

214 溶接部の凝固組織形成および固相粒成長の確率論的モデル

—溶接部組織 3 次元シミュレータの開発 (第 1 報) —

新日本製鐵株式會社 先端技術研究所

○野上敦嗣

新日本製鐵株式會社 大分技術研究部

小関敏彦

新日本製鐵株式會社 鉄鋼研究所

市川和利

新日鉄情報通信システム株式会社

福田由佳

Stochastic Modelling of Solidification and Grain Growth in Welding

—Development of Three-dimensional Simulator for Weld Microstructures (Report 1) —

by Atsushi Nogami, Toshihiko Koseki, Yuka Fukuda and Kazutoshi Ichikawa

1. 緒言

溶接に伴う溶接部の材料組織変化を予測・制御することは極めて重要であり、計算でも溶融部温度履歴¹⁾や凝固組織²⁾の予測研究が行われている。これらの連続体近似による解析モデルにより、系の平均的な挙動は充分定量的に予測できるが、結晶形状や粒径分布等のマイクロ組織の不均質性を考慮することはできない。近年、連続体モデルと確率論的モデルを組み合わせる不均質性も考慮した凝固組織形成シミュレーション法の開発が試みられ³⁾、溶接部組織予測にも適用されている⁴⁾。ただ、これらの先駆的研究は 2 次元計算であり、HAZ の粗粒化も考慮されていない。本研究では、厚板の溶接部組織の予測を可能にする 3 次元シミュレータを開発し、HAZ 粗粒化の確率論的モデルも構築も試みた。

2. 計算モデル

2.1. 凝固粒生成・成長モデル

本モデルでは Fig.1 に示すような熱・溶質拡散計算用の目の粗い格子 (差分メッシュ) と結晶粒組織計算用の細かい格子 (セル) を用いる。計算の流れを Fig.2 に示す。1 時間ステップ内で、まず熱伝導・溶質拡散を差分法で計算した後、核生成・粒成長をモンテカルロ (MC) 法で計算し、これを所望の時間まで繰り返す。定式化は Zhu and Smith³⁾に従った。なお、差分法は一次差分陽解法とし、3 次元に拡張した。MC 計算で用いる凝固核生成確率 P_n 、凝固粒成長確率 P_g を式(1)、(2)に示す。

$$P_n(x_i, y_i, t + \Delta t) = A \cdot [\Delta T^2(x_i, y_i, t + \Delta t) - \Delta T^2(x_i, y_i, t)] \cdot V_m \quad (1)$$

ここで、 ΔT は過冷度、 V_m はモンテカルロ計算用のセルの体積。

$$P_g(x_i, y_i, t) = \begin{cases} 0 & \text{if } \Delta T \leq 0 \\ B \exp(-\Delta F_g^*(x_i, y_i, t) / kT) & \text{if } \Delta T > 0 \end{cases} \quad (2)$$

ここで、 ΔF_g^* は結晶成長のエネルギー障壁で、凝固に伴うセル体積分の自由エネルギー変化と固液界面数による界面エネルギー変化の総和 ΔF_g からセルサイズ r を変化させた時の極大値として $\partial \Delta F_g / \partial r = 0$ より求めたもの。A, B は頻度パラメータで計算の時間刻み、MC 計算のセルの大きさに依存する。

2.2. 固相粒成長モデル

凝固組織シミュレーションでは、通常、凝固粒同士が接触した後の固相の粒成長は考慮しないが、本研究では HAZ の粗粒化をシミュレートするため、固相粒の結晶方位遷移確率 P_c を(3)

式のように与えた。

$$P_c = \exp(-\Delta E_{GB} / kT) \cdot C \exp(-D' / kT) \quad (3)$$

ここで、 ΔE_{GB} は結晶方位の変化に伴う粒界エネルギーの増減。

等温での固相粒成長 MC シミュレーションでは(3)式の右辺第一項のみを遷移確率とするが、溶接プロセスでは母材に極端な温度場が生じるため母材原子の kinetics を考慮する必要があり、第2項を乗じた。すなわち第2項は Mobility に関連する項である。なお、実際の計算では母材の融点で正規化して、 $C \exp(-D/(T/T_m))$ の形で用いた。

