

科学研究費助成事業（学術研究助成基金助成金）研究成果報告書

平成 25 年 6 月 7 日現在

機関番号：12605

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2011～2012

課題番号：23760088

研究課題名（和文）GPU アクセラレートされた Phase-Field 法に基づく複相組織鋼の材質予測

研究課題名（英文）Prediction of Microstructure and Mechanical Property of Multiphase Steel using GPU-accelerated Phase-Field Method

研究代表者

山中 晃徳 (YAMANAKA AKINORI)

東京農工大学・大学院工学研究院・准教授

研究者番号：50542198

研究成果の概要（和文）：結晶塑性有限要素法、GPU で高速化されたマルチフェーズフィールド法および均質化法を用いて、高強度鋼の複相マイクロ組織形態と力学特性を予測するための数値シミュレーション法の開発を行った。さらに、開発したシミュレーション法を用いて、熱間加工におけるオーステナイト相の変形挙動解析、連続冷却におけるフェライト相形成過程の予測、さらにはマイクロ組織形態を考慮した DP 鋼の数値材料試験に至る一連の材質予測シミュレーションを実現した。

研究成果の概要（英文）：We developed a new numerical simulation method by combining the crystal plasticity finite element method, the GPU-accelerated multi-phase-field method and the homogenization method in order to predict microstructure formations and mechanical properties of high strength multiphase steels, such as dual-phase (DP) steel. In this study, using the developed method, we systematically investigated the austenite-to-ferrite transformation from the hot-deformed austenite phase and the uniaxial tensile deformation behavior of the DP steel on the basis of the microstructural morphology simulated by the multi-phase-field method.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
交付決定額	3,200,000	960,000	4,160,000

研究分野：計算力学、計算材料学

科研費の分科・細目：機械工学・機械材料・材料力学

キーワード：フェーズフィールド法、鉄鋼材料、材質予測、GPGPU、均質化法、有限要素法

1. 研究開始当初の背景

昨今のレアメタル枯渇問題や環境問題を社会的背景として、従来行われてきた化学組成制御に置き換わって、鉄鋼材料の製造工程における塑性加工プロセスと熱処理プロセスを巧みに制御してマイクロ組織制御をすることにより、低合金鋼に所望の力学特性を付与する材料開発技術の確立が求められている。しかしながら、鉄鋼材料の化学組成と加工熱処理プロセスの条件には、無限の組み合わせがあり、かつ、そこで生じるマイクロ組織変化は極めて複雑である。したがって、最終

的に得られるマイクロ組織から材料の力学特性を実験的手法のみで予測することは容易ではない。これに対して、申請者はフェーズフィールド法と有限要素法を用いた、鉄鋼材料のマイクロ組織と変形挙動を予測するための数値シミュレーション法の構築を進めている。これまでの研究では、鉄鋼材料の基本構成組織の形成シミュレーションを可能とし、さらにフェーズフィールド法で得られた組織形態情報に基づき材料の変形挙動を解析する数値材料試験法の基礎検討を行ってきた。しかしながら、上記の解析手法を実

用に供するためには、Dual-Phase(DP)鋼に代表される実用高強度鋼中の複合組織形態と変形挙動の両方を定量的に予測可能とする必要がある。これが実現すれば、数値シミュレーションを援用した既存鉄鋼材料の更なる高機能化、低合金鋼に所望の力学特性を付与するための有益な材料組織設計指針を示すことが可能になると期待されている。

2. 研究の目的

本研究では、Graphics Processing Unit (GPU) による超多スレッド計算法により高速化したフェーズフィールド法を用いて鉄鋼材料中の複相組織形態や各相の空間分布、残留応力分布を予測し、その予測結果を基に、均質化法に基づく有限要素解析を用いて鉄鋼材料の変形挙動を評価可能な数値シミュレーション法を確立することを目的とした。さらに、フェーズフィールド法と均質化有限要素法を連成解析することで、加工誘起相変態や変態誘起塑性現象を明らかにするための、数値シミュレーション法の構築を検討した。

3. 研究の方法

2. で示した研究目的を達成するため、下記(1)～(3)の研究を実施した。

(1) 熱間加工中のオーステナイト相の変形挙動とその後の連続冷却過程におけるフェライト相の形成過程を予測するために、結晶塑性有限要素法とマルチフェーズフィールド法を用いた数値シミュレーション法を開発した。

