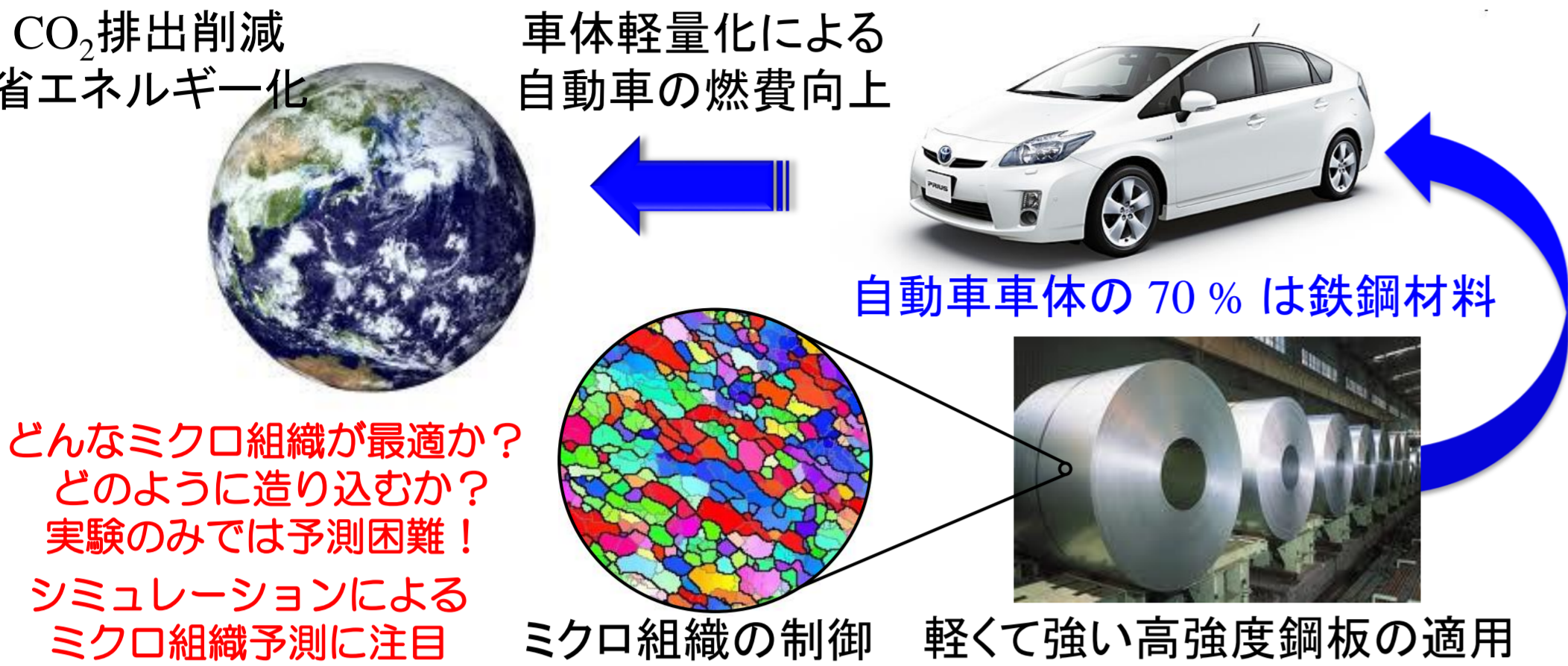


鉄鋼材料におけるマイクロ組織形成マルチフェーズフィールドシミュレーションの大規模GPU計算技術の構築



鉄鋼材料のマイクロ組織制御技術



マルチフェーズフィールド法

全自由エネルギーを基礎に、多結晶金属材料内のマイクロ組織形成における界面移動、溶質拡散、変形を解析できる強力な計算手法。

全自由エネルギー “化学的自由エネルギー + 弾性ひずみエネルギー + 勾配エネルギーの総和”

$$G_{total} = \int_V \left\{ f_{chemical} + f_{elastic} + \sum_{i=1}^N \sum_{k=i+1}^N \left(-\frac{a_{ik}^2}{2} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_k + W_{ik} \phi_i \phi_k \right) \right\} dV$$

フェーズフィールド方程式 “結晶粒界などの界面移動を表す方程式”

