

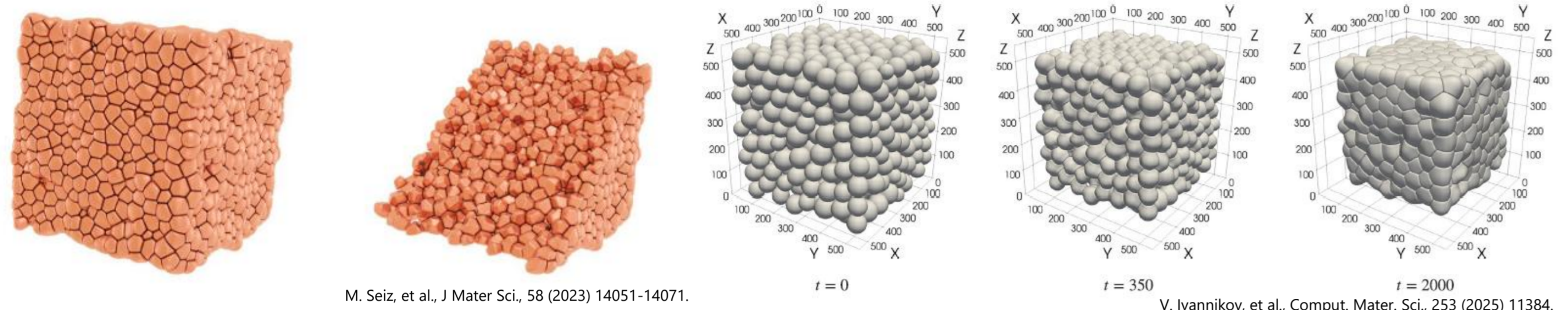
# 革新的焼結組織予測phase-fieldモデル開発と 高性能シミュレーションによる欠陥形成メカニズム解明

○中澤葵<sup>1</sup>, 青木尊之<sup>1,2,\*</sup>, Marco Seiz<sup>1</sup>, 高木 知弘<sup>1,\*</sup>

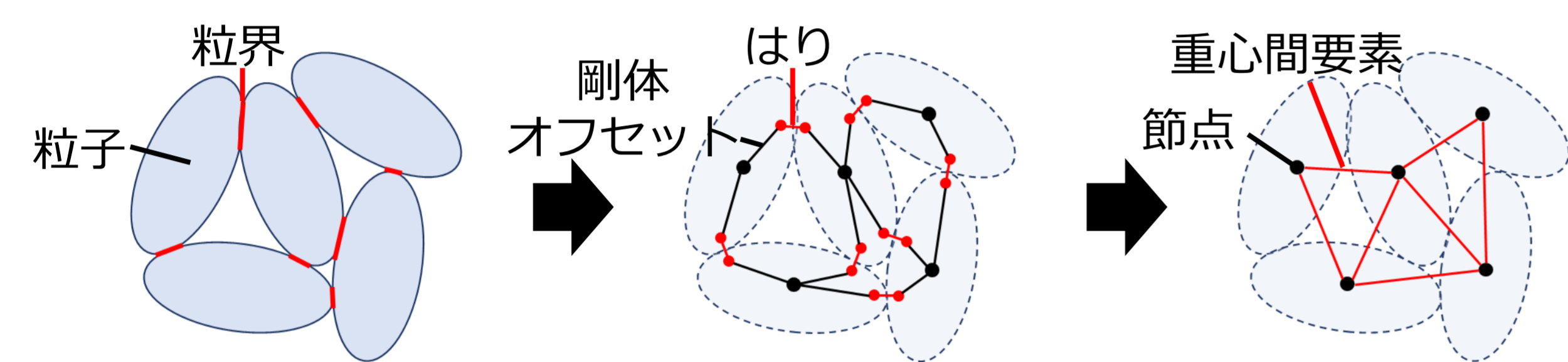
<sup>1</sup> 京都工芸繊維大学  
<sup>2</sup> 東京科学大学

\* 課題代表者  
\*\* 課題副代表者

**■ 緒言** 焼結体の特性は焼結時に形成される材料組織の形態によって決定されるため、高性能な焼結体の作成にはその高精度な予測が必要である。**Phase-field(PF)法**は、材料組織の発展を最も高精度に再現する数値モデルである。しかしながら、PF法による従来の焼結シミュレーションでは、精度と計算コストに課題を抱えており、粒子間の剛体運動を高精度に再現しつつ、数万粒子を用いたシミュレーションを可能とするモデルは存在しない。本研究では、粒界における粒子の離脱および粒界滑りを許容する、焼結中の粒子の剛体運動を低コストかつ高精度に再現可能な**はり要素に基づく剛体運動モデル**を開発した。また開発したモデルを用いて数千から数万粒子を用いたシミュレーションを行い、焼結中のき裂進展や焼結体の変形を再現することに成功した。



