

Phase-Field 法に基づく鉄鋼材料の フェライト変態の 4 次元モデリング

東京農工大学大学院 工学研究院 先端機械システム部門
准教授 山中晃徳

(平成 24 年度奨励研究助成 AF-2012028)

キーワード：フェーズフィールド法，鉄鋼材料，フェライト変態，シミュレーション

1. 研究の背景と目的

Dual-Phase 鋼や TRIP 鋼などの高強度鋼において、フェライト相は延性を担うとともに、その分布形態がマルテンサイト相などの硬質相の分布形態に大きく影響するため、力学特性に強く影響する。したがって、高強度鋼の力学特性を予め予測するために、フェライト相の分布形態を定量的に予測することが基本的かつ最も重要な研究課題である。近年では、収束イオンビーム(FIB)や機械的シリアルセクションング法を用いて、鉄鋼材料中のマイクロ組織の 3 次元分布形態を実験的に観察可能となってきたが、組織形態の分析や評価に膨大な時間を要することや組織形態の時間発展を捉えることは容易ではない。したがって、マルチフェーズフィールド法を用いてマイクロ組織形態形成過程を数値シミュレーションにより、予測することが極めて有用であるとして期待されている。

本研究では、鉄鋼材料の冷却過程で生じるオーステナイト→フェライト変態挙動(以下、フェライト変態と記す)をマルチフェーズフィールド法でモデル化し、フェライト相の 3 次元空間分布およびその時間変化を含めた 4 次元変化を予測可能とすることを目的とする。特に、本研究のシミュレーションでは、最も基本的な鉄鋼材料である Fe-C 合金の連続冷却過程で生じるフェライト変態の 3 次元シミュレーションを可能とした。このとき、画像処理装置(Graphics Processing Unit: GPU)を用いた高速計算法を用いて、シミュレーションの高速化・効率化を行った。また実験的検討として、熱膨張計を用いて、炭素鋼の連続冷却におけるフェライト変態時のフェライト相の体積分率変化や結晶粒径分布を測定した。さらに、機械的シリアルセクションング法によりフェライト相の 3 次元形態の測定を行った。

2. シミュレーションおよび実験方法

2.1 マルチフェーズフィールド法

本研究で用いるマルチフェーズフィールド法においては、マイクロ組織の形成は、系(マイクロ組織)の全自由エネルギーが単調減少するように進行するとの仮定に基づいている¹⁾。

系の全自由エネルギーは、次式のギブスの自由エネルギー汎関数として定義される。

$$G = \int_V \left\{ \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \left(-\frac{a_{ij}}{2} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j \right) + \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N (W_{ij} \phi_i \phi_j) + g_{chem} + \lambda \left(\sum_{i=1}^N \phi_i(x,t) - 1 \right) \right\} dV$$

ここで、 ϕ_i はフェーズフィールド変数と呼ばれ、各座標における結晶粒 i の存在確率を表す。また、上式右辺の被積分項の第一項は勾配エネルギー、第二項はダブルウェルポテンシャル、第三項は化学的自由エネルギー、第四項はフェーズフィールド変数の総和が各座標において 1 となるための拘束条件を表す。さらに、 a_{ij} と W_{ij} は、それぞれ勾配係数、ポテンシャル障壁高さと呼ばれるパラメータであり、次式のように界面エネルギー σ_{ij} や界面幅 δ に関係づけられる。

$$W_{ij} = \frac{4\sigma_{ij}}{\delta}$$

$$a_{ij} = \frac{8\delta\sigma_{ij}}{\pi^2}$$

全自由エネルギーが単調減少を仮定すれば、フェーズフィールド変数 $\phi(x,t)$ の時間発展方程式は、次式で表される。

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -\frac{2}{n} \sum_{j=1}^n M_{ij}^{\phi} \left[\sum_{k=1}^n \left(\frac{1}{2} (a_{ik} - a_{jk}) \nabla^2 \phi_k + (W_{ik} - W_{jk}) \phi_k \right) - \frac{8}{\pi} \sqrt{\phi_i \phi_j} \Delta E_{ij} \right]$$

ここで、 ΔE_{ij} は相変態の化学的駆動力の大きさを表す²⁾。ま

た、フェーズフィールド変数のモビリティに関しては、フェライト/オーステナイト界面の易動度 M_{ij} と次式のように関係付けられる。

$$M_{ij}^{\phi} = \frac{\pi^2}{8\delta} M_{ij}$$

一方、フェライト変態においては炭素原子の拡散が生じるため、次式で表される炭素濃度 C の時間発展方程式を計算する。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ \sum_{i=1}^N \phi_i J_i \right\} = \nabla \cdot \left\{ \sum_{i=1}^N \phi_i D_i^C \nabla c_i \right\}$$

