

結晶粒粗大化シミュレーションへの温度勾配の適用

大西 淳* 大重広明**

A Study on an Application of a Gradient of Temperature to a Simulation of Grain Growth

Atsushi ONISHI* and Hiroaki OSHIGE**

For the purpose of schooling and technical training, it is helpful to visualize a phenomenon of grain growth. And many persons concerned pay attention to Monte Carlo simulation of grain growth, that is a simple but reasonable simulation method. Authors had developed the simulation system, which calculated a phenomenon of grain growth in parallel. In this article, we report a result of our survey of a way to apply a gradient of temperature to this system. As a result of the survey, we found the method that decided the probability of boundary of a crystal moving depending on temperature. We verified validity of this method by using results of simulation. And through trials of simulation, we got to know that simulation considering a gradient of temperature was faster than simulation in an isothermal situation.

key words: Monte Carlo simulation, grain growth, temperature

1. はじめに

金属など多結晶体に溶接熱などの熱を加えて温度を上げると、熱が伝導した部分で結晶粒のサイズの平均値が大きくなるという現象が起こる。この現象は結晶粒の粗大化と呼ばれる。この現象が起こる状況によってはその部分の組織が脆弱となり、後に亀裂が入るなど大きなトラブルが生じることがある。このようなトラブルを避けるには、溶接技術者に結晶粒の粗大化現象を理解させ、溶接技術の向上を促す必要がある。そのときの現象理解には、アニメーションなどの視覚教材が有用である。

結晶粒の粗大化現象は微小世界で起こる現象であり、現実の現象をそのまま視覚教材にすることは難しい。そこで、現象をコンピュータ上でシミュレーションすることが必要となる。そのための方法の一つとして、potts モデルによるモンテカルロ法が注目を集めている¹⁾³⁾。

この方法は単純なモデルを用いて結晶粒粗大化現象をうまくシミュレーションできるため、研究が進められてきた。しかし、この方法がもつ、シミュレーションに時間がかかるという問題を解決する研究については、著者らが調べた範囲内では報告がな

った。そこで、著者らの研究室では、並列計算化によってシミュレーションを高速化することについて研究を進めてきた⁴⁾⁸⁾。

これまでの研究では、多結晶体のモデル全域で温度が均一という条件のもとでシミュレーション・プログラムを作成し、それを並列計算化してきた。今回の研究では、このシミュレーション・プログラムに対して温度勾配を適用する方法を調査した。調査するにあたり、本研究室では今回の研究が温度勾配を考える端緒であることから、まず並列計算化する前のシミュレーション・プログラムに温度勾配を適用することを前提においた。また、上記の理由に加え、溶接母材における熱伝導の完全な解明や数学的記述はそもそも困難であること⁹⁾、材料特性の解析を目的とする場合と違って現象の視覚化を目的とする場合には、現象の概況をシミュレーションできればよいことから、できる限り単純なモデルを用いることとした。

以下、**2.**では、今回の研究における熱源と多結晶体のモデルについて述べる。そして、**3.**では調査した温度勾配の適用法等について述べる。続く**4.**では、調査結果に基づいて実施したシミュレーションの試行結果をもとに、今回採用した適用法の評価とシミュレーションの試行を通じてわかったことについて述べる。最後に、**5.**でまとめを行う。

原稿受付 平成 18 年 8 月 31 日

* 情報工学科

** 情報工学科, 現, 津山工業高等専門学校 名誉教授

2. 熱源と多結晶体のモデル

本研究では、比較的厚い金属板の溶接を行う状況を想定したシミュレーションを考えている。このような状況では、溶接金属に加えられた溶接熱は溶接金属中を3次元的に伝導する。そのため、今回の研究では、多結晶体を3次元で考えて、その中での熱伝導を考慮しなければならない。

そこで、本稿では x , y , z 方向の3次元座標軸を Fig.1 のように設定する。矢印の指す方向が正の方向である。そして、簡単のため、多結晶立体は x , y , z すべての軸の正負すべての方向に対して無限に広がる無限体であるとする。

