

純物質の凝固解析の基礎と有限差分法による数値計算法

島岡 三義

Fundamentals of Analysis of Solidification of Pure Materials
and Numerical Calculation Technique by Finite Difference Method

Mitsuyoshi SHIMAOKA

Mechanical, electro-magnetic and chemical properties of metal materials change remarkably with the composition of material and/or with the solidification structure. It is necessary to develop a controlling technique of the solidification structure in order to obtain the useful function of the material. In this paper, to gain a correct understanding of fundamental theory of solidification phenomenon, analytical solutions of Stefan, Neumann and Schwarz models for macroscopic solidification of pure materials have been explained. Numerical technique with finite difference method for these solidification problems has been also explained.

1 はじめに

金属材料の機械的、電磁氣的、化学的性質などが材料組成のみならず、凝固組織によっても大きく変化する。特に、結晶化せずに固化したアモルファス合金の性質が結晶質合金に比べて優れていることが明らかにされている⁽¹⁾。また、近年は地球環境の保護の観点から、有害な金属を使用しない材料の開発が進められており、それとともに凝固組織を制御して必要な機能を得ようとする研究も進められている。従来、合金の凝固過程の計算機シミュレーションは、鑄造プロセスにおける鑄型内の湯流れ解析、引け巣や偏析などの鑄造欠陥の予測などが中心であり^{(2), (3)}、どちらかと言えばマクロな凝固解析であり、純金属や合金の結晶の成長過程そのものをシミュレートしているわけではなかった。一方、計算機の性能が格段に向上し、複雑な計算もパーソナルコンピュータである程度実行できるようになってきている。このような背景から、方法論としては古くから存在していたフェーズフィールド法による、純金属の他、2元あるいは3元合金、共晶・包晶・偏晶反応型合金などの結晶成長過程の計算機シミュレーションが1990年代以降急速に増えてきている⁽⁴⁾⁻⁽⁷⁾。

本報告では、古典的でマクロな熱伝導モデルによる、単純な凝固現象の数学的な取扱いの基礎を明確にし、有限差分法による数値計算の要点を解説する。

2 実際の合金の凝固とマクロな凝固解析法

2.1 合金の凝固形態と実際の組織

図1に直径約3mmのNi-6.7Al-0.3Be mass%合金棒の引張破断部の軸断面SEM(Scanning Electron Microscope)

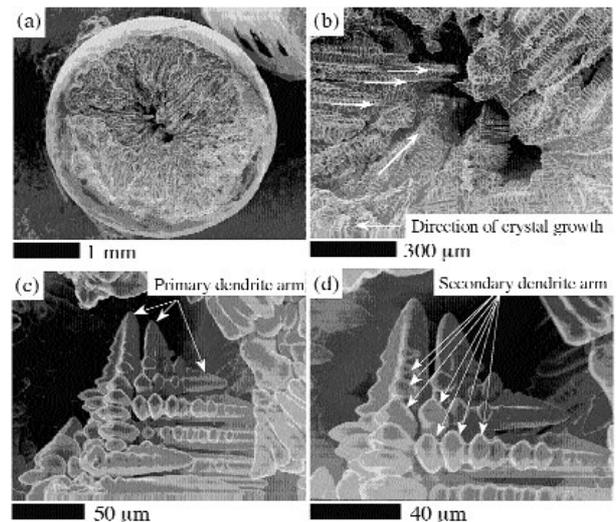


Fig.1 SEM views of tensile fracture surface of a Ni-Al-Be alloy rod and the dendritic crystals.

像を示す。この材料は図2に示すように、注射器で溶融Ni-Al-Be合金を吸い上げて棒状に凝固させたものであるが、吸上げ過程で外周部から冷却されるので、結

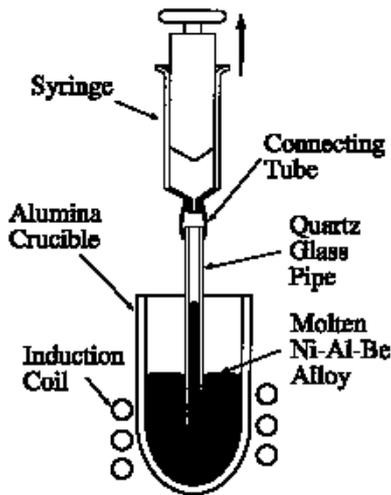


Fig.2 Production of a rod by suction casting.

晶が外周部から中心に向かっていくことがよくわかる(図1(a), (b))。また、中心部が空洞になっており、これは铸造欠陥品ということにもなる。結晶をさらに拡大してみると(図1(c), (d))、結晶の成長する方向に対して垂直に成長しているのが観察される。このような結晶の成長の仕方は樹木のようなことから「樹枝状晶(dendrite)」と呼ばれる。図1(c)の矢印で示したものを「幹」、すなわち、 dendrite 1次アームといい、図1(d)の矢印で示したものを「枝」、すなわち、 dendrite 2次アームという。 dendrite 2次アームの長さは「幹」の先端にいくにしたがって短くなる。このような結晶を模式的に示せば図3のようになる。 dendrite 2次アームの成長方向には指向性があり、十字状に成長していく。図1に示した合金の吸上げ過程では、吸上げ速度が速すぎて石英ガラス管上部の融液が凝固して、下部の dendrite のまわりが融液で十分満たされなかったために、棒材の中心部が空洞になったものと考えられる。また、図3の d_1 を dendrite 1次アーム間隔、 d_2 を dendrite

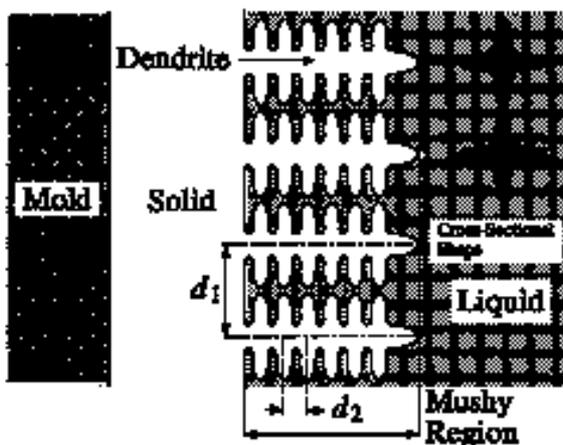


Fig.3 Illustration of dendritic solidification.

