

jh160031-NAH

多結晶粒成長メカニズム解明のための フェーズフィールドドクリスタル法の大規模 GPU 計算技術の開発

山中晃徳（東京農工大学）

概要

金属材料の強度や延性は、材料中の結晶粒の寸法や結晶中の原子の配向方向に強く依存する。したがって、金属材料の製造中の結晶粒成長を精緻に予測できる数値シミュレーション方法が必要とされている。本研究では、結晶粒の成長と同時に生じる粒回転（原子の配列方向の変化）を解析できるフェーズフィールドドクリスタル(PFC)法の複数 GPU 計算技術を開発することを目的とした。結果として、複数 GPU 計算プログラムの開発には課題が残ったが、GPU を用いて高速化した 3 次元 PFC シミュレーションにより結晶粒成長における粒回転挙動や結晶粒界上の転位構造変化について、従来の原子スケールのシミュレーション方法（分子動力学計算など）では明らかにできない新しい知見を得た。

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

東京農工大学からは、研究代表者として山中晃徳が参加した。山中は、研究全体の統括、フェーズフィールドドクリスタルモデルの理論的考察、GPU 計算コードの開発を担当した。一方、東京工業大学からは、副代表者として青木尊之教授、額田彰准教授、下川辺隆史助教に参加して頂いた。額田准教授には CUFFT の複数 GPU 計算コードの開発にご協力頂いた。下川辺助教には TSUBAME2.5 への実装、青木教授には TSUBAME2.5 での超高速化のためのチューニングについてご協力を頂いた。

2. 研究の目的と意義

金属材料の強度や加工性は、材料中の結晶粒サイズや結晶を構成する原子の配向に強く依存する。工業的には、金属材料の特性を調整するために、材料を様々な温度に加熱する処理（熱処理）を行う。熱処理により結晶粒は成長するため、温度や保持時間を制御することで、結晶粒サイズを制御し、所望の材料の強度を得ることができる。

結晶粒の成長を予測する数値シミュレーション方法として、マルチフェーズフィールド（MPF）法が近年注目されており、研究代表者は JHPCN 課題で TSUBAME2.5 を用いた大規模計算技術の開発を行ってきた。しかしながら、結晶粒成長の主要メカニズムの一つである方位回転（結晶粒を構成する原子の配列方向の変化であり、以下では粒回転と称する）は、現在の MPF 法では計算することが不可能である。したがって、金属材料中の結晶粒成長挙動を予測するためにも粒回転は解明すべき重要な学術的研究課題である。

結晶粒成長中の粒回転を計算可能な数値シミュレーション法として、フェーズフィールドドクリスタル (PFC) 法が最近注目されている。PFC 法では、分子動力学 (MD) シミュレーションのように個々の原子の移動を計算するのではなく、原子密度の時間変化を計算することで、連続体モデルでありながら原子スケールのシミュレーションが可能である。さらに、MD シミュレーションに比べて理論的には 1000 倍以上も長い時間スケールで生じる現象を扱うことができる。したがって、事実上 MD シミュレーションでは解析できない現象（粒回転がそれにあたる）を解析できる点が利点である。しかしながら、PFC 法では 1 原子を表現するために、 8^3 個程度の規則差分格子が必要であり、多数の原子数を扱う場合には、MD シミュレーショ

ンに比べて、大きな計算コストを必要とする。

そこで本研究では、PFC シミュレーションの複数 GPU 計算技術を開発することを主な目的とし、東京工業大学の GPU スーパーコンピューター TSUBAME2.5 において、PFC 法による結晶粒成長シミュレーションの大規模計算の実施を目的とした。本研究により従来の原子スケールシミュレーションでは捉えることができなかった、結晶粒成長中の粒回転挙動の詳細を大規模 PFC シミュレーションで解明することができれば、結晶粒サイズの高精度予測に繋がり、工業的な観点からもその意義は大きいと考えた。

