

AMR法を適用したデンドライト成長シミュレーションの 複数GPU並列化

坂根 慎 治

京都工芸繊維大学大学院 工芸科学研究科 設計工学専攻

1. はじめに

金属材料の機械的特性は、メゾスケール(0.1~100 μm)における材料組織形態に強く依存する。特に鋳造時に形成される凝固組織は、全ての金属材料の初期組織となり後の加工製品の組織形態に強く影響するため、その高精度な予測と制御が材料組織最適化の鍵となる。

過冷却溶液中で凝固が生じる際に見られる典型的な凝固組織形態としてデンドライト(樹枝状)形態が知られている。このデンドライト組織の成長を高精度に予測可能な数理モデルとしてPhase-field (PF)法が発展している¹。このPF法では拡散界面モデルを採用しているため、デンドライトの曲率を有する界面形態を精度よく表現するにはその曲率半径よりも数倍細かい数値格子を必要とする。そのため、PF法は計算コストが高く、多くの先行研究が2次元問題や3次元デンドライト1本の評価に限定されていた²。

近年、PF法を用いたデンドライト成長計算の高速化のために、並列演算性能の高いGraphic processing unit (GPU)が用いられている²⁻⁵。このGPUを多数並列した大規模計算手法^{2,3}によって、対流の無い二元合金の過冷却溶液中で鋳型壁面に生じた固相核から数十から数百本の3次元柱状デンドライトが同時に多数成長する大規模シミュレーションが実現された⁶⁻⁸。一方で、凝固の問題は固液相変態に加えて、熱・溶質の移流拡散や液相流動、固体の運動・衝突・結合などが同時に起こるマルチフィジックス問題であり、実用的な凝固組織予測のためには、それらの影響を同時に評価することが重要である。しかしながら、液相流動や固体の運動を考慮したPFモデル⁹⁻¹¹は計算コストが更に高くなるため、それらの計算では未だに3次元デンドライト数個の成長^{12,13}や二次元問題の計算¹¹に限定されている。統計的信頼性の高い組織形態予測のためには多数のデンドライトを取り扱うことが重要であり、PF凝固モデルの拡張に伴う計算コストの増大に応じて、PF計算で取り扱える時空間領域の更なる大規模化は必須である。

PF法を用いたデンドライト成長シミュレーションの効率化のためにAdaptive mesh refinement (AMR)法が用いられている^{14,15}。AMR法を適用したPF凝固計算では、高い空間解像度を必要とする固液界面近傍に細かい数値格子を配置し、それ以外の領域に粗い格子を配置することで、計算量を大幅に削減できる。しかしながら、PF凝固計算へのAMR法の適用はCPUを用いた計算に限定されており、GPUを用いた計算への適用例は報告されていない。

そこで、本研究では、複数GPU並列計算によるデンドライト凝固シミュレーションの更なる効率化の第一段階として、複数GPU並列2次元PF凝固計算へのAMR法適用を行う。このとき、AMR法の適用により空間ごとの計算量が不均一になるため、各GPUが受け持つ計算量が均一になるよう動的負荷分散の実装も行う。また、開発手法の計算性能を評価し、AMR法の適用による計算効率化の効果を示す。

2. 二元合金一方向凝固モデル

計算には、大野らによって開発された二元合金凝固のための定量的PFモデルを一方向凝固問題に拡張したモデル¹⁶を用いる。ここで、一方向凝固中の計算領域内の温度場は frozen temperature approximation に基づき $T = T_0 + G(y - V_p t)$ と設定する¹⁷。ここで、 T_0 は基準温度、 G は y 方向の温度勾配、 V_p は引抜速度である。次に、相の状態を表すPF変数 ϕ を導入し、 $\phi = +1$ において固相、 $\phi = -1$ において液相と定義する。PF変数の時間発展方程式は次式で表す。

$$\tau_0 a_s(\mathbf{n})^2 [1 - (1-k)u'] \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \left[W_0^2 a_s(\mathbf{n})^2 \nabla \phi \right] + \sum_{r=x,y} \frac{\partial}{\partial r} \left[W_0^2 a_s(\mathbf{n}) \frac{\partial a_s(\mathbf{n})}{\partial \phi_r} |\nabla \phi|^2 \right] + \phi(1 - \phi^2) - \lambda^* (1 - \phi)^2 (u + u') \quad (1)$$

