

jh220023

## 3D プリント積層造形のパウダーモデル構築と 大規模フェーズフィールド格子ボルツマン計算

高木 知弘 (京都工芸繊維大学)

### 概要

本研究では、金属積層造形における高精度な材料組織予測を可能とする数値シミュレーション法の開発を行う。溶融プール内の凝固組織をありのまま再現する高精度モデルと、効率的な計算を目指す結晶粒スケールの粗視化モデルの二つのモデル開発を同時に進める。本年度は、粗視化モデルを対象とし、パウダーの溶融凝固問題に着目して研究を進めた。ここで、粉末床形成からレーザー走査までの一通りのプロセスを再現可能な2次元モデルとプログラムを作成した。溶融プール形成、キーホール形成、マランゴニ対流、多結晶凝固の一連の現象を再現可能であることを確認した。しかしながら、粉末床を設けると計算が不安定化し課題となっている。さらに、温度場を移動点熱源の理論解を与える Rosenthal の式で表し、multi-phase-field 法に組み込むモデルを作成し、複数層・複数トラックの組織予測を可能とした。シミュレーションを行うことで特徴的な多結晶組織を再現可能であることを示した。

### 1. 共同研究に関する情報

- (1) 共同利用・共同研究を実施している拠点名 (該当するものを残す)

東京工業大学 学術国際情報センター

- (2) 課題分野 (該当するものを残す)

大規模計算科学課題分野

- (3) 共同研究分野 (HPCI 資源を利用している研究課題のみ、該当するものを残す)

超大規模数値計算系応用分野

- (4) 参加研究者の役割分担

高木 知弘 (京都工芸繊維大学・機械工学系) : 研究全体の総轄, モデル構築, 考察, 論文執筆.

青木 尊之 (東京工業大学・学術国際情報センター) : 大規模 GPU 計算の総轄, 並列 GPU コードのチューニング.

坂根 慎治 (京都工芸繊維大学・機械工学系) : 並列 GPU コード開発, モデル構築, 計算の実行, データ処理用コードの作成, データ処理,

考察, 論文執筆.

光山 容正 (京都工芸繊維大学・工芸科学研究科) : モデル構築, 計算の実行, データ整理.

山中 波人 (京都工芸繊維大学・工芸科学研究科) : 計算の実行, データ整理.

八條 郁 (京都工芸繊維大学・工芸科学研究科) : 計算の実行, データ整理.

### 2. 研究の目的と意義

3D プリントによる金属付加製造 (additive manufacturing: AM)において最も重要なのは、造形製品の特性を決定する材料組織と残留応力の制御である。これらを精度よく予測&制御するためには数値シミュレーションが不可欠であるが、金属 AM のマルチフィジックス (電子/レーザービームと金属粉末の相互作用, 粉末と基板の溶融, 溶融プール内の液相流動, デンドライト成長, 粒成長, 残留応力蓄積) に起因したモデリングの困難さと計算コストの高さにより、これらのマルチフィジックスを全て考慮したシミュレーションは行われていない。

本研究では、金属 AM プロセスを完全に再現可能な高性能計算法の確立を目的とする。なお、粉末床溶融結合法(powder bed fusion: PBF)を対象とする。本研究は 2021 年度から 3 年間で予定しており、2 年目の 2022 年度は、パウダーの溶融凝固現象に着目し、モデルの構築と大規模計算に向けた複数 GPU 並列コード開発を行う。積層造形の完全なる組織予測シミュレーションを世界に先駆けて可能とし、当該分野に強烈なインパクトを与えることが本研究の一番大きな意義である。シミュレーションによって AM の高精度組織予測を実現する本研究は、将来的に実験研究との融合、機械学習との併用によって材料組織を最適化するためのプロセス設計を可能とする極めて意義深い研究である。

