



平成29年 7月 3日

京都大学記者クラブ所属報道機関各社 御中

京都工芸繊維大学広報委員会

担当：総務課広報室

tel:724-7016 fax:724-7029

理想粒成長の統計的ふるまいを超大規模シミュレーションにより解明  
—あらゆるセル構造形成現象の理解と予測に筋道—

1. 発表者：

- 高木 知弘 (京都工芸繊維大学機械工学系 准教授)  
大野 宗一 (北海道大学大学院工学研究院材料科学部門 准教授)  
澁田 靖 (東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻 准教授)  
下川辺 隆史 (東京大学情報基盤センタースーパーコンピューティング研究部門 准教授)  
青木 尊之 (東京工業大学学術国際情報センター 教授)  
三好 英輔 (京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科設計工学専攻 博士後期課程1年)  
坂根 慎治 (京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科設計工学専攻 博士後期課程1年)

2. 発表のポイント：

- ◆あらゆるセル構造形成現象の理想的モデルである理想粒成長を、スーパーコンピュータ上での超大規模シミュレーションにより再現
- ◆実験や従来規模のシミュレーションでは不可能であった理想粒成長の統計的挙動の解明に成功
- ◆現実の粒成長・セル構造形成の理解に向けた基礎理論を提示

3. 発表概要：

京都工芸繊維大学機械工学系の高木知弘准教授を中心とする共同研究グループは、スーパーコンピュータ上での大規模フェーズフィールド法シミュレーション（注1）により理想粒成長（注2）現象を再現し、その統計的ふるまいの正確な解明に成功しました。

金属固体内の結晶粒の成長や、石鹸泡やビール泡の粗大化など、界面に区切られた多くの小区画（セル）が競合的に成長する現象は自然界において数多く見られます。理想粒成長は、このようなセル構造形成を考える上で最も単純化された理想的モデルであり、理論・実験・数値シミュレーションの各方面から広く研究されてきました。しかしながら、理想的条件下で多くのセルの挙動を追跡することは、実験や従来規模のシミュレーションでは難しく、現象の真の統計的ふるまいは未だ明らかではありませんでした。共同研究グループは今回、理想粒成長において、古くから理論的に予言されてきた統計的定常状態（注3）が達成される一方で、定常状態における組織形態が古典的理論から大きく乖離することを明

らかとしました。本成果は、あらゆるセル構造形成現象の理解に対し有益な基盤を与えるものと期待されます。

本研究は英国のオンライン科学雑誌 Nature Partner Journal (npj) Computational Materials に日本時間 7 月 3 日 (月) 午後 7 時 (英国時間 7 月 3 日 (月) 午前 10 時) に掲載されます。

なお、本研究は科研費基盤研究 (B)、科研費基盤研究 (S)、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点および、革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラの助成を受けて実施されました。また本研究の一部は、文部科学省ポスト「京」重点課題 7「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」(CDMSI) の一環として実施したものです。

#### 4. 発表内容：

##### 【研究の背景】

多くの実用材料は多結晶構造を有し、その物理的・機械的特性は内部組織形態に強く支配されます。材料の内部組織の形成において、最も重要な冶金学的プロセスの一つが、多数の結晶粒の競合的成長現象である粒成長です。また、粒成長と同様のメカニズムによるセル構造形成現象は、石鹸泡の粗大化や地殻中の岩盤形成など、自然界に遍在しています。このため、粒成長は材料学のみならず、工学・自然科学の多くの分野で古くから関心を集めてきました。中でも、すべての粒界が等しいエネルギーと易動度を有する条件での単相材中の粒成長、すなわち理想粒成長は、あらゆる粒成長・セル構造形成現象を考える上で必須のモデルケースであり、広く研究が行われています。理想的条件での粒成長を実験的に観察することはきわめて困難であることから、現象の詳細は主として数値シミュレーションにより解明が試みられてきました。しかしながら、従来の計算規模では取り扱える結晶粒の数に大きな制約があり、現象の正確な統計的ふるまいは依然として議論の渦中にありました。

##### 【研究内容】

近年、GPU (注 4) の並列処理性能に着目した GPU 加速コンピューティングが注目を集め、シミュレーションで取り扱える時空間スケールの制約を解消するための有望なツールとして大きな期待が寄せられています。研究グループは、複数 GPU による並列計算が可能なフェーズフィールド法シミュレーションコードを開発し、GPU スパコン TSUBAME2.5 (注 5) 上で 800 個の GPU を並列化することで、先行研究における最大規模の計算を 10 倍以上上回る超大規模時空間スケールでの理想粒成長シミュレーションを可能としました。図 1 はその一例であり、2,560<sup>3</sup> 格子を用いたシミュレーションにおいておよそ 300 万個の結晶粒が競合的に成長し、10 万ステップ後に 1 万個ほどまで減少しています。このようなシミュレーションを通して、理想粒成長時の組織形態変化を詳細に評価した結果、結晶粒の平均サイズで規格化したサイズ分布形状が、時間的に変化しない統計的定常状態に到達する様子を初めて明瞭に観測することに成功しました。一方で、定常状態における組織形態が、理想粒成長の代表的理論である Hillert 理論 (1965) から大きく乖離することを明らかとしました (図 2)。さらには、P. R. Rios ら (2006) や R. D. MacPherson ら (2007) の理論を踏まえて新しい理論モデルを構築し、シミュレートされた理想粒成長挙動を精度よく記述することを可能としました。

