

JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 第12回 シンポジウム
2020年7月9日(木)

2020年度採択課題 (jh200012-NAH)

異常粒成長の大規模フェーズフィールド シミュレーション

京都工芸繊維大学機械工学系
代表 **高木 知弘**

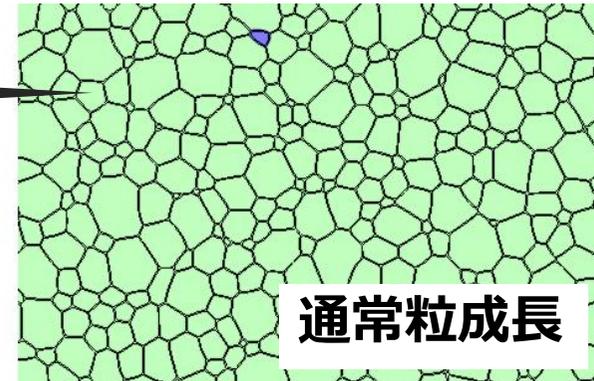
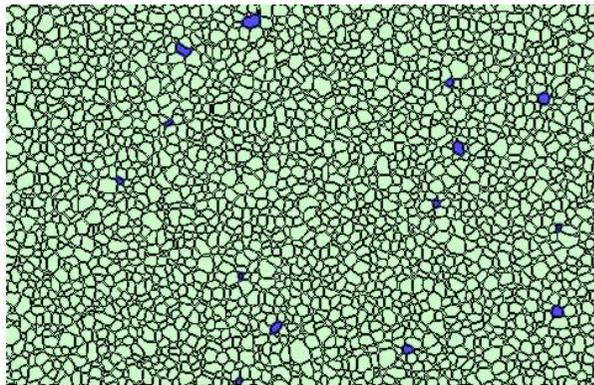
協同研究体制

代表者	高木 知弘	京都工芸繊維大学
副代表者	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
	三好 英輔	京都工芸繊維大学
	坂根 慎治	京都工芸繊維大学
	上野 健祥 (D1)	東京大学



研究背景 | 異常粒成長

※昨年度課題までの研究対象



工学的重要性

通常粒成長：粒径の制御による材料強度・靱性のバランス調節

異常粒成長：集合組織形成や単結晶化を通じた高機能材料創生

➔ 状況に応じた両現象の適切な予測が不可欠

研究背景 | 粒成長シミュレーションの課題

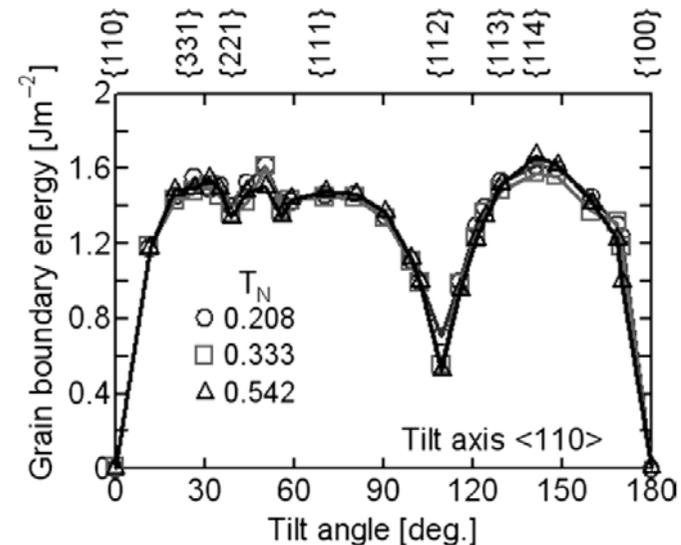
課題1：物性値

特に異常粒成長予測で必須となる、**粒界エネルギーと粒界モビリティの結晶方位差依存性（粒界異方性物性）**が未知であり、またそれらの取得方法が確立されていない。

課題2：計算規模

粒界異方性を詳細に考慮した粒成長の**統計的挙動**は未解明。

※ 粒界等方性および簡便な異方性モデルの下での粒成長挙動評価は先の研究で達成済み。



Fe粒界エネルギーの方位差依存性の例

[Y. Shibuta, S. Takamoto, T. Suzuki, ISIJ Int. 48 (2008) 1582]