ここで、 D_i^C は結晶粒 i における炭素原子の拡散係数であり、結晶粒 i が α 相か γ 相かによって値が異なる。

数値シミュレーションにおいては、上に示したフェーズフィールド変数と炭素濃度変数の時間発展方程式を差分法を用いて離散化し、数値計算する。

2.2 複数 GPU 計算によるシミュレーション高速化

マルチフェーズフィールド法の3次元計算は計算コストが大きい。そこで、複数GPUを用いた高速並列計算法を用いた³⁾。複数のGPUを用いて並列計算を行う際には、計算領域全体を複数のサブ領域に分割し、それぞれに1基のGPUを割り当てる。本研究では、計算領域全体をz方向に2つのサブ領域に分割して、それぞれのサブ領域においてそれぞれのGPUがフェーズフィールド変数と炭素濃度変数の時間発展方程式を計算する。各GPUにおいて計算するに際し、各サブ領域のz方向端部において参照する隣接格子点のデータは、もう一方のGPU上のメモリ上に保存されているため、サブ領域間でデータ交換を行う必要がある。本研究では、GPU計算のための統合計算環境であるCUDAのバージョン4.0から使用可能となったPeer-to-Peer(P2P)通信を用いて、GPU間で直接データ交換を行った。

2.3 熱膨張計を用いたフェライト変態挙動の測定

熱膨張計を用いた変態挙動測定では、炭素鋼S10C(Fe-0.13wt.%C-0.26wt.%Si-0.5wt.%Mn-0.012wt.%P)を供試材として用いた。試験片形状は、直径 5mm、長さ 18mm であり、Mn や Si などの置換型添加元素の偏析を除

くために均質化処理を行なった。

変態挙動の測定には、NETZSCH Japan 社製の示差型熱膨張計 TD5010SE-NK を用いた。実験においては、室温から 1180K まで昇温速度 5K/min. で加熱したのち 3 分間保持し、オーステナイト単相状態とした。その後、4 つの異なる冷却速度(5 K/min., 10 K/min., 20 K/min., 30 K/min.) で室温まで連続冷却した。熱膨張測定後は、得られた熱膨張曲線を用いて、この原理に基づき、フェライト相の体積分率変化を計算した。また、フェライト相の結晶粒径は、光学顕微鏡による観察で測定した。

2.4 シリアルセクション法

光学顕微鏡による 2 次元的なマイクロ組織観察では、観察する試験片の断面の違いにより、粒径および体積分率が変化する。正確な粒径と体積分率を測定するために、機械的シリアルセクション法による 3 次元的なマイクロ組織観察を行う必要がある。シリアルセクション方法は多岐にわたるが、本研究では試験片を複数回にわたり研磨し、その都度撮影した二次元断面画像を重ね、3 次元像を再構築する方法を採用した。以下に、本研究で用いた機械的シリアルセクション方法を示す。(1) 試験片マイクロ組織の目的とする対象を決定し、ピッカー試験装置を用いて圧痕を付ける。(2) 試験片を鏡面研磨し、エッチング後、光学顕微鏡を用いてマイクロ組織写真を撮影する。(3) 取り込んだ光学顕微鏡写真より、画像解析ソフト IrfanView および可視化ソフトウェア MicroAVS 付属ツール ImgToVol を用いて 3 次元像を再構築する。

3. シミュレーション結果と実験結果

3.1 マルチフェーズフィールドシミュレーション結果

本研究では、Fe-0.15wt.%C 合金の連続冷却過程におけるフェライト変態の 3 次元シミュレーションを行った。本研究で用いた解析領域の大きさは $12.8 \times 12.8 \times 12.8 \mu\text{m}^3$ であり、 $128 \times 128 \times 128$ の等間隔の差分格子で分割した。初期温度は 1040 K、冷却速度は 2.0 K/s、終了温度は 1020 K とした。また、界面エネルギーや界面易動度は等方的とした。

図 1 に、マルチフェーズフィールドシミュレーション

で得られたフェライト相分布および炭素濃度の時間変化を示す。フェライト相の冷却が進み温度が低下するとともにフェライト相が成長し、オーステナイト相においては、炭素濃度が増加していることが再現されている。

