## jh140033-NA18

# 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

## 山中晃徳 (東京農工大学)

#### 概要

本研究では、平成25年度に開発したマルチフェーズフィールド法の複数GPU計算法を応用して、金属材料中の分散粒子による多結晶粒成長のピンニング効果や逆ピンニング効果を解明するための大規模シミュレーション方法を構築し、実用金属材料の力学的特性向上につながる有効な材料学的知見を得ることを目的としている。本最終報告書では、分散粒子を含む金属材料における多結晶粒成長を表現するマルチフェーズフィール(MPF)ドモデルを説明する。また、MPFモデルを東京工業大学のTSUBAME2.5スーパーコンピューターに実装し、大規模3次元シミュレーションを実施した結果について報告する。結果として、平成25年度に開発したプログラムの大幅変更なく、分散粒子を含む多結晶粒成長の大規模3次元シミュレーションをも実行可能であることを実証した。

## 1. 共同研究に関する情報

## (1) 共同研究を実施した拠点名

東京工業大学学術国際情報センター

## (2) 共同研究分野

超大規模数值計算系応用分野

## 参加研究者の役割分担

参加研究者は、東京農工大学から山中晃徳と同大学院工学府機械システム工学専攻 修士 1年である岡本成史が参加した。山中は、研究代表者として研究全体の統括を行った。岡本は、平成 25年度より本共同利用研究に従事しており、マルチフェーズフィールド法の GPU 計算プログラムの開発および東京工業大学のスーパーコンピューターTSUBAME2.5への実装を担当し、大学院生ながら重要な役割を果たした。

一方、東京工業大学からは、副代表者として 青木尊之教授、下川辺隆史助教が参加した。下 川辺助教は、TSUBAME2.5 への実装評価手法や 大規模計算のためのプログラムチューニング、 特に GPU のオンボードメモリアクセスのチュ ーニュングを担当した。青木教授は、超高速化 のためのノード間チューニングを担当した。

## 2. 研究の目的と意義

背景:研究代表者は、これまでマルチフェーズフィールド法を主な計算ツールとして使用し、 鉄鋼材料やアルミニウム合金などの金属材料の性能を飛躍的に向上させるための材料学的知見を提供しうる材料シミュレーション法を開発することを目的に研究を行ってきた。

鉄鋼材料やアルミニウム合金は、日本の主要 工業製品である自動車のボディ部材などに、非 常に広範に使用されている。最近では、地球環 境問題や省エネルギー問題の解決のために、ハ イブリッド自動車が普及してきているが、さら なる燃費向上のために、従来よりも高強度かつ 軽量(薄い)な高強度鋼板やアルミニウム合金 板材を開発し、それを自動車車体に適用するこ とで車体のさらなる軽量化を達成することが求 められている。

上記を可能とする金属板材をより効率的に低コストで開発するために、材料製造プロセスにおいて材料中に形成する 10<sup>-6</sup> メートルオーダーのミクロ組織(結晶粒や析出物)の 3 次元分布や形態を数値シミュレーションで高精度に予測する技術が必要とされており、世界的にも激しい研究競争となっている。そのなかで、マルチフェーズフィールド法は、実用金属材料の多結

晶組織の形成過程の3次元シミュレーションを 行う計算方法のうち、最も有力な方法として注 目されている。しかしながら、マルチフェーズ フィールド法は、非線形項を含んだ複数の偏微 分方程式を解く必要があり、かつ、メモリアク セス律速な計算のため3次元シミュレーション には非常に膨大な計算コストを必要とする。

そのため、平成 25 年度までの本共同利用研究において、マルチフェーズフィールド法の大規模 3 次元シミュレーションを可能とする複数 GPU 計算方法を開発した。また、開発した計算方法を東京工業大学のスーパーコンピューター TSUBAME2.5 に実装し、実行性能評価を行った結果、良好なスケーリング性能が得られることを実証してきた。

目的:本年度の研究では、平成25年度に開発したマルチフェーズフィールド法の大規模複数GPU計算法を応用し、実際に金属材料の特性向上につながる有効な材料学的知見を得ることを目指した。具体的な研究対象としては、微細な分散粒子が存在する金属材料中での多結晶粒成長とし、分散粒子による結晶粒成長のピンニング効果(抑制効果)や逆ピンニング効果(促進効果)のシミュレーションを実施し、これらの現象を解明することを目的とした。

