

# Phase-field 法を基盤とした合金の 凝固組織予測に関する研究

## 学位論文内容の要旨

鋳造は、数ある金属成形法の中で最も容易に複雑形状の製品を作り上げることのできる優れた成形法であり、製品重量の制限がほとんど無く、少数多品種生産から大量生産まで多種多様な製品の製造が可能である。そのため、人類は古来より鋳造技術を会得し様々な金属製品の製造を行い、より高品質なものへの要求が高まってきた。しかし、鋳造品の高品質化に伴う鋳造欠陥の抑制には、新製品の開発や品質制御などにおいて大きなコストがかかり、必然的に高級化が進んでしまう。そこで、コスト削減のために鋳造工場でもコンピュータの導入が進められ、製品の管理、装置・機械の制御ばかりでなく、コンピュータによる支援設計(CAD)、支援製造(CAM)、さらには、支援エンジニアリング(CAE)によって製品行程の解析や設計が行われている。この CAE では、従来の経験やデータをコンピュータに取り込み、データベース化して利用することによるエキスパートシステムの利用の検討や、鋳造・凝固の過程をコンピュータの中で再現して結果を予測する凝固プロセスシミュレーション法の開発が行われている。特に、凝固プロセスシミュレーションでは、凝固伝熱シミュレーション、湯流れシミュレーションを初めとして多様なシミュレーション法の研究が進められている。

そこで、本研究ではこのプロセスシミュレーションの中で、近年、重要とされている凝固組織形成シミュレーションに主眼を置き、中でもマイクロ-メソスケールのシミュレーション手法として発展している Phase-field (PF) 法に注目した。PF 法は凝固組織の基本とも言える dendrite を非常に簡単にかつ自然な形態で再現できる手法として発展してきたが、凝固現象に対する複合的な計算例があまり報告されていない。そのため、本研究では、PF 法の種々の凝固現象への幅広い適用性の検討を目的とし研究を進めた。本論文は全 7 章から構成されており、概要は以下の通りである。

第 1 章は、序論であり、工学的背景及び凝固プロセスシミュレーションの現状についてまとめ、本研究の目的について述べた。

第 2 章では、PF 法について説明した。凝固問題に対する PF 法の基本的な考え方を述べ、定量的な PF 計算を行う上で重要となる Phase-field パラメータ  $M$  における Sharp interface limit モデルと Thin interface limit モデルを純物質の PF モデルにより簡潔に説明すると共に、合金系及び多相系の PF モデルについても説明した。そして、PF 法での計算例として、Al-Si 合金における dendrite 成長及び一方向凝固の計算結果を示した。

第 3 章では、凝固組織形成過程において重要となる溶湯流動の影響を考慮した解析モデ

ルを開発し、溶湯流動下でのデンドライト組織形成及び偏向現象について検討した。溶湯流動が伴うことでデンドライトの周りの溶質拡散層が非対称となり、その結果デンドライトの形態も非対称となること、流れの上流側に  $20 \sim 30^\circ$  程度傾いて成長する結晶が最も成長しやすいことが明らかとなった。これらの結果を踏まえ、溶湯流動によって引き起こされる特徴的な組織である偏向組織の形成メカニズムについて検討し、デンドライト偏向及び結晶粒偏向メカニズムを以下のようにまとめた。

- ・デンドライト偏向は、溶湯流動によってデンドライト先端近傍の溶質拡散層が非対称に変化することで、上流側のデンドライト側面の成長速度が増加したために引き起こされる。
- ・結晶粒偏向は、流れに対して垂直の方向に成長するデンドライト群の先端近傍に分断遊離などで形成された遊離等軸晶が付着し、その遊離結晶の中で成長方向が  $20 \sim 30^\circ$  程度傾いた結晶が選択され生き残った結果として起こる。

第4章では、一方向凝固時のセルとデンドライトの成長方向を、成長速度の関数として検討した。これらの検討のためにサクシノニトリルを用いた直接観察と、PF法によるFe-C系合金での数値計算を行った。その結果、無次元化成長方向  $\alpha$  と無次元化成長速度  $V/V_c$  の導入により、いくつかの条件で得られた成長方向に関する実験結果及び計算結果を一貫して説明することができることが明らかとなった。また、PF法による計算結果は実験で得られた関係と定性的に一致し、観察困難な金属での実験を行わなくても、PF法による計算を行うことで必要な合金に対する成長方向と成長速度の関係を見いだすことが可能であることがわかった。

第5章では、PF法の1次元モデルをTLP接合に適用し、長時間プロセスの計算を行いその適用性及び有効性を検討した。PF法での解析モデルは、実験及び従来の移動境界値モデルから得られた結果と良い一致を示し、長時間プロセスへの適用が可能であり、さらにPF法では非平衡過程が計算可能であるため、昇温過程における非平衡な母材溶解現象に対応できることが明らかとなった。

第6章では、PF法とCellular Automaton(CA)法を連成させた2元系及び多成分系合金のマクロ鑄造組織予測モデルを開発し、実験結果と比較することで本モデルのマクロ鑄造組織予測法としての妥当性について検討した。本モデルではCA法におけるデンドライト先端成長動力学にPF法を導入し、さらに伝熱計算にエンタルピー法を採用することで多成分系合金への拡張を試みた。また、核生成モデルには、核生成速度を表す過冷度の  $n$  乗関数を用いることで、核生成モデルの簡便化を図った。その結果、Al-Si 2元合金での計算では、PF-CAモデルとKGT-CAモデルの両モデルで一方向凝固組織が再現できた。また、エンタルピー法を適用した伝熱計算により、鑄造時の多成分系合金の冷却曲線を非常に良く再現でき、多成分系合金に拡張したPF-CAモデルが、主要合金成分を対象とした実用合金の鑄造組織予測法として有効であることが明らかとなった。

