発 行 所 日本機械学会 計算力学部門
お問合せ 03-3560-3501

ISSN 1340-6582

日本機械学会 計算力学部門

CMD Newsletter

COMPUTATIONAL MECHANICS

計算力学部門ニュースレター No.53

April, 2015

目次

・特集：フェーズフィールド法

フェーズフィールド法の基礎と最近の動向……高木知弘（京都工芸繊維大学）……2

エクサスケールのフェーズフィールド法の大規模計算……青木尊之（東京工業大学）……5

フェーズフィールド法による材料組織予測と力学特性評価……小山敏幸（名古屋工業大学）……7

フェーズフィールド法による混相流計算……高田 尚樹（産業技術総合研究所）……9

汎用マルチフェーズフィールド法ソフトウエアの発展……野本 祐春（CTC）……12

沸騰伝熱促進技術開発に向けた取り組み……福多 将人（東芝）……15

・部門からのお知らせ

KSME-JSME Joint Symposium on Computational Mechanics &
CAE 2014 at Jeju, Korea報告……高野 直樹（慶應義塾大学）……18

第27回計算力学講演会（CMD2015）のご案内……山田貴博（横浜国立大学）……19

2015年度年次大会の部門企画について……佐々木克彦（北海道大学大学院）……20

特集：フェーズフィールド法

フェーズフィールド法の基礎と最近の動向

高木 知弘
京都工芸繊維大学大学院 工芸科学研究科 機械システム工学部門

1. フェーズフィールド法の発展と最近の動向

機械学会会員の方も、フェーズフィールド法（phase-field method）という言葉を一度は聞いたことがあるという人が増えてきたのではないかと思う。筆者がはじめてフェーズフィールド法に関する内容で学会発表したのが、2002年に鹿児島で行われた第15回計算力学講演会であった。当時、フェーズフィールド法関係の発表はごく一部であったが、その後、材料系の研究者も計算力学講演会で発表されるようになり、また機械側の研究者もフェーズフィールド研究を始められ、機械学会主催の講演会においてもフェーズフィールド法の発表が増えていった。そのような中、2008年に沖縄で行われた第21回計算力学講演会において、名工大の小山先生、山形大の上原先生とともにフェーズフィールド法のOSを立ち上げた。流体分野におけるフェーズフィールド法の活用も活発になり、2011年の岡山での第２4回講演会から産総研の高田様にもオーガナイザに加わって頂いた。3年毎にOS名を見直しつつ、昨年岩手で行われた第27回講演会で7回目のOSとなった。毎回20件程度の発表があり、計算力学講演会の中でも発表数の多いOSとして定着している。OS開始時はオーガナイザも若かったが、それなりに時間が経ち、更に若い研究者がフェーズフィールド法に関して議論する場を企画することも必要と考え、東京農工大の山中先生と名工大の塚田先生に計算工学講演会においてフェーズフィールド法のOSを立ち上げていただいた。現在国内では、これら二つのOSがフェーズフィールド法に特化した発表の場となっている。

国際会議では、計算力学関係の会議であれば、フェーズフィールド法のセッションを多くみるようになった。フェーズフィールド法に特化した国際会議は、ルール大学ボーフムのI. Steinbach先生とペンシルベニア州立大学のL.Q. Chen先生らが立ち上げた会がある。1999年の第1回の参加者は30名程度であったが、10年後の2009年に行われた第2回の発表件数は67件、5年後の昨年2014年に行われた第3回は、オーラル発表52件、ポスター発表89件と発表数が倍増している。第3回はポスター発表賞が設けられ、10人の受賞者のうち3人が日本人であった。

話は前後するが、フェーズフィールド法の今日の発展は、1990年ごろに現広島大学の小林先生がデンドライト成長の計算に成功したことが引き金となった[1]。文献[1]の引用数は、2015年1月の時点で約650となっている。その後、凝固の分野では、合金への拡張、界面幅を変えても結果の変わらない定量的フェーズフィールドモデルの開発、多相・多結晶問題のためのマルチフェーズフィールド法の開発と進んだ[2]。また、同時期に固相変態[3]や粒成長[4]などのフェーズフィールドモデルが発展し、フェーズフィールド法はメゾスケールにおける材料組織予測の最も強力なモデルの一つとなっている。

フェーズフィールド法という言葉がでてきたのは、1980年ごろのようであるが、拡散界面モデル、アレン－カーン方程式、カーン－ヒリアード方程式など、同様の手法が異なる分野で様々な呼び名の下で用いられてきた。現在もその傾向は残っているが、1990年以降、様々な分野でフェーズフィールド法という言葉に集約されつつある印象を受ける[5]。図1は、フェーズフィールド法を用いた研究の論文数の変化である。1990年から2次曲線的に論文数が増加し、フェーズフィールド研究が加速度的に増加していることがわかる。現在でも、凝固・固相変態・粒成長など、材料組織関係の論文が多い。最近では、電池関係の発表や論文が目立つようになった。また、組織と特性の同時もしくは連続的な評価手法の構築、ミクロな組織とマクロな特性のマルチスケール計算にも適用されている。材料組織以外では、混相流の計算にもフェーズフィールド法は多く用いられている。最近では、3相以上の問題へも適用されている。液相の流動は凝固問題には重要であり、凝固と対流の同時計算も多く行われている。また、フェーズフィールド法は並列計算やGPGPU計算と相性が良いため、大規模計算による研究も見られるようになった。ここ数年は、き裂進展計算に関する研究が多く目に付くようになった。また、トポロジー最適化やバイオメカニクスにも用いられており、その適用範囲は今後益々広がることが予想される。

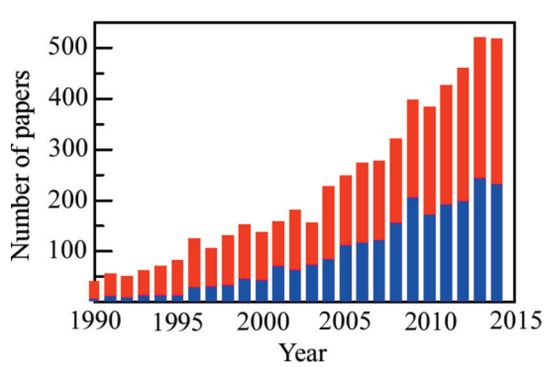


図1 フェーズフィールド法を用いた研究の論文数の変化。青：タイトルに“phase field”がある論文。赤：タイトル・抄録・キーワードのいずれかに“phase field”がある論文。（文献データベースScopusによる。）

2. フェーズフィールド法の基礎

フェーズフィールド法は、自由境界問題を、境界を追従することなく比較的容易に解くことのできる手法である。フェーズフィールドと呼ばれる秩序変数 ϕ を新たに導入し、境界両サイドの状態を区別する。図3は二元合金等温凝固過程のデンドライト成長、図4は中央き裂を有する平板引張時のき裂進展（左端x方向変位拘束、下端y方向変位拘束、上端上方向へ一定変位速度）、図5は片持はりの剛性最大トポロジー最適化（左端変位拘束、右端中央に下向き集中力）の計算例である。いずれの図も、左から右の時間変化である。また、上図がフェーズフィールド変数の分布を表し、赤い領域が $\phi = 1$ の固相（もしくは材料内）、青い領域が $\phi = 0$ の液相・き裂内・穴に対応し、界面において図6の黒線のように0から1へ滑らかに値が変化している。つまり、界面はシャープではなく、幅を持つことになる。

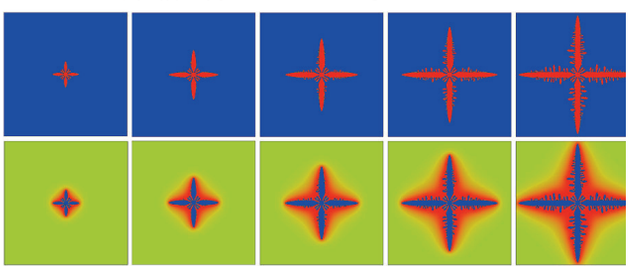


図3　Al-3wt%Cu合金のデンドライト成長計算（上：フェーズフィールド、下：Cu濃度）

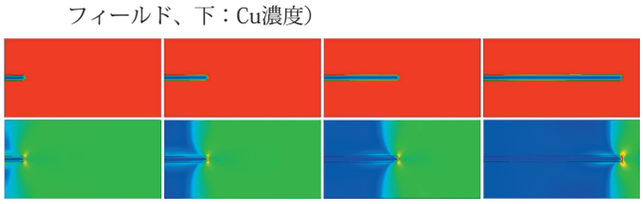


図4　き裂進展計算（上：フェーズフィールド、下：相当応力）

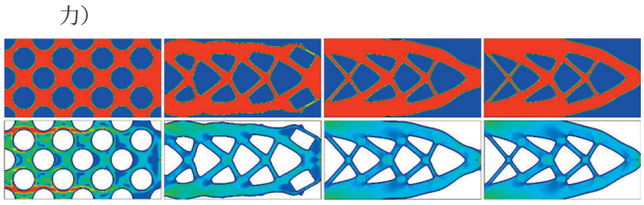


図5　片持はりの剛性最大化トポロジー最適化計算（上：フェーズフィールド、下：相当応力）

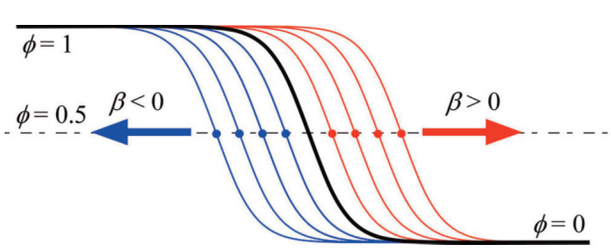


図6　フェーズフィールド変数のプロファイル

フェーズフィールド変数 ϕ の時間発展は、式(1)のような反応拡散方程式に帰着するフェーズフィールド方程式を解くことで求められる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \delta^2 \nabla^2 \phi + \phi(1-\phi)(\phi - 0.5 + \beta) \qquad (1)$$

右辺第1項は拡散項、第2項は反応項であり、図6の黒線のような ϕ の分布を、それぞれ滑らかに、急峻にするように作用する。ここで、δ は例えば $\phi = 0.1 \sim 0.9$ の領域に対応する界面幅である。このとき、$\beta = 0$ であれば拡散項と反応項は完全につり合い、ϕ の時間変化は0、つまり界面は動かない。一方、β が0でない値を持つと拡散項と反応項のバランスが崩れ、β の正負に依存して ϕ のプロファイルが青と赤のように時間とともに変化する。このとき、例えば $\phi = 0.5$ の点の時間変化を見ると、界面が左右に一定速度で移動しているように見える。また、β の絶対値が大きくなると ϕ のプロファイル変化が大きくなり、界面の移動速度が速くなる。このように、フェーズフィールド法では、界面の位置を追従するのではなく、式(1)のような反応拡散方程式に帰着するフェーズフィールド方程式を数値的に解くことで界面移動を表現する。

