

フェーズフィールド凝固シミュレーションへの アダプティブ有限要素法の適用

Phase-Field Simulation of Solidification using Adaptive Finite Element Method

高木 知弘 (神戸大・海科) 富田 佳宏 (神戸大・工)

Tomohiro TAKAKI, Kobe University
Yoshihiro TOMITA, Kobe University
FAX: 078-431-6286 E-mail: takaki@maritime.kobe-u.ac.jp

Phase-field method is successfully applied to the study of the solidification. Since the method must allow the continuous of the phase-field inside the narrow solid-liquid interface, very fine meshes are needed. In this study, the adaptive finite element method is introduced in order to conduct the phase-field simulation efficiently. The degree of freedom of the hanging node, which occurs on the side of an element, is eliminated by conducting the matrix operation.

1. 緒言

凝固過程におけるデンドライト形成など、形態発展問題のシミュレーション手法としてフェーズフィールド法が注目されている。フェーズフィールド法は界面位置を明確に決める必要が無く、比較的容易に界面発展を記述することができる。一方で、非常に狭い界面領域内でフェーズフィールドの急峻な分布を許容する必要があるため、非常に小さな計算格子を必要とする。本研究では、アダプティブ有限要素法をフェーズフィールド法に適用することにより、凝固シミュレーションの効率化を図ることを目的としている。

2. アダプティブ有限要素法

Warren ら¹⁾によって提案された二元合金の凝固問題に対するフェーズフィールドモデルを採用する(詳細は文献[1,2]を参照)。

空間は有限要素法、時間はクランク・ニコルソンの中央差分法を用いることで離散化を行うと、時間 $t + dt$ におけるフェーズフィールド ϕ^{t+dt} は次の連立一次方程式を解くことにより得ることができる²⁾。

$$\left(\frac{1}{dt} [K_\phi^1] + \frac{1}{2} [K_\phi^2] \right) \{ \phi^{t+dt} \} = \left(\frac{1}{dt} [K_\phi^1] - \frac{1}{2} [K_\phi^2] \right) \{ \phi^t \} + \{ f_\phi \} \quad (1)$$

ここで、マトリクス $[K_\phi^1]$ と $[K_\phi^2]$ は、それぞれ熱伝導方程式でいう熱伝導・熱容量マトリクスに対応する。

要素の細分化および粗大化は図1のように、1つの親要素を4つの子要素へ、4つの子要素を1つの親要素へ変化させることにより行う。ある要素とその要素に隣接する要素のサイズレベルが異なると、図1の節点10のように要素辺上に中間節点(hanging node)が生じる。4節点アイソパラメトリック要素を用いているため、節点

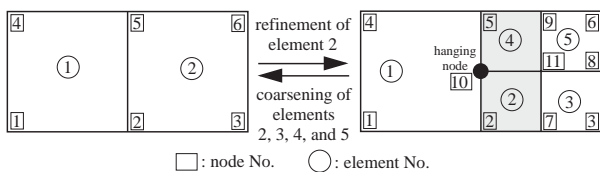


Fig. 1 Element refinement and coarsening

10においては、 $\phi_{10} = 0.5(\phi_2 + \phi_5)$ を満たす必要がある。ここでは、この条件式を隣合う要素のサイズの小さい要素に対する式(1)に代入することにより、中間節点の自由度を消去する。例えば、図1右の要素2の式(1)を、

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_2^{t+dt} \\ \phi_7^{t+dt} \\ \phi_{11}^{t+dt} \\ \phi_{10}^{t+dt} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & b_{14} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & b_{24} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} & b_{34} \\ b_{41} & b_{42} & b_{43} & b_{44} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_2^t \\ \phi_7^t \\ \phi_{11}^t \\ \phi_{10}^t \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} f_2 \\ f_7 \\ f_{11} \\ f_{10} \end{Bmatrix} \quad (2)$$