ここで、 τ_0 はPF緩和時間、 W_0 は界面幅である。 $a_s(\mathbf{n})$ は立方晶の界面異方性を表現するための関数であり、次式で表す。

$$a_s(\mathbf{n}) = \bar{a} (1 - 3\varepsilon_4) \left[1 + \frac{4\varepsilon_4}{1 - 3\varepsilon_4} \frac{(\partial \phi / \partial x)^4 + (\partial \phi / \partial y)^4}{|\nabla \phi|^4} \right] \quad (2)$$

ここで、 $\mathbf{n} = \nabla \phi / |\nabla \phi|$ は界面法線方向の単位ベクトル、 ε_4 は界面異方性強度である。式(1)右辺第4項の λ^* は熱力学的駆動力の係数、 u は無次元溶質濃度であり、 $u = (C_l - C^e) / (C^e - C_s^e)$ と定義する。ここで、 C_l と C_s は液相と固相における溶質濃度、 C^e と C_s^e は液相と固相における平衡溶質濃度である。本研究では希薄溶体を対象とし、分配係数 $k = C_s / C_l = C_s^e / C_l^e$ が成立すると仮定する¹⁸。なお、界面における溶質濃度 C は $C = [(1 - \phi)C_l + (1 + \phi)C_s] / 2$ で表される。 $u' = (y - V_p t) / l_t$ は一方向凝固問題への拡張によって追加された温度依存性の補正項である。ここで、 l_t は熱拡散長であり、 $l_t = |m|(1-k)C_0 / (kG)$ であらわされる。なお、 m は液相線勾配、 C_0 は初期溶質濃度である。

二元合金の無次元溶質濃度 u の時間発展方程式を次式で表す。

$$\frac{1}{2} [1 + k - (1-k)\phi] \frac{\partial u}{\partial t} = \nabla (D_l q(\phi) \nabla u - \mathbf{J}_{AT}) + \frac{1}{2} [1 + (1-k)u] \frac{\partial \phi}{\partial t} - \nabla \cdot \mathbf{J} \quad (3)$$

ここで、 $q(\phi)$ は補間関数であり、 $q(\phi) = [kD_s + D_l + (kD_s - D_l)\phi] / (2D_l)$ である。 D_l と D_s は液相および固相における溶質拡散係数である。 \mathbf{J}_{AT} はPF界面における溶質の流束を補正するアンチトラッピング流束項であり、次式で表される¹⁶。

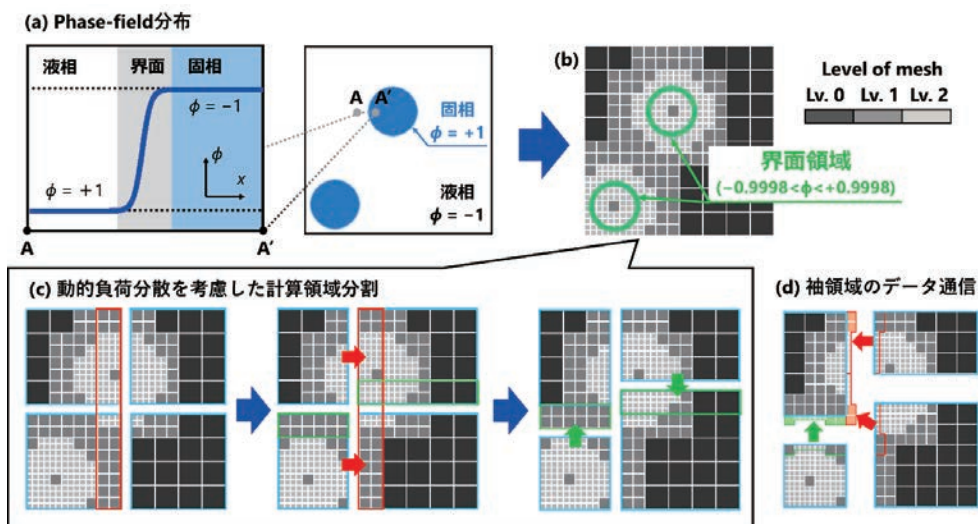
$$\mathbf{J}_{AT} = -\frac{1}{2\sqrt{2}} \left(1 - \frac{kD_s}{D_l} \right) W_0 [1 + (1-k)u] \frac{\partial \phi}{\partial t} \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \quad (4)$$