## ■ はり要素による粒子間剛体運動モデリング



### ● 重心間要素の剛性方程式

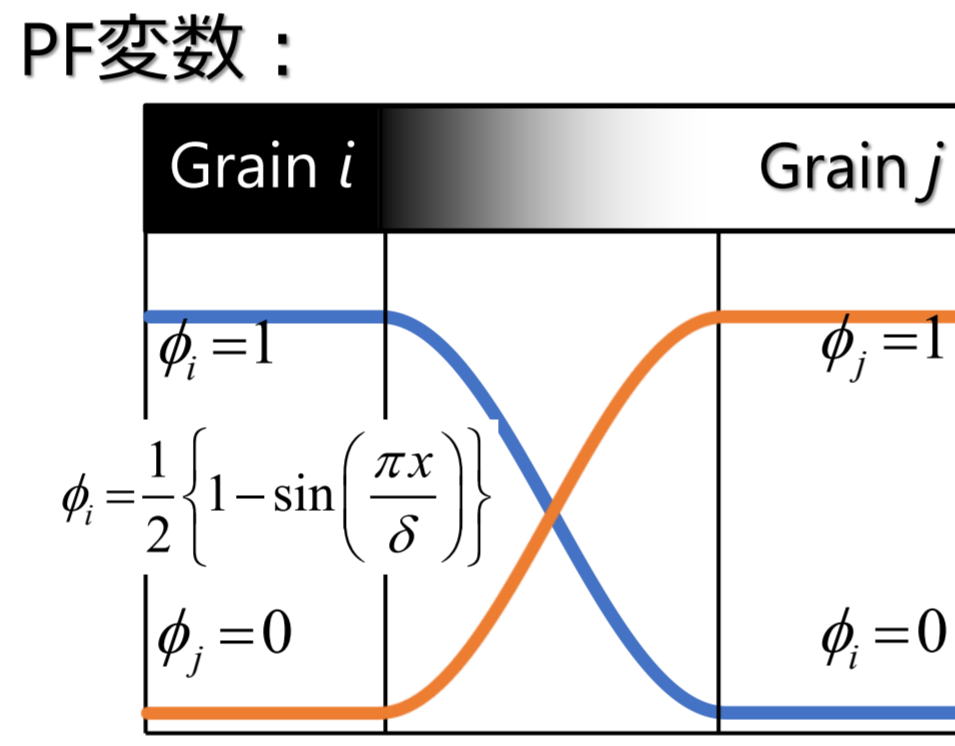
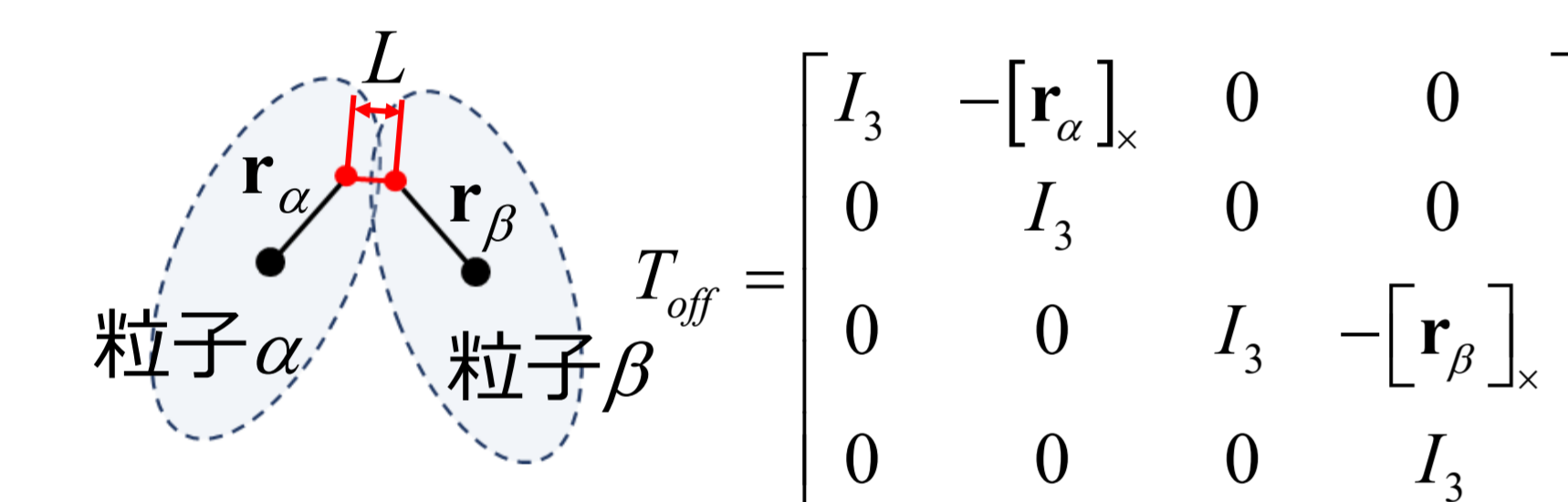
$$\mathbf{P} = \mathbf{K}' \mathbf{U} \quad \mathbf{P} = \left\{ \mathbf{F}_\alpha \mathbf{M}_\alpha \mathbf{F}_\beta \mathbf{M}_\beta \right\}^T \quad \mathbf{U} = \left\{ \mathbf{u}_\alpha \theta_\alpha \mathbf{u}_\beta \theta_\beta \right\}^T \quad \mathbf{K}' = \mathbf{T}_{off}^T \mathbf{T}^T \mathbf{K} \mathbf{T} \mathbf{T}_{off}$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}_{ax(u_\alpha, u_\beta)} + \mathbf{K}_{tor(\theta_\alpha, \theta_\beta)} + \mathbf{K}_{sh(v_\alpha, \theta_\alpha, v_\beta, \theta_\beta)} + \mathbf{K}_{sh(w_\alpha, \theta_\alpha, w_\beta, \theta_\beta)}$$

引張・圧縮   ねじり                      曲げ・せん断

$$\mathbf{K}_{ax} = \frac{EA}{L} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{K}_{sh} = \frac{EI}{L^3(1+\phi)} \begin{bmatrix} 12 & 6L & -12 & 6L \\ 6L & (4+\phi)L^2 & -6L & (2-\phi)L^2 \\ -12 & -6L & 12 & -6L \\ 6L & (2-\phi)L^2 & -6L & (4+\phi)L^2 \end{bmatrix}$$

### ● 剛体オフセット変換マトリクス



**● 各粒界における固有ひずみ**

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\alpha\beta}^0 = \{-d_{\alpha\beta} \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0\}^T \quad \mathbf{f}_{\alpha\beta}^0 = \mathbf{T}_{off}^T \mathbf{T}^T \int_0^L \mathbf{B}^T \mathbf{D} \boldsymbol{\varepsilon}_{\alpha\beta}^0 dx$$

$$d_{\alpha\beta} = 0.125 \delta \int_{GB} \phi_\alpha \phi_\beta \Omega \delta n dV / V_{\alpha\beta} \quad V_{\alpha\beta} = \int_{GB} \phi_\alpha \phi_\beta dV$$