このような多結晶体に対し、熱源は多結晶体中に置かれる点熱源としてモデル化する。このモデルは、溶接熱が極小領域に集中的に加えられ、そこから3次元熱流として伝搬することを表現している。溶接熱は現実には溶接金属表面から加えられる。しかし、熱が加えられている付近の状況は、想定する溶接方法によっては単純に多結晶立体の表面に熱源を置くという方法でモデル化できないことがある³⁾。そこで、温度勾配をシミュレーションに取り入れる端緒として、今回は熱源を3次元の無限体中に置かれる点熱源としてモデル化し、熱源の精密なモデル化は今後の課題とする。そして、溶接熱の移動は、点熱源が x 軸と並行に x 軸負の方向へ向かって一定速度で移動する等速運動として扱う。

次に、多結晶体のモデルについて説明する。今回の研究では、 x の値を固定して決まる yz 平面において観察される2次元の粗大化現象を扱う。座標の扱いを簡単にするため、シミュレーション領域を

$y \geq 0$, $z \geq 0$ に制限する（以下、この領域を観察領域と呼ぶ）。この制限のもとでも、熱源が通過する領域内の位置を任意に設定できれば、制限しない場合と同様のシミュレーションが可能である。観察領域は、例えば、Fig.1 において網掛けで示す領域となる。

この観察領域における結晶粒の分布状況は potts モデルを用いて表現する⁴⁾。potts モデルとこれに基づくモンテカルロ・シミュレーションは、モデルのサイズと現実の多結晶体のサイズとの対応、シミュレーション上での時間経過と現実の時間経過との対応など、物理的意味づけに関する詳細が十分理論化されているとは言えない³⁾。しかし、比較的簡単なモデルで結晶粒の粗大化過程をうまく視覚化できるため、視覚化を目的とするシミュレーションでは最も有用なシミュレータの一つとして注目されている。

potts モデルにより多結晶体の表面を表現した例を Fig.2 に示す。Fig.2 では、多結晶体表面が六角形

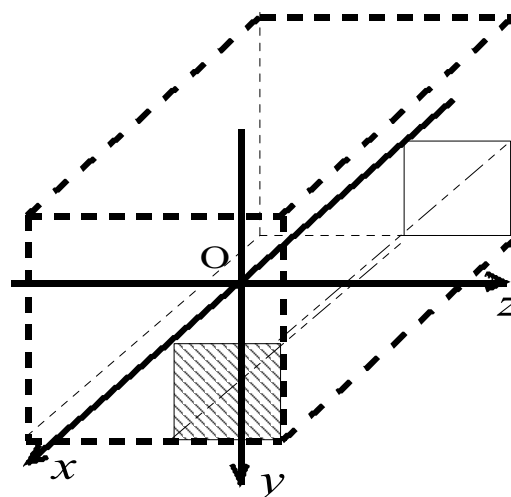


Fig.1 axioms.

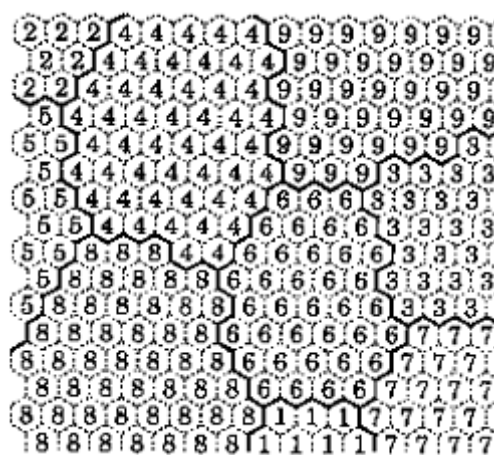


Fig.2 a model of a microstructure of polycrystalline aggregate¹⁾.

セルの集まりとして表現されている。1つのセルはその領域に存在する規則正しく配列した原子の集まりを表している。結晶粒とは、そこに含まれる原子が規則正しく配列して構成された多面体である。そして、多結晶体とは、原子の配列や位相（これらを結晶方位と呼ぶ）が異なる多数の結晶粒の集合体である。このような多結晶体をモデル化するにあたり、potts モデルでは各セルに異なるセル領域間での結晶方位の違いを区別するためのラベル (Fig.2 ではアラビア数字で表されている) をつける。ラベルは単に結晶方位の違いを区別するためだけにつけられるものであり、現実の結晶方位の物理的な特徴を表すものではない。このようにラベル付けすることにより、同じラベルをもつセルの集まりとして1つの結晶粒を表現でき、異なるラベルをもつセル間の境界で結晶粒界を表現できるようになっている。

