

Fracture analysis of WC cemented carbides using machine learning interatomic potential

Graduate School of Engineering Science, The University of Osaka

Yuki Ando, Junki Obata, Kazuma Takeda, Alex Tai, Yoshinori Wada, Jiaqin Xu, Shihao Zhu, Yangen Li, Shuhei Shinzato, Shigenobu Ogata

目的 機械学習ポテンシャルを用いた分子動力学解析により、切削工具等に用いられる超硬セラミックスの変形・破壊メカニズムを理解する。

内容 タングステンカーバイド-コバルト(WC-Co)系のニューラルネットワークポテンシャルを用いた焼結体の変形・破壊解析により、WC-Coの破壊に対する結合剤の結晶構造の影響を調査した。

結果 Co結合剤相の結晶構造を面心立方(FCC)構造、稠密六方(HCP)構造とした変形・破壊解析を行い、FCC-Co相では塑性変形が活発に起こり、エネルギーが効率よく消費されることで、変形の局所化が抑制され高靱性を実現することを示した。一方、HPC-Co相では塑性変形が極めて限定的となり、高い変形抵抗挙動を示した。

利用した計算機 SQUID GPUノード群
ノード時間 15,000 時間
使用メモリ 320 GB(A100x8)
並列化 2ノード 並列

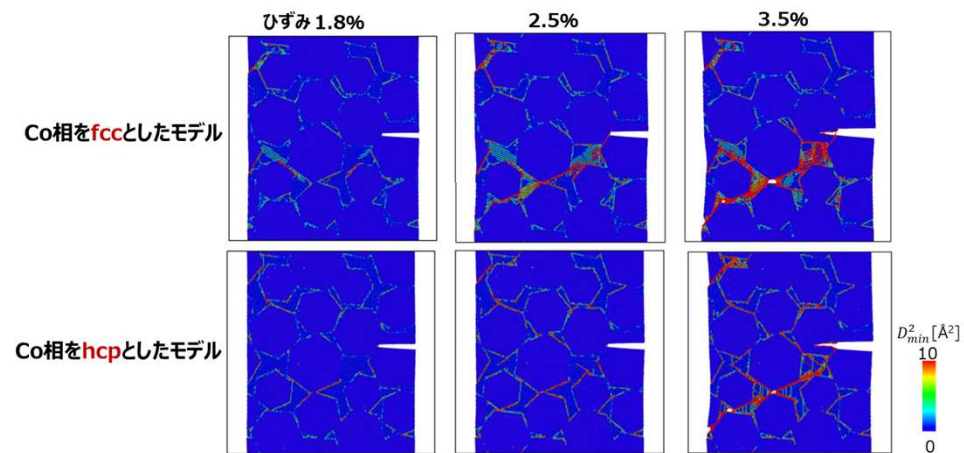


Fig. Fracture behavior of WC-Co with FCC/HCP Co phases