溶融・凝固による移動境界問題の粘塑性構成式を用いた 固相-液相の連成解析*

(第1報, 問題のモデル化と基礎式, 有限要素式)

佐久間 淳^{*1}, 井上 達雄^{*2}

Coupled Solid-Liquid Analysis for Viscoplastic Body with Moving Boundary Caused by Melting/Solidification (1st Report, Modeling and Fundamental/Finite Element Equations)

Atsushi SAKUMA and Tatsuo INOUE

Formulation of conservation laws of mass, momentum and energy for the region with moving interface between a solid and a liquid is described in the first part of the paper. Here, jump conditions of velocity, stress and heat flux on the interface are applied to give the fundamental equations including the Stefan condition relevant to the analysis of some problems incorporating melting/solidification. Discretized finite element equations for the analysis of temperature, stress/strain and melting/solidification in the course of welding are formulated using the thermo elasto viscoplastic constitutive equation.

Key Words: Constitutive Equations, Numerical Analysis, FEM, Viscoplasticity, Moving Boundary, Phase Transformation, Melting, Solidification

1. 緒 言

材料の溶融・凝固は、鋳造や溶接など部材の成形や接合の手段として利用されているが、その過程で生じる温度や組織の変化による変形や残留応力などの力学的な効果が、製品の性能に大きな影響を与える場合が少なくない。この過程の問題に関しては、熱伝導における Stefan 問題など境界を求めるための研究⁽¹⁾⁻⁽³⁾は盛んである一方で、液相と固相が共存することによる現象の複雑さのため、力学的問題まで考慮して扱われることは多くはなかった⁽⁴⁾⁻⁽⁷⁾。この溶融・凝固過程の力学問題に対して現在まで筆者らは、材料の固相から液相までの力学的挙動を表現可能な粘塑性構成式を用いて、有限要素法の定式化とそれを用いた溶接や鋳造などの工学過程のシミュレーションを行ってきた⁽⁸⁾⁻⁽¹²⁾。

本研究では、溶融・凝固によって固相と液相の境界が移動する物体の力学的問題について、2相から成っている系を各相ごとの領域に分けて考えるモデル⁽¹³⁾を用い、そこにおいて問題の解が満足すべき条件について考察した。また、この手法によって Stefan 条件が導出できることを示す。さらに、これら基礎式に関する考察に加えて、力学的な構成関係として液相から固相までの材

料の力学的挙動の表現が可能な粘塑性構成式を用いて、固相領域では弾性ひずみを考慮した弾・粘塑性構成式、液相では弾性ひずみを無視した剛粘塑性構成式を適用することによって、先のモデルから得られる境界条件を考慮した有限要素式の導出を行う。とくにここでは、この過程が一般に熱ひずみと変態ひずみを伴うことから、これらのひずみの影響を考慮した構成式を用いた定式化を行い、今後の溶接等の工学問題への応用を可能なものとする。

2. 系内部の境界が移動する問題

相変態を伴う系の支配方程式を導出する過程において、ここでは系内に相界面(以後内部境界とする)が存在するモデルを用いた結果を示す。とくに、この内部境界が溶融・凝固などの相変態によって移動する問題について、系に保存則を適用することによって内部境界で満足すべき諸条件を導出する。

2.1 変化率の表現 いま、Fig.1(a)に示す法線 n_i で定義される境界 Γ (以後外部境界とする) が速度 v_i' で移動している領域 V を考える⁽¹⁴⁾。このとき、任意のスカラー、ベクトル、テンソルで表される示量変数 $\phi(x_i, t)$ の領域 V 内での積分の物質導関数は

$$\frac{D}{Dt} \int_V \phi dV = \int_V \frac{\partial \phi}{\partial t} dV + \int_{\Gamma} \phi v_i' n_i d\Gamma \dots \dots (1)$$

となる。さらに、領域 V 内で定義される物質点の速度 v_i

* 原稿受付 1995 年 9 月 20 日。

^{*1} 正員、山口大学工学部 (〒755 宇部市常盤台 2557)。

^{*2} 正員、京都大学工学部 (〒606 01 京都市左京区吉田本町)。

Fig. 1 Definition of velocity v_i of material point and velocity v'_i of outer boundary Γ (Fig.(a)) and inner boundary $\bar{\Gamma}$ (Fig.(b)).

を考えると、境界上で $v'_i \neq v_i$ の場合に式 (1) は

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \int_V \phi dV &= \int_V \frac{\partial \phi}{\partial t} dV + \int_{\Gamma} \phi v_i n_i d\Gamma + \int_{\Gamma} \phi (v'_i - v_i) n_i d\Gamma \\ &= \int_V \left(\frac{D\phi}{Dt} + \phi \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \right) dV + \int_{\Gamma} \phi (v'_i - v_i) n_i d\Gamma \dots (2) \end{aligned}$$

とすることができる。

とくに、外界と接している境界 Γ を通して物質の流入がない場合は、境界の速度 v'_i と境界上の物質点の

速度 v_i は等しいので、式 (2) で $v'_i = v_i$ とおくと

$$\frac{D}{Dt} \int_V \phi dV = \int_V \left(\frac{D\phi}{Dt} + \phi \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \right) dV \dots (3)$$

となり、通常の関係となる。

2.2 内部境界を考慮した変化率

ここでは、添字 s, l で表される 2 相が内部境界 $\bar{\Gamma} (= \Gamma_s \cap \Gamma_l)$ で接しており、それぞれの相が占める領域 V_s, V_l から全領域 V が構成されている場合について考える (Fig.1(b)). とくにここでは、境界 $\bar{\Gamma}$ が速度 v'_i で系内を移動している場合、つまり相変態によって境界が物質点に対して移動しているものとする。このとき、境界条件は

$$v'_i = v_i \quad \text{on } \Gamma \dots (4)$$

$$v'_i \neq v_i \quad \text{on } \bar{\Gamma} \dots (5)$$

となる。このとき、変数 ϕ の領域 V 全体での時間変化は、2 つの領域 V_s, V_l それぞれの時間変化の和で表すことができる。

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \int_V \phi dV &= \frac{D}{Dt} \left(\int_{V_s} \phi dV + \int_{V_l} \phi dV \right) \\ &= \frac{D}{Dt} \int_{V_s} \phi dV + \frac{D}{Dt} \int_{V_l} \phi dV \dots (6) \end{aligned}$$

