

COMSOL と LLM による 金属積層造形プロセスの自動解釈とモード抽出

高岸 洋一¹, 千葉 晶彦¹

1. 東北大学 未来科学技術共同研究センター

概要

代表的な金属積層造形である粉末床溶融結合法では、複雑形状部品を精緻に製造する技術として近年普及が進んでいる。欠陥や表面凹凸の少ない造形実現のためには、粉末床に形成されるメルトプールの形状や大きさ、近傍領域の温度分布の予測が重要となるが、これらは粉末材料の種類や特性、造形条件により大きく変化する。そのため、物理方程式に基づくシミュレーションによる検討が積極的に進められてきた。特にモードの数やメカニズムの抽出、それらの遷移領域の特定は、造形条件最適化の観点から極めて重要なタスクとなっている。本研究では、はじめに COMSOL® Multiphysics により Ti-6Al-4V サンプルを対象としたマクロ熱源モデルを構築し、Application Builder および COMSOL Batch を活用してさまざまな造形条件における温度、マランゴニ数、温度勾配、凝固速度分布を出力する。次に、各出力データに対して Large Language Model による自動解釈を行い、画像特徴量と埋め込みベクトルとの相関分析により、メルトプールのモード自動抽出を試みる。

キーワード: 金属積層造形, Powder Bed Fusion, Electron-Beam, Comsol batch, Large Language Model

はじめに

電子ビームやレーザーを熱源とした金属積層造形である粉末床溶融結合 (PBF) 法は、「金属 3D プリンタ」とも呼ばれ、金属粉末床を選択的に溶融・凝固させる精緻かつ効率的な造形技術として注目されている [1]。近年、PBF は自動車や航空宇宙分野への適用が進んでいるが、ボイドやクラック形成、表面の荒れなどによる造形品の品質安定化の課題があり、メカニズム解明や特性予測、造形条件最適化に関する研究が活発に進められている [2,3]。特に形成されるメルトプールのモードの数やメカニズムの推定、それらの遷移領域の特定は、造形条件最適化の観点から極めて重要な課題となっている [3]。

PBF プロセスは、粉末床の伝熱、溶融凝固にともなう相変化、ミクロ組織形成、表面張力に駆動されるメルトプール内の流動や表面不安定化などを伴う複合現象である。そのため、熱・流体・相変化・構造などのマルチフィジックス計算 [4-7] や、ナノスケールからマクロスケールまでマルチスケール計算が積極的に実施されてきた [8-10]。中でも、熱伝導方程式と相変化を考慮したマクロ熱源モデル [4] は、造形サンプル全体の温度分布やメルトプール評価を目的として広く採用されている。

一方で、このようなモデルは変数間の依存関係が複雑となりやすい。特にパラメトリック計算を実施する場合、大量のデータが出力されるため、結果の解釈や意味の抽出に多大な労力を要する問題が残る。

このような課題に対し、最近我々は軽量の 2 次元の伝熱・相変化・組織形成モデルによってパラメトリック計算を実行し、Large Language Model (LLM) を用いて大量の計算結果データを自動解釈する方法を提案した [7]。そこでは、各パラメータと物理的意味との対応関係の分析により、「現象の発見」や「モード検出」の可能性が示された。

本研究では、はじめに提案手法をベースとして Ti-6Al-4V サンプル造形を対象とした 3 次元マクロ熱源モデルを COMSOL® Multiphysics 上に構築し、COMSOL Batch を用いたパラメトリック計算を実行する。次に、計算結果データの次元圧縮と LLM による結果の自動解釈のデータセットを作成した上で、近傍点のランキングによる分析とモード抽出を試みる。

電子ビームによる積層造形プロセス

熱源として電子ビームを用いる PBF-EB は、通常真空下で造形が行われる。金属粉末床をスキージングにより平坦化し、予熱によって粉末床全体を加熱した後、電子ビーム照射および走査

により、造形形状に沿った選択的な熔融凝固を行う(図 1a, b 参照). その際、照射領域近傍では粉末が熔融してメルtpoolを形成するが、その温度分布、広がり・深さ(溶け込み)、形状などの特徴は凝固後の表面凹凸や欠陥の形成、マイクロ組織に大きく影響を与える. そのため、さまざまな材料や造形形状において、あらかじめメルtpoolや近傍(HAZ 部)の温度分布を予測し、ビーム電流や走査速度、ラインピッチ、フォーカスオフセットなど造形条件を最適化することが重要となる. 基礎的な造形試験やシミュレーションでは、ベンチマークとして図 1c に示すようなシンプルな形状が使用されることも多い.

