

jh190024-NAH

## 粒界異方性を考慮した粒成長の大規模フェーズフィールドシミュレーション

高木 知弘 (京都工芸繊維大学)

金属材料の最終的な微視組織・物性は、熱処理工程で生じる結晶粒成長により決定されるため、新材料開発や既存材料の高性能化では粒成長の高精度予測が極めて重要となる。このためには、数値シミュレーションによる系統的な粒成長挙動評価が不可欠であるが、次の三つの課題が解決しておらずシミュレーションを材料開発に生かしていないのが現状である：①粒成長モデルの精度不足、②粒界異方性物性のデータ不足、③計算規模の制約による統計的不確かさ。本研究では、phase-field (PF) 法・分子動力学 (MD) 法・データ同化・HPC の融合により上記課題を統一的に解決し、粒界異方性が粒成長挙動に及ぼす影響を解明することで、シミュレーション援用材料開発の加速を目指す。今年度は、既存の PF 粒成長モデルと計算アルゴリズムすべてに対して詳細な精度評価を行い、粒界異方性を最も正確に導入可能な手法を明らかとした。また、同手法を並列 GPU コードに実装し、簡便な異方性物性モデルを用いた系統的な大規模シミュレーションを行うことで、異方性強度と粒成長の統計的挙動との相関を解明した。さらに、PF 法と MD 法のデータ同化を通じて多結晶粒成長から粒界物性を抽出する手法を示した。

### 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

#### (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

三好 英輔 (京都工芸繊維大学・工学科学研究科) :

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

坂根 慎治 (京都工芸繊維大学・工学科学研究科) :

GPU 並列コーディング, データ処理用コードの作成

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

### 2. 研究の目的と意義

金属加工の最終工程である熱処理において生じる粒成長 (grain growth) は、金属製品の材料微視組織を決定するため、その高精度な予測と制御が高性能材料開発の鍵となる。このためにはコンピュータシミュレーションによる系統的な評価が不可欠であるが、次の3つの課題が解決しておらず数値シミュレーションを材料開発に生かしていないのが現状である：①粒界異方性を精度よく考慮可能な粒成長モデルが存在しない、②実材料に対する粒界異方性物性のデータが不十分、③粒成長の統計的挙動を得るためには大規模シミュレーションが不可欠。

本グループは昨年度までの研究において、分子動力学 (molecular dynamics: MD) 法とフ

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と現象解明を試み、これらの成果は世界的に高く評価された。一方で、粒成長問題で最も重要な未解決課題の一つである粒界異方性の影響については、未だ解明に至っていない。そこで今年度の研究では、MD 法と PF 法のデータ同化により粒界異方性物性の高精度な取得を可能にするとともに、粒界異方性が粒成長の統計的挙動に及ぼす影響を大規模 PF シミュレーションの系統的評価を通して明らかにすることを目的とする。これは、材料開発を加速させる上で極めて重要かつ意義深い貢献をなすものである。また、PF 法、MD 法、データ同化、大規模シミュレーションを融合した新しい手法の提案という点において極めて独創性が高く、当該分野に大きなインパクトを与える研究である。

### 3. 当拠点公募型研究として実施した意義

当共同研究では、粒成長に関する数値的検討を過去 4 年間にわたり行ってきた。この中で、「4. 前年度までに得られた研究成果の概要」に示すように、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。さらに、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を可能とした。これらの研究成果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) の各分野を牽引する研究者によって構成され、日本発の世界一の研究

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ことは必要性が極めて高く、当該分野における先端的知見を本邦から発信するという点で大きな意義を有する。

## 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 30 年度までの 4 年間にわたり行ってきた。以下に平成 30 年度までの成果の概要を示す。

### 4.1 超大規模 MD シミュレーション

純鉄の Finnis-Sinclair (FS)ポテンシャルを用いた複数 GPU 並列 MD 計算コードを作成し、MD シミュレーションの高速化に対して GPU 並列計算が極めて効果的であることを確認した。同コードを用いた MD シミュレーションにより、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、詳細な解析を行った。その結果、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  $236.8 \times 236.8 \times 236.8 \text{ nm}^3$ 、鉄原子数は  $1.024 \times 10^9$  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、2000 ps の計算を 512 GPUs 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。