固相領域 V_s の境界 Γ_s と液相領域 V_l の境界 Γ_l は、それぞれ $\Gamma_s = (\Gamma_s \cap \bar{\Gamma}) \cup (\Gamma_s \cap \Gamma)$, $\Gamma_l = (\Gamma_l \cap \bar{\Gamma}) \cup (\Gamma_l \cap \Gamma)$ とすることができるので、さらに式 (6) の右辺第 1, 2 項それぞれに式 (2) を適用して次式を導出することができる。

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \int_V \phi dV &= \int_{V_s} \left(\frac{D\phi}{Dt} + \phi \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \right) dV + \int_{\Gamma_s \cap \bar{\Gamma}} \phi (v'_i - v_i) n_i d\Gamma + \int_{V_l} \left(\frac{D\phi}{Dt} + \phi \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \right) dV + \int_{\Gamma_l \cap \bar{\Gamma}} \phi (v'_i - v_i) n_i d\Gamma \\ &\dots (7) \end{aligned}$$

2.3 諸量の保存則に関する考察 ここでは、内部境界が移動する全領域 V に質量、運動量、エネルギーの各保存則を適用し、それによって内部境界 $\bar{\Gamma}$ で成立すべき条件を導出する。

まず式 (7) の ϕ として密度 ρ を用いると全領域 V に対する質量保存則が得られる。

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho dV = \int_{V_s} \left(\frac{D\rho}{Dt} + \rho \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \right) dV + \int_{\Gamma_s \cap \bar{\Gamma}} \rho (v'_i - v_i) n_i d\Gamma + \int_{V_l} \left(\frac{D\rho}{Dt} + \rho \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \right) dV + \int_{\Gamma_l \cap \bar{\Gamma}} \rho (v'_i - v_i) n_i d\Gamma = 0 \dots (8)$$

ここで、連続の式 $D\rho/Dt + \rho \partial v_i / \partial x_i = 0$ を式 (8) に代入すると次式が得られる。

$$\int_{\Gamma_s \cap \bar{\Gamma}} \rho (v'_i - v_i) n_i d\Gamma + \int_{\Gamma_l \cap \bar{\Gamma}} \rho (v'_i - v_i) n_i d\Gamma = 0 \dots (9)$$

さらに相 s, l の密度 ρ をそれぞれ ρ_s, ρ_l 、速度 v_i を v_i^s, v_i^l とし、境界 Γ_s, Γ_l を定義する法線 n_i^s, n_i^l が境界 $\bar{\Gamma}$ 上で $n_i^s = -n_i^l$ となることを考慮すると、式 (9) の局所形 $\rho_s (v'_i - v_i^s) n_i^s + \rho_l (v'_i - v_i^l) n_i^l = 0$ から次式が導出される。

$$\rho_s v_i^s n_i^s - \rho_l v_i^l n_i^s = (\rho_s - \rho_l) v'_i n_i^s \dots (10)$$

これは、境界 $\bar{\Gamma}$ での速度 v_i の跳躍条件 (jump condition) を表し、系が質量保存則を満足するための条件となる。

運動量の保存則について考えると、領域 V に関しては物体力 b_i 、表面力 $\bar{t}_i$ を用いて

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho v_i dV = \int_V \rho b_i dV + \int_{\Gamma} \bar{t}_i d\Gamma = \int_{V_s} \rho b_i dV + \int_{\Gamma_s \cap \bar{\Gamma}} \bar{t}_i d\Gamma + \int_{V_l} \rho b_i dV + \int_{\Gamma_l \cap \bar{\Gamma}} \bar{t}_i d\Gamma \dots (11)$$

を考えることができる。一方、式 (7) における ϕ として運動量 ρv_i を考えると

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho v_i dV = \int_{V_s} \rho \frac{Dv_i}{Dt} dV + \int_{\Gamma_s \cap \bar{\Gamma}} \rho (v'_j - v_j) v_i n_j d\Gamma + \int_{V_l} \rho \frac{Dv_i}{Dt} dV + \int_{\Gamma_l \cap \bar{\Gamma}} \rho (v'_j - v_j) v_i n_j d\Gamma \dots (12)$$

となり、これに運動方程式 $\rho Dv_i/Dt = \rho b_i + \partial \sigma_{ji} / \partial x_j$ を代入すると

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \int_V \rho v_i dV &= \int_{V_s} \rho b_i dV + \int_{\Gamma_s} \sigma_{ji} n_j d\Gamma + \int_{\Gamma_s \cap \bar{\Gamma}} \rho (v'_j - v_j) v_i n_j d\Gamma + \int_{V_l} \rho b_i dV + \int_{\Gamma_l} \sigma_{ji} n_j d\Gamma + \int_{\Gamma_l \cap \bar{\Gamma}} \rho (v'_j - v_j) v_i n_j d\Gamma \\ &\dots (13) \end{aligned}$$

となる。ここで $\bar{t}_i = \sigma_{ji} n_j$ なる Cauchy の関係を考えると、式 (11) と (13) から内部境界 $\bar{\Gamma}$ に関して

$$\int_{\Gamma_s \cap \bar{\Gamma}} \sigma_{ji} n_j d\Gamma + \int_{\Gamma_l \cap \bar{\Gamma}} \sigma_{ji} n_j d\Gamma + \int_{\Gamma_s \cap \bar{\Gamma}} \rho v_i (v'_j - v_j) n_j d\Gamma + \int_{\Gamma_l \cap \bar{\Gamma}} \rho v_i (v'_j - v_j) n_j d\Gamma = 0 \dots (14)$$

