

# 多結晶粒成長メカニズム解明のためのフェーズフィールドクリスタル法の大規模GPU計算技術の開発



## 1. 背景: 鉄鋼材料の結晶組織制御

CO<sub>2</sub>排出削減 省エネルギー

車体軽量化による 自動車の燃費向上

自動車車体の約70%は鉄鋼材料

材料の製造工程での結晶組織の変化を実験のみで予測することは困難!

シミュレーションによる結晶組織の予測が重要!

結晶組織の制御 高強度で薄く加工できる鋼板

<http://bestcarmag.com/makes/Toyota/Prius>

## 3. フェーズフィールドクリスタル(PFC)法

秩序変数

$\phi$ : 時間平均された原子密度場

全自由エネルギー

$$F = \int_V \left\{ \frac{\phi}{2} (-\epsilon + (1 + \nabla^2)^2) \phi + \frac{1}{4} \phi^4 \right\} dV$$

時間発展方程式  $\phi$  の時間変化を計算することで、原子の移動を追跡する。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta \phi} = \nabla^2 \{ (-\epsilon + 1) \phi + 2 \nabla^2 \phi + \nabla^4 \phi + \phi^3 \}$$

メリット

- ✓ 分子動力学(MD)シミュレーションの10<sup>3</sup>~10<sup>4</sup>倍の時間スケールで生じる現象を計算できる。
- ✓ 粒成長における方位変化を自然に表現(計算)することができる。

デメリット

- ✓ 6階の偏微分方程式を解く必要があり、陽解法では非常に小さい $\Delta t$ としなければならない。
- ✓ 多数の原子・結晶粒の挙動を計算するためには、膨大な計算コストを必要とする。

## 2. 研究目的

JHPCN課題で研究してきた内容

2013年「鉄鋼材料におけるマイクロ組織形成マルチフェーズフィールドシミュレーションの大規模GPU計算技術の構築」

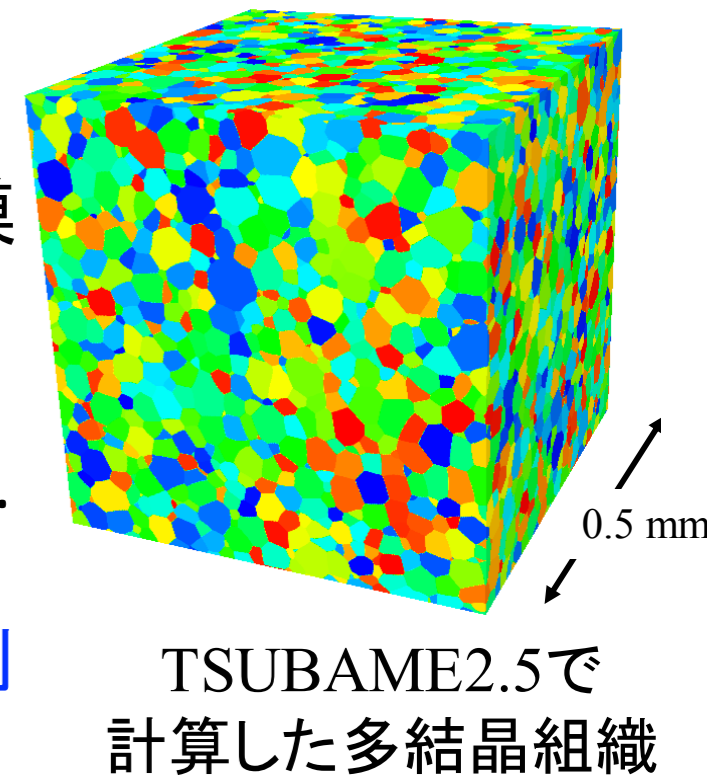
2014年「マルチフェーズフィールド法の大規模GPU計算による金属多結晶組織制御法の探索」

2015年「可動な分散粒子を含む金属材料におけ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」

成果①: 多結晶組織の変化を計算するためのマルチフェーズフィールド法の大規模GPU計算技術を確立した。

成果②: よりリアルな分散粒子を含む材料での多結晶組織の変化(粒成長)を計算した。

課題: マルチフェーズフィールド法では、粒成長にもなう方位変化(各結晶中の原子配列の方向)を計算できない。



### 2016年度の研究目的

- ① フェーズフィールドクリスタル(PFC)法を用いて、方位変化が多結晶粒成長に及ぼす影響を解明する。
- ② スペクトルソルバーに用いる高速フーリエ変換をCUFFTにより高速化し、複数GPU計算を可能とする。
- ③ 複数GPUによるPFCシミュレーションの並列計算技術を開発し、TSUBAME2.5に実装することで大規模計算を実現する。