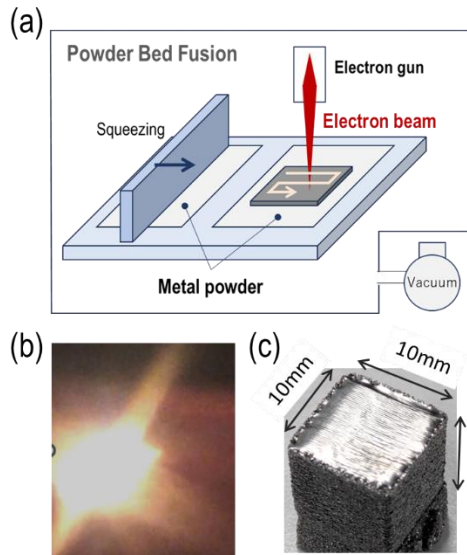


図 1. (a) 電子ビーム積層造形の模式図. (b) 造形中の光学画像. (c) ベンチマークのサンプル (Ti-6Al-4V).

計算方法

計算の全体フロー

計算のフロー概要を図 2 に示す. COMSOL® Multiphysics による 3 次元マクロ熱源モデルを用いて、出力されるサンプルの温度分布、凝固速度分布などの画像(2 次元データ)をそれぞれ機械学習により次元圧縮し、潜在空間(特徴量空間)上にマッピングする. 次に、LLM により各画像を自然言語の解釈テキストを生成し、それらのテキストを埋め込みベクトル化する(“意味空間”にマッピングする). 最後に、画像と現象説明テキストそれぞれのベクトルの相関分析を行うことで、現象のモード自動抽出や感度の高い特徴量特定を検討する.

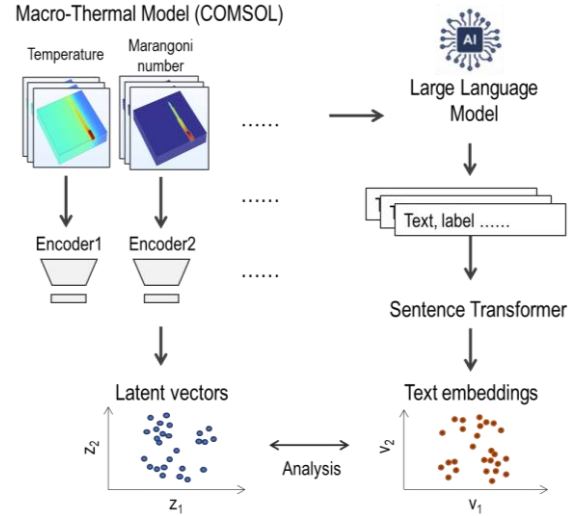


図 2. 本研究の計算の全体フロー.

マクロ熱源モデルの支配方程式

ジオメトリは直方体サンプルを想定して $5 \times 10 \times 1 \text{ mm}^3$ とし、上部 0.1 mm を粉末床領域として空隙率を割り当てた. 電子ビーム照射による発熱を模擬するため、Heat source を双方向ラスタスキャン (Y 方向に往復) により移動させた. メッシュはすべて 6 面体とし、接点数は約 1,200 とした. ジオメトリおよびメッシュ外観を図 3 に示した.

マクロ熱源モデルは、計算負荷の高いメルtpool内の流動の直接計算を避け、温度分布と相変化の計算により簡便かつ高速にメルtpool形成や各指標を予測する手法である. サンプルの温度場 T は、熱伝導方程式により計算した.

