

フェーズフィールドモデルによる析出相内部の
応力変化と残留応力のシミュレーション*上原拓也*¹, 辻野貴洋*²Simulations on the Stress Evolution and Residual Stress
in Precipitated Phase by Using the Phase Field ModelTakuya UEHARA*³ and Takahiro TSUJINO³ Department of Computational Science and Engineering, Nagoya University,
Furo-cho, Chikusa-ku, Nagoya-shi, Aichi, 464-8603 Japan

Microstructure formation and the stress evolution in the microstructure is simulated based on the coupling equations among the phase, temperature and stress/strain. Grain growth processes from some nuclei of the precipitated phase are simulated under three different conditions. Assuming volumetric dilatation in transformation to the precipitated phase, tensile and compressive stresses are generated at the interfacial region, and the distribution changes as the grain grows. The elasto-plastic model gives the residual stress distribution in the material, which is not able to be obtained by the elastic calculation. A grain-growth model with regularly disposed four nuclei demonstrates creation of residual stress zone along the grain boundaries. Another model with randomly distributed nuclei also gives the residual stress distribution along the grain boundaries, in which dependence of the stress on the size and shape are observed.

Key Words: Numerical Analysis, Thermal Stress, Residual Stress, Phase Field Model, Phase Transformation, Coupling Effects, Finite Element Analysis

1. 結 言

材料の機械的、力学的特性は、その微視的な内部構造に大きく影響される。特に、近年の工学デバイスの微小化に伴い、従来は巨視的に一様かつ均質であり、等方的な材料で構成されているとみなすことの多かった金属材料についても、その内部組織や内部構造の影響が無視できなくなっている。その中でも、結晶粒スケールとなる数 μm レベルの現象となると、結晶粒の形状、分布とともに、各結晶粒内に存在する残留応力の存在が機械的な特性に重大な影響をもたらす。このような微視組織内の残留応力の評価には、凝固、熱処理、再結晶化などの過程において、結晶粒の成長とそれに伴う応力変化を、連成しながら同時に解析することが必要となる。このような過程の数値解析手法としては、Johnson-Mehl-Avrami などの変態速度式と連続体力学を連成した、井上らによる変態・熱・力学的手法⁽¹⁾⁽²⁾があるが、そこでは変態は体積分率 ξ を用いて表現されているため、界面の移動や結晶粒形成を直接

解析することはできない。

これに対し、フェーズフィールドモデルを用いると、デンドライトをはじめ、ファセットや多結晶組織を含む様々な微視組織形成のシミュレーションを行うことができる⁽³⁾⁻⁽⁶⁾。しかし、そこでは相変態に伴う応力変化の解析を行った例はほとんどなく、組織内部の応力や残留応力評価の解析には用いられていない。そこで、著者らはこれまでに、簡略化したモデルを用いて凝固過程における弾性応力変化の解析を行ったが⁽⁷⁾⁽⁸⁾、さらに本研究では、フェーズフィールドモデルによって相変態を表現し、温度、応力を連成させることによって、微視組織形成過程における応力変化と残留応力の解析を行うことを目的としている。前報⁽⁹⁾では、相変態と、温度、応力を連成させたフェーズフィールド解析の基礎式の定式化について報告したが、本報では、その基礎式に基づく数値解析について報告する。

2. 基礎式

基礎式の定式化については、前報⁽⁹⁾で述べた通りであり、ここでは、実際に用いる基礎式のみを示す。

* 原稿受付 2005年6月16日。

¹ 正員, 名古屋大学大学院工学研究科(〒464-8603 名古屋市千種区不老町)。² 京都大学大学院エネルギー科学研究科[現: 新日本製鐵(株)(〒671-1188 姫路市広畑区富士町1)]。

E-mail: uehara@mech.nagoya-u.ac.jp

Table 1 Applied parameters for simulations.

m	2.5×10^5	a, m^4	10	$b, \text{m}^3/\text{J}$	5.0×10^{-5}	T_m, K	400
$\rho, \text{kg}/\text{m}^3$	1.0×10^3	$c, \text{J}/(\text{kg K})$	5.0×10^2	$k, \text{W}/(\text{m K})$	150	$L, \text{J}/\text{m}^3$	3.0×10^3
$h, \text{W}/(\text{m}^2 \text{K})$	1.0×10^4	T_w, K	300	$\Delta x, \text{m}$	1.0×10^{-2}	$\Delta t, \text{s}$	1.0×10^{-2}
E, GPa	200	ν	0.3	σ_y, MPa	250	H', MPa	250
$\alpha, 1/\text{K}$	5.0×10^{-6}	β	1.5×10^{-3}	n_1, MPa^{-1}	1.0×10^{-2}	n_2, MPa^{-2}	1.0×10^{-5}

Table 2 Boundary and initial conditions for three simulation cases.

