

# Phase Field 法による繊維間のデンドライト成長シミュレーション

## Phase Field Simulation of Dendritic Growth Between Fibers

正 高木 知弘 (神戸商船大)      学 山本 裕介 (神戸大院)  
正 富田 佳宏 (神戸大工)      正 福岡 俊道 (神戸商船大)

Tomohiro TAKAKI, Kobe University of Mercantile Marine, 5-1-1, Fukaeminami, Higashinada-ku, Kobe  
Yoshihiro TOMITA, Kobe University, 1-1, Rokkodai, Nada-ku, Kobe  
Yusuke YAMAMOTO, Kobe University  
Toshimichi FUKUOKA, Kobe University of Mercantile Marine

**Key Words**: Phase Field Method, Dendritic Growth, Composites, FEM

### 1 緒言

繊維強化複合材料の機械的性質は、その形成過程に強く影響を受ける。そのため、母材凝固時の挙動を前もって把握しておくことは大変重要である。本研究では、繊維強化複合材料の形成過程を数値解析を用いて評価する研究の第一段階として、繊維間の過冷却純金属中におけるデンドライト成長シミュレーションを行い、デンドライト成長形態におよぼす繊維の影響を検討する。解析には、固液界面において連続的に変化する秩序パラメータを用いたフェーズフィールド法を採用する。

### 2 フェーズフィールド方程式<sup>(1)</sup>

フェーズフィールド法は相変化を連続的に取り扱うことを可能とする数値解析手法である。本研究で用いた純金属材料に対するフェーズフィールド方程式の導出過程を以下に示す。

系の全自由エネルギー $F$ として、次式で示す Ginzburg-Landau 型の自由エネルギー汎関数を採用する。

$$F[\phi, T] = \int_V \left\{ \frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla\phi|^2 + f(\phi, T) \right\} dV \quad (1)$$

ここで、 $\phi$ は液相 ( $\phi=0$ ) と固相 ( $\phi=1$ ) を界面領域において連続的に結ぶ秩序変数であり、フェーズフィールドと呼ばれる。 $\varepsilon$ は界面エネルギー $\sigma$ と界面厚さ $\delta$ に関係する微小な正のパラメータである。また、 $f(\phi, T)$ は自由エネルギー密度であり次式のように仮定する。

$$f(\phi, T) = f_S(T)h(\phi) + f_L(T)(1-h(\phi)) + Wg(\phi) \quad (2)$$

$f_S(T)$ : 固相の自由エネルギー密度

$f_L(T)$ : 液相の自由エネルギー密度

$Wg(\phi)$ : 界面の過剰自由エネルギー

$h(\phi)$ : エネルギー密度分布  $h(\phi) = \phi^3(10 - 15\phi + 6\phi^2)$

$g(\phi)$ : 2重井戸型関数  $g(\phi) = \phi^2(1-\phi)^2$

「系は常に系のエネルギーを最も早く減らす方向に進み、その速度はエネルギー勾配に比例する」という仮定を設定すると、

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = -M \frac{\delta F}{\delta\phi} \quad (3)$$

となり、

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = M \left( \varepsilon^2 \nabla^2 \phi - \frac{\partial f}{\partial\phi} \right) \quad (4)$$

が求めるフェーズフィールド方程式となる。

上記式中のフェーズフィールドパラメータ、 $\varepsilon$ 、 $W$ 、 $M$ は界面エネルギー $\sigma$ 、界面厚さ $\delta$ 、カイネティック係数 $\mu$ と関係付けられ、それぞれ次式で与えられる。

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{3\delta\sigma}{b}}, \quad W = \frac{6\sigma b}{\delta}, \quad M = \frac{4T_M \mu b}{15\delta L} \quad (5)$$

ここで、 $T_M$ は融点、 $L$ は潜熱である。また、 $b = 2 \tanh^{-1}(1-2\lambda)$ であり、例えば界面領域を  $0.1 < \phi < 0.9$  とする場合  $\lambda = 0.1$ 、 $0.05 < \phi < 0.95$  とする場合  $\lambda = 0.05$  となる。

