

令和 2 年 6 月 18 日現在

機関番号：14303

研究種目：基盤研究(A) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17H01237

研究課題名(和文)大規模計算とその場観察の定量的融合による革新的材料組織予測法の開発

研究課題名(英文)Development of innovative prediction method of material microstructure by quantitative coupling of large-scale simulation and in situ observation

研究代表者

高木 知弘 (Takaki, Tomohiro)

京都工芸繊維大学・機械工学系・教授

研究者番号：50294260

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 33,800,000円

研究成果の概要(和文)：材料開発では、材料組織の適切な予測と制御が極めて重要である。本研究では、フェーズフィールド(PF)計算、SPring-8によるその場観察、分子動力学(MD)計算の三つの最先端研究をデータサイエンスにより融合し、革新的メソスケール材料組織予測アプローチの構築を目指した。MD計算結果を観察データとし、PFとEnKFによるデータ同化によって界面物性値を算出する手法を開発した。SPring-8その場観察結果を観測データとし、PFとEnKFによるデータ同化によって物性値と場の情報を得る基盤技術を構築した。大規模PF計算による高精度材料組織予測法を開発し、凝固と粒成長の組織予測とメカニズム解明を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

人々の生活が多様性を増す中で、ものづくりの根幹である材料開発の時間短縮が喫緊の課題となっている。材料開発は、素材の開発に加え、メソスケールの組織制御が極めて重要である。本研究では、大規模フェーズフィールド計算、大型放射光施設によるその場観察、大規模分子動力学計算の、最先端の3つの研究をデータサイエンスを用いて融合する高精度材料組織予測法の開発を試み、その基盤を構築した。当該分野における日本の最先端研究の融合、実験と計算の融合を推し進めたことに学術的意義がある。本研究で構築した融合研究の基盤をさらに発展させ、多様なものづくりを支える材料開発に貢献することが可能となる。

研究成果の概要(英文)：In material development, accurate prediction and control of material microstructures are extremely important. In this study, we tried to construct an innovative mesoscale material structure prediction approach by combining three cutting-edge researches of phase-field (PF) simulation, in-situ observation by SPring-8, and molecular dynamics (MD) simulation through data science. We successfully developed the data assimilation to calculate the interfacial physical properties by PF and EnKF using the MD results as observation data. Moreover, to obtain the material physical properties and field information, we constructed a frame of data assimilation by PF and EnKF using the results of SPring-8 in-situ observation as observation data. In addition, we constructed the high-performance PF simulation schemes and performed large-scale PF simulations for solidification and grain growth to predict the material microstructures and clarify important mechanisms in microstructure formation process.

研究分野：機械材料・材料力学

キーワード：フェーズフィールド法 分子動力学法 その場観察 データサイエンス 凝固 粒成長 材料組織

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

継続的な新材料開発や既存材料の高機能化は、人間社会と経済の持続可能な発展に不可欠のテーマである。新材料開発の時間とコストを大幅に低減することを目標に、アメリカのマテリアルズ・ゲノム・イニシアティブ[1]を皮切りとするマテリアルズ・インフォマティクス戦略が、日本をはじめ各国で推進されている。これは、従来の材料開発で用いられてきた理論・実験・計算科学を、コンピュータを活用したデータサイエンスにより融合するデータ駆動型アプローチであり、材料技術革新の新しい潮流である。これを達成するためには、各手法の高精度化と連携が不可欠であるが、特に実験とシミュレーションの融合が不十分であることが指摘されている[2]。また、第一原理計算のみで十分な評価が行える特定の材料に対しては既に成果も報告されているが、多くの材料ではメゾスケールにおける材料組織の高精度予測が極めて重要であり、その精度は未だ不十分である[3]。

メゾスケール材料組織を定量的に予測可能な唯一の数理モデルは、フェーズフィールド(phase-field: PF)法である[4]。PF法は凝固時の dendrite 成長の再現に成功してから注目を集め、現在では多様な組織の予測が可能となっている。しかしながら、拡散界面モデルを用いるために計算コストが高く、取り扱える領域が狭いことが課題である。「実験とシミュレーションの融合の欠落」は、PF計算の高い計算コストが影響しており、対象とする時空間スケールに大きな差があるために、両者の結果を同じ土俵で議論できない状況である。

当研究グループは、graphics processing unit (GPU)の高度な並列処理能力に着目し、複数の GPU を並列化することで世界最大の PF 計算を可能としてきた[5, 6]。最近では、分子動力学(molecular dynamics: MD)法の大規模 GPU 並列による 10 億原子計算に成功し、自発的均質核生成から凝固そして粒成長に至る一連の組織予測を世界で初めて可能とした[7]。このため、大規模 PF 計算とその場観察、大規模 PF 計算と大規模 MD 計算の直接比較・連携・融合が可能であり、最先端の三手法融合研究による高精度組織予測が可能ではないかという着想に至った。

2. 研究の目的

本研究では、大規模 PF 計算を基軸とし、SPRING-8 によるその場観察と大規模 MD 計算の三つの最先端研究をデータサイエンスにより融合し、定量的かつ高精度な革新的メゾスケール材料組織予測アプローチの構築を目指す。具体的には次の 3 点を期間内に明らかにする。

- (1) 大規模 MD 計算による界面物性の算出
- (2) その場観察と大規模 PF 計算による場の情報と物性値の推定
- (3) 大規模 PF 計算による高精度材料組織予測法の開発

3. 研究の方法

「2. 研究の目的」において設定した 3 点の目的を達成するために、下記の研究手法を用いる。

- (1) 大規模 MD 計算による界面物性の算出

系統的な大規模 MD 計算において固液界面エネルギーとカイネティック係数の界面異方性物性を算出する。その結果を、機械学習(ディープラーニング)を用いることで、従来の近似理論に頼ることなく、そのまま精度良く PF 法に反映する。

- (2) その場観察と大規模 PF 計算による場の情報と物性値の推定

一方向凝固のその場観察と大規模 PF 計算を同一条件下で行い、データ同化を用いることで場の情報と物性値を推定し、凝固成長のダイナミクスを解明する。

- (3) 大規模 PF 計算による高精度材料組織予測法の開発

上記 2 点の成果を用い、構造材料に対する大規模 PF 計算によるメゾスケール材料組織の高精度制御にチャレンジする。特に凝固組織をターゲットとし、最終的には組織微細化に重要な dendrite 断片化を再現し、メカニズムの解明を試みる。

4. 研究成果

まず研究目的に対する研究達成状況を示す。目的(1)に対しては、手法の再検討を行い、データ同化を用いることにした。大規模 MD 凝固計算の結果を観察データとし、PF 法によるシミュレーションとアンサンブルカルマンフィルタ(Ensemble Kalman Filter: EnKF)を用いたデータ同化によって界面物性を取得する手法を構築し、純鉄の 4 つの界面物性の同時算出に成功した[8]。加えて、粒成長時の粒界異方性物性の算出にも取り組み、大規模 MD 粒成長計算の結果を観察データとし[9]、マルチフェーズフィールド法(multi-phase-field: MPF)計算[10, 11]と EnKF によるデータ同化法を構築した。しかしながら、MD 粒成長計算では粒界移動時の揺らぎが大きく、MD 結果を観察データとするデータ同化には成功しておらず今後の課題である。目的(2)に対しては、SPRING-8 における Fe-Si 合金の一方向凝固その場観察を行い、PF 計算を用いたデータ同化を行うために、画像データを PF 変数に落とし込む手法を開発した。また、データ同化を高速に行うために、GPU スパコン上で複数の PF 計算を同時に実行可能な、データ同化の複数 GPU 並列計算を可能とした。目的(3)は、凝固組織の高精度予測を可能とするため、PF モデル開発[12, 13]と高性能 PF 計算法の開発を行い[14, 15]、柱状晶の競合成長現象の解明[16]、強制対流による単一等軸 dendrite の形態変化[17]、多数の等軸 dendrite の運動を伴う等軸晶形成モデルの構築[18-21]、自然対流が凝固組織形成に及ぼす影響の解明[22-24]、柱状 dendrite 樹間液相流れの透過率評価法の確立[25-27]、混相流モデルの構築[28]、超大規模粒成長計算法の確立と現象解明

