

# 凝固組織のハイパフォーマンス・コンピューティングと クロススケール・アプローチへの新展開

大野 宗一\* 澁田 靖\*\* 高木 知弘\*\*\*

## 1. はじめに

材料組織の形成過程をコンピュータ・シミュレーションによって観察・予測する試みは、1990年代頃から本格的に始まり、現在までに多くの研究が行われてきた。実験事実を定性的または定量的に再現することを目的とした研究に加えて、近年では、既存の実験科学では扱いが難しい現象の解明や、製造プロセス条件の最適化などに組織形成シミュレーションを実際に活用するケースが徐々に増えており<sup>(1)</sup>、研究アプローチとしての有用性を確立しつつあるといえる。これは計算モデルの高精度化・高度化に加えて、コンピュータの性能と計算技術の発展によるところも大きい。

スーパーコンピュータの演算速度は、一般のコンピュータと比べて15年ほど進んでいると言われている。つまり、単純に計算規模のみを考えるとすれば、スーパーコンピュータを使うことで一般のコンピュータを用いたときの約15年先の研究成果が得られることになる。著者らのグループは、HPCI戦略プログラム分野<sup>(2)</sup>とポスト「京」重点課題<sup>(7)</sup>の中で、金属の凝固現象を原子レベルの手法である分子動力学(Molecular Dynamics, MD)法と組織レベルの手法であるフェーズフィールド・モデルの超大規模計算によって研究してきた<sup>(2)</sup>。その中では、原子レベルと組織レベルのそれぞれのスケールにおいて、金属の凝固の計算としては現状で世界最大規模の計算も実施した<sup>(3)</sup>。本稿ではそれらの研究成果を中心に凝固組織シミュレーションの最近の進展について紹介する。そして、この取り組みの先に見えてきたクロススケール

ル・アプローチという新しい展開についても言及したい。

## 2. 凝固組織の超大規模フェーズフィールド・シミュレーション

実用金属材料の高品質化や高機能化、さらには歩留り向上や低コスト化を達成するために、 casting・凝固プロセスで形成する凝固組織を高精度に予測して制御することが求められている。材料組織を計算する強力なモデルとしてフェーズフィールド・モデルが発展している<sup>(4)(5)</sup>。以下、このモデルを簡潔に説明して凝固組織の大規模計算を紹介する。

フェーズフィールド・モデルは、異相界面や粒界を厚みのある境界(diffuse interface)として表現し、組織変化を計算する方法である。この方法では、相の結晶構造や方位を区別する秩序変数を導入して、その空間分布で組織を表現する。具体的には、秩序変数が均一な領域をバルク(相・結晶粒)、そして急峻かつ連続的に変化する領域を異相界面や粒界と定義する。これによって、フェーズフィールド・モデルにおいては、異相界面や粒界といった境界の移動を陽に追跡する必要がなくなる。秩序変数の時間発展方程式を解けば Gibbs-Thomson 効果が再現され、その方程式と熱拡散方程式や溶質拡散方程式を連立して解けばステファン条件が自然に成立する。バルク中でも境界中でも同じ微分方程式を解くことで、複雑なマルチフィジックスの界面ダイナミクスが記述されることになる。言い換えると、フェーズフィールド・モデルとは自由境界問題を簡便に解く手法である。

フェーズフィールド・モデルでは、diffuse interface によ

\* 北海道大学大学院工学研究院；教授(〒060-8628 札幌市北区北13条西8丁目)

\*\* 東京大学大学院工学系研究科；准教授

\*\*\* 京都工芸繊維大学 機械工学系；教授

High Performance Computing of Solidification Microstructures and Emergence of Cross-scale Approach; Munekazu Ohno\*, Yasushi Shibuta \*\* and Tomohiro Takaki\*\*\*(\*Faculty of Engineering, Hokkaido University, Sapporo, \*\*Department of Materials Engineering, The University of Tokyo, Tokyo, \*\*\*Faculty of Mechanical Engineering, Kyoto Institute of Technology, Kyoto)

