

## マルテンサイト変態を考慮した結晶塑性有限要素解析手法の開発

研究代表者 熊本大学先進マグネシウム国際研究センター 准教授 眞山 剛

共同研究者 熊本大学大学院自然科学教育部 修士2年 豊田 康平

### 1. 緒言

残留オーステナイトを含む鉄鋼材料は、適当な変形条件下において加工誘起マルテンサイト変態による著しい加工硬化を引き起こし、加工後においても高い強度と健全な組織を保持し得ることが知られている。近年では高合金鋼のみならず、中 Mn 鋼等においてもこのような挙動の活用が検討されており、将来的には幅広い応用製品への適用が期待される。応用製品の強度設計や変形解析を効率的に実施するためには、有限要素法をはじめとする数値解析手法の適用が妥当であり、従来材料に対しては既に十分な実績がある。しかしながら、加工誘起マルテンサイト変態を考慮した数値解析を実施するために必要な構成則は、現象の複雑さにより未だに確立されていない。マルテンサイト変態は、その形成時において顕著な負荷方位依存性を示すことに加えて、形成されるマルテンサイトバリエーションが母相と特定の方位関係を持つことから、結晶スケールの異方性を考慮した構成則である結晶塑性構成則による表現が妥当であると考えられる。先行研究としてもマルテンサイト変態を陽に考慮した結晶塑性構成則の構築が試みられており、例えば M.-G. Lee ら<sup>1)</sup>は準安定オーステナイト鋼の挙動を表現している。また、S. L. Wong ら<sup>2)</sup>は高マンガン鋼への応用を想定して、変態誘起塑性と双晶誘起塑性の両方を導入した結晶塑性構成則を構築している。いずれの研究においても構成式による計算結果が実験結果をよく再現することが示されているが、構成則の構造が複雑であることに加えて、多数の材料パラメータを含んでおり、論文中で想定されていない材料への適用は容易ではない。

一方、近年の結晶塑性解析に関する研究では、双晶変形を考慮した構成則も広く使用されるようになってきている。双晶変形はマルテンサイト変態と同様に、形成領域における塑性変形と結晶方位変化を伴うものであるため、既存の双晶モデルに基づくことにより、マルテンサイト変態を考慮した比較的シンプルな結晶塑性構成則の構築が期待できる。そのようなシンプルな構成則を商用有限要素法へ導入することができれば、構造体の強度設計や変形解析を実施する上でも有用であると考えられる。

本研究の目的は、加工誘起マルテンサイト変態が関与する鉄鋼材料の変形挙動を、結晶スケールの微視的素過程に基づき定量的に表現可能な力学解析手法を構築することである。具体的には母相と複数のマルテンサイトバリエーションの巨視的塑性変形への寄与を各領域の体積分率により重み付けすることにより表現する手法を用いて、マイクロ材料試験により得られている SUS304 単結晶の材料試験結果<sup>3, 4)</sup>を記述することにより、開発手法の妥当性を検証すると共に、単結晶および多結晶体の変形挙動に及ぼすマルテンサイト変態の寄与に関する数値的評価を行う。

## 2. 解析手法

本研究で構築した解析手法は、Pierce ら<sup>5)</sup>が提案した速度依存型結晶塑性構成則に Kalidindi<sup>6)</sup>の提案した双晶モデルを導入したものを基本としている。以下では、硬化則として転位密度依存型モデル<sup>7)</sup>を用いた結晶塑性構成則について概説した後、マルテンサイト変態の導入について説明する。

### 2. 1 結晶塑性構成則

すべり系  $\alpha$  のせん断ひずみ速度  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  が次式<sup>5)</sup>で得られるとする。

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0 \operatorname{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{1/m} \quad (1)$$

ここで、 $\tau^{(\alpha)}$ 、 $m$ 、および  $\dot{\gamma}_0$  は、それぞれすべり系  $\alpha$  の分解せん断応力、ひずみ速度依存性指数、および参照せん断速度を表す。速度依存性が極限まで小さい場合に臨界分解せん断応力(CRSS)に対応する参照応力  $g^{(\alpha)}$  の発展則は、現象論的発展則や転位密度依存型発展則等、様々なモデルが提案されているが、ここでは下記の転位密度依存型モデル<sup>7)</sup>を用いることにする。

$$g^{(\alpha)} = g_0^{(\alpha)} + \sum_{\beta} \Omega^{(\alpha\beta)} a \mu b \sqrt{\rho^{(\beta)}} \quad (2)$$

