

氷結晶におけるパターン形成の 2次元シミュレーション 最終発表

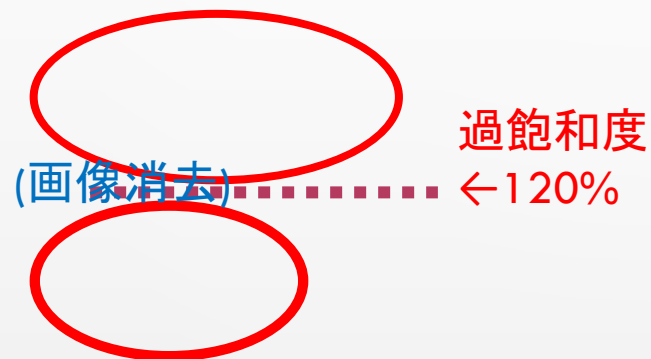
総合数理学部 現象数理学科

2年1組5番 江口将史

(画像消去)

プロジェクトの概要 (1)

- [目的]
 - 現象を表す数理モデルについて, その物理シミュレーションの実行方法を習得する.
- [目標]
 - 温度と過飽和度から結晶の形態が異なることをシミュレーションによって再現する.
(~~×~~ シミュレータの作成)



プロジェクトの概要 (2)

- [シミュレーション方法]
 - Processing を用いた.
 - 基本的には熱拡散方程式の数値計算
 - 中心差分をとった.
 - 界面成長の部分では👉Phase-Field法 を用いた

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)_i &= \frac{\varphi_{i+1,j} - \varphi_{i-1,j}}{2\Delta x} \\ \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y}\right)_j &= \frac{\varphi_{i,j+1} - \varphi_{i,j-1}}{2\Delta y} \\ \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}\right)_i &= \frac{\varphi_{i+1,j} + \varphi_{i-1,j} - 2\varphi_{i,j}}{\Delta x^2} \\ \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2}\right)_j &= \frac{\varphi_{i,j+1} + \varphi_{i,j-1} - 2\varphi_{i,j}}{\Delta y^2} \\ \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial y}\right)_i &= \frac{\varphi_{i+1,j+1} + \varphi_{i-1,j-1} - \varphi_{i-1,j+1} - \varphi_{i+1,j-1}}{4\Delta x \Delta y}\end{aligned}$$

プロジェクトの概要 (3)

(画像消去)

- [Phase-Field法[4]]

torrentホームページ[3]より

- 固相と液相の中間の性質を持つ界面において、固相の存在確率を導入して、曖昧な部分を扱う手法

熱拡散方程式

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T$$



$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{C_p} \left(k \nabla^2 T + \underline{30\varphi^2(1-\varphi)^2 L \frac{\partial \varphi}{\partial t}} \right)$$

フェーズフィールド
の時間変化

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -M_\varphi \left(\frac{\delta G_{sys}}{\delta \varphi} + \xi \right)$$

$$\left(\begin{array}{l} M_\varphi : \text{界面の易動度, 定数} \\ \xi : \text{揺動項} \end{array} \right)$$

全自由エネルギー G_{sys}

$$G_{sys} = \int_V \left\{ \underbrace{G(\varphi, T)}_{\text{化学エネルギー}} + \underbrace{\frac{1}{2} \varepsilon^2 |\nabla \varphi|^2}_{\text{勾配エネルギー}} \right\} dV$$

化学エネルギー

勾配エネルギー

プロジェクトの概要 (4)

$$G^S(T) - G^L(T) \simeq \frac{-L(T_m - T)}{T_m}$$

化学自由エネルギー $G(\varphi, T)$

$$G(\varphi, T) = \underline{h(\varphi)} G^S(T) + (1 - \underline{h(\varphi)}) G^L(T) + W^{SL} g(\varphi)$$

$$\left(\begin{array}{l} G^S(T) : \text{固相化学的自由エネルギー} \\ G^L(T) : \text{液相化学的自由エネルギー} \\ h(\varphi) : \text{局所的固相率に応じた単調増加関数} \\ h(\varphi) = \varphi^3(10 - 15\varphi + 6\varphi^2) \\ W^{SL} g(\varphi) : \text{エネルギー障壁} \\ g(\varphi) = \varphi^2(1 - \varphi)^2 \end{array} \right)$$

(画像消去)

高木[5]より

(最終的に・・・)

