

# 蓄積変形エネルギーに基づいた組織変化シミュレーション法

吉野雅彦\*

## 1. 研究目的

鋼などの金属材料は塑性加工により形状だけではなく、その機械特性、物性が大きく変化することが知られている。そのような特徴を利用して高品質な材料を開発する試みがなされ、近年、例えば制御延などの技術として実用に供されている。加工により目的の材質を創出するためには、製品の組織・材質を予測し、それに適した加工プロセスを設計することが必要である。そこでコンピュータにより加工によって生じる組織変化・材質変化をシミュレートし、製品特性を予測しようとする試みがなされている<sup>1)~7)</sup>。

このような組織・材質のシミュレーションは塑性解析に組織変化のKineticsを組み込むことにより構成される。これは塑性力学と冶金学を連結しようとするものであり、このためには両者を結びつける具体的なパラメータおよびその理論体系の確立が必要である。

図1に、塑性加工によって生じる塑性変形、温度変化、組織変化、材料特性変化の関係を模式的に示す<sup>8)</sup>。それぞれの現象の間を繋ぐ矢印が影響因子を表している。このうち加工や変態による発熱が温度変化へ及ぼす影響、体積変化が変形に及ぼす影響については、既に熱弾塑性理論により確立されている。また流動応力やヤング率などの機械特性の変化は通常の塑性理論に基づいて塑性解析に取り込むことができる。よって材質シミュレーションを完成させるためには、残る

- ① 塑性変形・温度変化が材質変化に及ぼす影響
- ② 塑性変形と温度変化が組織変化に及ぼす影響
- ③ 組織変化が材質変化に及ぼす影響

を評価するシステムが必要である。

そこで本稿ではまず①②の影響を評価する因子として蓄積変形エネルギーを内部変数として用いる方法を提案し、これを用いて②の組織変化および③の材質変化をシミュレートする方法を述べ、最後にこのシステムを用いた材質予測シミュレーションの例を紹介する。

## 2. 蓄積変形エネルギー

図2に塑性変形から組織・材質変化に至る材料内の諸現象を示す。一般に材料に塑性加工を与えるとひずみや応力が生じる。転位論によるとひずみは転位など格子欠陥の運動に起因すると考えられており、転位の増殖や結合が結晶構造の変化をもたらす<sup>9)</sup>。増殖した転位には結晶格子の歪みによる弾性エネルギーが蓄積されており、このエネルギーが再結晶などの組織変化の駆動力になると考えられている。

そこで、塑性加工と組織変化を結びつけるパラメータとし

て次式で定義される一般化蓄積変形エネルギーを用いる<sup>10)11)</sup>。

$$\dot{W} = \sigma_f \cdot \dot{\epsilon}_{eq}^p - k \cdot W^r \quad (1)$$

ここで $\sigma_f$ はその瞬間の流動応力、 $\dot{\epsilon}_{eq}^p$ は相当塑性ひずみ速度、 $k$ は回復速度係数、 $r$ は回復の次数を表す指数である。 $W$ は、塑性変形エネルギーによって金属の加工硬化が生じるとした加工硬化仮説を拡張した概念であり、加工硬化と回復を同時に評価するパラメータである。塑性仕事のうち数%が転位のエネルギーとして蓄積されることが知られているが、この転位のエネルギーを塑性仕事を用いて評価しようとするものであり、第一項が塑性仕事、第二項が回復によるその放出を表している。

