

令和 5 年 6 月 26 日現在

機関番号：14303

研究種目：若手研究

研究期間：2021～2022

課題番号：21K14041

研究課題名（和文）高性能フェーズフィールド計算による積層造形凝固組織の高精度予測手法開発

研究課題名（英文）Development of accurate prediction method for solidification microstructure in additive manufacturing by high-performance phase-field simulation

研究代表者

坂根 慎治（Sakane, Shinji）

京都工芸繊維大学・機械工学系・助教

研究者番号：70876755

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,500,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、金属積層造形中に形成される凝固組織を3次元的に高精度に予測するために、積層造形中のマルチフィジックスを考慮したデンドライト・セル凝固モデルの構築と、その大規模3次元計算手法開発を行った。ここで、演算性能の高いGPUを複数用いた並列計算と、固液界面にのみ細かい数値格子を動的に配置する適合格子細分化法を組み合わせたフェーズフィールド(PF)モデルの大規模3次元計算手法を確立した。また、メソスケール熱流体計算とミクロスケールPFモデルのカップリングモデルを構築し、大規模3次元PF計算を通して、実験組織をよく模擬した3次元積層造形組織の予測に成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

積層造形の凝固組織は造形物の品質を決定づけるため、その高精度予測が重要であるが、積層造形中のマルチフィジックスを包括的に考慮した凝固組織予測モデル構築と、3次元組織予測を可能とする高性能計算手法開発が課題であった。本研究で構築した3次元組織予測手法は、フェーズフィールド組織予測のための高性能計算手法開発の指針となり、かつ、実験的にその場観察が難しい積層造形中の凝固組織形成過程を3次元的に再現・評価できるため、学術的な貢献が期待できる。また、高品質な積層造形品を製造するための知見を生み出す強力なツールとして、今後、産業面での貢献も期待できる。

研究成果の概要（英文）：In this study, to accurately predict the solidification microstructure formed by dendrite/cell growth during metal additive manufacturing (AM) in three dimensions (3D), a multi-physics model coupling the meso-scale thermal fluid flow model and the micro-scale phase-field (PF) model was developed. To enable the large-scale 3D PF simulations, a high-performance computing methods combining parallel computation using multiple GPUs and the adaptive mesh refinement method were implemented. Through the large-scale 3D PF simulation during AM, the 3D microstructure was successfully predicted, simulating the experimental microstructure well. The developed method is a powerful tool for revealing the mechanisms of dendrite/cell growth with multi-physics phenomena during AM.

研究分野：計算材料科学

キーワード：フェーズフィールド法 格子ボルツマン法 複数GPU並列計算 適合格子細分化法 デンドライト・セル
成長 レーザー溶融法 金属積層造形 凝固

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

積層造形(Additive Manufacturing: AM)は、従来の加工法では製造が難しい複雑な形状の製品を作成可能な最新のものづくり技術であり、大きな社会変革をもたらすブレイクスルー技術として期待されている。金属 AM による造形物の特性は、プロセス中に形成される凝固組織によって決定される。しかしながら、この凝固組織を高精度に予測できないことが大きな課題となっている[1]。金属 AM の代表的な方法である、レーザー溶融式積層造形(Additive Manufacturing Selective Laser Melting: AM-SLM)においては、母材上への金属粉末の配置、レーザー照射による金属粉末と母材の溶解、放熱による凝固組織の形成、を層ごとに繰り返すことで立体物を造形する。この一連のプロセスは、金属溶融、液相流動、母材からの柱状晶形成、溶液中での核生成と等軸晶形成、熱輸送、粒成長などの複数の物理現象が同時に生じる複雑なマルチフィジックス問題である。加えて、高温かつ不透明な現象のため、溶融プール内部の直接観察は困難である。そのため、数値計算による現象の再現と組織形成メカニズムの解明が急務である。AM 凝固組織はデンドライト・セル状組織の成長とその後の粒成長によって形成される。デンドライト・セル成長を含むミクロスケール材料組織の発展を定量的に再現可能な強力な数値モデルとしてフェーズフィールド(phase-field: PF)法が発展している[2]。AM プロセスのデンドライト・セル成長の PF 計算は行われているが、2次元問題や溶融プール底面の一部の領域を対象とした一定の温度勾配・冷却速度下の評価に限定されており[1]、金属粉末の溶融や液相流動を同時に考慮した3次元計算は行われていない。これは、AM プロセスにおける複雑なマルチフィジックス現象を包括的に再現可能なモデルが存在しないことに加え、液相流動内での材料組織発展を考慮した3次元計算は計算規模が膨大になるためである。