第7章は本論文の総括である。

# 学位論文審査の要旨

主 査 教 授 成 田 敏 夫  
副 査 教 授 工 藤 昌 行  
副 査 教 授 毛 利 哲 夫  
副 査 助 教 授 大 笹 憲 一

学 位 論 文 題 名

## Phase-field 法を基盤とした合金の 凝固組織予測に関する研究

近年、鋳造品の高品質化に伴う鋳造欠陥の抑制のために、鋳造・凝固の過程をコンピュータの中で再現して結果を予測する凝固プロセスシミュレーション法の開発が行われている。凝固プロセスシミュレーションでは、凝固伝熱シミュレーション、湯流れシミュレーションを初めとして多様なシミュレーション法の研究が進められている。

本研究ではこのプロセスシミュレーションの中で、近年、急速に発展してきた凝固組織形成シミュレーションに主眼をおき、中でもマイクロ-メソスケールのシミュレーション手法として発展してきた Phase-field (PF) 法に注目した。PF 法は凝固組織の基本とも言える dendrite を非常に簡単にかつ自然な形態で再現できる手法として発展してきたが、凝固現象に対する複合的な計算例があまり報告されていない。そのため、本研究では、PF 法の種々の凝固現象への幅広い適用性の検討を目的とし研究を進めた。本論文は全 7 章から構成されており、概要は以下の通りである。

第 1 章は、序論であり、工学的背景及び凝固プロセスシミュレーションの現状についてまとめ、本研究の目的について述べた。

第 2 章では、PF 法について説明した。凝固問題に対する PF 法の基本的な考え方を述べ、定量的な PF 計算を行う上で重要となる Phase-field パラメータ  $M$  における Sharp interface limit モデルと Thin interface limit モデルを純物質の PF モデルにより簡潔に説明すると共に、合金系及び多相系の PF モデルについても説明した。

第 3 章では、凝固組織形成過程において重要となる溶湯流動の影響を考慮した解析モデルを開発し、溶湯流動下での dendrite 組織形成及び偏向現象について検討した。溶湯流動が伴うことで dendrite の周りの溶質拡散層が非対称となり、その結果 dendrite の形態も非対称となること、流れの上流側に  $20 \sim 30^\circ$  程度傾いて成長する結晶が最も成長しやすいことが明らかとなった。これらの結果を踏まえ、溶湯流動によって引き起こされる特徴的な組織である偏向組織の形成メカニズムについて検討し、dendrite 偏向及び結晶粒偏向メカニズムを以下のようにまとめた。

- ・デンドライト偏向は、溶湯流動によってデンドライト先端近傍の溶質拡散層が非対称に変化することで、上流側のデンドライト側面の成長速度が増加したために引き起こされる。
- ・結晶粒偏向は、流れに対して垂直の方向に成長するデンドライト群の先端近傍に分断遊離などで形成された遊離等軸晶が付着し、その遊離結晶の中で成長方向が  $20 \sim 30^\circ$  程度傾いた結晶が選択され生き残った結果として起こる。

第4章では、一方向凝固時のセルとデンドライトの成長方向を、成長速度の関数として検討した。これらの検討のためにサクシノニトリルを用いた直接観察と、PF法によるFe-C系合金での数値計算を行った。その結果、無次元化成長方向  $\alpha$  と無次元化成長速度  $V/V_0$  の導入により、いくつかの条件で得られた成長方向に関する実験結果及び計算結果を一貫して説明することができることが明らかとなった。また、PF法による計算結果は実験で得られた関係と定性的に一致し、観察困難な金属での実験を行わなくても、PF法による計算を行うことで必要な合金に対する成長方向と成長速度の関係を見いだすことが可能であることがわかった。

第5章では、PF法の1次元モデルをTLP接合に適用し、長時間プロセスの計算を行いその適用性及び有効性を検討した。PF法での解析モデルは、実験及び従来の移動境界値モデルから得られた結果と良い一致を示し、長時間プロセスへの適用が可能であり、さらにPF法では非平衡過程が計算可能であるため、昇温過程における非平衡な母材溶解現象に対応できることが明らかとなった。

第6章では、PF法とCellular Automaton (CA)法を連成させた2元系及び多成分系合金のマクロ鑄造組織予測モデルを開発し、実験結果と比較することで本モデルのマクロ鑄造組織予測法としての妥当性について検討した。本モデルではCA法におけるデンドライト先端成長動力学にPF法を導入し、さらに伝熱計算にエンタルピー法を採用することで多成分系合金への拡張を試みた。また、核生成モデルには、核生成速度を表す過冷度の  $n$  乗関数を用いることで、核生成モデルの簡便化を図った。その結果、Al-Si 2元合金での計算では、PF-CAモデルとKGT-CAモデルの両モデルで一方向凝固組織が再現できた。また、エンタルピー法を適用した伝熱計算により、鑄造時の多成分系合金の冷却曲線を非常に良く再現でき、多成分系合金に拡張したPF-CAモデルが、主要合金成分を対象とした実用合金の鑄造組織予測法として有効であることが明らかとなった。

第7章は本論文の総括である。

これを要するに、著者はPhase-field法の実際の凝固現象への新しい適用法を提案し、凝固組織予測法としての高いポテンシャルを実証したもので、材料工学に対して寄与するところ大なるものがある。よって著者は、北海道大学博士(工学)の学位を授与される資格あるものと認める。