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(-K \nabla T) + Q_{EB} + Q_L \quad (1)$$

ただし、 ρ , C_p , K はそれぞれ密度、比熱、熱伝導率を表す. Q_{EB} は電子ビームによる入熱であり、熱源中心からの距離 r 、パワー P 、ビーム半径 r_0 、吸収効率 η を用いて、次のようなガウス関数として表す.

$$Q_{EB} = \frac{\eta P}{2\pi r_0^2} \exp\left(-\frac{r^2}{2r_0^2}\right) \quad (2)$$

Q_L は相変化による発熱/吸熱項を表すが、ここでは簡単のため等価比熱法により模擬した. すなわち、潜熱による比熱変化 C_{Lf} を

$$C_{Lf} = \frac{L}{T_L - T_s} \quad (3)$$

により計算した. ここで、 T_L , T_s , L はそれぞれ液相線温度、固相線温度、潜熱を表す. また、ジオ

メトリ上面および側面からは黒体仮定の輻射境界条件を適用した。

主な使用パラメータ一覧を表1にまとめた。熱物性は典型的な Ti-6Al-4V の値を採用した。造形条件としてビーム電流および走査速度を変えて、Application Builder および COMSOL Batch により計 297 水準のパラメトリック計算を実施した。なお、サンプル初期温度は予熱を想定して 400℃ とした。

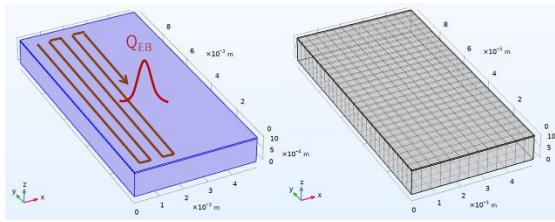


図 3. ジオメトリとメッシュ外観。

表 1. 使用パラメータ一覧。

パラメータ	値	参照
密度 ρ	4500 kg/m ³	[2]
比熱 C_p	7100 J/(kg*K)	[7]
熱伝導率 K	22 W/(m*K)	-
凝固潜熱 L	292 J/g	
初期空隙率	0.5	[2]
初期温度	400 °C	-
ビーム電流	6.7 – 13.4 mA	[2]
走査速度	500 – 1500 mm/s	[7]

マクロ熱源モデルの出力データと次元圧縮

造形中に形成されるメルトプールの形状、サイズ、表面凹凸、凝固組織を推定するため、溶融保持時間分布 t_{melt} 、代表時間におけるジオメトリ上面の温度分布 T 、マランゴニ数 Ma 、温度勾配 G 、凝固速度 R それぞれの分布データを出力した。

溶融保持時間 t_{melt} は、ある領域が溶融してから凝固するまでの時間を表すものであり、一般にこれが長いほど結晶粒は粗大化や偏析が発生しやすい。ここでは、液相線温度 T_L を上回っている時間を積算した。

$$t_{melt} = \int \tanh\left(\frac{aT}{T_L}\right) dt \quad (4)$$

により計算する。ここで、 a は比例定数である。マランゴニ数 Ma は、メルトプールにおけるマランゴニ対流(表面張力流)の強さを表す指標であり、局所的な温度勾配 ∇T を用いて

$$Ma = \frac{\left| \frac{\partial \sigma}{\partial T} \right| \nabla T \cdot L^2}{\mu \cdot \alpha} \quad (5)$$

により計算される。ここで、 σ は温度依存性を持った表面張力、 μ は動粘性係数、 α は熱拡散率、 L は代表長さである。凝固速度 R は、温度の時間変化 $\partial T / \partial t$ および温度勾配 G を用いて、

$$R = \frac{1}{G} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (6)$$

により求まる。ただし、 R は凝固時 ($\partial T / \partial t < 0$) のみ計算した。

さらに、出力された各データの特徴を抽出するため、2次元マップデータを次元圧縮する。ここでは、典型的な線形の圧縮手法である PCA (Principal Component Analysis) を使用した。