**● Multi-phase-field 方程式**

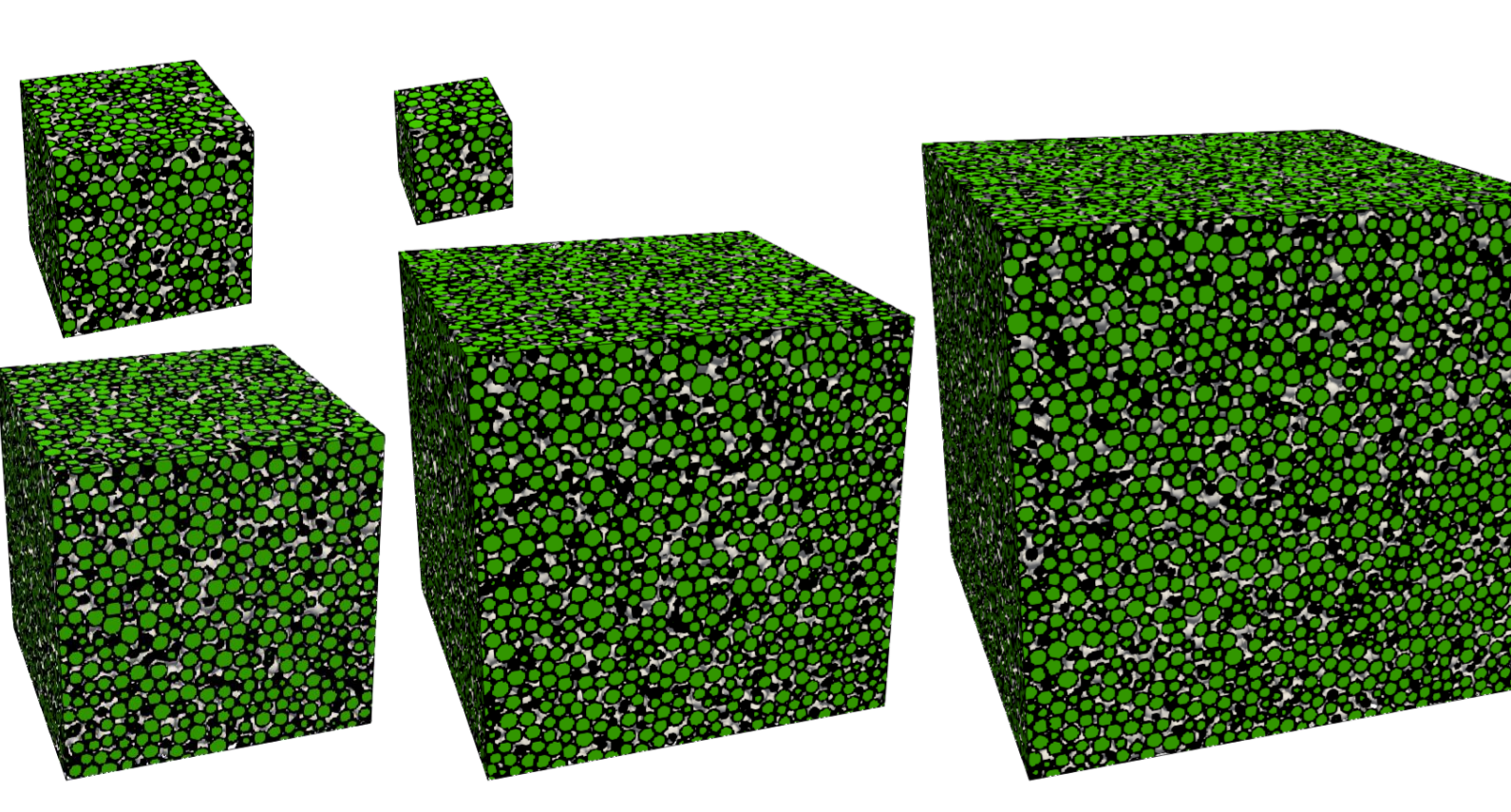
$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_i \mathbf{v}_i) = -\frac{2}{n} \sum_{j=0}^n M_{ij}^\phi \left[ \sum_{k=1}^n \left\{ (W_{ik} - W_{jk}) \phi_k + \frac{1}{2} (a_{ik}^2 - a_{jk}^2) \nabla^2 \phi_k \right\} + \frac{1}{2} k_s (c - c_s^{eq})^2 - \frac{1}{2} k_v (c - c_v^{eq})^2 - (c_s - c_v) \mu \right]$$

**● 移流-拡散方程式**

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot \{(1-c) \mathbf{v}\} = \nabla \cdot \{D \phi_s \nabla c_s + D \phi_v \nabla c_v\}$$

