

アダプティブフェーズフィールド法による多結晶体への凝固シミュレーション

Adaptive Phase-Field Simulation during Solidification to Polycrystalline Materials

○ 学 徳田 秀一 (神戸大・院) 正 高木 知弘 (神戸大・海科)
 正 富田 佳宏 (神戸大・工)

Shuichi TOKUDA, Kobe Univ., Grad. Sch. Sci. & Tech., Nada, Kobe, 657-8501
 Tomohiro TAKAKI, Kobe Univ., Fac. Maritime Sci., Higashinada, Kobe, 658-0022
 Yoshihiro TOMITA, Kobe Univ., Dept. Mech. Eng., Fac. Eng., Nada, Kobe, 657-8501

Key Words : Adaptive Phase Field Method, Solidification, Polycrystal, Grain Boundary, Free Energy, Crystal Orientation, Finite Element Method

1 緒言

現在一般に使用されている金属材料は多結晶組織を有しており, それらは方位の異なる単結晶が結晶粒界によって結合したものである. このような構造は, 過冷された液体中で核生成を起し複数個の結晶が同時に凝固成長することで形成される. 本研究で対象とする多結晶金属の凝固は, 固液界面と結晶粒界の2種類の異なる不連続界面を同時に扱う必要がある. このような問題を従来の界面モデルを用いて解析すると, 界面の位置, 形状, 移動速度といった境界条件を決定する必要があり, その解析は極めて困難である.

そこで, 本研究では Phase Field 法^{(1)~(3)}を用いたシミュレーションを行う. 空間の各点における相の状態を表すオーダーパラメータを定義し, これを連続的に分布させることにより界面における境界条件を直接取り扱うことなしに数値シミュレーションが可能となる. さらにアダプティブ法⁽⁴⁾を導入することにより大規模解析を可能とし, 各種パラメータが dendrite の結晶成長過程や結晶粒界の形状に及ぼす影響, 結晶粒の回転メカニズムを明らかにする.

2 支配方程式

本研究では, 固相領域と液相領域を区別する秩序パラメータ ϕ と, 結晶粒の方位を表す秩序パラメータ θ を Fig.1 に示すように定義する. Fig.1(a) は固液界面を表し, ϕ は界面で固相 ($\phi=1$) と液相 ($\phi=0$) を滑らかに結ぶよう分布させる. また Fig.1(b) は固相間界面である結晶粒界を表し, ϕ は $0.0 < \phi < 1.0$ の値をとって分布し, θ は結晶粒界を横断して異なる値を有する結晶方位を滑らかに分布させる⁽³⁾⁽⁵⁾. なお, 液相中における結晶方位 θ は物理的な影響を及ぼさない⁽³⁾.

これらの変数を用いて以下に示すような Ginzburg-Landau 型の自由エネルギー汎関数 F が提案されている⁽³⁾.

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

α, s および ε は正の定数である.

ここで式 (1) の右辺第一項は自由エネルギー密度を

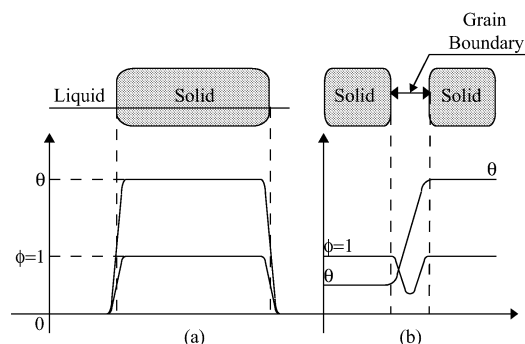


Fig. 1 Description of One-dimensional Interface and Grain Boundary by ϕ and θ

表し, 固相と液相の自由エネルギー密度のそれぞれにその分率を乗じたものと界面の過剰自由エネルギーの和で表され式 (2) のように定義される.

$$f(\phi, T) = -4W \int_0^\phi p(1-p) \left(p - \frac{1}{2} - m(T) + a\chi \right) \quad (2)$$

