jh130014-NA09

*高木 知弘（京都工芸繊維大学）*

# 大規模フェーズフィールド計算による高精度凝固組織予測システムの構築

## ■ 研究背景

軽量かつ高強度な新材料の開発のためには，ミクロンオーダーの材料組織を高精度にコントロールすることが極めて重要である．材料組織は，鋳造・圧延・熱処理・塑性加工といった様々な加工プロセスでその形態を変化させるが，凝固組織を高精度にコントロールしておけば，引き続き行われる加工プロセスにおいて形成される組織コントロールが容易もしくは不要となる．典型的な凝固組織形態はデンドライト（樹枝状結晶）であるが，極めて複雑な形態を有しているため，最も強力なモデルであるフェーズフィールド法による大規模計算が必要となる．

## ■ 研究目的

本研究では，新材料開発を支援する大規模フェーズフィールド計算に基づく高精度凝固組織予測システムの構築を目的とする．本研究は，2011年にゴードンベル賞を受賞した研究の継続研究であり，今年度は，結果が界面幅に依存しない定量的フェーズフィールド法を導入し，実用的なシステムの構築を目指す．また，系統的な大規模シミュレーションを行うことで，複数デンドライト間の競合成長メカニズムを解明し，新材料開発のために必要となる基礎データの蓄積を行う．

## ■研究計画

はじめに，定量的フェーズフィールドモデルのTSUBAME用並列GPUプログラムの作成を行う．ここで，デンドライト先端近傍のみを追従するmoving frame algorithmを採用し計算コストの低減を図る．作成したプログラムによる2Dおよび簡単な3D計算により，隣り合う2本のデンドライトの淘汰現象を整理する．また，TSUBAMEは殆どの GPU が新しいものに入れ替わり、メモリと計算性能が2倍以上になると予想される．このため，2500×2500×1500程度の差分格子を用いた異なる優先成長方向を有する多数デンドライトの一方向凝固計算を複数回行い，複雑なデンドライトの淘汰メカニズムの解明を試みる．