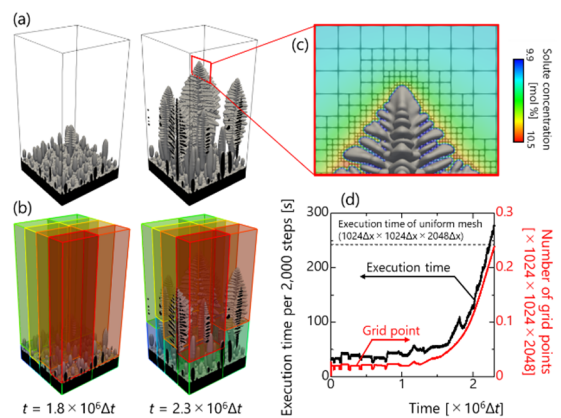
### 3. 当拠点の公募型研究として実施した意義

本共同研究では、PF 法による材料組織予測に関する数値的検討を継続的に進めている。この中で、GPU スパコン TSUBAME の利用によって PF 計算の極めて良好な高速化を達成可能であることを示した。さらに、複数 GPU 並列計算によって、世界的にまだどのグループも達成できない時空間スケールでの材料組織形成シミュレーションを可能とした。これらの研究成果は国内外で極めて高く評価されており、本研究を発展させることは計算材料学の更なる発展に大きく寄与し、また日本の研究力を世界に示すことができる。この研究は複数 GPU を用いた大規模計算によって初めて達成できるため、GPU スパコン TSUBAME の利用が不可欠である。加えて、本研究グループは、PF 法、材料組織学、流体力学、HPC の各分野を牽引する研究者によって構成され、日本発の世界一の研究が可能となる。以上のことから、本研究を当拠点公募型共同研究として実施した意義は極めて高い。

### 4. 前年度までに得られた研究成果の概要

高精度モデル開発において、溶融プール内の液相流動を伴うデンドライト成長を表現可能な大規模計算手法構築のため、適合格子法(adaptive mesh refinement: AMR)を適用した液相流動を伴う二元合金凝固モデルの複数 GPU 並列計算コードを開発した[1-3]。同時に、粗視化モデルにデンドライト樹間の液相流れを精度よく導入するために、透過率の評価を進め、また透過率を効率的に評価可能な手法開発を行った[4]。さらに、粗視化モデルの構築とコーディングを行った。以下に各成果の概要を示す。

**4.1 AMR 法を適用した複数 GPU 並列計算** 3 次元デンドライト成長の PF シミュレーションを効率的に行うために、複数 GPU 並列計算法にブロック構造 AMR 法を適用した parallel-GPU AMR を開発した[1-3]。ここで、各 GPU が受け持つ格子点数が均一になるように、Slice-grid 法にもとづき領域を動的に GPU に割り当てる、動的負荷分散を導入した。

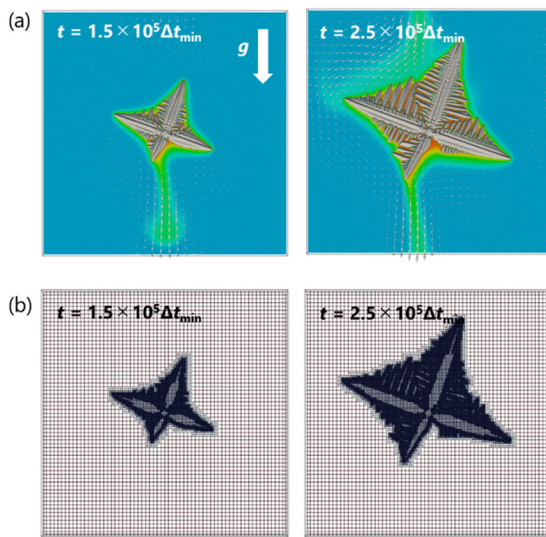


**Fig. 1** Columnar dendrite growth simulation by the parallel-GPU AMR with 16 GPUs: (a) Solid-liquid interface morphologies. (b) Domain decomposition for 16 GPUs. (c) AMR block decomposition around the dendrite tip. (d) Temporal changes in the execution time per 2000 steps and number of grid points of adaptive mesh.

