

# フェーズフィールド法を使ってみませんか？

高木 知弘\*  
takaki@kit.ac.jp

## 1 はじめに

本学に着任して2011年12月で丸4年が経ち、研究室メンバーもB4からM2までようやく揃いました。現在は博士後期課程への進学希望者が来てくれることを期待しつつ、研究環境と研究レベルの向上を図っているところです。研究内容は、今回紹介するフェーズフィールド法を用いたコンピュータシミュレーションと、有限要素法と実験によるボルト締結構造物の力学特性評価です。

フェーズフィールド法に関しては、研究に加えて国内のユーザーを増やすことも目標としており、本学の仮想webサーバをお借りしてフェーズフィールド法の情報提供サイトの運営を行っております(<http://www.pfm.kit.ac.jp/>)。また、2009年3月から2011年3月まで、「機械の研究」誌にフェーズフィールド法の解説記事を連載し(<http://www.cis.kit.ac.jp/~takaki/phase-field.html>)、この内容を集約した単行本を、2012年3月に養賢堂から出版する予定です。このように、フェーズフィールド法の発展と教育にも力を入れています。

今回、本誌に執筆する機会を頂きましたので、学内の教員と学生の皆さんに、フェーズフィールド法を簡単に紹介させて頂きたいと思えます。まず、フェーズフィールド法の概要を説明し、次いで、幾つかのシミュレーション例を紹介させて頂きます。

## 2 フェーズフィールド法

フェーズフィールド法は、境界の移動を伴う問題を、比較的簡単に精度良く解くことのできる数値モデルです。1990年ごろに、凝固時に形成されるデンドライト(樹枝状結晶)のシミュ

レーションに成功し、それ以降、凝固のみならず、固相変態、再結晶、粒成長などの材料組織予測手法として発展してきました。また、き裂の伝播や転位の移動、多相流問題、トポロジー最適設計、バイオメカニクスなど、様々な現象や学問にも応用されています。

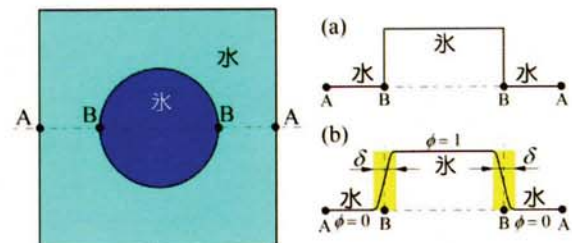


図1 フェーズフィールド変数

フェーズフィールド法では、フェーズフィールドと呼ばれる新しい変数 $\phi$ を用います。図1は、水の中に円形の氷が浮かんでいる状態を、従来の方法(図1(a))とフェーズフィールド法(図1(b))で表現したものです。図1(a)では、水と氷の境をシャープな界面として考えます。一方、フェーズフィールド法では、図1(b)のように、例えばフェーズフィールド変数 $\phi$ が1の領域を氷、0の領域を水と定義し、 $\phi$ が0から1まで滑らかに変化する領域を界面と考えます。このため、界面が有限の幅 $\delta$ を持つことになり、拡散界面モデルとも呼ばれています。つまり、界面を「ぼかす」もしくは「あいまいにする」モデルと言えます。

水の中で氷が大きくなったり小さくなったりする凝固や融解の自由境界問題は、図1(a)の従来の考え方では、界面を「追う」ことで表現されます。この場合、図1のような簡単な形状であれば問題ないのですが、材料組織は極めて複雑な形状をしており、そのような問題では界面を「追う」方法は極端に難しくなります。一方、図1(b)のフェーズフィールド法では、界

\*機械システム工学部門/准教授



面を直接追うことはせず、各点のフェーズフィールド変数の増減をみることで界面の移動を表現します。例えば、電光掲示板では文字が移動しているのではなく電気のオン・オフで文字が移動しているように見えますし、波の伝播では、水が移動しているのではなく、その点の水面の高さが変化することで水が移動しているように見えます。フェーズフィールド変数の増減は、フェーズフィールド変数の時間発展方程式を解くことで得られます。最も簡単な式は、

