

分子動力学法とフェーズフィールド法の融合による 粒成長の高精度解析法の構築



■ 背景

通常金属材料は多結晶組織を有しており、この組織を如何に微細化し高強度化を達成するかが、金属材料の軽量化や新材料開発において鍵となる。多結晶組織を形作る粒成長 (grain growth) は高温の材料内部で生じる現象であり、実験による観察は困難である。そのため、コンピュータシミュレーションによる再現が不可欠となる。昨年度の研究において、分子動力学 (molecular dynamics : MD) 法による自発的凝固核生成から粒成長までを連続して評価可能な計算に成功した (図1)。これは、演算性能の高い Graphics Processing Unit (GPU) による計算の高速化と、複数GPU並列化による計算の大規模化によって達成された。しかしながら粒成長では、粒サイズが大きくなるとその時間変化は顕著に遅くなりMDのみによる計算は極めて困難となる。

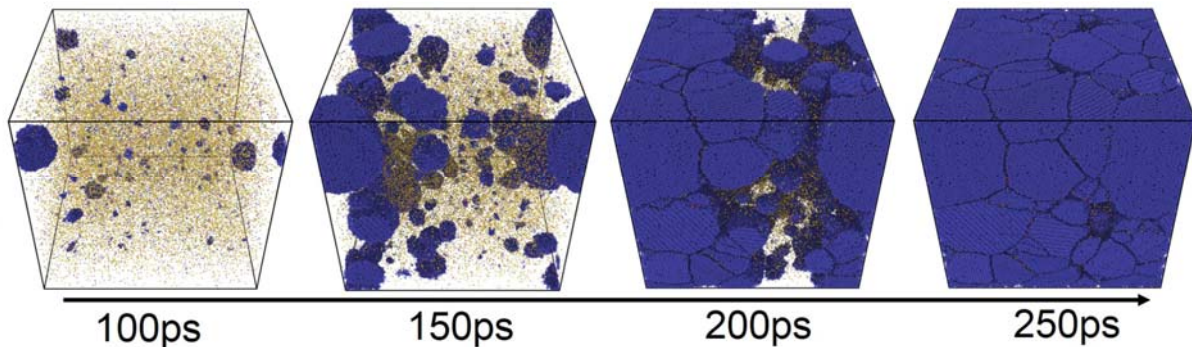


図1 MDによる凝固から粒成長の連続シミュレーション

[Y. Shibuta, S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Acta Mater., 105 (2016) 328-337]

■ 目的と作業内容

本研究では、凝固核生成から粒成長後期までを連続して表現可能な、MDとフェーズフィールド (phase-field : PF) 計算を連続して行う、新しい高精度粒成長解析法の構築を目的とする。この目的を達成するためには、多結晶粒成長を表現可能なマルチフェーズフィールド (multi-phase-field : MPF) モデルの高精度化と大規模計算が必要となる。具体的には以下 I~III の作業を行う。

I : 方位差と面方向に依存した粒界エネルギーと粒界モビリティの界面異方性物性の取得。

数十万原子のMD計算をスパコン上で並行して行い、粒界エネルギーと粒界モビリティの界面異方性物性値を取得する。この際、粒界エネルギー計算には従来の手法を、粒界モビリティの計算にはランダムウォーク法を用いる。

II : 界面異方性を高精度に導入可能な高次MPFモデルの構築。

現在用いられているMPFモデルは、粒界エネルギーとモビリティの異方性比がある一定以上になると計算が不安定化する問題を有している。このため、I で求めた物性値を精度良く反映させるために、高次MPFモデルを構築する。

III : 超大規模粒成長シミュレーション。

II で構築したMPFモデルによる超大規模粒成長を可能とする並列GPUコーディングを行う。この際、前年度構築した理想粒成長用MPFモデルと異なり、粒方位差と粒界面方位による異方性を導入することが必要となる。なお、TSUBAME3.0 がPascalアーキテクチャのGPU搭載スパコンとして稼働開始した場合には、Pascalコア向けのコードチューニングを行う。

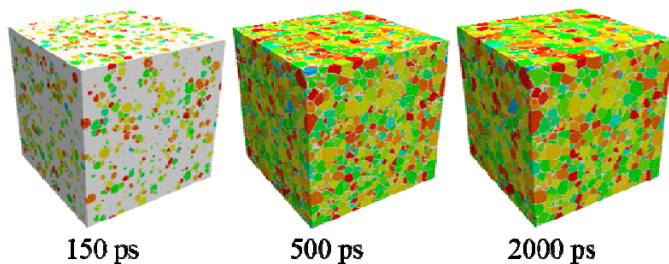


図2 10億原子を用いた超大規模MD計算

[Y. Shibuta et al., Nature Communications, 8 (2017) 10]

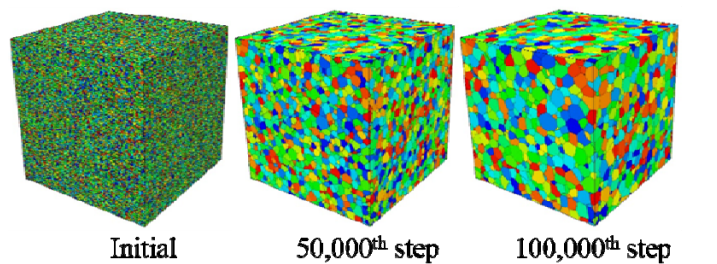


図3 2048³格子による超大規模MPF計算