

JAXを活用したマルチフェーズフィールド計算による鉄鋼材料のミクロ組織形成シミュレーション技術の開発

研究体制

東京農工大学 山中晃徳 (代表者), 鈴木大輝 (大学院生・博士後期課程, 計算担当)
東京科学大学 中田伸生, 永島涼太, 藤倉快 (大学院生・博士後期課程, 計算担当)



研究の背景

- 持続可能な社会の実現に向け、インフラ構造物や自動車の基盤である鉄鋼材料の力学特性向上が強く求められている。
- 鉄鋼材料の力学特性は、材料内部の組織形態に強く依存しており、製造工程で生じる相変態を活用したミクロ組織制御が必要である。
- 実験的観察で3次元組織形態を明らかにすることは、多大な時間的・技術的コストを要するため、学術的にも産業的にもマルチフェーズフィールド(MPF)法による組織形成過程の数値シミュレーションが期待されている。
- 組織の空間分解能(nm~μmオーダー)と組織形成の時間スケール(秒~分オーダー)を克服するためには、大規模・高速計算が必要。

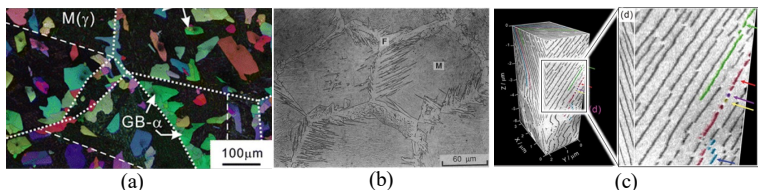


図1 (a,b) フェライト変態により得られる組織 (Miyamoto et al. *Metal. Mater. Trans. A*, 44 (2013)). (c) パーライト変態により得られる組織 (Shibata et al. *Sci. Tech. Adv. Mater.*, 26 (2025)). 組織によって、鉄鋼材料の強度が大きく変わる。

マルチフェーズフィールド法

I.Steinbach et al. *Physica D*, 134 (1999)

- 結晶粒ごとに変数 ϕ を割り当て、系の全自由エネルギーを定義する。
- 熱力学第2法則に基づき導出した ϕ の時間発展方程式を有限差分法(時間微分:オイラー法, 空間微分:2階中央差分)で計算する。

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

- パラメータは、物性値と関係づけることができ、実時間・実スケールでの数値シミュレーションが可能である。

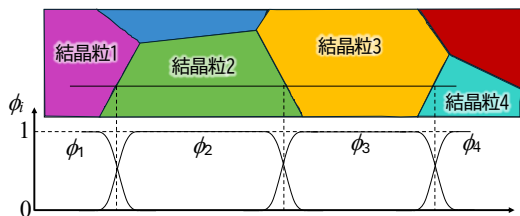


図2 マルチフェーズフィールド法における秩序変数 ϕ の定義。 ϕ の時間発展を計算することで、粒界や界面の移動を計算する(自由境界問題を解く)ことができる。

研究の目的

鉄鋼材料のフェライト変態およびパーライト変態によるミクロ組織形成を高精度に予測可能なMPFシミュレーションの計算技術、特に、スーパーコンピュータを用いた大規模GPU計算技術を開発することとする。MPFシミュレーションのGPU計算技術を開発するに際し、柔軟性と移植性の高い複数GPU計算技術を確立するため、従来のC言語やFortranによる実装ではなく、Pythonベースの計算技術、特に科学計算用ライブラリJAXを活用した複数GPU並列計算技術を構築する。

JHPCN共同研究として実施する必要性と意義

- 東京科学大学 中田研究室と協働し、MPFシミュレーション結果の検証に不可欠である実験データを取得・検証することで、計算科学と実験・計算材料科学の異分野融合による研究体制を構築し、独自性の高い研究成果を創出する。
- 東京科学大学TSUBAMEの持つ大規模GPU計算環境を最大限活用できるJAXライブラリを用いた柔軟かつ可搬性を有するMPFシミュレーション技術を構築する。
- JAXの自動最適化機構を活用した複数GPU計算による大規模MPFシミュレーションで性能を最大限引き出すことは、鉄鋼材料のみならず、あらゆる材料にも応用することが可能である。
- フェーズフィールドシミュレーションの大規模GPU計算は、2011年のゴードンベル賞(特別賞)受賞以来、世界を牽引してきた。

今後の方向性

- JAX-MPFとしてのフレームワークを進める。
- パーライト変態の大規模3次元シミュレーション(図1のようなセメンタイト相の分岐、分裂の再現とメカニズム解明ができれば、材料科学として大きな成果。)
- フェライト変態におけるデータ同化を先行実施(図1のような実際の組織スケールでのデータ同化ができれば、鉄鋼材料科学としては意義は大きい。)

研究計画

フェーズI: MPFモデル構築と大規模計算を見据えた基礎検証(2026年4-6月)