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

のように表されます。つまり、 $\phi$  の時間変化(左辺)は、右辺第1項の拡散項( $\phi$  の分布を滑らかにする寄与)と第2項の反応項( $\phi$  の分布を急峻にする寄与)のバランスで決まります。ここで、 $\beta=0$  の時は拡散項と反応項の寄与が打ち消しあい、 $\phi$  の分布は変化しません。 $\beta$  が値を持つと、拡散項と反応項のバランスが壊れ、 $\beta$  の正負に依存して図2のように  $\phi$  の増減が生じ、例えば  $\phi=0.5$  の点の位置を追うと、界面が移動するように見えるわけです。

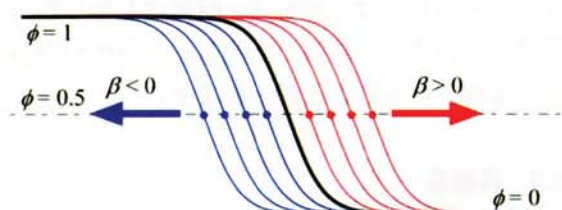


図2 フェーズフィールド法による界面移動

$\beta$  は温度や濃度の関数であり、図1の水の問題であれば、温度が0℃よりも高いか低いかによって  $\beta$  の正負が決定され、0℃からの温度差の絶対値が大きいほど単位時間あたりの  $\phi$  の変化が大きく、つまり界面の移動速度が速くなり、凝固や融解の温度依存性が表現できるようになります。通常は、式(1)の  $\phi$  の発展方程式と熱伝導方程式や濃度の拡散方程式を同時に解きます。

式(1)は、反応拡散方程式の一種であり、極々一般的な差分法で簡単に解くことができます。また、2次元でも3次元でも同じ式です。さらに、式(1)は材料組織予測で重要となる曲率の影響を自然に含んでいます。このため、式(1)「さえ」解けば、界面を追うことなく、簡単に、

精度良く複雑な界面形態の時間変化を表現できる訳です。

### 3 フェーズフィールドシミュレーション紹介

凝固、粒成長、薄膜成長、最適設計、原子シミュレーションへのフェーズフィールド法の適用例を紹介させていただきます。

#### 3.1 デンドライト成長

図3は、式(1)と熱伝導方程式を同時に解いて得られた純ニッケル凝固時のデンドライト形態です。青いところが  $\phi=1$  の固相部分です。幾つかの条件を変えてシミュレーションを行っています。実際は式(1)をもちよっと複雑にした式を使いますが、それでも200行程度の簡単なプログラムでこのような複雑なデンドライト形態を得ることができます。

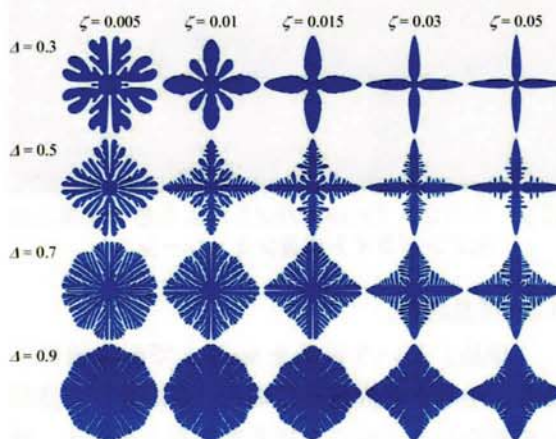


図3 純ニッケルのデンドライト

フェーズフィールド法の一番の欠点は、計算に用いる数値格子点を多く必要とするということです。これは、狭い界面領域でフェーズフィールド変数の滑らかな分布を表現する必要があるためです。最近、GPGPUというグラフィックボードを用いた計算手法が注目されていますが、フェーズフィールド法はGPGPU計算に大変相性が良いと言われています。図4は、5000×5000の差分格子を用いたアルミ合金のデンドライト成長シミュレーションの結果です。CPUの約100倍の計算速度を達成することができました。

図5は、東京工業大学のスパコンTSUBAME 2.0を用いた世界最大のデンドライト成長シミュレーション結果です(差分格子数: 768×1632×3264)。本研究は東工大の青木尊之教授





図4 GPU計算によるニッケル合金のデンドライト成長シミュレーション

(<http://www.sim.gsic.titech.ac.jp/>)のグループと共同で行われ、2011年のゴードンベル賞・特別賞を受賞しました。この結果は、Spring-8を用いて観察された金属凝固組織と酷似しており、今後の計算材料学に大きく貢献するものと期待しています。