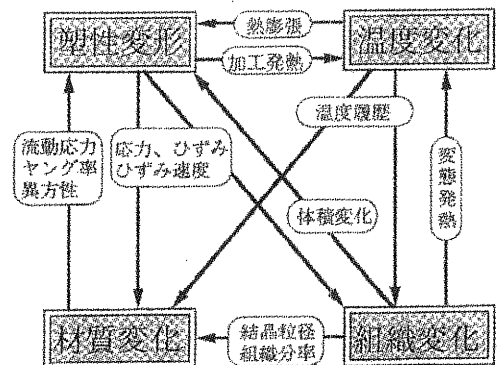


図1 塑性加工と組織・材質変化の関係<sup>1)</sup>

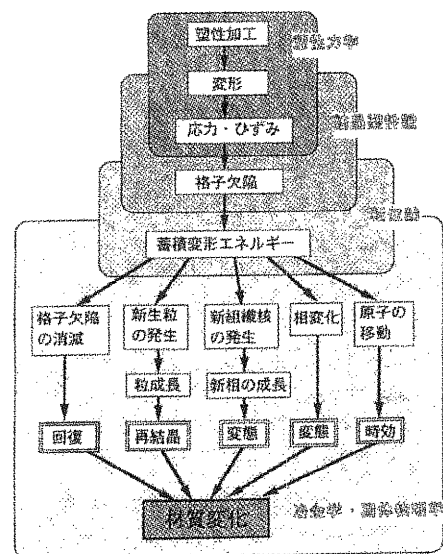


図2 塑性加工によって生じる材料内の諸現象<sup>1)</sup>

塑性変形による材料の流動応力の変化、すなわち加工硬化、を一般化蓄積変形エネルギー $W$ を用いて表したものが式(2)である<sup>5)6)</sup>。

$$\sigma = \left( \frac{\dot{\epsilon}_{eq}}{\dot{\epsilon}_{st}} \right)^m \left\{ a(W+b)^n + c \right\} \exp \left[ -p \left( \frac{\dot{\epsilon}_{eq}}{\dot{\epsilon}_{st}} \right)^q (T-T_{st}) \right] \quad (2)$$

ここで $\dot{\epsilon}_{st}$ と $T_{st}$ はそれぞれデータ測定の規準としたひずみ速度と温度であり、本式中の $m, a, b, n, c, p, q$ が材料物性値である。図3に本式を使ってひずみ速度、温度がさまざまに変化する場合の流動応力を計算した例を示すが、途中で焼鈍による回復が生じているにも拘わらず、その流動応力変化がよくシミュレートされていることが判る。以上より「①塑性変形・温度履歴が機械特性に及ぼす影響」が一般化蓄積変形エネルギー $W$ により評価できることが判る。

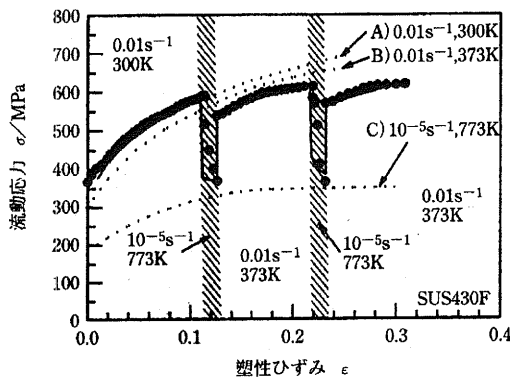
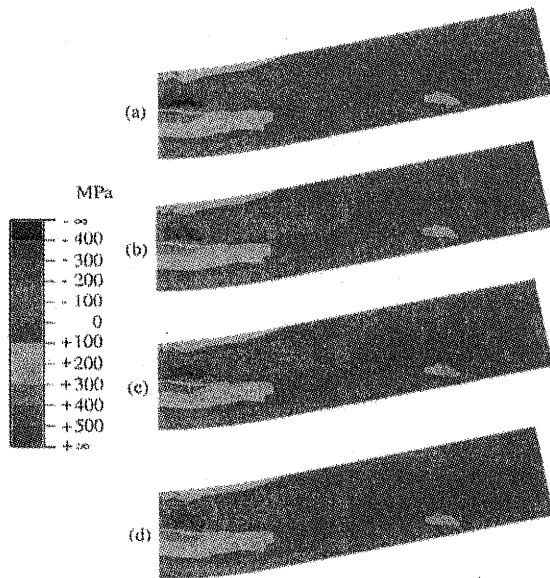


図3 流動応力のシミュレーション例



Effect of annealing on residual stress  $\sigma$  distributions.  
(a) before annealing. (b) 800K heating.  
(c) 600sec annealing. (d) after annealing.

