7th Symposium

jh150017-NA13

山中 晃徳 (東京農工大学)

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



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ミクロ組織形成に 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.

研究目的

平成25・26年度の研究で構築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、可動分散粒子を含む金属材料中での多 結晶粒成長のシミュレーションを行う、また、分散粒子の分率、サイ ズ,形態,温度による結晶粒径変化を高精度に予測可能とする.

Joint Usage / Research Center for Interdisciplinary Large-scale Information Infrastructures

研究計画

 ・分散粒子の半径,体積率,空間配置,形態などのパラメ ータを種々に変更したシミュレーションを実施する. ・種々の温度でシミュレーションを行い, ピンニング効果の 温度依存性 を調査する.

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: CUDA + PGI Accelerator Fortran 並列化: OpenMPI, GPU Direct2.0



計5ノード



計算結果(研究進捗状況)

平成25・26年度に開発したオーバーラッピング法*を Computation for local composition on whole sub-domain and ϕ on Boundry Computation for ϕ inner region 分散粒子を含む系のシミュレーションのために改良 Stream 1: Computation for *C* on whole sub-domain APT algorithm GPU Stream 2: (x)*岡本成史,山中晃徳,下川辺隆史,青木尊之,日本計算工学会論文集, [inner region] Stream 3: (y)Vol.2013, (2013), p.20130018 Download, C Stream 4: (z)➡分散粒子を考慮しても良好なスケーリング性能を実現 APT algorithm, (x), (y), (z)(y) Upload Download CPU Download 270000 steps (1350 s) 45000 steps (225 s) 90000 steps (450 s) 180000 steps (900 s) MPI communication, (x), (y), (z), C*M. Okamoto, A. Yamanaka, T. Shimokawabe, T. Aoki, MS&T15, (2015), to be presented. Number of matrix-grains/particles: 8192/30039



計算機資源



東京農工大学

 $I \longrightarrow$ Next step

Time

東京工業大学GSIC クラウド型グリーンスパコンTSUBAME2.5

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



.1 µm