LLM による解釈テキストの生成

マクロ熱源モデルの出力データにおける意味的な特徴を抽出するため、代表時間における温度分布、マランゴニ数、温度勾配、凝固速度および溶融保持時間の分布データを LLM エージェントに与え、物理的な解釈テキストを生成した。ここでは、LLM としてマルチモーダル入力可能な Gemma-4-26B を採用し、プロンプトに各出力データの内容や着目すべきポイントをまとめ、API を用いてテキスト生成を自動化した。

温度分布に対するプロンプトの例を図4に示す。表現のゆらぎを抑えるため、基準条件の画像に対する差に着目するように指示した。

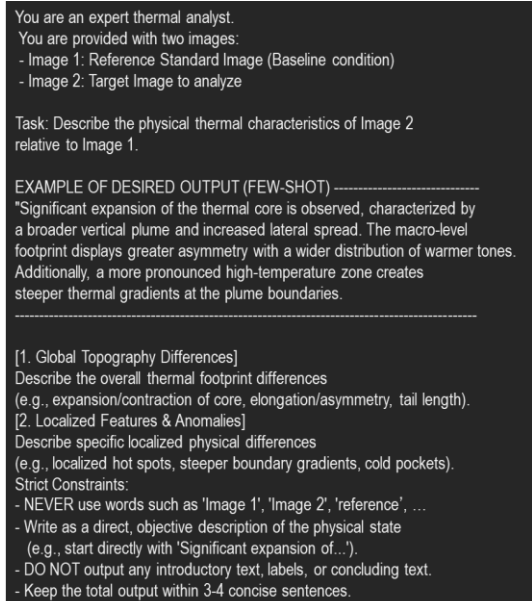


図 4. 温度分布に対するプロンプトの例。

計算結果

代表造形条件における計算結果例

代表的な造形条件 (ビーム電流 10mA, 走査速度 1000mm/s) における, 0.4s 後の温度分布 T およびメルトプール領域を図 5a, b にそれぞれ示した。熱源領域では 3000℃ 近い高温領域が形成されており, 後方に帯状の温度勾配が見られる。また, メルトプール形状(図 5b の赤色領域)を見ると, 走査方向に伸びて端部から連続的に溶融しているが, 深さ方向(Z 方向)には溶け込みが浅いことが分かる。図 5c に示すマランゴニ数 Ma はメルトプールの先端近傍で高く, 凝固後の表面凹凸形成が予測される。また, 液相線温度と固相線温度の間にある凝固速度 R と温度勾配 G をみると, いずれもメルトプール後方のエッジ部分に逆 U 字型の分布が形成されている。ただし, R は中央部で高いのに対し, G の値は比較的低い。これは, 凝固界面の不安定化を引き起こすほか, 柱軸晶から等軸晶への遷移が予測される。これら各出力データの傾向は, 電子ビーム積層造形の特徴と定性的に一致している[4]。

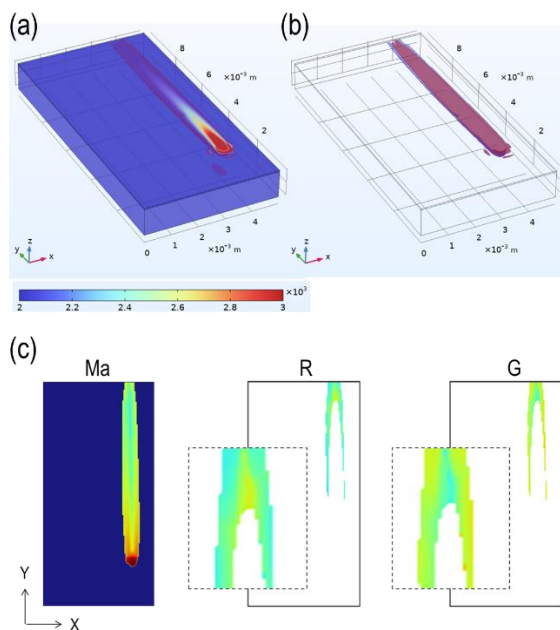


図 5. 0.4s 後の各出力データ. (a) 温度分布. (b) メルトプール形状. (c) マランゴニ数 Ma の分布. (d) 凝固速度 R の分布と中央の拡大図. (e) 温度勾配 G の分布と中央部の拡大図.

