

Jh210010-NAH

3D プリンタ積層造形のフルスケール凝固組織予測のための 大規模フェーズフィールド格子ボルツマン計算

高木 知弘 (京都工芸繊維大学)

概要

本研究では、金属の積層造形(additive manufacturing: AM)における高精度な材料組織予測を可能とする数値シミュレーション法の開発を行う。溶融プール内の凝固組織をありのまま再現する高精度モデルと、効率的な計算を目指す結晶粒スケールの粗視化モデルの二つのモデル開発を同時に進める。いずれのモデルにおいても、組織計算に phase-field (PF) 法、液相流動計算に格子ボルツマン(LB)法を適用する PF-LB モデルを用いる。2021 年度は、高精度モデルにおける大規模 PF-LB 計算を効率的に行うために、適合格子法を複数 GPU 並列化した parallel-GPU AMR を開発した。粗視化モデルにおいては、デンドライト樹間液相流れの透過率評価を進めた。また、parallel-GPU AMR を適用した効率的な透過率予測法を開発した。さらに、粉末粒子焼結モデルの作成、多結晶凝固モデルへの移動熱源の導入を行い、粗視化モデルの基礎を構築した。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

東京工業大学

(2) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野

(3) 参加研究者の役割分担

高木 知弘 (京都工芸繊維大学・機械工学系) : 研究全体の総轄, モデル構築, 並列 GPU コード開発, 計算の実行, データ処理&考察, 論文執筆.

青木 尊之 (東京工業大学・学術国際情報センター) : 大規模 GPU 計算の総轄, 並列 GPU コードのチューニング.

坂根 慎治 (京都工芸繊維大学・機械工学系) : AMR コード開発, 並列 GPU コード開発, モデル構築, 計算の実行, データ処理用コードの作成, データ処理&考察, 論文執筆.

光山 容正 (京都工芸繊維大学・工芸科学研究科) : モデル構築, 計算の実行, データ整理.

山中 波人 (京都工芸繊維大学・工芸科学研究科) : 計算の実行, データ整理.

八條 郁 (京都工芸繊維大学・工芸科学研究科) : 計算の実行, データ整理.

中井 健太 (京都工芸繊維大学・工芸科学研究

科) : 計算の実行, データ整理.

2. 研究の目的と意義

3D プリンタによる積層造形(additive manufacturing: AM)は、従来のモノづくりを根本的に変革するポテンシャルを有しており、世界中で活発に研究が行われている。金属 AM において最も重要なのは、造形製品の特性を決定する材料組織と残留応力の制御である。これらを精度よく予測・制御するためには数値シミュレーションが不可欠であるが、AM のマルチフィジックス (電子/レーザービームと金属粉末の相互作用, 粉末と基板の溶融, 溶融プール内の液相流動, デンドライト成長, 粒成長, 残留応力蓄積) に起因したモデリングの困難さと計算コストの高さにより、それらのマルチフィジックスを全て考慮したシミュレーションは行われていない。

本研究では、金属 AM プロセスを完全に再現可能な高性能計算法の確立を目的とする。溶融プール内の凝固組織をありのまま再現する高精度モデルと、効率的な計算を目指す結晶粒スケールの粗視化モデルの二つのモ

デル開発を同時に進める。本研究は複数年での実施を計画しており、1年目の2021年度は、高精度モデルにおける溶融プール内における液相流動を伴うデンドライト凝固の再現を目的とする。加えて、少ない計算コストで高精度に組織を予測可能な粗視化モデルの開発を行う。手法としては phase-field (PF) 法と格子ボルツマン(LB)法を用いる。積層造形の完全なる組織予測シミュレーションを世界に先駆けて可能とし、当該分野に強烈なインパクトを与えることが本研究の一番大きな意義である。シミュレーションによって AM の高精度組織予測を実現する本研究は、将来的に実験研究との融合、機械学習との併用によって材料組織を最適化するためのプロセス設計を可能とする極めて意義深い研究である。

