

jh230029

## 3D プリンタ積層造形の高精度材料組織予測のための 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

粉末床溶融結合法を採用した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。「実用性」と「挑戦性」の観点から3つの課題 A, B, C を設定し、時空間スケールの異なる計算法開発を行った。「実用性」の観点から、様々なスキャンストラテジーを対象とする多結晶 multi-phase-field (MPF) シミュレーション法の開発を行った【課題 A】。「挑戦性」の観点からは、溶融池の液相流動計算結果を用い、デンドライト/セル成長を高性能 phase-field 計算によって高精度に求めるブリッジング法を開発した【課題 B】。さらに、気相と溶融池の流動とそれに影響を受ける多結晶組織を評価する、多結晶 MPF 法と混相流 MPF 法を連成したモデル開発を行った【課題 C】。

### 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  
京工業大学 学術国際情報センター

(2) 課題分野  
大規模計算科学課題分野

(3) 共同研究分野 (HPCI 資源利用課題のみ)  
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.

高橋 侑希 (京都工芸繊維大学・工芸科学研究科) :  
並列 GPU コード開発, 計算の実行, データ整理.

池田 幸之介 (京都工芸繊維大学・工芸科学研究科) :  
モデル構築, 並列 GPU コード開発, 計算の実行, データ整理.

### 2. 研究の目的と意義

本研究では、金属積層造形プロセスを phase-field (PF)法によって完全に再現する高性能計算法の確立を目的とし、世界一の数値シミュレーション研究を目指す。令和3年度から3年間を予定した継続課題であり、今年度はその最終年度であり、以下の3課題を実施する。

【課題 A】多結晶 multi-phase-field (MPF)シミュレーション.....実用性

【課題 B】流動とデンドライト/セル成長のブリッジングシミュレーション.....挑戦性

【課題 C】全現象を考慮したシミュレーション.....挑戦性

積層造形における完全なる組織予測シミュレーションは未だ行われていない。特に国

内では皆無といえる。これ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。この研究によって、シミュレーションによる積層造形の組織予測が可能となり、実験研究との融合、機械学習の併用によって、将来的に材料組織を最適化するためのプロセス設計が可能となる。以上のように、本研究ではこれまでにない高精度の組織予測を達成しようとしており、将来的にプロセス設計を見込んだ 3D プリンタ分野にイノベーションを起こす極めて意義深い研究である。

### 3. 当拠点の公募型共同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研究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 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

前年度までの 2 年間に於いて、主に 2 つのスケールからのアプローチを試みた。一つは、様々なスキャンストラテジーの結晶粒スケールの組織予測を可能とする数値計算法の

構築。もう一つは、熔融池の液相流動を高精度に予測して、その影響をうける結晶粒スケールの組織予測を可能とする計算法の構築である。以下に二つの計算法の概要と成果を示す。

#### 4.1 複数層・複数トラックのビーム走査

様々なスキャンストラテジーにおいて形成される結晶粒スケールの組織を効果的に予測する手法の開発を目指し、温度と熔融池内の液相流動を解かず効果的に組織予測を行うことのできる MPF シミュレーション法の開発を行った。図 1 にシミュレーション例を示す[1]。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。なお、粉末床は多結晶層として表現した。図 1 より、熔融池底の結晶方位を引き継いで概ね界面法線方向に成長する、結晶粒のエピタキシャル成長が確認できる。また、これらの結晶粒は特徴的な曲線を有する粒形態を呈していることがわかる。

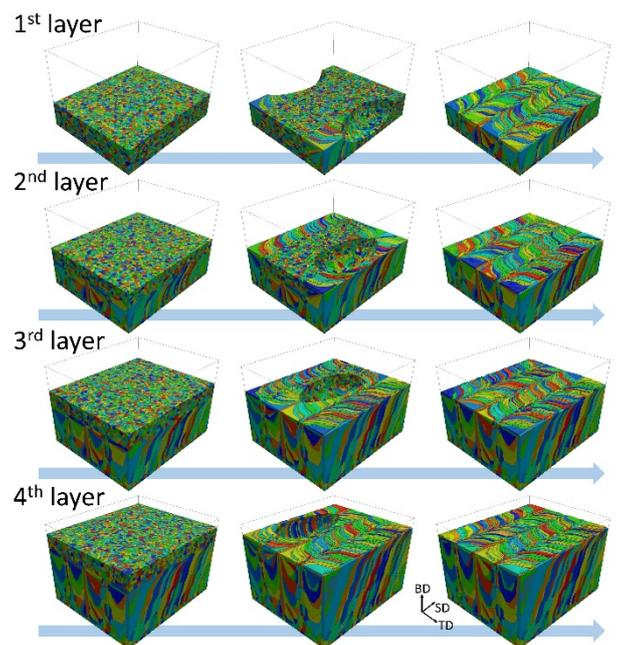


Fig. 1 Temporal changes of material microstructures during laser scanning with four-layer and four-track. [1]