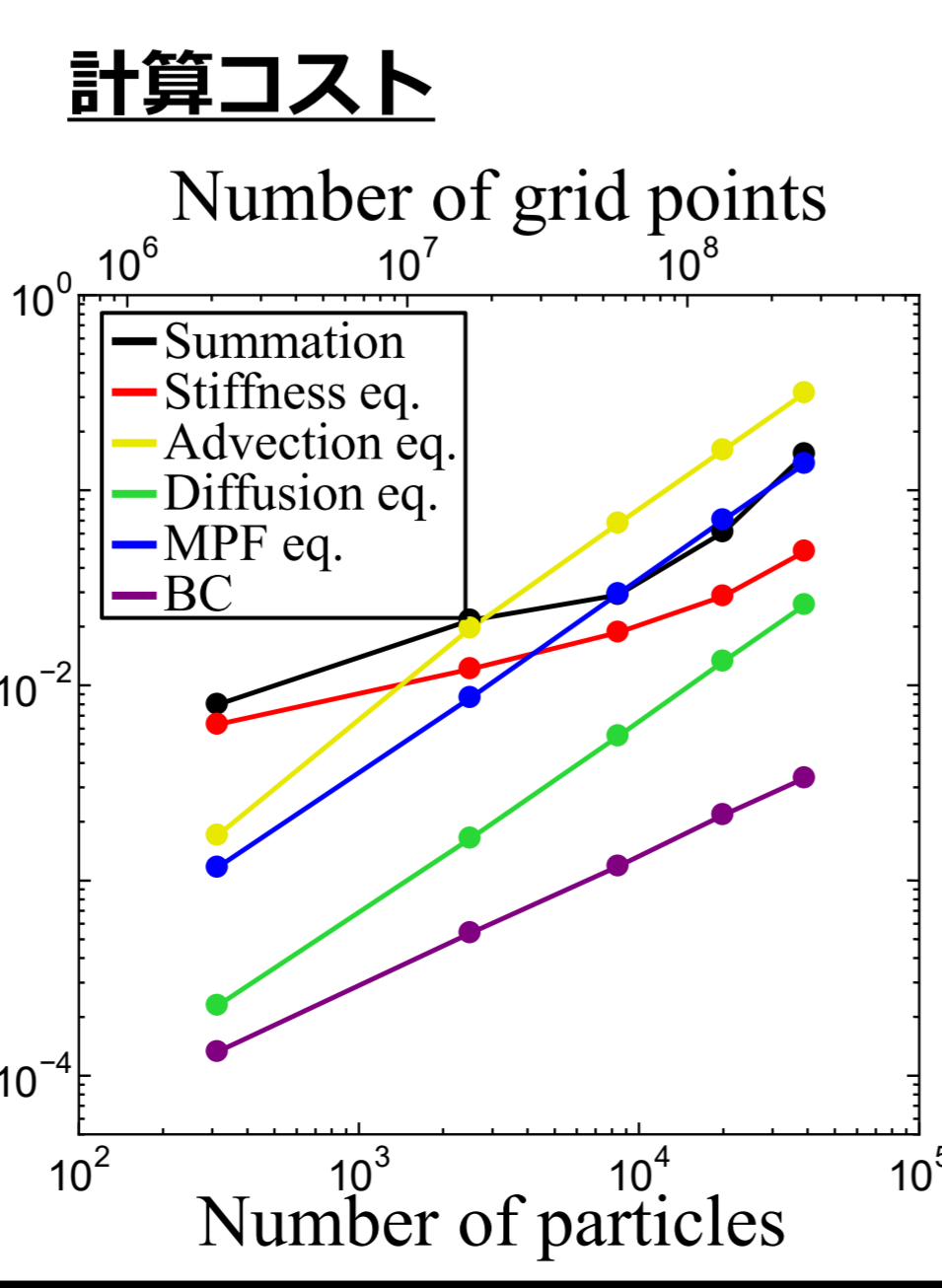
粒界の収縮  
粒成長  
空孔拡散

## ■ 計算コスト評価

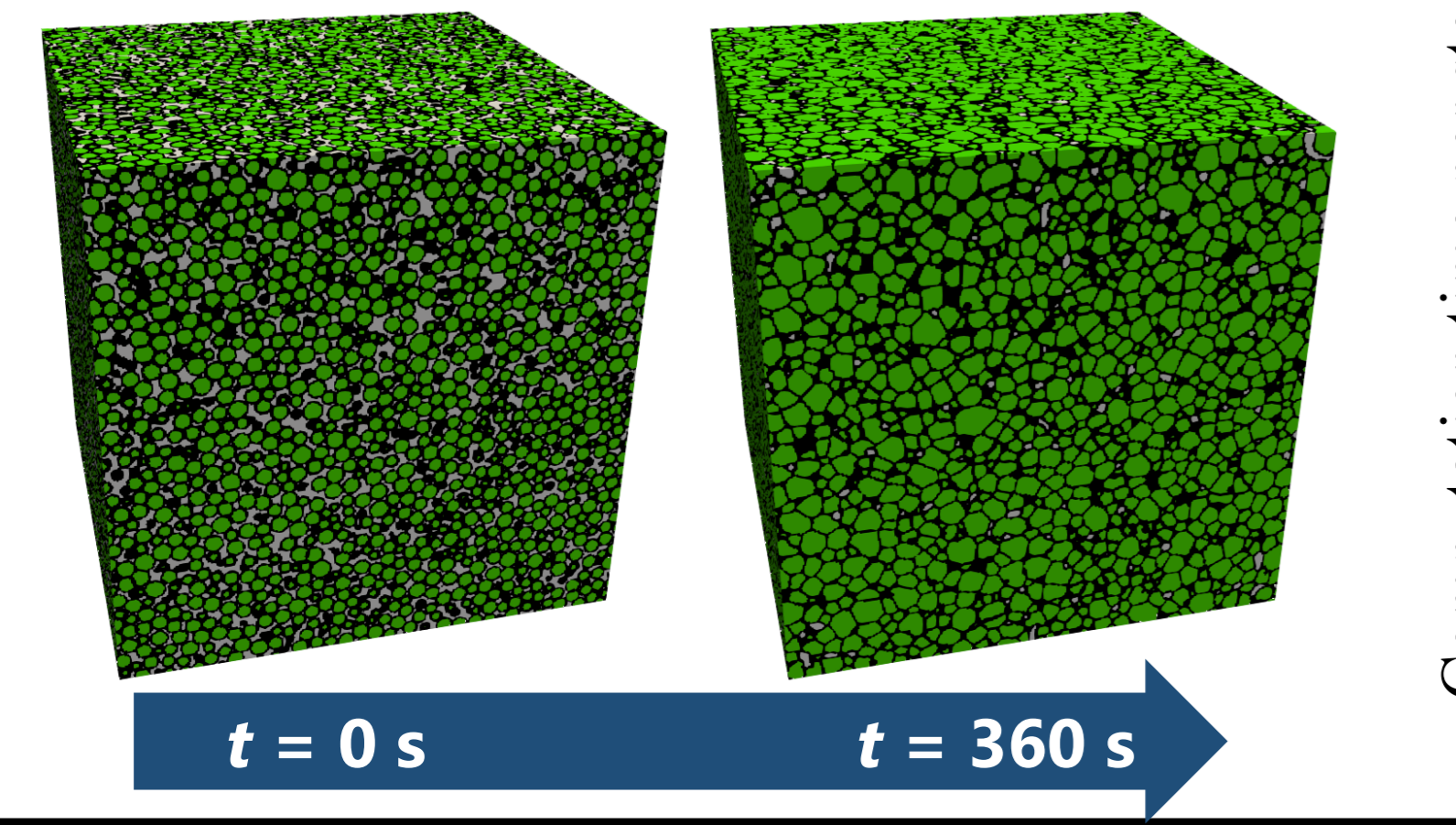


**● NVIDIA H100**

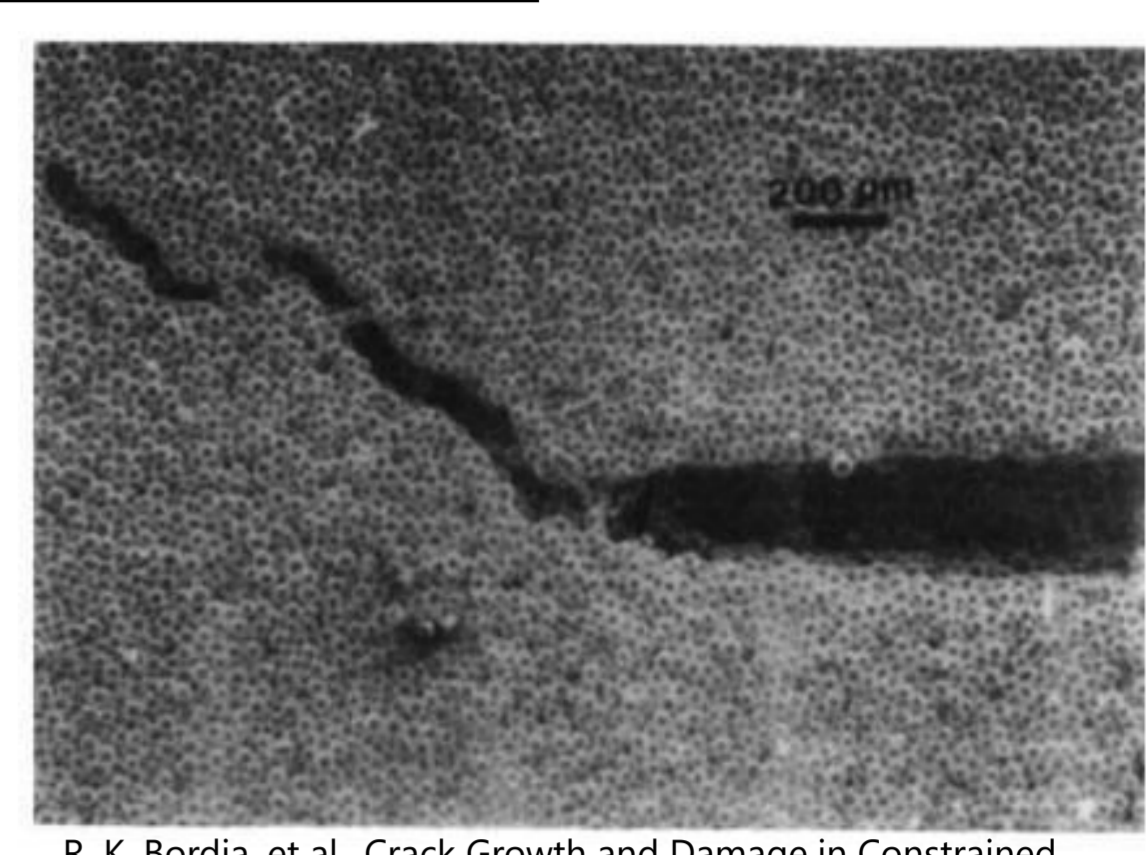
