

機関番号：14303
 研究種目：若手研究(B)
 研究期間：2009～2010
 課題番号：21760074
 研究課題名(和文) フェーズフィールド・クリスタル法による新しいマルチスケール材料
 特性評価手法の開発
 研究課題名(英文) Development of New Multiscale Model to Evaluate Material Performance
 Using Phase-Field-Crystal Method
 研究代表者
 高木 知弘 (TAKAKI TOMOHIRO)
 京都工芸繊維大学・工芸科学研究科・准教授
 研究者番号：50294260

研究成果の概要(和文)：フェーズフィールド・クリスタル法を用いた多結晶体の変形シミュレーションを行い、温度・ひずみ速度・粒サイズ依存性を表現できることを示した。また、GPGPUをフェーズフィールドシミュレーションに適用し、70倍程度の高速化を達成した。さらに、マルチフェーズフィールド法を用いた再結晶シミュレーションを行い、集合組織形成のためには粒界エネルギーとモビリティの方位差依存性特性が重要であることを示した。

研究成果の概要(英文)：It has been concluded that the phase-field-crystal simulation can express the dependencies of temperature, strain rate and grain size on the deformation of polycrystalline metal. To achieve the high speed computing of phase-field-crystal simulation, GPGPU has been employed for the conventional phase-field simulation. As a result, it has been confirmed that GPU phase-field simulations achieve about 70 times performance speedup for CPU. Furthermore, by performing the static recrystallization simulations using multi-phase-field method, it has been shown that the misorientation dependencies of grain boundary energy and mobility are important to form the recrystallization texture.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	2,000,000	600,000	2,600,000
2010年度	1,100,000	330,000	1,430,000
年度			
年度			
年度			
総計	3,100,000	930,000	4,030,000

研究分野：計算力学・材料力学・材料組織学

科研費の分科・細目：機械工学・機械材料・材料力学

キーワード：機械力学・材料力学、フェーズフィールド法、数値シミュレーション、
 計算物理、格子欠陥

1. 研究開始当初の背景

材料特性の数値的評価手法として、有限要素法と原子個々を直接解析する分子動力学法が幅広く用いられている。しかしながら、それらが対象とする空間および時間スケールの隔たりは大きく、その問題を解決するためにマルチスケール解析手法に関する研究

が多く行われているが、未だ汎用性の高いマルチスケール手法は構築されておらず、材料特性評価手法としてのマルチスケール手法の開発が急務となっている。

2. 研究の目的

フェーズフィールド・クリスタル法による

新しいマルチスケール材料特性評価手法を確立し、これまでシミュレートすることが困難であった現実的な時間スケール下における原子構造を反映した結晶粒スケールにおける材料特性評価を可能とし、材料変形過程や材料微視組織形成過程のメカニズムの解明を行い、材料組織設計や材料開発のための新しい知見を得ることを最終的な目的とする。

3. 研究の方法

フェーズフィールド法は、複雑な材料組織形成過程を比較的容易に再現できることから、20年程前の dendrite 形成モデルの成功から大きな注目を集め、最近では凝固、結晶成長、相変態、再結晶、粒成長、き裂伝播、転位のダイナミクス、バイオメカニクス、最適設計など、マテリアルサイエンスの様々な現象の挙動評価のために用いられている。この中で、フェーズフィールド・クリスタル法は、図1に示すように従来のフェーズフィールド法とはフェーズフィールド変数の定義が全く異なり、変数一周期で一つの原子を表現する。そのため、分子動力学法と同様、原子配列を考慮したボトムアップ的な評価が可能となる(図2)。さらに、連続体ベースのモデル化手法であるため、時間スケールが原子拡散オーダーとなり、分子動力学法の 10^6 倍程度の時間スケールでの評価が可能であると言われている。

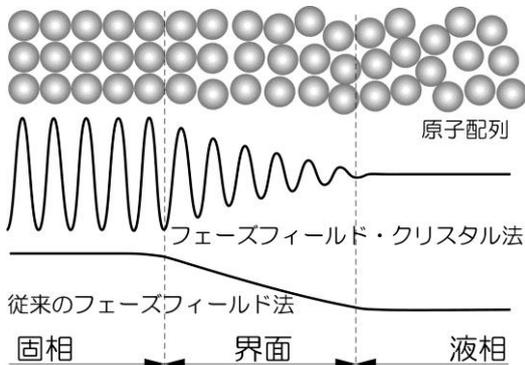


図1 フェーズフィールド変数

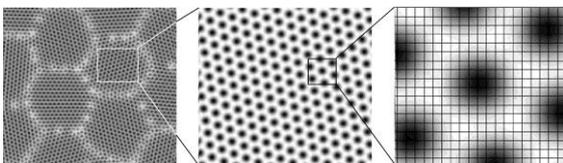


図2 フェーズフィールド・クリスタル法による金属材料の階層構造表現

本研究では、まずフェーズフィールド・クリスタル法の基本特性評価を行う。特に、多結晶体に対する、温度やひずみ速度をパラメトリックに変えた二次元変形シミュレーションを行い、温度やひずみ速度に依存した材