イト2次アーム間隔と言い、凝固速度(あるいは、融液からの抜熱速度)が速くなると、 d_1 、 d_2 が狭くなる、すなわち、より緻密な凝固組織を呈するようになる。純物質でも凝固途中では dendrite 形態が見られるが、すべて凝固してしまうと dendrite の境界が埋め尽くされてしまうので、 dendrite を見分けることができないだけである。

2.2 マクロな古典的凝固解析法

ここでは、純物質の凝固、かつまた、凝固界面が平滑で直交一次的に凝固界面が移動(固相が成長)する場合について解説する。このような仮定は、図3に示すマッシー領域の存在を考えないもので、凝固界面は dendrite の根元か先端のいずれかということになる。また、実用上は無意味な仮定のようなのであるが、モデルの構築次第で解析解が得られ、大雑把な凝固時間を見積もりたい場合などでは有効であり、以下の3つの凝固モデルについて説明することとする。なお、凝固による体積変化(水の場合は膨張し、金属の場合は凝固収縮する。)は考えないこととする。

(1) Stefan モデル

図4に最も基本的な Stefan モデルを示す。鑄型壁を境界として右方に無限に広がる半無限体空間に融解(凝固)温度、 T_f に保持された純物質が、ある時刻において鑄型壁の温度が凝固点以下の温度、 T_s に固定された場合の凝固界面の位置(固相厚さ)、 $s(t)$ と固相内の温度分布、 $T(x, t)$ を求めようとするものである。物質を液相のまま凝固温度以下に冷却することを「過冷」というが、過冷状態は不安定な状態なので、過冷融液に振動などを与えると一挙に固相が成長する。

対象とする物質の液相および固相の熱物性値はすべて定数とし(物性値は文献(10)、(11)によった)、熱伝導率を λ 、密度を ρ 、定圧比熱を C_p 、熱拡散率を a で表

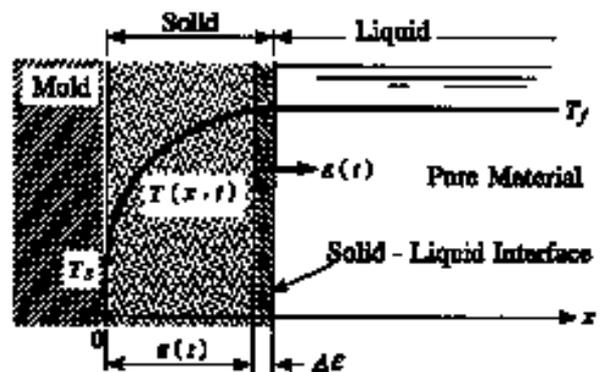


Fig.4 Stefan model for the growth of solid phase of pure material.

し、下付添字 l と s で液相および固相を識別することとする。また、物質の凝固潜熱を L とする。温度分布を有するのは固相内だけであり、固相内の非定常熱伝導方程式は次式で表される。

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = a_s \cdot \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} \quad (0 \leq x \leq \varepsilon(t)) \quad \dots(1)$$

$$\text{初期条件 } t = 0 \quad \text{で} \quad \varepsilon(0) = 0 \quad \dots(2)$$

$$\text{境界条件 } x = 0 \quad \text{で} \quad T(0, t) = T_s \quad \dots(3)$$

$$x = \varepsilon(t) \quad \text{で} \quad T(\varepsilon(t), t) = T_f \quad \dots(4)$$

また $x = \varepsilon(t)$ で

$$\rho_s \cdot L \cdot \frac{\Delta \varepsilon}{\Delta t} = \rho_s \cdot L \cdot \frac{d\varepsilon(t)}{dt} = \lambda_s \cdot \left. \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right|_{x=\varepsilon(t)} \quad (5)$$

式(5)は Δt 時間に固相が $\Delta \varepsilon$ だけ成長したとするときのエネルギー保存則であり、単位時間あたり、

$$\rho_s \cdot L \cdot \frac{\Delta \varepsilon}{\Delta t} = \rho_s \cdot L \cdot \frac{d\varepsilon(t)}{dt}$$

の凝固潜熱が発生し、その熱量は熱伝導によって固相側に伝達される（固相内の温度分布が左下がりであるから）ことを意味する。導出過程は省略するが、式(1)の解は、

$$T(x, t) = T_s + (T_f - T_s) \cdot \frac{\text{erf}(x/2\sqrt{a_s \cdot t})}{\text{erf}(\varepsilon(t)/2\sqrt{a_s \cdot t})}$$

で与えられる^{(8), (9)}。ここで、

$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_0^x \exp(-\eta^2) \cdot d\eta$$

は、Gauss の誤差関数である。

$$\phi = \frac{\varepsilon(t)}{2\sqrt{a_s \cdot t}}$$

とにおいて、式(5)の関係から、最終的に次式が得られる。

$$\phi \cdot \exp(\phi^2) \cdot \text{erf}(\phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot Sf$$

