

TSUBAME 共同利用 平成 25 年度 学術利用 成果報告書

超大規模フェーズフィールド GPU 計算によるデンドライト競合成長メカニズムの解明
Very-large-scale phase-field GPU simulations of competitive dendritic高木 知弘
Tomohiro Takaki京都工芸繊維大学
Kyoto Institute of Technology
<http://www.cis.kit.ac.jp/~takaki/>

二元合金凝固の定量的フェーズフィールドモデルを一方向凝固問題に拡張し、単一 GPU コードおよび並列 GPU コードを作成し、TSUBAME2.5 による GPU 並列計算を可能とした。作成したコードを用いることで、まず、2 次元 2 結晶体の一方向凝固過程におけるデンドライト競合成長のシミュレーションを系統的に行い、最近報告されている新しいデンドライト淘汰現象を詳細に考察し、メカニズムを解明した。また、3 次元競合計算に必要な基礎データの蓄積を行い、3 次元競合成長計算に着手した。

We formulated a quantitative phase-field equation for directional solidification of binary alloy, and we developed a multiple-GPU codes for TSUBAME2.5. First, we made clear the mechanism of new selection phenomena between dendrites by performing the directional solidification simulations for 2D bi-crystal systematically. Then, by performing 3D single dendrite growth simulations, we prepared computational conditions for 3D competitive growth simulation, and started 3D competitive growth simulation.

Keywords: Phase-field method, GPU parallel computing, solidification, dendrite, competitive growth.

背景と目的

材料の機能や強度などの特性は、合金の化学組成のみによって決まるのではなく、材料に内在する「組織」に強く依存する。これからのエコ社会に向けた省エネルギー化のためには、材料の組織を高精度にコントロールし、強度や延性など所定の特性を有する材料を創製することで構造物の軽量化を図り、エネルギー効率を向上させることが重要となる。凝固組織は、以降の加工プロセスで形成される全ての組織の母となる組織であり、凝固組織を精度良く予測 & 制御することで、それ以降の加工時に形成される材料組織の予測 & 制御が容易となり、加工のコストや環境負荷も低く抑えることができる。

合金の凝固は高温での現象であり、かつ材料は不透明で直接観察できないため、現象の把握が極めて困難である。Spring-8 など大型放射光を用いた研究が進められているが、厚さの薄い 2 次元現象の観察に限定されている。そのため、コンピュータを用いた数値シミュレーションによる評価が必要となる。フェーズフィールド

法(phase-field method)はデンドライトに代表される材料微視組織を評価可能な最も強力な数値モデルであるが、モデルの特徴上計算コストが大きく、これまでの評価は 2 次元問題や 3 次元の小さな領域に限定されている。このため、大規模フェーズフィールド計算技術の確立が急務である。

本プロジェクトでは、大規模フェーズフィールド計算技術をプロジェクト期間の 3 年間で確立することを大きな目的としている。今年度は、二元合金凝固の定量的フェーズフィールドモデルによる GPU スパコン TSUBAME2.5 を用いた複数 GPU 並列計算を可能とした。また、この手法を用いることで、2 次元 2 結晶体のデンドライト競合成長シミュレーションを系統的に行い、デンドライト間隔と優先成長方向がデンドライト間の淘汰現象に及ぼす影響を詳細に検討し、競合成長現象のメカニズムを解明した。また、3 次元計算への導入として、周期境界領域における 1 本のデンドライト成長シミュレーションを行い、領域サイズとデンドライト先端の過冷却度を定量化した。