Keywords: *phase-field model, molecular dynamics simulation, solidification, high performance computing, dendrite, data assimilation, cross-scale modelling*

2019年10月18日受理[doi:10.2320/materia.59.139]

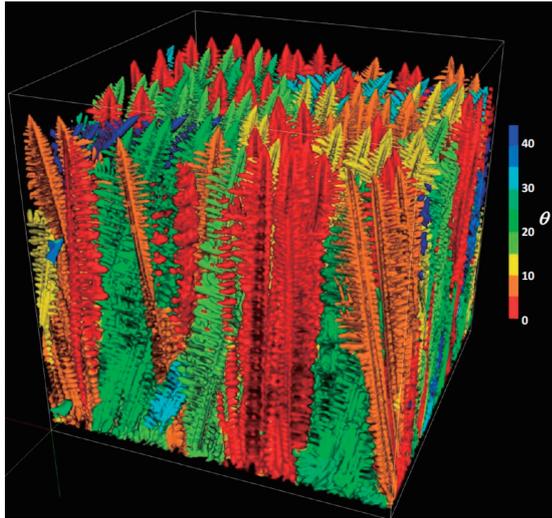


図1 Al-5 at%Si 合金における一方向凝固の超大規模フェーズフィールド・シミュレーション結果<sup>(6)</sup>. 約 $3 \times 3 \times 3 \text{ mm}^3$ のサイズの3Dシステムにおいて、温度勾配10 K/mm, 冷却速度0.3 K/sの条件下で、システムの底部に置いた固相のseedから成長した柱状デンドライト組織.

って界面形態をなめらかに表現するため、複雑形態の界面においても Gibbs-Thomson 効果が正確に再現される. しかし、その反面、界面厚さよりも細かな差分格子で数値計算を行う必要があるために計算コストが高い. 例えば、一般のコンピュータを用いた場合、三次元(3D)計算で扱えるデンドライトはせいぜい数本程度に限られる. そのため、複数のデンドライトが関わる実問題の現象を理解することは困難であった. そこで、著者らのグループは、フェーズフィールド・モデルによる超大規模計算を実施し、百本以上のデンドライトの競合成長をシミュレートした. その結果の例を図1に示す<sup>(6)</sup>. これは Al-5 at%Si 合金の一方向凝固を対象に、図の上下方向に温度勾配をつけて底部から冷却した際の凝固組織の計算結果である. 固相(fcc 固溶体)のみを示しており、その<100>と温度勾配の方向との角度差  $\theta$  によってデンドライトを色分けしている. 東京工業大学のスーパーコンピュータ TSUBAME2.0を用いて Graphics Processing Unit (GPU)による並列化を行い、一辺約3 mmの3Dシステムを約4000<sup>3</sup>個の差分格子に分割して実施した超大規模計算の結果である. 百本以上の柱状デンドライトが底部から上部に向かって競合成長している. このような大規模計算が可能になったことにより、デンドライト競合成長における選択則の妥当性<sup>(7)</sup>やデンドライト一次アーム配列の対称性<sup>(8)</sup>の解明など、多くの成果が得られるようになった.

### 3. 定量的フェーズフィールド・モデル

上述の通り、フェーズフィールド・モデルは、自由境界問題を簡便に解くモデルである. しかし、通常のフェーズフィールド・モデルでは界面において非物理的な効果が生じてし