ここで W はフェーズフィールドパラメータと関連付けられる正の定数⁽⁶⁾で, 界面の過剰エネルギーの大きさを示し, a はノイズの振幅, χ は $[-0.5, 0.5]$ の乱数で dendrite の形成に必要なノイズの項である. $m(T)$ は熱力学的駆動力を表し, 式 (3) で定義される.

$$m(T) = \frac{15L(T - T_M)}{2WT_M} \quad (3)$$

式 (3) における T_M は融点, L は潜熱である. 次に式 (1) の右辺第 2 項, 第 3 項はそれぞれ固液界面の存在, 隣接する結晶粒間の方位差によって生じる付加的エネルギーを示している. また第 4 項は θ をより滑らかに表現し, $|\nabla\theta|$ に関する高次の項を加えることによって曲率の影響を表現する項である⁽⁷⁾.

ここで, 結晶成長における異方性は界面カイネティクス係数と界面エネルギー密度の異方性により表現される. 本研究では界面エネルギーにのみ異方性を考慮する. これは式 (1) の α に方向依存性を持たせることによって実現できる. 界面に立てた法線ベクトルと横軸のなす角度を θ とすると α は式 (4) のように定義される.

$$\alpha(\theta) = \bar{\alpha}[1 + \gamma\kappa(\theta - \psi)] \quad (4)$$

γ は界面異方性強度, κ は異方性モード, ψ は結晶の優先成長方向と横軸の角度を表している. 系の状態は,

式 (1) に示す自由エネルギー汎関数の減少率が最大になる経路をたどって変化するという仮定に基づく、秩序パラメーター ϕ , および θ に関する発展方程式は下記ようになる。

$$\begin{aligned} \tau_\phi \frac{\partial \phi}{\partial t} &= -\frac{\delta F}{\delta \phi} \\ &= -\frac{\partial}{\partial x} \left(\alpha \frac{\partial \alpha}{\partial \theta} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\alpha \frac{\partial \alpha}{\partial \theta} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \\ &\quad + \nabla \cdot (\varepsilon \nabla \phi) \\ &\quad + 4W\phi(1-\phi) \left(\phi - \frac{1}{2} - m(T) + \alpha\chi \right) \quad (5) \\ \tau_\theta \phi^2 \frac{\partial \theta}{\partial t} &= -\frac{\delta F}{\delta \theta} \\ &= \nabla \cdot \left[\phi^2 \left(\frac{s}{|\nabla \theta|} + \varepsilon^2 \right) \nabla \theta \right] \quad (6) \end{aligned}$$

これらに加えて、下記の潜熱を考慮した熱伝導方程式を連成させて解析を行う。

$$c \frac{\partial T}{\partial t} = k \nabla^2 T + 30L\phi^2(1-\phi)^2 \frac{\partial \phi}{\partial t} + b(T_0 - T) \quad (7)$$

式 (7) 中の c は比熱, k は熱伝導率を表し, 右辺第 2 項は界面のみで潜熱を発生させるための項であり, 第 3 項は潜熱による領域内の温度上昇を人工的に抑える項であり, T_0 は熱を奪う際の基準温度である。またデンドライトの成長が解析領域の影響を受け始めるまで $b=0$ で, その後 b に値を持たせている。

3 アダプティブ法

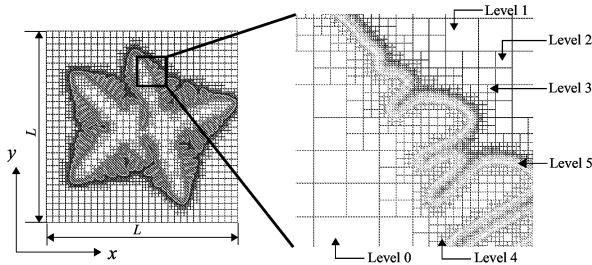


Fig. 2 Adaptive Model

解析領域は Fig.2 に示す $L \times L$ ($L = 19.2\mu\text{m}$) の領域を対象としている。4 節点アイソパラメトリック要素の正方形メッシュを用いて解析領域を分割した。ここで、大規模解析を行うためにメッシュ細分化と粗大化を自動で行うアダプティブ法を導入し, Fig.2 で示すように Level 0(最大) から Level 5(最小) の 6 段階の要素を使用した。Level 5 における一辺の要素サイズは $0.02\mu\text{m}$ である。要素内の秩序パラメーター ϕ の平均値が 0.001 から 0.9 の範囲でメッシュを細分化し, それ以外の場合粗大化する。これにより, レギュラーメッシュに比べて解析速度の飛躍的向上が見られた。