の関係が得られる。さらに、この局所形に速度 v_i の跳躍条件を表す式 (10) を考慮すると

$$\sigma_{ji}^s n_j^s - \sigma_{ji}^l n_j^l = \rho_s v_i^s (v_j^s - v_j^l) n_j^s + \rho_l v_i^l (v_j^s - v_j^l) n_j^l = \rho_s (v_i^s - v_i^l) (v_j^s - v_j^l) n_j^s \dots (15)$$

となる。これは内部境界 $\bar{\Gamma}$ での応力 σ_{ij} の跳躍条件を表し、系が運動量保存則を満足するための条件となる。

またエネルギー保存則については、その保存則は内部エネルギー密度 e 、熱供給密度 $\bar{\gamma}$ と熱流束 q_i を考慮すると

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho e dV + \frac{D}{Dt} \int_V \frac{1}{2} \rho v_i v_i dV = \int_V \rho b_i v_i dV + \int_{\bar{\Gamma}} \sigma_{ji} v_i n_j d\Gamma + \int_V \rho \bar{\gamma} dV - \int_{\bar{\Gamma}} q_i n_i d\Gamma \dots (16)$$

となり、さらに応力 σ_{ij} の対称性を考慮してこれを整理すると次の関係が得られる。

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho e dV = \int_V \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij} dV + \int_V \rho \bar{\gamma} dV - \int_{\bar{\Gamma}} q_i n_i d\Gamma \dots (17)$$

ここで、式 (7) の ϕ として単位体積当たりの内部エネルギー ρe を考えると、2 相 s, l からなる領域 V について

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho e dV = \int_{V_s} \rho \frac{De}{Dt} dV + \int_{\Gamma_s \cap \Gamma} \rho e (v_i^l - v_i^s) n_i d\Gamma + \int_{V_l} \rho \frac{De}{Dt} dV + \int_{\Gamma_l \cap \Gamma} \rho e (v_i^l - v_i^s) n_i d\Gamma \dots (18)$$

が得られ、さらにこの右辺に対して式 (17) の関係を用いると、内部境界 $\bar{\Gamma}$ に関する次の式が得られる。

$$\int_{\Gamma_s \cap \Gamma} \rho e (v_i^l - v_i^s) n_i d\Gamma - \int_{\Gamma_s \cap \Gamma} q_i n_i d\Gamma + \int_{\Gamma_l \cap \Gamma} \rho e (v_i^l - v_i^s) n_i d\Gamma - \int_{\Gamma_l \cap \Gamma} q_i n_i d\Gamma = 0 \dots (19)$$

したがって、この局所形から

$$q_i^s n_i^s - q_i^l n_i^l = \rho_s e_s (v_i^l - v_i^s) n_i^s - \rho_l e_l (v_i^l - v_i^s) n_i^l \dots (20)$$

となる。ここで、先の跳躍条件の式 (10) を考慮すると次の関係を導出することができる。

$$q_i^s n_i^s - q_i^l n_i^l = \rho_s (e_s - e_l) (v_i^l - v_i^s) n_i^s \dots (21)$$

これは、内部境界 $\bar{\Gamma}$ での熱流束 q_i の跳躍条件となる。

また、ここで示した解析モデルの一般性の検証として、式 (21) から溶融・凝固問題で多く用いられる Stefan 条件を導出する。まず、内部エネルギー密度 e としてエンタルピー密度 h を用いて得られる $e = h + (1/\rho) \sigma_{ij} \epsilon_{ij}$ なる関係を考えると

$$e_s - e_l = h_s - h_l + \frac{1}{\rho_s} \sigma_{ij}^s \epsilon_{ij}^s - \frac{1}{\rho_l} \sigma_{ij}^l \epsilon_{ij}^l \dots (22)$$

が得られ、さらに Fourier の法則とエンタルピー密度差 $\Delta h = h_l - h_s$ が両相間の相変態の潜熱 l であることを考慮すると、式 (21) に (22) を代入し

$$k_s \frac{\partial T_s}{\partial x_i} n_i^s - k_l \frac{\partial T_l}{\partial x_i} n_i^l = \rho_s \left[l - \frac{1}{\rho_s} \sigma_{jk}^s \epsilon_{jk}^s + \frac{1}{\rho_l} \sigma_{jk}^l \epsilon_{jk}^l \right] (v_i^l - v_i^s) n_i^s \dots (23)$$

が得られる。ここで k は熱伝導率、 T は温度である。さらに各相の速度 v_i と応力 σ_{ij} を無視すると

$$k_s \frac{\partial T_s}{\partial x_i} n_i^s - k_l \frac{\partial T_l}{\partial x_i} n_i^l = \rho_s l v_i^l n_i^s \dots (24)$$

となるが、これはいわゆる Stefan 条件⁽¹⁷⁾であって、ここでの解析モデルが Stefan 問題を表現可能であることを示している。

さらに、各相の速度や応力を考慮する力学問題に対しては、条件として式 (10)、(15)、(21) に基づいた定式化を行うことになる。

3. 構成式と固体、液体の応力/ひずみ解析

ここでは、材料の固体から液体までの材料挙動を表現可能な粘塑性構成式⁽⁸⁾を用い、系の静的つり合い状態を考慮して $Dv_i/Dt = 0$ とした上で、固体と液体それぞれの場合の応力/ひずみ解析のための有限要素式を示す。

3.1 相変態を考慮した熱弾・粘塑性構成式 常

温から溶融状態までの材料挙動を表現するため、ここでは全ひずみ速度 $\dot{\epsilon}_{ij}$ を

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \dot{\epsilon}_{ij}^e + \dot{\epsilon}_{ij}^{vp} + \dot{\epsilon}_{ij}^T + \dot{\epsilon}_{ij}^m \dots (25)$$

