



## 材料組織形成をシミュレートする

計算組織学研究グループ(小山・塚田研究室)  
名古屋大学大学院工学研究科  
マテリアル理工学専攻材料工学分野

我々の研究室は、名古屋大学大学院工学研究科マテリアル理工学専攻材料工学分野(2017年度からは、後述の材料デザイン工学専攻)に所属しています。現在、教員・スタッフは、教授の小山敏幸先生、准教授の塚田祐貴、技術補佐員の三摩唱子氏の3名です。学生は、名古屋大学の修士課程学生6名、学部学生6名が在籍し、名古屋工業大学から修士課程学生5名を特別研究派遣学生として受け入れています。研究室では、材料組織形成メカニズムの解明や優れた材料特性を発現させるための組織制御指針の提示を目標に、フェーズフィールド(PF)法を軸足として、各種材料の組織や特性のシミュレーションに取り組んでいます。特に、PF法に基づく組織シミュレーションの結果を特性計算のイメージデータに用いることによってプロセス解析と特性解析を連携させる新しい研究を行っています。

PF法は材料組織形成過程のシミュレーション手法です。PF法では、材料組織を記述するためのフィールド変数を定義し、そのフィールド変数を用いて組織の全自由エネルギーを定式化します。そして、全自由エネルギーが最も効率的に減少する方向へフィールド変数の時間発展を計算し、組織形成をシミュレートします。これまで材料学の分野で確立されてきたエネルギー計算法(CALPHAD法に基づく単相のギブスエネルギー計算法やマイクロメカニクスに基づく弾性ひずみエネルギー計算法など)をPFモデルに直接取り込むことによって、全自由エネルギーの定量的評価に基づいた組織シミュレーションが可能になります。最近では、簡単な二次元シミュレーションであれば、組織形成の計算から計算結果の可視化まで、汎用のノートパソコンを使って数分程度で実行することができます。折に触れて、学部学生の前でノートパソコンを使った組織シミュレーションを実演することで、学生に材料組織形成に対する興味を持ってもらうとともに、最近の汎用パソコンの演算能力の高さを実感してもらっています。

研究室では、「材料組織」をキーワードに、様々な材料を対象に研究テーマを設定しています。研究対象としている材料には、鉄鋼材料、ニッケル基耐熱材料、次世代マグネシウム構造材料、超弾性チタン材料、希土類磁石材料、電池材料などがあります。いずれの材料も、優れた特性を引き出すために、材料組織の改良・最適化が必要とされています。研究室では、組織シミュレーションを実行するにあたり、既製の

ソフトウェアは使わずに、各種材料のPFモデルを個別に構築し、ソースコードを開発しています。研究室の学生は、配属から1ヶ月程度で科学技術計算に必要なプログラミング言語の知識を身に付けた後、①研究対象とする材料組織形成に関する調査、②材料組織の各種エネルギー計算法の習得、③材料組織形成のモデリング、④組織シミュレーション結果の整理・可視化とその解釈、に多くの時間を割いています。学生は、学年や研究テーマに関係なくお互いの研究内容について議論し、また重要な知識や計算スキルをうまく共有しながら、研究を進めています。

我々は最近、PF法とデータサイエンスの手法を組み合わせた研究に積極的に取り組んでいます。材料組織形成に関する現象は数多くありますが、個々の現象のPFモデルは世界的に整備が進んできており、それらを効果的に組み合わせることで、実際の材料組織形成をシミュレートするための高度なPFモデルを構築することが可能になってきました。モデルが高度化すると、どうしても数値計算にかかる時間が増加してしましますが、我々の研究室では、GPGPU用の計算機を導入することで、比較的短時間でシミュレーション結果を得ることができています。PF法では、シミュレーションの入力データとして単相の各種物性値が必要です。当然、用いる入力データが異なれば、シミュレーションで得られる材料組織も異なってきます。もし、入力データが異なるシミュレーション結果が大量にあれば、データサイエンスの手法を用いて、入力データ(=単相の各種物性値)と計算結果(=材料組織)の関係を記述し、材料組織予測の簡易システムを構築することができます。もしこれが実現すれば、材料組織制御を目的とした従来の試行錯誤的なプロセスを大幅に加速することができると考えています。これ以外にも、データサイエンスの手法を活用した取り組みを順次進めており、「PF法の活用による材料開発プロセスの高効率化」を実現するための普遍的な手法を確立することを目指しています。

さて、名古屋大学工学部・工学研究科は2017年4月に改組が予定されており、新しくマテリアル工学科が誕生し、マテリアル工学科の上に、大学院の3つの専攻(材料デザイン工学専攻、物質プロセス工学専攻、化学システム工学専攻)が設置されます。マテリアル工学科では、材料・物理・化学を基軸として、物質・材料のナノスケールから製造・生産といったマクロなシステムまでを一つの体系として捉えたカリキュラムを構成しており、物質の原理原則に基づいたものづくりを目指した研究活動、マテリアルを様々な観点から俯瞰できる能力を持った人材を育成するための教育活動を行っています。計算組織学研究グループ(小山・塚田研究室)の見学は随時受け付けておりますので、ご興味のある方がいらっ

(文責：塚田祐貴 名古屋大学准教授)  
(2016年11月7日受理)[doi:10.2320/materia.56.39]  
(連絡先：〒464-8603 名古屋市千種区不老町)  
E-mail: tsukada@numse.nagoya-u.ac.jp