Case	Thermal B.C.	Mechanical B.C.	Initial seed(s)	Init. Temp.
Case 1	b1, b4: Adiab., b2, b3: Conv.	b1: y -fix, b2, b3: Free, b4: x -fix	Corner C	400 K
Case 2	b1-b4: Conv.	b1-b4: Fixed	Corner A-D	300 K
Case 3	b1-b4: Conv.	b1-b4: Fixed	Corner A-D & 5 in bulk	300 K

フェーズフィールド方程式：

$$m\dot{\phi} = a\nabla^2\phi + \phi(1-\phi) \left[\phi - \frac{1}{2} + M(\phi, T, \sigma_{ij}) \right] \quad (1)$$

ただし、

$$M(\phi, T, \sigma_{ij}) = b\phi(1-\phi) \left(L \frac{T_m - T}{T_m} + f(\sigma_{ij}) \right), \quad (2)$$

$$f(\sigma_{ij}) = n_1\sigma_{kk} + n_2\sigma_{ij}\sigma_{ij} \quad (3)$$

熱伝導方程式：

$$\rho c \dot{T} = k\nabla^2 T + 30L\phi^2(1-\phi)^2\dot{\phi} - T\alpha\delta_{ij}\dot{\sigma}_{ij} + \sigma_{ij}\dot{\epsilon}_{ij}^p \quad (4)$$

応力-ひずみ関係式：

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \frac{1+\nu}{E}\dot{\sigma}_{ij} - \frac{\nu}{E}\dot{\sigma}_{kk}\delta_{ij} + \dot{\epsilon}_{ij}^p + \alpha\dot{T}\delta_{ij} + 30\beta\phi^2(1-\phi)^2\dot{\phi}\delta_{ij} \quad (5)$$

ここで、 m 、 a および b は界面幅や界面エネルギーの影響を表すフェーズフィールドパラメータ、 $f(\sigma_{ij})$ は相変態の応力依存性を表す関数であり、 n_1, n_2 は適当なパラメータである。また、 ρ, c, k, L, T_m はそれぞれ、密度、比熱、熱伝導率、潜熱、変態温度、 $\sigma_{ij}, \epsilon_{ij}, \epsilon_{ij}^p$ はそれぞれ、応力、ひずみ、塑性ひずみ、 E, ν, α, β はそれぞれ、ヤング率、ポアソン比、線膨張係数、変態膨張係数である。塑性ひずみにしては、降伏条件には Mises の条件、硬化則には移動硬化則を用いた構成式を用いる。

3. 計算モデルと条件

前節に述べた基礎式に基づき、温度変化に伴う結晶成長シミュレーションを行う。計算に用いるパラメータの値は表 1 に示した通りである。ただし、 h, T_w は後述する熱伝達境界条件を与えるときの熱伝達係数および周辺温度、 σ_y, H' は弾塑性解析を行うときの初期

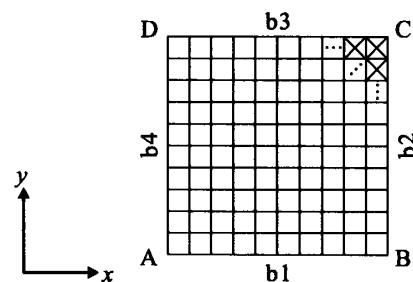


Fig. 1 Illustration of the simulation model and mesh division with notations of apices A-D and boundaries b1-b4.

降伏応力および硬化係数、 $\Delta x, \Delta t$ は有限要素解析における要素サイズの基準および時間刻みである。これらの値は、特定の材料を想定した値ではなく、変態-熱-応力の連成効果が明確に現れるように設定した仮想的な材料定数である。これらの値を用い、図 1 に示したような 2 次元の正方形領域に対し、表 2 に示した Case 1-3 の 3 種類の条件の下で、有限要素法による数値解析を行う。領域サイズは、表 1 に示した Δx を単位として、Case 1, 2 については 30×30 、Case 3 については 80×80 とし、斜辺の長さが Δx である直角二等辺三角形を用いた要素分割を行う。また、初期条件としては、モデル内全域が均一な母相 ($\phi=0$) であるとし、温度は均一な初期温度、応力は全域で 0 とする。析出相の初期核については、計算の第 1 ステップにおいて、表 2 に示した位置に強制的に析出相への変態を起こすことによって核を発生させる。