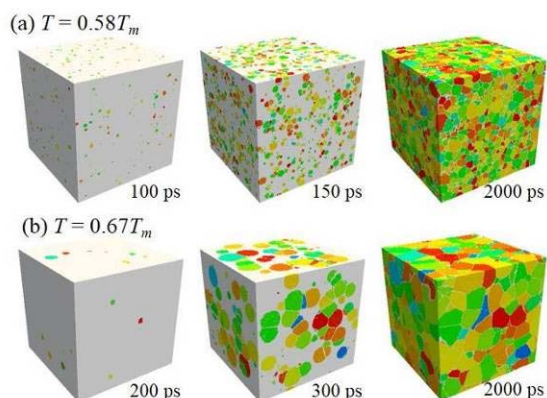


Fig. 1 Snapshots during very-large-scale MD simulations with spontaneous homogeneous nucleation and solidification.

さらに、粒成長のキネティクスを評価するため、図 1 よりやや規模を落とした 1 億原子系（正確には 113,246,208 原子系）、 $110 \times 110 \times 110 \text{ nm}^3$  の初期領域サイズを対象として長期間の大規模 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  $0.58T_m$  を対象とし、計算には 128 GPUs を用いた。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。  $t = 500 \text{ ps}$  において約 1500 個存在した粒が、  $t = 30,000 \text{ ps}$  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。したがって、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。この計算結果から平均粒半径  $\langle r(t) \rangle$  の時間変化を解析したところ、初期の粒成長はよく知られた理想粒成長の放物線成長則  $\langle r(t) \rangle^2 \propto t$  に従う一方、時間の経過とともに粒成長が鈍化し放物線則から乖離していくことが確認された。これを詳細に考察した結果、放物線則からのずれは reduced mobility  $M\sigma$  と呼ばれる物性因子が粒成長の進行につれて単調減少することに起因することが明らかとなった。

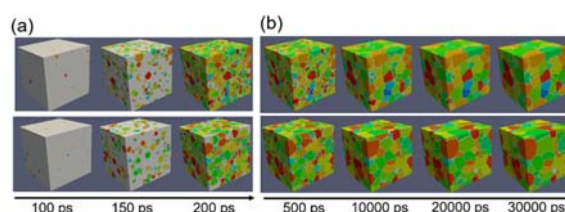


Fig. 2 Snapshots of simulation cells for (a) nucleation, solidification and (b) subsequent grain growth for two independent calculations of 30000 ps.

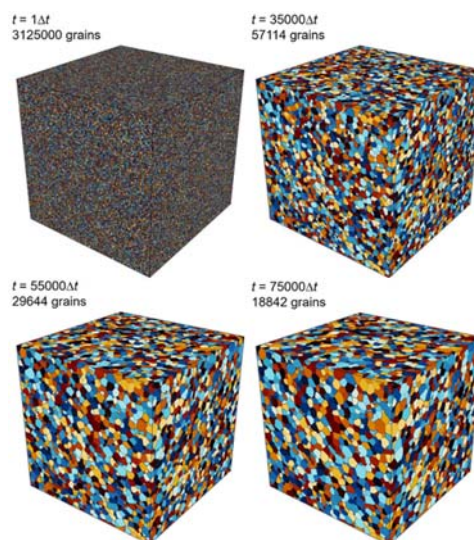


Fig. 3 Snapshots during very-large-scale MPF grain growth simulation.

