

データベース駆動型グラントカノニカル モンテカルロ法の開発

大阪大学 基礎工学研究科 糟谷瑛, 新里秀平, 尾方成信

目的 金属中の粒界などの欠陥に固溶元素が偏析する現象の解析を可能とする高速なグラントカノニカルモンテカルロ解析法を開発する。

内容 原子構造緩和の効果を考慮するグラントカノニカルモンテカルロ法では、原子浴の緩和計算に多大な時間を要するため、これをデータベース化して用いることにより高速化を実現した。

結果 データベースを用いることにより100,000原子程度の粒子浴を用いる場合に約100倍程度の高速化が実現できた。本手法を用いて金属粒界への固溶元素の偏析の解析を行い、偏析量の固溶元素濃度依存性、環境温度依存性、粒界性格依存性が解析可能であることがわかった。

利用した計算機

OCTOPUS

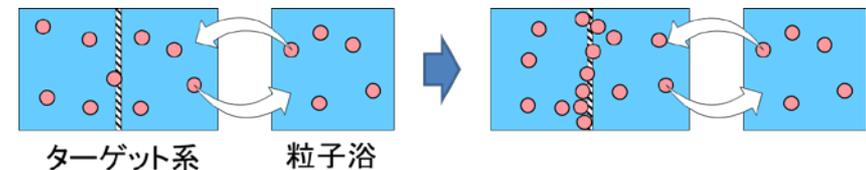


図 グラントカノニカルMC法