

jh150014-NA10

フェーズフィールド法と分子動力学法による 大規模デンドライト成長シミュレーション

高木 知弘 (京都工芸繊維大学)

GPU スパコン TSUBAME を用いた大規模フェーズフィールドシミュレーションにより、多結晶二元合金におけるデンドライト競合現象を評価し、典型的な凝固組織である柱状晶の形成メカニズム解明にアプローチする。ここで、大規模計算を更に効率的に行うために液相領域に粗な格子を用いる工夫を行う。加えて、分子動力学法による複数 GPU 大規模凝固シミュレーション手法を確立し、分子動力学法による超大規模凝固シミュレーションを可能とする。

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

下川辺 隆史 (東京工業大学・学術国際情報センター)

並列 GPU コードのチューニング・大規模データ処理&可視化技術サポート

(2) 共同研究分野

- 超大規模数値計算系応用分野
- 超大規模データ処理系応用分野
- 超大容量ネットワーク技術分野
- 超大規模情報システム関連研究分野

坂根 慎治 (京都工芸繊維大学・工芸科学研究科)

GPU 並列コーディング・フェーズフィールド計算実行・データ処理&考察・論文執筆

(3) 参加研究者の役割分担

高木 知弘 (京都工芸繊維大学・機械工学系)
研究全体の統括・GPU 並列コーディング・フェーズフィールド計算実行・データ処理&考察・論文執筆

青木 尊之 (東京工業大学・学術国際情報センター)
大規模 GPU 計算の統括・並列 GPU コードのチューニング

大野 宗一 (北海道大学・大学院工学研究院)
データ整理・データ考察・論文執筆補助

澁田 靖 (東京大学・大学院工学系研究科)
分子力学計算の実行・データ整理&考察・論文執筆

2. 研究の目的と意義

金属材料製品の開発において、凝固組織を高精度に予測および制御することは、製品の軽量化や高機能化において極めて重要である。一般的な凝固組織は、デンドライトと呼ばれる樹枝状結晶の成長によって形成されるため、凝固組織を精度良く評価するためにはデンドライトを再現することが必要である。デンドライトを精度良く再現する唯一の連続体モデルはフェーズフィールド法であるが、フェーズフィールド法は拡散界面モデルであるため、計算コストが高くなる問題がある。加えて、凝固組織は多くのデンドライトの相互作用によって形成される。このため、HPC 技術の確立が不可欠である。また、フェーズフィールド法は現象論モデルであり、物性値や界面異方性のモデリングを必要とする。そこで、原子系シミュレーション手法との連成技術の開発により現状を打破

することが課題である。

上記のような背景を受け、本研究では GPU スパコン TSUBAME を用いた大規模フェーズフィールドシミュレーションにより、二元合金多結晶体における dendrite 競合現象を評価し、典型的な凝固組織である柱状晶の形成メカニズム解明を試みる。ここで、大規模計算をこれまで以上に効率的に行うため、液相領域に粗い格子を用いる手法を適用する。加えて、複数 GPU による分子動力学法による大規模凝固シミュレーション手法を確立し、自発的核生成から凝固および粒成長までの一貫したシミュレーションを可能とする。

3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

本研究は、フェーズフィールド法、分子動力学法、材料工学、超大規模計算の専門家のコラボレーションによって進められており、本共同研究ならではの世界的研究を可能とする極めて意義深い研究である。当拠点公募型研究は 3 年目になるが、本研究成果は国内外で高く評価されており、この研究を継続し、当該分野で世界的なイニシアチブを取り続けることに大きな意義がある。また、今年度から新規に大規模分子動力学法の研究を取り入れ、連続体モデルと原子系モデルの新しい形のマルチスケール連成モデルの構築を目指す。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

本一連の研究は、平成 23 年のゴードンベル賞の継続研究であり、本共同研究は平成 25 年度から開始し、今年度で 3 年目となる。平成 25 年度（初年度）は、結果が界面幅に依存しない二元合金凝固問題に対する定量的フェーズフィールドモデルを GPU 実装し、TSUBAME による大規模計算を可能とした。平成 26 年度（2 年目）は、コードのチューニングを行いフェーズフィールド法による本格的な大規模計算に着手した。これまでに得られた主な成果は下記の通りである。

