

京都大学計算科学ユニット
2012年度第2回研究交流会「工学における計算科学の展開」
開催日程：平成24年6月26日（火）
開催場所：工学部3号館2階N3講義室

Phase-field法による 多様な形態発展シミュレーション

京都工芸繊維大学 大学院工芸科学研究科
機械システム工学部門

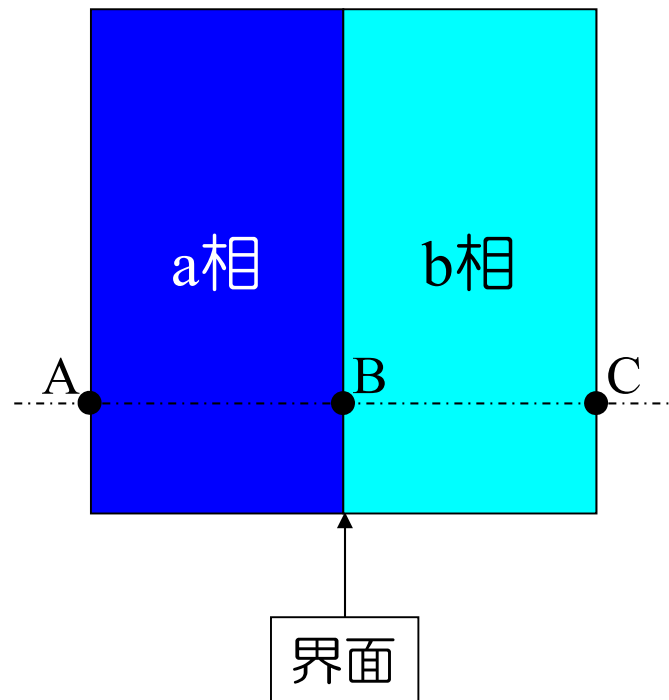
高木 知弘

発表内容

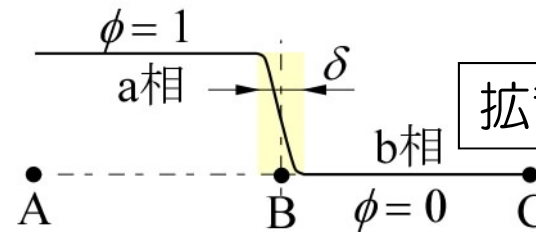
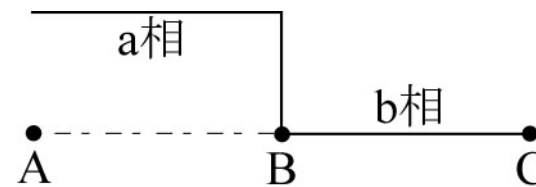
1. Phase-field法の基本モデル
2. 多様なphase-fieldシミュレーション
 - ・凝固・再結晶・固相変態・その他応用
3. スパコンTSUBAME2.0による大規模凝固計算

Phaes-field法の基本モデル

Phase-field変数



従来の考え方



拡散界面モデル

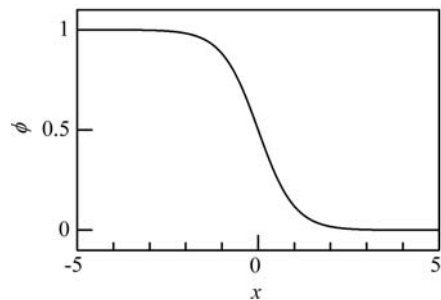
Phase-field法の考え方

ϕ : phase-field変数

$$\begin{cases} \phi = 1 : \text{a相}, & \phi = 0 : \text{b相} \\ \phi = 0 : \text{a相}, & \phi = 1 : \text{b相} \\ \phi = +1 : \text{a相}, & \phi = -1 : \text{b相} \end{cases}$$

界面移動のメカニズム

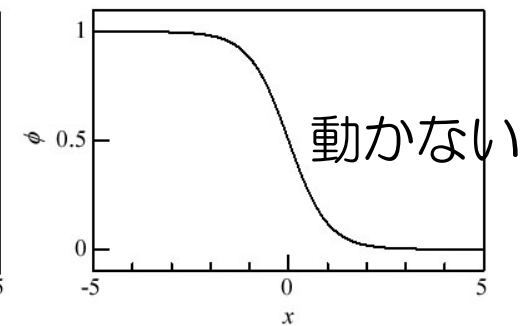
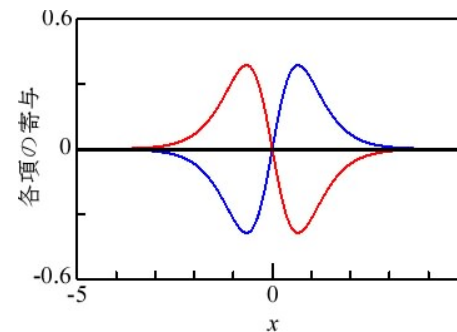
$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla^2 \phi + 8\phi(1-\phi)(\phi - 0.5 + \beta)$$



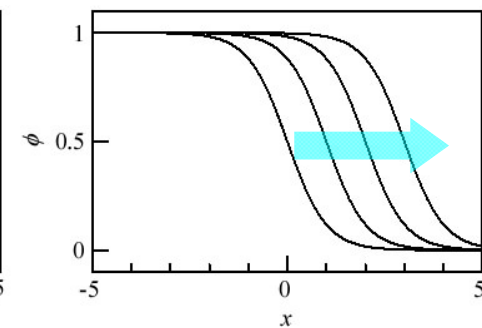
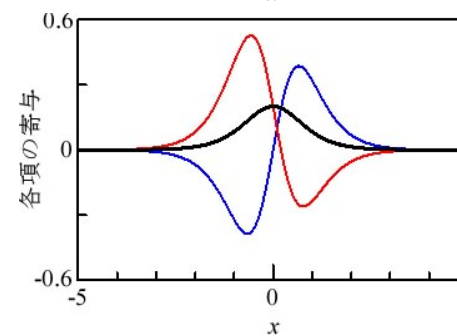
$$\phi = \frac{1}{2} \{1 - \tanh x\}$$

$\partial \phi / \partial t = 0$ の微分方程式を解くことで出すことができる。

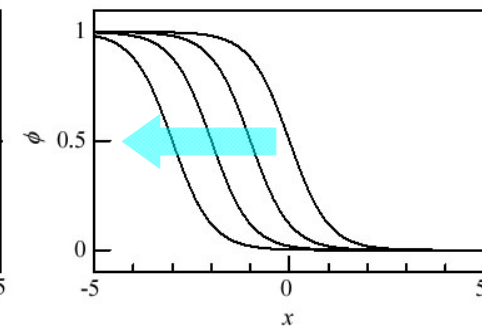
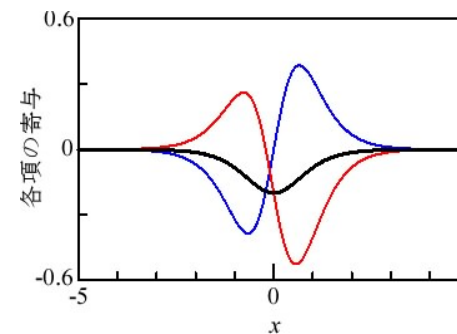
$\beta = 0.0$



$\beta = 0.1$



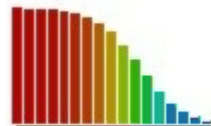
$\beta = -0.1$



界面移動のメカニズム(cont.)

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \underbrace{\nabla^2 \phi}_{\text{拡散項}} + \underbrace{8\phi(1-\phi)(\phi-0.5+\beta)}_{\text{反応項}}$$

フェーズフィールド法による界面移動は
拡散項による分布を滑らかにしようとする作用と
反応項による分布を急峻にしようとする作用の
バランスで決定される。



※どんなに複雑なモデルでも基本はこれ！！！！



自由エネルギー汎関数

$$F = \int f dV$$

自由エネルギー密度

$$f = f_{chem} + f_{doub} + f_{grad} + \dots$$

化学的自由エネルギー密度

勾配エネルギー密度

ダブルウェルポテンシャル

化学的自由エネルギー密度

$$f_{chem} = p(\phi) f_a + (1 - p(\phi)) f_b$$

a相 : $\phi = 1$

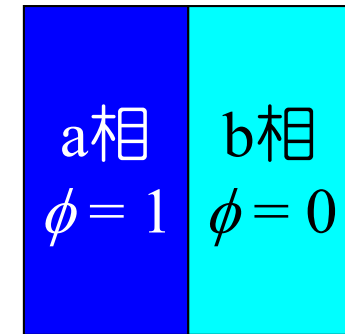
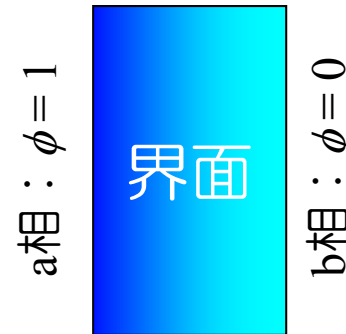
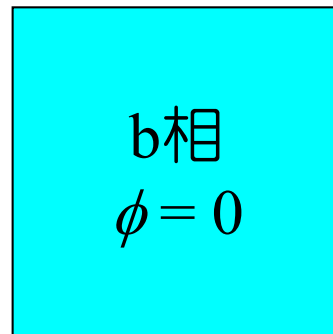
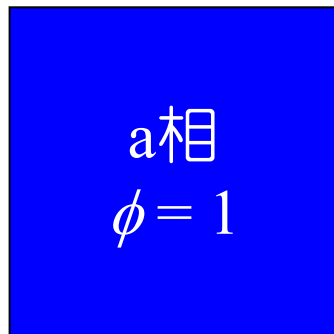
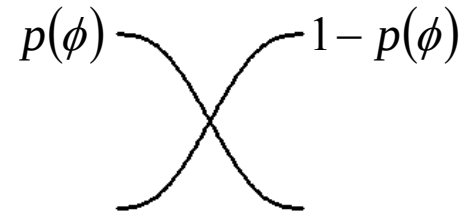
$$p(1) = 1$$

$$f_{chem} = f_a$$

b相 : $\phi = 0$

$$p(0) = 0$$

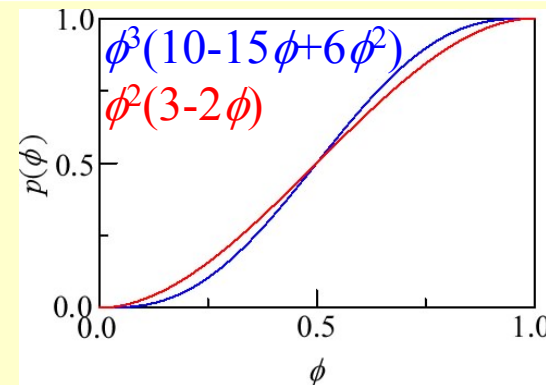
$$f_{chem} = f_b$$



$p(\phi)$: エネルギー密度分布関数

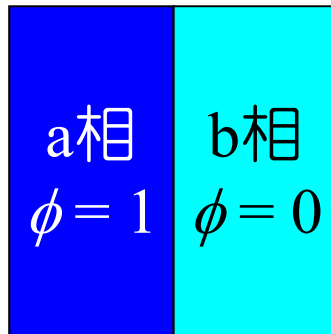
$$\left. \begin{aligned} p(\phi) &= \phi^3 (10 - 15\phi + 6\phi^2) \\ p(\phi) &= \phi^2 (3 - 2\phi) \end{aligned} \right\} \text{が多く用いられる.}$$

$$p(0) = 0, p(1) = 1, \left. \frac{\partial p}{\partial \phi} \right|_{\phi=0} = \left. \frac{\partial p}{\partial \phi} \right|_{\phi=1} = 0$$