(2) マルチフェーズフィールド法によるマイクロ組織形成シミュレーションを高速かつ効率的に行うため、GPUによる超多スレッド計算法を開発した。

(3) (1) で構築した数値シミュレーションで得られるマイクロ組織形態の画像情報をもとに、均質化結晶塑性有限要素法によるDP鋼の数値材料試験法を構築した。また、これを用いて、DP鋼中のフェライト相の分布形態が材料の変形挙動に及ぼす影響を明らかにした。

4. 研究成果

(1) 結晶塑性有限要素法とマルチフェーズフィールド法を用いた加工オーステナイト相におけるフェライト相形成過程の数値シミュレーション法の構築

実用高強度鋼の複合組織形態(たとえば、DP鋼のフェライト+マルテンサイト2相組織の形態)を考慮して、高強度鋼の変形挙動や強度を予測するためには、熱間加工後の連続冷却過程におけるフェライト相の形成過程を予測する必要がある。そこで本研究では、結晶塑性有限要素法とマルチフェーズフィールド法を用いて、オーステナイト単相温度

域での熱間加工後の連続冷却過程で生じるフェライト相形成過程を予測するためのシミュレーション法を構築した。

図1は、平面ひずみ状態を仮定し、ひずみ10%および20%まで圧縮変形したオーステナイト相中の結晶方位分布および蓄積エネルギー分布を結晶塑性有限要素法で解析した結果である。本解析により、オーステナイト相に加えられるひずみが増加するとともに粒界近傍で転位密度が増大し始め、図中の矢印で示すように、母相粒を横断するような高い蓄積エネルギーを有する領域が形成される現象が再現された。また、こうした領域では、図2において矢印で示すように塑性変形による方位回転が顕著に生じており、結晶方位差が 15° 以上の大角粒界が形成された。

次に、図1および図2に示したオーステナイト相中の変形状態から、古典的核形成理論に基づきフェライト相の核形成サイト密度および核形成速度を求め、マルチフェーズフィールド法によるフェライト相形成過程のシミュレーションを行った。

