

大阪大学ナノテク社会人教育プログラム
 ナノマテリアル・ナノデバイスデザイン学
 フェーズフィールド法の基礎と応用
 2025年1月27日(月) 18時～21時

フェーズフィールド法の基礎と応用

京都工芸繊維大学 機械工学系

高木 知弘

講師紹介



高木 知弘 (1973年生 福岡県)

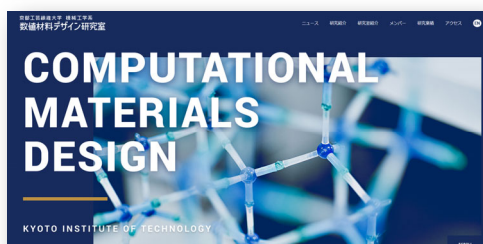
1995年 3月 神戸商船大学商船学部 卒業
 1997年 3月 神戸商船大学大学院商船学研究科 修了
 1997年 4月 神戸商船大学商船学部 助手
 2003年 3月 博士(工学)取得[論文博士]
 2003年10月 神戸大学海事科学部 助手
 2007年 4月 神戸大学大学院海事科学研究科 助教
 2007年12月 京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科 准教授
 2019年 3月 京都工芸繊維大学機械工学系 教授

京都工芸繊維大学 機械工学系
 数値材料デザイン研究室

<http://www.cmd.kit.ac.jp/>

数値材料デザイン研究室 研究紹介

<http://www.cmd.kit.ac.jp/research/>



講義内容

1. 動画によるフェーズフィールドシミュレーション紹介（資料無し）
2. フェーズフィールド法の基本モデル
3. マルチフェーズフィールドモデル
4. 研究紹介（資料無し）

2. フェーズフィールド法の基本モデル

- (1) フェーズフィールド変数
- (2) 界面移動のメカニズム
- (3) 自由エネルギー汎関数
- (4) 時間発展方程式
- (5) パラメータと物性値の関係
- (6) 差分法による離散化
- (7) フェーズフィールド法の特徴

教科書



第I部 基本モデル

- 第1章 フェーズフィールド法とは？
- 第2章 基本モデルとモデル化の流れ
- 第3章 界面異方性のモデル化と平衡形

第II部 凝固

- 第4章 純物質の凝固とデンドライト
- 第5章 2元合金の凝固とデンドライト

第III部 固相変態

- 第6章 拡散型固相変態
- 第7章 フェーズフィールド微視的弾性論
- 第8章 マルテンサイト変態

第IV部 マルチフェーズフィールド法

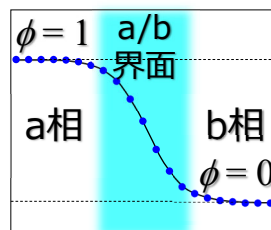
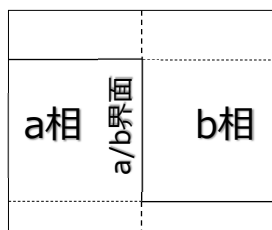
- 第9章 マルチフェーズフィールドモデルと粒成長
- 第10章 拡散場を伴うマルチフェーズフィールドモデル

第V部 応用モデル

- 第11章 KWCモデルとその応用
- 第12章 フェーズフィールド・クリスタル法

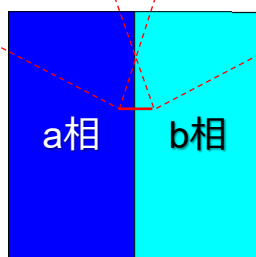
フェーズフィールド変数

急峻界面
(Sharp interface)

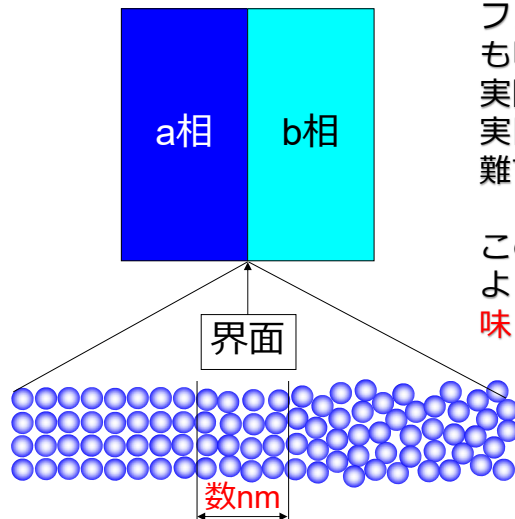


拡散界面
(Diffuse interface)

フェーズフィールド変数: ϕ



フェーズフィールド変数 (界面幅) の物理的意味

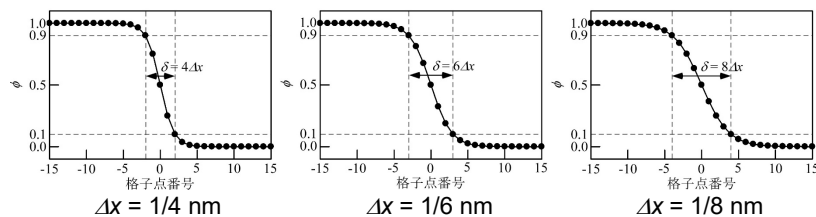


フェーズフィールド変数は**秩序変数**とも呼ばれ、原子配列の秩序度を表す。実際の界面幅は数nmと言われているが、実際の界面幅を用いた計算は極めて困難である。

このため、モデリング上、都合のいいように導入した変数であり、**物理的意味はない**と考える方がいいようである。

界面幅と計算コスト

例えば、**界面幅 $\delta = 1 \text{ nm}$** と考える。



1 μm の領域のシミュレーションを行おうとすると、

1次元	4000 格子点	6000 格子点	8000 格子点
2次元	4000 ² 格子点	6000 ² 格子点	8000 ² 格子点
3次元	4000 ³ 格子点	6000 ³ 格子点	8000 ³ 格子点

※実際の界面幅を用いたシミュレーションは普通不可能。

→界面幅（格子サイズ）を大きくとってシミュレーションを行う。

※駆動力（過冷度）の大きな問題は界面幅を小さくする必要がある。

界面移動の表現

フェーズフィールド方程式

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

フェーズフィールド変数 ϕ の時間変化



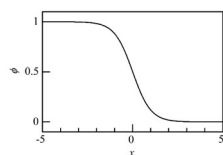
界面位置($\phi = 0.5$)の時間変化



界面移動に対する
各項の寄与

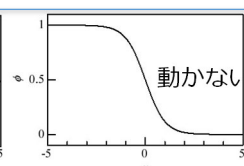
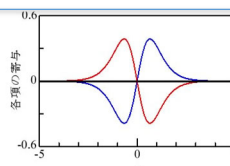
$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \delta^2 \nabla^2 \phi + \phi(1-\phi) \left(\phi - \frac{1}{2} + \beta \right)$$

平衡プロファイル

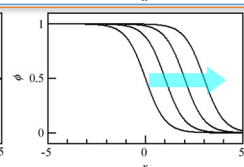
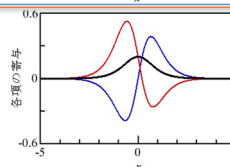


$$\phi = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \tanh \frac{x}{2\sqrt{2}\delta} \right\}$$

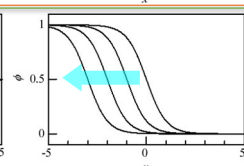
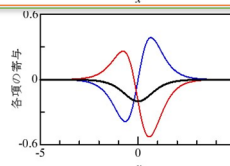
$\beta = 0.0$



$\beta = 0.1$



$\beta = -0.1$

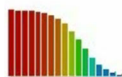


界面移動のメカニズム

フェーズフィールド方程式

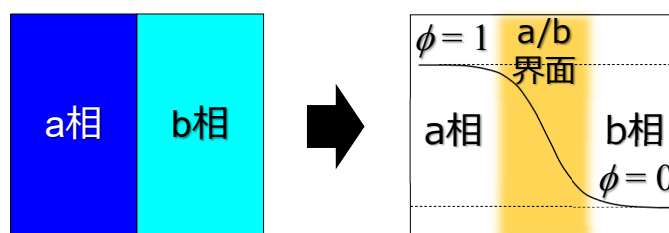
$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \underbrace{\delta^2 \nabla^2 \phi}_{\text{拡散項}} + \underbrace{\phi(1-\phi) \left(\phi - \frac{1}{2} + \beta \right)}_{\text{反応項}}$$

フェーズフィールド法による界面移動は、反応拡散方程式に帰着するフェーズフィールド方程式を数値的に解くことで表現される。界面の移動方向と移動速度は、**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！！

フェーズフィールド変数の定義



自由エネルギー汎関数

系の全自由エネルギー $F = \int f dV$ [J]

自由エネルギー密度 $f = f_{chem} + f_{doub} + f_{grad} + \dots$
[J/m³]

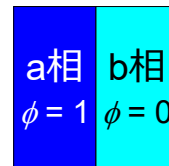
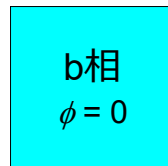
化学的自由エネルギー密度

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

- バルクの自由エネルギー密度
- 温度や濃度の関数
- 溶体近似モデルやCALPHAD法(Calculation of Phase Diagram and Thermodynamics)などの熱力学データベースから導出



f_a

f_b

f_a

f_b

$$F_{chem} = \int_V f_a dV \\ = V f_a$$

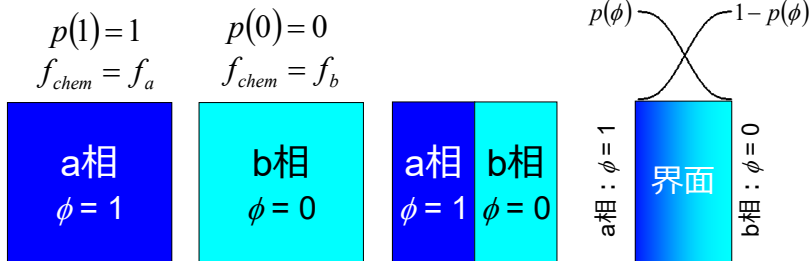
$$F_{chem} = \int_V f_b dV \\ = V f_b$$

~~$$F_{chem} = V_a f_a + V_b f_b$$~~

PF法ではこゝは表現しない.