図6は β が一定の一次元のイメージであるが、実際の計算では β は他変数の関数となる場合が多い。図3のデンドライト計算では、フェーズフィールド方程式に加え、溶質濃度の拡散方程式を解いており、β は濃度の関数となる。図4と図5の計算では、応力場を同時に解いており、β は弾性ひずみエネルギーの関数である。図4と図5で異なるのは、図4は応力の高い方向へ界面（き裂）が移動し、図5は応力の高い領域に材料を追加し、応力の低い領域から材料を取るようにモデル化がなされている。式(1)は β が一定の場合は定量的な結果を示すが、β が他変数の関数の場合は界面領域内で他の変数が分布するため、界面幅 δ を変えると結果が変わることになる。この問題を解決するため、特に凝固の分野では界面幅が変わっても結果の変わらない定量的モデルの開発が行われている。また、式(1)はラプラシアンを含んでいることから、曲率の影響を自動的に表現可能である。これは材料組織予測モデルとしては好都合であるが、単に界面位置を追従するために用いる流体計算等では逆に邪魔になる場合がある。そのような問題に対しては式(1)から曲率寄与を取り除くようなモデル化も行われている。

3. 書籍の紹介

名工大の小山先生の一連の著書[5-8]により、国内のフェーズフィールド法の書籍はかなり充実してきた。「フェーズフィールド法入門」[5]は、フェーズフィールド法の発展史等も丁寧に説明されており、材料組織予測モデルからその特性評価モデルまでの説明があり、プログラムをダウンロードして利用することができる。「材料設計計算工学 計算組織学編」[6]も材料組織予測モデルの解説書であるが、[5]よりもより教科書的であり、演習問題も多く掲載されている。「材料組織弾性学と組織形成」[7]は、フェーズフィールド微視的弾性論を中心とする応力場発展を伴う組織予測モデルの説明が丁寧になされている。「3D材料組織・特性解析の基礎と応用」[8]では、組織形態の構成法とそれを活用した解析法について紹介されており、プログラムも掲載されている。筆者と農工大の山中先生の「フェーズフィールド法」[9]は、機械側の研究者として材料組織予測法としてのフェ

ーズフィールド法を解説した書籍であり、かなり基本的なところから説明されている。洋書では、タイトルにフェーズフィールドが入ったものはProvatasとElder [10]、Emmerich [11]によるものがある。書籍以外に、review paperや解説記事も多く出ており、上記書籍の参考文献欄やデータベース検索サイトから見つけることができる。また、フェーズフィールド法の情報提供サイト[12]からも最新の情報を得ることができるので、ご活用頂きたい。

参考文献

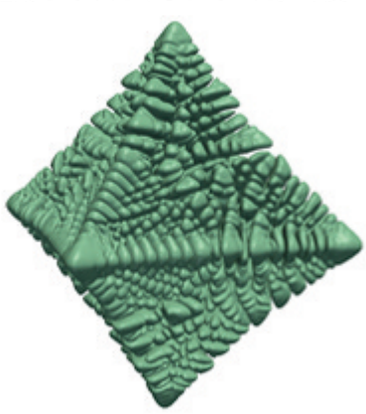
[1] R. Kobayashi, Physica D, 63 (1993), pp. 410-423.
[2] W.J. Boettinger, J.A. Warren, C. Beckermann, A. Karma, Annu. Rev. Mater. Sci., 32 (2002) 163-194.
[3] L.Q. Chen, Annu. Rev. Mater. Sci., 32 (2002), pp. 113-140.
[4] I. Steinbach, et al., Physica D, 94 (1996), pp. 135-147.
[5] 小山敏幸, 高木知弘, フェーズフィールド法入門 (計算力学レクチャーコース) (2013), 丸善出版.
[6] 小山敏幸, 材料設計計算工学 計算組織学編―フェーズフィールド法による組織形成解析 (材料学シリーズ) (2011), 内田老鶴圃.
[7] 小山敏幸, 塚田祐貴, 材料組織弾性学と組織形成―フェーズフィールド微視的弾性論の基礎と応用 (2012), 内田老鶴圃.
[8] 足立吉隆, 小山敏幸, 新家光雄, 3D材料組織・特性解析の基礎と応用―シリアルセクショニング実験およびフェーズフィールド法からのアプローチ (2014), 内田老鶴圃.
[9] 高木知弘, 山中晃徳, フェーズフィールド法―数値シミュレーションによる材料組織設計 (2012), 養賢堂.
[10] N. Provatas, K. Elder, Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering (2010), Wiley-VCH.
[11] H. Emmerich, The Diffuse Interface Approach in Materials Science: Thermodynamic Concepts and Applications of Phase-Field Models (2003), Springer.
[12] http://www.pfm.kit.ac.jp/

エクサスケールのフェーズフィールド法の大規模計算

青木尊之
東京工業大学 学術国際情報センター

筆者は数値流体力学が専門であるにも関わらず、フェーズフィールド法の企画に入れてもらっている経緯から始めさせて頂く。2004年秋、その当時は名古屋大学教授だった金田行雄先生に呼ばれて数値流体力学の集中講義を3日間やらせて頂いた。名古屋大学の大学院生はみな熱心に講義を聞いてくれて、とても充実した時間を持つことができた。その中でも講義の内容を特別よく理解し、度々鋭い質問をしてくる学生がいた。畝山多加志さん（現・金沢大学助教）である。私の講義の中で、その頃研究を進めていた高次精度計算スキーム（IDO法）[1]の話をしたところ、2日目の講義終了後に「この方程式はそのスキームで解けますか？」と質問してきた。それがフェーズフィールド法のAllen-Cahn 方程式とCahn-Hilliard 方程式であった。その日の晩は暇だったので早速宿舎でプログラミングを始めた。まずはAllen-Cahn 方程式にIDO法を適用し、ものの2時間程度で動画まで作成することができた。その勢いでCahn-Hilliard 方程式による相分離の計算も解こうとしたが、4階微分があるために安定に計算できるΔtが非常に小さいことが分かり、さらに思った以上に計算が重く、その晩は断念した。東京に戻りノートPCより速いCPUで計算してみたが、1格子点当たりの計算負荷が非常に高く、初期の混濁した状態から完全に2つの相に分離するまでに2次元計算でも何時間もかかることが分かった。また、界面で急激にプロファイルが変化する（高波数）ため、計算結果は余り離散化の精度に寄らず、むしろ計算負荷の観点からは低次精度スキームの方が有利であることも分かった。そして有限な界面幅のモデルであるため、少ない格子点数では近似計算ができないことも理解できた。

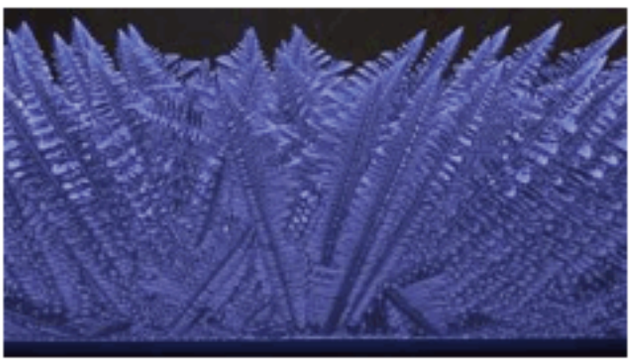
フェーズフィールド法のことが頭に残ったまま4年が過ぎた。その頃注目が集まり始めていたGPUコンピューティングは、CPUの単一コアに対して数10倍も速く計算できるということで、色々な問題に適用してみたくなっていた。今度こそChan-Hilliard 方程式を解こうと思いCUDAでプログラムしてみると、半日もかからず3次元コードが完成し、計算速度はCPUの単一コアのなんと160倍という驚愕の高速化を達成することができた。これに気を良くし、博士課程の学生だった小川慧さん（現・東芝）と2008年当時は東工大にいた山中晃徳さん（現・農工大准教授）と共同でAllen-Cahn方程式を解いて純金属の凝固計算を行った。東工大のスパコンTSUBAME1.0 に追加されたばかりのGPU (NVIDIA Tesla S1070) を60個使い2,400×2,400×2,400格子の大規模計算に成功した。このとき既に領域分割された各領域内の計算と領域間通信のオーバーラップ手法を導入している。



純金属の樹枝状凝固成長

東工大のTSUBAMEは2010年10月にFermiコアのGPUであるNVIDIA Tesla M2050を4,224個搭載したGPUスパコンに更新され、そのピーク性能は2.4ペタ・フロップスに達し、Top500スパコン・ランキングで世界4位になった。そこで、これまでのスパコンではできなかった計算をやりたいと考えた。それと同時にスパコン業界で最高の栄誉であるゴードンベル賞のことが頭を過った。それまでフェーズフィールド法の大規模計算はHPC分野では論文を見たことが無く、ましてGPUを大量に使う計算は新規性が強いと感じた。一方でゴードンベル賞の審査員たちが馴染みのないフェーズフィールド法の計算を評価しないのではという心配もあった。かくしてゴードンベル賞を狙うためのチームが立ち上がった。博士課程2年だった下川辺隆史さん（現・東工大助教）がプログラミング全般を担当し、京都工芸繊維大の高木知弘准教授にフェーズフィールド法、額田彰さん（現・東工大特任准教授）にCUDAプログラミングのチューニングをお願いした。

紆余曲折の末、フェーズフィールド法による Al-Si合金の凝固成長の計算を行うことになった。フェーズフィールド法は計算負荷が大きいということをもう少し詳しく説明する。ルーフライン・モデルは想定するプロセッサのピーク演算性能とメモリバンド幅に対し、1格子点当たりの浮動小数点演算数をメモリアクセス量で割った演算密度（FLOP/Byte）から実行性能を評価するモデルである。演算密度が小さいとメモリアクセスが律速となりピーク性能に対する実行性能は下がり、演算密度が大きくなると浮動小数点演算が律速となるためピークに近い性能がでる。隣接7点にアクセスする有限差分法で離散化した拡散方程式の計算などは演算密度が非常に小さいが、重力多体問題などは演算密度が非常に高い。フェーズフィールド法の計算は演算密度が非常に高かったのである。分割した計算領域の境界近傍の一層をCPUで計算させることでGPU間通信を大幅に低減したり、GPU計算のスレッドで使うレジスタ数の削減を行うなど様々な最適化を行い、ついに4,096×6,400×12,800の格子に対して4,000 GPUを使い2.0ペタ・フロップスの実行性能を達成することができた。これはピーク性能の44.5 % に相当し、フェーズフィールド法は GPU計算に非常に向いていることを示すことができた[3]。この成果により、スパコン業界で最も権威のある



ゴードンベル賞を受賞したAl-Si合金の凝固成長

国際会議 SC'11でゴードンベル賞（Special Achievement in Scalability and Time-to-Solution）を受賞することができた。TSUBAMEのような一大学のスパコンを使った計算が受賞できたのは多くの幸運が重なった結果であり、今想うとあの一瞬のチャンスしか無かったことが分かる。

