

## データ同化による粒界異方性物性データベースの構築と大規模フェーズフィールド粒成長計算

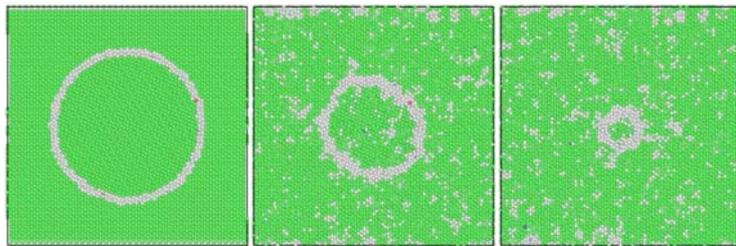


## 1. 背景と目的

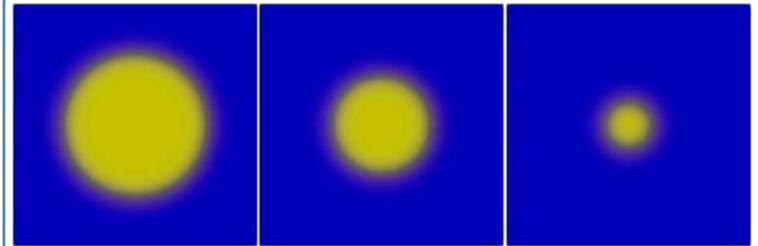
構造部材に用いられる金属材料の多くは多結晶組織を有しており、この多結晶組織を最適に制御することが構造物軽量化の鍵となる。多結晶組織は、不透明な金属材料の高温熱処理時に生じる粒成長 (grain growth) を通じて形成されるため、その形成過程の直接的な実験観察は不可能である。このため、コンピュータシミュレーションによる現象解明と組織制御が不可欠となる。本研究では、分子動力学(MD)法とフェーズフィールド(PF)法をデータサイエンスを用いて融合させ、粒界異方性物性のデータベースを構築し、MDとPFを融合させた粒成長シミュレーションの高精度化を目的とする。また、粒界異方性を考慮した大規模粒成長シミュレーションを行い、粒成長過程における統計的挙動を解明する。

## 2. 方法と計画

二結晶体における粒成長計算をMDを用いて系統的に行い、これを観測データとしてデータ同化の枠組みにおいてPFシミュレーションを行い、粒界異方性物性を取得する。この際、データ同化を高速化するためにGPU並列化を行う。系統的なデータ同化によって粒界物性のデータベースを構築し、これを用いた大規模粒成長PFシミュレーションを行うことで、粒界異方性を考慮した粒成長挙動の統計的挙動評価を行う。

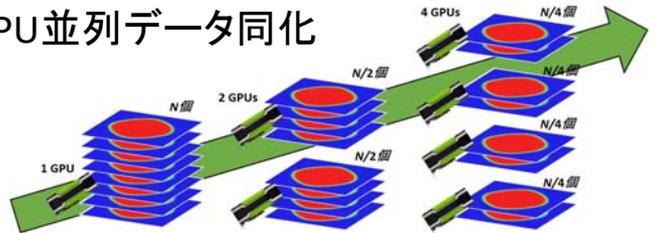


分子動力学シミュレーション



フェーズフィールドシミュレーション

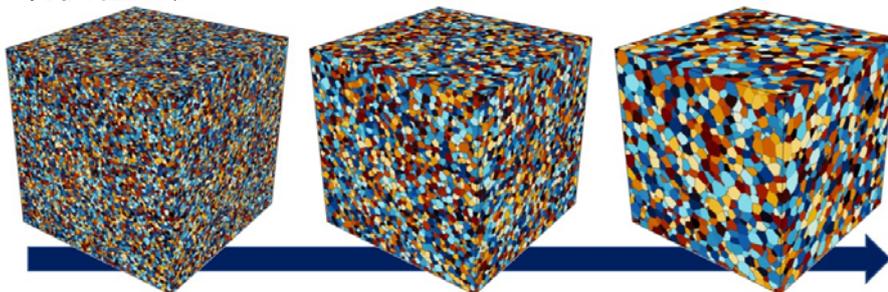
## GPU並列データ同化



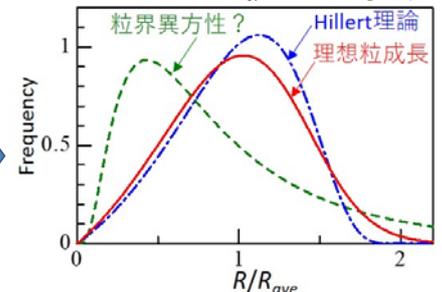
観測データ

粒界異方性物性のデータベース化

## 大規模粒成長フェーズフィールドシミュレーション



## 統計的挙動



## 3. 本研究の意義とインパクト

粒界エネルギーとモビリティの異方性特性の取得方法は未だに構築されていない。また、実際の金属材料における粒成長過程の真の統計的挙動も未解明である。本研究は、GPUスパコンの性能を最大限に生かし、データ同化の超並列計算と、大規模粒成長シミュレーションを行うことで、粒成長現象におけるこれまで解決されていない問題を解決し、今後の材料開発に寄与する強力なツールを構築するものである。