図4 冷間曲げ材の焼鈍による残留応力の変化

以上の式を弾塑性有限要素法ABAQUSに導入し、焼鈍による残留応力の変化をシミュレートした<sup>12)</sup>。素材はフェライト系ステンレスSUS430Fとし、冷間で三点曲げ加工を行い、その後800Kで600秒間焼鈍するものとした。図4に熱処理の各段階における残留応力分布( $\sigma_r$ )を示す。図の左端が中央の支点位置であり、その直下に圧縮と引っ張りの残留応力が生じている。この図ではあまり明瞭ではないが、焼鈍の進行に伴い、最大残留応力領域が減少し、全体的に残留応力が低下することがシミュレートされている。このように蓄積変形エネルギーを用いることにより加工硬化および回復過程がシミュレートできることが判る。

### 3. 再結晶シミュレーション

#### 3.1 核発生モデル

次に、②の「塑性変形と温度変化が組織変化に及ぼす影響」について述べる。ここでは代表的な組織変化として再結晶を対象とし、核発生・粒成長理論に基づき蓄積変形エネルギーを駆動力としたモデルを構築する<sup>13)15)</sup>。

核発生理論では、熱エネルギーによる原子の揺らぎにより偶発的に直径 $r$ の単結晶(クラスター)が発生すると考える。するとそのクラスターの持つ自由エネルギーは

$$g = 4\pi r^2 \gamma - \frac{4\pi}{3} r^3 \Delta G_v \quad (3)$$

で表される。ここで $r$ はクラスターの半径、 $\gamma$ は表面エネルギー、 $\Delta G_v$ はGibbsの自由エネルギーである。

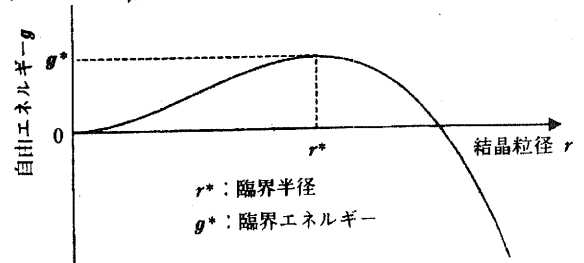


図5 クラスターの自由エネルギー

$r$ に対する $g$ の変化を図5に示す。この極大値が臨界エネルギー $g^*$ 、その半径が臨界半径 $r^*$ であり、次式で表される。

$$g^* = \frac{16\pi\gamma^3}{3\Delta G_v}, \quad r^* = \frac{2\gamma}{\Delta G_v} \quad (4)$$

$\Delta G_v$ は蓄積変形エネルギー $W$ に依存すると考えられるので

$$\Delta G_v = \lambda \cdot W - T \cdot \Delta S \quad (5)$$

と表す。ここで $\lambda$ は定数、 $\Delta S$ はエントロピー変化である。蓄積変形エネルギーが組織変化の駆動力になる機構については未だ不明な点が多いが<sup>16)</sup>、ここでは簡単に蓄積変形エネルギーが材料内のポテンシャルエネルギーに転化すると仮定している。

偶然発生したクラスターの半径が臨界半径 $r^*$ より大きい場合、すなわちクラスターが臨界エネルギー $g^*$ より大きなエ

エネルギーを有する場合、半径 $r$ が大きくなる方がエネルギーが減少するのでクラスターは安定して成長し、再結晶粒となる。逆にクラスターの半径が臨界半径 $r^*$ より小さい場合、半径 $r$ が小さい方がエネルギーが減少するので、クラスターは縮小し最終的には消滅する。材料が変形し蓄積変形エネルギーが蓄えられていると、臨界エネルギーおよび臨界半径が小さくなるので、再結晶核が発生し易くなる。

以上のモデルによると再結晶核の発生速度はクラスターが $r^*$ もしくは $g^*$ を越える頻度によって決まる。結晶中の原子が持つ熱エネルギーは一般に式(6)で示されるようなボルツマン分布を有することが知られている。

$$n = \frac{h_0 h_g}{k_b T} \exp\left(-\frac{h_g g}{k_b T}\right) \quad (6)$$

ここで $k_b$ はボルツマン定数、 $T$ は絶対温度である。よってクラスターのエネルギーも同様にボルツマン分布すると考えられる。図6にこのボルツマン分布を模式的に示す。縦軸に原子数もしくはクラスター数、横軸にエネルギーをとる。