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -\frac{2}{n} \sum_{j=1}^n M_{ij} \left[\sum_{k=1}^n \left\{ (W_{ik} - W_{jk}) \phi_k + \frac{1}{2} (a_{ik}^2 - a_{jk}^2) \nabla^2 \phi_k \right\} - \frac{8}{\pi} \sqrt{\phi_i \phi_j} \Delta E_{ij} \right]$$

溶質拡散方程式 “炭素などの溶質原子拡散を表す方程式”

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ \sum_i \phi_i D_C^i \nabla C_i \right\}$$

非線形項を含んだ“複数”の偏微分方程式を解く必要があるため、計算負荷とメモリアクセス量が大きいことが、実用化(実験との比較)への問題点

研究目的

東京工業大学のGPUクラスタースーパーコンピュータTSUBAME2.0を用いて、マルチフェーズフィールド法によるマイクロ組織形成シミュレーションを高速かつ大規模に計算するための新しい数値計算技術・可視化技術を開発する

研究計画

1. 複数GPU計算に適したマルチフェーズフィールド法の計算アルゴリズムとプログラムの開発
2. TSUBAME2.0でのフェライト相形成シミュレーションの大規模計算と新材料開発に貢献するフェライト相の3次元組織形態情報の探索

計算方法

計算スキーム

空間微分: 2次精度 中心差分法
 時間積分: 1次精度 オイラー法
 プログラミング言語: CUDA Fortran
 コンパイラ: CUDA4.0 + PGI Accelerator Fortran
 並列化: OpenMPI, GPU Direct2.0



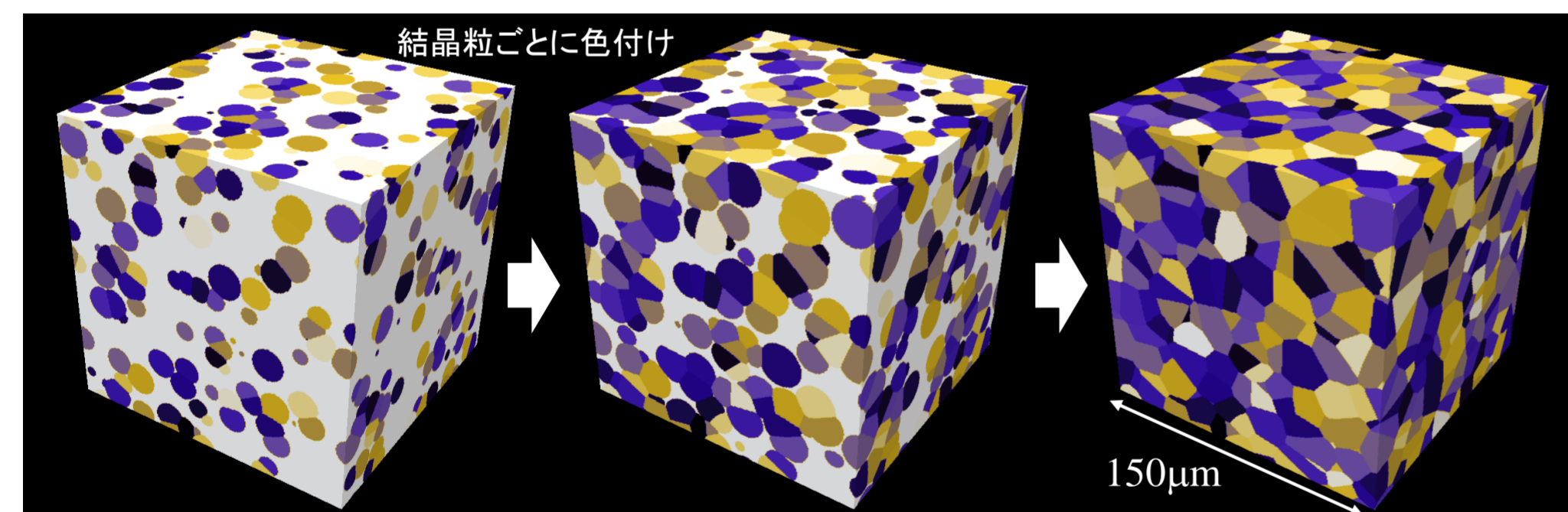
計算機資源

東京工業大学GSIC クラウド型グリーンスパコンTSUBAME2.0
 東京農工大学 山中研究室 GPUクラスター
 CPU: Intel Xeon E5-2690 (2.9GHz 8core L3=20MB) x 2
 GPU: NVIDIA Tesla Kepler K20X 6GB x 2
 Memory: 128GB (DDR3-1600 REG ECC 8GB x 16)
 HCA: InfiniBand QDR 40Gbps x1