2. 研究の目的

本研究では、積層造形過程のマルチフィジックスを考慮した PF 法ベースの数値モデルを構築し、その大規模な3次元計算を可能とする新たな高性能計算手法を開発することで、積層造形プロセスで形成される凝固組織の高精度予測を達成することを目的とする。

3. 研究の方法

3.1. マルチフィジックス PF モデルの大規模3次元計算手法開発

希薄二元合金凝固のための定量的 PF モデル[3]、液相流動と固体運動を伴う等温・非等温二元合金凝固のための PF 格子ボルツマンモデル[4, 5]を対象として、それぞれ高性能計算手法を実装する。計算の大規模化および高速化のため、並列演算性能が高い graphic processing unit (GPU)を複数用いた並列計算を実装する。また、PF 計算では、固液界面近傍にのみ特に細かい空間分解能が要求されるため、必要な個所のみ動的に細かい数値格子を割り当てる適合格子細分化 (adaptive mesh refinement: AMR) 法の実装により計算を効率化する。本研究では、並列化が容易な八分木型ブロック構造 AMR 法[6]を用いる。AMR 法を適用した PF 計算の複数 GPU 並列化にあたり、各 GPU の計算負荷を均一にするため、動的負荷分散を考慮したスライスグリッド法に基づく領域分割法[7]を適用する。温度場や濃度場、流れ場などの複数の場を取り扱う場合には、場ごとに適した格子幅、時間増分を用いる複数格子・時間増分法[8]を適用することで、計算を効率化する。開発した大規模3次元計算手法の並列演算性能は、研究室の GPU 計算機および東京工業大学の GPU スーパーコンピュータ TSUBAME3.0 を用いて評価する。

3.2. 積層造形中の3次元組織予測手法構築

構築した大規模3次元計算手法を、AM-SLM における溶融プール内の高速凝固問題に適用する。ここで、凝固モデルとして、高速凝固において生じる溶質トラップ現象を考慮可能な二元合金凝固のための定量的 PF モデル[9]を用いる。なお、溶融プール内のデンドライト・セル成長を精度よく予測するためには、溶融プール内の温度場と流れ場の情報が必須である。3.1章で開発する大規模3次元計算法を用いても、溶融プール全体を対象とした PF 計算は困難であったため、溶融プール全体の自由表面挙動を高精度に予測可能なマルチフィジックス熱流体モデル[10]とのカップリングによるマルチスケールモデリングを試みる。熱流体モデルでは、熱伝導と液相流動に加えて、金属の蒸発やマランゴニ流、固液共存領域での圧力損失などのマルチフィジックスが考慮されている。このメソスケールな熱流体モデルにより、溶融プールの自由表面挙動および温度・流れ場の時間変化を再現する。熱流体計算における溶融プール底近傍の一部領域を PF 計算領域として設定し、その領域内の温度場を時空間的に補間し、ミクロスケールな PF 計算の入力として利用する。大規模3次元計算の実施には、東京工業大学の GPU スーパーコンピュータ TSUBAME3.0 を用いた。

