

新材料創製のための粉末床溶融結合式付加製造のデジタルツイン科学

Digital Twin Science Powder Bed Fusion (PBF) Type Additive Manufacturing for Creation of Materials

小泉 雄一郎*・奥川 将行*・柳 玉恒*・中野 貴由*
Yuichiro KOIZUMI, Masayuki OKUGAWA, Yuhon LIU and Takayoshi NAKANO

(Received 5 March 2025, Accepted 7 April 2025)

Additive Manufacturing (AM), commonly known as 3D printing, is not only a technology for fabricating 3-D components but also a process for creating new materials. Among various AM processes, Powder Bed Fusion (PBF) is widely applied to metal parts. The properties of materials fabricated by PBF often superior to those produced by conventional manufacturing processes, which suggest the possibility of the development of new materials. Here, we introduce the concept of Digital Twin (DT) science applied to PBF-based AM for creation of novel material. A digital twin (DT) is a cyber space replica of a system, such as manufacturing equipment for optimization, defect prediction, and real-time monitoring, significantly enhancing manufacturing efficiency and material performance. We present a DT model for PBF, consisting of various numerical simulation methods, such as Discrete Element Method (DEM) for powder bed formation, Computational thermal Fluid Dynamics (CtFD) for melt pool behavior, and Phase-Field (PF) Method for microstructure evolution. These models contribute to a better understanding of defect formation mechanisms, solidification processes, and anisotropic crystal growth unique to PBF. Furthermore, in-situ monitoring techniques, including high-speed infrared cameras and photodiode sensors, are explored to validate and refine the DT models. By integrating experimental data with simulation-driven insights, we aim to improve the reliability of AM-produced components and accelerate the discovery of new material properties. This paper discusses the latest developments in DT science for AM, highlighting the challenges and opportunities in optimizing PBF processes for advanced material creation.

Key Words: Additive Manufacturing, Powder Bed Fusion, Laser Beam, Electron Beam, 3D-Printing

1. 緒言

付加製造 (Additive Manufacturing: AM) は、3D プリントとも呼ばれ、3次元形状部材の製造技術であると同時に新材料を創成するプロセスでもある。一般にはAMの特徴として以下の様なことが知られている。

- (I) 複雑な形状を容易に製造できる：トポロジー最適化により設計した形状を製造、部材製造に必要な材料を低減、軽量化による輸送機器の燃費向上、デザイン意匠性の高い部材の製造、などが可能である。
- (II) 材料の使用効率が高い：切削加工と比較して材料の廃棄削減による環境負荷の低減
- (III) CAD データから直接製造が可能：型レス製造によるリードタイムの短縮、地産地消型の製造による物流コストを削減、オンデマンド生産による在庫レス化が可能である。その一方で、課題として、
 - (i) 初期費用、ランニングコスト、原料等が高い。
 - (ii) 造形物の寸法精度、強度などが不十分な場合がある。
 - (iii) 規格や認証制度の整備が開発段階にある：

信頼性の向上やさらなる高付加価値化による高コストの課題を解消するための方策として、材料特性の向上や高機

能特性の付与が果たす役割は極めて重要である。

AMで製造された部材が従来プロセスで製造された部材よりも優れた材料特性を示す場合もあり、それを活用することで新材料を創成することを可能にする。AMプロセスの中でも、高精度/高信頼性金属AMプロセスとして、粉末床溶融結合 (Powder Bed Fusion: PBF) (Fig. 1)^{1), 2)} が最も多く適用されてきた。PBFで製造された造形物では結晶異方性は発現し易くそれを制御する研究が、大阪大学異方性カスタム設計・AM研究開発センターにて、AM特有の結

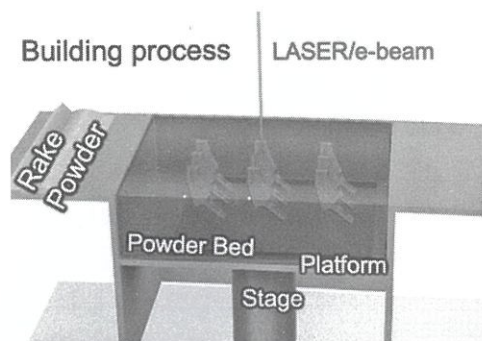


Fig. 1 Schematic illustration of Powder Bed Fusion (PBF). (Source: the website of Koizumi Laboratory^{1), 2)})

* 大阪大学大学院工学研究科 マテリアル生産科学専攻 (〒565-0871 大阪府吹田市山田丘2-1)
Division of Materials and Manufacturing Science, Graduate School of Engineering, The University of Osaka (2-1 Yamadaoka, Suita, Osaka 565-0871, Japan)

晶配向や組織制御に注目した材料創製の研究として、JST-CREST ナノ力学「カスタム力学機能制御学の構築～階層化異方性骨組織に学ぶ～」(研究領域名:革新的力学機能材料の創出に向けたナノスケール動的挙動と力学特性機構の解明)(2021～2026年度,研究代表者:中野貴由)³⁾(Fig. 2)、日本学術振興会科学研究費補助金 学術変革領域研究(A)「超温度場材料創成学:巨大ポテンシャル勾配による原子配列制御が拓くネオ3Dプリント」(2021～2025年度,領域代表者:小泉雄一郎)にて取り組んでいる。PBFでの結晶配向制御がもたらすと期待されているAMの優位性には、様々なものがある。具体的には例えば、PBFでは単結晶状の部材が得ることが可能である。ガスタービン翼などの製造では、クリープ特性を向上させることを目的として、従来から弱点となる結晶粒界が荷重軸方向に平行にのみ存在する一方向凝固材や、結晶粒界の全く存在しない単結晶が、investment casting(ロストワックス casting)による1～10 mm/h程度の凝固速度での一方向凝固で行うことで製造されてきた。この方法では例えば、100 mmのブレードを得るには10時間以上を要する。しかし、このような単結晶部材をAMプロセスで製造できれば、それだけでも、先述のAMの利点に加え、材料の高機能化による利点も得られる。さらに、それらの利点を組み合わせることで、従来のプロセスでは不可能であった特性を達成することが可能となる。