3. 当拠点公募型研究として実施した意義

本共同研究では、PF 法による材料組織予測に関する数値的検討を過去6年間にわたり行ってきた。この中で、GPU スパコン TSUBAME の利用によって PF 計算の極めて良好な高速化を達成可能であることを示した。さらに、複数 GPU 並列計算によって、世界的にまだどのグループも達成できない時空間スケールでの材料組織形成シミュレーションを可能とした。これらの研究成果は国内外で極めて高く評価されており、本研究を進展させることは計算材料学の更なる発展に大きく寄与し、また日本の研究力を世界に示すことができる。この研究は複数 GPU を用いた大規模計算によって初めて達成できるため、GPU スパコン TSUBAME の利用が不可欠である。加えて、本研究グループは、PF 法 (高木・坂根)、材料学 (高木)、流体力学 (坂根・青木)、HPC (青木・坂根) の各分野を牽引する研究者によって構成され、日本発の世界一の研究が可能となる。以上のことから、本研究を当拠点公募型共同研究として

実施することは必要性が極めて高く、当該分野における先端的知見を本邦から発信するという点で大きな意義を有する。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

AM における組織予測は 2021 年度からの新規課題である。

5. 今年度の研究成果の詳細

高精度モデル開発において、溶融プール内の液相流動を伴うデンドライト成長を表現可能な大規模計算手法構築のため、適合格子法 (adaptive mesh refinement: AMR) を適用した液相流動を伴う二元合金凝固モデルの複数 GPU 並列計算コードを開発した。同時に、粗視化モデルにデンドライト樹間の液相流れを精度よく導入するために、透過率の評価を進め、また透過率を効率的に評価可能な手法開発を行った。さらに、粗視化モデルの構築とコーディングを行った。以下に各成果の詳細を示す。

5.1 AMR 法を適用した複数 GPU 並列計算

3次元デンドライト成長の PF シミュレーションを効率的に行うために、複数 GPU 並列計算法にブロック構造 AMR 法を適用した parallel-GPU AMR を開発した。ここで、各 GPU が受け持つ格子点数が均一になるように、Slice-grid 法[S. Tsuzuki, T. Aoki, Proceedings of ScalA (2016) 1-8]にもとづき領域を動的に GPU に割り当てる、動的負荷分散を導入した。

実装した parallel-GPU AMR の性能評価のため、図1に示す最小格子幅 Δx_{\min} 換算で $1024 \times 1024 \times 2048$ 格子の領域内部における柱状デンドライト成長シミュレーションを 16 GPUs を用いて実施した。図1(a)は各時刻のデンドライト形態を、図1(b)は slice-grid 法に基づく領域分割の様子をそれぞれ示している。図1(c)にデンドライト先端近傍における AMR ブロック分割の様子を示しており、高い空間

分解能が必要な固液界面近傍に細かい格子が割り当てられている様子が確認できる. 図 1(d)にシミュレーション中の 2000 step あたりの計算実行時間(黒線)と総格子点数(赤線)の時間推移を示している. 図中には比較のために $1024 \times 1024 \times 2048$ の均一格子を用いた場合の実行時間も黒破線で示している. 図より, AMR により均一格子の 20%以下まで格子点数を削減できる場合, 均一格子を用いた場合よりも計算が高速化されることを確認した. また, 開発手法を用いた弱スケール評価において 16 GPU から 256 GPU の範囲で良好な並列性能を示し, 256 GPU 使用時に $4096\Delta x_{\min} \times 4096\Delta x_{\min} \times 2048\Delta x_{\min}$ の大規模領域を用いた dendrite 成長計算を効率的に実施可能であることを確認した. この成果は Materials Theory 誌に掲載された【学術論文[1]: Materials Theory 6(1) (2022) 3】.