3. 計算例および課題

Fig.3 に本シミュレータによる溶接部材料組織の時間変化を断面組織図で示す。溶融部の柱状晶の発達や HAZ の粗粒化など形態的には溶接部組織が良く再現できている。実組織の比較を通じてシミュレータのより定量的な検証が必要である。次報で検証例を報告する。

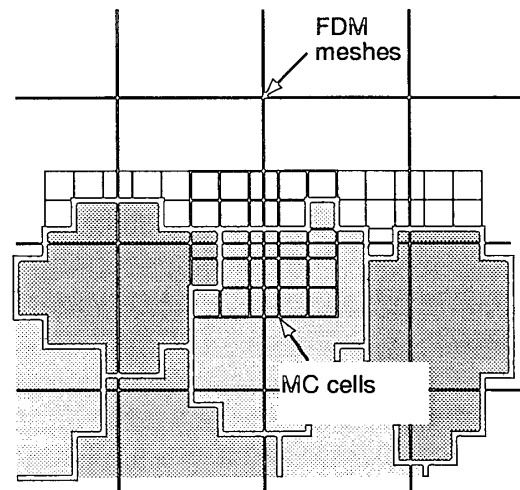


Fig.1 The relationship between FDM meshes and MC cells

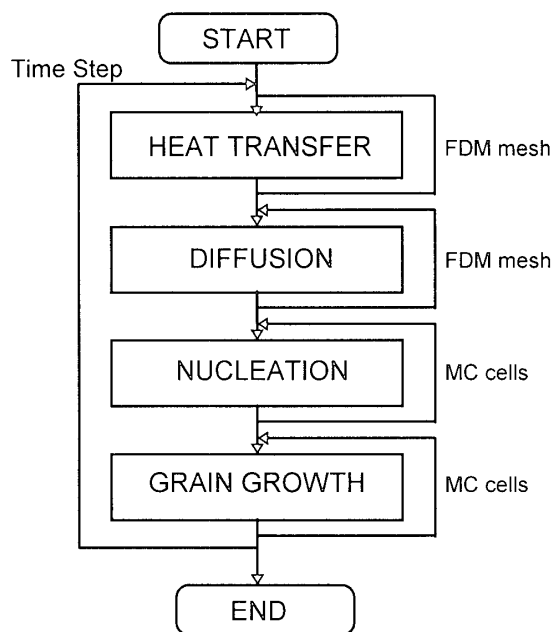


Fig.2 Flow of the computational model

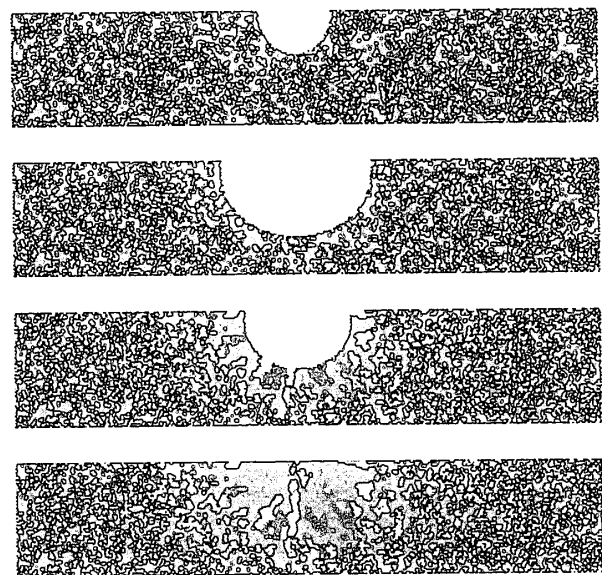


Fig.3 The temporal evolution of calculated weld microstructure

参考文献

- 1) T. Kasuya and N. Yurioka: Welding Research Supplement, (1993 Mar.)108s-115s.
- 2) T. Koseki et. al.: Metall. Mater. Trans. A, 25A(1994)1309
- 3) P. Zhu and R.W. Smith: Acta metall. mater., 40(1992)3369-3379.
- 4) M. Rappaz et. al.: Metall. Trans. A, 27A(1996)695-705.