

TSUBAME 共同利用 令和3年度 学術利用 成果報告書

フェーズフィールド法に立脚した多結晶組織形成の大規模シミュレーション  
Large-scale phase-field simulation on the formation of polycrystalline microstructures三好 英輔  
Eisuke Miyoshi東京農工大学大学院工学研究院  
Institute of Engineering, Tokyo University of Agriculture and Technology  
<https://web.tuat.ac.jp/~miyoshi/>

少数の結晶粒が優先成長する異常粒成長現象の適切な予測は、高性能材料の開発において極めて重要な役割を担う。本研究では、フェーズフィールド法と複数 GPU 並列計算に基づき、異常粒成長の超大規模シミュレーション手法を開発した。さらに、数十万の結晶粒を用いた世界最大の 2D および 3D シミュレーションを行うことで、異常粒成長の代表的理論である平均場理論の妥当性の解明を試みた。特定の結晶粒と周囲粒との初期サイズ比、粒界エネルギー比、移動度比を変化させた系統的な大規模シミュレーションを実施し、シミュレーション結果と平均場理論による解析解とを詳細に比較した結果、特定粒の異常成長挙動(異常成長の発生の有無、異常成長した際に到達する限界サイズ)が理論と良好に一致することが初めて定量的に明らかとなった。

This study developed a large-scale simulation method for abnormal grain growth phenomena based on the phase-field modelling and parallel computing on multiple GPUs. The developed method was applied to 2D and 3D abnormal grain growth to elucidate the validity of the well-known mean-field theory proposed by Humphreys. A series of large-scale simulations were performed while varying the initial size ratio, boundary energy ratio, and mobility ratio of a specific grain and matrix grains. Detailed comparisons of the simulated results and theoretical predictions demonstrated that the abnormal grain growth behaviors (i.e., whether or not the abnormal growth occurs and the limiting size that can be reached by an abnormally growing grain) is well described by the mean-field theory.

*Keywords:* Polycrystals; Microstructure; Grain boundary properties; Phase-field method; GPGPU

#### 背景と目的

多結晶固体の焼鈍過程で少数の結晶粒が優先成長する異常粒成長は、集合組織や単結晶の創生において必須の役割を担うことに加え、再結晶核生成などの冶金学現象の発生機構としても知られ、工学的に極めて重要な現象である。異常粒成長を解析的に予測する有力なモデルとして、Humphreys [Acta. Mater. 45 (1997) 4231] の平均場理論が多用されている。平均場理論では、特定の結晶粒の異常成長挙動を、その結晶粒と周囲のマトリクス粒とのサイズ比、粒界エネルギー比、移動度比という 3 つのパラメータのみの関数として記述することができる。しかしながら、この理論の妥当性の詳細な検証は未だされていない。これは、理想的なモデル系に対する実験の困難さと、従来の数値研究における計算スケールおよび計算精度の限界に強く起因するものである。

本研究では、フェーズフィールド法と複数 GPU 並列計算に基づき、異常粒成長の超大規模シミュレーション

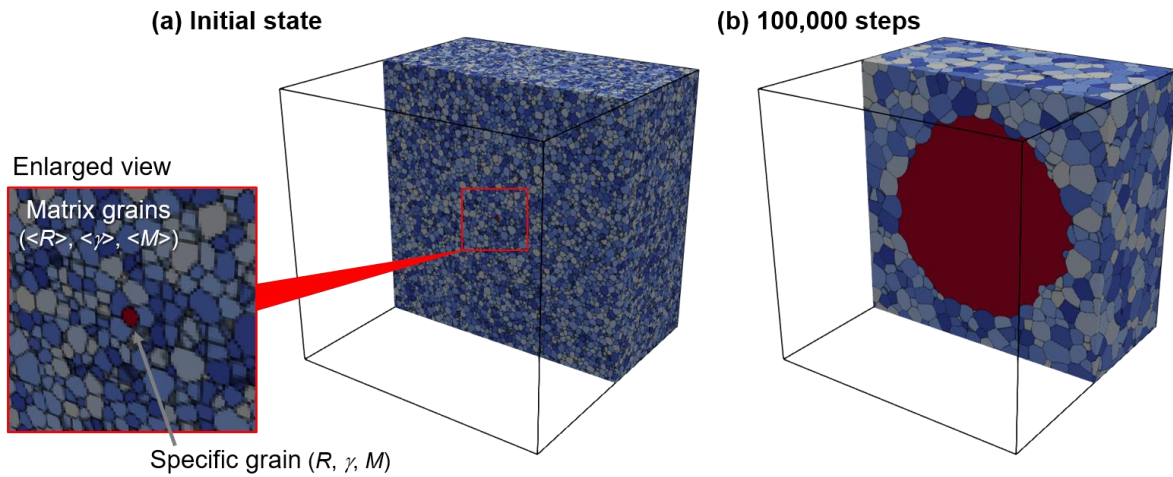
手法を開発し、数十万の結晶粒を用いた世界最大の 2D および 3D シミュレーションを行うことで、平均場理論の妥当性を初めて明らかとすることを目的とした。