フェーズフィールド法を均一な格子上で解くことは比較的容易であり、多くの研究者によりさらに発展され続けている。フェーズフィールド法は大規模計算を絶えず必要としており、スパコンの性能向上とともにさらに新しい展開が期待できる。2020年頃に登場すると予想されるエクサスケールのスパコンでフェーズフィールド法の大規模計算はどうなるであろうか。上述したように演算密度が高いために、メニーコア型やアクセラレータ型のスパコンであっても高い実行性能を出し易い。エクサスケールのスパコンでは、現在のスパコンの100倍のピーク演算性能を持つが、インターコネクト性能向上は画期的な光通信技術が導入されない限りせいぜい現在の20倍程度であろう。ルーフライン・モデルはノード内の実行性能とノード間のインターコネクト性能のモデルに拡張することができる[4]。それによれば演算密度が高いことによりインターコネクトの性能がノード演算性能に対して相対的に低いスパコンであっても高い実行性能が得られることが分る。エクサスケールでもフェーズフィールド法はスパコン性能に応じた大規模計算が可能であり、どんな新しい世界が切り開かれるか、フェーズフィールド法を使うそれぞれの専門分野の方々に大いに期待する。

参考文献

[1] Y. Imai, T. Aoki: Stable coupling between vector and scalar variables for the IDO scheme on collocated grids, Journal of Computational Physics, Vol. 215. pp. 81-97 (2006)

[2] 小川慧, 青木尊之, 山中晃徳: マルチGPUによるフェーズフィールド相転移計算のスケーラビリティー ― 40GPUで5 TFLOPSの実効性能, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステムVol. 3 No. 2 67-75 (2010)

[3] T. Shimokawabe, T. Aoki, T. Takaki, A. Yamanaka, A. Nukada, T. Endo, N., Maruyama, S. Matsuoka: Peta-scale Phase-Field Simulation for Dendritic Solidification on the TSUBAME 2.0 Supercomputer, in Proceedings of the 2011 ACM/IEEE International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, SC'11, IEEE Computer Society, Seattle, WA, USA, Nov. 15 (2011)

[4] Takashi Shimokawabe, Takayuki Aoki and Naoyuki Onodera, Scalability model for multi-GPU computation of stencil applications using regular structured meshes with explicit time integration, 第189回ARC・第132回HPC合同研究発表会（HOKKE-19）(2013)

フェーズフィールド法による材料組織予測と力学特性評価

小山敏幸
名古屋工業大学 大学院 工学研究科（物質工学専攻）

フェーズフィールド法（以下PF法と記す）の発展によって、現在、以下の２点が世界的に加速している。

① 材料の各種不均一組織形成の直接計算
② 不均一組織形態情報を直接考慮した材料特性計算

上記手法は、複雑現象に対する学術的なメカニズム解明はもとより、工業的な部材設計・解析にいたるまで、今後の科学・工学の発展において不可欠のツールに成長しつつある。以下では、PF法による合金組織のシミュレーションと、材料組織形態情報を直接活用したイメージベースの材料特性計算に関する最近の解析例について紹介する[1-4]。

1. 材料組織予測

解析対象の組織は、Fe-C二成分系における、多結晶のα(フェライト)相とγ(オーステナイト)相の二相組織で、外部磁場にて組織形態に異方性が生じる場合の組織変化をPF法にてモデル化した例である（PF法にて考慮した秩序変数は、炭素のモル分率 と結晶粒を表現するPF）。図１(A)は外部磁場を考慮していない場合の1023K等温時効における組織変化で、上段が多結晶α相とγ相のPFであり、灰色の部分がα相、白い部分がγ相である。下段は炭素濃度場で、純Fe (白)およびFe-1mass%C (黒)として局所的な炭素濃度を明暗にて表現している。相分解初期(a)において、結晶粒界に炭素が濃化するとともに、濃化の顕著な領域においてγ相が形成され、時効の進行に伴いγ相の体積分率が増加する（図(b)～(c)）。後期ではγ相のオストワルド成長によって組織は粗大化していく（図(c)～(d)）。γ相の全体的な配置に異方性はなく、α相内で空間的にほぼ均一にγ相は形成･成長している。続いて図１(B)は、外部磁場下（外部磁場は上下方向）における等温時効組織変化で、図の表記は(A)の場合と同様である（外部磁場は十分に大きく、組織内の磁気モーメントが全て上下方向に揃っている場合を想定した計算）。析出初期において炭素がα相の結晶粒界に濃化する挙動は(A)の場合と同様であるが、特に上下方向に沿った粒界にやや優先的に炭素は濃化していることがわかる。この傾向は、相分解の進行に伴い顕著となり、さらに炭素の濃化した部分はγ相の核形成サイトとして働くので、図(b)～(c)に見るように、上下方向に伸びたγ相組織が発達する。最終的に外部磁場方向にγ相が連なった組織形態(d)へと変化していく。以上の外部磁場による組織変化は実験的にも確認されている。

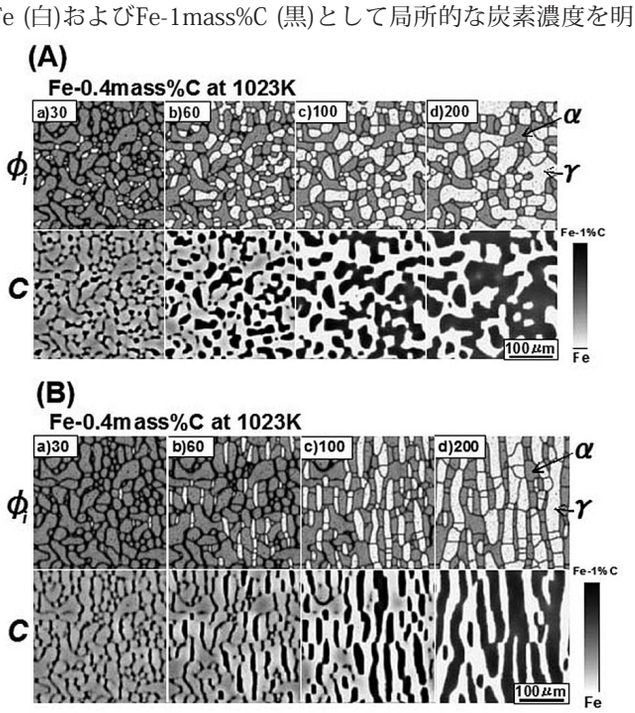


図１ Fe-C系の多結晶組織(α＋γ)組織形成および、外部磁場を利用したその組織形態制御に対する計算例

2. 力学特性予測

力学特性は組織形態によって変化する。ここでは力学特性の三次元組織形態依存性について、PF法から得られる組織形態情報を用いて、力学特性の組織形態依存性を系統的に解析した結果を紹介する。特に鉄鋼材料において、高強度相であるマルテンサイト相やベイナイト相が第二相として含まれる場合、これら第二相の形状および配向性が少なからず応力-ひずみ曲線に影響するので、近年、第二相の形状・配向性の効果まで考慮できる応力-ひずみ曲線の実用的解析法の実現が重要な課題となっている。以下では、鉄鋼材料における力学特性の三次元組織形態依存性について、改良型セカント法を用いて系統的な解析を行った結果について説明する。

図２は、母相(phase 0)をフェライト、析出相(phase 1：白い部分)をベイナイトとし（ベイナイトは組織であるが、ここでは力学的な意味における単一相と仮定している）、析出相の組織形態を変化させて応力-ひずみ曲線を計算した結果である。各図中の組織が考慮した析出相の形態であり、第二相の体積分率はいずれも30%である。外部応力は、組織の模式図の、上下方向の単軸引張りである。個々の図内の最上部および最下部の応力-ひずみ曲線は、それぞれ析出相(phase 1)と母相(phase 0)の単相の応力-ひずみ曲線で、両者の内側の曲線が、二相組織全体の応力-ひずみ曲線である。黒い実線部分は「析出相と母相の両方が弾性変形している場合」、

赤線は「析出相は弾性変形しているが母相は塑性変形している場合」、また青線は「両相ともに塑性変形している場合」に対応している。全ての応力-ひずみ曲線は、くびれ発生条件が満足された段階で計算を打ち切っている。

まず二相組織全体の応力の大きさは、おおよそ、析出相単相と母相単相の応力を体積分率で平均した値になっており、いわゆる応力に関する混合則が成立していることがわかる。(a)と(b)の応力-ひずみ曲線はほぼ等しく、(c)と(d)の応力-ひずみ曲線もほぼ等しい。一方、上段に対し下段では、加工硬化初期段階における応力の、ひずみに対する立ち上がりが大きく、かつ最終的な伸びは減少しており、応力-ひずみ曲線形状が組織形態に依存することがわかる。以上から、複雑な組織でもランダムなまだら構造ならば、(a)の球の場合で近似できると考えられる。しかし、組織形態に異方性が存在する場合には、もはや球近似は使用できない。また興味深い点は、(c)と(d)の応力-ひずみ曲線がほぼ等しい点である。つまり、組織が三次元的な周期構造であっても、一次元的な層状構造であっても、マクロ的な応力-ひずみ曲線に大きな変化は認められない。つまり、周期的構造でさえあれば、組織内に層状部分や変調構造部分が混在していても、マクロ的な応力-ひずみ曲線は変化しないことになる。応力-ひずみ曲線が組織形態のどのような特徴に敏感に応答するのかを系統的に理解することは今後の重要な課題であろう。

3. 展　望

現在、材料組織制御から諸特性までを系統的に網羅する次世代の材料開発の方法論確立が進められている。現実の材料では、相変態、応力場および電磁場などが複雑にからみあって組織形成が進行するので、組織の安定性や組織変化過程を議論するためには、相変態・弾性場および電磁場に関連したエネルギー場や力場を一つの計算の枠組みにて、かつ必要十分な精度にて記述する必要がある。従来これらの分野（すなわち、カルファド法、 マイクロメカニクス、ランダウ理論等の分野）は材料科学において各論的に発展してきた傾向にあるが、現実の多くの相変態・組織形成の解析にはこれら全てが同時に必要である。これら全てを含むエネルギー論的解析、さらにはそれを基礎とした動力学的解析を兼ね備えているPF法は、実際の材料組織の解析法・設計法の枠組みとして強力な手法であろう。

一方、組織イメージを活用した特性計算法とPF法を組み合わせる解析手法を用いることによって、材料の設計プロセスと特性の最適化を同時に進めることができる。つまり、従来にない効率的な材料設計の道が拓かれ始めた。特にイメージベースの特性計算に関しては、有限要素法ひいては均質化法をベースとした形態（トポロジー）最適化法が最近大きく進展している[3]。従来、要求特性に対して最適な組織を議論する場合、平均的な組織パラメータ（平均サイズ、体積分率、平均的な配向性等々…）が用いられてきたが、不均一な組織情報まで考慮する新しいステージに入り始めたようである。これを受けて材料組織形態情報そのものをデータベース化する動きも活発化してきている[4]。またイメージベースの特性計算自体も、本稿で説明した力学特性以外に磁気特性や誘電特性など、構造材料から機能材料まで幅広く対象が広がり続けている[1]。近年のデバイス設計では、もの創り自体が材料組織のスケールに到達してきた。さらにマクロ的な部材設計においても、ナノスケールの精緻な組織制御が当然のように行われる時代となった。これからの材料・デバイス・部材設計に、不均一な材料組織と特性を同時に解析する実効的方法論は、新たな競争力の源泉となると思われる。

参考文献

1) 小山敏幸, 日本金属学会誌, 73(2009), 891.
2) 小野寺ら, 鉄と鋼, 100(2014), 1207.
3) 計算工学による組織と特性予測技術II研究会最終報告書, (一社)日本鉄鋼協会, (2013).
4) 新家光雄(編), 3D材料組織・特性解析の基礎と応用 , 内田老鶴圃, (2014).