一方で、最高性能やチャンピオンデータの発現だけでは、信頼性の観点からの課題は残る。最高性能が高ければ高いほど、裾野の性能も高くなると期待されるが、「鎖はその一番弱い部分で切れる」というように、部材の強度は最も脆弱な部分によって決定される。そのため、如何に弱点、すなわち欠陥をなくすかに加えて、期待される性能を保証することが重要である。

PBFプロセスは、プロセス中に常時断面を観察することが可能であることから、プロセス中に検査を完了させることも可能であると期待される。また、熔融凝固後の熱履歴や、残留応力によって特性が変化する点も考慮する必要がある。

PBF式AMは、金属粉末をレーザー(Laser)や電子ビームで局所的に熔融・凝固させて層状に積み重ねることで、複雑な形状の部品を製造する技術である。PBFは、部位ごとの材料特性の制御や新材料の創成を可能にするプロセスとしても注目されている。プロセスの最適化や新たな応用分野を切り開くために、サイバーフィジカルシステム(CPS)およびデジタルツイン(DT)の活用が進められている。

日本政府が提唱した「Society 5.0」や「Connected Industries」、ドイツ政府が提唱した第4次産業革命(Industry 4.0)などによりものづくりのデジタルトランスフォーメーション(DX)が加速してきた。この変革により、要求される性能から、逆問題解析を用いて、最適な材料設計やプロセス設計を行い、必要な場所・時間で、必要な数量の製品を製造する社会の実現が進められている。さらに、自然災害や国際情勢の変化など、環境・状況の変化に対応できる製造サプライチェーンの強靱性への要求が高まり、感染症拡大を背景に、社会のDXの動きが一層強まっている。この動きは、欧州で2021年に提唱された第5次産業革命(Industry 5.0)においても重要視されている。

このような高度社会において、サイバーフィジカルシステム(CPS)やデジタルツイン(DT)は、次世代のものづくりの中核を担う技術として開発が進められている。

CPSはサイバー空間と物理空間を統合したシステムであり、DTは、製造装置、工場などの複雑な機械システムや、気候システム、物流システムなどのシステムをサイバー空間上に複製したものである。DTは、統計モデルと物理モデルによって構築され、物理モデリングには、製造施設で発生する物理・化学現象を再現するための計算機シミュレーションが用いられる⁴⁾。

CPSとDTは様々なスケールで構築されており^{1), 3-11)}、マクロスケールでは、天気予報⁹⁾、サプライチェーンにおける物流ネットワークの最適化、機械の部品交換の故障予測、などに応用されている¹⁰⁻¹⁴⁾。

AMを活用した高機能部材の高効率生産のためにも、AM

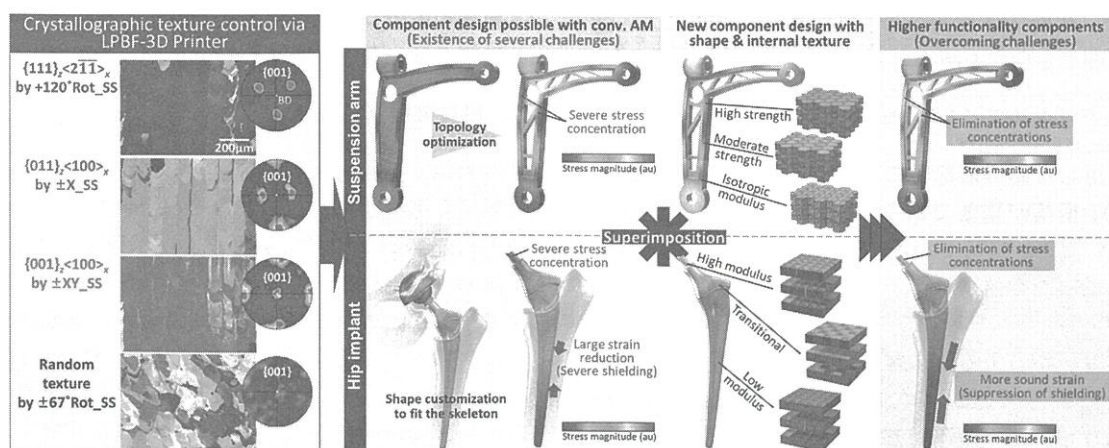


Fig. 2 Conceptual Diagram of Creation of high-performance components through crystallographic texture control in laser PBF. (source: Ishimoto et al., Acta Mater. reproduced under CC-BY license.³⁾)

システムのDT構築が重要である。筆者らは特に金属AMの主流であるPBF^{10), 15)}について研究している。PBFによるAM技術については、世界的にも研究例が多く、DTの活用によるプロセスの最適化技術の開発が進められている。但し、それらは、欠陥の検出、回避を目的としたものが多いなか、筆者らは、結晶配向を中心とした材料特性の制御、さらにはPBFの急速凝固結晶成長挙動を解明し、それらを制御するための、DT構築²⁾を目指した計算機シミュレーションを多く行っている。PBFプロセスで発現する種々の現象のなかでも、PBF特有の結晶成長自体が、凝固の科学の視点からも新しい研究対象となっている。PBF特有の結晶成長を再現することを目的としたシミュレーションを開発する中で、新たな知見が見出されている。プロセス中に発現することが見出された現象は、プロセス最適化のための現象を予測するという目的に対しては、克服すべき新たな課題となってしまうものの、同時に、数々の新たな学術的な知見を獲得する絶好の機会ともなる。例えば、非常に興味深いことに、PBFにおける冷却速度は、アトマイズ法やメルトスピン法など、非晶質材料やナノ結晶材料の製造に用いられる急速凝固プロセスと同等あるいはそれ以上に大きいにも関わらず、結晶配向の強い、従来は低速結晶成長でしか得ることができないと考えられてきた単結晶や一方向凝固柱状組織を有する材料が得られている。