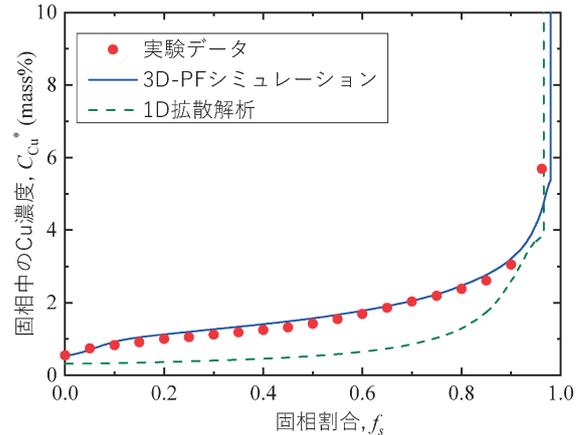


図2 Al-3 mass%Cu 合金の初晶 fcc 固溶体におけるマイクロ偏析の解析結果<sup>(14)</sup>. 冷却速度1.3 K/sで凝固したデンドライト組織におけるマイクロ偏析をランダムサンプリング法によって整理した結果.

まい、自由境界問題における Gibbs-Thomson 効果とステファン条件が正しく再現されないことが知られている. これを解決したモデルが定量的フェーズフィールド・モデル<sup>(9)(10)</sup>として凝固の分野で開発され、現在この分野においては定量的モデルを使うことが標準的となっており、大規模計算でも活用されている. 定量的モデルにおいては、秩序変数の移動度が拡散場と関連付けられている点、そして拡散方程式に秩序変数との新しいカップリング項(anti-trapping current)が導入されている点が従来のモデルとは異なる. これらの修正によって自由境界問題が正しく再現される. 初期の定量的モデルは、固相内拡散が無視できる二元系合金の等温凝固のみに適用可能であったが、著者らのグループは固相内拡散を考慮した多元系合金の非等温凝固の解析、つまり実用合金の凝固の解析に適用可能な定量的モデルの開発を行った<sup>(10)</sup>. さらに、従来の定量的モデルは方程式の漸近解析に基づく発見的な方法でしか構築できなかったが、著者らのグループはこれを熱力学ポテンシャルに基づく変分原理で導出できることを見出し<sup>(11)(12)</sup>、定量的モデルの熱力学的な妥当性を実証するとともに、定量的モデルを定式化するための方法論を進展させた.

定量的モデルは、界面厚さが界面の曲率半径よりも小さければ、その計算結果は差分格子間隔等の数値計算の条件に依存せず、自由境界問題を正しく再現することが知られている<sup>(13)</sup>. バルクの熱力学量や界面物性値等、実測可能な物性値のみを入力パラメータとし、任意に調整するような現象論的パラメータを扱う必要はない. 定量的モデルは、多くのケースにおいて高精度に凝固組織を予測することが可能である. 例えば、Al-3 mass%Cu 合金のマイクロ偏析の解析結果を図2に示す<sup>(14)</sup>. 図中のプロットは実験データであり、鑄造後の凝固組織における Cu 濃度をランダムサンプリングによって分析した後、そのデータを初晶中の Cu 濃度と固相割合の関係に整理した結果である. そして、3D 定量的フェーズフィールド・シミュレーションによって得られた同様の結

果を実線で表した。さらに、これらとの比較のために、マイクロ偏析の解析でよく用いられる一次元(1D)の拡散解析の結果を破線で示している。まず、1D 拡散解析の結果は、全体的に Cu 濃度を過小評価しており、実験データを精度良く予測できていないことがわかる。一方、定量的モデルの結果は実験結果と非常に良く一致している。なお、この定量的モデルの計算結果は、フィッティングパラメータなどは一切用いずに、文献で報告されている物性値と実験と同じ凝固条件を入力することで得られたものである。そして、このような一致は偶然のものではなく、合金組成を変えた場合、さらには Fe-Mn 合金におけるマイクロ偏析の場合にも計算結果と実験結果は良く一致することが示されている<sup>(14)</sup>。つまり、定量的フェーズフィールド・シミュレーションによってマイクロ偏析を高精度に予測可能である。

