#### jh180036

# データ同化による粒界異方性物性データベースの構築と 大規模フェーズフィールド粒成長計算

### 高木 知弘(京都工芸繊維大学)

構造部材に用いられる金属材料の多くは多結晶組織を有しており、この多結晶組織を最 適に制御することが構造物軽量化の鍵となる.このためには、多結晶組織を決定する粒 成長過程の高精度な数値シミュレーションが不可欠であるが、多結晶組織の予測におい て重要な粒界異方性物性の不足が課題である.本研究では、分子動力学(MD)法と phase field (PF)法をデータサイエンスを用いて融合させ、粒界異方性物性を高精度に予測し、 MD と PF による粒成長マルチスケールモデルを完成させることを目的とする.まず、 データ同化としてアンサンブルカルマンフィルタを用い、PF 法による粒成長シミュレ ーションの双子実験において、粒界エネルギーとモビリティが高精度に予測可能である ことを確認した.次に、MD による3結晶粒系における粒成長シミュレーションを行い 観測データとし、PF 法とデータ同化により粒界物性を導出した.さらに、粒界異方性を 導入した大規模粒成長計算を可能とする並列 GPU コードを実装した.また、ミクロン オーダーの大規模 MD シミュレーションとそれに引き続く PF 法による粒成長シミュレ ーションを行い、MD と PF 法による新しい粒成長マルチスケールモデルを構築した.

- 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
  - ロ 超大規模データ処理系応用分野
  - ロ 超大容量ネットワーク技術分野
  - ロ 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) フェーズフィールドモデル構築,データ同化 コード作成,考察,論文執筆

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

下川辺 隆史(東京大学・情報基盤センター)
並列 GPU コードのチューニング,大規模デー
夕処理&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)
フェーズフィールド計算実行,データ同化, 計算データ処理&考察,論文執筆
上野 健祥(東京大学・大学院工学系研究科マ テリアル工学専攻)
分子動力学計算の実行,分子動力学計算デー
タ整理

## 研究の目的と意義

構造部材に用いられる金属材料の多くは 多結晶組織を有しており、この多結晶組織を 最適に制御することが構造物軽量化の鍵と なる.多結晶組織は、不透明な金属材料の高 温熱処理時に生じる粒成長(grain growth)を 通じて形成されるため、その形成過程の直接

観察は不可能である.このため、コンピュー タシミュレーションによる現象解明と組織 制御が不可欠となる. 平成28年度と29年度 の2年間に渡って、分子動力学 (molecular dynamics: MD) 法とフェーズフィールド (phase-field: PF) 法の大規模シミュレーショ ンによる粒成長予測の高精度化を試み、これ らの成果は世界的に高く評価された.一方で, PF 法による多結晶組織の予測において重要 な粒界異方性を十分な精度で導入すること ができておらず, 解決しなければならない大 きな課題である. そこで本研究では, MD と PF をデータサイエンスを用いて融合させ,粒 界異方性物性を高精度に予測し, MDとPFに よる新しい粒成長マルチスケールモデルを 完成させることを目的とする.

構造材料開発においては、メゾスケールに おける材料組織を精度良く表現可能な PF 法 の利用が不可欠である.しかしながら実材料 の挙動を表現するには、①モデルの精度不十 分、②界面物性値の情報不足、③高い計算コ ストの3つの問題を解決する必要がある.こ のため、PF計算における上記問題の解決が喫 緊の課題である.本研究は上記3つの課題に おいて、②の界面物性値の問題解決に取り組 むものであり、材料開発のために極めて重要 かつ意義深い研究である.また、MD と PF 法 を連続して用いる計算法は例がなく、新しい マルチスケール手法の提案という点におい て極めて独創性が高く、当該分野に与えるイ ンパクトの大きい研究である.

### 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が示された.また, 両手法の複数 GPU 並列計算によって,世界 的にまだどのグループも達成できない時空 間スケールでの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.本一連の研 究は、国内外で極めて高く評価されており、 本研究を発展させることは計算材料学の更 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)、HPC(青木・下 川辺)の各分野の研究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 発の世界的一の研究が可能となる.以上のこ とから、本研究を当拠点公募型共同研究とし て実施する必要性は極めて高い.