また、条件によっては、微細結晶粒も得られている。造形プロセスの条件を造形する部位によって変更することで、材料組織を部位ごとに制御することは、さらなる高機能部材を製造するための有力な手段として期待されることから、筆者らは、それら制御すること目的とした研究を精力的に進めている。この研究により、従来の手法との相違点も浮き彫りになっている。

このようにDTの構築を目標(ランドマーク)としつつ、その過程で新たな科学的知見を得ることを、「デジタルツイン科学」と呼ぶ。そして研究を進める中で新たな課題に直面するたびに、それを乗り越えることが、研究を継続する動機となっている。

本稿では、金属AM技術のDTの構築と、それによる新材料創製に関する研究を紹介する。

2. PBFのデジタルツイン科学の概要

AMを活用した高機能部材の高効率生産のため、AMシステムのDT構築が重要である。先述のとおり筆者らは、PBFのDTの構築を進めている(Fig. 3)。PBFのDTでは、物理法則に沿った数値解析により、各工程がシミュレートされる。

例えば、レーキによる粉末層形成過程における粉末粒子の挙動が、各粒子の運動をニュートンの運動方程式と剛体回転を扱うオイラーの運動方程式を数値計算する個別要素法(DEM)によってシミュレートされる。さらに、形成された粉末床に対するLBやEB照射による溶融凝固挙動

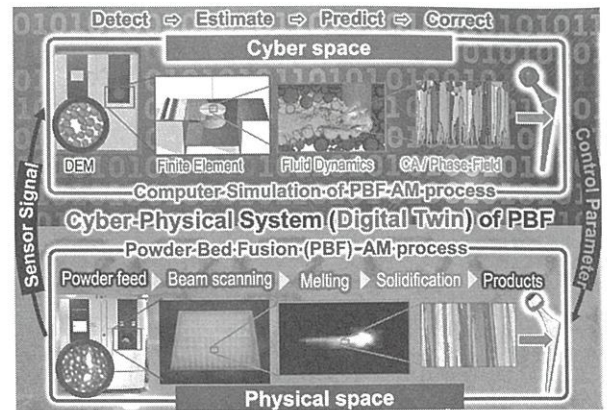


Fig. 3 Conceptual Diagram of Digital Twin Science in Powder Bed Fusion (PBF). (Source: the website of Koizumi Laboratory¹¹⁾)

の計算もなされる。具体的には、ビームと物質の相互作用による発熱が、PBF-LBではLBの光線追跡(Ray-Tracing)¹⁶⁾、PBF-EBではEBのモンテカルロ(MC)計算¹⁷⁾などで求められ、熱輸送が有限要素法(FEM)などで計算される。さらに、溶融池内の流体の流れが、流体の運動をNavier-Stokesの式で、熱輸送をFourierの熱伝導方程式で解く数値熱流体力学(CtFD)計算で予測される。CtFD計算で得られた温度分布変化を境界条件として、凝固中の結晶成長と微細組織の形成が、Cahn-Hilliardの式とAllen-Cahnの式を用いて溶質と秩序パラメータの分布を時間発展させるフェーズフィールド(PF)法によりシミュレートされる。PF法は、10 μm 未満のデンドライトなど比較的微細な組織形成のシミュレーションに用いられ、溶融池全体の結晶粒組織や複数の溶融トラックの重ね合わせで生成される結晶粒組織など比較的大きな組織形成のシミュレーションにはセルオートマトン(CA)法が適用できる^{18), 19)}。

PBFプロセスにおける各段階の計算機シミュレーションが幅広く実施されている。具体的には、原料粉末の供給と粉末床の形成プロセス、造形中における残留ひずみの解析、LBやEBによる粉末の溶融結合過程、凝固過程、さらに冷却中に生じる非平衡凝固、非定常な結晶成長、相転移による組織形成のシミュレーションが行われる。

以下では、各プロセスのシミュレーション例を示す。

3. 粉体流動プロセス

PBFにて材料を創製する上で、まずポアなどの欠陥のない健全な部材が得られることが前提となる。PBFプロセス中の欠陥形成を回避するためには、粉末流動挙動の理解、予測および制御が重要である。経験的には、球形度が高く粒度分布が狭い粉末は、均一な粉末層の形成に適するとされているが、そのメカニズムは十分に解明されていない。これは、粉末床が他の粉末粒子に覆われた状態で形成されるため、実験的に粉末粒子の挙動を直接観察することが困難なためである。こうした課題に対して、個別要素法(DEM)は有効な計算機シミュレーション手法である。DEMは、粒

子間に作用する粘弾性力や摩擦力を計算し、Newtonの運動方程式とEulerの運動方程式を用いて、各粒子の運動を数値的に解析する。

この手法は、多量の粒子が関与する現象(例:土石流、ボールミル、サイロ充填、粉末の混合²⁰⁾、サブマージアーク溶接²¹⁾などに広く適用されており、PBFにおける粉末層形成過程の解析にも応用されている²²⁻²⁴⁾。

Fig. 4 は、PBFにおける粉末層の形成過程のシミュレーションのスナップショットである。また、**Fig. 5** は、粉末サイズを変化させた場合の粉末層充填度の変化を示している²⁵⁾。このようなシミュレーション結果と実験の比較から、粉末に作用する力の起源など基礎的な知見を得ることが、DTSのコンセプトに基づいた研究の醍醐味である。