3. 温度勾配のシミュレーションへの適用

3.1 アルゴリズムの変更

これまで本研究室で構築してきたシミュレーション・システムは、多結晶体表面を **2.** で説明した potts モデルでモデル化し、モンテカルロ法に基づいて等温環境における結晶粒粗大化現象を2次元シミュレーションする⁴⁾。アルゴリズムの概略のフローチャートを Fig.3 に示す。このアルゴリズムの開始時には、シミュレーションの対象とする多結晶体の表面領域のモデルに含まれるセルの総数と、その領域内に存在する結晶方位の種類の総数を入力する。これらの入力値を変えることにより、シミュレーションする領域の広さとその状況を変化させることができる。なお、現在のシミュレーション・システムでは、シミュレーション領域内における結晶方位の初期の分布状況は乱数によって決定することになっており、任意に指定される状況からシミュレーションを開始することはできない。

多結晶体は、**2.** で説明したとおり、結晶方位の異なる結晶粒の集合体である。そのため、結晶粒が粗大化し、結晶方位の異なる結晶粒同士がつきあつたと、そこに粒界が形成されてひずみエネルギー等が蓄積される。この粒界に蓄積するエネルギーのことを粒界エネルギーと呼ぶ。結晶粒の粗大化は、粒界エネルギーが減少して多結晶体が安定化する過程で起こる現象、すなわち、つきあつた結晶粒間で併合が起こり結晶粒界の総面積が減少していく現象である。potts モデルでは粒界に相当するセルの辺の総数で粒界エネルギーの大きさを表現する。そして、乱数を使ってセルをランダムに指定し、そのセルの結晶方位が周囲に分布するいずれのセルと同じ結晶方位になれば最も粒界エネルギーが減少するかを計算して、指定したセルのラベルを付け替える (Fig.4 参照)。粒界エネルギーが減少するようにセルのラベルを付け替えると、それに伴ってこのセル周囲に存在する結晶粒界が、セル周辺に分布するいずれかの結晶粒が粗大化するように付け替わる、または消滅する。このように、セルのラベルが付け替わり、結晶粒界を表すセルの辺が変化することを粒界移動と呼ぶ。Fig.4 ではラベル「2」の結晶粒が粗大化するように粒界移動が起こっていることを確認できる。

以上のようなセルの指定とラベルの付け替えを繰り返すことでシミュレーションを進めるが、モデル内のセルの総数と同じ回数の繰り返しをシミュレーションの単位とし、Monte Carlo Step (以下、MCS と略す) と呼ぶ。1MCS がシミュレーションにおける時間経過の単位となり、シミュレーションする時間的期間はこの MCS として開始時に指定する。

このアルゴリズムは等温環境でのシミュレーションを行うためのものである。等温環境と違い、溶接熱が局所的に加えられた場合など多結晶体内に温度

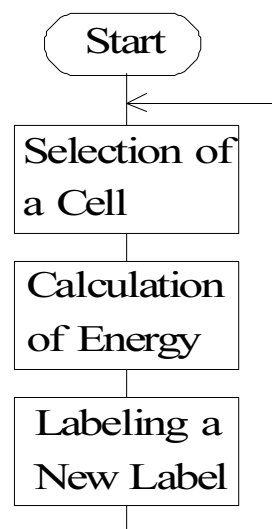


Fig.3 a flow chart of simulation algorithm.

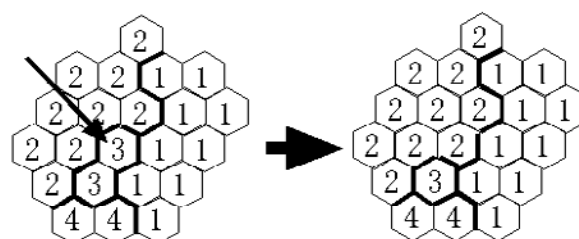


Fig.4 labeling a new label.