ε の方位依存性 $\varepsilon(\theta)$

$$\varepsilon(\theta) = \varepsilon_0(1 + \zeta \cos(k(\theta - \theta_0)))$$

$$\left(\begin{array}{l} \varepsilon_0 : \text{定数} \\ \zeta : \text{異方性強度 } \zeta < \frac{1}{15} \\ k : \text{界面エネルギー増減周期 (90 度ごとだと } k = 4) \\ \theta_0 : \text{デンドライトアームの成長方向} \\ \tan \theta = \frac{\frac{\partial \varphi}{\partial y}}{\frac{\partial \varphi}{\partial x}}, \quad \theta = \tan^{-1} \frac{\frac{\partial \varphi}{\partial y}}{\frac{\partial \varphi}{\partial x}} \end{array} \right)$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta G_{sys}}{\delta \varphi} + \xi = & 4W^{SL}\varphi(1-\varphi) \left(0.5 - \varphi + \frac{15L(T-T_m)}{2W^{SL}T_m}\varphi(1-\varphi) + \chi \right) \\ & - \varepsilon^2 \Delta \varphi - \varepsilon \varepsilon' \left(\left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right) \sin 2\theta + 2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial y} \cos 2\theta \right) \\ & + \frac{1}{2}(\varepsilon'^2 + \varepsilon \varepsilon'') \left(2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial y} \sin 2\theta - \Delta \varphi - \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right) \cos 2\theta \right) \end{aligned}$$

プロジェクトの概要 (4)

- 過飽和度の導入

- 👉 kinetic係数・・・結晶の面成長速度 $[\text{m K}^{-1} \text{s}^{-1}]$

$$\beta = \alpha_{QLL} \frac{v_c (p - p_e)}{\sqrt{2\pi m k T}}$$

表 2: 水の界面カイネティック係数の計算条件

空気の気体定数 R	$287.1 \text{ JK}^{-1} \text{ kg}^{-1}$
水分子 1 個の質量 m	$3.0 \times 10^{-23} \text{ g}^3$
固相の水分子 1 個の体積 v_c	$3.0 \times 10^{-29} \text{ m}^3$
ボルツマン定数 k	$1.38 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$

成果物の紹介 (シミュレーション結果)

初期条件[5][6]

$$\varepsilon_0 = \sqrt{\frac{3\delta\gamma}{b}}, \quad W^{SL} = \frac{6\gamma b}{\delta}, \quad M_\phi = \frac{bT_m\beta}{3\delta L}$$

表 1: 水の凝固過程の計算条件

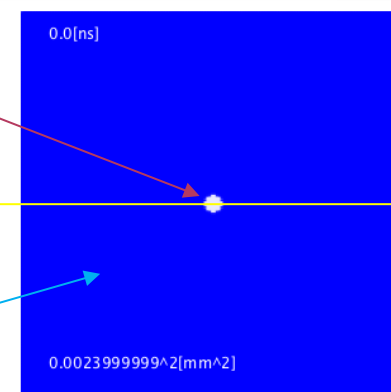
融点 T_m	273.15 K
過冷却液体の温度 T_0	$273.15 + \{-15, -20\}$ K
熱伝導率 K	$2.2 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$
比熱 C_p	$4.2 \times 10^6 \text{ J K}^{-1} \text{ m}^{-3}$
潜熱 L	$3.4 \times 10^8 \text{ J m}^{-3}$
界面エネルギー密度 γ	0.11 J m^{-2}
差分ブロック長さ Δx	30 nm
界面幅 δ	$\delta = 3\Delta x \text{ nm}$

氷核

$$\varphi = 0.9$$

$$T = T_0 + 0.9 \times (T_m - T_0)$$

フェーズフィールドの
固相確率



過冷却液体

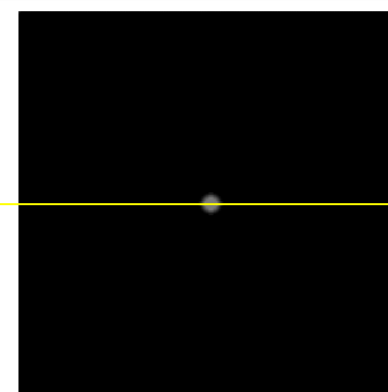
$$\varphi = 0.0$$

$$T = T_0$$

$$\varphi = 1.0$$

$$\varphi = 0.0$$

温度場



T_{max}

T_{min}

[5]水の物性値 (2016/11/20 アクセス) <http://ebw.eng-book.com/pdfs/a56d20812231f13a37182ba24e79ebc4.pdf>