ここで、 $\Omega^{(\alpha\beta)}$  はすべり系  $\alpha$ - $\beta$  間の相互作用を表現する係数であり、 $g_0^{(\alpha)}$ 、 $a$ 、 $\mu$ 、および  $b$  は材料パラメータである。また、式(2)中の  $\rho^{(\beta)}$  はすべり系  $\beta$  の転位密度を示しており、その発展則としては回復項<sup>8)</sup>を含む下記のモデルを用いることにする。

$$\dot{\rho}^{(\alpha)} = \left( \frac{c}{L^{(\alpha)}} - n \rho^{(\alpha)} \right) \frac{|\dot{\gamma}^{(\alpha)}|}{b} \quad (3)$$

ここで  $c$  と  $n$  は、それぞれ式(3)の右辺第1項で表される転位の蓄積量と右辺第2項で表される転位の回復量を調整する材料パラメータである。また、式(3)中の  $L^{(\alpha)}$  は転位の平均自由行程(mean free path)を表す内部状態変数<sup>7)</sup>であり、本研究では次式により見積られるものとした。

$$L^{(\alpha)} = \frac{c^*}{\sqrt{\sum_{\beta} \omega^{(\alpha\beta)} \rho^{(\beta)}}} \quad (4)$$

ここで、 $c^*$  は材料パラメータ、 $\omega^{(\alpha\beta)}$  は重み係数行列であり運動転位に対する抵抗の相対的な大きさを表現する。 $\omega^{(\alpha\beta)}$  の非対角成分が優位とすることにより、単結晶の変形過程における Stage I から II への遷移を表現することができる<sup>7)</sup>。

## 2. 2 マルテンサイト変態の考慮

マルテンサイト変態はその形成領域において塑性ひずみが生じると共に結晶構造が変化する。母相とマルテンサイト形成領域には材料により決まった方位関係があるが、母相とは異なる結晶方位を持つ領域が形成されたことで新たな結晶が形成されたと見做すこともできる。さらに変形が進行した際には、母相とマルテンサイト相のいずれにおいてもすべり変形が生じ得るだけでなく、マルテンサイト領域の拡大、母相内の異なる領域に同一バリエーションが形成される場合、さらには異なるマルテンサイトバリエーションが形成され得るため、マルテンサイトの形成領域を全て個別に考慮した解析を実施することは、結晶粒数が膨大となり得るため計算コストの点から現実的ではない。

以上の問題は、双晶変形においても生じ得るが、双晶の形成については von Houtte<sup>9)</sup>が母相と双晶を体積分率により考慮して、双晶体積分率が閾値を超えたところで結晶方位を母相から双晶の方位に回転させるモデルを提案することで取り扱いが可能となった。このモデルは、複数のバリエーションを持つ双晶系のうち最も体積分率が大きな双晶系に方位回転させる、ということで **Predominant Twin Rotation (PTR)** と呼ばれることも多い。その後、体積分率による重み付けにより、全双晶系の変形機構を常に考慮する **Multiple Twin Scheme** が Kalidindi<sup>6)</sup>により提案された。このモデルは計算コストやメモリ容量等の点で PTR よりも負荷が大きいですが、PTR において双晶回転時に起こり得る不連続な変化が生じないことや、双晶の消滅(De-Twinning)等も考慮できる<sup>10)</sup>、といったメリットがあり、近年では頻繁に採用されている。以下では、**Multiple Twin Scheme** に基づき、マルテンサイト変態を考慮した結晶塑性解析を実施するための概略を示す。

まず母相の塑性変形を次式に示す塑性速度勾配テンソルで表現する。

$$\mathbf{L}_{\text{Matrix}}^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}_{\text{Matrix}}^{(\alpha)} \left( \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)} \right) + \sum_{\alpha} \dot{f}^{(\alpha)} \gamma^{\text{TRIP}} \left( \mathbf{s}_{\text{TRIP}}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{\text{TRIP}}^{(\alpha)} \right) \quad (5)$$