実装した parallel-GPU AMR の性能評価のため、図 1 に示す最小格子幅  $\Delta x_{\min}$  換算で  $1024 \times 1024 \times 2048$  格子の領域内部における柱状デンドライト成長シミュレーションを 16 GPUs を用いて実施した。図 1(a) は各時刻のデンドライト形態を、図 1(b) は slice-grid 法に基づく

領域分割の様子をそれぞれ示している. 図 1(c)に dendrite 先端近傍における AMR ブロック分割の様子を示しており, 高い空間分解能が必要な固液界面近傍に細かい格子が割り当てられている様子が確認できる. 図 1(d)にシミュレーション中の 2000 step あたりの計算実行時間(黒線)と総格子点数(赤線)の時間推移を示している. 図より, AMR を導入することで, 均一格子の 20%以下まで格子点数を削減できる場合, 均一格子を用いた場合よりも計算が高速化されることを確認した.

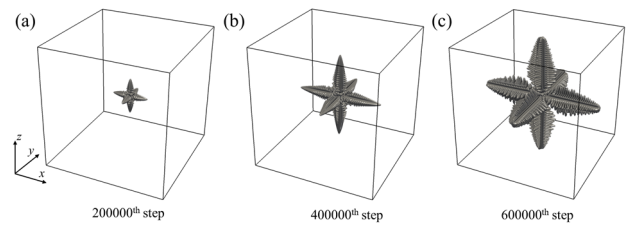
さらに, 液相流動を伴う dendrite 成長の parallel-GPU AMR を 3次元問題に拡張し, 図 2 に示す 3次元薄膜領域内での自然対流を伴う等軸 dendrite 成長計算を実施した. 計算領域サイズは  $256 \Delta x_{\min} \times 4096 \Delta x_{\min} \times 4096 \Delta x_{\min}$  とし 64 GPU を用いて計算した. AMR の適用により特に凝固初期の計算コストを大幅に削減することに成功した.



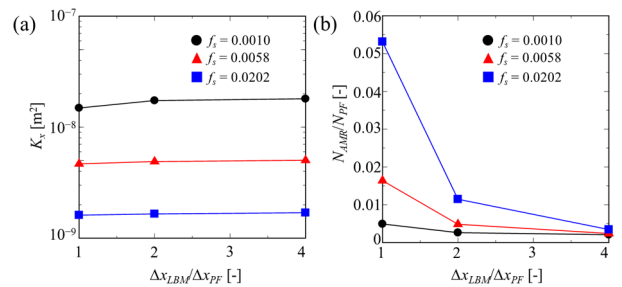
**Fig. 2** Simulation of 3D dendrite growth under natural convection by the parallel-GPU AMR: (a) morphologies of solid-liquid interface and distributions of solute concentration and flow velocity. (b) AMR block decomposition on cross section.

**4.2 dendrite 樹間液相の透過率評価**  
粗視化モデルを用いる場合, dendrite やセル形態を直接取り扱わないため, 固液共存域の液相流動の容易さを透過率を用いて表現する必要がある. dendrite 樹間の透過

率の定量化に向け, 効率的に透過率を予測可能な parallel-GPU AMR を適用した[4].



**Fig. 3** Equiaxed dendrite structures at (a)  $2 \times 10^5$ th step ( $f_s = 0.0010$ ), (b)  $4 \times 10^5$ th step ( $f_s = 0.0058$ ), and (c)  $6 \times 10^5$ th step ( $f_s = 0.0202$ ) computed by the AMR PF simulation.



**Fig. 4** Effect evaluation of the solid fraction  $f_s$  and minimum grid size  $\Delta x_{LBM}$  on the (a) accuracy and (b) efficiency of permeability prediction for equiaxed dendrite structures shown in Fig. 6 by the AMR LB simulations.

本手法を用いて図 3 に示す等軸 dendrite に対する透過率評価を行った. 材料は Fe-5.4wt%Si を対象とし, 領域サイズは  $(2048 \Delta x_{PF})^3$  とした. これらの 3つの形態に対して, 透過率計算で用いる最小格子幅  $\Delta x_{LBM}$  を  $\Delta x_{LBM} / \Delta x_{PF} = 1, 2, 4$  と変化させ, 合計 9通りの計算を行った. 図 7 に透過率計算の結果を示す. 図 7(a)より, 格子比  $\Delta x_{LBM} / \Delta x_{PF}$  を変化させても透過率への影響は小さく,  $\Delta x_{LBM} / \Delta x_{PF} = 4$  でも透過率評価精度に問題ないといえる. この結果を踏まえて図 7(b)をみると,  $\Delta x_{LBM} / \Delta x_{PF} = 4$  では均一格子に比べて 5%の格子数で計算を行えており, AMR と格子解像度を変化させた方法の組み合わせで極めて効率的な透過率評価が可能であることを確認した.