ここで、 Sf は、

$$Sf = \frac{Cp_s \cdot (T_f - T_s)}{L}$$

で定義される Stefan 数と呼ばれる無次元数で、凝固プロセスでは重要なパラメータである。式(9)を ϕ について解き（Newton - Raphson 法で容易に数値解を得ることができる）、その結果を式(8)に代入することで、固相厚さ $\varepsilon(t)$ を次式から求めることができる。

$$\varepsilon(t) = 2\phi \sqrt{a_s \cdot t} = \beta \cdot \sqrt{t} \quad \dots(11)$$

$$\beta = 2\phi \cdot \sqrt{a_s}$$

ここで、 β を凝固定数といい、固相厚さは時間の平方根に比例することがわかる。表1に示す物質と Stefan 数について固相厚さの時間変化を計算した結果を図5に示

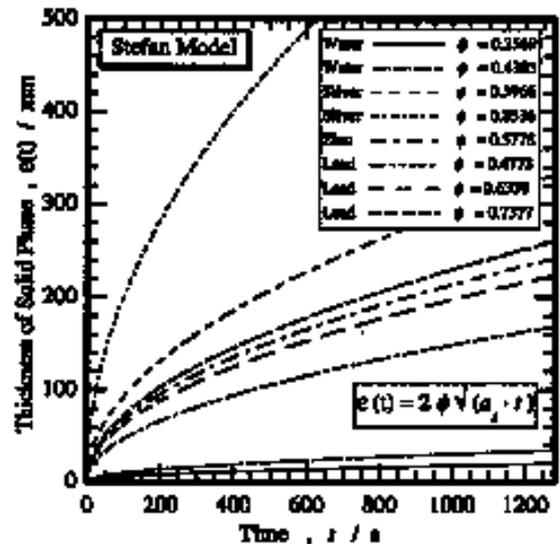


Fig.5 Solid phase growth of pure materials by Stefan model.

Table 1 Thermal properties of water, silver, zinc and lead. And calculating conditions on Stefan model and calculated results.

物質	凝固潜熱 L [J · kg ⁻¹]	定圧比熱 Cp_s [J · kg ⁻¹ · K ⁻¹]	熱伝導率 a_s [m ² · s ⁻¹]	融解点 T_f [K]	鋳造温度 T_s [K]	Stefan 数 Sf	ϕ	凝固定数 β [m · s ^{-1/2}]
① Water	333500	2000 (273K)	1.2 × 10 ⁻⁶ (273K)	273.15	250	0.1379	0.2569	5.628 × 10 ⁻⁴
② Water	333500	2000 (273K)	1.2 × 10 ⁻⁶ (273K)	273.15	200	0.4378	0.4385	1.0593 × 10 ⁻³
③ Silver	105000	272 (1000K)	137 × 10 ⁻⁶ (1000K)	1235.08	1100	0.3497	0.3966	9.2842 × 10 ⁻³
④ Silver	105000	272 (1000K)	137 × 10 ⁻⁶ (1000K)	1235.08	300	2.4221	0.8536	1.9982 × 10 ⁻²
⑤ Zinc	102000	443 (600K)	34.2 × 10 ⁻⁶ (600K)	692.7	500	0.8382	0.5778	6.7580 × 10 ⁻³
⑥ Lead	24700	130 (300K)	24.3 × 10 ⁻⁶ (300K)	600.7	500	0.5316	0.4773	4.7057 × 10 ⁻³
⑦ Lead	24700	130 (300K)	24.3 × 10 ⁻⁶ (300K)	600.7	400	1.0579	0.6339	6.2496 × 10 ⁻³
⑧ Lead	24700	130 (300K)	24.3 × 10 ⁻⁶ (300K)	600.7	300	1.5842	0.7377	7.2730 × 10 ⁻³

す。製氷に時間を要することは日常生活において実感するところであるが、これは、家庭用冷蔵庫の冷凍室の温度が高々-15℃程度であり、凝固潜熱が他の金属に比べて大きいために Sf を大きくできないこと (ϕ も小さい)と、氷の熱拡散率が小さいために凝固定数が小さくなることによる。金属材料の場合は融点が高く、鋳型壁との温度差を大きく設定でき、凝固定数を大きくすることができるので、水以上に高速で固相を成長させることができることがわかる。

(2) Neumann モデル

図4の Stefan モデルにおいて、液相側においても温度分布を持たせたもの、すなわち、図6に示すように初期状態において液体温度は融解点以上にあるとするもので、より現実味を帯びたモデルと言える。固相と液相を支配する熱伝導方程式と、初期・境界条件式は次式のようにになる。

$$\frac{\partial T_s(x, t)}{\partial t} = a_s \cdot \frac{\partial^2 T_s(x, t)}{\partial x^2} \quad (0 \leq x \leq \epsilon(t))$$

$$\frac{\partial T_l(x, t)}{\partial t} = a_l \cdot \frac{\partial^2 T_l(x, t)}{\partial x^2} \quad (\epsilon(t) \leq x)$$

初期条件 $t = 0$ で $\epsilon(0) = 0$ 、また $T_s(x, 0) = T_l(x, 0) = T_0$... (14)

境界条件 $x = 0$ で $T_s(0, t) = T_0$... (15)

$x = \epsilon(t)$ で $T_s(\epsilon(t), t) = T_l(\epsilon(t), t) = T_f$... (16)

また、固液界面でのエネルギー保存則は、

$$\rho_s \cdot L \cdot \frac{d\epsilon}{dt} = \rho_s \cdot L \cdot \frac{d\epsilon(t)}{dt} = \lambda_s \cdot \left. \frac{\partial T_s(x, t)}{\partial x} \right|_{x=\epsilon(t)} - \lambda_l \cdot \left. \frac{\partial T_l(x, t)}{\partial x} \right|_{x=\epsilon(t)}$$

で、式(5)に液相側から固相側への流入熱量が追加され

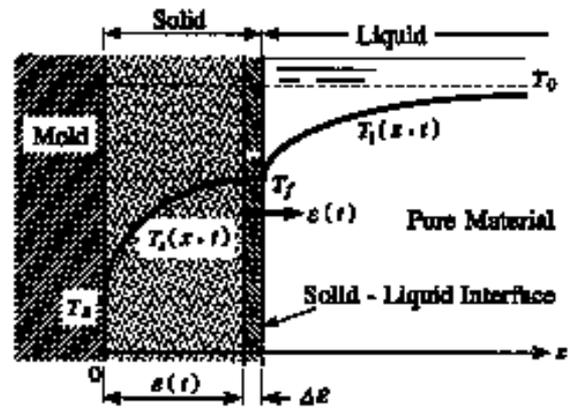


Fig.6 Neumann model for the growth of solid phase of pure material.