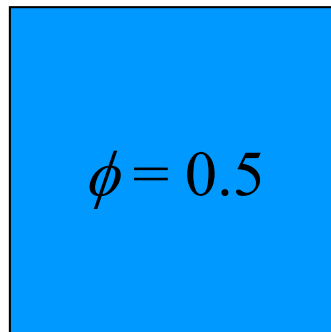


ダブルウェルポテンシャル

平衡状態 ($f_a = f_b$)



$$f_{chem} = p(\phi)f_a + (1 - p(\phi))f_b$$

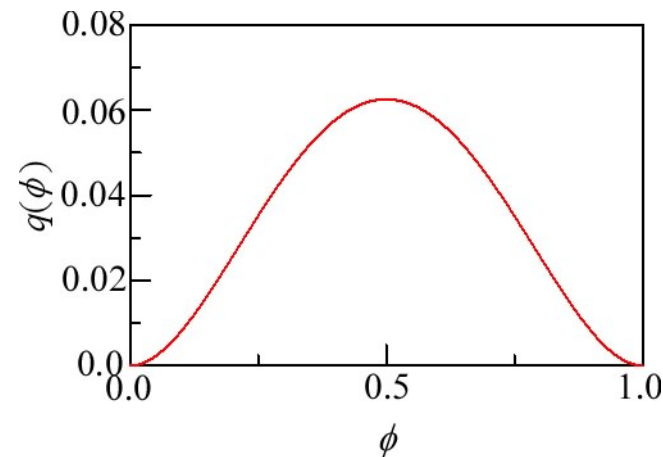


化学的エネルギーは同じ

$$f_{doub} = Wq(\phi)$$

$q(\phi)$: ダブルウェル関数 : $q(\phi) = \phi^2(1 - \phi)^2$

W : エネルギー障壁

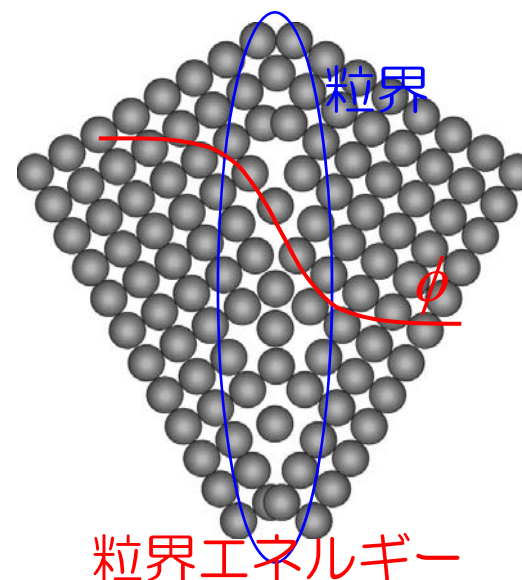
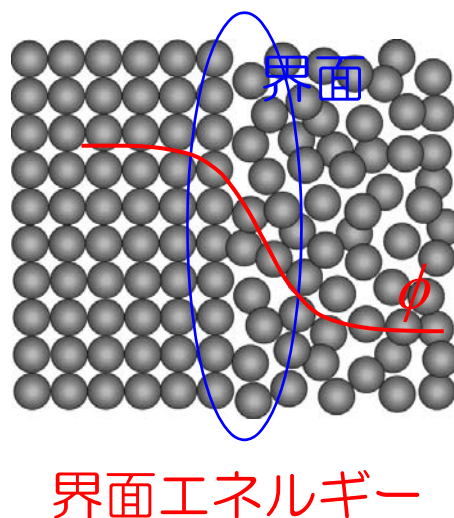
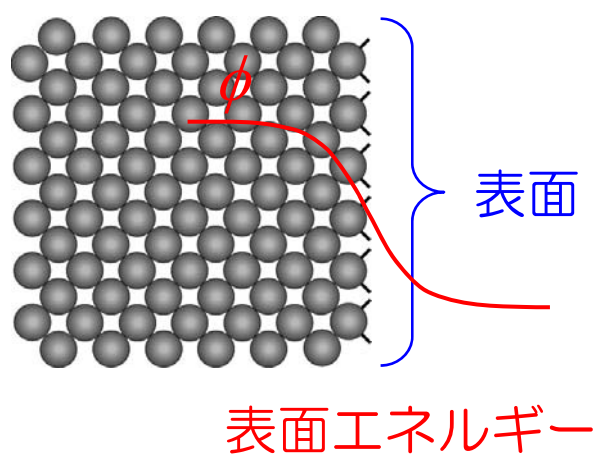


$$q(0) = q(1) = 0, \quad \left. \frac{\partial q}{\partial \phi} \right|_{\phi=0} = \left. \frac{\partial q}{\partial \phi} \right|_{\phi=1} = 0$$

勾配エネルギー密度

$$f_{grad} = \frac{a^2}{2} |\nabla \phi|^2$$

a : 勾配係数



自由エネルギー汎関数（まとめ）

$$F = \int f dV$$

自由エネルギー密度 $f = f_{chem} + f_{doub} + f_{grad} + \dots$

化学的自由エネルギー密度

$$f_{chem} = p(\phi)f_a + (1 - p(\phi))f_b$$

$p(\phi)$: エネルギー密度分布関数

$$\begin{cases} p(\phi) = \phi^2(3 - 2\phi) \\ p(\phi) = \phi^3(10 - 15\phi + 6\phi^2) \end{cases}$$

ダブルウェルポテンシャル

$$f_{doub} = Wq(\phi)$$

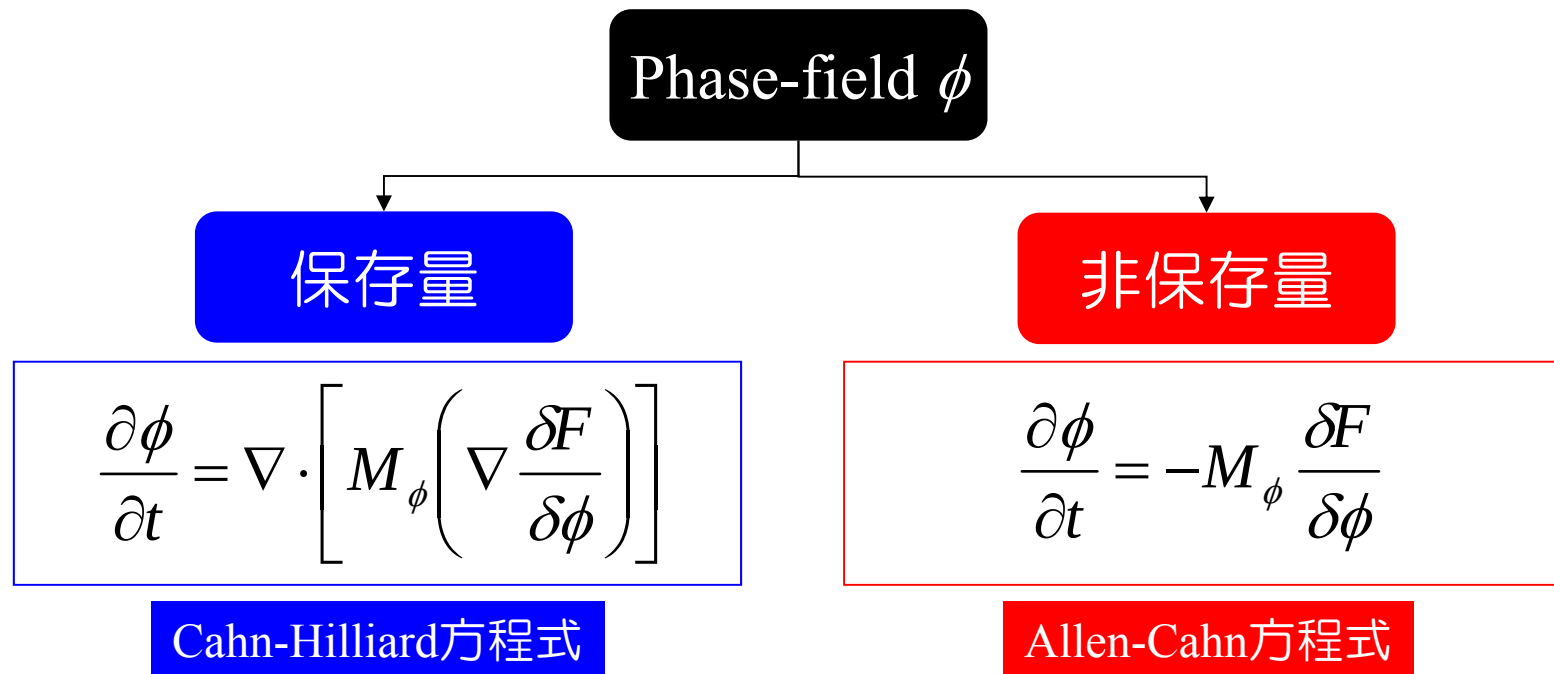
$q(\phi)$: ダブルウェル関数 $q(\phi) = \phi^2(1 - \phi)^2$
 W : エネルギー障壁

勾配エネルギー密度

$$f_{grad} = \frac{a^2}{2} |\nabla \phi|^2$$

a : 勾配係数

時間発展方程式



M_{ϕ} : Phase-fieldモビリティ

最も簡単なphase-field方程式

汎関数微分

$$\frac{\delta F}{\delta \phi} = -a^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - 4W\phi(1-\phi) \left(\phi - \frac{1}{2} - \frac{3}{2W}(f_a - f_b) \right)$$

をAllen-Cahn方程式

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M_\phi \frac{\delta F}{\delta \phi}$$

に代入すると、次式の発展方程式を得る.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M_\phi \left[a^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + 4W\phi(1-\phi) \left(\phi - \frac{1}{2} + \beta \right) \right]$$

$$\beta = -\frac{3}{2W}(f_a - f_b) = -\frac{3}{2W}\Delta f$$



係数と物性値の関係付け

界面幅

$$\delta = \frac{\sqrt{2}a}{\sqrt{W}}b$$

界面エネルギー

$$\gamma = \frac{a\sqrt{W}}{3\sqrt{2}}$$

界面モビリティ

$$M = \frac{6a}{\sqrt{2W}}M_{\phi}$$

$$b = 2 \tanh^{-1}(1 - 2\lambda) \\ (\lambda \approx 0.1)$$

勾配係数

$$a = \sqrt{\frac{3\delta\gamma}{b}}$$

エネルギー障壁

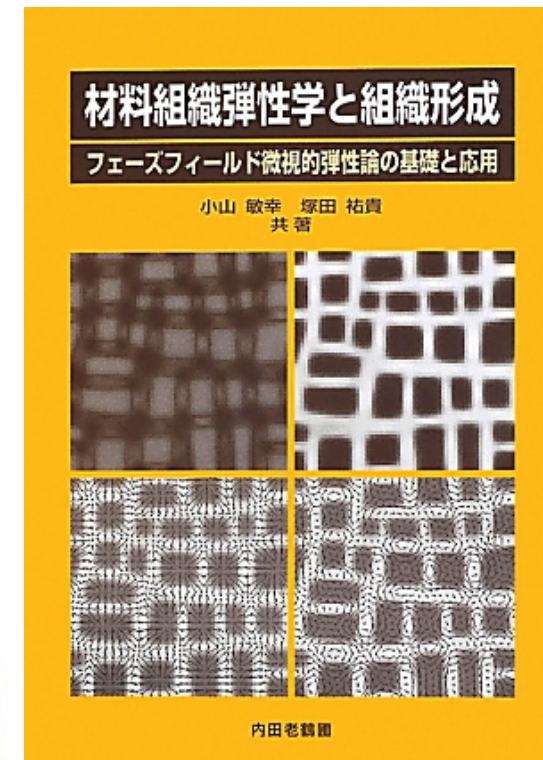
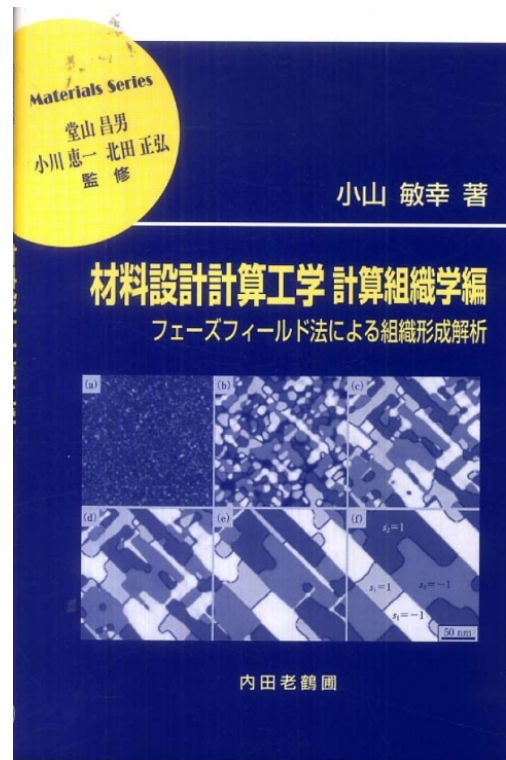
$$W = \frac{6\gamma b}{\delta}$$