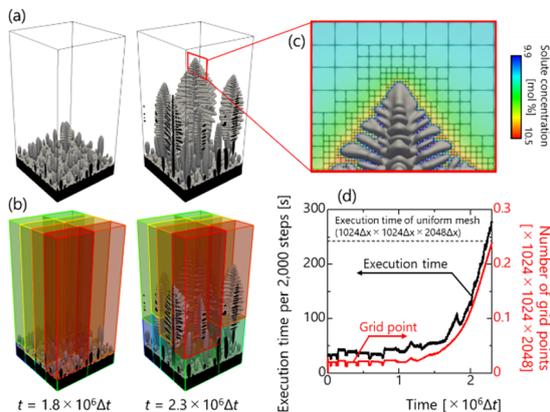


Fig. 1 Columnar dendrite growth simulation by the parallel-GPU AMR with 16 GPUs: (a) Solid-liquid interface morphologies. (b) Domain decomposition for 16 GPUs. (c) AMR block decomposition around the dendrite tip. (d) Temporal changes in the execution time per 2000 steps and number of grid points of adaptive mesh.

次に, 液相流動を考慮できる PF-LB モデルに parallel-GPU AMR を拡張した. 液相流動の計算には, 低レイノルズ数領域において大きな時間増分を用いて安定に計算可能な二緩和時間格子ボルツマン法[S. Sakane, T. Takaki, Comp. Mater. Sci. 186 (2021) 110070]を用いた. まず, 2次元問題について評価を行い, Δx_{\min}

換算で 16384×16384 格子を用いた強制対流内での等軸 dendrite 成長シミュレーションを 16 GPUs を用いて実施した. 結果を図 2 に示す. 図 2(a)は溶質濃度分布と領域分割の様子を示している. また, 図 2(b)には dendrite 領域の拡大図を AMR ブロック分割の様子と合わせて示している. さらに, 図 2(c)にシミュレーション中の $1 \times 10^5 \Delta t_{\min}$ ごとの実行時間および総格子点数の時間推移を示している. 図 1(c)に示す実行時間と格子点数の関係より, AMR により均一格子の約 40%以下まで格子点数を削減できる場合, 均一格子を用いた場合よりも計算が高速化されることを確認した. これにより, 特に dendrite 領域よりも広い液相領域を必要とする凝固問題において, 効果的に計算コストを削減できることを示した. この成果は Computational Materials Science 誌に掲載された【学術論文[3]: Comp. Mater. Sci. 211 (2022) 111507】.

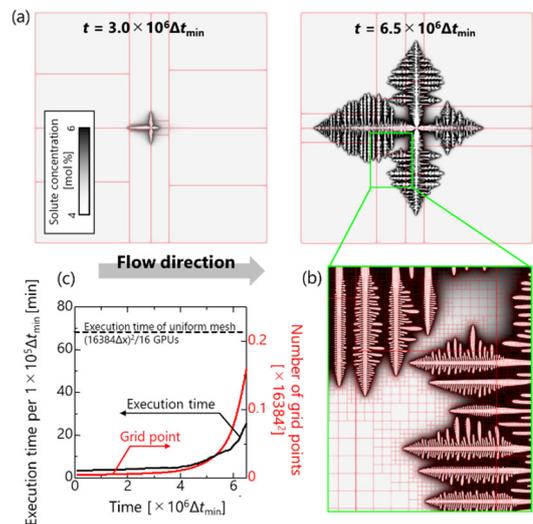


Fig. 2 Simulation of dendrite growth under forced convection with parallel GPU-AMR: (a) Distribution of solute concentration and domain decomposition for parallel GPU computation. (b) Enlarged view with AMR block decomposition. (c) Temporal changes in the execution time per $1 \times 10^5 \Delta t_{\min}$ and number of grid points of adaptive mesh.

