

jh200012-NAH

異常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）

概要

多結晶材料の熱処理で生じる粒成長は、多数の結晶粒が平均的に成長する通常粒成長、少数の粒が優先成長する異常粒成長に大別され、状況に応じた両現象の適切な予測が材料高性能化の鍵となる。このためには、シミュレーションによる系統的な粒成長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活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。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、通常粒成長と異常粒成長の統一的理解と予測を可能とすることで、計算駆動材料開発の加速を目指す。今年度は、先に開発した通常粒成長の大規模 PF 計算法を異常粒成長に応用し、系統的な計算を行うことにより、従来の異常粒成長理論の妥当性を初めて明らかとした。また、同計算法を用いて擬似的な集合組織を用いた異常粒成長計算を実施し、異常粒成長の発生における粒界異方性および初期組織の影響を解明した。さらに、PF 法と MD 法のデータ同化による AI の粒界物性の取得を行い、取得結果の妥当性を示した。

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（東京農工大学・大学院工学研究院）：

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・機械工学系）：

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

仲井 蒼示（京都工芸繊維大学・大学院工芸科学研究科）：

異常粒成長 MPF モデルの実装と計算

2. 研究の目的と意義

多結晶材料の熱処理時に生じる粒成長は、種々の材料製品の微視組織・特性を決定する最も重要な冶金学現象の一つである。粒成長は、多数の結晶粒が平均的に成長する通常粒成長、少数の粒が優先的に成長する異常粒成長の二種に大別され、状況に応じた両現象の適切な予測が材料高性能化の鍵となる。このためには数値計算による系統的評価が不可欠であるが、次の3つの課題が未解決であり、数値計算を材料開発に生かしていなかった。：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り通常粒成長の高精度予測と現象解明を試み、これらの成果は世界的に高く評価された。今年度の研究では、これまでに構築した通常粒成長の大規模 PF 計算法を異常粒成長問題に応用するとともに、MD とデータ同化を援用して realistic な粒界物性情報の導入を図る。これにより、粒界異方性が異常粒成長の発生・進展に及ぼす影響を、大規模 PF 計算の系統的評価を通じて解明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、原子計算 (MD 等)、データ科学、HPC を融合した新しい材料開発の枠組を提案するという点で独創性が高く、当該分野へのインパクトは極めて大きい。

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 5 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 31 年度までの 5 年間にわたり行ってきた。以下に平成 31 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 1.024×10^9 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。

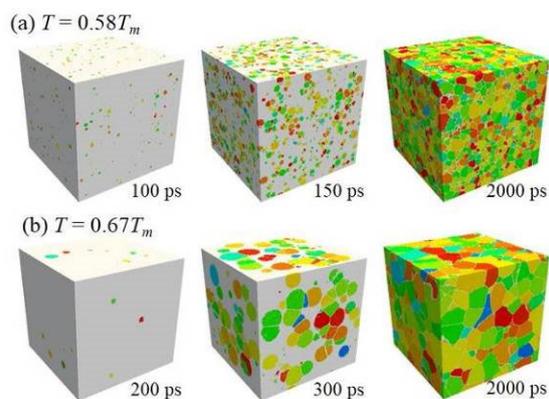


Fig. 1 Snapshots during very-large-scale MD simulations with spontaneous homogeneous nucleation and solidification.

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。

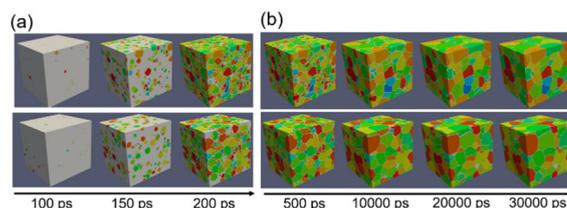


Fig. 2 Snapshots of simulation cells for (a) nucleation, solidification and (b) subsequent grain growth for two independent calculations of 30000 ps.