勾配が存在する場合には、温度が高い箇所ほど結晶粒の粗大化が促進されるという現象が現実には起こる。温度勾配を考慮したシミュレーションを行うには、この現象を再現できるよう Fig.3 のアルゴリズムに手を入れる必要がある。

そこで、同じ手法を用いてシミュレーションを行っている他の研究でどのように温度勾配を扱っているかを調査した。その結果、局所的に熱源を配置した場合のシミュレーションを行うには、結晶粒界の移動確率というものを導入すればよいことがわかった³⁾。結晶粒界の移動確率を導入する、つまり、乱数を使って指定したセルのラベルを付け替えるかどうかを確率的に決定するようにすれば、温度上昇が高い箇所ほど結晶粒界の移動確率を高めることにより、その箇所で起こる結晶粒の粗大化が促進することをシミュレートできる。調査した研究では、乱数で指定されたセル周囲の結晶粒界の移動確率 W を温度に関する次の式で計算している。

$$W = \exp(Q/T_{\max}) \cdot \exp(-Q/T) \quad (1)$$

ここで、 Q は粒界移動が起こるために必要な活性化エネルギーを表す定数、 T は指定されたセルの領域の温度上昇を表す変数である。また、 $T_{\max}$ は基準と

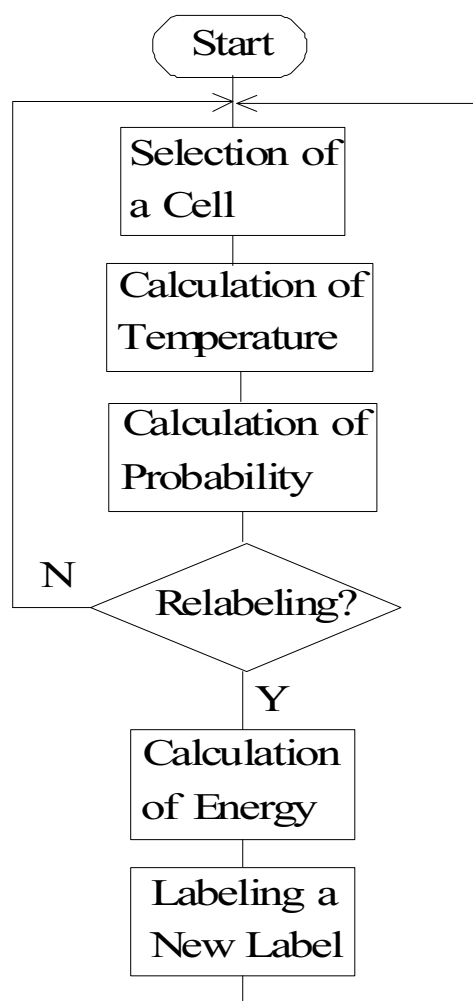


Fig.5 a flow chart of simulation algorithm after conversion.

なる温度であり、 $T = T_{\max}$ のときに $W = 1$ となる、すなわち、必ず結晶粒界が移動するような値に決める。調査の対象とした研究では、 $T_{\max}$ を T の最大値、すなわち、多結晶体の融点としていた。この式を使えば、 T が大きくなるほど W が大きくなるように移動確率を決めることができる。

本研究でも上述した調査結果を採用することにし、シミュレーションに温度勾配を適用できるようアルゴリズムを変更した。変更後のアルゴリズムのフローチャートを Fig.5 に示す。Fig.3 との主要な違いは、セルを指定した後、そのセルの部分の温度上昇および上述の式に基づく結晶粒界の移動確率を計算している点である。計算で得られた移動確率と乱数を使い、指定されたセルの結晶方位を変化させるか否かを決定している。変化させない場合には粒界エネルギーの計算は行わずに、次のセルを指定する。

3.2 温度の計算式

次に、温度上昇の計算式について述べる。今回の研究と温度勾配の扱いについて参考にした研究とでは熱源のモデルが違っている。そのため、温度上昇の計算式については改めて調査した。その結果、次の式が得られた⁹⁾。

$$T = \frac{q}{C\rho} \cdot \frac{e^{-\frac{r^2}{4kt}}}{(2\sqrt{\pi kt})^2} \quad \left(\text{ただし, } k = \frac{\lambda}{C\rho} \right) \quad (2)$$

ここで、 $q[\text{J/m}]$ は溶接長さ当たりの入熱量である。また、 $C[\text{J/kg} \cdot ^\circ\text{C}]$ は比熱、 $\rho [\text{kg/m}^3]$ は密度、 $\lambda [\text{J/m} \cdot \text{s} \cdot ^\circ\text{C}]$ は熱伝導率を表す多結晶体に関する定数である。さらに、 $t[\text{s}]$ は観察領域を熱源が通過してからの経過時間、 $r[\text{m}]$ は熱源通過位置と温度上昇を計算するセルとの距離を表す変数である。