#### 4. 定量的モデルの高度化

上述のように定量的モデルは凝固組織を高精度に予測可能である。しかし、最新の定量的モデルにおいても考慮されていない因子がいくつかある。例えば、凝固収縮、界面物性の濃度・温度依存性、そして固相の変形の影響などは考慮されていない。さらに、液相中の流動は凝固組織の時間変化に影響を及ぼすことが知られているものの、過去の多くの計算においてその影響は無視されてきた。その一番の原因は計算コストの高さにある。ナビエ・ストークス(Navier-Stokes, NS)方程式の計算コストが高く、フェーズフィールド・シミュレーションと連成させると、対象にできる現象が著しく限られてしまう。

そこで著者らのグループは、格子ボルツマン法(Lattice Boltzmann Method, LBM)と定量的フェーズフィールド・モデルを組み合わせた手法を開発し、液相流動を伴う凝固組織の時間変化を高速に計算することを可能にした。LBMは計算流体力学の比較的新しい手法であり、この手法においては離散化されたボルツマン方程式(格子ボルツマン方程式)を解くことでNS方程式と同じ計算結果が得られる。NS方程式の数値解法と異なり、LBMには収束計算が必要ないため、その計算は高速であり、並列計算にも向いている。図3に示したのは、Al-3 mass%Cu合金の一方向凝固における液相流動の影響を調べた例である<sup>(3)(15)</sup>。凝固に伴って界面で溶質分配が生じて液相内の溶質濃度が不均一になり、その濃度差に応じて液相の密度変化が生じる。さらに温度変化によっても液相の密度変化が生じることから、凝固中は液相の密度は不均一になる。したがって、重力の影響を受けて液相流動が生じる。図3(a)は重力が凝固の進行方向と反対の向き(図の下向き)に働く場合、図3(b)は重力の影響がない場合、そして図3(c)は重力が凝固の進行方向と同じ向き(図の上向き)に働く場合の計算結果である。重力の有無と、その向きによって液相流動が変化するため、凝固組織も変化する。重力方向が凝固の向きと反対の場合(図3(a))には、重力がない場合に比べて柱状 dendrite の間隔がやや不均一にな

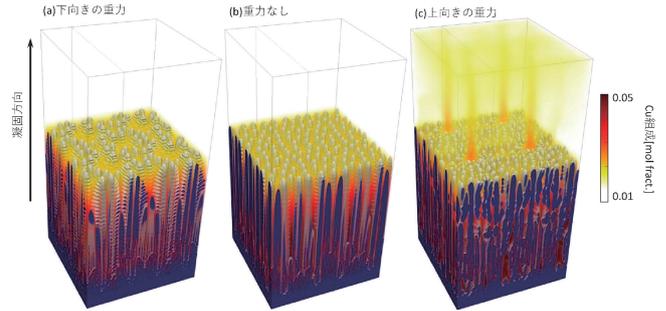


図3 Al-3 mass%Cu合金の一方向凝固における dendrite 成長に及ぼす溶質対流の影響を調査した結果<sup>(3)(15)</sup>。(a)下向き重力、(b)重力無し、(c)上向き重力のもとでの dendrite 成長形態を表す。384×384×1536 mm<sup>3</sup>のシステムにおいて、温度勾配50 K/mm、引抜速度100 mm/sとして計算した結果であり、Cu濃度の分布を表している。Cu濃度の低い液相は透明になっている。

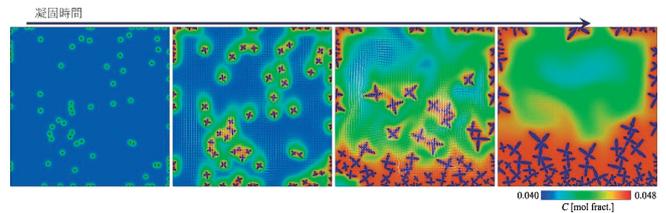


図4 透明有機物質(SCN-3 mass%acetone)の等軸晶凝固における沈降現象の2Dシミュレーション結果<sup>(3)(16)</sup>。約2×2 mm<sup>2</sup>のシステムにおいて、過冷度1.37 Kの過冷液相中で等軸晶が成長しながら図の下部に沈降する様子を示した結果。