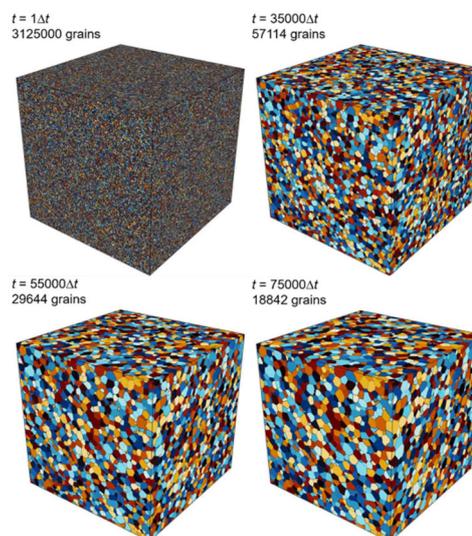


Fig. 3 Snapshots during very-large-scale MPF grain growth simulation.

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、取り扱う粒子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 、初期粒子数は 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。

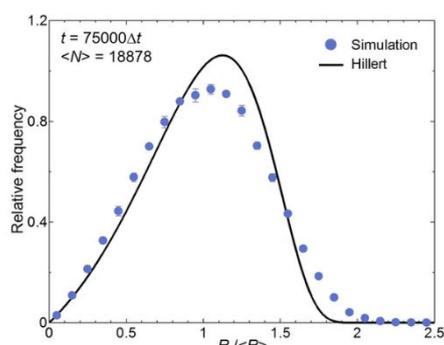


Fig. 4 Grain size distribution at steady state growth condition (75,000th step).

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° 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。

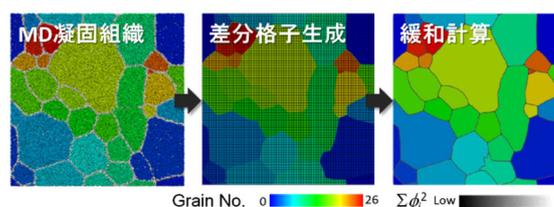


Fig. 5 Procedure to develop an initial polycrystalline structure for MPF simulation from MD simulation result.

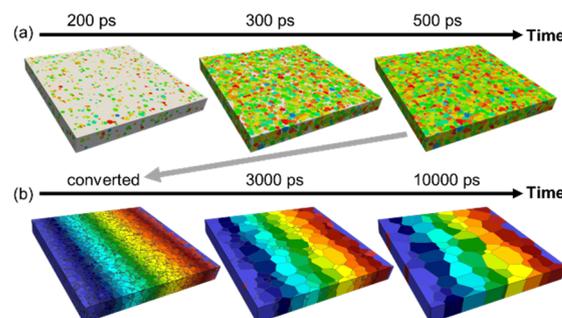


Fig. 6 (a) Snapshots of (a) large-scale MD nucleation simulation and (b) subsequent MPF grain growth simulation.

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。

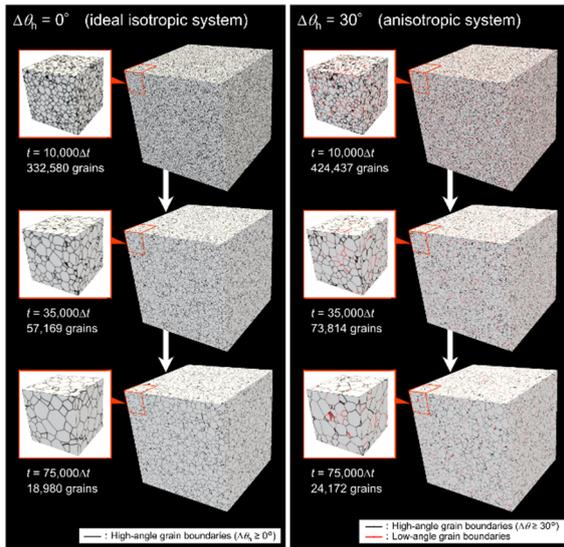


Fig. 7 Examples of the microstructural evolutions in large-scale PF grain growth simulations for $\Delta\theta_h = 0^\circ$ and 30° .