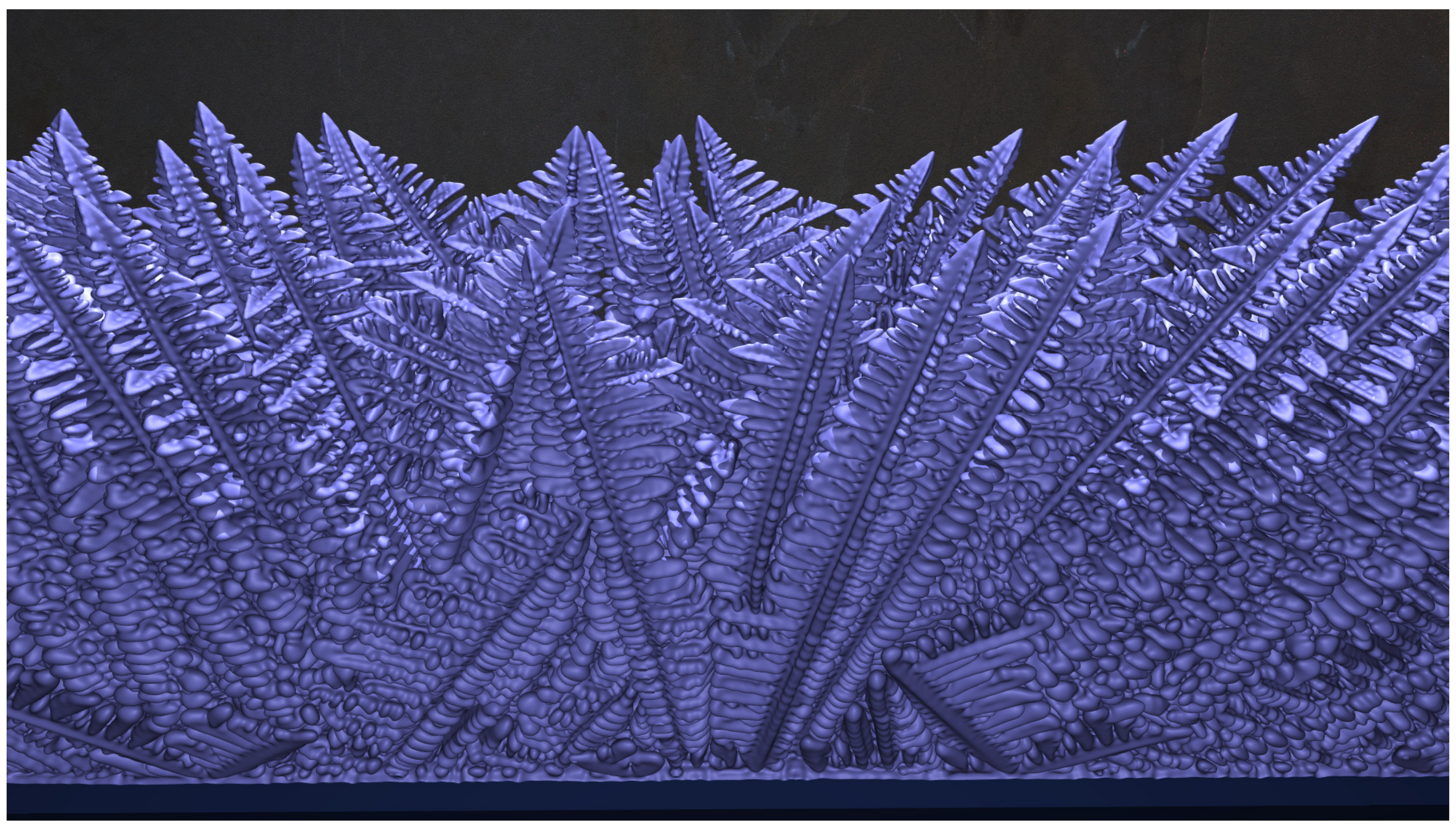

図1 2011年ゴードンベル賞を受賞したAl-Si二元合金の一方向凝固シミュレーション結果

## ■ 共同研究体制

青木 尊之（東京工業大学 学術国際情報センター）
大野　宗一（北海道大学 大学院工学研究院）
下川辺　隆史（東京工業大学 学術国際情報センター）
堀井 麻有（京都工芸繊維大学 工芸科学研究科）
高木 知弘（京都工芸繊維大学 大学院工芸科学研究科）

## ■ Phase-field法

Phase-field法は，新たに導入するphase-fieldと呼ばれる秩序変数により異なる相を表現し，反応拡散方程式に帰着する時間発展方程式を解くことで，比較的容易に複雑な界面形態変化を表現する方法である．

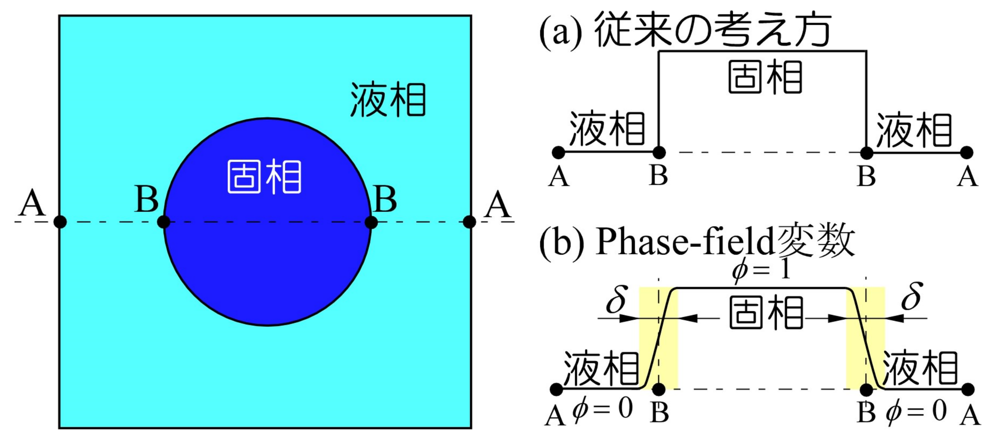


図2 Phase-field変数

## ■ 定量的phase-fieldモデルによる二元合金一方向凝固計算

複数デンドライトの競合成長における淘汰現象を定量的に解明するために，定量的phase-fieldモデル[Ohno, PRE, 2009]を用いた二元合金の2D&3D一方向凝固シミュレーションを行う．

Phase-field方程式【$\phi = 1$ : solid, $\phi = -1$ : liquid】

$$a_s(\theta)^2\left[1-(1-k)u'\right]\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla\cdot\left(a_s(\theta)^2\nabla\phi\right) - \frac{\partial}{\partial x}\left[a_s(\theta)\frac{\partial a_s(\theta)}{\partial \theta}\frac{\partial \phi}{\partial y}\right] + \frac{\partial}{\partial y}\left[a_s(\theta)\frac{\partial a_s(\theta)}{\partial \theta}\frac{\partial \phi}{\partial x}\right] - \frac{df(\phi)}{d\phi} - \lambda^*\frac{dg(\phi)}{d\phi}(u+u')$$

$$u = \frac{c_l - c_l^e}{c_l^e - c_s^e},\quad u' = \frac{y - V_p t}{l_T},\quad a_s(\theta) = a_0(1-3\zeta)\left\{1 + \frac{4\zeta}{1-3\zeta}\frac{(\partial_x\phi)^4 + (\partial_y\phi)^4}{|\nabla\phi|^4}\right\}$$