本シミュレーションは、1CPUコア(Intel Xeon E2640)を用いた場合 900 時間以上の計算時間を必要とするが、本研究において構築した複数 GPU 計算を用いて 2 基の GPU(NVIDIA TESLA C2070)を使用すれば、計算時間は 58 時間となり、15 倍以上の高速化を達成した。

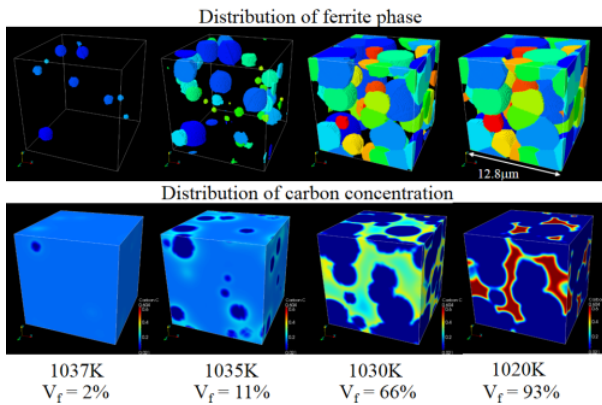


図 1 Fe-0.15wt.%C の連続冷却過程におけるフェライト相の形成過程と炭素濃度変化のマルチフェーズフィールドシミュレーション結果

3.2 炭素鋼のフェライト変態挙動測定の実験結果

図2に、本研究で得られた炭素鋼S10Cの連続冷却過程におけるフェライト相の体積分率変化を示す。この結果より、冷却速度が増加すると、より低い温度で変態が生じていることが分かる。一方で、冷却速度が増加すると、フェライト相の結晶粒の粒成長が遅くなり、体積分率は減少する。

図3に、光学顕微鏡で観察したフェライト相形態を示す。白色の領域がフェライト相であり、黒色または灰色の領域がパーライト組織や、ベイナイト組織などの硬質相であると考えられる。低い冷却速度で冷却した場合は、等軸状(球状)のアロトリオモルフフェライトが多く形成され、ラス状もしくはプレート上のヴィッドマンステッテンフェライトはほとんど形成されていないことがわかる。