また、 $\nabla \cdot \mathbf{J}$ はデンドライトの高次アームを生成するためのノイズ項である¹⁹。

式(1)、(3)の微分項の計算には有限差分法を用いる。ここで、式(1)と式(3)の時間微分項は、風上一次微分を用いて導出する。式(1)と式(3)のラプラシアン項はそれぞれ第一、第二近接格子点を用いた9点差分³および二次精度中心差分を用いて導出する。

3. AMR 法と複数 GPU 並列計算の実装

図1にAMR法を適用した2次元PF凝固の複数GPU並列計算の概略を示す。まず、図1(a)に示すようなPF分布を持つ計算領域を、四分木構造に基づき図1(b)に示すように格子細分化を行う。このとき、まず始めに計算領域を粗い正方ブロックに分割する。そのブロックを細分化レベル0として、レベル0ブロックを n 回再帰的に四分木分割したブロックを細分化レベル n と定義する。格子の細分化にあたり、固液界面領域($-0.9998 < \phi < 0.9998$)に細分化レベル最大のブロックが割り当てられるまで再帰的に四分木分割を行う。また、界面領域に配置されたブロックと隣接するブロックにも細分化レベル最大のブロックを割り当て、それ以外の領域には隣接ブロックのレベル差が1以下となる範囲で最大限粗いブロックを割り当てる。本研究では、GPUを用いた式(1)、式(3)の有限差分計算において、各スレッドのメモリアクセスが連続的になるように、分割したブロックに $N \times N$ の数値格子を割り当てるブロック構造AMR法を採用した^{20, 21}。次に、複数GPU並列化に伴う動的負荷分散のイメージを図1(c)に示す。GPU並列のため、まず計算領域は2次元方向に均等に分割される。その後、スライスグリッド法²²に基づき各GPUが受け持つ格子点数が均一になるように領域境界を移動させることで動的負荷分散を行う。ここで、計算領域境界の移動は細分化レベル0のブロック幅単位で行う。また、図1(d)に示すように、各計算ステップの開始時には分割領域境界に接するブロック内に含まれる ϕ と u の格子点情報を隣接する分割領域を受け持つGPUに転送し、分割領域袖の情報も補完する。計算には、東京大学のスーパーコンピュータReedbush-Lを用いた。Reedbush-Lは、4基のGPU (NVIDIA社GPU Tesla P100)を搭載した計算ノード64基から構成される。計算コードは、CPU計算部分をC/C++、GPU計算部分をCompute Unified Device Architecture (CUDA)を用いて記述した。また、ノード間通信にはOpenMPIを用いた。

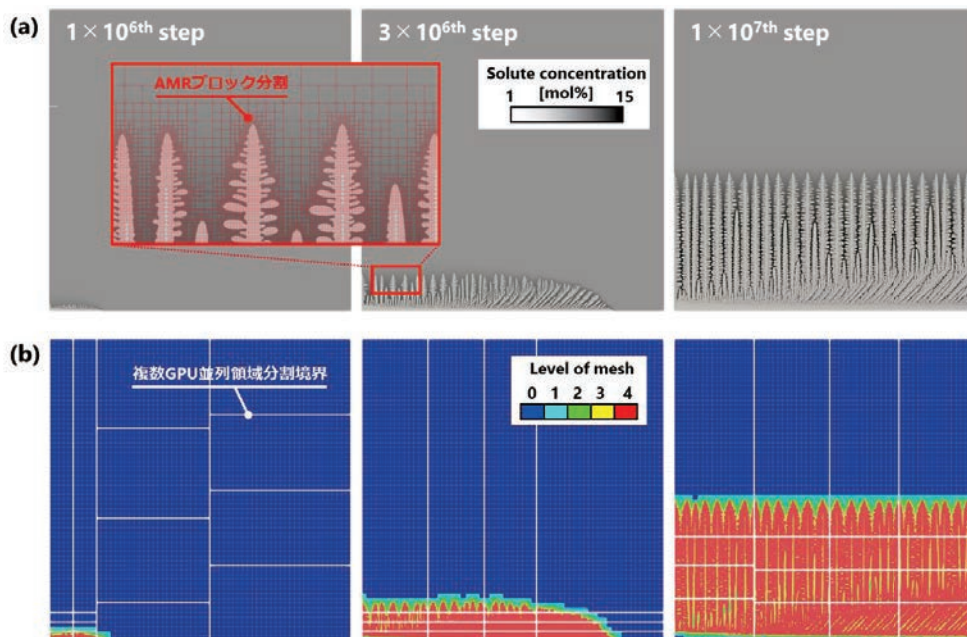


第1図: AMR法を適用した2次元 phase-field 凝固シミュレーションの複数 GPU 並列計算概略:
 (a) Phase-field 分布; (b) 計算領域の AMR ブロック分割; (c) 動的負荷分散を考慮した計算領域分割;
 (d) CPU を介した MPI 通信による袖領域データの GPU 間転送。

