

jh160038-NAH

フェーズフィールド法と分子動力学法による大規模粒成長シミュレーション

高木 知弘 (京都工芸繊維大学)

粒成長問題は、メゾスケールの材料組織を制御する最も重要な冶金学現象の一つであり、これまで多くの研究が行われてきた。しかしながら、不透明な高温の材料中で生じる現象であるため観察が困難であり、かつ統計的評価を行うためには多くの結晶粒を取り扱う必要がありコンピュータシミュレーションも容易ではなく、未だに未解明な点が多い。本研究では、フェーズフィールド(PF)法と分子動力学(MD)法の大規模 GPU 並列計算による粒成長現象の解明を目的として研究を行った。PF 法に関しては、複数の PF 変数を用いるマルチフェーズフィールド(MPF)法の世界最大の超大規模理想粒成長シミュレーションに成功し、理想粒成長の統計的挙動を明らかにした。また、MD 法では、10 億原子の純金属過冷却融液からの均質核生成から粒成長に至る一連の組織形成に成功した。さらに、1 億原子を用いた長時間の粒成長シミュレーションを行った。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

東京工業大学

(2) 共同研究分野

- 超大規模数値計算系応用分野
- 超大規模データ処理系応用分野
- 超大容量ネットワーク技術分野
- 超大規模情報システム関連研究分野

(3) 参加研究者の役割分担

高木 知弘 (京都工芸繊維大学・機械工学系)
研究全体の総轄, GPU 並列コーディング, 大規模フェーズフィールド計算実行, データ処理&考察, 論文執筆

青木 尊之 (東京工業大学・学術国際情報センター)

大規模 GPU 計算の総轄, 並列 GPU コードのチューニング

大野 宗一 (北海道大学・大学院工学研究院)
定量的フェーズフィールドモデル構築, データ整理&考察, 論文執筆

澁田 靖 (東京大学・大学院工学系研究科)
大規模分子力学計算の実行, 大規模分子力学計算データ整理&考察, 論文執筆

下川辺 隆史 (東京工業大学・学術国際情報センター)

並列 GPU コードのチューニング, 大規模データ処理&可視化サポート

坂根 慎治 (京都工芸繊維大学・工芸科学研究科)

GPU 並列コーディング, データ処理用コードの作成

三好 英輔 (京都工芸繊維大学・工芸科学研究科)

大規模フェーズフィールド計算実行, フェーズフィールド計算データ処理&考察, 論文執筆

大喜多 慎 (東京大学・大学院工学系研究科)
大規模分子動力学計算の実行, 分子動力学計算データ処理&考察, 論文執筆

2. 研究の目的と意義

材料開発において、メゾスケールにおける材料組織を高精度に予測および制御することが、製品の軽量化や高性能化の鍵である。このためには、従来の試行錯誤による実験的手法ではなく、材料開発を加速させるための系統的な評価を可能とする数値シミュレーションが不可欠である。フェーズフィールド(phase-field : PF)法は、メゾスケール材料組織の定量的な予測を可能とする唯一の数値モデルであるが、拡散界面モデルを用いているため対象とできる領域が小さいことが課題である。このため、大規模シミュレーション技術の開発が急務である。

これまでの研究において、東京工業大学のスパコン TSUBAME を用いた並列 Graphics Processing Unit (GPU)計算により、二元合金一方向凝固の大規模 PF シミュレーションを可能とし、デンドライト競合成長に関する多くの知見を得た（平成 25～27 年度 JHPCN 共同研究）。また、分子動力学(molecular dynamics : MD)法の GPU 計算により、過冷却液相からの自発的均質核生成と凝固、またそれに引き続く粒成長の一連の組織形成過程の表現に成功した。更に、MD の並列 GPU 計算を可能とし、大規模計算を行うことで、新しい均質核生成現象を発見した（平成 27 年度 JHPCN 共同研究）。これらの成果は、国内外で高い評価を得ている。

本研究では、これまでの研究を発展させ、凝固に引き続いて生じる粒成長(grain growth)をターゲットとする。粒成長は、粒界物性(粒界エネルギーとモビリティの方位差依存性)に強く依存し、材料組織が変化する。しかしながら、これらの粒界物性を実験観察から取得することは困難である。また、実際の粒成長現象の詳細は、バルク材のその場観察が困難なことから、明らかにされていない。本研究では、大規模 MD 計算による粒成長現象の解明と、マルチフェーズフィールド(multi-phase-field : MPF)法による粒成長計算の高精度化を目指す。具体的には、大規模 MD 粒成長計算を行い、粒成長現象を詳細に考察し解明する。また、複数 GPU 並列 MPF コードを新規に開発し、理想粒成長の超大規模計算を行い、従来の粒成長理論の妥当性を検証する。さらに、MD 計算と同じ条件での MPF 粒成長計算を行い、両結果を比較することで、従来の MPF 計算の問題点を洗い出し、MPF モデルの高精度化を目指す。

