

自由境界問題のクロススケール計算に向けた 超大規模フェーズフィールドシミュレーション法の確立

Establishment of ultra-large-scale phase-field simulation method for cross-scale computation of free boundary problems

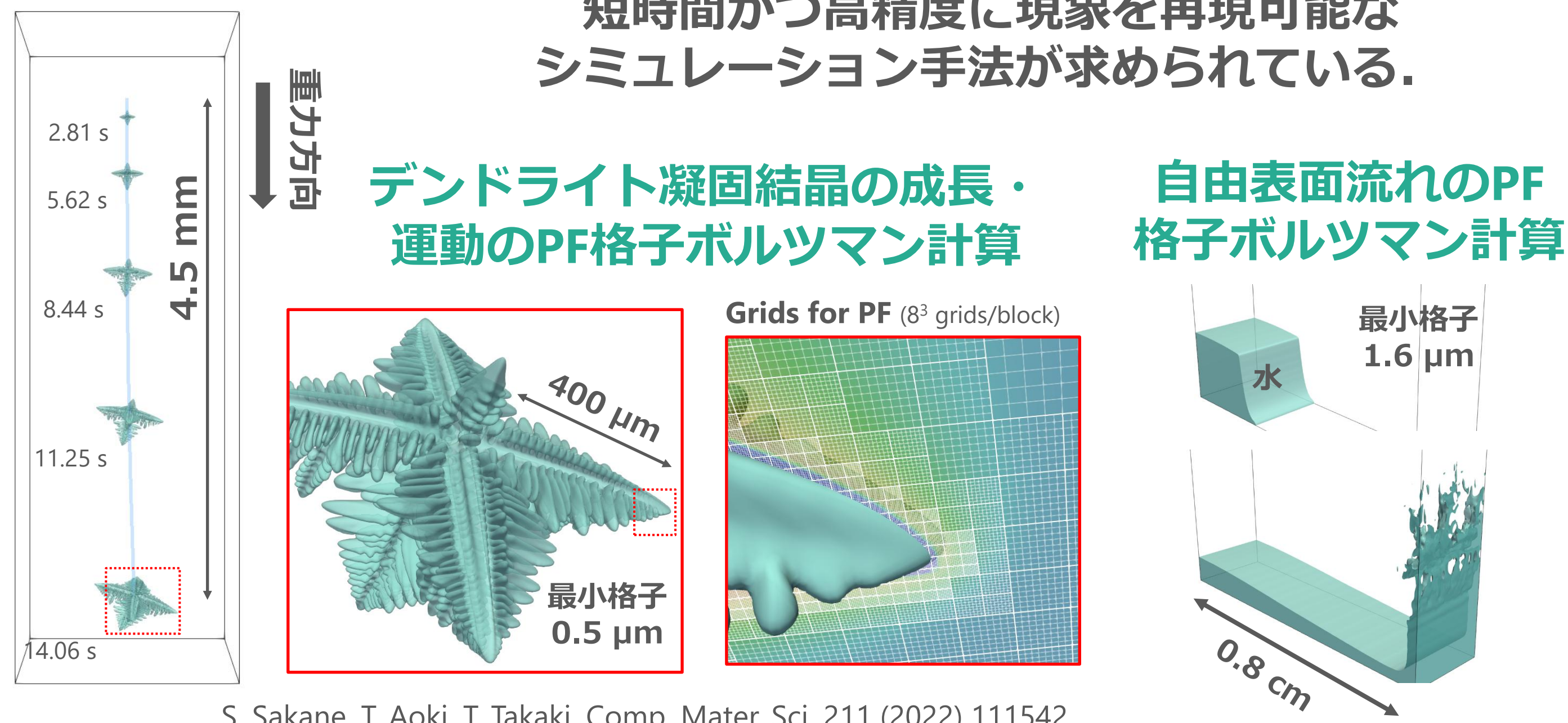
課題代表者: 坂根 慎治¹, 副代表者: 青木 尊之^{1,2}, 田原 真之介¹, 大脳 皓一¹, 山田 秀太郎¹