4 解析条件

本研究では, 初期核の位置を任意で選択した。このとき, 初期状態で ϕ が固液界面で不連続になるのを避けるために次式により滑らかに接続している。

$$\phi(r) = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh \left(\frac{\sqrt{2W}}{2\alpha} (r - r_0) \right) \right] \quad (8)$$

ここで, r は核の中心からの距離を示し, r_0 は初期核半径で $r_0 = 5 \times dx$ で定義する。結晶方位は各結晶毎にランダムに与え, 計算の安定性を考慮するために初期条件で ϕ に比べ広い範囲で定義する必要があるため $r_0 = 20 \times dx$ の範囲で θ を与えている。また, 境界条件は断熱条件のみを考慮している。これらの条件で過冷却状態の液体の凝固解析を行い, デンドライトの結晶成長過程を解析し, ついで結晶粒の回転の解析を行う。Phase Field シミュレーションの際には, 空間に対しては有限要素法を時間に対してはクラックニコルソンの中央差分を適用し, 連立 1 次方程式の解法としては, 共役勾配法を用いた。

5 解析結果

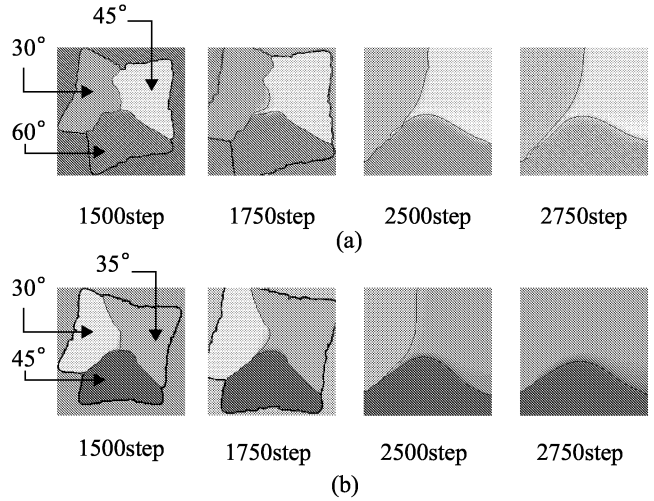


Fig. 3 Distribution of Grain Boundary and Crystal Orientation

Fig.3 は各結晶粒の結晶方位を変化させた場合の Phase Field シミュレーション結果を示す。図中の黒線は固液界面または結晶粒界を示している。時間の経過とともに結晶粒界が移動していることがわかる。また, Fig.3(a) では 2750step の時点で結晶粒は回転していないのに対し, Fig.3(b) では 2750step の時点で初期方位 30° の結晶粒が回転し 35° になり結晶粒界が消滅し大きな組織になっている。このように, 結晶方位差が小さいほど早く回転し, さらに結晶方位差が大きい場合結晶粒界の形状は複雑になっていることもわかる。これらの結果の詳細については講演当日に発表する。

6 参考文献

- 1) Caginalp, G., *Arch.Rat.Mech.Anal.*, **92**, (1986), 205
- 2) Kobayashi, R., *Physica D*, **63**, (1993) 410
- 3) Kobayashi, R., Warren, J. A., and Carter W. C., *Acta Materialia*, **51**, (2003), 6035-6058
- 4) Takaki, T., Fukuoka, T., and Tomita, Y., *WCCM VI*, (2004), CD-ROM(No.2).
- 5) Kobayashi, R., Warren, J. A., and Carter W. C., *Physica. D*, **140**, (2000), 141
- 6) Wheeler, A.A., Boettinger, W.J., Mcfadden, G.B., *Phys.Rev.A*, **45**, (1992) 7424-7439
- 7) Kobayashi, R., Warren, J. A., and Carter W. C., *GAKUTO International Series "Mathematical Science and Applications"*, **14**, (2000), 283