**4.3 粗視化モデルの構築** AM プロセス時の溶融プール内で成長する dendrite やセル形態を直接表現せず, 結晶粒スケールで材料組織を効率的に予測する粗視化モデルの構築に着手した. PBF を対象とし, 多結晶構

造を有する基板上に粉末を敷き詰め、レーザー熱源の移動による熔融、凝固、焼結、熔融プール内の液相流動、凝固後の粒成長を再現する。

## 5. 今年度の研究成果の詳細

今年度は粗視化モデルを対象とし、パウダーの熔融凝固問題に着目して研究を進めた。ここで、粉末床形成からレーザー走査までの一通りのプロセスを再現可能な2次元モデルとプログラムを作成した。また、移動点熱源による温度場の理論解を与える Rosenthal の式を multi-phase-field モデルに組み込み、複数層・複数トラックの組織予測が可能なコードを作成し、シミュレーションを行うことで特徴的な多結晶組織を再現可能であることを示した[6]。なお、昨年度までの成果が学術論文[1-5]に掲載された。学術論文[5]はGPUスパコンを用いたこれまでの成果の review 論文である。以下に詳細な成果を示す。

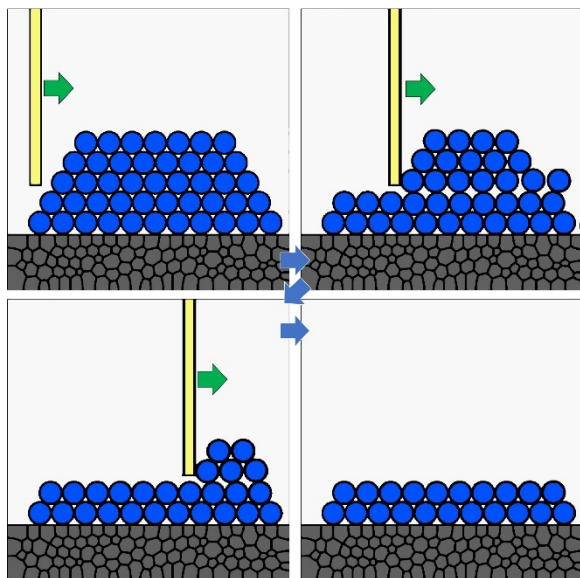


Fig. 5 Preparation simulation of a powder bed.

**5.1 粉末床準備** PBF シミュレーションに用いる粉末床を如何に作成するかも一つの課題である。ここでは、図5のような粉末床を準備するシミュレーションを可能とした。多結晶基板上に粉末を配置し、これを基板表面と一定の距離を保った平板を移動させる

ことで一様厚さの粉末床を形成した。この際、先に構築した固体の運動を伴う多結晶凝固に対する multi-phase-field 法を応用した [Comput. Mater. Sci., 197 (2021) 110658]。図2は同サイズの円形粉末の例を示しているが、任意の形状およびサイズの粉末を用いたシミュレーションが可能である。

**5.2 焼結プロセス** 粉末は電子/レーザービームによって熔融するが、熔融プールに近い領域では焼結が生じる。Steinbach の MPF モデル [ISIJ Int., 60 (2020) 160-167] と空孔拡散を連成させた焼結モデルを作成し、図6のような焼結シミュレーションを可能とした。領域サイズは  $(512\Delta x)^3$ 、初期粒数は 2,072 である。計算初期で粒子間にネックが形成し、その後の粒成長によって  $2 \times 10^6$  steps の計算において粒数は約半分まで減少した。なお、ここでは粒の剛体運動は導入していないため緻密化は生じていない。