図 2 は、図 1 の結晶粒の中で大きく成長した、ある一つの結晶粒の成長過程を示したものである。第 1 層のビーム走査時、この粒は表面に位置し、横方向にカーブを描くように成長している。第 2 層の走査からは上方向に成長し、角を持つような形態となり、第 3 層と第 4 層の走査で角部がさらに成長する様子が確認できる。このように、エピタキシャル成長による特徴的な成長が粒単位で高精度にみることができる。

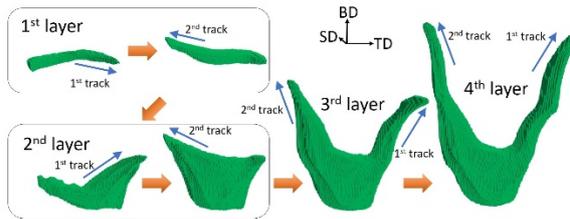


Fig. 2 Morphological change during epitaxial growth of a grain in a simulation shown in Fig. 1.

#### 4.2 熔融池流動ダイナミクスと粒成長

金属 AM では材料内に大きな温度勾配が生じ、熔融池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、熔融池内の液相流動を複雑化し、それに影響を受けて材料組織形態が変化し、材料内に気泡が取り残され欠陥となる。このような液相流動と材料組織の複雑な相互作用を、混相流を表現する MPF モデルと、多結晶粒成長を表現する MPF モデルを連成して表現することを試みた。

混相流 MPF モデルは、先に構築した保存型 Allen–Cahn MPF モデル[Computers & Fluids, 178 (2019) 141-151]の保存性をさらに高め[2]、これ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 3(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上昇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 3(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 3(c)に示す。図 3(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、混相流 MPF 法を用いることで、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。

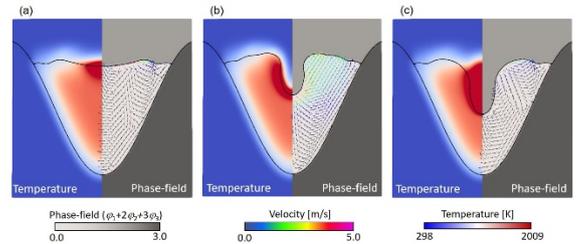


Fig. 3 Simulation results of melt pool flow and gas-liquid interface migration caused by (a) Marangoni force, (b) Marangoni force and recoil pressure, (c) Marangoni force, recoil pressure, and evaporation.

図 3 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、ビーム走査の一連のプロセスを再現するモデルを構築した。図 4 にシミュレーション例を示す。図 4 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ビーム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、非対称な熔融池形状、熔融池表面の窪み、熔融池後方で多結晶凝固と特徴的な曲線を有する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。

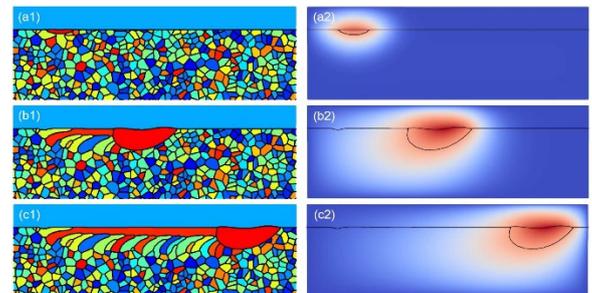


Fig. 4 Simulation result of material microstructure evolution (left side) and temperature change (right side) during laser scanning on a polycrystalline substrate.

