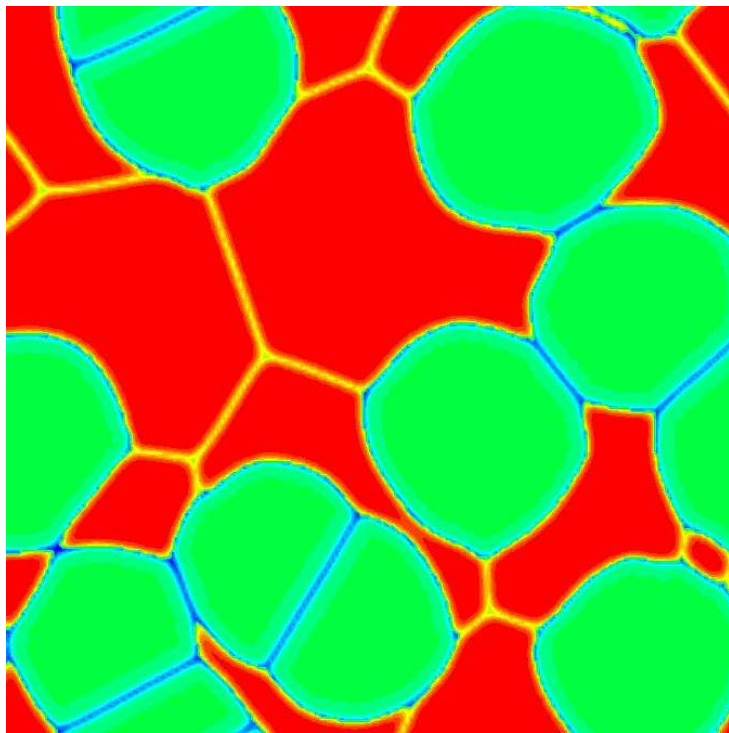


# Phase-fieldシミュレーション

## 操作マニュアル



## 1. 入力パラメータ

Phase Field 法で解析する前にまず各々のパラメータを設定する必要があります。

まず, `gui_poly2dim.exe` を実行すると, 図 1.1 の画面が出てきます. 新規にモデルを作成するためには[File]ボタンをクリックし, [New]をクリックします.

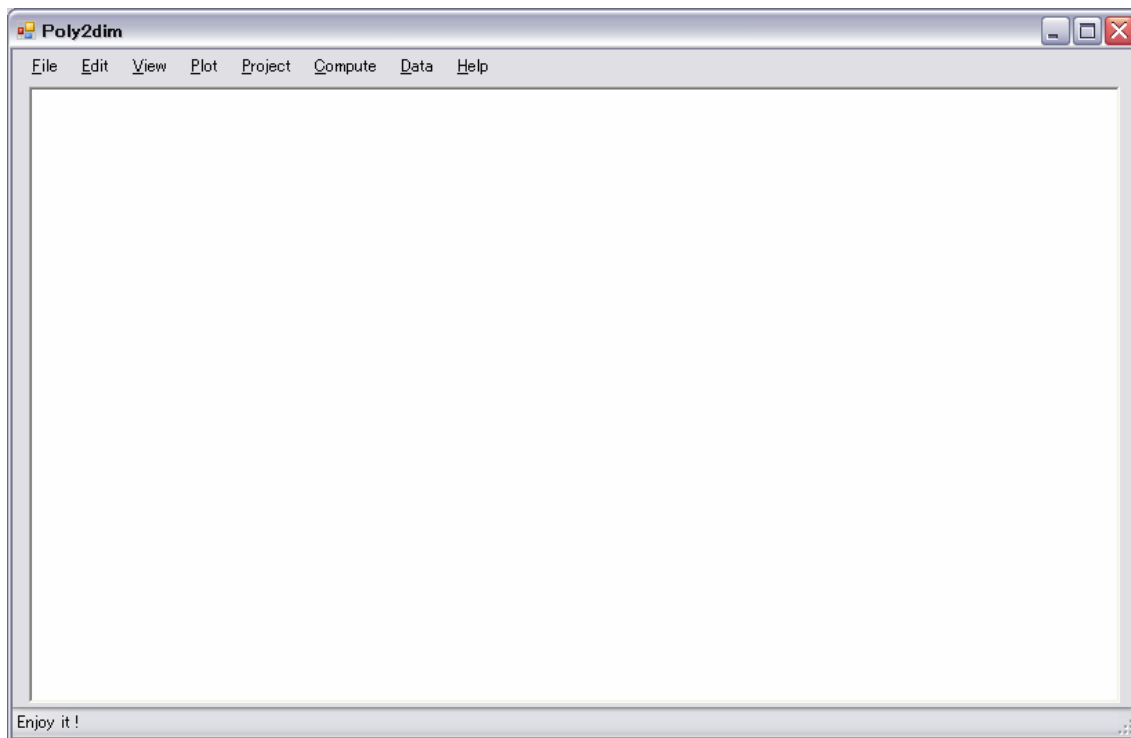


図 1.1 メイン画面

### ■ [Project name]タブ

最初に新規のプロジェクト名を指定します. 図 1.2 の画面が表示されるので, **Project name** に任意のプロジェクト名を, **Location** の部分にプロジェクトの保存フォルダを指定します. [参照]ボタンでフォルダの場所を選択することができます. 入力を終えたら[Next]ボタンをクリックし, 次へ進みます.

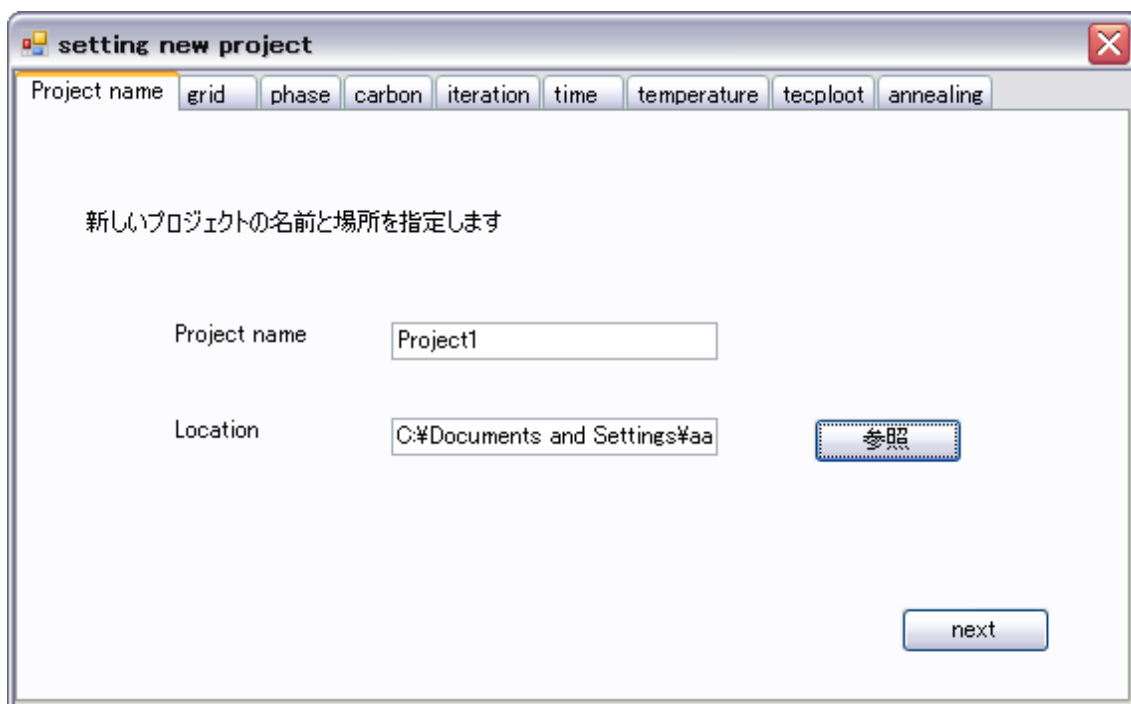


図 1.2 プロジェクト名設定画面

#### ■ [grid]タブ

ここでは、計算矩形領域の一边の幅と分割数を指定します。計算領域のスケールは  $\mu\text{m}$  です。入力したら[next]ボタンをクリックしてください。