で表す。ただし、 $\dot{\epsilon}_{ij}^e$ は弾性ひずみ、 $\dot{\epsilon}_{ij}^{vp}$ は粘塑性ひずみ、 $\dot{\epsilon}_{ij}^T$ は熱ひずみ、 $\dot{\epsilon}_{ij}^m$ は変態ひずみである。

ここで弾性ひずみ ϵ_{ij}^e は、Young 率 E と Poisson 比 ν を用いた Hooke の法則によって次式で表される。

$$\epsilon_{ij}^e = \frac{1+\nu}{E} \sigma_{ij} - \frac{\nu}{E} \sigma_{kk} \delta_{ij} \dots (26)$$

また、粘性に依存したひずみは粘性係数 μ を用いて

$$\dot{\epsilon}_{ij}^{vp} = \frac{1}{2\mu} s_{ij} \dots (27)$$

で表され、さらに偏差応力 s_{ij} の第 2 不変量 J_2 と降伏応力 σ_y からなる降伏関数 $F = \sqrt{3J_2} - \sigma_y$ を用いて

$$\frac{1}{2\mu} = \frac{\gamma\sqrt{3}}{2\sqrt{J_2}} \langle \psi(F) \rangle \dots (28)$$

とおくと、式 (27) は Perzyna の粘塑性ひずみ⁽¹⁵⁾となつて、しかも Newton 流体の構成関係も与えられる⁽¹⁶⁾。

ただし、 $\langle \rangle$ は次の Macauley 記号である。

$$\langle \psi(F) \rangle = \begin{cases} 0 & (F < 0) \\ \psi(F) & (F \geq 0) \end{cases} \dots (29)$$

熱ひずみ速度 $\dot{\epsilon}_{ij}^T$ 、変態ひずみ速度 $\dot{\epsilon}_{ij}^m$ はそれぞれ

$$\dot{\epsilon}_{ij}^T = \alpha \dot{T} \delta_{ij} \dots (30)$$

$$\dot{\epsilon}_{ij}^m = \sum_I \beta_I \dot{\xi}_I \delta_{ij} \dots (31)$$

で与えられる。ここで、 α は線膨張係数、 β_I と ξ_I は組織 I の変態膨張係数と体積分率を表している⁽⁸⁾。

3.2 弾・粘塑性構成式を用いた定式化 式 (25)

で示した構成関係を速度形の仮想仕事の原理式

$$\int_V \{\dot{\sigma}\}^T \{\delta \dot{\epsilon}\} dV - \int_{\bar{\Gamma}} \{\dot{\sigma}\}^T \{\delta v\} d\Gamma - \int_V \{\rho \dot{b}\}^T \{\delta v\} dV = 0 \dots (32)$$

に適用することによって、次に示す有限要素式

$$[K]\{v\} = \{\dot{f}^t\} + \{\dot{f}^b\} + \{\dot{f}^T\} + \{\dot{f}^m\} + \{\dot{f}^{vp}\} \dots (33)$$

が得られる⁽⁸⁾。ここで、各項は

$$[K] = \sum_V \int_{V_e} [B]^T [D^e] [B] dV \dots (34)$$

$$\{f^i\} = \sum_V \int_{\Gamma_e} [N]^T \{\dot{t}\} d\Gamma \dots\dots\dots (35)$$

$$\{f^b\} = \sum_V \int_{V_e} [N]^T \{\rho b\} dV \dots\dots\dots (36)$$

$$\{f^T\} = \sum_V \int_{V_e} [B]^T [D^*] \{\bar{\alpha}\} \dot{T} dV \dots\dots\dots (37)$$

$$\{f^m\} = \sum_V \int_{V_e} [B]^T [D^*] \sum_I \{\bar{\beta}_I\} \dot{\xi}_I dV \dots\dots\dots (38)$$

$$\{f^{vp}\} = \sum_V \frac{1}{2\mu} \int_{V_e} [B]^T [D^*] \{s\} dV \dots\dots\dots (39)$$

である。[B], [D*], [N] はそれぞれ変位-ひずみマトリックス, 弾性マトリックス, 形状関数を表し, $\{\bar{\alpha}\}$, $\{\bar{\beta}_I\}$ は弾性係数の温度, 組織依存性を含めた次式とする。

$$\{\bar{\alpha}\} = \{\alpha\} + \frac{\partial}{\partial T} [D^*]^{-1} \{\sigma\} \dots\dots\dots (40)$$

$$\{\bar{\beta}_I\} = \{\beta_I\} + \frac{\partial}{\partial \xi_I} [D^*]^{-1} \{\sigma\} \dots\dots\dots (41)$$

3.3 剛粘塑性構成式を用いた定式化 Perzyna

の粘塑性モデルは Newton 流体の力学的な挙動も表現可能であることから, 溶融・凝固現象の解析にも適用可能であるが, 一般的に非圧縮性液体では Hooke の法則に基づく弾性ひずみは生じないと考えられるので, これを考慮した式 (33) を無条件で液相の力学的挙動の解析に適用することはできない。そこでここでは, 式 (25) の構成関係から弾性ひずみ成分を無視した場合の有限要素式を示す。

このとき, 全ひずみ速度としては

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \dot{\epsilon}_{ij}^p + \dot{\epsilon}_{ij}^T + \dot{\epsilon}_{ij}^m \dots\dots\dots (42)$$

を考え, これに既に示した粘塑性ひずみ $\dot{\epsilon}_{ij}^p$, 熱ひずみ $\dot{\epsilon}_{ij}^T$, 変態ひずみ $\dot{\epsilon}_{ij}^m$ を表す式 (27), (30), (31) を代入す

$$\dot{\phi} = \int_V \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij} dV - \int_{\Gamma} \sigma_{ji} n_j v_i d\Gamma - \int_V \rho b_i v_i dV + \frac{1}{2} \bar{\lambda} \int_V (\dot{\epsilon}_{ii}^{vp})^2 dV \dots\dots\dots (47)$$