4. 一方向凝固シミュレーション

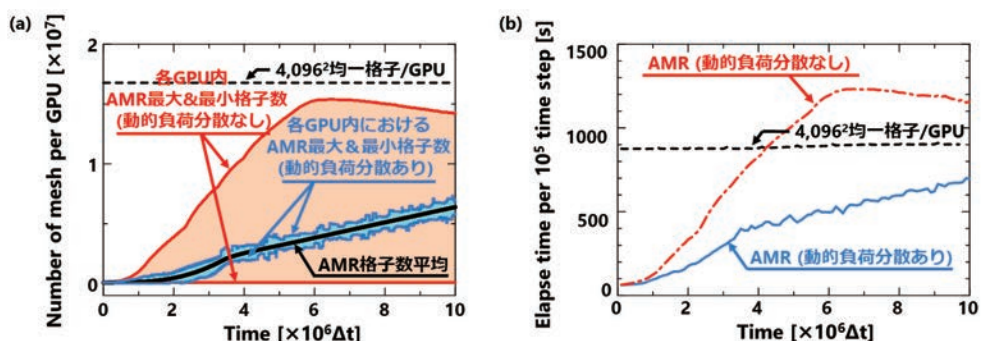
開発手法の計算性能評価のため、2次元一方向凝固シミュレーションを行う。ここで、計算に必要な物性値はSCN-acetoneの値を用いた²³。この材料は、透明かつ融点が低いことから通常の光学カメラによる dendroライト成長過程の直接観察が可能であり、その場観察で用いられている。計算領域底面の初期過冷度 $\Delta T = 1.37$ K、初期溶質濃度 $C_0 = 3.0$ wt.%の過冷却溶液で満たされた 8.192×8.192 mm²の計算領域の左下隅に半径 $6 \mu\text{m}$ の固相核を配置して計算を開始する。このとき、 $G = 10$ K/mm、 $V_p = 10 \mu\text{m/s}$ と設定した。計算に用いる最小の格子幅 Δx_{\min} は $\Delta x_{\min} = 0.5 \mu\text{m}$ とし、細分化レベル0から4までの5段階で格子の細分化を行った。なお、四分木分割された各ブロックには 16×16 の数値格子を割り当てた。時間増分 Δt は、フォン・ノイマンの安定性解析に基づき、 Δx_{\min} を基準に $\Delta t = \Delta x_{\min}^2 / (5D_l) = 3.937 \times 10^{-5}$ sと設定した。計算には16 GPUを用い、 10^7 stepまでの計算を行った。

図2(a)(b)に一方向凝固シミュレーション中の溶質濃度と各細分化レベルのブロック配置の時間変化をそれぞれ示す。また、図2(b)のブロック配置図に白線で複数GPU並列のための計算領域分割境界を示す。図2(a)に示すように、固相が計算領域底面に沿って左から右へと濡れ広がる間に、 y 方向の温度勾配に沿って一方向に柱状 dendroライトが成長する様子が確認できる。このとき、図2(b)において計算領域境界線は、計算負荷の集中する細分化レベル最大の格子が割り当てられた領域を均等に分割するように移動している。さらに、図2(a)中に時刻 $t = 3.0 \times 10^6 \Delta t$ の dendroライト先端近傍の溶質濃度場の拡大図を示している。なお、拡大図中ではAMRのブロック分割を赤線で示している。図に示すように、固液界面近傍に細かいブロックが割り当てられ、それ以外の領域には粗いブロックが割り当てられている様子が確認できる。