4.1 2 次元二結晶競合成長シミュレーション

図 1 に示すような Al-Cu 二元合金の一方方向凝固過程における二結晶競合成長シミュレーションを

行い、熱流方向 (y 方向) から傾いて成長する UO (unfavorably oriented) dendrite が、FO (favorably oriented) dendrite を淘汰する新しい淘汰現象のメカニズムを解明した [Acta Mater. 81 (2014) 272-283, JOM 67 (2015) 1793-1804]。この計算は 2 次元ではあるが、通常の CPU 計算では領域・時間とも困難な計算であり、TSUBAME の利用により極めて効率的に結果を出すことができた。

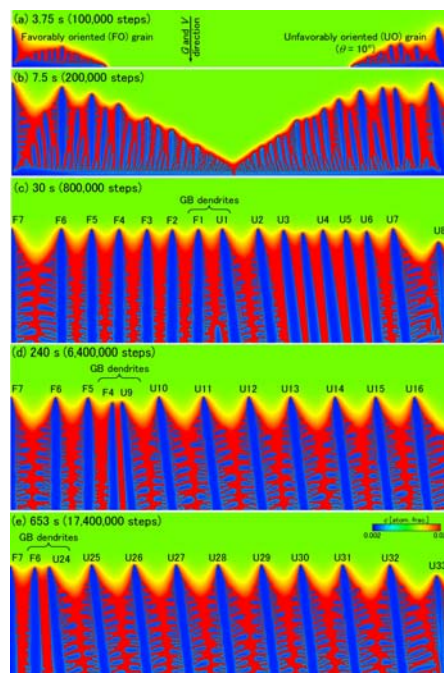


Fig. 1 Two-dimensional bicrystal dendrite competitive growth simulation. [JOM 67 (2015) 1793-1804]

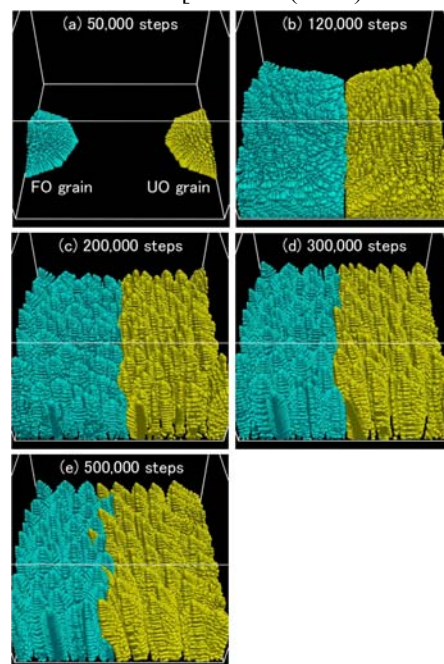


Fig. 2 Three-dimensional bicrystal dendrite competitive growth simulation. [JOM 67 (2015) 1793-1804]

4.2 3次元二結晶競合成長シミュレーション

図 2 は、3 次元 2 結晶競合成長シミュレーションの結果である[JOM 67 (2015) 1793-1804]. 図 1 の 3 次元バージョンである. 3 次元では粒界がジグザグになり, また図 1 の 2 次元同様, 条件によって UO デンドライトが FO デンドライトを淘汰する現象を確認することができた. このような計算において UO デンドライトの傾きを変えた 3 通りの計算を行った[ISIJ Int. 56 (2016) in print].

