

EX18324 (東京大学推薦課題)

坂根慎治 (京都工芸繊維大学 工芸科学研究科)

AMR法を適用した dendrite 成長シミュレーションの複数GPU並列化



研究背景と目的

鑄造時に形成される凝固組織は、全ての金属材料の初期組織となり後の加工製品の組織形態に強く影響するため、その高精度な予測と制御は高品質材料開発の鍵となる。Phase-field法は、典型的な凝固組織である dendrite (樹枝状) 組織の成長を精度よく予測可能な強力な数理モデルである。一方で、PF法は拡散界面モデルを採用しており、計算コストが高く取り扱える領域が小さいことが問題である。実用的な材料組織評価のためには複数の3次元 dendrite の競合成長を取り扱う必要があるが、多くの先行研究では2次元問題や3次元 dendrite 1本の評価に限定されている。また、凝固では液相流動が dendrite 組織に大きな影響を与えるが、流動を考慮したPF解析は計算コストが更に高くなるため、先行研究の殆どが2次元で行われている。

本研究では、Dendrite 凝固組織予測計算の更なる大規模化・高速化のために、二元合金 dendrite 凝固モデルに Adaptive Mesh Refinement (AMR) 法を適用し、動的負荷分散を考慮した複数GPU並列計算の実装を行う。さらに、構築手法の計算性能を評価し、凝固組織予測における有用性を確認する。