化学的自由エネルギー密度

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



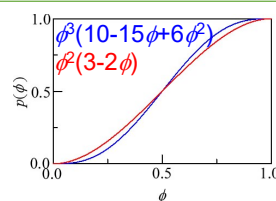
$p(\phi)$: エネルギー密度分布関数

$$p(\phi) = \phi^3 (10 - 15\phi + 6\phi^2)$$

$$p(\phi) = \phi^2 (3 - 2\phi)$$

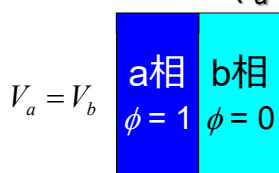
$$p(0) = 0, p(1) = 1$$

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



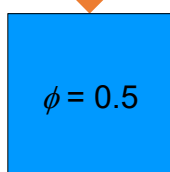
ダブルウェルポテンシャル

平衡状態 ($f_a = f_b$)



化学的エネルギーは同じ

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



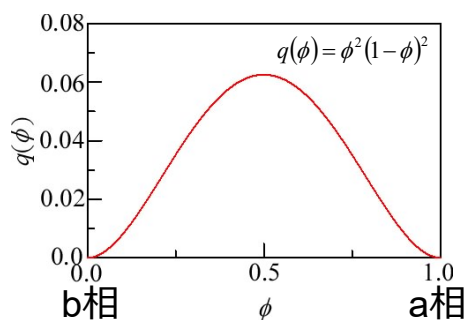
$$f_{doub} = W q(\phi)$$

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

W : エネルギー障壁

$$q(0) = q(1) = 0$$

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



化学的自由エネルギー f_{chem} + ダブルウェルポテンシャル f_{doub}

化学的自由エネルギー密度

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

ダブルウェルポテンシャル

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

化学的自由エネルギー密度 + ダブルウェルポテンシャル

$$\begin{aligned} f_{chem} + f_{doub} &= p(\phi) f_a + (1 - p(\phi)) f_b + Wq(\phi) \\ &= f_b + (f_a - f_b) p(\phi) + Wq(\phi) \end{aligned}$$

平衡状態と準安定状態

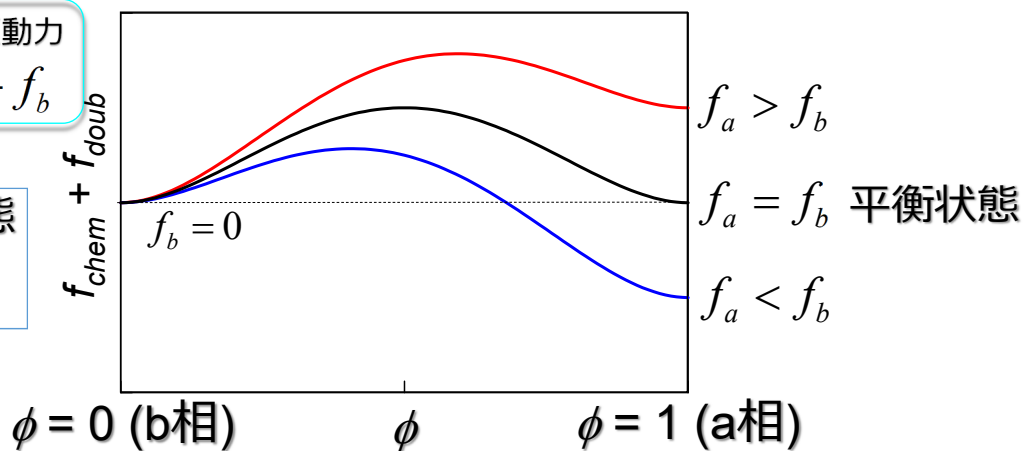
$$f_{chem} + f_{doub} = f_b + (f_a - f_b) p(\phi) + Wq(\phi)$$

界面移動の駆動力

$$\Delta f = f_a - f_b$$

準安定状態

過冷却状態
過熱状態

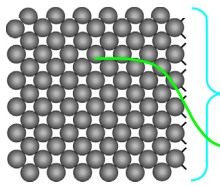


勾配エネルギー密度

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

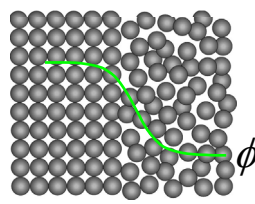
a : 勾配係数

固体表面



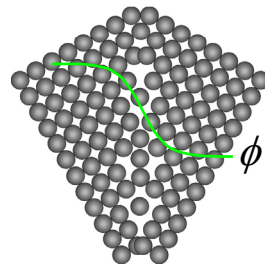
表面エネルギー

固液界面



界面エネルギー

粒界



粒界エネルギー

自由エネルギー汎関数（まとめ）

系の全自由エネルギー $F = \int f dV$

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

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

$$p(\phi) : \text{エネルギー密度分布関数} \begin{cases} p(\phi) = \phi^2(3 - 2\phi) \\ p(\phi) = \phi^3(10 - 15\phi + 6\phi^2) \end{cases}$$

ダブルウェルポテンシャル

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

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

$$W : \text{エネルギー障壁}$$

勾配エネルギー密度

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

$$a : \text{勾配係数}$$

時間発展方程式

フェーズフィールド変数 ϕ

非保存量

保存量

Allen-Cahn方程式
(アレン-カーン方程式)

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

Cahn-Hilliard方程式
(カーン-ヒリヤード方程式)

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot \left[M_{\phi} \left(\nabla \frac{\delta F}{\delta \phi} \right) \right]$$

M_{ϕ} : フェーズフィールドモビリティ
 $\delta F / \delta \phi$: 汎関数微分

フェーズフィールド変数が保存量の場合 - Cahn-Hilliard方程式 -

閉じた系を考える。

自由エネルギーは時間とともに増加しない。 ← 熱力学第二法則

$$\frac{dF}{dt} = \int \frac{\delta F}{\delta \phi} \frac{\partial \phi}{\partial t} dV \leq 0 \quad \dots (1)$$

ϕ は保存量なので連続の式が成り立つ。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J} \quad \dots (2)$$

式(2)を式(1)に代入し、ガウスの発散定理を適用。

$$\frac{dF}{dt} = \int \left(\nabla \frac{\delta F}{\delta \phi} \right) \cdot \mathbf{J} dV \leq 0$$

これを満足する流束は次式となる。

$$\mathbf{J} = -M_{\phi} \left(\nabla \frac{\delta F}{\delta \phi} \right)$$

この式を式②に代入することで、
Cahn-Hilliard方程式を得る。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot \left[M_{\phi} \left(\nabla \frac{\delta F}{\delta \phi} \right) \right]$$

$$\begin{aligned} \frac{dF}{dt} &= \int \frac{\delta F}{\delta \phi} (-\nabla \cdot \mathbf{J}) dV \\ &= -\int \left[\nabla \cdot \left(\frac{\delta F}{\delta \phi} \mathbf{J} \right) - \left(\nabla \frac{\delta F}{\delta \phi} \right) \cdot \mathbf{J} \right] dV \\ &= -\int \frac{\delta F}{\delta \phi} \mathbf{J} \cdot n dA + \int \left(\nabla \frac{\delta F}{\delta \phi} \right) \cdot \mathbf{J} dV \\ &= \int \left(\nabla \frac{\delta F}{\delta \phi} \right) \cdot \mathbf{J} dV \leq 0 \end{aligned}$$

フェーズフィールド変数が非保存量の場合 - Allen-Cahn方程式 -

閉じた系を考える.

自由エネルギーは時間とともに増加しない. ← 熱力学第二法則

$$\frac{dF}{dt} = \int \frac{\delta F}{\delta \phi} \frac{\partial \phi}{\partial t} dV \leq 0$$

これを満足する $\partial \phi / \partial t$ は次式となり, Allen-Cahn方程式を得る.

