

氏名	みよし えいすけ 三好 英輔
学位(専攻分野)	博士(工学)
学位記番号	博甲第953号
学位授与の日付	令和2年3月25日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当
研究科・専攻	工芸科学研究科 設計工学専攻
学位論文題目	Phase-field study on polycrystalline grain growth (Phase-field法による多結晶粒成長の研究)
審査委員	(主査)教授 高木知弘 教授 荒木栄敏 教授 森田辰郎

論文内容の要旨

多結晶材料の熱処理過程で生じる結晶粒成長は、最終的な材料組織・特性を決定付ける最も重要な冶金学的現象の一つである。これまで、粒成長の系統的な評価と予測を可能とするため、多くの数値的アプローチがなされてきた。とりわけ **phase-field (PF)** モデルは、粒界位置を追従することなく複雑な組織発展を記述できるため、粒成長研究のための最も有力な数理モデルとして広く用いられている。しかしながら、他の多くの数理モデルと同様、従来の PF モデルには (1) 粒界物性異方性を導入した際の計算精度の低下、(2) 取り扱える時空間スケールの限界による統計的不確かさ、(3) 入力パラメータである粒界物性値の情報不足、の3点が未解決課題として残っており、シミュレーションによる組織予測と現象解明にあたり大きな障害となっている。以上の背景の下、本学位論文では、PF モデルの精度・計算規模・物性値の問題を統一的に解決して粒成長の高精度予測を実現するとともに、同現象の未解明の諸相を明らかとすることを目的とした。

第2章および第3章では、粒界物性(エネルギーおよびモビリティ)の強い異方性を伴う PF 粒成長シミュレーションの精度評価・向上を試みた。このためにまず、粒界多重点の寄与を表現する高次項を PF モデルに導入し、その係数の最適値を決定する方法を構築した。さらに、既存の各種 PF モデルと計算アルゴリズムのすべてに対して精度評価を行い、Steinbach らのモデルに収束計算を導入した計算法が最も高精度であることを示した。これにより、粒界エネルギーの最小・最大比 1:5 程度の強い異方性領域においても、誤差約 10% の精度で粒成長シミュレーションが可能であることが明らかとなった。

次に、第4章では、粒成長予測の統計的信頼性を向上させるため、複数の **graphics processing unit** による並列 PF 計算コードを開発し、ほぼ任意の規模での粒成長シミュレーションを可能とした。さらに、同コードとスーパーコンピュータを用いた超大規模シミュレーションを通じて、理想粒成長の真の定常挙動の観察に初めて成功し、定常時の粒径分布・粒成長キネティクスが古典的な Hillert 理論による予測から大きく乖離することを明らかとした。また、大規模計算結果を基に理想粒成長の解析的記述にも取り組み、定常組織・キネティクスの包括的理論モデルの構築、断面観察から3次元組織を推定する立体解析法の開発、薄膜粒成長のスケールリング則の発見などの成果を得た。

第 5 章では、簡便な異方性モデルにより方位差依存の粒界エネルギーとモビリティを PF モデルへ導入し、異方性の強さ（高角粒界閾値）を系統的に変化させて大規模粒成長シミュレーションを実施することで、異方性粒成長の統計評価を行った。その結果、方位差依存物性の下での粒成長は、異方性の強弱によらず定常状態へと達することが明らかとなった。また、定常状態における粒成長挙動は、高角粒界閾値およそ $15^\circ \sim 30^\circ$ を遷移区間として、等方性とみなしうる範囲と異方性の影響が顕在化する範囲に整理できることを示した。

最後に、第 6 章では、粒界物性取得法の構築に向けた最初のステップとして、分子動力学シミュレーションにより生成された原子配列情報を PF モデルの拡散界面プロファイルへと落とし込む組織変換手法を開発した。これにより、原子論的シミュレーションと連続体シミュレーションの直接比較を通じて粒界物性を抽出するための基本的枠組が確立された。さらに、この変換手法を用いることで、核生成プロセスを表現できる分子動力学、高効率な計算が可能な PF の両メリットを相補的に活用して凝固から粒成長後期までを一貫的に予測する、新しいブリッジング・シミュレーションを可能とした。