# 4. 前年度までに得られた研究成果の概要

粒成長に関する研究は,平成 27 年度から 29 年度までの3 年間行っている.以下に平成 29 年度までの研究成果の概要を示す.

#### 4.1 超大規模 MD シミュレーション

純鉄に対する Finnis-Sinclair (FS)ポテンシ ャルを用いた複数 GPU 並列コードを作成し、 MD 計算の高速化に対しても GPU 並列計算 は効果的であることを確認した. このコード を用いた MD シミュレーションによって,純 鉄過冷却融液からの自発的均質核生成とそ の後の凝固過程を再現した.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,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[Acta Mater. 105 (2016) 328-337]. 次いで、10 億原子 の超大規模MDシミュレーションに成功した. 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. 図1 に計算より得られたスナップショットを示 す[Nature Communications, 8 (2017) 10]. 系の

初期サイズは 236.8 × 236.8 × 236.8 nm<sup>3</sup>, 鉄原 子数は 1.024×10<sup>9</sup> 個である. ポテンシャルに は bcc Fe に対する FS 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.



Fig. 1 Snapshots during very-large-scale MD simulations with spontaneous homogeneous nucleation and solidification. [Nature Communications, 8 (2017) 10]

図1に示した MD 計算を更に長時間行うと 粒成長を表現可能である.まず単一 GPU 計 算において, 12,454,560 個の純鉄原子系の粒 成長 MD シミュレーションを行った. この結 果, 粒成長指数が 0.3 となり, 理想粒成長の 0.5 よりも小さくなることを示した. 実際の 材料は粒界異方性があるため理想粒成長と 乖離があるが,統計的な評価を行うにはこの 系では粒数が不十分であることも指摘した[J. Crystal Growth, 474 (2017) 140-145]. そこで, 1億原子(正確には113,246,208原子), 110× 110×110 nm<sup>3</sup>の初期領域サイズを対象として 超大規模MD粒成長シミュレーションを行っ た[Acta Mater., 153 (2018) 108-116]. 温度 Tは, 0.58Tmを対象とし、128 GPUを用いて並列計 算を行った.図2に多結晶形態の時間変化を

示す. 図(a)は液相からの固相核生成とその後 の凝固,図(b)は粒成長過程である. t=500 psにおいて約 1500 個存在した粒が,t=30000ps では 150 個まで減少し,2 つの計算におい てほぼ同じ粒サイズで変化していることが わかる. このため,粒成長を表現するには十 分な空間を確保できているといえる.



Fig. 2 Snapshots of simulation cells for (a) initial nucleation, solidification and (b) subsequent grain growth for two independent calculations of 30000 ps.



Fig. 3 Squared average grain size as a function of time.

図3は,2乗平均粒半径<*r*(*t*)><sup>2</sup>の時間変化 を示している.等方性粒界特性における理想 粒成長においては,

<r(t) ><sup>2</sup> - < $r(t_0)$  ><sup>2</sup> = KM  $\sigma(t - t_0)$  (1) で表される放物線成長則が成り立つことが 知られており,図3中の実線で示すように粒 成長初期は式(1)に従った変化が確認される. なお,式(1)において,K は粒構造の幾何学的 な情報を反映したカイネティック係数,M は 粒界モビリティ, $\sigma$ は粒界エネルギーであり, 理想粒成長問題ではいずれも定数である.図 3 より, t = 5000 ps 以降では変化が直線から ずれている. このずれは  $KM\sigma$  が変化したこ とにより生じる. これを詳細に考察した結果, K は粒成長の過程でほぼ一定で, reduced mobility  $M\sigma$ が時間とともに単調に減少する ことに起因することを明らかにした.