ここで、右辺第1項は母相のすべりの寄与を、第2項はマルテンサイト変態の寄与を表す。 $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ 、 $\mathbf{m}^{(\alpha)}$  および  $\mathbf{s}_{\text{TRIP}}^{(\alpha)}$ 、 $\mathbf{m}_{\text{TRIP}}^{(\alpha)}$  は、変形機構  $\alpha$  のせん断方向ベクトルおよびせん断面（すべり面／晶壁面）法線ベクトルを示している。また、 $\gamma^{\text{TRIP}}$  はマルテンサイト変態に伴い生じるせん断ひずみ量を示している。右辺第1項において  $\dot{\gamma}_{\text{Matrix}}^{(\alpha)}$  で表される母相のすべり系  $\alpha$  のすべり速度は式(1)を用いて計算される。これに対して右辺第2項の  $\dot{f}^{(\alpha)}$  はマルテンサイト体積分率の変化率を示しており、次式で表すことができる。

$$\dot{f}^{(\alpha)} = \frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\gamma^{\text{TRIP}}} \left( 1 - \sum_{\beta} f^{(\beta)} \right) \quad (6)$$

ここで、 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  の見積りにはマルテンサイト形成素過程等の知見を導入してモデル化することも考えられるが、本研究ではすべりと同様に式(1)を用いることにした。

一方、マルテンサイトバリエーション  $i$  の塑性速度勾配テンソルは次式で表現される。

$$\mathbf{L}_{\text{Variant}(i)}^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}_{\text{Variant}(i)}^{(\alpha)} \left( \mathbf{s}_{\text{Variant}(i)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{\text{Variant}(i)}^{(\alpha)} \right) \quad (7)$$

ここで、 $\mathbf{s}_{\text{Variant}(i)}^{(\alpha)}$  および  $\mathbf{m}_{\text{Variant}(i)}^{(\alpha)}$  は、マルテンサイトバリエント  $i$  におけるすべり系  $\alpha$  のすべり方向ベクトルおよびすべり面法線ベクトルを表しており、母相の結晶方位と母相-マルテンサイトバリエント間の方位関係より求めることができる。また、 $\dot{\gamma}_{\text{Variant}(i)}^{(\alpha)}$  はマルテンサイトバリエント  $i$  におけるすべり系  $\alpha$  のすべり速度を示しており、母相と同様に式(1)を用いて見積られる。

式(5), (7)に示した母相とマルテンサイトバリエントを重み付けして表現する比較的簡単な方法として、ひずみ一定(Taylor 型)モデルと応力一定(Sachs 型)モデルがある。本研究では、ひずみ一定モデルを採用し、マルテンサイト体積分率を用いて重み付けされた次式の応力速度を用いた。

$$\begin{aligned} \dot{\boldsymbol{\sigma}} &= \left( 1 - \sum_i f^{(i)} \right) \dot{\boldsymbol{\sigma}}_{\text{Matrix}} + \sum_i f^{(i)} \dot{\boldsymbol{\sigma}}_{\text{Variant}(i)} + \sum_i \dot{f}^{(i)} \left( \boldsymbol{\sigma}_{\text{Matrix}} - \boldsymbol{\sigma}_{\text{Variant}(i)} \right) \\ &= \left( 1 - \sum_i f^{(i)} \right) \left( \mathbf{C}_{\text{Matrix}} : \mathbf{D} - \mathbf{C}_{\text{Matrix}} : \mathbf{D}_{\text{Matrix}}^p - \mathbf{W}_{\text{Matrix}}^p \boldsymbol{\sigma}_{\text{Matrix}} + \boldsymbol{\sigma}_{\text{Matrix}} \mathbf{W}_{\text{Matrix}}^p \right) \\ &\quad + \sum_i f^{(i)} \left( \mathbf{C}_{\text{Variant}(i)} : \mathbf{D} - \mathbf{C}_{\text{Variant}(i)} : \mathbf{D}_{\text{Variant}(i)}^p - \mathbf{W}_{\text{Variant}(i)}^p \boldsymbol{\sigma}_{\text{Variant}(i)} + \boldsymbol{\sigma}_{\text{Variant}(i)} \mathbf{W}_{\text{Variant}(i)}^p \right) \\ &\quad + \sum_i \dot{f}^{(i)} \left( \boldsymbol{\sigma}_{\text{Matrix}} - \boldsymbol{\sigma}_{\text{Variant}(i)} \right) \end{aligned} \quad (8)$$