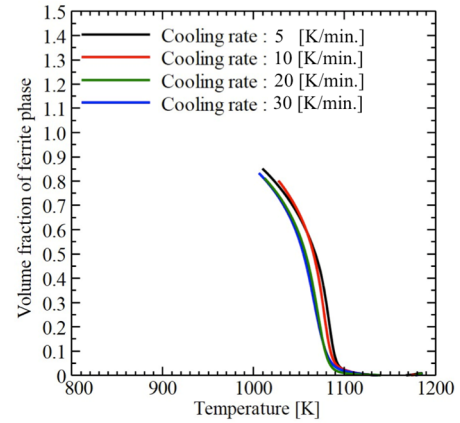


図2 炭素鋼S10Cの連続冷却過程におけるフェライト相の体積分率変化

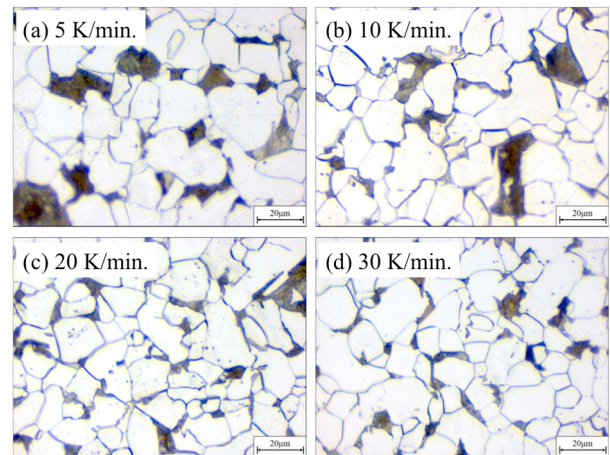


図3 炭素鋼S10Cの連続冷却により形成したフェライト相の光学顕微鏡写真

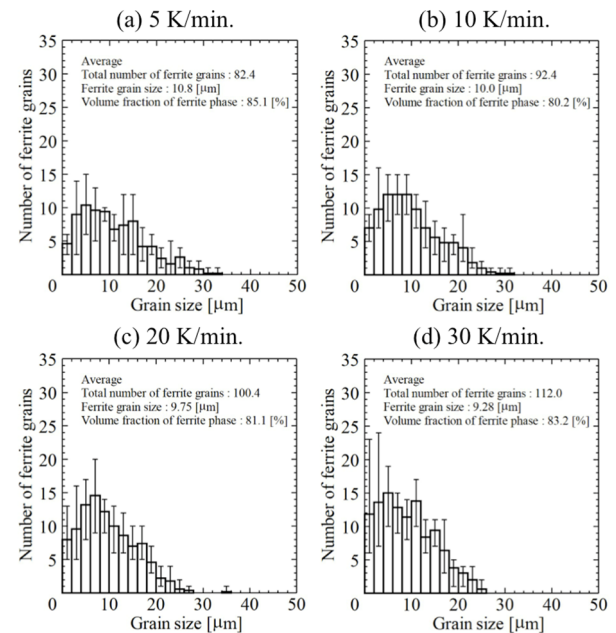


図4 炭素鋼 S10C の連続冷却により形成したフェライト相の結晶粒径分布

図4に、フェライト相の結晶粒径分布、粒数、平均粒径、および体積分率を示す。冷却速度が増加することにより、より多くのフェライト相が形成されていることがわかる。また、フェライト相の平均粒径は冷却速度の増加とともに減少していることがわかる。一方で、フェライト相の体積分率は冷却速度が大きくなるほど大きくなる結果となった。冷却速度が増加するほど、より低い温度でフェライト変態が生じるため、冷却速度の増加とともに、フェライト相の体積分率は減少すると考えられるが、予想と反した結果が得られた。原因として、フェライト相の体積分率をマイクロ組織の断面による二次元観察から測定していることが考えられる。

図5に、シリアルセクションングにより得られたマイクロ組織観察より再構築したフェライト相の3次元像を示す。図中の赤色または橙色の領域がフェライト相である。3次元像を再構築することにより、フェライト相の3次元形状を観察することができ、多くのフェライト相が等軸状のアロトリオモルフフェライトであることが判明した。図中矢印で示したフェライト相に着目すると、z方向に沿って粒径は一定ではなく、z方向に進むほど粒径が増加していることがわかる。すなわち、フェライト相の粒径は、観察する試験片の断面に大きく影響することが明らかとなった。

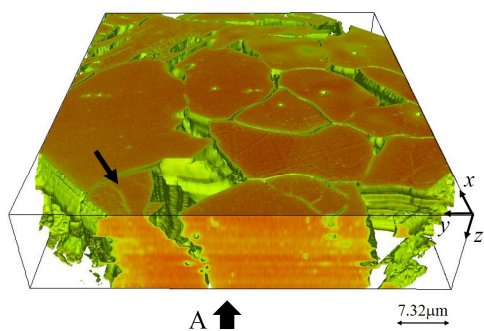


図5 冷却速度 5 K/min. で連続冷却した炭素鋼 S10 中のフェライト相の3次元形態

4. まとめと今後の展望

本研究では、鉄鋼材料中のフェライト相の3次元形態とその時間変化を精度良く予測するために、マルチフェーズフィールド法を用いた Fe-C 合金のフェライト変態

の3次元シミュレーションとその実験的検討を行った。

実験結果の比較を行うためには、効率的な3次元シミュレーションを可能とする必要があり、複数のGPUを用いた高速並列計算法を確立した。さらに、熱膨張計を用いて炭素鋼の連続冷却におけるフェライト変態挙動を解析し、フェライト相の体積分率変化や結晶粒径分布を測定した。また、シリアルセクションング法を用いてフェライト相の3次元形態を観察した。シミュレーションで得られるフェライト相の3次元形態を実験結果と直接比較するためには、さらなる計算領域の拡大、それに伴う計算コストの増大を克服する必要がある。また、結晶塑性解析によりオーステナイト相の塑性加工を再現し、その解析結果を用いて加工オーステナイトからのフェライト変態挙動を3次元マルチシミュレーションで再現するためには、結晶塑性解析の高速化が必要であることもわかった。したがって今後の展望としては、マルチフェーズフィールドシミュレーションと結晶塑性解析の高速化が重要な課題である。後者の研究課題については、高速フーリエ変換法を用いた結晶塑性解析法⁴⁾が有効であると考えており、今後も研究を遂行する。

謝辞

本研究を遂行するにあたり、公益財団法人天田財団に奨励研究助成を頂きました。ここに記して、謝意を表します。

参考文献

- 1) I. Steinbach and F. Pezzolla, *Physica D*, 134, (1999), 385.
- 2) A. Yamanaka, T. Takaki and Y. Tomita, *ISIJ International*, 52, (2012), 659.
- 3) A. Yamanaka, T. Takaki, T. Aoki and T. Shimokawabe, *Journal of Computational Science and Technology*, 6, (2012), 182.
- 4) R. A. Lebensohn, *Acta Materialia*, 49, (2012), 2723.