- JAXによる単一GPUによる3次元計算において、数値的安定性を確認し、CPU並列計算との速度比較を行う。このフェーズIでの性能確認および改善が、極めて重要との位置付けで実施

フェーズII: JAXによる大規模GPU計算技術の体系化と性能評価(2026年7-9月)

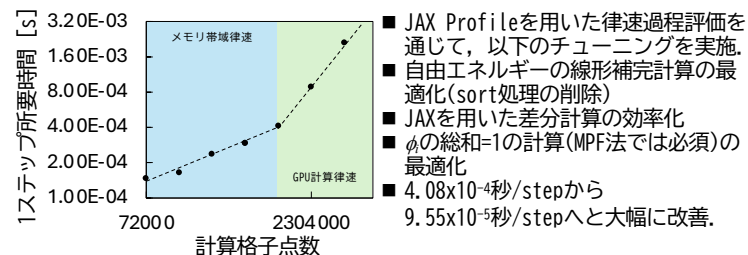
- 複数GPU環境へ容易に拡張可能なMPFシミュレーションのフレームワーク「JAX-MPF」を構築
- MPFシミュレーションでは、ひとつの計算点に複数のPF変数の時間変化を計算するため、空間方向のshardingのみならずPF変数方向のshardingを組み合わせたデータ分割方法を検討し、データ通信量・メモリ使用量を最小にする最適分割規則の設計を行う。

フェーズIII: フェライト変態とパーライト変態の3次元大規模計算(2026年10月-2027年3月)

- JAX-MPFを用い、パーライト変態における3次元組織形成の大規模MPFシミュレーションを実施する。
- フェライト変態に関しては、複数のオーステナイト相の結晶粒間に形成されるフェライト相の生成・成長過程を解析する。
- 計算機科学的な進展よりもむしろ、材料科学的に未解明であるセメンタイトの配向・分岐といった3次元特徴の形成メカニズムを明らかにする。
- 次年度以降に向け、バイズの定理に基づくデータ同化との融合も推進する。

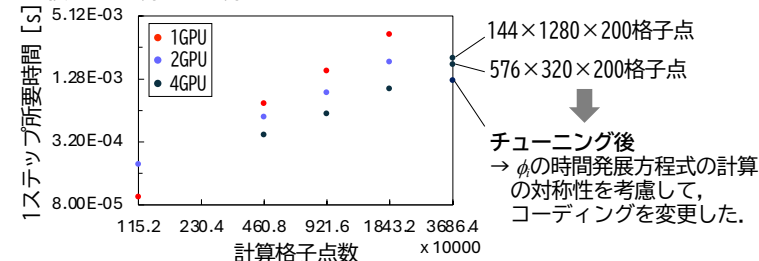
これまでの研究成果

(1) シングルGPU計算での計算時間の格子点数依存性



- JAX Profileを用いた律速過程評価を通じて、以下のチューニングを実施。
- 自由エネルギーの線形補完計算の最適化(sort処理の削除)
- JAXを用いた差分計算の効率化
- ϕ の総和=1の計算(MPF法では必須)の最適化
- 4.08×10^{-4} 秒/stepから 9.55×10^{-5} 秒/stepへと大幅に改善。

(2) 複数GPU計算での計算時間の格子点数依存性



(3) 東京科学大学TSUBAME4.0での計算実行

■ パーライト変態のMPFシミュレーション

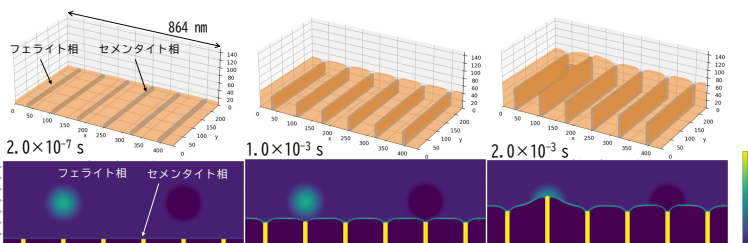


図3 Tsubame4.0のGPUで計算したパーライト変態による組織形成過程。(上段)組織分布、(下段)炭素濃度分布。大規模計算により図2のようなパーライト組織形態の形成メカニズム(特にセメンタイトの分断)を明らかにすることを旨とする。

■ フェライト変態のMPFシミュレーション

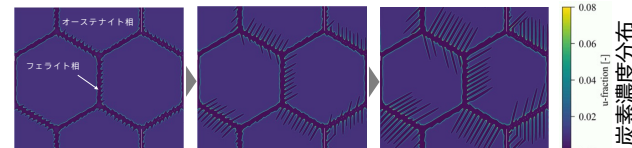


図4 Tsubame4.0の2GPUで計算したWidmanstätten形態(針状形態)のフェライト相の形成過程。図2と同じスケールでの計算成果は、本研究ではじめて実現したと考えられる。なお、このシミュレーションにデータ同化(EnKF)の実装も完了している。