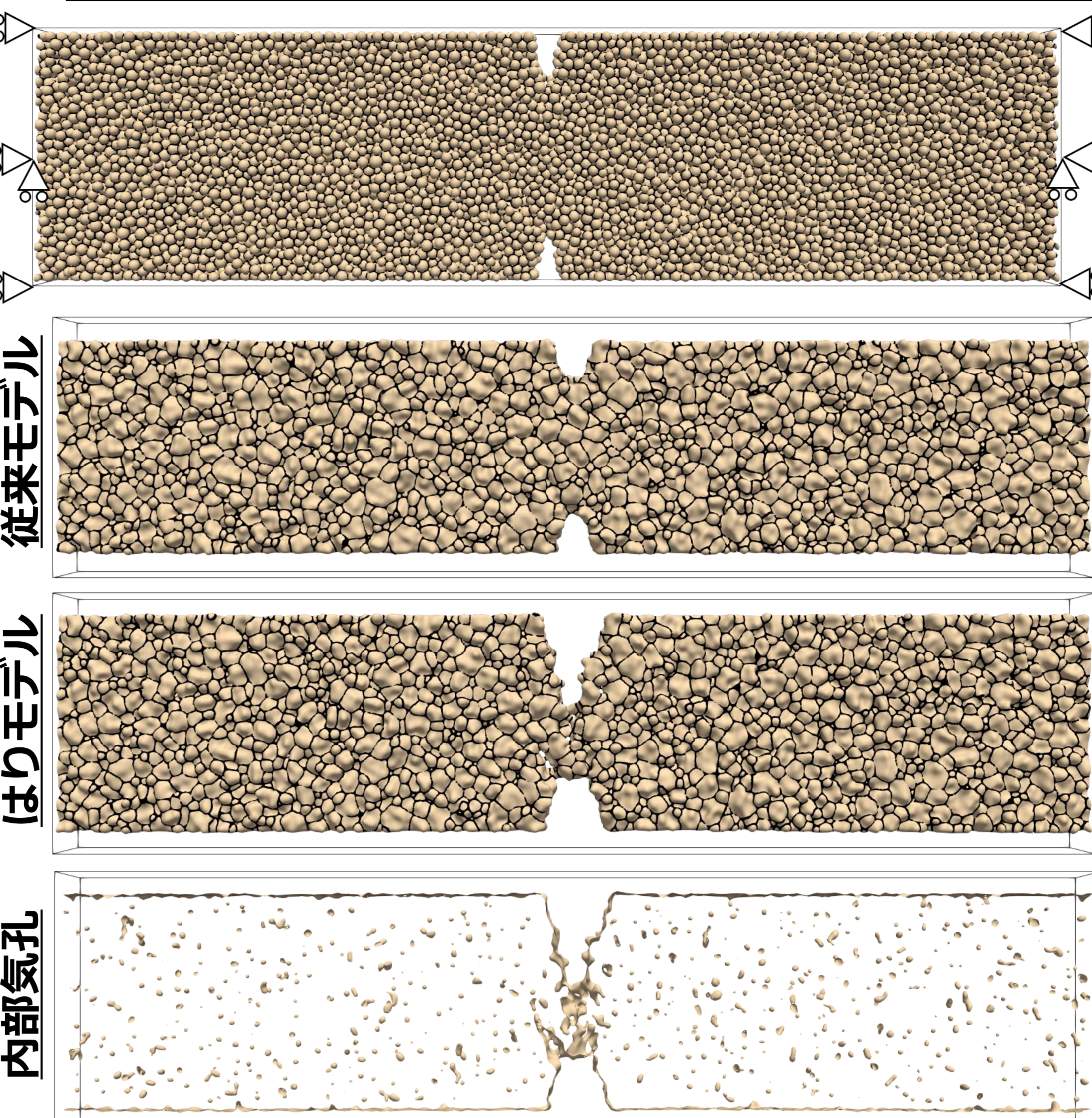
計算領域: 128<sup>3</sup>~640<sup>3</sup> Δx<sup>3</sup>  
粒子数: 313~39,063 粒子  
平均粒径: 0.72 μm  
平均粒径: 0.72 μm  
計算ステップ: 3.6 × 10<sup>5</sup>  
計算機: NVIDIA H100×1