DEMシミュレーションを実行するには、粒子の特性に応じて適切なモデルを選択するまたは新たに開発する必要がある。一般に、粒子間相互作用は、粉末表面に垂直な方向に作用する粘弾性力と、表面の接線方向に作用する摩擦力を組み合わせたHertz-Mindlin接触モデルで記述され、粒子間に働く力が、バネ、ダッシュポット、スライダーにてモデル化される。このモデルのパラメータは、粉末の堆積が形成する静的安息角(**Fig. 6**)や、回転するドラム中の粉末が形成する動的安息角など、粉末の集団挙動を再現するように調整される。これら相互作用パラメータの決定は、科学・工学の両方の観点から極めて重要である。例えば、粉末粒子間に引力を仮定しなければ現象が再現出来ない場合、粉末粒子間にはファンデルワールス力や静電気力などの非接触力が作用していることが明らかとなる。これも

DTSコンセプトに基づく研究による発見の一例である。

実験とシミュレーションの差が無視できる程であれば、DEMシミュレーションは、レーキやスキージによる粉末層形成プロセスの条件最適化に活用できるとともに、実験では観測が困難な粒子挙動の詳細な理解にも活用できる。

4. 溶融・流動・凝固プロセスシミュレーション

PBF金属AMプロセスでは、LBやEBを用いた金属粉末の溶融、空隙を埋める溶融液の流動による緻密化、凝固が繰り返される。溶融が不十分、流動が不安定だと凝固後に空洞が残る欠陥となる。このような欠陥の発生を予測し、回避するための計算機シミュレーションが報告されている²⁶⁻²⁸⁾。CtFD(**Fig. 7**)により、PBFにおける粉末の溶融挙動をシミュレートし、ボーリング(Balling)、デヌデーション(Denudation)、スパッタリング(Sputtering)などの欠陥の発生メカニズムを解析する研究が進められている。

CtFD計算では、LBやEBによる加熱にともなう蒸発で生じる反力が凹部を形成し、その凹部内面での多重反射による、LBの吸収率の上昇も加味される。溶融池表面の急峻な温度勾配に起因する表面張力の不均一による流れ(マランゴニ流)や蒸発反力が溶融金属の挙動に強く影響することを示されている。最近では、CtFD計算で得られた表面起伏のモデルを、仮想的微細粒子を配列して造形体表面を模擬したモデルにより、造形体の上部表面と粉末粒子との相互作用力を考慮した粉末層形成シミュレーションも可能となった²⁹⁾(**Fig. 8**)。

金属の融体物性(表面張力や粘性など)とPBFにおける

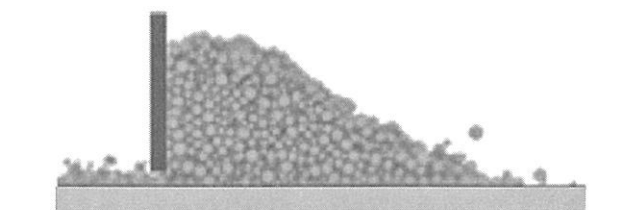


Fig. 4 Experimental and simulated models of powder bed. (a) experiment, (b) DEM simulation. (After Mino et al., Reproduced under CC-BY licence)

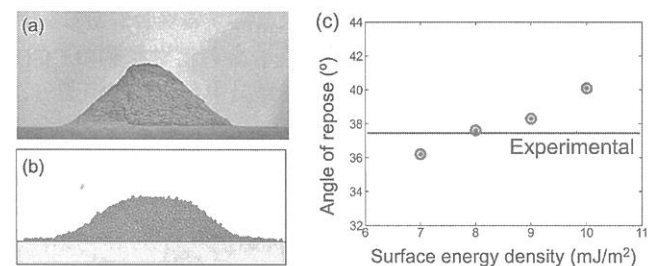


Fig. 6 (a) Optical image of cone-like pile of powder formed by pouring powder to measure the angle of repose. (b) Snapshot of the powder pile formed in powder drop DEM simulations and (c) angles of repose obtained by the DEM simulations with various surface energy densities. (After Mino et al., Reproduced under CC-BY licence)

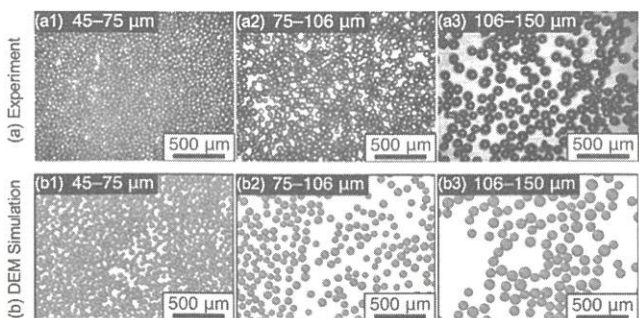


Fig. 5 Digital twin of powder bed formation. (a) Experiment, (b) DEM simulation. (Adapted from Okugawa et al., Reproduced with permission)²⁵⁾

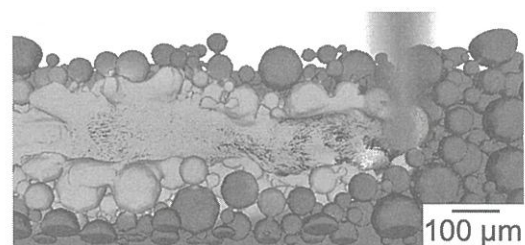


Fig. 7 Snapshot of CtFD simulation of powder bed fusion process.