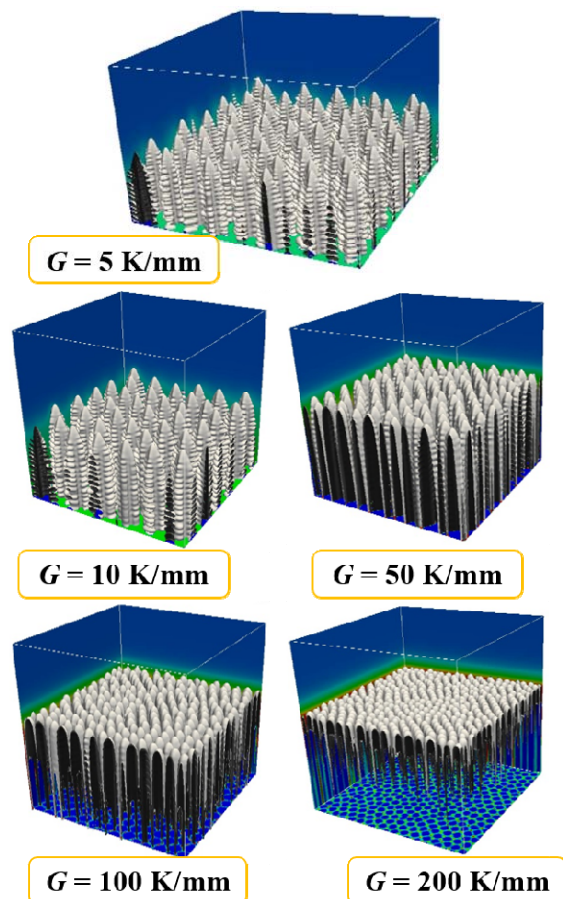


Fig. 3 Three-dimensional directional solidification of single crystal.

4.3 3次元単結晶デンドライト配向挙動評価

図 3 は、単結晶の一方向凝固過程におけるデンドライト競合成長シミュレーションを、温度勾配を変化させて行った結果である. このシミュレーションは、温度勾配方向 (z 方向) 垂直断面内のデンドライト配向性のメカニズムを解明するために行った. Voronoi 分割と Deloney 三角分割によりデータ整理を行い, 六角形配列が安定配列であることを明らかにした. 現在論文を投稿中である.

5. 今年度の研究成果の詳細

昨年度までは単結晶・二結晶のデンドライト競合現象を対象とした. 今年度は、多結晶におけるデンドライト競合成長現象を対象とし, より現実的な柱状晶の形成メカニズム解明を目的に研究を進めた. また, 分子動力学法を用いた単一 GPU による系統的シミュレーションを行い, 大規模並列コードを作成した. 詳細は下記の通りである.