る。一方、重力方向が凝固方向と同じの場合(図3(c))には、Cu濃度の濃い液相が高温側(図上部)に流れることで、凝固が不安定になり、チャンネル状の偏析帯が形成する傾向が現れている。このように、従来無視されてきた液相流動の影響も高速計算技術によってシミュレートすることが可能になってきた。

鋳塊内部では温度勾配が小さく、等軸晶が形成しやすい。等軸晶は液相中を自由に運動するが、それをシミュレートするためには、定量的モデルとLBMをカップリングしたモデルに、固相の運動方程式を導入する必要がある。その計算例を図4に示す<sup>(3)(16)</sup>。これは透明有機物質における等軸晶の沈降現象のシミュレーション結果である。溶湯の上部でランダムに発生した固相が成長しながら重力によって沈降する様子が計算されている。特に、凝固中の固相の沈降によって液相流動が生じ、それが固相の成長と運動に影響を及ぼしている。このような等軸晶の運動は鋳塊のマクロ偏析の形成に関与しているほか、柱状晶-等軸晶遷移にも関わる。今後、このモデルを実プロセスにおける組織形成の解析に応用することが求められる。

上記の通り、定量的モデルにより組織形成シミュレーションの高精度化が進み、さらに流動や固相の運動の導入などモ

デルの高度化も進められている。これらの発展と大規模計算技術の進展が相まって、凝固組織シミュレーションの有用性が著しく増している。ただし、定量的モデルであっても核生成を記述できる段階にはない。核生成を取り扱ったフェーズフィールド・シミュレーションは過去に多く報告されているが<sup>(17)</sup>、核生成を定量的にシミュレートする方法が十分に確立されているとは言い難い。現在、MDシミュレーションが核生成現象を理解する非常に強力な手段となっており、その内容を次に説明する。

## 5. 超大規模 MD シミュレーションによる均一核生成の解析

MDには大きく分けて第一原理MDと古典MDがあるが、ここでの対象は古典(半古典)MDである。この手法は、経験的もしくは半経験的に求めた原子間ポテンシャルを使って、ニュートンの運動方程式に基づいて多数の原子の運動をシミュレートする手法であり、原子レベルのダイナミクスを理解するための有効な手法である<sup>(18)</sup>。

凝固をはじめとする一次の相変態は核生成によって開始するが、上述の通りフェーズフィールド・モデルでは現状これを定量的に扱うことが難しい。一方、MDシミュレーションによって、様々な相変態における核生成現象が以前から解析されてきた。しかし、対象とできる時間・空間スケールが小さな領域に限られることから、一つもしくは数個の核の挙動のみに解析が制限され、金属の凝固における核生成の統計的な側面を明らかにすることは困難であった。そこで著者らのグループは multi-GPU の並列計算技術を駆使し、100万原子系<sup>(19)</sup>、1000万原子系<sup>(20)</sup>、そして10億原子系の MD シミュレーション<sup>(21)</sup>によって、純鉄の過冷液体からの均一核生成挙動を調査し、均一核生成に関する新しい知見を得てきた。著者らが最近行った最も大きな規模の計算結果を図5に示す<sup>(22)</sup>。これは100億原子系の MD シミュレーションの結果であり、図5(a)に示すように一辺が約1  $\mu\text{m}$  の平板状のシステムにおいて生じる純鉄の過冷液体からの均一核生成をシミュレートしたものである。図5(b)では、核生成した bcc 固相の結晶方位と座標軸の角度を色分けしており、保持後250 ps および500 ps 経過した際の組織に関しては、その拡大図も示している。過冷液体から bcc の核が発生し、その後微細な多結晶組織が形成している。なお、このシミュレーションでは核生成を誘発するような操作は一切行っていない。等温・等圧の条件で過冷液体を保持したときこのような核生成が MD では自然にシミュレートされる。ここでは詳細を割愛するが、このシミュレーションから、均一核生成で形成した直後の組織における粒径分布や隣接結晶粒間の方位差の頻度分布など、均一核生成の統計的な側面が解析可能となっている<sup>(22)</sup>。