ここで、 $\dot{\boldsymbol{\sigma}}_{\text{Matrix}}$  および  $\dot{\boldsymbol{\sigma}}_{\text{Variant}(i)}$  は、母相およびマルテンサイトバリエント  $i$  の応力速度を、 $\boldsymbol{\sigma}_{\text{Matrix}}$  と  $\boldsymbol{\sigma}_{\text{Variant}(i)}$  は母相とマルテンサイトバリエント  $i$  の真応力テンソルを表す。また、 $\mathbf{C}_{\text{Matrix}}$ 、 $\mathbf{D}_{\text{Matrix}}^p$ 、 $\mathbf{W}_{\text{Matrix}}^p$  および  $\mathbf{C}_{\text{Variant}(i)}$ 、 $\mathbf{D}_{\text{Variant}(i)}^p$ 、 $\mathbf{W}_{\text{Variant}(i)}^p$  は、それぞれ母相およびマルテンサイトバリエント  $i$  の弾性係数テンソル、塑性ひずみ速度テンソル、塑性スピテンソルを示している。なお、実際の数値解析では式(8)の計算において Rate-tangent modulus 法<sup>5)</sup>を適用することにより現実的な時間増分での解析を可能としている。

以上の構成式を鉄鋼材料におけるオーステナイト  $\gamma \rightarrow$  マルテンサイト  $\alpha'$  に適用するためには、母相とマルテンサイトの結晶方位関係とバリエント選択則を与える必要がある。鉄鋼材料のマルテンサイト変態における結晶方位関係としては、KS の関係や NW の関係が良く知られており、それらを忠実に考慮することも可能である。しかしながら、KS の関係における 24 バリエント、NW の関係における 12 バリエントを考慮した解析は計算負荷が高いため、本報告では Bain の関係における 3 バリエントを考慮した解析を実施し、簡易的に材料パラメータ同定すると共に、定性的な挙動を調査することにした。一方、バリエント選択則としては Higo ら<sup>11)</sup>が単結晶試験に基づき KS の関係に関して提案したせん断面  $\{111\}\gamma$  とせん断方向  $\langle 211 \rangle\gamma$  を参考にして、KS の関係によるバリエントの方位に最も近い方位を持つ Bain バリエントが生成されると仮定した。

### 3. 計算結果と考察

#### 3. 1 単結晶解析

前節に示した結晶塑性構成則を導入した静的陽解法有限要素法を用いて、マイクロ材料試験法により実施された SUS304 単結晶の引張試験結果<sup>3, 4)</sup>の記述を試みた。解析モデルとしては実際の試料形状を模したのを用い、負荷軸が[111]方向および[123]方向となるようにモデル全体に初期方位を与えて単結晶モデルとした。変形前は全ての領域がオーステナイト母相であり、その変形機構としては{111}<110>すべり系とマルテンサイト変形系を考慮した。なお、マルテンサイト変形系では極性を考慮している。一方、マルテンサイト変態により形成されるマルテンサイトの変形機構としては、BCC の{110}<111>すべり系および{112}<111>すべり系を考慮した。Table 1 に、負荷方位に対するオーステナイト母相の各すべり系のシュミットファクターを示す。[111]引張では6つのすべり系が同一の最大シュミットファクター0.27を持つものに対して、[123]引張ではすべり系 11 が際立って高いシュミットファクター0.47を持つ。

Table 1 Schmid factors for each slip system

System No.	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
[111] tension	0	0	0	0.27	0	0.27	0	0.27	0.27	0.27	0.27	0
[123] tension	0.13	0.36	0.23	0.20	0.14	0.34	0	0.03	0.04	0.32	0.47	0.15