料の力学挙動評価が可能であることを確認する。次に、結晶粒のサイズを変えた変形シミュレーションを行い、Hall-Petchの関係および逆Hall-Petchの関係を表現できるかどうかを確認する。このシミュレーションでは申請者が先に構築したアフィン変形を再現する変形シミュレーション手法を採用する。

次に、数値シミュレーションの大規模化を目指し、GPGPUシミュレーションを可能とする。また、平行して、通常のフェーズフィールド法を用いた再結晶シミュレーション手法を構築し、フェーズフィールド・クリスタルシミュレーションにより得られる物性を導入したシミュレーション手法の構築を目指す。

4. 研究成果

(1) フェーズフィールド・クリスタル法の変形シミュレーションにおける基本特性評価

まず、フェーズフィールド・クリスタル法を多結晶金属材料の変形シミュレーションに適用する際の基本特性評価を行った。

①温度の影響

温度を変化させた変形シミュレーションを行った結果、温度が高い領域では粒の方位回転および粒界移動が生じ、温度の低い領域では粒界から転位が放出し、この転位が粒内を横切る変形が確認された。これらの結果は、これまで報告されている分子シミュレーションや実験と現象が定性的に良く一致しており、フェーズフィールド・クリスタル法による変形シミュレーションは温度依存性を適切に表現できることを確認した。

②ひずみ速度依存性

変形速度を変えた多結晶体の引張りシミュレーションを行った結果、ひずみ速度を高くすると応力-ひずみ関係の勾配が高くなり、塑性変形が開始する応力値も高くなることを示した。このように、ひずみ速度依存性を表現できることを示したが、ひずみ速度がある閾値より高くなると、変形シミュレーションを適切に行えなくなることも示した。これは、フェーズフィールド・クリスタルモデルは基本的に現象を拡散で表現するため、原子の拡散速度より速い現象には適用できないためである。

③粒サイズ依存性

図3のようなモデルを用い、多結晶体の結晶粒のサイズを変化させた引張り変形シミュレーションを行い、力学特性に対する粒サイズ依存性を評価した。

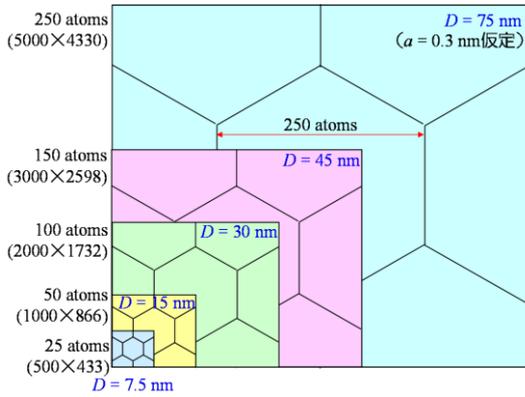


図3 粒サイズ依存性評価に用いたモデル

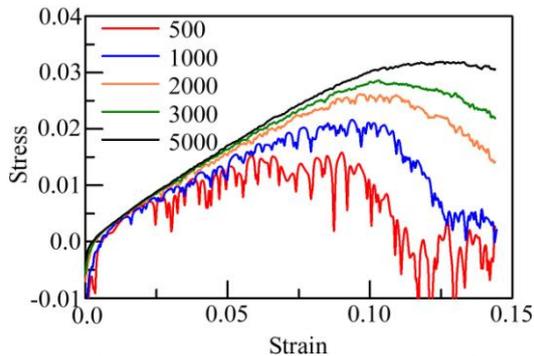


図4 応力-ひずみ関係の粒サイズ依存性

図4はその際に得られた応力-ひずみ関係である。粒サイズが小さい場合は、シミュレーション領域も小さいため、1つの転位の移動が全体の特性に影響し、値が大きく揺らいでいるが、傾向としては粒サイズが小さくなるほど塑性変形に入る応力値が高くなる逆Hall-Petchの関係を表現できていることがわかる。逆Hall-Petch領域からHall-Petch領域へ変化する現象を確認するため、シミュレーション領域をさらに大きくしようと試みたが、既存のコンピュータでは対応が困難であった。そこで、GPUによるフェーズフィールド・クリスタルシミュレーションを行うことを目的として、まず一般的なフェーズフィールドシミュレーションのGPGPU化を試みた。

