

令和 6 年度 防衛装備庁
安全保障技術研究推進制度

研究成果報告書

3D積層造形プロセスの マルチフィジックスシミュレーション 技術

令和 7 年 5 月

国立研究開発法人 物質・材料研究機構

本報告書は、防衛装備庁の安全保障技術研究推進制度による委託業務として、国立研究開発法人 物質・材料研究機構が令和4年度から令和6年度にかけて実施した「3D積層造形プロセスのマルチフィジックスシミュレーション技術」の成果を取りまとめたものです。

0. 研究背景

3D積層造形プロセスは、ジェットエンジン部材等の製造技術として利用が広まっており、特に、従来技術では不可能な複雑形状を造形できることから、軽量かつ高い冷却効率を有する優れたタービンプレードの実現が期待されている。現在、最も熱負荷のかかる部位には精密鑄造によるNi基超合金単結晶材が用いられており、形状だけでなく、3D造形による単結晶組織実現が大きな挑戦となっている。

3D造形により複雑形状を造形する場合、部位毎に異なる熱伝導特性により、同じプロセス条件であっても、温度分布が変わり冷却速度や温度勾配が変化することで、結晶粒径や凝固偏析、析出状態など組織が変化する。これに伴い、力学特性や、プロセス時の残留応力場も変化してしまうという特徴がある。したがって、一つのパーツであっても部位毎に造形条件を変化させることが単結晶組織制御には必須となる。無限の組み合わせがあることから、実験による試行錯誤だけで、最適条件を見出すことは不可能である。このため、まず、造形条件から部位毎の温度場を予測し、それに基づいて組織および特性、造形可否を予測する技術を確立することが必要である。

1. 委託業務の目的

本研究の最終目標は、造形部材の形状を考慮した、レーザ照射による温度場や凝固組織、組織に基づく応力-ひずみ特性、部材全体の応力場・ひずみ場予測技術を確立し、これら予測技術を連成し活用することで、部位形状に応じたプロセス条件を調整し、Ni基合金の単結晶組織を有するモデル形状材の実現を目指すことである。特に従来の取り組みで大きな制約となっていた、要素数の多い大きな計算モデルでの予測を、大型計算機を用いた並列化により可能とすることを重要な達成目標と考えている。このために、下記のような要素技術の開発、高度化を行う。

- (1) パウダーベッドの形成シミュレーション技術
- (2) 流動を考慮したレーザ照射による熔融凝固挙動、温度分布予測技術
- (3) 凝固時に形成される結晶組織、析出相の予測技術
- (4) 組織特徴量に基づいた応力-ひずみ曲線の予測技術
- (5) 部材全体のマクロな温度分布、残留応力分布・ひずみ分布の予測技術
- (6) 解析技術を活用し能動的な温度場制御を行い、単結晶組織を有するモデル形状材を実現

2. 研究開始時に設定した研究目標の達成度

各要素技術について、目標とした数値シミュレーション技術を開発することができた。流体解析とマルチフェーズフィールド法の連成による組織予測では目標とする結晶粒径の予測誤差±25%をおおよそ実現することができた。また、応力ひずみ予測では降伏応力で誤差10%未満を実現し、マクロ造形体のひずみ予測では誤差50%未満を達成することが出来た。さらに単結晶基材上での配向制御では、プロセス条件により単結晶状組織を有する組織を形成することに成功した。

3. 委託業務における研究の方法及び成果

(1) パウダーベッドの形成シミュレーション技術

本研究開発で対象とするパウダーベッド型レーザ 3D 積層造形プロセスでは、金属粉末を平坦に敷き詰め（パウダーベッド）、3D モデルの断面形状に対応する領域内にレーザを走査させることで熔融凝固させ、これを繰り返すことで造形を行う。このパウダーベッドの状態が熔融凝固後の欠陥状態へ影響を与えることから、パウダーベッド形成過程を離散要素(DEM)法によりシミュレートする技術について開発を進めてきた。

開発モデルは、大型計算機(NIMS の所有するスーパーコンピュータ ASAHI)上で DEM 解析を並列計算により実施することを可能とした。これにより、解析で取り扱う粒子数を初年度に開発したモデルでの 1,000 個から 50,000 個へと大幅に拡大し、より現実に近い現象として解析を実施することが可能となった。図 1 には初年度開発モデルを左側、最終モデルを右側に示す。扱う粒