#### 4.2 超大規模 PF 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 3 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  $2560^3$ 、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 4 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 4 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。

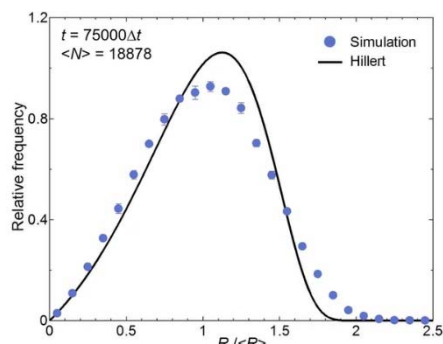


Fig. 4 Grain size distribution at steady state growth condition (75,000th step).

#### 4.3 MD-PF ブリッジング計算法の開発

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 による粒成長後期までの計算は困難である。このため、MD により得られた多結晶構造を PF 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 5 は、同手法を擬 2 次元系に適用した結果を例として、MD 凝固組織 (左図) から PF 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。MD 計算は [Scientific Reports 5 (2015) 13534] の結果を用いた。構築した手法では、まず、MD 計算結果に対して方位差  $3^\circ$  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 (図 5 左図)。次いで、原子配置に対して PF 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 PF 緩和計算を行い、PF 計算用初期構造 (右

図) を作成する。図 5 の結果より、MD 生成組織の粒界形状を保ちつつ PF 法の拡散界面構造が得られていることがわかる。

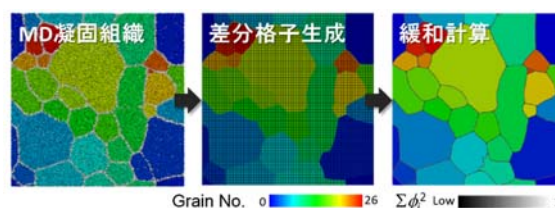


Fig. 5 Procedure to develop an initial polycrystalline structure for MPF simulation from MD simulation result.

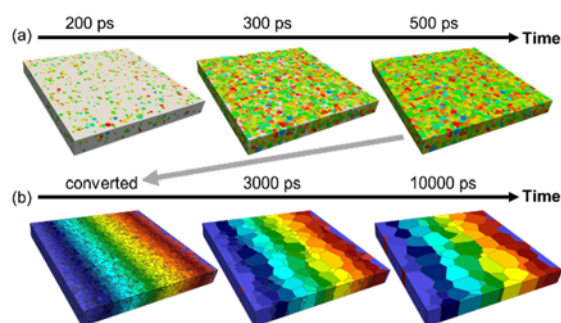


Fig. 6 (a) Snapshots of (a) large-scale MD nucleation simulation and (b) subsequent MPF grain growth simulation.

次いで、上記の組織変換手法を用い、ミクロンオーダーの大規模 MD 核生成計算と PF 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. 27 (2019) 054002]。同手法による計算結果を図 6 に示す。(a) の MD 計算では、初期サイズ  $1.03 \times 1.03 \times 0.11 \mu\text{m}^3$ 、原子数約 100 億、温度  $0.67T_m$  の純鉄薄膜 (FS ポテンシャル) を対象として、256 GPUs 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 生成組織を上記手法により PF 構造へと変換し、引き続き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組織発展計算は、