意義:現在、鉄鋼メーカーや軽金属メーカーでは、材料中に分散粒子を形成させることで、金属材料の降伏強度を決定づける最大の因子である結晶粒サイズを精緻に制御している。最新の材料組織制御技術を用いれば、分散粒子の形成位置やサイズを高精度に制御可能であると言える。しかしながら、所望の力学特性を材料に発現させるための分散粒子の最適な形成位置等を決定することは、膨大な数の実験回数を必必を決定する。したがって、マルチフェーズフィールド法を用いて、結晶粒サイズに及ぼす分散粒子のサイズ・体積分率・分布状態の影響を高精度に予測可能となれば、現在の材料組織制御技術を一段と向上でき、材料開発期間の短縮、試験コストの削減に大きく貢献できる。これは、ま

すます国際競争が激しくなる材料分野において 大きな武器となると期待できる。

## 3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

マルチフェーズフィールド法は、鉄鋼材料やアルミニウム合金のみならず、極めて多岐にわたる実用材料の組織制御や開発に、現在最も有効な数値シミュレーション方法として国内はもちろん世界的にも注目されている。したがって、マルチフェーズフィールド法の超高速・超大規模計算手法を確立することは、日本の強みである材料開発の国際競争において、今後も世界のイニシアティブを握るうえで、非常に大きな意義があると考える。事実として、2011年のゴードンベル賞受賞以来、世界の主要研究機関でフェーズフィールド法の GPU 計算が盛んに実施されるようになってきており、マルチフェーズフィールド法の大規模 GPU 計算技術においてアドバンテージを示しておく必要がある。

しかしながら、TSUBAME2.5のような世界トップクラスの GPU スパコンを用いた大規模計算を実施し、優れた実行性能を得るためには、使用するスーパーコンピューターの特性の理解と様々な計算技術ノウハウを必要とする。特に、研究代表者のように学外者にとって、それは研究を実施するうえで、非常に大きな壁となる。本共同研究課題を通じて、GPUを用いた高性能計算のエキスパートである青木尊之教授と下川辺助教と共同研究を行うことは、効率的に研究を進め、優れた研究成果を得るうえで非常に大きな意義がある。

## 4. 前年度までに得られた研究成果の概要

平成 25 年度は、マルチフェーズフィールド法を複数 GPU で高速計算するための計算技術を開発した。詳細は、「山中晃徳, 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 平成 25 年度共同研究最終報告書,(2014)」を参照されたい。特筆すべきは、マルチフェーズフィールドシミュレーションの計算と並列計算のためのデータ通信を非

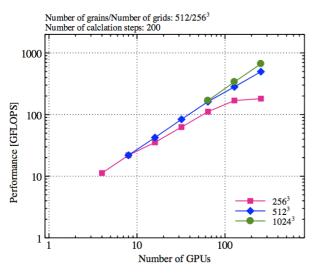


Fig. 1 Strong scaling of the multiple-GPU computing of polycrystalline grain growth simulation with and without the overlapping method for 256<sup>3</sup>, 512<sup>3</sup> and 1024<sup>3</sup> grids on TSUBAME2.5 supercomputer.

同期に実行し、データ通信によるオーバーへッドを隠蔽するためのオーバーラッピング法を開発した点である。オーバーラッピング法の詳細は、文献(岡本成史,山中晃徳,下川辺隆史,青木尊之,マルチフェーズフィールド法による多結晶粒成長シミュレーションの複数 GPU 計算,日本計算工学会論文集,Vol.2013,(2013),p.20130018.)において論文発表した。

さらに、平成 25 年度の研究では、開発した計算 手 法 を 大 規 模 GPU スパコンで ある TSUBAME2.5 に実装し、金属材料中での多結晶 粒成長過程の大規模シミュレーションを行い、良好な強スケーリング(Fig. 1)および弱スケーリング性能(Fig. 2)を得られることを実証した。

## 5. 今年度の研究成果の詳細

## 5.1 分散粒子を含む材料における多結晶粒成長 挙動を表すマルチフェーズフィールドモデル

今年度(平成 26 年度)の主な研究成果は、平成 25 年度に開発したマルチフェーズフィールド法 の大規模 GPU 計算法を応用して、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 3 次元シミュレーションを実行可能としたことであ

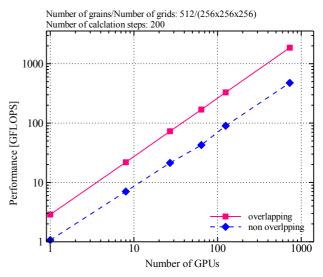


Fig. 2 Weak scalability of the multiple-GPU computing of polycrystalline grain growth simulation on TSUBAME 2.5 supercomputer.