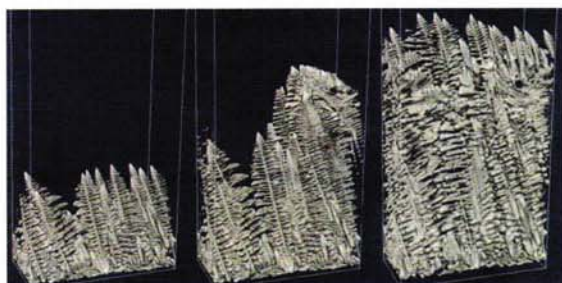


図5 スパコンTSUBAME2.0による超大規模3次元デンドライト成長シミュレーション

### 3.2 球晶成長

「球晶」という言葉をweb上で画像検索すると、中心から放射状に細長い筋が伸びた球形の綺麗な結晶の写真を見ることができます。球晶は、高分子材料の凝固時に見られる典型的な結晶形態です。図3のような金属材料の単結晶と異なり、中心から放射状に伸びる細い筋が単結晶であり、それが成長とともに枝分かれしながら多結晶体となり、その集合が一つの球晶を形成します。

球晶の形成には、高い粘性と過冷却度が必要であると言われています。図6は、液相の粘性を変えて凝固シミュレーションを行った結果です。ここでは2元合金の物性を用いた模擬シミュレーションを行っており、上段が濃度の分布、下段が結晶方位の分布です。このフェーズフィールドシミュレーションでは、結晶方位を新しく変数として導入し、粘性を結晶方位の配向度として表現しています。図6(a)から図6(d)に向かって結晶方位の配向度が遅く(粘性

が高く)、結晶の枝分かれが頻繁に生じ、球晶に似た形態に近づいていることがわかります。

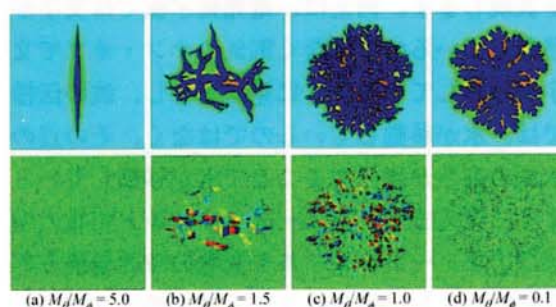


図6 粘性が結晶形態に及ぼす影響

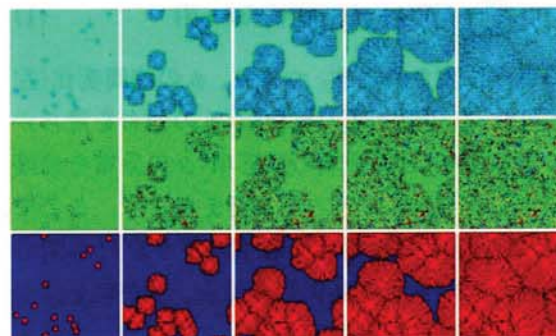


図7 複数球晶の成長シミュレーション

図7は、複数の核からの球晶の成長過程を示しています。上から、濃度、結晶方位、フェーズフィールド変数の分布で、時間は左から右へ経過しています。球晶が衝突して、全体が固相化する様子を見ることができます。

### 3.3 再結晶

金属材料を大きく変形させると、材料内に転位が蓄積し、材料が硬くなります。硬くなった材料を柔らかくして延性を取り戻すために、加工後の材料を高温状態に保持する焼鈍しを行うことがあります。この際、不思議なことに、転位をほとんど含まない綺麗な結晶が転位密度の高い領域で核生成し、成長して新しい材料組織が誕生します。この過程を再結晶と呼びます。再結晶のシミュレーションでは、材料の塑性変形と再結晶を連続して評価する必要があります。

図8は、多結晶体の変形シミュレーションを、有限要素法を用いて行った結果です。図(a)~(c)は、それぞれ30%、40%、50%圧縮した際の結果であり、上から、転位の密度、結晶方位の分布です。これらの結果を使って、ちょっと特別な操作をすると、図9の一番上のような組織を得ることができます。この状態からフェー