大規模 MD と PF を相補的に用いた解析により初めて可能となった。

## 5. 今年度の研究成果の詳細

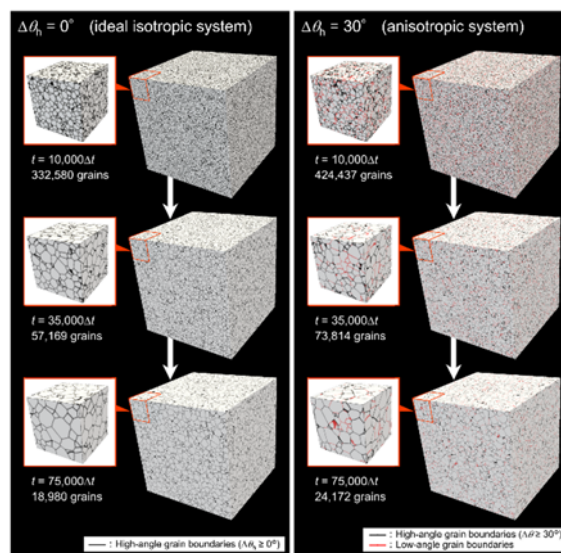
「2. 研究の意義と目的」で述べた目的に沿って、粒界異方性を考慮した粒成長の大規模 PF コード開発、および MD 法と PF 法のデータ同化による粒界物性評価用のコード開発を行った。以下、各成果の詳細を述べる。なお、3 節の図 6 に示す成果を基に論文を執筆し、令和元年 5 月に *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* (IF=1.826) にて出版された [*Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* 27 (2019) 054002]。また、図 3 に示したような大規模理想粒成長シミュレーションに対し、零ノイマン境界条件を用いて材料表面を簡便に導入し、薄膜中の粒成長挙動を解析した昨年度の成果も同紙で掲載に至った [*Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* 27 (2019) 054003]。

### 5.1 異方性粒成長の大規模 PF コード開発

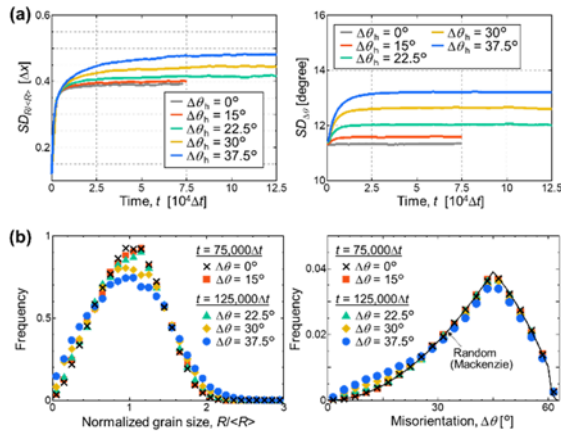
まず、粒界異方性問題を取り扱う上で最適な PF 粒成長モデルを選定するため、既存の各種 PF モデルおよび計算アルゴリズムのすべてを用いて、異方性物性の下での粒界移動シミュレーションを系統的に行い計算精度を評価した。その結果、Takaki らの収束計算アルゴリズム [T. Takaki, et al., *Mater. Trans.* 49 (2008) 2559] を導入した Steinbach らの MPF モデルが最も高効率・高精度に異方性粒成長を計算可能であることが明らかとなり、この成果は *ISIJ International* に掲載された [*ISIJ Int.* 60 (2019) 160]。

次いで、先に構築した MPF 粒成長の複数 GPU 並列計算コード (4.2 節) に対し、結晶方位差の効率的計算機能、収束計算アルゴリズムなどを実装し、方位差依存の異方性粒界物性を導入可能とした。さらに、同コードを用い、最も簡便な異方性モデルである Read-