る。この成果は中間報告時のやや遅れた進捗状況を考慮すれば、研究を大きく進展させることができたと評価できる。以後、結果を詳細に説明するために、今年度に使用したマルチフェーズフィールド法の方程式系を説明する。

一般にマルチフェーズフィールド法では、N個の結晶粒で構成される材料の持つ全自由エネルギーを次式の Ginzburg-Landau 型の自由エネルギー汎関数で表す。

$$G = \int_{V} \left[ \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=i+1}^{N} \left( W_{ij} \phi_{i} \phi_{j} \right) + \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=i+1}^{N} \left( -\frac{a_{ij}}{2} \nabla \phi_{i} \cdot \nabla \phi_{j} \right) + g_{\text{chem}} \right] dV$$

$$(1)$$

ここで、右辺の被積分項の第 3 項は、系の化学的自由エネルギーを表している。 $\phi_i$  は結晶粒 i ( $i=1\sim N$ )の局所的な体積分率を表す変数であり、場所と時間の関数である。また、マルチフェーズフィールド法では、界面が有限の長さを有するものとし、界面領域内では $\phi_i$  は 0 から 1 へと滑らかに変化するものと定義される。

また、 $g_{chem}$  は材料の化学的自由エネルギーを表しており、本研究では次式により表現する。

$$g_{chem} = \sum_{i}^{N} \phi_{i} f_{i}(c_{i}) \tag{2}$$

ここで、 $f_i(c_i)$ は多結晶構造をなす母相と分散粒

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 平成 26 年度共同研究 最終報告書 2015 年 5 月

子の化学的自由エネルギーである。 $c_i$  は、母相や分散粒子内のそれぞれで定義される溶質濃度変数であり、i は母相もしくは分散粒子の番号を表す。 $c_i$  を用いて、任意座標における溶質濃度変数は次式で定義する。

$$c = \sum_{i}^{N} \phi_i c_i \tag{3}$$

本研究では温度一定の条件を想定しているため、式(2)の $f_i(c_i)$ は次式のような簡便な二次関数で表す。

$$f_i = K_k \left( c_i - a_k \right)^2 \tag{4}$$

ここで、 $K_k$ は母相や分散粒子の安定性を決定するパラメータ、 $a_k$ は母相や分散粒子の平衡状態での溶質濃度である。

式(1)の全自由エネルギーの時間に対する単調減少を仮定すると、 $\phi_i$ の時間発展方程式は、以下の式で与えられる。

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -\frac{2}{n} \sum_{j=1}^n M_{ij}^{\phi} \left[ \sum_{k=1}^n \left\{ \left( W_{ik} - W_{jk} \right) \phi_k + \frac{1}{2} \left( a_{ik}^2 - a_{jk}^2 \right) \nabla^2 \phi_k \right\} \right. \\
\left. + f_i \left( c_i \right) - f_j \left( c_j \right) - \left( c_i - c_j \right) \mu \right] \tag{5}$$

ここで、μは化学ポテシャルであり、次式で表される擬平衡条件を仮定して定義する。

$$\mu = \frac{\partial f_1}{\partial c_1} = \frac{\partial f_2}{\partial c_2} = \dots = \frac{\partial f_N}{\partial c_N}$$
 (6)

一方、溶質濃度変数 c の時間発展方程式、すなわち非線形拡散方程式は、次式で表される。

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot M_c \nabla \frac{\delta G}{\delta c}$$

$$= \nabla \cdot D \sum_{i}^{N} \phi_i \nabla c_i$$
(7)

式(7)については、 $c_i$ の計算方法が若干異なるものの平成 25 年度に開発したプログラムをほぼ現状のまま利用できた。

以上で示したように、また中間報告時にも述べたように、本研究で用いたマルチフェーズフィールドモデルは、昨年度に開発したマルチフェーズフィールドモデルのプログラムに若干の変更を加えるだけで対応可能であることがわか

った

数値シミュレーションにおいては、式(5)および式(7)の方程式を差分法で離散化し、3次元規則差分格子上でステンシル計算を行った。本研究では、空間微分については二次精度の有限差分法、時間積分には、一次精度のオイラー法で離散化した。