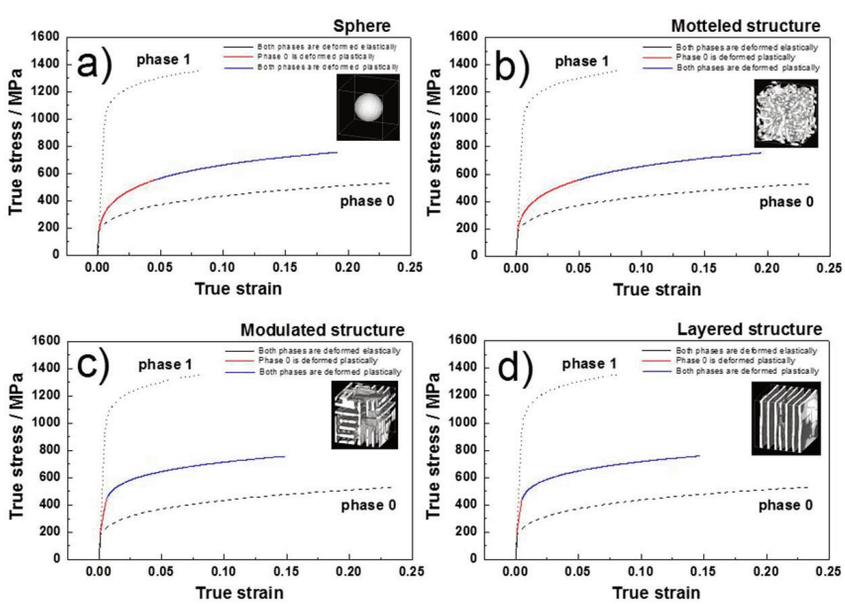


図２　応力-ひずみ曲線の組織形態依存性の計算結果

フェーズフィールド法による混相流計算

高田尚樹
独立行政法人産業技術総合研究所 集積マイクロシステム研究センター

1．はじめに

様々な理工学分野で見られる気液・液液等の混相流に対して、Front-Tracking（FT）法、Level-Set（LS）法、Volume of Fluid（VOF）法等は、流体界面を直接捕捉・追跡して流動現象の詳細理解・予測に役立つ数値流体力学（CFD）シミュレーションの計算法として多くの研究者によって開発・適用が進められ、計算機の性能向上とともに普及してきた[(1)]。これら界面捕獲・追跡CFD計算法の多くは、相間の物性遷移領域である界面の幅が現実にはナノメートルオーダーであることを踏まえ、マクロスケール的観点から界面を厚さが無い移動境界との前提で幾何学演算・反復収束演算等によって界面を構築する。そのため、多数の界面の同時多発的大規模変形が継続する場合、界面移流・構築は煩雑化し計算負荷が増大する。また、濡れ性が不均一で且つ凹凸形状の固体表面上で流体界面が移動する接触線問題や、界面を横断した熱･物質移動が生じる相変化や溶解を伴う流れでは、バルクの相と異なる界面移動速度を扱うため計算は複雑化する。

材料分野で始まったフェーズフィールド法（PFM）は、上記の従来CFD法の課題を克服可能な代替アプローチとして、1990年代中盤から国内外の研究者によって流体分野に導入され、流体系に対する自由エネルギー汎関数・方程式・計算スキームの各種提案と、様々な混相流問題への適用が進められてきた[(2)-(10)]。現行の混相流PFMの多くは、瞬時局所平衡が成り立つと見なせるマクロスケールの連続流体変数の圧力や流速等の予測を主眼として界面捕獲・追跡も同時に行う。その計算に必要な界面構築機能と界面張力は、任意の形式の二重井戸ポテンシャルと勾配二乗項から成るエネルギー汎関数によって導入できる。混相流PFMは、ナノ・マイクロスケールの材料が対象のPFMと異なる点が多いことから、両者を明確に区別するため拡散界面モデル（DIM）法と呼ばれる場合もある。広義にはLS法もDIM法と言えるが、非平衡系の自由エネルギー理論に基づく界面構築や界面力演算を強調する際はDIM法と呼ぶようである。

2．混相流計算へのフェーズフィールド法（PFM）の適用

2.1 基礎方程式

本節では、最も基本的な混相流として、熱・物質移動が無い等温で非混和性の気液または液液二相流体流れを取り上げて代表的なPFMの支配方程式を説明する。本手法は、界面厚さを一定に保持する移流拡散方程式、連続の式、及び界面張力による応力または体積力項を持つ運動方程式を連立して解く[(2)-(7)]。

二相流体の空間分布は、材料分野のPFMと同様に、秩序変数 ϕ を用いて表される[(2)]。各相は ϕ の異なる一定値の領域に該当し、界面は ϕ が急峻かつ連続的に変化する有限体積領域とモデル化される。二相分布の時間発展は、ϕ の移流拡散方程式によって記述される。その拡散係数は、任意地点・時刻で ϕ の勾配が平衡状態での理論値よりも急峻な場合は正の値、逆の場合は負の値を取る ϕ の連続関数で与えられて空間的・時間的に変化する。これは、平衡状態からずれた界面形状を補正して非平衡を解消する拡散流束が界面領域で瞬時局所に生じることを意味する。その結果、界面はその厚さが常に一定保持されるよう局所平衡状態へ向けて自律的に構築され、平衡に達すると拡散流束が生じず ϕ の時間発展式から拡散項が消えて各相が安定に共存する。

二相流体の速度と圧力は、連続の式と運動方程式から求める。運動方程式には、対象とする二相の系の自由エネルギー汎関数から導かれる可逆的な応力テンソルが加えられる[(2)-(4)]。このテンソルは、圧力の項と秩序変数 ϕ の勾配の項から成り、後者は界面張力による影響を表す。応力テンソルの項を変形すると、界面曲率に依存する体積力の項を導出できる。この項は、FT法、LS法、VOF法等が一般に使用するContinuum Surface Force （CSF）モデルに基づく体積力[(1),(5)]と同様の形式で表される[(6)]。

固体表面への各流体相の濡れ性を示す接触角は、変数 ϕ の表面法線方向勾配によって設定され[(2)]、その勾配の値を場所毎に変えることで不均一な濡れ性を容易に設定出来る。また、境界条件で接触線の滑り速度を実験的・理論的に設定する必要無しに、拡散流束による界面構築に伴い、固体表面に接する流体界面が流体相と独立した速度で移動する様子が再現される[(6),(7)]。

2.2 計算スキーム

PFMでは、各時刻の流れ場内で界面形状（変数 ϕ ）、流体速度及び圧力を支配方程式から得るための計算スキームとして主に、他のCFD法と同様の有限差分法・有限体積法・有限要素法や、格子ボルツマン法（LBM）[(3),(4),(6),(11),(12)]が適用されている。LBMでは、流体を構成する仮想粒子集合の衝突と並進の反復に基づくボトムアップ的アプローチにより流動現象を創発的に再現する。この特徴から、利点として、(1) 流れ場内の複雑形状物体境界の容易な再現、(2) 計算コードの容易な作成、(3) 質量・運動量等保存性と空間等方性の両方に優れる移流スキーム、(4) 並列化効率の高い計算、等がもたらされる。以上により、LBMは、1990年代からスピノーダル分解等様々な混相流の計算に適用され[(3),(4),(6)]、固体表面が複雑な形状と不均一な濡れ性を持ち且つ毛細管力が顕著な微

細多孔質体内液相浸透のように複雑性の高い流動の計算に適したスキームとして国内外で発展している。

2.3 他の計算法との比較

混相流PFMでは、マクロスケールの連続流体力学に基づく偏微分方程式を界面領域でも扱うことから、その界面幅は、計算領域を分割する空間セル1個分よりも厚く設定される場合が多い。そのため、PFMの界面領域は実在の界面よりもずっと大きく、ラグランジュ的に界面を追跡するFT法や流体体積率を追跡するVOF法等の従来CFD法と比べても大きくなる。このように、現在主要な混相流PFMは、材料のPFMや従来CFD法と異なるが、様々な実験・理論・従来計算と比較して妥当な結果を与えることが示されている。混相流PFMも界面幅が代表長さに比べて十分薄くなれば従来CFD法と一致し、界面幅よりも大きな曲率半径の変形であれば高精度に予測できる。従来法の多くはCSFモデルに基づく界面張力による体積力を1セル幅程度で与えるが、離散的な計算空間で界面における力の釣り合いを良好に満たすのは難しい。一方、PFMでは、数セル幅の界面領域内で連続的に体積力を与えるため力の釣り合い誤差が小さく、その誤差による疑似的流速も低減し、界面張力・毛細管力支配の微小混相流現象を従来法よりも高精度計算可能と推察される。

3．フェーズフィールド法による混相流計算の現状

混相流PFMは当初、密度比の小さい問題に適用されてきたが、2000年代中盤から計算スキームやアルゴリズムの改良によって水-空気系のように密度比の高い混相流も計算可能になった[(4)]。日本では国外と異なり、混相流計算では従来CFD法と比較してPFMは殆ど注目されていなかったが、2000年以降多くの研究者によって様々なPFMの提案と適用が進められている。混相流PFMの研究・開発・適用はこれまで、燃料電池ガス拡散層内の水滴挙動、界面活性剤等の溶質の濃度や温度に依存する不均一な界面張力により駆動されるマランゴニ対流、材料接合用の低融点合金充填剤微粒子合一挙動、せん断流中で界面に溶質が付着した場合の液滴衝突、伝熱機器設計・性能評価を目指した沸騰二相流[(8)]等様々な現象に対して行われてきた[(2)-(10)]。これらの成果は、流体界面や固体表面濡れ性の影響が顕著な混相流現象の微小スケールの観点からの理解・予測においてPFMが従来法に優るとも劣らない能力と今後の更なる発展可能性を示している。

相変化や溶解が生じない非混和性混相流に対してこれまで提案されたPFMの多くは、界面の移流・構築演算にCahn-Hilliard（CH）型の方程式を採用している[(2)-(4)]。この理由は、保存される物理量に関する秩序変数 ϕ の時間発展を保存型で記すCH式が、体積や質量等の保存則を重視するCFD計算に適するためである。CH式では、界面構築の役割を担う拡散項は、化学ポテンシャルの空間勾配に起因する流束で表され、ϕ の4階空間微分を含む。これに対して近年、ϕ の2階微分拡散項を持つ非保存型のAllen-Cahn（AC）方程式を保存型に修正して界面移流・構築に用いるPFMが提案されている[(5)]。CH式やAC式が界面曲率に依存した拡散現象を記述するという事は、曲率が時間的・空間的に変化すると拡散流束によって界面が移動することを意味し、その結果、非混和性混相流計算で各相の体積・質量を高精度に保存することが困難になる。これに対して、修正AC式は、CH式よりも低い階数の微分を含み且つ界面曲率依存性を排する拡散流束を持つため、修正AC式採用のPFMでは、CH式採用PFMよりも界面移流・構築演算負荷が減るとともに体積保存性が向上し且つ界面張力効果が界面構築に入らないため高精度な計算が期待できる[(5)-(7),(10)]。尚、CH式でもAC式と同様の拡散項の修正により保存性と界面張力評価の精度を向上できる[(7)]。