3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

PFC シミュレーションでは、5 で説明するように、原子密度場 ϕ に関する 6 階の偏微分方程式を計算する必要があり、計算精度と計算効率の観点からソルバーとして、フーリエ変換を使用している。研究代表者は、フーリエ変換計算部分を高速フーリエ変換ライブラリである FFTW から CUFFT に変更することで、計算時間が 1 / 33 に短縮されることを確認した。また計算規模が大きくなるほど CUFFT が優位となることが知られており、複数 GPU 計算が強力な計算方法となりうる。したがっ

て本課題では、GPU 計算の世界的研究者である青木教授、下川辺博士そして GPU での FFT 計算において卓越している額田准教授とともに、世界トップクラスの GPU クラスタスーパーコンピューターである TSUBAME2.5 において、世界に類を見ない高速かつ大規模な PFC シミュレーションを行うための計算技術を開発できると考えており、本共同研究課題でしか実施できない研究であると言える。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

研究代表者は、平成 25 年度から JHPCN 研究課題に参加しているが、初年度には MPF 法の数値計算とデータ通信を非同期実行するためのオーバラッピング法を導入した 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、多結晶粒成長の大規模シミュレーションにおいて良好な強・弱スケール性能が得られることを示した。平成 26 年度および平成 27 年度の研究では、MPF 法の大規模 GPU 計算法を改良し、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ための研究を実施した。過去 3 年間の研究により、Fig. 1 に示すような非常に多数の結晶粒と分散粒子を含む金属材料での結晶粒成長シ

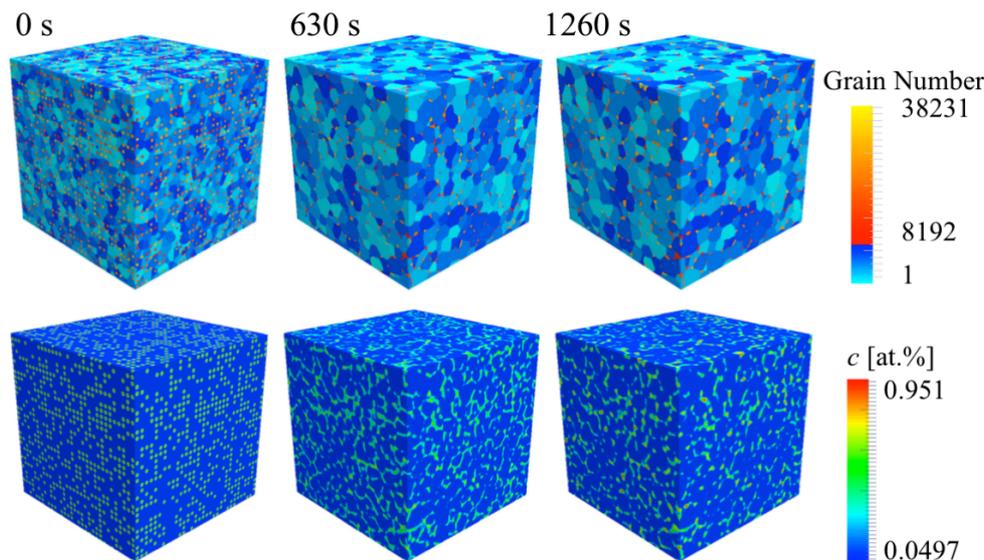


Fig. 1 Polycrystalline grain growth behavior in a system which contains mobile particles simulated by the MPF method accelerated by the multiple-GPU computing technique on the TSUBAME2.5-supercomputer. This result was obtained in the previous JHPCN researches.