### ● 焼結による組織変化



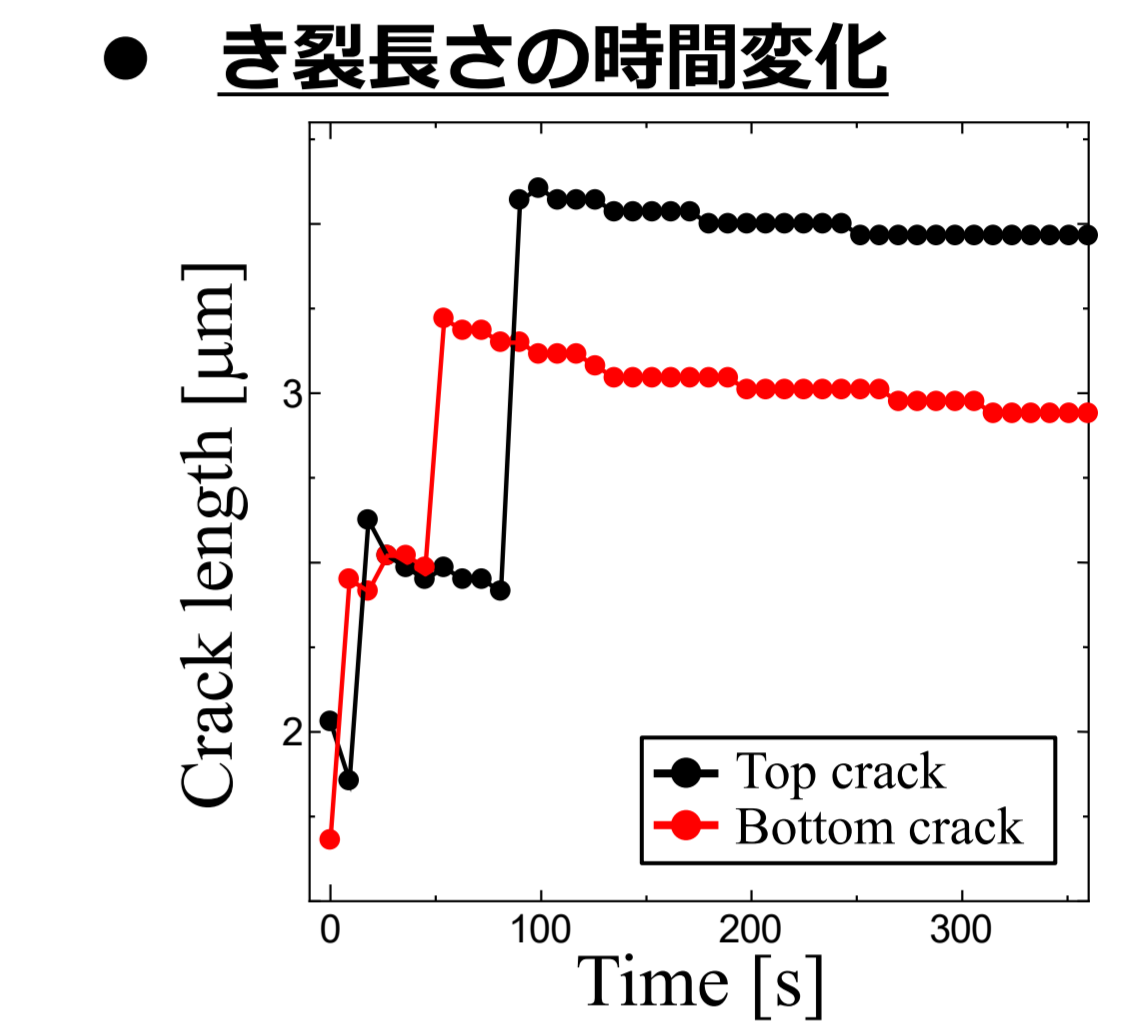
## ■ 拘束焼結における切欠起点のき裂進展シミュレーション



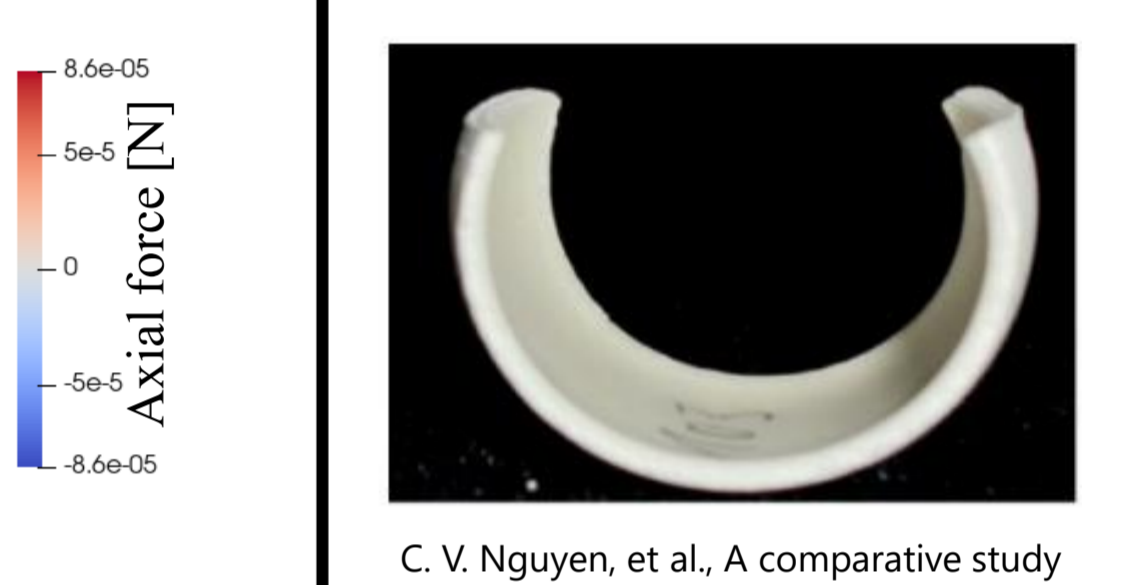
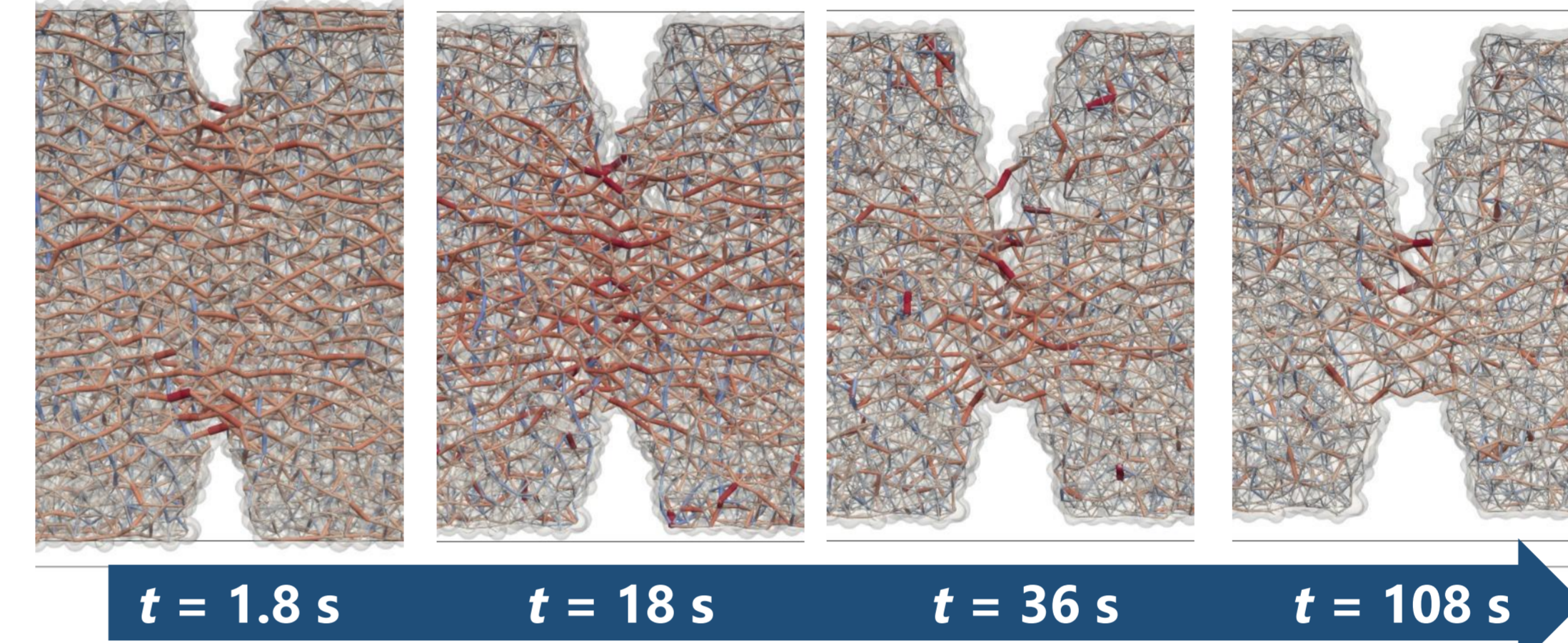
R. K. Bordia, et al., Crack Growth and Damage in Constrained Sintering Films, J. Am. Ceram. Soc., 76 10 (1993) 2475-85