#### 概要

特定の結晶粒とマトリクス粒の初期サイズ比、粒界エネルギー比、移動度比を変化させて系統的な大規模 2D・3D 粒成長シミュレーションを実施し、結果と平均場理論による解析解とを詳細に比較した。使用した計算条件や平均場理論の詳細を以下に示す。

#### 計算条件

数値モデルとして、多結晶系の粒界移動を精度良く表現可能な Steinbach ら [Physica D 134 (1999) 385] のマルチフェーズフィールド (MPF) モデルを用いた。計算領域サイズは、2D で  $12,288^2 \Delta x^2$  ( $\Delta x = 1$ : 差分格子間隔)、3D で  $1280^3 \Delta x^3$  とし、時間増分  $\Delta t$  は、陽解法の安定条件を満たす範囲でなるべく大きく設定



**Fig. 1** 3D polycrystalline system for simulating the abnormal growth of a specific grain: (a) initial state, (b) 100,000 steps. Different grains are distinguished by different colors. The matrix grains are visualized only for a half of the entire domain to make the specific grain visible.

した。Figure 1 (a)に例示するように、粒径  $R$ 、粒界エネルギー  $\gamma$ 、モビリティ  $M$  の球形の結晶粒(特定粒, specific grain)を領域中央に配置し、その周囲を平均粒径  $\langle R \rangle$ 、粒界エネルギー  $\langle \gamma \rangle$ 、モビリティ  $\langle M \rangle$  の約 30 万の結晶粒群(マトリクス)で充填した。2D 計算には 16GPU, 3D 計算には 64GPU を使用した。

以上の条件の下、特定粒とマトリクスとの初期粒径比  $\rho_{ini} = R_{ini} / \langle R \rangle_{ini}$ 、粒界エネルギー比  $\Gamma = \gamma / \langle \gamma \rangle$ 、モビリティ比  $\mu = M / \langle M \rangle$  を変化させて計算を行い、特定粒の異常成長挙動を下記の平均場理論と比較した。

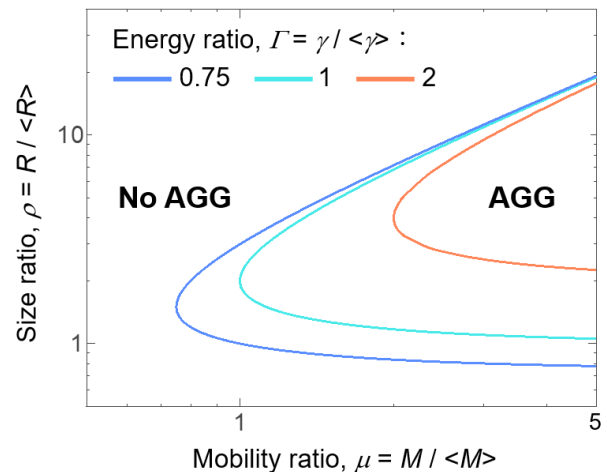
#### 平均場理論

Humphreys は、Hillert の平均場解析に立脚し、マトリクス中の特定粒の異常成長挙動を、粒径比  $\rho = R / \langle R \rangle$ 、粒界エネルギー比  $\Gamma = \gamma / \langle \gamma \rangle$ 、モビリティ比  $\mu = M / \langle M \rangle$  の関数として記述する解析的モデルを提示した。この理論によれば、特定粒の異常成長が生じる最小粒径比  $\rho_{min}$ 、異常成長した粒が到達する最大粒径比  $\rho_{max}$  は次のように表される。

$$\rho_{min} = 2\mu - 2\sqrt{\mu(\mu - \Gamma)},$$

$$\rho_{max} = 2\mu + 2\sqrt{\mu(\mu - \Gamma)}.$$

この関係を図示すると、Fig. 2 のようになる。特定粒とマトリクスとの粒径比  $\rho$  が実線の下側 ( $\rho_{min}$ ) より上にあると、特定粒は異常成長し、粒径比  $\rho$  が次第に増加す



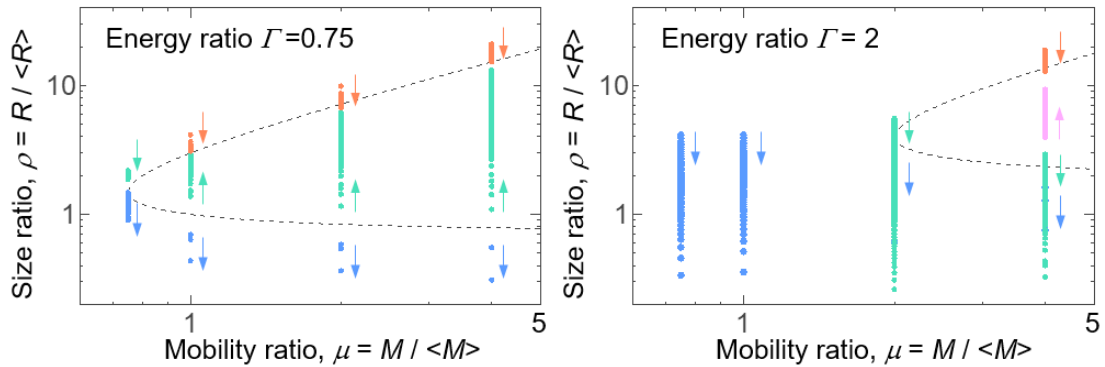
**Fig. 2** Abnormal growth conditions of the specific grain shown in Fig. 1 as a function of the grain size ratio  $\rho = R / \langle R \rangle$ , boundary energy ratio  $\Gamma = \gamma / \langle \gamma \rangle$ , and mobility ratio  $\mu = M / \langle M \rangle$ .