GPGPUによる高性能計算



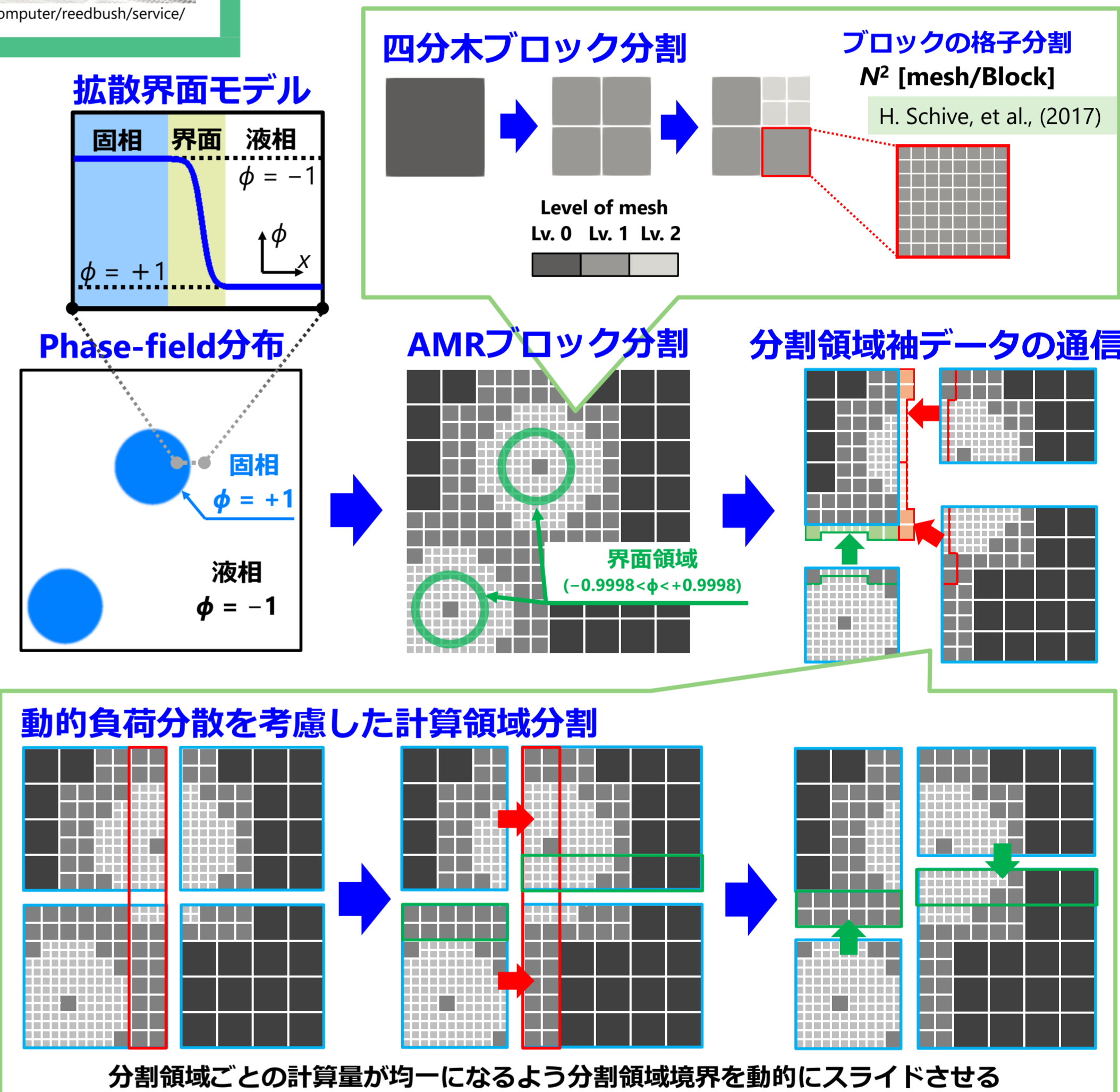
計算ノード × 64

- CPU: Intel Xeon E5-2695v4 (36 core)
- GPU: NVIDIA Tesla P100 × 4
- インターコネクト: InfiniBand EDR 4x (100 Gbps x2)

複数GPU並列計算

- CPUコード: C/C++
- GPUコード: CUDA
- ノード間通信: OpenMPI

Phase-field計算のAMR実装と複数GPU並列化

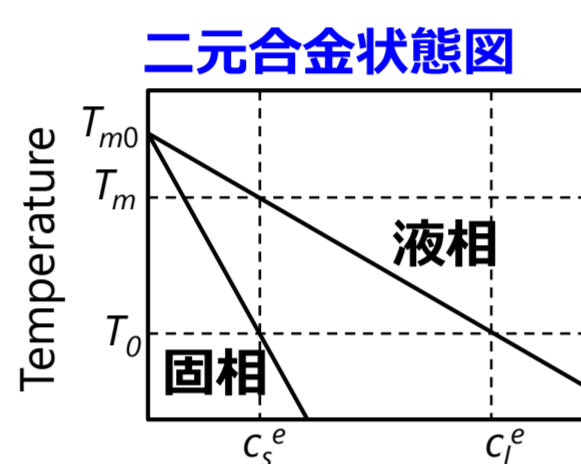


Phase-field二元合金凝固モデル

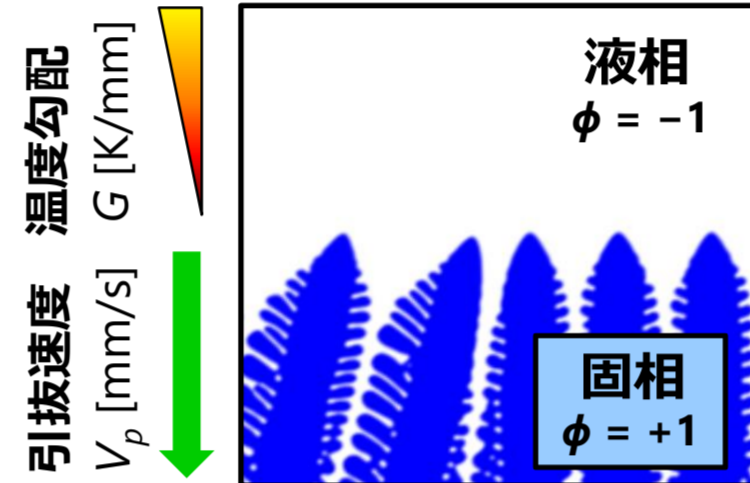
温度場

$$T = T_0 + G(y - V_p t)$$

H.-J. Diepers, et al., J Cryst. Growth 237-239 (2002) 149.