以上の条件による変形解析を実施し、構成式中の材料パラメータを実験結果の応力-ひずみ挙動を再現するよう試行錯誤的に同定した。パラメータの具体的な値はここには示さないが、初期 CRSS はマルテンサイトのすべり系が最も大きく、次いでマルテンサイト変態系、オーステナイトのすべり系という順となることで、以降に示すマルテンサイト変態に伴う硬化を表現することができている。

Fig. 1a は[111]引張および[123]引張の解析により得られた応力-ひずみ曲線を示している。変形挙動の顕著な異方性が表現されており、[111]引張では変形初期より高い加工硬化率で応力が上昇しているのに対して、[123]引張では変形初期の低い加工硬化率がひずみ 20%程度でわずかに高くなり、さらにひずみ 70%程度から急激に加工硬化率が上昇し続けていることがわかる。Fig. 1b は変形に伴うマルテンサイト体積分率の変化を示しており、[111]引張ではひずみ 10%を超えたあたりから急激な増加を示しているのに対して、[123]引張ではひずみ 60%程度から徐々に増加していることがわかる。

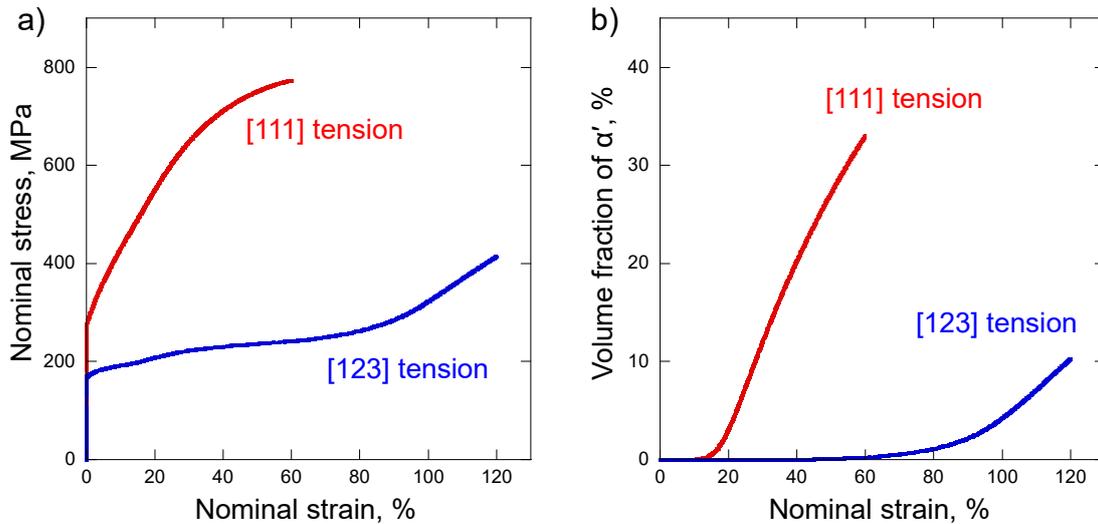


Fig. 1 Numerical results of single crystal analysis. (a) Stress-strain curves. (b) Evolution of volume fraction of martensite.

Fig. 2 は、単結晶解析により得られた変形過程における各変形機構の活動度を表す結果であり、Fig. 2a および c は、それぞれ[111]引張および[123]引張におけるオーステナイト相内すべりとマルテンサイト変態が塑性変形に及ぼす寄与割合を示している。これらの結果より、[111]引張ではひずみ 10%を超えたあたりから寄与割合が増加するもののひずみ 25%程度以上ではほぼ一定の割合であるのに対して、[123]引張ではひずみ 60%程度からマルテンサイト変態の寄与割合が増加し続けていることがわかる。また、Fig. 2b および d は、それぞれ[111]引張および[123]引張におけるオーステナイト相内すべりの相対活動度を示している。この結果からは、いずれの引張負荷でも変形初期には Table 1 に示したシュミットファクターに従っており、[111]引張では 6 つのすべり系がほぼ同程度に活動し、[123]引張では最大シュミットファクターを持つすべり系 11 が支配的に活動している。ひずみ 10%を超えると活動変形機構は大きく変化しているが、これは塑性変形に伴い変形が不均一となったことに起因している。