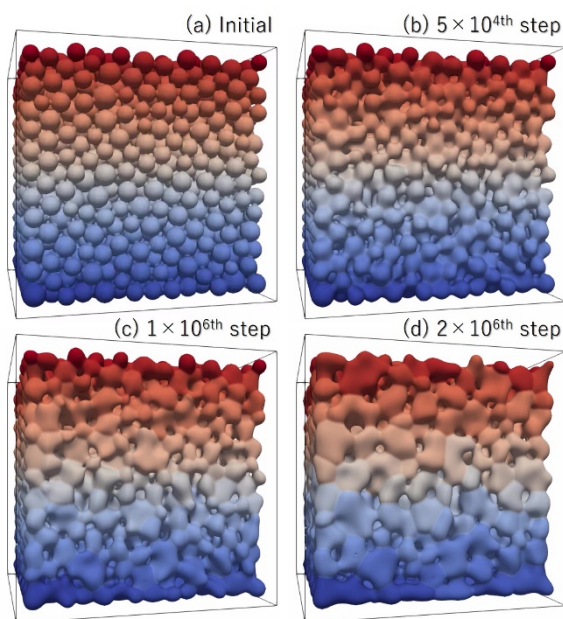


Fig. 6 Neck formation and subsequent grain growth during sintering.

**5.3 熔融プールダイナミクス** 金属 AM では材料内に大きな温度勾配が生じ、熔融プールの表面エネルギーの温度依存性によってマランゴニ対流が生じる。また、レーザーの反跳力と液相の蒸発によってキーホールが形成し、熔融プール内の液相流動を複雑化し、

材料内に気泡が取り残され欠陥となる。

このような現象を、先に構築した保存型 Allen-Cahn MPF モデル[Computers & Fluids, 178 (2019) 141-151]に表面エネルギーの空間勾配による流体力を組み込み、温度場と連成させることで、図 7(a)のようなマランゴニ対流を再現した。界面エネルギーは温度の増加とともに線形に低下すると設定しており、界面中央部から外側に向かって流動が生じていることが確認できる。また、反跳力を導入した結果を図 7(b)に示す。中央部に窪みが形成されていることが確認できる。さらに、気相の蒸発を入れた結果を図 7(c)に示す。図 7(b)に比べて窪みが深くなっていることが確認できる。以上のように、表面張力の温度依存性の導入によるマランゴニ対流、反跳力と液相蒸発によるキーホール形成の再現が確認できた。

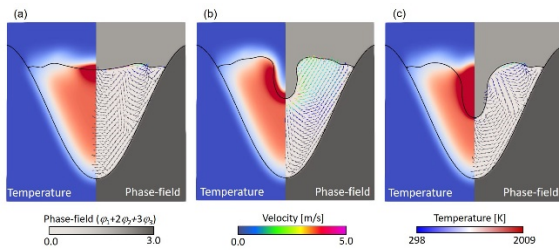


Fig. 7 Liquid flow in melt pool caused by (a) thermal dependency of liquid-liquid interface energy, (b) recoil pressure, and (c) liquid evaporation.

図 7 の固気液混相流を表現する MPF モデルに、多結晶凝固を表現する MPF モデルを連成し、レーザー走査の一連のプロセスを再現するモデルを構築した。図 8 にシミュレーション例を示す。図 8 の左図が組織変化、右図が温度分布変化である。計算コストの問題でレーザー出力を低く抑えたシミュレーションを行っているため、キーホールの形成は確認できないが、非対称な熔融プール形状、熔融プール表面の窪み、熔融プール後方の多結晶凝固と曲がった結晶粒の再現を確認することができる。本シミュレーションでは、粉末床は用いていないが、粉末床を用いると計算が不安定する課題が残っている。

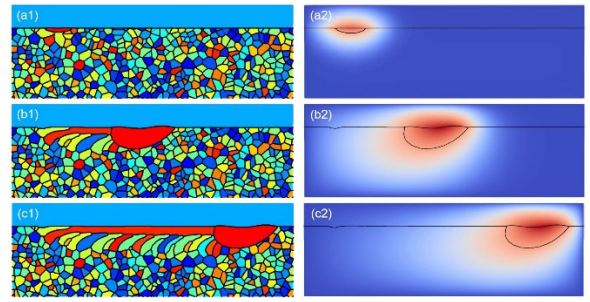


Fig. 8 Changes of material microstructures and temperature during laser scanning on a polycrystalline substrate.