ここで示したように、大規模計算によって MD が扱える系の空間スケールが大幅に拡張されている。図5で例示した系は一辺1  $\mu\text{m}$  レベルであり、小さな材料組織のレベルに

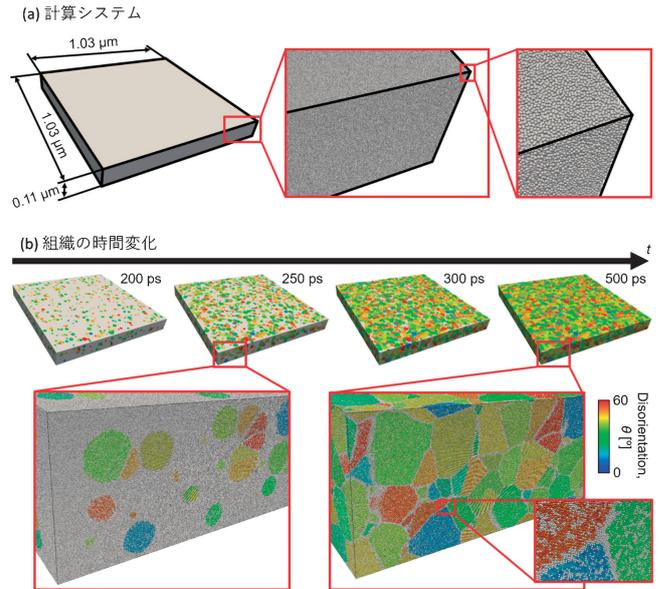


図5 100億原子系の MD シミュレーションによる純鉄の過冷液体からの均一核生成の解析結果<sup>(22)</sup>。

まで到達している。また、最近では加速 MD 法の発展で見られるように<sup>(23)</sup>、MD が扱える時間スケールを拡張する手法の発展も進んでいる。この手法は今後様々な材料組織の形成過程の解析に活用されることが期待される。

## 6. クロススケール・アプローチへの展開

上記の通り、著者らは原子レベルの MD と組織レベルのフェーズフィールド・モデルの二種類のアプローチによって、金属の凝固をマルチスケールの視点で解明することを試みてきた。ここで、図6(a)にマイクロ、メゾ、マクロスケールの手法が対象とする時間・空間スケールの模式図を示した。通常、マイクロ、メゾ、マクロスケールの手法が扱える時間・空間スケールにはギャップがある。小さなスケールの手法からボトムアップの形で、このギャップの間に如何に橋渡しをするのが、マルチスケール・モデリングの一つの要諦といえる。現在、組織の計算に必要な物性値を全て MD から求めることが可能であり<sup>(18)</sup>、原理的には原子間ポテンシャルの情報のみから凝固組織の計算が可能である。これもボトムアップ的なマルチスケール・アプローチの一種である。しかし、物性値の受け渡しのみでは、フェーズフィールド・モデルが立脚する自由境界問題の解を逸脱するような現象を予測することは不可能であり、わざわざマルチスケールで現象をモデリングする意義もそれほど大きくないと考えられる。原子レベルのダイナミクスを直接的に組織変化の過程に取り入れるようなアプローチの開発が重要である。この点に関して、新しい試みが始まっていることを以下に述べる。

大規模計算技術のおかげで、MD が扱える時空スケールは組織レベルに達しつつあることをすでに述べた。言い換えると、MD とフェーズフィールド・モデルの両手法が全く同じ