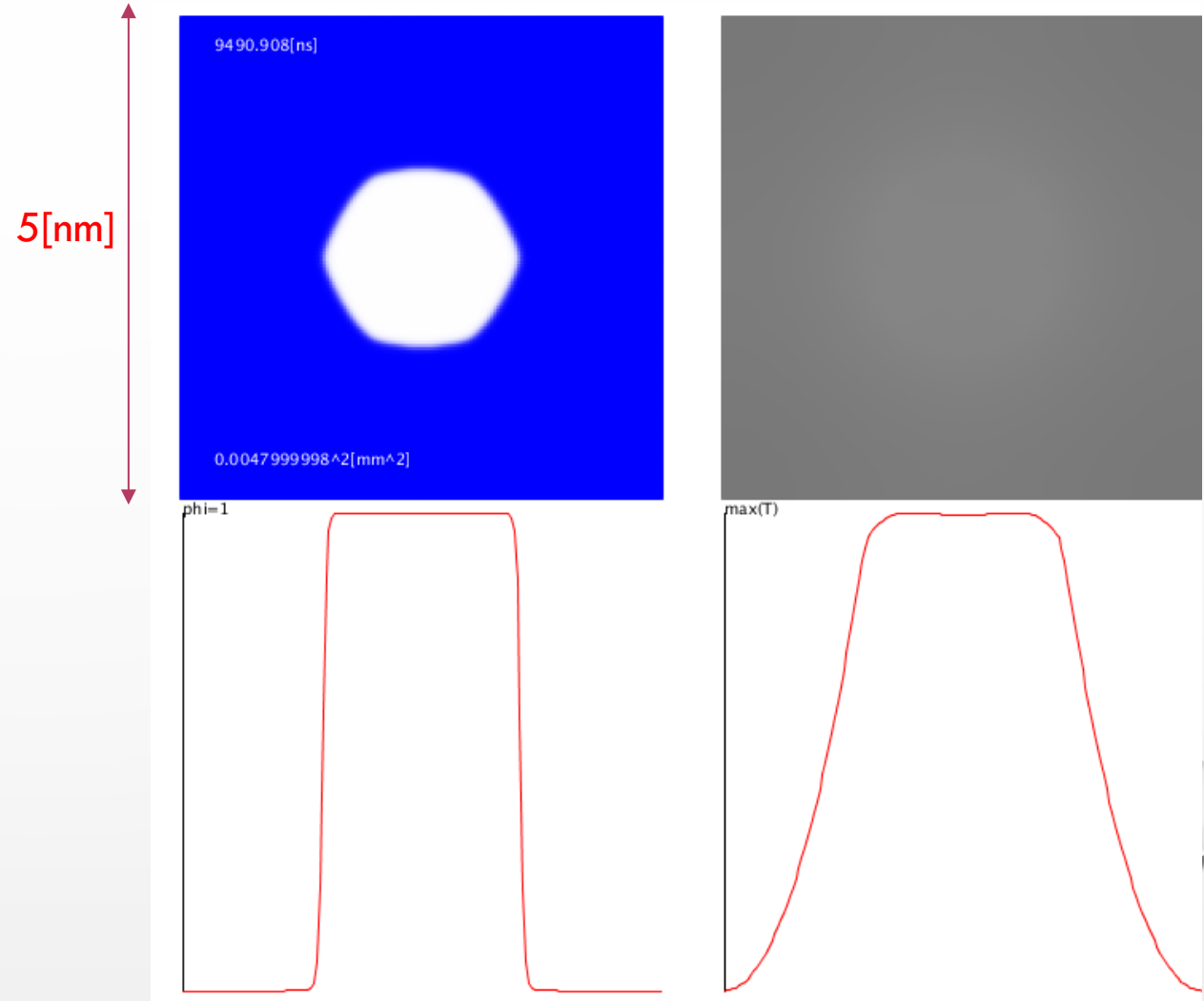
[6]水のプログラム雑学-水のエネルギー (2016/11/20 アクセス) http://www.geocities.jp/shuji_maru/chikara/chikara.html