## 5. 今年度の研究成果の詳細

### 5.1 多結晶 MPF シミュレーション(課題 A)

本課題は、実用性を重視したシミュレーションを可能とするものであり、特に様々なスキャンストラテジーを再現可能な手法の構築を目指している。昨年度投稿していた論文が出版され[1], これを基礎とする研究を進めた。

今年度は、文献[1]で構築した複数層・複数トラック走査シミュレーションをより効率的に行うために、非常に大きな領域に対して溶融池近傍のみを計算の対象とする計算法の開発を行った。図 5 は計算例の(a)全領域と(b)計算領域である。図 5(a)に示す  $1280 \times 2304 \times 256$  格子が全領域であり、これに対して図 5(b)に示す計算領域は  $320 \times 640 \times 256$  格子と非常に小さく、全領域を対象とする計算よりも  $1/8$  のコストで計算を完了した。作成した手法を用いて、レーザー出力 120 W で x-x スキャンと x-y スキャンの二種類のスキャンストラテジーの計算を行った。格子サイズは  $\Delta x = 0.3125 \mu\text{m}$  とし、x-x スキャンでは  $1792 \times 2304 \times 640$  格子で x-y スキャンでは  $2304 \times 2304 \times 640$  格子を全領域に設定した。2つのスキャンストラテジーで領域サイズが異なるのは、周期境界設定の可否に依存する。これに対して計算領域は両スキャンストラテジーとも  $1792 \times 2304 \times 640$  格子とし、TSUBAME3.0 の 48 GPU を用いて  $2.08 \times 10^6$  steps の計算に対して約 73 時間で計算を完了した。Fig. 6 に計算終了時のそれぞれの固体表面と表面から  $30 \mu\text{m}$  下における断面を示す。計算結果から、実験観察でも見られているスキャンストラテジーに依存した断面組織を確認できた。

現在は、x 方向と y 方向への熱源の走査に限定されているが、任意方向走査に拡張中であり、近いうちに任意のスキャンストラテジーを可能とする予定である。なお、Fig. 6 の結果に関しては現在論文を執筆中である。

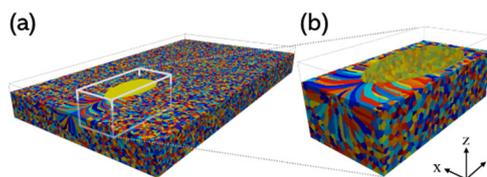


Fig. 5 Polycrystalline structures for (a) overall domain and (b) computational domain around melt pool.

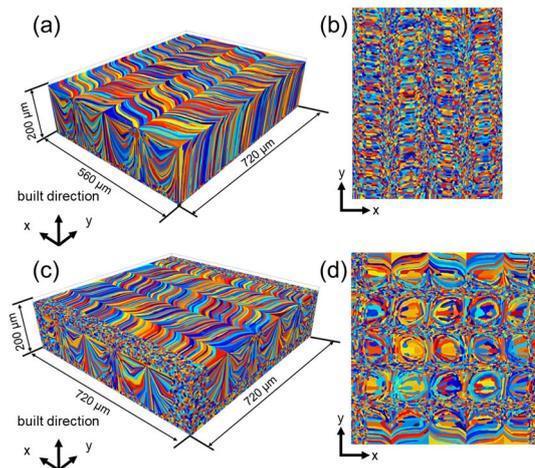


Fig. 6 Material microstructures on (a)(c) surface and (b)(d) cross section  $30 \mu\text{m}$  below the surface for (a)(b) x-x and (c)(d) x-y scanning strategy.

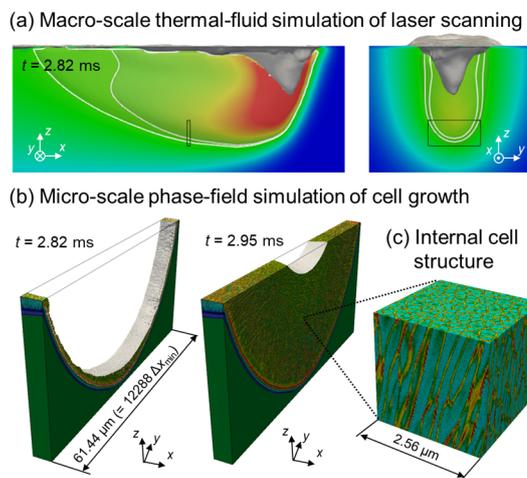


Fig. 7 (a) Temperature around melt pool in the macroscale laser scanning simulation, and (b) columnar cell growth in the large-scale PF solidification simulation and (c) enlarged view of obtained internal cell structure.