さらに, 液相流動を伴う dendrite 成長の parallel-GPU AMR を 3次元問題に拡張し,

図 3 に示す 3 次元薄膜領域内での自然対流を伴う等軸 dendroライト成長計算を実施した。計算領域サイズは $256 \Delta x_{\min} \times 4096 \Delta x_{\min} \times 4096 \Delta x_{\min}$ とし 64 GPU を用いて計算した。AMR の適用により特に凝固初期の計算コストを大幅に削減することに成功した。

現在, parallel-GPU AMR のさらなる計算の効率化を図るために, 場ごとに異なる格子幅・時間増分を用いる複数格子・時間増分法 [S. Sakane, et al., *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 27 (2019) 054004], 八分木構造 AMR のリーフの親ノードにブロックを割り当てることでブロックの袖領域データ転送を削減するマザーリーフ法 [長谷川 雄太, 青木 尊之, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, 9 (2016) 34-45], GPU 間データ転送とステンシル計算の同時実行による通信隠蔽 [T. Shimokawabe, et al., *Proceedings of SC11* (2011) 1-11] の実装を行っている。また, 液相流動を伴う dendroライト成長の 3 次元 parallel-GPU AMR コードについて, 非等温・多結晶凝固問題への拡張を進めている。実装を完了次第, 溶融プール内の温度変化, 基板からの dendroライト成長, 凝固中の液相流動を統一的に表現した薄膜 3 次元領域における積層造形シミュレーションを試み, 実装手法の妥当性を評価する予定である。また, 前述の計算高速化手法を取り入れ, 溶融プール全域でのシミュレーション実施を目指す。

5.2 dendroライト樹間液相の透過率評価

これまでの研究において, dendroライトに対する透過率評価は可能としていたが [T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Aoki, *Acta Mater.*, 164 (2019) 237-249. Y. Mitsuyama, T. Takaki, S. Sakane, Y. Shibuta, M. Ohno, *Acta Mater.*, 188 (2020) 282-287.], 計算コストが高く, 一次アーム間隔の広い dendroライト構造等に対する評価は困難であった。また, 従来の透過率評価は熱流方向に成長する柱状デ

ンドライトに対するものであり, 実際の多結晶 dendroライトに対する評価は皆無であった。そこで, 熱流方向から傾いて成長する柱状 dendroライトの大規模一方向凝固シミュレーションを行い, 透過率に重要な配列評価を行った。この結果, 傾いた dendroライトも基本的には六角形配列が支配的であることを明らかにした 【学術論文[2]: T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Aoki, *Comput. Mater. Sci.*, 203 (2022) 111143】。また, この dendroライト構造に対する系統的な透過率計算を行い, 現在データ整理を行っている。

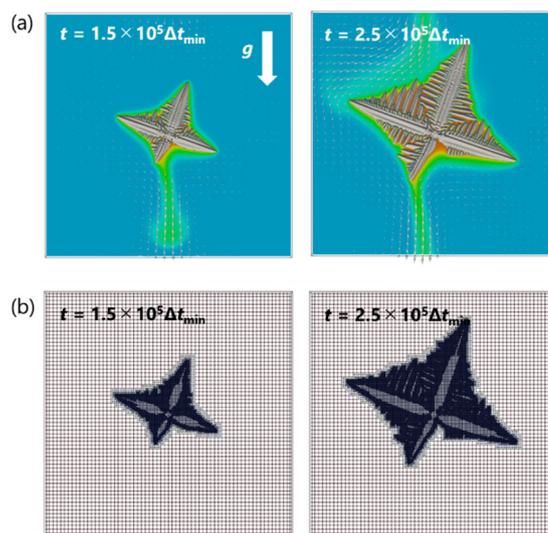


Fig. 3 Simulation of 3D dendrite growth under natural convection by the parallel-GPU AMR: (a) morphologies of solid-liquid interface and distributions of solute concentration and flow velocity. (b) AMR block decomposition on cross section.