以上より、 $\varepsilon$ に異方性を考慮した2次元フェーズフィールド方程式と、潜熱発生項を考慮した熱伝導方程式は次式となる。

$$\frac{1}{M} \frac{\partial\phi}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left( \varepsilon \frac{\partial\varepsilon}{\partial\theta} \frac{\partial\phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \varepsilon \frac{\partial\varepsilon}{\partial\theta} \frac{\partial\phi}{\partial x} \right) + \nabla \cdot (\varepsilon^2 \nabla\phi) + 4W\phi(1-\phi) \left( \phi - \frac{1}{2} + \beta + a\chi \right) \quad (6)$$

$$\beta = -\frac{15L(T-T_M)}{2WT_M} \phi(1-\phi)$$

$$\varepsilon(\theta) = \bar{\varepsilon} \{1 + \gamma \cos k\theta\}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T + \frac{L}{c} h'(\phi) \frac{\partial\phi}{\partial t} \quad (7)$$

式中の変数は以下の通りである。 $\theta$ : 界面法線方向と  $x$  軸の角度。 $\kappa$ : 熱拡散係数。 $c$ : 単位体積当たりの比熱。 $a$ : ノイズの振幅。 $\chi$ : [-0.5, 0.5]の乱数。 $\gamma$ : 異方性強度。 $k$ : 異方性モード。

### 3 数値解析手法

式(6)と(7)を解析するために、空間は4節点アイソパラメトリック要素を使用した有限要素法、時間はクランク・ニコルソンの中央差分法を用いて離散化を行う。連立一次方程式の解法は、フェーズフィールド方程式に対してはマトリックスが非対称となるため前処理付き双共役勾配法、熱伝導方程式に対しては前処理付き共役勾配法をそれぞれ適用している。また、規則メッシュを使用しているためいずれも Element by Element 法を採用する。

繊維が等間隔で配列した条件を仮定し、図1に示すような解析領域を使用する。フェーズフィールド方程式は金属部のみ、熱伝導方程式は全領域において解かれる。フェーズフィールド $\phi$ は界面領域以外では0または1となるため、 $0.00001 < \phi < 0.99999$ の領域を解析領域とし、計算時間の短縮を図っている<sup>(2)</sup>。このため、特に解析初期においては計算時間に占める温度場解析の割合が非常に大きくなる。さらに、同じサイズの要素を使用する場合、フェーズフィールド方程式よりも熱伝導方程式の方が小さな時間増分 $\Delta t$ を必要とする。以上の理由より、温度場に使用する要素サイズ $dX$ をフェーズフィールドの要素サイズ $dx$ よりも大きくし、解析を効率良く行っている。本解析では、 $dX = 3dx$ とする。図2は、各解析領域のメッシュ分割を模式的に示している。

