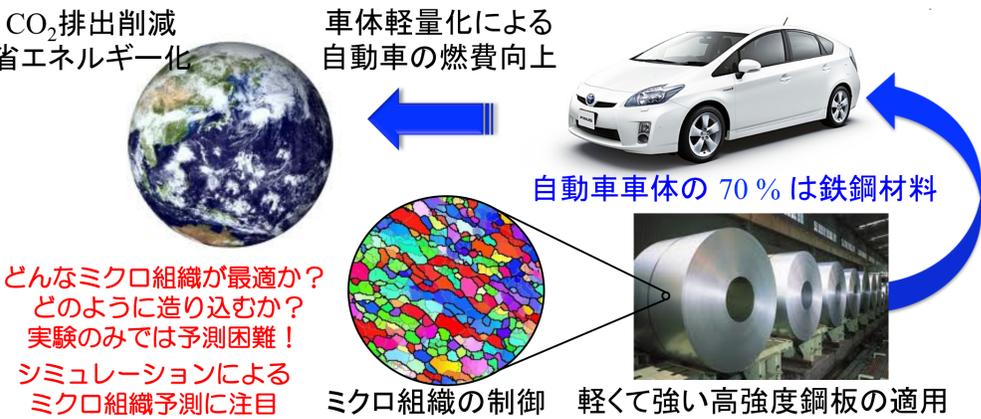


# マルチフェーズフィールド法の大規模GPU計算による金属多結晶組織制御法の探索



## 鉄鋼材料のマイクロ組織制御技術



## 研究目的

平成25年度の研究で構築したマルチフェーズフィールド法の複数GPU計算法を応用し、実材料の特性向上につながるマイクロ組織制御に重要な現象、特に多結晶組織形成における分散析出粒子による結晶粒界のピン止め効果のメカニズムの解明を目指す。

## 研究計画

- ・異常粒成長における分散粒子のピン止め効果を解明するための大規模マルチフェーズフィールドシミュレーションの実施
- ・東京工業大学のスパコンTSUBAME2.5を用いた大規模シミュレーションによるピン止め効果を最大限利用した材料組織制御方法の探索

## マルチフェーズフィールド法

全自由エネルギーを基礎に、多結晶金属材料内のマイクロ組織形成における界面移動、溶質拡散、変形を解析できる強力な計算手法。

全自由エネルギー “化学的自由エネルギー + 弾性ひずみエネルギー + 勾配エネルギーの総和”

$$G_{total} = \int_V \left\{ f_{chemical} + f_{elastic} + \sum_{i=1}^N \sum_{k=i+1}^N \left( -\frac{a_{ik}^2}{2} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_k + W_{ik} \phi_i \phi_k \right) \right\} dV$$

フェーズフィールド方程式 “結晶粒界などの界面移動を表す方程式”

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -\frac{2}{n} \sum_{j=1}^n M_{\phi} \left[ \sum_{k=1}^n \left\{ (W_{ik} - W_{jk}) \phi_k + \frac{1}{2} (a_{ik}^2 - a_{jk}^2) \nabla^2 \phi_k \right\} - \frac{8}{\pi} \sqrt{\phi_i \phi_j} \Delta E_{ij} \right]$$

溶質拡散方程式 “炭素などの溶質原子拡散を表す方程式”

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ \sum_i \phi_i D_C^i \nabla C_i \right\}$$

計算負荷とメモリアクセス量が大いことが、実用的なシミュレーション(実験との比較)への問題点であったが、平成25年度の研究で複数GPU計算により可能となった。

## 計算方法

### 計算スキーム

空間微分: 2次精度 中心差分法  
 時間積分: 1次精度 オイラー法  
 プログラミング言語: CUDA Fortran  
 コンパイラ: CUDA4.0 + PGI Accelerator Fortran  
 並列化: OpenMPI, GPU Direct2.0



### 計算機資源

東京工業大学GSIC クラウド型グリーンスパコンTSUBAME2.5

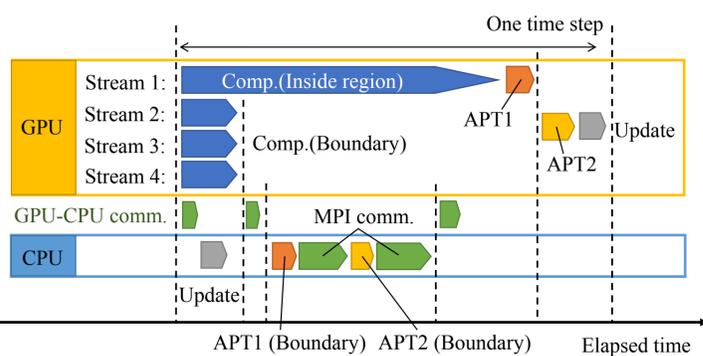
東京農工大学 山中研究室 GPUクラスター

CPU: Intel Xeon E5-2690 (2.9GHz 8core L3=20MB) x 2  
 GPU: NVIDIA Tesla Kepler K20X 6GB x 2  
 Memory: 128GB (DDR3-1600 REG ECC 8GB x 16)  
 HCA: InfiniBand QDR 40Gbps x1

