非直交格子を用いた有限体積法による凝固解析*

蓮野 昭人^{*1}, 安斎 浩一^{*2}, 新山 英輔^{*3}

Solidification Analysis by FVM on Irregular Grid

Akihito HASUNO, Koichi ANZAI and Eisuke NIYAMA

A method of numerical simulation of the solidification of castings, particularly of complicated shapes, is developed. The proposed method is based on the finite volume method (FVM) and uses an irregular grid system. The irregular grid system is obtained by the boundary fit method. The coordinates lines of the grid are formed to coincide with the complicated boundaries of the castings. Nodal points are placed inside the each cell of the grid. Using the local oblique Cartesian coordinates which are formed by connecting neighboring nodal points, the energy balance equation is directly solved by the vector analysis technique in the generalized coordinates. Some calculation results of two-dimensional sections are shown and the accuracy of the method is checked. The proposed method has the following advantages: (1) The algorithm is simple and calculation time is short comparable to the conventional finite difference method (FDM), and (2) It can handle castings of complicated shapes which could not be handled by the conventional FDM.

Key Words: Solidification, Castings, Complicated Shapes, FVM, Irregular Grid System, Boundary Fit Method, Simulation Method

1. 緒言

鑄造過程における伝熱及び凝固問題を解析することは、健全な鑄物を得る上で非常に重要であり、近年ではコンピュータを用いた伝熱・凝固解析により鑄造条件を最適化する技術が実用化され、多くの実製品に適用されている。

従来の伝熱・凝固解析の手法としては、直交差分法⁽¹⁾⁽²⁾、有限要素法⁽³⁾、片山・斎藤らの方法⁽⁴⁾、直接差分法⁽⁵⁾、斎藤の方法⁽⁶⁾などが知られている。このうち、直交差分法による凝固解析には次に挙げるような特徴があり、鑄造問題の伝熱及び凝固解析に適することから広く用いられている。

- 比較的単純なアルゴリズムであり、プログラムの作成が容易である。
- 数値計算に用いるメッシュの生成が容易である。
- 短時間で計算が行え、必要な記憶容量も小さい。

直交差分法の問題点としては、直交座標系で鑄物表面の曲面や曲線、あるいは微小なテーパのついた形状を表現しようとする場合、その形状が階段状になる、という点が挙げられる。この形状近似の誤差により、計算上の鑄物表

面の面積が実際の面積よりも大きくなるため、伝熱・凝固解析の際、実際より熱が早く奪われるという誤差を生じる。砂型鑄物の場合は、鑄物－鑄型境界での熱抵抗は無視できるぐらい小さく伝熱挙動は内部抵抗率速となるため、体積が正確に近似できていれば鑄物－鑄型境界面積が多少大きくても実用上十分な精度で凝固計算可能である。これに対し、金型鑄物の場合は、鑄物－鑄型境界での熱抵抗は無視できず伝熱挙動は一般に界面抵抗率速となるため、鑄物の表面積が正しく近似できていないと正確に凝固計算をおこなうことができない。特に、薄肉金型鑄物を直交差分法で凝固計算する場合は形状近似の程度が悪くなり、計算精度の点で実用上問題がある。

これに対して、有限要素法や片山・斎藤らの方法、直接差分法、斎藤の方法などは、直交格子ではなく任意形状の格子を用いて解析を行う方法であり、形状近似の際の誤差が直交差分法に比べ小さい。しかし、有限要素法の場合、直交差分法に比べてアルゴリズムが複雑で、計算時間も長いという欠点がある。多角形要素を用いる方法では、計算に用いる格子形状や節点位置に制約があったり、三次元化が困難であるなどの問題点がある。

また、非直交格子で構成される物理空間での伝熱問題を直交格子で構成される写像空間での伝熱問題に変換して解析する Boundary-Fit 法が知られおり、鑄造問題に適用した報告例もあるが⁽⁷⁾、鑄物形状に制限があったり、アルゴリ