たものとなる。このことは、固相の成長を抑制するように作用するので、Stefan モデルより固相の成長が遅くなることが推測できる。固相と液相の温度分布はそれぞれ以下のようにになる。

$$T_s(x, t) = T_{S0} + \frac{T_f - T_{S0}}{\text{erf}(\phi)} \cdot \text{erf}\left[\frac{x}{2\sqrt{a_s \cdot t}}\right]$$

$$T_l(x, t) = T_0 - \frac{T_0 - T_f}{\{1 - \text{erf}(\sqrt{a_l/a_s} \cdot \phi)\}} \cdot 1 - \text{erf}\left[\frac{x}{2\sqrt{a_l \cdot t}}\right]$$

... (19)

ここで、 ϕ は、

$$\frac{\exp(-\phi^2)}{\text{erf}(\phi)} - \frac{\lambda_s}{\lambda_l} \cdot \sqrt{\frac{a_s}{a_l}} \cdot \frac{T_0 - T_f}{T_f - T_{S0}} \cdot \frac{\exp(-a_s/a_l \cdot \phi^2)}{\{1 - \text{erf}(\sqrt{a_l/a_s} \cdot \phi)\}}$$

$$= \frac{L}{C_{Ps}(T_f - T_{S0})} \cdot \sqrt{\pi} \cdot \phi = \frac{\sqrt{\pi}}{Sf} \cdot \phi$$

の解であり、

Table 2 Thermal properties of water, silver, zinc and lead. And calculating conditions on Neumann model and calculated results.

物質	熱伝導率 λ_l [W · m ⁻¹ · K ⁻¹]	熱伝導率 λ_s [W · m ⁻¹ · K ⁻¹]	熱拡散率 a_l [m ² · s ⁻¹]	Stefan 数 Sf	ϕ	凝固定数 β [m · s ^{-1/2}]
① Water	0.576 (280K)	2.2 (273K)	1.372 × 10 ⁻⁷ (280K)	0.1379	0.1738	3.8069 × 10 ⁻⁴
② Water	0.576 (280K)	2.2 (273K)	1.372 × 10 ⁻⁷ (280K)	0.4378	0.3260	7.1415 × 10 ⁻⁴
③ Silver	176.5 (1273K)	374 (1000K)	137 × 10 ⁻⁶ (1000K)	0.3497	0.3615	8.4629 × 10 ⁻³
④ Silver	176.5 (1273K)	374 (1000K)	137 × 10 ⁻⁶ (1000K)	2.4221	0.8131	1.9033 × 10 ⁻²
⑤ Zinc	58.8 (693K)	105 (600K)	17.5 × 10 ⁻⁶ (600K)	0.8382	0.5083	5.9449 × 10 ⁻³
⑥ Lead	16.3 (607K)	35.2 (300K)	9.6 × 10 ⁻⁶ (300K)	0.5316	0.3995	3.9384 × 10 ⁻³
⑦ Lead	16.3 (607K)	35.2 (300K)	9.6 × 10 ⁻⁶ (300K)	1.0579	0.5492	5.4145 × 10 ⁻³
⑧ Lead	16.3 (607K)	35.2 (300K)	9.6 × 10 ⁻⁶ (300K)	1.5842	0.6503	6.4112 × 10 ⁻³

$$\begin{aligned} \epsilon(x) &= 2\phi \sqrt{a_s \cdot t} = \beta \cdot \sqrt{t} \\ \beta &= 2\phi \cdot \sqrt{a_s} \end{aligned} \quad (21)$$

である。また、式(21)は式(11)と同じである。表1の物質について、同じ Sf 数 $\{Sf = Cp_s \cdot (T_f - T_{50})/L\}$ において、初期液相過熱度 ΔT を 50[K]とした場合の Neumann モデルの解を表2に、固相成長過程を図7に示す。初期液相温度が融解点であろうが、50[K]程度高からうが、 ϕ や凝固数 β に大きな変化は見られず、特に銀の場合は固相成長におよぼす影響は小さいことがわかる。 β におよぼす ΔT の影響を調べると、図8のようになる。この図から、物質によらず ΔT の増加に伴う ϕ の減少の割合

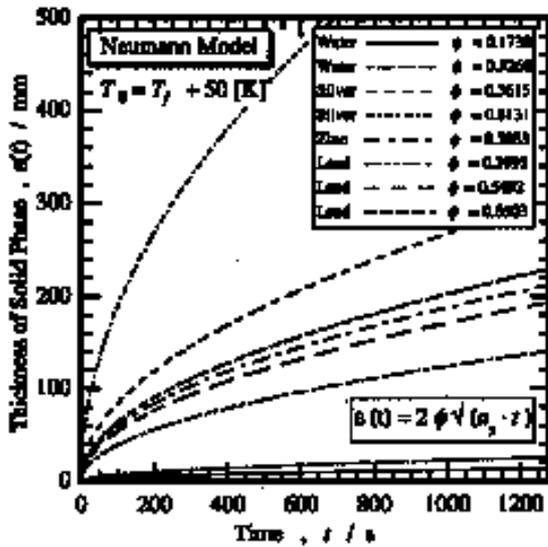


Fig.7 Solid phase growth of pure materials by Neumann model.