文献(5)では、修正AC式が、保存型LS法で界面位置を表す符号付距離関数の移流と再構築の演算を同時に行う場合の方程式と等価であることが示されている。保存型LS法は、界面近傍で急激に値が変化する距離関数を採用するため従来型LS法よりも界面位置・形状特定を容易にしつつ体積保存を向上する。このように、材料分野のPFMを混相流計算用途に拡張すると、結果的に流体分野の改良型LS法に帰着する。

上記の他、気・液相に加えて固相も含む混相流の計算に対して、埋め込み境界法（Immersed Boundary Method, IBM）[(11)]を導入して固体物体を扱う気液・液液系PFMや、材料分野のマルチフェーズフィールド法（MPFM）の拡張適用[(10)]が行われている。Smoothed Profile Method[(12)]やSmoothed Boundary Method[(13)] と呼ばれる計算法もMPFM同様、流体相と固相の間の有限幅で連続的に変化する秩序変数を割り当てて任意物体形状を考慮する。

4．おわりに

本稿では、混相流CFD計算のためのフェーズフィールド法（PFM）の概要を述べた。混相流PFMの研究報告は従来CFD計算法と比べて少なく、計算スキーム以外にも、界面厚さ、濡れ性、熱・物質移動の評価等で様々な課題がある。例えば、PFM自体は核形成を再現しないため、幾つかのPFMでは統計力学的または実験的にモデル化した状態方程式や潜熱を使って瞬時局所の圧力・温度から相変化量を評価して気泡や液滴を初期発生させている[(8),(9)]。相変化気液二相流問題へのPFMの本格的な適用はこれからである。今後、PFMが様々な計算スキームを取り込んで高精度化するとともに、従来CFD法と融合したより高度な混相流計算法の開発が期待される。また、現行のマクロスケール中心の混相流だけでなく、メゾスケールまで考慮して気相・液相・固相をシームレスに取扱可能な統一的マルチスケール混相計算の実現にPFMが寄与することも考えられる。

文　献

(1) 小林 敏雄; 他, 編. 数値流体力学ハンドブック. 2003, 丸善.
(2) Anderson, D. M.; McFadden, G. B.; Wheeler, A. A. Annu. Rev. Fluid Mech. 1998, Vol. 30, p. 139–165 (DOI: 10.1146/annurev.fluid.30.1.139).
(3) Chen, S.; Doolen, G. D. Annu. Rev. Fluid Mech. 1998, Vol. 30, p. 329–364 (DOI: 10.1146/annurev. fluid.30.1.329).

(4) Inamuro, T.; Ogata, T.; Tajima, S.; Konishi, N. J. Comput. Phys. 2004, Vol. 198, p. 628–644 (DOI: 10.1016/j.jcp.2004.01.019).
(5) Chiu, P.-H.; Lin, Y.-T. J. Comput. Phys. 2011, Vol. 230, p.185–204 (DOI:10.1016/j.jcp.2010.09.021).
(6) Takada, N.; Matsumoto, J.; Matsumoto, S. The Journal of Computational Multiphase Flows. 2014, Vol. 6, No. 3, p. 283–298 (DOI:10.1260/1757-482X.6.3.283).
(7) Takada, N.; Matsumoto, J.; Matsumoto, S. J. Comput. Sci. Technol. 2013, Vol. 7, No. 2, p. 322–337 (DOI: 10.1299/jcst.7.322).
(8) Fukuta, M.; Yamamoto, Y. Japanese Journal of Multiphase Flow. 2014, Vol. 28, p. 161–166 (DOI: 10.3811/jjmf.28.161).
(9) 辻本 公一. ふぇらむ. 2014, Vol. 19, No. 11, p. 775-780.
(10) 榊原 徹哉; 高木 知弘; 倉田 正輝. 日本機械学会 第27回計算力学講演会論文集. 2014, 講演No. 2213, CD-ROM.
(11) Seta, T.; Rojas, R.; Hayashi, K.; Tomiyama, A. Phys. Rev. E. 2014, Vol. 89, 023307 (22pp) (DOI: 10.1103/PhysRevE.89.023307).
(12) Jafari, S.; Yamamoto, R.; Rahnama, M. Phys. Rev. E. 2011, Vol. 83, 026702 (7pp) (DOI: 10.1103/ Phys RevE.83.026702).
(13) Yu, H.-C.; Chen, H.-Y.; Thornton, K. Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2012, Vol. 20, 075008 (41pp) (DOI: 10.1088/0965-0393/20/7/075008).

汎用マルチフェーズフィールド法ソフトウエアの発展

野本祐春
伊藤忠テクノソリューションズ(株)　科学システム事業部

このたび「フェーズフィールド法」特集にて弊社から販売しています汎用ソフトウエアMICRESSについての紹介記事の依頼を受けました。フェーズフィールド法は約四半世紀前に凝固におけるデンドライト（樹状）成長の数値計算の試みにより始まった材料工学における１つの分野でした。しかし、2008年の機械学会計算力学講演会からフェーズフィールド法に関するオーガナイズセッションが開設されていることに象徴されますように、力学的固相変態や流体などの機械工学分野への拡大が急速に進み、すでに多領域に共通する数値計算手法との位置付けを得ています。一方、これだけの時間が経過している割には、過去の有限要素法や数値流体力学の発展・展開のように汎用ソフトウエアの開発は少なく、知る限りMICRESS以外には見受けられません。この理由を一言で言えば、「より多くの材料の多種の現象を表現できる数値手法を1つのソフトウエアにまとめることが困難である」ことにあると考えられます。このような背景を踏まえ、以下、MICRESSの開発経緯、機能、適用分野、解析例などについて解説します。

MICRESS（ MICRostructure Evolution Simulation Software）の開発は、ドイツのアーヘン工科大学付属の鋳造・凝固研究所ACCESS（http://www.access.rwth-aachen.de/）のマルチフェーズフィールド法の提案者であるSteinbach博士（現、Ruhr-Universität Bochem教授）がリーダーとなって1990年代半ばに開始されました。当初から、鉄系、アルミニウム系、ニッケル系などの工業用合金の凝固組織形成に対する汎用ソフトウエア構築をコンセプトとして開発されています。まず汎用化開発を実現している大きな理由として、フェーズフィールド界面駆動力と拡散係数を算定するために、計算状態図（CALPHAD: Calculation of Phase Diagram）の熱力学データベースとの連携を１プログラム内で実現したことがあります。現在、鉄鋼産業を中心として、合金設計には計算状態図は必須のツールとなっています。中でも弊社で販売しているThermo-Calc（http://www.thermocalc.com/）は、合金分野での熱力学データの豊富さと充実した計算機能から世界の業界標準として多用されています。とりわけThermo-Calcには、界面駆動力を算定するための自由エネルギー密度や化学ポテンシャルをプログラム内で算出するための関数群が用意されていることが、開発開始を大きく動機付けました。さらに、Thermo-Calcは元々スウェーデン王立工科大学にて開発されたものであるため（その後、独立し企業化）、EU圏内での連携のし易さも大きく寄与しています。2003年に販売開始され、昨年12月にバージョン6.2がリリースされました。日本では、Thermo-Calcとのセット利用が必須条件となることから、弊社での取り扱いが2005年から開始されました。日本国内では鉄鋼系を筆頭とした企業の材料研究開発部門、大学、公的研究機関での利用が順調に拡大しています。現在、世界販売に占める日本の割合が約25%となっており、日本の材料開発力の強さがこの数字からも理解できます。

MICRESSは、鋳造・凝固研究所にて開発が開始された関係上、“凝固周辺”の組織形成を解析対象としています。このため、ミクロンオーダーのスケールでの“粗い格子のマルチフェーズフィールド法”（Coarse Grid Multi-phase field Method）を用いています。よってスピノーダル分解などのナノスケールの固相変態は適用の対象外となっている点に注意が必要です。ナノスケールの組織形成計算には、“細かい格子のマルチフェーズフィールド法”（Fine Grid Multi-phase field Method）の枠組みが必要になり、プログラム全体が異なるものになります。しかし、MICRESSでは凝固後のミクロンオーダーの固相変態の計算を可能にしています。図1に例として炭素鋼における反応を示しますが、MICRESSはこれらを連続的に計算することが可能です。

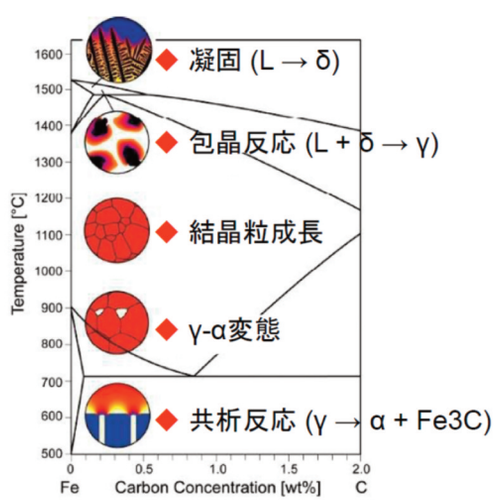


図1　Fe-C状態図と反応計算

以下にMICRESSの計算機能を示します。

① 任意数の成分、相および粒で構成された系
② 凝固、共晶/包晶反応、再結晶、粒粗大化
③ 一次元、二次元および三次元の場
④ 拡散データベースと連携した相互拡散および粒界拡散
⑤ 多様な核生成設定機能
⑥ ファセット界面を含む界面異方性モデル
⑦ 定比化合物相の取り扱い

⑧　歪エネルギー連性（弾性場連性）オプション
⑨　溶湯流れ場連性オプション
⑩　均質化法機械特性算出モジュールHOMAT（オプション）

ここで、④はThermo-Calcの熱力学データベースと同様に拡散モビリティデータベースと連携して、その場の相、温度、成分濃度に応じた拡散係数を自動算出する機能です。⑤、⑥および⑦の機能は、学術面ではあまり顧みられない課題ですが、MICRESSが工業用合金の組織形成予測計算に利用される点において重要な機能です。言うまでもなく核生成は組織形成（相変態）の起点として重要な現象ですが、未だ理論的・数値的に普遍的かつ正しく予測するのは困難です。そこで、MICRESSでは古典的核生成理論に基づき、様々な核生成条件を設定できるようプログラミングされています。⑥と⑦も、実際の合金では炭化物や金属間化合物の介在が材料特性に大きく影響し、逆にこれらの生成をコントロールすることで目的の性能を得たりしますので、界面移動や異方性特性をより実現象に合うように計算するための機能です。図2にこれらの機能を適用したアルミニウム合金（Al-Si-Cu-Mg-Ni）の凝固計算の結果を実験観察と比較して示します。灰色部分は液相、白色部分はAl-FCCの凝固組織、黒色部分は定比化合物Mg_2Siです。Al-FCCの樹状界面やMg_2Siのファセット界面が良く計算されているのが分かります。