[29-32]を達成した。以下に各成果を詳細に示す。

(1) 大規模 MD 計算による界面物性の算出

MD 計算による従来の界面物性評価においては、ある物性を抽出するために理想的な状態を作り出す必要があり、面方位に依存する全ての界面物性を取得することには限界があった。本研究では、過冷却融液の中で固相核が成長する MD 計算結果をそのまま用いることで、全ての界面物性を同時に算出可能な手法の開発を試みた。手法としては、MD 計算結果を観察データとし、PF 計算と EnKF を適用するデータ同化を用いた。また、原子の位置情報からなる MD 計算結果を、PF 変数の分布情報に変換するマッピング手法を構築した[10]。これによって、MD 計算結果を直接 PF 計算と比較することを可能とした。次いで、Finnis-Sinclair (FS)ポテンシャルを用いた過冷却純鉄からの単一核成長計算結果に対してデータ同化を試み、界面エネルギーとその異方性強度、界面モビリティとその異方性強度の 4 つの物性を同時に精度よく算出することに成功した[8]。さらに、本手法を多結晶粒成長問題にも適用し、通常の MD 粒成長計算結果を観察データとし、MPF 法と EnKF を用いたデータ同化の手法を構築した。ここで、図 1 に示すような双子実験によって、同時にデータ同化の可能な粒数の評価を行い、6 個までの粒数、つまり 30 個の粒界物性 (=15 粒界×2 物性値：粒界エネルギーと粒界モビリティ) までであれば同時評価が可能であることを示した(論文執筆中)。一方で、MD 粒成長計算では、粒界が移動する際に揺らぎが生じるため、現在のところ MD 計算結果を用いたデータ同化は成功しておらず今後の課題である。

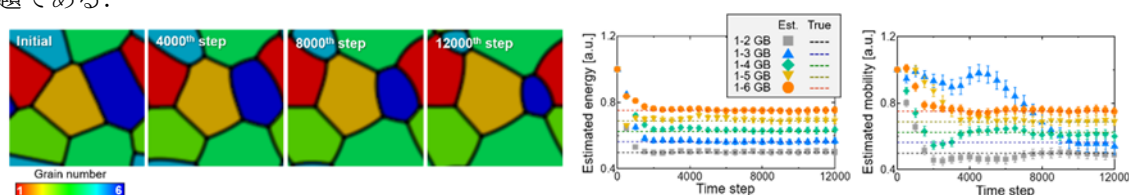


図 1 多結晶粒成長のデータ同化による双子実験結果

(2) その場観察と大規模 PF 計算による場の情報と物性値の推定

当初の計画では、SPring-8 における合金凝固のその場観察とまったく同じ条件の PF 計算を行い、データ同化によって場の情報と物性値を取得する予定としていた。図 2(a)中の挿入図は、SPring-8 において、Fe-5.3wt%Si の一方向凝固のその場観察を行った結果である。この実験を完全に再現するために、図 2 のような PF 計算を試みた。図 2 の計算では、 $4.837 \times 4.837 \times 0.1 \text{ mm}^3$ の領域を $6,144 \times 6,144 \times 128$ 格子に分割し、温度勾配 $G = 3 \text{ K/mm}$ 、冷却速度 $R = 5 \text{ K/min}$ の条件の下で、96.6 s (4.8×10^6 steps)の計算を行った。この計算は、東京工業大学の GPU スパコン TSUBAME3.0 において、192 個の GPU を並列させて約 5.5 日間行ったものである。しかしながら、計算規模が極めて大きくデータ同化が不可能であった。

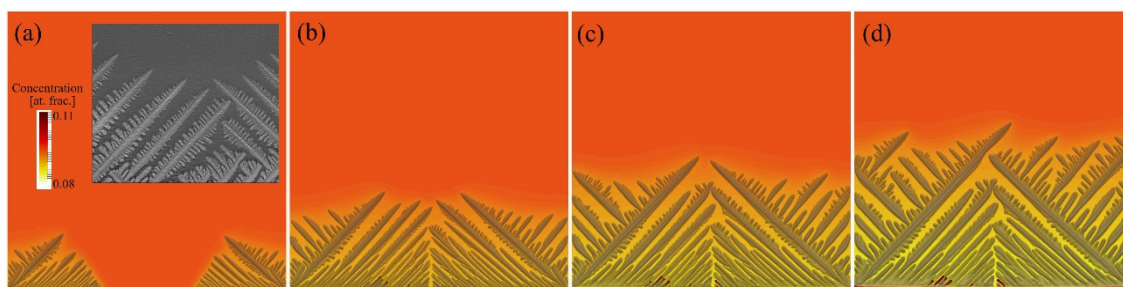


図 2 その場観察と同条件における大規模 PF シミュレーションの結果

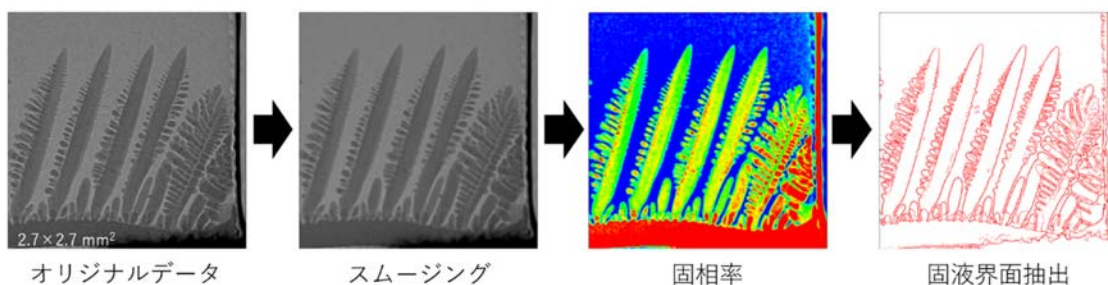


図 3 その場観察結果からの固液界面抽出手順

そこで、図 3 に示すような dendrite 先端曲率半径の大きな組織を再現するその場観察実験を行い (Fe-4wt%Si, $R = 5 \text{ K/min}$), 一部を取り出すことでデータ同化に用いることを考えた。まず、その場観察結果を PF 変数の情報に変換するマッピング法を開発した。図 3 に示すように、

その場観察結果をスムージング処理し、固相率情報に変換し、その2階勾配によって界面位置を特定した。これによってPF計算とEnKFによるデータ同化準備は完了した。しかしながら、その場観察は薄膜内における2次元実験とはいえ、完全には2次元となっていない。そのため、3次元組織の2次元投影情報のみでデータ同化を行う手法を現在検討中であり、その場観察結果を用いたデータ同化はまだ成功には至っていない。

その場観察結果を観察データとするPF法によるデータ同化は、個々のPF計算が大規模計算となるため、計算の並列化が必須である。データ同化では、アンサンブル数 N だけのPF計算を同時に行う必要があるため、TSUBAME3.0において並列データ同化を可能とした。図4はGPU数を増やした時の計算時間を示している。GPU数の増加とともに計算時間がほぼ線形的に減少しており、良好な並列性能が得られていることがわかる。また、個々のPF計算が大規模となるため、データ同化に加えて各PF計算も並列化するコードの開発も完了した。