溶融凝固挙動との関係は、プロセス条件最適化や PBF に適した新材料の設計において重要である。

仮想的に物性値を変えたシミュレーションによって、各物性値が与える影響を調べることも可能である。また、実験データと一致するシミュレーションでの計算パラメータからの物性値推定も有用である。ただし、不確定パラメータが複数存在する場合には、特に慎重な解析が必要である。

5. 凝固・結晶成長過程のシミュレーション

AM 造形部材の特性は微細組織に強く依存し、従来プロセスと比較して、優れた特性を示す場合も多い。また、強い結晶配向を利用することで単結晶材を得ることも可能である³⁰⁾。

大阪大学異方性カスタム設計・AM 研究開発センターでは、特定方向に優れた特性を示す異方性材料の開発が精力的に進められており³⁰⁻³³⁾、骨に近い弾性率を持つ人工骨³⁰⁾や、耐クリープ性に優れた単結晶タービン翼の製造も目指している³²⁾。

凝固組織は、固液界面の温度勾配 (G) と凝固速度 (R) で決定されると考えられている。Hunt³⁴⁾ の柱状・等軸遷移 (Columnar-Equiaxed Transition: CET) のクライテリアに基づく凝固マップを用いた組織予測、および所望の組織を形成する条件の導出が提案されている^{35), 36)}。しかし、 G と R の実測は困難であるため、それらを評価するための計算機シミュレーション (Fig. 9) が不可欠である。

PBF 型金属 AM においては、単結晶や多結晶の作り分けにとどまらず、さまざまな組織制御が可能である。結晶方位が一方に揃った単結晶でも、微細な濃度変調や格子欠陥濃度変調が形成され、材料特性に強く影響する場合がある。

Fig. 10 は、LB 走査による Ni 基合金の溶融挙動の CtFD

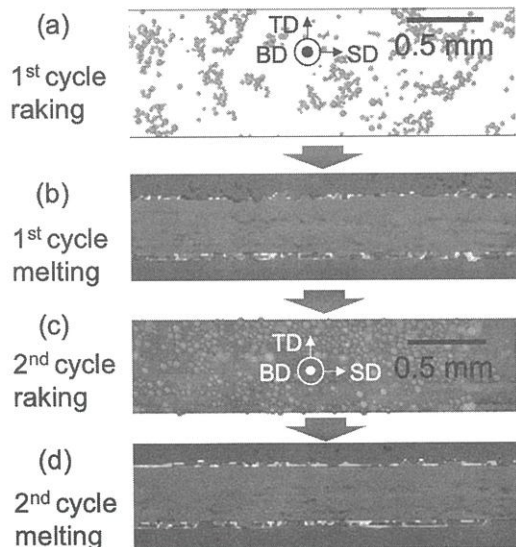


Fig. 8 Simulated models of powder bed. (a) experiment, (b) DEM simulation. (After Mino et al., Reproduced under CC-BY licence)²⁹⁾

計算と PF 計算による溶質元素分布予測の例である³⁷⁾。Fig. 11 は、各溶質元素のプロファイルを示している。幅 $1\ \mu\text{m}$ 以下の微細なデンドライトセルが形成され、セル間への顕

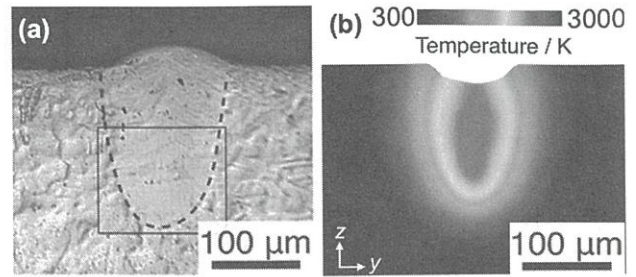


Fig. 9 Digital twin of single melt track (a) optical image of the cross section of melt-region, (b) snapshot of the cross-sectional view of temperature distribution during melting process simulated by CtFD. (After Okugawa et al., Reproduced under CC-BY license)³⁷⁾

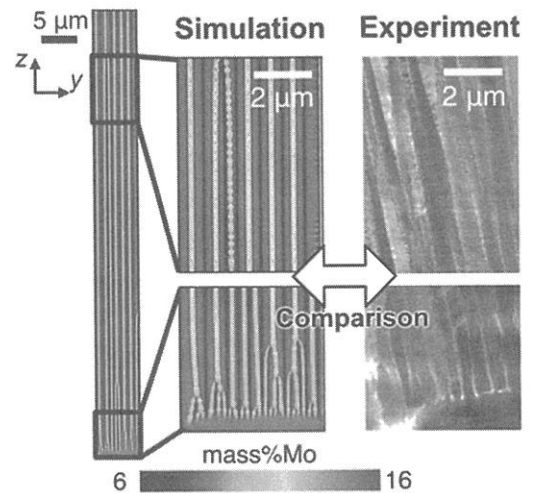


Fig. 10 Prediction of solute segregation by PF calculations. Comparison of simulation and experiment. (After Okugawa et al. Reproduced under CC-BY license)³⁷⁾

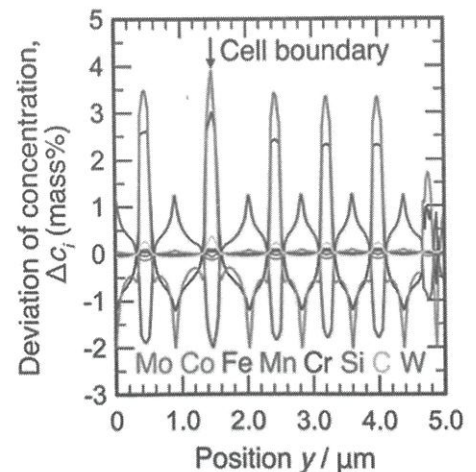


Fig. 11 Prediction of solute segregation by PF calculations. Deviation profile of solute concentration. (After Okugawa et al. Reproduced under CC-BY license)³⁷⁾