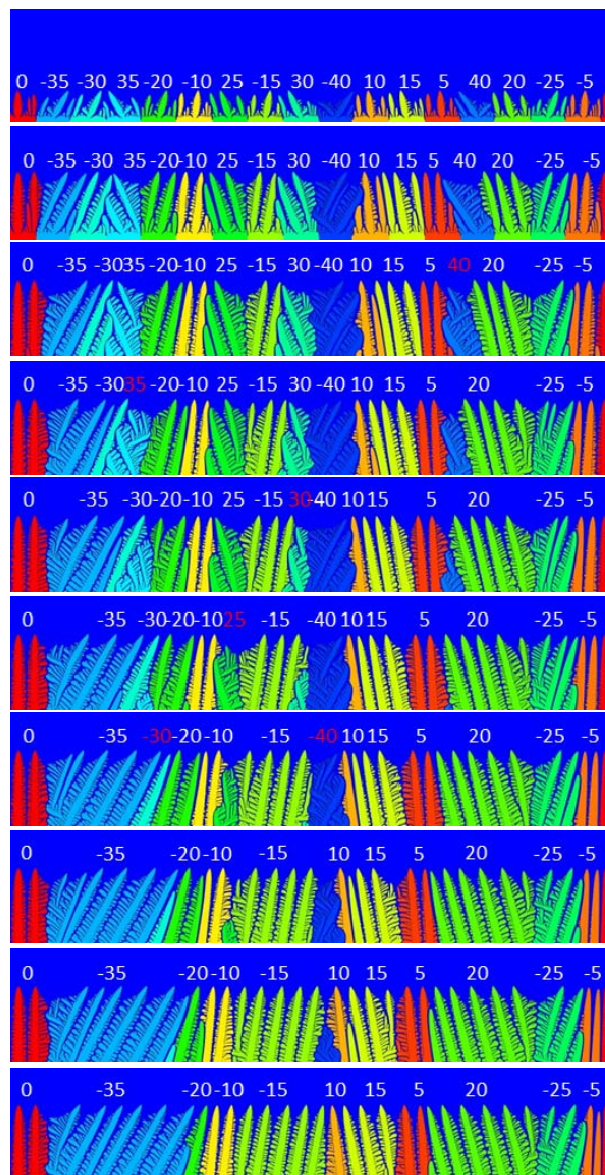


Fig. 4 Two-dimensional polycrystal directional solidification simulation. [J. Cryst. Growth 442 (2016) 14-24]

5.1 2次元多結晶デンドライト競合成長

図 4 は、2 次元多結晶デンドライト競合成長シミュレーション結果の一例である. 計算領域下端

部に 17 個の結晶方位の異なる核を配置し、そこから一方向 (y 方向) に温度勾配を与え dendrite 成長させている。2 次元計算ではあるが、8,192 × 1,536 格子を用い 2×10^7 ステップの計算を 8 GPU 並列で 2 日間行っている。この計算を温度勾配 4 通り、初期核配置を 5 通り変化させ、全部で 20 回の計算を行った。この結果、必ずしも温度勾配方向に成長する dendrite が生き残るわけではないことを示し、詳細なメカニズムを考察した。この結果は Journal of Crystal Growth [J. Cryst. Growth 442 (2016) 14-24] に掲載された。

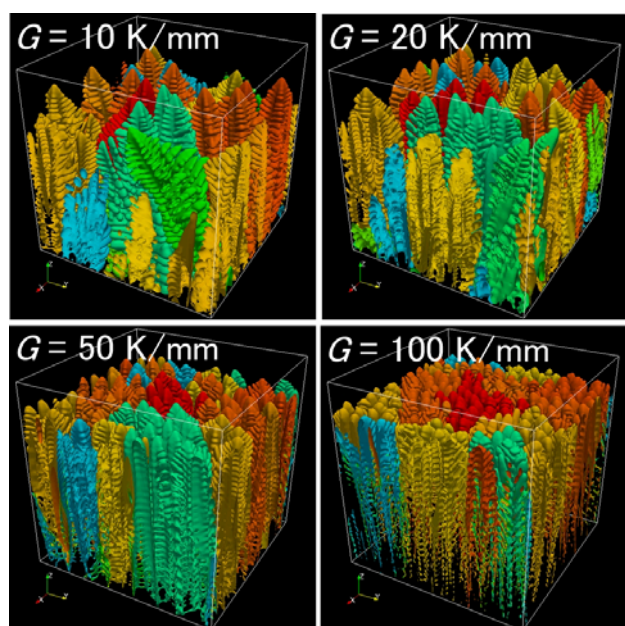


Fig. 5 Three-dimensional polycrystal directional solidification simulations.

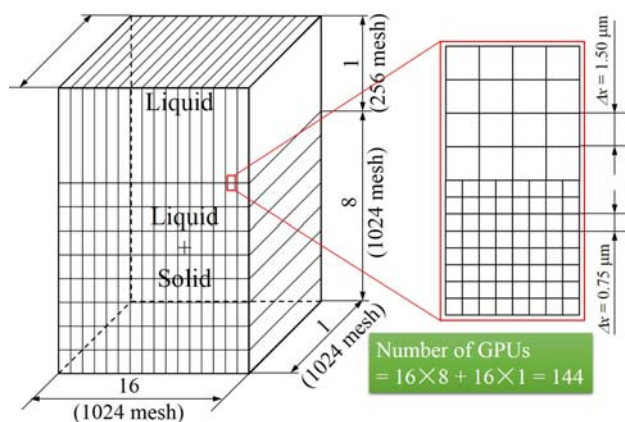


Fig. 6 Domain subdivision and mesh division for phase-field directional solidification simulation

