

高木 知弘 (京都工芸繊維大学)

フェーズフィールド法と分子動力学法による
大規模デンドライト成長シミュレーション

■ 研究背景

凝固組織を高精度に予測および制御することは、製品の軽量化や高機能化において極めて重要である。一般的な凝固組織は、デンドライトと呼ばれる樹枝状結晶の成長によって形成されるため、凝固組織を精度良く評価するためにはデンドライト成長メカニズムの解明、および複数デンドライトの競合成長による実用的な凝固組織予測手法の確立が極めて重要となる。

■ 研究目的

本研究では、GPUスパコンSUBAME2.5を用いた分子動力学法とフェーズフィールド法の大規模並列化シミュレーションを可能とすることで、デンドライト形成メカニズムの解明と、多結晶体の一方向競合成長シミュレーションによるデンドライト競合成長現象の解明にチャレンジする。

■ 研究計画

図1は単一GPUを用いた分子動力学シミュレーションによる過冷却融液からの固相成長過程の結果である。このように、単一GPUを用いた100万原子のシミュレーションにより、結晶成長過程における自発的異方性形態の再現に成功した。本研究では、この計算の複数GPUを用いた大規模化を行い、分子動力学シミュレーションによるデンドライト成長の再現にチャレンジする。また、形成されたデンドライト成長をフェーズフィールドシミュレーション結果と比較し、フェーズフィールドモデルの更なる高精度化を図る。図2は1,536 × 1,536 × 1,024差分格子を用いた2結晶体のデンドライト競合成長フェーズフィールドシミュレーション結果である。この計算手法に対して適合細分化格子(Adaptive Mesh Refinement : AMR)法を適用し、更なる大規模計算を可能とすることで、3次元多結晶一方向凝固シミュレーションを行い、完全3次元空間におけるデンドライト競合成長現象の解明を試みる。

■ 共同研究体制

高木 知弘 (京都工芸繊維大学), 青木 尊之 (東京工業大学), 大野 宗一 (北海道大学),
澁田 靖 (東京大学), 下川辺 隆史 (東京工業大学), 坂根 慎治 (京都工芸繊維大学)

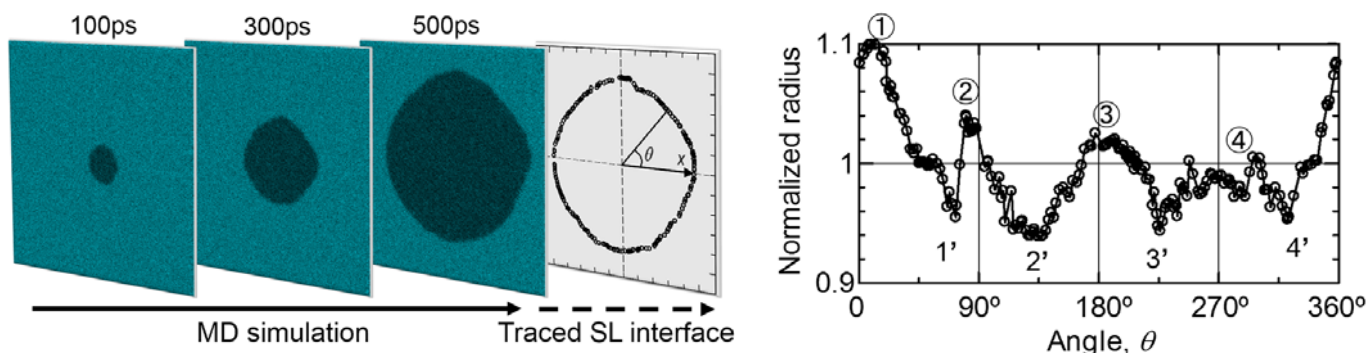


図1 100万原子を用いた単一GPU分子動力学シミュレーションによる凝固過程の固相異方性形態

[Y. Shibuta, M. Ohno, and T. Takaki, JOM, 2015]

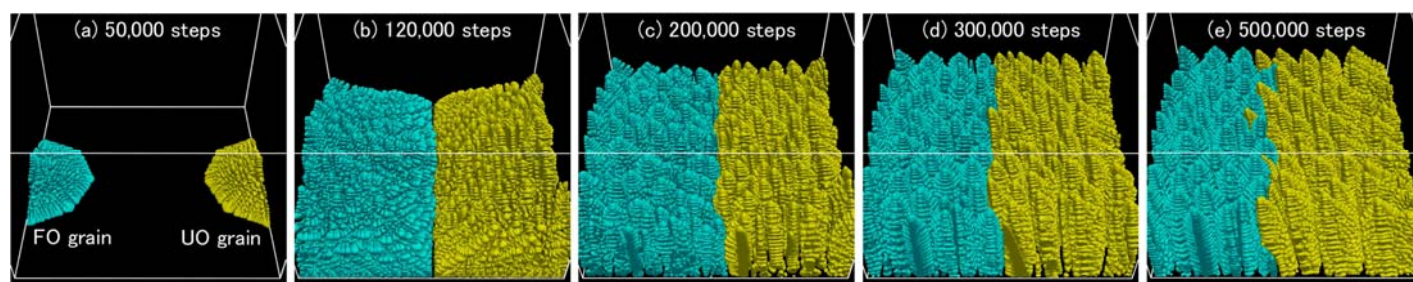


図2 二元合金2結晶体の一方向凝固フェーズフィールドシミュレーションにおけるデンドライト競合成長

[Y. Shibuta, M. Ohno, and T. Takaki, JOM, 2015]