著な溶質濃度変化が予測された。この予測は、実験結果と良い一致を示しており、デジタルツインの有用性を示している。

さらに、このようなシミュレーション結果は、一般的に偏析のシミュレーションとして行われる Scheil 凝固シミュレーションに較べて、位置情報や組織の情報を含み、時間的な組成偏析の緩和の影響も反映した、より現実に近い溶質分布の情報を含んでいることから、このような溶質偏析がその後の熱処理における析出挙動を予測し、それに基づいて、PBF に特有の凝固条件で生じる溶質偏析による強度変化を考慮した、すなわち PBF 造形して用いることを前提とした、プロセス設計・合金設計において不可欠なものとなる。

6. プロセスモニタリング

溶融凝固における温度変化の実測法として、高速度赤外線カメラ³⁸⁾や二色法³⁹⁾による測定がある。二色法による温度解析は、黒体の輻射による光の強度は次式で表される。

$$I_b(\lambda, T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{k_B T}\right) - 1} \quad (1)$$

ここで、 h は Planck 定数、 c は光速、 k_B は Boltzmann 定数である。センサーが検出する波長での被測定物の放射率が既知であれば、その波長(λ)の輝度から次式により温度が推定できる。

$$\varepsilon_\lambda = \frac{I(\lambda, T)}{I_b(\lambda, T)} \quad (2)$$

放射率が不明であっても、材料からの放射輝度の波長依存性を示す曲線は、黒体からの放射のそれと相似形の曲線であることを利用して、2つの波長での強度の比から温度を推定する手法が、二色法である (Fig. 11)。可視光カメラは、光の三原色 (赤、緑、青) の波長の光の強度を記録する。これらの光の強度比を利用して、温度を推定できる。

ただし、各色の光強度を記録する画素は、特定の波長の光のみを検出するのではなく、特定の波長で最大の感度を示し、広い波長範囲にわたって感度を持つ。また、使用するレンズによって各波長の光透過率も異なるため、2波長の強度比と温度の関係を求めるにはキャリブレーションが必要である。

なお、これらの温度評価には、相転移にともなう放射率の変化やレンズなどの光の吸収率の波長依存性の影響を考慮した較正を要し、複数のシミュレーションと実験の比較で検証する必要がある。

その点に注意した計測と計算により物性値を導くことはデジタルツイン科学の重要な要素であり、リアルタイムでの現象予測にも有用である。

現時点では、計算に長時間を要しリアルタイム予測は困難であるがデータ同化やサロゲートモデルなどの AI 活用的高度化、量子コンピュータの開発による計算能力の向上により実現すると期待される。

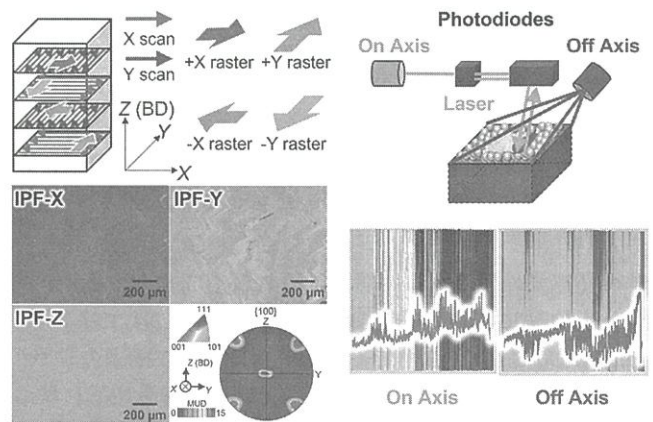


Fig. 12 Single crystallization by Laser PBF and its in-process monitoring by melt-pool monitoring system equipped with on-axis and off-axis photo diodes (PD). (After Liu et al., Reproduced under CC-BY licence)⁴⁰⁾

また、造形中の全時間インプロセスモニタリングの光学的手法として、長時間露光撮影による加熱部検出や、LB 照射部から発せられた光を、ハーフミラーを用いて、LB の光軸上にてフォトダイオード (PD) で検出したり、造形チャンバー上部に設置された PD で検出したして、それらの光の強度から LB 照射による溶融に伴う種々の現象を推定する試みも進めている。

Fig. 12 はその一例であり⁴⁰⁾、316L ステンレス鋼を Fig. 11 左上に示すように X 方向および Y 方向に同様の LB 走査によって、X 方向と Y 方向で異なる結晶方位に配向した結晶が得られた。このとき、Y 方向に走査した場合にのみ右下の光強度マップで示すように On-Axis と Off-Axis の PD で検出した光の強度が大きく異なった。

このようなデータと得られる組織との相関データを蓄積し、造形プロセス中に組織形成を推定することも可能となる。

7. 結論

本稿では、粉末床溶融結合 (PBF) を用いた付加製造 (AM) のデジタルツイン科学について紹介しその可能性を示した。数値シミュレーションとプロセスモニタリングを融合する DT は、高度なプロセス最適化や欠陥予測を可能にするだけでなく、材料特性の向上、さらには新材料の創成にも有用である。

具体的には、DEM による粉末層形成シミュレーション、CFD による溶融池挙動解析、PF 法による微細組織形成の予測は、PBF 特有の結晶成長挙動とその材料特性への影響、それらに基づく材料設計のプロセス設計の指針を示すのに有効であり、PBF プロセスのさらなる高度化と新材料創製の道を開くものと期待される。現時点では、シミュレーションは、長時間を要し、さらなる精度向上も要するが、今後、データ同化などのデータ科学手法の活用と逆問題解析の高速・高度化とリアルタイム計測技術の高度化により、適材