(2) フェーズフィールドシミュレーションのGPGPU化

当初計画では、MPIを用いた並列化によるシミュレーションの高速化を予定していたが、フェーズフィールド法はGPUに非常に愛称が良いということがわかり、予定を変更しGPUによる高速化を図った。

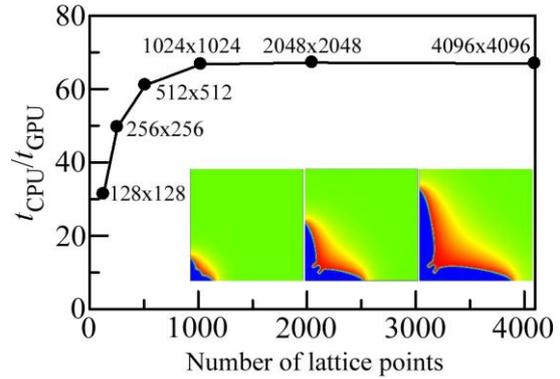


図5 フェーズフィールドGPUシミュレーション高速化の領域サイズ依存性

図5は、2元合金の2次元凝固シミュレーションにおけるGPU高速化度を評価した結果である。横軸は正方形シミュレーション領域1辺の格子数、縦軸は、同じシミュレーションをCPUとGPUで行った際の時間、それぞれ t_{CPU} と t_{GPU} の比 t_{CPU}/t_{GPU} を示している。この結果より、シミュレーション領域が広がるほど高速化を達成でき、1024×1024を超えると高速化はほぼ一定になることがわかった。また、大きなシミュレーション領域においては、約70倍程度の高速化を達成することができた。

さらに、 dendriteの3次元シミュレーションおよびマルチフェーズフィールドシミュレーションにもGPUを適用し、いずれのシミュレーションにおいても2桁の高速化を達成することができた。

(3) 再結晶シミュレーション

フェーズフィールド・クリスタル法によって得られる、粒界エネルギーおよび粒界モビリティの方角差および方位依存性を導入した再結晶シミュレーションを行うために、前の作業と平行してマルチフェーズフィールド法を用いた粒成長シミュレーションを行った。

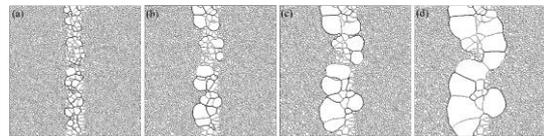


図6 変形帯からの再結晶シミュレーション

図6は領域中央に配置した変形帯（塑性変形量が周囲より高い帯状の領域）からの再結晶シミュレーションの様子を示している。この際、粒界エネルギーと粒界モビリティには方位差依存性を与え、再結晶集合組織に支配的な因子評価を行った。この結果、粒界エネルギーが小さく粒界モビリティが高い結晶方位差を有する粒が優先的に成長し、集合組織形成に対しては粒界エネルギー

ーと粒界モビリティの方位差依存性特性が影響することを示した。また、特にモビリティの方位差依存性が集合組織形成に対して重要であることを示した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 7 件)

- ① A. Yamanaka, T. Aoki, S. Ogawa, T. Takaki, GPU-accelerated phase-field simulation of dendritic solidification in a binary alloy, Journal of Crystal Growth, Vol.318, 40-45, (2011), 査読有.
- ② 山中晃徳, 小川慧, 青木尊之, 高木知弘, GPU によるマルチフェーズフィールドシミュレーション, 日本計算工学会論文集, Vol.2010, 2010000, (2010), 査読有.
- ③ 高木知弘, フェーズフィールド法の基礎と応用 (21) —フェーズフィールド・クリスタル法 その 2—, 機械の研究, Vol.62, No.11, 1075-1082, (2010), 査読無.
- ④ 高木知弘, フェーズフィールド法の基礎と応用 (20) —フェーズフィールド・クリスタル法 その 1—, 機械の研究, Vol.62, No.10, 967-972, (2010), 査読無.
- ⑤ T. Takaki, Y. Tomita, Static recrystallization simulations starting from predicted deformation microstructure by coupling multi-phase-field method and finite element method based on crystal plasticity, International Journal of Mechanical Sciences, Vol.52, 320-328, (2010), 査読有.
- ⑥ T. Hirouchi, T. Takaki, Y. Tomita, Effects of temperature and grain size on phase-field-crystal deformation simulation, International Journal of Mechanical Sciences, Vol.52, 309-319, (2010), 査読有.
- ⑦ A. Yamanaka, T. Takaki, Y. Tomita, Elastoplastic phase-field simulation of martensitic transformation with plastic deformation in polycrystal, International Journal of Mechanical Sciences, Vol.52, 245-250, (2010), 査読有.