ミュレーションが可能となった。これまで JHPCN 課題として開発してきた MPF 法の複数 GPU 計算技術は、本申請課題の基礎となっており、かつ、これまでの JHPCN 研究課題を実施することで初めて粒回転を計算する重要性と PFC 法での大規模計算を本課題で開発する着想に至った。

5. 今年度の研究成果の詳細

5.1 フェーズフィールドクリスタルモデル

PFC 法では、材料が有する全自由エネルギーを下記の関数で定義する⁽¹⁾。

$$F = \int_V \left\{ \frac{\phi}{2} \left(-\epsilon + (1 + \nabla^2)^2 \right) \phi + \frac{1}{4} \phi^4 \right\} dV \quad (1)$$

ここで、 ϕ は時間平均された原子密度であり、結晶粒中では周期的な分布、液体中では一定値をとる変数である。 ϵ は温度に関するパラメータである。 ϕ の時間変化、すなわち原子の移動は、全自由エネルギーの時間に対する減少を仮定した次式で表される。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta \phi} \quad (2)$$

式(2)に式(1)を代入すれば、PFC シミュレーションにおいて解くべき支配方程式が導かれる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla^2 \left\{ (-\epsilon + 1) \phi + 2\nabla^2 \phi + \nabla^4 \phi + \phi^3 \right\} \quad (3)$$

先に述べたように、式(3)は ϕ の 6 階の偏微分方程式となるため、通常差分法で計算すると時間増分が極めて小さくなる。本研究では、式(3)をフーリエ変換に基づく Semi-implicit スペクトル法により数値計算した。

5.2 複数 GPU 計算プログラム構築の検討

TSUBAME2.5 での超大規模 PFC シミュレーションを実現するため、額田准教授の協力のもと、複数 GPU 計算コードの開発を検討した。研究代表者が既に開発していた、単一 GPU 計算用のソースコードを変更し、複数 GPU 計算を実現するためには、FFT 計算を 2 次元 FFT と 1 次元 FFT に分割して計算を実施する必要がある。しかしながら、`cufftPlanMany` を用いて 2 次元 FFT と 1 次元 FFT

に分割すると単一 GPU 計算でも、元のソースコードを用いた計算の結果と合わず、計算が発散する結果となった。`cufftPlan3d` を用いた計算では発散もなく、元ソースコードと同じ計算結果が得られるため元のソースコードには問題ではないと考えている。中間報告後も研究代表者独自で、プログラムのデバッグや `cuFFT` ライブラリの複数 GPU 計算機能 (`cuFFFTXT` ライブラリ) 等も用いて、検討を実施したが、研究期間中に問題を解決できず、原因は現在も調査中である。

5.3 単一 GPU 計算による材料学的発見

複数 GPU 計算のためのソースコードの開発を行いながら、単一 GPU 計算を実施し、結晶粒成長と粒回転について材料科学的に新しい知見を得たので、以下に報告する。

結晶粒が成長（または収縮）する際に、結晶粒が回転するか否かは、材料科学的にも材料開発の観点からも非常に重要な問題であるが、金属材料内部は実験的に直接観察することが困難であるため、数値シミュレーションによる解明が期待されている。これまでに MD 法によるシミュレーションでは研究が行われてきたが、長時間の計算が必要となるため、擬 2 次元計算結果は報告されているものの、3 次元計算例は実施されていない。そこで、単結晶（結晶粒 A）に球形状の結晶粒（結晶粒 B）が埋め込まれた状態で、結晶粒 B が収縮する際の粒回転を調査した。

Fig. 2 に、球状粒 B の収縮挙動を 3 次元 PFC シミュレーションにより解析した結果を示す。初期に完全な球形状としたにも関わらず、球状粒 B は極めて異方性の強い収縮挙動を示すことがわかった。また、Fig. 3 に示すように、結晶粒 A と結晶粒 B の界面には六角形状の転位ネットワーク (Hexagonal Dislocation Network: HDN) が形成され、これが結晶粒 B の異方的な収縮の原因となっていることを明らかにした。さらに本研究で計算された HDN は、Fig. 4 に示すように実験的にも確認されており、本研究で使用しているソースコードの計算が材料科学の観点からも正しい結果を導くこ