5.4 複数層・複数トラック組織予測 温度と熔融プール内の液相流動を解かず効率的に組織予測を評価できる MPF シミュレーション法の開発を行った。図 9 にシミュレーション例を示す[6]。本シミュレーションでは、316L 鋼に対して 4 層・4 トラックの双方向走査を行った。なお、モデルとしては移動点熱源の温度分布の理論解を与える Rosenthal の式を、double-obstacle ポテンシャルを用いた MPF に導入し、MPF 方程式のみを解いている[A.F. Chadwick, P.W. Voorhees, Acta Mater., 211 (2021) 116862]。なお、粉末床は多結晶層として表現している。

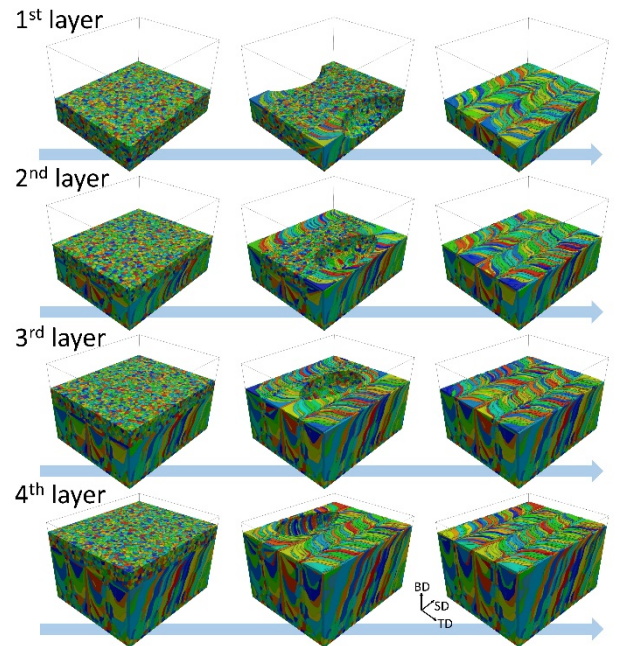


Fig. 9 Changes of material microstructures during laser scanning with four-layer and four-track.

図 10 は、図 9 のシミュレーションにおいて

て大きく成長するある結晶粒の成長過程を示したものである。第1層からのエピタキシャル成長による特徴的な結晶粒の成長が確認できる。

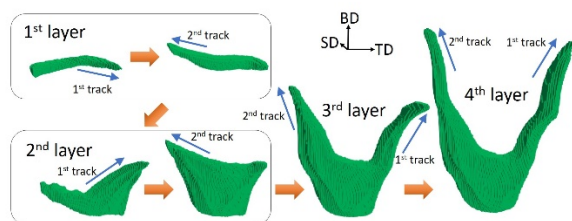


Fig. 10 Epitaxial growth of a grain in a simulation shown in Fig. 9.

## 6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

今年度は粗視化モデルを対象とし、パウダーの溶融凝固問題に着目して研究を進めた。ここで、粉末床形成からレーザー走査までの一通りのプロセスを再現可能な2次元モデルとプログラムを作成し、マランゴニ対流やキーホール形成の再現が可能であることを確認した。また、溶融プール内の液相流動と多結晶凝固の連成計算が可能であることも確認した。一方で、粉末床を導入すると計算が不安定化し、現時点ではPBFを完全に再現可能なモデルは構築できていない。次年度が本継続研究の最終年度であるため、問題を解決し、目的を達成したいと考えている。一方で、温度と流動を解かず効率的に組織予測を再現可能なシミュレーション法を開発した。本手法はスキャンストラテジーの評価に有効であり、今後、本手法の高精度化と計算の効率化に取り組む予定である。

## 7. 研究業績

### (1) 学術論文 (査読あり)

- [1] S. Sakane, T. Takaki, T. Aoki, Parallel-GPU-accelerated adaptive mesh refinement for three-dimensional phase-field simulation of dendritic growth during solidification of binary alloy, *Materials Theory* 6 (2022) 3.
- [2] S. Sakane, T. Aoki, T. Takaki, Parallel-GPU

AMR implementation for phase-field lattice Boltzmann simulation of a settling dendrite, *Computational Materials Science* 211 (2022) 111542.