¹ 京都工芸繊維大学, ² 東京科学大学



背景と目的

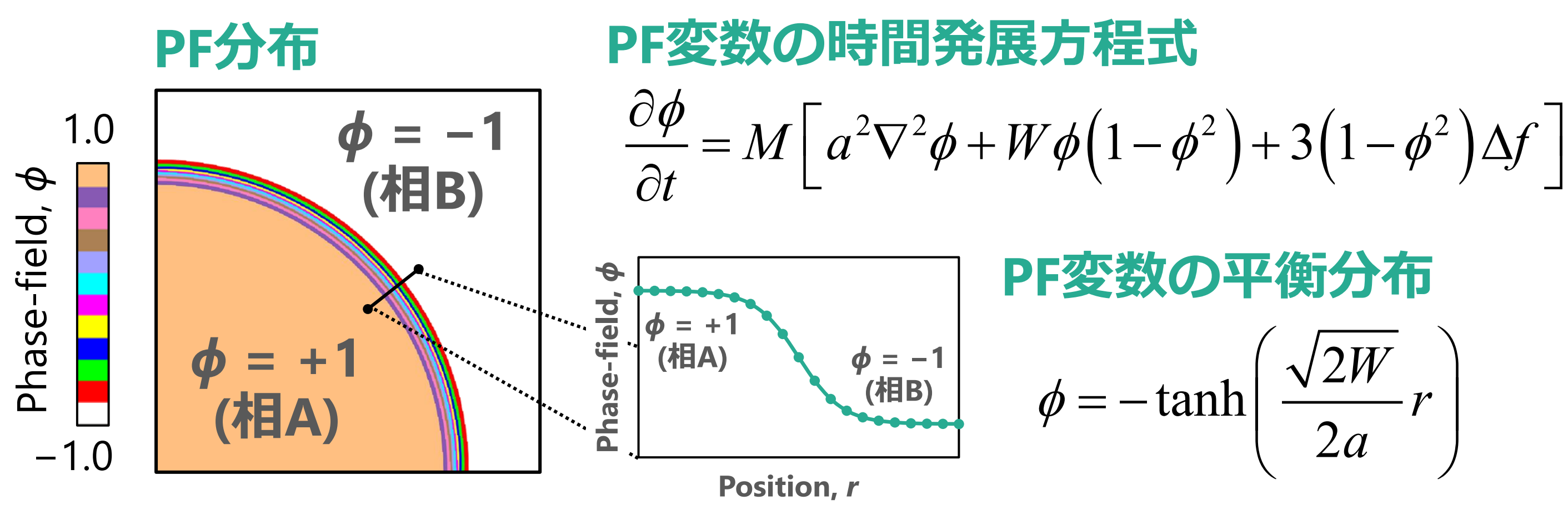
材料開発や防災計画のデジタルツイン構築に向けて、
短時間かつ高精度に現象を再現可能な
シミュレーション手法が求められている。



S. Sakane, T. Aoki, T. Takaki, Comp. Mater. Sci. 211 (2022) 111542.

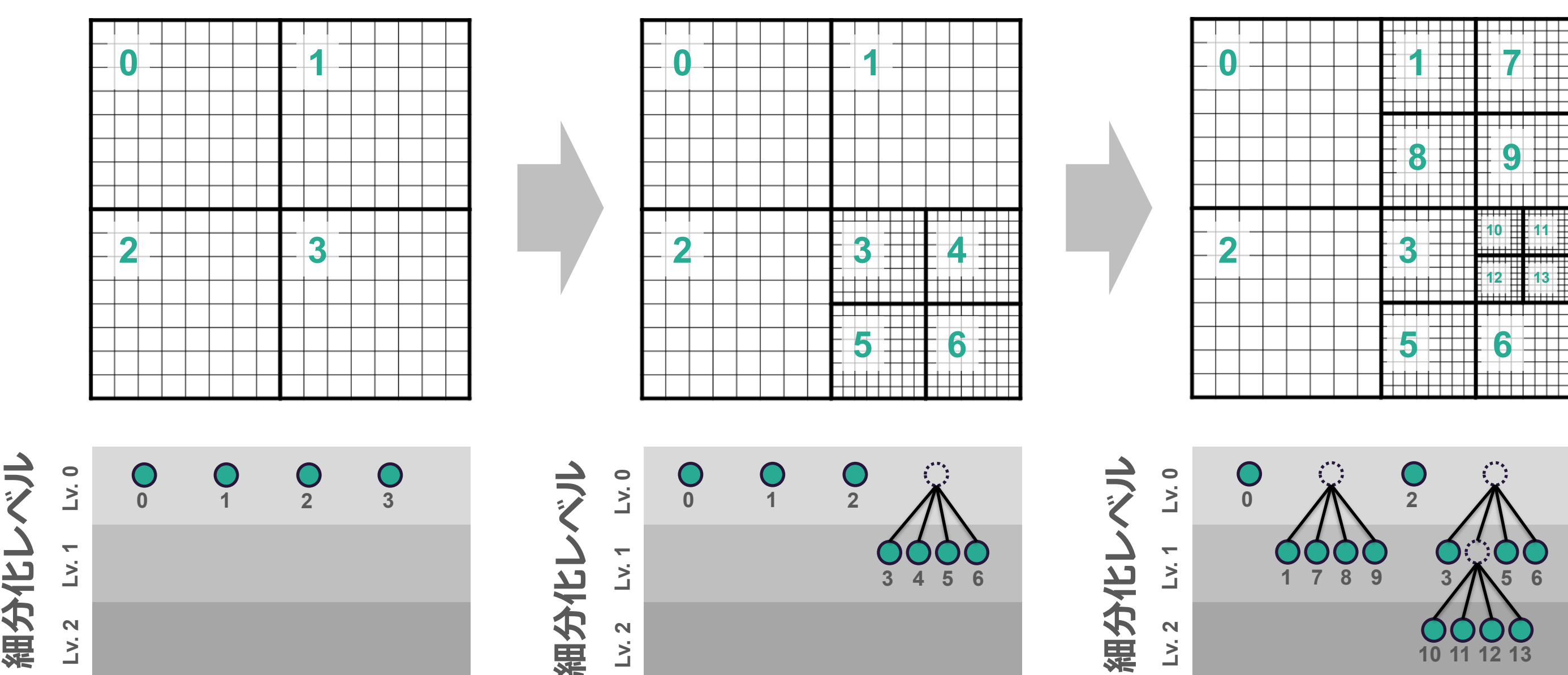
上記自由境界問題の高精度解法であるPF法は計算コストが高く、大規模計算に課題がある。ミクロな界面形状を直接取り扱ったマクロスケールPF計算による自由境界問題のクロススケール計算実現に向けて計算高速化に取り組む。

