

jh150017-NA13

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

山中晃徳（東京農工大学）

概要

本研究では、過去 2 年間の研究で開発したマルチフェーズフィールド(MPF)法の大規模 GPU 計算技術を用いて、可動分散粒子を含む金属材料中での多結晶粒成長の大規模 3 次元シミュレーションを行うことで、分散粒子による粒界ピンニング効果を考慮した高精度な結晶粒径予測を実現することを目的とした。今年度の研究では、可動分散粒子を含む系での多結晶粒成長の大規模 MPF シミュレーションの実行性能を TSUBAME2.5 で評価し、これまでと同様に良好な強スケーリング性能が得られることを示した。さらに、大規模 MPF シミュレーションに基づく数値実験により、分散粒子の半径および体積分率から平均結晶粒径を予測する式として工業的にも広く使用されている Smith-Zener 式の係数を、可動分散粒子を含む系に対して初めて導出することに成功した。

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

超大規模数値計算系応用分野

(3) 参加研究者の役割分担

研究体制はこれまでと同様であり、東京農工大学からは研究代表者として山中晃徳と同大学院修士 2 年である岡本成史が参加した。山中は、研究全体の統括およびマルチフェーズフィールドモデルの理論的考察・改良を担当した。岡本は、一昨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(MPF)法の CUDA Fortran プログラムの開発とデバッグ、GPU と CPU によるオーバーラッピング計算のアルゴリズムの改良、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て頂いていた。下川辺助教には、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を担当して頂いていた。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て頂いていた。

2. 研究の目的と意義

省エネルギー社会の実現、地球温暖化問題の解決のために、ハイブリッド自動車等のさらなる燃費向上や CO2 排出削減が求められている。そのため技術課題として、自動車車体の軽量化が掲げられており、車体部材に使用する金属材料の高強度化と高延性化が求められている。

金属材料の強度や延性の制御は、材料内部に存在する直径 $10^5 \sim 10^4$ m 程度の結晶粒のサイズを制御にすることで可能である。結晶粒のサイズは、材料にひずみを加えることで小さくすることが可能であり、これにより材料の強度は増加する。一方、材料を高温環境下に曝すことで、材料内部の結晶粒は成長し、そのサイズは大きくなる。その結果、材料は軟化する。実際の材料開発においては、過度な結晶粒成長を抑制し、所望の結晶粒サイズに制御するために、材料中に微細な粒子を分散させることで、結晶粒成長を抑制する“ピンニング効果”が多用されている。したがって、分散粒子を含む材料における結晶粒成長を理解し、予測することは、材料開発において極めて重要である。しかしながら、ピンニング効果は分散粒子のサイズや体積分率などの因子に強く依存するのみならず、これらの因子は時々刻々と変化、すなわち、「可動」であるため、実験的な方法でピンニン

グ効果を理解し、結晶粒サイズを正確に予測することは極めて困難である。したがって、MPF シミュレーションによる研究が期待されている。

本研究では、これまでの共同研究課題で開発してきた MPF 法の大規模 GPU 計算技術を用いて、可動分散粒子を含む金属材料中での多結晶粒成長の大規模 3 次元(3D)シミュレーションを行い、可動分散粒子によるピンニング効果を考慮した高精度な結晶粒サイズ予測を可能とすることを目的とする。特に、大規模シミュレーションを数値実験とみなし、可動分散粒子を含む材料に対する Smith-Zener 式の係数の同定を行った。

3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

材料メーカー等では、金属材料の結晶粒径を制御するために、非常に多くの時間を費やして実験的研究が行われている。これに対して最近、計算材料科学を援用した材料設計技術の開発が米国・欧州を中心に活発である。なかでも、各種材料中のマイクロ組織の形成過程を予測するための非常に強力な数値シミュレーション法として、MPF 法は注目されている。しかしながら、MPF シミュレーションで使用されるメッシュサイズは、一般に 10^{-7} m のオーダーである。一方、先に述べたように結晶粒の典型的なサイズは $10^{-5} \sim 10^{-4}$ m オーダーであるため、1 つの結晶粒を表現するのに 100 メッシュ程度が必要となる。さらには、分散粒子は結晶粒よりも小さいため、分散粒子を表現する