Fig. 4 Snapshots during very-large-scale MPF grain growth simulation. [npj Comp. Mater., 3 (2017) 25]

### 4.2 超大規模 MPF 粒成長シミュレーション

PF 法によって多結晶粒成長を表現する場 合, 粒毎に PF 変数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.この際,取り扱う粒数が多くなると 膨大なメモリを必要とするため, active parameter tracking (APT)と呼ばれる手法を用 いることでメモリを節約し,MPF モデルの GPU 並列化を行った.

図4に、構築した複数 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[npj Comp. Mater., 3 (2017) 25]. 格子点数は 2,560<sup>3</sup>,初期粒数は 3,125,000 個,使用した GPU数は 800 である. 本シミュレーションは、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 あり,35,000 ステップから 75,000 ステップ間 において定常成長状態を達成した. 図 5 は、 定常成長時における粒サイズ分布を示して いる.実線は Hillert 理論である.図5からわ かるように、本計算で得られた実際の粒サイ ズ分布は Hillert 理論とは異なる分布を示し、 これまで認められてきた理論を覆す成果を 得た.また、本成果に基づき、理想粒成長に 関する幾つかの新しい理論式を提案した.



Fig. 5 Grain size distribution at steady state growth condition (75,000th step). [npj Comp. Mater., 3 (2017) 25]

### 4.3 MD 粒構造を用いた MPF 粒成長法の開発

MDは自発的な核生成と多結晶粒構造生成 が可能であるが、粒成長は極めて長い時間を 要するため、MDによる粒成長計算は困難で ある.このため、MDにより得られた多結晶 構造を MPF による粒成長計算の初期構造と して用いる新しい粒成長計算法を構築した [Comp. Mater. Sci., 152 (2018) 118-124].図6に 擬2次元計算の結果を示す.MD計算は、 [Scientific Reports 5 (2015) 13534]の結果を用 いた.図6はMD粒成長計算結果(左図)か ら、MPF計算用初期データ(右図)を作成す る流れを示したものである.まず、MD計算 結果に対して、方位差3°以下の隣接原子を一 つの単結晶と判断するクラスタ判定を行う

(左図). 次いで,原子配置に対して MPF 計 算で用いる差分格子を重ね,格子点の方位を 決定する. この際,格子点の方位情報は完全 にステップ状であるため,曲率効果を排除し た MPF 緩和計算を行い, MPF 計算用初期構 造(右図)を得る.



Fig. 6 Procedure to develop an initial polycrystalline structure for MPF simulation from MD simulation result.



Fig. 7 Polycrystalline structures obtained by MD and MPF grain growth simulations.

図7は、図6の多結晶構造からのMD(左 図)とMPF(右図)による粒成長計算結果で ある.MPF計算は、粒界特性を等方性として いるため、MD計算結果と一致しないのは仕 方ないが、全体的な粒成長の傾向はよく一致 している.

### 5. 今年度の研究成果の詳細

4.1 節の図 2,3 の成果が, 平成 30 年 7 月に Acta Materialia (IF = 6.036)に出版された[Acta Mater., 153 (2018) 108-116]. また, 4.3 節に示 した研究成果が、平成 30 年 9 月に Computational Materials Science (IF = 2.530) $\ell$ 出版された[Comp. Mater. Sci., 152 (2018) 118-124]. さらに,図4に示した超大規模理想粒 成長シミュレーションの結果を用い,3次元 組織とその2次元断面組織の関係を明らかに し, この成果が平成 30 年 11 月に Journal of Materials Science (IF=2.993)に出版された[J. Mater. Sci., 53 (2018) 15165-15180]. また、こ れまでの JHPCN と HPCI による成果をまと めた progress report  $\vec{m}$ , Advanced Theory and Simulations に出版された[Advanced Theory and Simulations, 1 (2018) 1800065]. 上記のよ

うに,これまでの成果による4編の論文が平 成30年度中に出版された.平成30年度の研 究成果を以下に示す.

### 5.1 データ同化の概要

観測データと MPF シミュレーションに基 づき粒界物性値を推定することを想定して, アンサンブルカルマンフィルタによるデー タ同化を MPF 計算コードに実装した.ここ では,その概要を略述する.