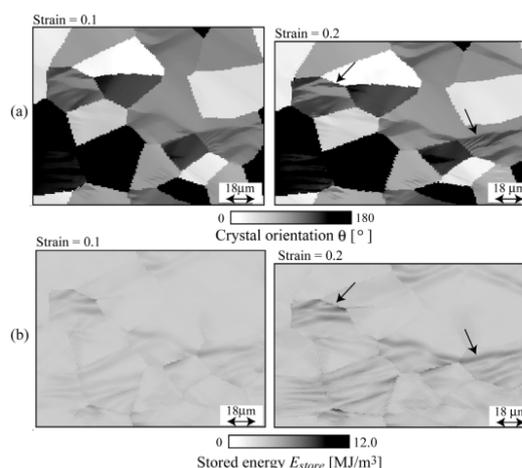


図1 ひずみ10%および20%まで熱間加工したオーステナイト相中の(a)結晶方位および(b)蓄積エネルギー分布

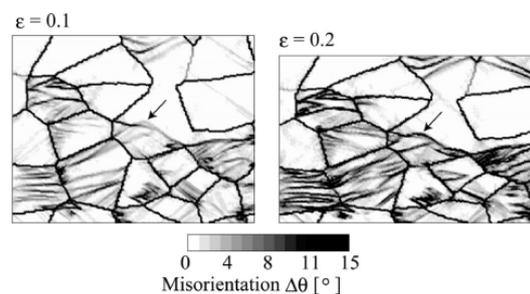


図2 ひずみ10%および20%まで熱間加工したオーステナイト相中の結晶方位差分布

図3は、ひずみ10%まで加工したオーステナイト相を、1090Kから1010Kまで5K/sの冷却速度で連続冷却したときに生じる、フェライ

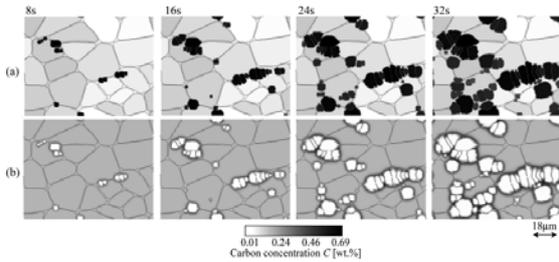


図 3 ひずみ 10%まで圧縮加工したオーステナイト相を連続冷却した際に生じるフェライト相形成過程

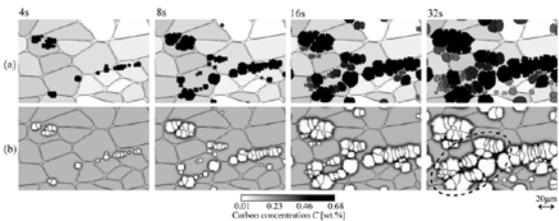


図 4 ひずみ 20%まで圧縮加工したオーステナイト相を連続冷却した際に生じるフェライト相形成過程

ト相形成過程のシミュレーション結果である。なお、本シミュレーションでは、オーステナイト粒界や粒内変形帯上のフェライト核形成サイトの場所については、結晶方位差や蓄積エネルギーの大きさに基づき決定した。図 3 の結果より、変態初期には、フェライト相は主にオーステナイト粒界近傍に形成する傾向がある。しかし、温度が低下するに従い、加工によりオーステナイト粒内に導入された変形帯で多くのフェライト相が形成するようになることがわかる。一方、ひずみ 20%まで加工したオーステナイト相を同条件で冷却した時のフェライト相形成過程を図 4 に示す。図 3 の結果に比べて、明らかにフェライト相の核形成が促進されており、図 4 中の破線で示す領域においてはフェライト相の結晶粒径が小さくなることがわかる。

本シミュレーションでも再現された、オーステナイト相に大きな塑性変形を与え、母相の粒界面積を増加させることで、フェライト相の結晶粒が微細化されることは実験的にも確認されており、本シミュレーション結果はこれを定性的に説明するものである。

(2) マルチフェーズフィールド法を用いたフェライト相形成シミュレーションの GPU による高速並列計算

(1) で示したようにマルチフェーズフィールド法を用いることで、フェライト相の形成過程やそれに伴う炭素濃度変化を解析することができる。しかしながら、マルチフェーズフィールド法は、材料中の多結晶構造を

表現するために、複数の秩序変数を定義し、それらに対して非線形な時間発展方程式を解くため、計算コストが大きいことが問題である。したがって、(1) で示したようなフェライト相形成シミュレーションの 3 次元計算を行うためには、数値シミュレーションの高速化や効率化が必須となる。そこで、(1) で示したフェライト相形成シミュレーションに、GPU による超多スレッド計算法を適用した。

まず、マルチフェーズフィールド法によるマイクロ組織形成シミュレーションを GPU で計算するため、CUDA Fortran を用いた専用プログラムを開発した。GPU 計算のためのプログラムにおいては、CPU での処理内容を記述したホストコードと GPU での処理内容を記述したデバイスコードから構成され、デバイスコード内に計算内容を示す複数のカーネル関数が記述されている。本研究で開発したプログラムでは、メモリを効率的に使用し高速に計算するための Active Parameter Tracking 法のためのカーネル関数を含む 6 つのカーネル関数から構成される。

GPU による高速化性能を評価するため、1GPU を用いて差分格子点数 256×256 、結晶粒数 20、10000 計算ステップのフェライト相形成シミュレーションを実施し、その計算時間を CPU1 コアを用いた計算時間とコンピュータの自動並列化機能により 4CPU コアを用いた計算時間と比較した。また、それぞれに対して、APT 法を適用する場合と適用しない場合についても高速化性能を評価した。なお、GPU 計算には、NVIDIA 社製の GPU Tesla C2050 を用いた。

図 5 に、GPU と CPU の計算方法に対する計算時間と APT 法を適用せず CPU1 コアで計算した場合の計算時間を 1 としたときの、他の計算法による高速化倍率を示す。同じ CPU を用いた計算でも、APT 法を適用することで約 2 倍の高速化が可能であった。さらに、4CPU コアの並列計算を行うことにより高速化率は 4 倍にまで増加する。一方、GPU 計算に関しては、APT 法を適用しなければ 4CPU コアによる並列計算よりも遅くなるが、APT 法を適用することで、CPU1 コアを用いた計算の 15.3 倍、4CPU コアを用いた並列計算に比べても約 4 倍の高速化が可能であることが実証された。