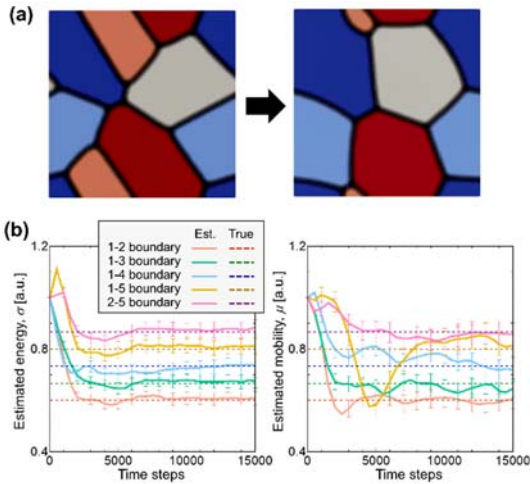
Shockley 関係・sigmoid 関係により異方性物性を導入し、図 7 に例示するような  $2560^3$  格子・3,125,000 初期粒の世界最大の異方性粒成長シミュレーションを行った。ここで、Read-Shockley 関係と sigmoid 関係に含まれる高角粒界閾値  $\Delta\theta_h$  を系の異方性強度の指標とし、この値を変化させて系統的計算を実施することで、異方性強度と粒成長挙動の相関を評価可能とした。結果の詳細な統計解析から、異方性の強弱によらず粒径分布や粒界方位差分布は時間的に変化しなくなり、粒成長が定常状態に達する (図 8(a)) ことを示した。一方で、定常時の組織形態は  $\Delta\theta_h$  値に依存し、 $\Delta\theta_h \geq 30^\circ$  の強異方性条件において理想粒成長 ( $\Delta\theta_h = 30^\circ$ ) 組織からの乖離が顕著となることを明らかにした (図 8(b))。さらに、異方性粒成長挙動は平均場理論などの既存の粒成長理論では表現できず、これは理論の導出に用いられた仮定が異方性を有する系では成立しないことに起因するという新たな知見を得た。これらの成果は現在論文として投稿中である。



**Fig. 7** Examples of the microstructural evolutions in large-scale PF grain growth simulations for  $\Delta\theta_h = 0^\circ$  and  $30^\circ$ .



**Fig. 8** (a) Temporal variations in standard deviation ( $SD$ ) for the distributions of normalized grain sizes ( $R/\langle R \rangle$ ) and boundary misorientation angles ( $\Delta\theta$ ) for different  $\Delta\theta_h$ . (b) Steady-state grain size and misorientation distributions for different  $\Delta\theta_h$ .

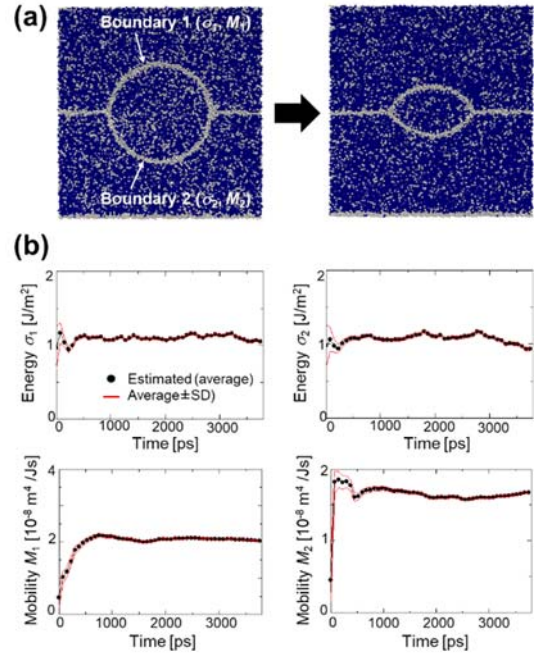


**Fig. 9** (a) PF grain growth simulation used for the twin experiment. (b) Temporal variations in estimated grain boundary energies and mobilities.

## 5.2 粒界物性評価のデータ同化コード開発と双子実験

データ同化による粒界物性評価の効率化と高精度化のため、これまでに作成したアンサンブルカルマンフィルタに基づくデータ同化コードを任意個数の粒を含む一般多結晶系に拡張した。さらに、図 9(a)に示す 5 結晶系粒成長での双子実験（物性値を真値に設定した PF 計算を観測データとしてデータ同化を行い、物性値の推定結果を真値と比較することで推定精度を評価する手法）により、構築したコードの妥当性を検証した。その結果、図 9(b)のように、同コードは多数の粒界

のエネルギーおよびモビリティを同時に精度良く推定可能であることが確認された。さらに詳細に双子実験を行ったところ、系内の粒界数 15 程度（推定パラメータ数およそ 30）までは高精度に物性の推定が行えることが明らかとなった。これらの成果については現在論文を執筆しており、近いうちに投稿予定である。



**Fig. 10** (a) MD grain growth simulation used for the twin experiment. (b) Temporal variations in estimated grain boundary energies and mobilities.