とし、 $\phi_{10} = 0.5(\phi_2 + \phi_5)$ を代入すると、

$$\begin{bmatrix} (a_{11} + a_{14})/2 & a_{12} & a_{13} & a_{14}/2 \\ (a_{21} + a_{24})/2 & a_{22} & a_{23} & a_{24}/2 \\ (a_{31} + a_{34})/2 & a_{32} & a_{33} & a_{34}/2 \\ (a_{41} + a_{44})/2 & a_{42} & a_{43} & a_{44}/2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_2^{t+dt} \\ \phi_7^{t+dt} \\ \phi_{11}^{t+dt} \\ \phi_5^{t+dt} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} (b_{11} + b_{14})/2 & b_{12} & b_{13} & b_{14}/2 \\ (b_{21} + b_{24})/2 & b_{22} & b_{23} & b_{24}/2 \\ (b_{31} + b_{34})/2 & b_{32} & b_{33} & b_{34}/2 \\ (b_{41} + b_{44})/2 & b_{42} & b_{43} & b_{44}/2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_2^t \\ \phi_7^t \\ \phi_{11}^t \\ \phi_5^t \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} f_2 \\ f_7 \\ f_{11} \\ f_{10} \end{Bmatrix} \quad (3)$$

を得ることができる。同様の作業を要素4に対しても行うことで、中間節点10の自由度を消去することができる。連立一次方程式の解法としては、EBE双共役勾配法を採用している。

凝固問題では移動する界面を追従するために、要素のアダプティブ作業をダイナミックに行う必要がある。ここでは、四分木データ構造を採用することにより、効率的な要素の細分化および粗大化作業を行う³⁾。

3. シミュレーション結果

図2は文献[1]と同様の等温過飽和凝固デンドライト生成過程をシミュレーションの対象として得られた結果を示す¹⁾。解析領域左下に配置した結晶核から凝固が開始し、右方向と上方向へデンドライトが成長している。ここで、界面異方性として4回対称性を用いているため1/4領域を解析対象としている。使用したアダプティブ要素のレベル数は8(レベル0-7)としている。解析領域は $128 \times 128 \mu\text{m}$ 、最小要素(レベル7)の1辺 $dx^7 = dy^7 = 0.05 \mu\text{m}$ 、最大要素(レベル0)の1辺 $dx^0 = dy^0 = 2^7 dx = 6.4 \mu\text{m}$ であり、全領域を最小要素のみで分割した場合、全要素数は6,553,600となる。要素

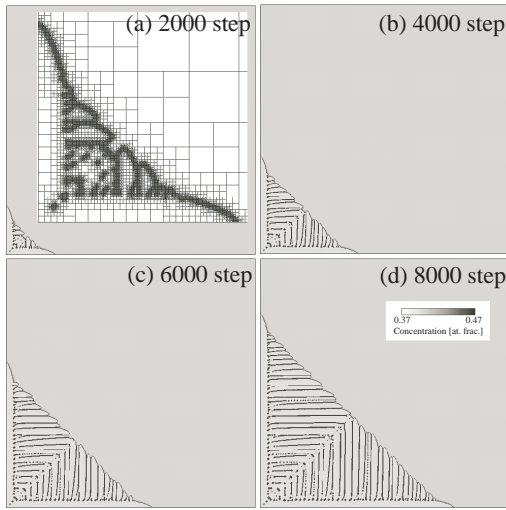


Fig. 2 Time evolution for isothermal solidification simulation ($T = 1577.4\text{K}$ const., $\Delta = 0.85$, $c_0 = 0.4$ at. frac.)

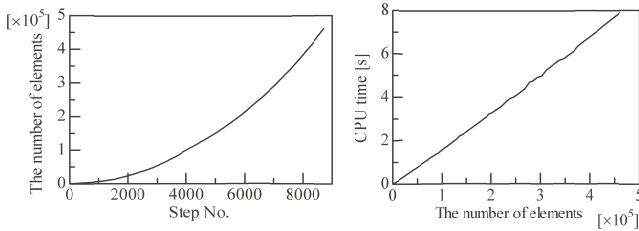


Fig. 3 Variations of the number of elements and CPU time versus the number of elements

の細分化は、要素内のフェーズフィールドの平均値 ϕ_{ave} が ($0.001 < \phi_{ave} < 0.9$) の場合に行い、それ以外の領域では粗大化を行っている。図 2(a) 中には 2000 ステップ時の要素分割図も示している。界面領域にレベル 7 の要素が配置されていることが分かる。図 3 は図 2 のシミュレーション過程における要素数変化、および CPU 時間 (Pentium 4, 3GHz, 1CPU) - 要素数関係を示している。シミュレーションが進むとデンドライトが成長し、界面の面積が増加するため、要素数は 2 次曲線的に増加している。また、CPU 時間と要素数はほぼ線形関係を示しており、各ステップにおける要素アダプティブ作業が非常に効率的に行われていることを示している。