金属材料は、電子・原子のナノスケールから、実際の製品のマクロスケールまでの階層構造を有しており、各スケールにおいて様々な数値モデルが用いられている。複数のスケ

ールをシームレスに繋ぐマルチスケールモデルに関する研究が古くから行われているが、このようなマルチスケールモデルの構築は極めて困難である。一方、申請者らのこれまでの大規模 MD 計算の成果より、MD によるメゾスケール領域における組織予測の可能性が見えている。この大規模 MD 計算を体系的に行うことで、材料組織形成に必要な物理を抽出し、これを上位スケールの PF 計算の高精度化のための情報として利用する、新しい方法論の確立は学術的に極めて意義深い。本研究は、そのような新しい方法論を確立するための基礎研究である。また、材料開発の新しい潮流であるマテリアルズ・インフォマティクスの基盤を構築する研究でもあり、社会的にも重要である。

3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

これまでの研究成果より、GPU の利用によって PF 計算と MD 計算の極めて良好な高速化を達成可能であることを示した。また、両手法の複数 GPU 並列大規模計算によって、世界的にまだどのグループも達成できない時空スケールにおける材料組織形成シミュレーションが可能であることを示した。このため、本研究を発展させることは、計算材料科学の更なる発展に大きく寄与し、また日本の研究力を世界に示すことができる。この研究は複数 GPU を用いた大規模計算によって初めて達成できるため、GPU スパコン TSUBAME の利用が不可欠である。加えて、本研究グループは、PF 法（高木・大野）、MD 法（澁田）、材料学（高木・大野・澁田）、大規模計算（青木・下川辺）の各分野を牽引する研究者によって構成され、本共同研究を行うことで日本発の世界一の研究が可能となる。このように、世界一の研究を確実に遂行するという点において、本研究を本公募研究として実施する意義は極めて大きい。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

本一連の研究は、平成 23 年のゴードンベル賞の継続研究であり、本共同研究は平成 25 年度から開始し、今年度で 4 年目となる。平成 25 年度（初年度）は、結果が界面幅に依存しない二元合金凝固問題に対する定量的フェーズフィールドモデルを GPU 実装し、TSUBAME による大規模計算を可能とした。平成 26 年度（2 年目）は、コードのチューニングを行いフェーズフィールド法による本格的な大規模計算に着手した。平成 27 年度（3 年目）は、PF 法の大規模計算に加え、MD の大規模計算研究にも着手した。これまでに得られた主な成果は以下の通りである。

4.1 2 次元二結晶競合成長シミュレーション

図 1 に示すような Al-Cu 二元合金の一方方向凝固過程における二結晶競合成長シミュレーションを行い、熱流方向（y 方向）から傾いて成長する UO (unfavorably oriented) デンドライトが、熱流方向に成長する FO (favorably oriented) デンドライトを淘汰する新しい淘汰現象のメカニズムを解明した[Acta Mater. 81 (2014) 272-283, JOM 67 (2015) 1793-1804, JOM 67 (2015) 1793-1804]。この計算は 2 次元ではあるが、通常の CPU 計算では空間・時間とも困難な計算であり、TSUBAME の利用により効率的に結果を出すことができた。

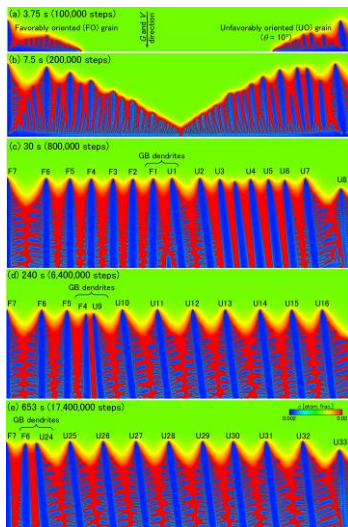


Fig. 1 Two-dimensional bicrystal dendrite competitive growth simulation. [JOM 67 (2015) 1793-1804]

