

# 対流によるデンドライトフラグメンテーション解明のためのPF-LBシミュレーション

PF-LB Simulation for Investigating Dendrite Fragmentation due to Convection

黒田凱世<sup>1)</sup>, 坂根慎治<sup>2)</sup>, 高木知弘<sup>3)</sup>

Kaisei Kuroda, Shinji Sakane and Tomohiro Takaki

1) 学(工) 京都工芸繊維大学大学院 工芸科学研究科 機械物理学専攻 (〒606-8585 京都府京都市左京区松ヶ崎橋上町, E-mail: kuroda.kaisei6373@gmail.com)

2) 博(工) 京都工芸繊維大学 機械工学系 准教授 (〒606-8585 京都府京都市左京区松ヶ崎橋上町, E-mail: sakane@kit.ac.jp)

3) 博(工) 京都工芸繊維大学 機械工学系 教授 (〒606-8585 京都府京都市左京区松ヶ崎橋上町, E-mail: takaki@kit.ac.jp)

Liquid flow plays an important role in dendrite fragmentation during alloy solidification. In this study, we investigate the effect of liquid flow on dendrite morphology through three-dimensional directional solidification simulations of a binary alloy using the phase-field lattice Boltzmann method.

**Key Words:** Phase-field lattice Boltzmann model, Dendrite fragmentation, Convection, Solidification

## 1. 緒言

金属製品の多くは製造過程で凝固を伴い、この際にデンドライトと呼ばれる樹枝状結晶が液相中で成長する。条件によっては、デンドライト成長時に枝が根元から切り離される、デンドライトフラグメンテーションと呼ばれる溶断現象が生じる。これは結晶粒の微細化を促し、金属製品の機械的特性に大きな影響を与えるため、重要な現象の一つである。合金凝固過程のX線その場観察実験において、対流による熱及び溶質の輸送が溶断現象を誘発することが示唆されているが[1]、液相流動を直接観察することは困難であり定量的な評価には至っていない。そのため、現象解明のためには数値シミュレーションによる評価が不可欠であるが、計算コストの観点から未だに数値計算で液相流動による溶断現象は再現できていない。我々のグループでは、adaptive mesh refinement (AMR)法とgraphic processing unit (GPU)の複数並列計算を組み合わせた高性能計算手法を開発し、phase-field (PF)法と格子ボルツマン(LB)法を連成したPF-LBモデルを用いて、液相流動を伴う二元合金の大規模凝固シミュレーションを達成した[2, 3]。

本研究では、液相流動を伴う二元合金の大規模一方向凝固シミュレーションを行い、対流による物質輸送がフラグメンテーションやデンドライト形態変化に与える影響を評価する。

## 2. シミュレーションモデル

二元合金の一方向凝固時に成長するデンドライトを対象とする。デンドライト成長は二元合金凝固の定量的PF

モデル[4]を、液相流動は二緩和時間LB法[5]を用いてそれぞれ表現する。また、計算高速化のため、3次元計算領域を八分木構造に基づき分割するブロック構造AMR法[6]を用いる。ここで、まず計算領域を粗い立方ブロックに分割する。このブロックを分割レベル0、レベル0ブロックを八分割するごとに分割レベルが1増加すると定義する。その後、最大分割レベル $l_{\max}$ を設定し、PF界面領域にレベル $l_{\max}$ ブロックが割り当てられるまでブロックを再帰的に八分割する。また、その他の領域では隣接するブロック間のレベル差が1以下になるようにブロックを割り当てる。ブロック分割後、各ブロックに $N_{\text{PF}} \times N_{\text{PF}} \times N_{\text{PF}}$ ,  $N_{\text{LB}} \times N_{\text{LB}} \times N_{\text{LB}}$ 数値格子を割り当てそれぞれの格子点上でPF計算とLB計算を行う。本研究では、各ブロックに $N_{\text{PF}}^3 = 12^3$ ,  $N_{\text{LB}}^3 = 6^3$ 格子を割り当てる。

材料はAl-3wt%Cu合金、計算領域は $200 \times 550 \times 10000 \mu\text{m}^3$ とした。計算領域底部中央に半球状の固相核を一つ配置して計算を開始する。凝固条件は、 $z$ 方向に一定の温度勾配 $G = 2 \text{ K/mm}$ を与え、冷却速度 $R = 0.2 \text{ K/s}$ とした。また、 $z$ 方向重力加速度を $g_z = -g_0, -5g_0$  ( $g_0 = 9.81 \text{ m/s}^2$ )と変化させ対流の強さを変えることで、デンドライト形態に与える影響を評価する。格子サイズはレベル0~3までの4段階とし、最小の格子サイズ $\Delta x_{\text{Lv.3}}^{\text{PF}} = 0.52 \mu\text{m}$ ,  $\Delta x_{\text{Lv.3}}^{\text{LB}} = 2\Delta x_{\text{Lv.3}}^{\text{PF}}$ とした。時間増分は $\Delta t = 1.29 \times 10^{-5} \text{ s}$ とした。

## 3. シミュレーション結果

Fig. 1は、 $z$ 方向の重力加速度を(a)  $g = -g_0$ , (b)  $g = -5g_0$ と変化させて計算を行った結果である。計算領域下部を拡大して表示している。灰色の曲面がPF変数 $\phi = 0$ の等値面