Case 1-3 の説明として、まず、Case 1 では、正方形領域の 1 つの角 (図 1 の C) に核を置き、そこから成長を起こす。このとき、境界条件としては、核を配置した頂点を挟む 2 辺 (図 1 の b2, b3) を熱伝達境界、残る 2 辺を断熱境界とする。また力学的拘束としては、

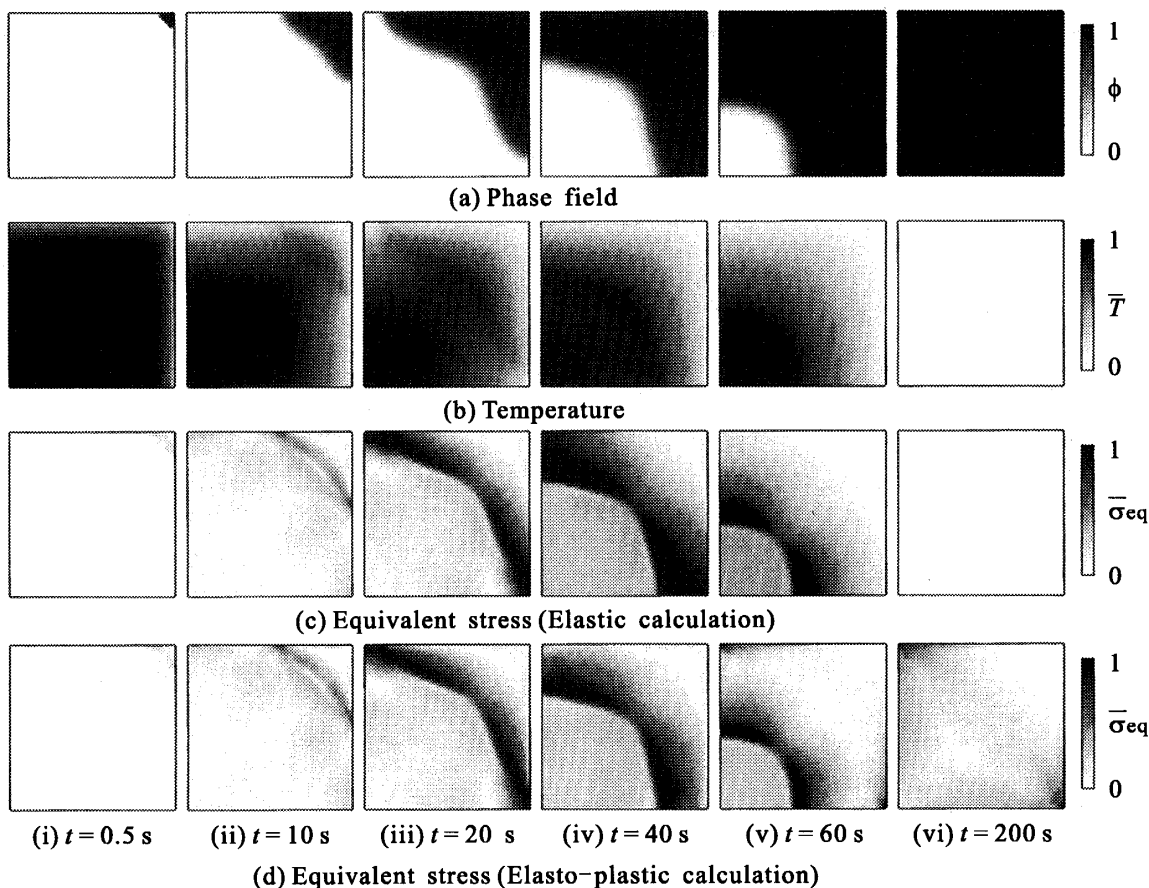


Fig. 2 Comparison between elastic and elasto-plastic calculation on the stress distribution due to phase transformation and thermal conduction (Case 1).

左側面 (図1のb4面) と下面 (b1面) をそれぞれ x , y 方向に拘束し, 残る2面は自由境界とする. これは, 表面から冷却をうける物体の角から, 新しい相が析出し, 成長する過程を想定したモデルである.