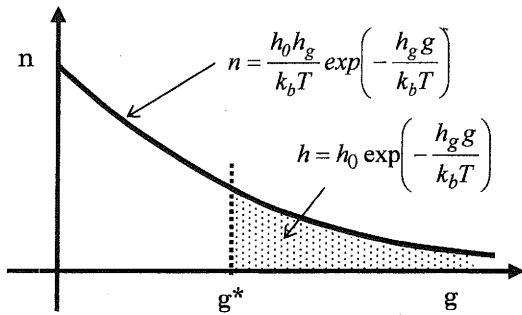


図6 ボルツマン分布

図中斜線部で示される領域が $g^*$ 以上のエネルギーを有するクラスター、すなわち臨界エネルギーを飛び越え再結晶核となるクラスター数を表しているが、この面積は式(6)を積分することにより求まり

$$h(g^*) = h_0 \exp\left(-\frac{h_g g^*}{k_b T}\right) \quad (7)$$

のように表される。これが再結晶核の発生頻度となる。

### 3. 2 粒成長モデル

このように発生した再結晶核は、エネルギーを減少させるために成長するが、このときの基礎的過程は原子の拡散である。図7に未再結晶粒と再結晶粒の粒界におけるポテンシャルエネルギーを模式的に示すが、未再結晶粒には変形エネルギーが蓄積されている分( $\lambda' W$ )だけポテンシャルが高く、また粒界には $\Delta E$ のポテンシャル障壁があるものと考えられる。結晶粒および未再結晶粒内の原子は熱エネルギーによりこのポテンシャル障壁を飛び越えてそれぞれの粒に移動する。

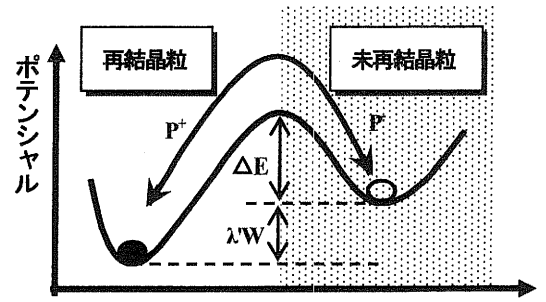


図7 結晶粒内のポテンシャルエネルギー

未再結晶粒から再結晶粒へ原子が移動するためには $\Delta E$ のエネルギー障壁を飛び越えなければならないが、原子の持つ熱エネルギーはBoltzmann分布しているので、 $\Delta E$ 以上のエネルギーを持つ原子数は

$$p^+ = \exp\left(-\frac{\Delta E}{RT}\right) \quad (8)$$

に比例すると考えられる。逆に再結晶粒から未再結晶粒へ移動する原子は、 $\lambda' W + \Delta E$ のエネルギー障壁を飛び越えなければならないので、その原子数は

$$p^- = \exp\left(-\frac{\lambda' W + \Delta E}{RT}\right) \quad (9)$$

に比例する。これらの原子数の差が再結晶粒に流入する原子数になるので、これに基づき再結晶粒の半径の変化速度すなわち成長速度を計算すると、

$$\frac{\partial D}{\partial t} = C \exp\left(-\frac{\Delta E}{RT}\right) \left\{1 - \exp\left(-\frac{\lambda' W}{RT}\right)\right\} \quad (10)$$

が得られる。ここで $D$ は再結晶粒径、 $R$ はガス定数である。

式(10)は平均的な粒成長速度と考えられるが、実際の結晶粒は等方的ではなく、また粒成長は粒界の形状にも影響されるので、粒成長速度は結晶粒によってばらつく。例えば図8のように $t_0$ の時点で全てが同じ径の結晶粒であっても、粒成長速度のばらつきによりある時間 $dt$ 後には幅をもって分布することになる。このため結晶粒径分布形状は粒の成長とともに変化していくことになる。

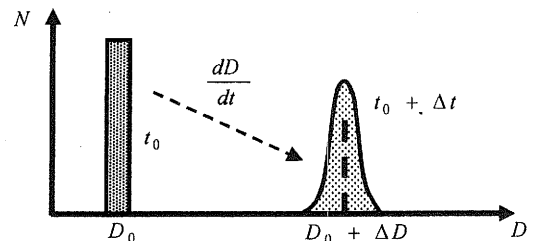


図8 粒成長による粒径のばらつき

そこで結晶粒分布形状の変化を表す式として、次式を用いる。

$$\frac{dN}{dt} + \frac{\partial}{\partial D}(vN) = \frac{\partial}{\partial D}\left(\Gamma \frac{\partial N}{\partial D}\right) \quad (11)$$