計4ノード



## 計算結果 (研究進捗状況)



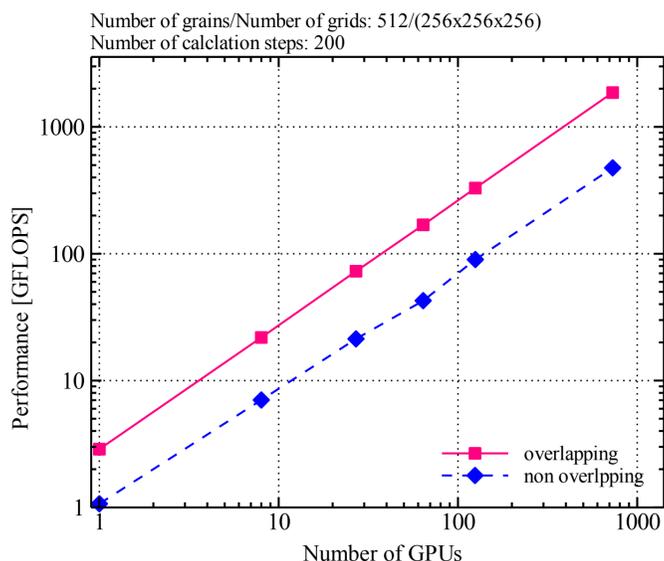
### オーバーラッピング法を用いた

### マルチフェーズフィールド法の複数GPU計算アルゴリズム

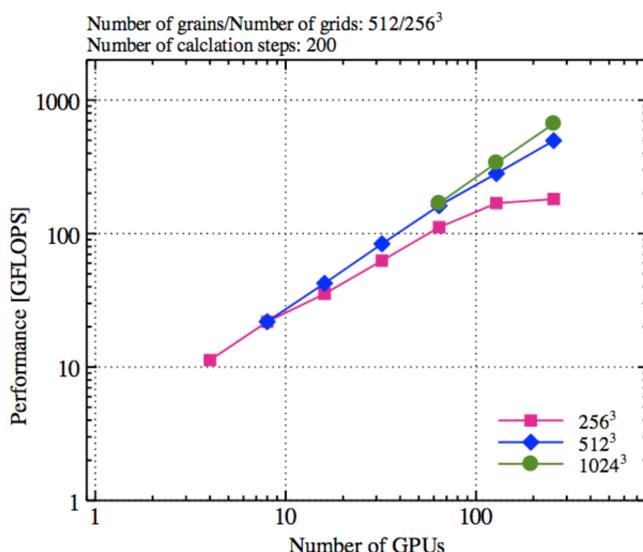
岡本成史, 山中晃徳, 下川辺隆史, 青木尊之, 日本計算工学会論文集, Vol.2013, (2013), p.20130018)

超大規模なマルチフェーズフィールドシミュレーションでも良好なスケーリング性能を達成!

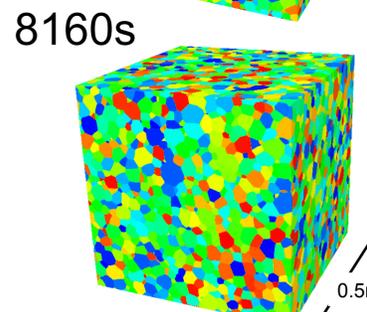
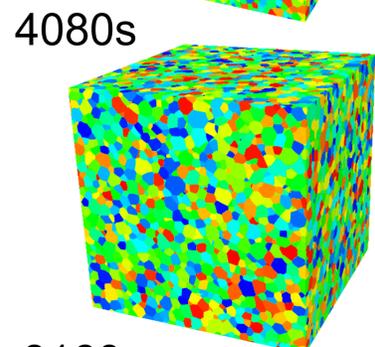
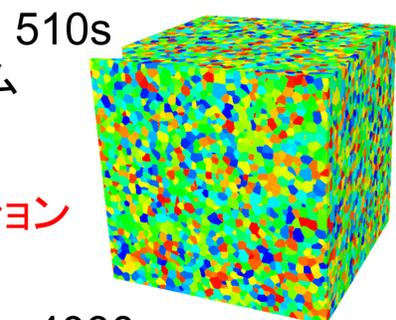
今年度は実材料の組織制御へ応用する!



多結晶粒成長の大規模マルチフェーズフィールドシミュレーションの弱スケーリング性能



多結晶粒成長の大規模マルチフェーズフィールドシミュレーションの強スケーリング性能



TSUBAME2.5で計算した多結晶粒成長挙動

## 今後の課題

- 析出粒子のピンニング効果を考慮したシミュレーションの実施
- 計算アルゴリズムのチューニングとさらなる効率化

## 共同研究者

青木尊之, 下川辺隆史 (東京工業大学GSIC), 岡本成史 (東京農工大学大学院生)