フェーズフィールド (Phase-field : PF) 法

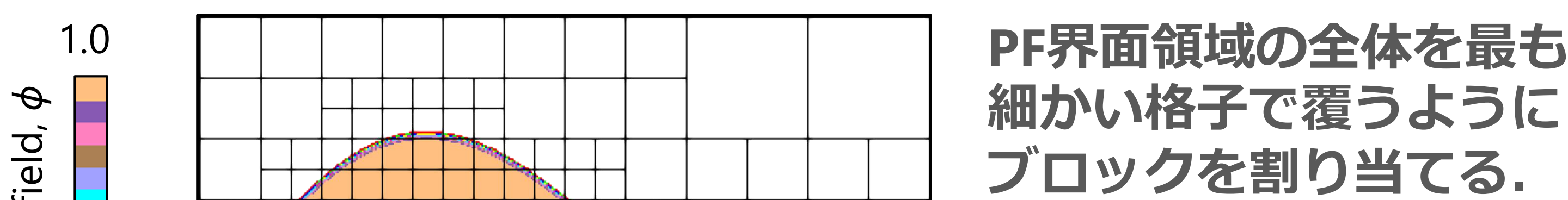


適合格子細分化 (Adaptive mesh refinement : AMR)

ブロック構造AMR

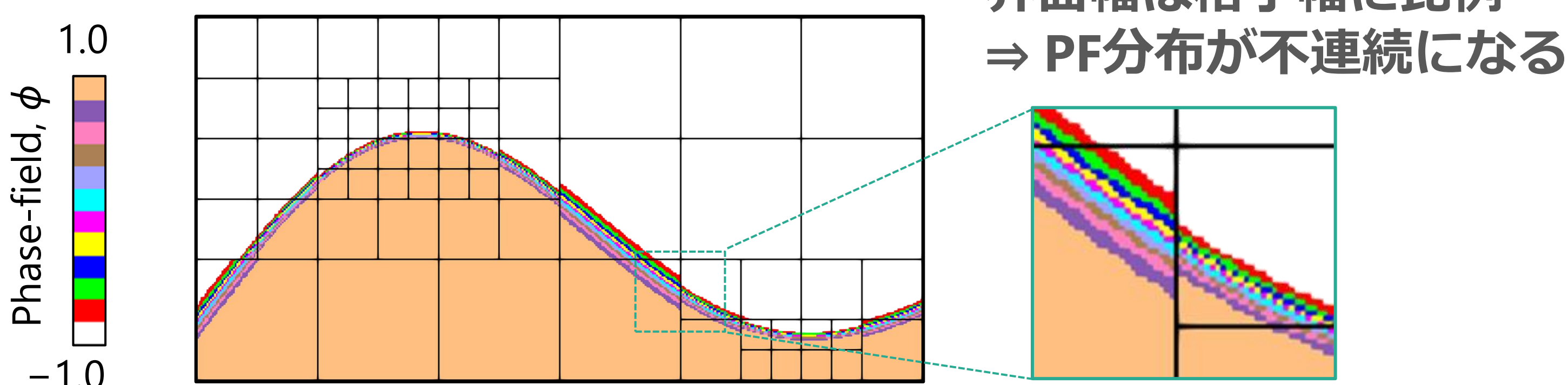


PF計算へのAMR実装 (従来法)