* 原稿受付 平成6年7月20日。

*¹ 准員, 東北大学工学部 (〒980 仙台市青葉区荒巻字青葉)。*² 正員, 東北大学工学部。*³ 東北大学工学部。

ズムが複雑であるという問題点がある。

境界要素法⁽⁸⁾による凝固解析法も提案されているが、現時点では計算時間や計算実行に必要な記憶容量などの点で実用的な方法とはいえない。

そこで本研究では、従来の多角形要素を用いるその他の方法に比較し格子形状に対する制約が少なく、有限要素法に比較し高速で直交差分法とほぼ同等の計算時間で解析可能な、非直交格子を用いた有限体積法（コントロールボリューム法）による凝固解析法について検討した。また、直交差分法による解析結果や実験結果との比較から本法の実用性について検討した。

2. 計算方法

有限体積法（コントロールボリューム法）^{(9) (10)}に基づく凝固解析法は、次に示すような積分形で示されたエネルギー保存則から得られる式を基礎式とする。ただし、凝固潜熱を取り扱うためにエンタルピーを基礎変数として用いている。

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{1}{V} \int q \cdot n dS \quad (1)$$

ここで、 H :エンタルピー、 t :時間、 q :熱流束ベクトル、 n :外向き法線ベクトルである。

エンタルピーの定義点の取り方や式(1)右辺の熱流束 q の評価方法などによって様々な計算法が提案されているが、本研究では、格子内部に設定した節点を原点とし、その格子と接する隣接格子内部の節点と原点を結んで得られる局所的な斜交座標系を利用して、式(1)右辺の熱流束 q を評価する方法を新たに提案する。⁽¹¹⁾

図1に示すセルの面ADを通過する熱量 Q を求める場合を考える。エンタルピーの節点は、次の式で定義される点に置く。

$$x_T = \frac{x_A + x_B + x_C + x_D}{4} \quad (2)$$

x_T, x_A, x_B, x_C, x_D はそれぞれ各点の位置ベクトルである。直交差分法を用いた場合、 T_a と T_1 の2点を結ぶ軸は面ADと垂直に交わるので、 q はこの2点の温度から求まる。しかし、非直交座標系においては一般にこれらの面と軸が直交するとは限らない。

そこで、本論文では、一般座標系におけるベクトル解析の手法を用いて式(1)を離散化する。

まず面ADについて考える。 q は、

$$q = \lambda \text{grad} T \quad (3)$$

図1 エネルギー式の離散化(二次元)

で与えられる。ここで、 $\text{grad} T$ を求めるために、 T_a を原点とし、座標軸が T_a と T_1 をむすぶ x^1 軸、 T_a と T_2 をむすぶ x^2 軸と定義される斜交座標系を考える。それぞれの軸の共変基底ベクトルを g_1, g_2 と定義する。また $x_1 \perp x_2, x_2 \perp x^1$ となるように新しい相反座標系を設定し、各軸方向の反変基底ベクトルを、 g^1, g^2 と定義する。これらの座標系の成分と基底ベクトルを用いると、 $\text{grad} T$ は次のように定義される。

$$\text{grad} T = \sum_{i=1}^2 T_{|i} g^i \quad (4)$$

ここで、 $T_{|i}$ は共変微分であるが、エンタルピーや温度のようなスカラー量の場合は通常の微分と等しいため以下のように離散化することができる。

$$T_{|1} = \frac{T_a^{AD} - T_a}{l_3} \quad (5)$$

$$T_{|2} = \frac{T_a^{AB} - T_a}{l_4} \quad (6)$$

伝熱と接触抵抗のみを考え、ふく射を無視すると、 q は以下ようになる。

$$q = \frac{1}{\frac{l_3}{\lambda_a} + \frac{1}{h_{AD}} + \frac{l_4 - l_3}{\lambda_1}} (T_1 - T_a) g^1 + \frac{1}{\frac{l_4}{\lambda_a} + \frac{1}{h_{AB}} + \frac{l_3 - l_4}{\lambda_2}} (T_2 - T_a) g^2 \quad (7)$$