ここで  $N$  は各粒径における結晶粒の数、 $v$  は式(10)から得られる平均的な粒成長速度、 $\Gamma$  は粒径分布の分散速度を表す係数である。

このように分布した再結晶粒の全体積が材料内で占める割合が再結晶率と考えられている。そこで再結晶率は次式で計算される。

$$\hat{R} = \frac{V}{V_0} = \frac{1}{V_0} \int_0^{D_{\max}} N(D) \frac{\pi}{6} D^3 dD \quad (12)$$

ここで  $V_0$  は試験片の体積である。しかしこの式は再結晶粒同士の干渉が無視できる初期段階でのみ有効である。そこで再結晶粒が十分に成長し粒同士の接触が生じた場合の体積のオーバーラップを補正するために、Johnson と Mehl が提案した拡張体積の概念を導入し、再結晶率を次式で定義する。

$$R = 1 - \exp(-\hat{R}) \quad (13)$$

以上の式に式(7)の再結晶粒発生頻度を境界条件として導入し数値的に解くことにより、再結晶粒の成長過程がシミュレートできる。

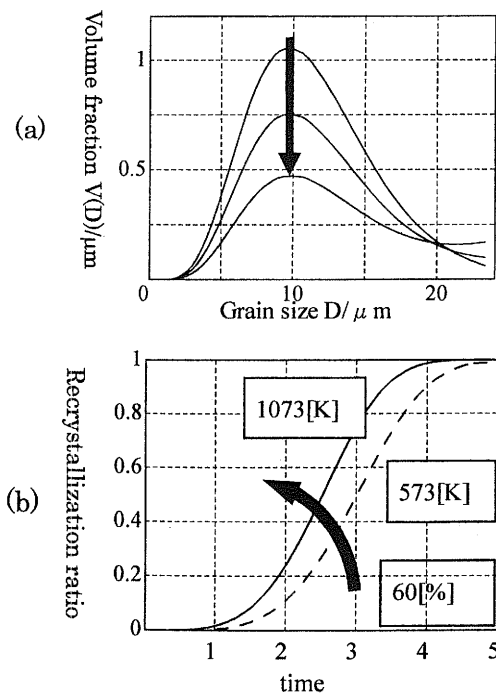


図9 再結晶過程のシミュレーション例

図9に、以上の再結晶モデルに基づいて静的再結晶過程をシミュレートした結果を示す。金属材料に予め適当なひずみを与え、適当な温度で焼鈍を行ったときの(a)粒径分布変化と(b)再結晶率変化である。(a)は横軸に結晶粒径、縦軸に結

晶粒の体積を示しており、焼鈍時間と共に結晶が成長し径の大きい粒が増えることにより粒径分布がなだらかになっていく様子が示されている。(b)は時間と共に再結晶率が增大する様子を表しており、焼鈍温度が高いほうが再結晶速度が大きく、短い時間で再結晶率1に達していることが示されている。このシミュレーションでは材料を特定していないが、定性的に実験的知見とほぼ一致していることがわかる。

以上のモデルは再結晶のみを扱っているが、その他の冶金現象、例えば変態、も同様に核発生・粒成長を基礎過程としていることが多く、本モデルを多少修正することにより適用できると考えられる。

### 3.3 再結晶による材質変化

次に③の組織変化が材質変化に及ぼす影響について検討する。再結晶により粒径分布が変わると、それにより材料の強度が変化することが知られている。この変化は一般にHall-Petchの法則として知られており、