Case 2 では, 全周囲を熱伝達境界とし, 4つの角から自由に析出相が成長するモデルとする. ただし, 力学的には全周囲を固定する. Case 1 は, 結晶成長モデルとしては, このモデルの1/4領域を解析したものに相当するが, ここでは, 全周囲を固定境界とすることによって, 異なる核から成長した析出相が自由表面の影響を受けずに界面を形成する過程を計算するものである. すなわち, 内部で結晶粒界が形成される過程を想定している. ただし, 発生する潜熱によって温度が著しく上昇することを防ぐため, 周囲は熱伝達境界として設定している.

最後に Case 3 として, モデル内部に, ランダムに核を配置し, 複数の結晶粒から成る多結晶体の形成過程のシミュレーションを行う. 境界条件は Case 2 と同様に, 全周囲を固定, 熱伝達境界とする.

4. 解析結果と考察

4.1 単一核からの成長 (Case 1)

4.1.1 結晶成長と応力の変化 まず単一核からの成長解析を行い, 界面の移動と応力変化の様子を調べる. 比較のため, 弾性解析のみを行った場合と, 弾塑性解析を行った場合についての結果を示す. このとき, 弾性解析と弾塑性解析では, 応力分布に相違が生じ, それがまた相変態に影響を与える. そこで, Case 1 では, 主に相変態による応力変化について検証するため, 相変態への応力の影響 (式(2)の $f(\sigma)$) は無視することとする.

図2(a), (b) はそれぞれ, フェーズフィールドおよび温度の時間変化を表したものである. ただし, 温度は初期温度と冷却温度で規格化した値で示している. これは弾性解析での結果であるが, $f(\sigma)$ を無視したことと, 応力仕事による発熱量も大きくないことから, 弾塑性解析においても, 同じ分布が得られることを確認している. フェーズフィールドについては, $\phi=0$ が母相, $\phi=1$ が析出相を表しており, 図の右上の角に置

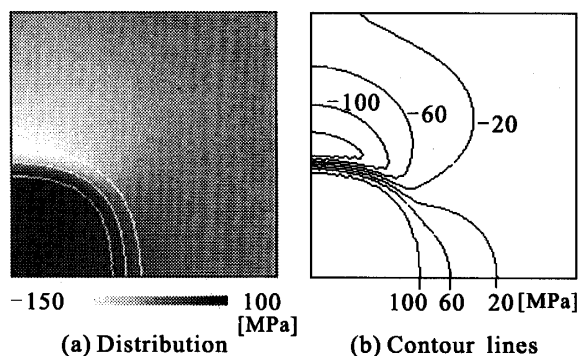


Fig. 3 Stress in the x direction at $t=30$ s in elastic analysis (corresponding to Fig. 2(c)(v)).

かれた核から、表面の冷却に伴って変態が進行していることがわかる。このとき、変態潜熱が発生して発熱するため、図 2 (b)(ii), (iii) において、表面からやや内部に入ったところに高温部分が生じている。

このときの応力の変化を表したのが図 2(c), (d) であり、図 (c) は弾性解析、図 (d) は弾塑性解析の結果を示している。ここで図に示した応力は、相当応力であり、各解析結果における最大値で規格化した値を示している。弾性解析、弾塑性解析のいずれの場合においても、変態界面において大きな応力が発生し、界面の移動とともに、高い応力の領域が移動していることがわかる。ここで、応力の符号を確認するために描いたのが図 3 であり、図 2 (c)(v) に示した弾性解析の $t=60$ s における応力の x 方向成分を示している。また、図 3(a) は応力の分布に、 $\phi=0.1, 0.5, 0.9$ の等値線を重ねたものであり、図 3(b) は応力分布の等値線を表したものである。この図において、左側面上の分布をみると、界面領域で応力が急激に変化し、応力の符号が反転していることがわかる。すなわち、界面の接線方向の応力成分は、界面領域で符号を反転している。これは、母相から析出相への変態によって体積が膨張するため、界面の母相側に引張り、析出相側に圧縮の応力が発生するためである。力学的拘束としては、右側面と上面を自由表面としているため、弾性変形のみを考慮した場合には、自由に膨張し、最終的に全領域で変態が完了し、温度分布もなくなると、図 2 (c)(vi) のように無応力状態となる。これに対し、塑性を考慮した解析では、変態途中に生じる応力が降伏応力を超え、最終的には、図 2 (d)(vi) に示すように、残留応力が生じることがわかる。