子数を 50 倍に増加させただけでなく、実際の造形装置の仕組みを取り入れ、粉末充填層が上昇することで、粉末を供給する機構とした。初期モデルでは粉末が重力落下のみで供給されており、初期状態で粒子質量の影響が出やすい状況にあった。このため、最終モデルの方がより実際のパウダーベッド形成過程を適切に再現できていると考えられる。扱う粒子数は 50 倍となったが、大型計算機での 48~96 コア並列により 1 条件当たりの計算時間は約 2 日に抑えることができ、計算時間の増加量は 2 倍未満に抑えることが出来た。

構築したモデルを用いて、原料粉末粒度分布のパウダーベッド形成へ与える影響について解析を行った。粒度分布は図 2 に示す 5 通り(平均粒径: 24、28、32、36、40 μm 、標準偏差 4)について解析を行った。ばね定数: $0.5 \times 10^5 \text{ N/m}$ 、反発係数: 0.4、摩擦係数: 0.3 とし、各条件で 5 回計算を行い充填率の平均を計算した。コートブレードは剛体、厚さ 0.15 mm の板状とした。得られたパウダーベッドの予測結果例について俯瞰図および中央断面図を、平均粒径 24 μm (左列) および 40 μm (右列) の場合について図 3 に示す。また、平均粒径と充填率の相関について、図 4 に示す。粒径が小さくなるほど、充填率が高くなることが明確に示された。1 層厚さ (1 層毎の