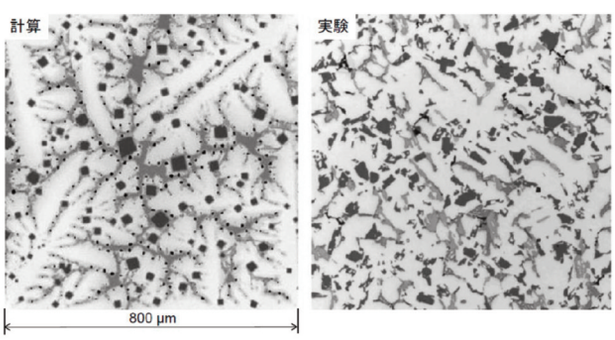


図2　Al-Si-Cu-Mg-Ni系凝固組織計算（B.Boettiger, J.Eiken and I.Steinbach: Acta Matter., 54(2006) 2697-2704.）

⑧から⑨の機能はオプションとなっています。特に⑨は昨年末に新規リリースされました。⑧は固相変態組織をより高精度に得たい場合に利用します。析出相が成長する際、母相との間でのモル体積差が大きいほど歪みエネルギーが大きくなり、相変態に影響します。このオプションではエシャルビーサイクルを解きながら歪エネルギー連性計算を行います。⑨の溶湯流れ連性機能は、凝固における液相の流れの影響を

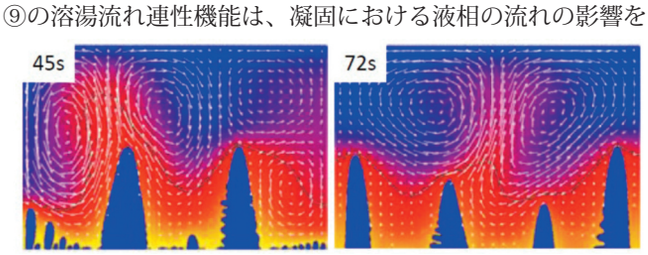


図3　溶湯流れ連性による１次デンドライト間隔の選択

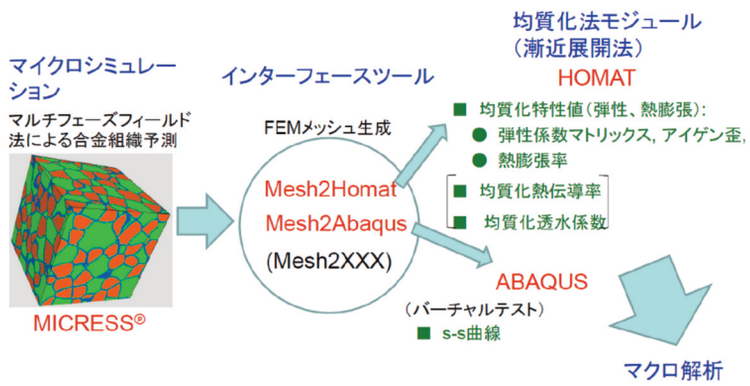


図4　均質化法モジュールHOMATの計算の流れ

非圧縮性ナビエストークス方程式と移流拡散方程式を解いて連性計算します。１次デンドライト近傍の液相では、溶質濃度境界層内の濃度差に起因する密度差から、対流が生じます。この対流が１次デンドライト近傍の濃度分布をさらに変化させることにより、凝固界面成長速度を変化させ、結局、対流の無い場合の１次デンドライト間隔とは異なってくることが良く知られています。図3に対流を伴う場合のデンドライト間隔選択の計算例を示します。溶湯の対流が、溶質濃度分布とデンドライト成長と連性している様子が分かります。今後、鋳造ソフトウエア等のマクロ湯流れ計算とのマルチスケール解析が期待されます。

最後にオプション機能⑩のHOMATですが、これも昨年度末にリリースされました。この機能はMICRESS本体とは分離されたソフトウエアであり、MICRESSにて計算された実用合金のミクロ組織から機械特性を算出します。計算の流れは図4のようになります。漸近展開法による均質化法を用いており、MICRESSの差分格子と組織分布からFEM格子を生成し、弾性率などの均質化機械特性を算出します。これら均質化特性値を機械部品に対するFEM解析の入力値とすることにより精度の高い設計解析を可能にします。さらに漸近展開による均質化法の利点として局所化計算が可能である点があります。マクロ解析の応力・歪の値からミクロ組織の応力・歪分布が求められることで、破壊の起点の判別をより高精度で予測できます。

一方、例えば鉄鋼製鋼プロセスでは、スラブを熱間圧延する際、一回のパスでできるだけ大きくプレスするのがコスト削減につながります。しかし、大きな塑性加工では耳割れの発生を招きます。そこで材料設計段階からプレス量を算定できることが求められています。このような計算を行うために、S-S曲線特性を得るためのインターフェース（Mesh2Abaqus）が用意されており、Abaqusを用いてバーチャルテスト計算を実行します。また、連続鋳造時にスラブ内部は等軸晶に表面付近は柱状晶になっているため、MICRESSの計算も等軸晶条件と柱状晶条件の２ケースを計算し、内部と表面付近の異なる機械特性値を設定します。図5にスラブの熱間圧延計算例を示します。このように、ミクロスケール材料組織形成計算からマクロスケール変形解析まで実際のプロセスのマルチスケール計算を可能にしています。

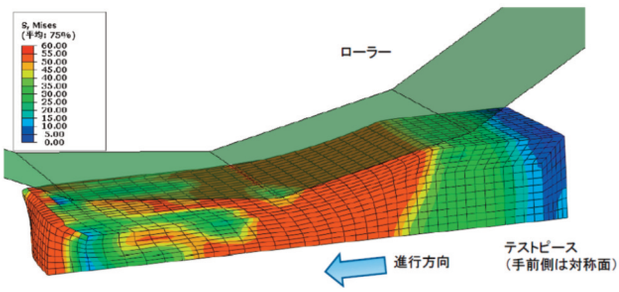
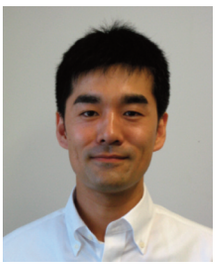


図5　スラブ熱間圧延計算（Abaqus、対称モデル）

以上、汎用マルチフェーズフィールド法ソフトウエアMICRESSは、マルチスケール解析ソリューションシステムとして発展を続けています。平行して今後重要な機械物性データベースなどの基盤開発も国際連携で進められています（http://web.access.rwth-aachen.de/MICRESS/ICMEg1/）。



沸騰伝熱促進技術開発に向けた取り組み

福多将人
（株）東芝 電力システム社 電力・社会システム技術開発センター

1．はじめに

発電プラントにおける熱交換器やパワーデバイスなど、沸騰現象を利用した冷却技術は様々な機器、システムで応用されている。これらの性能向上、または小型化には伝熱促進が重要であり、沸騰熱伝達率の向上が求められる。この実現に向けて、伝熱面の微細加工や表面改質等、これまで様々な沸騰伝熱促進技術の研究開発が行われてきた[1]。同時に、二相熱流動分野におけるシミュレーション技術も高度化が進められ、個々の気泡界面変形や、多数の気泡を含んだ二相流動まで高精度で把握することが可能となってきている。しかしながら、沸騰現象は、気泡生成や界面変形、熱移動、相変化による気泡成長、気泡離脱、伝熱面の濡れ等の素現象が複雑に連成して生じるため、現状では、上述の伝熱面の改質等が沸騰伝熱に与える影響に関して、定量評価が可能な技術は確立されていない。

そこで我々は、近年、計算力学分野で、相間の界面挙動を直接扱うことが可能な解析手法として高度化が進められているフェーズフィールド法に着目し、沸騰熱伝達の定量評価と伝熱促進を目的とした沸騰シミュレーションを開発してきた[2] [3]。本稿では、その取り組みについて紹介する。

2．沸騰シミュレーションの開発

表面改質による熱伝達率の促進効果を直接評価するために、伝熱面における沸騰気泡挙動を扱う必要がある。本研究では、拡散界面モデル[4]を用いて、相変化を伴う気泡界面の変形を評価する。本モデルでは、界面における密度勾配を基に界面エネルギーを与えて、質量保存式、運動量保存式、および界面エネルギーを含むエネルギー（式（１））の保存式を構築し、有限体積法により離散化して数値解析を実行する。

$$E=\frac{1}{2}\rho|\mathbf{u}|^2+e+\frac{\kappa_s}{2}|\nabla\rho|^2 \qquad (1)$$

ここで，ρ，u，κ_sはそれぞれ，密度，流速ベクトル，勾配エネルギー係数である．式(1)右辺の各項はそれぞれ、運動エネルギー、内部エネルギー、および界面エネルギーを表す。気液界面では、エネルギー保存式で求めたエンタルピと、蒸気表プログラム[5]から得られる飽和エンタルピを基にクォリティを算出し、界面内における中間物性値を算出する。

次に、伝熱面の濡れ性の評価方法を検討する。濡れ性は、図１に示す固気液三相界面でのエネルギーバランスより決定される。そこで、流体である気液界面に加えて、伝熱面である固体相の表面エネルギーについても、フェーズフィールド法を適用して評価する。このとき、固体と流体（気相と液相を含む）を区別するために、フェーズフィールド変数ϕを導入する。この変数ϕには任意の値を設定可能であり、例えば、固体相にϕ = 1、流体相にϕ = 0を設定する。気液界面と同様に、固体表面も有限な幅の遷移相を有し、変数ϕが0～1の間で滑らかに遷移するとみなして、界面での密度等の物性値は、ϕを用いて式(2)で算出する。

$$\rho'=\phi\rho_s+(1-\phi)\rho \qquad (2)$$

ただし、ρ、ρ_sはそれぞれ、流体、固体の密度である。固体－流体間の遷移相における変数ϕの勾配を基に、表面エネルギーを算出して濡れ性を考慮した解析を実現する。

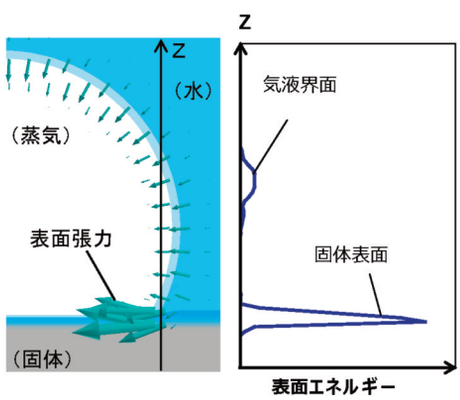
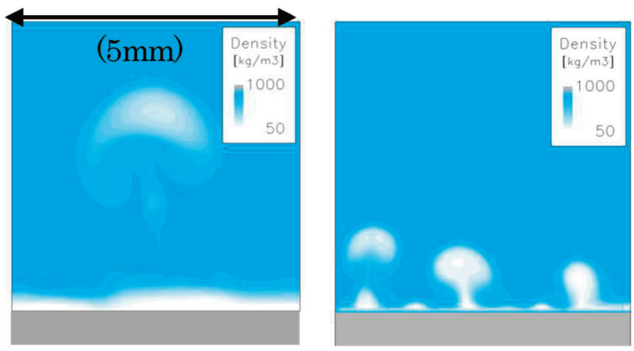


Fig.1 Schematic image of surface energy around a bubble.