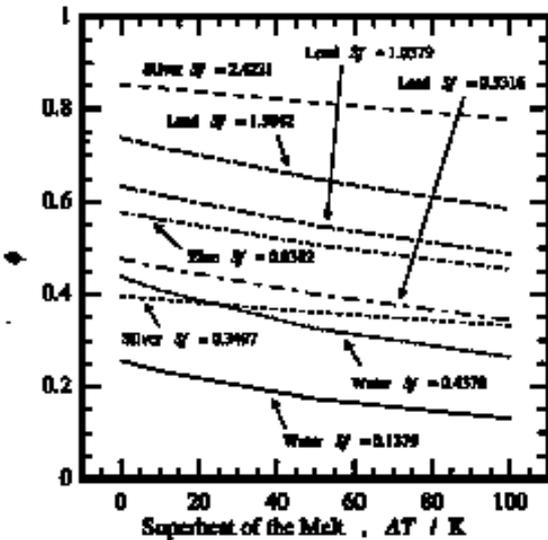


Fig. 8 Relation between ϕ and the superheat of the melt, ΔT .

は同程度であることがわかる。また、水では、沸点ギリギリの $\Delta T = 100[K]$ とした場合でも ϕ は $\Delta T = 0$ のときの 1/2程度であり、同じ厚さの氷を得るのに高々2倍の時間を要するだけである。

以上のことから、大雑把な固相厚さを予測するには Stefan モデルでも十分であることがわかる。

(3) Schwarz モデル

このモデルは、Neumann モデルに加えて、図9に示すように、鋳型を半無限体と考えて、鋳型内にも温度分布が存在するとするものである。この場合、鋳型壁温度、 T_i は時間の関数、 $T_i(t)$ となる。

固相、液相および鋳型を支配する熱伝導方程式と、初期・境界条件式は次式のようにになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_s(x, t)}{\partial t} &= a_s \cdot \frac{\partial^2 T_s(x, t)}{\partial x^2} & (0 \leq x \leq \epsilon(t)) \\ \frac{\partial T_l(x, t)}{\partial t} &= a_l \cdot \frac{\partial^2 T_l(x, t)}{\partial x^2} & (\epsilon(t) \leq x) \\ \frac{\partial T_m(x, t)}{\partial t} &= a_m \cdot \frac{\partial^2 T_m(x, t)}{\partial x^2} & (\text{鋳型内}) (x \geq 0) \end{aligned}$$

初期条件 $t = 0$ で $\epsilon(0) = 0$ 、また、
 $T_s(x, 0) = T_l(x, 0) = T_0$ 、 $T_m(x, 0) = T_{m0}$... (25)

境界条件 $x = 0$ で
 $T_s(x, t) = T_m(x, t) = T_i(0) = T_{i0}$... (26)

$$\lambda_s \cdot \frac{\partial T_s(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=0} + \lambda_m \cdot \frac{\partial T_m(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0$$

$x = \epsilon(t)$ で $T_s(\epsilon(t), t) = T_l(\epsilon(t), t) = T_f$... (28)

なお、固液界面でのエネルギー保存則は Neumann モデルと同じで式(17)で与えられる。式(20)に相当する解は次式で与えられる。

$$\frac{\exp(-\phi^2)}{M_s + \text{erf}(\phi)} = M_s \cdot \frac{T_0 - T_f}{T_f - T_{m0}} \cdot \frac{\exp(-M_s^2 \cdot \phi^2)}{\{1 - \text{erf}(\sqrt{a_s/a_l} \cdot \phi)\}}$$

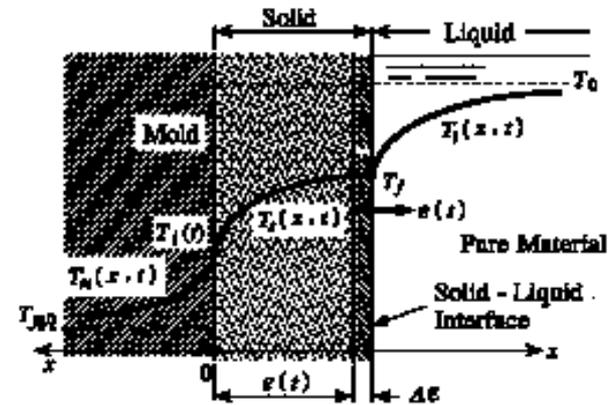


Fig.9 Schwarz model for the growth of solid phase of pure material.

$$= \frac{L \cdot \sqrt{\pi} \cdot \phi}{C_{p2}(T_f - T_{m0})} = \frac{\sqrt{\pi}}{Sf_S} \cdot \phi$$

ここで、

$$M_1 = \sqrt{\frac{\lambda_2 \cdot \rho_2 \cdot Cp_2}{\lambda_m \cdot \rho_m \cdot Cp_m}}, M_2 = \sqrt{\frac{\lambda_1 \cdot \rho_1 \cdot Cp_1}{\lambda_m \cdot \rho_m \cdot Cp_m}}, M_3 = \sqrt{\frac{a_2}{a_1}}$$

$$Sf_S = \frac{C_{p2}(T_f - T_{m0})}{L}$$

である。Sf_Sは、鋳型壁の温度が変動することから、T_f、T_{S0}の代わりに初期鋳型温度 T_{m0}を用いた場合の Stefan 数である。鋳型の熱物性値は使用する鋳物砂によって大きく変化するが、ここではオリビン砂を主成分（ベントナイトを5.9%、水分を3.3%含んだもの）とする鋳型として、473Kにおける値として ρ_m = 1.83 × 10³ [kg · m⁻³]、λ_m = 0.7294 [W · m⁻¹ · K⁻¹]及び Cp_m = 918.0 [J · kg⁻¹ · K⁻¹]として固相成長を計算してみる⁽¹²⁾。なお、Schwarzモデルでは、StefanモデルとNeumannモデルとは異なり、式(30)において φ = 0になることがある。φ = 0になるのは、