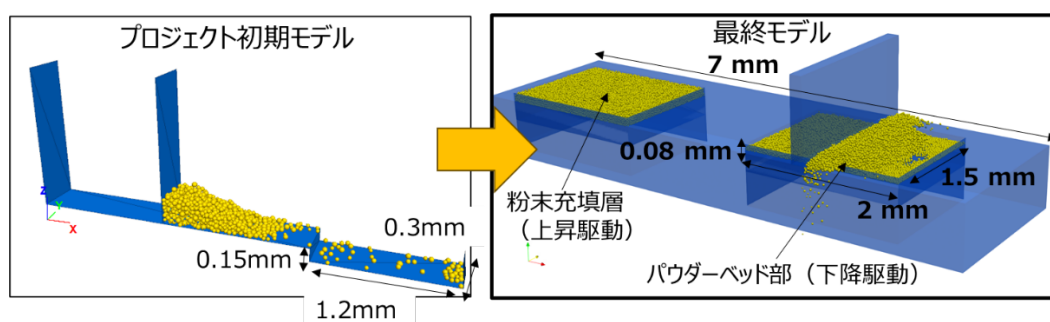


図 1.開発したパウダーベッド形成モデル: (左) 初期モデル (2022 年度開発)、(右) 最終モデル。

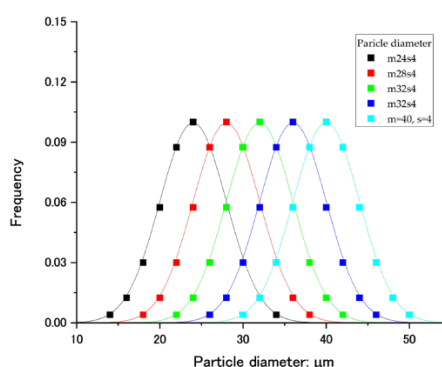


図 2. 6 通りの異なる粒度分布(異なる平均粒径 5 条件、バイモーダル分布 1 条件)。

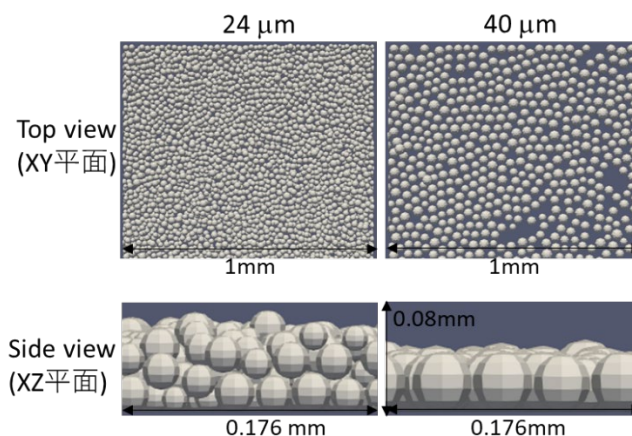


図 3. パウダーベッドの計算結果例: (左列) 平均粒径 24 μm 、(右列) 平均粒径 40 μm 。

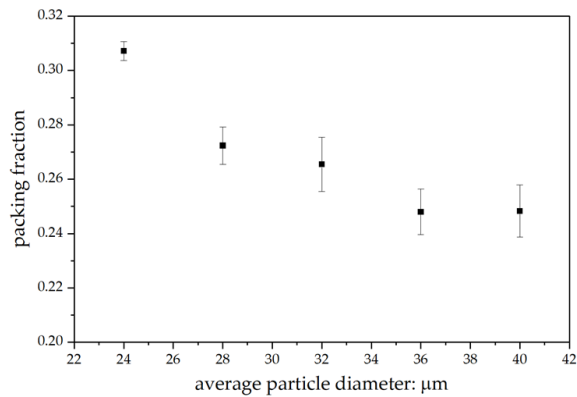


図 4. 平均粒径と充填率の相関

パウダーベッドステージの下降量) を $80\ \mu\text{m}$ としたモデルであるが、粉末が細かいほど均質に充填しやすいことに起因している。一方、粒径が大きくなると図 3 右の xy 平面図で明らかなように、不均質な領域がしうじやすく疎な充填になる傾向が認められた。また、非常に興味深い点として、図 3 の xz 平面図で示されるように細かい粉末の方が、実際の 1 層辺りのパウダーベッド層厚みが厚くなる傾向があることが分かった。このことは、装置の設定値として 1 層厚さを同じにしていたとしても、実際のパウダーベッド厚さは粉末粒度分布により異なることを示唆しており、その結果、レーザ照射により形成される溶融プール形状も影響を受ける可能性が示されている。実際の実験においてパウダーベッド厚さを測定することは容易では無いため、計算から得られた重要な発見であると言える。

次にコータブレードの形状の影響について分析した結果を示す。ブレードの先端形状はパウダーベッドの状態に大きな影響を及ぼすものと考えられた。そこで、図 5 に示す 5 通りのブレード形状について DEM 解析を実施し、形成されるパウダーベッド充填率への影響を調査した。粒度分布として、実際の Ni 基合金 (Hastelloy X) 商用粉末の測定データを模擬したデータを適用し、ばね定数他については前述の解析と同じ値を用いた。図 5 に解析結果の俯瞰図を、図 6 に充填率の値について示す。底部を面取りした 4 つのタイプよりも、底面が円弧型の方がより密なパウダ