3．沸騰伝熱促進の解析評価

開発手法を用いて、初めにプール沸騰現象を対象として沸騰熱伝達率の予測精度を評価した[2]。

図２に、解析で得られた密度分布を示す。圧力条件は7MPaとし、下部の伝熱面より一様熱流束100kW/m^{2}を与えている。比較のため、図左に伝熱面の表面エネルギーを考慮していないケース、図右に濡れ性モデルを適用し表面エネルギーを考慮したケースの結果を示した。図より、濡れ性モデル有のケースで、伝熱面上に複数の沸騰気泡が生成される様子が再現されていることが分かる。この時の沸騰熱伝達率を評価し、実験式と比較した結果を図３に示す。濡れ性モデルを適用することで、解析結果と実験式が良く一致することが確認された。



(w/o Wettability Model) (w/Wettability Model)

Fig.2 Snapshots of density distribution for pool boiling.

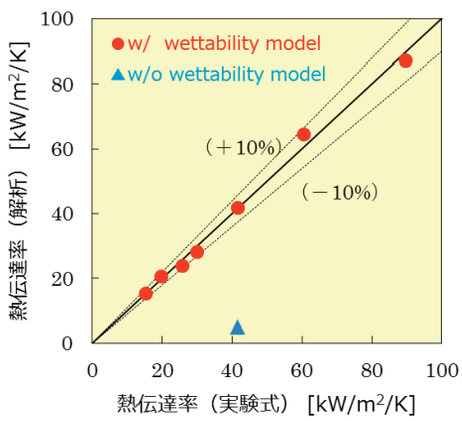


Fig.3 Comparison of heat transfer coefficient.

次に、開発手法を用いて、沸騰熱伝達率を向上する伝熱面改質条件について検討する[3]。

伝熱面を改質して濡れ特性を制御したとき、沸騰が促進され、熱伝達率を向上できることが知られている。これらの効果は、これまで実験研究により示されてきたが、解析を活用して伝熱促進の定量評価を実現した事例は、著者の知る限り見当たらない。本研究では、高い除熱能力を有する核沸騰現象を対象とし、前章で開発した沸騰シミュレーションを適用して、熱伝達率促進効果の評価を実施する。ここでは、沸騰促進するために発泡点密度を向上する条件を検討した。伝熱面に対して、表面エネルギー分布を設定して発泡点を制御し、沸騰熱伝達率への影響を評価した結果について以下に述べる。

解析体系には、圧力7MPaの流体部の下に設置した固体相に対して一様一定熱流束（100kW/m²）の境界条件を課した。伝熱面上には、局所的に表面エネルギーの低い領域を複数点設定する。本シミュレーションを実行すると、低エネルギー領域が撥水性の発泡点となり、沸騰気泡が発生する。

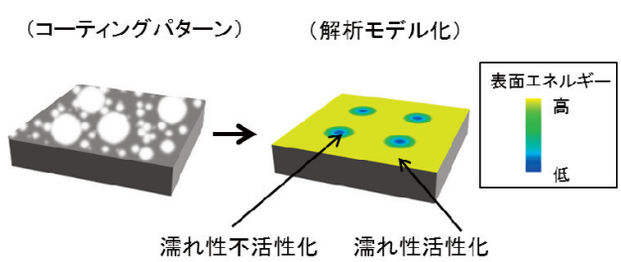


Fig.4 Image of numerical modeling of heated surface

図５に、本解析で得られた沸騰気泡挙動の可視化結果を示す。飽和水と飽和蒸気の中間密度の等値面、及び、伝熱面の過熱度分布をコンター図で示している。発泡点においては、蒸発潜熱が伝熱面から奪われるため、温度上昇が抑制されてほぼ飽和温度を維持し、それ以外の領域では数℃程度に過熱されていることが分かる。このとき生成された離脱気泡径Dは≦1.0 mmであり、これは、表面張力と浮力のバランスから理論的に導出された、Fritzの式[6]で予測される気泡径と一致する結果であった。これより、沸騰気泡の生成に関して、本解析は妥当な結果を与えていると考えられる。

次に、発泡点密度を変化させた時の伝熱面平均温度を算出し、その過熱度から熱伝達率の増加率を算出した結果を図６に示す。図より、発泡点密度の増加に応じて熱伝達率の増加が確認できる。また、図中には、伝熱面から伝わる熱がすべて沸騰気泡の生成に使われるとして導出された、Rohsenowの熱伝達理論[6]により算出した熱伝達率をプロットしており、本解析結果と概ね一致していることが分かる。以上の結果から、局所的に表面エネルギーの低い撥水面を設定することによる発泡点密度の増加が、沸騰熱伝達率の向上に有効であることを確認した。

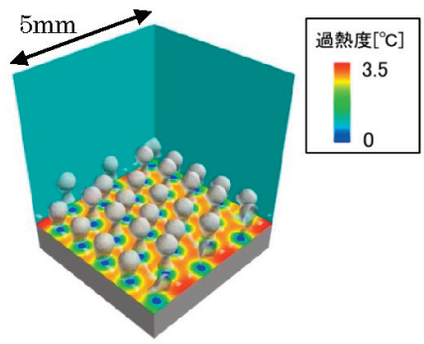


Fig.5 Temperature & bubbles nucleation on heated surface.

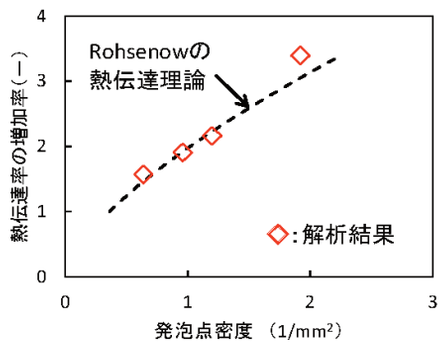


Fig.6 Enhancement of boiling heat transfer coefficient.

４．おわりに

熱交換器や冷却システムにおける沸騰伝熱の促進を目指して、沸騰シミュレーションの開発に取り組んできた。開発手法の特徴は、熱伝達率に対する伝熱面の表面改質の影響を直接評価することであり、本手法を用いて熱伝達率を向上する改質条件を検討した。今後は、本成果を高性能伝熱面の開発に反映し、試験により熱伝達率の向上効果を実証して、シミュレーションベースの合理的な高性能伝熱面開発技術を確立

していく。

参考文献

(1) Y. Takata, et al., Int. J. Air-Cond. Ref., Vol.20, No.1, 1150003, 2012.
(2) M. Fukuta and Y. Yamamoto, ASME FEDSM2014-21679, 2014.
(3) 福多将人、山本泰、第27回計算力学講演会、2014
(4) 高田尚樹、冨山明男、混相流研究の進展、Vol.2、pp.173-180、2007
(5) 蒸気表、日本機械学会、1999
(6) 沸騰熱伝達、日本機械学会、pp.102-104、1965

KSME-JSME Joint Symposium on Computational Mechanics & CAE 2014 at Jeju, Korea報告

高野直樹
慶應義塾大学 理工学部 機械工学科

Yoon Young Kim教授をチェアマンとして2010年にSeoul National Universityで第1回目の標題のジョイントシンポジウムが開催された後、2012年（金沢大学、チェアマン：山崎教授）に続き第3回目となる韓国機械学会－日本機械学会の計算力学分野のジョイントシンポジウムが2014年5月1日に韓国済州島Seogwipo KAL Hotelにて開催された。今回のチェアマンはMaenghyo Cho教授（Seoul National Unviersity）である。

日本側は金山教授（日本女子大学）を団長とし、HPC（high performance computing）とマルチスケールをキーワードとして、計9名が参加した。プログラムは下表に示すが、金山教授のキーノートスピーチのほかは発表順（敬称略、大学名略記）に、小野寺（東工大）、山田（東大）、和田（近畿大）、高橋（東京理科大）、高木（京都工繊大）、筆者、中林（東洋大）、武居（苫小牧高専）の各先生である。一般講演は質疑を含み20分ずつという短い発表であったが、内容の濃い最新の研究成果の発表とディスカッションを行った。

当日は天気にも大変に恵まれ、広々としたホテルの裏庭は鮮やかな緑の芝が輝いていた。お互いの発表の後は、バンケットで交流を深めることができた。個人的には、バンケット後も、Hyundaiの方やAltair Koreaの方々と、今後の本シンポジウムの形態について意見交換の場が持てたことは何よりであった。

バンケットでの話し合いで、2016年にソウルでWCCM-XIIとAPCOM-VIが開催されることに配慮し、次回は2015年秋に日本で開催し、以後は奇数年開催に変更することとなった。

日本機械学会計算力学部門としては、本ジョイントシンポジウムは部門の正式行事として、会員がよりオープンに参加できる機会として、継続していくことを決めた。現在すでに、2015年ホスト国として実行委員会が発足している。大島副部門長を実行委員長とし、アルテアエンジニアリング㈱代表取締役社長　綾目氏が副実行委員長に着任し、産学連携の体制をとり、準備を開始している。開催日や概要が決まり次第、学会HPなどでご案内しますので、次回は是非多数ご参加ください。

09:20 – 09:30	Opening ceremony	
09:30 – 10:00	Hiroshi Kanayama	Keynote: Domain decomposition analysis of industrial thermal convection problems
10:00 – 10:30	Heoung Jae Chun	Evaluation of surgical techniques in lumber spine with computer aided engineering
10:50 – 11:10	Minhyung Lee	Material constants extraction by Taylor-impact test
11:10 – 11:30	Naoyuki Onodera	Peta-scale large-eddy simulation using lattice Boltzmann method on the Tsubame supercomputer
11:30 – 11:50	Keonwook Kang	Atomistic calculation of cross-slip energy barrier in FCC Ni
11:50 – 12:10	Tomonori Yamada	Toward a high performance seismic simulation on petascale supercomputers
12:10 – 12:30	Seunghwa Yang	Nonlinear multiscale analysis of CNT/polymer nanocomposites: effect of interface, interphase, and agglomeration
01:40 – 02:00	Yoshitaka Wada	Development of high resolution visualization library for very large scale analysis
02:00 – 02:20	Sung Youb Kim	Negative Poisson's ratio in metallic structures
02:20 – 02:40	Akiyuki Takahashi	Dislocation dynamics study on the influence of elastic anisotropy in the plastic deformation of polycrystals
02:40 – 03:00	Jun-Sik Kim	A thickness length-scale effect of micro-beams by strain gradient elasticity
03:00 – 03:20	Tomohiro Takaki	Multi-scale hot-working simulations using phase-field and finite element methods
03:20 – 03:40	Seunghwa Ryu	A three-dimensional phase field model for nanowire growth by the vapor-liquid-solid mechanism
04:00 – 04:20	Naoki Takano	Stochastic multiscale finite element analysis of porous media
04:20 – 04:40	Byeongchan Lee	The anatomy of Tersoff potentials
04:40 – 05:00	Yasushi Nakabayashi	An efficient parallelization method and asymmetric solver for the fluid-structure interaction problem
05:00 – 05:20	Hyun-Gyu Kim	Hyperelasticity-based crystal plasticity models of face-centered cubic crystals
05:20 – 05:40	Amane Takei	Performance evaluation of parallel finite element electromagnetic field analysis using numerical human models in HPC environment
	Banquet	