透過率予測の効率化のために, 前章で開発した parallel-GPU AMR を適用した。本手法による透過率予測シミュレーションの妥当性を確認するため, 周期的に配置された円柱と球周りの液相流動シミュレーションを実行した。結果を図 4 に示す。ここで, 先行研究 [D. A. Edwards et al., *Phys. Fluids A* 2 (1990) 45-55, A. S. Sangani, *Int. J. Multiph. Flow* 8 (1982) 193-206, A. A. Zick, *J. Fluid Mech.* 115 (1982) 13-26] 結果と比較することで, 開発した手法が高精度かつ効率的に透過率を予測できる

ことを確認した. 図 4 のシミュレーションは $(256\Delta x_{\min})^3$ の領域に対して行われたが, 領域サイズは固定したままで 1 辺あたりの格子数 N_L を $N_L = 32, 64, 128, 256, 512, 1024$ のように変化させて計算の精度と効率を評価した. この結果を図 5 に示す. なお, 固体は図 4(a) に示す円柱とし, 円柱の半径 R は, $R = 0.15L$ ($f_s = 0.0177$), $0.50L$ ($f_s = 0.197$), $0.95L$ ($f_s = 0.709$) とした. なお, L は領域 1 辺の半分のサイズ, f_s は固相率である. 図 5(a) より, $R = 0.15L$ の場合は全 N_L にわたって高精度に透過率を予測でき, $R = 0.15L$ と $0.95L$ では $N_L \geq 256$ において精度が高いことがわかる. また, 図 5(b) より, N_L が大きくなるほど, つまり格子サイズが小さいほど AMR を用いることで高い計算効率が達成できることを確認した.

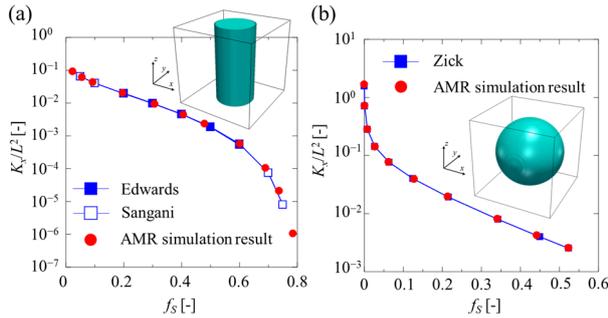


Fig. 4 Validation of permeability predictions by the parallel-GPU AMR for periodically arranged (a) cylinders and (b) spheres. The computational domain size was set to $(2L)^3 = (256\Delta x_{\min})^3$.

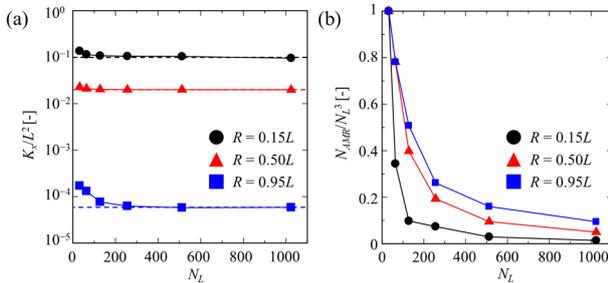


Fig. 5 Effect of minimum grid size Δx_{\min} on the (a) accuracy and (b) efficiency of permeability computation for cylinder using the developed permeability prediction with AMR method.

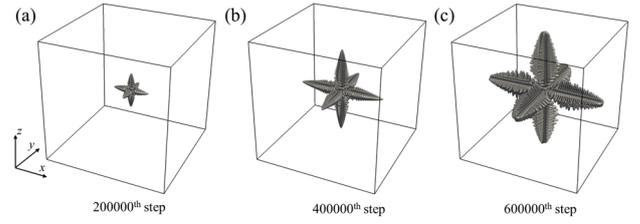


Fig. 6 Equiaxed dendrite structures at (a) 2×10^5 th step ($f_s = 0.0010$), (b) 4×10^5 th step ($f_s = 0.0058$), and (c) 6×10^5 th step ($f_s = 0.0202$) computed by the AMR PF simulation.

