

数値材料 デザイン 研究室

**シミュレーションを用い
金属材料内部の
微視組織に光を当てる**



高木知弘 教授
[機械工学系]

[経歴]
1997年04月- 神戸商船大学 助手
2003年10月- 神戸大学海事科学部 助手
2007年04月- 神戸大学大学院海事科学研究科 助教
2007年12月- 京都工芸繊維大学 准教授
2019年03月- 京都工芸繊維大学 教授

[研究分野]
フェーズフィールド法、数値シミュレーション、有限要素法、材料組織、超大規模計算



数値材料デザイン研究室

[研究概要]
フェーズフィールド法を基軸としたコンピュータシミュレーションにより、凝固・粒成長・相変態等において形成される材料組織の予測に関する研究を実施。特に、スーパーコンピュータを用いた超大規模シミュレーションに力を入れています。

機械工学を支える重要な存在であり、私たちの身のまわりにもあふれている金属材料。その内部には微細な組織があり、材料の特性に影響を与えています。数値材料デザイン研究室ではシミュレーションを駆使して金属材料の組織を予測することで、材料科学の発展に貢献しています。

シミュレーションによって 未知の世界が見えてくる

コンピュータの登場によって私たちの社会は大きく変わり、これまで人間には不可能だった様々なことが実現できるようになりました。今回取材した数値材料デザイン研究室でも、コンピュータの力を最大限に活用して新たな発見を目指しています。研究の主なターゲットは「金属材料」。コンピュータはそこにどう関わってくるのでしょうか。「私たちの研究室では、コンピュータシミュレーションを用いた金属材料の組織予測について研究しています」と話すのは機械工学系教授の高木知弘先生。「金属の内部にはとても細かい組織があり、その組織によって材料の強度や各種の特性が左右されます。そのため、組織を予測し、その挙動を理解することは材料開発においてとても重要になってくるのです。私は特に、金属が凝固する際の組織の変化に注目しています。金属の凝固は非常に高温な現象であるため観察は難しい。金属は不透明である点も観察の妨げになります。そこで、コンピュータシミュレーションが大きな力を発揮するのです。凝固時の組織形成について理解できれば、一部固まらないところが出てきて強度が低下する『凝固欠陥』などの現象が起こらないようコントロールできるようになるでしょう」。凝固における組織形成メカニズムを知るために、一つの鍵となるのが「流体」だと先生はいます。「地球上には重力があるため液体の中に濃度分布ができる、その差によって流れが生まれます。空気の温度差によって気流が起こるのと同じですね。この流れが凝固にどう影響するかを調べています。流体を加味したシミュレーションモデルの構築は難しいですが、それが面白さでもあります」。

実際に研究に取り組んでいる学生に、シミュレーションの様子も見せてもらいました。画面には、時間の経過とともに結晶が生まれる様子や組織が構築されていく様子がアニメーションで表示されます。こんな現象が金属材料の中で起こっているのか、と驚きとともに不思議な感覚にさせられます。「本来は目にすることのできない金属材料の組織形成プロセスを3次元でダイナミックに観察できる。それがこの研究の一番の魅力です」と高木先生も話してくれました。

知の集積によって 新たな発見を目指す

「本研究室の特徴としては、スーパーコンピュータを用いた大規模シミュレーションに取り組んでいることも挙げられます」と高木先生。「普通のコンピュータでは現象の一部しか見えません。大きなスケールで見るには計算規模を上げる必要がありますので、東京工業大学が運用するスーパーコンピュータ『TSUBAME』を利用してシミュレーションを行っています」。東京工業大学との交流は10年近く続いているといいます。TSUBAMEは学外の研究機関・企業にも広く開放されており、遠隔でアクセスが可能。学生も研究室にいながらにし