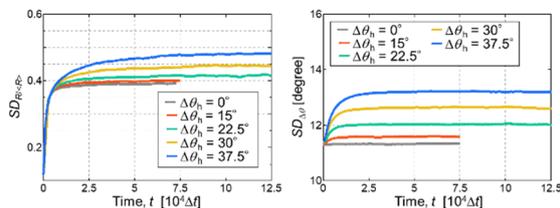


Fig. 8 Temporal variations in standard deviation (SD) for the distributions of normalized grain sizes ($R/\langle R \rangle$) and boundary misorientation angles ($\Delta\theta$) for different $\Delta\theta_h$.

4.4 異方性粒成長の大規模 PF コード開発

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、不均一な粒界物性を精度良く扱うための収束計算アルゴリズムを実装し、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することで、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実現した。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) ことを初めて明らかとした。さらに、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、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ためであることなど、現象解明に資する多くの知見を得た。

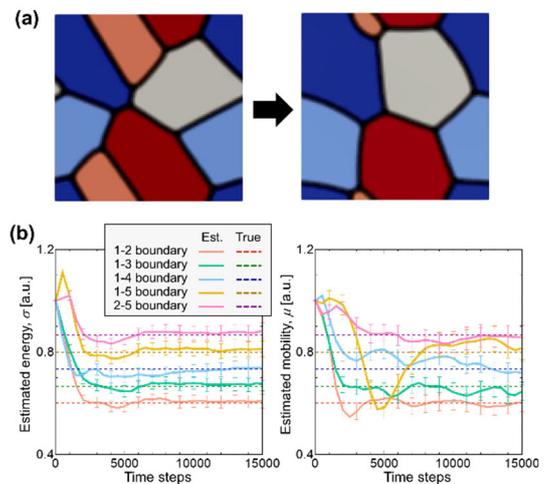


Fig. 9 (a) PF grain growth simulation used for the twin experiment. (b) Temporal variations in estimated grain boundary energies and mobilities.

4.5 粒界物性評価のデータ同化コード開発と双子実験

MD 粒成長データを観測データとした粒界物性推定を可能とするため、アンサンブルカルマンフィルタと MPF モデルに基づくデータ同化コードを開発した。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を示した。

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異常粒成長の大規模 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、4.4 節の図 7~8 に示すような成果を基に論文を執筆し、令和 2 年 1 月に Computational Materials Science (IF=2.863) にて出版された [Comput. Mater. Sci. 186 (2020) 109992]。また、4.5 節の図 9 に示したような双子実験による粒界物性推定の妥当性検証について論文を執筆し、現在投稿中である。

5.1 異常粒成長の大規模 PF コード開発と粒成長理論の検証

異常粒成長の発生の有無や異常成長粒の最大到達サイズを簡便に予測する理論として、Humphreys 理論がよく知られている。しかしながら、通常規模の計算では異常成長粒の挙動を長期にわたり観察することは難しく、同理論の妥当性は未だ十分に検証されていない。そこで、昨年度までに構築した通常粒成長の PF 計算コードを拡張し、特定の粒が周囲を蚕食して成長する異常粒成長の複数 GPU 並列計算を可能とした。次いで、シンプルな 2 次元系および 3 次元系での異常粒成長を対象とし、同コードを用いて系統的計算を行うことで Humphreys 理論の妥当性検証を図った。

計算では、図 10 に示すように、均一な粒界エネルギー σ_m 、モビリティ M_m を有する結

晶粒群 (マトリクス) で埋め尽くした 16000^2 格子 2 次元系および 1240^3 格子 3 次元系の計算領域中央に円形 (球形) の粒を配置し、この粒の粒界エネルギー σ 、モビリティ M 、初期半径を計 64 通りに変化させた。多数の計算を実施する都合上、3 次元系の計算領域サイズは 4.2 節や 4.4 節の超大規模計算に比べ小さく設定したが、なお先行研究における最大級の異常粒成長計算を 50 倍を上回る規模である。結果の詳細な解析から、円形 (球形) 粒の異常成長の発生の有無は、Humphreys 理論による予測とよく一致することを明らかとした。さらに、異常成長時の円形 (球形) 粒とマトリクス粒との粒径比 R/R_m は、同理論の予測値に近い値に収束していくことが確認され (図 11)、理論の妥当性を支持する新しい知見が得られた。現在、これらの結果についてさらに詳細な考察を加え、論文投稿を準備中である。