図 1.3 計算領域設定画面

## ■ [phase]タブ

ここでは、Phase field 計算の各種パラメータ、 $\alpha/\gamma$  境界面の移動度を入力します。

まず、図 1.4(a)の左側にある [Phase initialization] でオーステナイトとフェライトの初期化のためのボロノイ分割を行うためのパラメータを指定します。[method] はプルダウンメニューから “file input” もしくは “random” を選択できます。

### 1) “file input” の場合 (図 1.4(a))

“initial\_phase.txt” を用意します。そのフォーマットについては後述します。[file name] の [参照] ボタンで “initial\_phase.txt” ファイルの場所を指定してください。

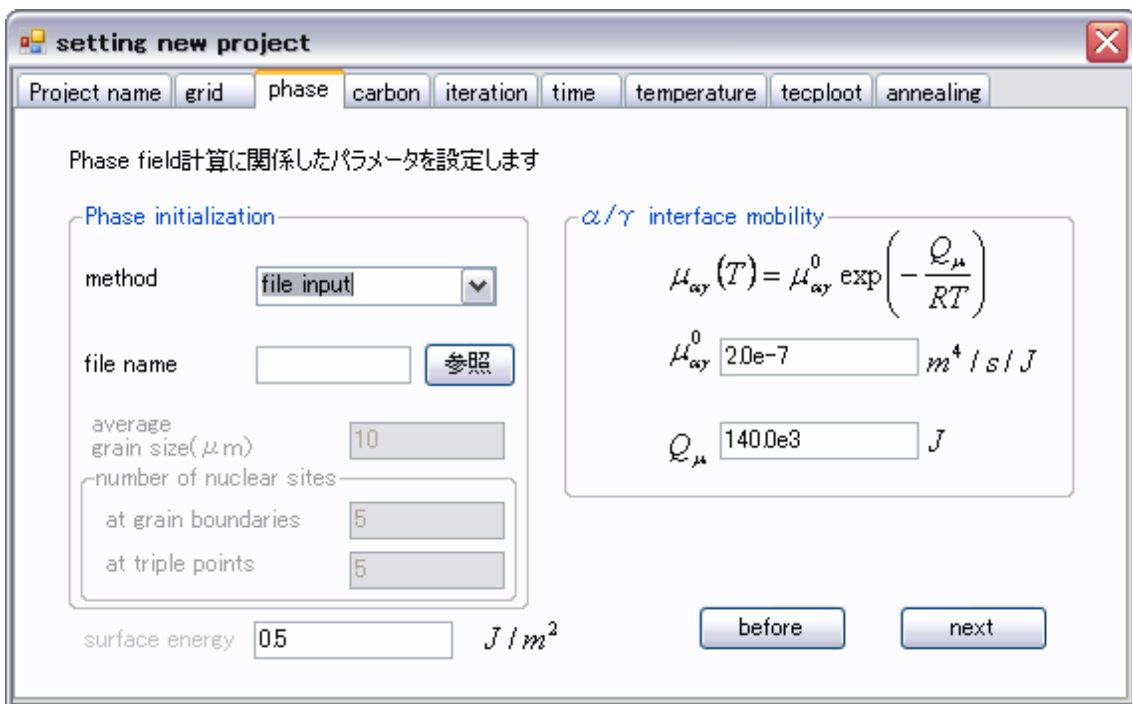


図 1.4(a) ボロノイ分割，移動度設定画面．“file input” モード

### 2) “random” の場合 (図 1.4(b))

[average\_grain\_size] ボックスはオーステナイトの初期の平均粒径を指定します。[number of nuclear sites] には配置させるフェライト核の個数を入力してください。図 1.4(b)の例では、オーステナイトの grain boundary (結晶粒界) に 5 個，triple point に 5 個のフェライトの核をランダムに最初に発生させます。フェライト核は、 $\Delta x =$  (計算領域の幅/分割数) として  $2\Delta x$  の半径を持つようになっており、現在のところ初期設定しかできませんが、今後は時間とともに核を発生する仕組みを組込むために使うとよいでしょう。[surface energy] には  $\alpha/\gamma$  境界面のエネルギー密度を入力してください。

次に [α/γ interface mobility] で  $\alpha/\gamma$  境界面の移動度を設定します。移動度  $\mu_{\alpha\gamma}$  は

$$\mu_{\alpha\gamma}(T) = \mu_{\alpha\gamma}^0 \exp\left(-\frac{Q_{\mu}}{RT}\right)$$