フェーズフィールドモビリティ

$$M_{\phi} = \frac{\sqrt{2W}}{6a}M = \frac{b}{3\delta}M$$



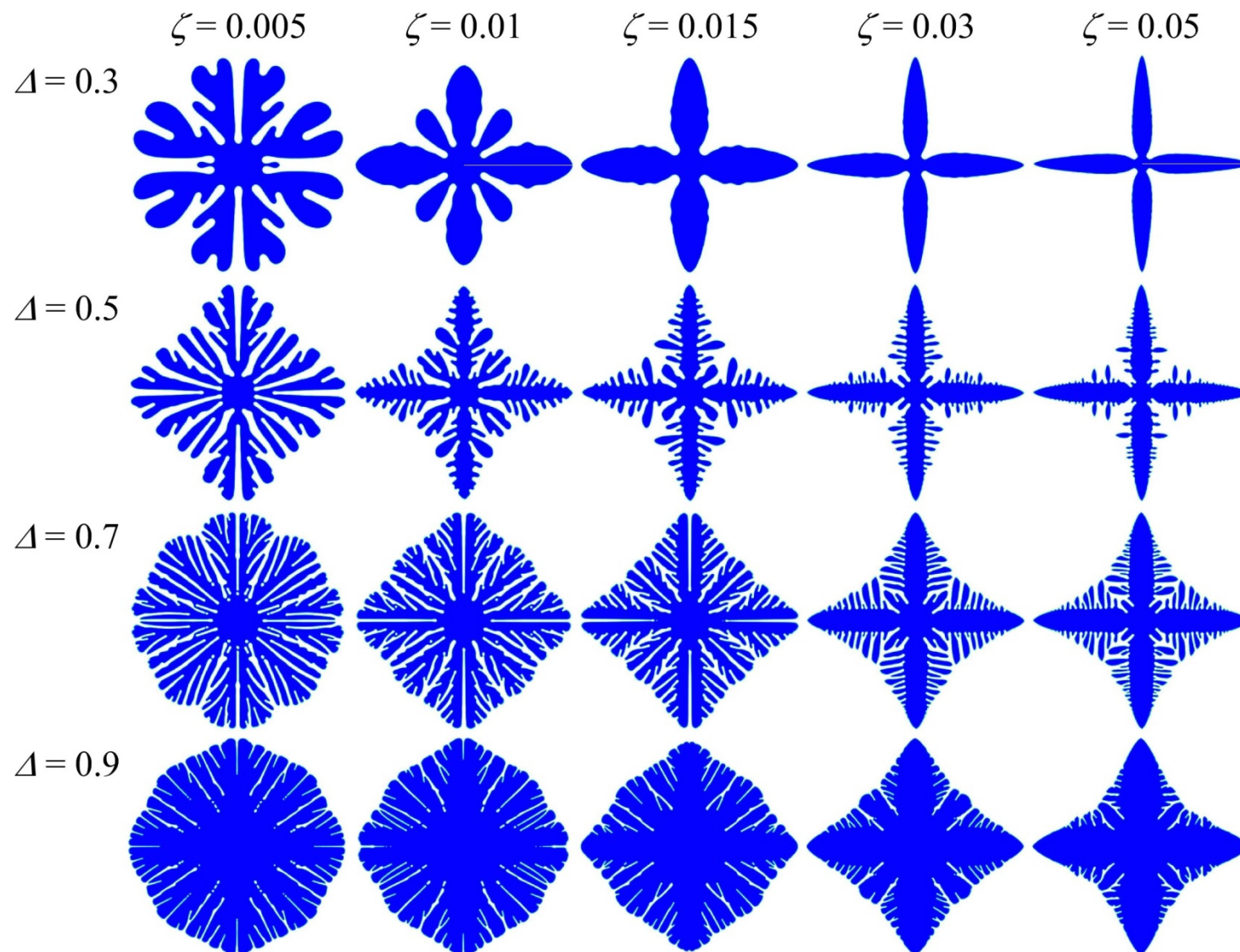
Phase-field法関連の書籍



多様なphase-fieldシミュレーション

- デンドライト凝固成長
- 粒成長問題
- マルテンサイト変態
- 量子ドットの自己組織化成長
- Phase-field crystal法
- Phase-field crackモデル
- Phase-fieldトポロジー最適化モデル

デンドライト成長シミュレーション



純物質の凝固phase-fieldモデル

Phase-field方程式

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M_{\phi} \left[a^2 \nabla^2 \phi + 4W\phi(1-\phi) \left(\phi - \frac{1}{2} + \beta \right) \right]$$

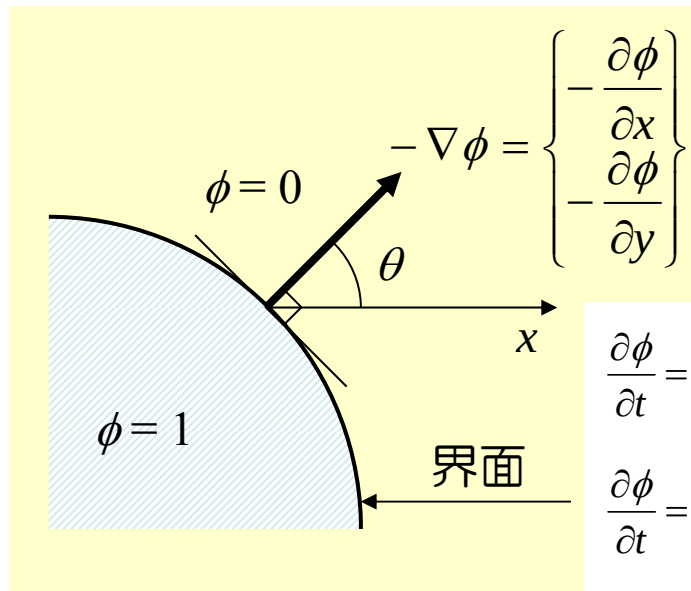
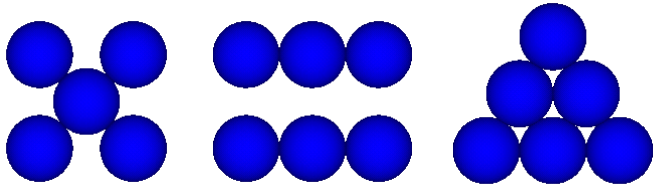
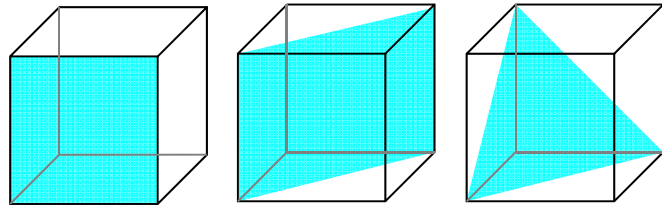
$$\beta = -\frac{3}{2W} (f_S - f_L) = \frac{3}{2W} \Delta f$$

$$\Delta f = -(f_S - f_L) = -\frac{L(T - T_m)}{T_m}$$

熱伝導方程式

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T + \frac{L}{c} \frac{\partial p(\phi)}{\partial t}$$

デンドライトを表現するためには 界面の異方向性が必要



$$F = \int \left[f_{chem} + f_{doub} + \frac{a^2}{2} |\nabla \phi|^2 \right] dV$$

界面エネルギー

$$a(\theta) = \bar{a} [1 + \zeta \cos(k\theta)]$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta F}{\delta \phi} &= \frac{\partial f}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial \phi_{,x}} - \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial f}{\partial \phi_{,y}} \\ &= \frac{\partial f}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial x} \left(a^2 \frac{\partial \phi}{\partial x} + a \frac{\partial a}{\partial \phi_{,x}} |\nabla \phi|^2 \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(a^2 \frac{\partial \phi}{\partial y} + a \frac{\partial a}{\partial \phi_{,y}} |\nabla \phi|^2 \right) \\ &= \frac{\partial f}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial x} \left(a^2 \frac{\partial \phi}{\partial x} + a \frac{\partial a}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial \phi_{,x}} |\nabla \phi|^2 \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(a^2 \frac{\partial \phi}{\partial y} + a \frac{\partial a}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial \phi_{,y}} |\nabla \phi|^2 \right) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M_\phi \left[-\frac{\partial}{\partial x} \left(a \frac{\partial a}{\partial \theta} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(a \frac{\partial a}{\partial \theta} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + a^2 \nabla^2 \phi - \frac{\partial f_{chem}}{\partial \phi} - \frac{\partial f_{doub}}{\partial \phi} \right]$$

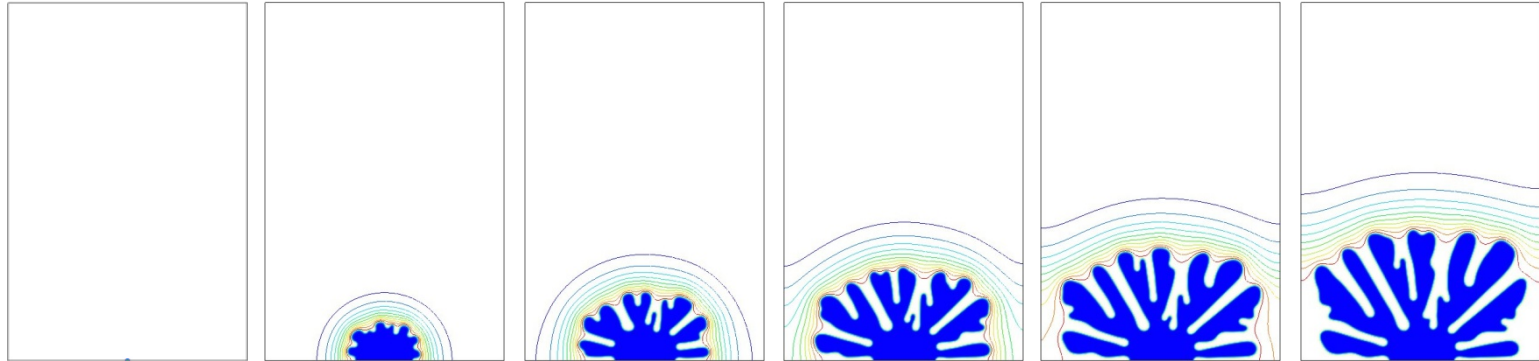
$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M_\phi \left[-\frac{\partial}{\partial x} \left(a \frac{\partial a}{\partial \theta} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(a \frac{\partial a}{\partial \theta} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + a^2 \nabla^2 \phi + 4W\phi(1-\phi) \left(\phi - \frac{1}{2} + \beta + \chi \right) \right]$$