パラメトリック計算データの次元圧縮

計 297 水準のパラメトリック計算により出力された各データ(T , Ma , t_{melting} , R , G , 走査 90%完了時)について, PCA により次元圧縮を行った。図 6 は潜在空間(第 1 から第 3 主成分)上に各デ

ータをプロットしたものである。点の色はエネルギー密度を表しており, 明るいほどこの値が高いことを意味する。温度分布 T では, 低エネルギー密度状態において潜在空間上に広がりを持っており, 分布形状が多様であることを示している。一方, 高エネルギー密度領域では狭窄しており, 似た分布が形成されることが示唆される。マランゴニ数 Ma と溶融保持時間 t_{melting} は, いずれもライン状の軌跡を示しており, 分布が連続的かつ単調に変化していることを表している。一方, 温度勾配 G および凝固速度 R は, ライン状であるもののループに近い構造をとっている。これは, エネルギー密度以外のパラメータが大きく影響している可能性や, 分布が周期的である可能性を示唆している。

このように, いずれのプロットを見てもエネルギー密度に応じて連続的な変化を示しており, 明確なクラスタは見られない。

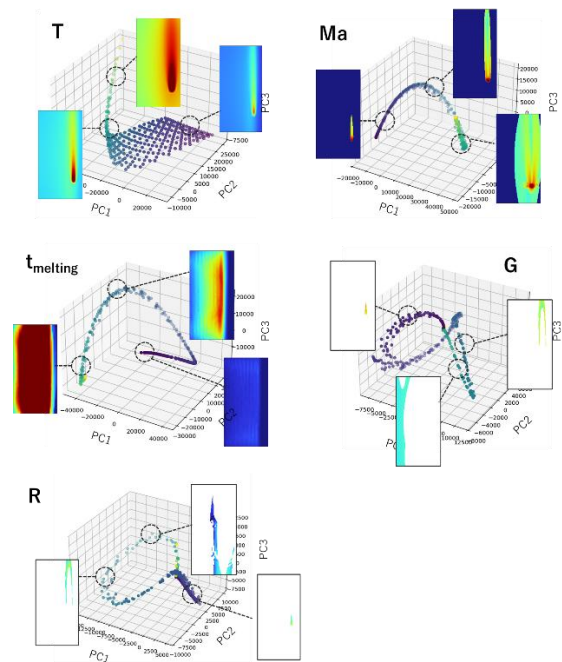


図 6. T , Ma , t_{melting} , R , G 各データにおける, それぞれの主成分空間 (潜在空間) 上のプロット。

解釈テキストの生成例

各出力データに対する自動解釈の例として, ビーム電流 6.7mA, 走査速度 500mm/s の条件における生成テキストの抜粋を図 7 に示した。この計算条件は比較的に入熱が大きいので, 温度分布に対しては高温領域の広がり, 高い温度勾配が形成されていることが指摘されている。また, 高 Ma 数領域が熱源先端部に存在すること, 高 t_{melting} 領域が広がっておりメルトプールの不安