概要

本研究課題は、科学研究費助成事業(基盤研究(B))「超大規模フェーズフィールド GPU 計算による dendrite 競合成長メカニズムの解明」(平成 25~27 年度)の下で行われるものである。材料強度を支配する材料組織は、凝固プロセスにおける dendrite の成長によって創生される。しかしながら、dendrite 凝固組織の 3 次元構造形成メカニズムは、実験観察の困難もあり未だに解明されていない。本研究では、フェーズフィールド法による GPU スパコンを用いた超大規模計算を構築し、二元合金の一方向凝固計算を体系的に行うことで、3 次元 dendrite 競合成長メカニズムを世界で初めて解明する。本年度は、定量的シングルフェーズフィールドモデルを用いた GPU 並列コードを構築し、単結晶・二結晶における系統的な dendrite 競合成長シミュレーションを行い、dendrite 間の淘汰メカニズムの解明を目指した。

結果および考察

図 1 は、優先成長方向の異なる 10 個の核から的一方向凝固過程のフェーズフィールドシミュレーション結果を示している。上下方向に一定の温度勾配があり、左右は周期境界としている。図は 6 枚あり、上から下に時間が経過している。図 1 より、異なる方向に成長する dendrite が競合し、最終的に(一番下の図)、成長方向と熱流方向(上下方向)の角度が小さい dendrite が生き残って成長を続けていることがわかる。このように、優先成長方向と熱流方向のなす角度 θ が小さい dendrite が、 θ の大きい dendrite の成長を止めて凝固組織を形成することが、一般的に広く受け入れられている淘汰現象である[1]。一方、最近の研究において全く逆の現象が報告されている[2]。つまり、 θ が大きい dendrite が θ の小さい dendrite の成長をブロックするというものである。今年度は、この新しい淘汰現象に着目し、2 次元大規模計算と 3 次元計算のための準備計算を行った。

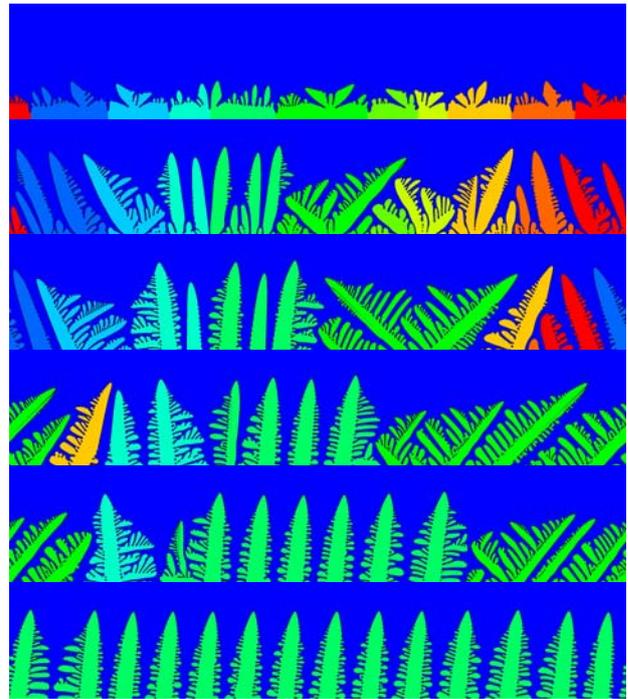


Fig. 1 Dendrite competitive growth during directional solidification of a binary alloy.

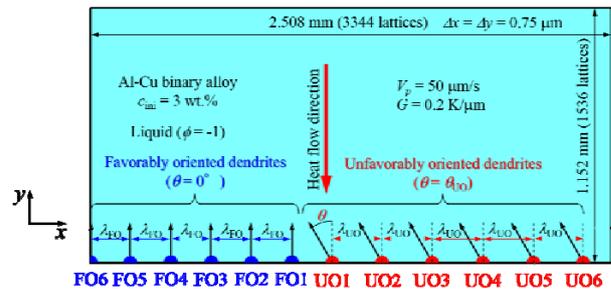


Fig. 2 Computational and initial conditions for bi-crystal competitive growth simulations during directional solidification of Al-Cu alloy.