※2次アームを出すためにノイズ項が必要

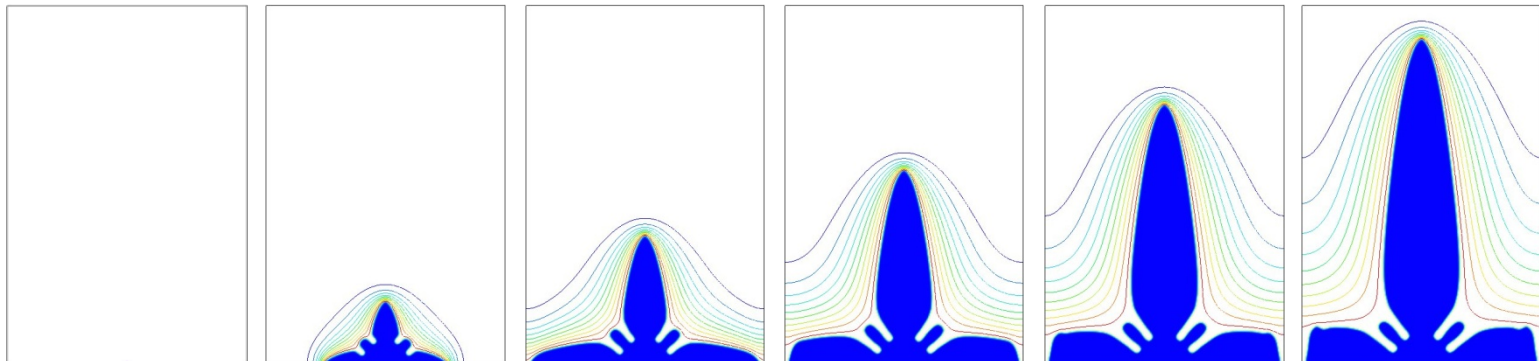


界面異方性とノイズの影響

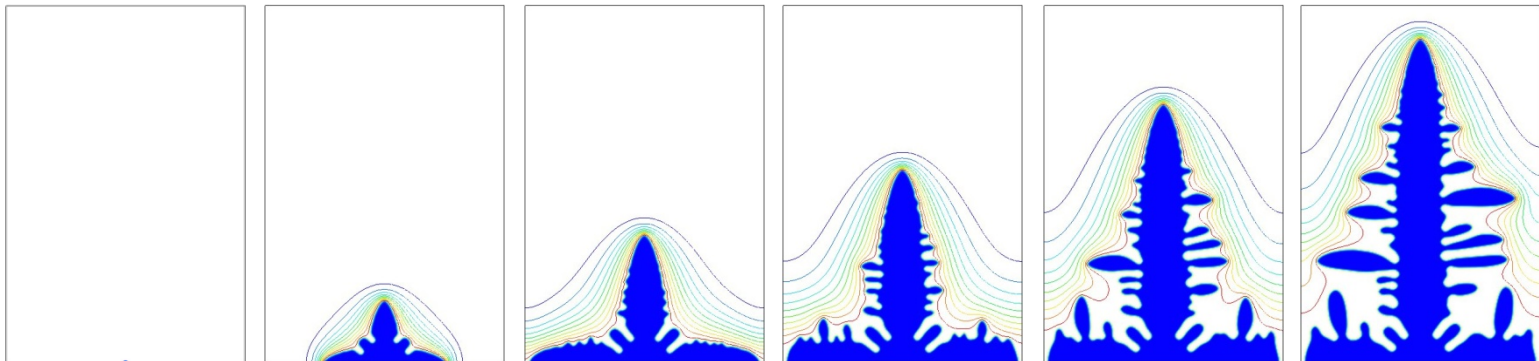
等方性



異方性

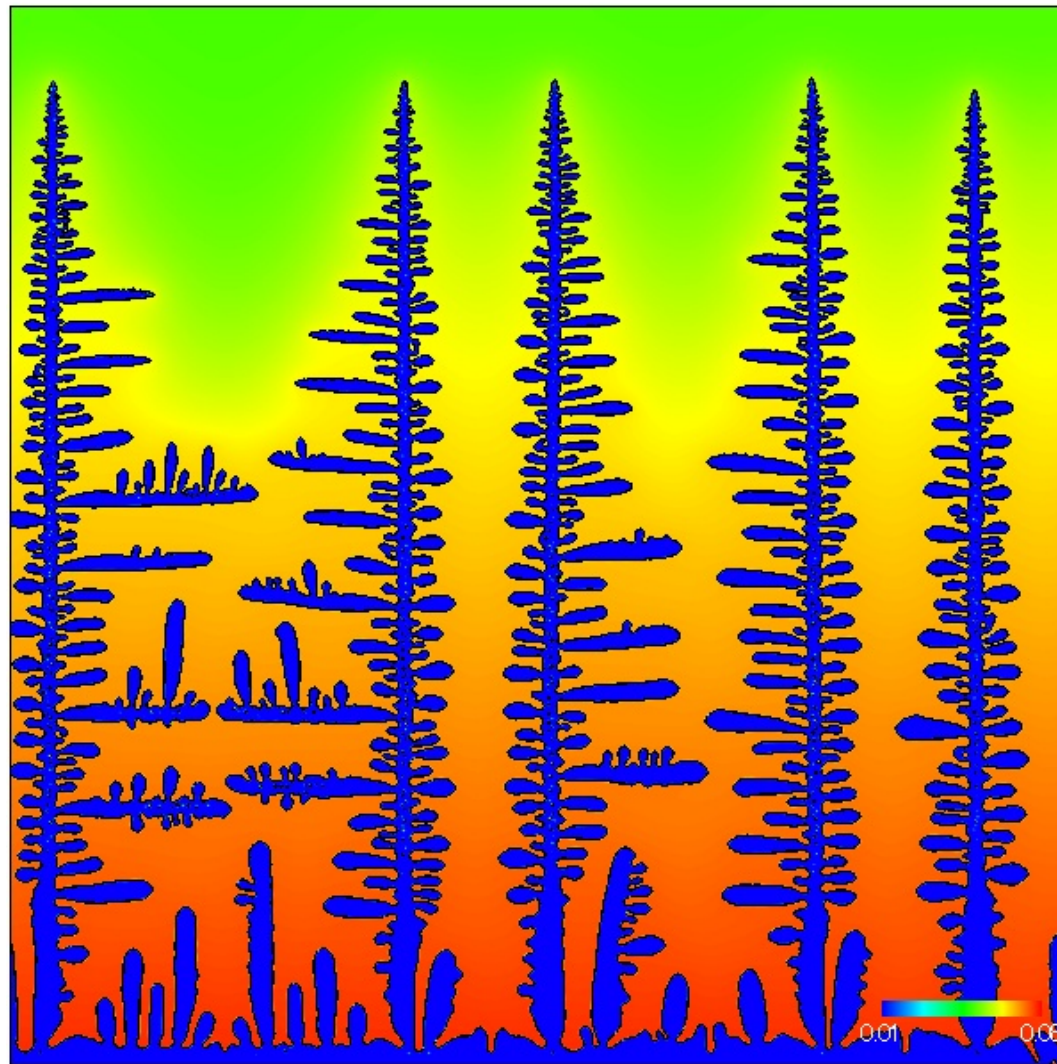


異方性
+
ノイズ

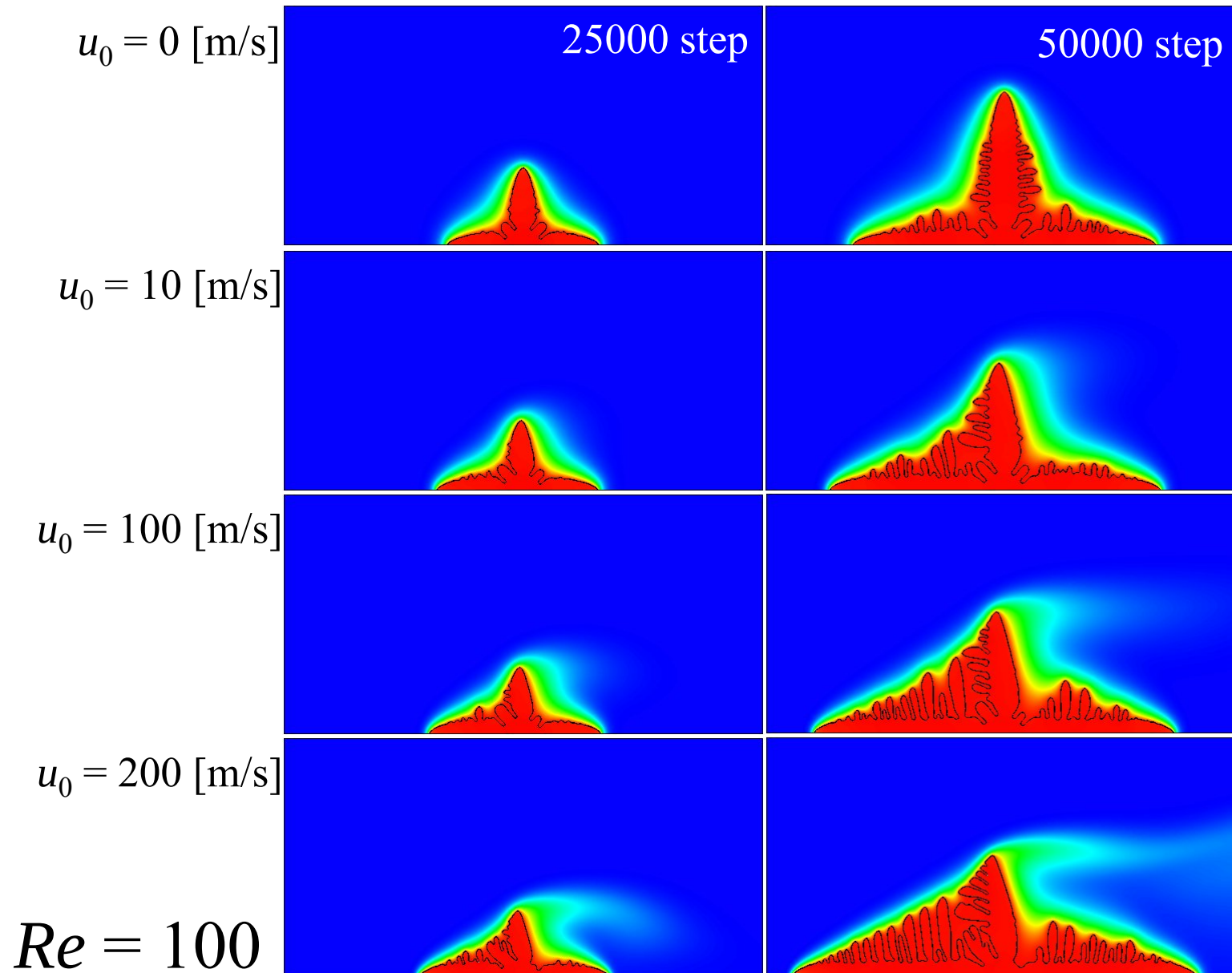


一方向凝固計算によるデンドライト成長

GPU計算
5120×5120
4,000,000 step

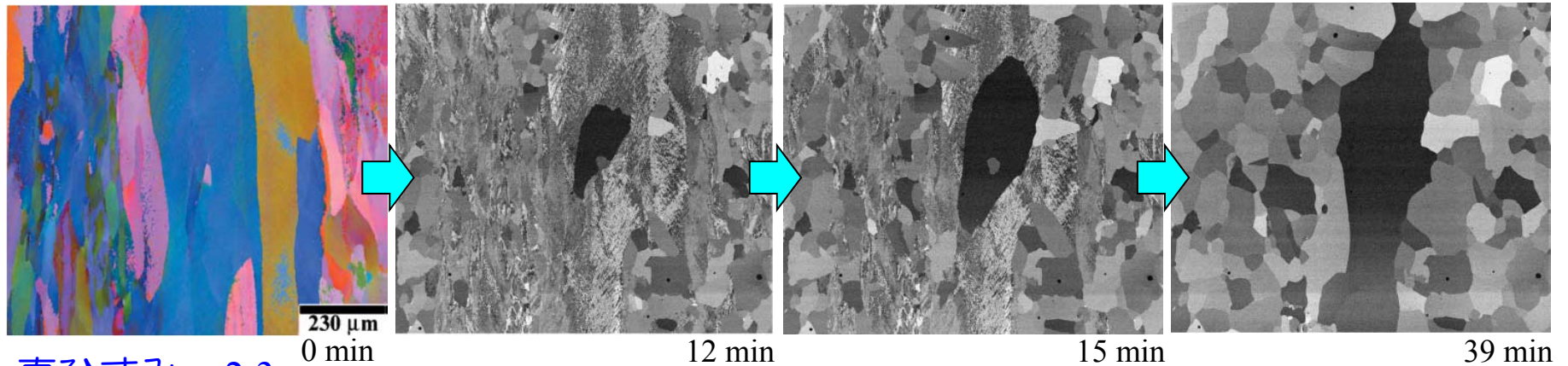


対流内でのデンドライト成長計算

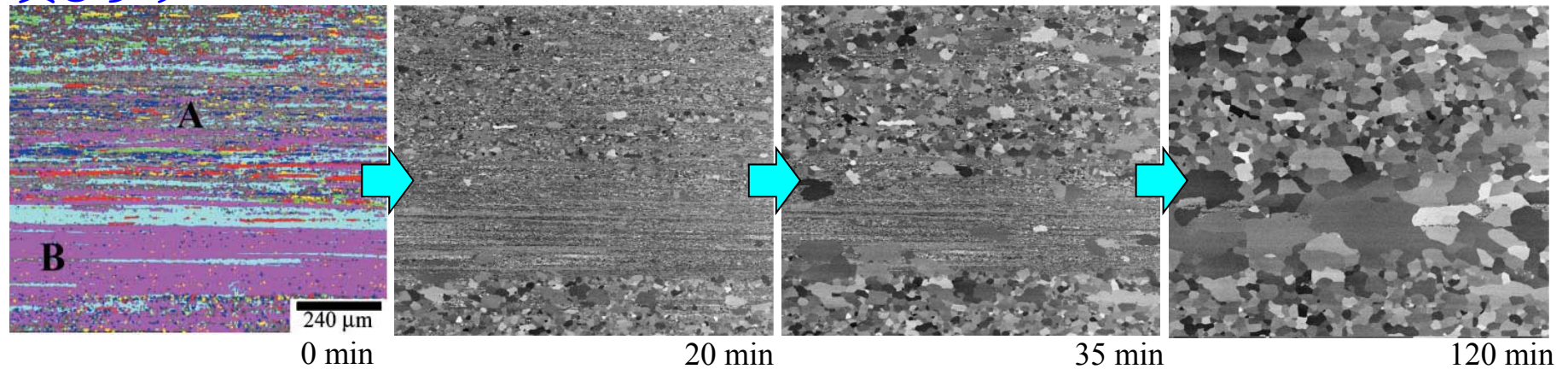


静的再結晶

真ひずみ = 0.7



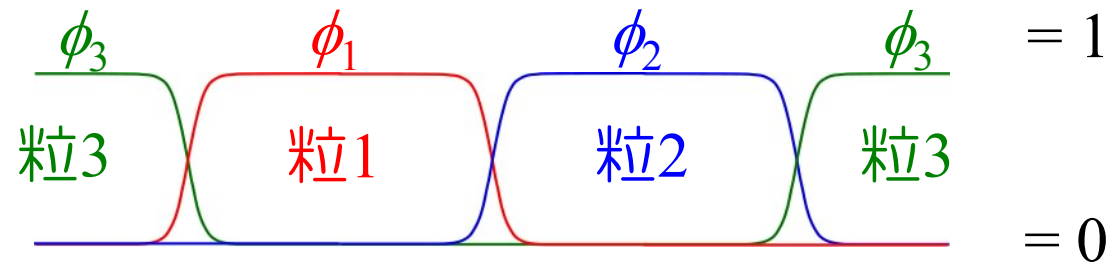
真ひずみ = 2.3



Al-0.13wt%Mg
冷間圧延
290°C annealing

P. J. Hurley and F. J. Humphreys
Journal of Microscopy, 213, (2004), 225-234.

Multi-phase-field法

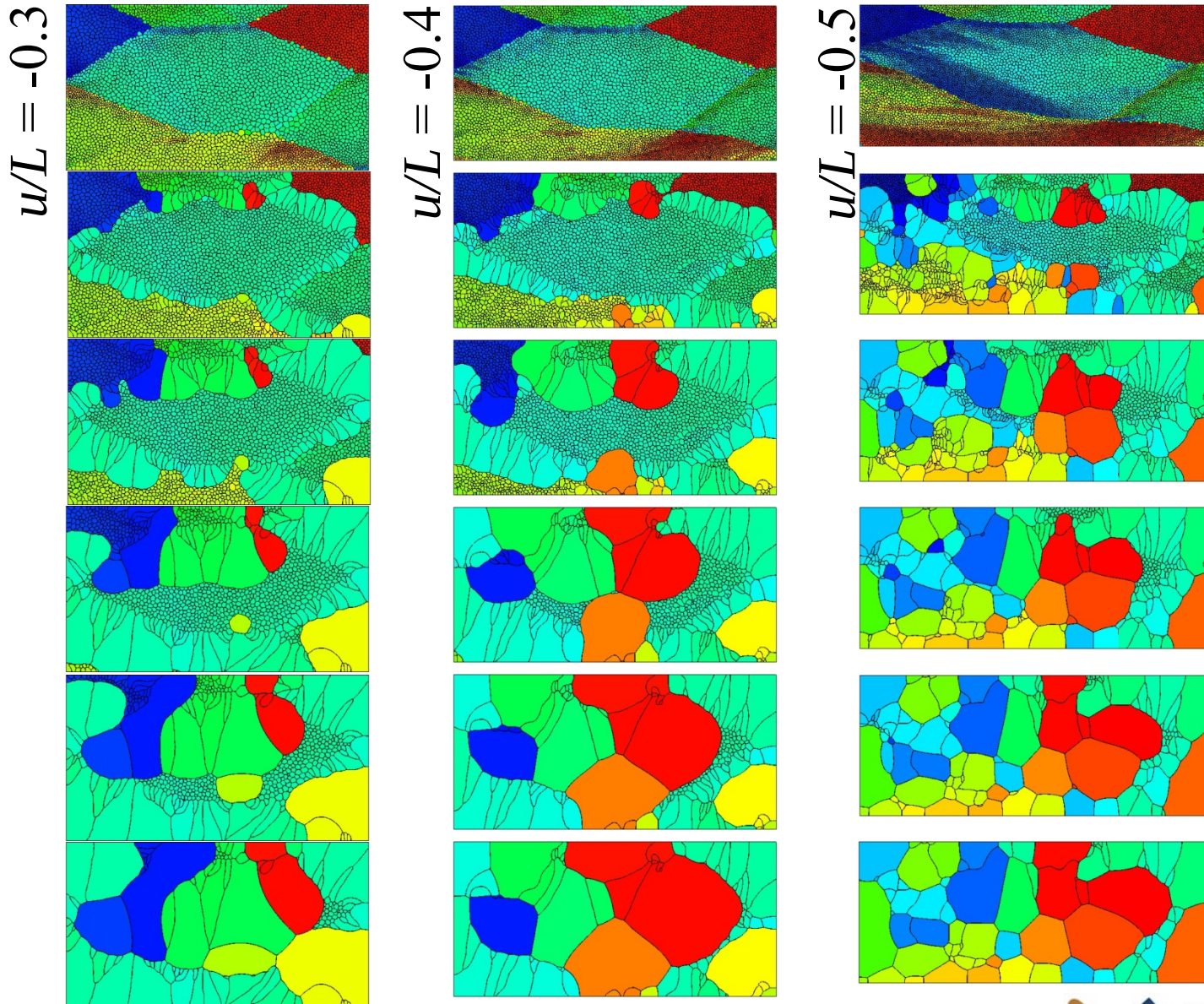


$$\phi_{\alpha} = \begin{cases} 1 & \cdots \text{粒}\alpha\text{内} \\ 0 & \cdots \text{その他の粒内} \end{cases} \quad \sum_{\alpha=1}^N \phi_{\alpha} = 1$$