5.2 3次元多結晶 dendrite 競合成長

図 5 は、3 次元多結晶 dendrite 競合成長シミュレーション結果である。図 5 は、 $1,024 \times 1,024 \times 1,024$ 格子領域を可視化しており、実際の計算では、この上部に更に 512 格子分の領域を設けている。図 2 や図 3 の昨年度までの計算では、全領域に同じサイズの格子を用いる計算を行っていたが、液相領域は溶質拡散のみを解けばよく、溶質濃度はフェーズフィールドに比べると勾配が非常に小さく、液相領域では粗い格子を用いることができる。そこで今年度は、液相領域に粗い格子を用い、計算を効率化できるようにコードをチューニングした。領域分割と格子サイズの関係を図 6 に示す。図 5 のシミュレーションでは、可視化領域の上部に溶質拡散のみを解く $512\Delta x$ (Δx は最小格子サイズ) を設けているが、この領域の実際の格子サイズは $2\Delta x$ としており、実際は $1,024^3 + 512 \times 512 \times 256$ 個の格子で計算を行っている。このため、 $1,024 \times 1,024 \times 1,536$ の格子を用いる場合の 70% の格子数で同じ計算を可能としている。図 5 は 10^6 ステップ時の計算結果であり、温度勾配を 5 通り、初期核配置を 3 通り変化させ、全部で 15 回の計算をおこなった。現在データを整理中であり、近いうちに論文執筆を行いたいと考えている。

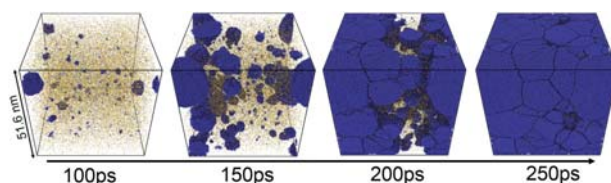
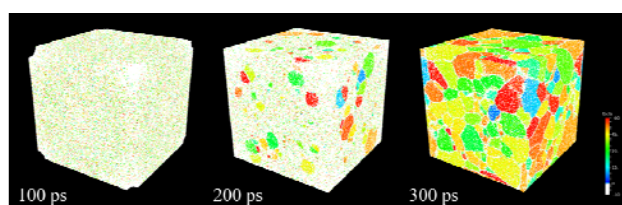


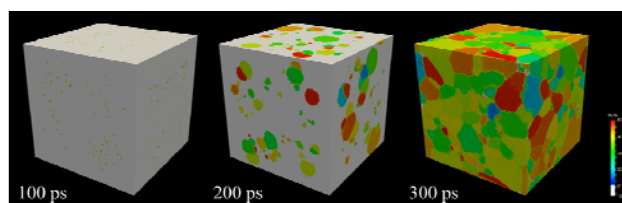
Fig. 7 Single GPU MD simulation of 12,454,560 atoms. [Acta Mater. 105 (2016) 328-337]

5.3 単一 GPU による大規模 MD 計算

単一 GPU 計算による 10^7 原子スケールの大規模計算を可能とし、過冷却融液からの自発的な核生成、多結晶凝固、粒成長の連続シミュレーションが可能であることを示した [Acta Mater. 105 (2016) 328-337].



(a) Atomic information



(b) Lattice information

Fig. 8 Large-scale MD simulation by parallel GPU computation.

5.4 MD の複数 GPU 並列コーディング

MD 計算を大規模かつ高速化するため、複数 GPU 並列コーディングを行った。また、計算が超大規模となるため、離散的原子情報を構造格子データに落とし込み可視化を容易にする方法(図8)、および Common Neighbor Analysis (CNA)による原子構造判定、また平均粒径や粒界方位差評価など、データ整理用コードも構築した。実際の計算では 10^7 原子スケールの計算を行った。現在データ整理と論文執筆中である。また、次年度からの粒成長計算における MD による多結晶粒成長計算とフェーズフィールド計算結果を比較するため、マルチフェーズフィールド法の高精度化も進めている [Comp. Mater. Sci. 112A (2016) 44-51, Comp. Mater. Sci. 120 (2016) 77-83].

