

凝固・偏析シミュレーション見積り仕様書

Advanced Algorithm & Systems

2011年5月18日

1. 緒言

お客様のご希望は、「PhaseField のような小さなスケールの解析への需要は、まだ大きくありません。弊社で主に行なう凝固解析は、数メートルサイズの領域における、対流+伝熱凝固+マクロ偏析の解析です、どうやら、対流を考慮しつつ凝固の進行と偏析の生成をシミュレーションすることが目的のようです、御社でご提案可能な術はありますか、ということですが、これに関連した弊社のソルバーとしては「Level set 法による鋳造プログラム」があります。しかし、このプログラムは湯流れ解析を主に扱い、熱解析はまだこれからのようです。特に問題なのは、各物理定数に気相、液相と SDF 境界を用いている場合には固相の物性値を気液界面の符号付距離関数 $\phi(\vec{r}, t)$ 、SDF 境界の $\phi_{Boundary}(\vec{r}, t)$ を用いて Heaviside 関数で滑らかにつないだものを代入した点と、さらに固相では移流を無視した点と、気相、液相、固相が対称に取り扱われていないことについて、もとのエネルギー方程式との整合性が悪いなどの問題点があるが、今後の改善が必要な点など、熱解析について未知数である。

そこで、本開発では伝熱・凝固・湯流れ・変形など多くの現象が複雑に絡み合う鋳造分野へ、粒子法(MPS 法)を応用する解析方法(東北大学・安齋教授による、(1))を提案したい。この新しい解析方法である粒子法によると、湯流れ解析と伝熱・凝固解析を連成させ、密度及び粘性の温度依存性を導入することにより、体積変化を伴う複雑な問題の解析ができています。マクロ偏析については、従来の経験則に基づいた解析を当面は採用する。粒子法プログラムは弊社としては新たに開発することになるが、精度、汎用性、応用性の点から利用価値は高いものと言える。

2. 解析方法

2. 1. 重み関数と粒子数密度

粒子法では相互作用する粒子は一定の有効半径内の近隣粒子に限定し、その粒子との間の相互作用の重み付平均を求めることで計算を行う。重み付平均を求める際に用いる重み関数は次式を用いる。

$$w(r) = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{40r_0^2}{7\pi r_e^2} \left(1 - 6\left(\frac{r}{r_e}\right)^2 + 6\left(\frac{r}{r_e}\right)^3 \right) & (0 \leq r < 0.5r_e) \\ \frac{10r_0^2}{7\pi r_e^2} \left(2 - 2\frac{r}{r_e} \right)^3 & (0.5r_e \leq r < r_e) \\ 0 & (r_e \leq r) \end{array} \right. \quad (2.1.1)$$

ここで、 r は相互作用を計算する 2 粒子間の距離、 r_e は相互作用の有効半径、 r_0 は粒子の代表

長さである。

相互作用の重み付平均を求めるためには、重み関数の和を用いる。この和は粒子の分布密度に密接に関連するため、粒子数密度と呼ぶ。粒子 i における粒子数密度 n_i は次式で与えられる。

$$n_i = \sum_{i \neq j} w(|r_j - r_i|) \quad (2.1.2)$$

物質の十分内部にある粒子の粒子数密度を特に n^0 と表記する。

2. 2. 粒子間相互作用

粒子法では勾配、ラプラシアンに対し、粒子間相互作用モデルを用いる。2 つの粒子 i, j がそれぞれ位置ベクトル \vec{r}_i, \vec{r}_j , スカラー量 ϕ_i, ϕ_j , ベクトル量 \vec{u}_i, \vec{u}_j を保持している場合、粒子 i において勾配、ラプラシアンの計算には以下の計算モデルを用いる。

$$\nabla \phi_i = \frac{d}{n_i} \sum_{i \neq j} \frac{\phi_j - \phi_i}{|r_j - r_i|} \text{sgn}(r_j - r_i) w(|r_j - r_i|) \quad (2.2.1)$$

$$\nabla^2 \phi_i = \frac{2d}{n_i} \sum_{i \neq j} \frac{\phi_j - \phi_i}{|r_j - r_i|^2} w(|r_j - r_i|) \quad (2.2.2)$$

