

TSUBAME 共同利用 平成 26 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 II
 Very-large-scale phase-field GPU simulations of competitive dendritic growth II

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/>

3次元空間における異なる優先成長方向を有するデンドライトの競合成長を評価するために、二元合金の2結晶競合成長シミュレーションを系統的に行った。この結果、傾いたデンドライトが熱流方向に成長するデンドライトを淘汰する、通常で無い淘汰現象が3次元でも生じることを確認した。また、液相の対流内においてデンドライトが運動しながら成長するモデルの GPU コード化を行い計算の高速化と、せん断流内のデンドライト成長と重力により沈降するデンドライトの2次元シミュレーションが可能であることを確認した。

Competitive dendritic growth simulations of binary alloy bicrystals were performed systematically in the three-dimension space. As a result, an unusual overgrowth phenomenon, where the inclined dendrite overgrows the dendrite which grows to the heat flow direction, was observed. In addition, a GPU code which can simulate the growth and motion of a dendrite was developed, and it was confirmed that the fundamental two-dimensional simulations, such as dendrite growth in shear flow and dendrite sedimentation process, were enabled using the developed code.

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、昨年度構築した定量的 phase-field モデルを用いた二元合金一方向凝固問題に対する並列 GPU コードを用いて、一方向凝固における3次元2結晶競合成長シミュレーションを系統的に行った。また、デンドライトが対流内で運動を伴いながら成長する現象を再現可能なモデルを用いた GPU コードを作成し、2次元問題におけるせん断流内のデンドライト成長と重力により沈降するデンドライトの成長シミュレーションを可能であることを確認した。

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 計算によるデンドラ

イト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、実験観察の困難さ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法を構築し、二元合金の一方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、二元合金の一方方向凝固過程における 3 次元 2 結晶競合成長シミュレーションを系統的に行った。また、dendrite が対流を伴う液相内で運動しながら成長する現象の GPU コードを作成し、2 次元問題におけるせん断流内の dendrite 成長と重力により沈降する dendrite の成長シミュレーションを可能であることを確認した。

結果および考察

図 1 と図 2 に二元合金 2 結晶競合成長のシミュレーション条件を示す。 $\lambda \Delta x \times 1,536 \Delta y \times 1,536 \Delta z$ の計算領域を用い、格子サイズは $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.75 \mu\text{m}$ としている。ここで、 λ は x 方向の格子数であり、図 2 に示すように $\lambda = 1, 31, 63, 127, 255$ と変化させる。また、図 1 に示すように、左側の dendrite が熱流方向 (z 方向) に成長する FO (favorably oriented) dendrite、右側が熱流方向から角度 θ だけ傾いて成長する UO (unfavorably oriented) dendrite とする。角度 θ は 5, 10, 15° と変化させる。また、図 2 に示すように、FO dendrite の配列を A と B の 2 種類に設定する。

図 3 は結果の一例である。 $\lambda = 31$, $\theta = 5^\circ$ と 10° の条件 A における結果を示している。グレーとレッドの dendrite は 3,000,000 steps 時における形態、色の付いた実線は dendrite チップ先端の 3,000,000 steps までの軌跡である。図 2 に示すように、計算開始時は 4 本の FO dendrite があったが、3,000,000 steps 時において $\theta = 5^\circ$ の場合は 1 本、 $\theta = 10^\circ$ の場合は 2 本の FO dendrite が淘汰されていることがわかる。このように、3 次元空間においても、傾いた UO dendrite がまっすぐ成長する FO dendrite を淘汰する現象を確認することできた。また、UO dendrite の角度によ

て異なる淘汰挙動を示すことも確認できた。

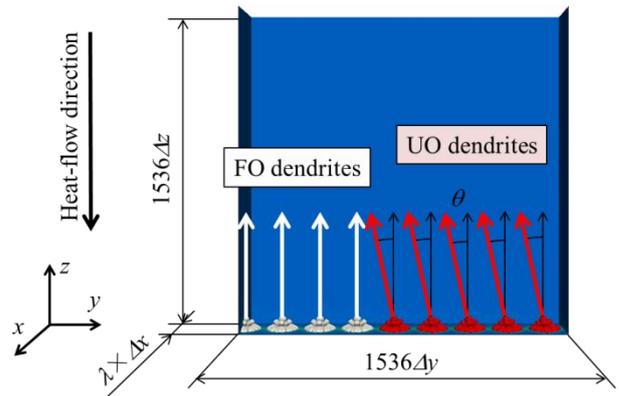


Fig. 1 Computational conditions for three-dimensional competitive dendritic growth simulation of binary alloy bicrystal (side view).