図 2 は、2 次元 2 結晶体の競合成長シミュレーションに用いた計算条件と初期条件である。全領域を Al-3wt%Cu の液相で満たし、領域下端部に 12 個の結晶核を配置する。ここで、左側の 6 個が $\theta = 0^\circ$ の熱流方向に成長する FO(favorably oriented) dendrite、右側の 6 個が熱流方向から傾いて成長する UO(unfavorably oriented) dendrite とする。領域の下側から上側に向かって一定の温度勾配 G を設定しており、dendrite は下から上に向かって成長する。左右の境界はフェーズフィールド変数と濃度いずれも零ノイマン条件とし、両サイドに壁があるような状態を表現している。フェーズフィールドモデルは、大野らによって提案された二元合金凝固の定量的フェーズフィールドモデルを用いる[3]。

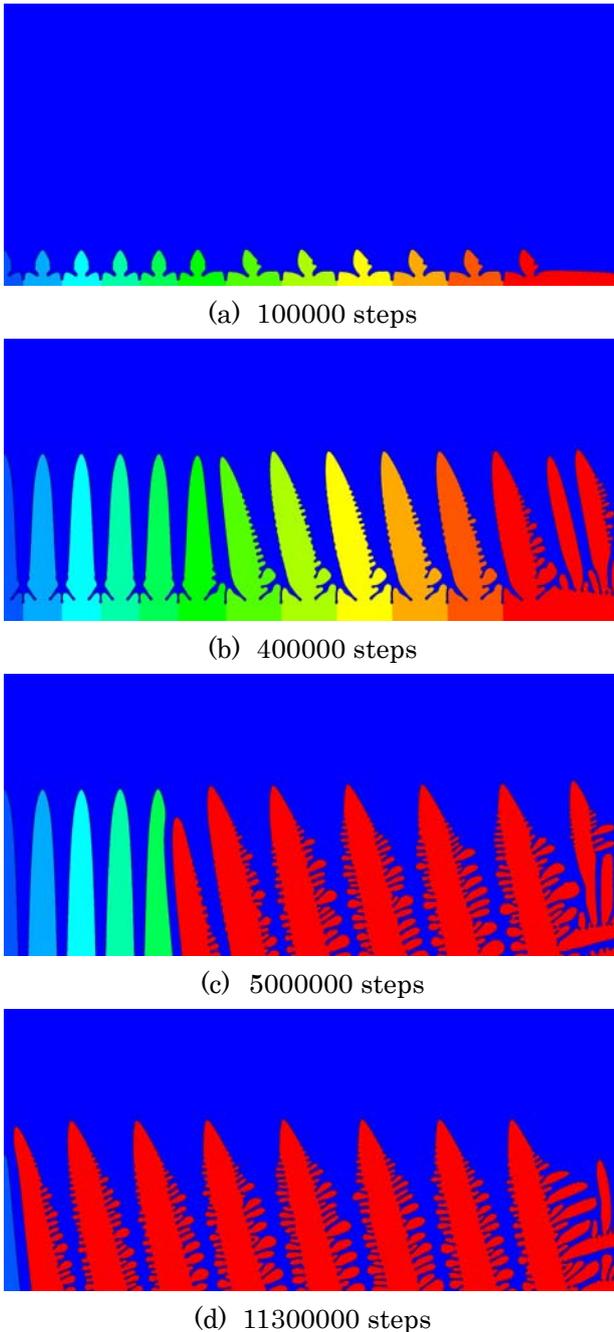


Fig. 3 Time slices of competitive growth of bi-crystal during directional solidification. ($\lambda_{FO} = 210\Delta x$, $\theta_{UO} = 15^\circ$)

図 3 は、 $\lambda_{FO} = 210\Delta x$, $\theta_{UO} = 15^\circ$ の条件における dendrite 形態変化を示している。400000 ステップまでは領域の温度を引き抜き速度 V_p に対応させて一定速度で低下させているが、400000 ステップ以降は領域内の温度分布は変化させず、領域を下方向に速度 V_p で引張る計算を行っている。また、図 3 の dendrite の色は図 2 の dendrite の番号に対応しており、領域右側ではブランチング(枝分かれ)によって UO6 から新たな dendrite が形成していることがわかる。また、図 3 よ

