

## GPUスパコンを用いた大規模フェーズフィールドシミュレーションによる材料組織の高精度予測

京都工芸繊維大学 機械工学系 准教授

**高木 知弘**

(お問い合わせ先) E-MAIL : takaki@kit.ac.jp



### 研究の背景

強度に代表される金属材料の様々な特性を向上させるには、レアアースなど異なる材料を添加するだけではなく、1 mmの1/10000~1/10のサイズを持つ「材料組織」を適切に制御することがたいへん重要です。材料組織の制御は、様々な条件を試行錯誤する実験的手法によって行われていますが、この従来の方法は新材料の開発が長期に及ぶことが大きな課題です。

このため、材料開発を加速させる取り組みが世界中で行われています。これに不可欠なのがコンピュータシミュレーションによる「材料組織予測」ですが、材料組織の最小特徴量を精度よく表現しつつ、材料組織の形成に必要な広い領域を対象とするコンピュータシミュレーションは、計算コストがきわめて高く、通常のコンピュータで行うことは困難です。

### 研究の成果

最近、「グラフィックスプロセッシングユニット (GPU)」を使った高速なコンピュータシミュレーションが注目されています。そこで私たちは、数千枚のGPUを搭載した東京工業大学のスパコンTSUBAMEを使って、多数のGPUを並列させた超大規模な材料組織予測シミュレーションを可能にしました。その際に用いるのが、フェーズフィールド法という強力な材料組織予測モデルです。

構築したフェーズフィールド法の並列GPU計算法を

用いて、合金が凝固する際に形成されるデンドライト(樹枝状結晶)の大規模シミュレーションを行い、その競合成長現象を解明しました(図1)。さらに、凝固の後に生じる粒成長の超大規模フェーズフィールドシミュレーションを行い、理想粒成長の統計的挙動を明らかにしました(図2)。これらの成果は、大規模シミュレーションによって初めて達成されたものです。

### 今後の展望

私たちの大規模フェーズフィールドシミュレーションは、SPring-8などの大型放射光施設を利用した最先端のその場観察実験のスケールに比肩するようになってきました。そこで、シミュレーションを実験と同じ条件で行い、シミュレーションの精度向上と、実験による現象解明を可能とする、シミュレーションと実験をうまく融合させた材料組織予測の高精度化を行いたいと考えています。その結果、コンピュータシミュレーションによる材料開発の高速化が期待できます。

### 関連する科研費

2013-2015年度 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」

2017-2019年度 基盤研究 (A) 「大規模計算とその場観察の定量的融合による革新的材料組織予測法の開発」

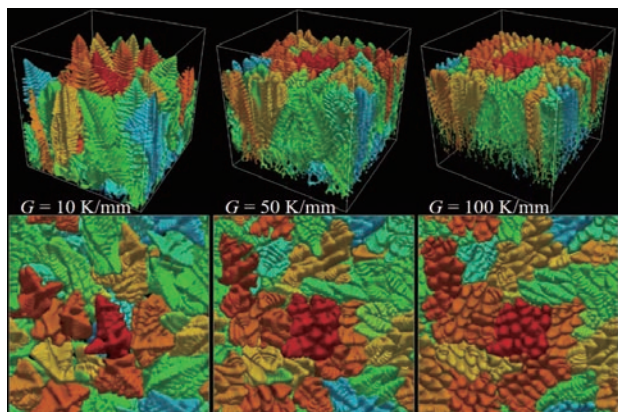


図1 条件を変えて行ったデンドライト競合成長の超大規模シミュレーション。上段は斜め上から見た図(下から上に凝固が進む)。下段は真上から見た図。固体表面のみを可視化している。

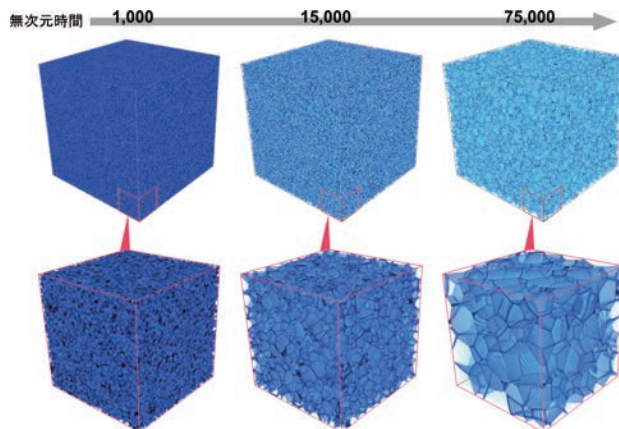


図2 800個のGPUを並列させて行った、世界最大の理想粒成長シミュレーション。青い壁で区切られた300万個以上の微小結晶(結晶粒)が、競合的に成長し粗大化する過程で数を減らしている。