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

汎関数と汎関数微分

汎関数 $F = \int f(x, y, z, \phi, \partial \phi / \partial x, \partial \phi / \partial y, \partial \phi / \partial z) dV$

$$= \int \left[p(\phi) f_a + (1 - p(\phi)) f_b + W q(\phi) + \frac{a^2}{2} (\nabla \phi)^2 \right] dV$$

汎関数微分 $\frac{\delta F}{\delta \phi} = \frac{\partial f}{\partial \phi} - \nabla \cdot \frac{\partial f}{\partial \nabla \phi}$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\delta F}{\delta \phi} = \frac{\partial f}{\partial \phi} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)} : 1 \text{ 次元} \\ \frac{\delta F}{\delta \phi} = \frac{\partial f}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)} - \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)} : 2 \text{ 次元} \\ \frac{\delta F}{\delta \phi} = \frac{\partial f}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)} - \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)} - \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)} : 3 \text{ 次元} \end{array} \right.$$

汎関数微分の導出

汎関数

$$F = \int f(x, \phi, d\phi/dx) dx$$

を考えると,

$$\delta F = \int \frac{\delta F}{\delta \phi} \delta \phi dx \quad \dots (1)$$

で表される $\delta F/\delta \phi$ を汎関数微分と呼ぶ.

f の変化量 δf は,

$$\delta f = \frac{\partial f}{\partial \phi} \delta \phi + \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{d\phi}{dx}\right)} \delta \left(\frac{d\phi}{dx}\right) \quad \dots (2)$$

F の変化量 δF は,

$$\delta F = \int (f + \delta f) dx - \int f dx = \int \delta f dx \quad \dots (3)$$

式(2)を式(3)に代入して, 整理する.

$$\begin{aligned} \delta F &= \int \left[\frac{\partial f}{\partial \phi} \delta \phi + \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{d\phi}{dx}\right)} \delta \left(\frac{d\phi}{dx}\right) \right] dx \\ &= \int \left[\frac{\partial f}{\partial \phi} \delta \phi + \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{d\phi}{dx}\right)} \frac{d(\delta \phi)}{dx} \right] dx \\ &= \int \left[\frac{\partial f}{\partial \phi} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{d\phi}{dx}\right)} \right] \delta \phi dx \end{aligned}$$

第2項

$$\begin{aligned} &\int \left[\frac{\partial f}{\partial \left(\frac{d\phi}{dx}\right)} \frac{d(\delta \phi)}{dx} \right] dx \\ &= \int \left[\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial \left(\frac{d\phi}{dx}\right)} \delta \phi \right) - \left(\frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{d\phi}{dx}\right)} \right) \delta \phi \right] dx \\ &= \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{d\phi}{dx}\right)} \delta \phi \Big|_{x_1}^{x_2} - \int \left[\frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{d\phi}{dx}\right)} \right] \delta \phi dx \\ &= - \int \left[\frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{d\phi}{dx}\right)} \right] \delta \phi dx \end{aligned}$$

式(1)より, 汎関数微分は次式のように導出できる.

$$\frac{\delta F}{\delta \phi} = \frac{\partial f}{\partial \phi} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{d\phi}{dx}\right)}$$

実際に汎関数微分を計算

自由エネルギー汎関数

$$F = \int f dV$$

自由エネルギー密度

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

化学的自由エネルギー密度

$$\begin{aligned} f_{chem} &= p(\phi) f_a + (1 - p(\phi)) f_b \\ p(\phi) &= \phi^2 (3 - 2\phi) \end{aligned}$$

ダブルウェルポテンシャル

$$\begin{aligned} f_{doub} &= W q(\phi) \\ q(\phi) &= \phi^2 (1 - \phi)^2 \end{aligned}$$

勾配エネルギー密度

$$f_{grad} = \frac{a^2}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta F}{\delta \phi} &= \frac{\partial f}{\partial \phi} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)} \\ &= \frac{df_{chem}}{d\phi} + \frac{df_{doub}}{d\phi} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f_{grad}}{\partial \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)} \\ &= (f_a - f_b) \frac{dp(\phi)}{d\phi} + W \frac{dq(\phi)}{d\phi} - \frac{d}{dx} \left(a^2 \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \\ &= (f_a - f_b) \frac{dp(\phi)}{d\phi} + W \frac{dq(\phi)}{d\phi} - a^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \\ &= 6\phi(1-\phi)(f_a - f_b) + 2W\phi(1-\phi)(1-2\phi) - a^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \\ &= -a^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - 4W\phi(1-\phi) \left(\phi - \frac{1}{2} - \frac{3}{2W}(f_a - f_b) \right) \end{aligned}$$

最も簡単なフェーズフィールド方程式

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。

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

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

パラメータと物性値の関係付け

$$F = \int \left[\underbrace{p(\phi)f_a + (1-p(\phi))f_b}_{\text{化学的自由エネルギー}} + \underbrace{Wq(\phi) + \frac{a^2}{2}(\nabla\phi)^2}_{\text{界面エネルギー}} \right] dV$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M_\phi \left[a^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + 4W\phi(1-\phi) \left(\phi - \frac{1}{2} + \beta \right) \right] \iff V = M \left(\Delta f - \frac{\gamma}{r^n} \right)$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{勾配係数 } a \\ \text{エネルギー障壁 } W \\ \text{フェーズフィールドモビリティ } M_\phi \end{array} \right\} \iff \left\{ \begin{array}{l} \gamma \text{ 界面エネルギー} \\ \delta \text{ 界面幅} \\ M \text{ 界面モビリティ} \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} 1 \text{ 次元} & n=0 \\ 2 \text{ 次元円} & n=1 \\ 3 \text{ 次元球} & n=2 \end{array} \right.$$

r : 曲率半径

一次元平衡プロフィール： ϕ_{eq}

時間発展方程式

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M_{\phi} \left[a^2 \nabla^2 \phi - (f_a - f_b) \frac{dp(\phi)}{d\phi} - W \frac{dq(\phi)}{d\phi} \right]$$

1次元平衡状態（ $\partial \phi / \partial t = 0, f_a - f_b = 0$ ）を考える.

$$a^2 \frac{d^2 \phi}{dx^2} = W \frac{dq(\phi)}{d\phi}$$



微分方程式を解く

$$\phi_{eq} = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \tanh \left(\frac{\sqrt{2W}}{2a} x \right) \right\}$$

一次元平衡プロフィール

界面幅： δ

平衡プロフィール

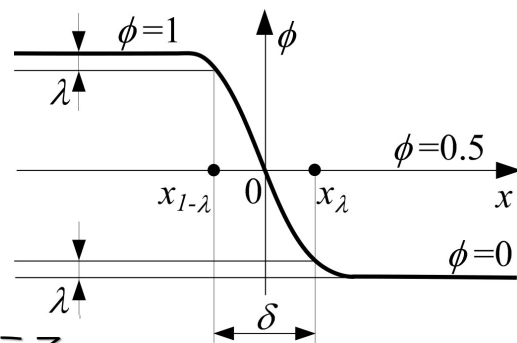
$$\phi_{eq} = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \tanh \left(\frac{\sqrt{2W}}{2a} x \right) \right\}$$

$\lambda < \phi < (1-\lambda)$ の領域を界面幅と考える.

$$\delta = x_{\lambda} - x_{1-\lambda} = \frac{\sqrt{2}a}{\sqrt{W}} 2 \tanh^{-1}(1-2\lambda) = \frac{\sqrt{2}a}{\sqrt{W}} b \quad \lambda < \phi < (1-\lambda)$$

ここで, $b = 2 \tanh^{-1}(1-2\lambda)$
例えば, $\lambda = 0.1$ とすると $b = 2.2$ となる.

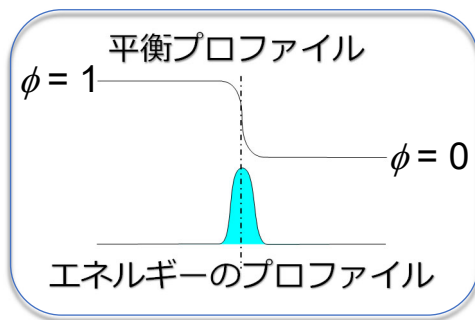
$$\delta = \frac{\sqrt{2}a}{\sqrt{W}} b$$



界面エネルギー： γ

$$F = \int \left[\underbrace{p(\phi)f_a + (1-p(\phi))f_b}_{\text{化学的自由エネルギー}} + \underbrace{Wq(\phi) + \frac{a^2}{2}(\nabla\phi)^2}_{\text{界面エネルギー}} \right] dV$$

1次元平衡状態 ($f_a = f_b = 0$) を考える.



$$\begin{aligned} \gamma &= \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ Wq(\phi) + \frac{a^2}{2} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 \right\} dx \\ &= 2W \int_{-\infty}^{\infty} q(\phi) dx = 2W \int_1^0 q(\phi) \frac{dx}{d\phi} d\phi \end{aligned}$$

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

界面モビリティ： M

時間発展方程式

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = M_\phi \left[a^2 \nabla^2 \phi - (f_a - f_b) \frac{dp(\phi)}{d\phi} - W \frac{dq(\phi)}{d\phi} \right]$$

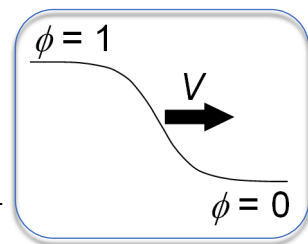
1次元定常成長状態を考える. $\frac{\partial\phi}{\partial t} = \frac{\partial\phi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} = -V \frac{\partial\phi}{\partial x}$