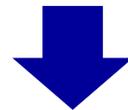
目的

課題1の解決

分子動力学 (MD) 法とフェーズフィールド (PF) 法の粒成長シミュレーションにデータ同化を適用することで、粒界異方性物性を取得しデータベース化する。

課題2の解決

東工大のTSUBAME上において、上記の粒界異方性物性を導入したPF法による大規模粒成長シミュレーションを可能とする。



粒界異方性が異常粒成長やそれに伴う集合組織形成に及ぼす影響を、大規模PF計算の系統的評価によって初めて解明し、**通常粒成長と異常粒成長の統一的な理解と予測**を可能とする。

研究計画

テーマ1 (第1四半期)

純鉄の粒界物性取得とデータベース化

テーマ2 (第2四半期)

2Dと3Dにおける異常粒成長理論の検証

テーマ3 (第3四半期)

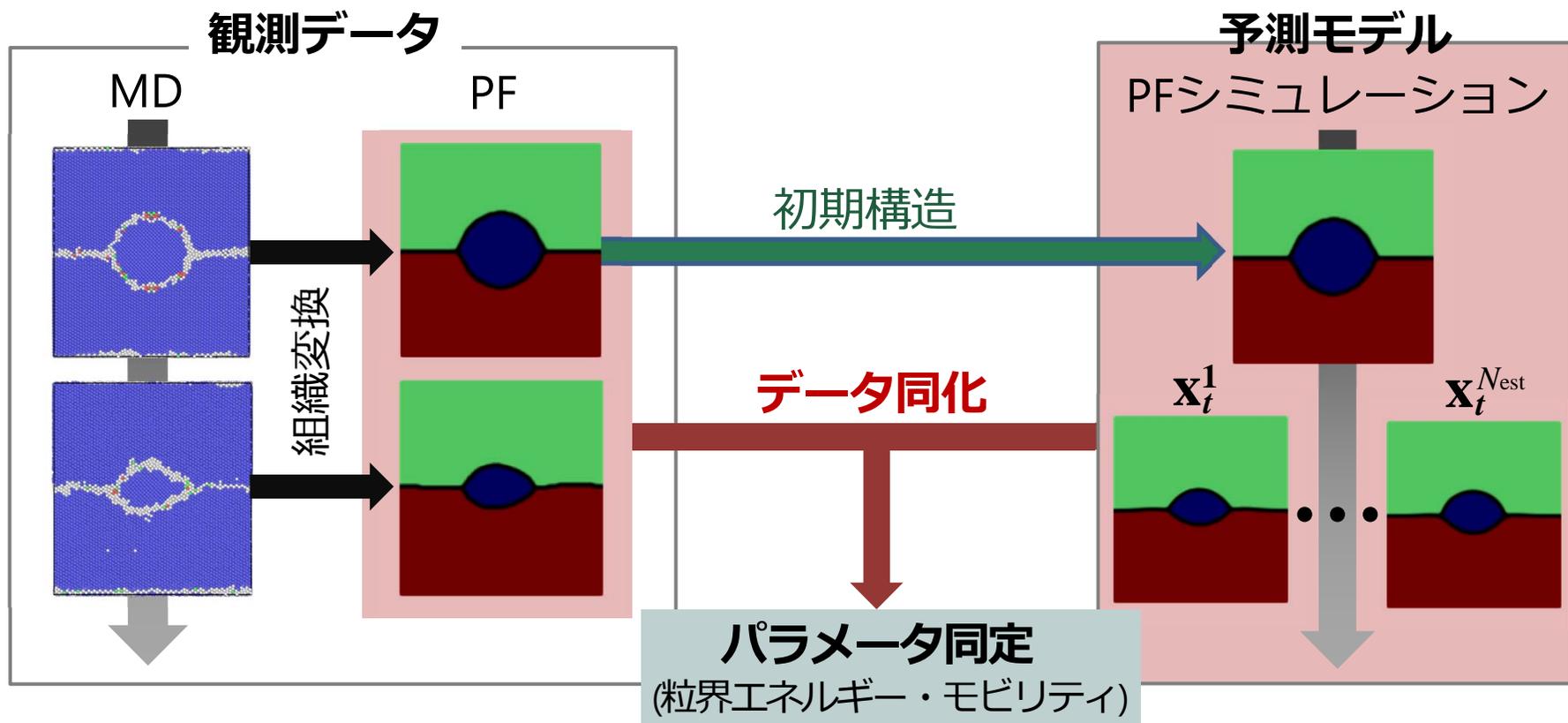
異常粒成長および集合組織形成の大規模計算

テーマ4 (第4四半期)