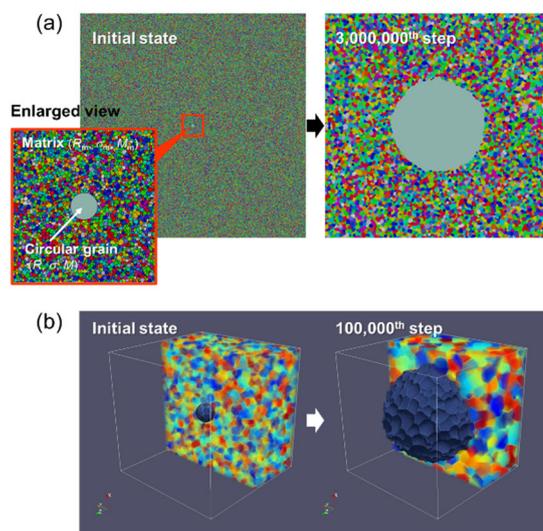


Fig. 10 Snapshots of abnormal grain growth simulations for (a) 2D and (b) 3D idealized polycrystalline systems. In (b), matrix grains are shown only for a half of the domain to better visualize the abnormally growing grain.

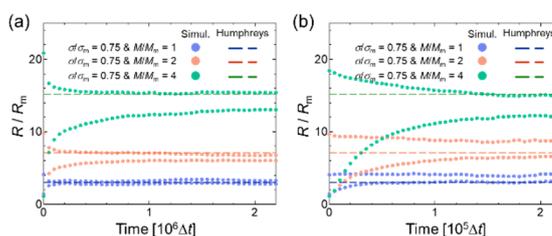


Fig. 11 Temporal variations in R / R_m for different σ_m / σ , M / M_m , and initial R / R_m values, as calculated for (a) 2D and (b) 3D systems shown in Fig. 10.

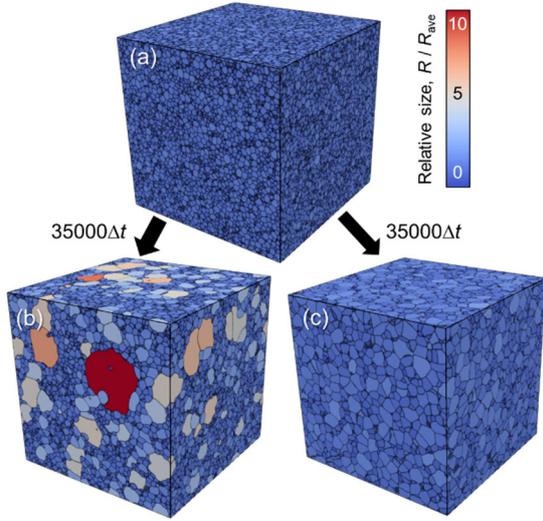


Fig. 12 Snapshots of abnormal grain growth simulations in textured systems. (a) Initial state. (b, c) Evolved microstructures for the conditions of (b) mobility anisotropy with $\Delta\theta_{ave} = 3^\circ$ and (c) energy anisotropy with $\Delta\theta_{ave} = 3^\circ$. The colors of grains indicate their sizes R relative to average grain size R_{ave} .

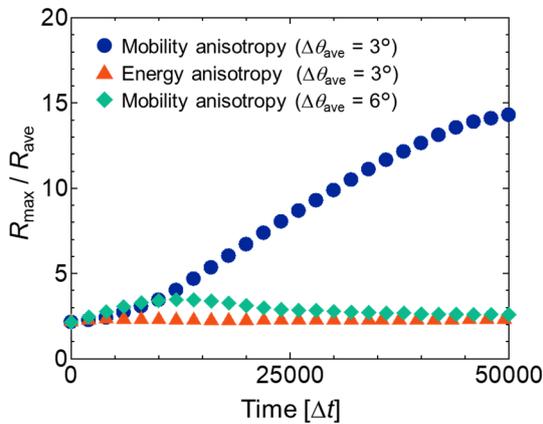


Fig. 13 Temporal variations in R_{max} / R_{ave} for different conditions of boundary property anisotropy and texture strength.