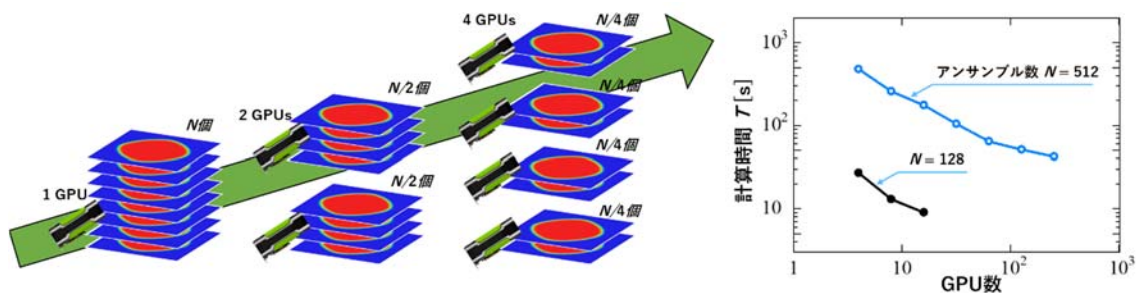


図4 GPU スパコン上におけるデータ同化の並列処理スケーリング

(3) 大規模PF計算による高精度材料組織予測法の開発

当研究グループでは、これまでGPUスパコンを用いた大規模PF計算による世界最大の計算を可能としてきた。しかしながら、液相流動の考慮、温度場の考慮、実験との比較、統計的評価のためには、さらなる計算の高速化と大規模化を必要とする。本研究では、高性能PF計算法の構築および大規模PF計算と大規模MD計算による組織形成過程の予測・現象解明を試みた。

高性能計算法の構築においては、液相流動を伴う dendrite 凝固の大規模PF計算を可能とするため、PF法と格子ボルツマン法を連成させ、複数GPU並列化を行い、良好なスケーリングが達成できることを示した。また、強制対流下における dendrite 成長の世界最大のPF計算を示した[15]。加えて、温度場と流動場を効率的に計算することを目的とし、PF、濃度場、温度場、流動場の各場の支配方程式に対して異なるサイズの格子と時間増分を適用する、マルチグリッド法とマルチ時間増分法を導入し、一様サイズの格子と時間増分を用いる場合の約100倍の計算高速化を達成した[14]。また、本研究期間の途中において、GPUスパコンTSUBAMEのバージョンが2.5から3.0へ更新され、GPUが全て取り換えられたため、新しいGPUアーキテクチャ用にコードを最適化した。

凝固組織の高精度予測においては、下記に示すような多くの特筆すべき成果を得た：

- 多結晶柱状晶の一方向凝固大規模PF計算を行い、粒間の淘汰現象が基本的にはWalton-Chalmersモデルに従うことを発見した[16]。
- 強制対流下における単一 dendrite の成長計算を系統的に行い、流動方向と優先成長方向の角度が dendrite 形態変化に及ぼす影響を明らかにした [17]。
- 固液密度比によって沈降しつつ成長する単一 dendrite の長距離落下計算を可能とする計算手法を開発した[19]。
- 等軸晶の形成過程を再現するために、複数の等軸 dendrite が運動・衝突・融合を伴う成長と、融合後の粒成長を連続して表現可能なPFモデルを構築した[20]。本手法を複数GPU並列化することで、数百の等軸 dendrite を取り扱うことのできる大規模PF計算を可能とした[18]。さらに、本手法を固液共存域の変形問題へ適用し、その有用性を示した[21]。
- 自然対流を伴う2次元と3次元の大規模一方向凝固計算[22]、2次元問題における2結晶の競合成長に及ぼす自然対流の影響評価を行い[23]、自然対流が柱状晶成長に及ぼす影響を明らかにした。
- dendrite スケールのマイクロ凝固組織情報をマクロ流動計算で用いる際に重要となる、 dendrite 樹間液相流れの透過率を、大規模PF計算と格子ボルツマン計算によって算出する手法を構築し、柱状晶に対する透過率がKozeny-Carmanの式で表現可能であることを示し、また初めて透過率テンソルを提案した[25-27]。
- 自由表面を伴うPF凝固計算を可能とするために、MPFモデルを用いた混相流計算法を構築した[28]。

多結晶粒成長問題においては、2次元粒成長問題に対する粒界異方性の影響評価[32]、世界最大の理想粒成長MPF計算による統計的粒成長挙動の解明[31]、3次元粒成長とその2次元断面内の粒成長の相関関係の解明[30]、薄膜内における粒成長挙動の解明[29]を行った。