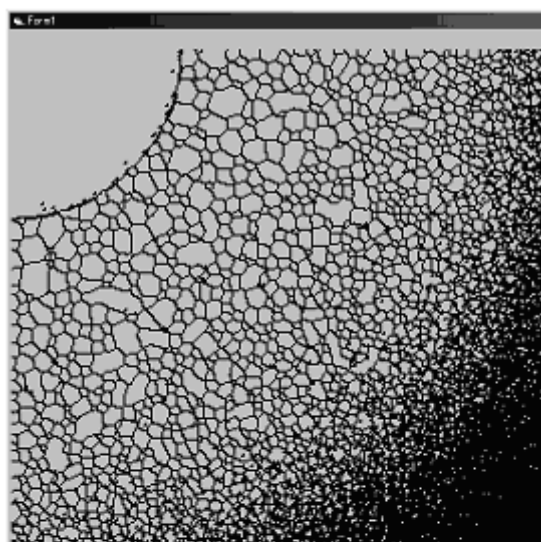
この式は、熱源が観察領域を通過して十分な時間が経過している場合に適用できるものである*。本研究で対象としているシミュレーションは、溶接熱が通過した後の温度が低下していく過程で起こる、結晶粒粗大化の様子を可視化することを目的に行う。そのため、この式が適用できる範囲内のシミュレーションが可能になればよい。そこで、今回はこの式を採用することにした。

4. シミュレーション結果に基づく考察

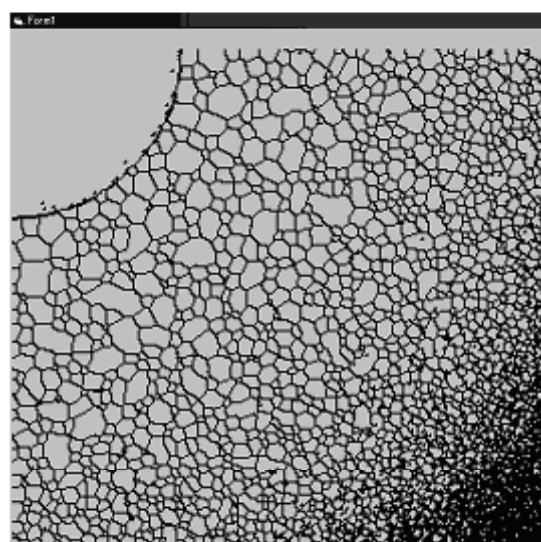
今回作成したシミュレーション・プログラムを用い、温度勾配を考慮して結晶粒粗大化現象を試行的にシミュレーションした結果を Fig.6 と Fig.7 に示す。これらの図は厚さ 3mm のステンレス鋼に、それぞれ、3kJ/cm および 10kJ/cm の熱を加えた場合のシミュレーション結果である。時間については、その起点を熱源が観測領域を通過した瞬間とした。熱源の通過位置はシミュレーション開始時に観察領域内の任意の点に指定できるが、今回の試行では、図の左上隅、すなわち、原点に指定した。また、図示しているのは、y 軸方向、z 軸方向それぞれ原点から 300セルの範囲であり、これは今回の試行で用いたパラメータ値について温度勾配を考慮した効果が視覚的によく確認できる範囲とした結果である。試行で用いた主なパラメータ値は Table 1 に示す。参考のため、今回用いたパラメータ値に対して文献 3 に基づいてセルの中心から隣接するセルの中心までの距離を算出すると、 $10 \mu\text{m}$ となった**。