にて定義されます。  $\mu_{\alpha\gamma}^0$  (m<sup>4</sup>/s/J)と  $Q_{\mu}$  (J)を指定して下さい。

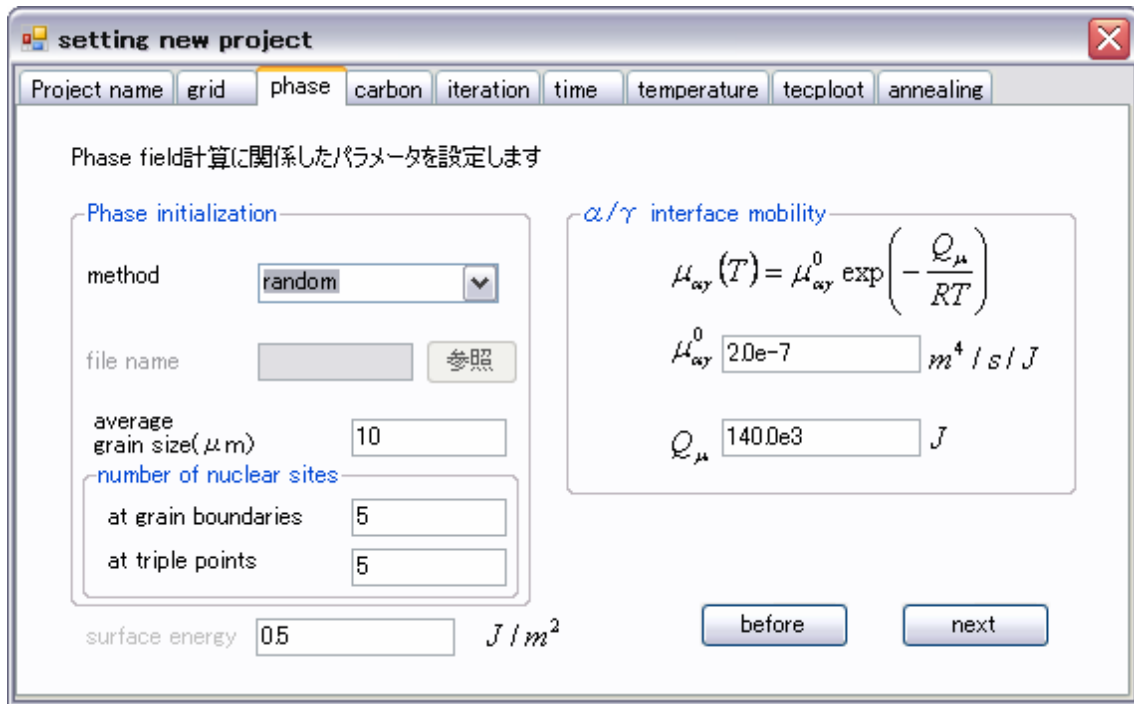


図 1.4 (b) “random” モード

### ■ [carbon]タブ

ここでは、 $\alpha$ 、 $\gamma$ 相それぞれにおける炭素の拡散係数を指定します。

$\alpha$ 相における炭素の拡散係数  $D_a^C$  は以下で定義されます。

$$D_a^C = D_a^{C_0} \exp\left(-\frac{Q_{10}(1.0 - Q_{11}/T)}{RT}\right)$$

上式の各係数、 $D_a^{C_0}$ 、 $Q_{10}$  (J)、 $Q_{11}$  (K)、を指定してください。

$\gamma$ 相における炭素の拡散係数  $D_\gamma^C$  は

$$D_\gamma^C = D_\gamma^{C_0} \exp\left(-\frac{Q_{20}}{RT}\right)$$

にて定義されます。同様に  $D_{\alpha\gamma}^0$  と  $Q_{20}$ (J)を指定して下さい。

“Initial Carbon Concentration” ボックスには炭素濃度の初期値を重量%で入力してください。

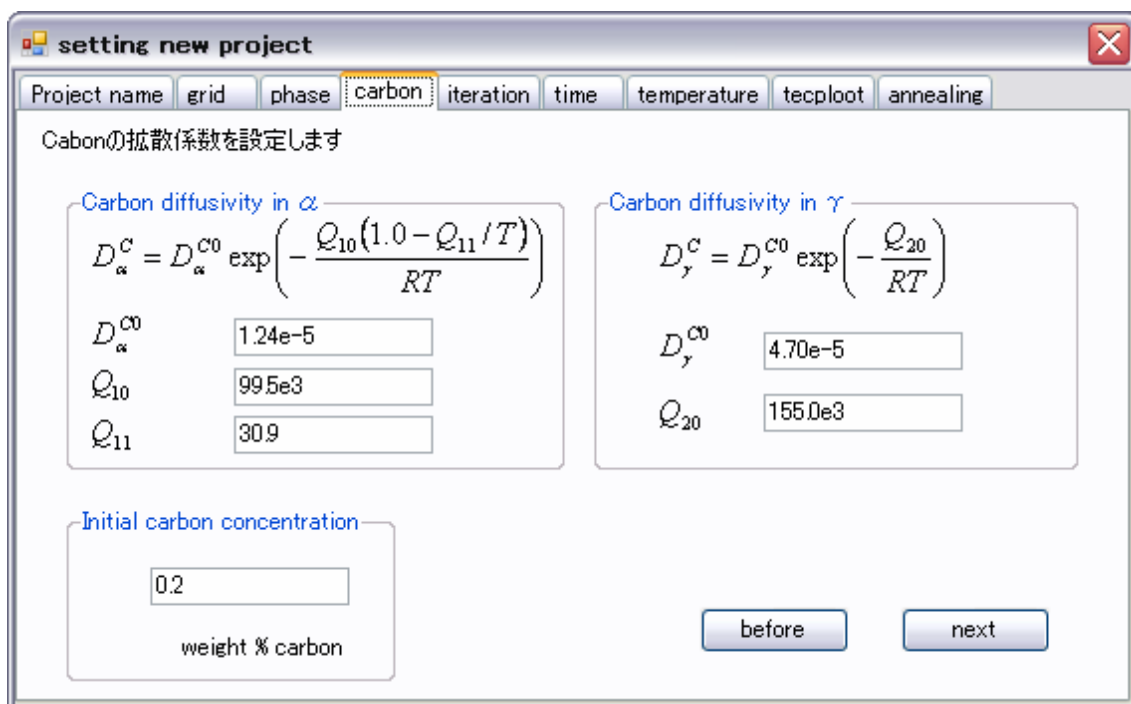


図 1.5 炭素設定画面

#### ■ [iteration]タブ

ここでは計算回数の設定を行います。画面に従って数値を入力してください。

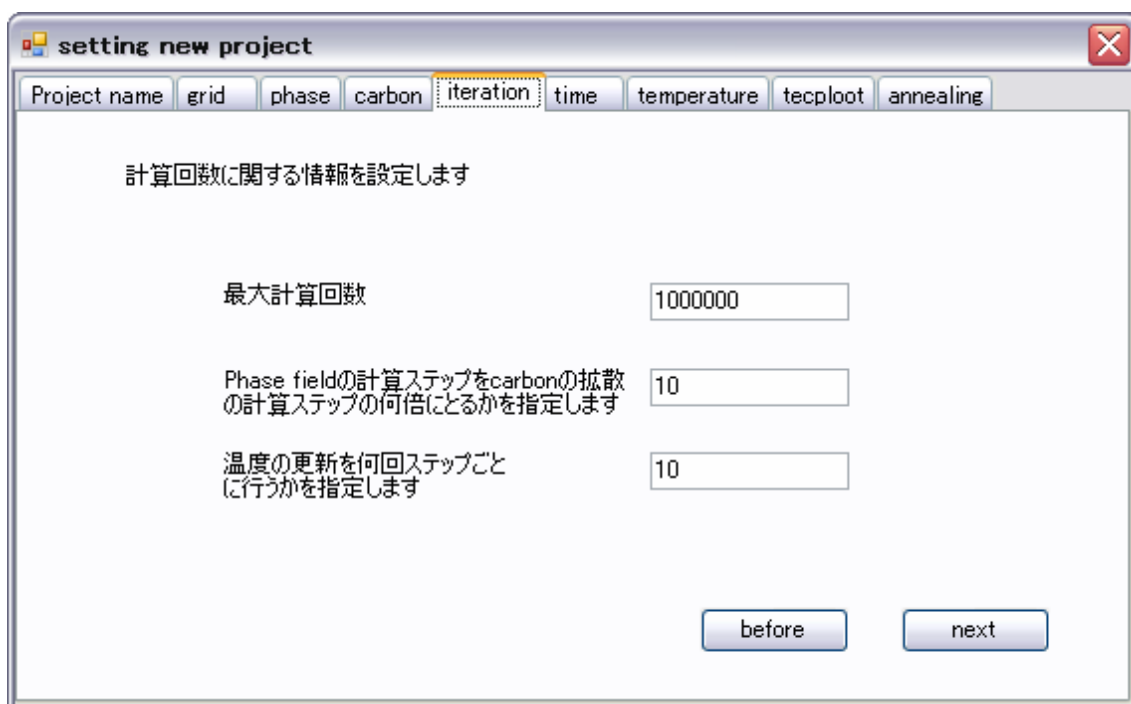


図 1.6 計算回数設定画面

## ■ [time]タブ

開始・終了時間, 時間刻み幅を秒単位で設定します. クーラン(CFL: Courant-Friedrichs-Lewy)条件から刻み幅を計算します. 計算開始時の刻み幅  $\Delta t_0$  と最大量  $\Delta t_{\max}$  は初期 CFL (*initial\_cfl*) と最大 CFL (*max\_cfl*) を用いて以下の式で計算できます.