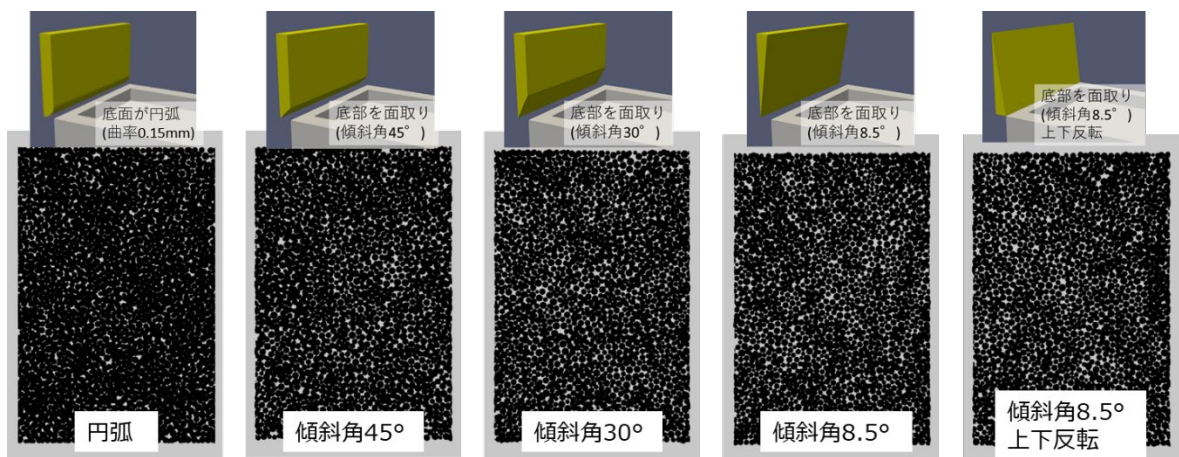


図 5. 異なる 5 通りのコータブレード形状モデルと、異なるブレード形状に対し、形成されたパウダーベッド俯瞰図 (xy 平面) の比較。

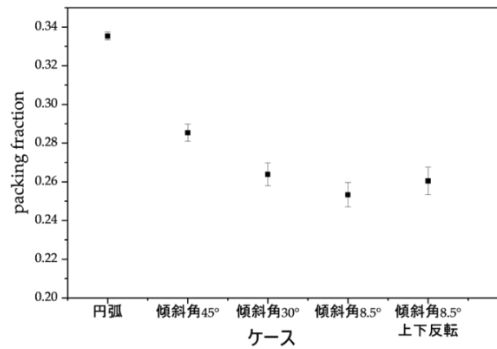


図6. ブレード形状と充填率の比較

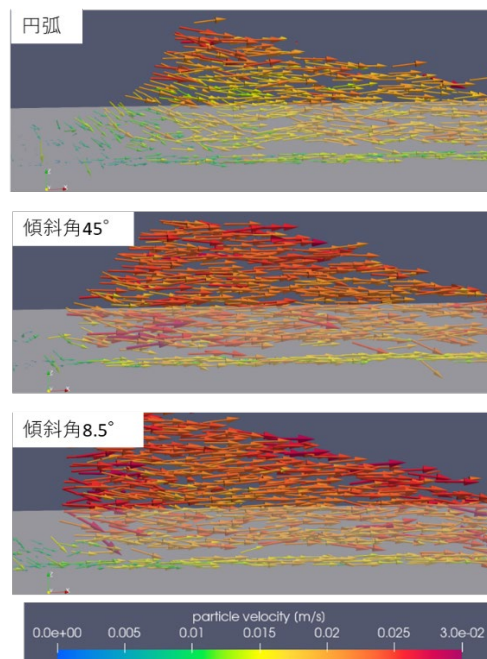


図7. 時間 $t=0.52$ 秒における粒子群の移動速度とその方向分布

ーベッドを形成することが明らかになった。また面取り型では、傾斜角度が大きくなるほど充填率が高くなった。図7にはブレードの水平移動開始後、時間 $t=0.52$ 秒時点での、ブレード先端における粒子群の移動速度とその方向分布を、円弧型、面取り型（45度）、面取り型（8.5度）について示している。ブレードは左から右へ移動している。円弧型では円弧に沿って放射状に粒子群が押し出され、 z 方向（図中縦方向）への粒子運動を拘束しつつ、ブレードが移動する。この拘束圧を受けつつ、粉末層全体がせん断変形しており、移動中の粒子配置が大きく変化している。このため、既に充填した粉末層の隙間を埋めるように粒子が移動し、高密度化が生じたものと考えられる。一方で、面取り型では、既に充填された粉末とその上部が一体となって x 方向に水平移動しており、移動中の粒子配置の変化があまり認められない。従来、あまり学術的な検討がなされてこなかったブレード形状の影響について、円弧状ブレードを適用することで、より充填率が高いパウダーベッドを形成することができ、造形体中の欠陥抑制につながることを示唆された。

さらに、実際の粉末粒子には短距離(接触状態)、および長距離(非接触状態)に応じて、多様な付着力が作用する。そこで、付着力を組み込んだDEM解析モデルの開発に取り組んだ。ここでは、弾性接触（JKR）モデルと回転抵抗モデルを導入し、前者のモデルにおける凝集エネルギー密度 k と後者のモデルの転がり摩擦係数 μ について、別途ベイズ最適化による最適パラメータの探索を行った。ハステロイX原料粉末の圧密試験で得られた間隙比と、DEM計算で得られた間隙比との誤差が最小となるように k 、 μ 値の探索を行った。その結果、 $k=47500 \text{ J/m}^3$ 、 $\mu=0.5$ が得られた。さらに検討を行った結果、ベイズ最適化によって推定された値は、大きな外力負荷が働く圧密試験に比べ低圧下の現象であるパウダーベッド形成過程を表現するには、凝集エネルギー密度

の寄与が過大であることが明らかとなった（図8a）。そこで、 k の値の影響について調査した結果、図8bcで見られるように、より低い k 値を適用することで実際の疎密を有するパウダーベッドを再現することが可能となることが明らかとなった。今後、積層造形装置のパウダーベッド形成機構を模擬した試験装置を開発することで、より精密な最適化が可能であることが示唆された。