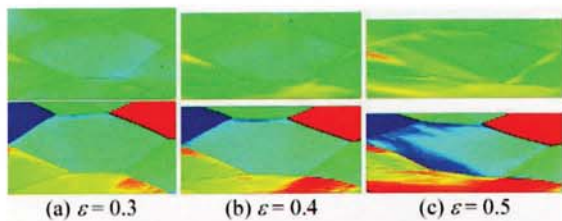


図8 多結晶体の有限要素解析結果

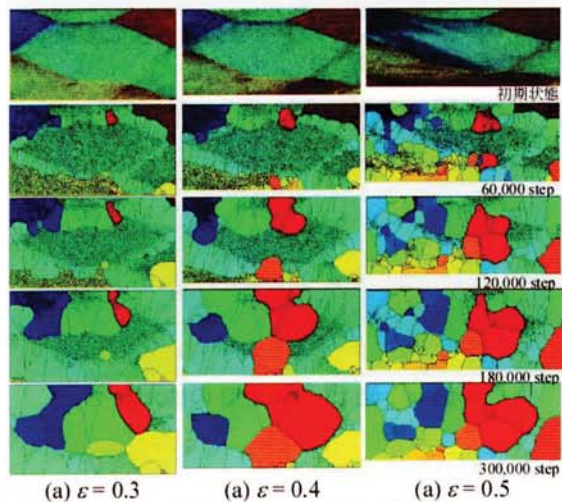


図9 再結晶シミュレーション

ズフィールド法を用いて再結晶のシミュレーションを行うと、図9の上から下に向かって各変形に応じた再結晶時の組織変化を見ることができます。ここでは、複数のフェーズフィールド変数を用いるマルチフェーズフィールド法を採用しています。

ここで紹介したように、フェーズフィールド法と有限要素法を用いることで、材料加工プロセス全てをシミュレートできるようになります。

### 3.4 自己組織化成長

ある基板の上に他の材料を蒸着させて薄膜を作ると、基板と薄膜の材料の原子間距離が異なる場合、基板と薄膜の界面付近に応力場が生じ、ひずみエネルギーを小さくするように島のようなドットが自然に形成されます。

図10は、Si基板上にGeを蒸着させるフェーズフィールドシミュレーションの結果です。時間は上から下へ、図の色は相当応力の分布です。蒸着が開始すると、ピラミッド状の小さいドットが核生成し成長します。ある程度大きくなると、大きなドットが小さいドットを吸収する粗大化が生じ、途中ピラミッド形態からドーム形態にドット形態が変化し、さらに粗大化する過

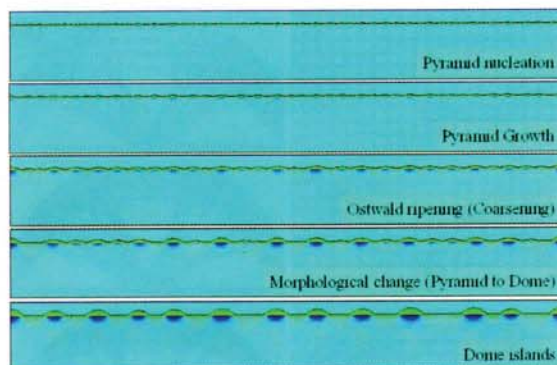


図10 ドットの自己組織化シミュレーション

程を見ることができます。応力場の計算には、有限要素法を用いています。

### 3.5 トポロジー最適設計

構造物のトポロジーを含んだ最適形状を自動的に計算する試みが、1980年代後半ごろから行われています。ここでは、単純支持はりの下端中央に下向きの集中荷重を作用させ、面積一定の条件下で剛性(変形し難さ)を最大化するトポロジー最適設計へのフェーズフィールド法の適用例を紹介します。

図11は、縦横比1:2の長方形構造の中に無数の穴を開けた初期状態(図11(a))からのフェーズフィールドシミュレーションの結果を示しています。青い領域が材料のあるところで、水色の領域が材料の無い穴部になります。図11(b)(c)では、全体的にWをひっくり返したような形状が現れ、各穴は引張や圧縮の方向(主応力方向)に細長く配向していることがわかります。これらの穴が繋がったり、材料で埋め尽くされたりして、図11(d)(e)のような構造が形成され、最終的には図11(f)のような、どこかにありそうなアーチ橋形状の構造が算出されています。中心から放射状に伸びる部材は、木の枝のような形状になっています。

図12は、縦横比1:6の初期構造(図12(a))からのシミュレーション結果です。この場合も、引張と圧縮を受け持つような構造が形成され、大小2つの橋を組み合わせたような構造が算出されています。