第28回計算力学講演会のご案内

山田貴博
横浜国立大学大学院 環境情報研究院

第28回計算力学講演会は、横浜国立大学常盤台キャンパス理工学部（神奈川県横浜市保土ケ谷区）で2015年10月10日から12日までの3日間開催されます。

横浜は、安政の開国により開港した５つの港の一つである横浜港を拠点として発展した都市で、横浜市は総人口日本第２の東京２３区に次ぐ大都市となっています。横浜の魅力の一つは、横浜開港、文明開化を伝える史跡を始めとし、アジア最大の中華街である横浜中華街など、国際都市としての港の周りに広がる異国情緒あふれた観光地にあります。また、ウオーターフロントの町並みとして整備されたみなとみらい２１地区は主要なオフィス街であるとともに、横浜美術館などの文化施設や複数のショッピングモールなどが集まる人気スポットとなっています。

会場となる横浜国立大学常盤台キャンパスは、横浜港を望む丘の上に建設された緑あふれるキャンパスです。このキャンパスは、保土ケ谷カントリークラブの跡地に立てられたものですが、キャンパスの一部となっている森は実は自然の森ではなく、横浜国立大学で植物生態学を研究されていた名誉教授宮脇昭先生の計画のもと、土地本来の植生にしたがった多数の種類の樹種を混ぜて植樹を行い、それが育って現在のようになった森です。キャンパスに来られた際には、このような研究成果が活かされたキャンパスの森にも注目していただければと思います。

横浜駅は東京駅、羽田空港から電車で３０分の距離にあり、交通至便なターミナル駅となっています。横浜国立大学常盤台キャンパスは横浜駅からはやや離れたところに位置していますが、理工学部の講義棟を利用し、コンパクトな会場で効率的にセッションに参加できるような形で実施することを計画しています。実行委員会一同は、参加者皆様の有益な情報交換の場となる講演会になることを目指し準備しており、皆様の参加を心よりお待ちしております。

第28回計算力学講演会

ＵＲＬ http://www.jsme.or.jp/conference/cmdconf15
企　画　　日本機械学会 計算力学部門
開催日　　2015年10月10日（土）～12日（月）
会　場　　横浜国立大学（横浜市）
講演発表申込締切（予定）　2015年6月12日（金）
講演採択通知　　2015年7月中旬
講演原稿提出締切（予定）　2015年8月28日（金）
募集要項、発表形式、申込方法等

セッションには「オーガナイズドセッション」と「一般セッション」があります。発表形式は口頭発表を基本とします。ただし、セッションによってはポスター発表を受付けるセッションもあります。使用言語は日本語、または英語です。会員以外の方の発表も受け付けます。なお、発表の採否・プログラムの構成については、オーガナイザおよび講演会実行委員会にご一任願います。

講演会HPより講演申し込みを受け付け、7月下旬に発表採否の通知および講演会プログラムを講演会HPに掲載する予定です。講演論文原稿は、A4サイズで2ページを標準とし、最大3ページまでとします。講演申し込み方法、オーガナイズドセッション一覧、論文投稿方法等の詳細については、講演会HPをご参照下さい。

問合せ先
第28回計算力学講演会実行委員会
幹事　松井和己（横浜国立大学）
電話&FAX　(045) 339-4344
E-mail: jsmecmd28@ynu.ac.jp

2015年度年次大会の部門企画について

佐々木克彦
北海道大学大学院 工学研究院

2015年9月13日（日）を市民開放行事にあて、9月16日（水）まで、北海道大学 工学部（札幌市北区北13条西8丁目）において、2015年度年次大会が開催される予定です。2015年度の大会では、「Be Ambitious! ～機械工学の新たな挑戦～」をキャッチフレーズに、健康・医療・バイオ、グローバリゼーション、減災・災害防止、を3つの主要テーマとして実施致します。機械に関わる全ての方々にとって、新たな挑戦の場、情報交換・交流の場となるよう本大会を活用して頂ければ幸いです。特に企業の研究者・技術者や大学院・学部の学生諸君を対象とした企画も数多く予定されています。詳細は2015年度 年次大会 webページをご覧ください。

http://www.jsme.or.jp/conference/nenji2015/

計算力学部門では、次の特別行事・オーガナイズドセッションを実施予定です。皆様には是非ご参加くださいますようお願い申し上げます。

特別行事

先端技術フォーラム

・産学連携への期待
（計算力学部門/北海道支部/機械力学/計測制御/ロボテックス・メカトロニクス/設計工学・システム）
菊地厖（日鉄住金テクノロジー（株）、FAX 0439-80-2089、kikuchi.h3c.atsushi@jp.nssmc.com）

ワークショップ

・企業における革新的設計のためのＣＡＥ活用
（計算力学部門/設計工学/ＣＡＥ懇話会）
平野徹（ダイキン情報システム（株）、FAX 072-252-7273、tohru.hirano@daikin.co.jp）

・オープンCAEと日本のものづくり
（計算力学部門/NPO法人CAE懇話会/オープンCAE学会）
辰岡正樹（(株)アルゴグラフィックス、FAX 06-6150-0882、masaki_tatsuoka@argo-graph.co.jp）

オーガナイズドセッションとオーガナイザ一覧

○印は、代表オーガナイザ、連絡オーガナイザ

・低炭素社会を支える超並列シミュレーション技術
Massively Parallel Simulation Technology for Supporting Low-Carbon Society
（計算力学部門/材料力学部門/熱工学部門）
○奥田洋司（東京大、FAX 04-7136-4604、okuda@k.u-tokyo.ac.jp）、吉川暢宏（東京大）、黒瀬良一（京都大）

・生命体統合シミュレーション
Integrated Simulation of Living Matter
（バイオエンジニアリング部門/計算力学部門/流体工学部門/材料力学部門/マイクロ・ナノ工学部門）
○井上康博（京都大、FAX 075-751-4125、inoue@frontier.kyoto-u.ac.jp）、杉山和靖（大阪大）、田原大輔（龍谷大）、坂本二郎（金沢大）、和田成生（大阪大）、高木周（東京大）

・高温材料・機器の信頼性
Reliability of High-Temperature Materials and Components
（材料力学部門/機械材料・材料加工部門/動力エネルギーシステム部門/計算力学部門）
猪狩敏秀（三菱重工、FAX 095-834-2143、toshihide_igari@mhi.co.jp）、藤山一成（名城大）、野中勇（東北大）、西田秀高（中国電力）、屋口正次（電中研）

・工業材料の変形特性・強度およびそのモデル化
Deformation properties and strength of engineering materials and these modeling
（機械材料・材料加工部門/材料力学部門/計算力学部門）
○金子堅司（東京理科大、FAX 03-5228-8363、kaneko@rs.kagu.tus.ac.jp）、佐々木克彦（北海道大）

・流体機械の研究開発におけるEFD/CFD
EFD/CFD for research and development of fluid machinery
（流体工学部門/計算力学部門）
○古川雅人（九州大、FAX 092-802-3117、furu@mech.kyushu-u.ac.jp）、船崎健一（岩手大）、山本悟（東北大）、渡邉聡（九州大）、重光亨（徳島大）

・燃料電池・二次電池とマイクロ・ナノ現象
Fuel cell, battery and their micro/nano phenomena
（流体工学部門/熱工学部門/計算力学部門/動力・エネルギー部門/材料力学部門/マイクロ・ナノ工学部門）
大島伸行（北海道大）、近久武美（北海道大）、鹿園直毅（東京大）、○花村克悟（東京工業大、FAX 03-5734-3705、hanamura@mech.titech.ac.jp）、橋田俊之（東北大）、徳増崇（東北大）

・電子情報機器、電子デバイスの強度・信頼性評価と熱制御

Reliability Evaluation and Thermal Management of Electrical Devices
（熱工学部門/材料力学部門/計算力学部門）
○畠山友行（富山県立大、、FAX 0766-56-6131、hatake@pu-toyama.ac.jp）、川上　崇（富山県立大）、于強（横浜国立大）、池田　徹（鹿児島大）

・複合材料構造の解析と最適化
Analysis and optimization of composite material structures
（機械力学・計測制御部門/計算力学部門）
○成田吉弘（北海道大、FAX011-706-6416、ynarita@eng.hokudai.ac.jp）、轟　章（東京工業大）、太田　佳樹（北海道科学大）、本田　真也（北海道大）

・交通機関の安全安心シミュレーション
Simulation for Safety of Automobile and Traffic Environment
（設計工学・システム部門/計算力学部門）
吉村忍（東京大）、酒井譲（横浜国立大）、森田和元（交通安全環境研）、藤井秀樹（東京大）、○北栄輔（名古屋大、FAX 052-789-3521、kita@is.nagoya-u.ac.jp）

・解析・設計の高度化・最適化
Innovation and Optimization of CAE and Design
（設計工学・システム部門/計算力学部門）
○西脇眞二（京都大、FAX 075-383-3601、shinji@prec.kyoto-u.ac.jp）、下田昌利（豊田工業大）、長谷川浩志（芝浦工業大学）、山本崇史（工学院大）

・医工学テクノロジーによる医療福祉機器開発
Medical machine development via medicine-engineering collaboration
（医工学テクノロジー推進会議、機械力学･計測制御部門、流体工学部門、計算力学部門ほか）
田中真美（東北大、FAX 022-795-5878、mami@rose.mech.tohoku.ac.jp）、辻内 伸好（同志社大）、安藤建（パナソニック(株)）、白石俊彦（横浜国立大）

お問合せ先
佐々木 克彦（北海道大学大学院 工学研究院）
TEL 011-706-6376、 katsu@eng.hokudai.ac.jp

《各行事の問い合わせ、申込先》
日本機械学会計算力学部門担当　川島礼二郎　E-mail: kawashima@jsme.or.jp
〒160-0016　東京都新宿区信濃町35番地　信濃町煉瓦館5F　TEL 03-5360-3501　FAX 03-5360-3508

計算力学部門ニュースレター No. 53 : 2015年4月8日発行
ニュースレターのカラー版（No. 41～）につきましては、日本機械学会計算力学部門の下記URLをご覧下さい。
http://www.jsme.or.jp/cmd/Newsletter/index.html
編集責任者：広報委員会委員長　滝沢研二
ニュースレターへのご投稿やお問い合わせは下記の広報委員会幹事までご連絡ください。
なお、各記事の文責は著者にあります。
広報委員会 幹事　永井亨
エムエスシーソフトウェア株式会社
〒60-0023　東京都新宿区西新宿1-23-7　新宿ファーストウエスト8F
TEL：03-6911-1220　FAX：03-6911-1221　E-Mail：toru.nagai@mscsoftware.com

印刷：生々文献サービス／〒151-0053 東京都渋谷区代々木2-36-6／TEL.03-3375-8446／FAX 03-3375-8447／E-mail: seiseibunken@nifty.com