5.2 集合組織における異常粒成長計算

集合組織（結晶粒がある特定の方位に配向した組織）を有する材料では、異常粒成長がしばしば生じる。このような異常粒成長の発生は粒界物性（エネルギー・モビリティ）異方性に起因することが示唆されているが、エ

ネルギーとモビリティのいずれが支配的な影響を持つかは不明である。本研究では、集合組織を模擬した系において粒界物性異方性を伴う大規模 PF 計算を行い、この問題の解明を図った。

計算には図 12(a)に例示するような 1024^3 格子、約 20 万結晶粒の系を用い、粒界エネルギーとモビリティの異方性は、最も簡便なモデルである Read-Shockley 関係と sigmoid 関係により導入した。ここで、各結晶粒の方位を表す 3 つの Euler 角を平均 0° の正規分布乱数で与え、正規分布の標準偏差を変化させることで、結晶方位の集積度（平均粒界方位差 $\Delta\theta_{ave}$ ）の異なるさまざまな疑似集合組織を作成して計算を行った。その結果、粒界エネルギーを異方性とした系では常に通常粒成長が生じる一方、粒界モビリティ異方性を伴う系では、最大粒の粒径 R_{max} が平均粒径 R_{ave} の 10 倍以上まで達する顕著な異常粒成長が確認された（図 12 (b, c), 図 13)。さらに、モビリティ異方性を有する系であっても、明瞭な異常粒成長の発現には平均粒界方位差 $\Delta\theta_{ave} = 3^\circ$ 程度の強い集合組織が必要となることが示され（図 13）、異常成長メカニズムにおける粒界モビリティ異方性と集合組織強度の重要性が明らかとなった。

5.3 MD-PF データ同化による AI 物性評価

現実的な異方性粒界物性を導入した異常粒成長評価を可能とするため、MD 粒成長計算と PF 計算とのデータ同化により粒界物性の取得を行った。ここで、前年まで MD 計算に用いていた Fe に代えて、粒界面方位の異方性の弱い Al を対象材料とした。さらに、汎用ソフト LAMMPS の使用により温度制御・圧力制御を高精度化することで、粒界の熱揺らぎを抑制し、PF 法とのデータ同化への適用性向上を図った。

図 14(a)はデータ同化に用いた MD 計算結果の一例であり、上下の長方形粒の粒界中央

に半径約 10 nm の円形粒を配置し、純 Al の FS ポテンシャルを用いて温度 800 K での粒収縮挙動を再現している。ここで、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 $30^\circ, 45^\circ$ の回転を与えた。4.3 節の組織変換手法により、MD 結果の原子配列を PF 組織 (図 14(b)) へと変換してデータ同化の観測データに用い、円形粒上下の粒界のエネルギー σ_1, σ_2 およびモビリティ M_1, M_2 を推定した。図 15 は、図 14 の系でのデータ同化より推定された粒界物性値 ($\sigma_1 = 0.76 \text{ J/m}^2$, $\sigma_2 = 0.54 \text{ J/m}^2$, $M_1 = 1.46 \text{ m}^4/(\text{Js})$, $M_2 = 1.58 \text{ m}^4/(\text{Js})$) を用いて、図 14(b)左図を初期構造とした PF 計算を行い、(a)の MD 計算とで円形粒面積の時間変化を比較した結果である。両計算結果はきわめて良好に一致しており、粒界物性の推定値の妥当性が確認できる。

以上のような MD-PF データ同化を、各結晶粒の結晶方位を変化させて行い、種々の Al 粒界に対して物性を高精度に求めることに成功した。一方で、Al であっても一部の粒界は顕著な面方位異方性を呈し、これらの粒界では物性推定の精度が低下することが明らかとなった。今後、粒界物性の面方位依存性を考慮可能な PF モデルを導入するなどの対策を取り、あらゆる粒界構造への物性推定法の完成を図る。

