



1. はじめに

粒成長 (grain growth) は、材料組織形成過程において最も重要かつ基本となる現象であり、これまで多くの数値的研究が行われている。一方で、計算コストの制約から2次元や小さい領域における3次元計算に限定されてきた。このため、統計的な評価において本当に正しい結果を出しているとはいえない。また、実際の粒界構造は極めて複雑であり、実物性を用いた連続体モデルによる粒成長シミュレーションは存在しないのが現状である。

本研究では、東工大のGPUスパコンTSUBAMEを用いた大規模フェーズフィールドシミュレーションと大規模分子動力学シミュレーションにより、高精度な粒成長シミュレーションを可能とする。

2. 研究計画

まず、超大規模マルチフェーズフィールドシミュレーションと超大規模分子動力学シミュレーションを可能とする、並列GPUコードを作成する。このコードを用いることで、大規模分子動力学シミュレーションを行い、粒成長現象を詳細に考察する。また、系統的なシミュレーションにより、粒界異方性特性のデータベースを構築する。このデータベースを用いた超大規模マルチフェーズフィールド粒成長シミュレーションを行い、結果を分子動力学シミュレーションと比較検討することで粒成長シミュレーションの高精度化を目指す。この際、異方性粒成長を精度良く表現するために、高次マルチフェーズフィールドモデルを更に高精度化する[1]。

3. 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), 三好 英輔 (京都工芸繊維大学), 大喜多 慎 (東京大学)

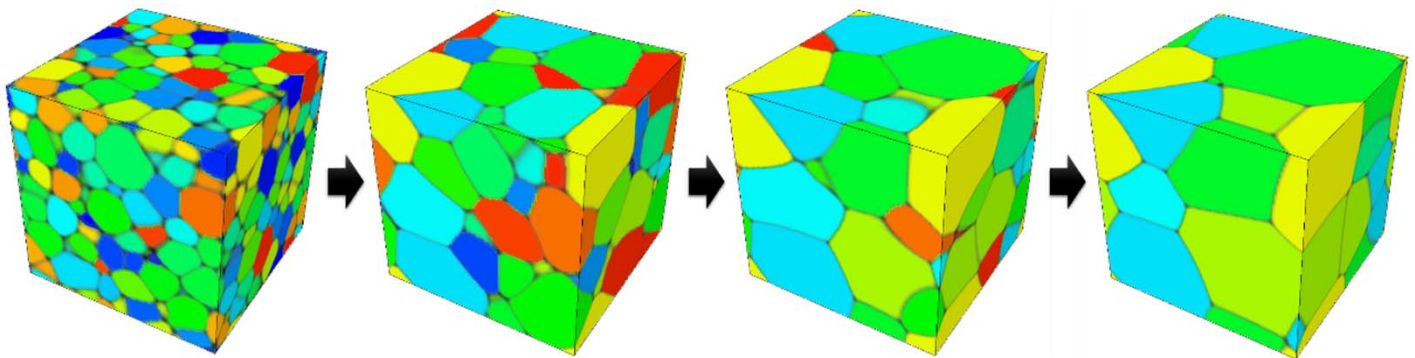


図1 単一GPUを用いたマルチフェーズフィールド法による粒成長シミュレーション

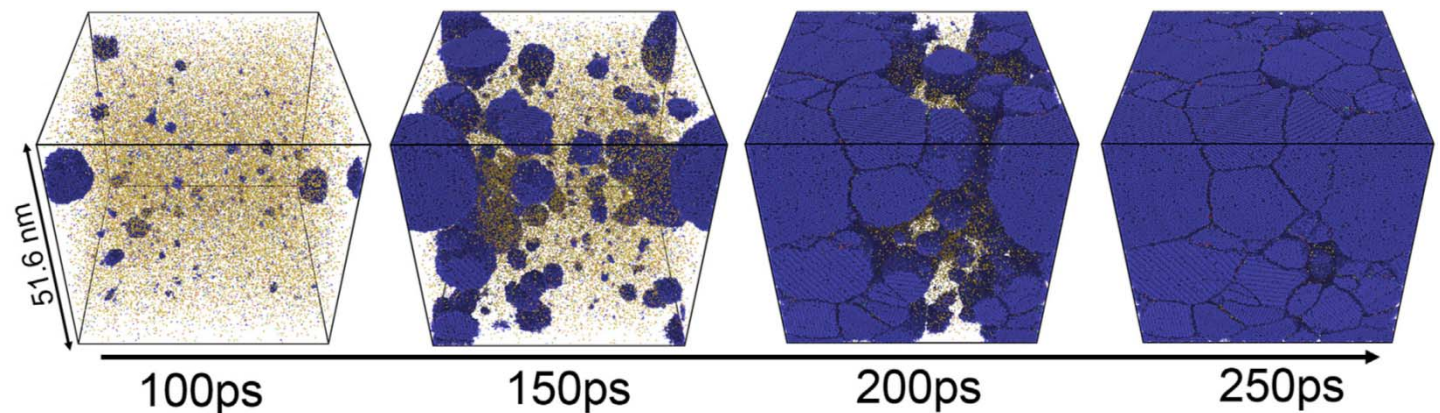


図2 単一GPUを用いた凝固から粒成長の分子動力学シミュレーション [2]

参考文献

- [1] E. Miyoshi and T. Takaki: *Computational Materials Science*, 120, 77 (2016)., E. Miyoshi and T. Takaki: *Computational Materials Science*, 112, Part A, 44 (2016).
 [2] Y. Shibuta, S. Sakane, T. Takaki, and M. Ohno: *Acta Materialia*, 105, 328 (2016)., Y. Shibuta, K. Oguchi, T. Takaki, and M. Ohno: *Scientific Reports*, 5, 13534 (2015).