$$\tau = \tau_0 + Cd^{1/2} \quad (13)$$

で表される。しかしこれはあくまで粒界の影響のみを評価しており、再結晶による材料の蓄積変形エネルギーおよびそれに起因する加工硬化量の変化は考慮されていない。

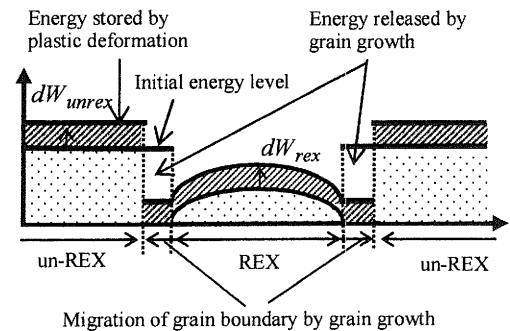


図10 粒成長に伴う蓄積変形エネルギーの変化

そこで本稿では以下に述べる方法で再結晶による蓄積変形エネルギーの変化および機械特性の変化を評価した。図10に未再結晶粒の間に再結晶粒が発生し成長していくときの蓄積変形エネルギーを模式的に示す。再結晶は結晶のひずみを解放し欠陥の無い整合した結晶構造に原子を再配列するプロセスなので、再結晶粒が成長した部分ではエネルギーが一旦ゼロになる。しかし動的再結晶などでは再結晶中も材料の変形が続くので材料全体に変形エネルギー  $dW$  が蓄積される。そのため再結晶粒の内部にも変形エネルギーが蓄積される。このようにして再結晶により蓄積変形エネルギーが材料内に不均一に分布することになる。このときの平均的な蓄積変形エネルギーの増分は

$$dW = dW_{unrex} + dW_{rex} - \frac{R}{1-R} W_{unrex} dt$$

で表される。ここで $W_{unrex}$ は未再結晶部分の蓄積変形エネルギー増分、 $W_{rex}$ は再結晶部分の蓄積変形エネルギー増分である。この蓄積変形エネルギー増分の式を加工プロセスに沿って積分し、式(2)に適用することにより材料全体の流動応力を求めることが出来る。これにより製品の強度が予測できる。

### 3. シミュレーション例

以上のシステムを前節の熱弾塑性有限要素法に導入し、熱間塑性加工のための組織予測システムを構築した。さらに本システムを用いて純銅を冷間鍛造し熱処理するプロセスに適し再結晶組織のシミュレーションを行った。図11に解析モデルを示すが、円筒径の純銅のピレットに円錐形ダイを上下からピレット高さの30%もしくは60%分だけ冷間で押込むものとした。モデルでは対称性を考慮して1/4部分を解析した。冷間鍛造後、573Kもしくは1073Kで100秒間熱処理するものとした。

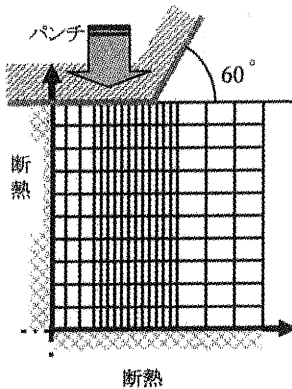


図11 冷間鍛造の解析モデル

図12にシミュレーションより得られた平均粒径分布を示す。押し込み量、熱処理温度の違いにより平均粒径分布が異なる様子がわかる。すなわち変形が集中するダイ角部では再結晶による微細化が進み平均粒径が低下しているのに対し、変形の小さいダイ直下およびピレット角部では粒径が増大している。加工量が多い場合、微細化が進みまたその領域も拡大している。また熱処理温度が高い方が再結晶の進行が速い。

図13に、同じ条件で実験を行い、シミュレーション結果と比較して示す。ダイ角部および中心に近い部分の再結晶粒分布を比較したが、図に示すようにどちらも分布形状がほぼ一致しており、本シミュレーション法で組織予測可能であることが判る。

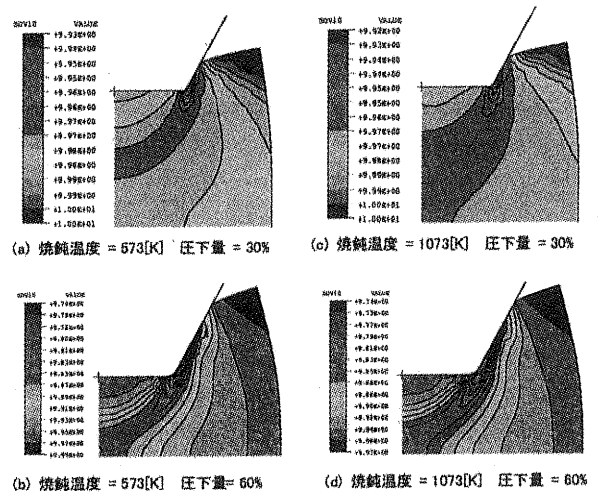


図12 シミュレーションより得られた平均粒径分布 (純銅の冷間鍛造+焼鈍による静的再結晶)

