

Phase Field法による固相焼結シミュレーションのご提案

Advanced Algorithm & Systems

Phase Field 法を固相焼結シミュレーションに応用させる目的として調査いたしました。その結果を踏まえて、プログラム開発等のご提案をさせていただきます。

1. Phase field 法の概略
2. 固相焼結シミュレーションへの応用
3. ご提案
4. 納品物
5. 作業工程

1. Phase field法の概略

Phase Field法は、熔融・凝固や相変態など界面が移動するようなモデルにおいて威力を発揮する解析手法で、合金などの固体内での組織の挙動を熱力学をベースに組織の形成過程をシミュレーションします。物質を形成するプロセスで温度や圧力を管理することで非常に優れた特性を示す物質を作り出すことができます。それを決定する重要なファクターの一つとして物質を形成する相 (Phase) の間の幾何学的関係があります。ここで相と相の境界のダイナミクスは、隣接する相間の自由エネルギー、弾性エネルギーなどにより決定され、それは相のフロントが進行する速度、相境界の曲率の間に成立する関係を満たしながら時間発展していくと見ることができます。このようにして時間発展した結果得られる相の幾何学的特質をあらゆる条件でコンピュータにより計算予測し 実際の物質設計のためのツールとして役立つことが出来ます。ここで得られる知見はナノスケールの構造の材料設計には有力なものです。このようにPhase Field 法は凝固過程や固相結晶成長、相変態などの界面移動を伴う現象の解析及びそれを応用する材料設計に用いられるものです。以下にその基礎となる考え方を示します。

具体的には、不連続に変化する異なる二層を連続な関数 (Phase Field 変数 ϕ) を用いて滑らかに接続し、その関数を用いることで界面の数学的取り扱いを可能にします。物理的にその基礎となる考え方は、Cahn-Hilliard の扱いで取り入れられた界面拡散モデルで Ginzburg-Landau 型のエネルギー形式を考えます。

$$F[\phi] = \int_V \left\{ f(\phi, c, T) + \frac{\varepsilon_\phi^2}{2} |\nabla \phi|^2 + \frac{\varepsilon_c^2}{2} |\nabla c|^2 \right\} dV \quad (1)$$

関数 $f(\phi, c, T)$ は系の化学的自由エネルギー密度で、現在はよりモデル化され二重井戸型ポテンシャルにて定義されます。第2項と第3項は界面の存在に起因する勾配エネルギー、 ε は

その係数です。ここで重要となってくる秩序変数 ϕ は、相の局所的な存在確率を表します。変域は $0 \leq \phi \leq 1$ で、 $\phi=1$ が第I相、 $\phi=0$ が第II相を表します。例えば、凝固過程を見る場合では $\phi=1$ が固相、 $\phi=0$ が液相となります。もう一方の秩序変数 c は濃度を表し、このエネルギー形式を基にして、全系の時間発展を記述する方程式を解きます。この自由エネルギーが最小化される平衡状態において二相が分離・共存します。ここで、系の全自由エネルギー F の減少率が最大になる方向へ進み、その速さはエネルギー勾配に比例すると仮定します。その発展方程式は、

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -L \frac{\delta F}{\delta \phi} \quad (2)$$

で与えられ、右辺の汎関数微分 $\delta F / \delta \phi$ がエネルギーの勾配にあたります。 L はKinetic係数と界面幅で関係付けられる係数です。実際に問題となるのはこの求め方で、 ϕ に関する偏微分方程式を空間に関して離散化して、時間に対する前進差分法で数値計算します。

次に、濃度場 c についても同様に時間発展を考えます。連続の式から以下の拡散方程式が得られます。

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot \left(D c(1-c) \nabla \frac{\delta F}{\delta c} \right) \quad (3)$$

D は拡散係数で、ここでは第I相中と第II相中の拡散係数を含みます。式(2)、(3)を解くことにより、場の変数 ϕ 、 c の時間的、空間的な発展を求めることができます。

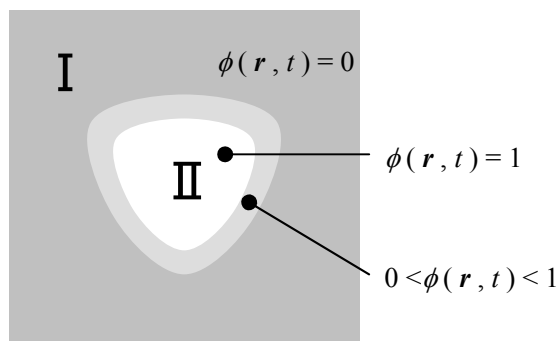


Fig.1

2. 固相焼結シミュレーションへの応用

焼結についてですが、固体の粉体を高温(ただし融点以下)に加熱した場合、粉末の粒子が相互に結合し緻密な多結晶体となる現象です。この現象をシミュレーションするためにPhase Field法をすることを考えます。

まず、式(1)と同様に、空間と時間の秩序変数として、質量密度 $\rho(\mathbf{r}, t)$ と粒子 α の存在確率を表す $\eta(\mathbf{r}, t; \alpha = 1, 2, \dots, N)$ (N : 全粒子数)を導入し、系の自由エネルギーを以下のように書くことができます。

$$F[\rho] = \int_V \left\{ f(\rho, \{\eta(\alpha)\}, T) + \frac{1}{2} \beta_\rho |\nabla \rho|^2 + \sum_\alpha \frac{1}{2} \beta_\eta |\nabla \eta(\alpha)|^2 \right\} dV \quad (4)$$