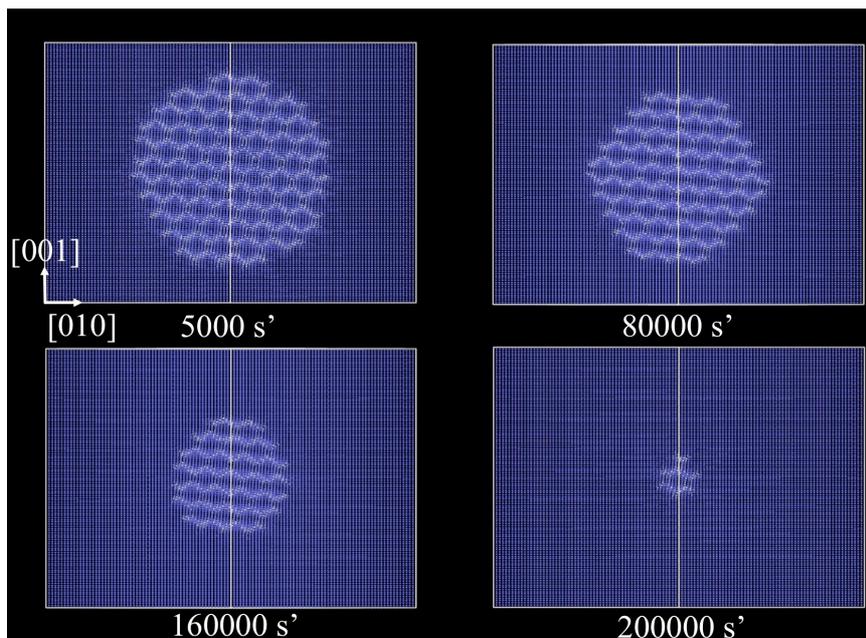


Fig. 2 Shrinkage of an initially spherical grain B embedded in a grain A. Blue atom has body centered cubic (BCC) crystal and white atom has other crystal structure. The size of atoms is decreased to half of real one for the visualization.

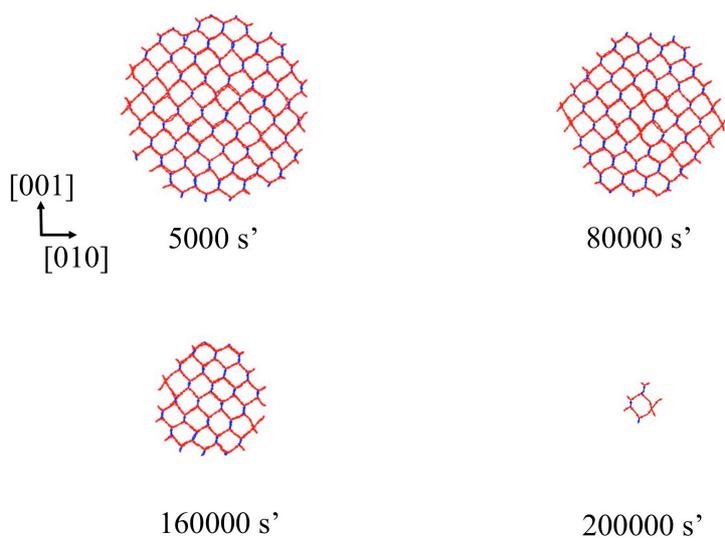


Fig. 3 Evolution of the hexagonal dislocation network (HDN) during the shrinkage of the grain B.

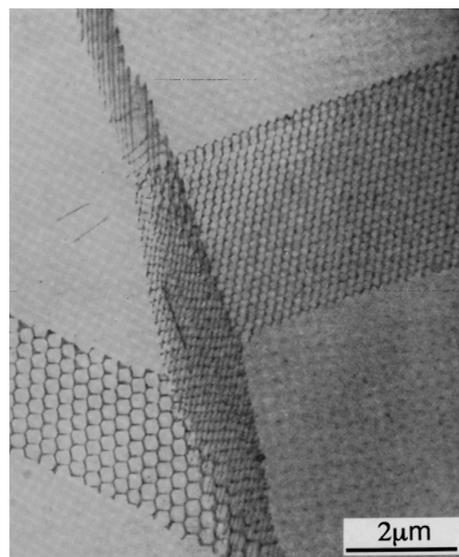


Fig. 4 Hexagonal dislocation network (HDN) formed in a planar $\{110\}$ twist boundary in bcc iron [?].