$$\Delta t_0 = \text{initial\_cfl} \cdot \min\left(\frac{\Delta x^2}{D_a^c}, \frac{\Delta x^2}{D_\gamma^c}\right)$$

$$\Delta t_{\max} = \text{max\_cfl} \cdot \min\left(\frac{\Delta x^2}{D_a^c}, \frac{\Delta x^2}{D_\gamma^c}\right)$$



The screenshot shows a window titled "setting new project" with a tabbed interface. The "time" tab is selected. The window contains the following text and input fields:

- Project name
- grid
- phase
- carbon
- iteration
- time (selected)
- temperature
- tecplot
- annealing

時間とその刻み幅に関する情報を設定します

|                     |                                    |
|---------------------|------------------------------------|
| 開始時間(sec)           | <input type="text" value="0.0"/>   |
| 終了時間(sec)           | <input type="text" value="100.0"/> |
| 初期CFL               | <input type="text" value="0.1"/>   |
| 最大CFL               | <input type="text" value="100.0"/> |
| CFLが10倍になるのに要する計算回数 | <input type="text" value="500"/>   |

before next

図 1.7 時間設定画面

## ■ [temperature]タブ

時間による温度の変化を設定します.

図 1.8 の例では時刻 0 sec で温度が 1080K, 時刻 100 sec で 980K, この間は線形処理されます. 100 秒間に 100K, すなわち毎秒 1K/sec の温度勾配で減少させていきます. 図 1.9 は時間, 温度のデータを 4 組指定したときの温度変化の様子を表しています.



図 1.8 温度設定画面

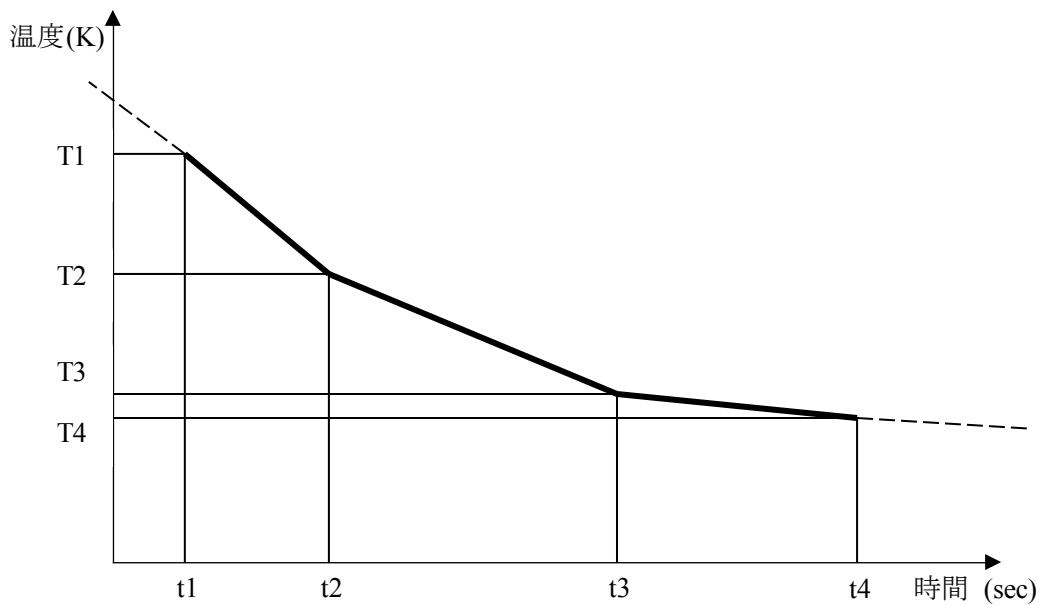


図 1.9 時間による温度変化

#### ■ [tecplot]タブ

解析結果を出力する際の設定を行います。図 1.10 のように出力したいデータにチェックを入れてください。また、何回計算するごとにデータ出力するかを入力してください。



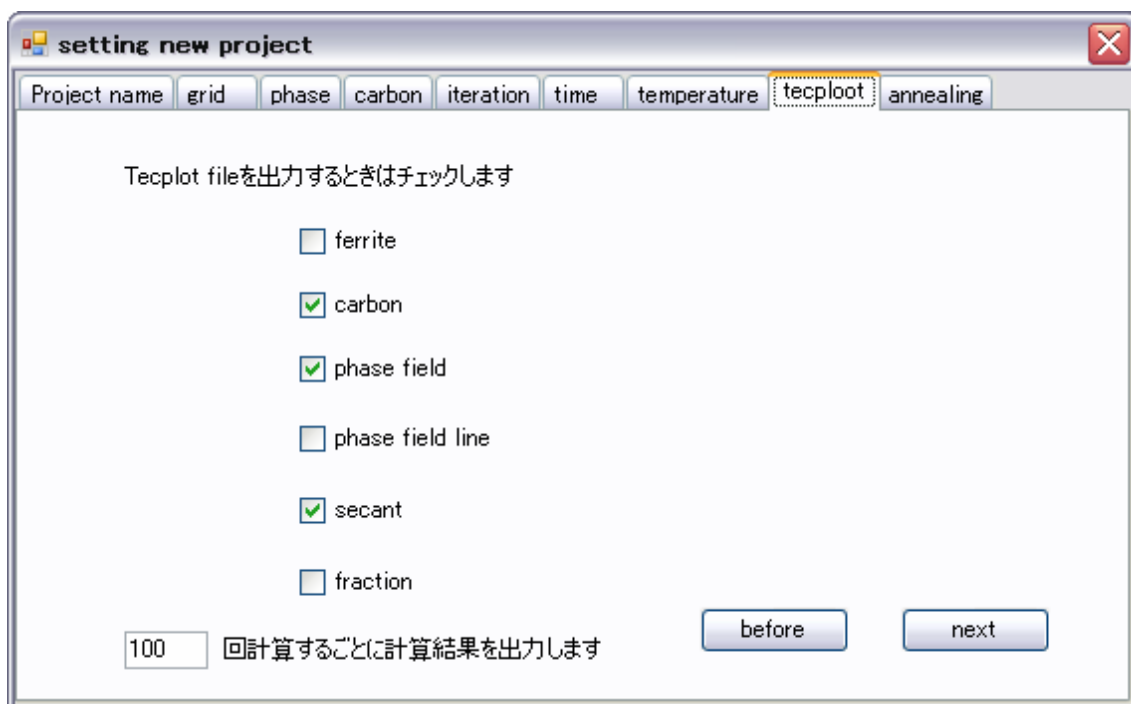


図 1.10 Tecplot 設定画面

### ■ [annealing]タブ

ここでは、phase field の界面における振る舞いを滑らかにするための予備計算（アニーリング）と閾値(Threshold)について設定を行います。アニーリングでは本計算で行う phase field の計算から自由エネルギーの項を除いたものを用いて計算します。そのときの時間間隔  $\Delta t_{ann}$  を以下で見積もります。

$$\Delta t_{ann} = \frac{\Delta x^2}{\mu_{\alpha\gamma}(T)\sigma} F_{ann}$$

ここで、 $\mu_{\alpha\gamma}$  は図 1.4 における  $\alpha/\gamma$  の移動度、 $\sigma$  は“surface energy”を表します。まず、図 1.11 にある[Annealing]でアニーリングの回数を設定してください。[factor]については、上式の  $F_{ann}$  に当たる数値を設定してください。