この式と平衡プロファイルの仮定より,

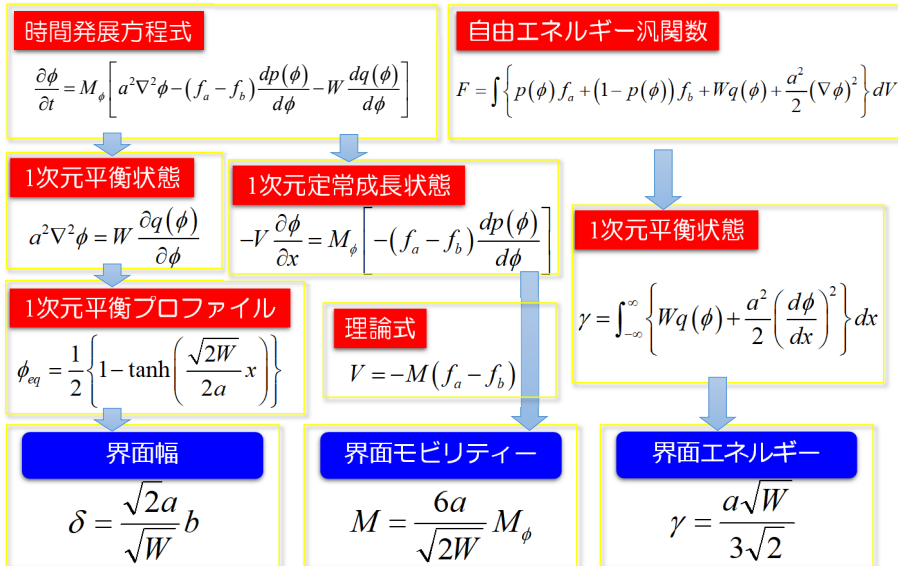
$$-V \frac{\partial\phi}{\partial x} = M_\phi \left[-(f_a - f_b) \frac{dp(\phi)}{d\phi} \right]$$

両辺に $d\phi/dx$ を掛けて積分すると次式を得る.

$$V = -\frac{6a}{\sqrt{2W}} M_\phi (f_a - f_b) \quad \Rightarrow \quad V = -M(f_a - f_b) \quad \Rightarrow \quad M = \frac{6a}{\sqrt{2W}} M_\phi$$



パラメータと物性値の関係づけ（まとめ1）



パラメータと物性値の関係づけ（まとめ2）

界面幅

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

界面エネルギー

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

界面モビリティ

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

勾配係数

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

エネルギー障壁

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

PFモビリティ

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

時間発展式を物性値で表現

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M_{\phi} \left[a^2 \nabla^2 \phi + 4W \phi (1 - \phi) \left(\phi - \frac{1}{2} + \beta \right) \right] \quad \beta = -\frac{3\Delta f}{2W}$$

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

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \bar{\delta}^2 \nabla^2 \phi + \phi (1 - \phi) \left(\phi - \frac{1}{2} + \beta \right) \quad \bar{t} = t \frac{8\gamma b^2 M}{\delta^2}, \quad \bar{\delta} = \frac{\delta}{2\sqrt{2}b}$$

$$\beta = -\frac{\bar{\delta}\Delta f}{4\gamma}$$

2次元差分法プログラム（陽解法）

```
implicit double precision (a-h,o-z)
parameter(m1ax=51,n1ax=m1ax+1)
parameter(m1ay=51,n1ay=m1ay+1)
dimension p(0:n1ax,0:n1ay),pp(0:n1ax,0:n1ay)
```

宣言文

```
dx = 0.5e-6
dy = dx
gamma = 1.
delta = 4.*dx
amobi = 1.
ram = 0.1
```

データ入力

```
bbb=2.*log((1.+(1.-2.*ram))/(1.-(1.-2.*ram)))/2
```

a, W, M_φ, b, Δt

```
aaa = sqrt(3.*delta*gamma/bbb)
www = 6.*gamma*bbb/delta
pmobi = amobi*sqrt(2.*www)/(6.*aaa)
beta = 0.5
```

パラメータ & 時間増分計算

```
dt = dx*dx/(5.*pmobi*aaa*aaa)
write(*,*) 'Time increment =',dt,'[s]'
nend = 100
```

φの初期値設定

```
r0=real(m1ax/2)*dx
do m=1,m1ay
do l=1,m1ax
x=real(l-1)*dx
y=real(m-1)*dy
r=sqrt(x*x+y*y)+r0
p(l,m)=0.5*(1.-tanh(sqrt(2.*www)/(2.*aaa)*r))
enddo
enddo
```

計算ループ

```
do nstep=1,nend
write(*,*) 'Step No. =',nstep
```

境界条件

```
do m=0,n1ay
p(0,m) = p(2,m)
p(n1ax,m)=p(m1ax-1,m)
enddo
do l=0,n1ax
p(l,0) = p(l,2)
p(l,n1ay)=p(l,m1ay-1)
enddo
```

φ_{n+1} = φ_n + Δφ

```
do m=1,m1ay
do l=1,m1ax
rpx=(p(l-1,m)-2.*p(l,m)+p(l+1,m))/(dx*dx)
rpy=(p(l,m-1)-2.*p(l,m)+p(l,m+1))/(dy*dy)
dpi1=aaa*aaa*(rpx+rpy)
dpi2=4.*www*p(l,m)*(1.-p(l,m))*(p(l,m)-0.5+beta)
dpi=dpi1+dpi2
pp(l,m)=p(l,m)+pmobi*dpi*dt
enddo
enddo
```

φ_{n+1} → φ_n

```
do m=1,m1ay
do l=1,m1ax
p(l,m)=pp(l,m)
enddo
enddo
```

計算ループ終了

```
stop
end
```

差分法による離散化

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M_{\phi} \left[a^2 \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) + 4W\phi(1-\phi)(\phi - 0.5 + \beta) \right]$$

空間

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{(l-0.5, m)} \approx \frac{\phi_{l,m}^n - \phi_{l-1,m}^n}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{(l+0.5, m)} \approx \frac{\phi_{l+1,m}^n - \phi_{l,m}^n}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_{(l, m)} \approx \frac{\frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{(l+0.5, m)} - \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{(l-0.5, m)}}{\Delta x} = \frac{\phi_{l-1,m}^n - 2\phi_{l,m}^n + \phi_{l+1,m}^n}{(\Delta x)^2}$$

2階中央差分

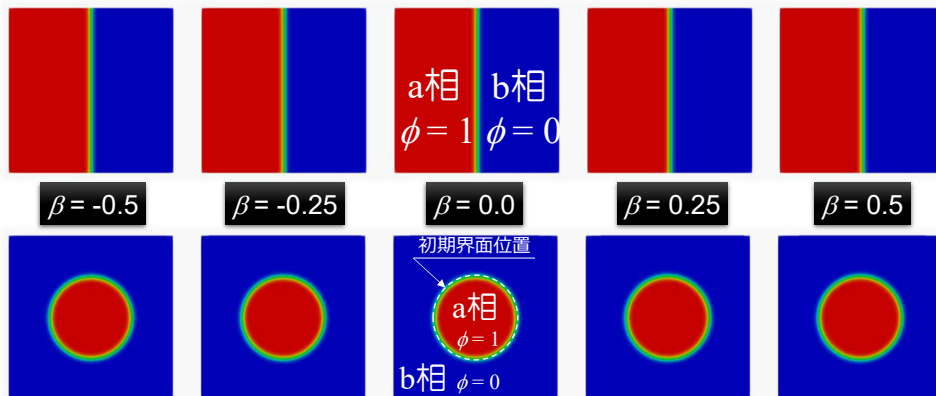
時間

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} \Rightarrow \phi^{n+1} = \phi^n + \frac{\partial \phi}{\partial t} \Delta t$$

前進差分

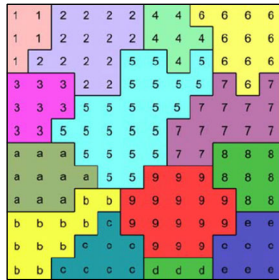
1D & 2D界面移動

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \bar{\delta}^2 \nabla^2 \phi + \phi(1-\phi) \left(\phi - \frac{1}{2} + \beta \right) \quad \beta = -\frac{\bar{\delta}}{4\gamma} (f_a - f_b) = -\frac{\bar{\delta} \Delta f}{4\gamma}$$



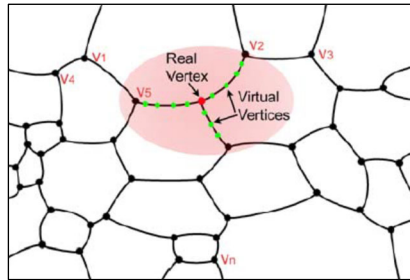
他のモデル

モンテカルロ法
セル・オートマトン法



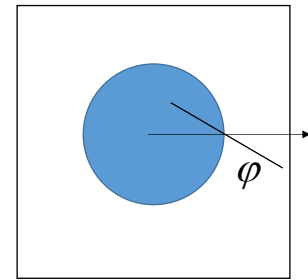
- 滑らかな界面の表現は困難.
- 実時間との関係が困難 (モンテカルロ法).
- ローカルルールを導入が容易.