<引用文献>

- [1] N.S.A. Technology, Materials Genome Initiative for Global Competitiveness, General Books2011.
- [2] S.R. Kalidindi, D.B. Brough, S. Li, A. Cecen, A.L. Blekh, F.Y.P. Congo, C. Campbell, Role of materials data science and informatics in accelerated materials innovation, *MRS Bull.* 41(8) (2016) 596-602.
- [3] D.L. McDowell, R.A. LeSar, The need for microstructure informatics in process–structure–property relations, *MRS Bull.* 41(8) (2016) 587-593.
- [4] 高木知弘, 山中晃徳, フェーズフィールド法 : 数値シミュレーションによる材料組織設計, 養賢堂 2012.
- [5] Y. Shibuta, M. Ohno, T. Takaki, Solidification in a Supercomputer: From Crystal Nuclei to Dendrite Assemblages, *JOM* 67(8) (2015) 1793-1804.
- [6] T. Takaki, Phase-field modeling and simulations of dendrite growth, *ISIJ Int.* 54(2) (2014) 437-444.
- [7] Y. Shibuta, S. Sakane, E. Miyoshi, S. Okita, T. Takaki, M. Ohno, Heterogeneity in homogeneous nucleation from billion-atom molecular dynamics simulation of solidification of pure metal, *Nat. Commun.* 8(1) (2017) 10.
- [8] M. Ohno, Y. Oka, S. Sakane, Y. Shibuta, T. Takaki, Bayesian inference of solid-liquid interfacial properties out of equilibrium, *Phys. Rev. E* 101(5) (2020) 052121.
- [9] S. Okita, E. Miyoshi, S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, Grain growth kinetics in submicrometer-scale molecular dynamics simulation, *Acta Mater.* 153 (2018) 108-116.
- [10] E. Miyoshi, T. Takaki, Y. Shibuta, M. Ohno, Bridging molecular dynamics and phase-field methods for grain growth prediction, *Comput. Mater. Sci.* 152 (2018) 118-124.
- [11] E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, Accuracy Evaluation of Phase-field Models for Grain Growth Simulation with Anisotropic Grain Boundary Properties, *ISIJ Int.* 60(1) (2020) 160-167.
- [12] M. Ohno, T. Takaki, Y. Shibuta, Numerical testing of quantitative phase-field models with different polynomials for isothermal solidification in binary alloys, *J. Comput. Phys.* 335 (2017) 621-636.
- [13] M. Ohno, T. Takaki, Y. Shibuta, Variational formulation of a quantitative phase-field model for nonisothermal solidification in a multicomponent alloy, *Phys. Rev. E* 96(3) (2017) 033311.
- [14] S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Aoki, Acceleration of phase-field lattice Boltzmann simulation of dendrite growth with thermosolutal convection by the multi-GPUs parallel computation with multiple mesh and time step method, *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* 27(5) (2019) 054004.
- [15] S. Sakane, T. Takaki, R. Rojas, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Shimokawabe, T. Aoki, Multi-GPUs parallel computation of dendrite growth in forced convection using the phase-field-lattice Boltzmann model, *J. Cryst. Growth* 474 (2017) 154-159.
- [16] T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Aoki, C.-A. Gandin, Competitive grain growth during directional solidification of a polycrystalline binary alloy: Three-dimensional large-scale phase-field study, *Materialia* 1 (2018) 104-113.
- [17] S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Shimokawabe, T. Aoki, Three-dimensional morphologies of inclined equiaxed dendrites growing under forced convection by phase-field-lattice Boltzmann method, *J. Cryst. Growth* 483 (2018) 147-155.
- [18] S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Aoki, Two-dimensional large-scale phase-field lattice Boltzmann simulation of polycrystalline equiaxed solidification with motion of a massive number of dendrites, *Comput. Mater. Sci.* 178 (2020) 109639.
- [19] S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, Simulation method based on phase-field lattice Boltzmann model for long-distance sedimentation of single equiaxed dendrite, *Comput. Mater. Sci.* 164 (2019) 39-45.
- [20] T. Takaki, R. Sato, R. Rojas, M. Ohno, Y. Shibuta, Phase-field lattice Boltzmann simulations of multiple dendrite growth with motion, collision, and coalescence and subsequent grain growth, *Comput. Mater. Sci.* 147 (2018) 124-131.
- [21] N. Yamanaka, S. Sakane, T. Takaki, Application of multi-phase-field lattice Boltzmann method to semi-solid deformation, *IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng.* 861 (2020) 012067.
- [22] T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Aoki, Large-scale phase-field lattice Boltzmann study on the effects of natural convection on dendrite morphology formed during directional solidification of a binary alloy, *Comput. Mater. Sci.* 171 (2020) 109209.
- [23] T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, Competitive growth during directional solidification of a binary alloy with natural convection: two-dimensional phase-field study, *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* 27(5) (2019) 054001.
- [24] T. Takaki, R. Rojas, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Shimokawabe, T. Aoki, Phase-field-lattice Boltzmann studies for dendritic growth with natural convection, *J. Cryst. Growth* 474 (2017) 146-153.
- [25] Y. Mitsuyama, T. Takaki, S. Sakane, Y. Shibuta, M. Ohno, Permeability tensor for columnar dendritic structures: Phase-field and lattice Boltzmann study, *Acta Mater.* 188 (2020) 282-287.
- [26] T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Aoki, Permeability prediction for flow normal to columnar solidification structures by large-scale simulations of phase-field and lattice Boltzmann methods, *Acta Mater.* 164 (2019) 237-249.
- [27] Y. Mitsuyama, T. Takaki, S. Sakane, Y. Shibuta, M. Ohno, Permeability tensor for various columnar dendrite structures, *IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng.* 861 (2020) 012029.
- [28] S. Aihara, T. Takaki, N. Takada, Multi-phase-field modeling using a conservative Allen–Cahn equation for multiphase flow, *Comput. Fluids.* 178 (2019) 141-151.
- [29] E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane, T. Aoki, Large-scale phase-field simulation of three-dimensional isotropic grain growth in polycrystalline thin films, *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* 27(5) (2019) 054003.
- [30] E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane, T. Shimokawabe, T. Aoki, Correlation between three-dimensional and cross-sectional characteristics of ideal grain growth: large-scale phase-field simulation study, *J. Mater. Sci.* 53(21) (2018) 15165-15180.
- [31] E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane, T. Shimokawabe, T. Aoki, Ultra-large-scale phase-field simulation study of ideal grain growth, *npj Comput. Mater.* 3(1) (2017) 25.
- [32] E. Miyoshi, T. Takaki, Multi-phase-field study of the effects of anisotropic grain-boundary properties on polycrystalline grain growth, *J. Cryst. Growth* 474 (2017) 160-165.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計26件（うち査読付論文 26件 / うち国際共著 4件 / うちオープンアクセス 6件）