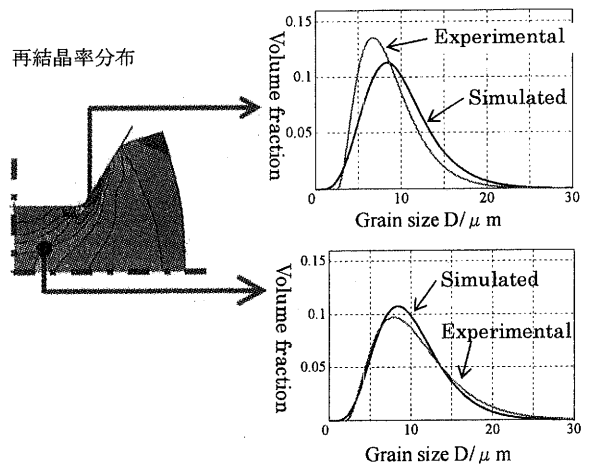


図13 シミュレーションより得られた鍛造部品内部の結晶粒径分布と実験値の比較

### 4. おわりに

本稿では材質予測理論を構築する上で重要な内部変数として蓄積変形エネルギーを用いる方法を説明した。さらに蓄積変形エネルギーを用いて、①塑性変形・温度変化が材質変化に及ぼす影響、②塑性変形と温度変化が組織変化に及ぼす影響、③組織変化が材質変化に及ぼす影響、を評価する手法を説明した。ここでは組織変化として最も基本的な過程である再結晶を取り扱い、熱間塑性加工のための組織・材質予測システムを構築した。

ここで解説した方法は再結晶のみを扱っているが、変態などのその他の冶金現象への拡張も可能であり、汎用的な組織材質シミュレーターとして活用できると期待される。

<参考文献>

- 1) 斎藤良行・木村求・田中康浩・関根稔弘・坪田一哉・田中智夫：川鉄技報，15(1983)1-8.
- 2) 矢田浩：塑性と加工，25-286 (1984)，p. 970-p. 980.
- 3) 江坂一彬・脇田淳一・高橋学・河野治・原田慎三：製鉄研究，321(1986)92-104.
- 4) 日本鉄鋼協会：第131・132回西山記念講座，鉄鋼材料の材質予測・制御技術の現状と将来，(1989)，日本鉄鋼協会.
- 5) 日本鉄鋼協会：変形特性の予測と制御，(1994)，日本鉄鋼協会.
- 6) Karhausen, K., and Kopp, R.: Steel Res. 63 (1992), No. 6, 247.
- 7) Yanagimoto, J.: ISIJ Int., 39-2 (1999), 171-175.
- 8) 吉野：塑性と加工，41-473 (2000)
- 9) 鈴木秀次：転位論入門，(1967) p. 89-139., アグネ.
- 10) Yoshino, M. and Shirakashi, T.: Int. J. Mech. Sci., Vol. 39, No. 12, (1997), p. 1345-p. 1362.
- 11) 吉野 雅彦・白樫 高洋：塑性と加工，35-407 (1994)，p. 1386-p. 1393.
- 12) 吉野雅彦，白石知宏：熱弾塑性有限要素法を用いた残留応力解析，塑性と加工，vol. 41, No. 472, (2000)，pp. 502-506.
- 13) 吉野雅彦，澤田真也，白樫高洋，二村政範：塑性加工の影響を導入した再結晶モデルの提案 (第三報)，平成12年度塑性加工春季講演会講演論文集，(2000)，pp. 175-176.
- 14) 吉野雅彦，二村政範：材質制御鍛造加工のための組織予測システム，日本機械学会第8回機械材料・材料加工技術講演会講演論文集(2000)，pp. 359-360.
- 15) Masahiko Yoshino, Masanori Futamura, Tomohiro Shiraishi, Numerical prediction of grain size distribution for hot forging processes, Numiform2001, (2001) 251-256.
- 16) 吉野雅彦，江藤淳，白樫高洋：結晶塑性有限要素法を用いた純アルミニウムの再結晶機構の検討，平成10年度塑性加工春季講演会講演論文集，(1998)，p. 235-236.