定化を促進することなどが記載されている。これらは、凝固学的・結晶成長学的に妥当であると判断できる。

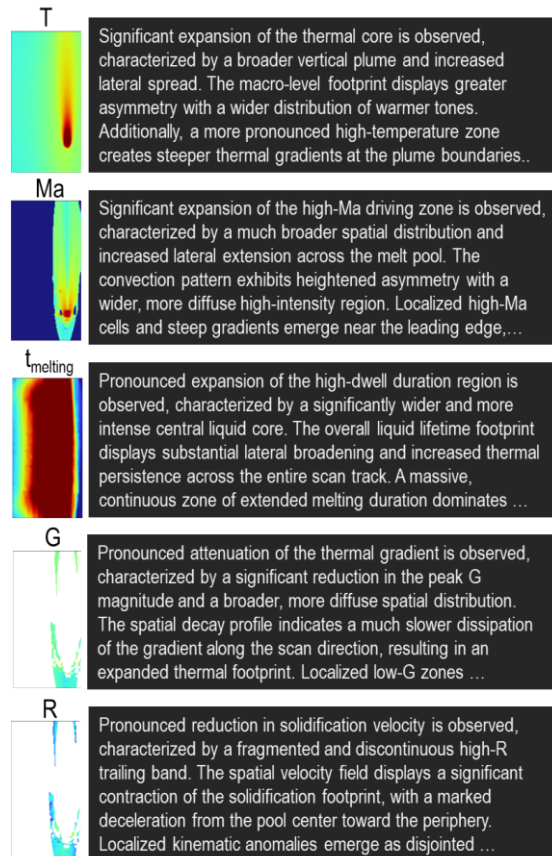


図 7. 各出力データに対する自動解釈の例。

パラメトリック計算の解釈テキスト生成

COMSOL®のパラメトリック計算により出力された各データ(T, Ma, t_{melting} , R, G)について、物理的な解釈テキストをそれぞれ生成し、Sentence Transformers (paraphrase-multilingual-MiniLM-L12-v2) により 384 次元の埋め込みベクトルへ変換した。図 8 はこれらをさらに PCA により次元圧縮し、3 次元プロットしたものである。なお、点の色はエネルギー密度を表している。T, Ma, t_{melting} , R において、明確なクラスタが形成されていることが分かる。また、出力データによってクラスタの個数が異なることも興味深い。これは、出力データを直接次元圧縮したプロット(図 6)とは大きく異なっており、物理的な意味におけるモードが抽出された可能性が示唆される。

次に、K-Means 法によって各出力データの埋め込みベクトルを分類し、各クラスをビーム電流 vs 走査速度の平面にプロットすることで、プロセスマップを作成した(図 9 参照)。また、