Phase-field分布



Phase-field方程式

$$\tau_0 a_s(\vec{n})^2 (1 - (1-k)u') \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla^2 (W_0^2 a_s(\vec{n})^2 \phi) - (-\phi + \phi^3) - \lambda^* (1 - \phi^2)^2 (u + u')$$

界面異方性関数

$$a_s(\vec{n}) = \bar{a} (1 - 3\epsilon_4) \left[ 1 + \frac{4\epsilon_4}{1 - 3\epsilon_4} \{n_x^4 + n_y^4\} \right]$$

界面法線ベクトル

$$\vec{n} = \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \end{pmatrix} = \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}$$

溶質の拡散方程式

$$\frac{[1+k-(1-k)\phi]}{2} \frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (q(\phi) \nabla u + \vec{J}_{AT}) + \frac{1}{2} [1+(1-k)u] \frac{\partial \phi}{\partial t} - \nabla \cdot \vec{J}$$

無次元溶質濃度

$$u = \frac{C_l - C_l^e}{C_l^e - C_s^e}$$

温度補正項

$$u' = \frac{T - T_0}{T_m - T_0}$$

Anti-trapping流束項

$$\vec{J}_{AT} = -a(\phi) W [1 + (1-k)u] \frac{\partial \phi}{\partial t} \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}$$