4.2 3 次元二結晶競合成長シミュレーション

図 2 は、3 次元二結晶競合成長シミュレーションの結果である [ISIJ Int. 56 (2016) 1427-1435]。図 1 に示す 2 次元計算同様、UO デンドライトの傾きが小さい場合は新しい淘汰現象が確認され、大きい場合は確認できなかった。一方、奥行き方向の粒界位置によって FO と UO の相互作用が異なり、3 次元では粒界がジグザグになることを確認した。これは 2 次元では表現できない現象である。

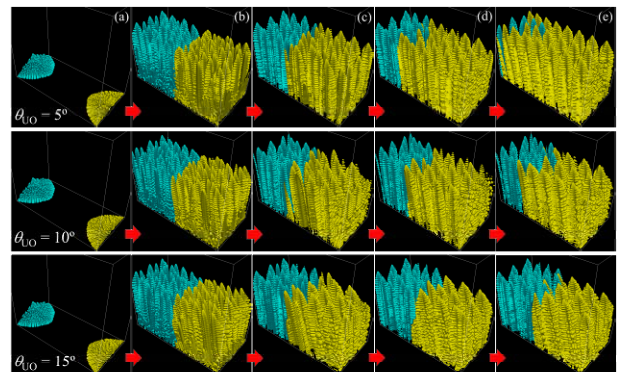


Fig. 2 Three-dimensional bicrystal dendrite competitive growth simulations. [ISIJ Int. 56 (2016) 1427-1435]

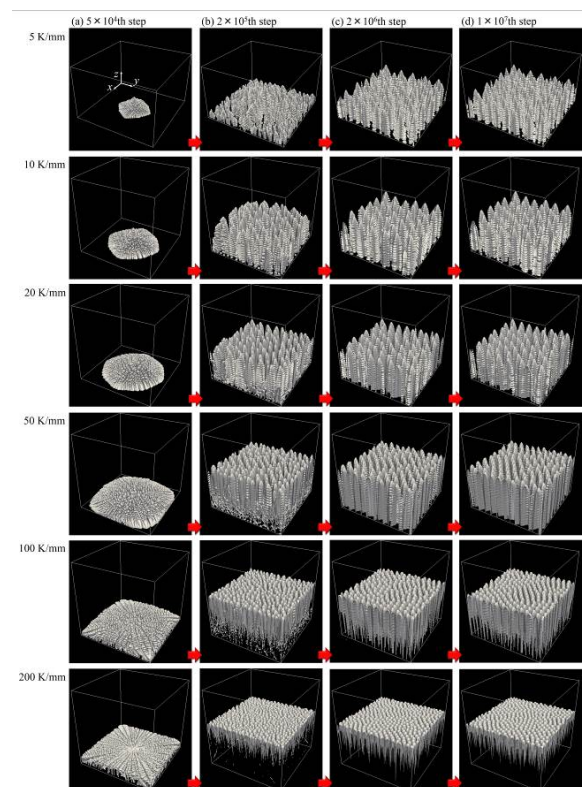


Fig. 3 Three-dimensional dendrite competitive growth simulations in a single-crystal. [Acta Mater. 118 (2016) 230-243]

4.3 3次元単結晶デンドライト配向挙動評価

図 3 は、単結晶二元合金の一方向凝固過程におけるデンドライト競合成長シミュレーションを、温度勾配を 6 通りに変化させて行った結果である [Acta Mater. 118 (2016) 230-243]. このシミュレーションは、温度勾配方向 (z 方向) 垂直断面内のデンドライト配列挙動を解明するために行った. このシミュレーション結果の詳細な考察により、デンドライト&セル形態、いずれも六角形が最も支配的な配列であることを明らかにした.

4.4 多結晶競合成長シミュレーション

図 4 は、多結晶二元合金の一方向凝固過程におけるデンドライト競合成長の 2 次元シミュレーションのスナップショットである [J. Cryst. Growth 442 (2016) 14-24]. 粒の色は、赤から青に変化するにつれて温度勾配方向からの傾きが大きくなる. 図 4 より、温度勾配方向に成長する赤い粒は横方向へ大きくなり難く、傾きの大きな粒は横方向へ大きくなり易いことがわかる. また、傾きの大きな粒もかなり長く成長を続け、従来の競合成長における一般常識を覆す結果を得た. この 3 次元計算も行ったが、現在論文を執筆中である.