次に [Threshold]の eps1 と eps2,eps3 を用いて Phase field のメモリ上への割り当てに関する閾値を設定します。Phase 秩序変数  $\phi$  について以下の式が満たされるときに、 $\phi_{i,j}$  をメモリから削除します。ここで  $i,j$  はグリッド上の場所を表すサフィックスです。eps2 と eps3 の様子を図 1.12 に表します。

$$\sqrt{(\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j})^2 + (\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j-1})^2} < \text{eps1} \quad \text{かつ} \quad \phi_{i,j} > \text{eps2}$$

或いは

$$\sqrt{(\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j})^2 + (\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j-1})^2} < \text{eps1} \quad \text{かつ} \quad \phi_{i,j} < \text{eps3}$$

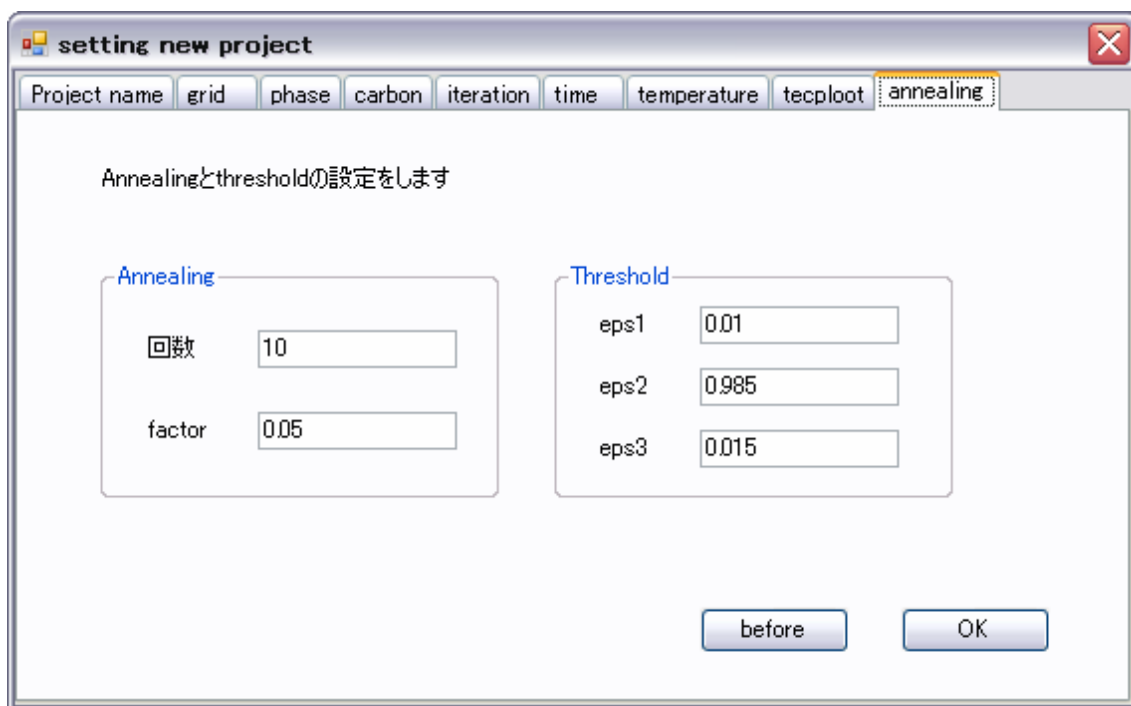


図 1.11 アニーリングと閾値の設定画面

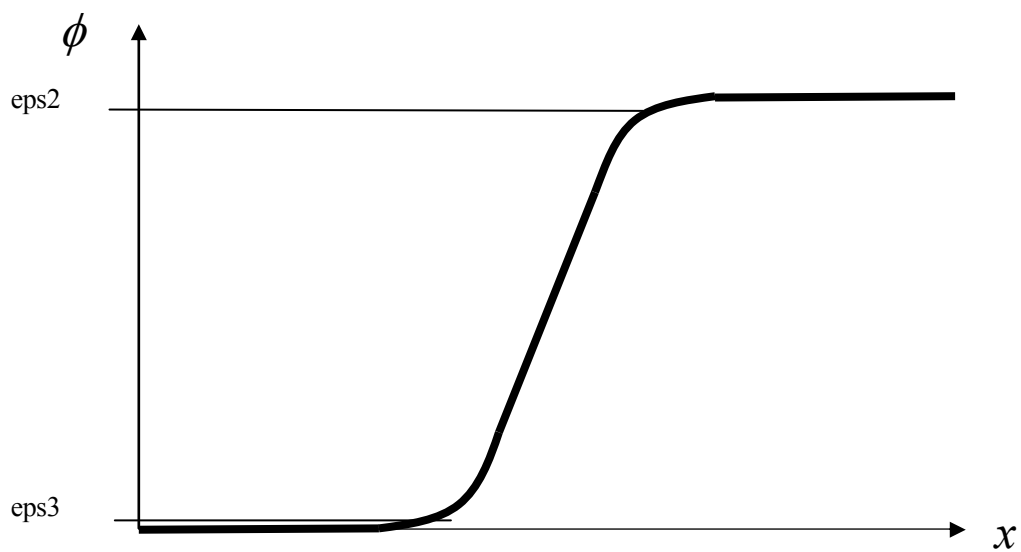


図 1.12 閾値

## 2. 解析実行

メニューバーの[Compute]—[Start]をクリックして計算を実行して下さい(図 2.1)。計算が始まります。以前の計算結果を用いて途中から開始する場合は、[Restart]をクリックして下さい。解析の最中もマウスで画面の結晶図を3次元的に動かすことが可能です。