1. 著者名 Takaki Tomohiro, Sakane Shinji, Ohno Munekazu, Shibuta Yasushi, Aoki Takayuki	4. 巻 171
2. 論文標題 Large-scale phase-field lattice Boltzmann study on the effects of natural convection on dendrite morphology formed during directional solidification of a binary alloy	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 109209 ~ 109209
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commatsci.2019.109209	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Sakane Shinji, Takaki Tomohiro, Ohno Munekazu, Shibuta Yasushi, Aoki Takayuki	4. 巻 178
2. 論文標題 Two-dimensional large-scale phase-field lattice Boltzmann simulation of polycrystalline equiaxed solidification with motion of a massive number of dendrites	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 109639 ~ 109639
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commatsci.2020.109639	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Ohno Munekazu, Oka Yukimi, Sakane Shinji, Shibuta Yasushi, Takaki Tomohiro	4. 巻 101
2. 論文標題 Bayesian inference of solid-liquid interfacial properties out of equilibrium	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 052121 ~ 052121
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.101.052121	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Mitsuyama Yasumasa, Takaki Tomohiro, Sakane Shinji, Shibuta Yasushi, Ohno Munekazu	4. 巻 188
2. 論文標題 Permeability tensor for columnar dendritic structures: Phase-field and lattice Boltzmann study	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 282 ~ 287
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2020.02.016	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Takaki Tomohiro, Sakane Shinji, Ohno Munekazu, Shibuta Yasushi	4. 巻 27
2. 論文標題 Competitive growth during directional solidification of a binary alloy with natural convection: two-dimensional phase-field study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering	6. 最初と最後の頁 054001 ~ 054001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-651X/ab1a17	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sakane Shinji, Takaki Tomohiro, Ohno Munekazu, Shibuta Yasushi, Aoki Takayuki	4. 巻 27
2. 論文標題 Acceleration of phase-field lattice Boltzmann simulation of dendrite growth with thermosolutal convection by the multi-GPUs parallel computation with multiple mesh and time step method	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering	6. 最初と最後の頁 054004 ~ 054004
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-651X/ab20b9	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sakane Shinji, Takaki Tomohiro, Ohno Munekazu, Shibuta Yasushi	4. 巻 164
2. 論文標題 Simulation method based on phase-field lattice Boltzmann model for long-distance sedimentation of single equiaxed dendrite	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 39 ~ 45
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commatsci.2019.03.047	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Miyoshi Eisuke, Takaki Tomohiro, Ohno Munekazu, Shibuta Yasushi	4. 巻 60
2. 論文標題 Accuracy Evaluation of Phase-field Models for Grain Growth Simulation with Anisotropic Grain Boundary Properties	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ISIJ International	6. 最初と最後の頁 160 ~ 167
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/isijinternational.ISIJINT-2019-305	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Miyoshi Eisuke, Takaki Tomohiro, Ohno Muneказu, Shibuta Yasushi, Sakane Shinji, Aoki Takayuki	4. 巻 27
2. 論文標題 Large-scale phase-field simulation of three-dimensional isotropic grain growth in polycrystalline thin films	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering	6. 最初と最後の頁 054003 ~ 054003
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-651X/ab1e8b	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yamanaka N, Sakane S, Takaki T	4. 巻 861
2. 論文標題 Application of multi-phase-field lattice Boltzmann method to semi-solid deformation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 IOP Conference Series: Materials Science and Engineering	6. 最初と最後の頁 012067 ~ 012067
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1757-899X/861/1/012067	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Mitsuyama Y, Takaki T, Sakane S, Shibuta Y, Ohno M	4. 巻 861
2. 論文標題 Permeability tensor for various columnar dendrite structures	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 IOP Conference Series: Materials Science and Engineering	6. 最初と最後の頁 012029 ~ 012029
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1757-899X/861/1/012029	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 T. Takaki, R. Sato, R. Rojas, M. Ohno, Y. Shibuta	4. 巻 147
2. 論文標題 Phase-field lattice Boltzmann simulations of multiple dendrite growth with motion, collision, and coalescence and subsequent grain growth	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 124-131
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commatsci.2018.02.004	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 S. Okita, E. Miyoshi, S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta	4. 巻 153
2. 論文標題 Grain growth kinetics in submicrometer-scale molecular dynamics simulation	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 108-116
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2018.04.060	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 E. Miyoshi, T. Takaki, Y. Shibuta, M. Ohno	4. 巻 152
2. 論文標題 Bridging molecular dynamics and phase-field methods for grain growth prediction	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 118-124
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commatsci.2018.05.046	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Aoki, C.-A. Gandin	4. 巻 1
2. 論文標題 Competitive grain growth during directional solidification of a polycrystalline binary alloy: Three-dimensional large-scale phase-field study	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Materialia	6. 最初と最後の頁 104-113
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.mtla.2018.05.002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Y. Shibuta, M. Ohno, T. Takaki	4. 巻 1
2. 論文標題 Advent of cross-scale modeling: high-performance computing of solidification and grain growth	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Advanced Theory and Simulations	6. 最初と最後の頁 1800065
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adts.201800065	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane, T. Shimokawabe, T. Aoki	4. 巻 53
2. 論文標題 Correlation between three-dimensional and cross-sectional characteristics of ideal grain growth: large-scale phase-field simulation study	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Materials Science	6. 最初と最後の頁 15165-15180
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10853-018-2680-y	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 S. Aihara, T. Takaki, N. Takada	4. 巻 178
2. 論文標題 Multi-phase-field modeling using a conservative Allen-Cahn equation for multiphase flow	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Computers & Fluids	6. 最初と最後の頁 141-151
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.compfluid.2018.08.023	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Aoki	4. 巻 164
2. 論文標題 Permeability prediction for flow normal to columnar solidification structures by large-scale simulations of phase-field and lattice Boltzmann methods	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 237-249
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2018.10.039	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Shimokawabe, T. Aoki	4. 巻 483
2. 論文標題 Three-dimensional morphologies of inclined equiaxed dendrites growing under forced convection by phase-field-lattice Boltzmann method	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Crystal Growth	6. 最初と最後の頁 147-155
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcrysgro.2017.11.029	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 M. Ohno, T. Takaki, Y. Shibuta	4. 巻 96
2. 論文標題 Variational formulation of a quantitative phase-field model for nonisothermal solidification in a multicomponent alloy	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 33311
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.96.033311	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 T. Takaki, R. Rojas, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Shimokawabe, T. Aoki	4. 巻 474
2. 論文標題 Phase-field-lattice Boltzmann studies for dendritic growth with natural convection	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Crystal Growth	6. 最初と最後の頁 146-153
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcrysgro.2016.11.099	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 S. Sakane, T. Takaki, R. Rojas, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Shimokawabe, T. Aoki	4. 巻 474
2. 論文標題 Multi-GPUs parallel computation of dendrite growth in forced convection using the phase-field-lattice Boltzmann model	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Crystal Growth,	6. 最初と最後の頁 154-159
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcrysgro.2016.11.103	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 E. Miyoshi, T. Takaki	4. 巻 474
2. 論文標題 Multi-phase-field study of the effects of anisotropic grain-boundary properties on polycrystalline grain growth	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Crystal Growth	6. 最初と最後の頁 160-165
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcrysgro.2016.11.097	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane, T. Shimokawabe, T. Aoki	4. 巻 3
2. 論文標題 Ultra-large-scale phase-field simulation study of ideal grain growth	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 npj Computational Materials	6. 最初と最後の頁 1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41524-017-0029-8	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 M. Ohno, T. Takaki, Y. Shibuta	4. 巻 335
2. 論文標題 Numerical testing of quantitative phase-field models with different polynomials for isothermal solidification in binary alloys	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Computational Physics	6. 最初と最後の頁 621-636
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcp.2017.01.053	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

{ 学会発表 } 計101件 (うち招待講演 18件 / うち国際学会 58件)

1. 発表者名 T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta
2. 発表標題 Phase-field Lattice Boltzmann Simulations of Dendrite Growth with Melt Flow
3. 学会等名 TMS 2020 Annual Meeting & Exhibition (TMS2020) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Y. Mitsuyama, T. Takaki, S. Sakane, Y. Shibuta, M. Ohno
2. 発表標題 Prediction of Permeability Tensor for Columnar Dendritic Structures: Phase-field and Lattice Boltzmann Simulations
3. 学会等名 TMS 2020 Annual Meeting & Exhibition (TMS2020) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1 . 発表者名 N. Yamanaka, T. Takaki, S. Sakane, Y. Shibuta, M. Ohno
2 . 発表標題 Multi-phase-field Modeling for Interaction of Moving Dendritic Particles
3 . 学会等名 TMS 2020 Annual Meeting & Exhibition (TMS2020) (国際学会)
4 . 発表年 2020年

1 . 発表者名 M. Ohno, Y. Oka, S. Sakane, T. Takaki, Y. Shibuta
2 . 発表標題 Bayesian Interference of Solid-liquid Interface Properties Out of Equilibrium Based on Phase-field and Molecular Dynamics Simulations
3 . 学会等名 TMS 2020 Annual Meeting & Exhibition (TMS2020) (国際学会)
4 . 発表年 2020年