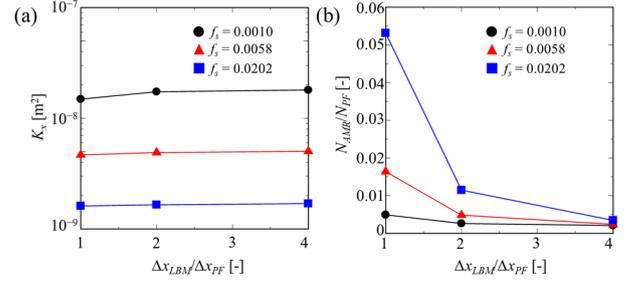


Fig. 7 Effect evaluation of the solid fraction f_s and minimum grid size Δx_{LBM} on the (a) accuracy and (b) efficiency of permeability prediction for equiaxed dendrite structures shown in Fig. 6 by the AMR LB simulations.

次に, 本手法を用いて等軸デンドライトに対する透過率評価を行った. 材料は Fe-5.4wt%Si を対象とし, 領域サイズは $(2048\Delta x_{PF})^3$ とした. $2 \times 10^5, 4 \times 10^5, 6 \times 10^5$ ステップのデンドライト形態を図 6 に示す. これらの 3 つの形態に対して, 透過率計算で用いる最小格子幅 Δx_{LBM} を $\Delta x_{LBM}/\Delta x_{PF} = 1, 2, 4$ と変化させ, 合計 9 通りの計算を行った. 図 7 に透過率計算の結果を示す. 図 7(a) より, 全ての固相率の場合で格子比 $\Delta x_{LBM}/\Delta x_{PF}$ が大きくなるとともに透過率が増加している. これは, 解像度の低下によるデンドライト二次アームといった微細構造を精度良く表現できなかったため考えられる. しかしながら, 透過率の変化は小さく, $\Delta x_{LBM}/\Delta x_{PF} = 4$ でも透過率評価精度に問題ないこといえる. この結果を踏まえて図 7(b) をみると, $\Delta x_{LBM}/\Delta x_{PF} = 4$ では均一格子に比べて 5% の格子数で計算を行っており, AMR と格子解像度を変化させた方法の組み合わせで極めて効率的な透過率評価が可能であることを確認した. 均

一格子を用いた 2048^3 格子の格子ボルツマン計算では約 2,720 GB のメモリが必要であり、TSUBAME に搭載している NVIDIA Tesla P100 を用いると単純に 170 基の GPU を必要とするが、 $\Delta x_{LBM} / \Delta x_{PF} = 4$ の AMR を用いると、最新の GPU を使えば一つの GPU での評価が可能である。本成果は、国際会議 6th International Conference on Advances in Solidification Processes (ICASP6) で発表予定であり、その proceedings として IOP Conference Series: Materials Science and Engineering に投稿し、accept された【学術論文[4]: Y. Mitsuyama, S. Sakane, T. Takaki, IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. (2022) accepted】。

5.3 粗視化モデルの構築

AM プロセス時の溶融プール内で成長する dendrite を直接表現せず、結晶粒スケールで材料組織を効率的に予測する粗視化モデルの構築に着手した。粉末床溶融結合法を対象とし、多結晶構造を有する基板上に粉末を敷き詰め、レーザー熱源の移動による溶融、凝固、焼結、溶融プール内の液相流動、凝固後の粒成長を再現する。モデル構築の流れとして、粉末粒子の焼結 multi-phase-field (MPF) モデルを作成し、これに先に構築した多結晶凝固 MPF モデル[Y. Yamanaka et al., Comput. Mater. Sci. 197 (2021) 102286]を組み込むことを予定している。現在、焼結 MPF モデルの作成が完了した。焼結現象を再現する PF モデルとしては、Wang [Y.U. Wang, Acta Mater., 54 (2006) 953-961]のモデルが広く用いられているが、このモデルはいくつか欠点があるため、double-obstacle ポテンシャルを用いた MPF を適用して新たに焼結モデルを構築した。また、多結晶凝固 MPF モデルにレーザーによる移動熱源を導入し、粉末粒子の溶融と再凝固を再現した。それぞれのモデルの複数 GPU 実装は完了しており、現在、この二つのモデルを組み合わせる作業を行ってい