**● 計算条件**

計算領域 : 2048 × 512 × 96 Δx  
格子サイズ : Δx = 35 nm  
時間増分 : Δt = 1 ms  
粒子数 : 10,723粒子  
平均粒径 : 0.72 μm  
計算ステップ : 3.6 × 10<sup>5</sup>

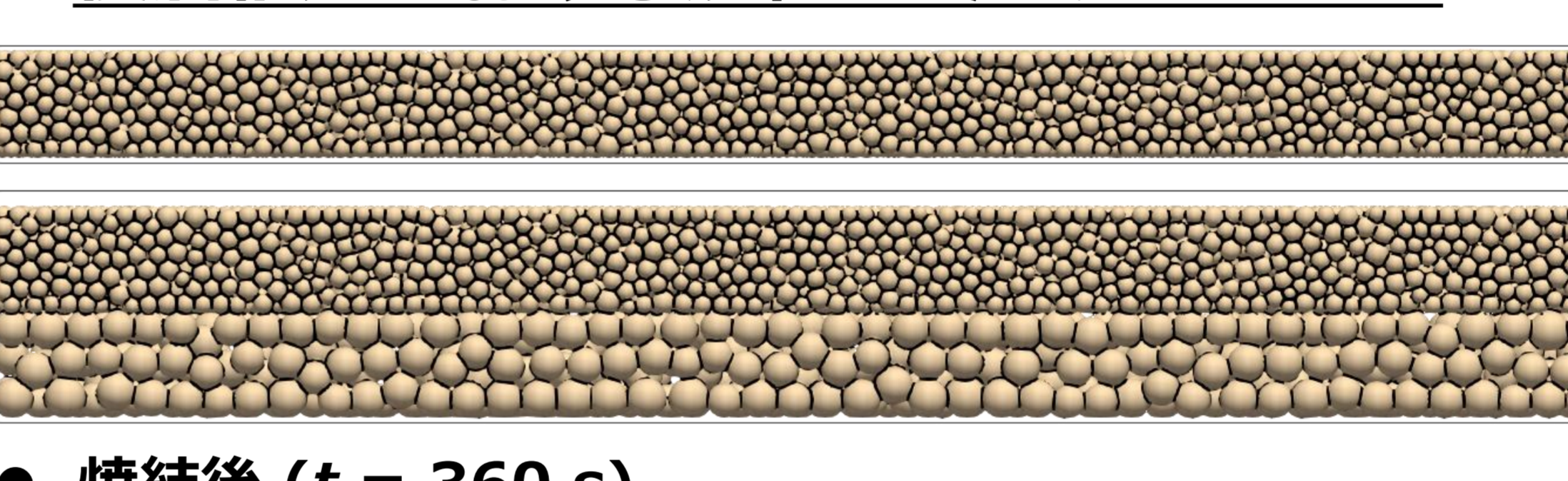


### ● 各要素の軸力



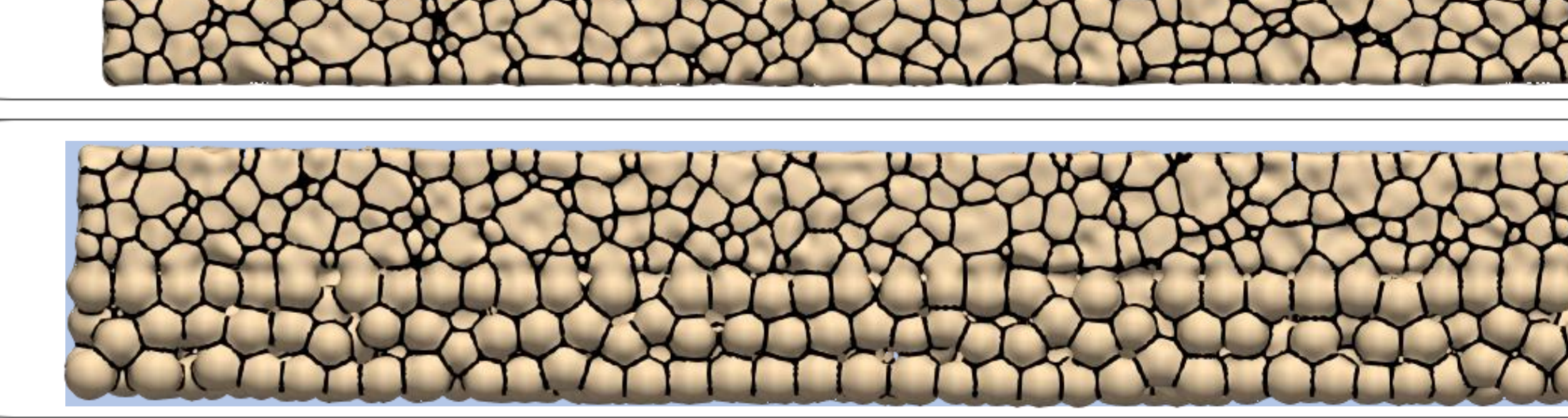
C. V. Nguyen, et al., A comparative study of different sintering models for Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, J. Ceram. Soc. Jpn., 124 (2016) 301-312