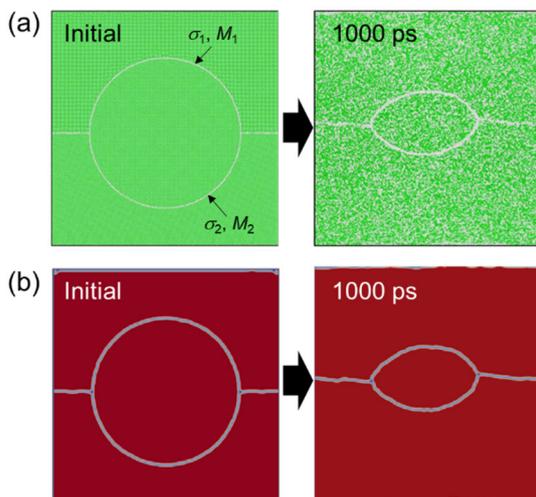


Fig. 14 (a) MD grain growth simulation used for estimating Al grain boundary properties by data assimilation. (b) Phase-field structures converted from (a).

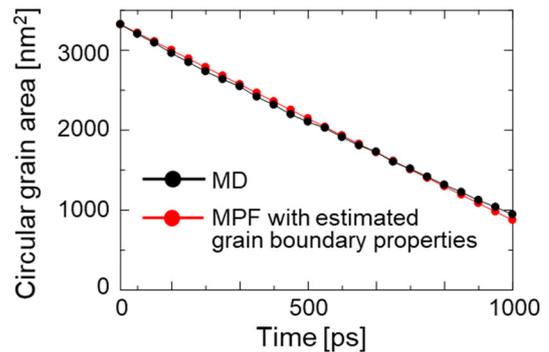


Fig. 15 Temporal variations in circular grain area, as calculated from the MD results shown in Fig. 14 and MPF simulation with estimated grain boundary properties.

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

今年度の研究では、(1)先に構築した PF 並列 GPU コードを異常粒成長に拡張し、シンプルなモデル系において異常粒成長理論を検証すること、(2)同コードを用いて、より一般的な組織における異常粒成長の発生メカニズムを解明すること、(3) 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粒成長挙動評価を可能とすること、の 3 点を目標とした。(1) (2) の異常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規模での系統的計算を実現し、粒成長の未解決問題を解明する多くの興味深い結果が得られた。また、(3) の物性取得では、種々の Al 粒界エネルギーとモビリティの高精度な評価に成功し、PF 計算を現象の定量的再現に向けて前進させる成果を示した。通常粒成長に関する論文がジャーナル掲載に至ったほか、異常粒成長・データ同化に関して投稿中および執筆中の論文が各 1 編あり、多様な分野において学術的発見が得られている。これらの点から、総合的な研究進捗は良好であったと考える。

今後は、粒界物性評価において残った課題である面方位異方性問題を解決し、物性の詳

細なデータベース化を急ぐ。これにより、当共同研究で構築してきた PF 法・MD 法・データ科学・HPC 融合による粒成長計算法を最終完成させる。本手法の完成は、従来のシミュレーションの計算精度・計算規模・物性値の問題を解消し、定量的な材料組織予測を可能とするものであり、計算駆動型材料開発の大幅な加速をもたらすことが期待される。

- (5) 公開したライブラリなど
なし
- (6) その他(特許, プレスリリース, 著書等)
なし

7. 研究業績一覧(発表予定も含む。投稿中・投稿予定は含まない)

(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, *Comput. Mater. Sci.* 186 (2020) 109992.

(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)

E. Miyoshi, T. Takaki, Y. Shibuta, M. Ohno, Data assimilation-based approach to estimate grain boundary properties using phase-field grain growth simulations, TMS2021, March 15-18, 2021, Online.

E. Miyoshi, T. Takaki, Y. Shibuta, M. Ohno, Validation of a novel measurement method for anisotropic grain boundary properties based on data assimilation and multi-phase-field simulation, COMPSAFE2020, December 8-11, 2020, Online.

(4) 国内会議発表 (査読なし) なし