となる。ここで, 最終項が得られた解が $\dot{\epsilon}_{ii}^{vp} = 0$ を満足させるための penalty である。したがって, 式 (47) の変位速度 v_i に関する変分形

$$\int_V s_{ij} \delta \dot{\epsilon}_{ij} dV - \int_{\Gamma} \sigma_{ji} n_j \delta v_i d\Gamma - \int_V \rho b_i \delta v_i dV + \bar{\lambda} \int_V (\dot{\epsilon}_{kk} - 3\alpha \dot{T} - 3 \sum_I \beta_I \dot{\xi}_I) \delta \dot{\epsilon}_{ii} dV = 0 \dots\dots\dots (48)$$

を満足させる解を求めることによって, 体積粘塑性ひずみ速度 $\dot{\epsilon}_{ii}^{vp}$ が 0 に近い変位速度 v_i をえることができる。式 (48) のマトリックス式

$$\int_V \{\delta \dot{\epsilon}\}^T \{s\} dV - \int_{\Gamma} \{\delta v\}^T \{\dot{t}\} d\Gamma - \int_V \{\delta v\}^T \{\rho b\} dV + \bar{\lambda} \int_V \{\delta \dot{\epsilon}\}^T \{A\} \{A\}^T \left(\{\dot{\epsilon}\} - \{\alpha\} \dot{T} - \sum_I \{\beta_I\} \dot{\xi}_I \right) dV = 0 \dots\dots\dots (49)$$

から, 有限個の要素からなる領域 V に対して

$$\begin{aligned} \{\delta v\}^T \sum_V \left[\int_{V_e} \frac{1}{2\mu} [B]^T [C] \left(\{\dot{\epsilon}\} - \{\alpha\} \dot{T} - \sum_I \{\beta_I\} \dot{\xi}_I \right) dV - \int_{\Gamma_e} [N]^T \{\dot{t}\} d\Gamma - \int_{V_e} [N]^T \{\rho b\} dV \right. \\ \left. + \bar{\lambda} \int_{V_e} [B]^T \{A\} \{A\}^T \left(\{\dot{\epsilon}\} - \{\alpha\} \dot{T} - \sum_I \{\beta_I\} \dot{\xi}_I \right) dV \right] = 0 \dots\dots\dots (50) \end{aligned}$$

が得られ, これが任意の速度 $\{\delta v_i\}$ に対して成立することから, 結果として次式が得られる。

$$[K] \{v\} = \{f^i\} + \{f^b\} + \{f^T\} + \{f^m\} \dots\dots\dots (51)$$

ただし,

$$[K] = \sum_V \left(\int_{V_e} 2\mu [B]^T [C] [B] dV - \bar{\lambda} \int_{V_e} [B]^T \{A\} \{A\}^T [B] dV \right) \dots\dots\dots (52)$$

$$\{f^i\} = \sum_V \int_{\Gamma_e} [N]^T \{\dot{t}\} d\Gamma \dots\dots\dots (53)$$

$$\{f^b\} = \sum_V \int_{V_e} [N]^T \{\rho b\} dV \dots\dots\dots (54)$$

$$\{f^T\} = \sum_V \int_{V_e} \left(2\mu [B]^T [C] - \bar{\lambda} [B]^T \{A\} \{A\}^T \right) \{\alpha\} \dot{T} dV \dots\dots\dots (55)$$

$$\{f^m\} = \sum_V \int_{V_e} \left(2\mu [B]^T [C] - \bar{\lambda} [B]^T \{A\} \{A\}^T \right) \sum_I \{\beta_I\} \dot{\xi}_I dV \dots\dots\dots (56)$$

ると, 次の関係が得られる。

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \frac{1}{2\mu} s_{ij} + \alpha \dot{T} \delta_{ij} + \sum_I \beta_I \dot{\xi}_I \delta_{ij} \dots\dots\dots (43)$$

また, これを偏差応力 s_{ij} について解くと

$$s_{ij} = 2\mu \left(\dot{\epsilon}_{ij} - \alpha \dot{T} \delta_{ij} - \sum_I \beta_I \dot{\xi}_I \delta_{ij} \right) \dots\dots\dots (44)$$

となる。この式 (42) のように, 弾性ひずみ $\dot{\epsilon}_{ij}^e$ がない場合には問題は剛粘塑性問題となる。

剛粘塑性問題の解くためにここでは

$$\dot{\phi} = \int_V \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij} dV - \int_{\Gamma} \sigma_{ji} n_j v_i d\Gamma - \int_V \rho b_i v_i dV \dots\dots\dots (45)$$

をまず考える。ただし, 塑性変形などで観察される非圧縮の材料挙動はこの式 (45) のみで求めることが困難であることがあって, このときは新たな付帯条件を考えて関数 $\dot{\phi}$ から非圧縮性の条件をはずして数値解析が行われる⁽¹⁸⁾。したがって, それらの方法のうちここでは penalty 法による定式化を示す。このとき, 解を与える速度 v_i とこれに対応するひずみ速度 $\dot{\epsilon}_{ij}$, および可容速度 $v_i + \delta v_i$ と可容ひずみ速度 $\dot{\epsilon}_{ij} + \delta \dot{\epsilon}_{ij}$ のそれぞれの関数 $\dot{\phi}$ の間に成立する

$$\dot{\phi}(\dot{\epsilon}_{ij} + \delta \dot{\epsilon}_{ij}) - \dot{\phi}(\dot{\epsilon}_{ij}) \geq 0 \dots\dots\dots (46)$$

の関係をを用いる。これは, 可容速度 v_i の中で関数 $\dot{\phi}$ を最小にするものが境界値問題の解であることを示す最小ポテンシャルエネルギーの原理 (principle of minimum potential energy) による。さらに penalty 法⁽¹⁸⁾によると, 式 (45) の関数 $\dot{\phi}$ は, penalty 数 $\bar{\lambda}$ を用いて

となる。また、 $[C]$ 、 $\{A\}$ はそれぞれ次式である。

$$[C] = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ 0 & 1 & & & & \\ 0 & 0 & 1 & & & \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 \end{bmatrix} \dots\dots\dots (57)$$

$$\{A\} = \{1 \ 1 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0\}^T \dots\dots\dots (58)$$