* 式の適用範囲の詳細については、文献 9 を参照してほしい。

** 2. で述べたように、potts モデルと現実の多結晶体の物理スケールとの対応は、著者らが行った調査の範囲内では、十分に理論化されているとは言えない。ここで示した数値は文献 3 の成果に基づいて試行に用いたパラメータを使って算出した結果であり、著者らが物理的な実験結果と対比してその確実性を確認した数値ではない。あくまで参考値と考えてもらいたい。



after 20MCS

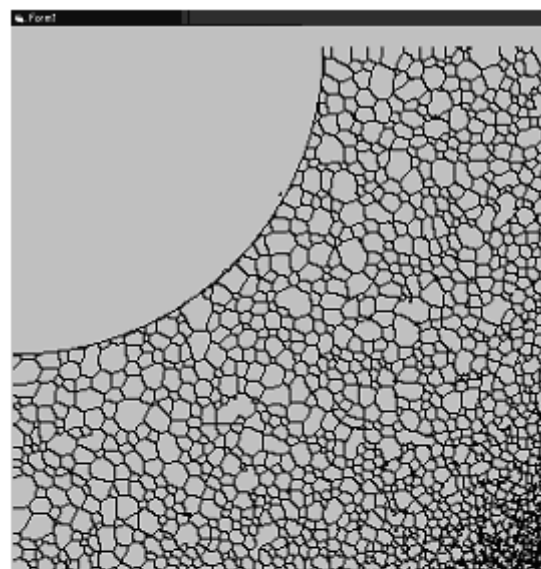


after 60MCS

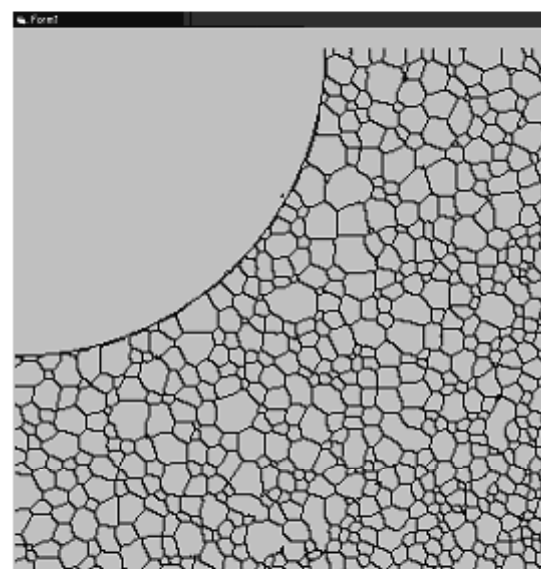
Fig.6 a result of trial ($q=3\text{kJ/cm}$).

シミュレーション結果の可視化には、本研究室で作成したツールを利用している⁴⁾。

Fig.6 および Fig.7 において熱源の通過位置を中心として 1/4 円状にみえる部分は、融点に達して溶解しているところに相当する。Fig.6 と Fig.7 を比較すると、入熱の多い Fig.7 のほうが熱の拡散範囲が広いことが観察される。また、これらの図によれば、熱源の通過位置に近いところほど結晶粒の粗大化が進んでいる様子が観察できる。さらに、時間が経過するにつれて粗大化が進んでいることも観察できる。これらの観察結果は、温度勾配が存在する場合に現実の結晶粒粗大化現象で観察される特徴である。このことから、シミュレーション結果を可視化して目視する限りにおいて、今回採用した温度勾配の適用法は、単純なモデルを使って現象の基礎理解のため



after 20MCS



after 60MCS

Fig.7 a result of trial ($q=10\text{kJ/cm}$).

Table1 parameters of trials.

Specific heat (C)	$0.5\text{J/g}\cdot^{\circ}\text{C}$
Thermal conductivity (λ)	$16.3\text{J/m}\cdot\text{s}\cdot^{\circ}\text{C}$
Density (ρ)	7.93g/cm^3
Activation energy (Q)	1500kJ/mol
Melting point (T_{max})	1480°C

の視覚教材を作成するという目的に対しては適切であったと考える。しかし、現実の溶接時の状況を厳密に再現するには、熱源のモデルなどにまだ検討の余地がある。

また、今回のシミュレーションの試行を通し、シミュレーションに要する時間について、等温環境でのシミュレーションより温度勾配を考慮したシミュ

レーションのほうが、所用時間が短くなるのではないかという見通しを得た。この見通しは、温度勾配に関する部分以外は同等のシミュレーションを試行したところ、等温環境のシミュレーションに対し、温度勾配を考慮したシミュレーションでは数分の1の時間しか要しなかった経験に基づく。このような時間差が生じる原因は、アルゴリズムを変更したことにあると考えている。アルゴリズム中最も時間を要する処理はエネルギー計算であり、温度勾配を考慮した場合には、温度の低い部分のシミュレーションにおいてこのエネルギー計算が高い確率で省略されるため、所用時間が短くなると推測している。