## 5.3 MD-PF データ同化による粒界物性取得

双子実験に引き続いて、実際の MD 粒成長を観測データに用いるデータ同化計算を行い、粒界物性の取得を試みた。図 10(a)は、基礎的検討として使用した単純な 3 結晶系 MD 計算結果の例であり、上下の長方形粒の粒界中央に半径 10 nm（約 20 万原子）の円形粒を配置し、純鉄の FS ポテンシャルを用いて温度 1300 K での粒収縮挙動を再現している。なお、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  $\langle 110 \rangle$  軸周り  $16^\circ, -16^\circ$  の回転を与えた。図 10(a)からわかるように、この計算条件では粒界が滑らかな形状を保ったま

ま粒収縮が進行している。図 10(b)は, (a)の計算から 4.3 節の手法により作成した PF 組織を観測データとし, データ同化を行って円形粒上下の粒界 1, 2 のエネルギー $\sigma_1, \sigma_2$ およびモビリティ $M_1, M_2$ を算出した結果である。いずれも推定値が一定に収束し, 純鉄粒界物性の典型的なオーダー ( $\sigma \sim 1 \text{ J/m}^2, M \sim 10^{-8} \text{ m}^4/\text{Js}$ ) の値が得られている。

この結果より, 粒界移動が滑らかに生じるような条件であれば, MD を用いたデータ同化は適切に物性値推定が可能であると考えられる。一方で, より一般的な多結晶系での MD 計算結果への適用は難航している。これは, 粒界面方位の異方性や熱揺らぎによる粒界移動の不規則性が顕在化するためであり, MD 計算の大規模化や時系列データの平均化により対処を試みたものの, 現状では十分な問題解決には至っていない。多様な種類の粒界に対する物性取得を考えると, 任意の粒構造へのデータ同化適用は必須であり, 本問題は今後最優先で解決に当たる必要がある。

## 6. 今年度の進捗状況と今後の展望

今年度の目標は, 粒界異方性を考慮した PF 並列 GPU コードを作成し, 系統的大規模シミュレーションを通して異方性粒成長の統計的挙動を明らかにするとともに, MD-PF データ同化により粒界物性の取得を行い, より現実的な物性値を用いた PF 計算を可能とすることであった。これらのうち異方性粒成長シミュレーションについては, 先行研究を圧倒する計算規模を実現し, 現象の解明と理論的解釈に資する多くの知見が得られ, 当初の想定以上の成果があった。また, データ同化用コードの作成と双子実験による妥当性評価も滞りなく完了した。一方で, 5.3 節で述べた MD 計算における熱揺らぎ, 粒界面方位異方性の問題のため, 粒界物性の詳細な取得には至っていない。今後, MD 計算の計算条件や解析方法をさらに詳しく検討するほか, PF

計算に熱揺らぎによる粒界移動の駆動力を導入するなど, MD・PF の両面から問題解決に向けたアプローチを図る。今年度の研究全体としては, 成果が 3 編のジャーナルで報告されたことに加え, 投稿中および執筆中の論文も各 1 編あり, 総合的な進捗は良好であったと考える。

令和 2 年度は, これまで構築してきた通常粒成長の計算手法を異常粒成長問題へと拡張することを予定している。その際, 今年度の未解決課題である粒界異方性物性の詳細な取得をまず達成し, 物性データベースを導入した大規模 PF 粒成長計算を系統的に行うことで, 粒界異方性が異常粒成長やそれに伴う集合組織形成に及ぼす影響を初めて明らかとする。これにより, 通常粒成長と異常粒成長の統一的な理解と予測を可能とし, 所望の組織を得るために加工熱処理条件を最適化する数値計算援用材料プロセス設計の技術深化に繋げる。

## 7. 研究業績一覧 (発表予定も含む)

### (1) 学術論文 (査読あり)

E. Miyoshi, T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, Large-scale phase-field study of anisotropic grain growth: effects of misorientation-dependent grain boundary energy and mobility, (2020). (submitted)

E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, Accuracy evaluation of phase-field models for grain growth simulation with anisotropic grain boundary properties, ISIJ Int. 60(1) (2019) 160-167.