なお、残留応力分布をみると、左上と右下の頂点付近に大きな応力が発生している。このモデルは、自由表面に囲まれる物体の 1/4 領域をモデル化したもので

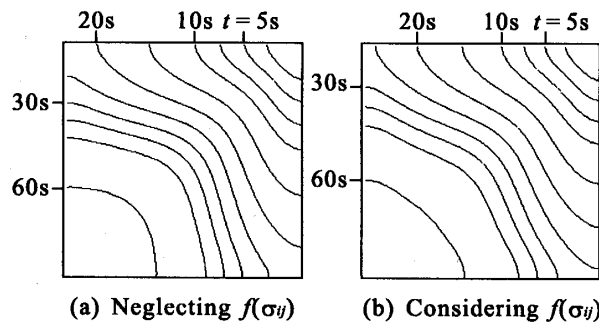


Fig. 4 Effect of the function $f(\sigma)$, representing the stress-dependency on the phase transformation, on the grain growth.

あり、これらの部分には、対称的な位置から成長してきた析出相がぶつかる箇所に相当する。これについては、次節に示す Case 2 で考察する。

4.1.2 相変態の応力依存性 相変態に及ぼす応力の影響については、実験的にも知られており、数値解析においても、Johnson-Mehl-Avrami の式に応力依存項を付加した修正式⁽¹⁰⁾ が用いられている。ここでは、その詳細については検討しないが、式 (3) に示した $f(\sigma)$ によってその影響が表現されることを確認する。モデルと境界条件は前項に示した計算と同じであり、弾塑性解析を行う。ただし、前項では $f(\sigma)$ を無視した解析を行ったが、ここでは $f(\sigma)$ を考慮した解析を行う。このときの計算結果を比較して示したのが図 4 である。図中の等値線は、時刻 $t=5\sim 60$ s の界面位置 ($\phi=0.5$) を表したものであり、右上から成長していく様子を表している。このとき、表面での界面位置をみると、 $f(\sigma)$ を無視した場合の図 (a) に比べ、 $f(\sigma)$ を考慮した図 (b) では、変態の進行がやや遅くなっていることがわかる。これに対し、界面領域に沿った領域のうち、表面よりも応力の値が小さい対角線方向の成長速度は、相対的にやや速くなり、結果的に界面の曲率がなだらかになっていることがわかる。このことから、界面に沿って応力分布が存在する場合、界面の成長速度が一樣でなくなり、界面形状に影響が現れることがわかる。

4.2 複数の核からの成長 (Case 2) 次に、結晶粒界の形成と応力分布の関係について考察するため、Case 2 として示した条件を与え、4つの核からの成長によって結晶粒界が形成される過程の解析を行う。ここでは、 $f(\sigma)$ も考慮した弾塑性解析とし、すべての連成を考慮した解析を行う。

