

TSUBAME 共同利用 平成 23 年度 産業利用 成果報告書

利用課題名 鋼材強化に資する微細析出物成長制御のための計算機シミュレーション
英文: Computational simulation to control fine precipitate growth for strengthening of steel

澤田 英明
Hideaki Sawada

新日本製鐵株式会社 先端技術研究所
Advanced Technology Research Laboratories, Nippon Steel Corporation
URL <http://www.nsc.co.jp>

析出物は組織制御と強度に対する寄与によって鋼材強化に重要な役割を果たす。その析出物の析出や成長を決める重要な因子となる析出物と鉄母相の界面エネルギーの計算を計画している。析出物と鉄母相の部分整合界面を扱うためには 1000 個以上の原子を扱う必要があるが、計算量が計算規模に対して線形に増加するオーダーN法を用いることと、TSUBAME 利用によって、これまでに原子数 1500 個程度の計算を十分な精度で実施することに成功してきた。今回、更に大きな系への適用のための試行計算を実施し、1000 並列以上における高い並列化効率を確認した。

The precipitates in steel play an important role to strengthen steel. We plan to calculate the interface energy between precipitate and iron, which is the important factor of controlling growth of the precipitate. The interface energy for the system with 1500 atoms was performed by using the order-N method of the first-principles calculation on the TSUBAME supercomputer. We perform test calculations for larger system and confirm the high parallelization efficiency for more than 1000 cores.

Keywords: first-principles calculation, order-N method, interface energy, precipitate, iron

背景と目的

鋼中析出物は母相の鉄と整合した整合析出物として析出し、大きくなるにつれて母相中の蓄積する歪を解消するため、部分整合析出物に遷移する。しかし、析出物の析出や成長に対して重要な因子となる析出物と母相の界面性状や界面エネルギーを求めることは、整合界面に対しては可能でも、部分整合界面に対しては非常に大規模な計算を必要とするため不可能であった。第一原理計算の大規模化可能なオーダーN法を用い、TSUBAME 利用による大規模計算によって、その解決を試みた。平成 21 年 10 月から平成 23 年 9 月までのトライアルユースで、Fe と NbC の部分整合界面の界面性状と界面エネルギーを求めることに成功していたが、計算規模がその 3 倍になる Fe と TiC の部分整合界面の計算に着手し、高い並列化効率と大規模計算の可能性を確認した。

概要

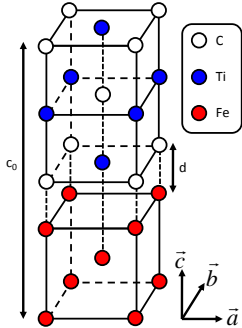
鋼中に生成する析出物は数多くあるが、鋼強度や

組織形成過程において重要な役割を果たす析出物の 1 つとして NaCl 型析出物がある。NaCl 型析出物は bcc-Fe 母相と (100)TiC//(100)Fe、[010]TiC//[011]Fe、[001]TiC//[0-11]Fe の Baker-Nutting の関係といわれる結晶方位関係を持つことが知られており、2nm 以下の極微小析出物は鉄母相と整合していると考えられている。しかし、析出物が大きくなるにつれて、母相中に蓄積された歪を解消するために、整合析出物から部分整合析出物に遷移する。整合界面と部分整合界面での界面エネルギーは、析出物の析出や成長に対して重要な因子である。大規模計算が可能な第一原理計算のオーダーN法(プログラム名: OpenMX、北陸先端科学技術大学院大学尾崎准教授開発)を用い、bcc-Fe と TiC の部分整合界面の計算に着手し、高い並列化効率と大規模計算の可能性を確認した。

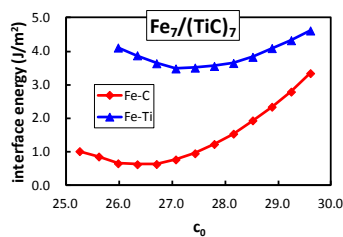
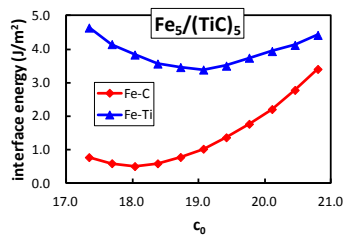
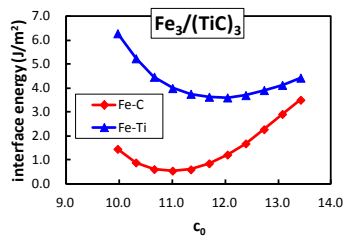
結果および考察

図 1 に示す Fe と TiC の整合界面構造

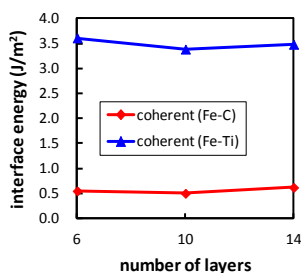
$\text{Fe}_x/(\text{TiC})_x$ ($x=3, 5, 7$) に対して、OpenMX によって計算した c 軸長に対する界面エネルギーの変化をそれぞれ図 2 に示した。更に、図 3 に、それぞれの場合の界面エネルギーの極小値を計算に用いた層数に対してプロットした。



(図 1) 整合界面構造 $\text{Fe}_x/(\text{TiC})_x$ ($x=3$)



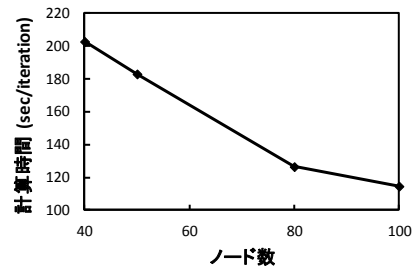
(図 2) $\text{Fe}_x/(\text{TiC})_x$ ($x=3, 5, 7$) の界面エネルギーの c 軸長依存性



(図 3) 界面エネルギーの層数依存性

図 3 から、整合界面については、層数 5 層と 7 層では界面エネルギーに大きな差異はないことが分かる。

bcc-Fe との格子のミスフィットは NbC の 10.1% に対して、TiC は 6.7% であるため、部分整合界面を計算するのに必要な原子数が多くなる。具体的には、計算する層数を 14 層とすると、Fe/NbC の計算は単位胞中に含まれる原子数 1463 個で実施したが、Fe/TiC では 5000 個程度の原子を扱う必要がある。そのため、Fe/NbC 系よりも計算に用いるノード数を増やし、elapsed time を短くする必要がある。そこで、ノード数を増加した時の並列化効率について調べた。計算は Fe/TiC 系の 1851 個の単位胞で実施した。図 4 にその結果を示す。100 ノードでの計算は 40 ノードでの計算に対して 70% 以上の並列化効率を示しており、1000 並列以上においても高い並列化効率を維持していることを確認した。



(図 4) iteration 当たりの計算時間のノード数依存性

まとめ、今後の課題

鋼の強度制御のために重要な役割を果たす析出物の析出や成長を決める重要な因子となる析出物と鉄母相の界面エネルギーの計算を実施した。析出物と鉄母相の部分整合界面には 1000 個以上の原子を含む単位胞の計算が必要だが、これまで、第一原理計算のオーダー N 法を用いることと、TSUBAME 利用によって、原子数 1500 個程度の計算を十分な精度で実施することに成功してきた。今回、更に大きな系への適用のための試行計算を実施し、1000 並列以上における高い並列化効率を確認した。

今後、継続して他析出物と鉄母相との界面エネルギーの計算を行い、析出物や母相の違いによるエネルギーの変化を明らかにすることを計画している。