1 . 発表者名 T. Takaki
2 . 発表標題 Multi-GPU Accelerated Large-scale Phase-field Simulations for Dendritic Solidification
3 . 学会等名 Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM) (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane, T. Aoki
2 . 発表標題 Effects of Misorientation-Dependent Grain Boundary Properties on Grain Growth: Large-Scale Phase-Field Simulations and Analysis
3 . 学会等名 Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Aoki
2 . 発表標題 AMR Implementation for Multi-GPUs Parallel Computing of Phase-field Lattice Boltzmann Method of Dendrite Growth with Melt Convection
3 . 学会等名 Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 Y. Mitsuyama, T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta
2 . 発表標題 Evaluation of Permeability Tensor for Columnar Dendrite by Phase-field and Lattice Boltzmann Methods
3 . 学会等名 Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 T. Fukushima, E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta
2 . 発表標題 Investigation of a Method for Estimating Grain Boundary Properties by Data Assimilation Using Molecular Dynamics and Phase-Field Methods
3 . 学会等名 Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 N. Yamanaka, T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta
2 . 発表標題 Multi-Phase-Field Simulation of Mobile Dendrites in a Liquid Flow
3 . 学会等名 Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 T. Takaki
2 . 発表標題 GPU accelerated phase field lattice Boltzmann simulations for growth of multiple equiaxed dendrites with motion
3 . 学会等名 5th German-Japanese Workshop on Computational Mechanics (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 T. Takaki
2 . 発表標題 Multi-phase-field lattice Boltzmann simulation from dendritic growth with solid motion to grain growth
3 . 学会等名 KSME-JSME Joint Symposium on Computational Mechanics & CAE 2019 (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta
2 . 発表標題 Multi-phase-field lattice Boltzmann simulations from dendrite growth with motion to grain growth
3 . 学会等名 7th International Conference on Recrystallization and Grain Growth (Rex&GG) (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta
2 . 発表標題 Estimation of anisotropic grain boundary properties through data assimilation for molecular dynamics and phase-field simulations
3 . 学会等名 7th International Conference on Recrystallization and Grain Growth (Rex&GG) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 T. Takaki
2 . 発表標題 High-performance phase-field computing of solidification and grain growth
3 . 学会等名 The 4th International Symposium on Phase-Field Modelling in Materials Science (PF-19) (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Aoki
2 . 発表標題 Multi-GPUs parallelization for AMR-phase-field simulation of dendrite growth
3 . 学会等名 The 4th International Symposium on Phase-Field Modelling in Materials Science (PF-19) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 M. Ohno, Y. Oka, S. Shibuta, T. Takaki
2 . 発表標題 Solid-liquid interfacial properties estimated from phase-field and molecular dynamics simulations
3 . 学会等名 The 4th International Symposium on Phase-Field Modelling in Materials Science (PF-19) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane, T. Aoki
2 . 発表標題 Large-scale multi-phase-field simulations of anisotropic grain growth-Effects of misorientation-dependent boundary energy and mobility
3 . 学会等名 The 4th International Symposium on Phase-Field Modelling in Materials Science (PF-19) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta
2 . 発表標題 Multi-phase-field lattice Boltzmann simulations during formation process of equiaxed structure considering dendrite motion
3 . 学会等名 5th International Conference on Advances in Solidification Processes (ICASP-5) & 5th International Symposium on Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification, Casting and Refining (CSSCR-5) (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane, T. Aoki
2 . 発表標題 Large-scale multi-phase-field simulation of polycrystalline grain growth with anisotropic grain boundary properties
3 . 学会等名 5th International Conference on Advances in Solidification Processes (ICASP-5) & 5th International Symposium on Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification, Casting and Refining (CSSCR-5) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Aoki
2 . 発表標題 Multi-GPU acceleration of three-dimensional phase-field computation for dendrite growth with thermal-solutal convection
3 . 学会等名 5th International Conference on Advances in Solidification Processes (ICASP-5) & 5th International Symposium on Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification, Casting and Refining (CSSCR-5) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 Y. Mitsuyama, T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta
2 . 発表標題 Permeability prediction in any direction of columnar dendrite by phase-field and lattice Boltzmann methods
3 . 学会等名 5th International Conference on Advances in Solidification Processes (ICASP-5) & 5th International Symposium on Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification, Casting and Refining (CSSCR-5) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Oka, T. Takaki, Y. Shibuta, M. Ohno
2. 発表標題 Estimation of properties of solid-liquid interface based on data assimilation
3. 学会等名 5th International Conference on Advances in Solidification Processes (ICASP-5) & 5th International Symposium on Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification, Casting and Refining (CSSCR-5) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 光山 容正, 高木 知弘
2. 発表標題 柱状デンドライトの透過率テンソルの提案
3. 学会等名 第5回材料WEEK 若手学生研究発表会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 坂根 慎治, 高木 知弘, 大野 宗一, 澁田 靖, 青木 尊之
2. 発表標題 液相流動と固体運動を伴うデンドライト成長の複数GPU並列AMR phase-field計算
3. 学会等名 日本機械学会 第32回計算力学講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 山中 波人, 坂根 慎治, 高木 知弘
2. 発表標題 等軸晶予測のためのMPF-LBモデルの高精度化の検討
3. 学会等名 日本機械学会 第32回計算力学講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 岡 ゆきみ, 澁田 靖, 高木 知弘, 大野 宗一
2. 発表標題 データ同化に基づいた固液界面エネルギーと液相内熱拡散率の同時推定
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第178回秋季講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 光山 容正, 高木 知弘, 坂根 慎治, 澁田 靖, 大野 宗一
2. 発表標題 柱状デンドライト構造に平行な流れの透過率予測
3. 学会等名 日本金属学会2019年秋季(165回)講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 福島 拓実, 三好 英輔, 高木 知弘, 大野 宗一, 澁田 靖
2. 発表標題 分子動力学法とphase-field法を用いたデータ同化による粒界物性評価法の検討
3. 学会等名 第24回計算工学講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 坂根 慎治, 高木 知弘, 大野 宗一, 澁田 靖, 青木 尊之
2. 発表標題 AMR法を適用したphase-fieldデンドライト凝固計算の複数GPU並列化
3. 学会等名 第24回計算工学講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 高木 知弘, 坂根 慎治, 大野 宗一, 澁田 靖
2. 発表標題 運動を伴うデンドライト成長phase-fieldモデルへのdouble-obstacleポテンシャルの適用
3. 学会等名 第24回計算工学講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane, T. Shimokawabe, T. Aoki
2. 発表標題 Large-scale phase-field simulation of 3D Ideal grain growth: testing the mean-field theory and stereological analysis
3. 学会等名 4th International Congress on 3D Materials Science (3DMS 2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Aoki
2. 発表標題 Permeability prediction for 3D dendrites structure by large-scale phase-field lattice Boltzmann simulation
3. 学会等名 4th International Congress on 3D Materials Science (3DMS 2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Y. Oka, M. Ohno, T. Takaki, Y. Shibuta, K. Matsuura
2. 発表標題 Parameter estimation during solidification of metals based on data assimilation
3. 学会等名 The 13th World Congress in Computational Mechanics (WCCM 2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1 . 発表者名 R. Sato, T. Takaki
2 . 発表標題 Multiple-phase-field simulation of multiple dendritic growth with motion
3 . 学会等名 The 13th World Congress in Computational Mechanics (WCCM 2018) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 S. Aihara, T. Takaki, N. Takada
2 . 発表標題 Three-dimensional simulation of spreading dynamics of a droplet on substrate using multi-phase-field model
3 . 学会等名 The 13th World Congress in Computational Mechanics (WCCM 2018) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Aoki
2 . 発表標題 Three-dimensional phase-field simulations during directional solidification of a binary alloy considering thermal-solutal convection
3 . 学会等名 The 13th World Congress in Computational Mechanics (WCCM 2018) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 E. Miyoshi, T. Takaki, Y. Shibuta, M. Ohno
2 . 発表標題 Direct mapping from molecular dynamics to phase-field simulations for accurate prediction of grain growth
3 . 学会等名 The 13th World Congress in Computational Mechanics (WCCM 2018) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 Y. Oka, M. Ohno, T. Takaki, Y. Shibuta, K. Matsuura
2 . 発表標題 Parameter estimation in solidification processes of metals based on data assimilation
3 . 学会等名 55th Annual Technical Meeting of the Society of Engineering Sciences (SES) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 E. Miyoshi, T. Takaki, Y. Shibuta, M. Ohno
2 . 発表標題 Accuracy evaluation of phase-field grain growth models with different functional forms
3 . 学会等名 55th Annual Technical Meeting of the Society of Engineering Sciences (SES) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta
2 . 発表標題 High-performance phase-field lattice Boltzmann modelling and simulation of multiple dendrite growth with motion
3 . 学会等名 55th Annual Technical Meeting of the Society of Engineering Sciences (SES) (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 Y. Shibuta, S. Okita, S. Sakane, E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno
2 . 発表標題 Microstructure formation in large-scale molecular dynamics simulation
3 . 学会等名 The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2018) (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 E. Miyoshi, T. Takaki, Y. Shibuta, M. Ohno
2 . 発表標題 Direct mapping from molecular dynamics to phase-field simulations for accurate prediction of grain growth
3 . 学会等名 The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2018) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 R. Sato, T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta
2 . 発表標題 Multi-phase-field lattice Boltzmann modeling and simulation of equiaxed structure
3 . 学会等名 The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2018) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Aoki
2 . 発表標題 Multi-GPU large-scale phase-field lattice Boltzmann simulation of dendrite growth with thermos-solutal convection
3 . 学会等名 The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2018) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Aoki
2 . 発表標題 Solidification microstructure formation by phase-field simulation with multi-GPU acceleration
3 . 学会等名 The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2018) (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1. 発表者名 三好英輔, 高木知弘, 澁田靖, 大野宗一
2. 発表標題 分子動力学法からPhase-Field法へのダイレクトマッピングによる多結晶粒成長予測の高精度化
3. 学会等名 第3回マルチスケール材料力学シンポジウム (日本材料学会 第67期通常総会・学術講演会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 渡辺 勢也, 青木 尊之, 黄 遠雄, 長谷川 雄太, 高木 知弘
2. 発表標題 マルチフェーズフィールド法に基づく領域分割を用いたAMR計算の動的負荷分散
3. 学会等名 日本計算工学会 第23回計算工学講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 坂根 慎治, 高木 知弘, 大野 宗一, 澁田 靖, 青木 尊之
2. 発表標題 熱溶質対流を伴う二元合金凝固phase-fieldシミュレーションの複数GPU並列化
3. 学会等名 日本計算工学会 第23回計算工学講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 高木 知弘, 佐藤 遼太郎, 坂根 慎治, 大野 宗一, 澁田 靖
2. 発表標題 液相流動と固体運動を伴う多結晶 dendrite 凝固の2D PF-LBMシミュレーション
3. 学会等名 日本計算工学会 第23回計算工学講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 岡 ゆきみ, 澁田 靖, 高木 知弘, 大野 宗一
2. 発表標題 データ同化に基づいた 金属の凝固における 固液界面エネルギーの推定
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第176回秋季講演大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 佐藤 遼太郎, 高木 知弘
2. 発表標題 等軸晶形成のためのmulti-phase-fieldモデリング
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第176回秋季講演大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 高木 知弘, 坂根 慎治, 大野 宗一, 澁田 靖, 青木 尊之
2. 発表標題 Phase-field法と格子ボルツマン法による柱状デンドライト垂直流れの透過率評価
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第176回秋季講演大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 光山 容正, 坂根 慎治, 高木 知弘
2. 発表標題 柱状デンドライト垂直方向流れの透過率予測
3. 学会等名 日本機械学会 第31回計算力学講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 三好 英輔, 高木 知弘, 大野 宗一, 澁田 靖
2. 発表標題 各種multi-phase-fieldモデルによる結晶粒成長シミュレーションの精度評価
3. 学会等名 日本機械学会 第31回計算力学講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 坂根 慎治, 高木 知弘
2. 発表標題 AMRのGPU実装によるPhase-fieldデンドライト成長シミュレーションの高速化
3. 学会等名 日本機械学会 第31回計算力学講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 高木 知弘, 坂根 慎治, 佐藤 遼太郎, 大野 宗一, 澁田 靖
2. 発表標題 破断と運動を伴うデンドライト成長の2D phase-field格子ボルツマン計算
3. 学会等名 日本機械学会 第31回計算力学講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 光山 容正, 坂根 慎治, 高木 知弘
2. 発表標題 柱状デンドライトの透過率テンソルの検討
3. 学会等名 日本鉄鋼協会・日本金属学会関西支部鉄鋼プロセス研究会・材料化学研究会 平成30年度第2回合同研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 佐藤 遼太郎, 高木 知弘
2. 発表標題 複数デンドライトの運動を伴う等軸晶予測のためのmulti-phase-fieldモデリング
3. 学会等名 日本鉄鋼協会・日本金属学会関西支部鉄鋼プロセス研究会・材料化学研究会 平成30年度第2回合同研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 三好 英輔, 高木 知弘, 大野 宗一, 澁田 靖, 坂根 慎治, 下川辺 隆史, 青木 尊之
2. 発表標題 粒成長過程における断面・立体組織特性の相関：大規模phase-field計算による研究
3. 学会等名 日本鉄鋼協会・日本金属学会関西支部鉄鋼プロセス研究会・材料化学研究会 平成30年度第2回合同研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 坂根 慎治, 高木 知弘
2. 発表標題 AMR法によるGPUデンドライト凝固計算の高速化
3. 学会等名 日本鉄鋼協会・日本金属学会関西支部鉄鋼プロセス研究会・材料化学研究会 平成30年度第2回合同研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 澁田 靖, 大喜多 慎, 大野 宗一, 三好 英輔, 坂根 慎治, 高木 知弘
2. 発表標題 超大規模分子動力学法シミュレーションによる核生成・凝固粒長過程の統一的理解
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第177回春季講演大会, 材料とプロセス
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 岡 ゆきみ, 澁田 靖, 高木 知弘, 大野 宗一, 松浦 清隆
2. 発表標題 データ同化に基づく金属の凝固における固液界面物性値の推定
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第177回春季講演大会, 材料とプロセス
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 光山 容正, 高木 知弘
2. 発表標題 柱状デンドライトの3次元透過率テンソルの検討
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第177回春季講演大会, 材料とプロセス
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 高木 知弘, 坂根 慎治, 佐藤 遼太郎, 大野 宗一, 澁田 靖, 青木 尊之
2. 発表標題 等軸晶形成のphase-fieldモデリングと2次元大規模シミュレーション
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第177回春季講演大会, 材料とプロセス
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Jaehoon Lee, 高木 知弘, 澁田 靖, 松浦 清隆, 大野 宗一
2. 発表標題 Al-3mass%Cu 合金における一次デンドライトアーム間隔の成長速度依存性の計算
3. 学会等名 日本金属学会2019年春季(164回)講演大会
4. 発表年 2019年