このときの解析結果を図 5 に示す。図 (a)-(c) はそれぞれフェーズフィールド、温度および相当応力分布

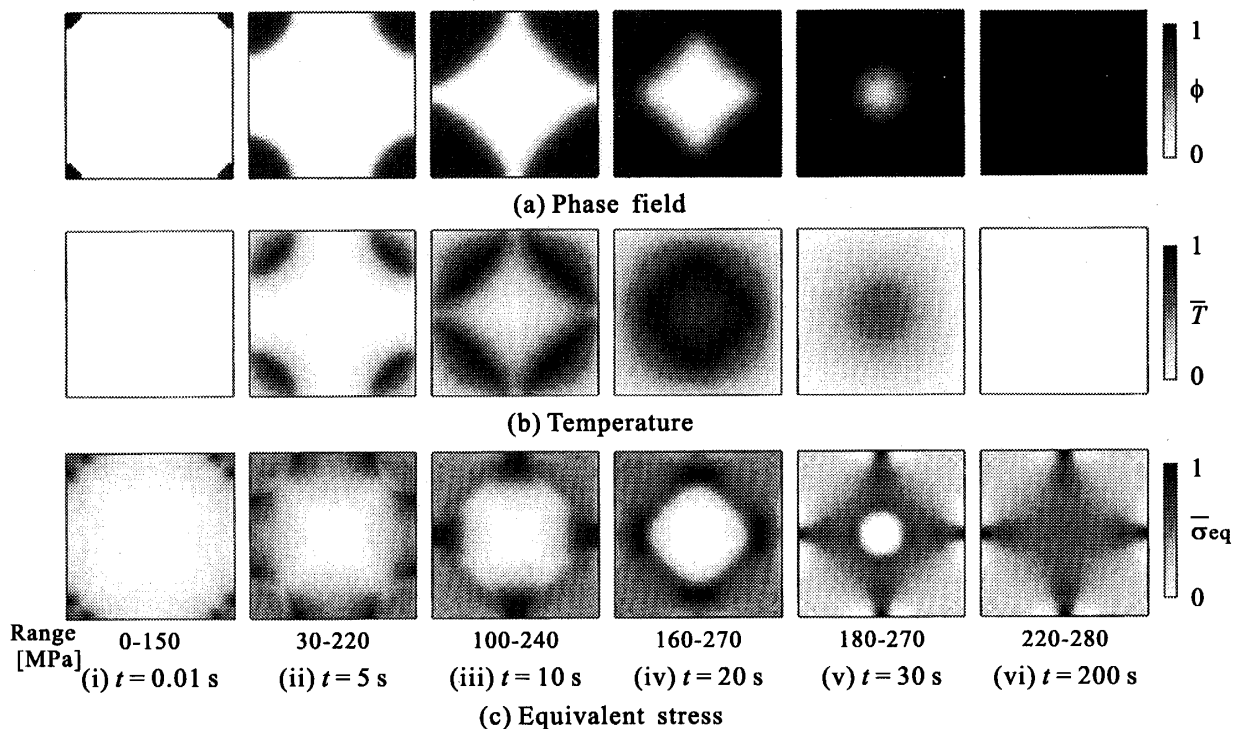


Fig. 5 Stress evolution during grain growth from four nuclei, and residual stress distribution exhibiting cross shape (Case 2).

の変化を表している。ただし、温度については、解析中の最大値と最小値で規格化した値を示しているが、応力変化を示した図(c)では、分布が明確になるように、各時刻における最大値と最小値で規格化した値を用いて分布を示し、その最大値と最小値を図中に示している。

まず相変態に関しては、図(a)に示すように、4つの頂点に配置した核から析出相の成長が進行する。本研究では、結晶粒成長の異方性は導入していないため、ほぼ円形に成長する。Case 1の場合と形状が異なるのは、初期温度が異なるためである。やがて $t=10$ sを過ぎた頃に4つの成長領域が互いに衝突し、その後内部へと変態が進行する。全領域で変態が完了すると、フェーズフィールドは一様に $\phi=1$ という値を示すため、図5においては結晶粒界は表示されないが、実際には、異なる結晶核からの成長領域が衝突した後、結晶粒界が形成されており、最終的には十字型の粒界から成る正方形の4つの結晶粒が得られている。また、温度変化については、Case 1の場合と同様に、界面において変態潜熱の発生が生じるが、表面から熱を逃がすことによって、最終的には均一な温度となる。

次に、応力分布の変化をみると、自由に成長が進行する $t=10$ sまでの間は、Case 1の場合と同様に、界面付近に大きな応力が生じる。ただし、Case 2での境

界条件は、全周囲を固定条件としているため、界面領域でも表面付近に、より大きな応力が生じている。この後、析出相同士が衝突する $t=10$ s以降においては、応力分布は著しく異なった様子を見せる。すなわち、析出相が衝突して形成される粒界部分にきわめて大きな応力が発生する。その後、粒界が表面から内部に向けて形成されるにつれて、粒界に沿って高い応力の領域が広がっていく。このとき、 $t=10$ sと $t=20$ sの図を比べると、 $t=20$ sにおいては、45度方向となる母相析出相の界面においても、大きな応力となっていることがわかる。これは、粒界に囲まれて、析出相の膨張が強く拘束されるためであると考えられる。最終的に変態が完了すると、図5(c)(vi)に示すように、十字型に残留応力が生じていることがわかる。これは形成された粒界に相当する領域であり、粒界に沿って高い残留応力が発生していることを表している。なお、全体的な平均応力が増加するのは、周囲を拘束しているため、析出相への変態に伴う膨張が起こる分、圧縮を受けるためである。

4.3 多結晶体の形成過程 (Case 3) 最後に、内部にランダムに核を配置し、異なる形状と大きさをもつ結晶粒が形成される過程における応力変化のシミュレーションを行った結果を図6に示す。図6(a)-(d)はそれぞれ、フェーズフィールド、結晶粒番号、温度お