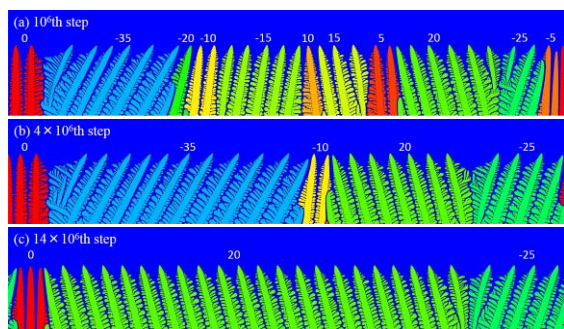


Fig. 4 Two-dimensional dendrite competitive growth simulation in a polycrystal. [J. Cryst. Growth 442 (2016) 14-24]

4.5 単一 GPU による MD シミュレーション

図 5 は、単一 GPU を用いた MD 計算による、純 Fe 過冷却融液からの自発的均質核生成とその後の凝固過程の結果である [Acta Mater. 105 (2016) 328-337]. 詳細な考察の結果、核生成速度は、融液内の 20 面体クラスター

の密度と自己拡散の大きさのバランスによって決定され、それによってある温度において核生成速度が最大となることを明らかにした.

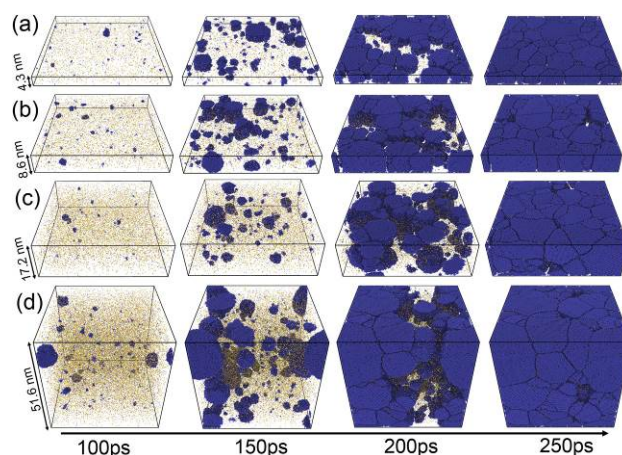


Fig. 5 Effects of system thickness on MD simulations during nucleation and solidification from undercooled pure Fe. [Acta Mater. 105 (2016) 328-337]

また、MD 計算を大規模かつ高速化するため、複数 GPU 並列コーディングを行い、良好な並列性能を確認した. 次いで、10 億原子の超大規模シミュレーションに成功し、融点 T_m に対して $0.58T_m$ と $0.67T_m$ の二つの温度において、2,000 ps の計算を実行した. この規模の計算になると可視化およびデータ処理が困難になる. このため、原子情報を規則格子情報に落とし込む粗視化と、粒方位や隣接粒との方位差などを決定するデータ処理を TSUBAME 上で行うコードも作成した.

5. 今年度の研究成果の詳細

今年度は、昨年度行った超大規模 MD シミュレーションのデータ整理と考察、および論文執筆を行った. また、その 1/10 程度のセルサイズを用いた MD による粒成長計算を行っている. 更に、PF 法による大規模粒成長シミュレーションを行うために、MPF モデルの並列 GPU コーディングを行い、これを用いた超大規模理想粒成長シミュレーションを行った. 詳細は以下の通りである.

5.1 超大規模 MD シミュレーション

前年度行った超大規模 MD シミュレーションのデータを整理し、詳細な考察を行うことで論文を執筆し、Nature Communication に掲載された[Nature Communications, 8 (2017) 10]. 図 6 に計算より得られたスナップショットを示す. 10 億個 (正確には 1.024×10^9 個) の鉄原子を用い, 系の初期サイズは $236.8 \times 236.8 \times 236.8 \text{ nm}^3$ である. ポテンシャルには bcc Fe に対する Finnis-Sinclair ポテンシャルを用い, 温度は融点 T_m に対して $0.58T_m$ と $0.67T_m$ を対象とし, 2,000 ps の計算を 512 GPU を用いて行った. この結果より, 凝固終了直後の方位分布は完全にランダムであり統計的に十分な領域サイズであること, 均質核生成は完全にランダムではなく先に核生成した核周辺に不均質な核生成が生じやすいことなど, 新しい発見を得た. なお, 計算結果が超大規模であるため, データ処理も TSUBAME 上で並列計算により行った.

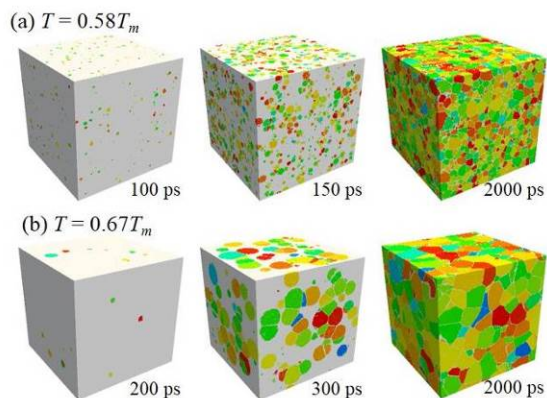


Fig. 6 Snapshots during very-large-scale MD simulations with spontaneous homogeneous nucleation and solidification.