4. 研究成果

4.1. 柱状デンドライト成長の高性能計算手法開発

二元合金凝固のための定量的 PF モデル[3]の複数 GPU 並列 AMR 計算手法を開発した。ここで、柱状デンドライト成長を効率的に評価するため、デンドライトの先端位置を追従して計算領域を一方向に移動させる領域移動法[7]を実装した。Fe-5.4%Si 二元合金を対象に、開発手法の並列計算性能評価

を行った。ここで、従来の均一格子を用いた計算では取り扱いが困難な、一次枝間隔が広い凝固条件（温度勾配 3 K/mm、冷却速度 5 K/min）における柱状 dendrite 成長計算を実施した。図 1 に、弱スケール並列性能評価のために実施した 16 GPU および 256 GPU 並列計算における柱状 dendrite の固液界面形態の様子を示す。また、図 1 に示す時刻 $t = 3 \times 10^6 \Delta t$ の状態から 2000 time step 分の計算を行い、その間の実行時間を図 2 に示す。図 2 に示すように、GPU 数を増やしてもほぼ同じ実行時間が得られおり、開発した複数 GPU 並列 AMR 計算手法により良好な並列性能の元、計算を大規模化できることを示した。上記の成果は、国際誌 Materials Theory にて発表済みである[7]。

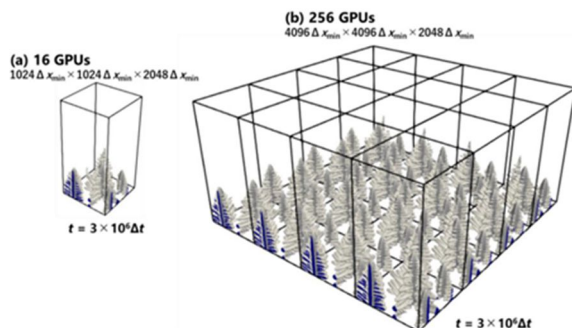


図 1 弱スケール並列性能評価のために実施した (a)16 GPU および (b)256 GPU 並列計算における Fe-5.4wt.%Si の一方向凝固中の柱状 dendrite の固液界面形態[7]。

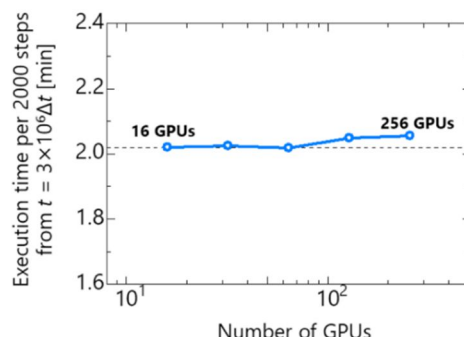


図 2 二元合金凝固の定量的 PF モデルの複数 GPU 並列 AMR 計算手法の弱スケール並列性能評価結果[7]。

4.2. 液相流動と固体運動を伴う等軸 dendrite 成長の高性能計算手法開発

液相流動と固体運動を伴う等温二元合金凝固のための PF 格子ボルツマンモデル[5]の複数 GPU 並列 AMR 計算法を開発した。ここで、液相流動を表現する格子ボルツマン計算に PF 計算よりも 2 倍粗い数値格子を用いる複数格子法[8]を適用することで、計算のさらなる効率化を達成した。SCN-3wt.% acetone を対象とし、図 3 に示す固液密度比に起因した浮力によって沈降しながら成長する等軸 dendrite の計算を実施し、長距離沈降中の 3 次元等軸 dendrite の成長・運動挙動を PF モデルに基づく計算により初めて評価することに成功した。ここで、図 3 に示すような領域内の界面領域が極端に小さい条件において、AMR 法により顕著な高速化の効果が得られることを確認した。上記の成果は、国際誌 Computational Materials Science にて発表済みである[11]。