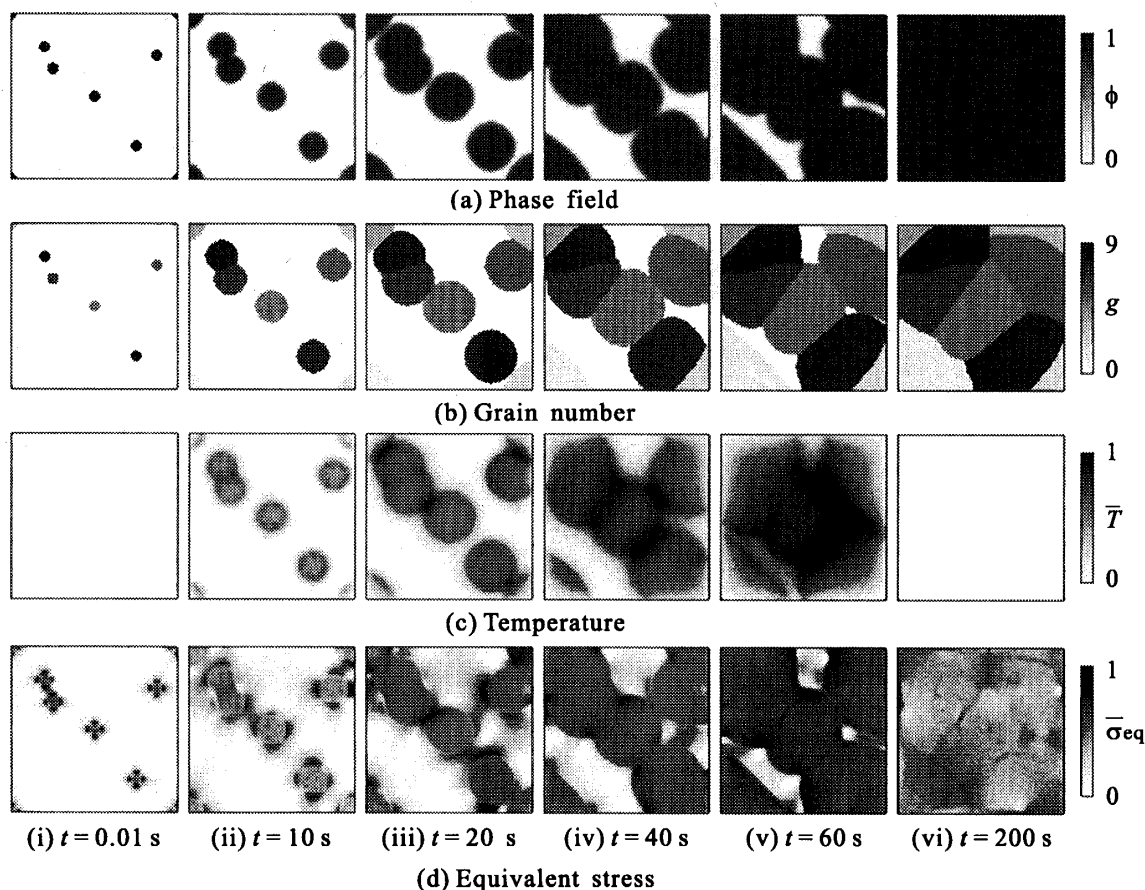


Fig. 6 Polycrystal formation and stress evolution during grain growth from nine nuclei, exhibiting high stress region along grain boundaries (Case 3).

よび相当応力を示す。ここで、結晶粒番号とは、初期配置として与えた核に、それぞれ異なる番号を与え、その後の変態で得られた析出相が、どの初期核から成長したものかを識別する番号である。Fan, Chen⁽⁵⁾やWarren, Kobayashi, Carter⁽⁶⁾は、このような異なる結晶核から析出相が成長し、結晶粒界を形成した後の挙動について、結晶粒の回転や結晶方位の変化が生じるモデルを提案しているが、ここではそのモデルは導入せず、析出相が衝突した部分が粒界となり、それ以上の変化は起こらないものとする。これは、結晶粒の回転や方位の変化には、原子スケールからの考察、または本研究で明らかにしている応力分布が駆動力となった、より物理的なモデル化が必要であると考えたため、その関連があまり明確ではないモデルの利用は今回は行わないという理由による。

図6(a), (b)から、これまでの計算結果と同様に結晶核から析出相の成長が起こり、最終的には9つの結晶粒からなる多結晶体が形成されることがわかる。温度変化についても、これまでと同様に、変態潜熱による発熱で、析出相内の温度が上昇し、とくに界面での