ためには、より細かいメッシュを使用する必要がある。したがって、実験結果との比較が可能な時空間スケールの計算結果を得て、さらに、統計学的に十分な個数の結晶粒の時間変化を解析するためには、一辺が数 1000 格子、計算ステップ数は数 100 万ステップが必要となり、スーパーコンピューターを使った大規模計算が不可欠である。したがって、フェーズフィールド法や MPF 法の大規模 GPU 計算において、すでに実績のある東京工業大学の TSUBAME2.5 を用いた研究は、MPF シミュレーションの大規模高速計算技術の発展につながり、日本が世界に誇る材料研究分野においても大きな意義を持つと考える。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

平成 25 年度(1 年目)の研究課題では、数値計算とデータ通信を非同期実行するためのオーバーラッピング法とそれを導入した MPF 法の複数 GPU 計算プログラムコードを開発した。また、TSUBAME2.5 に実装し、単純な分散粒子を含まない単純な結晶粒成長のシミュレーションにおいて、良好なスケーリング性能が得られることを示した。

平成 26 年度(2 年目)の研究課題では、前年度に開発した大規模 GPU 計算法を用いて、「不動な」分散粒子による結晶粒成長のピンニング効果を解明することを目的とし、前年度に開発したプログラムコードを若干変更するのみで、不動分散粒子によるピンニング効果のシミュレーションを可能

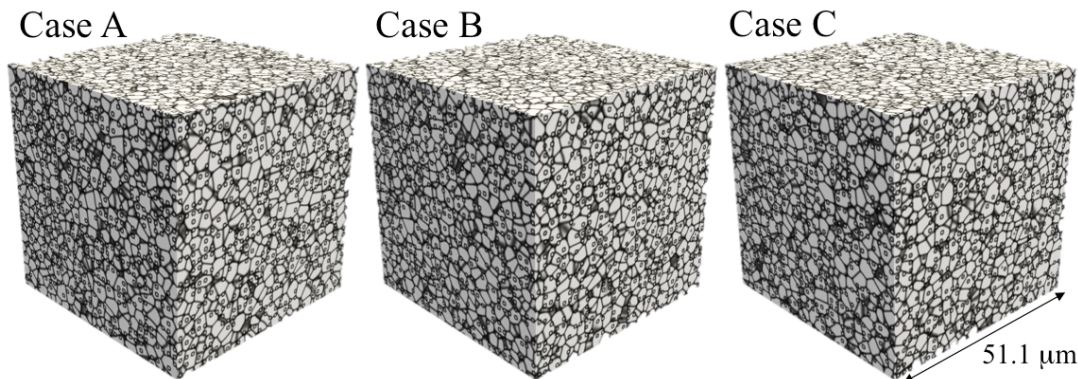


Fig. 1 Three different initial polycrystalline structures containing *mobile* particles.