### 5.2 熱流動と組織のブリッジング (課題 B)

本課題では、熱源走査によるマクロ場の熱流動解析結果をミクロ場の PF 法による組織予測に用いるブリッジングシミュレーション法を開発した。マクロ場の熱流動計算結果

は、シンガポール国立大の Yan 助教のグループから譲り受け、その温度場を入力として柱状セル組織発展の大規模シミュレーションを行った。ここで、PF モデルとしては二元合金の急冷凝固に対する定量モデルを用い、計算を高速化するために AMR を複数 GPU 実装した parallel-GPU AMR を採用した。Inconel718 合金のレーザー溶融および凝固プロセスを対象としてシミュレーションを行った結果を Fig. 7 に示す。Fig. 7(a) の溶融池底に黒枠で PF 計算の対象領域を示し、これが Fig. 7(b) に対応する。PF 計算の領域サイズを AMR の最小格子幅  $\Delta x_{\min}$  に対して  $768\Delta x_{\min} \times 12288\Delta x_{\min} \times 6144\Delta x_{\min}$  と設定し、TSUBAME3.0 の 256 GPU を用いて約 18 時間で計算を完了した。なお、本計算では出力ファイルサイズが膨大になるため、計算終了後のポスト処理 (Python を用いた均一格子データへの変換、一部領域のデータ抽出、Pvpython による可視化処理など) を TSUBAME 上で実施することにより、データ処理におけるローカルマシンへのデータ転送量を大幅に削減した。Fig. 2(b) に PF 計算中の固液界面発展および固相領域断面の溶質濃度分布を示す。本計算では、溶融池底から温度勾配方向に沿って柱状セルが成長する様子が確認できた。この計算より得られた組織 (Fig. 2(c)) のセル間隔を測定すると、およそ  $0.22 - 0.28 \mu\text{m}$  であった。これは、同様のプロセス条件における実験組織のセル間隔 ( $0.27 \mu\text{m}$ ) とよく一致しており、本研究で開発した手法が高精度なマイクロ組織予測手法であることを実証している。現在、論文を執筆中であり、国際学術雑誌 Additive Manufacturing へ投稿予定である。

## 5.2 液相流動と組織予測の連成 (課題 C)

本課題は、熱源の走査による溶融池内の液相流動と気相の流動、領域全体の温度場、および凝固組織発展を同時に再現するシミュレーションモデルを開発した。

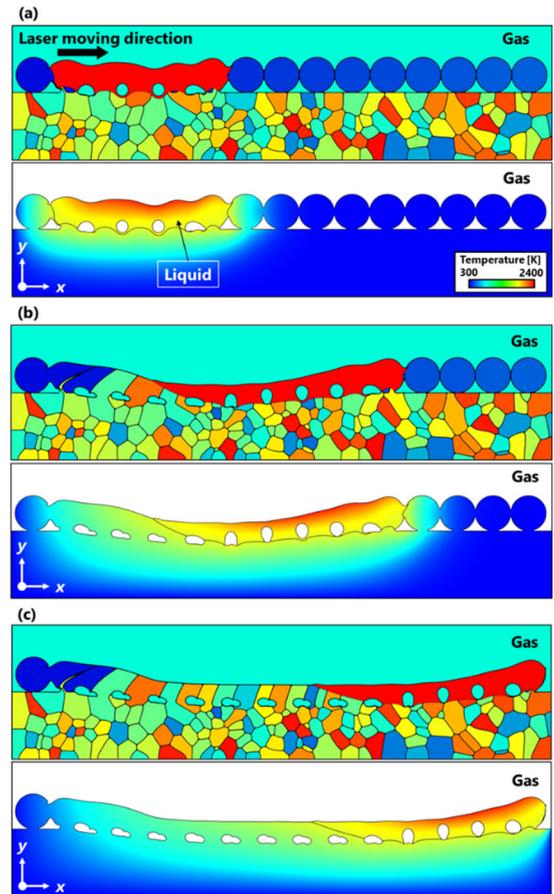


Fig. 8 Temporal changes of molten pool shape (upper) and temperature (lower) in two-dimensional laser scanning simulation at (a)  $5 \times 10^5$ th step, (b)  $3 \times 10^6$ th step, and (c)  $5 \times 10^6$ th step.