適所の組織制御の信頼性向上が実現すると期待される。

謝 辞

本研究の一部は、総合科学技術・イノベーション会議の SIP（戦略的イノベーション創造プログラム）「統合型材料開発システムによるマテリアル革命研究開発計画」（管理法人：国立研究開発法人科学技術振興機構）、JSPS 科研費 学術変革領域研究（A）「超温度場材料創成学：巨大ポテンシャル勾配による原子配列制御が拓くネオ 3D プリント」（JP21H05018, JP21H05193）および JST-CREST ナノ力学「カスタム力学機能制御学の構築 ～階層化異方性骨組織に学ぶ～」(JPMJCR2194) の支援を受けて行われた。

参 考 文 献

- 1) KOIZUMI LAB., Area of Materials Design and Proess Engineering (Koizumi Laboratory) web page, <http://www.mat.eng.osaka-u.ac.jp/msp3/>.
- 2) Y. Koizumi and M. Okugawa: “Digital Twin Science of Metal Powder Bed Fusion Additive Manufacturing: A Selective Review of Simulations for Integrated Computational Materials Engineering and Science”, *ISIJ Int.*, **62** (2022), 2183-2196.
- 3) T. Ishimoto, N. Morita, R. Ozasa, A. Matsugaki, O. Gokcekaya, S. Higashino, M. Tane, T. Mayama, K. Cho, H. Y. Yasuda, M. Okugawa, Y. Koizumi, M. Yoshiya, D. Egusa, T. Sasaki, E. Abe, H. Kimizuka, N. Ikeo and T. Nakano: “Superimpositional design of crystallographic textures and macroscopic shapes via metal additive manufacturing— Game-change in component design”, *Acta Mater.*, **286** (2025), 120709.
- 4) M. Elmersy, A. Sherif, A. Darwsih and A. E. Hassanien: “Digital Transformation and Emerging Technologies for Tackling COVID-19 Pandemic”, *Digital Transformation and Emerging Technologies for Tackling COVID-19 Pandemic*, in: A. E. Hassanien, A. Darwish (Eds.), *Digit. Transform. Emerg. Technol. Fight. COVID-19 Pandemic Innov. Approaches*, Springer International Publishing, Cham, (2021) 3-19.
- 5) F. Tao, H. Zhang, A. Liu and A. Y. C. Nee: “Digital Twin in Industry: State-of-the-Art”, *IEEE Trans. Ind. Informatics*, **15** (2019), 2405-2415.
- 6) G. L. Knapp, T. Mukherjee, J. S. Zuback, H.L. Wei, T. A. Palmer, A. De and T. DebRoy: “Building blocks for a digital twin of additive manufacturing”, *Acta Mater.*, **135** (2017), 390-399.
- 7) R. Rosen, J. Fischer and S. Boschert: “Next generation digital twin: An ecosystem for mechatronic systems?”, *IFAC PapersOnLine*, **52** (2019), 265-270.
- 8) M. Grieves: “Digital Twin: Manufacturing Excellence through Virtual Factory Replication” - A Whitepaper by Dr . Michael Grieves, White Pap., (2014) 1-7.
- 9) A. Rasheed, O. San and T. Kvamsdal: “Digital twin: Values, challenges and enablers from a modeling perspective”, *IEEE Access*, **8** (2020), 21980-22012.
- 10) O. Masmoudi, M. Jaoua, A. Jaoua and S. Yacout: “Data Preparation in Machine Learning for Condition-based Maintenance”, *J. Comput. Sci.*, **17** (2021), 525-538.
- 11) J. F. Olesen, H. R. Shaker: “Predictive maintenance for pump systems and thermal power plants: State-of-the-art review, trends and challenges”, *Sensors (Switzerland)*, **20** (2020), 2425.
- 12) Z. M. Çınar, A. A. Nuhu, Q. Zeeshan, O. Korhan, M. Asmael and B. Safaei: “Machine learning in predictive maintenance towards sustainable smart manufacturing in industry 4.0”, *Sustain.*, **12** (2020), 8211 (42 pages).
- 13) S. Arena, I. Roda and F. Chiacchio: “Integrating modelling of maintenance policies within a stochastic hybrid automaton framework of dynamic reliability”, *Appl. Sci.*, **11** (2021), 1-18.
- 14) H. Zhu: “Real-time prognostics of engineered systems under time varying external conditions based on the cox phm and varx hybrid approach”, *Sensors*, **21** (2021), 1-23.
- 15) T. DebRoy, T. Mukherjee, J. O. Milewski, J. W. Elmer, B. Ribic, J. J. Blecher and W. Zhang: “Scientific, technological and economic issues in metal printing and their solutions”, *Nat. Mater.*, **18** (2019), 1026-1032.
- 16) S. A. Khairallah, A. T. Anderson, A. Rubenchik and W. E. King: “Laser powder-bed fusion additive manufacturing: Physics of complex melt flow and formation mechanisms of pores, spatter, and denudation zones”, *Acta Mater.*, **108** (2016), 36-45.
- 17) W. Yan, J. Smith, W. Ge, F. Lin and W. K. Liu: “Multiscale modeling of electron beam and substrate interaction: a new heat source model”, *Comput. Mech.*, **56** (2015), 265-276.
- 18) Y. Lian, S. Lin, W. Yan, W. K. Liu, G. J. Wagner, A parallelized three-dimensional cellular automaton model for grain growth during additive manufacturing”, *Comput. Mech.*, **61** (2018), 543-558.
- 19) J. Kubo, Y. Koizumi, T. Ishimoto and T. Nakano: “Modified cellular automaton simulation of metal additive manufacturing”, *Mater. Trans.*, **62** (2021), 864-870.
- 20) P. W. Cleary and M. L. Sawley: “DEM modelling of industrial granular flows: 3D case studies and the effect of particle shape on hopper discharge”, *Appl. Math. Model.*, **26** (2002), 89-111.
- 21) H. Komen, M. Shigeta, M. Tanaka, M. Nakatani and Y. Abe: “Numerical simulation of slag forming process during submerged arc welding using DEM-ISPH hybrid method”, *Weld. World*, **62** (2018), 1323-1330.
- 22) M. Y. Shaheen, A. R. Thornton, S. Luding and T. Weinhart: “The influence of material and process parameters on powder spreading in additive manufacturing”, *Powder Technol.*, **383** (2021), 564-583.
- 23) M. Markl and C. Körner: “Powder layer deposition algorithm for additive manufacturing simulations”, *Powder Technol.*, **330** (2018), 125-136.
- 24) Y. Zhao, Y. Koizumi, K. Aoyagi, K. Yamanaka and A. Chiba: “Characterization of powder bed generation in electron beam additive manufacturing by discrete element method (DEM),” *Mater. Today Proc.*, **4** (2017), 11437-11440.
- 25) M. Okugawa, Y. Isono, Y. Koizumi and T. Nakano: “Raking process for Powder Bed Fusion of Ti-6Al-4V alloy Powder Analyzed by Discrete Element Method”, *Mater. Trans.*, **64** (2023), 37-43.
- 26) W. King, A. T. Anderson, R. M. Ferencz, N. E. Hodge, C. Kamath and S. A. Khairallah: “Overview of modelling and simulation of metal powder bed fusion process at Lawrence Livermore National