$$\begin{aligned} \frac{T_0 - T_f}{T_f - T_{m0}} &= \frac{1}{M_2 \cdot M_1} = \sqrt{\frac{\lambda_2 \cdot \rho_2 \cdot Cp_2}{\lambda_1 \cdot \rho_1 \cdot Cp_1}} \cdot \sqrt{\frac{\lambda_m \cdot \rho_m \cdot Cp_m}{\lambda_2 \cdot \rho_2 \cdot Cp_2}} \\ &= \sqrt{\frac{\lambda_m \cdot \rho_m \cdot Cp_m}{\lambda_1 \cdot \rho_1 \cdot Cp_1}} \cdot \sqrt{\frac{\lambda_m \cdot \rho_m \cdot Cp_m}{\lambda_1^2 \cdot a_1}} \end{aligned}$$

の場合で、凝固定数が0になるので固相が成長しない、つまり、凝固を生じない。表1、表2に示した物質について、T_{m0} = T_{S0} = T_Sとした場合の凝固を生じない初期融液温度 T₀を表3に示す。T₀は T_{m0}が低いほど高くなるが、鋳込み温度を T₀より高くすると鋳型壁温度が融解点以

上になって凝固しなくなる。したがって、確実に凝固させるには鋳込み温度を T₀と T_fの中間に設定する必要がある。また、凝固する条件下での Schwarz 解 (φ, β)を同じく表3に示し、固相成長過程を図10に示す。鋳型を半無限体としているため、Neumannモデルに比べて鋳型の熱吸収能が低下するので、凝固定数が著しく低下し、固相成長は極端に遅くなっている。実際の鋳型は有限の厚さであり、鋳型内の熱通過量は半無限体とする場合より多くなるので、固相成長は Schwarz解より速くなるが、Neumann解との中間程度になることが推定できる。

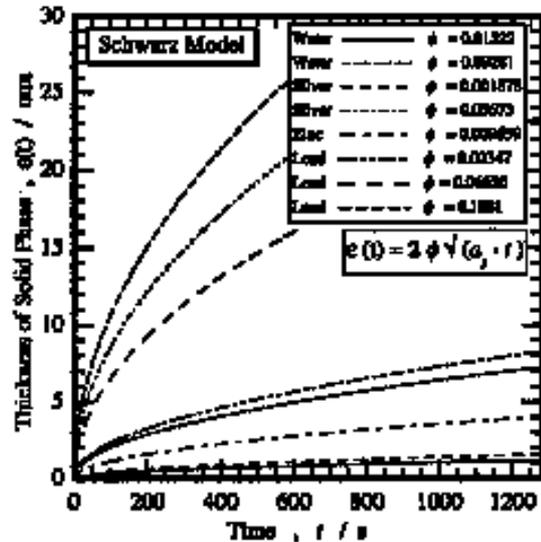


Fig.10 Solid phase growth of pure materials by Schwarz model.

Table 3 Calculating conditions on Schwarz model and calculated results for water, silver, zinc and lead.

物質	Stefan 数 Sf _S	凝固しない 初期融液温度 T ₀ [K]	初期鋳 型温度 T _{m0} [K]	融解点 T _f [K]	鋳込み 温度 T ₀₁ [K]	φ	凝固定数 β [m · s ^{-1/2}]
① Water	0.1379	289.6	250	273.15	283.15	0.01522	3.3335 × 10 ⁻⁵
② Water	0.4378	325.0	200	273.15	283.15	0.09281	2.0334 × 10 ⁻⁴
③ Silver	0.3497	1241.9	1100	1235.08	1240.08	1.878 × 10 ⁻³	4.3972 × 10 ⁻⁵
④ Silver	2.4221	1282.9	300	1235.08	1245.08	0.03673	8.5988 × 10 ⁻⁴
⑤ Zinc	0.8382	708.2	500	692.7	702.7	9.659 × 10 ⁻³	1.1297 × 10 ⁻⁴
⑥ Lead	0.5316	622.3	500	600.7	610.7	0.02347	2.3139 × 10 ⁻⁴
⑦ Lead	1.0579	643.3	400	600.7	610.7	0.06650	6.5567 × 10 ⁻⁴
⑧ Lead	1.5842	664.3	300	600.7	610.7	0.1081	1.0660 × 10 ⁻³

3 直交一次元凝固過程 (Neumann モデル) の
数値計算法

数値解析に当たっては、融液側の半無限領域を有限個数の要素に分割する必要がある。本研究では、固相と液相の界面に常に要素節点がある移動温度点法を用い、支配偏微分方程式等を陽的有限差分近似して数値計算することとする。移動温度点法の要素分割の考え方を図11に示し、以下に差分化の方法や計算手順の概略を示す。半無限領域を数値計算で扱うことは不可能なので、十分な時間経過後も固相域が到達しないであろう計算領域 S を仮定する。全計算領域を M 個の要素に分割し、その内、固相域は N 個の要素に分割する。半無限体の鋳型壁の温度点の番号を 1 とし、固相と液相の界面の温度点の番号を N とする。時間経過とともに固相が成長していても、要素分割数に変化はないので、固相と液相のそれぞれの要素寸法 Δx_s 、 Δx_l は時々刻々変化することになる (Δx_s は増大、 Δx_l は減少していく)。 N 番目の温度は常に凝固温度の T_f であり、温度勾配が不連続となる凝固界面の温度を計算する必要がないという、大きな利点をこの方法は有している。