バーテックス法
フロント・トラッキング法



- 頂点の追加 & 消滅の作業が煩雑.
- 3Dのコーディングが困難.
- 複雑な界面形態の表現が困難.

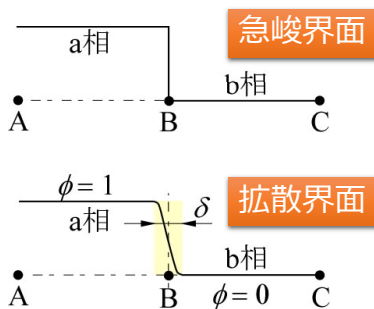
レベルセット法
$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - v |\nabla \phi| = 0$$



- 再初期化作業に時間がかかる.
- 曲率表現の精度が低い.

まとめ 1 : PF変数と界面移動のメカニズム

フェーズフィールド変数 ϕ



※実際の界面幅を用いることは不可能

フェーズフィールド方程式

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

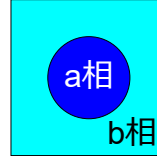
フェーズフィールド法による界面移動は、反応拡散方程式に帰着するフェーズフィールド方程式を数値的に解くことで表現される。



まとめ2：フェーズフィールド法の解析手順

① フェーズフィールド変数の定義

$$\phi = \begin{cases} 1 & \cdots \text{a相} \\ 0 & \cdots \text{b相} \end{cases}$$



② 自由エネルギー汎関数の構築

$$F = \int f dV$$

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

$$\begin{cases} \text{化学的自由エネルギー密度} & f_{chem} = p(\phi)f_a + (1-p(\phi))f_b \\ \text{ダブルウェルポテンシャル} & f_{doub} = Wq(\phi) \\ \text{勾配エネルギー密度} & f_{grad} = \frac{a^2}{2}(\nabla\phi)^2 \end{cases} \quad \begin{cases} p(\phi) = \phi^2(3-2\phi) \\ q(\phi) = \phi^2(1-\phi)^2 \\ p(\phi) = \phi^3(10-15\phi+6\phi^2) \end{cases}$$

③ 時間発展方程式の導出

$$\text{非保存量: } \frac{\partial\phi}{\partial t} = -M_\phi \frac{\delta F}{\delta\phi} \quad \text{保存量: } \frac{\partial\phi}{\partial t} = \nabla \cdot \left[M_\phi \left(\nabla \frac{\delta F}{\delta\phi} \right) \right]$$

④ パラメータと物性値の関係づけ

$$a, W, M_\phi \Leftrightarrow \gamma, \delta, M \quad a = \sqrt{\frac{3\delta\gamma}{b}}, \quad W = \frac{6\gamma b}{\delta}, \quad M_\phi = \frac{b}{3\delta}M$$

⑤ 離散化&数値シミュレーション

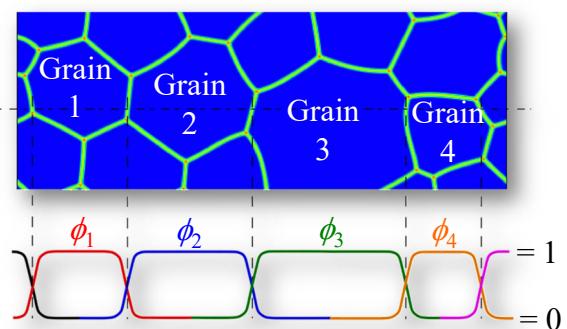
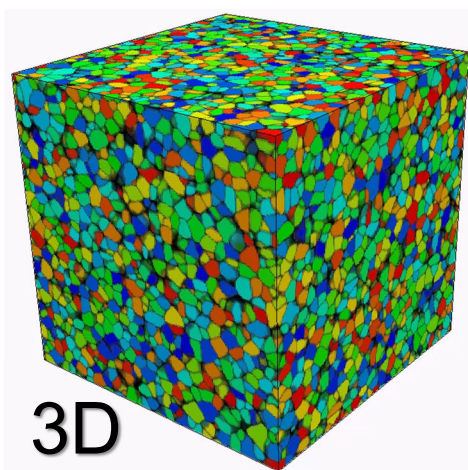
まとめ3：フェーズフィールド法の特徴

- 異相と界面を新しく導入するフェーズフィールド変数（秩序変数）で表現する。フェーズフィールド変数の変化領域として界面領域をとらえるため、界面は幅を有する。
- 界面移動は反応拡散方程式に帰着する時間発展式を数値的に解き表現するため、界面位置を追跡する必要がない。
- そのため、複雑な形態変化を比較的容易に表現可能である。
- 拡散界面モデルであるため、滑らかな界面形態を表現可能である。
- モデルに曲率効果が含まれている。
- 拡散界面モデルであるため、計算コストが高い。

3. マルチフェーズフィールドモデル

- (1) フェーズフィールド変数
- (2) 自由エネルギー汎関数
- (3) 時間発展方程式
- (4) パラメータと物性値の関係
- (5) 計算効率化アルゴリズム
- (6) 粒成長シミュレーション

複数のフェーズフィールド変数



$$\phi_{\alpha} = \begin{cases} 1 : \text{粒}\alpha\text{内} \\ 0 : \text{その他の粒内} \end{cases}$$

フェーズフィールド変数 1個 → 2個

PF変数：1個

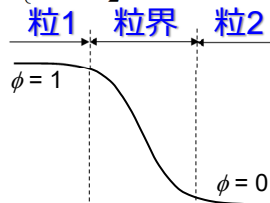
フェーズフィールド変数

$$\phi = \begin{cases} 1 & \cdots \text{粒1} \\ 0 & \cdots \text{粒2} \end{cases}$$

自由エネルギー汎関数

$$F = \int (f_{doub} + f_{grad}) dV$$

$$\begin{cases} f_{doub} = W\phi^2(1-\phi)^2 \\ f_{grad} = \frac{a^2}{2}(\nabla\phi)^2 \end{cases}$$



PF変数：2個

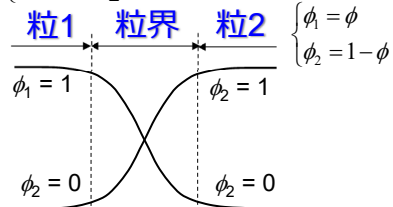
フェーズフィールド変数

$$\phi_1 = \begin{cases} 1 & \cdots \text{粒1} \\ 0 & \cdots \text{粒2} \end{cases} \quad \phi_2 = \begin{cases} 1 & \cdots \text{粒2} \\ 0 & \cdots \text{粒1} \end{cases} \quad \phi_1 + \phi_2 = 1$$

自由エネルギー汎関数

$$F = \int (f_{doub} + f_{grad}) dV$$

$$\begin{cases} f_{doub} = W\phi_1^2\phi_2^2 \\ f_{grad} = -\frac{a^2}{2}\nabla\phi_1 \cdot \nabla\phi_2 \end{cases}$$



フェーズフィールド変数 2個 → 3個

PF変数：2個

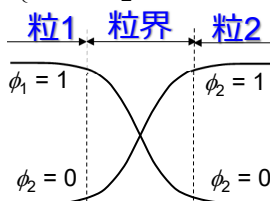
フェーズフィールド変数

$$\phi_1 = \begin{cases} 1 & \cdots \text{粒1} \\ 0 & \cdots \text{粒2} \end{cases} \quad \phi_2 = \begin{cases} 1 & \cdots \text{粒2} \\ 0 & \cdots \text{粒1} \end{cases}$$

自由エネルギー汎関数 $\phi_1 + \phi_2 = 1$

$$F = \int (f_{doub} + f_{grad}) dV$$

$$\begin{cases} f_{doub} = W\phi_1^2\phi_2^2 \\ f_{grad} = -\frac{a^2}{2}\nabla\phi_1 \cdot \nabla\phi_2 \end{cases}$$



PF変数：3個

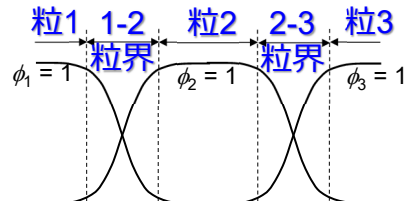
フェーズフィールド変数

$$\phi_1 = \begin{cases} 1 & \cdots \text{粒1} \\ 0 & \cdots \text{その他} \end{cases} \quad \phi_2 = \begin{cases} 1 & \cdots \text{粒2} \\ 0 & \cdots \text{その他} \end{cases} \quad \phi_3 = \begin{cases} 1 & \cdots \text{粒3} \\ 0 & \cdots \text{その他} \end{cases}$$