温度が上昇する。応力の変化をみると、やはり変態の進行とともに、界面付近において高い応力が発生し、形成される粒界に沿って大きな応力が生じた後、最終的に、粒界に沿った残留応力が現れている。

変態途中の経過をたどると、図6(d)(ii)において、領域内の左上付近で2つの結晶粒が衝突し、粒界が形成されているが、このときの応力はそれほど大きくなく、残留応力分布を示す図(vi)においても、この粒界における応力はほとんど識別できない程度である。これに対し、図6(d)(iv), (v)あたりで形成された粒界付近にはかなり大きな応力が発生し、残留応力でも粒界部分が明確に現れる。これは、初期には結晶粒が小さいため、変態膨張による体積変化量が比較的小さいこと、周囲の大部分が未変態領域であるため、膨張に対する拘束が小さいこと、後期になると変態完了領域が大部分となり、拘束が大きくなっていることなどが要因であると考えられる。また、結晶粒内にも応力の分布が見られ、3つの結晶粒の交わる3重点においては、より大きな応力が現れる傾向が見られる。

5. 結 言

本研究では、フェーズフィールドモデルを用いた相一温度-応力の連成方程式を用いることによって、母相から析出相が成長し、微視組織が形成される過程における応力変化、および残留応力のシミュレーションを行った。これによって、界面付近に大きな応力が生じること、粒界に沿って残留応力が現れること、結晶粒内や粒界の応力分布は、結晶成長の過程に依存して複雑な分布を示すことを示した。また、従来の連続体モデルによる変態・熱・力学モデルでは不可能であった、結晶粒の形成、粒界および粒内の応力分布を得ることが可能であることを示した。今後の課題としては、結晶粒の形状や大きさと応力分布の関係を明らかにすること、結晶方位に基づく異方性や、粒界が形成された後の挙動など、より微視的な構造や現象を取り込んだフェーズフィールドモデルの導入を行うこと、転位の運動や粒界すべりなど、塑性現象の本質的なモデル化を行うことなどが挙げられる。

最後に、本研究に関して有意義な助言を頂いた福山大学 井上達雄教授に謝意を表す。

文 献

- (1) Inoue, T. et al., Description of Transformation Kinetics, Heat Conduction and Elastic-plastic Stresses in the Course of Quenching and Tempering of Some Steels, *Ingenieur-Archiv*, **50-5** (1981) 315-327.
- (2) Inoue, T., Tanaka, K., Nagaki, S., *Kotai Rikigaku to Souhentai no Kaiseki (Solid Mechanics and Analysis of Phase Transformation)* (1995), Taiga Syuppan (in Japanese).
- (3) Kobayashi, R., Modeling and Numerical Simulations of Dendritic Crystal Growth, *Physica D*, **63** (1993), 410-423.
- (4) Uehara, T. and Sekerka, R. F., Phase Field Simulations of Faceted Growth for Strong Anisotropy of Kinetic Coefficient, *Journal of Crystal Growth*, **254** (2003), 251-264.
- (5) Fan, D. and Chen, L.-Q., Computer Simulation of Grain Growth using a Continuum Field Model, *Acta Materialia*, **45-2** (1997), 611-622.
- (6) Warren, J. A., Kobayashi, R., Carter, W. C., Vector-valued Phase Field Model for Crystallization and Grain Boundary Formation, *Physica D*, **119** (1998), 415-423.
- (7) Uehara, T. and Tsujino, T., Simulations on the Stress Evolution during Phase Transformation, *Dai17kai Keisan Rikigaku Koenkai Koen Ronbunshu (Proceedings of the 17th Computational Mechanics Conference)* (2004), 313-314 (in Japanese).
- (8) Uehara, T. and Tsujino, T., Phase Field Simulation of Stress Evolution during Solidification, *Journal of Crystal Growth*, **275-1/2** (2005), 219-224.
- (9) Uehara, T. and Tsujino, T., Formulation of Coupling Effects among Phase, Temperature and Stress by using the Phase Field Model, *Nihon Kikai Gakkai Ronbunshu, A (Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A)*, **72-716** (2006), 438-444 (in Japanese).
- (10) Wang, Z.-G. and Inoue, T., Analyses of Temperature, Structure and Stress during Quenching of Steel with Consideration for Stress Dependence of Transformation Kinetics, *Zairyo (Journal of the Society of Materials Science, Japan)*, **32-360** (1983), 991-996 (in Japanese).