## 5.2 シミュレーション結果

## 5.2.1 多結晶粒成長におけるピンニング効果

今年度に構築したマルチフェーズフィールドモデルを用いて、分散粒子による多結晶粒成長のピンニング効果(抑制効果)を再現できるかを確認するために、小規模な3次元シミュレーションを行った(岡本成史、日本鉄鋼協会第169回春季講演大会学生ポスターセッション、学生ポスターセッションアブストラクト集, p. 36.)。

計算領域の大きさは  $25.6 \times 25.6 \times 25.6 \text{ }\mu\text{m}^3$  とし、 $256^3$  個の規則差分格子で分割した。初期状態として、1638 個の母相の多結晶組織中に析出物をランダムに配置した。母相および析出物中の初期濃度は、それぞれの平衡濃度とした。析出物の形状は、半径  $2.8 \times 10^{-7}$  m の球形状とし、その体積分率  $f_p = 0.06$  および 0.1 と変化させた。境界条件として、周期境界条件を用いた。

Fig. 3 に、析出物の体積分率  $f_p$  = 0.06 および 0.1 の場合の多結晶粒の時間変化を示す。図中の小さい球が析出物、黒の実線が結晶粒界を表している。どちらの条件においても、時間とともに母相の結晶粒が粗大化している点は昨年度までのシミュレーション結果と変わらないが、その過程で析出物により粒界移動が妨げられるピンニング効果を再現できていることを確認した。また、Fig. 3(b)に示すように、析出物の体積分率が大きい方が、母相の結晶成長は抑制され、結晶粒径は小さくなることも実験的知見を再現できていることもわかる。

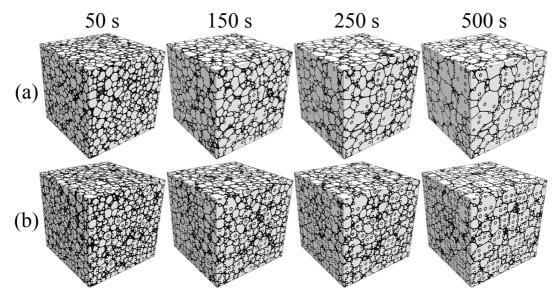


Fig. 3 Polycrystalline grain growth behavior for different the volume fraction of particles: (a) 0.06 and (b) 0.1. The number of computational grids was 256<sup>3</sup>.

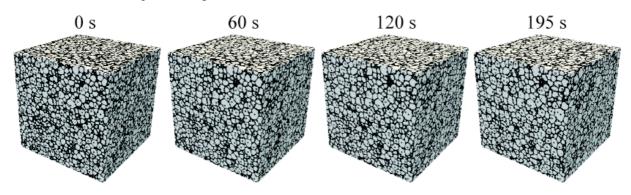


Fig. 4 Polycrystalline grain growth behavior simulated using 512<sup>3</sup> computational grids and 128 GPUs.

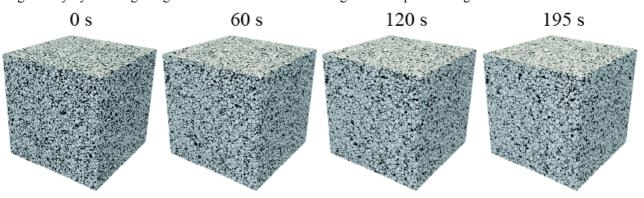


Fig. 5 Polycrystalline grain growth behavior simulated using 1024<sup>3</sup> computational grids and 512 GPUs.

# 5.2.2 TSUBAME2.5 を用いた大規模3次元シミュレーション結果

今年度の研究で開発したマルチフェーズフィールドモデルにより多結晶粒成長のピンニング効果を再現できることを確認したのち、東京工業大学学術国際情報センターの GPU スーパーコンピュ