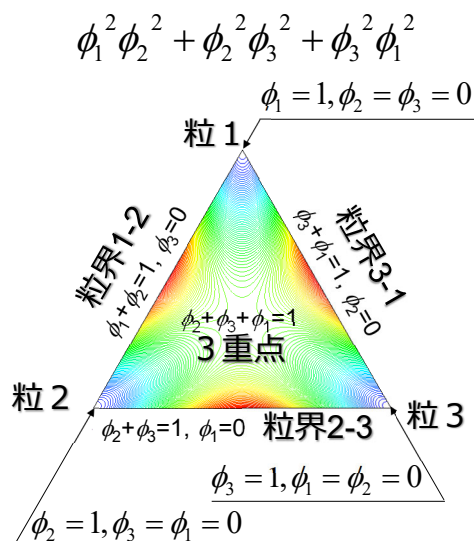
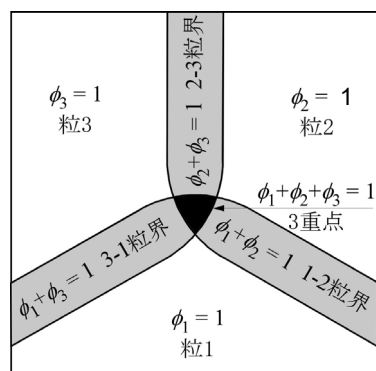
自由エネルギー汎関数 $\phi_1 + \phi_2 + \phi_3 = 1$

$$F = \int (f_{doub} + f_{grad}) dV$$

$$\begin{cases} f_{doub} = W_{12}\phi_1^2\phi_2^2 + W_{23}\phi_2^2\phi_3^2 + W_{31}\phi_3^2\phi_1^2 \\ f_{grad} = -\frac{a_{12}^2}{2}\nabla\phi_1 \cdot \nabla\phi_2 - \frac{a_{23}^2}{2}\nabla\phi_2 \cdot \nabla\phi_3 - \frac{a_{31}^2}{2}\nabla\phi_3 \cdot \nabla\phi_1 \end{cases}$$



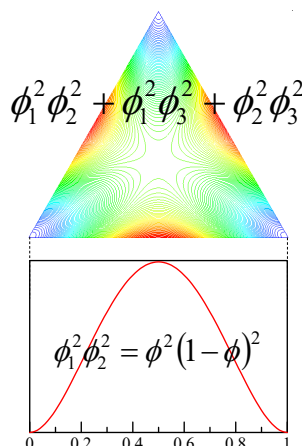
粒内・粒界・3重点におけるポテンシャル分布



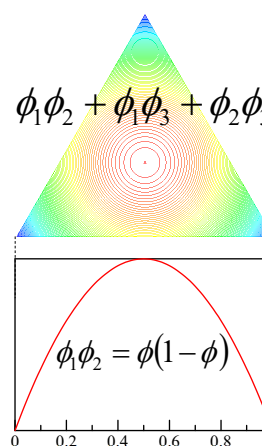
ダブルウェル&ダブルオブスタクル

$$f_{doub} = W_{12}\phi_1^2\phi_2^2 + W_{23}\phi_2^2\phi_3^2 + W_{31}\phi_3^2\phi_1^2$$

$$f_{doub} = W_{12}\phi_1\phi_2 + W_{23}\phi_2\phi_3 + W_{31}\phi_3\phi_1$$



ダブルウェル関数



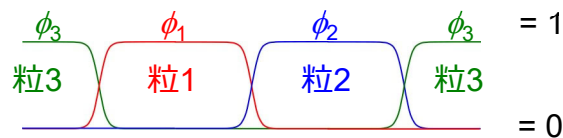
ダブルオブスタクル関数

マルチフェーズフィールドモデル

Steinbachらによって提案されたマルチフェーズフィールドモデル[l. Steinbach, F. Pezzolla, Physica D, 134, 1999, 385-393]を導出します。このモデルはフェーズフィールド法の汎用ソフトであるMICRESSに用いられており、最も広く用いられているマルチフェーズフィールドモデルといえます。

フェーズフィールド変数

$$\phi_\alpha = \begin{cases} 1 & \dots \text{粒 } \alpha \text{ 内} \\ 0 & \dots \text{その他の粒内} \end{cases}$$



$$\sum_{\alpha=1}^N \phi_\alpha = 1$$

N : 粒数 (用いるフェーズフィールド変数の個数)

自由エネルギー汎関数

$$F = \int f dV$$

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

化学的
自由エネルギー密度

$$f_{chem} = \sum_{\alpha=1}^N \phi_{\alpha} f_{\alpha} \quad f_{\alpha} : \text{粒} \alpha \text{ の化学的自由エネルギー}$$

ダブルオブスタクル
ポテンシャル

$$f_{doub} = \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=\alpha+1}^N (W_{\alpha\beta} \phi_{\alpha} \phi_{\beta}) \quad W_{\alpha\beta} : \text{エネルギー障壁}$$

勾配エネルギー密度

$$f_{grad} = \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=\alpha+1}^N \left(-\frac{a_{\alpha\beta}^2}{2} \nabla \phi_{\alpha} \cdot \nabla \phi_{\beta} \right) \quad a_{\alpha\beta} : \text{勾配係数}$$

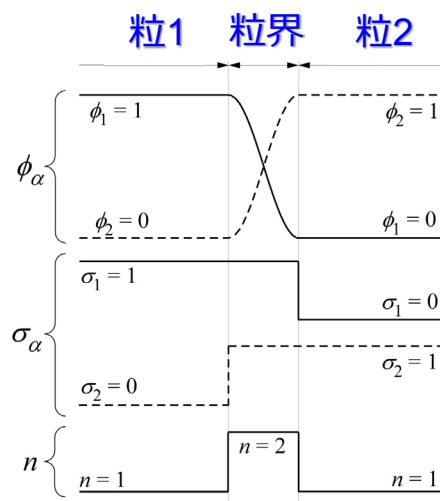
粒界のみで考える

ステップ関数

$$\sigma_{\alpha} = \begin{cases} 1 \cdots 0 & 0 < \phi_{\alpha} \leq 1 \\ 0 \cdots \phi_{\alpha} & \phi_{\alpha} = 0 \end{cases}$$

局所的なPF変数の数

$$n = \sum_{\alpha=1}^N \sigma_{\alpha}$$



フェーズフィールド変数の個数 $N \rightarrow n$

PF変数 N 個

PF変数 n 個

$$\sum_{\alpha=1}^N \phi_{\alpha} = 1 \quad \longrightarrow \quad \sum_{i=1}^n \phi_i = 1$$

$$f_{doub} = \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=\alpha+1}^N (W_{\alpha\beta} \phi_{\alpha} \phi_{\beta}) \quad \longrightarrow \quad f_{doub} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n (W_{ij} \phi_i \phi_j)$$

$$f_{grad} = \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=\alpha+1}^N \left(-\frac{a_{\alpha\beta}^2}{2} \nabla \phi_{\alpha} \cdot \nabla \phi_{\beta} \right) \quad \longrightarrow \quad f_{grad} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n \left(-\frac{a_{ij}^2}{2} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j \right)$$

α, β : N 個のPF変数内での番号

i, j : n 個のPF変数内での番号

時間発展方程式

$$F = \int f dV \quad \xleftarrow{\text{拘束条件}} \quad \sum_{i=1}^n \phi_i = 1$$

$$\Gamma = \int_V \left\{ f + \lambda \left(\sum_{i=1}^n \phi_i - 1 \right) \right\} dV$$

λ : ラグランジュの未定乗数

$$\dot{\phi}_i = -\frac{\delta \Gamma}{\delta \phi_i} = -\frac{\delta F}{\delta \phi_i} - \lambda$$

インターフェーズフィールドを定義

$$\psi_{ij} = \phi_i - \phi_j \quad (j > i) \quad (\lambda \text{ を消したい})$$

$$\begin{aligned} \dot{\psi}_{ij} &= \dot{\phi}_i - \dot{\phi}_j = \left(-\frac{\delta F}{\delta \phi_i} - \lambda \right) - \left(-\frac{\delta F}{\delta \phi_j} - \lambda \right) \\ &= -\frac{\delta F}{\delta \phi_i} + \frac{\delta F}{\delta \phi_j} \quad (\dot{\psi}_{ij} = \dot{\phi}_i \text{ にしたい}) \end{aligned}$$

$$\sum_{i=1}^n \psi_{ij} = \sum_{i=1}^n (\phi_i - \phi_j) = \sum_{i=1}^n \phi_i - \sum_{i=1}^n \phi_j$$

$$\sum_{i=1}^n \phi_i = \sum_{i=1}^n \psi_{ij} + \sum_{i=1}^n \phi_j = \sum_{i=1}^n \psi_{ij} + n\phi_j = 1 \quad (i \text{ と } j \text{ の入替})$$

$$\sum_{j=1}^n \psi_{ji} + n\phi_i = \sum_{j=1}^n (-\psi_{ij}) + n\phi_i = 1$$

$$\phi_i = \frac{1}{n} \left(\sum_{j=1}^n \psi_{ij} + 1 \right) \quad \dot{\phi}_i = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \dot{\psi}_{ij}$$

$$\dot{\phi}_i = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (\dot{\phi}_i - \dot{\phi}_j) = -\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \left(\frac{\delta F}{\delta \phi_i} - \frac{\delta F}{\delta \phi_j} \right)$$

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -\frac{2}{n} \sum_{j=1}^n M_{ij}^{\phi} \left(\frac{\delta F}{\delta \phi_i} - \frac{\delta F}{\delta \phi_j} \right)$$

時間発展方程式 (cont.)