## 4. 研究進捗状況

### 4.1 シングルGPUでの計算結果

\* GPU搭載のノートPCで実施

GPU: NVIDIA GeForce GTX980M  
メモリ: 8 GB (GPU)  
プログラム言語: CUDA C

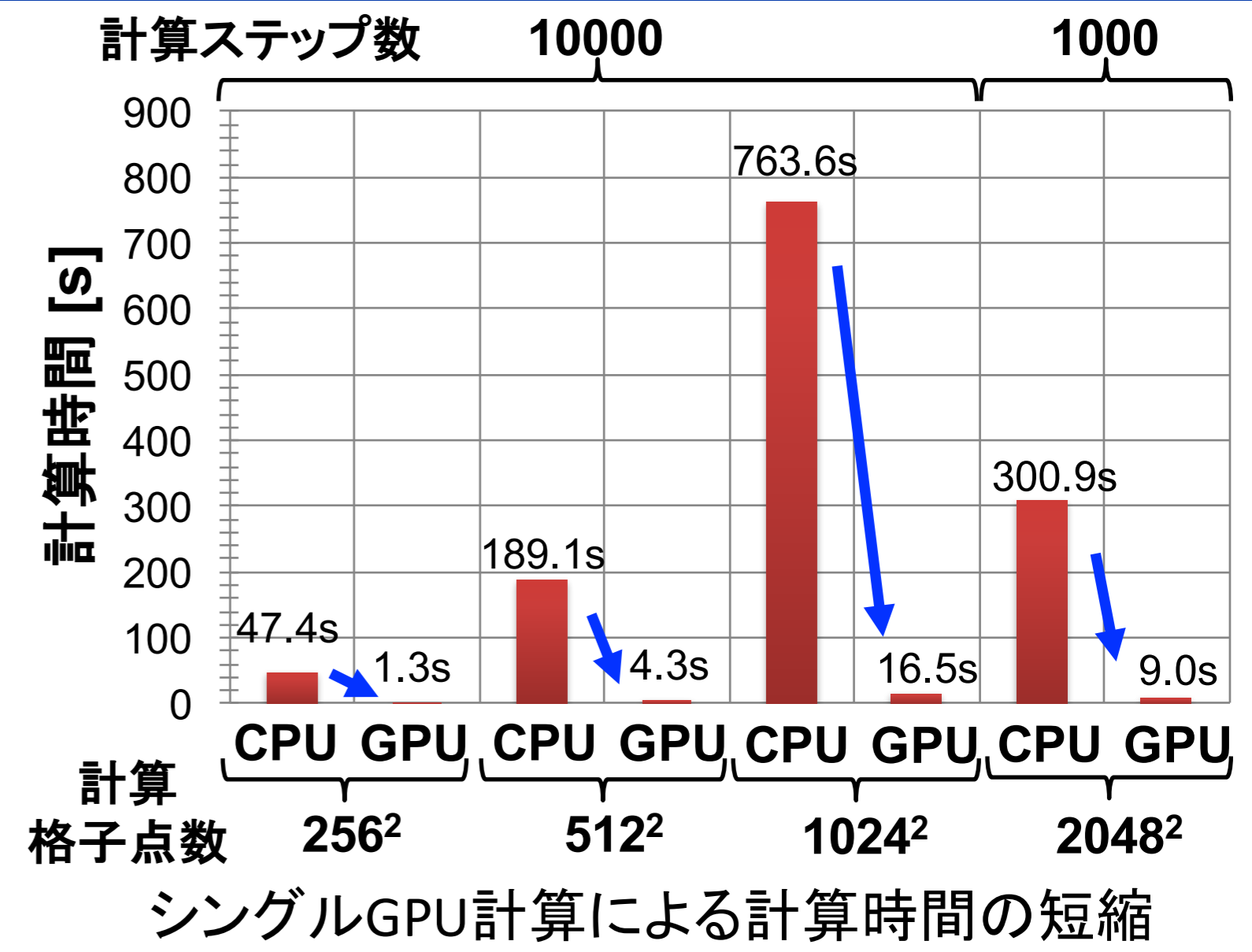
液相中に固相(結晶)の核を形成

結晶が成長

結晶の間に粒界が形成

$\phi$  の極大値が原子位置を表す

PFC法による多結晶凝固の2次元シミュレーション(1024 x 1024格子, 30000ステップ)



### 4.2 多結晶粒成長の3次元シミュレーション結果(シングルGPU)

計算格子点数: 1024 x 1024 x 256 (下記GPUの限界)  
原子数: 約178200 (下記GPUの限界)  
GPU: NVIDIA Tesla K40 を用いて計算

- ✓ CUFFTを用いたスペクトルソルバーとGPU計算により3次元シミュレーションが可能となり、結晶粒の成長・収縮を計算できることを確認。
- ✓ シングルGPUでは、メモリ容量の制限により、十分な計算領域が確保できず、柱状結晶しか計算できない。

小さい結晶粒は収縮

いくつかの結晶粒のみが成長(粗大化)

1000 step, 20000 step, 30000 step, 60000 step, 90000 step

PFC法による多結晶粒成長の3次元シミュレーション  
(青色の原子は、結晶粒を構成する原子. 白色の原子は、粒界を構成する原子)

## 5. 今後の計画

- 共同研究者とともに複数GPUの並列計算コードの開発
- TSUBAME2.5での大規模計算と性能評価
- 結晶粒成長における方位変化の解析