M. Ohno, K. Matsuura, Phys. Rev. E, 79 (2009) 031603.

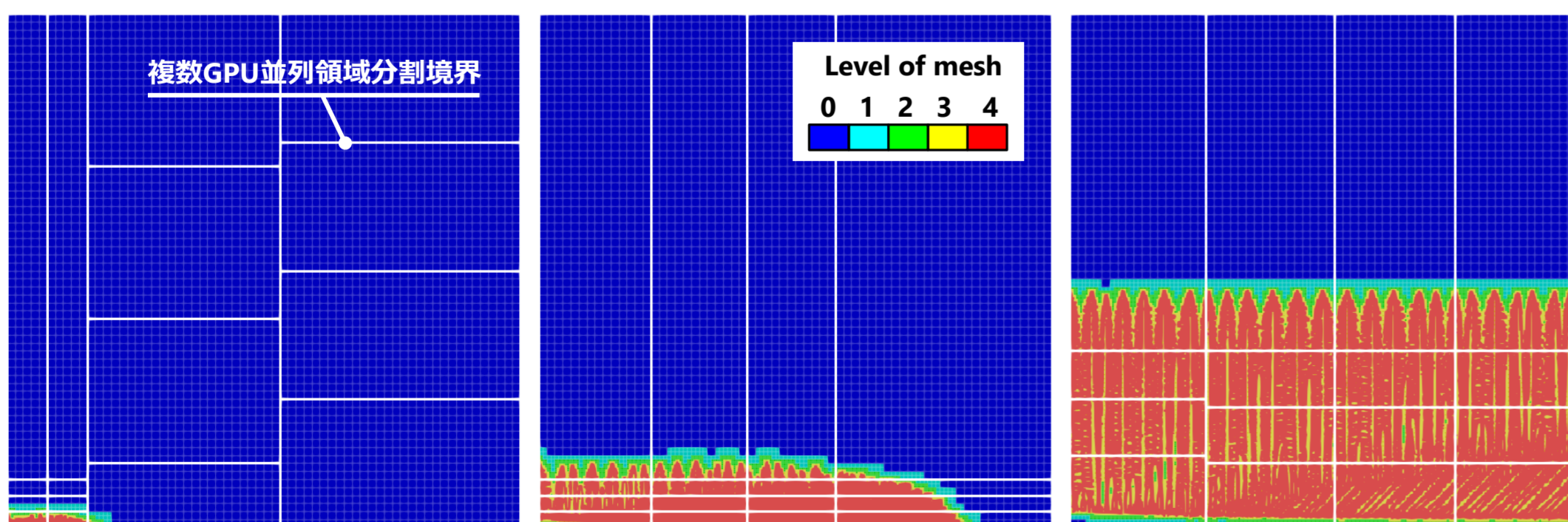
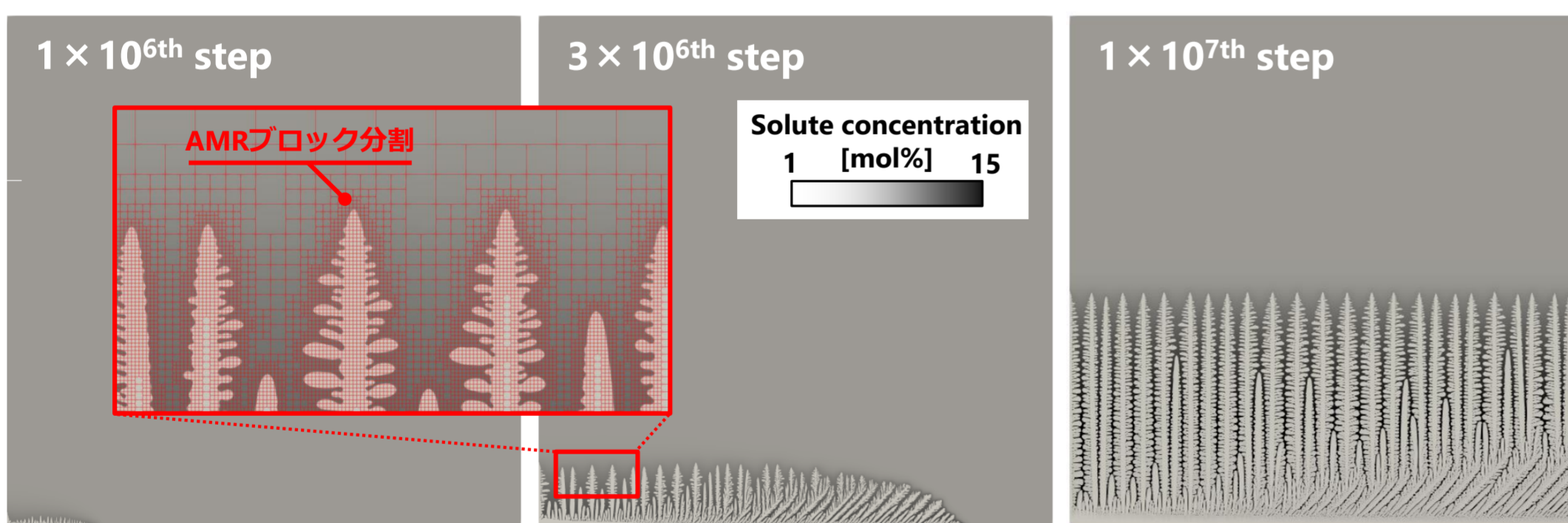
一方向凝固 dendrite 成長計算