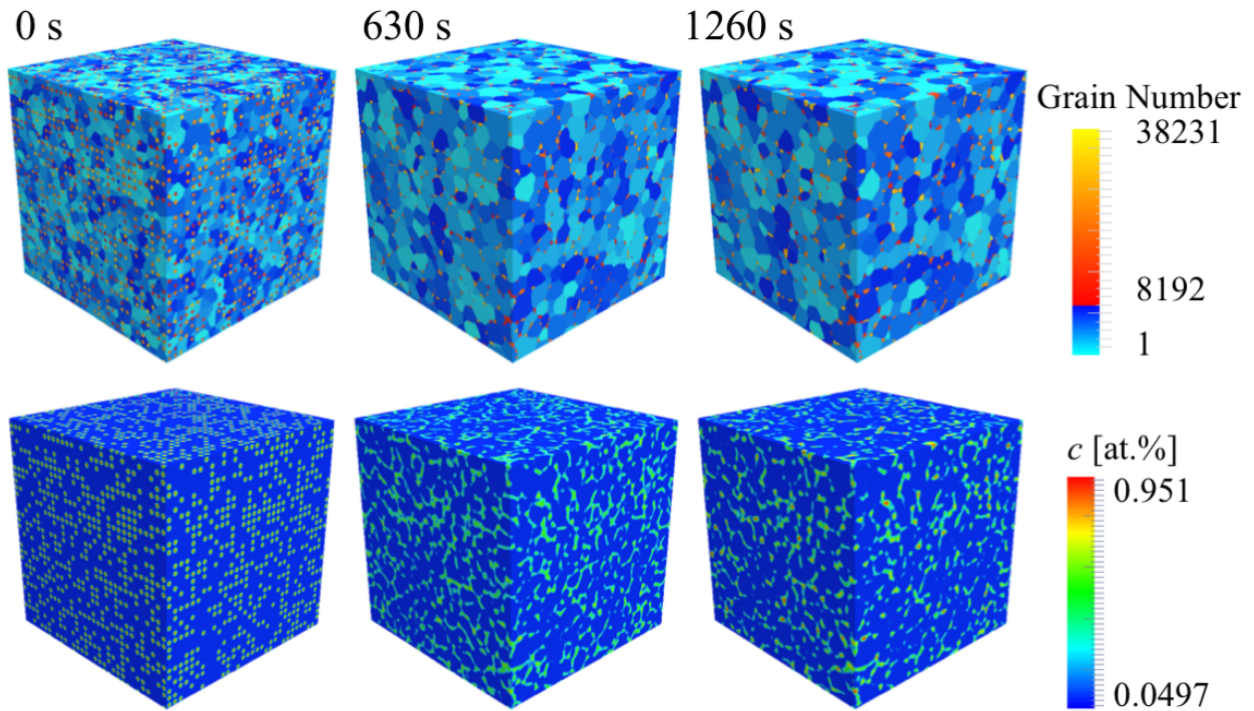


Fig. 2 Grain growth behavior in a polycrystalline structure containing *mobile* particles for Case C.

とした。さらに、TSUBAME2.5 において実行性能評価を行い、良好な弱スケーリング性能が得られることを実証した。以上の研究結果は、本年度の研究の基盤となる重要な成果であった。

5. 今年度の研究成果の詳細

5.1 マルチフェーズフィールドモデル

本研究で用いた MPF モデルでは、次式の多結晶粒組織および可動分散粒子の時間変化を表す偏微分方程式を用いる。

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

ここで ϕ_i は結晶粒(または粒子) 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。 M_{ij}^{ϕ} は界面の移動速度を規定するパラメータ、 a_{ij} と W_{ij} は界面エネルギーと拡散界面幅に関係づけられるパラメータである。 f_i は結晶粒(または粒子) i の化学的自由エネルギーを表す。

式(1)に現れる溶質濃度変数 c_i の時間変化を表す方程式として、次式の拡散方程式を解く。

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot M_c \nabla \frac{\delta G}{\delta c} = \nabla \cdot D \sum_i \phi_i \nabla c_i \quad (2)$$

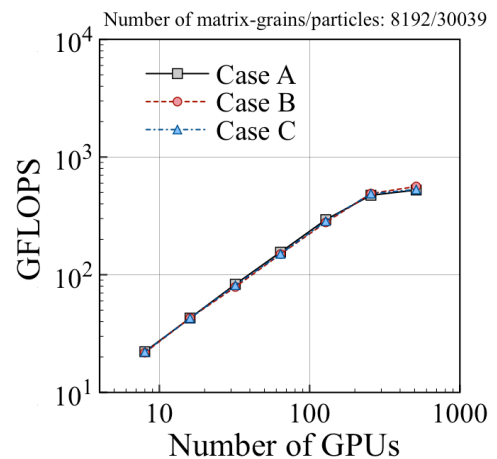


Fig. 3 Strong scaling performance as a function of number of GPUs.