とがわかる。本研究の最大の成果は、結晶粒 B が収縮するにつれて、結晶粒 B は回転することを、初めて明らかにした点である。この研究成果は、3次元での結晶粒成長と粒回転、さらには転位の関係を PFC シミュレーションで明らかにした点で独創的であり、材料学分野のトップレベルジャーナルに学術論文として掲載された。

最後に、本研究で大規模計算を実施する計画で

あった多結晶粒成長過程を単一 GPU を用いて計算した。Fig. 5 に、多結晶粒成長の 3 次元 PFC シミュレーションの結果をスナップショットで示す。計算規模は、 $1024 \times 1024 \times 430$ メッシュであり、原子数は 545736 である。これは、近年実施されている PFC シミュレーションでも最大規模の大きさである。各結晶粒には、結晶方位（原子の配列方向と水平方向がなす角度）に基づき色付けをしている。

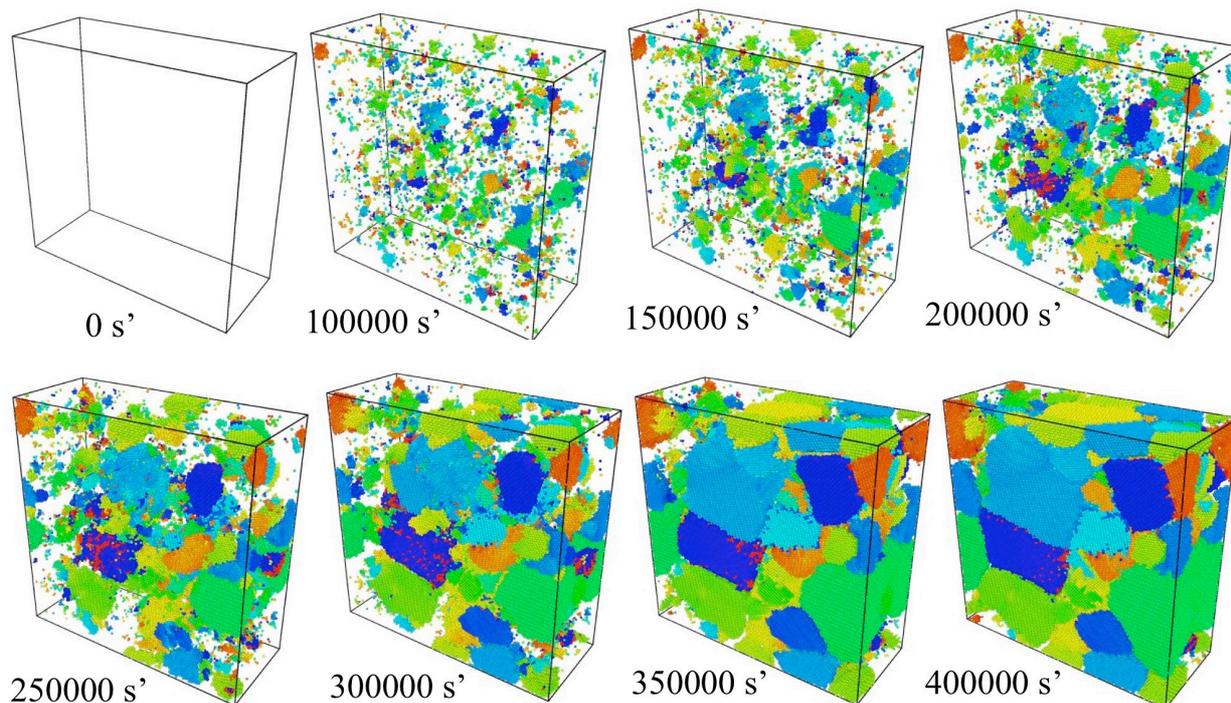


Fig. 5 Large scale 3D PFC simulation of polycrystalline grain growth. The color of each crystal grain describes crystal orientation. The number of computational grids and atoms are $1024 \times 1024 \times 430$ and 545736, respectively.