## 【社会的意義】

現実の粒成長・セル構造形成は、不純物や第二相、界面構造の異方性など、多くの複雑な因子に強く影響を受けます。理想粒成長は、このようなセル構造形成現象における複雑因子の影響を定量化するうえで不可欠の「ものさし」です。本研究で理想粒成長の統計的ふるまいが正確に明らかとなったことで、実現象の理解と予測が今後大きく進展することが期待されます。同時に、本研究は材料現象の解明におけるシミュレーション・大規模計算技術の有用性の証左を示すものであり、近年盛んとなっている計算材料学に基づく材料開発の潮流を加速させるものと期待されます。

## 5. 発表雑誌：

雑誌名：「npj Computational Materials - Nature」（オンライン版：7月3日）

論文タイトル：Ultra-large-scale phase-field simulation study of ideal grain growth

著者：Eisuke Miyoshi, Tomohiro Takaki, Munekazu Ohno, Yasushi Shibuta, Takashi Shimokawabe and Takayuki Aoki

DOI 番号：10.1038/s41524-017-0029-8

アブストラクト URL：<http://www.nature.com/articles/s41524-017-0029-8>

## 6. 注意事項：

解禁日：日本時間7月3日（月）午後7時（イギリス時間：3日（月）午前10時）

## 7. 用語解説：

（注1）フェーズフィールド法シミュレーション：

拡散界面モデルを用いて自由界面の移動を計算する組織形成シミュレーション手法。自由エネルギー最小化原理に基づき、フェーズフィールド変数と呼ばれる秩序変数の時間変化を計算することで界面移動が再現される。

（注2）理想粒成長：

多数の結晶粒が競合的に成長する粒成長現象のうち、不純物や界面構造の異方性を含まない理想化された系におけるものを指す。石鹸泡の粗大化過程は理想粒成長である。

（注3）統計的定常状態：

平均粒サイズで規格化した粒サイズ分布の形状が時間的に変化しない状態。M. Hillert (1965) や W. W. Mullins (1986) により、その存在が理論的に予言されていた。

（注4）GPU：

Graphics Processing Unit の略称。画像表示を目的として専用に設計されたプロセッサであるが、高い演算性能を持ち、最近是一般の計算に用いられるようになってきている。2,000個～3,000個の演算コアをチップ上に搭載する構造を持ち、GPUを用いて大量の計算を並列処理することで、同数のCPUと比べて短時間で計算を終わらせることができる。