ここで、 D が溶質原子の拡散係数であり、非零とすることで可動な分散粒子を表現することができる。

数値シミュレーションにおいては、式(1)および式(2)を、時間積分については 1 次精度のオイラー法、空間微分については 2 次精度の中央差分法で離散化して計算する。

5.2 可動分散粒子を含む材料における多結晶粒成長シミュレーションと実行性能評価

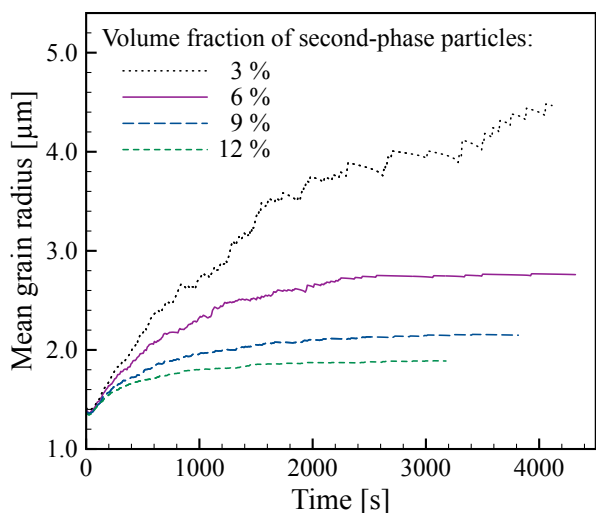


Fig. 4 Time variation of mean grain radius for different volume fraction of mobile particles.

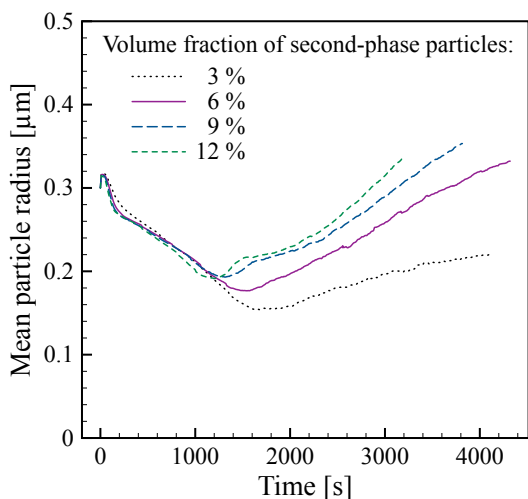


Fig. 5 Time variation of mean radius of the mobile particles for different volume fractions of mobile particle.

初期状態での組織分布が実行性能に及ぼす影響を調査するために、3種類の異なる初期組織(Case)を用いたシミュレーション結果を示す。この結果は、中間報告でも示した結果であるが、本研究で計算した内容を理解するために基礎となる結果であるため、本最終報告書においても説明する。

図1に、シミュレーションに用いた初期多結晶組織を示す。いずれのCaseにおいても、計算領域の大きさは $51.1 \times 51.1 \times 51.1 \mu\text{m}^3$ とし、 512^3 個の規則差分格子で分割した。初期状態として、8192個の母相の多結晶組織中に、30039個の分散粒子

をランダムに配置した。分散粒子の形状は、半径 $3.0 \times 10^{-9} \text{m}$ の球形状とした。分散粒子の体積分率は、 $f_p = 0.06$ とした。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。拡散係数は $D = 1.0 \times 10^{-9} \text{m}^2/\text{s}$ とした。境界条件として、全方向周期境界条件を用いた。

図2に、Case Cを初期組織とした場合の組織の時間変化を示す。図2上段の寒色の領域が母相結晶粒、暖色の領域が分散粒子を表している。また、図2下段は溶質濃度の時間変化を示している。時間とともに母相の結晶粒が粗大化している点、分散粒子により粒界移動が妨げられる点は昨年度の結果と変わらないが、それらとともに分散粒子が消失および粗大化する現象(オストワルド失せ長)も同時に再現できていることがわかる。