データ整理と論文執筆

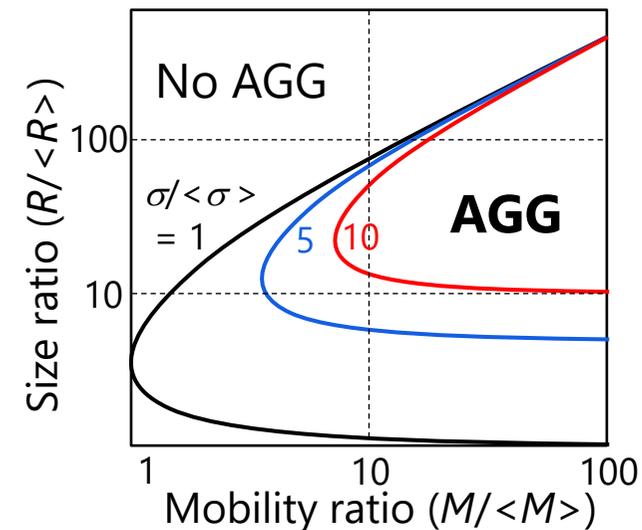
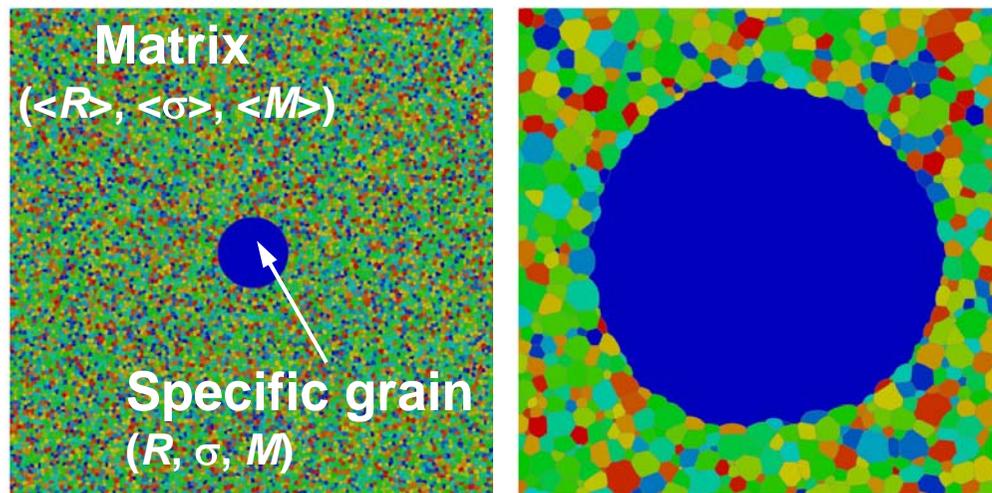
テーマ1 | 純鉄の粒界物性取得とデータベース化

MD粒成長計算に対し, MD組織からPF組織を作成する変換アルゴリズム [E. Miyoshi et al., *Comput Mater. Sci.* 152 (2018) 118] 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.