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

フェーズフィールド法と分子動力学法とも、当初予定していた目的をほぼ達成することができた。ただし、分子動力学計算では当初予定していた dendrite 構造の再現よりインパクトの高い超大規模計算による自発的核生成からの凝固計算を優先させた。また、過年度のデータを整理し論文投稿も順調に行えた。この結果、一連の研究成果は業績欄にあるように 8 編のジャーナルに掲載され、

研究が順調に進んでいることを裏付けている。

7. 研究成果リスト

(1) 学術論文

T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Shimokawabe, T. Aoki, Large-scale phase-field studies of three-dimensional dendrite competitive growth at the converging grain boundary during directional solidification of a bicrystal binary alloy, *ISIJ International*, 56 (2016). (in print)

T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane, T. Shimokawabe, T. Aoki, Two-dimensional phase-field study of competitive grain growth during directional solidification of polycrystalline binary alloy, *Journal of Crystal Growth*, 442 (2016) 14-24.

E. Miyoshi, T. Takaki, Extended higher-order multi-phase-field model for three-dimensional anisotropic-grain-growth simulations, *Computational Materials Science*, 120 (2016) 77-83.

E. Miyoshi, T. Takaki, Validation of a novel higher-order multi-phase-field model for grain-growth simulations using anisotropic grain-boundary properties, *Computational Materials Science*, 112, Part A (2016) 44-51.

Y. Shibuta, S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Submicrometer-scale molecular dynamics simulation of nucleation and solidification from undercooled melt: Linkage between empirical interpretation and atomistic nature, *Acta Materialia*, 105 (2016) 328-337.

Y. Shibuta, K. Oguchi, T. Takaki, M. Ohno, Homogeneous nucleation and microstructure evolution in million-atom molecular dynamics simulation, *Scientific Reports* 5, 2015/08, 13534.

Y. Shibuta, M. Ohno, T. Takak, Solidification in a

Supercomputer: From Crystal Nuclei to Dendrite Assemblages, *JOM*, Volume 64, Issue 8, 2015/08, 1793-1804.

S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, T. Shimokawabe, T. Aoki, GPU-accelerated 3D phase-field simulations of dendrite competitive growth during directional solidification of binary alloy, *Materials Science and Engineering*, Vol. 84, 2015/06, 012063.

(2) 国際会議プロシーディングス

無し

(3) 国際会議発表

Y. Shibuta, S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Nucleation, Solidification and Grain Growth in Large-Scale Molecular Dynamics Simulation Performed on Graphics Processing Unit, 2015 MRS Fall Meeting & Exhibit, November 29-December 4, 2015, Boston, Massachusetts, USA.

E. Miyoshi, T. Takaki, Higher-order multi-phase field model for 3D polycrystalline-grain-growth simulations The 8th International Workshop on Modeling in Crystal Growth (IWMCG-8), November 15-18, 2015, Spa, Belgium.

Y. Shibuta, T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Large scale molecular dynamics simulation of solidification and microstructure evolution, The 8th International Workshop on Modeling in Crystal Growth (IWMCG-8), November 15-18, 2015, Spa, Belgium.

T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, S. Sakane, T. Shimokawabe, T. Aoki, Dendrite competitive growth by large-scale phase-field simulations using GPU supercomputer [Invited], The 3rd International Workshops on Advances in Computational Mechanics (IWACOM-III), October 12-14, 2015, Tokyo, Japan

T. Takaki, R. Rojas, M. Ohno, T. Shimokawabe, T. Aoki, GPU phase-field lattice Boltzmann simulations of growth and motion of binary alloy dendrite [invited], Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes (MCWASP XIV 2015), June 21-26, 2015, Awaji Yumebutai International Conference Center, Japan.

S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, T. Shimokawabe, T. Aoki, GPU-accelerated 3D phase-field simulations of dendrite competitive growth during directional solidification of binary alloy, Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes (MCWASP XIV 2015), June 21-26, 2015, Awaji Yumebutai International Conference Center, Japan.