ここで、 λ_k :各要素の熱伝導度、 h_m :面 m の熱伝達係数、 T_a^{AD} :面AD上要素 a 側での温度、 T_a^{AB} :面AB上要素 a 側の温度である。

次に n の xy 座標系での成分を求め、軸 x^1, x^2 へ射影することで、 n の各軸の成分 n^1, n^2 が得られる。ここで n^1, n^2 は n の反変成分である。以上により、 q_n は

$$q_n = q \cdot n$$

$$= \sum_{i=1}^2 T_i |n^i| \quad (8)$$

T_a 、 T_1 、 T_2 の3点で構成される斜交座標系から、面AEを通過する熱流束と面ADの法線ベクトルとの内積 $q_{AE} \cdot n$ を評価し、 T_a 、 T_1 、 T_4 の3点で構成される斜交座標系から面DEを通過する熱流束と面ADの法線ベクトルとの内積 $q_{DE} \cdot n$ を評価すると、面ADを通過する正味の熱流量 Q_{AD} は以下のように求まる。

$$Q_{AD} = S_{AE}(q_{AE} \cdot n) + S_{DE}(q_{DE} \cdot n) \quad (9)$$

ここで、 S_{AE} 、 S_{DE} は点AE、点DE間の距離である。面AB、面BC、面CDについても同様に熱流量を求め、それぞれ Q_{AB} 、 Q_{BC} 、 Q_{CD} と定義する。式(1)の離散化には種々の方法が適用可能だが、ここでは時間について陽的に差分化すると次のように離散化される。

$$\frac{H^{t+\Delta t} - H^t}{\Delta t} V = Q_{AB} + Q_{BC} + Q_{CD} + Q_{DA} \quad (10)$$

また、式(7)式(8)に着目するとエンタルピーと温度以外は格子が生成された際に決定される幾何学的な量であり、時間には依存しないことがわかる。したがって、式(10)は次の式のように書くことができる。

$$H^{t+\Delta t} = H^t + \frac{\Delta t}{V} \sum_{i=1}^4 W_i (T_i - T_a) \quad (11)$$

ここで W_i は i 軸方向の幾何学的な量も加味した熱コンダクタンスと考えることができ、熱物性値が温度に独立であると仮定すると、熱コンダクタンスは計算の過程において不変である。従って、 W_i の値をあらかじめ求めておけば、各時間ステップにおける温度計算のアルゴリズムは、通常の直交差分とまったく同じとなり直交差分法とほぼ同等の計算時間で凝固解析できることが期待できる。また、節点を格子の頂点に取る有限要素法やその他の方法では、界面抵抗がある場合温度が不連続となる鋳物-鋳型境界部で二重節点を設定するなどの工夫が必要であるのに対し、本法では格子の内部に節点を設定しているため、鋳物-鋳型境界での伝熱量の評価がきわめて容易であり、鋳造問題のような多領域問題での伝熱解析に適している。

以上二次元の場合について述べたが、三次元の場合は、図2に示すような格子面の一部を通過する熱流束は、4点の温度を用いて算出することができる。このようにして求めた熱流束を通過する領域の面積で重み付け平均をとることで各格子面を通過する熱量とする。三次元の場合も二次元と同様に、各時間ステップにおける温度計算のアルゴリズムは直交差分法と同様になり、短い計算時間での解析が可能になると予想される。

図2 三次元空間での離散化の基本概念

本論文で提案した方法では原理的に要素界面における熱流量の保存は一般的には成立しない。格子形状が特に著しく歪んだ場合、誤差の定量的評価や、その軽減法についての検討が今後必要であると思われる。

また本計算法では、温度の定義点を結ぶ軸が対応する格子面を外分するような格子では、計算を行えないという制限がある。この現象は格子形状が急激に変化する場合に生じるが、次章で述べる格子生成法を用いることによって容易に防止することができる。