1 . 発表者名 T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Shimokawabe, T. Aoki
2 . 発表標題 Permeability prediction of dendrite structure by large-scale phase-field lattice Boltzmann simulation
3 . 学会等名 TMS 2018 Annual Meeting & Exhibition (TMS2018) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane, T. Shimokawabe, T. Aoki
2 . 発表標題 Statistical behavior of ideal grain growth: an ultra-large-scale phase-field simulation study
3 . 学会等名 TMS 2018 Annual Meeting & Exhibition (TMS2018) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Shimokawabe, T. Aoki
2 . 発表標題 Multi-GPU phase-field simulation of growth, motion and collision of multiple dendrites
3 . 学会等名 TMS 2018 Annual Meeting & Exhibition (TMS2018) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 M. Ohno, T. Takaki, Y. Shibuta
2 . 発表標題 Variational formulation of a quantitative phase-field model for non-isothermal solidification in multi-component alloys and its applications
3 . 学会等名 TMS 2018 Annual Meeting & Exhibition (TMS2018) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 Y. Shibuta, S. Sakane, E. Miyoshi, S. Okita, T. Takaki, M. Ohno
2 . 発表標題 Molecular dynamics approach to solidification microstructure
3 . 学会等名 TMS 2018 Annual Meeting & Exhibition (TMS2018) (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane, T. Shimokawabe, and T. Aoki
2 . 発表標題 Parallel GPU Phase-Field Simulations of Dendrite Competitive Growth
3 . 学会等名 18th SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP18) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Shimokawabe, and T. Aoki
2 . 発表標題 2D and 3D phase-field lattice Boltzmann simulations during directional solidification of a binary alloy with natural convection
3 . 学会等名 10th Pacific Rim International Conference on Modeling of Casting and Solidification Processes (MCSP2017) (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2017年

1 . 発表者名 E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane, T. Shimokawabe, T. Aoki
2 . 発表標題 Phase-field study on the comparison of grain growth microstructures from three-dimensional and cross-sectional observations
3 . 学会等名 10th Pacific Rim International Conference on Modeling of Casting and Solidification Processes (MCSP2017) (国際学会)
4 . 発表年 2017年