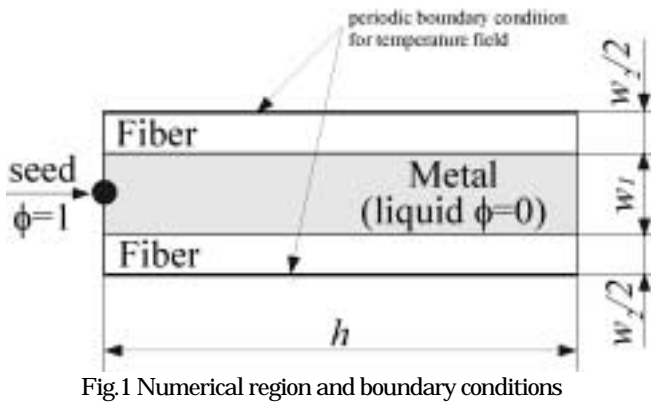


Fig.1 Numerical region and boundary conditions

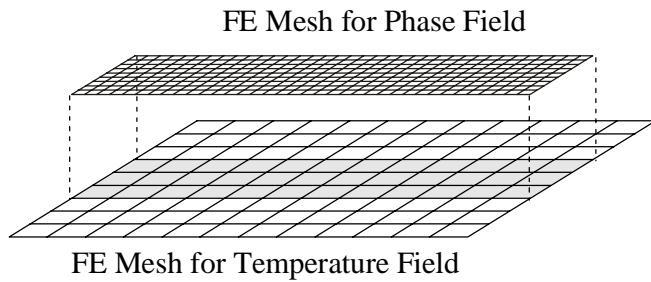


Fig.2 Finite element mesh

#### 4 境界条件と解析条件

図1に境界条件を示している。繊維対称面において温度の周期境界を設定し、繊維長手方向の境界に断熱条件を与えている。またフェーズフィールドに関しては境界において  $d\phi/dn = 0$  とする。

母材に対応する金属は純ニッケルとしている。解析で使用した物性および上記式中の変数値を以下に示す<sup>(3)</sup>。  $\sigma = 0.37 \text{ J/m}^2$ ,  $\mu = 2.0 \text{ m/Ks}$ ,  $T_M = 1728 \text{ K}$ ,  $L = 2.35 \times 10^9 \text{ J/m}^3$ ,  $\kappa = 1.55 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ ,  $c = 5.42 \times 10^6 \text{ J/Km}^3$ ,  $\gamma = 0.015$ ,  $k = 4$ ,  $a = 0.025$ ,  $\lambda = 0.1$ 。また、メッシュサイズを  $dx = 0.02 \mu\text{m}$  ( $dX = 0.06 \mu\text{m}$ ) とし、界面厚さは  $\delta = 4dx = 0.08 \mu\text{m}$  とする。時間増分  $\Delta t$  は  $0.0001 \mu\text{sec}$  としている。

初期温度は全領域において  $T_i = 1511.2 \text{ K}$  としている。これは、無次元化過冷度  $(T_M - T_i)/(L/c) = 0.5$  に対応する。フェーズフィールドは解析開始時全て液体つまり  $\phi = 0$  とし、seed として図1に示す左端中心の1つの節点を  $\phi = 1$  としている。

#### 5 解析結果

繊維間におけるデンドライト成長形態を評価するために、図1に示す繊維間隔  $w_1$  と繊維の熱拡散係数  $\kappa_2$  を種々変化させて、一連のシミュレーションを行う。ここでは繊維幅  $w_2 = 5.04 \mu\text{m}$ ,  $h = 40.08 \mu\text{m}$  一定としている。

図3は  $\kappa_2/\kappa_1 = 0.1$  のときのデンドライト成長形態におよぼす繊維間隔  $w_1$  の影響を示している。ここで  $\kappa_1$  は金属部ニッケルの熱拡散係数である。図3(a)  $w_1 = 10.2 \mu\text{m}$  の場合、バルク中のデンドライト成長とあまり違いは見られないが、2次アームが繊維壁に衝突するとその部分の幅が大きくなる傾向が観察される。図3(b)  $w_1 = 5.04 \mu\text{m}$  の場合、繊維と1次アームとの距離が小さいため、図3(a)と比べて2次アームの成長速度が遅くなっていることがわかる。バルク中における1次アームの幅は約  $2.5 \mu\text{m}$  であり、図3(a)(b)でもほぼ同じ大きさを示した。図3(c)  $w_1 = 2.52 \mu\text{m}$  はバルク中の1次アーム幅とほぼ同じ繊維間隔であり、この場合2次アームの形成は確認されていない。しかしながら、1次アーム先端の成長速度は図3(a)(b)(c)いずれもバルク中の成長速度とほぼ同じ約  $23 \text{ m/sec}$  となっている。