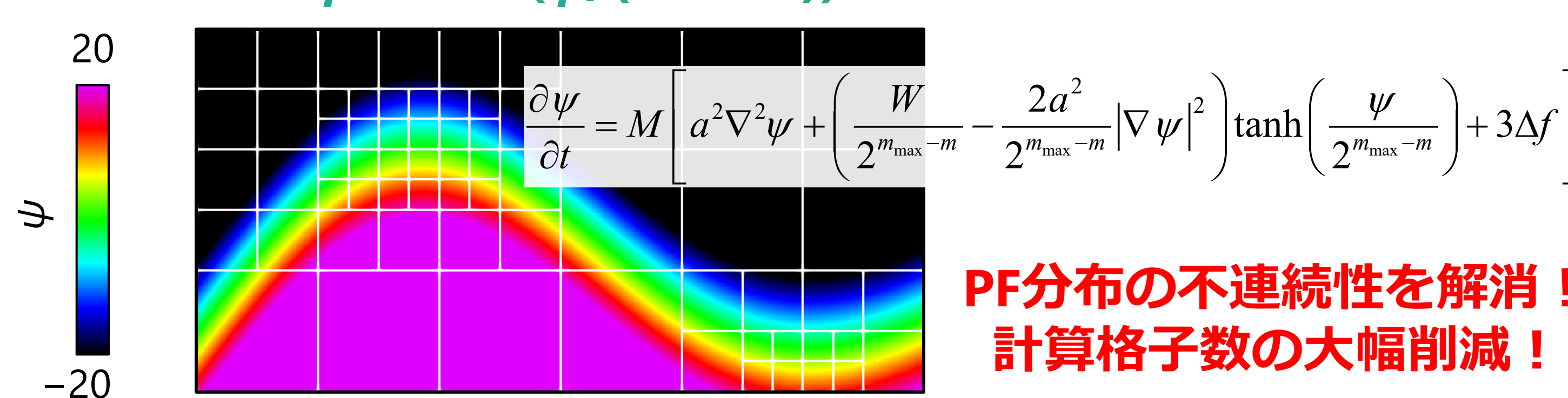
PF界面領域の全体を最も細かい格子で覆うようにブロックを割り当てる。
界面曲率の低い部分に過剰な格子細分化

界面曲率に応じた格子細分化 (提案法)



界面幅は格子幅に比例
⇒ PF分布が不連続になる

非線形変換 $\phi = \tanh(\psi/(2^{m_{\max}}-m))$



PF分布の不連続性を解消!
計算格子数の大幅削減!

GPUスーパーコンピュータ

東京科学大学TSUBAME4.0



https://www.isct.ac.jp/ja/news/20njm7qjp3

割当資源

4,000 ノード時間
(第1Q: 533 ノード時間)
(第2Q: 533 ノード時間)
(第3Q: 1866 ノード時間)
(第4Q: 1066 ノード時間)