昨年度の Fig. 4 の計算において計算が不安定化する問題を解決し、Fig. 8 のような粉末及び多結晶基板上への 2 次元レーザー走査シミュレーションを可能とした。この結果、Fig. 8 に示すような溶融不足による欠陥形成や、多結晶粒のエピタキシャル成長の再現に成功した。一方で、計算コストが高い課題は残っており、2 次元計算でも熱源出力の高い場合に生じるキーホール形成には至らなかった。そのため、本モデルを直接 3 次元化しても計算コストの面で希望する計算には至らないだろうと判断した。なお、Fig. 8 の結果に関しては現在論文を執筆中である。

3 次元計算を大規模に実施するために、流動計算を溶融池内に限定し、格子ボルツマン法を用いて解く手法に切り替えた。そして、複数 GPU 並列コードを作成し、3 次元大規模

計算を試みた。ここで、熔融池内の液相流動計算において、気液界面は自由表面として圧力境界条件を与え、固液界面には interpolated bounce back scheme を用いて滑りなし条件を与えた。

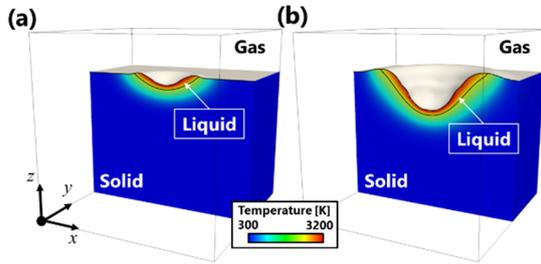


Fig. 9 Molten pool shape and temperature distribution at (a)  $1 \times 10^4$ th step and (b)  $3 \times 10^4$ th step in a three-dimensional laser irradiation simulation.

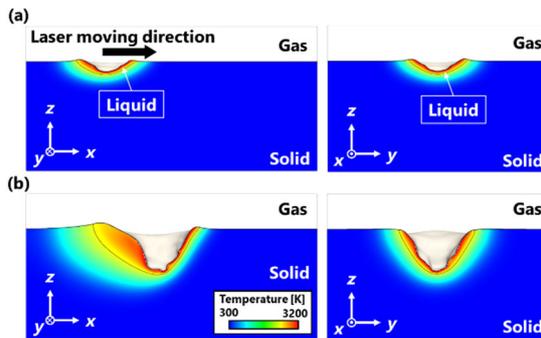


Fig. 10 Temporal changes of molten pool shape and temperature at (a)  $1 \times 10^4$ th step and (b)  $5 \times 10^4$ th step in three-dimensional laser scanning simulation.

SUS316L 基板へのレーザー照射シミュレーション結果を Fig. 9 に示す。熔融池の形状と温度分布を示しており、黒色の線は固液界面である。計算格子は  $1 \mu\text{m}$ 、計算領域は  $512 \mu\text{m}^3$ 、レーザー出力は  $120 \text{W}$  である。Fig. 4 より、レーザー照射による熔融池の拡大と反跳力によるキーホール形成の再現が確認できた。次に、レーザー走査シミュレーション結果を Fig. 10 に示す。計算領域は  $512 \times 384 \times 256 \mu\text{m}^3$  でレーザー走査速度は  $1.0 \text{m/s}$  である。レーザー走査による熔融凝固が確認できる。格子ボルツマン法を導入したことで、計算の大規模高速化を達成し、2次元計算では達成できなかった3次元レーザー走査シミュ

レーションにおけるキーホール形成を確認した。今後は本モデルに多結晶体を導入することで、熔融池の流動の影響を受ける材料組織予測を可能とする予定である。

## 6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

3スケール（課題 A, B, C）からの材料組織予測シミュレーション手法のモデル化と高性能計算法の開発を進めた。今年度で予定していた3年間の継続研究期間が終了したが、当初予定していた方向性から変化があった。理由としては、金属積層造形の温度条件が非常に厳しく、マルチスケール計算が必須のテーマであることを強く認識したためである。課題 A のスキャンストラテジーに依存した組織予測シミュレーションは、小さく見積もっても数 mm スケールの計算領域を必要とし、課題 B のデンドライト/セル組織予測は nm スケールの格子を必要とした。令和 6 年度は HPCI 課題として採択されており、本研究を継続する。当初予定を完全に達成できなかったと言えないが、本格的な金属積層造形の組織予測シミュレーション研究を開始するという点において、この3年間で得られた成果は大きいと考えている。3つのスケールにおいて、課題 C の熱流動計算の結果を課題 A と課題 B に用いるため、現在、特に課題 C の熱流動計算シミュレータ開発を急いでいる。これまでにない高精度な熔融池内の熱流動計算を行い、その結果を課題 A と課題 B のシミュレーションに用い、高精度な結晶粒スケールおよびデンドライト/セルスケールのシミュレーションを行い、いずれのスケールにおいても世界一のシミュレーション研究を達成したいと考えている。

## 7. 研究業績

### (1) 学術論文（査読あり）

[1] 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 64(6) (2023) 1150-1159.