この式(33)と式(51)を比較すると、その形式が基本的に異なっていることや、式(40)、(41)で示されたような材料特性の温度依存性の項が含まれておらず、同じ固相から液相まで表現可能な構成関係を考える場合でも、弾性ひずみの有無など考える材料特性の差異によって、異なる有限要素式が得られることがわかる。

4. 固相と液相が共存する溶融・凝固問題

溶接や鋳造など溶融・凝固過程の材料挙動を考慮しながら残留応力などを論じるには、固相と液相どちらも考慮に入れて解析する必要がある。そこでここでは、本研究で示した内部境界を考慮した解析モデルを用いて、固相と液相が共存する系であって、しかもそれらの相境界が移動する問題の有限要素式の導出方法を示す。

4.1 領域分割による考察

まず、速度 v_i^l の境界 Γ をもつ領域 V について、物体力 b_i 、表面力 $\bar{t}_i$ の外力のなす仕事量速度 $\dot{W}$ を考えると

$$\dot{W} = \int_V \rho b_i v_i dV + \int_{\Gamma} \bar{t}_i v_i^l d\Gamma \dots\dots\dots (59)$$

となる。これを固相、液相の各領域に分け、さらに物体の静的つり合いから $\rho b_i + \partial \sigma_{ij} / \partial x_j = 0$ を適用すると、

$$\int_{V_s} \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} dV - \int_{V_s} \rho b_i \delta v_i dV - \int_{\Gamma_s} \sigma_{ji} n_j \delta v_i d\Gamma + \int_{V_l} \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} dV - \int_{V_l} \rho b_i \delta v_i dV - \int_{\Gamma_l} \sigma_{ji} n_j \delta v_i d\Gamma = 0 \dots\dots (60)$$

なる仮想仕事の原理式が仮想速度 δv_i を用いて与えられる。ここで $V_s \cup V_l = V$ なる関係を考慮すると、式(60)は

$$\int_{V_s} \left[\sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} - \rho b_i \delta v_i - \frac{\partial (\sigma_{ji} \delta v_i)}{\partial x_j} \right] dV + \int_{V_l} \left[\sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} - \rho b_i \delta v_i - \frac{\partial (\sigma_{ji} \delta v_i)}{\partial x_j} \right] dV = \int_V \left[\sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} - \rho b_i \delta v_i - \frac{\partial (\sigma_{ji} \delta v_i)}{\partial x_j} \right] dV = 0 \dots\dots\dots (61)$$

となる。一方、 $(\Gamma_s \cap \Gamma) \cup (\Gamma_l \cap \Gamma) = \Gamma$ であることから、式(60)は

$$\int_{V_s} (\sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} - \rho b_i \delta v_i) dV + \int_{V_l} (\sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} - \rho b_i \delta v_i) dV - \int_{(\Gamma_s \cap \Gamma) \cup (\Gamma_l \cap \Gamma)} \sigma_{ji} n_j \delta v_i d\Gamma - \int_{\Gamma_s \cap \Gamma} \sigma_{ji} n_j \delta v_i d\Gamma - \int_{\Gamma_l \cap \Gamma} \sigma_{ji} n_j \delta v_i d\Gamma$$

$$= \int_V \left[\sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} - \rho b_i \delta v_i - \frac{\partial (\sigma_{ji} \delta v_i)}{\partial x_j} \right] dV - \left(\int_{\Gamma_s \cap \Gamma} \sigma_{ji} n_j \delta v_i d\Gamma + \int_{\Gamma_l \cap \Gamma} \sigma_{ji} n_j \delta v_i d\Gamma \right) = 0 \dots\dots\dots (62)$$

となる。したがって、この式(61)と(62)が同時に成立するための条件として次式が得られる。

$$\int_{\Gamma_s \cap \Gamma} \sigma_{ji} n_j \delta v_i d\Gamma + \int_{\Gamma_l \cap \Gamma} \sigma_{ji} n_j \delta v_i d\Gamma = \int_{\Gamma} (\sigma_{ji}^s n_j^s \delta v_i^s + \sigma_{ji}^l n_j^l \delta v_i^l) d\Gamma = 0 \dots\dots\dots (63)$$

ここで仮に $\delta v_i^s = \delta v_i^l$ なる関係を考えて、式(63)の局所形 $\sigma_{ji}^s n_j^s \delta v_i^s + \sigma_{ji}^l n_j^l \delta v_i^l = \delta v_i^s (\sigma_{ji}^s n_j^s + \sigma_{ji}^l n_j^l) = 0$ となつて、これが任意の仮想速度 δv_i について成立することから Cauchy の原理 $\bar{t}_i^s = -\bar{t}_i^l$ が導かれる。つまり、式(63)は境界 $\bar{\Gamma}$ でのつり合いの条件を表している。しかし、境界 $\bar{\Gamma}$ 上においては仮想速度 δv_i についても速度の跳躍条件の式(10)を満足していなければならない。したがってここでのつり合い条件は $\sigma_{ji}^s n_j^s \delta v_i^s + \sigma_{ji}^l n_j^l \delta v_i^l = 0$ で表されることとなる。

ここで、さらに各領域ごとについて考える。まず領域 V_s について、仮に境界 $\bar{\Gamma}$ で表面力 $\bar{t}_i = \sigma_{ji} n_j = 0$ であるとすると、領域 V_s に関する仮想仕事の原理式が次式で与えられる。

$$\int_{V_s} \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} dV - \int_{V_s} \rho b_i \delta v_i dV - \int_{\Gamma_s \cap \Gamma} \sigma_{ji} n_j \delta v_i d\Gamma = 0 \dots\dots\dots (64)$$