複数GPU並列実装

CPUプログラミング : C/C++
GPUプログラミング : CUDA
ノード間通信 : OpenMPI

最先端共同HPC基盤施設 Miyabi-G



https://www.jcahpc.jp/index.html

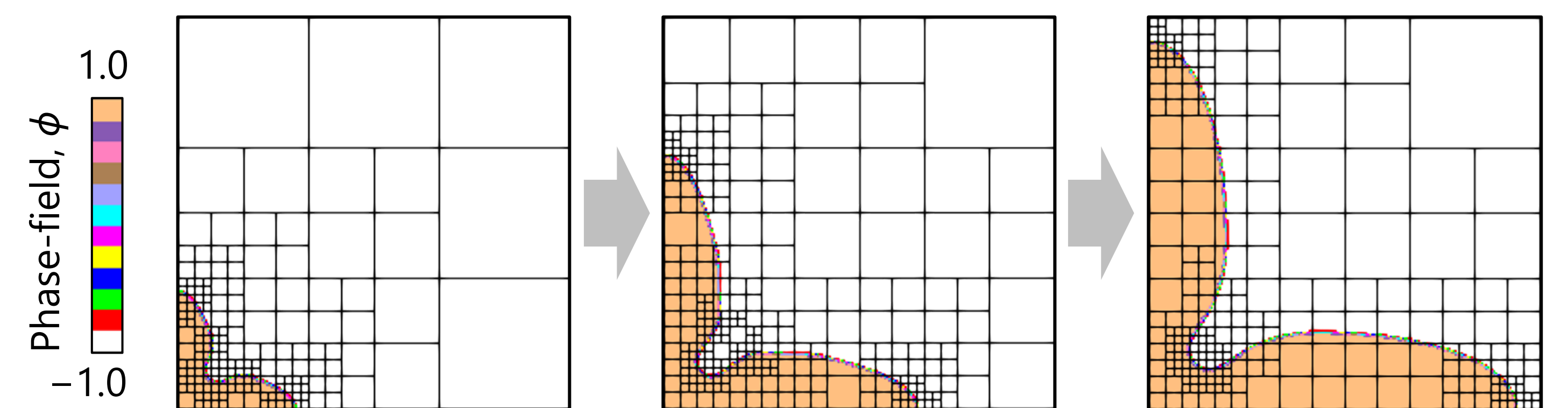
割当資源

41,200 ノード時間
(第1Q: 8,600 ノード時間)
(第2Q: 15,700 ノード時間)
(第3Q: 12,300 ノード時間)
(第4Q: 4,600 ノード時間)

研究計画 (2026年4月-2027年3月)

第1Q : アルゴリズム開発と基礎評価

界面曲率に応じたAMRのデンドライト成長問題への適用 (進行中)



自由表面流れの非線形変換PF格子ボルツマンモデル開発 (進行中)

第2Q : アプリケーション実装と並列性能評価

界面曲率に応じたAMRを適用した

- ・デンドライト凝固結晶の成長と運動
- ・水の自由表面流れ

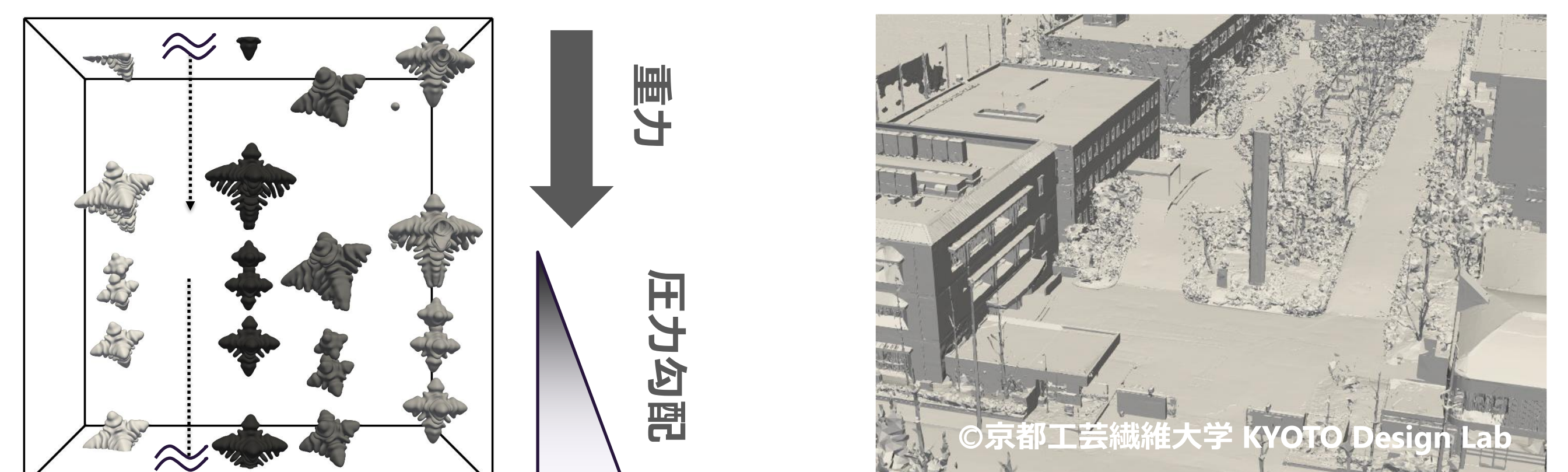
の複数GPU並列PF格子ボルツマン計算手法の実装

↓
強スケール・弱スケール評価

第3Q : 大規模計算の実施と実行性能評価

多数の凝固結晶群の
成長・運動の大規模計算

京都工芸繊維大学キャンパス
の高解像度浸水計算



計算の実行性能と妥当性を検証

第4Q : 研究総括

異なる問題に対して共通に利用可能な自由境界問題の
高性能計算フレームワークとして整備する。

その後の展望

実験との直接比較や現象解明, データ科学融合による自由境界問題のデジタルツイン構築に取り組む。