溶質拡散方程式

$$\frac{1}{2}\left[1+k-(1-k)\phi\right]\frac{\partial u}{\partial t} = a_2\lambda^*\nabla\left[q(\phi)\nabla u\right] + \nabla\left[a(\phi)\left[1+(1-k)u\right]\frac{\partial \phi}{\partial t}\frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|}\right] + \frac{1}{2}\left[1+(1-k)u\right]\frac{\partial \phi}{\partial t} - a_2\lambda^*\nabla\cdot\left[\frac{2F_u^0}{\Delta t\Delta x^2}q(\phi)\left[1+(1-k)u\right]\Pi\right]$$

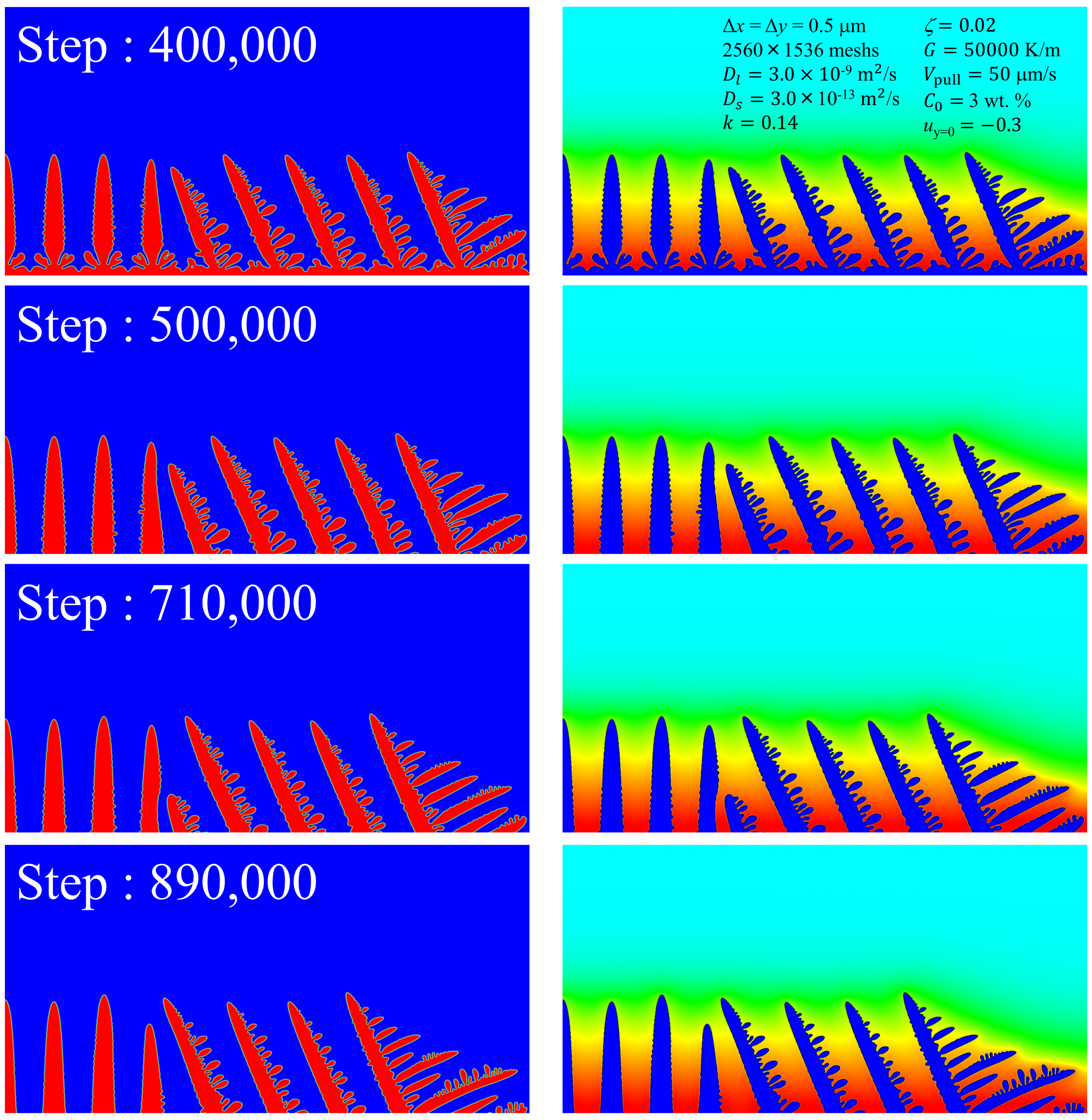


図3 定量的フェーズフィールドモデルを用いたAl-3wt%Cuの2D一方向凝固シミュレーション結果