計3ノード

計算結果 (研究進捗状況)

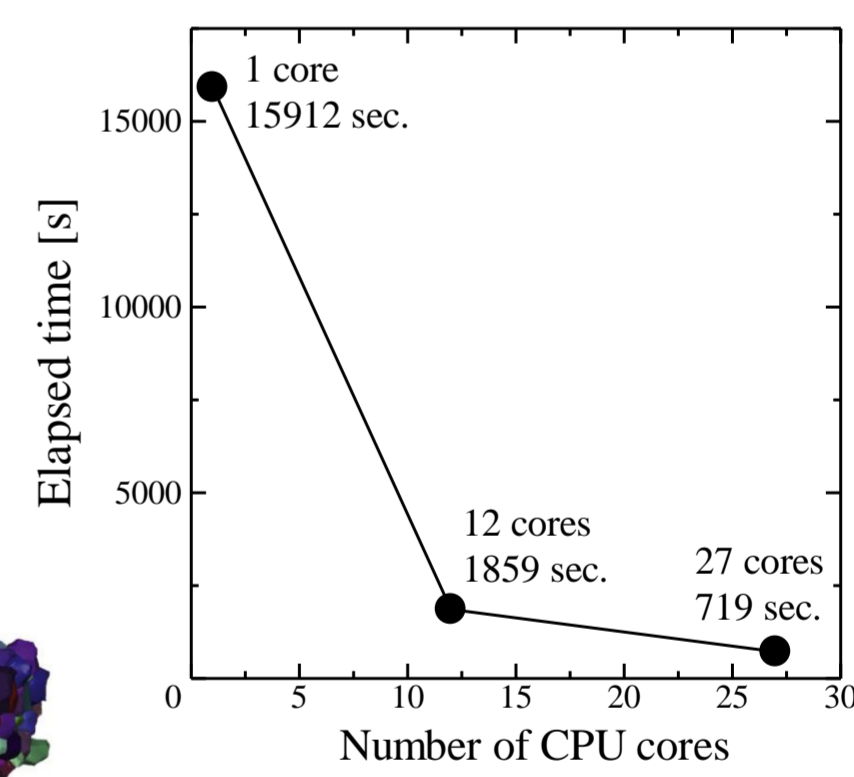
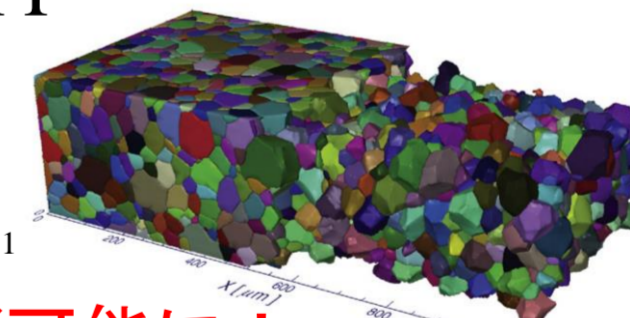
結晶粒成長シミュレーション (CPU並列計算)



