

粒界異方性を考慮した粒成長の大規模フェーズフィールドシミュレーション



1. 背景と目的

金属製品の最終的な材料微視組織・物性は、熱処理工程で生じる粒成長現象により決定されるため、新材料開発や既存材料の高性能化では粒成長過程の高精度な予測が極めて重要となる。このためにはコンピュータシミュレーションによる系統的な粒成長挙動評価が不可欠であり、これまで多くの数値的研究が行われてきた。しかしながら、次の3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生かせていないのが現状である。

- ◆ 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
- ◆ 実材料に対する粒界異方性物性のデータが不十分
- ◆ 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

本研究では、フェーズフィールド (PF) 法・分子動力学 (MD) 法・データ同化・HPC技術を融合することで上記課題を系統的に解決し、粒界異方性が粒成長挙動に及ぼす影響を解明することで、シミュレーション援用材料開発の加速を図る。

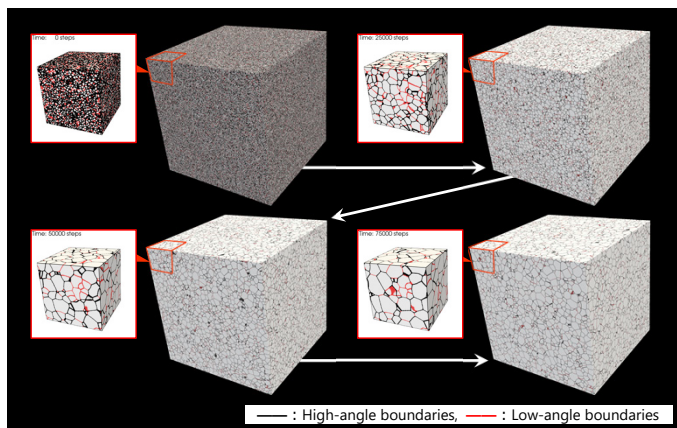
共同研究体制

高木知弘 (京工繊大)
青木尊之 (東工大)
大野宗一 (北大)
澁田靖 (東大)
三好英輔 (京工繊大)
坂根慎治 (京工繊大)
上野健祥 (東大)

2. 研究計画

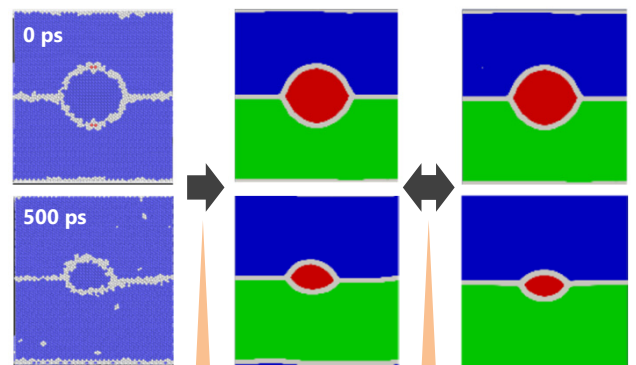
異方性粒成長のPF並列GPUコード作成

先に構築した粒界等方性問題のPFモデル並列GPUコード[1]に対し、粒間方位差とその方位差に依存する粒界物性の計算機能、およびPF計算の高精度化アルゴリズム[2]を実装し、粒界異方性問題に拡張する。



粒界異方性物性の取得

純金属の3結晶系MD粒成長シミュレーションに対し、MD組織からPF組織を作成する変換アルゴリズム[3]を適用し、アンサンブルカルマンフィルタによるデータ同化を通して粒界異方性物性を取得する。



超大規模粒成長シミュレーション

異方性物性データをPF並列GPUコードに導入し、系統的な超大規模計算 (2500³格子系・300万初期粒) により粒成長挙動の統計評価を行う。

3. 本研究の意義

構造材料開発では、メソスケールの材料組織を精度良く表現できるPF法の利用が不可欠である。本研究は、MD・データサイエンス・HPCの活用により従来のPF計算が抱えてきた課題を解消し、実材料の粒成長挙動を再現可能とするものであり、各国との競争が激化しているマテリアルズ・インフォマティクス戦略において重要な意義を持つ。また、最先端の数値手法を融合した新しいマルチスケール解析の提案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。

参考文献 [1] E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane, T. Shimokawabe, T. Aoki, *npj Comput. Mater.* **3** (2017) 25. [2] T. Takaki, T. Hirouchi, Y. Hisakuni, A. Yamanaka, Y. Tomita, *Mater. Trans.* **49** (2008) 2559. [3] E. Miyoshi, T. Takaki, Y. Shibuta, M. Ohno, *Comput. Mater. Sci.* **152** (2018) 118.