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -\frac{2}{n} \sum_{j=1}^n M_{ij}^{\phi} \left(\frac{\delta F}{\delta \phi_i} - \frac{\delta F}{\delta \phi_j} \right)$$

$$\frac{\delta F}{\delta \phi_i} = \frac{\partial f}{\partial \phi_i} - \nabla \cdot \frac{\partial f}{\partial \nabla \phi_i} = \sum_{k=1, (k \neq i)}^n (W_{ik} \phi_k) + \sum_{k=1, (k \neq i)}^n \left(\frac{a_{ik}^2}{2} \nabla^2 \phi_k \right) + \frac{\partial f_{chem}}{\partial \phi_i} = \sum_{k=1, (k \neq i)}^n \left(W_{ik} \phi_k + \frac{a_{ik}^2}{2} \nabla^2 \phi_k \right) + \frac{\partial f_{chem}}{\partial \phi_i}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{2}{n} \sum_{j=1}^n M_{ij}^{\phi} \left[\sum_{k=1, (k \neq i)}^n \left(W_{ik} \phi_k + \frac{a_{ik}^2}{2} \nabla^2 \phi_k \right) + f_i - \sum_{k=1, (k \neq j)}^n \left(W_{jk} \phi_k + \frac{a_{jk}^2}{2} \nabla^2 \phi_k \right) - f_j \right]$$

$$= -\frac{2}{n} \sum_{j=1}^n M_{ij}^{\phi} \left[\sum_{k=1}^n \left\{ (W_{ik} - W_{jk}) \phi_k + \frac{1}{2} (a_{ik}^2 - a_{jk}^2) \nabla^2 \phi_k \right\} + (f_i - f_j) \right]$$

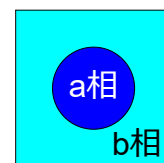
$$f_i - f_j = \frac{8}{\pi} \sqrt{\phi_i \phi_j} \Delta f_{ij} \quad \leftarrow \int_0^1 \sqrt{\phi} \phi_2 d\phi = \int_0^1 \sqrt{\phi(1-\phi)} d\phi = \frac{\pi}{8}$$

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

パラメータと物性値の関係づけ

フェーズフィールド変数

$$\phi = 1 \cdots \text{a相} \quad \phi = 0 \cdots \text{b相}$$



自由エネルギー汎関数

$$F = \int f dV = \int (f_{chem} + f_{doub} + f_{grad}) dV$$

化学的自由エネルギー密度

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

ダブルオブスタクルポテンシャル

$$f_{doub} = W q(\phi) \quad q(\phi) = \phi(1 - \phi)$$

勾配エネルギー密度

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

パラメータと物性値の関係づけ(cont.)

$$F = \int \left\{ p(\phi) f_a + (1 - p(\phi)) f_b + W q(\phi) + \frac{a^2}{2} (\nabla \phi)^2 \right\} dV$$

時間発展方程式

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

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M_\phi \left[a^2 \nabla^2 \phi - (f_a - f_b) \frac{dp(\phi)}{d\phi} - W \frac{dq(\phi)}{d\phi} \right]$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M^\phi \left[a^2 \nabla^2 \phi - (f_a - f_b) \frac{dp(\phi)}{d\phi} - (1 - 2\phi) W \right]$$

パラメータと物性値の関係づけ

時間発展方程式

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M_\phi \left[a^2 \nabla^2 \phi - (f_a - f_b) \frac{dp(\phi)}{d\phi} - W \frac{dq(\phi)}{d\phi} \right]$$

自由エネルギー汎関数

$$F = \int \left\{ p(\phi) f_a + (1 - p(\phi)) f_b + W q(\phi) + \frac{a^2}{2} (\nabla \phi)^2 \right\} dV$$

1次元平衡状態

$$a^2 \nabla^2 \phi = W \frac{\partial q(\phi)}{\partial \phi}$$

1次元定常成長状態

$$-V \frac{\partial \phi}{\partial x} = M_\phi \left[-(f_a - f_b) \frac{dp(\phi)}{d\phi} \right]$$

1次元平衡状態

$$\gamma = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ W q(\phi) + \frac{a^2}{2} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 \right\} dx$$

1次元平衡プロファイル

$$\phi_{eq} = \frac{1}{2} \left[1 - \sin \left(\frac{\sqrt{2W}}{a} x \right) \right]$$

理論式

$$V = -M(f_a - f_b)$$

界面幅

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

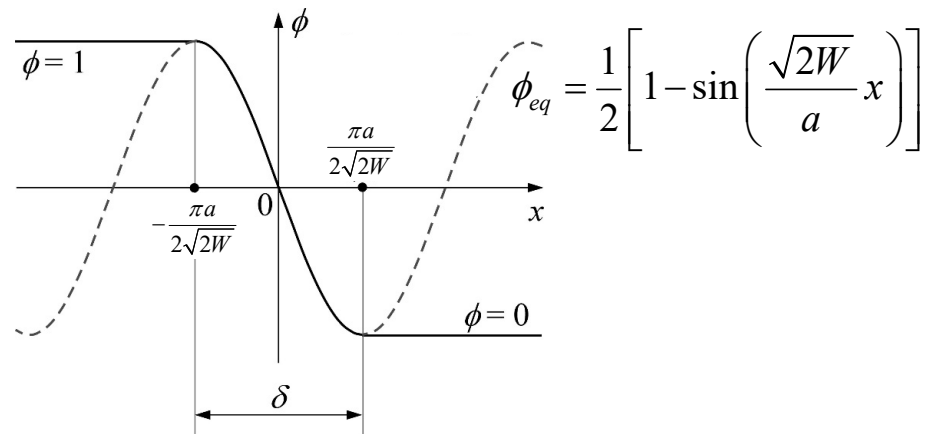
界面モビリティ

$$M = \frac{8}{\pi} \frac{a}{\sqrt{2W}} M_\phi$$

界面エネルギー

$$\gamma = \frac{a\sqrt{W}}{4\sqrt{2}} \pi$$

平衡プロフィールと界面幅



パラメータと物性値の関係づけ

界面幅

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

界面エネルギー

$$\gamma = \frac{a\sqrt{W}}{4\sqrt{2}} \pi$$

界面モビリティ

$$M = \frac{8}{\pi} \frac{a}{\sqrt{2W}} M_\phi$$

$$\phi_{eq} = \frac{1}{2} \left[1 - \sin \left(\frac{\sqrt{2W}}{a} x \right) \right] = \frac{1}{2} \left[1 - \sin \left(\frac{\sqrt{2}\pi}{2\delta} x \right) \right]$$

勾配係数

$$a = \frac{2}{\pi} \sqrt{2\delta\gamma} \rightarrow a_{ij} = \frac{2}{\pi} \sqrt{2\delta\gamma_{ij}}$$

エネルギー障壁

$$W = \frac{4\gamma}{\delta} \rightarrow W_{ij} = \frac{4\gamma_{ij}}{\delta}$$

PFモビリティ

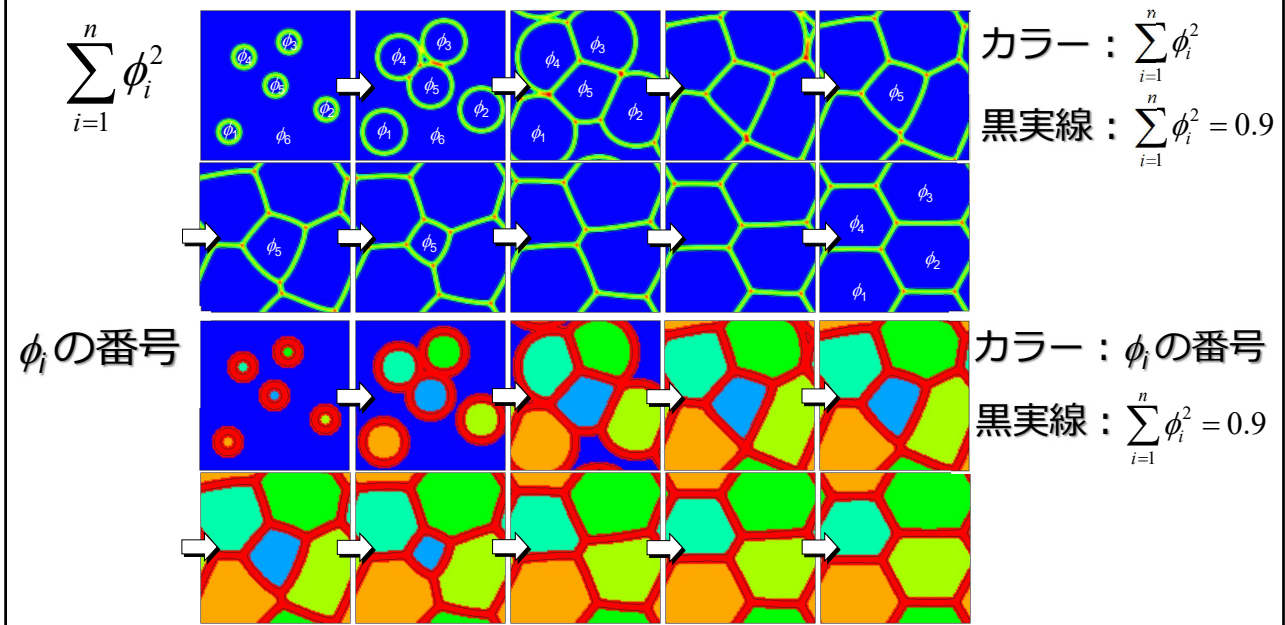
$$M_\phi = \frac{\pi^2}{8\delta} M \rightarrow M_{ij}^\phi = \frac{\pi^2}{8\delta} M_{ij}$$