り、最終的には UO dendrite が FO dendrite を淘汰し、全領域が UO dendrite のみとなっている。このように、新しい淘汰現象が本シミュレーションにおいても再現された。

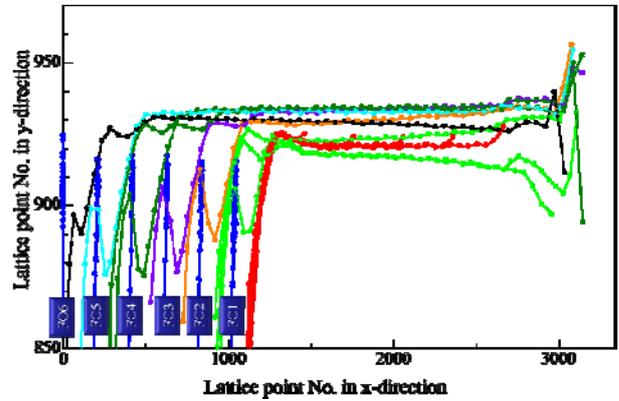


Fig. 4 Dendrite tip paths during simulation shown in Fig. 3.

図 4 に図 3 のシミュレーションにおける dendrite 先端の軌跡を示す。青いプロットが FO dendrite、その他の色が UO dendrite の結果である。赤、黄緑、オレンジ、紫、緑、水色の順に、それぞれ FO1~6 の dendrite にブロックされた UO dendrite である。赤と黄緑の UO dendrite は、dendrite 間隔が狭くチップ先端位置が低いため、1 本の FO dendrite を淘汰するために多くの UO dendrite を必要とするが、オレンジ以降は dendrite 間隔が広く、チップ先端位置が高いため、比較的簡単に FO dendrite を淘汰していることがわかる。

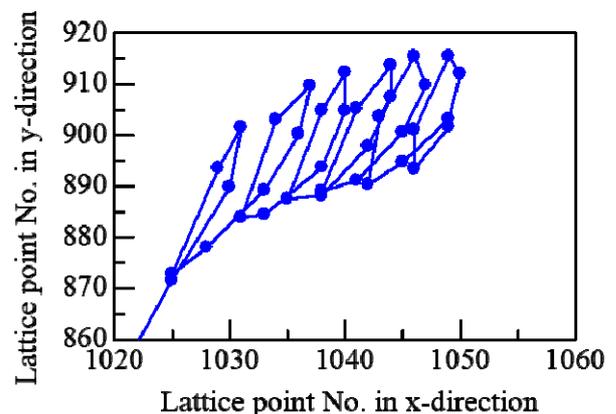


Fig. 5 Dendrite tip path of FO1 dendrite.

図 5 は、FO1 dendrite のチップ先端の軌跡を拡大したものである。図 5 の一つのループは、1 本の UO dendrite

ンドライトが近づき、それをブロックするという一連の過程に対応し、6個のループを見ることができることから、7本目のUOデンドライトによって淘汰されたことを意味する。図5からもわかるように、FOデンドライトはUOデンドライトの接近によりデンドライト先端の位置を下げつつ左に移動し、UOデンドライトを淘汰すると、元の位置に戻ろうとする。しかしながら、次のUOデンドライトが近づいているため、完全に元の位置に戻ることはできず、これを繰り返すことでFOデンドライト先端位置は徐々に下へ移動し、最終的にUOデンドライトに淘汰される。これがFOデンドライトがUOデンドライトに淘汰されるメカニズムである。

