

氏名	さかね しんじ 坂根 慎治
学位(専攻分野)	博士(工学)
学位記番号	博甲第952号
学位授与の日付	令和2年3月25日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当
研究科・専攻	工芸科学研究科 設計工学専攻
学位論文題目	デンドライト凝固組織の高精度予測に向けた大規模フェーズフィールド計算手法に関する研究
審査委員	(主査)教授 高木知弘 教授 森西晃嗣 教授 森田辰郎

論文内容の要旨

凝固組織は、鑄造製品の特性を決定するだけでなく、材料加工プロセスにおける初期組織となる。このため、高性能な金属製品の製造のためには、凝固組織の高精度な予測と制御が極めて重要である。しかしながら、高温かつ不透明な金属合金の凝固過程を直接観察することは困難であり、数値計算による評価が不可欠である。フェーズフィールド法はデンドライト凝固を高精度に再現可能な唯一の数値モデルであるが、計算コストが高く、組織評価において重要な3次元問題における複数デンドライト組織の再現はこれまで不可能であった。以上の背景を受け、本研究では、デンドライト凝固組織の高精度予測に向けた大規模フェーズフィールド計算手法を確立し、構築した手法を用いて各種凝固現象の解明を行うことを目的とし研究が行われた。本学位論文は全6章から構成されている。

第2章では、一方向凝固過程における複数柱状デンドライトの競合成長挙動評価を可能とする大規模フェーズフィールド計算手法を開発した。ここで、長時間の競合成長計算を行うために、成長するデンドライトの先端位置をある空間位置に固定する計算効率化手法を実装した。また、複数GPU並列計算において良好なスケーリングが得られることを確認した。次いで、単結晶、二結晶、多結晶中の柱状デンドライトの競合成長計算を実施した。単結晶計算においては、一次枝配列が六角形配列を取ることを発見した。二結晶計算においては、温度勾配方向に成長するデンドライトを傾いたデンドライトが淘汰する普通でない淘汰現象を解明した。多結晶計算においては、優先成長方向と温度勾配方向の傾きが小さい粒ほど長く成長し続けることを確認し、2次元や3次元二結晶などの特別な条件とは競合成長形態が異なることを示した。

第3章では、凝固において重要な液相流動を考慮したデンドライト成長の大規模フェーズフィールド計算手法を構築した。液相流動の計算にアルゴリズムがシンプルで並列化が容易な格子ボルツマン法を用い、世界最大のフェーズフィールド格子ボルツマン凝固計算を達成した。さらに、開発手法を強制対流や自然対流を伴うデンドライト成長問題の評価に適用した。強制対流の問題では、単一の等軸デンドライトの優先成長方向と流動方向を変えた系統的な計算を行い、デンドライト成長速度と流動方向の関係を明らかにした。自然対流の問題では、一方向凝固過程における複数デンドライトの競合成長計算を行い、重力が一次枝間隔と配列に及ぼす影響を明らかにし

た。さらに、デンドライト樹間液相の透過率算出法を構築し、複数柱状デンドライトに対する透過率を数値計算手法によって初めて求め、柱状晶の成長方向垂直流れを定量化した。

第4章では、固液相変態、熱・溶質拡散、液相流動を考慮したマルチフィジックス凝固現象を大規模に計算可能な手法を構築した。ここでは、場ごとに異なる格子幅および時間増分を用いる複数時間増分法と複数格子法、複数GPU並列計算を適用した。この時、構築手法が良好なスケールリングを達成できることを示し、熱溶質対流を伴う複数デンドライト成長計算における構築手法の有用性を示した。

第5章では、液相中を運動しながら成長するデンドライトの大規模計算法を構築した。まず、単一デンドライトの長距離落下中の成長挙動評価を可能とするため、計算領域移動法を適用したGPU計算コードを開発した。また、2次元問題における大規模計算を実行し、落下によるデンドライト一次枝成長速度の変化を明らかにした。さらに、多数のデンドライトの運動、成長、衝突と合体、その後の粒成長を考慮した多結晶凝固計算法を開発し、数百の等軸デンドライトを取り扱った多結晶凝固計算を達成した。

第6章は、結論として、これまでの総括と今後の展望について記載している。

論文審査の結果の要旨

本論文では、金属材料の特性を決定する凝固組織を高精度に予測するために、メゾスケール材料組織予測の最も強力な手法であるフェーズフィールド法の大規模計算法の構築を行っている。大規模計算法としては、演算性能の高いGPU (graphics processing unit) およびGPUを複数用いた並列計算を主な手法とし、これに各種効率化法を併用することで高性能計算を達成している。対象とした凝固現象は、一方向凝固、自然対流と強制対流を考慮した液相流動下での凝固、固体の運動を伴う等軸多結晶凝固であり、代表的な凝固現象を網羅している。なお、液相流動計算には並列効率の高い格子ボルツマン法を用いている。