質量密度 ρ は $0 \leq \rho \leq 1$ で表されます. 例えば, 粒子 α について η は $\{\eta(\alpha=1, 2, \dots, N)\}_{\rho=1} = \{1, 0, \dots, 0\} = \{0, 1, \dots, 0\} = \dots = \{0, 0, \dots, 1\}$ と表されます. このエネルギーについての変分を求め方程式を求めます. ここでは粒子の並進, 回転を含めた移流項とランジュバンノイズを付加した移流拡散方程式を以下のように表すことができます.

$$\frac{\partial \eta(\alpha)}{\partial t} = -L \frac{\delta F}{\delta \eta(\alpha)} - \nabla \cdot [\eta(\alpha) \mathbf{v}_{\text{adv}}(\alpha)] + \zeta_\eta(\mathbf{r}, t; \alpha) \quad (5)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot \left(D \nabla \frac{\delta F}{\delta \rho} - \rho \mathbf{v}_{\text{adv}} \right) + \zeta_\rho(\mathbf{r}, t) \quad (6)$$

上式における, $\nabla \cdot [\eta \mathbf{v}_{\text{adv}}]$, $\nabla \cdot [\rho \mathbf{v}_{\text{adv}}]$ がそれぞれ移流項にあたります. ノイズ項 $\zeta_{\eta(\rho)}$ は熱揺らぎの効果で以下を満たすものとします.

$$\begin{aligned} \langle \zeta(\mathbf{r}, t) \rangle &= 0 \\ \langle \zeta_\alpha(\mathbf{r}, t) \zeta(\mathbf{r}', t') \rangle &= 2k_B T L_\alpha \delta(t - t') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \end{aligned} \quad (7)$$

拡散係数 D については, 粒塊内部, 蒸気, 表面周回, 結晶粒界の拡散を合わせたもの考えます[Fig.2]. 結晶には方向依存性を考慮しますが, その結晶方位をグループ化し結合させます.

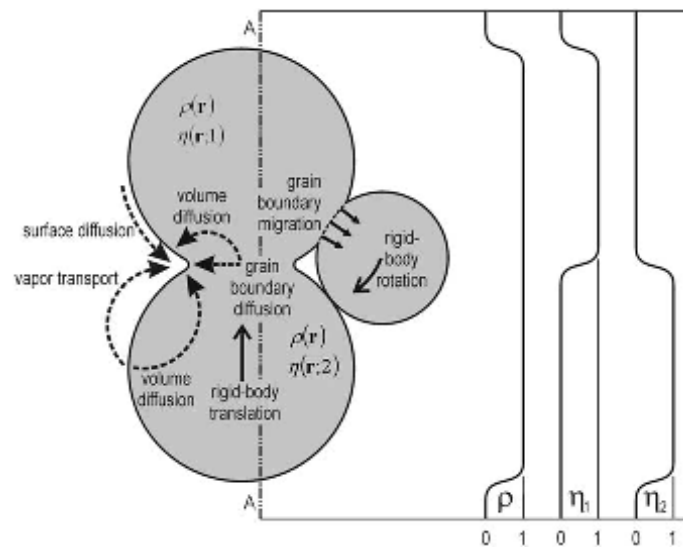


Fig.2

参考文献

- [1] M.G.Mecozzi, J.Sietsma, S.van der Zwaag, M.Apel, P.Schaffnit, and I.Steinbach, Metal.Mater. Trans. A, 36A, 2327-2340, (2005)
- [2] Yu U.Wang ; Acta mater, **54**, 953-961 (2006)
- [3] Long-Qing Chen, Wei Yang ; Phys. Rev. B, 50(21), 15752, (1994)

3. ご提案

固相焼結シミュレーションを目的として、弊社の Phase Field ソフトをカスタマイズいたします。弊社ソフトの特徴といたしましては、弾性ひずみエネルギーを考慮することで、結晶構造による異方性を情報として取り込んだ解析を行うことができます。

解析ソルバーの改良部分としては、大きく以下の内容が挙げられます。

- ・各粒子について移流ベクトル（並進，回転）の追加。
- ・粒塊，蒸気，表面，結晶粒界の拡散について。
- ・ランジュバンノイズの効果。

以上に基づいて計算ソルバー，パラメータ入力画面，データ出力等をカスタマイズさせていただきますと考えております。また，対象となる系や現象に対してパラメータを調整する必要がありますので，その基礎解析も合わせてご提案いたします。

4. 納品物

- ・ソフト
- ・操作マニュアル
- ・基礎解析の結果

5. 作業工程

- 1) お客様との打ち合わせにより，解析現象，プリポスト処理等の決定。
- 2) プログラム開発（設計・コーディング・デバッグ）。
- 3) 基礎解析，結果報告書の作成。
- 4) マニュアル作成

工程		工数 [人月]	(小計) [人月]
準備	お打ち合わせ	1.0	1.0
プログラム開発	プログラム設計	1.0	3.0
	ソルバー部分	1.0	
	インターフェイス部分	1.0	
基礎解析	準備	0.5	1.5
	解析	0.5	
	資料作成	0.5	
マニュアル作成	操作マニュアル	0.5	0.5

合計:6.0 人月

以上