テーマ2 | 2Dと3Dにおける異常粒成長理論の検証

異常粒成長の発生の有無を予測する代表的理論としてHumphreysモデルが知られている。しかし、従来研究の計算規模不足のため、特に3Dにおいて理論の妥当性は未検証である。そこで、PF並列GPUコード（2019年度共同研究課題）により、多結晶マトリクス中に配置した特定粒の異常成長計算を大規模2D系と3D系において行い、結果を上記理論と比較することで理論の妥当性を詳細に検証する。



異常粒成長の発生条件

$$1 - \frac{\sigma / \langle \sigma \rangle}{R / \langle R \rangle} - \frac{1}{4} \frac{R / \langle R \rangle}{M / \langle M \rangle} > 0$$

[F.J. Humphreys, Acta Mater. 45 (1997) 4231]

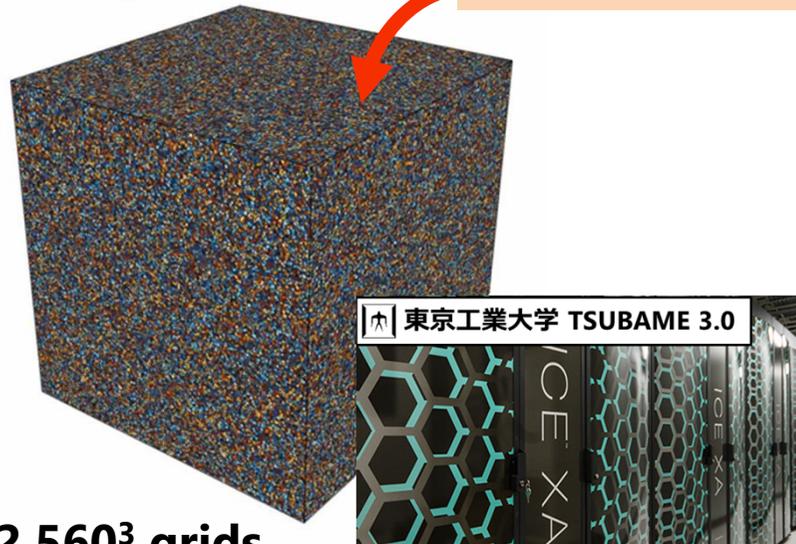
テーマ3 | 異常粒成長および集合組織形成の大規模計算

テーマ1で取得した粒界異方性物性をPF並列GPUコードに導入し，テーマ2より複雑な多結晶組織を対象として大規模3D粒成長計算を行い，異常粒成長や集合組織形成を再現する．初期組織は，粒径や結晶方位に分布を持たせた複数の仮想変形組織を用い，系統的評価を行う．

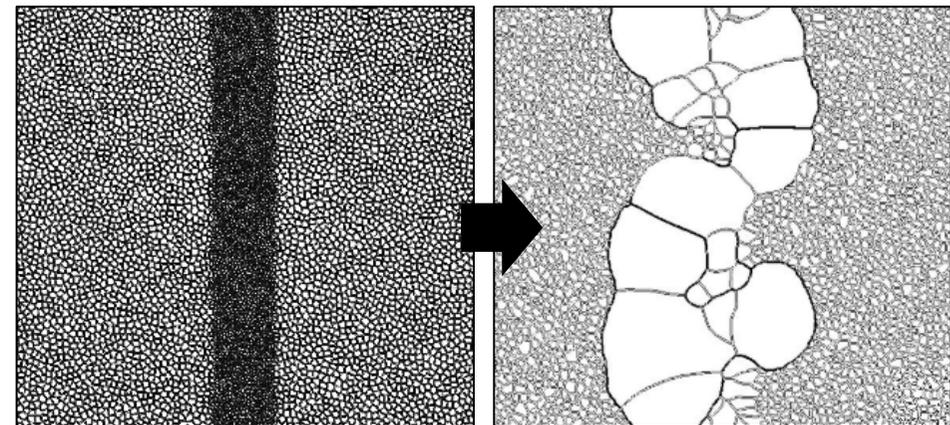
その後，異常粒成長・集合組織形成の有無・程度と粒界異方性や初期組織との関係を精査し，これらの現象を支配する物性・組織因子を解明する．

$t = 1\Delta t$
3125000 grains

粒界異方性物性データ



2,560³ grids
3,125,000 grains



変形遷移帯からの異常粒成長計算例

[T. Takaki, Y. Tomita, Proc. COMPLAS X (2009) (CD-ROM)]

本研究の意義

構造材料開発では、メゾ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、**実材料の通常粒成長・異常粒成長の統一的理解と予測を可能とする**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計算の枠組**を提案する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。