E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane, T. Aoki, Large-scale phase-field simulation of three-dimensional isotropic grain growth in polycrystalline thin films, Modell. Simul. Mater. Sci. Eng. 27 (2019) 054003.

Y. Shibuta, S. Sakane, E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Micrometer-scale molecular dynamics simulation of microstructure formation linked with multi-phase-field simulation in same space scale, *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* 27 (2019) 054002.

(2) 国際会議プロシーディングス (査読あり)  
なし

(3) 国際会議発表 (査読なし)

Y. Shibuta, Microstructure formation from atomistic viewpoint, TMS2020, February 23-27, 2020, San Diego, USA. (*invited*)

T. Fukushima, E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, Investigation of a Method for Estimating Grain Boundary Properties by Data Assimilation Using Molecular Dynamics and Phase-Field Methods, APCOM2019, December 18–21, 2019, Taipei, Taiwan.

E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane, T. Aoki, Effects of Misorientation-Dependent Grain Boundary Properties on Grain Growth: Large-Scale Phase-Field Simulations and Analysis, APCOM2019, December 18–21, 2019, Taipei, Taiwan.

E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, Estimation of anisotropic grain boundary properties through data assimilation for molecular dynamics and phase-field simulations, ReX&GG2019, August 4-9, 2019, Ghent, Belgium.

Y. Shibuta, S. Okita, E. Miyoshi, S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Grain growth kinetics by large-scale molecular dynamics

simulation, ReX&GG2019, August 4-9, 2019, Ghent, Belgium. (*invited*)

T. Takaki, High-performance phase-field computing of solidification and grain growth, PF19, July 22-25, 2019, Bochum, Germany. (*plenary talk*)

E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane, T. Aoki, Large-scale multi-phase-field simulations of anisotropic grain growth-Effects of misorientation-dependent boundary energy and mobility, PF19, July 22-25, 2019, Bochum, Germany.

E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane, T. Aoki, Large-scale multi-phase-field simulation of polycrystalline grain growth with anisotropic grain boundary properties, ICASP5-CSSCR5, June 17-21, 2019, Salzburg, Austria.

Y. Shibuta, Bridging the gap between atomistic and microstructure-scale simulations of solidification: From a perspective of large-scale molecular dynamics simulation, ICASP5-CSSCR5, June 17-21, 2019, Salzburg, Austria. (*plenary talk*)

(4) 国内会議発表 (査読なし)

澁田靖, 凝固・組織形成に関する分子動力学研究の現状と展望, 軽金属学会第 137 回秋期大会, 2019/11/1-3, 東京農工大学. (基調講演)

三好英輔, 高木知弘, 大野宗一, 澁田靖, 坂根慎治, 青木尊之, 粒界物性の異方性を考慮した大規模 multi-phase-field 粒成長計算, 日本機械学会第 32 回計算力学講演会, 2019/9/16-18, 東洋大学.

福島拓実, 高木知弘, 大野宗一, 坂根慎治, 青木尊之, 分子動力学法と phase-



field 法を用いたデータ同化による粒界物性評価法の検討, 第 24 回計算工学講演会, 2019/5/29-31, 大宮ソニックシティ.

三好英輔, 高木知弘, 大野宗一, 坂根慎治, 青木尊之, 多結晶粒成長における粒界物性の方位差依存性の影響: 大規模 phase-field シミュレーションによる解析, 日本材料学会第 68 期通常総会・学術講演会, 2019/5/24-26, 室蘭工業大学.

- (5) その他 (特許, プレスリリース, 著書等)  
なし