ここで d は次元数である。

2. 3. 伝熱・凝固解析手法

伝熱解析の支配方程式は次式で表される。

$$\frac{\partial H}{\partial t} = k \nabla^2 T \quad (2.3.1)$$

$$\Delta Q = t(T_1 - T_2) / R \quad (2.3.2)$$

ここで H は単位体積あたりの熱量 (J/m^3)、 t は時間 (s)、 k は熱伝導率 ($W/(mK)$)、 T は温度 (K)、 R は熱抵抗 ($m^2 K/W$)、 T_1 (K) 及び T_2 (K) は接触界面におけるそれぞれの物質の表面温度である。凝固の影響はエンタルピー法を用いて考慮する。

2. 4. 流動解析手法

流動解析の支配方程式は以下の2式である。

$$\frac{D\rho}{Dt} = 0 \quad (2.4.1)$$

$$\frac{D\vec{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\nabla^2\vec{u} + \vec{f} \quad (2.4.2)$$

(2.4.1)式は連続の式、(2.4.2)式は Navier-Stokes の式である。ここで、 ρ は密度 (kg/m^3)、 t は時間 (s)、 \vec{u} は速度 (m/s)、 p は圧力 (Pa)、 ν は動粘性係数 (m^2/s)、 \vec{f} は重力などの外力 (体積力) である。これらの式に SMAC 法と同様の半陰的アルゴリズムを適用する。差分法と異なる点は、差分法は圧力のポアソン方程式のソース項には速度の発散を用いるが、MPS 法では次式の粒子数密度を用いることである。

$$\nabla^2 p^{k+1} = -\frac{\rho}{\Delta t^2} \frac{n^* - n^0}{n^0} \quad (2.4.3)$$

SMAC 法は速度の発散がゼロとなるように圧力を計算することで連続の式を満足させるが、MPS 法では粒子数密度が一定値 n^0 となるように圧力を計算する。上式を解くことで新しい時刻 $k+1$ の圧力 p^{k+1} を求め、粒子の速度と位置を修正する。

2. 5. 体積変化の計算モデル

オイラー系手法では、収縮や膨張といった体積変化を扱う場合、改めてアルゴリズムを構築する必要がある。一方、MPS 法はラグランジュ系手法のため計算点である粒子の位置関係に制限はなく、移動・拡大・縮小の扱いに適しているため、体積変化を容易に扱うことが出来、引け巣や凝固膨張の直接解析が可能である。MPS 法により体積変化を考慮する場合、重み関数を粒子代表長さにあわせて変化させるだけで、従来のアルゴリズムをそのまま利用可能である。以下に、粒子 i における重み関数を $w_i(r)$ とした場合の重み関数を示す。

$$w_i(r) = \frac{V_j w\left(\left|\vec{r}_j - \vec{r}_i\right|, r_{ei}\right) + V_i w\left(\left|\vec{r}_j - \vec{r}_i\right|, r_{ej}\right)}{2V_i} \quad (2.5.1)$$

ここで V_i と V_j は粒子 i, j の体積、 r_{ei}, r_{ej} は粒子 i, j の有効半径

$$r_{ei} = r_{0,i} \times \frac{r_e}{r_0}, \quad r_{ej} = r_{0,j} \times \frac{r_e}{r_0}$$

である。ここで粒子*i*の代表長さ $r_{0,i}$ に温度依存性を導入することにより、体積変化を考慮した解析ができる。

2. 6. 圧力の多重緩和

ここでは、速度減衰の低減と安定性の向上を目的として、圧力の多重緩和を導入した。図2. 6. 1にそのフローチャートを示した。通常半陰解法では圧力のポアソン方程式は1回のみ解くが、多重緩和による本手法では圧力と速度の緩和を複数回行うことで、計算の安定性の向上を図る。