マルチフェーズフィールド法により
 結晶粒界の形成から成長、粗大化まで再現できる **大規模計算により実験結果との比較が可能に!**

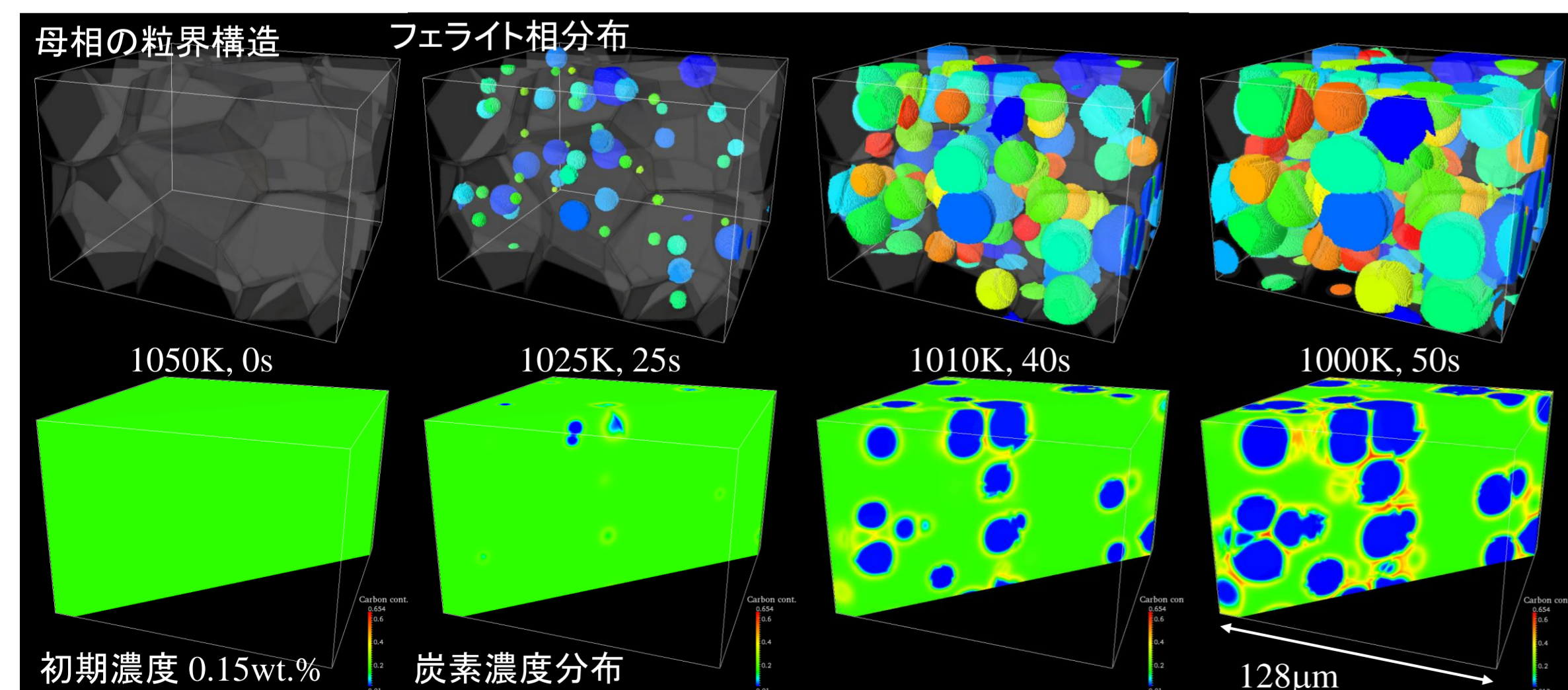
温度: 1073K
 結晶粒数: 1000個
 計算領域サイズ: 150 × 150 × 150 μm³
 格子点数: 300 × 300 × 300
 計算ステップ数: 400
 CPU: Intel Xeon E5-2690
 ノード間並列化: OpenMPI

Ti合金内の多結晶構造の
 実験観察結果
 D. J. Rowenhorst et al., *Acta Mater.*, 58, (2010), 5511



並列数と計算時間の関係

低炭素鋼におけるフェライト相形成シミュレーション (複数GPU計算(ノード内))



低炭素鋼(Fe-0.15wt.%C)の連続冷却中におけるフェライト変態

冷却速度: 1.0 K/s
 温度領域: 1050K → 1000K
 最大結晶粒数: 96個 (母相 20個 + フェライト相 76個)
 計算領域サイズ: 128 × 128 × 90 μm³
 格子点数: 256 × 256 × 180
 計算ステップ数: 196000
 GPU: NVIDIA TESLA C2070 × 2
 ノード内並列化: GPUDirect2.0 Peer-to-Peer Communication
 計算時間: **Single GPU: 68 hours**
Double GPUs: 36 hours 2GPUで計算効率化!

今後の課題

- フェライト相形成シミュレーションのプログラムをMPIで並列化
- TSUBAME2.0への実装と大規模計算の実施

共同研究者

青木尊之, 下川辺隆史 (東京工業大学GSIC), 橋本圭右, 岡本成史 (東京農工大学)