図 6 に、本研究で比較を行った 5 つの計算法における各カーネル関数の実行時間を示す。いずれの計算法においても、フェーズフィールド変数の時間発展を計算しているカーネル関数 1 が最も計算時間を要するホットスポットとなっており、カーネル関数 1 を GPU により高速に解析することで、15 倍以上の高速化が可能となることがわかった。これは、GPU による超多スレッド計算がマルチフ

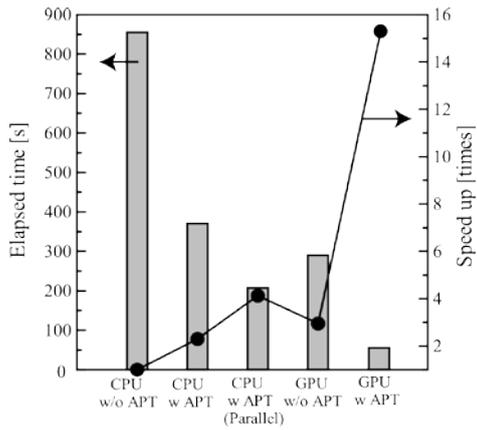


図5 マルチフェーズフィールドを用いたフェライト相形成シミュレーションの各計算方法による計算時間と高速化倍率。

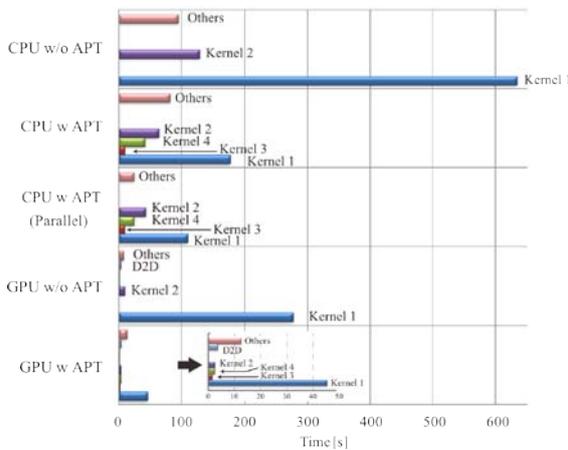


図6 各計算方法におけるカーネル関数ごとの実行時間の比較。

フェーズフィールド法に対しても有効な高速化法であることを実証する結果である。

(3) 均質化法結晶塑性有限要素法を用いた鉄鋼材料のマイクロ組織形態に基づく力学特性評価

上記(1)(2)で述べたように、GPUで高速化したマルチフェーズフィールド法を用いることで鉄鋼材料中のフェライト相の形成過程を予測することができる。さらに、予測されるフェライト相の形態は画像情報として得ることができるため、この画像情報を用いてフェライト+マルテンサイト2相組織の代表体積要素(RVE)を作成し、均質化法に基づく結晶塑性有限要素解析の入力情報とすることで、2相組織形態を考慮したDP鋼の数値引張試験を行った。

図7に、DP鋼の単軸引張数値材料試験を行った結果として得られた巨視的な真応力-真ひずみ曲線を示す。図中には、本解析で用いた、フェライト+マルテンサイト2相組織のRVEを示している。DP鋼に特徴的な連続的