ーターTSUBAME2.5 に実装し、大規模 3 次元シミュレーションを実施した。

まずは、計算領域の大きさを 51.2×51.2×51.2×51.2 μm³ とし、512³ 個の規則差分格子を用いた場合 の大規模シミュレーション結果を示す。本シミ ュレーションでは、初期状態として 12468 個の 母相の結晶粒と 44840 個の析出物をランダムに 配置した。このときの析出物の体積分率は $f_p$ = 0.06 である。Fig. 4 に、シミュレーションで得ら れた、195 秒間の多結晶粒成長挙動を示す。こ のシミュレーションにおいては、128 GPU を使 用し、約5時間の実行時間を要した。さらに、 計算領域の大きさを 102.4 × 102.4 × 102.4 μm³ と し、10243個の規則差分格子を用いた場合の超大 規模シミュレーションも実施した。本シミュレ ーションでは、初期状態において 85290 個の母 相の結晶粒と 358722 個もの析出物を考慮する ことが可能となった。Fig. 5 にシミュレーション で得られた多結晶粒成長挙動を示す。本シミュ レーションにおいては、512GPU を用いて約 24 時間の実行時間を要した. Fig. 4 および Fig. 5 に 示したどちらの結果においても、析出物により 粒界移動が妨げられるピンニング効果を再現でき ており、1024<sup>3</sup>格子というマルチフェーズフィール ドシミュレーションとしては、世界でも類を見な い大規模なシミュレーションが可能となった。

## 6. 今年度の進捗状況と今後の展望

平成26年度の研究では、平成25年度から開 発してきたマルチフェーズフィールド法の大規 模 GPU 計算法を用いて、分散粒子による結晶粒 成長のピンニング効果や逆ピンニング効果を解 明するためのマルチフェーズフィールドモデル の検討と TSUBAME2.5 上での大規模シミュレ ーションを達成した。中間報告時と比較して、 予想を上回る研究成果が得られたと考えている。 ただし、本研究の目標である、実際に金属材料 の特性向上につながる有効な材料学的知見を得 るためには、ピンニング効果のみならず逆ピン ニング効果のシミュレーション、さらには析出 物が可動な条件における粒成長挙動のシミュレ ーションも重要な課題となる。これらの課題に ついては、平成27年度の研究においてすでに着 手しており、鉄鋼メーカーの研究者の協力を得 て、実際の材料組織制御技術に有効な知見を得 ることを目指す。

## 7. 研究成果リスト

## (1) 学術論文

なし

## (2) 国際会議プロシーディングス

• <u>A. Yamanaka, M. Okamoto, T. Shimokawabe, T. Aoki, Large Scale 3D Multi-phase-field Simulation of Microstructure Evolution using TSUBAME2.5 GPU-supercomputer, Proceedings of International Congress on 3D Materials Science 2014, (2014), CD-ROM.</u>

## (3) 国際会議発表

- Masashi Okamoto, Akinori Yamanaka, Takashi Shimokawabe, Takayuki Aoki, Extreme Large-scale Multi-Phase-Field Simulation of Polycrystalline Grain Growth using TSUBAME2.5 GPU-Supercomputer, 11th World Congress on Computational Mechanics, Barcelona, Spain, July 20 25, 2014.
- Akinori Yamanaka, Masashi Okamoto, Takashi Shimokawabe, Takayuki Aoki, Large Scale 3D Multi-phase-field Simulation of Microstructure Evolution using TSUBAME2.5 GPU-supercomputer, Proceedings of International Congress on 3D Materials Science 2014, Annecy, France, June 29 July 2, 2014.
- <u>Akinori Yamanaka</u> and Sukeharu Nomoto, Simulation of Stress and Strain Partitioning in Dual-phase Steel using Multi-Phase-Field and Crystal Plasticity FFT Methods, 1st International Workshop on Software Solutions for ICME, Aachen, Germany, June 24 - 27, 2014.

## (4) 国内会議発表

- ・<u>岡本成史</u>, <u>山中晃徳</u>, <u>下川辺隆史</u>, <u>青木尊之</u>, GPUスパコンを用いたフェライト変態の大規模 マルチフェーズフィールドシミュレーション, 日本計算工学会第19回計算工学講演会, 広島国 際会議場, 2014年6月11-14日.
- ・<u>岡本成史</u>,マルチフェーズフィールド法を用いた多結晶粒成長におけるピンニング効果の大規模計算,日本鉄鋼協会第 169 回春季講演大会

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 平成 26 年度共同研究 最終報告書 2015 年 5 月 学生 ポスターセッション, 2015 年 3 月 18-20 日.

## (5) その他(特許,プレス発表,著書等)

- ・平成 26 年 8 月 15 日付 日刊工業新聞 16 面 「深層断面」にて、TSUBAME2.5 を用いたマル チフェーズフィールド法の大規模計算が紹介。
- ・平成27年3月19日,日本鉄鋼協会第169回春季講演大会学生ポスターセッション努力賞, 受賞者: 岡本成史,受賞発表題目:マルチフェーズフィールド法を用いた多結晶粒成長における ピンニング効果の大規模計算.