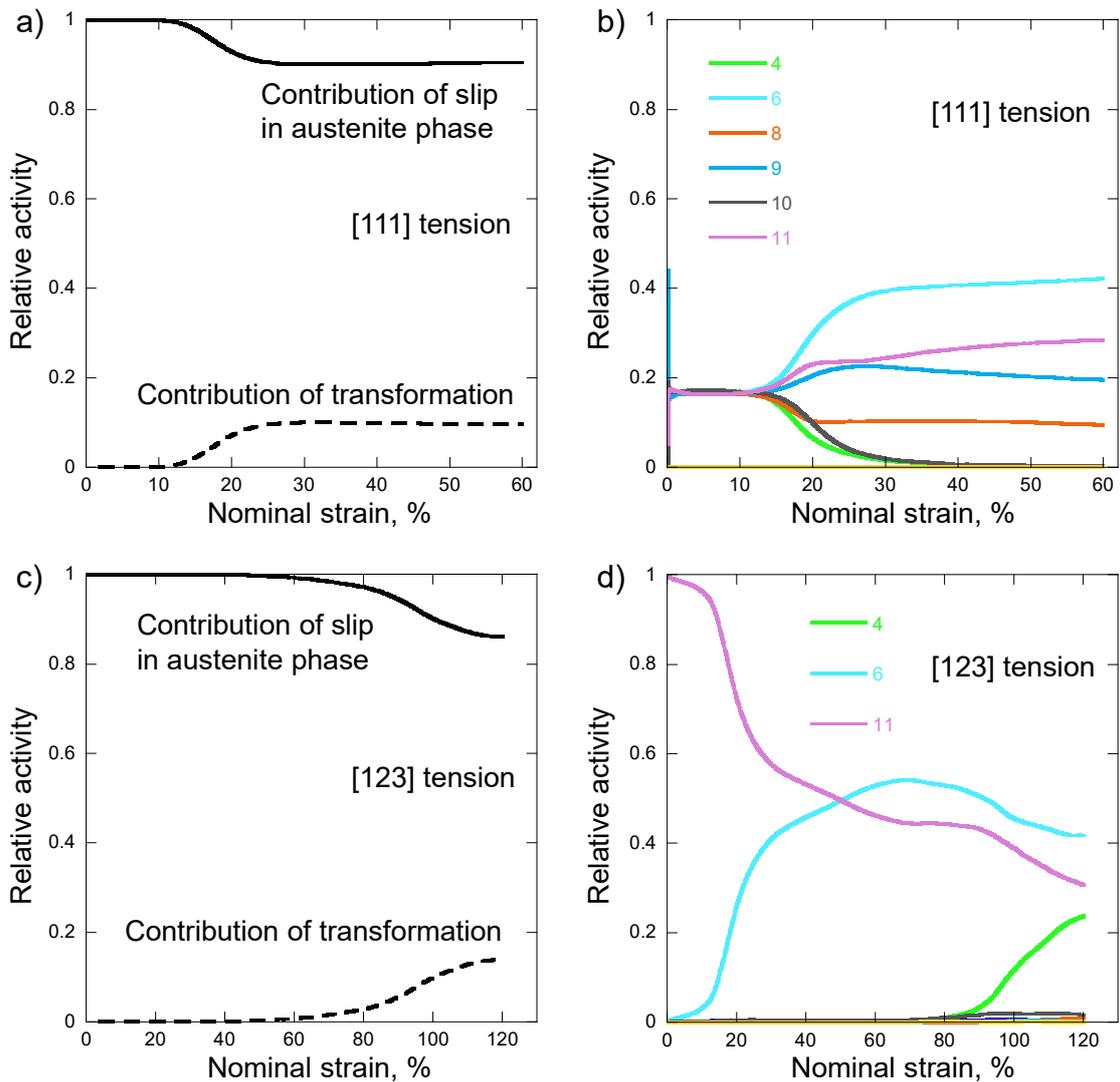


Fig. 2 Active deformation modes. Contributions of slip and transformation to overall deformation in austenite under (a) [111] tension and (c) [123] tension. Relative activity of each slip mode in austenite under (b) [111] tension and (d) [123] tension.