5.2 粒成長 MD シミュレーション

図 6 に示した MD 計算を更に長時間行うと粒成長を見ることが出来る. しかしながら, 図 6 の計算で用いた領域は超大規模であり, これを長時間続けることは現実的ではない. このため, 約 1/10 の 1 億原子 (正確には 113,246,208 原子), $110 \times 110 \times 110 \text{ nm}^3$ の初期領域サイズを対象として粒成長シミュレ-

ーションを行った. 温度 T は, 図 6 と同じ $0.58T_m$ と $0.67T_m$ を対象とし, 128 GPU を用いて並列計算を行った. 図 7 は, $T = 0.58T_m$ における組織変化のスナップショットである. 粒が粗大化し粒数が減少していることがわかる. 現在, 長時間の粒成長計算を完了し, データ整理を行っている. データ整理と考察が完了し次第, 論文投稿を行う.

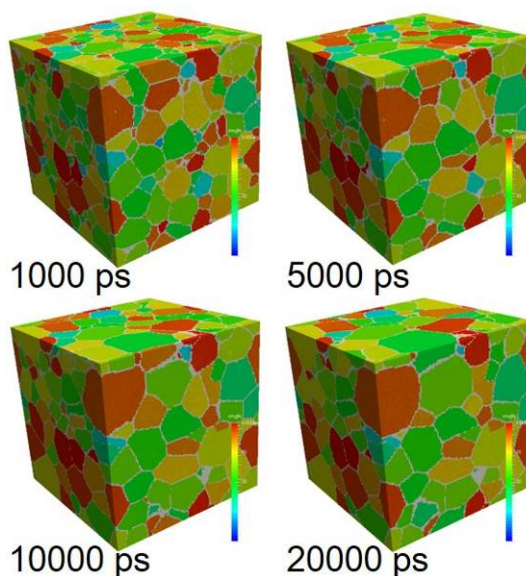


Fig. 7 Snapshots during grain growth large-scale MD simulation.

5.3 MPF モデルの並列 GPU コーディング

PF 法によって図 7 のような粒成長を表現する場合, 図 8 に示すように粒毎に PF 変数 ϕ_i を用いるマルチフェーズフィールド (multi-phase-field : MPF) モデルを用いる. つまり, 例えば 100 万個の結晶粒を取り扱う場合, 100 万個の ϕ_i を各格子点に保存する必要がある. しかしながら, これは膨大なメモリを必要とする. このため, 図 9(b) に示すような active parameter tracking (APT) と呼ばれる手法が多用されている. これは図 9(a) に示すように, 多くの PF 変数がゼロであることを考え, ゼロ以外の PF のみを保存する方法である. 一方で, APT はプログラムが煩雑になることが欠点である. 今回行った MPF モデルの GPU 並列化では APT をそのまま導入しコ

ーディングを行った。なお、図 9(b)に示す ϕ_i の最大保存数は 7 とした。

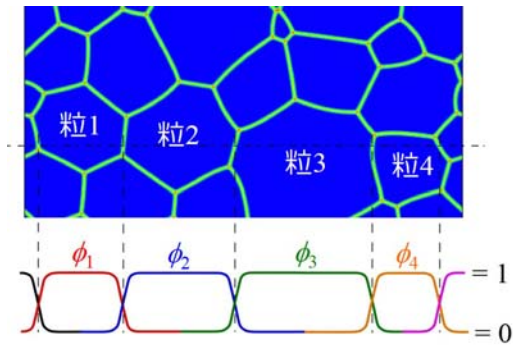


Fig. 8 Multi-phase-field variables.

