



高精度凝固組織予測のための大規模フェーズフィールドシミュレーションとその高速化

■ 研究背景

軽量かつ高強度な新材料の開発のためには、ミクロオーダーの材料組織を高精度にコントロールすることが極めて重要である。材料組織は、鑄造・圧延・熱処理・塑性加工といった様々な加工プロセスでその形態を変化させるが、その初期組織である凝固組織を高精度にコントロールしておけば、後の加工において形成される組織コントロールが容易もしくは不要となる。典型的な凝固組織形態はデンドライト(樹枝状結晶)であり、複数デンドライトの成長挙動を精度良く予測することが重要となる。フェーズフィールド法は、デンドライト成長を表現する最も強力な数値モデルであるが、計算コストが大きくなることが課題である。

■ 研究目的

本研究では、平成25年度に構築した大規模フェーズフィールドシミュレーション手法の更なる高速化とそれを用いた一方向凝固過程におけるデンドライトの3次元配向メカニズムの解明にチャレンジする。

■ 二元合金一方向凝固定量的Phase-fieldモデル

Phase-field方程式

$$\tau(\theta)[1-(1-k)\mu] \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot (W(\nabla \phi)^2 \nabla \phi) + \frac{\partial}{\partial x} \left[W(\nabla \phi) \frac{\partial W(\nabla \phi)}{\partial \phi_x} (\nabla \phi)^2 \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[W(\nabla \phi) \frac{\partial W(\nabla \phi)}{\partial \phi_y} (\nabla \phi)^2 \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[W(\nabla \phi) \frac{\partial W(\nabla \phi)}{\partial \phi_z} (\nabla \phi)^2 \right] - \frac{df(\phi)}{d\phi} - \lambda^* \frac{dg(\phi)}{d\phi} (u + u')$$

拡散方程式

$$\frac{1}{2} [1+k-(1-k)\phi] \frac{\partial u}{\partial t} = a_2 \lambda^* \nabla [q(\phi) \nabla u - j_{AT}] + \frac{1}{2} [1+(1-k)\mu] \frac{\partial \phi}{\partial t} - a_2 \lambda^* \nabla \cdot J$$

温度

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

Antitrapping current

$$j_{AT} = -a(\phi)W[1+(1-k)\mu] \frac{\partial \phi}{\partial t} \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}$$

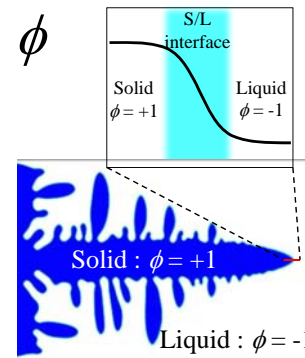
Fluctuating current

$$J = \frac{2F_u^0}{\Delta t \Delta x^2} q(\phi) [1+(1-k)\mu] \Pi$$

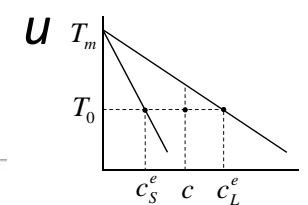
■ 研究計画

TSUBAMEは平成25年にGPUが全て Keplerに変更されたため、プログラムのKeplerコアGPUに対するチューニングを行うことで計算の高速化を図る。また、大規模計算にともなう効率的なデータ処理方法および可視化手法の構築も行う。プログラムの高速化後、256×256×2048程度の差分格子を用いた2×10⁷ステップ程度の計算を複数回行うにより、大規模計算のための最適条件探索とデンドライト競合成長の基本特性を評価する。次いで、約2048×2048×2048の差分格子を用い、1×10⁷ステップ程度の計算を、デンドライトの初期核配置、分配係数、温度勾配、引き抜き速度などの条件を変えて行う。

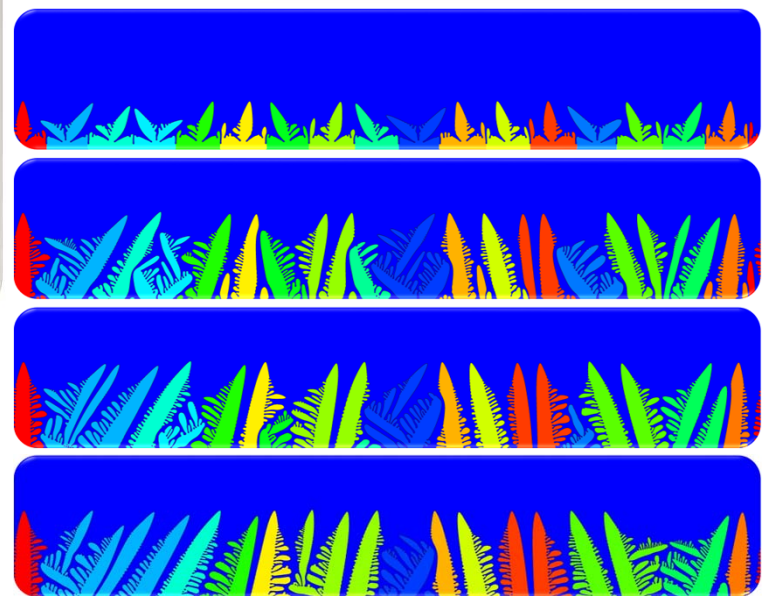
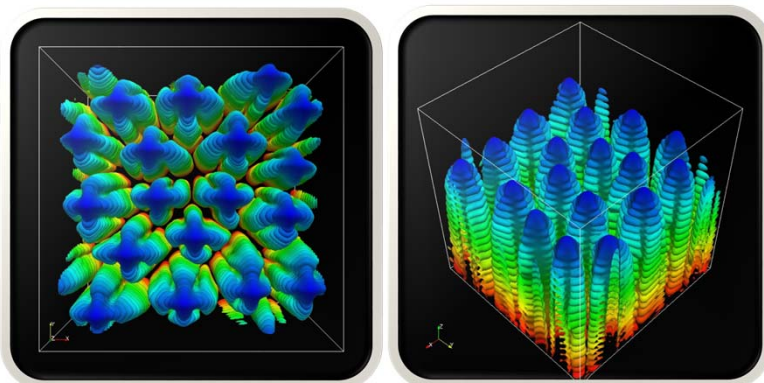
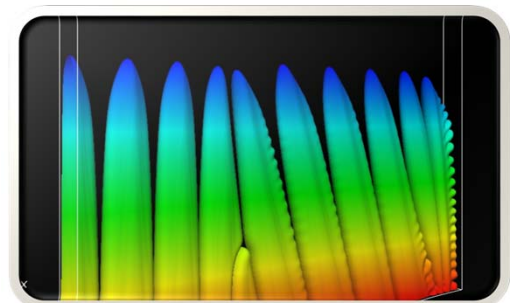
Phase-field変数



無次元過飽和度



$$u = \frac{c - c_l^e}{c_l^e - c_s^e}$$



■ 共同研究体制

- 高木 知弘 (京都工芸繊維大学 大学院工芸科学研究科)
- 青木 尊之 (東京工業大学 学術国際情報センター)
- 大野 宗一 (北海道大学 大学院工学研究院)
- 澁田 靖 (東京大学 大学院工学系研究科)
- 下川辺 隆史 (東京工業大学 学術国際情報センター)
- 堀井 麻有 (京都工芸繊維大学 大学院工芸科学研究科)