また多重緩和の速度修正を行う際、以下の優先緩和係数 α を用いることで、速度の減衰を低減する。

$$\Delta \bar{u} = -\alpha \frac{\Delta t}{\rho} \nabla p^{**} \quad (2.6.1)$$

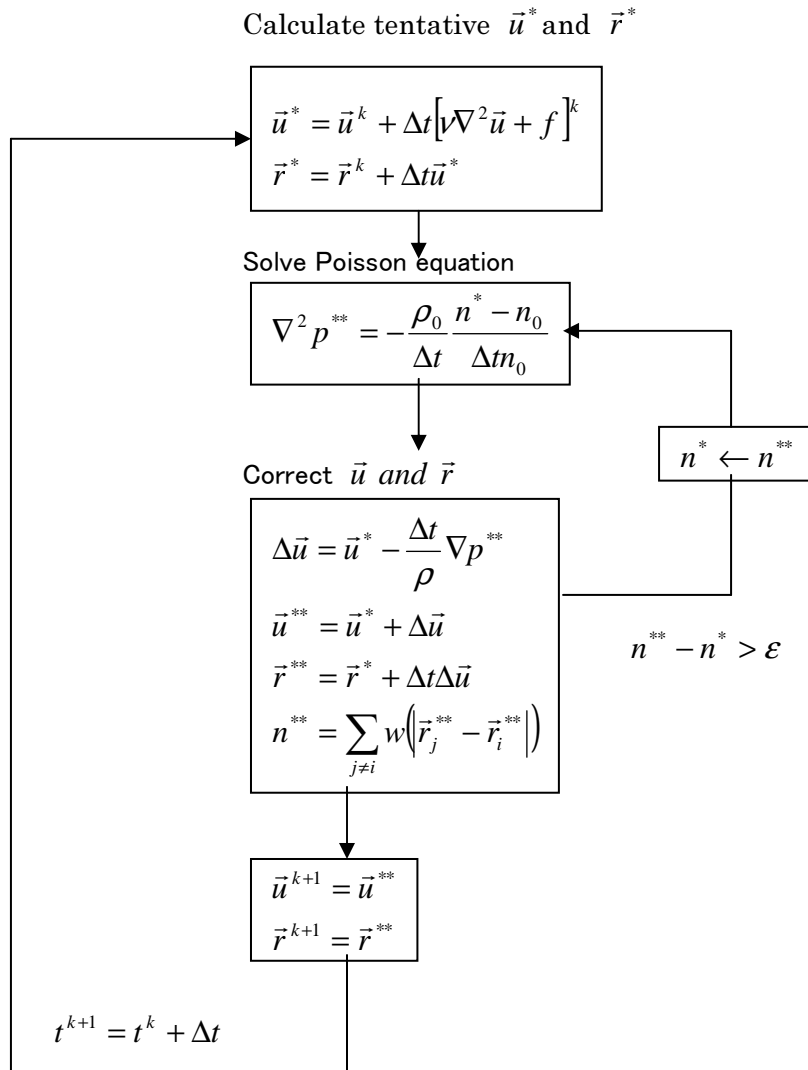
2. 7. 湯流れ・凝固連成解析

現在一般的に湯流れ・凝固を連成させ、固液共存域を考慮した解析を行う際は、溶湯がデンドライト樹枝間を流れるダルシー流れを仮定し、固相率によって透過率*K*を設定することで流れを解くことが多い。本研究では単純のため、固相率の上昇とともに粘性を上昇させることで固液共存域の流動を考慮する。本研究においては温度とエンタルピー、固相率の関係はすべて直線近似で表すが、粘性も同様に単純な直線近似で表すことにする。また、組織的過冷却などは無視する。

また本来であれば固相部は熱応力解析により変形を考慮すべきであるが、本研究では湯流れ解析により代用する手法を考案した。液相の流動と同時に固体収縮を解く場合、収縮を計算するために負圧を扱わなければならない。しかし、MPS法において負圧が生じる場合は計算が不安定になりやすい。そこで、固相域と流動域を分けて解析を行う手法を提案する。

まず1ステップ目では固相域の粒子に対して、仮の速度をゼロとすることで負圧が生じる固相を安定に解く。2ステップ目では固相域の粒子は壁粒子とみなし、流動域の粒子に対して通常通りの多重緩和を用いた湯流れ解析を行う。