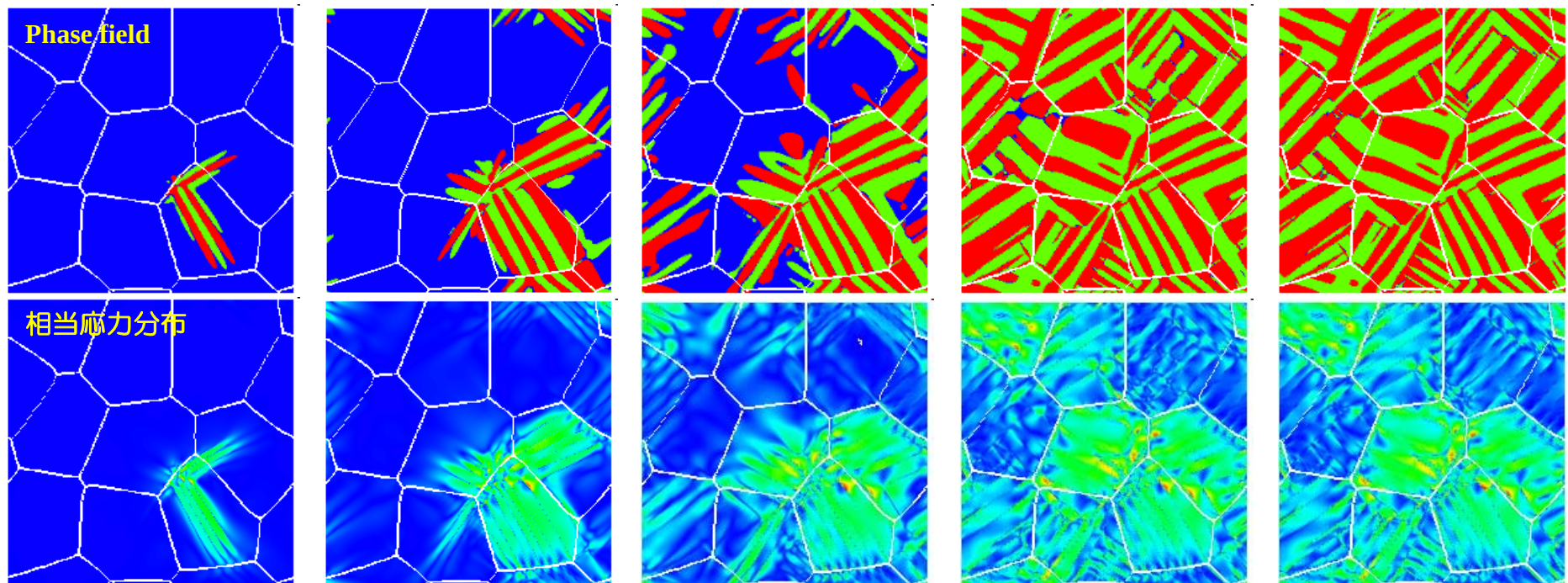
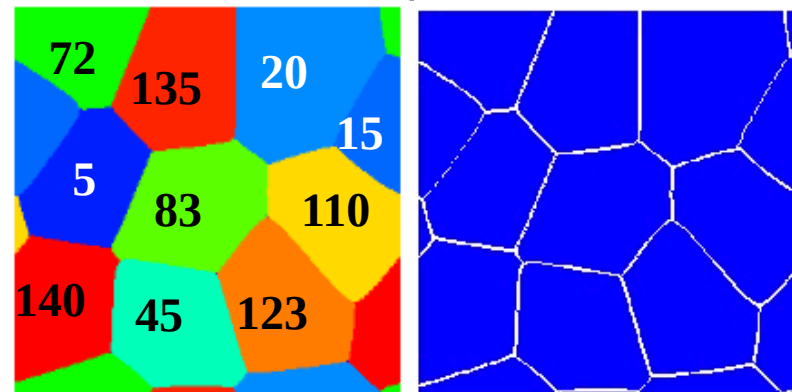
$$\dot{\phi}_i = - \sum_{j=1}^n \frac{2M_{ij}^{\phi}}{n} \left[\sum_{k=1}^n \left\{ (W_{ik} - W_{jk}) \phi_k + \frac{1}{2} (a_{ik}^2 - a_{jk}^2) \nabla^2 \phi_k \right\} - \frac{8}{\pi} \sqrt{\phi_i \phi_j} \Delta f_{ij} \right]$$

I. Steinbach, F. Pezzolla, Physica D, 134, (1999), 385-393.

変形組織に依存した再結晶粒成長



多結晶体内におけるマルテンサイト変態

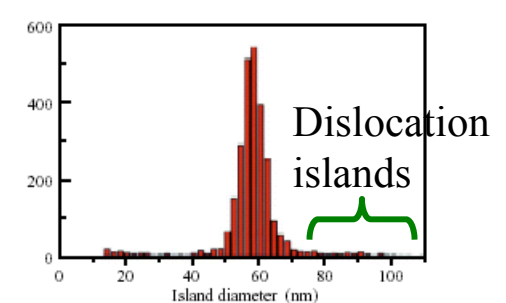
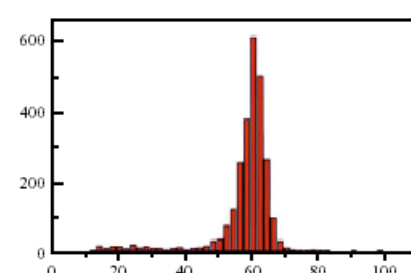
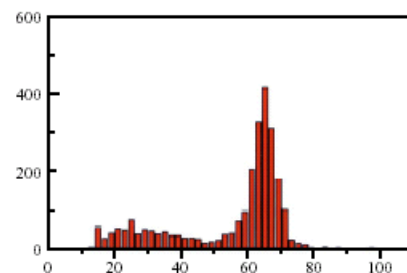
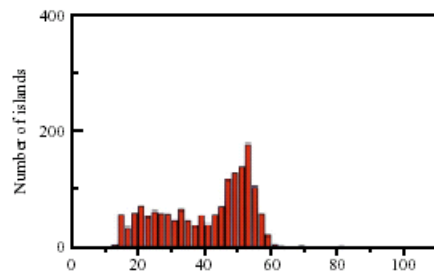
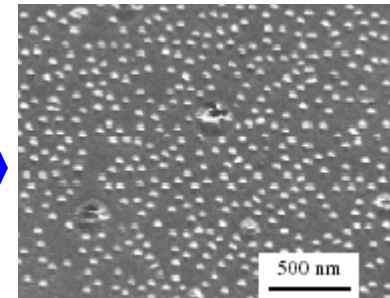
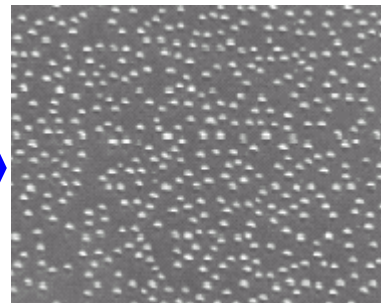
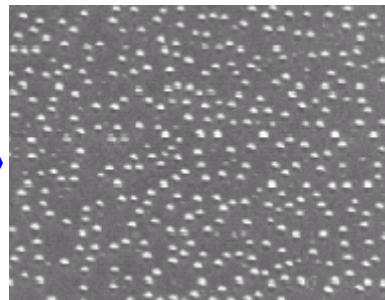
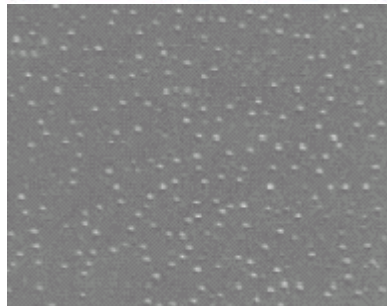
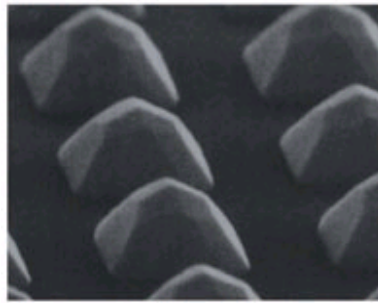