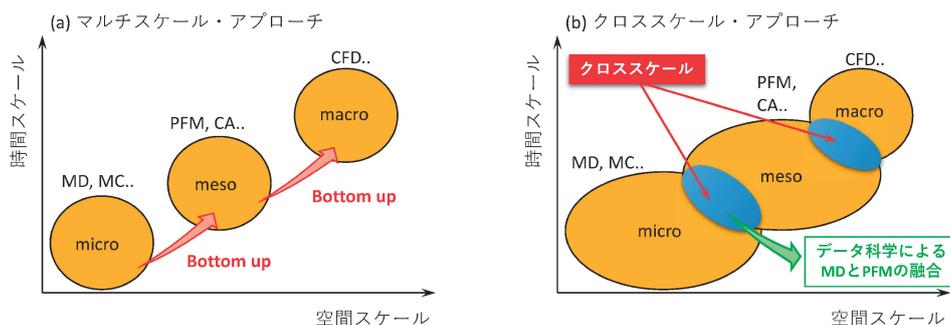


図6 各計算手法が対象とする時空スケール領域の模式図。(a)従来型のマルチスケール・アプローチと(b)新しいクロススケール・アプローチにおける関係。MD：分子動力学法，MC：モンテカルロ法，PFM：フェーズフィールド法，CA：セルオートマトン法，CFD：計算流体力学に基づく铸造解析。

現象を解析できるユニークな時空スケールが存在するようになった。大規模計算技術によって、それぞれのアプローチが対象とできる時空スケールの関係は、従来議論されてきた図6(a)の形から図6(b)のように変化している。マイクロとメゾスケールの手法が対象とできる領域に重なりが生じており、同様のことはメゾとマクロの手法の間でも生じている。これらの領域においては、今までにない新しい取り組みが可能である。例えば、MDから計算される組織変化をフェーズフィールド・モデルの結果と直接比較することや<sup>(24)</sup>、MDの組織をフェーズフィールド・モデルの計算の初期組織にすることも可能である<sup>(22)</sup>。特に、データ科学を使えば、二つの手法をもう一段階進んだ形で融合することができる。例えば、データ同化に基づいてMDとフェーズフィールド・シミュレーションを“同化”させれば、MDの結果を自由境界問題の枠組みで理解することや、フェーズフィールド・モデルに原子レベルのダイナミクスを“on the fly”で導入することが可能である。紙面の都合で詳細は述べられないが、この方法によって、現在まで十分に理解されてこなかった非平衡状態の界面物性が解明されることが期待される。著者らは、マイクロとメゾ、もしくはメゾとマクロスケールの手法を同一スケールで融合するアプローチをクロススケール(cross-scale)・アプローチと呼んでいる<sup>(3)</sup>。このクロススケール・アプローチの発展と応用が今後の重要課題である。

以上のように、大規模計算技術は、マイクロ、メゾ、マクロスケールの個々のスケールでの優れた成果の創出につながることに加えて、クロススケール・アプローチという新しい展開をもたらしている。

## 7. おわりに

コンピュータの性能の向上によって、数値シミュレーションの有用性が増している、という趣旨の文章を本稿の冒頭と途中で記した。この趣旨の表現は少なくとも20年以上前から本稿のような特集記事や解説記事で頻繁に見かけるものであり、計算材料科学に携わる様々な研究者がその時々で実感してきたことである。ここでは大規模計算技術を駆使した組

織形成シミュレーションの最前線の一部を紹介したが、ここで紹介した計算は、将来一般のコンピュータで十分実施可能になるものと期待される。材料開発の現場で組織形成シミュレーションがどの程度活用できるのか、または材料組織の学理をどこまでコンピュータ上で再現して新たな発見に繋げられるのか、これらの点に関して将来“当たり前”にできることを本研究が適切に先取りしていると信じている。また、ここでは言及できなかったが、凝固組織を観察する実験技術は近年飛躍的に発展しており<sup>(25)</sup>、実験科学と計算材料科学の最先端において両者がより密接に連携することで、本分野が今まで以上に加速度的に発展することが期待されている。

本研究の一部は、文部科学省の「HPCI戦略プログラム・分野2“新物質・エネルギー創成”」,「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”」の一環として実施したものです。また、本研究の一部は、JSPS科研費No.17H01237, No.16H04490, No.19H02486の助成を受けたものです。ここに感謝申し上げます。