(4) 国内会議発表

○高木 知弘, 坂根 慎治, 大野 宗一, 澁田 靖, 下川辺 隆史, 青木 尊之, 大規模 phase-field 計算による単結晶二元合金一方向凝固過程の一次枝配列挙動評価, 日本鉄鋼協会第 171 回春季講演大会, 2016/3/23-25.

○澁田 靖, 坂根 慎治, 高木 知弘, 大野宗一, 大規模分子動力学法シミュレーションによる凝固組織生成過程の考察, 日本鉄鋼協会第 171 回春季講演大会, 2016/3/23-25.

○三好 英輔, 高木 知弘, 粒界特性の方位差依存性を考慮した 2 次元粒成長の大規模 multi-phase-field 解析, 日本鉄鋼協会第 171 回春季講演大会, 2016/3/23-25.

○三好 英輔, 高木 知弘, 金属熱処理組織の高精度制御を目指した高次 multi-phase-field モデルの構築, 関西支部第 91 期定時総会講演会, 2016/3/11-12.

○坂根慎治, 高木知弘, 定量的 Phase-field 法によるデンドライト競合成長の GPU 超並列大規模シミュレーション, 第 1 回材料 WEEK,

2015/10/13-17.

○三次英輔, 高木知弘, 再結晶集合組織予測に向けた multi-phase-field 粒成長シミュレーション, 第 1 回材料 WEEK, 2015/10/13-17.

○三好英輔, 高木知弘, 高精度 3D 粒成長シミュレーションのための高次 multi-phase-field モデル, 日本機械学会第 28 回計算力学講演会, 2015/10/10-12.

○高木知弘, 坂根慎治, 大野宗一, 澁田靖, 下川辺隆史, 青木尊之, 二結晶二元合金におけるデンドライト競合成長の大規模 3D phase-field シミュレーション, 日本鉄鋼協会第 170 回秋季講演大会, 2015/9/16-18.

○澁田靖, 高木知弘, 坂根慎治, 大野宗一, 過冷融液からの核生成および凝固過程の大規模分子動力学法シミュレーション, 日本鉄鋼協会第 170 回秋季講演大会, 2015/9/16-18.

○三次英輔, 高木知弘, 高次 multi-phase-field モデルによる多結晶粒成長シミュレーション, 日本金属学会 2015 年秋季(157 回)講演会, 2015/9/16-9/18.

○三好英輔, 高木知弘, 異方性粒界特性を考慮した多結晶粒成長の GPU multi-phase-field シミュレーション, 第 20 回計算工学講演会, 2015/06/8-10.

(5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)

受賞

2015 年 6 月 24 日受賞

Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes XIV Best Poster Award

タイトル: GPU-accelerated 3D phase-field simulations of dendrite competitive growth during directional solidification of binary alloy

著者: S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, T. Shimokawabe, T. Aoki

国内招待講演

高木知弘, Phase-field 法と GPU スパコンによる大規模凝固シミュレーション, 日本機械学会北海道支部 特別講演会, 2015 年 12 月 10 日 (北海道大学)

高木知弘, TSUBAME2.5 を用いた大規模 phase-field シミュレーションによる凝固組織の高精度予測, GPU Technology Conference (GTC Japan 2015), 2015 年 9 月 18 日 (虎ノ門ヒルズフォーラム).

高木知弘, Phase-field 法の基礎と研究紹介, 第 27 回コンピュータショナル・マテリアルズ・デザインワークショップ, 2015 年 9 月 4 日 (大阪大学豊中キャンパス).

高木知弘, フェーズフィールド法の概要と材料組織解析の最先端, 公益社団法人 精密工学会 成形プラスチック歯車研究専門委員会 第 19 回講習会 2015 年 8 月 28 日 (機械振興会館).

高木知弘, GPU スパコンによるデンドライト成長の大規模 phase-field シミュレーション, 公益社団法人 日本鑄造工学会 鑄造 CAE 研究部会, 2015 年 8 月 4 日 (大阪産業大学 梅田サテライト).