図3に、Case A~Cの3種類の初期組織を用いて、シミュレーションを実施し、強スケーリング性能を評価した結果を示す。いずれの初期組織を用いても実行性能には影響しないことがわかった。また、256 GPU までは良好な強スケーリング性能を示す一方で、それ以上の GPU 数では性能が低下した。これは、GPU 数が多すぎる時には、計算とデータ通信を非同期に実行するオーバーラッピング法が適切に機能していないことを意味する。

5.3 大規模 MPF シミュレーションに基づく数値実験による Smith-Zener 式の係数の同定

分散粒子によるピンニング効果による結晶粒径制御において重要な予測式として、次式の Smith-Zener 式⁽¹⁾が知られている。

$$\langle R \rangle = a \frac{r}{f_p^b} \quad (3)$$

ここで、 $\langle R \rangle$ は平均結晶粒径、 r は分散粒子の半径である。係数 a と b は、不動分散粒子を含む材料については Smith らにより、 $a = 1.33$ 、 $b = 1$ と同定されているが、工業的に重要な可動分散粒子の場合には、実験的研究の難しさ、数値シミュレーションの計算コストの大きさの問題を理由に明らかにされていない。本研究では、大規模シミュ

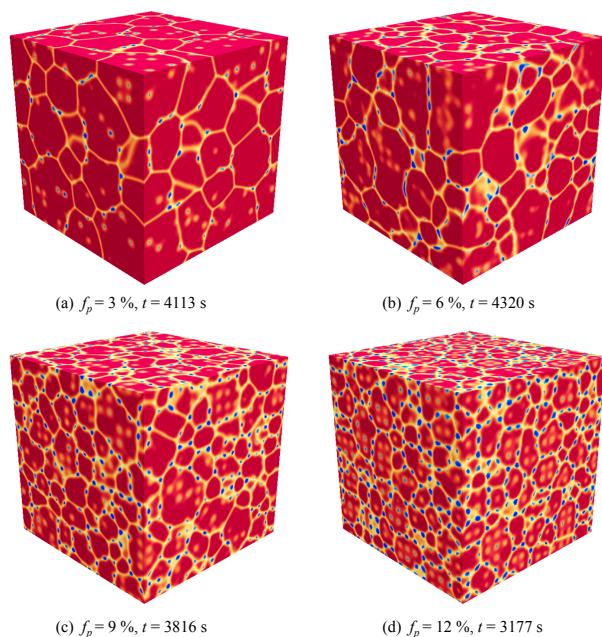


Fig. 5 Simulated pinned structure for different volume fractions of mobile particles.

レーションを数値実験と見なし、様々な可動分散粒子の体積分率における多結晶粒成長シミュレーションを実施し、係数 a および b を同定した。

数値実験では、計算領域の大きさは $25.6 \times 25.6 \times 25.6 \mu\text{m}^3$ とし、 256^3 個の規則差分格子で分割した。この領域サイズは、予備的な計算を行い、計算結果が変わらない範囲で最も小さいサイズとした。初期状態では、1024 個の結晶粒を配置した。分散粒子の体積分率は、 $f_p = 0.03, 0.06, 0.09, 0.12$ とし、初期状態において結晶粒界上にランダムに配置した。拡散係数は $D = 1.0 \times 10^{-14} \text{m}^2/\text{s}$ とした。その他の条件は、5.1 節と同じである。

図 4 に、数値実験によって得られた母相結晶粒の平均結晶粒径 $\langle R \rangle$ の時間変化を示す。分散粒子の体積分率の違いによるピンニング効果の違いが再現できており、分散粒子の体積分率が大きいほど最終的な平均結晶粒径は小さくなるが示されている。