その後、開発手法を非等温凝固モデルに拡張し[4]、固液相変態に伴う潜熱放出および熱・溶質対流が等軸 dendrite の成長・運動挙動に与える影響を評価した。本計算では、複数格子・時間増分法[8]の適用により温度場の計算コストを大幅に削減し、等温モデルとほぼ同程度の計算時間で非等温モデルの計算を可能とした。上記の成果は、国際会議論文 IOP Conference Series: Materials Science and Engineering にて発表済みである[4]。以上より、PF 変数、温度場、溶質濃度場、流れ場の時間変化を同時に取り扱ったマルチフィジックス PF モデルの大規模 3 次元計算を可能とする、当該分野における最先端の高性能計算手法開発に成功した。

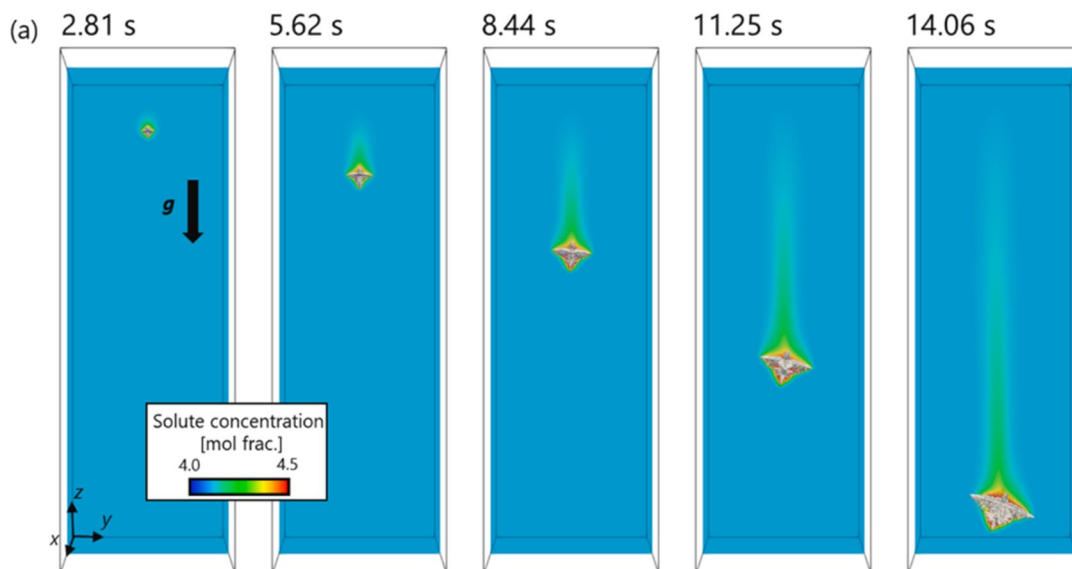


図 3 固液密度比に起因した浮力により沈降しながら成長する 3 次元等軸 dendrite の複数 GPU 並列 AMR-PF 格子ボルツマン計算結果[11]。固液界面形態および領域中央断面上の溶質濃度分布の時間変化を图示している。

4.3. AM-SLM プロセス中の 3 次元凝固組織予測

メソスケール熱流体モデル[10]とミクロスケール PF モデル[9]のカップリングモデルを構築した。PF 計算は、4.1 章で構築した複数 GPU 並列 AMR 計算[7]により高速化される。構築手法を用いて、ニッケル基超合金インコネル 718 の AM-SLM プロセスにおける 3 次元凝固組織予測を実施した。AM-SLM のプロセス条件は、実験データ[12]を参考に設定した。なお、実験では複数トラック・複数レイヤーの造形が行われているが、本研究では簡単のため、熱流体計算において、粉末無し、かつ、シングルトラックプロセスを仮定した。また、PF 計算においてインコネル 718 は Ni-5wt.%Nb と仮定した。溶融プールの底から 30 μm (粉末層厚さと同程度) の範囲を対象に、薄膜 3 次元領域における大規模 3 次元 PF 計算を実施した。なお、AMR における最小格子幅は 5 nm と設定した。図 4 に固液界面の時間発展の様子を示す。図中の x 方向がレーザー走査方向に対応している。図に示すように、実験と同様に、溶融プール底から熱流方向に沿って成長する柱状セル成長が再現できた。ここで、溶融プール中央における柱状セルの一次枝間隔を測定すると、およそ 0.21 - 0.24 μm であった。この値は実験値 (0.27 μm) [12] と比べると僅かに小さいものの概ね一致しており、構築した手法により高精度な 3 次元凝固組織予測が可能であることを実証できた。本構築手法は、AM の 3 次元凝固組織を予測するための強力なツールであり、その場観察が困難な AM 中のデンドライト・セル成長のメカニズム解明に強く寄与できる。上記の内容は、現在、国際誌に投稿準備中である。今後、本構築手法を液相流動を伴う問題に拡張し、AM 中の急流がデンドライト・セル成長に与える影響の詳細な評価を計画している。