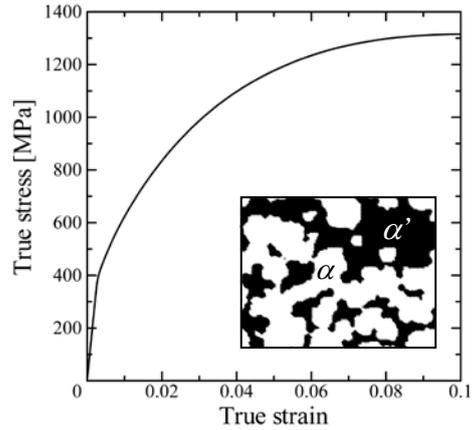


図7 均質化結晶塑性有限要素法によるDP鋼の単軸引張試験で得られる巨視的な真応力-真ひずみ曲線とRVE

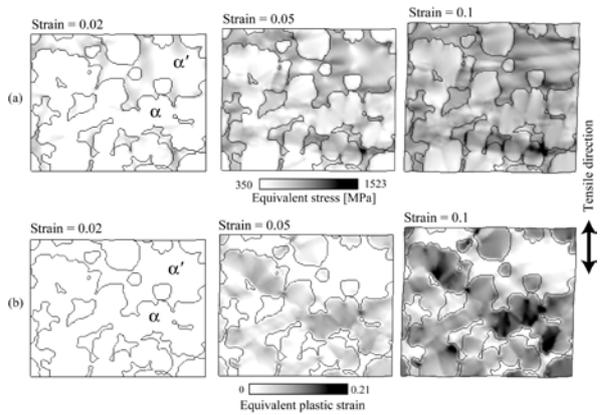


図8 各巨視的ひずみ状態における2相組織中の(a)相当応力および(b)相当塑性ひずみ分布

な降伏挙動を呈したのち、高い加工硬化挙動を示していることがわかる。

図8に、巨視的ひずみ0.02, 0.05 および0.1における、マイクロ組織内の相当応力および相当塑性ひずみ分布を示す。軟質なフェライト相で塑性変形が顕著に進行し、マルテンサイト相に挟まれたフェライト粒において局所的な塑性ひずみの集中がみられる。一方、フェライト相とマルテンサイト相で応力分配が生じ、マルテンサイト相において高い応力を示す傾向があることがわかる。

以上のように、マルチフェーズフィールド法によるマイクロ組織形成シミュレーションで得られる組織形態情報を用いて、RVEを作成し、均質化法に基づく結晶塑性有限要素解析を行うことで、マイクロ組織形態に依存した鉄鋼材料の変形挙動や強度を予測することが可能となった。

(4) 加工誘起変態や変態塑性現象の解明・予測に向けたシミュレーション法への課題

本研究の当初の計画では、上記で述べたGPUで高速化したフェーズフィールド法と

均質化法に基づく結晶塑性有限要素法を連成解析することで、加工誘起変態や変態塑性現象を解明し、シミュレーションにより予測するための数値計算手法の開発を行う予定であったが、均質化法に基づく有限要素解析の計算負荷は極めて大きく、本研究で購入した計算機では不可能であった。これについては、今後の課題としたいが、その解決方法としては、有限要素解析のソルバーに動的陽解法を採用することや動的陽解法の数値計算には、本研究の成果である GPU による高速計算を応用することが考えられ、これらについては現在も研究を進めている。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 7 件)

- ① A. Yamanaka and T. Takaki, Simulation of Microstructure Evolution and Deformation Behavior for Dual-phase Steel by Multi-phase-field Method and Elastoplastic Finite Element Method, International Journal of Automation Technology, 査読有, 7, (2013), pp.16-23.
- ② A. Yamanaka, T. Takaki, T. Aoki and T. Shimokawabe, Multiphase Field Simulation of Austenite-to-Ferrite Transformation Accelerated by GPU Computing, Journal of Computational Science and Technology, 査読有, Vol.6, (2012), pp.182-197. <http://dx.doi.org/10.1299/jcst.6.182>
- ③ A. Yamanaka, T. Takaki and Y. Tomita, Simulation of Austenite-to-Ferrite Transformation in Deformed Austenite by Crystal Plasticity Finite Element Method and Multi-Phase-Field Method, ISIJ International, 査読有, Vol.52, (2012), pp.659-668. <http://dx.doi.org/10.2355/isijinternational.52.659>
- ④ T. Aoki, S. Ogawa and A. Yamanaka, Multiple-GPU Scalability of Phase-Field Simulation for Dendritic Solidification, Progress in Nuclear Science and Technology, 査読有, Vol.2, (2011) pp.639-642.
- ⑤ A. Yamanaka and T. Takaki, Numerical Prediction of Mechanical Properties of Dual-Phase Steel by Using Multi-Phase-Field Method and Homogenization Method, Proceedings of COMPLAS XI, 査読無, CD-ROM, (2011) p.319 (1-12).
- ⑥ T. Shimokawabe, T. Aoki, T. Takaki, A. Yamanaka, A. Nukada, T. Endo, N., Maruyama and S. Matsuoka, Peta-scale Phase-Field Simulation for Dendritic Solidification on the TSUBAME 2.0 Supercomputer, The SC11 Technical Papers, 査読有, (2011), pp.1-1. <http://dx.doi.org/10.1145/2063384.2063388>
- ⑦ T. Takaki, A. Yamanaka and Y. Tomita, Multi-Phase-Field Simulations of Dynamic Recrystallization during Transient Deformation, ISIJ International, 査読有, Vol.51, (2011), pp.1717-1723. <http://dx.doi.org/10.2355/isijinternational.51.1717>