3. 格子生成法

さて、前節で提案した数値解析法は、局所斜交座標系を利用して熱流束を評価することで非直交格子に対しても精度良く計算できる点に特徴があるが、2章にも述べたとおり、その非保存性から極端に歪んだ格子ではやはり計算精度が悪くなると考えられる。そこで、本法に適した格子生成法についても検討した。

鋳物の凝固計算に用いる格子としては、

- 鋳型部と鋳物部を整合性良く分割できる。
- 鋳型-鋳物の境界で滑らかに変化する。
- できるだけ簡単に格子が生成できる。

の条件を満たすものが望ましい。そこで今回はこうした要求に応える手法として Boundary-Fit 格子生成法⁽¹²⁾を採用し、鋳物-鋳型の境界が滑らかに表現できるような非直交格子を簡単に生成する方法について検討した。Boundary-Fit 法は以下の楕円形偏微分方程式、

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \xi}{\partial y^2} = P(\xi, \eta) \quad (12)$$

$$\frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \eta}{\partial y^2} = Q(\xi, \eta) \quad (13)$$

を解くことにより、実空間上の解析領域を、直交座標系で表現される計算領域に座標変換して解析を行う方法であ

図3 Boundary Fit法により生成した格子の例

る。本論文では、この座標変換の手法を用いて直交格子から、非直交格子を生成した。

まず、式(12)、式(13)を解くにあたって鋳物-鋳型境界上の点を内部境界条件として与える。外部境界条件は、鋳型の形状を与える。式(12)、式(13)の右辺の関数は制御関数と呼ばれ格子点の分布を制御する働きがあるが、本論文では、式(12)、式(13)の両式について0とした。これらの条件の下で、式(12)、式(13)をSOR法を用いて解いた。この方法によって得られた格子は、鋳物の表面積を正確に表現しているので形状近似の誤差が生じないという利点がある。さらに境界形状に沿って滑らかに格子の形状や大きさが変わるので、本論文で提案した計算方法に適した格子である。また、鋳物、鋳型の形状を境界条件として与えるだけで計算領域全体を同時に簡単に分割できるという利点もあり、非常に有効な方法である。

本論文では二次元についてのみ解析を行ったが、この方法は三次元にも応用が可能で、容易に三次元非直交座標系を得ることができる。

4. 解析精度の比較

正方形断面のCu金型に、十分小さい大きさの正方形断面のAl-20%Si合金を鋳込んだ場合を考える。鋳物と鋳型が平行に配置されていれば、鋳物-鋳型の境界は直交格子と一致するので直交差分法でも形状近似の誤差は生じない。一方、鋳物と鋳型が平行ではなく任意の角度を持って配置されている場合、鋳物-鋳型の境界は直交格子と一致しないので、形状近似の際に誤差が生じる。さて、鋳物に対して鋳型が十分大きい場合、この2つの場合の解析結果は本来等しいはずである。そこで、鋳物が鋳型と平行に配置された場合の直交差分法による解析結果を正解とみなし、鋳物が鋳型に対してある角度を持って配置されている状態を直交差分法と有限体積法とで解析し、それぞれを正解と比較することで本論文で提案している凝固解析法の計算精度を検討した。

表1 計算に用いた熱物性値

constants	Al-20 % Si	Cu
Density ρ [kg · m ⁻³]	2.5×10^3	8.95×10^3
Specific heat C_p [kJ · kg ⁻¹ · K]	0.963	0.963
Heat conductivity λ [W · m ⁻¹ · K ⁻¹]	100.5	397.7
Latent heat H_f [kJ · kg ⁻¹]	389	-
Liquidus temperature T_l [K]	973	-
Solidus temperature T_s [K]	850	-
Heat transfer coefficient h [W · m ⁻² · K ⁻¹]		
metal / mold	2790	
air / meatal	9.18