↓動画だとファイルが大きくなるので
画像に差し替えてあります

成果物の紹介 (シミュレーション結果) 10[ms]

- ① 過冷却温度 -15°C , 過飽和度110%

(画像消去)

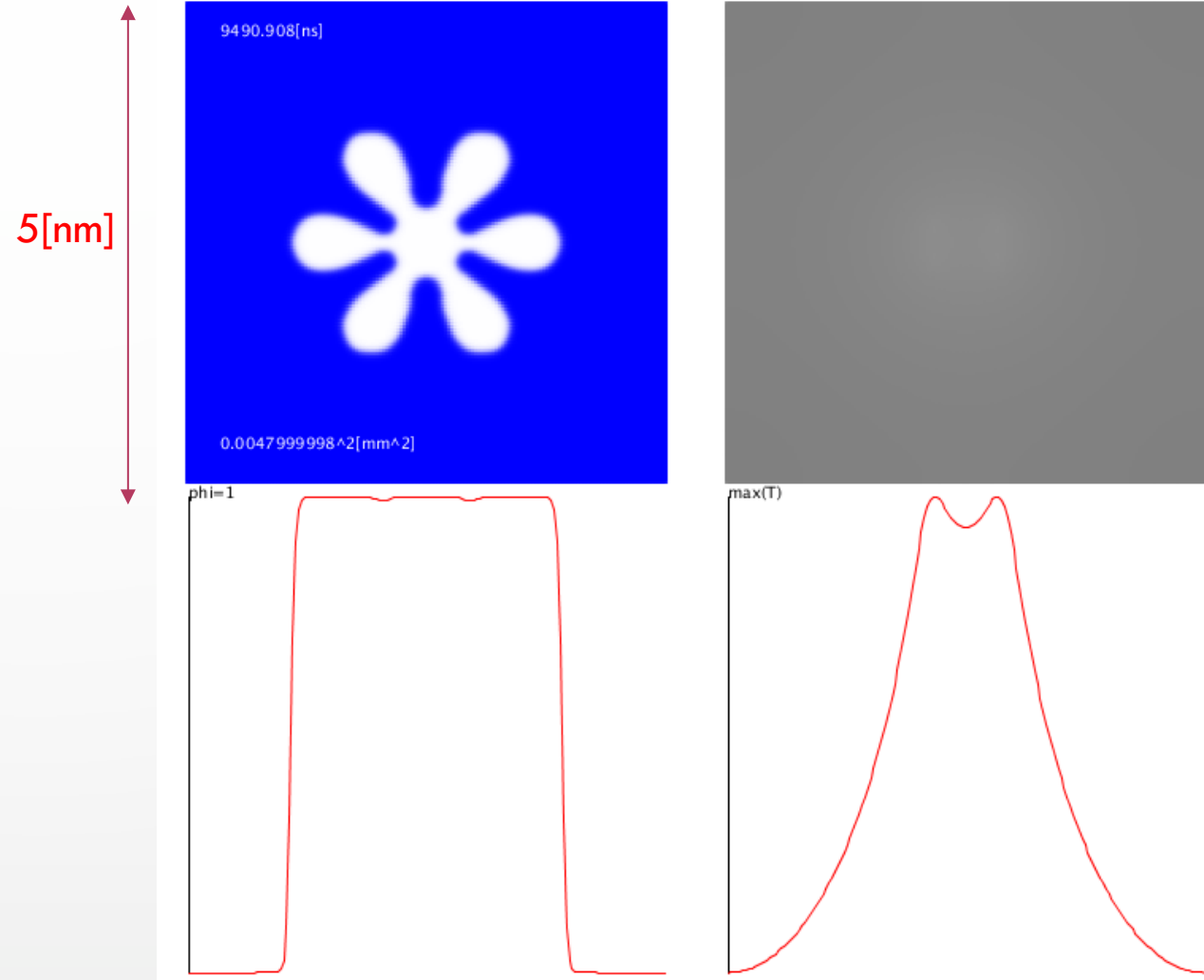


↓動画だとファイルが大きくなるので
画像に差し替えてあります

成果物の紹介 (シミュレーション結果) 10[ms]

- ② 過冷却温度 -15°C , 過飽和度130%

(画像消去)