る。  $\rho$  が実線の上側 ( $\rho_{max}$ ) に達したところで異常成長は止まり、以後、  $\rho$  は一定値  $\rho_{max}$  を保つと予想できる。

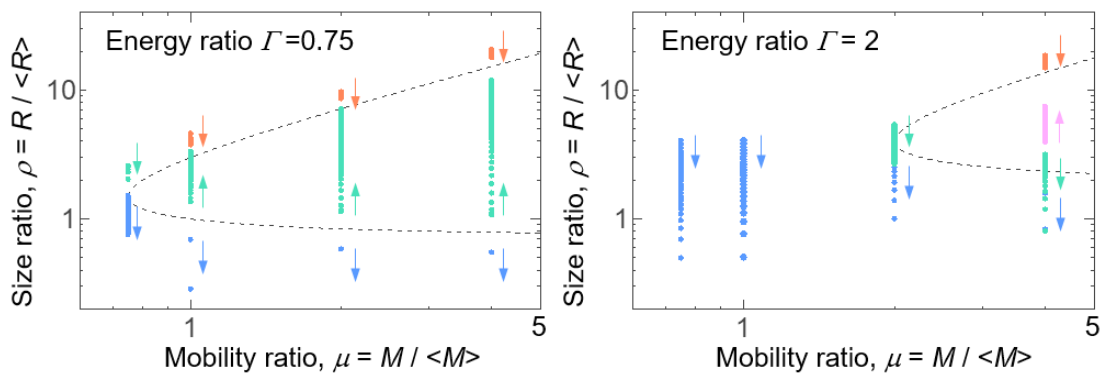
#### 結果および考察

Figure 1(b)は、シミュレートされた異常粒成長挙動の一例として、粒界エネルギー比  $\Gamma = 0.75$ 、モビリティ比  $\mu = 4$  の条件における 100,000 steps 時の組織形態を示す。特定粒が周囲のマトリクスを蚕食して優先成長

## (a) 2D simulations



## (b) 3D simulations



**Fig. 3** Temporal variations in size ratio  $\rho$  as functions of boundary energy ratio  $\Gamma$  and mobility ratio  $\mu$  compared to the theoretical diagram shown in Fig. 2: (a) 2D and (b) 3D simulations. Plots with different colors indicate results for different initial size ratios  $\rho_{\text{ini}} = R_{\text{ini}} / \langle R \rangle_{\text{ini}}$ .

する、異常粒成長の典型的な描像が得られている。

Figure 3 は、計算と平均場理論との比較の例として、粒界エネルギー比  $\Gamma = \gamma / \langle \gamma \rangle$  を 0.75 ~ 2、モビリティ比  $\mu = M / \langle M \rangle$  を 0.75 ~ 4 と変化させ、さまざまな初期粒径比から計算を行い、得られた粒径  $\rho$  の時間変化を理論線図 (Fig. 2) 上にプロットした結果を示す。ここで、異なる色のプロットにより、異なる初期粒径比  $\rho_{\text{ini}} = R_{\text{ini}} / \langle R \rangle_{\text{ini}}$  からスタートした計算結果を区別している。また、プロットの近くに示した矢印は、粒径比  $\rho$  の時間変化の方向 (上矢印: 増大 [ $d\rho/dt > 0$ ], 下矢印: 減少 [ $d\rho/dt < 0$ ]) を示す。Figure 3 より、異常粒成長の発生の有無 ( $d\rho/dt$  の正負) は、ほとんどの結果において平均場理論による予測と一致することがわかる。さらに、異常成長発生時の最終的な粒径比は、同理論の解析解の近傍に収束している。

これらの結果から、マトリクス中の特定粒の異常成

長挙動 (異常成長の発生の有無や最終到達サイズ) は、平均場理論による予測と良好に一致することが示された。以上の内容に加え、より詳細・広範なデータや、計算と理論との若干のずれの原因に関する考察を盛り込んで論文化し、現在、国際誌に投稿中である。

まとめ、今後の課題

フェーズフィールド法と複数 GPU 並列計算を活用した大規模シミュレーションにより、Humphreys の著名な異常粒成長理論の妥当性を初めて定量的に明らかとした。また、この成果を通じて、異常粒成長等の多結晶組織形成における粒界物性 (エネルギー、モビリティ) の重要性が改めて浮き彫りとなった。今後は、分子動力学による原子論的解析と、データ同化をはじめとするデータ科学手法を援用することで、情報が著しく不足している状況にある各種粒界物性値の評価・蓄積の

方法論を確立し、大規模フェーズフィールド計算に立脚した多結晶組織形成予測の更なる高度化を目指す。