図4 計算に用いた格子

図5 鋳物中心における冷却曲線

図6 金型形状の模式図

45cm × 45cm の Cu 鋳型に 5cm × 5cm の Al-20%Si 合金を鋳込んだ場合を想定して計算を行った。計算に用いた物性値を表1に示す。厳密には物性値の熱依存性についても吟味する必要があるが、従来の値⁽¹⁾ ⁽¹³⁾を比較・参照しこれらの値を用いた。次章で用いた物性値についても同様である。計算に用いた格子は図4の通りである。格子数はすべて 90 × 90 個とした。鋳物の初期温度は 1073K、鋳型の初期温度は 293K とした。鋳型の外側は空気として、その温度は 293K で一定とした。凝固潜熱の放出についてはエンタルピー法を用い、凝固中の固相率とエンタルピーの関係は直線で近似した。

各種凝固解析による鋳物中心における冷却曲線を示したのが、図5である。提案している有限体積法による解析結果（鎖線）は正解（実線）に良く一致しているのに対し、鋳物が鋳型に対してある角度を持って配置されている状態を直交差分法で解析した結果（破線）は、従来から知られているように境界形状の近似誤差により正解と大きく異なり、冷却が速すぎることをわかる。

5. 実験結果と解析結果の比較

5.1 実験方法 図6に示す断面を持つダクタイル鋳鉄の金型に、アルミニウム合金 ADC12 を鋳込み、引け巣の分布を観察し、解析結果と比較した。鋳物形状は平板状であるが、上面に 5/150 の微小テーパがついている。この金型の両側面を耐火物のレンガで挟み、鋳造時の熱流ができるだけ二次元的になるようにした。湯道は設けずに、押湯から直接注湯した。凝固後、染色探傷試験により引け巣の分布を観察した。その結果を図8に示す。図中の曲線で囲まれた部分が引け巣発生域で、鋳物の中心線部分に広く引け巣が発生していることが分かる。

(a) FVM に用いた格子 (格子数 60×24)

(b) FDM に用いた格子 (格子数 60×24)

(c) FDM に用いた格子 (格子数 120×48)

図7 数値解析に用いた格子

5.2 数値解析 数値解析は図7に示される3通りの方法で行い、それぞれの結果を実験結果と比較した。それぞれの計算に用いた格子を図7に示す。また計算に用いた熱物性値を表2に示す。鋳物の初期温度は注湯時に生ずる温度分布は無視し 953K で一定とした。鋳型の初期温度は 293K とした。鋳型の外側は空気として、その温度は 293K で一定とした。凝固潜熱の取り扱いについては、4章と同様とした。計算には、横河ヒューレットパッカード製ワークステーション HP9000 series model750 を使用し、C 言語を用いてプログラムした。引け巣分布の予測については修正温度勾配法⁽¹⁴⁾を用いた。温度勾配 G 、冷却速度 R を用いて $\max(G \cdot R^{-1/2})$ と表現されるパラメータが修正温度勾配で、この値が臨界値以下の領域を引け巣発生域とするのが、修正温度勾配法である。本論文では、臨界値として通常用いられる $\max(G \cdot R^{-1/2}) = 1$ を採用した。

5.3 解析結果 計算所要時間を表3に示す。提案している有限体積法により、同じ格子数の直交差分法とほぼ同等の時間で凝固計算が実行できることがわかる。

計算により予測される引け巣発生域を図9に示す。図中の曲線は $\max(G \cdot R^{-1/2}) = 1$ の点を結んだ等高線であり、その内側が引け巣発生領域である。直交差分法を用いた場合、格子数を4倍にした場合においても引け巣発生域の分

図8 中心線付近に発生した引け巣

表2 計算に用いた熱物性値

constants	ADC12	Ductile Iron
Density ρ [kg · m ⁻³]	2.7×10^3	6.9×10^3
Specific heat C_p [kJ · kg ⁻¹ · K]	0.964	0.838
Heat conductivity λ [W · m ⁻¹ · K ⁻¹]	100.5	25.1
Latent heat H_f [kJ · kg ⁻¹]	490	-
Liquidus temperature T_l [K]	853	-
Solidus temperature T_s [K]	803	-
Heat transfer coefficient h [W · m ⁻² · K ⁻¹]		
metal / mold	838	
air / metal	18.36	
air / mold	9.18	
Critical solid fraction f_s	0.6	