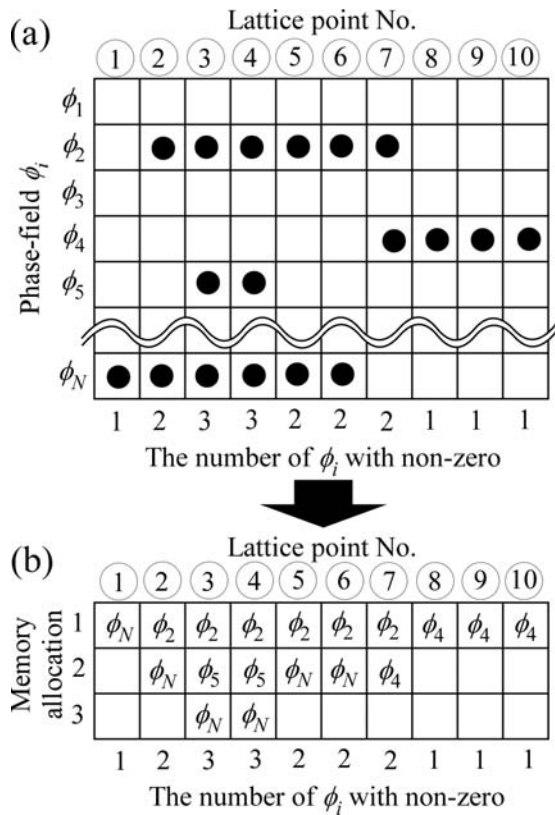


Fig. 9 Schematic image of active parameter tracking.

5.4 超大規模 PF 粒成長シミュレーション

図 10 に、構築した GPU 並列 MPF コードを用いた超大規模理想粒成長シミュレーションの結果を示す。格子数は $2,048^3$ 、初期粒数は 160 万個、GPU 数は 512 である。10 万ステップ時においても 6,000 個以上の粒が残存し、これまで行われた粒成長シミュレーションのサイズを圧倒する世界最大の理想粒成長シミュレーションである。図 11 は、領域サイズを 512^3 、 1024^3 、 2048^3 と変化させた

際の粒サイズ分布の時間変化である。各領域サイズに対して初期核位置を 3 通り変化させ、それらの平均を示している。図のように、 1024^3 までは大きなばらつきが確認されるが、 2048^3 ではいずれのステップにおいても滑らかな変化を示し、かつ 50000th step 以降は分布が一定となっている。このため、 2048^3 を用いることで高い精度の統計解析が可能である。また、点線は Hillert の理論であるが、本計算結果と理論値には大きな差が確認され、これまで信じられてきた理論を覆す結果を得ることができた。現在論文を投稿中である。

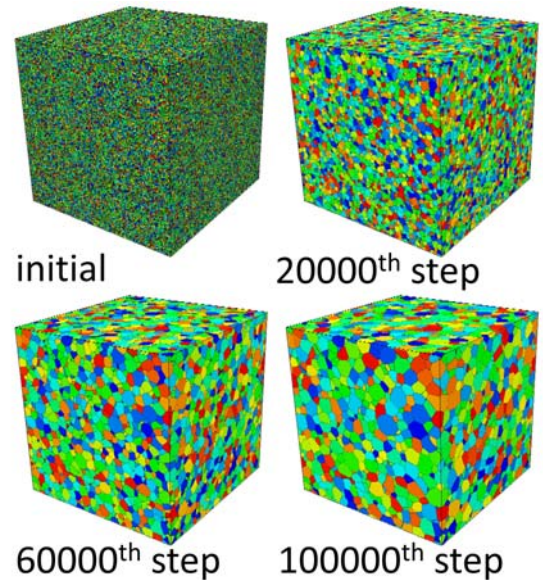


Fig. 10 Snapshots during very-large-scale MPF grain growth simulation.

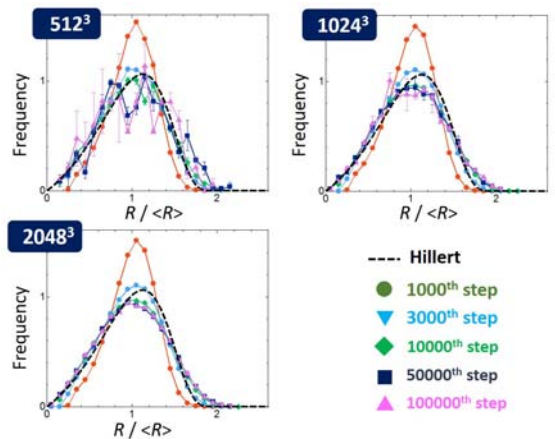


Fig. 11 Time changes in grain size distributions for three different domain sizes.