## ■ 積層構造における焼結シミュレーション

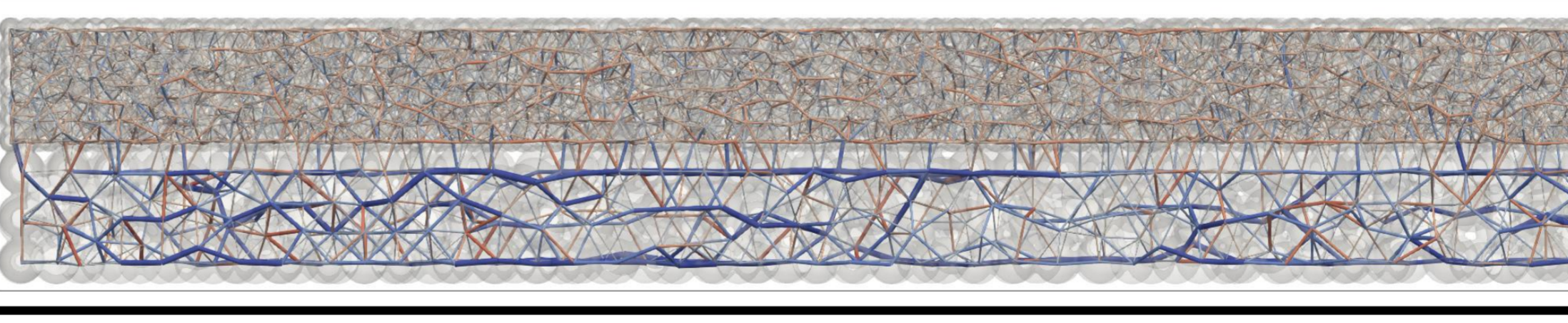


計算領域 : 2048 × 128 × 256 Δx  
粒子数 : 4725粒子  
平均粒径 : 0.72 μm, 1.44 μm  
計算ステップ : 3.6 × 10<sup>5</sup>

### ● 焼結後 (t = 360 s)

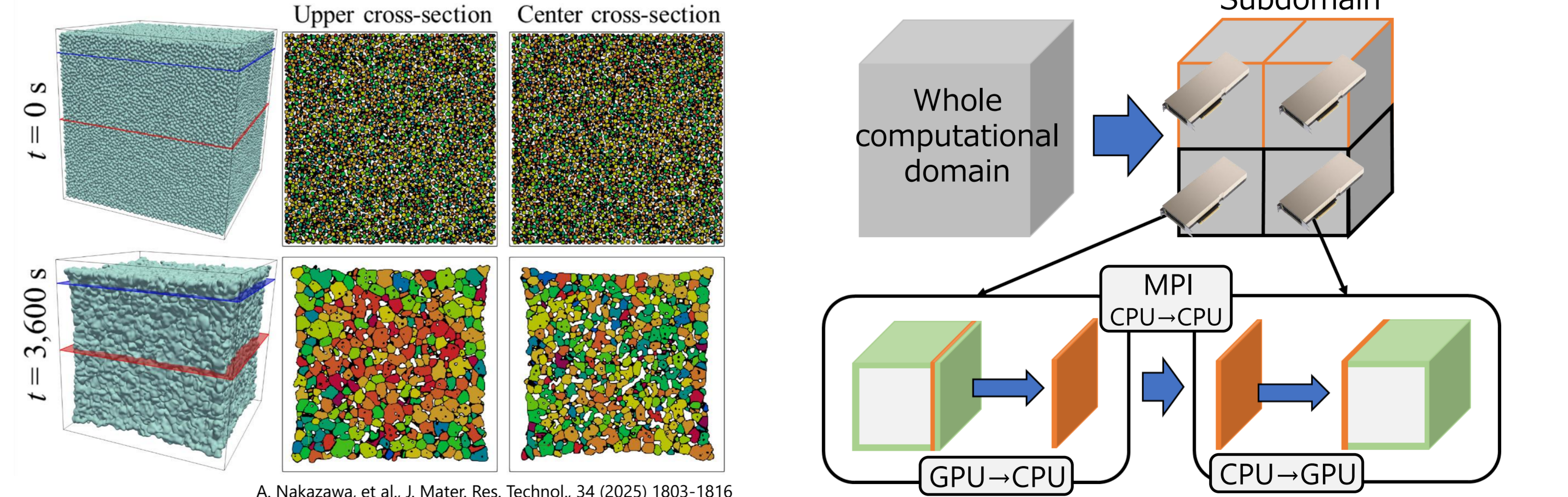


### ● 各要素の軸力 (t = 1.8s)

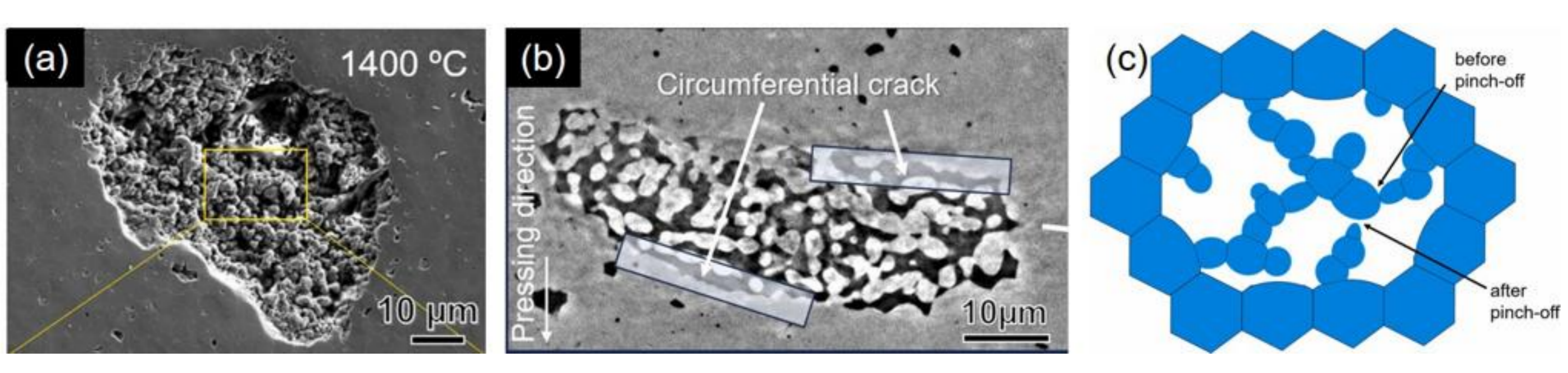


## ■ 今後の研究計画

### 第2四半期 焼結PFモデルのGPU並列大規模計算法の開発



### 第3四半期 複雑孔の生成メカニズム解明に向けた大規模シミュレーション



G. Okuma, et al., J. Eur. Ceram. Soc., 45 16 (2025) 117679