



アラカルト

講演大会学生ポスターセッションに参加して

コロナ禍を乗り越えて

Overcome the COVID-19 Disaster

松永竹仁
Takehito Matsunaga

秋田大学大学院 理工学研究科
物質科学専攻 材料理工学コース
修士2年

1 はじめに

2022年3月16日に行われた日本鉄鋼協会第183回春季講演大会学生ポスターセッションにおいて「格子異方性を緩和した3次元セルオートマトン法による一方向凝固シミュレーション」と題して発表を行い、最優秀賞を頂きました。このような栄誉ある賞を頂き、大変光栄に思っております。新型コロナウイルスで不安定な情勢の中、学生ポスターセッションを開催頂いた関係者の皆様、そして本発表を評価いただいた方々には厚く御礼申し上げます。本稿では、私の研究内容や日ごろの研究生生活について紹介させていただきます。

2 研究生生活

私が所属する秋田大学大学院理工学研究科物質科学専攻材料理工学コースの梶研究室では、 casting material の凝固組織制御を目的とした数値シミュレーションとその妥当性検討のための実験を行っています。マクロ偏析やミクロ偏析に代表される casting defect を低減するため、様々なアプローチからシミュレーションモデルの開発に取り組んでいます。

私が研究室に配属された年は、新型コロナウイルスの影響で6月中旬まで登校することもできない状態でした。私はプログラミング経験が無かったため、研究テーマがシミュレーションであるにも関わらずなかなかプログラムの理解が進みませんでした。そんな中、梶千修先生や博士課程の先輩をはじめとする研究室のメンバーからは、研究テーマのみならず、研究生生活に至るまで丁寧にアドバイスをいただきました。そのおかげで、投げだすことなく卒業研究に取り組むことができました。その1年に満たない期間でシミュレーションの面白さを知った私は修士課程に進学し、計算モデルについてより深く学びたいと思いました。現在も研究室の仲間にも助けられながら、次なる課題の解決に向けて研究活動に取り組んでいます。



梶研究室一同 (前列中央が著者) (Online version in color.)

3 研究背景と内容

私は現在、Cellular automaton (CA) 法を用いたメソスケールにおける二元系合金の3次元凝固シミュレーションの精度向上に取り組んでいます。この分野ではPhase-field (PF) 法が主流となっていますが、CA法はPF法に比べ計算コストが低く、またGPUを用いた並列計算に適したモデルであるため凝固シミュレーションの高速化実現が期待されています。しかしながらCA法には精度面の課題が残されており、その最も大きな要因が格子異方性です。CAモデルは計算空間を格子で区切って凝固組織を表現する性質上、滑らかな界面形態が得られません。そのため、凝固組織の成長を計算する際に必要となる界面曲率の計算誤差が大きく、これに起因する異方性のことを格子異方性と呼びます。

今回の発表内容では格子異方性による誤差緩和のため、曲率計算に双一次補間を用いることで計算精度向上を図り、加えてGPUによる計算高速化を行いました。従来法と比較すると、より多くの計算セルの情報をもとに計算することができると計算精度の向上が期待できます。今回は3種類の形態評価を行いました。まず1つ目は単一の等軸晶に成長方向を設定し、計算で得られた成長方向と比較するというものです。従来法と比較すると全体的に角度の再現性が改善し、成長方向の角度が浅い場合に特に有効であるという結果が得られました。本モデルを用いることで成長方向の再現性が向上することが確認できたため、次に柱状晶の一方向凝固シミュレーションを行いデンドライトの淘汰現象が適切に起こるか調査しました。デンドライトの一方向凝固では、熱流方向に近い成長方向を持つデンドライトが他のデンドライトを淘汰することが知られています。そのため、デンドライトの成長方向を正しく評価できる計算モデルでなければ正確な一方向凝固シミュレーションを行うことはできません。本モデルの妥当性を評価するため、今回は薄い計算空間に初晶を平面的に配置した疑似2次元凝固シミュレーションと3次元凝固シミュレーションを行いました。結果、どちらの計算条件においても凝固の進行とともに適切な淘汰現象を観察することができました。

今回行ったのは凝固形態の評価のみでしたが、今後の目標は凝固形態のみならず、それに起因する濃度分布まで正確に予測できるモデルを開発することです。そしてそのモデルを大規模GPU計算によって実行することで、より現実に即したスケールでの組織予測につなげたいと考えています。

4 今後の夢

私の今後の夢は凝固組織データベースの実現です。私が研究しているメソスケール凝固シミュレーションの精度向上と計算高速化が実現すれば、膨大な計算を必要とするデータベースの作成が可能となります。このデータはメソスケールのみならず、マクロスケールの凝固モデルにも応用可能です。これは、各スケールにおける凝固組織予測精度の向上を意味します。この目標を実現し、 casting product の性能向上に貢献したいと思っています。

5 おわりに

今回このような執筆の機会をくださった日本鉄鋼協会関係者の皆様、重ねて御礼申し上げます。そして何より、丁寧にご指導いただいた梶千修先生、研究室の学生の皆様にも厚く御礼申し上げます。この度頂いた賞に恥じぬよう、今後とも精進してまいります。

(2022年4月20日受付)