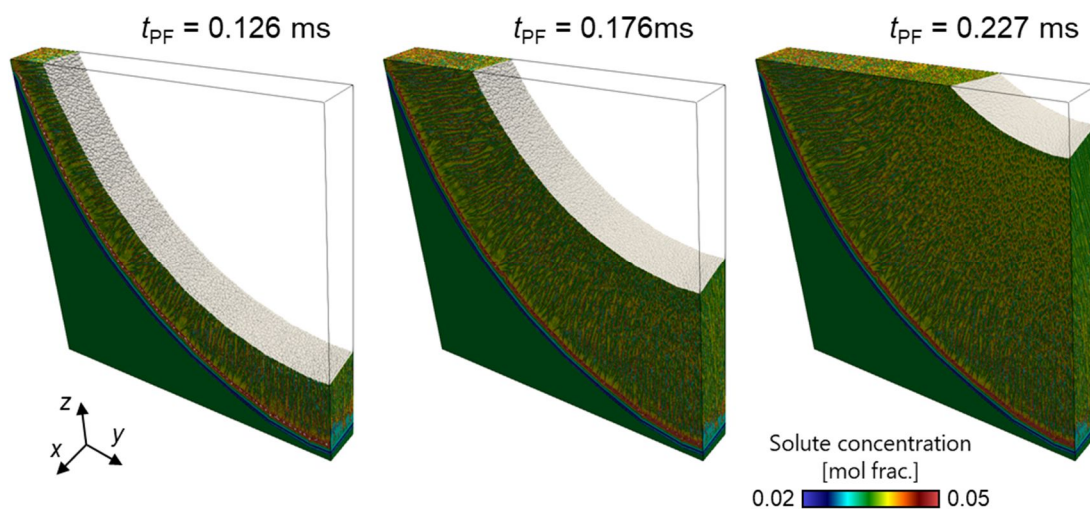


図 4 ニッケル基超合金インコネル 718 の AM-SLM シングルトラックプロセスにおいて形成された溶融プール底近傍の薄膜 3 次元領域内でのセル成長の複数 GPU 並列 AMR-PF 計算結果。