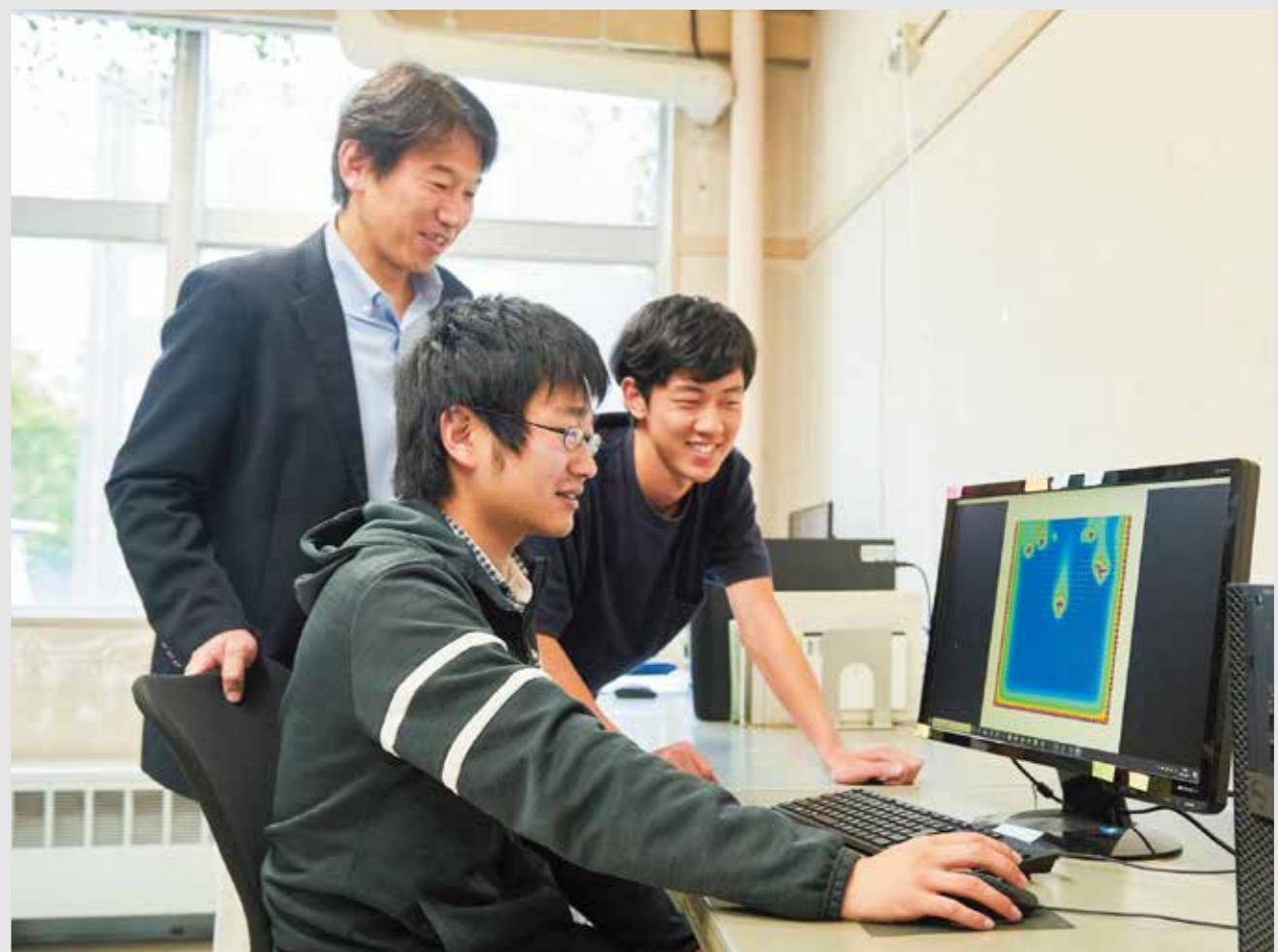


Fig.1——数理モデルの作成からシミュレーション結果の可視化まで、学生が一貫して行う

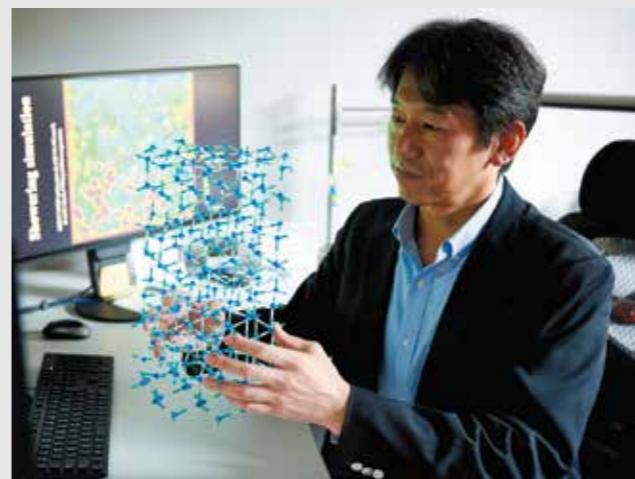


Fig.2——本来目にすることのできない部分を見られる点が魅力、と語る高木先生



Fig.3——青い固体が成長する凝固のシミュレーション

て、国内トップクラスの計算性能を持つスパコンを用いた最先端の研究に取り組んでいます。

また、東京大学や北海道大学の研究室とも活発な共同研究を実施しています。「材料とコンピュータを軸として、色々と相談しながら一緒に研究を進めています。学生にとっても、他大学の教員や学生とコミュニケーションをとることは大きな刺激になっているようです。研究面ではもちろん、将来の進路を考える上でも互いにいい影響を与えて合っていると思います」。先生はご自身の指導方針として、積極的に学生を外に出すようにしている

といいます。「外部の研究者と話をすると、自分の研究をまた違った視点から見られるようになります。国内・国外問わず、学会発表にもどんどん行ってもらいたいですね」。

高木先生は研究の今後のビジョンについて、こう話してくれました。「材料組織を予測し、そのメカニズムを把握できるようになれば、材料創製のプロセスを最適化できます。そのためにはまず、予測の高精度化が必要です。現在はSPring-8（大型放射光施設）等を使ってX線で直接組織内部を観察できるようになってきており、他大学

に実験データが集まっています。そうしたデータをシミュレーションのモデルに還元していくことで、これまでシミュレーションだけではできなかったことを可能にしていきたいと考えています。世界的な潮流としてAIやビッグデータの活用が進んでいるので、そうした手法を取り入れてどんどん新しいことにチャレンジしていきたいですね」。

コンピュータの発展により、大きな転換点を迎える材料科学の分野。先生たちの研究から今後どんな発見が生まれるのか、目が離せません。