[3] S. Sakane, T. Aoki, T. Takaki, Parallel GPU-accelerated adaptive mesh refinement on two-dimensional phase-field lattice Boltzmann simulation of dendrite growth, *Computational Materials Science* 211 (2022) 111507.

[4] Y. Mitsuyama, S. Sakane, T. Takaki, Effective evaluation of permeability for interdendritic fluid flow using adaptive mesh refinement: Phase-field lattice Boltzmann study, *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* 1274(1) (2023) 012043.

[5] T. Takaki, Large-scale phase-field simulations for dendrite growth: A review on current status and future perspective, *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* 1274(1) (2023) 012009.

[6] T. Takaki, Y. Takahashi, S. Sakane, Multi-Phase-Field Framework for Epitaxial Grain Growth in Selective Laser Melting Additive Manufacturing with Multi-Track and Multi-Layer, *Materials Transactions* (2023). in press

(2) 国際会議プロシーディングス (査読あり) なし

(3) 国際会議発表 (査読なし)

[1] T. Takaki, S. Sakane, Development of a multi-phase-field framework for powder bed fusion additive manufacturing, 2023 TMS Annual Meeting & Exhibition, March 19-23, 2023, San Diego, USA. (発表予定)

[2] T. Takaki, Multi-Phase-Field Modeling and Large-Scale Simulations for Solid-State Sintering, The 10th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2022), October 2-7, 2022, Baltimore, USA. [Keynote]

[3] T. Takaki, Permeability Prediction for Flow of Interdendritic Liquid by Phase-field and Lattice Boltzmann Methods, The 10th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2022), October 2–7, 2022, Baltimore, USA.

[4] R. Suzuki, S. Sakane, T. Takaki, Implementation of the Mother-leaf Method on GPU-accelerated AMR Code for Phase-field Computation of Dendrite Growth, 15th World Congress on Computational Mechanics (WCCM 2022) & 8th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM), July 31 – August 5, 2022, Yokohama, Japan. (Virtual)

[5] K. Hachijo, S. Sakane, T. Takaki, Multi-phase-field Modeling and Simulation of Sintering, 15th World Congress on Computational Mechanics (WCCM 2022) & 8th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM), July 31 – August 5, 2022, Yokohama, Japan. (Virtual)

[6] T. Takaki, Large-scale phase-field simulations for dendrite growth: A review of current status and future perspective, 6th International Conference on Advances in Solidification Processes (ICASP-6), June 20–24, 2022, Bischoffsheim, France. [Plenary]

[7] Y. Mitsuyama, S. Sakane, T. Takaki, Effective evaluation of permeability for interdendritic fluid flow using adaptive mesh refinement: Phase-field lattice Boltzmann study, 6th International Conference on Advances in Solidification Processes (ICASP-6), June 20–24, 2022, Bischoffsheim, France.

#### (4) 国内会議発表 (査読なし)

[1] 高木知弘, 坂根慎治, Multi-phase-field 法を用いた金属粉末積層造形モデリングの検討, 第 35 回計算力学講演会(CMD2022), 2022 年 11 月 16 日-18 日, オンライン. (発表予定)

[2] 鈴木涼介, 坂根慎治, 高木知弘, 複数 GPU マザーリーフ AMR 法による phase-field 凝固

計算の高速化, 日本鉄鋼協会第 184 回秋季講演大会, 2022 年 9 月 21–23 日.

[3] 坂根 慎治, 高木 知弘, 青木 尊之, 沈降中の等軸デンドライト成長のフェーズフィールド格子ボルツマンシミュレーション, 日本鉄鋼協会第 184 回秋季講演大会, 2022 年 9 月 21–23 日.

(5) 公開したライブラリなど  
なし

(6) その他 (特許, プレスリリース, 著書等)  
なし