固相成長に伴い、温度点が移動していくことから、ある温度点のタイムステップ Δt 後の温度変化は、式(32)によって計算される。

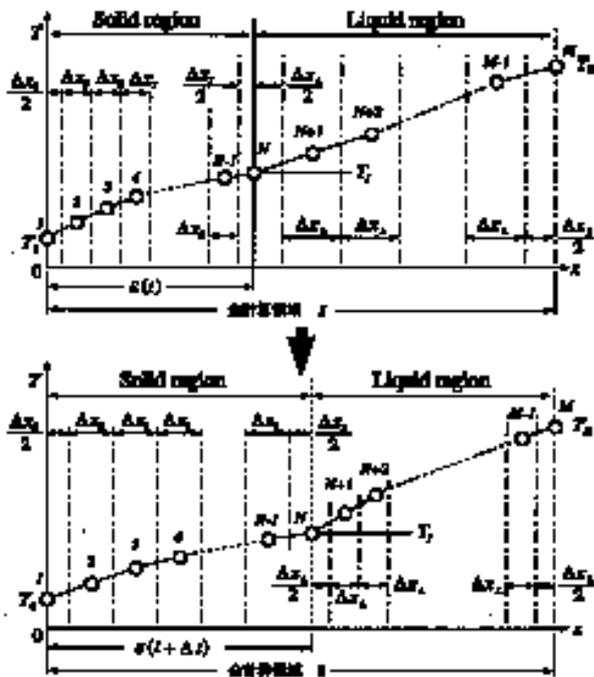


Fig.11 The moving temperature point method and change of the width of element with time.

$$\frac{dT(x, t)}{dt} \cdot \Delta t = \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} \cdot \Delta t + \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \cdot \left[\frac{dx}{dt} \cdot \Delta t \right] \dots (32)$$

式(32)の右辺第1項は時間のみの変化分で、右辺第2項は固相と液相の界面が移動することによる変化分である。式(32)の関係から、固相域、液相域を支配する熱伝導方程式はそれぞれ式(33)、式(34)のように書き換えられるが、固相成長速度、すなわち凝固界面の移動速度と各温度点の移動速度は異なることに注意する必要がある。

$$\begin{aligned} \frac{dT(x, t)}{dt} &= a_s \cdot \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \cdot \left[\frac{dx}{dt} \right] \\ &= a_s \cdot \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \cdot \frac{i-1}{N-1} \cdot \frac{d\epsilon(t)}{dt} \\ \frac{dT(x, t)}{dt} &= a_l \cdot \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \cdot \left[\frac{dx}{dt} \right] \\ &= a_l \cdot \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \cdot \frac{M-i}{M-N} \cdot \frac{d\epsilon(t)}{dt} \end{aligned}$$

上式を差分式で中心差分法で離散化式に表すと、

$$\begin{aligned} \frac{T_i^{j+1} - T_i^j}{\Delta t} &= \frac{a_s}{(\Delta x_s)^2} \cdot (T_{i-1}^j - 2T_i^j + T_{i+1}^j) \\ &+ \frac{T_{i+1}^j - T_{i-1}^j}{2\Delta x_s} \cdot \frac{i-1}{N-1} \cdot \frac{d\epsilon(t)}{dt} \quad (2 \leq i \leq N-1) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{T_i^{j+1} - T_i^j}{\Delta t} &= \frac{a_l}{(\Delta x_l)^2} \cdot (T_{i-1}^j - 2T_i^j + T_{i+1}^j) \\ &+ \frac{T_{i+1}^j - T_{i-1}^j}{2\Delta x_l} \cdot \frac{M-i}{M-N} \cdot \frac{d\epsilon(t)}{dt} \quad (N+1 \leq i \leq M-1) \end{aligned} \dots (36)$$

となり、式(17)の離散化式 (ここでは凝固界面近傍の3節点を用いて近似する)、

$$\begin{aligned} \lambda_s \cdot \frac{T_{N-2}^j - 4T_{N-1}^j + 3T_N^j}{2\Delta x_s} - \lambda_l \cdot \frac{-3T_N^j + 4T_{N+1}^j - T_{N+2}^j}{2\Delta x_l} \\ = \rho_s \cdot L \cdot \frac{d\epsilon(t)}{dt} \end{aligned}$$

より、凝固界面の移動速度 $d\epsilon(t)/dt$ は、

$$\begin{aligned} \frac{d\epsilon(t)}{dt} &= \frac{1}{\rho_s L} \left\{ \lambda_s \frac{T_{N-2}^j - 4T_{N-1}^j + 3T_N^j}{2\Delta x_s} \right. \\ &\quad \left. - \lambda_l \cdot \frac{-3T_N^j + 4T_{N+1}^j - T_{N+2}^j}{2\Delta x_l} \right\} \end{aligned}$$

となる。したがって、式(38)で求めた $d\epsilon(t)/dt$ を式(35)、(36)に代入することによって i 番目の要素の Δt 後の温度 T_i^{j+1} が計算でき、凝固界面の位置 $\epsilon(t + \Delta t)$ は、

$$\epsilon(t + \Delta t) = \epsilon(t) + \frac{d\epsilon(t)}{dt} \Delta t$$

で求めることができる。なお、陽的有限差分近似してい

るので、

$$\frac{\alpha_s \cdot \Delta t}{(\Delta x_s)^2} \leq \frac{1}{2}, \quad \frac{\alpha_l \cdot \Delta t}{(\Delta x_l)^2} \leq \frac{1}{2}$$