凝固条件

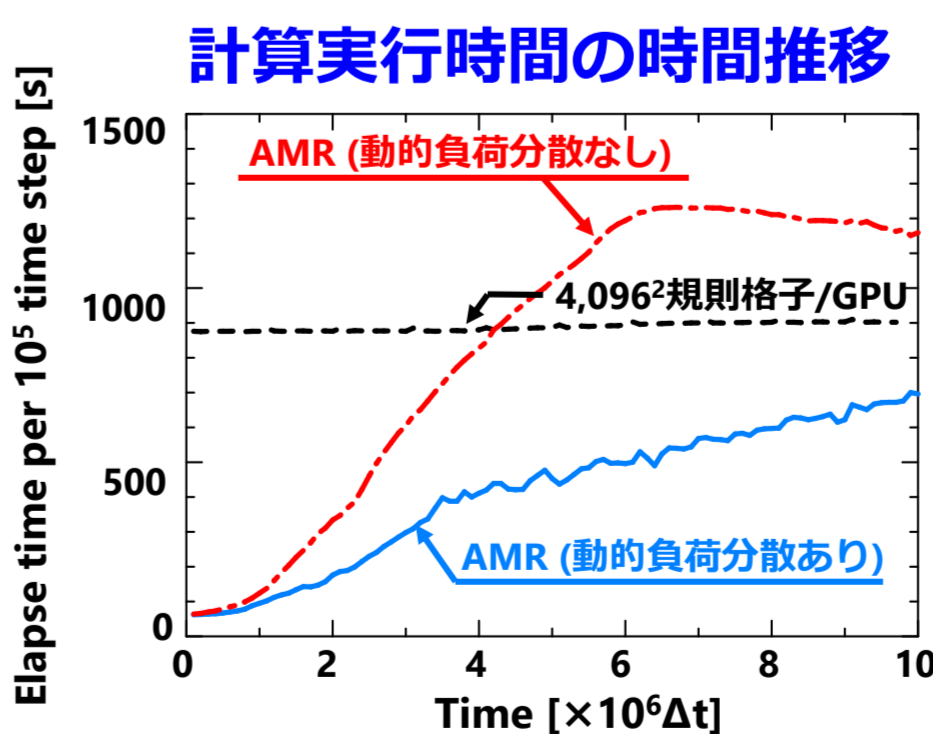
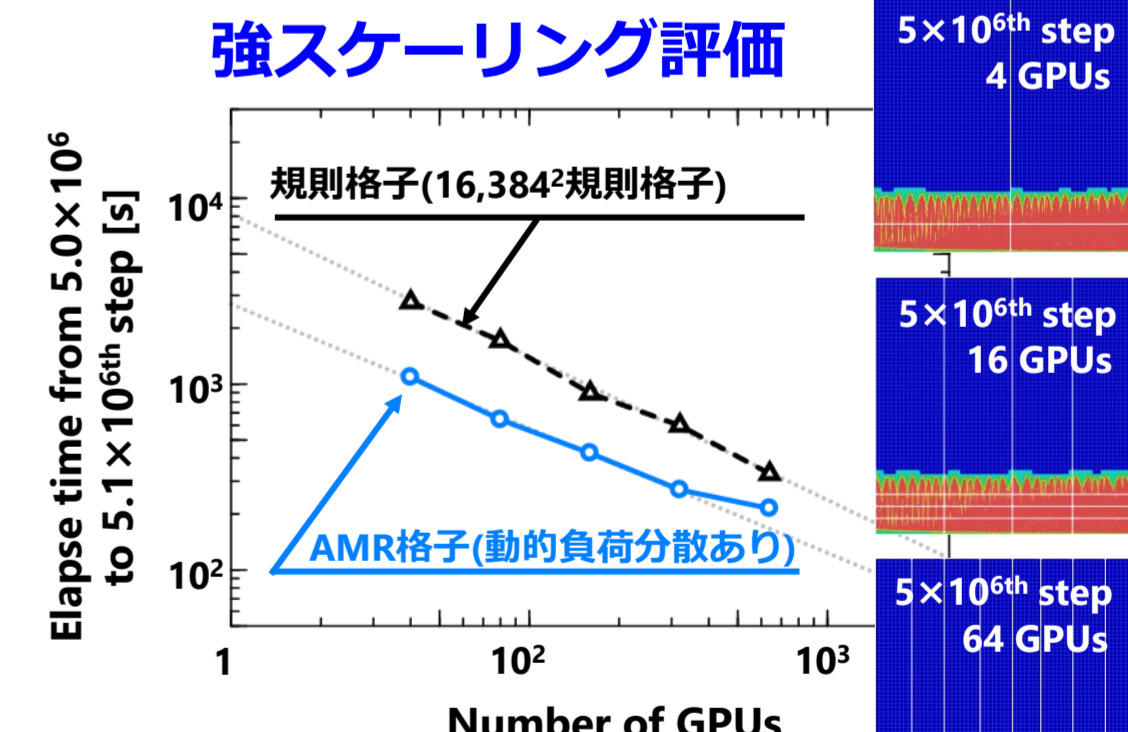
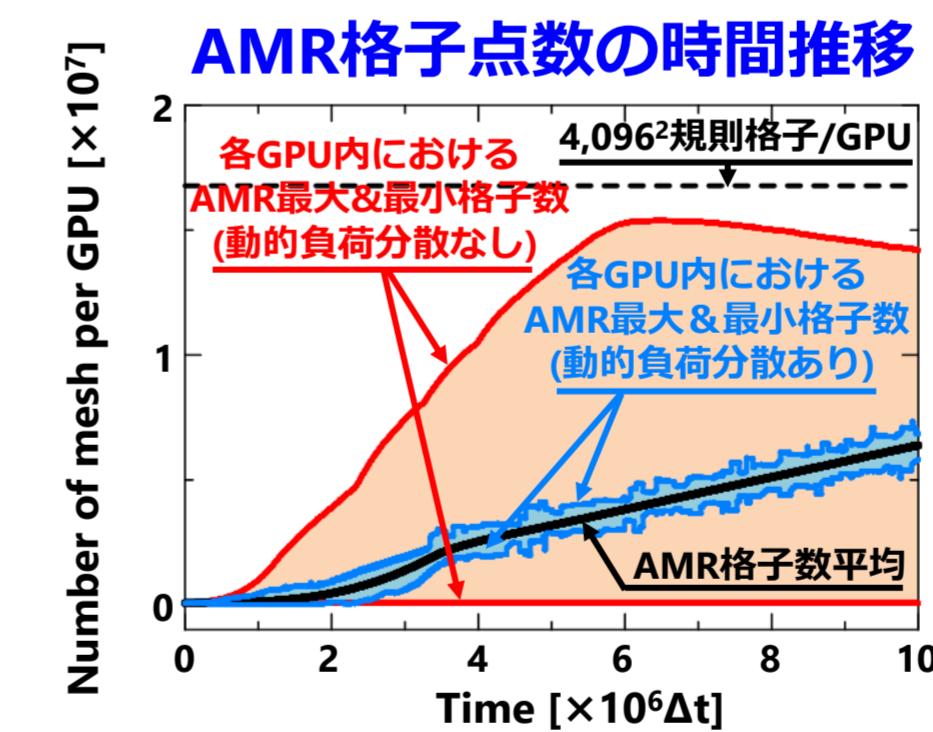
- 材料物性: SCN-3.0wt%acetone
- 温度勾配: G = 10 K/mm
- 引抜速度: V<sub>p</sub> = 10 μm/s

計算条件 & コスト

- 領域サイズ: 8.192 × 8.192 mm<sup>2</sup> (16,384 × 16,384 Δx<sub>min</sub><sup>2</sup>)
- 格子数/ブロック: 16<sup>2</sup> meshes/block
- GPU数: NVIDIA Tesla P100 × 16
- 実行時間: 11 hours



AMR格子点数/16,384 <sup>2</sup> 規則格子	AMR格子点数/16,384 <sup>2</sup> 規則格子	AMR格子点数/16,384 <sup>2</sup> 規則格子
計算量0.7%	計算量3.8%	計算量38.0%
計算速度 (vs. 規則格子) 9.2倍高速化	計算速度 (vs. 規則格子) 2.9倍高速化	計算速度 (vs. 規則格子) 1.3倍高速化



結言

Phase-field dendrite 成長シミュレーションの複数GPU並列計算にAMR法を適用することで、計算の高速化に成功した。これにより、従来の規則格子を用いた計算では取り扱うことが難しかった dendrite 間隔が広い場合などの固相が疎な条件における凝固組織形態予測が容易になると期待される。

今後の課題

液相流動や固相運動を伴う凝固問題への拡張と3次元化