しかし式(60)で表される関係では、領域 V_s 、 V_l の境界 $\bar{\Gamma}$ で表面力 $\bar{t}_i = \sigma_{ji} n_j \neq 0$ であって、さらに式(63)の関係から領域 V_s 内に関した仮想仕事の原理式が次式によって与えられる。

$$\int_{V_s} \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} dV - \int_{V_s} \rho b_i \delta v_i dV - \int_{\Gamma_s \cap \Gamma} \sigma_{ji} n_j \delta v_i d\Gamma - \int_{\Gamma_l \cap \Gamma} \sigma_{ji} n_j \delta v_i d\Gamma - \int_{\Gamma_l \cap \Gamma} \sigma_{ji} n_j \delta v_i d\Gamma = 0 \dots\dots\dots (65)$$

これと同様の手順によって、領域 V_l についても次式が得られる。

$$\int_{V_l} \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} dV - \int_{V_l} \rho b_i \delta v_i dV - \int_{\Gamma_l \cap \Gamma} \sigma_{ji} n_j \delta v_i d\Gamma - \int_{\Gamma_s \cap \Gamma} \sigma_{ji} n_j \delta v_i d\Gamma - \int_{\Gamma_s \cap \Gamma} \sigma_{ji} n_j \delta v_i d\Gamma = 0 \dots\dots\dots (66)$$

したがって、それぞれの領域についてこれらの結果を用いた有限要素式による解析では、境界 $\bar{\Gamma}$ 上での各条件を満足しながら領域ごとの解が式(65)、(66)を共に満足している場合に、系全体としての条件である式(60)を満足していることとなつて、1つの領域を分割した方法によっても問題の解析が可能となる。

4.2 有限要素法の定式化に関する考察

ここでは、金属材料の溶融・凝固過程の数値解析を行うことを目的として、すでに示した関係式から有限要素式の導出方法について示す。

まず固相領域 V_s に関しては、ここでは速度形の関数として次式を考える。

$$\int_{V_s} \dot{\sigma}_{ij} \delta \varepsilon_{ij} dV - \int_{V_s} \rho \dot{b}_i \delta v_i dV - \int_{\Gamma_s \cap \Gamma} \dot{\sigma}_{ji} n_j \delta v_i d\Gamma - \int_{\Gamma_l \cap \Gamma} \dot{\sigma}_{ji} n_j \delta v_i d\Gamma - \int_{\Gamma_l \cap \Gamma} \dot{\sigma}_{ji} n_j \delta v_i d\Gamma = 0 \dots\dots\dots (67)$$

ここで、筆者らによる常温から超高温までの材料試験⁽¹⁹⁾を基にした SUS304 鋼の物性値⁽¹²⁾では、固相の液相線温度(1550℃)での粘性係数のオーダーは $10^3 \text{ MPa}\cdot\text{s}$ であるのに対して液相では $10^{-9} \text{ MPa}\cdot\text{s}$ であり、このような材料の固相の変形に対する液相の変形抵抗は非常に小さいと考えられる。したがって、固相の変形を求める際に $\dot{\sigma}_{ij}^l = 0$ と考えると

$$\int_{V_s} \dot{\sigma}_{ij} \delta \epsilon_{ij} dV - \int_{V_s} \rho b_i \delta v_i dV - \int_{\Gamma_s \cap \Gamma} \dot{\sigma}_{ji} n_j \delta v_i d\Gamma - \int_{\Gamma} \dot{\sigma}_{ji}^s n_j^s \delta v_i^s d\Gamma = 0 \quad (68)$$

となって、固相領域 V_s の変形挙動の解析から液相に関する項が消えることとなる。ただし、固相と液相での物性値の差異が大きい場合には、当然式 (68) を導出することはできないことになる。しかし、このことは本研究で示すように各相ごとに領域を分ける必要が無いことにもなって、その場合には3.で示した同一の定式化結果を全領域に適用することが可能となると考えられる。

ここでさらに、式 (68) をマトリックス表示すると

$$\sum_V \left(\int_{V_s} \{\dot{\sigma}\}^T \{\delta \epsilon\} dV - \int_{V_s} \{\dot{b}\}^T \{\delta v\} dV - \int_{V_s} \{\rho b\}^T \{\delta v\} dV \right) = 0 \quad (69)$$

のように式 (32) と同形となり、これを用いた有限要素式は式 (33) と同じ次式が得られる。

$$[K]\{v\} = \{f^i\} + \{f^b\} + \{f^T\} + \{f^m\} + \{f^{vp}\} \quad (70)$$

一方、液相領域 V_l に関しては、式 (47) に対応して penalty 数 $\bar{\lambda}$ を導入した関数 $\bar{\phi}$ として

$$\bar{\phi} = \int_{V_l} \sigma_{ij} \epsilon_{ij} dV - \int_{V_l} \rho b_i v_i dV - \int_{\Gamma_l \cap \Gamma} \sigma_{ji} n_j v_i d\Gamma - \int_{\Gamma} (\sigma_{ji}^l v_i^l - \sigma_{ji}^s v_i^s) n_j^l d\Gamma + \frac{1}{2} \bar{\lambda} \int_{V_l} (\epsilon_{ii}^{vp})^2 dV \quad (71)$$

を考え、これを最小とする条件から解を求めることとする。とくにここでは、先に示したように固相の変形挙動が求められると、境界 $\bar{\Gamma}$ での物質点の速度 v_i^l も概知となっている。したがって、式 (71) の速度 v_i に対する連続性を仮定すると、この変形が次のように得られる。

$$\int_{V_l} \sigma_{ij} \delta \epsilon_{ij} dV - \int_{\Gamma_l \cap \Gamma} \sigma_{ji} n_j \delta v_i d\Gamma - \int_{V_l} \rho b_i \delta v_i dV + \bar{\lambda} \int_{V_l} \left(\epsilon_{kk} - 3\alpha \bar{T} - 3 \sum_I \beta_I \xi_I \right) \delta \epsilon_{ii} dV = 0 \quad (72)$$