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

10 億原子の超大規模 MD シミュレーションの成果が *Nature Communications* に掲載され、極めて高い評価を得た。また超大規模 MPF 理想粒成長シミュレーションを行い、これまで明らかにされていなかった真の理想粒成長挙動を解明した。現在、あるジャーナルに投稿中であり、掲載されれば多くの注目を浴びる成果であると期待している。また、1 億原子スケールの大規模 MD 粒成長シミュレーションを長期に渡って行い、現在データを整理中であり、データ整理と考察が終わり次第、論文投稿を行う。さらに、「8. 研究成果リスト」にあるように、今年は多くの論文を *IF* の高いジャーナルに掲載することができた。加えて、多くの招待講演の依頼を受けた。これらの成果は本一連の研究が順調に行われたことを裏付けている。

一方で、当初予定していた MD と MPF の直接比較による MPF 粒成長シミュレーションの高精度化は達成できていない。本内容は次年度の継続研究の中で行う予定である。

7. 研究成果リスト

(1) 学術論文

Y. Shibuta, S. Sakane, E. Miyoshi, S. Okita, T. Takaki, M. Ohno. Heterogeneity in homogeneous nucleation: Billion-atom molecular dynamics simulation of solidification of pure metal, *Nature Communications*, 8 (2017) 10.

S. Okita, Y. Shibuta, Grain Growth in Large-Scale Molecular Dynamics Simulation: Linkage between Atomic Configuration and von Neumann-Mullins Relation, *ISIJ Int.* 56 (2016) 2199-2207.

T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Shimokawabe, T. Aoki. Large-scale Phase-field Studies of Three-dimensional Dendrite Competitive Growth at the Converging Grain

Boundary during Directional Solidification of a Bicrystal Binary Alloy, *ISIJ Int.* 56 (2016) 1427-1435.

T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Shimokawabe, T. Aoki. Primary arm array during directional solidification of a single-crystal binary alloy: Large-scale phase-field study, *Acta Mater.* 118 (2016) 230-243.

T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane, T. Shimokawabe, T. Aoki. Two-dimensional phase-field study of competitive grain growth during directional solidification of polycrystalline binary alloy, *J. Cryst. Growth* 442 (2016) 14-24.

Y. Shibuta, S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno. Submicrometer-scale molecular dynamics simulation of nucleation and solidification from undercooled melt: Linkage between empirical interpretation and atomistic nature, *Acta Mater.* 105 (2016) 328-337.

M. Ohno, T. Takaki, Y. Shibuta. Variational formulation and numerical accuracy of a quantitative phase-field model for binary alloy solidification with two-sided diffusion, *Phys. Rev. E* 93 (2016) 012802.

E. Miyoshi, T. Takaki. Extended higher-order multi-phase-field model for three-dimensional anisotropic-grain-growth simulations, *Computational Materials Science* 120 (2016) 77-83.

E. Miyoshi, T. Takaki. Validation of a novel higher-order multi-phase-field model for grain-growth simulations using anisotropic grain-boundary properties, *Computational Materials Science* 112, Part A (2016) 44-51.

(2) 国際会議プロシーディングス

無し.

(3) 国際会議発表

E. Miyoshi, T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Aoki, Phase-Field Study of Ideal Grain Growth in Ultra-Large-Scale Polycrystalline Systems, 2016 MRS Fall Meeting & Exhibit, November 27-December 2, 2016, Boston, USA. (ポスター)

Y. Shibuta, S. Okita, S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Atomic Nature in Solidification and Grain Growth by Large-Scale Molecular Dynamics Simulation on GPU Supercomputer, 2016 MRS Fall Meeting & Exhibit, November 27-December 2, 2016, Boston, USA. (ポスター)

M. Ohno, T. Takaki, Y. Shibuta, Thermodynamic consistency and numerical performance of quantitative phase-field model for alloy solidification, 2016 MRS Fall Meeting & Exhibit, November 27-December 2, 2016, Boston, USA. (ポスター)

T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane, T. Shimokawabe, T. Aoki, Large-scale GPU computations of dendrite growth using phase-field method [Keynote], IUMRS International Conference in Asia (IUMRS-ICA), October 20-24, 2016, Qingdao, China. (口頭)

M. Ohno, T. Takaki, Y. Shibuta, Quantitative phase-field modeling and simulations of competitive growth of dendrites in alloy systems [Invited], IUMRS International Conference in Asia (IUMRS-ICA), October 20-24, 2016, Qingdao, China. (口頭)

T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Shimokawabe, T. Aoki, Large-scale phase-field computations of dendrite growth by GPU

supercomputer [Keynote], USACM Conference on Isogeometric Analysis and Meshfree Methods, October 10-12, 2016, La Jolla, California, USA.