（注5）TSUBAME2.5：

東京工業大学が運用する大規模クラスター型スーパーコンピュータ。NVIDIA 社製 GPU アクセラレータ「Tesla K20X」が4,224枚搭載されている。

8. 添付資料：

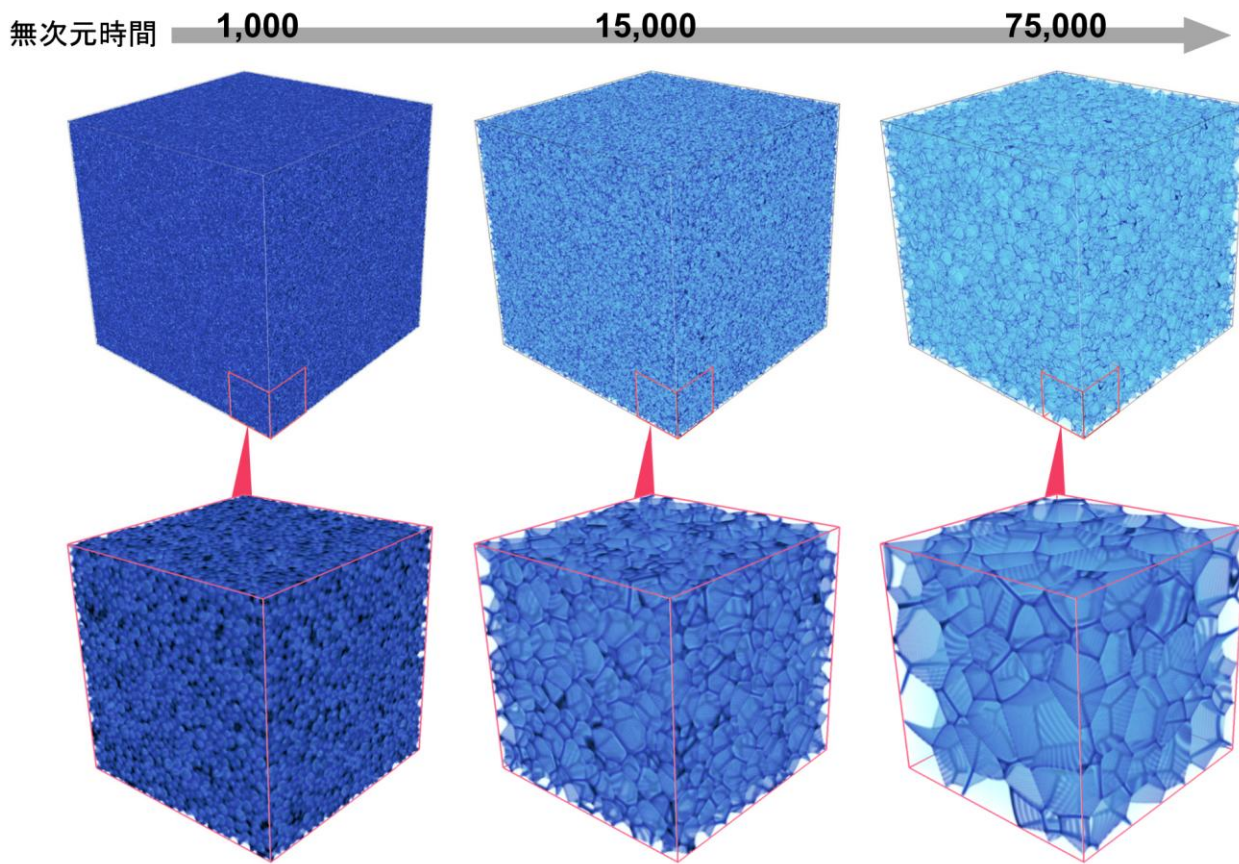


図1：大規模理想粒成長シミュレーションのスナップショット。界面で区切られた多数のセル（結晶粒）の競合成長が再現されている。赤枠内は領域の一部の拡大図を示す。

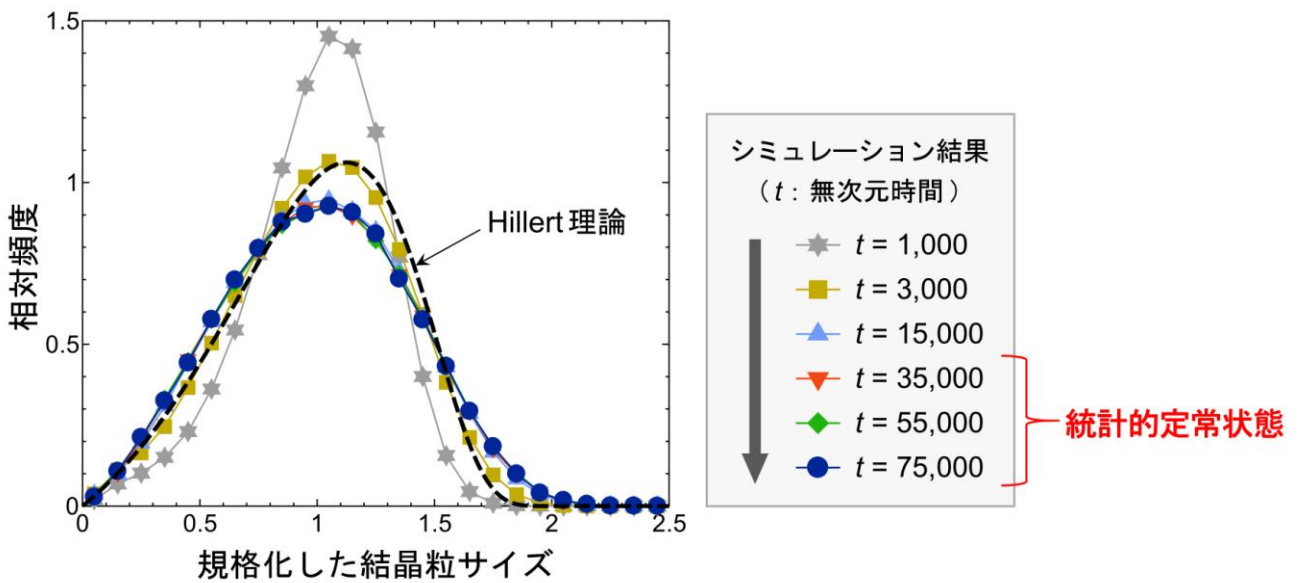


図2：シミュレーションにおける結晶粒サイズ分布の時間変化。十分な時間が経過したのち、サイズ分布が時間的に変化しない定常状態に到達している。定常状態のサイズ分布形状は、Hillert 理論による予測（破線）とは大きく異なる。

<本リリースおよび研究内容に関する問い合わせ先>

高木 知弘（たかき ともひろ） 京都工芸繊維大学 機械工学系 准教授

〒606-8585 京都市左京区松ヶ崎橋上町 1

Tel: 075-724-7317 Fax: 075-724-7300 E-mail: [takaki@kit.ac.jp](mailto:takaki@kit.ac.jp)