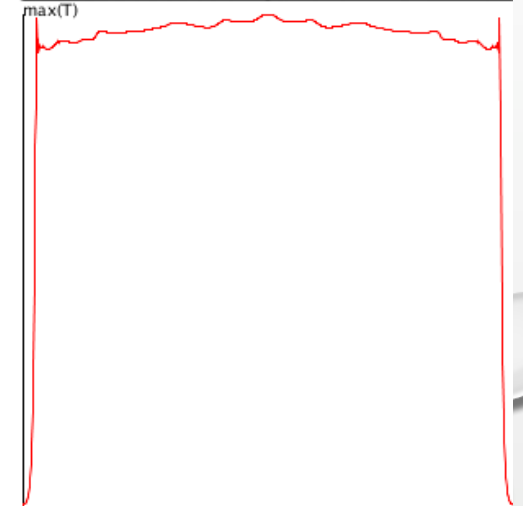
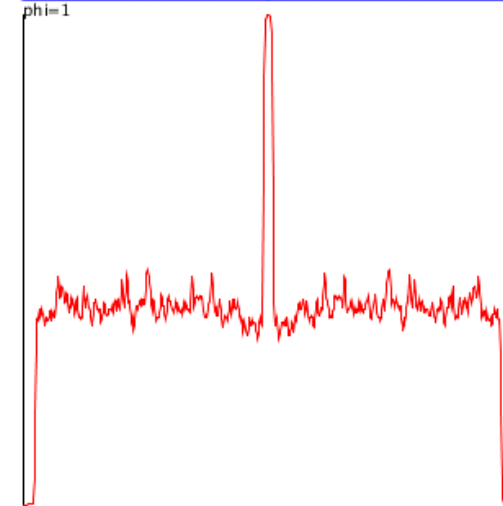
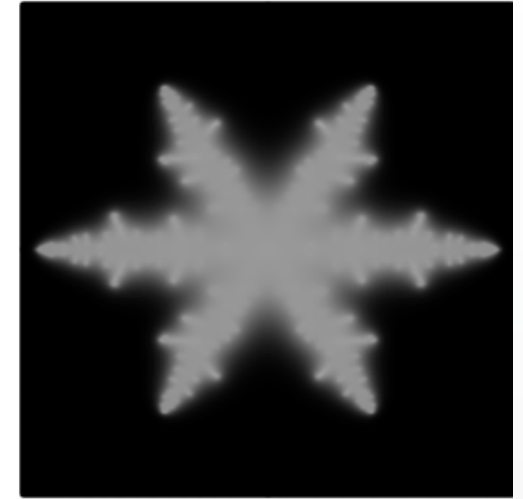
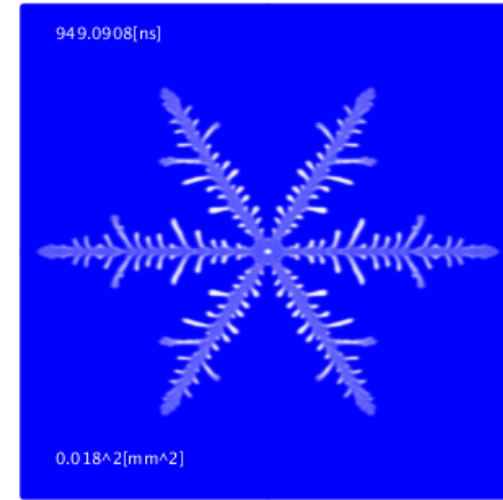
↓動画だとファイルが大きくなるので
画像に差し替えてあります

成果物の紹介 (シミュレーション結果) 10[ms]

- ③ 過冷却温度 -20°C , 過飽和度130%

(画像消去)

20[nm]



今後の発展

[得られたもの]

温度と過飽和度から結晶の形態が異なることをシミュレーションによって再現できた.

[問題点]

実行時間が長い 🖐️ 他の言語に挑戦

[今後の課題]

3次元シミュレーションを行う

シミュレーターの作成 (異方性強度をどう設定するか)

1年の情報処理, プログラミング演習から今回の応用プログラミング演習までご指導ありがとうございました.
この授業の取り組みを通してプログラミングの技術だけでなく, 目的や目標を明確に定めてプロジェクトを進めることが実践できました. 苦労が絶えませんでした, その分多くのことを学びました. 発表前日までうまく結晶が表示できなかったのですが, 何とか形になって最終発表ができて良かったです.
本当にありがとうございました.

ご清聴ありがとうございました