

氏 名	やまなか なみと 山中 波人
学位(専攻分野)	博 士 ( 工 学 )
学 位 記 番 号	博 1 1 7 3 号
学位授与の日付	令和 7 年 3 月 21 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	Phase-field 法を用いた固液共存域変形の数値モデル構築と挙動解析
審 査 委 員	(主査)教授 高木 知弘 教授 森田 辰郎 准教授 福井 智宏

## 論文内容の要旨

鋳造は、金属材料の製造における初期プロセスであり、そこでの凝固組織制御は材料の機械的特性の向上のために極めて重要である。鋳造時の凝固過程では、固相と液相が共存する固液共存体が、液相流動や加工法に由来する外力の影響で変形する。この固液共存変形においては、結晶粒の接触と再配列に起因して、偏析などの凝固欠陥が形成される。このため、固液共存変形の高精度な挙動評価が不可欠であるが、固液共存変形は高温かつ不透明な現象であるため、現象の直接観察は基本的に不可能である。そこで、固液共存変形を再現するために **phase-field** 法を用いた数値モデルを構築し、シミュレーションを通して変形挙動を解析することを目的として研究を行った。本論文は以下の 6 章から構成される。

第 2 章では、固液共存域変形を再現するための数値モデルの構築を目的とし、複数の相や結晶を表現するための **multi-phase-field (MPF)** モデル、液相流動を再現するための格子ボルツマン (**LB**) モデル、結晶の運動を再現するための運動方程式を連成することで、液相流動と固体運動を伴う多結晶凝固から粒成長までを連続して再現可能な **multi-phase-field** 格子ボルツマン (**MPF-LB**) モデルを構築した。さらに、構築したモデルの妥当性の検証を、単一固相の凝固シミュレーション、強制対流下の凝固シミュレーション、せん断流下での結晶の運動を伴う凝固シミュレーションを通して行った。また、構築したモデルのアプリケーション例として、デンドライトが沈降しながら成長し、最終的な凝固組織が形成するまでの、鋳造過程に生じる一連の現象を再現するシミュレーションを行った。

第 3 章では、まず、**LB** 法を単一緩和時間モデルから 2 緩和時間モデルに拡張し、第 2 章で構築したモデルをより高精度化した。続いて、固液共存体の基礎的な変形挙動を評価するために、固液共存体の単純せん断変形を再現するシミュレーションを行った。ここで、固相率を変化させてシミュレーションを行い、変形挙動が液体から固体へ遷移する様子を明らかにした。また、高い固相率の固液共存体に関して、レイノルズダイラタンシーに起因するせん断帯の形成挙動を、結晶粒の再配列と力学的挙動の関係から詳細に調査した。さらに、せん断帯形成に及ぼす領域サイズと初期結晶粒配列の影響も評価した。最後に、せん断帯の形成のメカニズムを、結晶粒の再配列挙動から明らかにした。

第 4 章では、様々な外力に対してモデルの汎用性を向上させることを目的とし、固液共存体に棒を押し込むことで固液共存域変形を引き起こす手法を開発した。この際、固体壁を PF 変数で表現する点に新規性がある。本手法を用いることで、固相率と結晶形態が固液共存変形に及ぼす影響評価を行った。

第 5 章では、MPF-LB モデルと固液共存変形シミュレーション法の 3 次元化を行い、固相率を変化させた単純せん断シミュレーションを実施した。この結果、結晶粒間の接触による相互作用が確認される固相率、及び、結晶粒の剛体を仮定したシミュレーションが可能な固相率は、いずれも 2 次元問題より小さく、実際の固液共存変形を高精度に再現するためには、3 次元計算が必須であることを確認した。

第 6 章では本研究の成果を総括した。

## 論文審査の結果の要旨

固液共存変形は、金属加工において極めて重要な現象である。しかしながら、高温かつ不透明な環境で生じ、複数の物理現象が同時に進行するため、その詳細な挙動の解明は長年困難とされてきた。本論文では、フェーズフィールド法と格子ボルツマン法を高度に連成し、計算コストの壁を克服するために複数 GPU を用いた大規模並列計算を実装することで、多結晶凝固から固液共存変形に至る過程を高精度にシミュレーションする手法を確立した。また、本手法を用いることで、固液共存体の単純せん断変形の系統的なシミュレーションを実施し、せん断帯の形成メカニズムを定量的に解明することに成功した。さらに、本研究の成果を実用レベルへと発展させるべく、多様な外力作用問題への展開、およびモデルとプログラムの 3 次元化を達成した。本論文は、計算材料科学の分野において革新的な手法と知見を提供するとともに、工学的応用の可能性を大きく拡張するものであり、その貢献は顕著であると評価できる。

以下に本学位論文作成の基礎となった 5 編の公表論文を示す。いずれもレフェリーシステムのある学術雑誌に筆頭著者として掲載されたものであり、2 編が学術論文 ([2][4])、3 編が国際会議論文 ([1][3][5]) である。

- [1] N. Yamanaka, S. Sakane, T. Takaki, Multi-phase-field lattice Boltzmann simulations of semi-solid simple shear deformation in thin film, *Journal of Physics: Conference Series* 2766(1) (2024) 012195.
- [2] N. Yamanaka, S. Hayase, S. Sakane, T. Takaki, Multi-phase-field lattice Boltzmann modeling and simulations of semi-solid simple shear deformation, *Materialia* 38 (2024) 102295.
- [3] N. Yamanaka, S. Sakane, T. Takaki, 2D multi-phase-field lattice Boltzmann simulations of semi-solid shear deformation, *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* 1274(1) (2023) 012045.
- [4] N. Yamanaka, S. Sakane, T. Takaki, Multi-phase-field lattice Boltzmann model for polycrystalline equiaxed solidification with motion, *Computational Materials Science* 197 (2021) 110658.

- [5] N. Yamanaka, S. Sakane, T. Takaki, Application of multi-phase-field lattice Boltzmann method to semi-solid deformation, *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* 861 (2020) 012067.