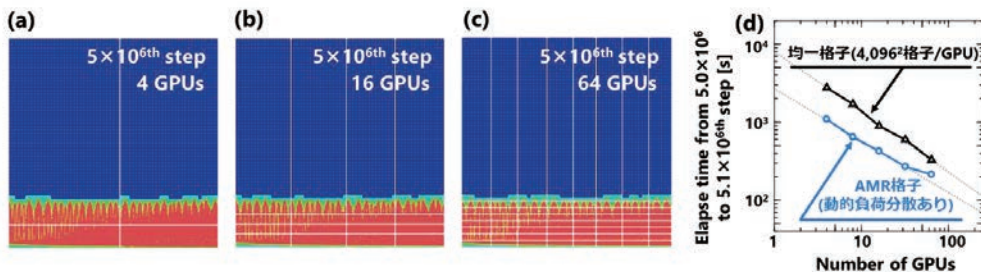


第2図: 動的負荷分散を考慮した2次元一方向 dendroライト凝固シミュレーションにおける各時刻の(a)溶質濃度分布および(b)各細分化レベルのAMRブロックの配置。

図3(a)と図3(b)にそれぞれ、シミュレーション中の格子点数と 10^5 stepあたりの計算実行時間の時間推移をプロットしたグラフを示す。ここでは比較のために、動的負荷分散を考慮した場合としない場合のAMR格子を用いた計算の結果と、格子幅 Δx_{\min} の均一格子を用いた計算における結果をそれぞれ示す。図3(a)において、黒実線は各GPUに割り当てられたAMR格子点数の平均値を、青および赤の実線はそれぞれ、動的負荷分散を考慮した場合としない場合の各GPUが受け持つAMR格子点数の最大値と最小値を示している。さらに、均一格子を用いた場合の格子点数を黒破線で示す。また、図3(b)において、青の実線と赤の一点鎖線でそれぞれ、動的負荷分散を考慮した場合としない場合の 10^5 stepあたりの計算実行時間を、黒の破線で均一格子を用いた場合の計算実行時間を示している。図3に示すように、動的負荷分散を考慮しないAMR計算では、デンドライトが広がる計算領域下部を受け持ったGPUに計算負荷が集中してボトルネックとなることで、計算実行時間が増大している。特に、 $4.0 \times 10^{6\text{th}}$ step以降においては均一格子を用いた場合の計算よりも計算性能が悪化している。一方で、動的負荷分散を考慮した場合、図3(a)に示すように各GPUが受け持つ格子点数の最大値と最小値の差は一定の範囲内に収まっており、妥当に動的負荷分散が行われていることを確認できた。このとき、計算実行時間は、格子点数に応じて増大しているが、いずれの時刻においても均一格子を用いた計算よりも計算実行時間が短縮された。特に、計算初期の時刻 $1.0 \times 10^{6\text{th}}$ stepにおいて、AMR法の適用により、均一格子を用いた場合に比べて格子点数が99.3%削減され、約9.2倍の高速化を達成した。



第3図: 一方向デンドライト凝固シミュレーション中の(a)格子点数および(b) 10^5 step 当たりの計算実行時間の時間推移。



第4図: 複数GPU並列AMR-PF凝固計算コードの強スケーリング評価結果: (a) 4, (b) 16, (c) 64 GPU並列計算における時刻 $5.0 \times 10^{6\text{th}}$ stepでの各細分化レベルのAMRブロックの配置と複数GPU並列境界線; (d) 使用GPU数と 1.0×10^5 step当たりの計算実行時間の関係。

最後に、開発手法の強スケーリング性能の評価のために、前述の一方凝固シミュレーションと同一の凝固条件の計算を4, 8, 16, 32, 64 GPUを用いてそれぞれ行い、 $5.0 \times 10^{6\text{th}}$ stepから $5.1 \times 10^{6\text{th}}$ stepまでの計算に要した時間を図4(d)にプロットした。また、比較のために、格子幅 Δx_{min} の均一格子を用いた場合の計算結果も同図中に示す。図に示すように、4 GPU並列での計算に要した時間に対して、8 GPU並列で1.69倍、16 GPU並列で2.56倍、32 GPU並列で4.04倍、64 GPU並列で5.09倍の高速化を達成した。このとき、いずれのGPU数においても均一格子を用いた計算よりも高速化できることが確認できた。以上の結果より、AMR法を複数GPU並列PF凝固シミュレーションに適用することで、デンドライト成長計算の更なる高速化が実現できることを示した。特に、低固相率の場合において高速化の効果が顕著であり、そのような凝固条件でのシミュレーションにおいて有用な計算ツールになると期待している。