Fig. 1 と Fig. 2 の結果を併せて考えると、[111]引張における変形初期から高い加工硬化率は、主に多重すべりに起因しているのに対して、[123]引張におけるひずみ 60%程度からの継続的な加工硬化率の上昇はマルテンサイト変態に起因するものと考えられる。このことを確かめるために、マルテンサイト変態の活動を抑制して同様の解析を実施した。Fig. 3a は、Fig. 1a に示した応力-ひずみ曲線にマルテンサイト変態を抑制した解析の結果を破線により重ねて示したものである。[111]引張では変態の有無で加工硬化挙動に大きな差異が見られないのに対して、[123]引張ではマルテンサイト変態を抑制すると変形後期の加工硬化を示さずに軟化が生じている。Fig. 3b は[123]引張の結果を拡大すると共に、マルテンサイト体積分率の変化も水色破線で示したものである。マルテンサイト変態体積分率

の増加開始と、マルテンサイトの考慮有無による差異が拡大するタイミングが一致しており、[123]引張においては特にマルテンサイト変態が延性発現に寄与し得ることを示している。

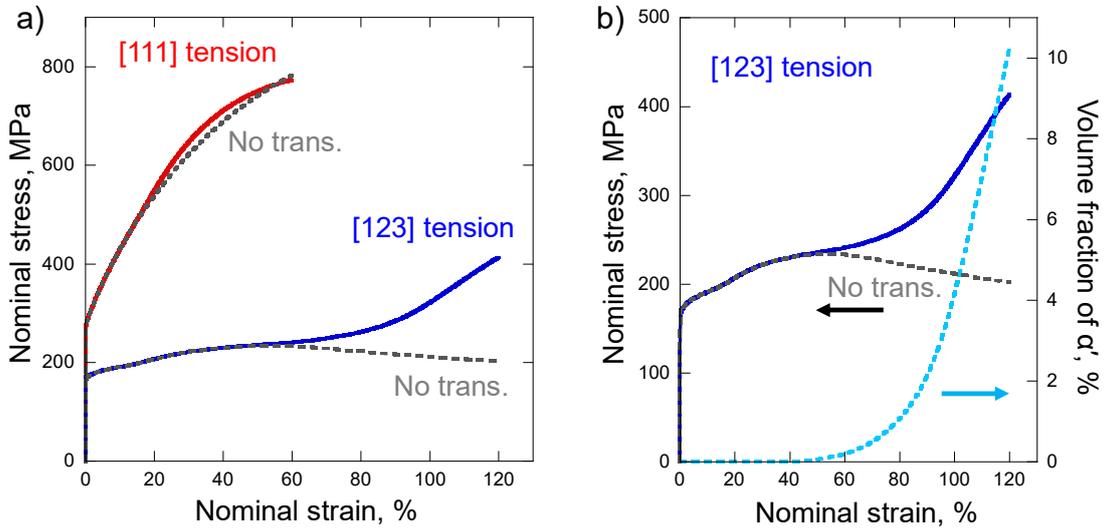


Fig. 3 Influence of martensitic transformation to stress-strain behavior. (a) Orientation dependence. (b) Relationship between hardening and evolution of volume fraction of martensite.

### 3. 2 多結晶解析

単結晶解析により同定されたパラメータを用いて、多結晶体の解析を実施した。解析モデルは立方体の各辺を均等に10分割した1000要素とし、各要素に乱数で初期方位を与えることによりランダム方位を持つ多結晶モデルとした。このモデルに対して変位制御で引張負荷解析を実施した。なお、Fig. 3に示した単結晶解析と同様に本多結晶解析においてもマルテンサイト変態を抑制した計算も実施し、マルテンサイト変態が多結晶の変形挙動に及ぼす影響について評価した。