[2] S. Aihara, N. Takada, T. Takaki, Highly conservative Allen–Cahn-type multi-phase-field model and evaluation of its accuracy, Theoretical and Computational Fluid Dynamics 37 (2023) 639–659.

(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] K. Ikeda, S. Sakane, T. Takaki, Multi-phase-field modeling to compute material microstructure evolutions affected by liquid flows during powder bed fusion, The 11th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing (PRICM11), November 19-23, 2023, Jeju, Korea.

[2] Y. Takahashi, S. Sakane, T. Takaki, A multi-phase-field framework for predicting material microstructures formed by different scanning patterns in powder bed fusion, The 11th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing (PRICM11), November 19-23, 2023, Jeju, Korea.

[3] Y. Takahashi, S. Sakane, T. Takaki, Multi-phase-field framework for predicting material microstructures formed by various scanning strategies in powder bed fusion, The 1st International conference on Creation of Materials by Superthermal Field 2023 (CMSTF2023), November 15-17, 2023, Osaka, Japan.

[4] K. Ikeda, S. Sakane, T. Takaki, Multi-phase-field model and 2D simulation of melt pool flow and material microstructural evolution during powder bed fusion, The 1st International conference on Creation of Materials by Superthermal Field 2023 (CMSTF2023), November 15-17, 2023, Osaka, Japan.

[5] S. Sakane, L. Wang, W. Yan, T. Takaki, Prediction of three-dimensional solidification microstructure in a molten pool during L-PBF process: direct coupling of micro-scale phase-field and meso-scale thermal fluid flow simulations, The 1st International conference on Creation of Materials by Superthermal Field 2023 (CMSTF2023), November 15-17, 2023, Osaka, Japan.

[6] T. Takaki, Multi-phase-field modeling of grain growth and multiphase flow in additive manufacturing, 10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 2023), August 20-25, 2023 Tokyo, Japan.

(4) 国内会議発表 (査読なし)

[1] 高橋 侑希, 坂根 慎治, 高木 知弘, Multi-phase-field 法による金属積層造形でのスキャンストラテジーの違いによる組織評価, 第 187 回春季講演大会, 2024 年 3 月 13–15 日, 東京理科大学 葛飾キャンパス.

[2] 池田 幸之介, 坂根 慎治, 高木 知弘, 粉末床熔融結合法の熔融池流動と組織発展の multi-phase-field シミュレーション, 日本機械学会 第 36 回計算力学講演会(CMD2023), 2023 年 10 月 25–27 日, 豊橋商工会議所.

[3] 高橋 侑希, 坂根 慎治, 高木 知弘, 金属積層造形における様々な走査パターンでの組織予測を可能とする multi-phase-field 計算法の開発, 日本機械学会 第 36 回計算力学講演会 (CMD2023), 2023 年 10 月 25–27 日, 豊橋商工会議所.

[4] 高橋 侑希, 坂根 慎治, 高木 知弘, 金属積層造形における複数層・複数トラック走査の材料組織予測を可能とする高性能 multi-phase-field 計算法の開発, 超温度場夏の学校若手研究交流会, 2023 年 9 月 24–25 日, ホテルサンルートソプラ神戸.

[5] 池田 幸之介, 坂根 慎治, 高木 知弘, Multi-phase-field 法を用いた金属積層造形に

における液相流動と組織発展の数値シミュレーションの検討, 超温度場夏の学校 若手研究交流会, 2023 年 9 月 24-25 日, ホテルサンルートソプラ神戸.

[6] 高木 知弘, 池田 幸之介, 坂根 慎治, PBF における溶融池内の液相流動と組織発展の multi-phase-field モデリング, 日本金属学会 2023 年秋期(第 173 回)講演大会, 2023 年 9 月 19-22 日, 富山大学五福キャンパス.

[7] 高木 知弘, 高橋 侑希, 坂根 慎治, 高性能 phase-field 計算による金属積層造形における粒成長評価, 第 28 回計算工学講演会, 2023 年 5 月 31-6 月 2 日, つくば国際会議場.

[8] 池田 幸之介, 坂根 慎治, 高木 知弘, Multi-phase-field 法を用いた粉末床溶融結合法の数値シミュレーション法の検討, 第 28 回計算工学講演会, 2023 年 5 月 31-6 月 2 日, つくば国際会議場.

(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.