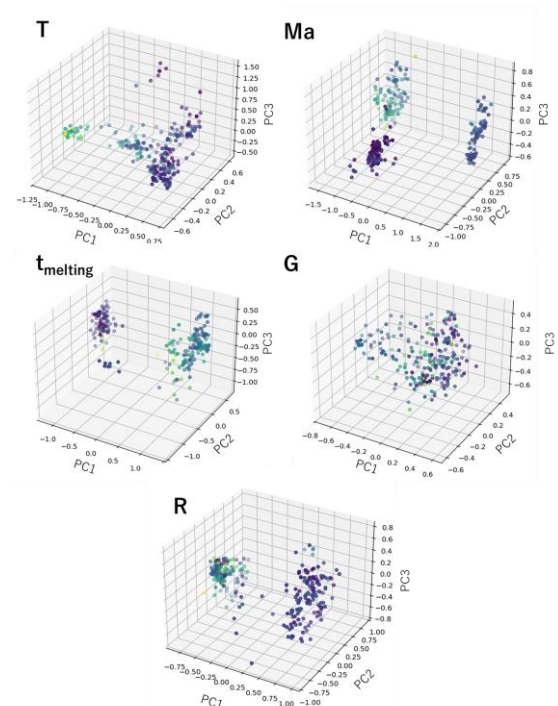


図 8. 解釈テキストの埋め込みベクトルの主成分空間(潜在空間)上プロット。

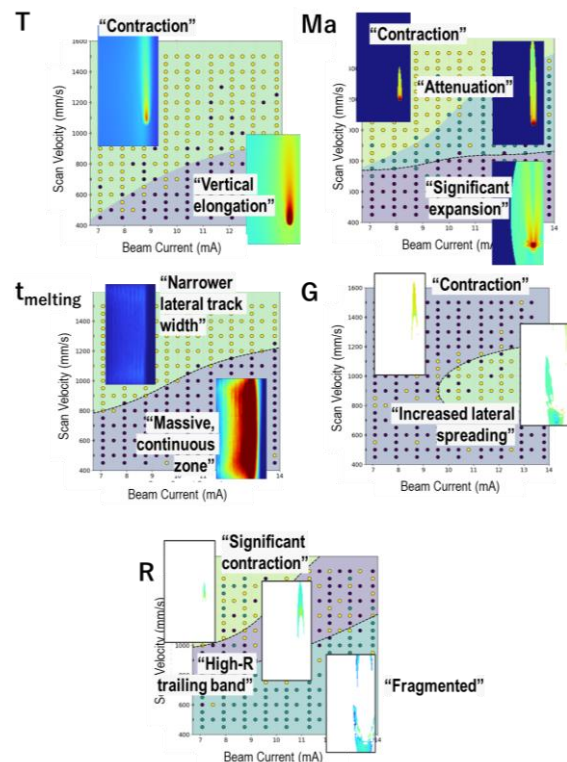


図 9. 各出力データの解釈テキストの埋め込みベクトルに基づくプロセスマップ。

各クラスターの代表的な出力データ(画像)とキーワードを合わせて記載した。なお、クラスタ数はエルボー法により決定した。T および t_{melting} では、概ねエネルギー密度($\propto$ 電流密度/走査速度)に応じて二分されていることが分かる。代表的なメルトプールのモードとして、比較的能量密度が低く熱伝導支配となる熱伝導モード、高エネルギー密度の際に深い溶け込みと蒸気反跳力により表面が大きくくぼむキーホールモードが知られており[11], これと良好に対応している。一方, Ma や G, R は形状や大きさ, 値によって3つに分類されており, 特に R では比較的低速条件であられる熱源前方および側面の高い凝固速度に着目している。これは, 熱源通過による再溶融・再凝固を引き起こす可能性があり, 注目すべきものと思われる。

潜在ベクトルと埋め込みベクトルの比較

PCA により抽出した潜在ベクトルと, 解釈テキストに基づく埋め込みベクトルを比較し, それぞれの空間における構造の違いを分析した。ここでは次の手順で評価した。潜在空間と埋め込み空間それぞれにおいて点間のユークリッド距離をランク付けし, 各点から近い点を順に並べたベクトル r を作成した。次に, 両空間同士でこれらの差 d を求め, 差の大きい点(造形条件ペア)を抽出した。これにより, 「潜在空間内では近いが, 意味空間(埋め込み)では遠い」ものを抽出した。点 i におけるランクの差 d_i は

$$d_i = R_{\text{emb},i} - R_{\text{latent},i} \quad (7)$$

である。ここで, $R_{\text{emb}}, R_{\text{latent}}$ はそれぞれ潜在ベクトルおよび埋め込みベクトルのランクを表す。なお, スピアマン順位相関係数は, いずれの出力データに対しても概ね 0.7 程度であり, 全体としての順位の相関がみられた。

図 10 に, t_{melting} と R において差 d の大きいペアを示した。溶融保持時間 t_{melting} では, 450 mm/s 条件ではほぼ全面で大きい値となっているが, 500 mm/s 条件では左端近傍でわずかに低下していることが分かる(図中の破線領域)。これは, この走査速度を閾値として t_{melting} に分布が発生し得ることを表している。また R のケースを見ると, 8.75 mA・1100 mm/s と 10 mA・1300 mm/s では両者のエネルギー密度はほぼ等しいが, 図中の破線で示すように後者の形状の対称性が崩れていることが確認される。

このように, 潜在ベクトルと埋め込みベクトルを比較することで, COMSOL®などの出力データだけでは検出しにくいわずかな変化を, 埋め込みベクトルと比較することで抽出できる

可能性が示された。ただし, 図 11 に R の例で示すように, 計算上の誤差やデータの補間に起因する, 物理的に意味のないペアも抽出される傾向がみられた。今後は, これらの効率的な選別が重要であると思われる。