Table 1 Number of UO dendrites needed to stop the growth of a FO dendrite. ($\theta_{UO} = 15^\circ$)

| λ_{FO} | $210\Delta x$ | $230\Delta x$ | $250\Delta x$ | $270\Delta x$ | $290\Delta x$ |
|----------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|
| FO1 | 7 | 7 | 9 | 16 | 18 |
| FO2 | 4 | 3 | 6 | 6 | 12 |
| FO3 | 2 | 3 | 6 | 7 | 9 |
| FO4 | 2 | 4 | 8 | 7 | 13 |
| FO5 | 3 | 3 | 6 | 6 | 3 |
| FO6 | 2 | 1 | 2 | 1 | 1 |

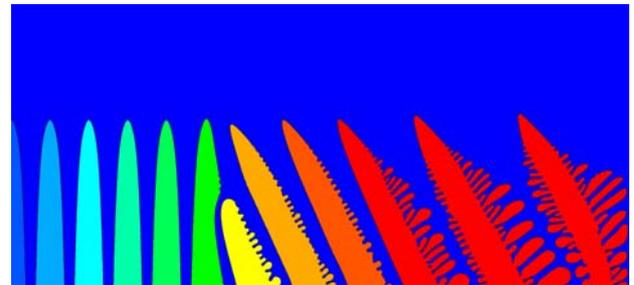
Table 2 Number of UO dendrites needed to stop the growth of a FO dendrite. ($\lambda_{FO} = 210\Delta x$)

| θ_{UO} | 1° | 5° | 10° | 15° |
|---------------|-----------|-----------|------------|------------|
| FO1 | 1 | 1 | 1 | 7 |
| FO2 | 1 | 1 | 2 | 4 |
| FO3 | 1 | 1 | 2 | 2 |
| FO4 | 1 | 2 | 2 | 2 |
| FO5 | 1 | 1 | 2 | 3 |
| FO6 | 1 | 1 | 1 | 2 |

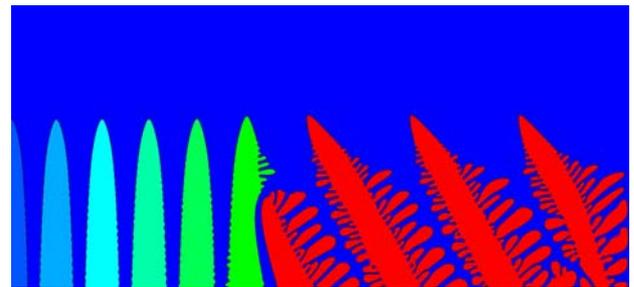
表1は、 λ_{FO} を変化させたときの、FO1~FO6のデンドライトを淘汰するのに要したUOデンドライトの本数である。このように、 λ_{FO} が大きくなると必要とするUOデンドライト本数は増えるが、この表の条件では、いずれも最終的に全てのFOデンドライトがUOデンドライトに淘汰された。表2は、 $\lambda_{FO} = 210\Delta x$ に固定し、表中のように θ_{UO} を変化させたときのUOデンドライト本数である。この表より、 θ_{UO} が小さくなるほど1本のFOデンドライ

トを淘汰するために必要なUOデンドライト本数が少なくなり、容易にUOデンドライトがFOデンドライトを淘汰することがわかる。

図6は、 $\lambda_{FO} = 210\Delta x$, $\theta_{UO} = 30^\circ$ の条件でシミュレーションを行った際の、(a) 1000000 steps と (b) 50000000 steps におけるデンドライト形態である。この場合、FO1デンドライトは右方向に移動しており、非常にゆっくりではあるが、FOデンドライトがUOデンドライトを淘汰していく過程を見ることができる。これまで、図6のような収束粒界では、粒界は熱流方向に平行に形成されるとされてきたが、本シミュレーションにおいて粒界におけるFO1デンドライトが徐々に右方向に移動するという新しい現象を確認した。これは、FO1デンドライトにUOデンドライトが接近すると、図5のようにFO1デンドライト先端は左下に移動するが、UOデンドライトを淘汰した後に右上方向に溶質を拡散できる十分なスペースがあり、デンドライト先端が元の位置以上に右方向へ移動することができるためである。



(a) 1000000 steps



(b) 50000000 steps

Fig. 6 Competitive growth for $\lambda_{FO} = 210\Delta x$ and $\theta_{UO} = 30^\circ$.