る段階である。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

高精度モデル開発においては、PF-LB モデルを用いた液相流動を伴う dendrite 成長の大規模シミュレーションを効率的に実行可能な parallel-GPU AMR を開発した。当該分野において、AMR の複数 GPU 実装を行った研究は初めてであり世界的に高く評価されている。これによって、粗視化モデルで用いる dendrite 樹間液相流動の透過率評価も効率的に行えるようになり、parallel-GPU AMR の開発は大きな波及効果が期待できる。また、parallel-GPU AMR の開発に関して学術論文 2 編【学術論文[1], [3]】を出版した。このため、高精度モデルの開発において、進捗状況は良好であるといえる。

粗視化モデル開発においては、粗視化モデルに重要な透過率評価を行った。2021 年度は熱流方向から傾いて成長する柱状 dendrite の配列評価と、その凝固組織に対する透過率評価を行い、学術論文 1 編【学術論文[2]】を出版した。また、透過率評価で 1 編の論文を執筆中である。Parallel-GPU AMR を透過率評価に適用し、その精度と効率の評価をまとめた学術論文 1 編【学術論文[4]】を出版した。このように、透過率評価においては大きな進展があった。モデル構築の作業においては、焼結モデルと多結晶凝固モデルの両手法からアプローチしており、それぞれの開発とコーディングが終了した段階である。これに関しては、当初計画から少し遅れており、早急にモデル開発を進める。

以上の進捗状況を総合的に判断すると、2021 年度はおおむね順調に進んだと結論付けられる。

2022 年度も本研究の継続課題が採択された。2022 年度は特に粗視化モデルのモデル開発を進める。特に粉末粒子の焼結モデルに凝固現象を組み込み、その 3 次元大規模計算を可能とする。

7. 研究業績一覧

(発表予定も含む。投稿中・投稿予定は含まない)

(1) 学術論文 (査読あり)

[1] S. Sakane, T. Takaki, T. Aoki, Parallel-GPU-accelerated adaptive mesh refinement for three-dimensional phase-field simulation of dendritic growth during solidification of binary alloy, *Materials Theory* 6(1) (2022) 3.

[2] T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Aoki, Phase-field study on an array of tilted columnar dendrites during the directional solidification of a binary alloy, *Computational Materials Science* 203 (2022) 111143.

[3] S. Sakane, T. Aoki, T. Takaki, Parallel GPU-accelerated adaptive mesh refinement on two-dimensional phase-field lattice Boltzmann simulation of dendrite growth, *Computational Materials Science* 211 (2022) 111507.

[4] Y. Mitsuyama, S. Sakane, T. Takaki, Effective evaluation of permeability for interdendritic fluid flow using adaptive mesh refinement: Phase-field lattice Boltzmann study, *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* (2022) accepted.

(2) 国際会議プロシーディングス (査読あり)

なし

(3) 国際会議発表 (査読なし)

[1] T. Takaki, Permeability prediction for columnar dendrite structures utilizing large-scale phase-field and lattice Boltzmann simulations, 2021 International Conference on Phase-Field Method and Related Methods, September 29, 2021, Online. 【plenary】

[2] S. Sakane, T. Takaki, T. Aoki, Multiple GPUs parallel computing implementation of

3D AMR phase-field simulation for columnar dendrite growth, EUROMAT2021, September 12-16, 2021, Online.

(4) 国内会議発表 (査読なし)

[1] 坂根慎治, 高木知弘, 青木尊之, AMR法による3次元柱状デンドライト成長の複数 GPU 並列 phase-field 計算の高速化, 日本機械学会 第 34 回計算力学講演会, 2021 年 9 月 21-23 日. (オンライン開催)

[2] 光山容正, 坂根慎治, 大野宗一, 澁田靖, 高木知弘, Phase-field 法と格子ボルツマン法による二次枝が発達した柱状デンドライトの透過率評価, 日本機械学会 第 34 回計算力学講演会, 2021 年 9 月 21-23 日. 北海道大学 (オンライン開催)

(5) 公開したライブラリなど

なし

(6) その他(特許, プレスリリース, 著書等)

なし