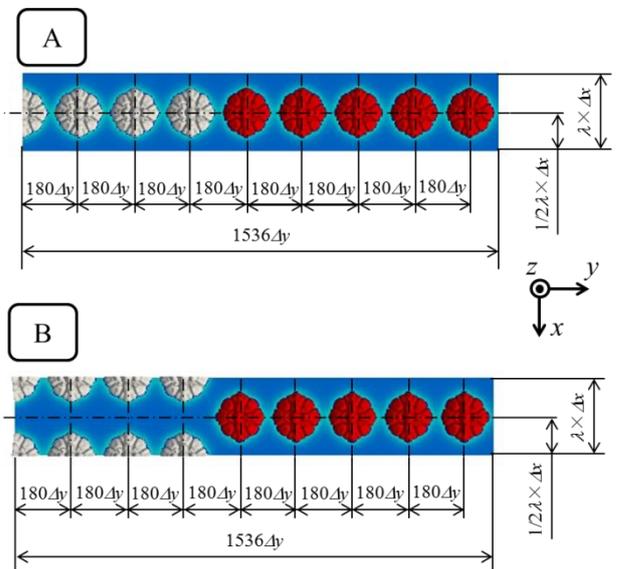


Fig. 2 Computational conditions for three-dimensional competitive dendritic growth simulation of binary alloy bicrystal (top view).

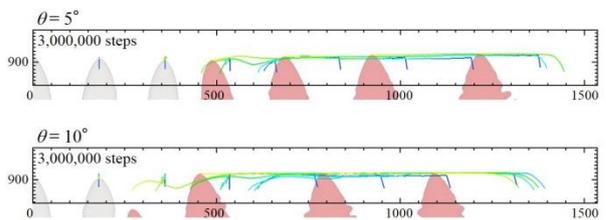


Fig. 3 Dendrite side views at 3,000,000 steps and trajectories of dendrite tips for $\lambda = 31$ and $\theta = 5^\circ$ and 10° .

図 4 はせん断流内における dendrite 成長シミュレーションの結果、図 5 は重力により dendrite が落下しながら成長する dendrite の結果である。図 4 のせん断流の計算では、 $8,192 \times 1,024$ の格子、図 5 の沈降計

算では $2,024 \times 4,096$ の格子を用いている。いずれも 2 次元計算であるが、CPU 計算では数日必要となる計算であり、これを GPU 化することで約 30 倍程度の計算高速化を達成し、数時間での計算を可能とした。現在、このコードの並列 GPU 化作業を行っている。

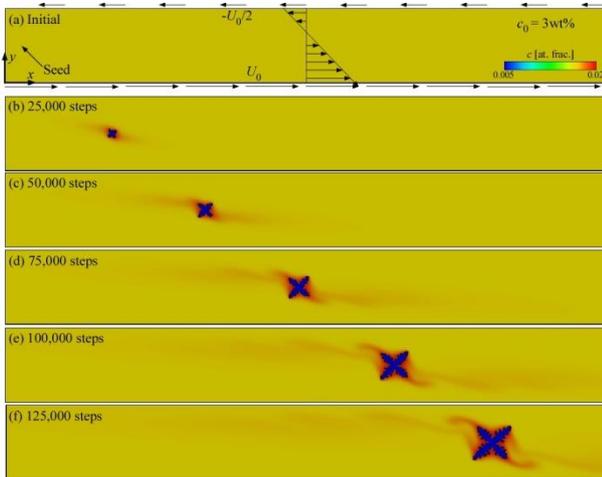


Fig. 4 Dendrite growth simulation in shear flow.

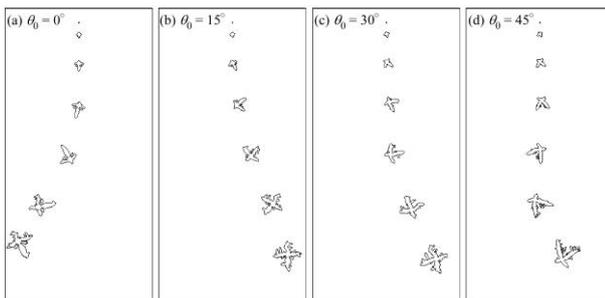


Fig. 5 Dendrite growth simulations in settling due to gravity. θ_0 is the initial angle of preferred growth direction of the seed.

まとめ、今後の課題

図 1～3 に示すデンドライト競合成長シミュレーションは現在データ整理中である。また、全ての条件に対して 500 万ステップの計算を行う予定であったが、全ての計算を終えることができなかったため、平成 27 年度も継続して計算を行う。計算およびデータ整理が完了した時点で、論文の執筆に取り組む予定である。図 4 と図 5 の流動を伴うシミュレーションにおいては、2 次元状態における系統的な計算を行い、デンドライト成長に対する液相流動とデンドライト運動の影響を詳細に検討する予定である。また、現在このコードの並列 GPU 化作業を行っており、3 次元計算への拡張を図る。