[学会発表] (計 15 件)

- ① 高木知弘, 山中晃徳, デンドライト競合成長過程の GPGPU Phase-Field シミュ

レーション, 日本鉄鋼協会第 161 回春季講演大会, 2011/03/25-27. (東京都市大学)

- ② 高木知弘, Multi-phase-field 法によるデンドライトの競合成長シミュレーション, 日本機械学会 第 23 回計算力学講演会, 2010/09/23. (北見工大)
- ③ T. Takaki, H. Kashima, T. Fukui, F. Morinishi, Multi-phase-field simulation of columnar dendritic structure in forced flow, The 16th International Conference on Crystal Growth (ICCG-16), 2010/8/8-13. (Beijing International Convention Center, Beijing, China)
- ④ 高木知弘, Phase-Field-Crystal 法によるマルチスケールシミュレーション, 第 59 回理論応用力学講演会, 2010/6/9. (日本学術会議)
- ⑤ 高木知弘, Multi-phase-field 法の精度評価と粒成長シミュレーション, 日本材料学会第 59 期学術講演会, 2010/5/23. (北海道大学)
- ⑥ 高木知弘, Phase-Field-Crystal 法による転位挙動評価, 日本機械学会関西支部第 85 期定時総会講演会, 2010/3/17. (神戸大)
- ⑦ 長瀧貴陽, 高木知弘, 屋代如月, 分子動力学法による金属ナノ多結晶体の変形シミュレーション, 日本機械学会関西支部第 85 期定時総会講演会, 2010/3/17. (神戸大)
- ⑧ T. Takaki, Material Design by Phase-Field Method, Finite Element Method and Molecular Dynamics Method, 2nd International Workshops on Advances in Computational Mechanics (IWACOM-II), 2010/3/30. (横浜国際会議場)
- ⑨ T. Takaki, T. Fukui, K. Morinishi, Phase-Field Simulations Coupled to Lattice-Boltzmann Scheme for Dendritic Growth with Fluid Flow, The 2nd International Symposium on Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification and Casting (CSSC2010), 2010/2/4. (北海道大学)
- ⑩ 高木知弘, Phase-Field-Crystal 法と分子動力学法の比較, 第 53 回日本学術会議材料工学連合講演会講演論文集, 2009/10/19-21. (京大会館)
- ⑪ 高木知弘, MPF-DRX 法による熱間加工過程のマルチスケールシミュレーション, 日本機械学会第 22 回計算力学講演会, 2009/10/10-12. (金沢大)
- ⑫ T. Takaki, Multi-Scale simulations during dynamic recrystallization

using multi-phase-field method, The 2nd Symposium on Phase-Field Modelling in Materials Science, Aachen, 2009/9/1. (Rolduc Abbey, アーヘン市, ドイツ)

- ⑬ T. Hirouchi, T. Takaki, Y. Shibutani, Y. Tomita, Effects of temperature and grain size on phase field crystal deformation simulation, The 2nd Symposium on Phase-Field Modelling in Materials Science, Aachen, 2009/9/1. (Rolduc Abbey, アーヘン市, ドイツ)
- ⑭ T. Takaki, Y. Tomita, Multi-phase-field modeling and simulation for static recrystallization, X International Conference on Computational Plasticity (COMPLAS X), 2009/9/3. (カタルーニャ工科大学, バルセロナ市, スペイン)
- ⑮ T. Hirouchi, T. Takaki, Y. Shibutani, Y. Tomita, Influence of Temperature and Grain-Size on Phase Field Crystal Deformation Simulation, X International Conference on Computational Plasticity (COMPLAS X), 2009/9/3. (カタルーニャ工科大学, バルセロナ市, スペイン)

[その他]

<http://www.cis.kit.ac.jp/~takaki/index-jp.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

高木 知弘 (TAKAKI TOMOHIRO)
京都工芸繊維大学・工芸科学研究科・
准教授
研究者番号：50294260

(2) 研究分担者

()

研究者番号：

(3) 連携研究者

()

研究者番号：