表3 計算時間の比較

Method	Time(s)
FVM	7.25
FDM(60 × 24)	7.10
FDM(120 × 48)	131.99

図9 解析結果の比較

布に不連続な領域が生じており実験結果に合わないことがわかる。直交差分法では、鋳物上部のテーパを近似する場合、図7の様に階段状に表現せざるをえないが、この階段状の部分で実際問題に比較し表面積が増加するため計算結果に影響を与える。影響の程度は、鋳物-鋳型境界面積や鋳型の熱的性質、界面抵抗の大きさに依存するが、今回用いたような熱的条件ではその影響が無視できないことがわかる。格子をさらに細かくすれば引け巣発生域の予測精度は向上すると予想されるが、計算時間も著しく増加する。

一方、有限体積法では形状近似の際の誤差は生じない。図8の実験結果と比較すると、引け巣の発生域も連続的に分布しており、有限体積法による計算結果と実験結果は同様な傾向を示していることがわかる。

以上より、ここでとりあげたような微小なテーパのついた鋳物形状を扱う場合においては、本法は直交差分法に比べて、より少ない格子数と短い計算時間で、より正確な計算結果を得られることが明らかになった。

6. 結論

従来法に比較し、高速でより実用性の高い凝固解析法を提案した。実験結果と解析結果は直交差分による解析結果と比較して定性的な傾向が類似しており、本法が鋳物の凝固解析および引け巣の発生予測に適した解析法であることを示した。また、本法は有限要素法や直接差分法に比べアルゴリズムも単純で直交差分法と同等の時間で凝固計算可能であることが示された。

さらに Boundary-Fit 格子生成法により、鋳型部及び鋳物部に対し同時に滑らかな格子を生成する方法を提案した。これによって形状近似の際の誤差を軽減し、滑らかな格子を容易に生成することが可能になった。

終わりに臨み、本研究にご協力いただいた東北大学工学部舟窪辰也助手、同工学部三浦正樹の各位に深く感謝します。さらに著者の一人に奨学金を給付いただいた新東工業株式会社および、本研究をご支援いただいた湯流れ研究会 stefan の会員各位に深く感謝します。

文 献

- (1) 大中 逸雄, コンピュータ伝熱凝固解析入門, 丸善 (1985), p21.
- (2) 斎藤 武雄, 数値伝熱学, 養賢堂 (1986), p32.
- (3) 矢川 元基, 流れと熱伝導の有限要素法入門, 培風館 (1983)
- (4) 片山 功蔵・服部 賢・斎藤 彬夫, 伝熱工学の進展 3(1974), p111.
- (5) 大中 逸雄, 鉄と鋼 65(1979), 1737.
- (6) 斎藤 武雄, 機械の研究 37(1985), 337.
- (7) Uchikawa, S. and Takeda, R., Trans ASME journal of heat transfer 107(1985), 494
- (8) Hong, C.P., Umeda, T. and Kimura, Y., Metall. Trans. B, 15B(1984), 91, 101
- (9) 日本機械学会編, 流れの数値シミュレーション, コロナ社 (1988), p71.
- (10) C.A.J. フレッチャー, コンピュータ流体力学, シュプリンガー・フェアラーク東京 (1993), p109.
- (11) W. フリュージェ, テンソル解析と連続体力学, プレイン図書 (1979).
- (12) Thompson, J.F., et al, J. Comput. Phys., 15(1974), 299.
- (13) 新山 英輔, 内田 敏男, 森川 稔, 斎藤 茂樹, 鋳物 52(1980), 635.
- (14) Niyama, E., Uchida, T., Morikawa, M., and Saito, S., 49th Int. Foundry Congress (1982), Paper No. 10.