5. 結言

Phase-field 二元合金一方凝固シミュレーションのための複数 GPU 並列計算コードに AMR 法を適用することで、計算の高速化を達成した。今回、開発した計算手法を用いることによって、均一格子を用いた計算では取り扱うことが難しかった、デンドライトが疎になる凝固条件での凝固組織形態予測が容易になると期待される。今後は、開発した計算手法の3次元問題への拡張や、凝固モデルの液相流動および固相の運動を伴う二元合金凝固モデルへの拡張によって、より広範な凝固現象を取り扱えるようにしたいと考えている。

6. 謝辞

本研究は、東京大学情報基盤センター「若手・女性利用者推薦」平成30年度後期採択課題および学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(JHPCN) 萌芽型共同研究(課題番号:EX18324)の支援を受けた。また、本研究を進めるにあたり、京都工芸繊維大学の高木知弘教授、北海道大学の野宗一教授、東京大学の澁田靖准教授、東京工業大学の青木尊之教授、東京大学の下川辺隆史准教授から非常に有意義なご助言をいただいた。記して謝意を表す。

参 考 文 献

1. T. Takaki, *ISIJ Int.*, Vol. 54, pp. 437-444, 2014.
2. S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, T. Shimokawabe and T. Aoki, *IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng.*, Vol. 84, p. 012063, 2015.
3. T. Shimokawabe, T. Aoki, T. Takaki, T. Endo, A. Yamanaka, N. Maruyama, A. Nukada and S. Matsuoka, *In Proceedings of International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis* pp. 1-11, 2011.
4. M. Ohno, *Phys. Rev. E*, Vol. 86, p. 051603, 2012.
5. D. Tourret and A. Karma, *Acta Mater.*, Vol. 82, pp. 64-83, 2015.
6. T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Shimokawabe and T. Aoki, *ISIJ Int.*, Vol. 56, pp. 1427-1435, 2016.
7. T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Shimokawabe and T. Aoki, *Acta Mater.*, Vol. 118, pp. 230-243, 2016.
8. T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Aoki and C.-A. Gandin, *Materialia*, Vol. 1, pp. 104-113,

- 2018.
9. C. Beckermann, H.J. Diepers, I. Steinbach, A. Karma and X. Tong, *J. Comput. Phys.*, Vol. 154, pp. 468-496, 1999.
 10. R. Rojas, T. Takaki and M. Ohno, *J. Comput. Phys.*, Vol. 298, pp. 29-40, 2015.
 11. T. Takaki, R. Sato, R. Rojas, M. Ohno and Y. Shibuta, *Computational Materials Science*, Vol. 147, pp. 124-131, 2018.
 12. S. Sakane, T. Takaki, R. Rojas, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Shimokawabe and T. Aoki, *J. Cryst. Growth*, Vol. 474, pp. 154-159, 2017.
 13. A. Zhang, S. Meng, Z. Guo, J. Du, Q. Wang and S. Xiong, *Metallurgical and Materials Transactions B*, Vol. 50, pp. 1514-1526, 2019.
 14. Z. Guo and S.M. Xiong, *Comput. Phys. Commun.*, Vol. 190, pp. 89-97, 2015.
 15. X. Zhang, J. Kang, Z. Guo, S. Xiong and Q. Han, *Comput. Phys. Commun.*, Vol. 223, pp. 18-27, 2018.
 16. M. Ohno and K. Matsuura, *Phys. Rev. E*, Vol. 79, p. 031603, 2009.
 17. H.J. Diepers, D. Ma and I. Steinbach, *J. Cryst. Growth*, Vol. 237-239, pp. 149-153, 2002.
 18. S.G. Kim, W.T. Kim and T. Suzuki, *Phys. Rev. E*, Vol. 60, pp. 7186-7197, 1999.
 19. B. Echebarria, A. Karma and S. Gurevich, *Phys. Rev. E*, Vol. 81, p. 021608, 2010.
 20. H.-Y. Schive, J.A. ZuHone, N.J. Goldbaum, M.J. Turk, M. Gaspari and C.-Y. Cheng, *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, Vol. 481, pp. 4815-4840, 2018.
 21. H.-Y. Schive, Y.-C. Tsai and T. Chiueh, *The Astrophysical Journal Supplement Series*, Vol. 186, p. 457, 2010.
 22. S. Tsuzuki and T. Aoki, *In Proceedings of International Conference on High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis* pp. 1-2, 2014.
 23. A. Badillo, D. Ceynar and C. Beckermann, *J. Cryst. Growth*, Vol. 309, pp. 197-215, 2007.