この結果より、粒界の曲率によって結晶粒が収縮、粗大化する様子が再現されている。今後、各結晶粒の粒回転挙動を明らかにすることは、学術的にも非常に意義が大きく、より現実的な多結晶粒成長挙動と粒回転挙動を予測可能となることが期待できる。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

本研究の目的であった PFC シミュレーションの複数 GPU 計算コードの開発は、共同研究者の協力も得る事ができたが、cuFFT の複数 GPU 計算の計算不安定性を解決する事ができなかった。その一方で、本研究で実施した PFC シミュレーションの 3 次元計算により、実験や従来の MD シミュレーションでは捉えることのできない、結晶粒成長と粒回転及び転位網変化について、材料科的に新しい現象を明らかにすることができた。今後は、研究代表者が所有する GPU クラスタでの複数 GPU 計算が可能なプログラムが確立された段階で

再度、本 JHPCN 課題に申請する計画である。

7. 研究成果リスト

(1) 学術論文

- [Akinori Yamanaka](#), Kevin McReynolds, Peter W. Voorhees, Phase field crystal simulation of grain boundary motion, grain rotation and dislocation reactions in a BCC bicrystal, *Acta Materialia*, in press. (doi.org/10.1016/j.actamat.2017.05.022)

(2) 国際会議プロシーディングス

なし

(3) 国際会議発表

- [Akinori Yamanaka](#), Kevin McReynolds, Peter W. Voorhees, Three-dimensional phase-field crystal simulation of grain boundary migration, grain rotation and grain translation in crystals, 4th World Congress on Integrated Computational Materials Engineering (ICME2017), May 21-25, 2017, Ypsilanti, Michigan, USA. (発表確定)

- Akiori Yamanaka, Kevin McReynolds, Peter W. Voorhees, Three-Dimensional Grain Growth: The Role of Dislocations, MRS Spring Meeting 2017, April 17-21, 2017, Phenix, Arizona, USA.
- Kevin McReynolds, Akinori Yamanaka, Peter W. Voorhees, Dislocations, Trijunctions and Grain rotation, The 146th TMS Annual Meeting, February 26-March 2, 2016, San Diego, USA.
- Akinori Yamanaka, Kevin McReynolds, Peter W. Voorhees, GPU-accelerated 3D phase field crystal simulation of grain boundary motion in bcc bicrystal, 3rd International Congress on 3D Materials Science 2016 (3DMS2016), July 10-13, 2015, Illinois, USA.

(4) 国内会議発表

- 山中晃徳, Peter W. Voorhees, 粒成長および粒移動のフェーズフィールドクリスタルシミュレーション, 第 22 回計算工学講演会論文集, 大宮ソニックシティー, 埼玉. (発表確定)
- 山中晃徳, Peter W. Voorhees, 粒界移動と粒回転のフェーズフィールドクリスタルシミュレーション, 日本機械学会第 29 回計算力学講演会講演論文集, CD-ROM, No. 16-4 (2016), 261.
- 山中晃徳, Kevin McReynolds, Peter W. Voorhees, BCC 鉄における結晶粒成長のフェーズフィールドクリスタルシミュレーション, 第 21 回計算工学講演会論文集, Vol. 21, (2016), p. B-3-4.

(5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)

なし

参考文献

- (1) K. R. Elder, M. Katakowski, M. Haataja, M. Grant, Modeling elasticity in crystal growth, Phys. Rev. Lett., Vol. 88, (2002), p. 245701,
- (2) D. Hull and D. J. Bacon, Introduction to Dislocations, Butterworth-Heinemann, Oxford, 2001, p. 167.