A. Yamanaka, T. Takaki, Y. Tomita, International Journal of Mechanical Sciences, Vol.52, 2010/02, 245-250.

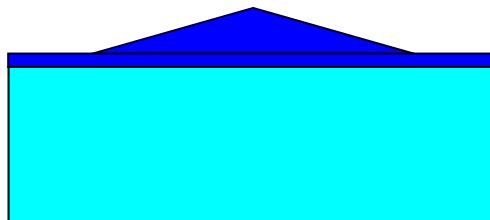


京都工芸繊維大学
KYOTO INSTITUTE OF TECHNOLOGY

量子ドットの形態変化



ピラミッド形態

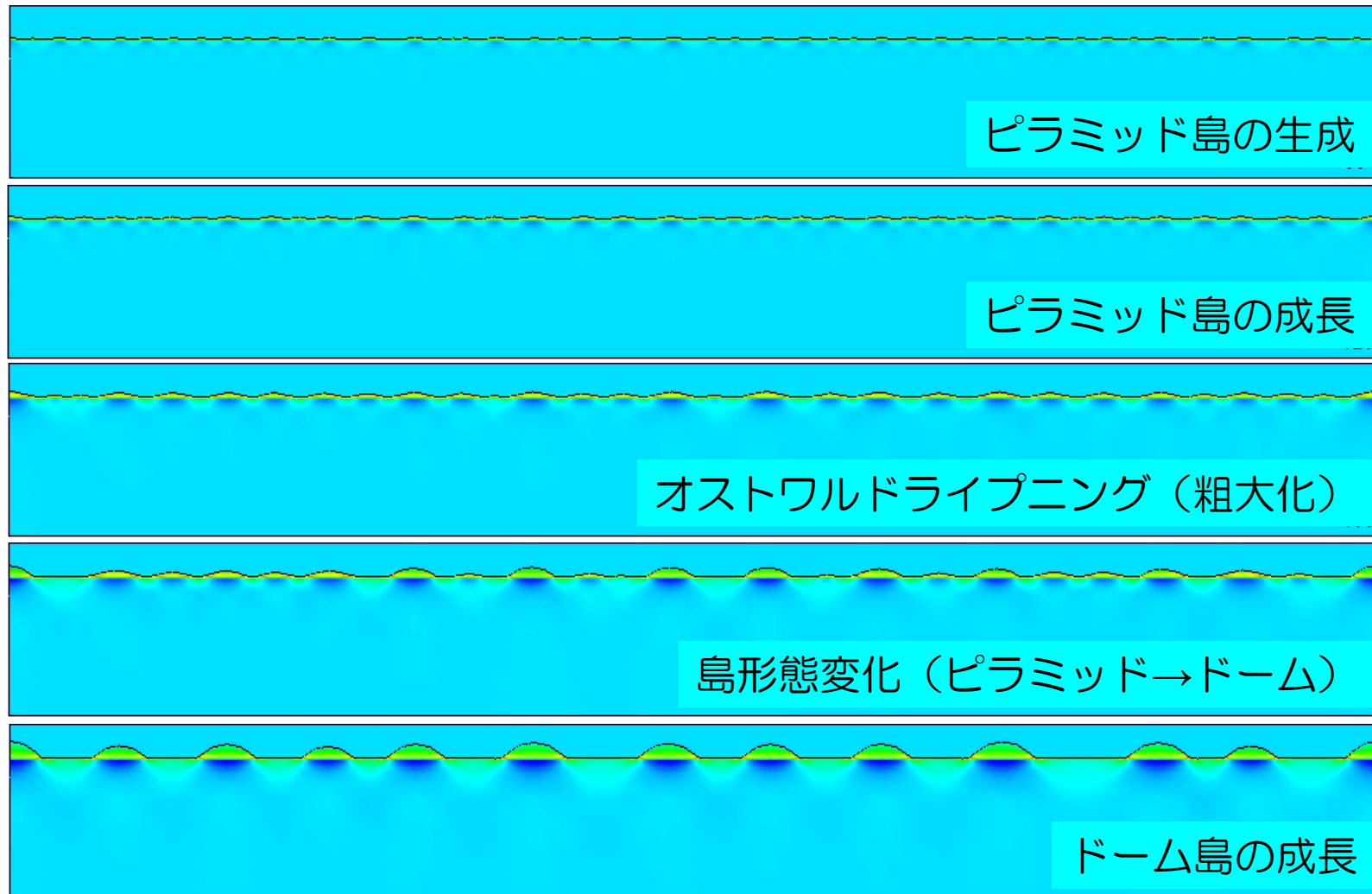


ドーム
形態



F. M. Ross, et. al.
Phy. Rev. Lett., 80, 1998

ドット成長過程の時間変化

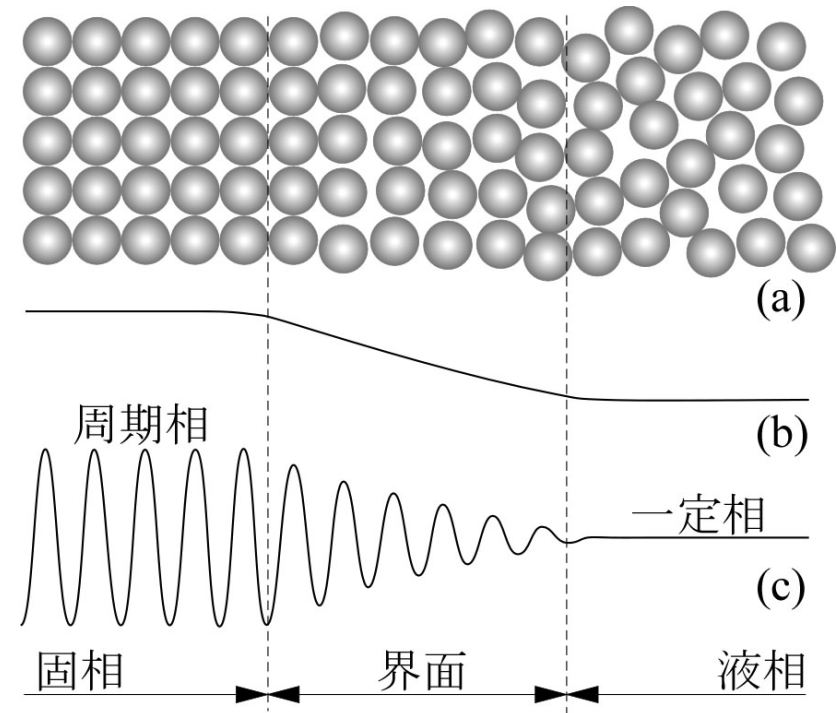
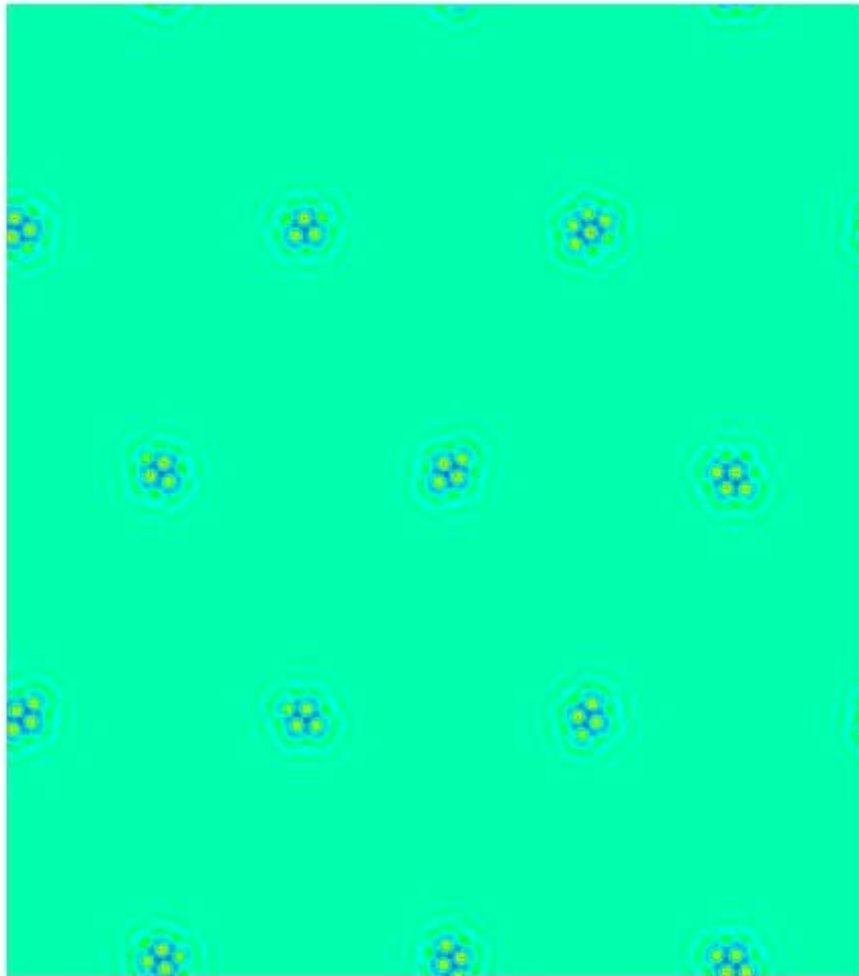