図4は  $\kappa_2/\kappa_1$  を変化させたときのデンドライト成長形態の違いを示している。ここで、繊維間隔  $w_1$  は  $5.04 \mu\text{m}$  一定としている。図4(a)  $\kappa_2/\kappa_1 = 0.01$  の場合、繊維の熱拡散係数が小さいため界面で発生した潜熱が拡散しにくく、2次アームの成長速度が遅くなっていることがわかる。図4(c)  $\kappa_2/\kappa_1 = 1.00$  の場合、初期状態のseedから生じた固相は解析領域左端を繊維に向かって成長し、繊維に衝突すると繊維の長手方向に中央部のデンドライトよりも早い速度で成長した。これは、繊維に接して成長するデンドライト先端における潜熱が、熱拡散係数の高い繊維中に拡散され易いためであると考えられる。

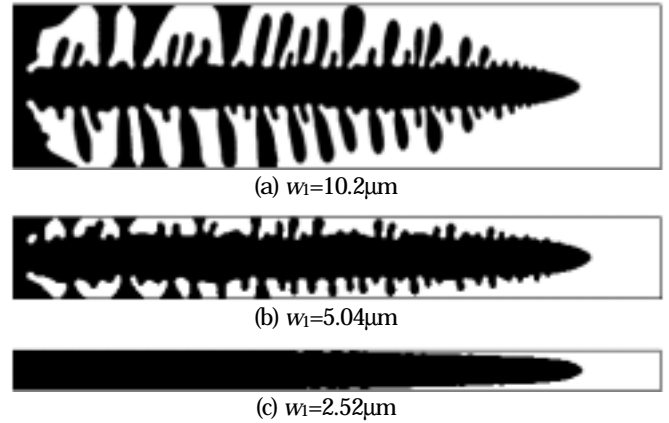


Fig.3 Effects of the width between fibers on the dendritic growth patterns at  $t=1.5 \mu\text{sec}$ , in which  $\kappa_2/\kappa_1=0.1$ . The black areas represent  $\phi > 0.5$  which corresponds to the solid.

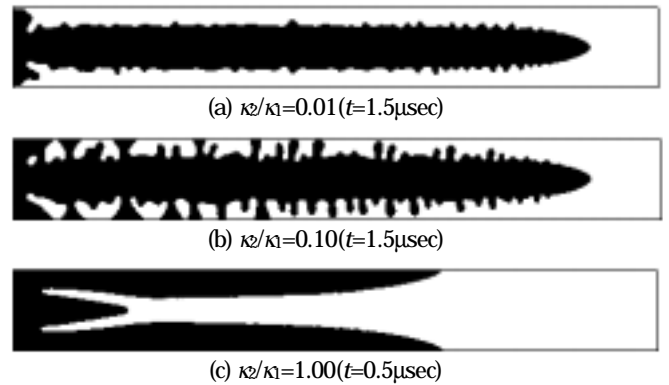


Fig.4 Effects of the thermal diffusivity of the fibers on the dendritic growth patterns, in which  $w_1=5.04 \mu\text{m}$ .

#### 6 結言

繊維間の過冷却純金属中におけるデンドライト成長をフェーズフィールド法を用いて解析し、デンドライト成長形態におよぼす繊維間隔と繊維の熱拡散係数の影響を検討した。

#### 参考文献

- (1) Boettinger, J. W. and Warren, J. A., 1996, "The Phase-Field Method: Simulation of Alloy Dendritic Solidification during Recalescence," *Metall. Trans. A*, Vol.27, pp.657-669.
- (2) Kim, S. G., Kim, W. T, Lee, J. S., Ode, M., and Suzuki, T., 1999, "Large Scale Simulation of Dendritic Growth in Pure Undercooled Melt by Phase-field Model," *ISIJ International*, Vol.39, No.4, pp.335-340.
- (3) Murray, B. T., Wheeler, A. A., and Glicksman, M. E., 1995, "Simulations of experimentally observed dendritic growth behavior using a phase-field model," *J. Cryst. Growth*, 154, pp.386-400.