図 5 に、分散粒子の平均半径の時間変化を示す。ギブストムソン効果により、1500 秒までは分散粒子は縮小し、その後はオストワルド成長による粗大化が進むことがわかる。図 6 に、結晶粒径が一定値となった時刻における多結晶組織（ピン止

め組織）を示す。青色で示された分散粒子が結晶粒の粒界三重点に位置しており、正しい計算が行われたことを確認できる。

なお、図 4 に示す結果において、 $f_p = 0.03$ の場合については、最終的な平均結晶粒径が得られておらず、さらに長時間の数値実験が必要である。今後の研究において、継続してシミュレーションを実施する計画である。

図 4 および図 5 で示した結果により得られた、最終的な平均結晶粒径と分散粒子の初期半径の比 $\langle R_{\text{lim}} \rangle / r$ と分散粒子の体積分率 f_p の関係 ($\langle R_{\text{lim}} \rangle / r - f_p$ 曲線) を図 6 に示す。図中の四角形のプロット点が本研究で得られた値である。図 6 には、先行研究で得られた Smith-Zener 式の係数で計算した結果も示している。本研究で得られた $\langle R_{\text{lim}} \rangle / r$ の値は、不動分散粒子を対象とした 3D シミュレーションを行った Vanherpe ら⁽³⁾の結果と同程度である。一方、 $\langle R_{\text{lim}} \rangle / r - f_p$ 曲線の傾きには、諏訪ら⁽⁵⁾が実施した可動分散粒子を考慮した 2D シミュレーションの結果と同様であることが明らかとなった。

以上の結果より、可動分散粒子を含む材料に対する Smith-Zener 式の係数 a および b をはじめて同定することができ、その値は $a = 1.86$ と $b = 0.56$ であることが示された。今後、この結果のさらなる検証を行うために、分散粒子の初期配置や初期半径を変えた数値実験を行う必要がある。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

今年度の研究により、可動分散粒子を含む材料における多結晶粒成長の大規模シミュレーションを TSUBAME2.5 において実現し、本研究の目的は計画通りに達成された。また、中間報告時に課題として挙げた、可動分散粒子を含む材料に対する Smith-Zener 式の係数をはじめて同定することに成功した。今後の研究では、本研究で得られた結果のさらなる検証のために、異なる条件（分散粒子の初期位置、初期半径など）での数値実験を繰り返す必要があり、来年度の研究にて実施する計画である。