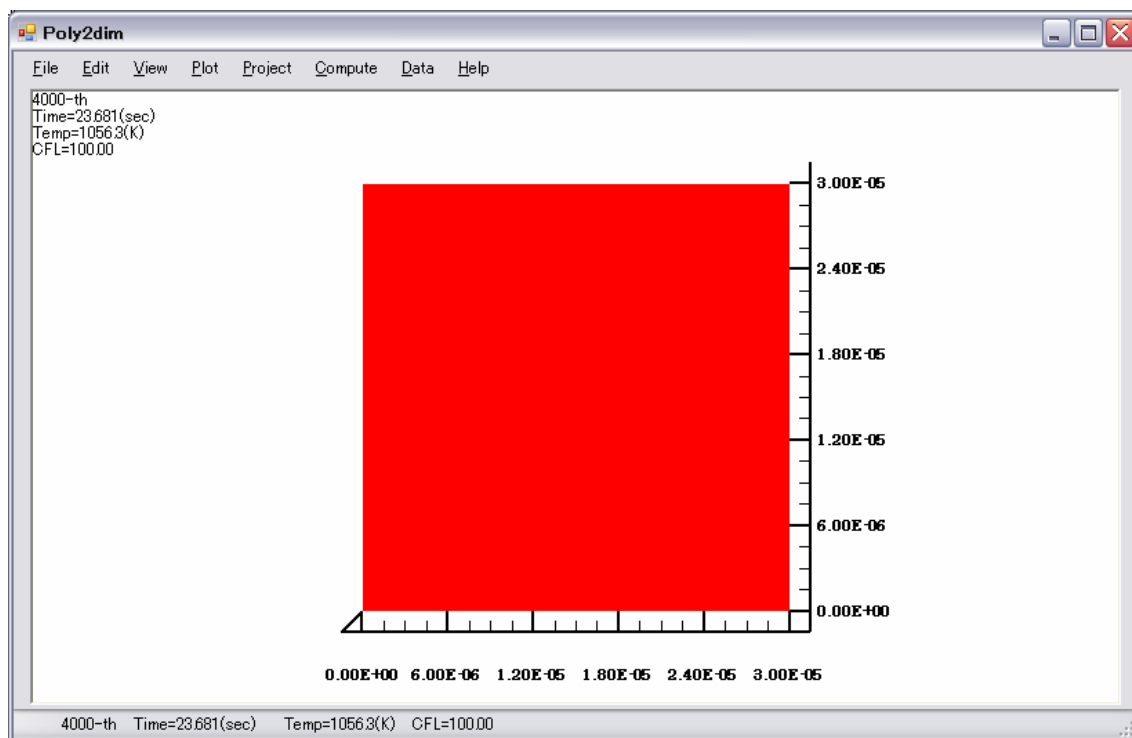


図 2.1 解析実行直前画面

計算途中にメニューバーの[Plot]—[Carbon]を選択すると、炭素濃度分布の途中経過を表示できます(図 2.2)。また、[Plot]—[Phase Field]ボタンをクリックすると $\gamma \rightarrow \alpha$ 相変態の様子が描画されます(図 2.3)。

すべての計算が終了したときの炭素濃度分布、および $\alpha/\gamma$ 相の様子が図 2.4, 図 2.5 です。図 2.4 において、緑色の部分は炭素濃度が高いことを表しています。図 2.5 の緑色の部分は結晶粒界を表します。