ある時刻 *t* の MPF シミュレーションの状態ベクトルを  $\mathbf{x}_t = (\phi_{1,1} \cdots \phi_{N_n,N_n} \ u_1 \cdots u_{N_n})^T$ , 観

測データベクトルを $\mathbf{y}_t = (\phi_{11}^{\circ} \cdots \phi_{N_t N_t}^{\circ})^{\mathrm{T}}$ と定

義し,  $x_t \ge y_t \ge 0$ 関係を $y_t = Hx_t + w_t$  (H: 観 測演算子,  $w_i$ : 観測誤差ベクトル)で表す. こ こで,  $\phi_{i,j}$  ( $i = 1, 2, ..., N_{\phi}$ ;  $j = 1, 2, ..., N_g$ ) は, j番目の格子点における i番目の PF 変数の値,  $N_{\phi}$ は PF 変数の総数,  $N_g$ は全格子点数であり, 上付きの添字 o は観測値を示す. また,  $u_1, ..., u_{N_p}$ は, 推定対象とする  $N_p$  個の物性値である. 摂動を加えた個々の MPF シミュレーション 結果 (アンサンブルメンバー) が N 個あると し, 状態量行列  $X_t = (x_t^{(1)} x_t^{(2)} \cdots x_t^{(N)})$ , 観測デ ータ行列  $Y_t = (y_t^{(1)} y_t^{(2)} \cdots y_t^{(N)})$ , 観測誤差行列  $W_t = (w_t^{(1)} w_t^{(2)} \cdots w_t^{(N)})$ を導入すると, アンサ ンブルカルマンフィルタによる  $X_t$ のフィル タリングは次式で与えられる.

# $\mathbf{X}_{t}^{*} = \mathbf{X}_{t} + \mathbf{K}_{t} \left( \mathbf{Y}_{t} + \mathbf{W}_{t} - \frac{1}{N} \mathbf{W}_{t} \mathbf{P} - \mathbf{H}_{t} \mathbf{X}_{t} \right)$ (2)

ここで、Pは全要素が1のN次正方行列、K, はカルマンゲイン行列であり、X,は観測デー タに合わせて補正された状態量行列を表す. データ同化計算においては、 MPF モデルの 時間発展方程式を解いて X,を順次更新し、観 測データが存在する時刻では式(2)を用いて X,を補正する.この手順を繰り返すことで、 状態および物性値が推定される.

#### 5.2 双子実験

上記の MPF データ同化の妥当性検証のた め,図8(a)の三結晶系を対象として双子実験 を行った.双子実験では、あらかじめ粒界物 性値 (エネルギー $\sigma$ およびモビリティ *M*) を 真値に設定した MPF 粒成長シミュレーショ ンを実施し、その結果を観測データとして、 データ同化により物性値の推定を行う.得ら れた推定値を真値と比較することで, 推定精 度を評価する.ここでは、物性の情報がよく 知られた粒界(Σ3 双晶粒界など)を粒界 Cに 配置することを想定し、 粒界 A, B のエネル ギー o<sub>A</sub>, o<sub>B</sub> およびモビリティ M<sub>A</sub>, M<sub>B</sub> を推定 対象とした. 観測データの作成では, 各物性 値の真値を $\sigma_A = M_A = 0.6$ ,  $\sigma_B = M_B = 0.8$ と設 定し、図8(b)に示す5000<sup>th</sup> step までの計算を 行った. データ同化におけるアンサンブルメ ンバー数はN=128を用い,各アンサンブル メンバーの $\sigma_A$ ,  $\sigma_B$ ,  $M_A$ ,  $M_B$ の初期値は平均1, 分散 0.01 の正規分布に従うとして算出した.



Fig. 8 Tri-crystal systems for twin experiment consisting of grain boundaries (GBs) A, B, and C at (a) initial time and (b) 5000<sup>th</sup> step.