### 3.6 原子シミュレーション

フェーズフィールドクリスタル法と呼ばれる、原子構造を表現可能なフェーズフィールドモデ



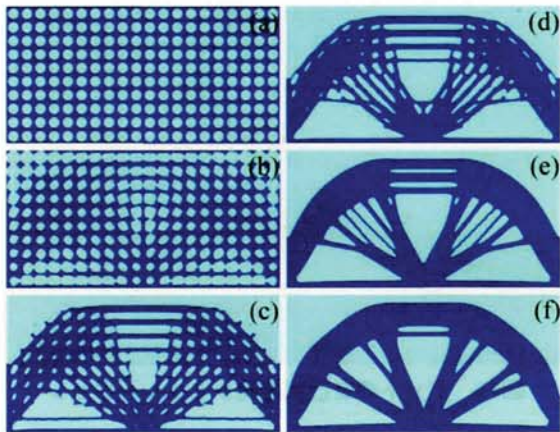


図11 トポロジー最適化シミュレーション I

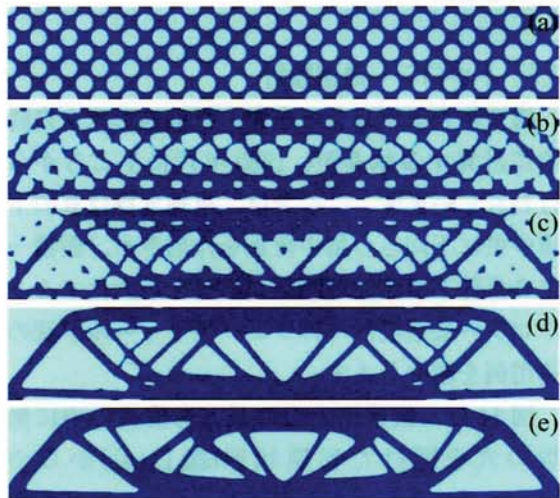


図12 トポロジー最適化シミュレーション II

ルがあります。このモデルでは、フェーズフィールド変数が正弦関数のように周期的に変化し、これにより原子の位置を表現します。図13は、フェーズフィールドクリスタル法を用いてナノ多結晶体を表現したものです。図13(a)は、フェーズフィールド変数の分布を示しており、赤が値が高いところ、青が値が低いところです。図13(b)は、エネルギーの分布によって図13(a)を表現したものです。粒界においてエネルギーが高くなっており、隣合う結晶粒の方位差が小さい粒界では、転位が離散的に配置してい

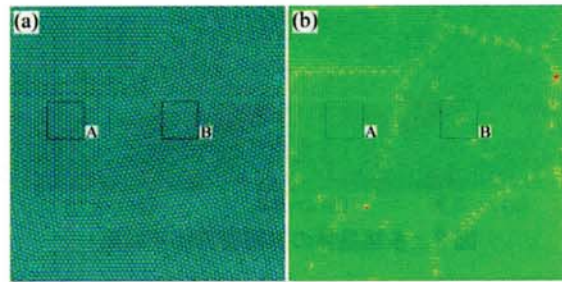


図13 フェーズフィールドクリスタル法による多結晶構造の表現

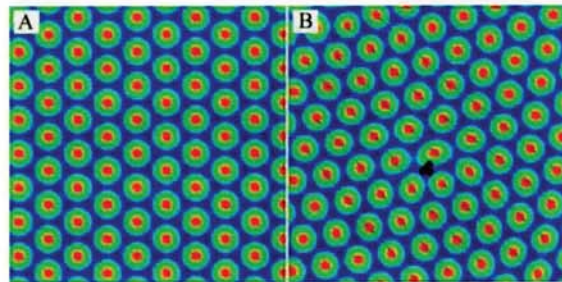


図14 図13のAとBの拡大図

ることがわかります。

図14は、図13中の領域Aと領域Bの拡大図です。Aは結晶粒内部であり、原子が規則正しく配列しており、Bは1個の転位を含んでいることがわかります。

#### 4 おわりに

最後まで読んで頂きまして有難うございました。今回ご紹介させて頂きましたように、フェーズフィールド法は、Åスケールの原子構造から、mスケールの構造物まで適用可能なマルチスケール手法です。また、境界を境界として取り扱わないことから、複数の物理現象を含むマルチフィジックス問題の評価を得意としています。機械工学や材料工学だけでなく、様々な分野への応用が可能な手法ですので、もし皆様の研究において「使ってみようかな?」と思われましたら、お気軽にお声掛け下さい。