を示し、溶質濃度を色で、液相流動を矢印で示している。(a)と(b)のデンドライト形態を見比べると、(b)のデンドライト二次アームが(a)に比べ全体的に細くなっていることが確認できる。

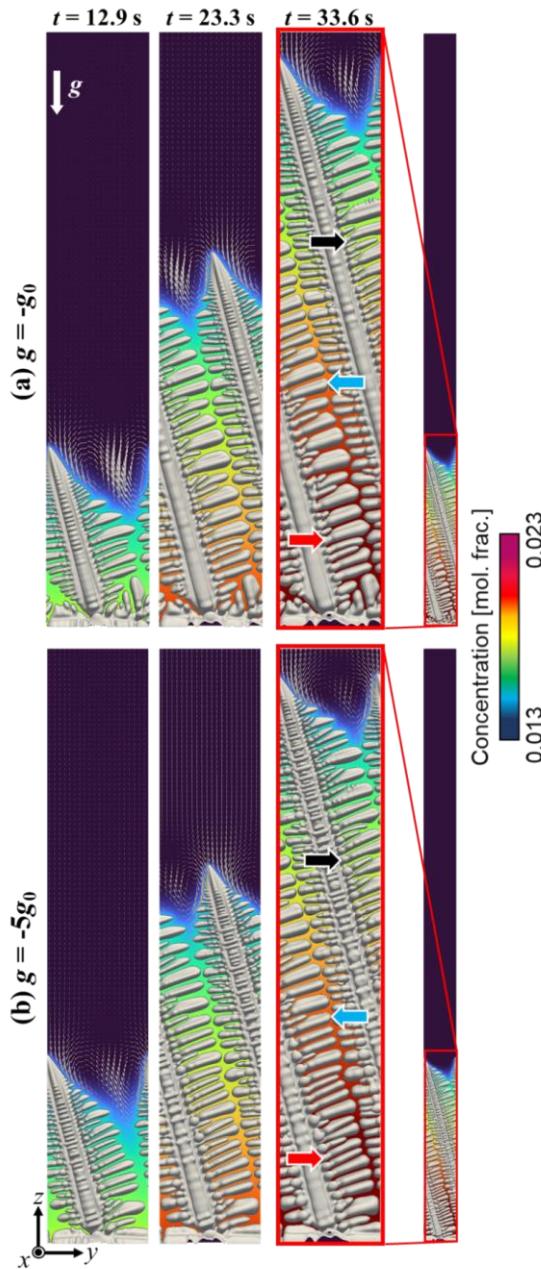


Fig. 1 Time slices of dendrite growth process at  $t = 12.9$  s ( $1.0 \times 10^6$ th step),  $23.3$  s ( $1.8 \times 10^6$ th step), and  $33.6$  s ( $2.6 \times 10^6$ th step) for (a)  $g = -g_0$  and (b)  $g = -5g_0$ .

また、Fig. 2はFig. 1の $t = 33.6$  sのスナップショットに赤、青、黒の矢印で示すアームの根本断面積の時間変化を、それぞれ赤、青、黒の線で示した図である。実線は $g = -g_0$ 、破線は $g = -5g_0$ を示している。いずれの曲線も、初め急激に立ち上がり、あるところで勾配が小さくなり、ほぼ一定の勾配を維持した。曲線の勾配が変化したあとは、 $g = -g_0$ と $g = -5g_0$ のそれぞれ3本の曲線の勾配はほぼ同じとなり、また、 $g = -g_0$ の方が、勾配が大きくなっていることが確認できる。

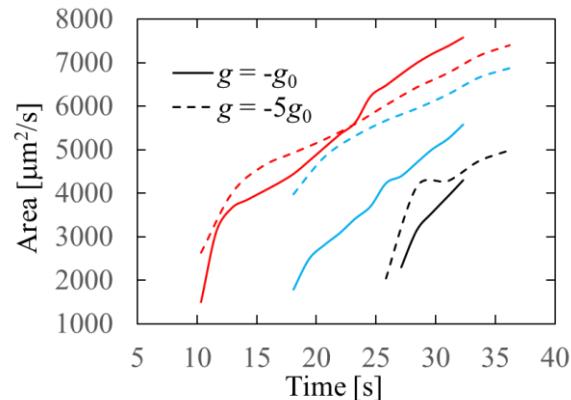


Fig. 2 Variations in the cross-sectional area of dendrite arm root (red, blue and black arrow in Fig. 1) under the conditions  $g = -g_0$  and  $g = -5g_0$ .

#### 4. 結言

本研究では、対流を伴うデンドライト一方向凝固シミュレーションを行い、重力加速度を変更させることで自然対流の強さを変更しデンドライト形態変化を比較した。デンドライトフラグメンテーションは見られなかったが、対流の強さが変わると二次アーム断面積の増加速度が変わることがわかった。

#### 参考文献

- [1] J.W. Gibbs et al., JOM 68 (2016) 170-177.
- [2] T. Takaki, S. Sakane and R. Suzuki, IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 1281 (2023) 012056.
- [3] T. Takaki, S. Sakane and T. Aoki, ISIJ Int. 63 (2023) 83-90.
- [4] M. Ohno, K. Matsuura, Phys. Rev. E, 79 031603 (2009)
- [5] S. Sakane, T. Takaki, Comput. Mater. Sci., 186 (2021)
- [6] S. Sakane, T. Aoki and T. Takaki, Comput. Mater. Sci., 211 (2022) 111542