図9は、粒界エネルギーσA, σBおよびモビ リティ MA, MBの推定値の時間変化を, 真値 (破線)と比較して示している.ここで,プ ロットは全アンサンブルメンバーの推定値 の平均,灰色の実線は平均±標準偏差である. この結果より,およそ 500<sup>th</sup> step 以降におい て,平均±標準偏差の範囲にすべての真値が 入っていることがわかる.また,平均はいず れも真値の近傍に収束しており,複数の粒界 物性を同時に,かつ良好な精度で推定できて いることが確認できる.今後,図8の系で中 央円形粒の方位を変化させたMD計算を系統 的に行い,それらを4.3節の手法でMPF構造 へ変換しデータ同化の観測データに用いる ことで,異方性粒界物性を効率よく取得可能 と見込んでいる.



Fig. 9 Estimated results for grain boundary properties  $\sigma_A$ ,  $\sigma_B$ ,  $M_A$ , and  $M_B$  during the twin experiment.

#### 5.3 データ同化による粒界物性の取得

上記の MPF データ同化において、観測デ ータに図 10 の 3 結晶系 MD 粒成長計算結果 を用いることで粒界物性の取得を試みた.こ こで, MD 計算における材料は純鉄 (FS ポテ ンシャル),温度は800Kとし,上下の長方形 粒の粒界中央に粒径 5.14 nm の円形粒を配置 した. また, 円形粒の結晶座標系は全体座標 系に一致させ、上下の長方形粒には、それぞ れ全体座標系に対して<110>軸周り 51.06°, -51.06°の回転を与えた.この MD 計算から 4.3 節の手法により作成した MPF 構造を観測デ ータとし, データ同化を行い円形粒上下の粒 界 A, B のエネルギー oA, oB およびモビリテ ィ M<sub>A</sub>, M<sub>B</sub>を算出した. その結果の一例を図 11 に示す. 各プロットは全アンサンブルメン バーの推定値の平均,赤色の実線は平均値± 標準偏差(SD)である.いずれの結果でも, 推定値は一定の値に収束していることが分

かる.しかしながら,双子実験の場合と異な り,標準偏差は増大し続け収束が見られない. また,データ同化における入力値(推定パラ メータの初期値や分散)が推定結果に大きく 影響するという問題も現状では生じている. 今後,これらの原因を調査し,改善策を検討 する必要がある.



Fig. 10 MD tricrystal simulation for estimating grain boundary properties by data assimilation.



Fig. 11 Estimated results of grain boundary properties  $\sigma_A$ ,  $\sigma_B$ ,  $M_A$ , and  $M_B$  during the data assimilation for MD and MPF simulations.

#### 5.4 粒界異方性を含む大規模 MPF コード開発

実材料における粒界のエネルギーやモビ リティなどの物性は,主として隣接する二結 晶粒の方位差に応じて変化する.このような 粒界物性の異方性を MPF シミュレーション に導入するためには,通常,結晶方位を表す Euler 角を総数 N 個の結晶粒に割り当て,事 前に  $N \times N$  個の方位差を計算して配列に保存 しておく手法が取られる.しかしながら,こ の手法では粒数 N を多くすると配列サイズ が膨大化し、メモリ確保が極めて困難となる. そこで、方位差を保存せず逐次計算を行う機 能を 4.2 節の複数 GPU 並列 MPF コードに実 装することで、粒界異方性を含む大規模 MPF シミュレーションを可能とした.ここで、異 方性物性を精度良く導入するための収束計 算アルゴリズムも併せてコードに実装した.

図 12 は、構築したコードによる、粒界異 方性を考慮した大規模粒成長シミュレーシ ョン結果の例である.ここで、差分格子点数 を 2,560<sup>3</sup>、初期粒数を 3,125,000 とし、256 個 の GPU (NVIDIA Tesla P100)を用いて計算を 行った.また、異方性物性は最も簡便なモデ ルである Read-Shockley モデルと sigmoidal モ デルにより導入し、方位差 30°以上の高角粒 界のエネルギー・モビリティは一定とした. 75,000 steps までの所要時間はおよそ 22h で あり、同条件での理想粒成長シミュレーショ ンに対しおよそ 1.5 倍程度の計算コストで異 方性物性の安定な導入を達成できている.