## 文 献

- (1) 小山敏幸, 大野宗一, 山中晃徳, 糟谷 正, 塚本 進: までりあ, **58**(2019), 494-497.
- (2) <https://cdmsi.issp.u-tokyo.ac.jp/sub/e>.
- (3) Y. Shibuta, M. Ohno and T. Takaki: Adv. Theory Simul., **1**(2018), 1800065.
- (4) W. J. Boettinger, J. A. Warren, C. Beckermann and A. Karma: Annu. Rev. Mater. Res., **32**(2002), 163-194.
- (5) N. Provatas and K. Elder: Phase-Field Methods in Materials, Science and Engineering, Wiley-VCH, New York, (2010).
- (6) T. Takaki, T. Shimokawabe, M. Ohno, A. Yamanaka and T. Aoki: J. Cryst. Growth, **382**(2013), 21-25.
- (7) T. Takaki, M. Ohno, T. Shimokawabe and T. Aoki: Acta Mater., **81**(2014), 272-283.
- (8) T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Shimokawabe and T. Aoki: Acta Mater., **118**(2016), 230-243.
- (9) A. Karma: Phys. Rev. Lett., **87**(2001), 115701.
- (10) 大野宗一: までりあ, **53**(2014), 458-461.
- (11) M. Ohno, T. Takaki and Y. Shibuta: Phys. Rev. E, **96**(2017), 033311.

- (12) M. Ohno, T. Takaki and Y. Shibuta: Phys. Rev. E, **93**(2016), 012802.
- (13) M. Ohno, T. Takaki and Y. Shibuta: J. Comput. Phys., **335** (2017), 621–636.
- (14) M. Ohno, M. Yamashita and K. Matsuura: Int. J. Heat Mass Transf., **132**(2019), 1004–1017.
- (15) T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta and T Aoki: Comput. Mater. Sci., **171**(2020), 109209.
- (16) T. Takaki, R. Sato, R. Rojas, M. Ohno and Y. Shibuta: Comput. Mater. Sci., **147**(2018), 124–131.
- (17) L. Gránásky, G. I. Tóth, J. A. Warren, F. Podmaniczky, G. Tegze, L. Rátkai and T. Pusztai: Progress in Materials Science, **106**(2019), 100569.
- (18) Y. Shibuta: Mater. Trans., **60**(2019), 180–188.
- (19) Y. Shibuta, K. Oguchi, T. Takaki and M. Ohno: Sci. Rep., **5** (2015), 13534.
- (20) Y. Shibuta, S. Sakane, T. Takaki and M. Ohno: Acta Mater., **105**(2016), 328–337.
- (21) Y. Shibuta, S. Sakane, E. Miyoshi, S. Okita, T. Takaki and M. Ohno: Nat. Commun., **8**(2017), 10.
- (22) Y. Shibuta, S. Sakane, E. Miyoshi, T. Takaki and M. Ohno: Modelling Simul. Mater. Sci. Eng., **27**(2019), 054002.
- (23) 石井明男：アンサンブル, **19**(2017), 151–157.
- (24) E. Miyoshi, T. Takaki, Y. Shibuta and M. Ohno: Comp. Mater.

- Sci., **152**(2018), 118–124.
- (25) H. Yasuda, K. Morishita, N. Nakatsuka, T. Nishimura, M. Yoshiya, A. Sugiyama, K. Uesugi and A. Takeuchi: Nat. Commun., **10**(2019), 3183.

★★

大野宗一  
 2004年3月 北海道大学 大学院工学研究科 博士後期課程修了  
 2004年4月 クラウスタール工科大学 博士研究員  
 2009年11月 北海道大学 大学院工学研究科 准教授  
 2019年4月 現職  
 専門分野：計算材料科学，材料組織学  
 ◎フェーズフィールド・モデルの開発と応用を中心に計算材料科学に基づいた材料組織学の研究に従事。

★★



大野宗一



澁田 靖



高木知弘