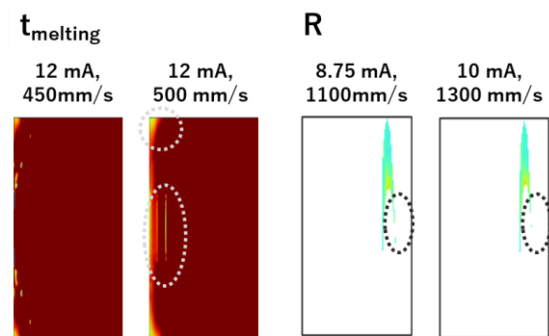


図 10. t_{melting} と Ma における d の大きいペアの例。

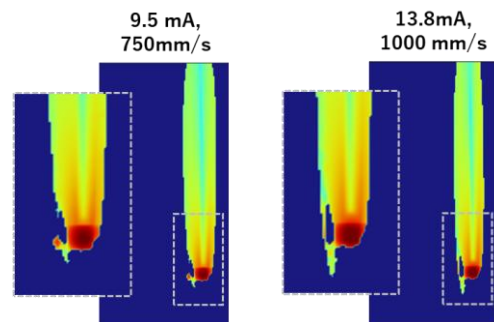


図 11. 物理的に意味のないと思われるペアの例。

結論

本研究では, Ti-6Al-4V サンプルの金属積層造形を対象としたマクロ熱源モデルを COMSOL® Multiphysics 上に構築した。また, COMSOL Batch を活用してさまざまな造形条件におけるパラメトリック計算を実行し, 各出力データに対して Large Language Model による自動解釈と特徴量と埋め込みベクトルとの相関分析を実施した。

画像に基づく潜在ベクトルは連続的に変化したのに対し, 解釈テキストの埋め込みベクトルはほとんどの場合で明確なクラスタを形成した。また, 埋め込みベクトルに基づくプロセスマップを作成した結果, 凝固速度分布では比較的低速条件であられる熱源前方および側面の高い凝固速度に着目したモードが検出された。これは, 熱源通過による再溶融・再凝固を引き起こす可能性があり, 注目すべきものと思われる。

さらに, 潜在ベクトルと埋め込みベクトルを比較した結果, COMSOL®などの出力データだ

けでは検出しにくいわずかな変化を、埋め込みベクトルとの比較により抽出できる可能性が示された。

参考文献

- [1] Z. Liu et al., “Alloy design for laser powder bed fusion additive manufacturing: a critical review”, *Int. J. Extrem. Manuf.* 6, 022002, 2024.
- [2] V. Sonkamble and N. Phafat, “A current review on electron beam assisted additive manufacturing technology: recent trends and advances in materials design”, *Discover Mechanical Engineering*, 2:1, 2023.
- [3] L-C Zhang et al., “Additive Manufacturing of Titanium Alloys by Electron Beam Melting: A Review”, *Adv. Eng. Mater.* 20, 1700842, 2018.
- [4] X. Ding et al., “Effect of process parameters on melt pool geometry and microstructure development for electron beam melting of IN718: A systematic single bead analysis study”, *Additive Manufacturing* 26, 215, 2019.
- [5] K. Leung et al., “COMSOL Heat Transfer Simulation for Reliability Estimation of Additive Manufacturing Process”, *COMSOL Conference, Boston*, 2016.
- [6] H. J. Willy, “Modelling Thermal Capillary Effects and Flow in the Molten Pool during Selective Laser Melting”, *the Proceedings of the 2017 COMSOL Conference in Singapore*.
- [7] Y. Takagishi et al., *Advances in Additive Manufacturing with Powder Metallurgy 2026*, in press.
- [8] L. Soares et al., “A review of multi-scale modeling strategies for metal additive manufacturing with emphasis on computational cost and time efficiency”, *Journal of Materials Research and Technology*, 41 5768, 2026.
- [9] J. Zhang et al., “A Multi-Scale Multi-Physics Modeling Framework of Laser Powder Bed Fusion Additive Manufacturing Process”, *Metal Powder Report*, 73, 151, 2018.
- [10] L. Shi et al., “Multi-Scale Numerical Modeling and Experimental Study of Molten Pool Dynamics and Solidification During the Additive Manufacturing of Inconel 718 Superalloy”, *METALLURGICAL AND MATERIALS TRANSACTIONS B*, 56, 5773, 2025.

- [11] M. Dal et al., “Powder Consideration For Additive Manufacturing Simulation”, *the Proceedings of the 2020 COMSOL Conference*.

謝辞

この成果の一部は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の助成事業 (JPNP24005) の結果得られたものです。