Fig. 12 Snapshots of large-scale MPF grain growth simulation with anisotropic boundary properties.

#### 5.5 新しいマルチスケール粒成長解析

ミクロンオーダーの大規模 MD 核生成計 算と MPF 粒成長計算を連続して行う,新し いマルチスケール粒成長解析法を構築した [Model. Simul. Mater. Sci. Eng. (2019) *in press*]. 同手法による計算結果を図 13 に示す. (a)の MD 計算では,初期サイズ 1.03 × 1.03 × 0.11 µm<sup>3</sup>,原子数約 100 億,温度 0.67*T*<sub>m</sub>の純鉄薄 膜(FS ポテンシャル)を対象として,256GPUs により 500 ps までの計算を行い,約 13,000 個 の結晶粒からなる多結晶組織を得た.この MD 生成組織を 4.3 節の手法で MPF 構造へと 変換し,引き続く粒成長シミュレーションを 行った結果が(b)である.時間の経過とともに, 薄膜厚さ方向の粒界曲率のない柱状粒組織 が形成され,粒成長挙動が 3 次元から 2 次元 へと遷移していることがわかる.このような 核生成から粒成長後期にわたるミクロ組織 計算は,大規模 MD と MPF を相補的に用い た解析により初めて可能となった.

従来のマルチスケール解析では、下位スケ ールの計算から抽出した特徴量を上位スケ ールの計算へと受け渡す間接的なブリッジ ング手法が取られてきた.これに対し、本研 究で提示した原子計算(MD)と連続体モデル

(MPF)の直接的ブリッジングは,HPC技術の活用による新しいマルチスケール解析の開拓に向けて画期を成すアプローチである.



Fig. 13 (a) Snapshots of (a) large-scale MD nucleation simulation and (b) subsequent MPF grain growth simulation [Model. Simul. Mater. Sci. Eng. (2019) *in press*].

## 6. 今年度の進捗状況と今後の展望

MD と PF 法を用いたデータ同化によって 粒界異方性物性を取得する手法を構築し,粒 界物性のデータベース化を行い,それを用い た MPF 法による大規模粒成長を行うことが 本研究において設定した目標であった.この 目標を概ね達成することができたが,粒界異 方性物性のデータベース化を構築するには 至っていない.これは図 10 に示した3 結晶 系におけるMD計算を安定に行うことができ ていないことが原因であり,当初想定してい なかった問題である.しかしながら,他の手 法は構築できていることから,この MD 計算 の問題が解決しさえすれば当初の目的は容 易に達成できるものと考えている.一方,ミ クロンオーダーの超大規模 MD 計算を可能と し,それに引き続く MPF 粒成長を行う新し いマルチスケール手法を構築した.成果は 6 編のジャーナルで報告され,総合的に考える と研究進捗は良好であったと判断できる.

令和元年度は、粒界異方性を導入した大規 模 MPF 粒成長計算を系統的に行うことによ り、粒界異方性が粒成長の統計的挙動に及ぼ す影響を解明する.これには 5.4 節で構築し た手法を適用する.この研究によって、どの ような粒界異方性を有する材料を開発すれ ば最適な多結晶構造を得ることができるか 明らかになる.また、今年度の課題として残 った粒界異方性物性のデータベースを構築 することで、実材料に対する高精度な多結晶 粒成長を初めて可能とする.

#### 7. 研究成果リスト

#### (1) 学術論文

<u>Y. Shibuta, S. Sakane, E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno,</u> Micrometer-scale molecular dynamics simulation of microstructure formation linked with multi-phase-field simulation in same space scale, Modell. Simul. Mater. Sci. Eng. (2019) *in press*.