これは式 (48) と同形であって、これを用いた有限要素式は式 (51) と同じく

$$[K]\{v\} = \{f^i\} + \{f^b\} + \{f^T\} + \{f^m\} \quad (73)$$

となる。ただし式 (71) に示したように、液相の変形は内部境界 $\bar{\Gamma}$ で固相の速度 v_i^s に拘束されるため、固相の解析結果を基に式 (10) から液相の内部境界 $\bar{\Gamma}$ での速度 v_i^l を求め、その結果を液相領域の幾何学的境界条件として導入する必要がある。

4.3 溶融・凝固過程の固液連成解析

本節のここまでの結果を用いて実際の溶融・凝固過程の解析を行うために、ここでは筆者らが従来から行ってきた連成解析⁽²⁰⁾の手法をもとにした計算方法を示す。Fig.2には計算の簡単な流れを示す。計算は大きく温度、組織(相)、

温度分布については、応力仕事による発熱 $\sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij}^{vp}$ と変態の潜熱を考慮に入れた熱伝導方程式を考える⁽²¹⁾。

$$\rho c \bar{T} - \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij}^{vp} - \rho_l l_I \dot{\xi}_I - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \rho \bar{\gamma} = 0 \quad (74)$$

ここで、 c , $\bar{\gamma}$ はそれぞれ密度、入熱量であって、 ρ_l , l_I , ξ_I は凝固過程で $I=s$ として固相の密度、凝固潜熱、固相の体積分率、また溶融過程では $I=l$ として液相の密度、溶融潜熱、液相の体積分率である。

各相の領域については、この法則から液相の体積分率 ξ_l を次式

$$\xi_l = \frac{(T - T_s)/m_s}{(T_l - T)/m_l + (T - T_s)/m_s} \quad (75)$$

によって表現する方法が適用可能である⁽⁸⁾。ここで、 T_s は固相線温度、 T_l は液相線温度、 m_s , m_l はそれぞれ状態図における固相線、液相線のこう配である。

この式 (74), (75) を用いることによって、相境界およびその移動(溶融・凝固)を表現することが可能となる。温度分布および相境界の移動速度が明らかになると、本研究で示した力学問題に対する解析手法が適用可能となる。実際の工学問題では、式 (75) で示されるような固相線温度と液相線温度の間に存在する半溶融領域 (mushy zone) があるが、これを各相の混合領域とする混合則 (rule of mixture)⁽²²⁾ も適用可能であって、これによって当該領域を固相もしくは液相と併せて解析する方法が比較的簡便である。

各ステップにおいては、これらの解析を所定の境界条件を満足するまで繰返すことによって、問題の解が得られることとなる。しかし本研究で示した境界条件の中

Fig. 2 Flow chart for calculation.

応力/ひずみ解析に分けられており、温度解析の結果をもとに系内の組織の状態を算出し、それらの結果をもとに応力/ひずみ解析を行うことになる。

で、式(10)については式(73)の導出過程で考慮されているが、式(15)と(21)については用いられなかった。式(15)については、系全体で力のつり合いが満足されない要因になるため、応力/ひずみ解析で固相、液相の状態を計算した後に、内部境界 $\bar{\Gamma}$ での値をもとに式(15)を満足するまでこれらを繰り返す必要がある。同様に、式(21)についても温度、組織解析で考慮し、さらに全体で解を収束させることによって問題の解析が可能となる。

5. 結 言

材料の溶融・凝固過程の力学問題に対して、系を固相と液相の2つの領域に分割する解析モデルを示し、これらの領域の間の境界で成立すべき条件をまず示した。さらに、このモデルに相変態を考慮した熱弾・粘塑性構成式を適用しながら、系全体の解析を行うための有限要素式を与えるとともに、これらの結果をもとにした計算方法についても示した。

文 献

- (1) Cannon, J.R. and Hill, C.D., *J. Math. Mech.*, **17**(1967), 1-20.
- (2) Crank, J., *Free and Moving Boundary Problems*, (1984), Oxford.
- (3) Benard, C. and Afshari, A., *Int. J. Num. Mech. Eng.*, **35**(1992), 835-851.
- (4) Oreper, G.M. and Szekely, J., *J. Fluid Mech.*, **147**(1984), 53-79.
- (5) Kou, S. and Wang, Y.H., *Met. Trans.*, **17A**(1986), 2265-2270.
- (6) Sheng, I.C., and Chen, Y., *Trans. ASME, J. Eng. Mat. Technol.*, **114**(1992), 438-448.
- (7) Bertram, L.A., *Trans. ASME, J. Eng. Mat. Technol.*, **115**(1993), 24-29.
- (8) 王・井上, 機論, **50**-459, A(1984), 1900-1908.
- (9) 佐成・井上, 機論, **56**-524, A(1990), 990-996.
- (10) 巨・井上, 機論, **59**-595, A(1993), 2189-2195.
- (11) 佐久間・井上, 機論, **60**-575, A(1994), 1624-1631.
- (12) 佐久間・井上, 機論, **61**-583, A(1995), 620-625.
- (13) Kosinski, W. and Romano, A., *Arch. Mech.*, **42**(1989), 255-266.
- (14) 棚橋, 連続体の力学, **2**(1986), 1-52, 朝倉書店.
- (15) Perzyna, P., *Adv. Appl. Mech.*, **9**(1966), 243-377.
- (16) Zienkiewicz, O.C., and Onate, E. and Heinrich, J.C., *Int. J. Num. Meth. Eng.*, **17**(1981), 1497-1514.
- (17) 例えば山口・野木, ステファン問題, (1977), 99-121, 産業図書.
- (18) 富田, 数値弾塑性力学, (1990), 47-104, 養賢堂.
- (19) 松井・巨・井上, 材料, **41**-466(1992), 1153-1159.
- (20) 井上, 機論, **50**-451, A(1984), 285-290.
- (21) 岸野・長岐・井上, 材料, **28**-312(1979), 861-867.
- (22) Inoue, T., (Hetnarski, R.B. 編) *Thermal Stresses*, **3**(1989), 192-278.