図7は、図8のような左右周期境界、前後零ノイマン境界の3D領域の中で、1本のデンドライトを成長させた際のデンドライト間隔 λ とデンドライトチップ先端の過冷却度の関係を示したものである。デンドライトの傾き

角度は 0° と 15° , 厚さ方向の格子数 n_y は, 16, 32, 48, 64 と変化させ, 2D と 3D の結果も同時に示している。図 7 より, 領域サイズを大きくすると 3D の結果に近づき, チップ先端過冷却度が小さくなるのがわかる。この結果を元に, 先に示した二結晶競合成長の 3 次元シミュレーションを行うことで, 2D と 3D の違いをより詳細に検討していきたいと考えている。

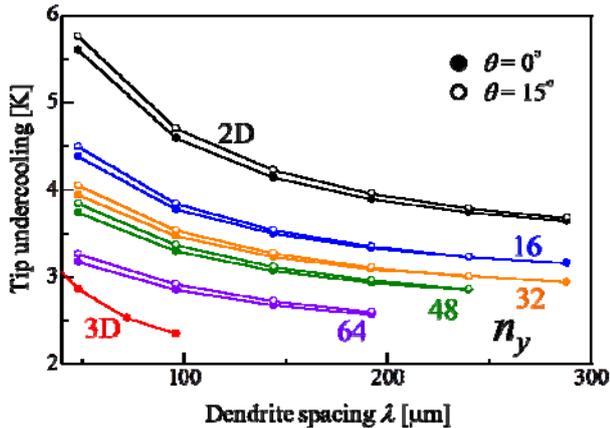


Fig. 7 Effects of dendrite spacing and width of computational domain on dendrite tip undercooling.

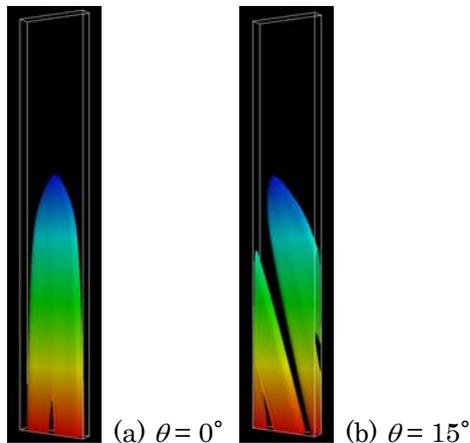


Fig. 8 Dendrite morphologies at steady state growth.

まとめ、今後の課題

本研究では, 二元合金凝固の定量的フェーズフィールドモデルを一方向凝固問題に拡張し, TSUBAME2.5 で計算するために複数 GPU 用にコーディングした。まず, 2次元2結晶の一方向凝固過程における dendrite の競合成長シミュレーションを系統的に行い, dendrite の新しい淘汰現象のメカニズムを解明した。また, 単一 dendrite 成長シミュレーショ

ンを行い, 3次元競合計算のための基礎データを蓄積した。

今後, コードの並列化効率を向上させ, 3次元競合成長シミュレーションを行いたいと考えている。加えて, 対流内での dendrite 成長シミュレーションを可能とするために, 今年度構築したモデルに格子ボルツマン法を連成させる。

- [1] Walton D, Chalmers B. Transactions of the Metallurgical Society of Aime 1959;215:447.
- [2] Zhou YZ, Volek A, Green NR. Acta Mater. 2008;56:2631.
- [3] Ohno M, Matsuura K. Physical Review E 2009;79:031603.