T. Takaki, T. Hasebe, Y. Tomita, Journal of Crystal Growth, Vol.287, 2006/1, 495-499.

T. Takaki, T. Hirouchi, Y. Tomita, Journal of Crystal Growth, Vol.310, 2008/4, 2248-2253.

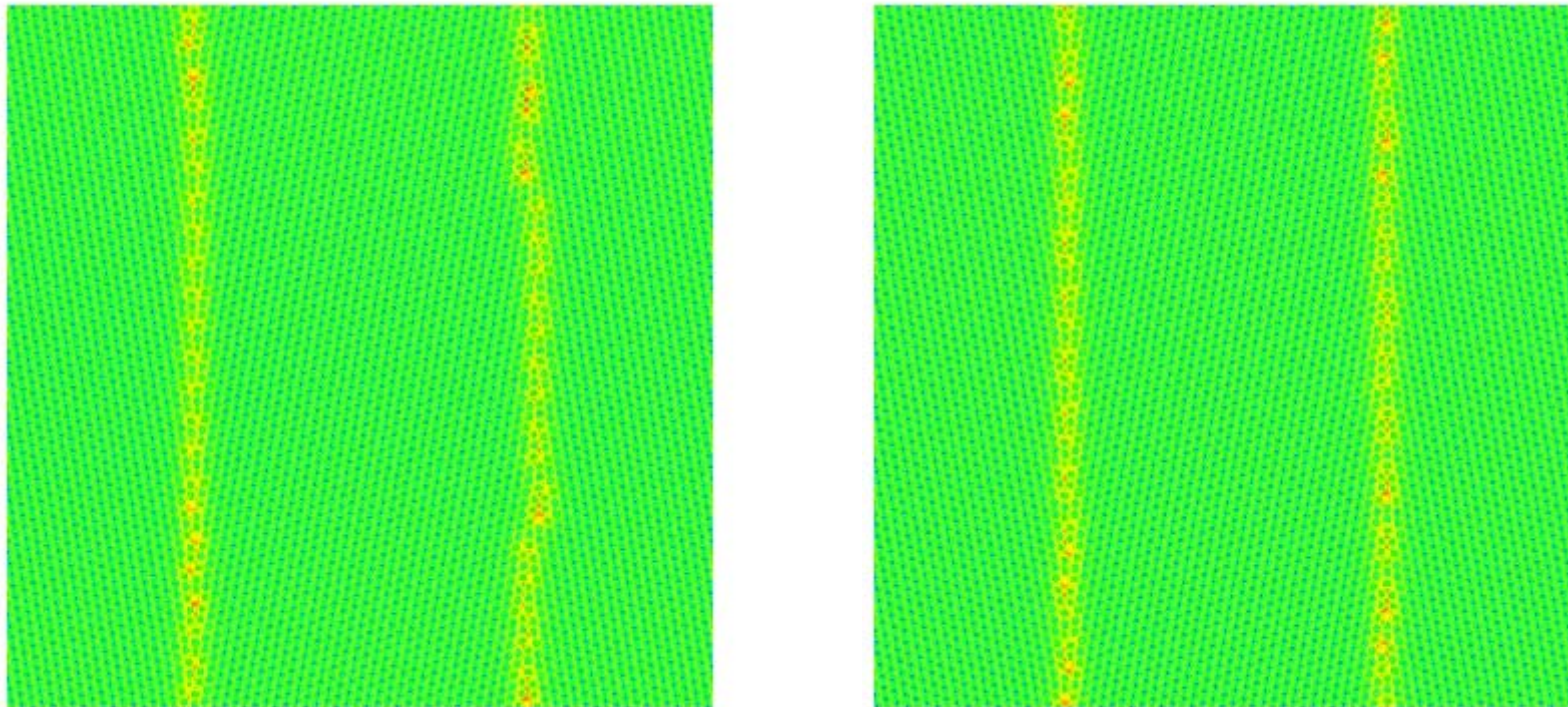
Phase-field crystal法

凝固シミュレーション



Phase-field crystal法

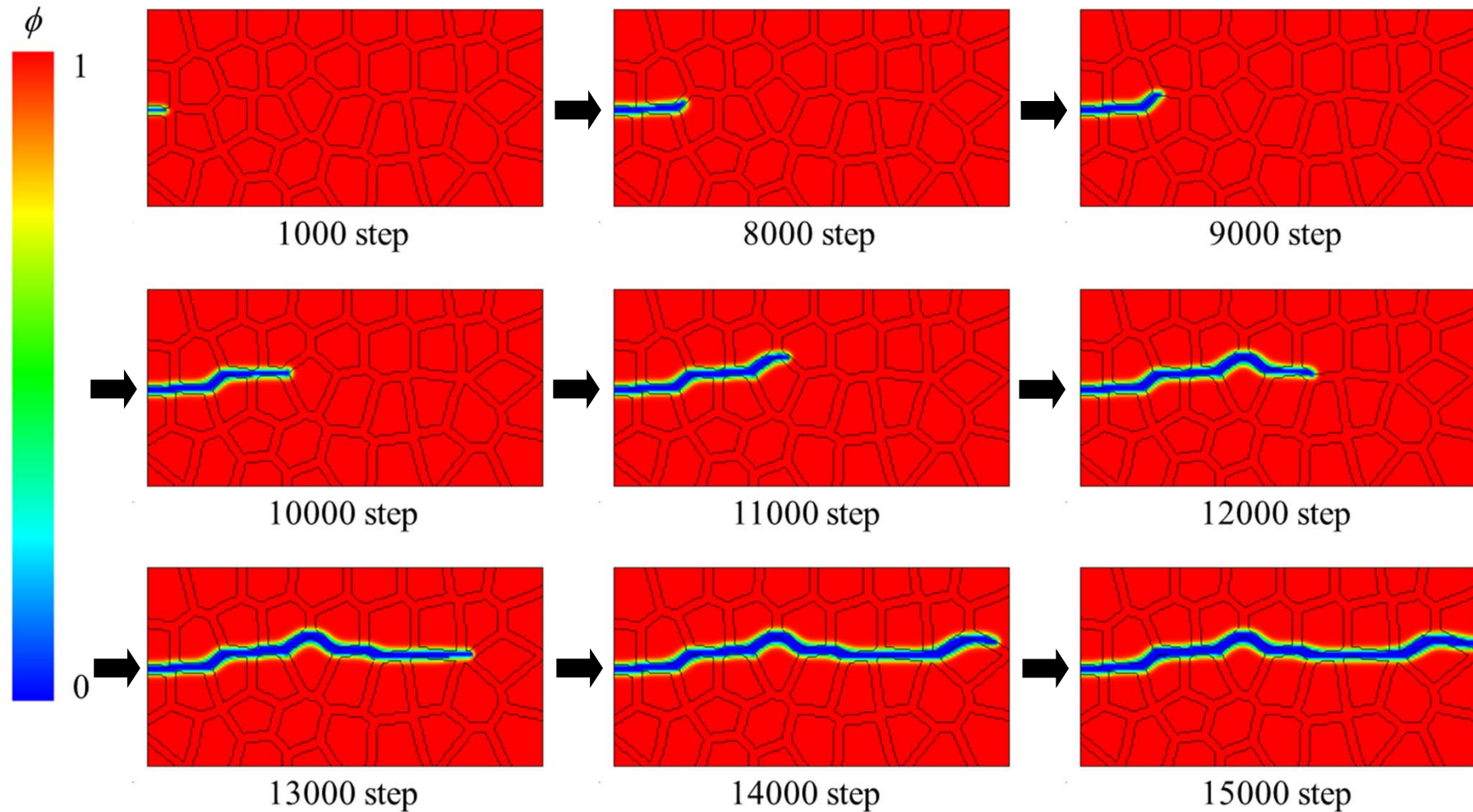
2結晶体の変形シミュレーション



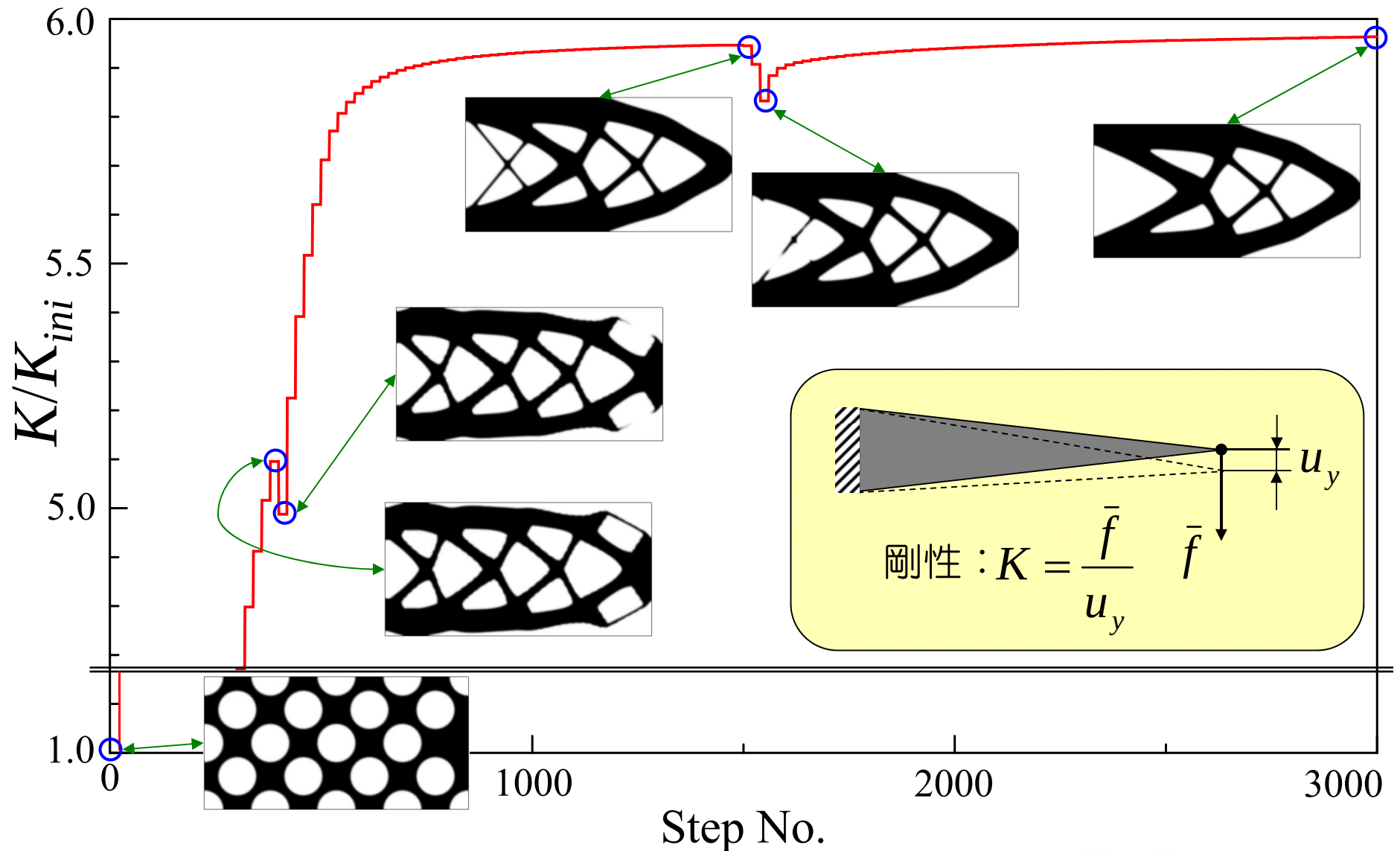
T. Hirouchi, T. Takaki, Y. Tomita, International Journal of Mechanical Sciences, Vol.52, 2010/02, 309-319.