- Laboratory”, *Mater. Sci. Technol. (United Kingdom)*, **31** (2015), 957-968.
- 27) S. A. Khairallah, A. T. Anderson, A. Rubenchik and W. E. King: “Laser powder-bed fusion additive manufacturing: Physics of complex melt flow and formation mechanisms of pores, spatter, and denudation zones”, *Acta Mater.*, **108** (2016), 36-45.
- 28) R. Shi, S. A. Khairallah, T. T. Roehling, T. W. Heo and J. T. McKeown: “M.J. Matthews, Microstructural control in metal laser powder bed fusion additive manufacturing using laser beam shaping strategy”, *Acta Mater.*, **184** (2020), 284-305.
- 29) S. Mino, M. Okugawa, T. Nakano and Y. Koizumi: “Raking and Fusing Behaviors during Fabrication of Multiple-layers in Powder Bed Fusion: an Integrated Discrete Element and Computational thermal fluid Dynamics Study”, *J. Jpn. Soc. Powder Powder Metallurgy*, **72** (2025) S1465-S1469.
- 30) T. Ishimoto, K. Hagihara, K. Hisamoto, S. H. Sun and T. Nakano: “Crystallographic texture control of beta-type Ti-15Mo-5Zr-3Al alloy by selective laser melting for the development of novel implants with a biocompatible low Young’s modulus”, *Scr. Mater.*, **132** (2017), 34-38.
- 31) S. H. Sun, T. Ishimoto, K. Hagihara, Y. Tsutsumi, T. Hanawa and T. Nakano: “Excellent mechanical and corrosion properties of austenitic stainless steel with a unique crystallographic lamellar microstructure via selective laser melting”, *Scr. Mater.*, **159** (2019), 89-93.
- 32) K. Hagihara, T. Nakano, M. Suzuki, T. Ishimoto, Suyalatu and S. H. Sun: “Successful additive manufacturing of MoSi₂ including crystallographic texture and shape control”, *J. Alloys Compd.*, **696** (2017), 67-72.
- 33) M. Todai, T. Nakano, T. Liu, H. Y. Yasuda, K. Hagihara, K. Cho, M. Ueda and M. Takeyama: “Effect of building direction on the microstructure and tensile properties of Ti-48Al-2Cr-2Nb alloy additively manufactured by electron beam melting”, *Addit. Manuf.*, **13** (2017), 61-70.
- 34) J. D. Hunt: “Steady state columnar and equiaxed growth of dendrites and eutectic”, *Mater. Sci. Eng.*, **65** (1984), 75-83.
- 35) S. Bontha, N. W. Klingbeil, P. A. Kobryn and H. L. Fraser: “Effects of process variables and size-scale on solidification microstructure in beam-based fabrication of bulky 3D structures”, *Mater. Sci. Eng. A*, **513-514** (2009), 311-318.
- 36) X. Ding, Y. Koizumi, D. Wei and A. Chiba: “Effect of process parameters on melt pool geometry and microstructure development for electron beam melting of IN718: A systematic single bead analysis study”, *Addit. Manuf.*, **26** (2019), 215-226.
- 37) M. Okugawa, K. Saito, H. Yoshima, K. Sawaizumi, S. Nomoto, M. Watanabe, T. Nakano and Y. Koizumi: “Solute segregation in a rapidly solidified Hastelloy-X Ni-based superalloy during laser powder bed fusion investigated by phase-field simulations and computational thermal-fluid dynamics”, *Addit. Manuf.*, **84** (2024), 104079.
- 38) I. Zhimov, C. Protasov, D. Kotoban, A. V. Gusarov and T. Tarasova: “New Approach of True Temperature Restoration in Optical Diagnostics Using IR-Camera”, *J. Therm. Spray Technol.*, **26** (2017), 648-660.
- 39) T. Furumoto, K. Oishi, S. Abe, K. Tsubouchi, M. Yamaguchi and A. T. Clare: “Evaluating the thermal characteristics of laser powder bed fusion”, *J. Mater. Process. Technol.*, **299** (2022), 117384.
- 40) Y. Liu, K. Nose, M. Okugawa, Y. Koizumi and T. Nakano: “Fabrication and Process Monitoring of 316L Stainless Steel by Laser Powder Bed Fusion with μ -Helix Scanning Strategy and Narrow Scanning Line Intervals”, *Mater. Trans.*, **64** (2023), 1135-1142.; Translated into Japanese in *J. Japan Inst. Met.* **88** (2024) 190-197.

代表者メールアドレス

小泉雄一郎 ykoizumi@mat.eng.osaka-u.ac.jp