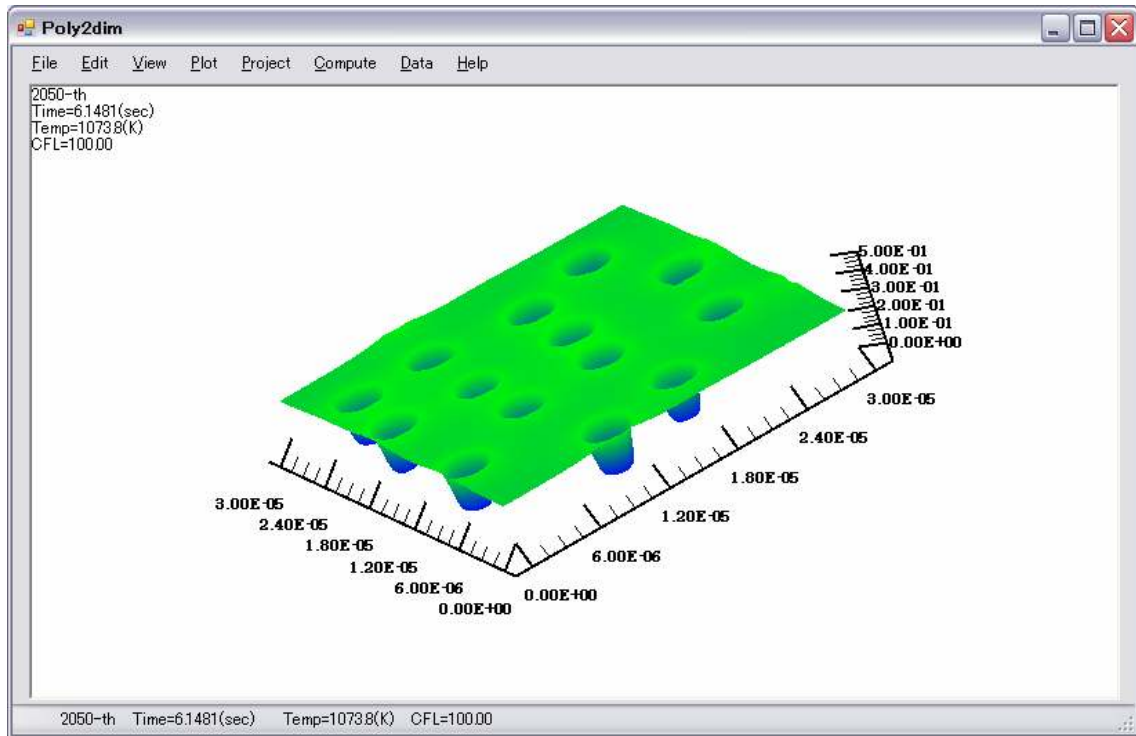


図 2.2 炭素濃度分布の途中経過

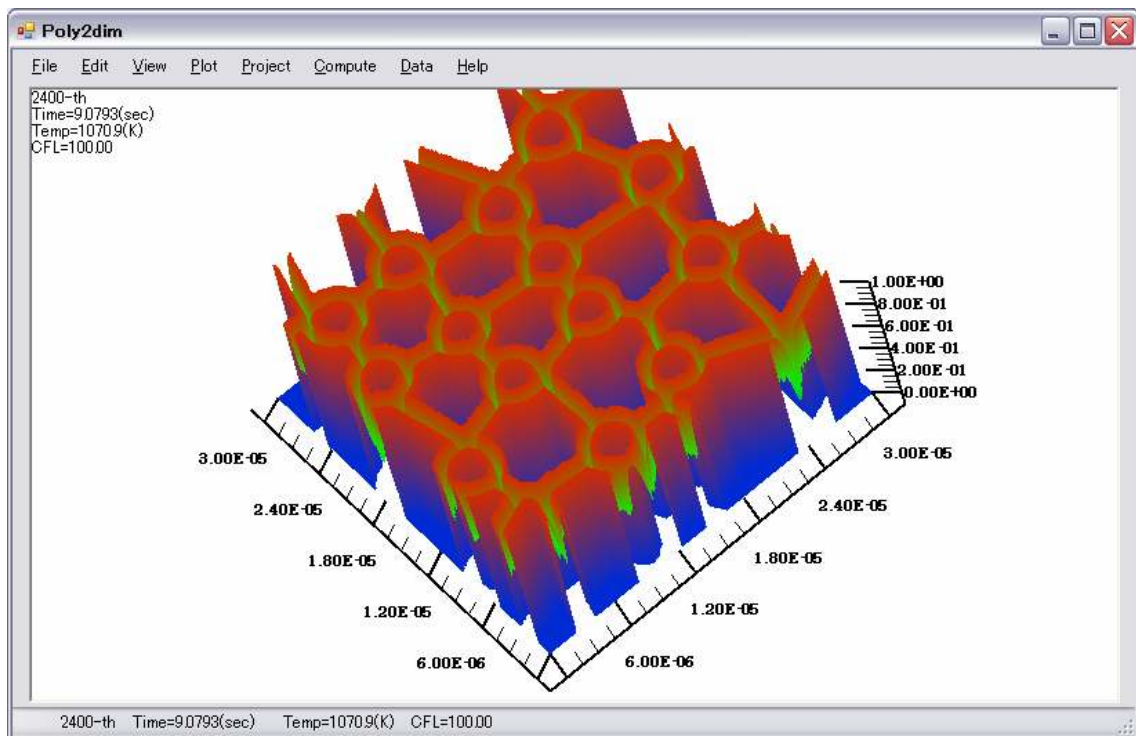


図 2.3 Phase Field

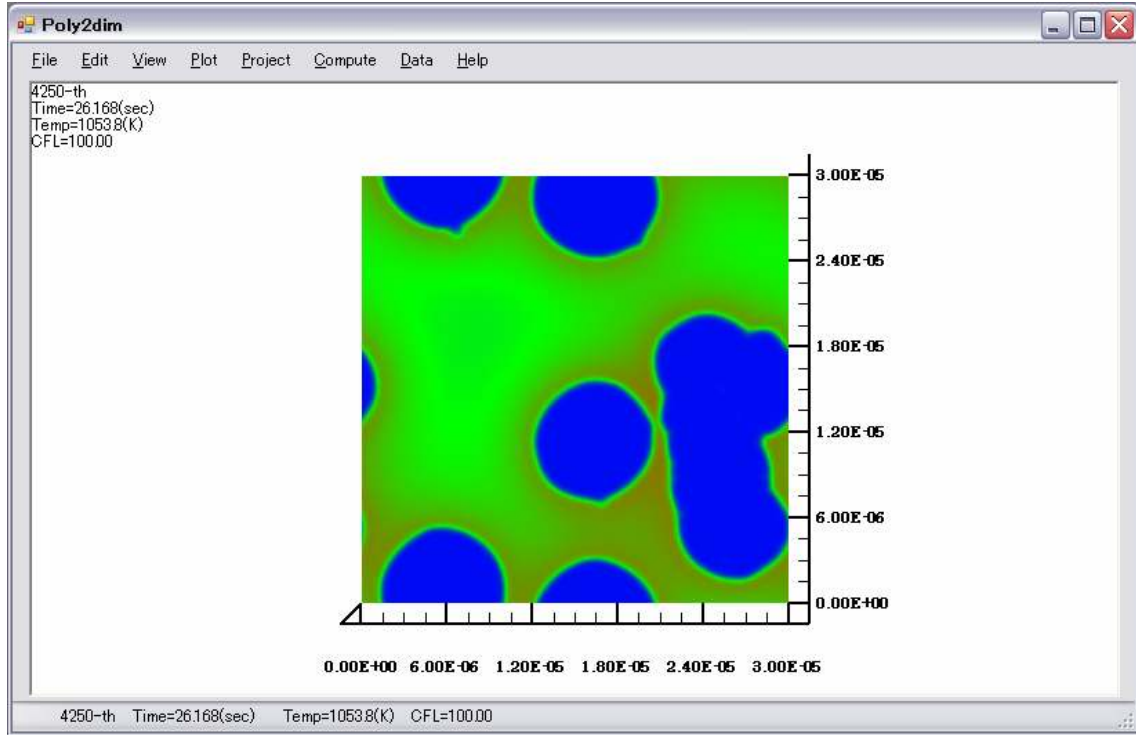


图 2.4 炭素濃度分布

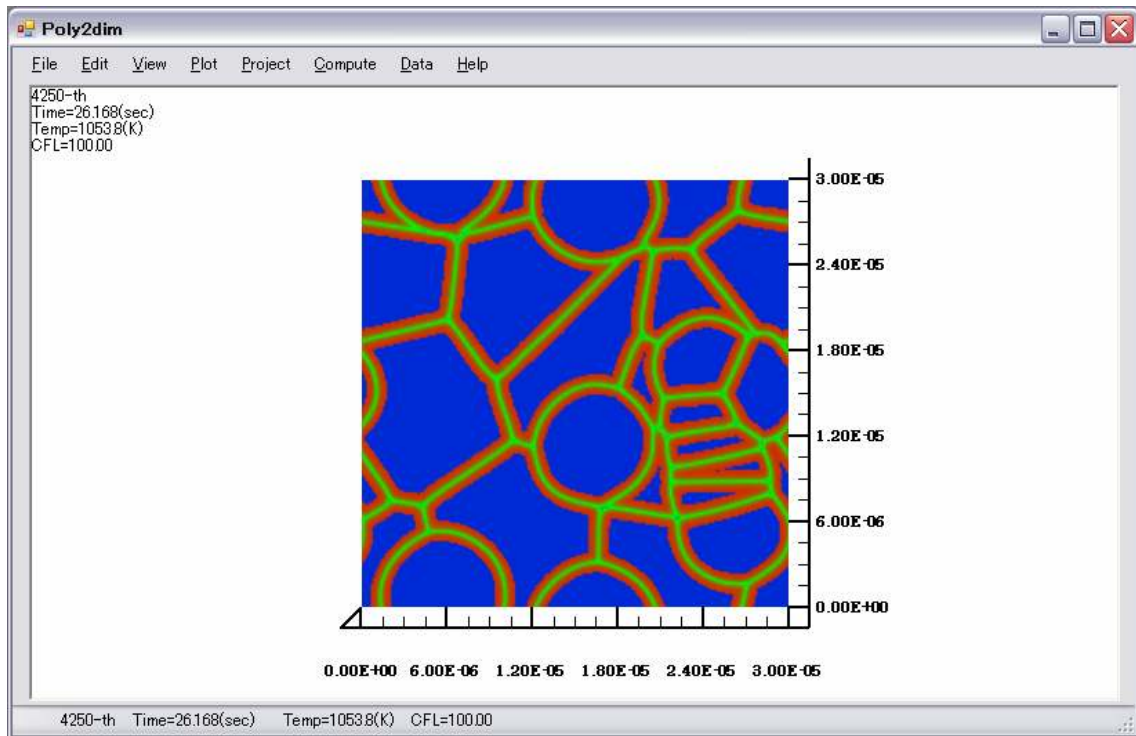


图 2.5 Phase Field

[Plot]—[Cross-Section]をクリックすると“Cross Section Viewer”画面が表示されます。ここでは結晶中の任意の2点を結んだ直線上の炭素濃度分布を表示することができます。2点はユーザーが任意に選ぶことができます。図2.6の  内を2点マウスでクリックして下さい。●—●で表示される線上での炭素濃度分布が下部に表示されます。縦軸が%で横軸が[m]のスケールになります。“resolution”のボックスに数字を入力して[set]ボタンを押して下さい。数字を大きくすると解像度が低くなります。