第 7 章は、結論として、これまでの総括と今後の展望について記載している。

論文審査の結果の要旨

本論文では、金属材料の最終組織を決定する重要な冶金学的現象である粒成長に着目し、粒成長を高精度に再現する数値計算法の確立と、それを用いた粒成長における未解明現象を明らかにすることを目的として研究が行われた。研究手法としては、メゾスケール材料組織予測法として最も強力なフェーズフィールド法と、高性能計算を可能とする GPU (graphics processing unit) を多数搭載したスパコンによる GPU 並列計算法が用いられている。フェーズフィールド法を用いた粒成長計算の以下の 3 つの課題を挙げ、これらを解決するように研究が進められている。課題①：フェーズフィールドモデルの精度不十分，課題②：計算スケールの制限，課題③：粒界物性値情報の不足。

課題①の解決のために、マルチフェーズフィールドモデルに高次項を導入し、その係数を最適化する手法を提案した。さらに、複数の粒成長フェーズフィールドモデルの精度評価を行い、最も精度の高い手法を示した。次に、課題②の解決のために、演算性能の高い GPU を多数搭載したスパコンによる並列計算を可能とした。最後の課題③を解決するために、分子動力学シミュレーション結果をフェーズフィールドシミュレーションに受け渡す、新しいブリッジング法を構築した。課題③では、具体的な物性値取得まではたどり着けていないが、その基礎となる手法の構築を完了している。以上の構築した手法を用いて、数百万粒を有する世界最大の超大規模理想粒成長計算を行い、統計的に正しい定常成長挙動を初めて示した。また、同結果を用いることで 2 次元断面と 3 次元組織の相互関係を明確化した。さらに、分子動力学法の超大規模計算結果を引き継ぎ、フェーズフィールド法によって粒成長計算を行う、新しいブリッジング・シミュレーションを初めて行った。

以上のように、本論文では、学術的かつ工学的に重要な研究課題が明確に設定され、先行研究の十分な調査と文献引用によって本研究の位置づけおよび課題が明確化されている。さらに、研究の方法は目的を達成するために適切である。本研究で達成された粒成長計算法の確立とそれを

用いた研究成果は、学術的かつ工学的に極めて有用な結果であり、論文の体裁も学位論文として適切である。このため、本論文は学位論文として適切であると判断する。

以下に本学位論文の内容に関連する8編の公表論文を示す。

1. Eisuke Miyoshi, Tomohiro Takaki, Validation of a novel higher-order multi-phase-field model for grain-growth simulations using anisotropic grain-boundary properties, *Computational Materials Science*, Vol. 112, pp. 44-51, 2016.
2. Eisuke Miyoshi, Tomohiro Takaki, Extended higher-order multi-phase-field model for three-dimensional anisotropic-grain-growth simulations, *Computational Materials Science*, Vol. 120, pp. 77-83, 2016.
3. Eisuke Miyoshi, Tomohiro Takaki, Multi-phase-field study of the effects of anisotropic grain-boundary properties on polycrystalline grain growth, *Journal of Crystal Growth*, Vol. 474, pp. 160-165, 2017.
4. Eisuke Miyoshi, Tomohiro Takaki, Munekazu Ohno, Yasushi Shibuta, Shinji Sakane, Takashi Shimokawabe and Takayuki Aoki, Ultra-large-scale phase-field simulation study of ideal grain growth, *npj Computational Materials*, Vol. 3, Article ID 25, 2017.
5. Eisuke Miyoshi, Tomohiro Takaki, Munekazu Ohno, Yasushi Shibuta, Shinji Sakane, Takashi Shimokawabe and Takayuki Aoki, Correlation between three-dimensional and cross-sectional characteristics of ideal grain growth: large-scale phase-field simulation study, *Journal of Materials Science*, Vol. 53, pp. 15165-15180, 2018.
6. Eisuke Miyoshi, Tomohiro Takaki, Yasushi Shibuta, Munekazu Ohno, Bridging molecular dynamics and phase-field methods for grain growth prediction, *Computational Materials Science*, Vol. 152, pp. 118-124, 2018.
7. Eisuke Miyoshi, Tomohiro Takaki, Munekazu Ohno, Yasushi Shibuta, Shinji Sakane and Takayuki Aoki, Large-scale phase-field simulation of three-dimensional isotropic grain growth in polycrystalline thin films, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol. 27, Article ID 054003, 2019.
8. Eisuke MIYOSHI, Tomohiro TAKAKI, Munekazu OHNO and Yasushi SHIBUTA, Accuracy Evaluation of Phase-field Models for Grain Growth Simulation with Anisotropic Grain Boundary Properties, *ISIJ International*, Vol. 60, pp. 160-167, 2020.