まとめ マルチフェーズフィールド法

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

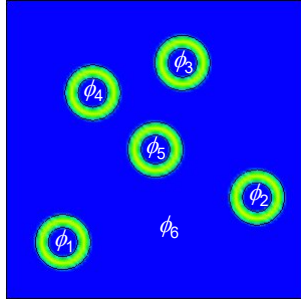
$$a_{ij} = \frac{2}{\pi} \sqrt{2\delta\gamma_{ij}}, \quad W_{ij} = \frac{4\gamma_{ij}}{\delta}, \quad M_{ij}^{\phi} = \frac{\pi^2}{8\delta} M_{ij}$$

粒成長シミュレーション



パラメータ設定

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

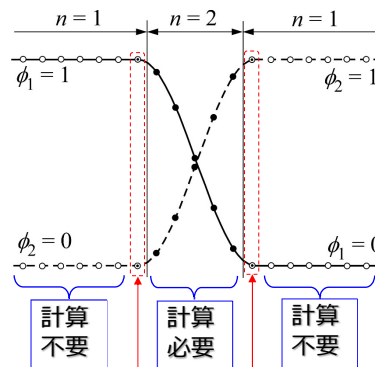


平衡プロファイル

$$\phi_{eq} = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \sin \left(\frac{\sqrt{2W}}{2a} x \right) \right\}$$

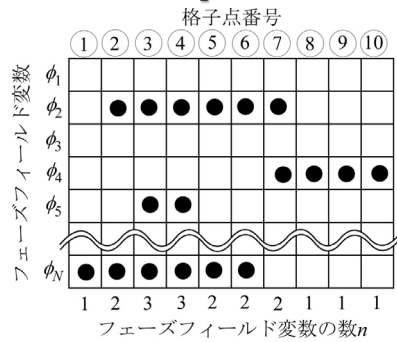
$$\begin{aligned} a_{ij} &= \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} & a_{16} \\ a_{21} & 0 & a_{23} & a_{24} & a_{25} & a_{26} \\ a_{31} & a_{32} & 0 & a_{34} & a_{35} & a_{36} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & 0 & a_{45} & a_{46} \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} & 0 & a_{56} \\ a_{61} & a_{62} & a_{63} & a_{64} & a_{65} & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & a & a & a & a & a \\ a & 0 & a & a & a & a \\ a & a & 0 & a & a & a \\ a & a & a & 0 & a & a \\ a & a & a & a & 0 & a \\ a & a & a & a & a & 0 \end{bmatrix} \\ W_{ij} &= \begin{bmatrix} 0 & W_{12} & W_{13} & W_{14} & W_{15} & W_{16} \\ W_{21} & 0 & W_{23} & W_{24} & W_{25} & W_{26} \\ W_{31} & W_{32} & 0 & W_{34} & W_{35} & W_{36} \\ W_{41} & W_{42} & W_{43} & 0 & W_{45} & W_{46} \\ W_{51} & W_{52} & W_{53} & W_{54} & 0 & W_{56} \\ W_{61} & W_{62} & W_{63} & W_{64} & W_{65} & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & W & W & W & W & W \\ W & 0 & W & W & W & W \\ W & W & 0 & W & W & W \\ W & W & W & 0 & W & W \\ W & W & W & W & 0 & W \\ W & W & W & W & W & 0 \end{bmatrix} \\ M_{ij}^\phi &= \begin{bmatrix} 0 & M_{12}^\phi & M_{13}^\phi & M_{14}^\phi & M_{15}^\phi & M_{16}^\phi \\ M_{21}^\phi & 0 & M_{23}^\phi & M_{24}^\phi & M_{25}^\phi & M_{26}^\phi \\ M_{31}^\phi & M_{32}^\phi & 0 & M_{34}^\phi & M_{35}^\phi & M_{36}^\phi \\ M_{41}^\phi & M_{42}^\phi & M_{43}^\phi & 0 & M_{45}^\phi & M_{46}^\phi \\ M_{51}^\phi & M_{52}^\phi & M_{53}^\phi & M_{54}^\phi & 0 & M_{56}^\phi \\ M_{61}^\phi & M_{62}^\phi & M_{63}^\phi & M_{64}^\phi & M_{65}^\phi & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & M^\phi & M^\phi & M^\phi & M^\phi & M^\phi \\ M^\phi & 0 & M^\phi & M^\phi & M^\phi & M^\phi \\ M^\phi & M^\phi & 0 & M^\phi & M^\phi & M^\phi \\ M^\phi & M^\phi & M^\phi & 0 & M^\phi & M^\phi \\ M^\phi & M^\phi & M^\phi & M^\phi & 0 & M^\phi \\ M^\phi & M^\phi & M^\phi & M^\phi & M^\phi & 0 \end{bmatrix} \\ \Delta f_{ij} &= \begin{bmatrix} 0 & \Delta f_{12} & \Delta f_{13} & \Delta f_{14} & \Delta f_{15} & \Delta f_{16} \\ \Delta f_{21} & 0 & \Delta f_{23} & \Delta f_{24} & \Delta f_{25} & \Delta f_{26} \\ \Delta f_{31} & \Delta f_{32} & 0 & \Delta f_{34} & \Delta f_{35} & \Delta f_{36} \\ \Delta f_{41} & \Delta f_{42} & \Delta f_{43} & 0 & \Delta f_{45} & \Delta f_{46} \\ \Delta f_{51} & \Delta f_{52} & \Delta f_{53} & \Delta f_{54} & 0 & \Delta f_{56} \\ \Delta f_{61} & \Delta f_{62} & \Delta f_{63} & \Delta f_{64} & \Delta f_{65} & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta f \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta f \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta f \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta f \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta f \\ -\Delta f & -\Delta f & -\Delta f & -\Delta f & -\Delta f & 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

プログラミング時の注意点

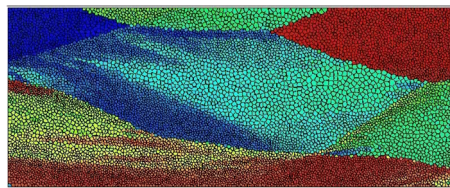
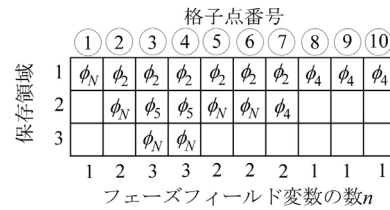


この点はn=1だが計算しないと界面が動かない。

Active parameter tracking (APT)



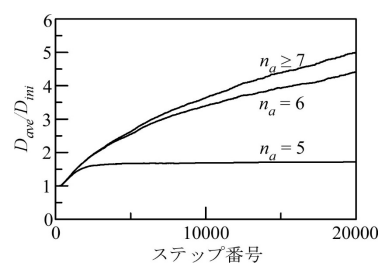
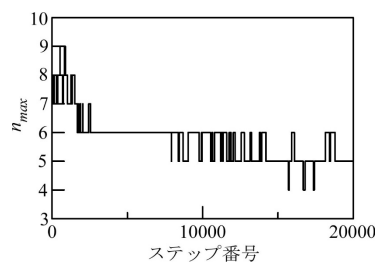
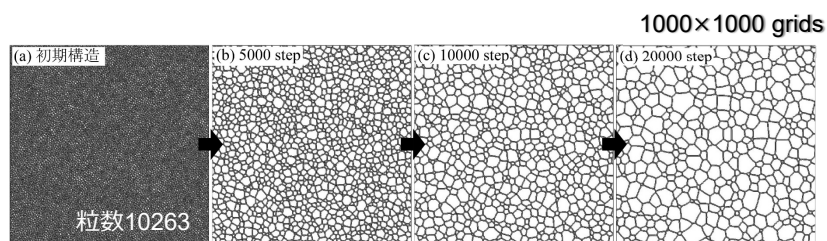
S. G. Kim, D. I. Kim, W. T. Kim, Y. B. Park,
Phys. Rev. E, 74, (2006), 061605-1-061605-14.



2500 × 1000 grids, 9622 sub-grains

保存するPF変数の
最大数を決めておく.

APTの確認



おわりに

本講義では、メゾスケールにおける最も強力な材料組織予測手法であるフェーズフィールド法について、その基本的なモデルを中心に、多相・多結晶問題を表現可能なマルチフェーズフィールド法も含めて説明しました。また、これらの手法を用いたいくつかの最新研究例についても紹介しました。

フェーズフィールド法は、拡散界面を用いて境界の移動を追跡する手法であり、界面／表面／粒界の複雑なダイナミクスを比較的容易に計算することが可能です。ただし、計算コストが高い点は依然として課題として挙げられます。また、数学的知識を必要とする点は、この手法の難しさの一つと言えるでしょう。しかしながら、計算機性能の飛躍的な向上や、効率的なアルゴリズムの開発が進展している現状を踏まえると、今後さらに多くの分野での応用が期待されます。