図 4 は一方向凝固シミュレーションの結果を示している (詳細は文献 [3] 参照)。初期平滑界面を左から $1.6 \mu\text{m}$ の位置に配置し、それよりも左側を固相、右側を液相としている。要素の細分化は、($0.001 < \phi_{ave} < 0.9$) または ($|\nabla c_{ave}| \geq 0.01$ and $\phi < 0.001$) の場合に行い、それ以外の領域では粗大化を行っている。シミュレーションが進むと平滑界面が乱れセル形態が発生し、セルまたはデンドライトの競争的な成長を経て、周期構造を有する定常成長状態に達することが分かる。図 4(e) にはデンドライトチップ先端近傍の要素分割を示している。界面領域および濃度勾配の大きい領域にそれぞれレベル 7 と 6 の要素が配置されていることがわかる。図 5 は要素数とチップ先端の速度変化を示している。平滑界面状態では

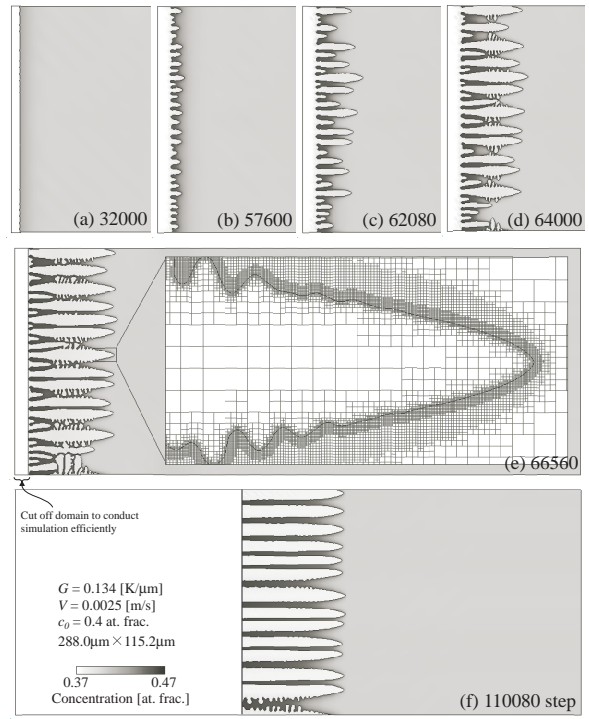


Fig. 4 Time evolution for directional solidification simulation

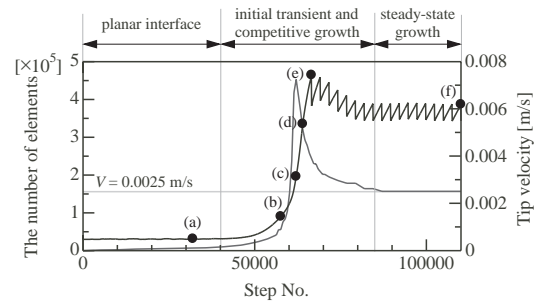


Fig. 5 Variations of the number of elements and tip velocity

要素数は非常に少ないが、界面が乱れると要素数とチップ速度が急激に増加していることが分かる。また一方向凝固シミュレーションをより効率的に行うため、64000 ステップから 2650 ステップ毎に解析領域の左端を解析対象から外している。このため、要素数がステップ状に変化している。また、チップ先端速度は定常時に引張り速度 V となっている。

参考文献

- 1) J. A. Warren, Boettinger, W. J., *Acta Metall. Mater.*, **43-2**, pp.689 - 703, 1995.
- 2) 高木知弘, 福岡俊道, 富田佳宏: 日本機械学会論文集 A 編, **70**, 128-135, 2004.
- 3) T. Takaki, T. Fukuoka, Y. Tomita Proceedings CD-ROM of the Sixth World Congress on Computational Mechanics, 310, 2004.