を満たすように要素寸法とタイムステップを設定する必要がある (最初から固定する必要はなく、時間経過とともに変化させていっても良い)。もちろん、計算の最初に固相が存在している必要があり、固相厚さを別の方法で求めておく必要がある。また、計算の初期は Δx_s が非常に小さくなるので (液相域が狭くなると Δx_l が非常に狭くなって来る)、タイムステップは大きく取れないという問題がある。

図12に計算の大まかな流れを、図13に解析解 ϵ_{th} と数値解 ϵ_{cal} との比較を水の場合について示す。時刻 $t=0$ から10s経過後を数値計算の初期値とし、初期固相厚さはNeumann解で与えた。また、固相域と液相域をそれぞれ50等分し、時間に関する繰り返し (計算の打ち切り) は $JTEND=4800$ 回とした。図13から、数値解析による固相厚さの方が解析解より厚くなり、時間経過とともにそれが增大していくことがわかる。いろいろな要素分割数、分割法で計算しても同様の傾向が認められた。本計算では、温度の位置変数による2回微分項を3点近似により離散化しているが、計算精度を高めるためには、4点以上の温度点を用いて離散化することが有効ではある。しかし、時間経過とともに Δx_s が增大していき、逆に Δx_l が減少していくので、ある程度計算が進行

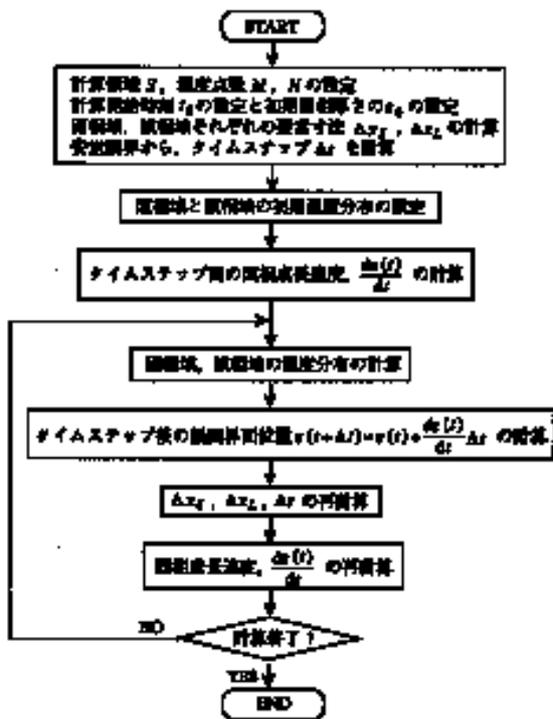


Fig.12 The flow chart of numerical calculation by moving temperature point method.

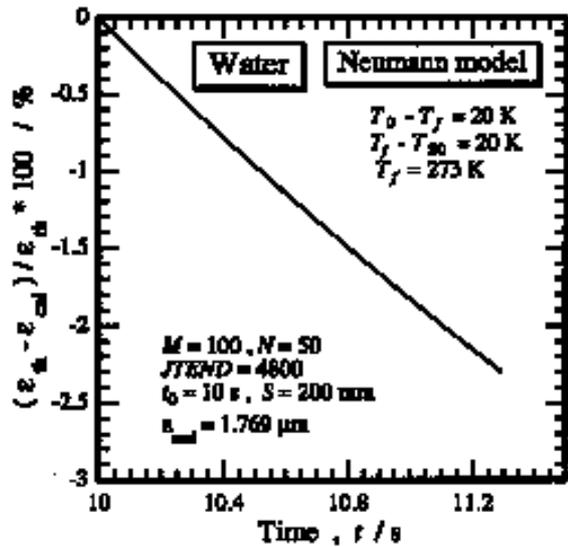


Fig.13 Comparison of the analytical results with numerical results for Neumann model about water.

した段階で固相域、液相域の要素寸法が小さくなるように要素分割数を見直す必要がある。

4 おわりに

本報告では金属材料に対する興味付けと凝固現象の理解を深めてもらうことを目的として、マクロな熱伝導モデルによる凝固解析法を解説した。また、近年は微分方程式も簡単にグラフ化できるソフトウェアも開発されており、自らプログラムを作成して数値計算する機会も減ってきている。ソフトウェアが利用者にとってブラックボックスになりつつあり、結果を盲目的に信用せざるを得ない状況になることを懸念するものである。本稿が少しでも役に立つようであれば筆者の望外の喜びである。

参考文献

- (1) 増本 健、深道和明：アモルファス合金 その物性と応用、アグネ (1984) .
- (2) 大中逸雄：コンピュータ伝熱・凝固解析入門、丸善 (1985) .
- (3) 新山英輔：鑄造伝熱工学、アグネ技術センター (2001) .
- (4) 小林 亮：日本結晶成長学会誌、18-2 (1991)、pp. 209 - 216.
- (5) T. Suzuki, M. Ode, S. G. Kim and W. T. Kim : J. Crystal Growth、237 - 239 (2002)、pp. 125 - 131.

- (6) B. Nestler and A. A. Wheeler : *Computer Physics Communications*, **147** (2002), pp. 230 - 233.
- (7) W. J. Boettinger, J. A. Warren, C. Beckermann and A. Karma : *Annu. Rev. Mater. Res.*, **32** (2002), pp. 163 - 194.
- (8) H. S. Carslaw and J. C. Jaeger : *Conduction of Heat in Solids (2nd ed.)*, Oxford Univ. Press (1959) .
- (9) 庄司正弘 : 伝熱工学、東京大学出版会 (1995) .
- (10) 日本機械学会 : 伝熱工学資料 (4訂版)、丸善 (1986)、pp. 314 - 325.
- (11) 日本金属学会 : 金属データブック (3訂版)、丸善 (1993)、pp. 14 - 16.
- (12) 大中逸雄 : コンピュータ伝熱・凝固解析入門、丸善 (1985)、p. 333.