坂根 慎治 助教
高木 知弘 教授

お問合せ先
corc@kit.ac.jp
産学公連携推進センター

大規模3次元フェーズフィールド凝固計算
GPUと解適合格子法による凝固組織予測計算の高速化

■キーワード
凝固　デンドライト成長　GPU　解適合格子法　フェーズフィールド法

■研究の概要

鋳造や溶接、積層造形などの金属が凝固するプロセスを経る製品の品質は、製造時に形成される凝固組織によって決定されます。そのため、それらの製品の品質向上には高精度な凝固組織予測が不可欠です。典型的な凝固組織形態であるデンドライト（樹枝状結晶）の成長を高精度に予測可能な数値計算手法としてフェーズフィールド(PF)法が発展しています。PF法を用いてデンドライト成長の定量的評価を行うためには、固液界面近傍の計算格子にデンドライトの先端曲率半径の0.1～0.2倍程度の格子幅を用いる必要があり、多数の3次元デンドライト結晶が相互作用しながら成長するようなシミュレーションの実施にはスーパーコンピュータを用いた大規模計算が必須でした。

本研究では、並列演算性能の高いGraphic processing unit (GPU)を用いたPF凝固計算にブロック構造解適合格子を適用し、固液界面近傍にのみ細かい数値格子を割り当てることで、計算コストの削減に成功しました。また、複数のGPUを用いた並列化により、GPU一枚あたりのメモリサイズに制約されずに計算規模を拡張できるようになりました。

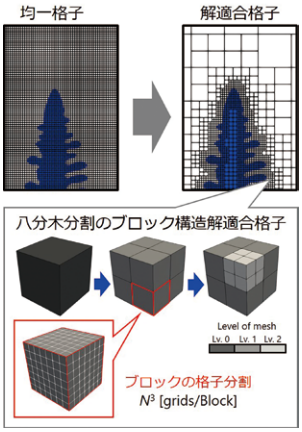

図 1. ブロック構造解適合格子法の概略

■研究・技術のプロセス／研究事例

開発手法を用いて二元合金の連続冷却中の凝固組織成長計算を行いました。最小格子幅で換算して1536^3格子の立方領域を過冷却溶液で満たし、領域隅に固相核を配置した状態でシミュレーションを開始し、100万タイムステップまで計算しました。NVIDIA社のGPU、Tesla P100を64枚用いた計算では、均一格子を用いた場合の計算よりも凝固開始時において約17倍、計算全体で約2.9倍の高速化を達成しています。この時、各GPUあたりの計算量が均一になるように、複数GPU並列計算における分割領域の境界を動的にスライドさせています。また、今回の計算では、均一格子を用いた場合にはGPUのメモリサイズの制約により4枚のGPUでの計算は出来ないのですが、解適合格子法を適用することによって、領域内の格子点数が少ない条件であれば少ない枚数のGPUでも広い計算領域を用いて計算できることが分かりました。現在は、本計算手法を液相流動や固体の運動を伴う凝固問題へ拡張する研究を行っています。

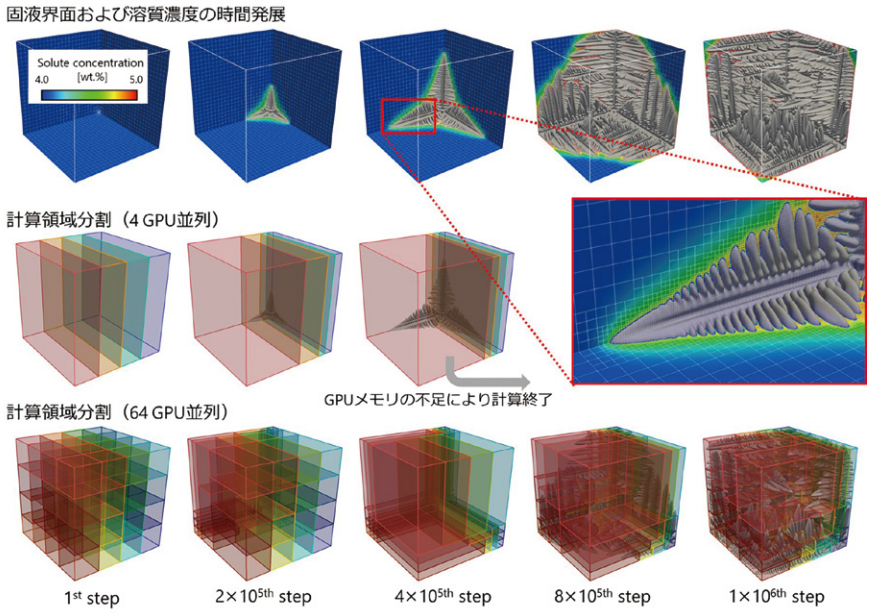

図 2. 解適合格子法を適用した二元合金凝固中の 3 次元デンドライト成長の複数 GPU 並列計算結果

■セールスポイント

GPUを用いたPF凝固計算への解適合格子法の適用により、均一格子を用いる場合よりも計算格子点数を削減し計算の高速化を達成しました。本手法はPF法を用いた他の材料組織予測計算の高速化にも応用可能です。