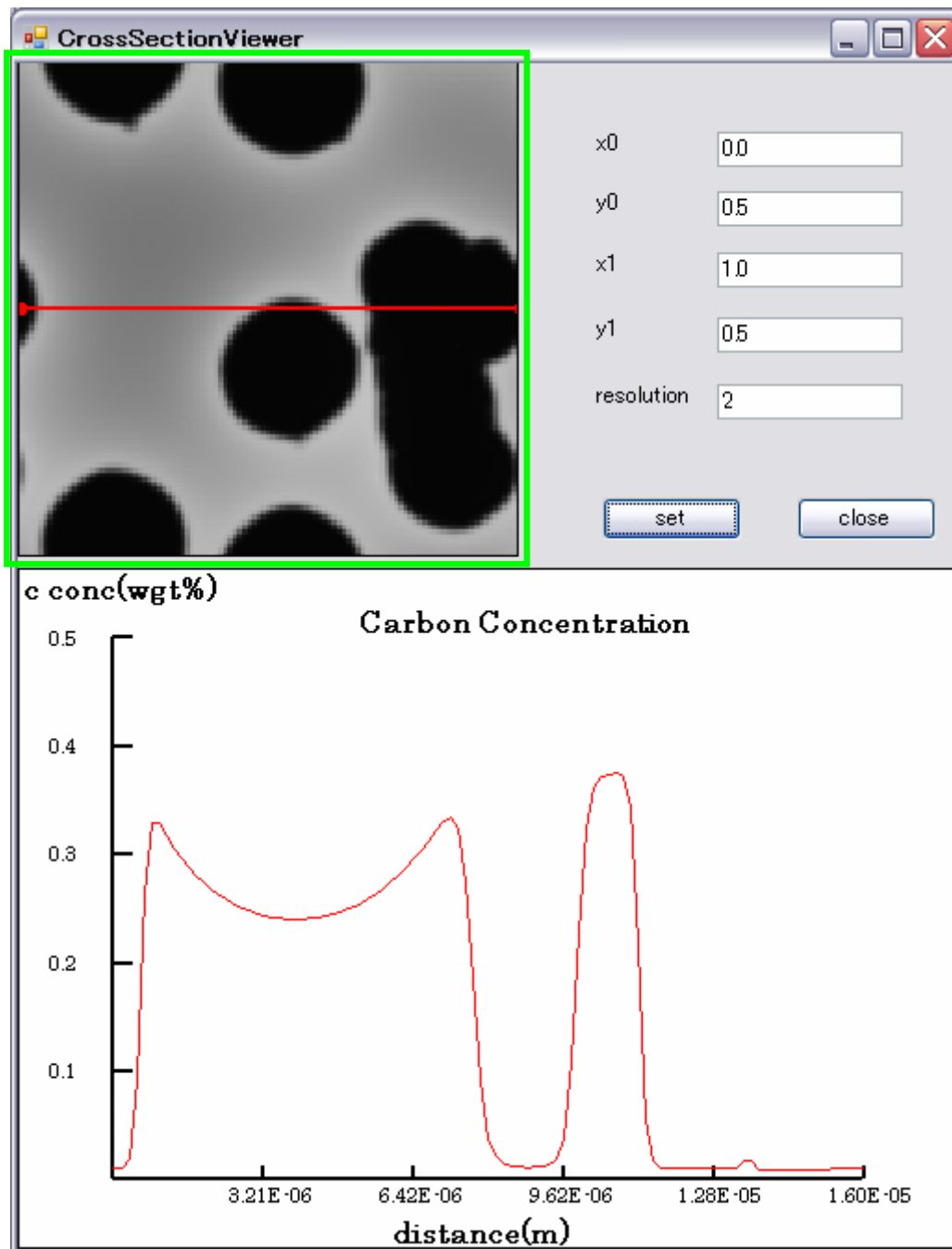


図 2.6 Cross Section Viewer

[Plot]—[Stress-Strain]をクリックすると応力—ひずみ分布を表示します。

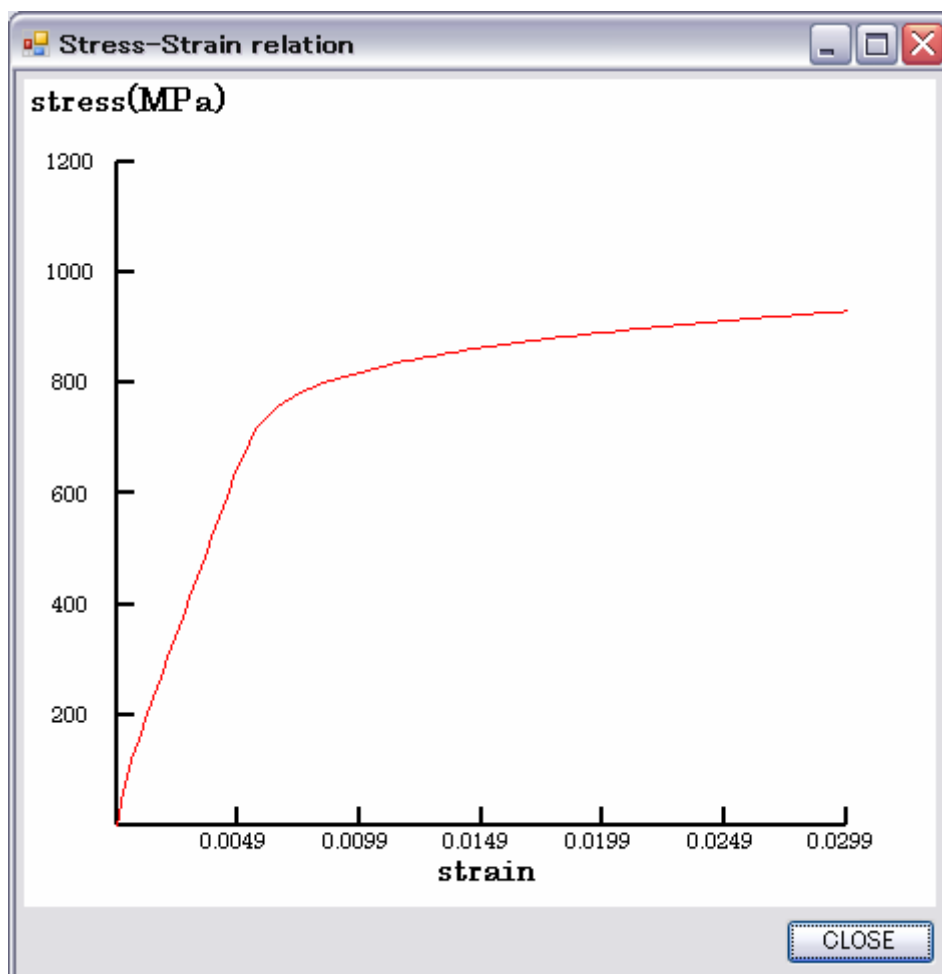


図 2.7 応力—ひずみ曲線