1 . 発表者名 S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Shimokawabe, T. Aoki
2 . 発表標題 Influence of forced flow on the oriented equiaxed dendritic growth: large-scale phase-field study
3 . 学会等名 10th Pacific Rim International Conference on Modeling of Casting and Solidification Processes (MCSP2017) (国際学会)
4 . 発表年 2017年

1 . 発表者名 R. Sato, T. Takaki
2 . 発表標題 Phase-field modeling and simulation of growth, motion and collision of multiple dendrites
3 . 学会等名 10th Pacific Rim International Conference on Modeling of Casting and Solidification Processes (MCSP2017) (国際学会)
4 . 発表年 2017年

1 . 発表者名 M. Ohno, T. Takaki, Y. Shibuta
2 . 発表標題 Quantitative phase-field modelling for alloy solidification and its applications
3 . 学会等名 10th Pacific Rim International Conference on Modeling of Casting and Solidification Processes (MCSP2017) (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2017年

1 . 発表者名 Y. Shibuta, S. Sakane, E. Miyoshi, S. Okita, T. Takaki, M. Ohno
2 . 発表標題 Molecular dynamics approach to nucleation and solidification
3 . 学会等名 10th Pacific Rim International Conference on Modeling of Casting and Solidification Processes (MCSP2017) (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2017年

1 . 発表者名 T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta
2 . 発表標題 Large-scale Phase-field Simulations for Dendrite Solidification on a Supercomputer
3 . 学会等名 6th Decennial International Conference on Solidification Processing (SP17) (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2017年

1 . 発表者名 Y. Shibuta, S. Sakane, E. Miyoshi, S. Okita, T. Takaki, M. Ohno
2 . 発表標題 Very large scale molecular dynamics simulation of solidification
3 . 学会等名 6th Decennial International Conference on Solidification Processing (SP17) (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2017年

1 . 発表者名 T. Takaki
2 . 発表標題 Competitive Growth Simulations of Multiple Columnar Dendrites: Large-scale Phase-field Study
3 . 学会等名 JSME-KSME Joint Symposium on Computational Mechanics & CAE 2017 (国際学会)
4 . 発表年 2017年

1 . 発表者名 T. Takaki, R. Rojas, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta
2 . 発表標題 Multi-phase-field-lattice Boltzmann model for polycrystalline solidification with melt convection
3 . 学会等名 IACM 19th International Conference on Finite Elements in Flow Problems (FEF 2017) (国際学会)
4 . 発表年 2017年

1. 発表者名 M. Ohno, T. Takaki, Y. Shibuta
2. 発表標題 Quantitative phase-field model coupled with lattice Boltzmann method for simulations of practical alloy systems
3. 学会等名 IACM 19th International Conference on Finite Elements in Flow Problems (FEF 2017) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 高木 知弘
2. 発表標題 スパコンによる大規模フェーズフィールド解析による凝固と粒成長の高精度組織予測
3. 学会等名 HPCI第4回材料系ワークショップ(招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 T. Takaki
2. 発表標題 Phase-field simulations of dendrite solidification and grain growth
3. 学会等名 Mathematics in Interface, Dislocation and Structure of Crystals (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 高木 知弘, 坂根 慎治, 大野 宗一, 澁田 靖, 青木 尊之
2. 発表標題 大規模phase-field計算による多結晶二元合金一方向凝固過程の競合成長挙動評価
3. 学会等名 日本鉄鋼協会 第175回春季講演大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 佐藤 遼太郎, 高木 知弘
2. 発表標題 複数デンドライトの運動を伴う高精度等軸晶予測のためのphase-fieldモデリング
3. 学会等名 日本機械学会 関西支部第93期定時総会講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 高木 知弘, 大野 宗一, 澁田 靖, 坂根 慎治, 三好 英輔, 下川辺 隆史, 青木 尊之
2. 発表標題 大規模phase-fieldシミュレーションの現状
3. 学会等名 日本機械学会 第30回計算力学講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 坂根 慎治, 高木 知弘
2. 発表標題 液相流動を考慮したphase-fieldシミュレーションへの複数レベルメッシュの適用
3. 学会等名 日本機械学会 第30回計算力学講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 三好 英輔, 高木 知弘, 澁田 靖, 大野 宗
2. 発表標題 分子動力学計算による生成組織を初期構造としたMulti-Phase-Field粒成長計算
3. 学会等名 日本機械学会 第30回計算力学講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 佐藤 遼太郎, 高木 知弘
2. 発表標題 複数デンドライトの成長・運動・衝突の表現による等軸晶形成のPFシミュレーション
3. 学会等名 日本機械学会 第30回計算力学講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 高木 知弘, 坂根 慎治, 大野 宗一, 澁田 靖, 下川辺 隆史, 青木 尊
2. 発表標題 3D大規模Phase-field格子ボルツマン計算によるデンドライト一方向凝固組織に及ぼす自然対流の影響評価
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第174回秋期講演大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 三好 英輔, 高木 知弘, 大野 宗一, 澁田 靖, 坂根 慎治, 青木 尊之
2. 発表標題 断面観察からの立体的結晶粒組織の推定に関するPhase-Field法による研究
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第174回秋期講演大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 佐藤 遼太郎, 高木 知弘
2. 発表標題 複数デンドライトの運動と衝突のphase-fieldシミュレーション
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第174回秋期講演大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 高木 知弘, 坂根 慎治, 大野 宗一, 澁田 靖, 下川辺 隆史, 青木 尊之
2. 発表標題 自然対流を伴う二元合金一方向凝固のphase-fieldシミュレーション
3. 学会等名 第22回計算工学講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 三好 英輔, 高木 知弘, 大野 宗一, 澁田 靖, 坂根 慎治, 下川辺 隆史, 青木 尊之
2. 発表標題 大規模3D multi-phase-field計算に基づく2D断面上の粒成長挙動評価
3. 学会等名 第22回計算工学講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 佐藤 遼太郎, 高木 知弘
2. 発表標題 複数デンドライトの成長・運動・衝突を表現するphase-fieldモデリング
3. 学会等名 第22回計算工学講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 安田秀幸, 富依勇太, 森下浩平
2. 発表標題 鉄鋼材料のデンドライト成長の時間分解・3次元観察(4D-CT)
3. 学会等名 日本鉄鋼協会 第175回春季講演大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 黄遠雄, 青木尊之, 松下真太郎
2. 発表標題 保存形フェースフィールド方程式によるAMR 法を用いた界面移流計算の動的メモリ管理によるGPU実装
3. 学会等名 第31回 数値流体力学シンポジウム (CFD2017)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 T. Aoki
2. 発表標題 Large-Scale Applications for Real-World Problems Solving Partial Differential Equations on Heterogeneous GPU Machines
3. 学会等名 SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP18) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 S. Watanabe, T. Aoki, Y. Hasegawa
2. 発表標題 Large-Scale Simulations For Multiphase Flows By Coupled LBM-DEM Using Multiple GPUs
3. 学会等名 DSFD2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>京都工芸繊維大学 高木知弘 ホームページ http://www.cis.kit.ac.jp/~takaki/index-jp.html</p>
--

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	大野 宗一 (Ohno Munekazu) (30431331)	北海道大学・工学研究院・教授 (10101)	
研究分担者	澁田 靖 (Shibuta Yasushi) (90401124)	東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・准教授 (12601)	
研究分担者	安田 秀幸 (Yasuda Hideyuki) (60239762)	京都大学・工学研究科・教授 (14301)	
研究分担者	青木 尊之 (Aoki Takayuki) (00184036)	東京工業大学・学術国際情報センター・教授 (12608)	