構築した大規模計算法を実際の凝固現象に適用し、大規模計算によってのみ達成可能な凝固現象の解明および発見を試みている。一方向凝固においては、単結晶、二結晶、多結晶を対象とし、単結晶問題ではデンドライト配列は六角形が支配的であることを解明、二結晶問題では傾きの大きな粒が小さな粒を淘汰する普通でない淘汰現象の解明、多結晶問題では傾きの小さい粒が優先的に成長することを明らかにした。また、強制対流を伴う単一の等軸デンドライトの成長を系統的に評価し、液相流動方向と優先成長方向がデンドライト形態に及ぼす影響を3次的に初めて明らかにした。また、一方向凝固における複数デンドライト成長の計算において、自然対流が淘汰挙動に及ぼす影響を3次的に初めて明らかにした。さらに、デンドライト樹間液相流れの計算手法を開発し、複数柱状デンドライト間液相流動の透過率を初めて定量化した。さらに、固体の運動を伴う問題に対して、単一等軸デンドライトの長距離移動と、多数の等軸デンドライトが相互作用しながら運動する様子を世界ではじめて再現した。

以上のように、本論文においては、学術的・工学的に重要な研究課題が明確に設定され、研究方法も目的に対して適切である。また、先行研究の十分な調査と文献引用によって研究の位置づけが明確化されている。さらに、工学的に重要な多くの知見が得られ、論文の体裁は学位論文として適切である。よって、本論文は学位論文として適切であると判断する。

以下に本学位論文の内容に関連する10編の公表論文を示す。なお、第二著者の論文も含まれているが、いずれも申請者が主体的に取り組んだものである。

1. S Sakane, T Takaki, M Ohno, T Shimokawabe and T Aoki, GPU-accelerated 3D phase-field simulations of dendrite competitive growth during directional solidification of binary alloy, IOP Conference Series: Materials Science and Engineering 84 (2015) 012063.
2. Tomohiro Takaki, Shinji Sakane, Munekazu Ohno, Yasushi Shibuta, Takashi Shimokawabe, Takayuki Aoki, Primary arm array during directional solidification of a single-crystal binary alloy: Large-scale phase-field study, Acta Materialia 118 (2016) 230–243.
3. Tomohiro TAKAKI, Shinji SAKANE, Munekazu OHNO, Yasushi SHIBUTA, Takashi SHIMOKAWABE and Takayuki AOKI, Large-scale Phase-field Studies of Three-dimensional Dendrite Competitive Growth at the Converging Grain Boundary during Directional Solidification of a Bicrystal Binary Alloy, ISIJ International, Vol. 56 (2016), No. 8, pp. 1427–1435.
4. Shinji Sakane, Tomohiro Takaki, Roberto Rojas, Munekazu Ohno, Yasushi Shibuta, Takashi Shimokawabe, Takayuki Aoki, Multi-GPUs parallel computation of dendrite growth in forced convection using the phase-field-lattice Boltzmann model, Journal of Crystal Growth, 474 (2017) 154–159
5. Tomohiro Takaki, Shinji Sakane, Munekazu Ohno, Yasushi Shibuta, Takayuki Aoki, Charles-André Gandin, Competitive grain growth during directional solidification of a polycrystalline binary alloy: Three-dimensional large-scale phase-field study, Materialia 1 (2018) 104–113
6. Shinji Sakane, Tomohiro Takaki, Munekazu Ohno, Yasushi Shibuta, Takashi Shimokawabe, Takayuki Aoki, Three-dimensional morphologies of inclined equiaxed dendrites growing under forced convection by phase-field-lattice Boltzmann method, Journal of Crystal Growth 483 (2018) 147–155
7. Tomohiro Takaki, Shinji Sakane, Munekazu Ohno, Yasushi Shibuta, Takayuki Aoki, Permeability prediction for flow normal to columnar solidification structures by large-scale simulations of phase-field and lattice Boltzmann methods, Acta Materialia 164 (2019) 237–249
8. Shinji Sakane, Tomohiro Takaki, Munekazu Ohno, Yasushi Shibuta and Takayuki Aoki, Acceleration of phase-field lattice Boltzmann simulation of dendrite growth with thermosolutal convection by the multi-GPUs parallel computation with multiple mesh and time step method, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 27 (2019) 054004 (12pp)
9. Shinji Sakane, Tomohiro Takaki, Munekazu Ohno, Yasushi Shibuta, Simulation method based on phase-field lattice Boltzmann model for long-distance sedimentation of single equiaxed dendrite, Computational Materials Science 164 (2019) 39–45
10. Tomohiro Takaki, Shinji Sakane, Munekazu Ohno, Yasushi Shibuta, Takayuki Aoki,

Large-scale phase-field lattice Boltzmann study on the effects of natural convection on dendrite morphology formed during directional solidification of a binary alloy, Computational Materials Science 171 (2020) 109209