[学会発表] (計 11 件)

- ① T. Takaki, T. Shimokawabe, A. Yamanaka and Takayuki Aoki, Extra Large Scale Phase-field Simulations during Directional Solidification of Binary Alloy, 7 th International Conference on Modeling in Crystal Growth, October 28-31, 2012, Taipei, Taiwan
- ② A. Yamanaka and T. Takaki, Three-dimensional Simulation of Martensitic Transformation in Steel by using Crystal Plasticity Phase-Field Model, 6 th International Conference on Multiscale Materials Modeling, October 15-19, 2012, Biopolis, Singapore.
- ③ T. Takaki, A. Yamanaka and Y. Tomita, New Multi-Scale Hot-Working Model for Dynamic Recrystallization, 6 th International Conference on Multiscale Materials Modeling, October 15-19, 2012, Biopolis, Singapore.
- ④ 山中晃徳, 高木知弘, GPU による Multi-Phase-Field シミュレーションの高速化評価, 日本機械学会 第 25 回計算力学講演会, 2012 年 10 月 6-9 日, ポートアイランド南地区, 兵庫県神戸市.
- ⑤ 高木知弘, 山中晃徳, 富田佳宏, 熱間加工マルチスケールモデルの構築と基本特性評価, 日本機械学会 第 25 回計算力学講演会, 2012 年 10 月 6-9 日, ポートアイランド南地区, 兵庫県神戸市
- ⑥ 下川辺隆史, 青木尊之, 高木知弘, 山中晃徳, 額田彰, GPU スパコン TSUBAME 2.0 によるフェーズフィールド法を用いた 2 petaflops 樹枝状凝固成長計算, 日本計算工学会 第 17 回計算工学講演会, 2012 年 5 月 29-31 日, 京都教育文化センター, 京都府京都市.
- ⑦ 山中晃徳, Phase-Field 法と均質化法を用いた鉄鋼材料の組織・力学特性評価シミュレーション, 溶接学会 溶接構造シンポジウム 2011, 2011 年 11 月 15-16 日, 大阪大学銀杏会館, 大阪府吹田市
- ⑧ 山中晃徳, 高木知弘, マルチフェーズフ

イールド法を用いた加工オーステナイト相のフェライト変態シミュレーション, 日本塑性加工学会第 62 回塑性加工連合講演会, 2011 年 10 月 27-29 日, ホテル日航豊橋, 愛知県豊橋市

- ⑨ 高木知弘, 山中晃徳, 富田佳宏, MPF-DRX 法と FE 法による熱間加工マルチスケールモデルの構築, 日本機械学会 第 24 回計算力学講演会, 2011 年 10 月 8-11 日, 岡山大学, 岡山県岡山市
- ⑩ 下川辺隆史, 青木尊之, 高木知弘, 山中晃徳, マルチ GPU 計算による超大規模 Phase-Field シミュレーション, 第 16 回日本計算工学会 計算工学講演会, 2011 年 9 月 25-27 日, 東京大学, 東京都
- ⑪ 山中晃徳, 高木知弘, Multi-Phase-Field 法と結晶塑性有限要素法によるフェライト相形成予測, 日本鉄鋼協会 第 162 回秋季講演大会, 2011 年 9 月 20-22 日, 大阪大学, 大阪府吹田市

[図書] (計 1 件)

- ① 高木知弘, 山中晃徳, フェーズフィールド法 - 数値シミュレーションによる材料組織設計 -, (2012), 養賢堂.

[その他]

東京農工大学大学院工学府
機械システム工学専攻山中研究室
ホームページ

<http://www.tuat.ac.jp/~yamanaka/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

山中晃徳 (YAMANAKA AKINORI)

東京農工大学・大学院工学研究院・准教授
研究者番号 : 50542198