<u>E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane,</u> <u>*T. Aoki*</u>, Large-scale phase-field simulation of threedimensional isotropic grain growth in polycrystalline thin films, Modell. Simul. Mater. Sci. Eng. (2019) *in press*.

<u>Y. Shibuta, M. Ohno, T. Takaki</u>, Advent of Cross-Scale Modeling: High-Performance Computing of Solidification and Grain Growth, Advanced Theory and Simulations 1(9) (2018) 1800065. S. Okita, <u>E. Miyoshi, S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Y.</u> <u>Shibuta</u>, Grain growth kinetics in submicrometer-scale molecular dynamics simulation, Acta Materialia 153 (2018) 108-116.

<u>E. Miyoshi, T. Takaki, Y. Shibuta, M. Ohno</u>, Bridging molecular dynamics and phase-field methods for grain growth prediction, Computational Materials Science 152 (2018) 118-124.

E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane, T. Shimokawabe, *T. Aoki*, Correlation between threedimensional and cross-sectional characteristics of ideal grain growth: large-scale phase-field simulation study, Journal of Materials Science 53(21) (2018) 15165-15180.

 (2) 国際会議プロシーディングス なし

### (3) 国際会議発表

<u>E. Miyoshi, T. Takaki, Y. Shibuta, M. Ohno</u>, Direct mapping from molecular dynamics to phase-field simulations for accurate prediction of grain growth, The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2018), Oct. 28 - Nov. 2, 2018, International Convention Center, Osaka, Japan.

<u>Y. Shibuta</u>, S. Okita, <u>S. Sakane</u>, <u>E. Miyoshi</u>, <u>T. Takaki</u>, <u>M. Ohno</u>, Microstructure formation in large-scale molecular dynamics simulation [Invited speech], The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2018), Oct. 28 - Nov. 2, 2018, International Convention Center, Osaka, Japan.

<u>E. Miyoshi, T. Takaki, Y. Shibuta, M. Ohno</u>, Accuracy evaluation of phase-field grain growth models with different functional forms, 55th Annual Technical Meeting of the Society of Engineering Sciences (SES), October 10-12, 2018, in Madrid, Spain.

E. Miyoshi, <u>T. Takaki</u>, <u>Y. Shibuta</u>, <u>M. Ohno</u>, Polycrystalline Grain Growth Simulations Using the Molecular Dynamics and Multi-Phase-Field Methods, The 13th World Congress in Computational Mechanics (WCCM 2018), July, 22-27, 2018, Marriott Marquis, New York, USA.

<u>E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane,</u> <u>T. Shimokawabe, T. Aoki</u>, Large-scale phase-field simulation of 3D Ideal grain growth: testing the meanfield theory and stereological analysis, 4th International Congress on 3D Materials Science (3DMS 2018), June 10-13, 2018, Culture Yard Conference Center, Elsinore, Denmark.

#### (4) 国内会議発表

<u>
澁田靖</u>,大<u>
喜多慎</u>,大<u>
野宗</u>,<u>
三好英輔</u>,<u>
坂根慎治</u>, <u>
高木知弘</u>,超大規模分子動力学法シミュレーョン による核生成・凝固粒長過程の統一的理解,日本 鉄鋼協会第 177 回春季講演大会,材料とプロセス, 2019/3/20-22. (東京電機大学 東京千住キャンパ ス)

<u>三好英輔</u>,<u>高木知弘</u>,<u>大野宗一</u>,<u>澁田靖</u>,各種 multi-phase-field モデルによる結晶粒成長シミュレ ーションの精度評価,日本機械学会 第 31 回計算 力学講演会,2018/11/23-25.(徳島大学 常三島キャ ンパス)

三好英輔,高木知弘, 進田靖,大野宗一,分子動力 学法から Phase-Field 法へのダイレクトマッピング による多結晶粒成長予測の高精度化,第3回マル チスケール材料力学シンポジウム(日本材料学会 第67 期通常総会・学術講演会),2018/05/25.(高知 工科大学永国寺キャンパス)

(5) その他(特許, プレス発表, 著書等) なし