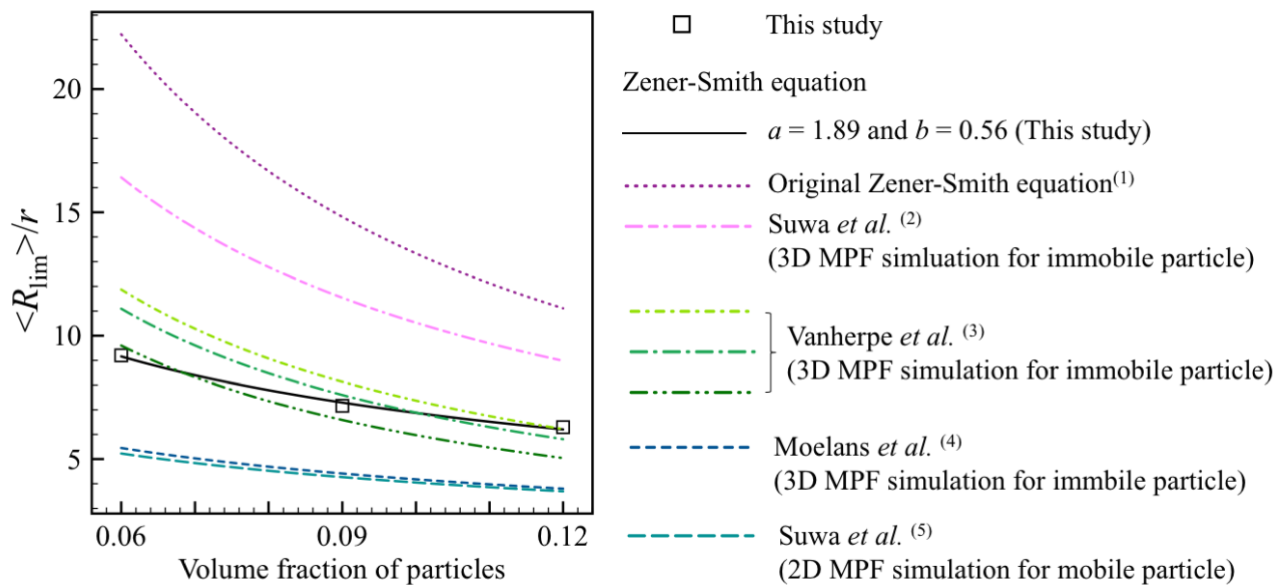


Fig. 6 Comparison of the relationship between $\langle R_{lim} \rangle / r$ and f_p obtained by this study with that by previous studies.

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

- Masashi Okamoto, Akinori Yamanaka, Takashi Shimokawabe, Takayuki Aoki, Large-scale Multi-phase-field Simulation of Polycrystalline Grain Growth with Finely Dispersed Particles, Proceedings of Materials Science and Technology 2015, (2015/10), CD-ROM, pp.553-560.

(3) 国際会議発表

- Masashi Okamoto, Akinori Yamanaka, Takashi Shimokawabe, Takayuki Aoki, Large-scale Multi-phase-field Simulation of Polycrystalline Grain Growth with Finely Dispersed Particles, October 4-8, 2015, Columbus, Ohio, USA.

(4) 国内会議発表

- 岡本成史, 山中晃徳, 下川辺隆史, 青木尊之,
- 可動分散粒子によるピンニングを考慮した多結晶粒成長の3次元マルチフェーズフィールドシミュレーション, 日本機械学会

第 28 回計算力学講演会講演論文集, No.15-19, CD-ROM, No.027. (2pages).

- 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可動分散粒子が結晶粒成長に及ぼす影響の評価, 日本鉄鋼協会 第 170 回秋季講演大会 学生ポスターセッション, 九州大学.
- 岡本成史, 山中晃徳, 下川辺隆史, 青木尊之, 多結晶粒成長過程における析出物によるピンニングの大規模マルチフェーズフィールドシミュレーション, 計算工学講演会論文集 Vol.20, (2015), p.C-9-2.
- (5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)

【受賞】

- 努力賞, 受賞者: 岡本成史, 日本鉄鋼協会 第170回秋季講演大会学生ポスターセッション, (2015), 九州大学.

参考文献

- (1) C. S. Smith, Grains, Phases, and Interfaces: An Interpretation of Microstructure, Metallurgical and Materials Transactions, Vol. 41A, No. 5, pp. 1064-1100, 1948.
- (2) Y. Suwa, Y. Saito, and H. Onodera, Phase field simulation of grain growth in three dimensional

system containing finely dispersed second-phase particles, *Scripta Materialia*, Vol. 55, No. 4, pp. 407–410, 2006.

- (3) L. Vanherpe, N. Moelans, B. Blanpain, and S. Vandewalle, Pinning effect of spheroid second-phase particles on grain growth studied by three-dimensional phase-field simulations, *Computational Materials Science*, Vol. 49, No. 2, pp. 340–350, 2010.
- (4) N. Moelans, B. Blanpain, and P. Wollants, Pinning effect of second-phase particles on grain growth in polycrystalline films studied by 3-D phase field simulations, *Acta Materialia*, Vol. 55, pp. 2173–2182, 2007.
- (5) Y. Suwa, Phase-field Simulations of Grain Growth in Two-dimensional Systems Containing Finely Dispersed Coarsening Particles, *ISIJ International*, Vol. 52, No. 4, pp. 582–591, 2012.