5. おわりに

今回の研究では、結晶粒粗大化現象のモンテカルロ・シミュレーション高速化に関する研究の一環として、温度勾配をシミュレーションに適用する方法について調査を行った。その結果、温度に依存させて結晶粒界の移動確率を決定する方法があることがわかった。この方法に基づいてシミュレーションを試行したところ、視覚教材作成を目的に単純なモデルを使って行うシミュレーションとしては、満足な結果が得られることがわかった。また、温度勾配を考慮したシミュレーションのほうが、等温環境におけるシミュレーションよりも処理時間が短くなるのではないかという見通しを得た。

2. で述べたように、今回使った熱源のモデルは溶接熱を精密にモデル化しているとはいえない。現実の熱伝導は複雑な現象であり、溶接の現場で実際に起こっている現象のモデル化法や、モデル化した結果の妥当性の判定法を考えることは困難を伴う。しかし、現実の現象に即したより効果的な視覚教材を作成するためには、これらの事項についてさらに検討することが必要である。

また、今回調査した温度勾配の適用法を、並列計算化したシミュレーション・プログラムに実装することが著者らの研究室において進んでいる。シミュレーション結果を現実の現象と照らしたときの妥当性の判定についても、上述した熱源のモデルの場合と同様、現実の結晶粒粗大化現象が複雑な現象で、実際の現象が計算で得られる理論値と一致しないことが多いことから、なにをもって妥当とするか基準の決定が難しい。しかし、時間経過に伴う結晶粒の平均サイズの変化や融解境界線からの距離による結晶粒の平均サイズの理論値など、過去の研究で用い

られている基準がいくつかある。これらの方法を調査して、並列計算化されたシミュレーションの結果の妥当性を検証し、その上で高速化の効果を評価することは、本研究に残された重要な今後の課題である。

謝 辞

本研究の一部は、津山工業高等専門学校の平成15年度傾斜配分枠研究費と、文部科学省および日本学術振興会の平成16年度科学研究費補助金により実施した。また、本研究のうち、シミュレーションに温度勾配を適用する方法の調査の部分は、津山工業高等専門学校情報工学科卒業生である石原尚実さんの卒業研究、シミュレーション・プログラムの変更およびそれを使ったシミュレーションの試行に関する部分は同卒業生である大橋克弘君の卒業研究に基づいている。ここに記して謝意を表す。

参 考 文 献

- 1) 大沼郁雄：計算機シミュレーションによる多結晶組織形成の予測，まてりあ，38,8(1999)610-614
- 2) D.J.Srolovitz, M.P.Anderson, G.S.Grest, P.S.Sahni：GRAIN GROWTH IN TWO DIMENSION, Scripta METALLURGICA, 17(1983)241-246
- 3) 西本和俊，才田一幸，鳥居尚之，大重広明：溶接熱影響部における結晶粒成長と再結晶のモンテカルロ・シミュレーション，溶接学会論文誌，21,2(2003)256-266
- 4) 大西淳，野村茜，大重広明：結晶粒粗大化のモンテカルロ・シミュレーションー各種プログラムの作成とシミュレーション結果の検討ー，津山工業高等専門学校紀要，45(2003)59-64
- 5) 大西淳，岡田卓也，大重広明：PC クラスタを用いた結晶粒粗大化シミュレーション・システムの構築ーシステム構成と試行シミュレーション結果の検討ー，津山工業高等専門学校紀要，47(2005)67-74
- 6) 野村茜，大西淳，大重広明：結晶粒粗大化のモンテカルロシミュレーションの試み，平成14年度電気・情報関連学会中国支部連合大会講演論文集，(2002)477
- 7) 大西淳，岡田卓也，T.Trung，大重広明：モンテカルロ法を用いた結晶粒粗大化シミュレーションの並列計算化，平成14年度電気・情報関連学会中国支部連合大会講演論文集，(2002)478
- 8) 大西淳：PC クラスタを用いた金属結晶粒粗大化過程シミュレーション・システムの構築，山陽放送学術文化財団リポート，48(2004)48-52
- 9) 佐藤邦彦，向井喜彦，豊田政男：溶接工学，理工学社，(1979)31-38