Fig. 4は多結晶の引張負荷解析により得られた応力-ひずみ曲線であり、赤の実線がマルテンサイト変態を考慮した解析結果、青の実線がマルテンサイト変態を抑制した解析結果である。両者を比較すると、変形初期の応力-ひずみ曲線はほぼ一致しているが、ひずみ20%程度から変形に伴い両

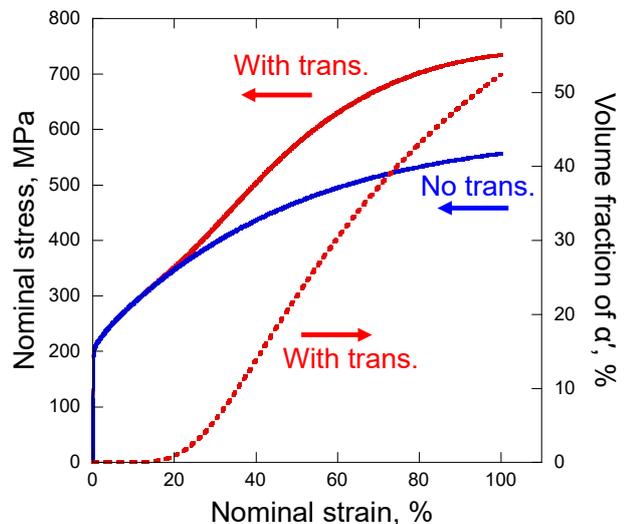


Fig. 4 Results of poly-crystal analysis.

者の差異が大きくなり、マルテンサイト変態を考慮した場合においてより大きな加工硬化を示している。さらに Fig. 4 中の赤破線はマルテンサイト体積分率の変化を示しており、ひずみ 20%程度からマルテンサイト体積分率に顕著な増加が見られることがわかる。これらことから、多結晶体の解析においてもマルテンサイト変態に起因する付加的加工硬化が表現されていることがわかる。

#### 4. まとめ

本研究では鉄鋼材料におけるマルテンサイト変態を表現するために、複数バリエーションを表現可能な双晶モデル Multiple Twin Scheme に基づく結晶塑性解析手法を構築した。さらに構築した解析手法を用いて単結晶および多結晶の引張負荷解析を実施し、マルテンサイト変態に起因する付加的加工硬化が記述されることを示した。一方で、本解析手法はマルテンサイト変態に起因する体積膨張を考慮していないこと、および計算負荷が高いこと等、解決すべき課題が残されている。変態時の体積膨張を考慮すること自体は、式(5)の右辺第 2 項のせん断方向ベクトルに垂直方向成分も加えることにより表現可能ではあるが、今回用いたひずみ一定モデルのような単純な均質化を適用した場合には、現実的とは思えない応力が発生する等の不具合が生じることが確かめられている。今後は、問題に応じた粗視化と精密化に加えて、数値的な安定性や効率の改善等も、実験的評価により得られる実現象との整合性を確認しながらさらに進める必要がある。

#### 謝辞

本研究は、公益財団法人 JFE21 世紀財団の助成のもと実施されました。深く感謝の意を表します。

#### 参考文献

- 1) M.-G. Lee et al., *Int. J. Plasticity* **26** (2010) 688-710.
- 2) S. L. Wong et al., *Acta Mater.* **118** (2016) 140-151.
- 3) Y. Mine et al., *Scripta Mater.* **113** (2016) 176-179.
- 4) S. Ueki et al., *ISIJ Int.* **59** (2019) 927-934.
- 5) D. Peirce et al., *Acta Metall.* **31** (1983) 1951-1976.
- 6) S. R. Kalidindi, *J. Mech. Phys. Solids* **46** (1998) 267-290.
- 7) T. Ohashi, *Phil. Mag. A* **70** (1994) 793-803.
- 8) U. F. Kocks, *Trans. ASME, J. Eng. Mater. Tech.*, **98** (1976) 76-85.
- 9) P. Van Houtte, *Acta Metall.* **26** (1978) 591-604.
- 10) H. Wang et al., *Mater. Sci. Eng. A* **555** (2012) 93-98.
- 11) Y. Higo et al., *Acta Metall.* **22** (1974) 313-323.