T. Hirouchi, T. Takaki, Y. Tomita, Computational Materials Science, Vol.44, 2009/2, 1192-1197.

Phase-field crackモデルによる多結晶体内の き裂伝播シミュレーション



Phase-fieldトポロジー最適化法





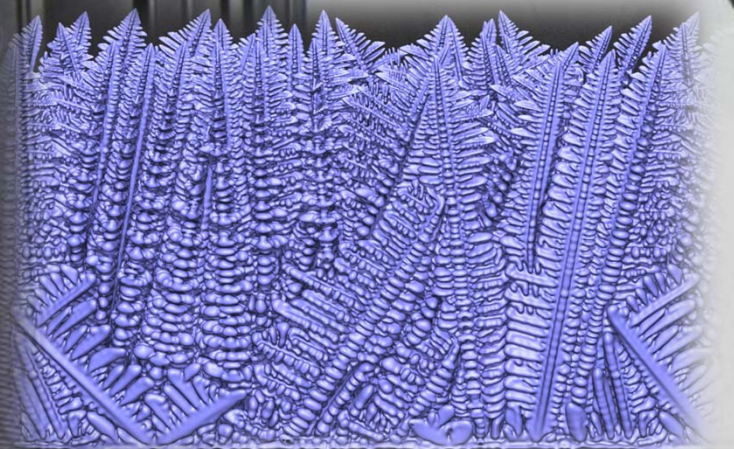
スパコンTSUBAME2.0による 超大規模凝固計算

共同研究者

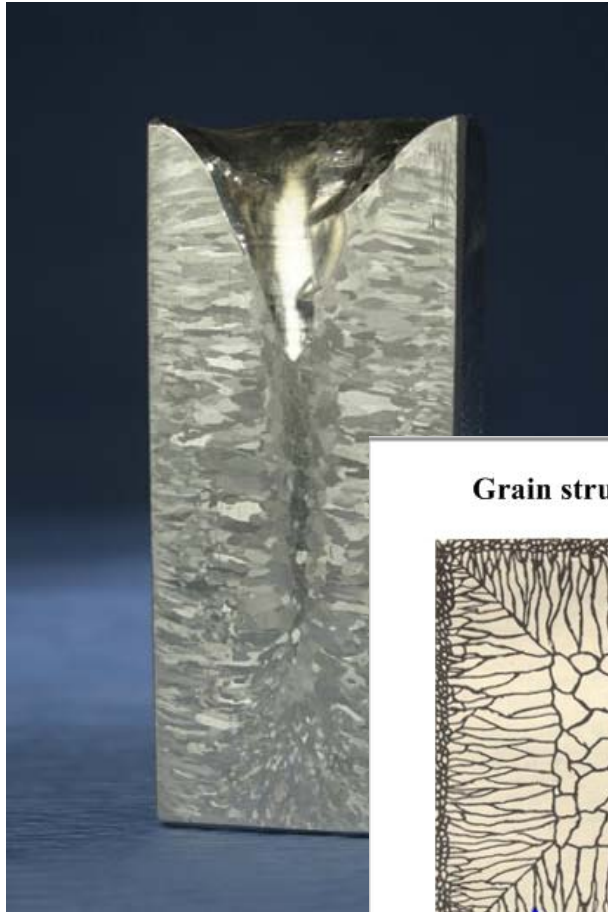
青木尊之（東工大）

下川辺隆史（東工大）

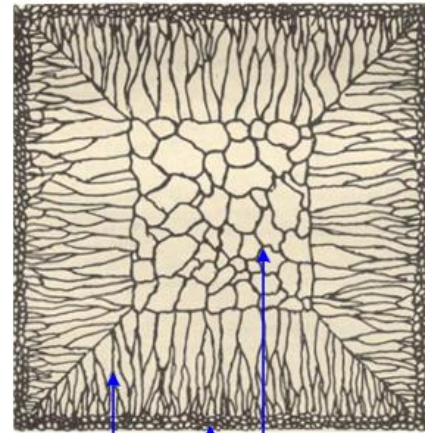
山中晃徳（東工大）



デンドライト競合成長と凝固組織

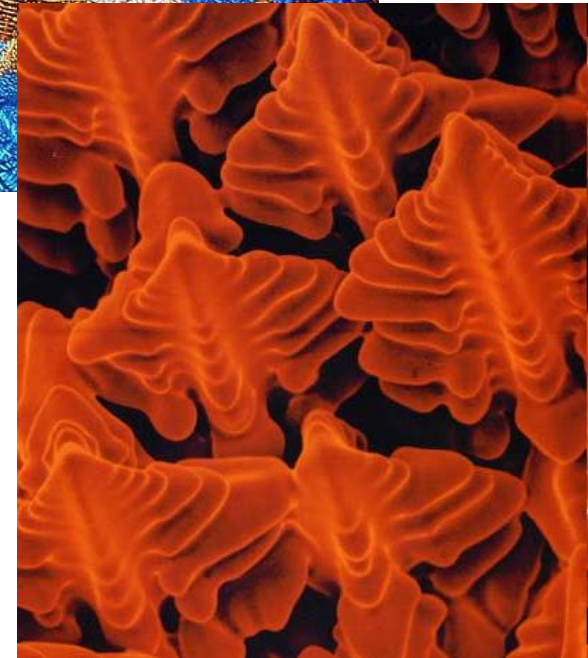


Grain structure of i

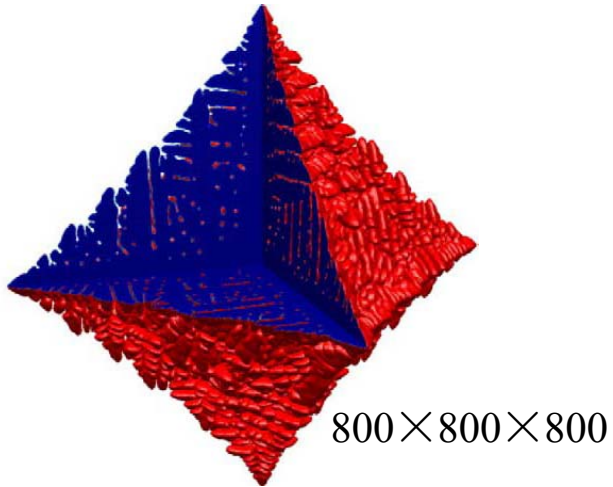


Columnar grains Large equiaxed grains
Small equiaxed grains

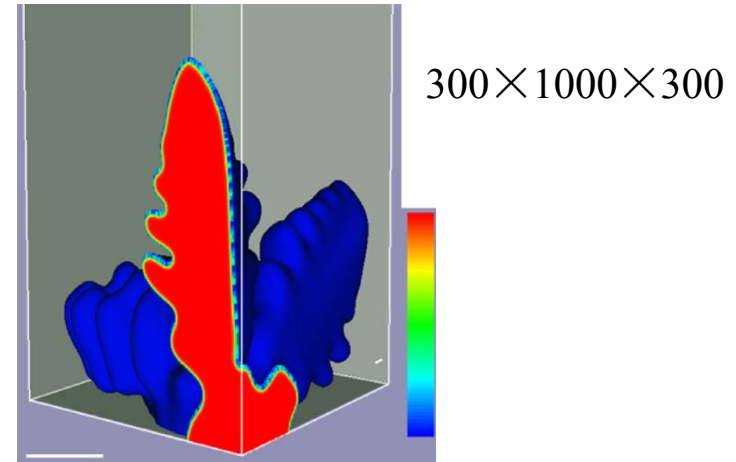
(from Bower T.F. and Flemings M.C., Trans. AIME, 239, 1620 (1967))



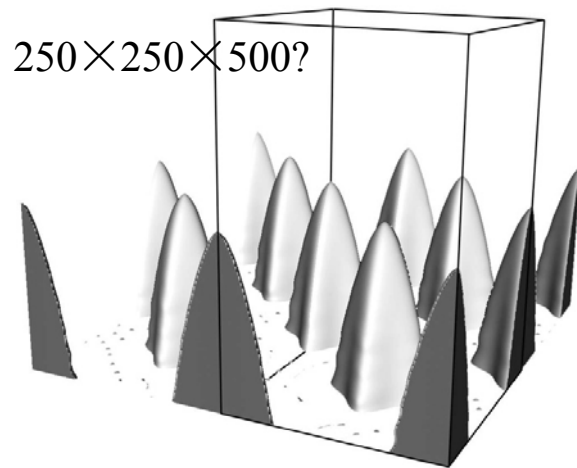
3D Phase-Field Computations



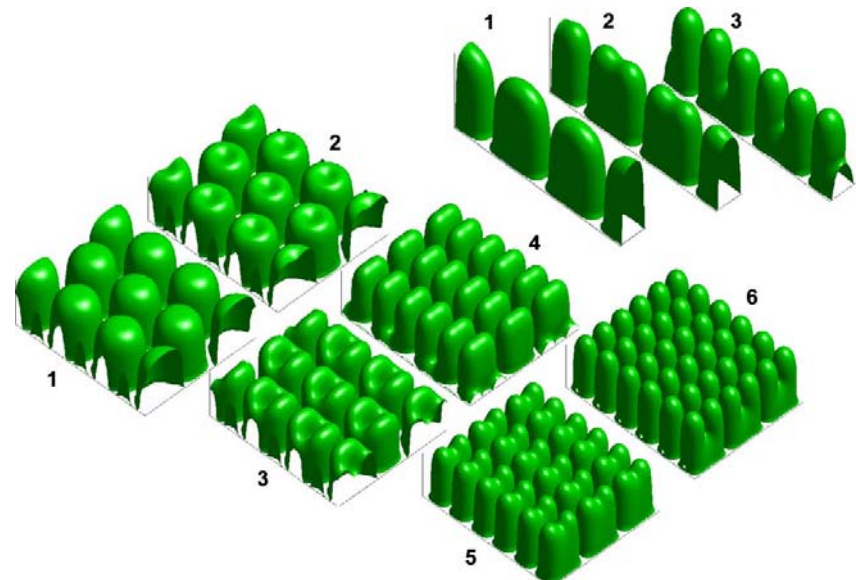
Mater. Sci. Eng., A, 413–414 (2005) 412–417.



Acta Mater., 59 (2011) 5074–5084

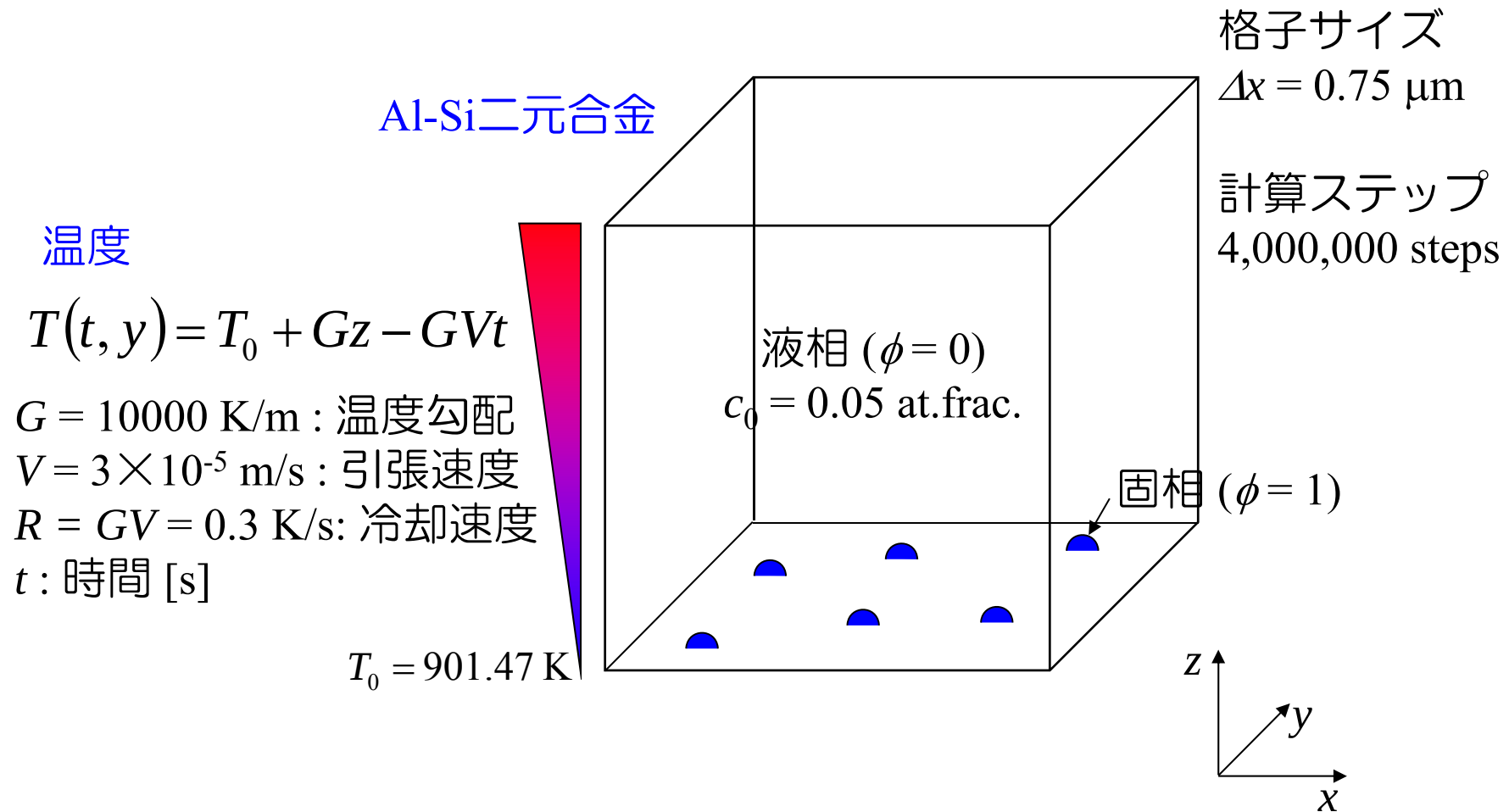


Acta Mater., 56 (2008) 4965–4971

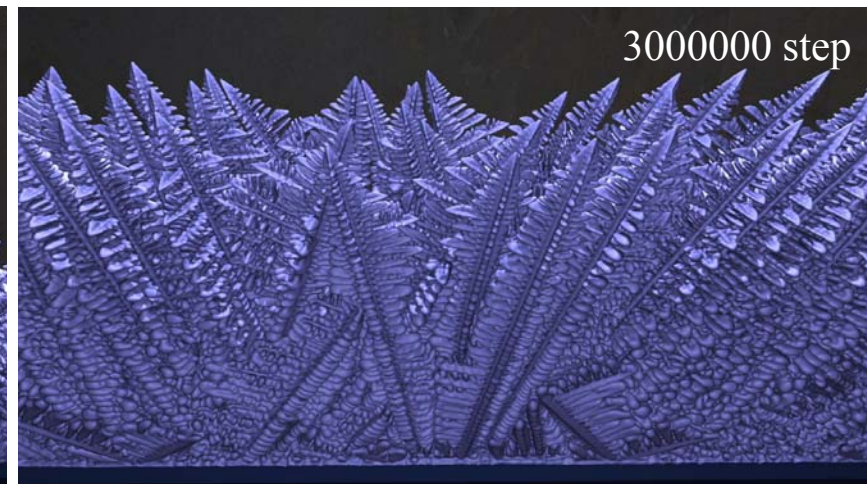
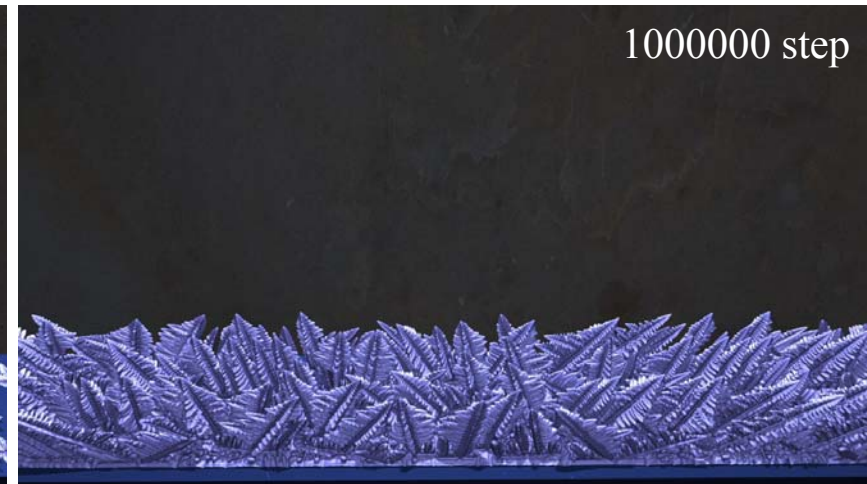


Phys. Rev. E 81, 011603 (2010)

二元合金の3D一方向凝固計算



$4096 \times 1024 \times 4096$
(3.072 mm $\times$ 0.768 mm $\times$ 3.072 mm)



ACM Gordon Bell Prize

Special Achievements in Scalability and Time-to-Solution (ゴードンベル賞・特別賞)

**Peta-scale Phase-Field Simulation for Dendritic Solidification
on the TSUBAME 2.0 Supercomputer**

2011年11月18日受賞 (SC11, シアトル)



国際会議SC11 (International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis)
ACM (Association for Computing Machinery、米国計算機学会)



京都工芸繊維大学
KYOTO INSTITUTE OF TECHNOLOGY