図2. 6. 1 圧力の多重緩和



2. 8. 炭素のマクロ偏析

中空鋼塊についての炭素のマクロ偏析データを用いた要因解析(2)によると、鋼塊厚 d (mm) と凝固速度 V (cm/min)を用いて、次式を得た。

$$C_{\max} / C_0 = 0.9172 + 0.0043d - 0.0209V \quad (2.8.1)$$

ここで C_{\max} は鋼塊中の最大偏析 C 濃度、 C_0 は凝固前溶鋼中の平均 C 濃度を表す。この要因解析によると、マクロ C 偏析低減には鋼塊厚を小さく、かつ凝固速度を大きくすることが有効と言える。次にマクロ C 偏析発生について凝固解析を用いて定量的に予測することを試みる。

鋼塊凝固時の固液界面の溶質分配は、液相内完全混合で固液界面の液側の境膜内拡散で律速されると仮定し、次の Burton の式で表す。

$$\frac{C_S}{C_L} = \frac{k_0}{k_0 + (1 - k_0) \exp(-AV)} \quad (2.8.2)$$

C_S, C_L : 固相、液相のバルク濃度

V : 凝固速度 (cm/s)

A : 境膜内拡散抵抗 (d/c m²)

凝固率 G の位置からさらに ΔG だけ凝固が進行した場合のバルクの液相濃度 C'_L は次の関係を満足する。

$$C'_L = \frac{(1 - G)C_L - \Delta G C_S}{1 - G - \Delta G} \quad (2.8.3)$$

これから、次の 1 次元マクロ偏析を記述する式を得る。

$$\frac{C_S}{C_L} = \frac{k_0 (1 - G)^{1/B}}{k_0 + (1 - k_0) \exp(-AV)} \quad (2.8.4)$$

ただし、

$$B = \frac{k_0 + (1 - k_0) \exp(-AV)}{(1 - k_0) \exp(-AV)} \quad (2.8.5)$$

炭素のマクロ偏析を凝固計算結果から得られる凝固速度と凝固率を(2.8.4)式に代入して推定したところ、鋼塊底部の負偏析帯から頭部の正偏析帯にいたる C 分布の様子を的確に再現し、実測値との一致も良好であった(2)。

3. 解析結果

前節までに記述した手法を用いて、鑄鉄と鑄型に砂型を用いた凝固解析と、ダム崩壊の自由表面を有する流動解析と、円柱形状の金型に鑄鉄を鑄込んだ場合の流動・凝固連成解析を行った(1)。その結果、凝固解析については、商用ソフトウェア AdStefan Ver.8 と比較したところ、良好な一致が得られた。流動解析については、波の減衰挙動を調べるため、全流体粒子の平気速度をプロットしたところ、従来法で 5 秒後には波の挙動が消えるが、本手法では 15 秒経過後も波の挙動は残り速度の不自然な減衰が抑えられ、自然な結果が得られた。流動・凝固連成解析については、本手法を用いることで湯流れから凝固・収縮までを一連の流れとして解析できることがわかった。

4. 工数見積り

以下に工数見積りを示す。

1	粒子法の習得と計算式の導出	3 人月
2	プログラム基本設計	1 人月
3	プログラミング	4 人月
4	プログラム・バグ取り、修正	2 人月
5	ユーザーインターフェース作成	2 人月
	合計	12 人月

5. 結語

ここではマクロ偏析について従来法を用いたが、将来的には粒子法スキームに則った方法で直接求められることになると予想される。その際、多種類の金属粒子(合金)を扱わなければならないが(今回は単金属)、拡張した例はまだない。いずれにしても、粒子法による鑄造解析は今後発展していくものと思われる。

参考文献

- (1) 平田直哉、安齋浩一 「粒子法による伝熱・凝固解析手法の検討」 鑄造工学、80 (2008) 81-87
- (2) 八百升, et al 「数値解析による大型鋼塊の偏析予測とその防止技術」 川崎製鉄技報 19 (1987) 3, 167-174