参考文献

- [1] J.H.K. Tan, S.L. Sing, W.Y. Yeong, Virtual and Physical Prototyping, 15 (2020) 87-105.
- [2] M. Ohno, ISIJ International, 60 (2020) 2745-2754.
- [3] M. Ohno, K. Matsuura, Physical Review E, 79 (2009) 031603.
- [4] S. Sakane, T. Aoki, T. Takaki, IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 1281 (2023).
- [5] S. Sakane, T. Aoki, T. Takaki, Computational Materials Science, 211 (2022) 111507.
- [6] H.-Y. Schive, J.A. ZuHone, N.J. Goldbaum, M.J. Turk, M. Gaspari, C.-Y. Cheng, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 481 (2018) 4815-4840.
- [7] S. Sakane, T. Takaki, T. Aoki, Materials Theory, 6 (2022) 1-19.
- [8] S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Aoki, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 27 (2019) 054004.
- [9] T. Pinomaa, N. Provatas, Acta Materialia, 168 (2019) 167-177.
- [10] L. Wang, Y. Zhang, H.Y. Chia, W. Yan, npj Computational Materials, 8 (2022).
- [11] S. Sakane, T. Aoki, T. Takaki, Computational Materials Science, 211 (2022) 111542.
- [12] X. Liu, K. Wang, P. Hu, X. He, B. Yan, X. Zhao, Materials (Basel), 14 (2021).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Sakane Shinji, Takaki Tomohiro, Aoki Takayuki	4. 巻 6
2. 論文標題 Parallel-GPU-accelerated adaptive mesh refinement for three-dimensional phase-field simulation of dendritic growth during solidification of binary alloy	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Materials Theory	6. 最初と最後の頁 1-19
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1186/s41313-021-00033-5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Sakane Shinji, Aoki Takayuki, Takaki Tomohiro	4. 巻 211
2. 論文標題 Parallel GPU-accelerated adaptive mesh refinement on two-dimensional phase-field lattice Boltzmann simulation of dendrite growth	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 111507 ~ 111507
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.commatsci.2022.111507	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Sakane Shinji, Aoki Takayuki, Takaki Tomohiro	4. 巻 211
2. 論文標題 Parallel-GPU AMR implementation for phase-field lattice Boltzmann simulation of a settling dendrite	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 111542 ~ 111542
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.commatsci.2022.111542	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Sakane S, Aoki T, Takaki T	4. 巻 1281
2. 論文標題 Phase-field lattice Boltzmann simulation of three-dimensional settling dendrite with natural convection during nonisothermal solidification of binary alloy	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 IOP Conference Series: Materials Science and Engineering	6. 最初と最後の頁 012053 ~ 012053
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1088/1757-899X/1281/1/012053	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

〔学会発表〕 計6件（うち招待講演 1件 / うち国際学会 2件）

1. 発表者名 Sakane Shinji, Takaki Tomohiro, Aoki Takayuki
2. 発表標題 Multiple GPUs parallel computing implementation of 3D AMR phase-field simulation for columnar dendrite growth
3. 学会等名 European Congress and Exhibition on Advanced Materials and Processes (EUROMAT 2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 坂根 慎治, 高木 知弘, 青木 尊之
2. 発表標題 適合細分化格子法を適用した複数GPU並列計算による運動しながら成長する等軸デンドライトのphase-field格子ボルツマンシミュレーション
3. 学会等名 日本流体力学会 第35回数値流体力学シンポジウム (CFD35)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 坂根 慎治, 高木 知弘, 青木 尊之
2. 発表標題 AMR法による3次元柱状デンドライト成長の複数GPU並列phase-field計算の高速化
3. 学会等名 日本機械学会 第34回計算力学講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 坂根 慎治, 高木 知弘
2. 発表標題 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
3. 学会等名 日本鉄鋼協会 第184回秋季講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 坂根 慎治
2. 発表標題 GPU計算と適合格子細分化法による高精度 dendrite 凝固組織予測シミュレーション
3. 学会等名 NVIDIA 冬のHPC Weeks (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Sakane Shinji, Aoki Takayuki, Takaki Tomohiro
2. 発表標題 Growth behavior of an equiaxed dendrite settling in an undercooled melt: three-dimensional phase-field lattice Boltzmann simulation study
3. 学会等名 Modelling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes XVI (国際学会)
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>Shinji Sakane (JP) - 京都工芸繊維大学 情報科学センター http://www.cis.kit.jp/~sakane/ 坂根 慎治 - 京都工芸繊維大学 研究者総覧 https://www.hyokadb.jim.kit.ac.jp/profile/ja.7fa0df662b348aeeb1e281e629aae43f.html</p>

6. 研究組織		
氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
シンガポール	シンガポール国立大学			