(口頭)

T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane, T. Shimokawabe, T. Aoki, Large-scale phase-field simulations of dendrite growth using a GPU supercomputer [Invited], 9th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing (PRICM9), August 1-5, 2016, Kyoto, Japan. (口頭)

E. Miyoshi, T. Takaki, Multi-phase-field study on 2D and 3D grain growth with particle pinning, 9th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing (PRICM9), August 1-5, 2016, Kyoto, Japan. (ポスター)

M. Ohno, T. Takaki, Y. Shibuta, Quantitative phase-field simulations of solidification microstructures in alloy systems [Invited], 9th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing (PRICM9), August 1-5, 2016, Kyoto, Japan. (口頭)

Y. Shibuta, S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Discussion on solidification and microstructure evolution from atomistic point of view: large-scale molecular dynamics simulations [Invited], 9th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing (PRICM9), August 1-5, 2016, Kyoto, Japan. (口頭)

E. Miyoshi, T. Takaki, Accuracy Improvement of Multi-Phase-Field Simulations on 2D and 3D Anisotropic Grain Growth, The 12th World Congress on Computational Mechanics (WCCM XII) & The 6th Asia-Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM VI), 24-29 July 2016, Seoul, Korea. (口頭)

E. Miyoshi, T. Takaki, Two-dimensional grain-growth kinetics with anisotropic grain-boundary properties analyzed by multi-phase-field simulations, 6th International Conference on Recrystallization and Grain Growth (ReX&GG 2016), July 17–21, 2016, Pittsburgh, Pennsylvania, USA. (ポスター)

Y. Shibuta, M. Ohno, T. Takaki, Solidification in GPU supercomputer: linkage between atomistic and continuum scales [Invited lecture], CALPHAD XLV, May 29 - June 3, 2016, Awaji Island, Hyogo, Japan. (口頭)

T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane, T. Shimokawabe, T. Aoki, Large-scale 3D Phase-field Studies of Competitive Grain Growth during Directional Solidification [Invited], The 4rd International Symposium on Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification, Casting and Refining (CSSCR2016), May 11-15, 2016, Xi'an, China. (口頭)

E. Miyoshi, T. Takaki, Higher-order multi-phase-field simulations of anisotropic grain growth with GPU acceleration, The 4rd International Symposium on Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification, Casting and Refining (CSSCR2016), May 11-15, 2016, Xi'an, China. (ポスター)

Y. Shibuta, S. Okita, S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Large-scale molecular dynamics simulation of solidification and grain growth [Invited], The 4rd International Symposium on Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification, Casting and Refining (CSSCR2016), May 11-15, 2016, Xi'an, China. (口頭)

(4) 国内会議発表

三好英輔, 高木知弘, 理想粒成長過程の解明：超大規模 multi-phase-field 計算によるアプローチ, 日本鉄鋼協会第 173 回春季講演大会, 2017/3/15-17.

澁田 靖, 大喜多慎, 坂根慎治, 高木知弘, 大野宗一, 大規模分子動力学から見る凝固組織生成, 日本鉄鋼協会第 172 回秋期講演大会, 2016/9/21-23.

三好英輔, 高木知弘, 坂根慎治, 大野宗一, 澁田 靖, 青木尊之, 大規模 multi-phase-field 計算に基づく理想粒成長過程の考察, 日本機械学会 第 29 回計算力学講演会, 2016/9/22-24.

三好英輔, 高木知弘, 粒界特性の異方性を伴う 3 次元粒成長の高次 multi-phase-field シミュレーション, 第 21 回計算工学講演会, 2016/5/31-6/2.

高木知弘, 坂根慎治, 大野宗一, 澁田 靖, 下川辺隆史, 青木尊之, 大規模 phase-field 計算による単結晶二元合金一方向凝固過程の一次枝配列挙動評価, 日本鉄鋼協会第 171 回春季講演大会, 2016/3/23-25.

三好英輔, 高木知弘, 粒界特性の方位差依存性を考慮した 2 次元粒成長の大規模 multi-phase-field 解析, 日本鉄鋼協会第 171 回春季講演大会, 2016/3/23-25.

澁田 靖, 坂根慎治, 高木知弘, 大野宗一, 大規模分子動力学法シミュレーションによる凝固組織生成過程の考察, 日本鉄鋼協会第 171 回春季講演大会, 2016/3/23-25.

三好英輔, 高木知弘, 金属熱処理組織の高精度制御を目指した高次 multi-phase-field モデルの構築, 関西支部第 91 期定時総会講演会, 2016/3/11-12.

(5) その他（特許，プレス発表，著書等）

プレス発表

澁田靖，坂根慎治，三好英輔，大喜多慎，高木知弘，大野宗一，完全な均質核生成は起こりえるのか？ — スパコンを用いた超大規模分子動力学シミュレーションで実証 —
[Nature Communications 8 (2017) 10.]