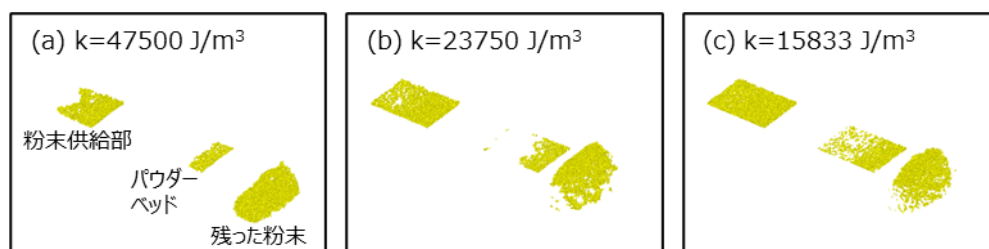


図8 付着力を導入したDEMモデルによるパウダーベッド予測結果：
(a) $k=47500 \text{ J/m}^3$ 、(b) $k=23750 \text{ J/m}^3$ 、(c) $k=15833 \text{ J/m}^3$ 。

(2) 流動を考慮したレーザ照射による熔融凝固挙動、温度分布予測技術

パウダーベッドに対して、レーザを直線的にスキャンするシングルトラック試験での、熔融凝固解析モデルを、流体解析を用いて構築した。さらに、この解析を大型計算機において実行可能とすることで、より大きなモデルを細かい時間ステップと空間メッシュサイズで実施することを可能とした。フリーの流体解析プラットフォームである **OpenFOAM8** をベースとした解析モデルであり、支配方程式は熱伝導方程式とナビエーストックス方程式、固体、液体、気体の三相変化を考慮した混相流解析である。また、レーザ照射に伴う蒸発反力やレーザスポット内のエネルギー分布、レーザによる多重反射、表面張力の温度依存性など、レーザ照射に伴う様々な物理モデルが適用されている。レーザ径は $80 \mu\text{m}$ 、ガウシアン型のエネルギー分布を持つレーザとなっており、温度場の境界条件として、天井面で室温一定、他の五つの面は断熱境界を適用し、流体解析の境界条件には、天井面で大気圧、他5面は **Slip** 条件を用いた。材料物性には、Ni 合金の値を適用し、可能な限り温度依存性のあるデータを用いた。空間メッシュサイズは基本的に $5 \mu\text{m}$ とし、レーザ照射部近傍は部分的に $2.5 \mu\text{m}$ とより細かくした。解析モデルサイズは、 $1.5 \times 0.3 \times 0.4 \text{ (mm}^3\text{)}$ とした。パウダーベッドは、DEM 解析で得られた計算結果をそのまま入力モデルとして用い、基材上に載せることで全体モデルを構築した。

図9に、レーザ出力300 W、走査速度 500 mm/s の場合の時間変化に対する計算結果を連続画像で示す。レーザは左端部近傍で照射開始され、照射開始と共に右方向へと移動している。図中上部に白い球状の凹凸が存在しているが、この領域がパウダーベッド層である。また図中のカラーおよび矢印は、速度および速度ベクトルを表している。このレーザ条件では、レーザの多重反射によりキーホールが形成され、粉末層厚さの約4.5倍下方までレーザが深く潜り込んでいる。キーホール直上では、レーザ照射により蒸発した金属蒸気の排出により、上方へ向かって大きなガスの流れが生じていることも分かる。また、キーホール先端での熔融プール形状の不安定化により、先端が分裂し、ガス欠陥が形成される過程をシミュレートすることにも成功している。図10は Zhaoらが **Science** 誌にて発表した、シンクロトロンXを用いたレーザ熔融挙動のその場観察結果である[1]。キーホール先端からのガス欠陥形成が観察されており、我々のシミュレーションが実現現象を適切に再現できていることを示している。また、図11には、3つの異なるレーザ条件（レーザ出力、走査速度）= $(300\text{W}, 500\text{mm/s})$ 、 $(600\text{W}, 1000\text{mm/s})$ 、 $(900\text{W}, 1500\text{mm/s})$ の場合について、温度場および熔融挙動の違いを比較したものである。黄色い線が液相線に対応しており、その内側では完全に液相となっている。この3つのレーザ条件はエネルギー密度（ $\equiv$ レーザ出力と走査速度の比）としては同じであるが、走査速度が増加していくにつれ熔融プールは走査方向に長く伸びている。このため、生成したガス欠陥が移動できる領域が広く、 $(900\text{W}, 1500\text{mm/s})$ の条件では浮力や対流によって欠陥が基材表面側へと移動している。一方で、 $(300\text{W}, 500\text{mm/s})$ の条件では、多くのガス欠陥はキーホール先端深さで凝固し固定されている。積層造形では、図に示す厚さ程度のパウダーベッドを1層ずつ積み、レーザ走査を繰り返す。このため、300Wの条

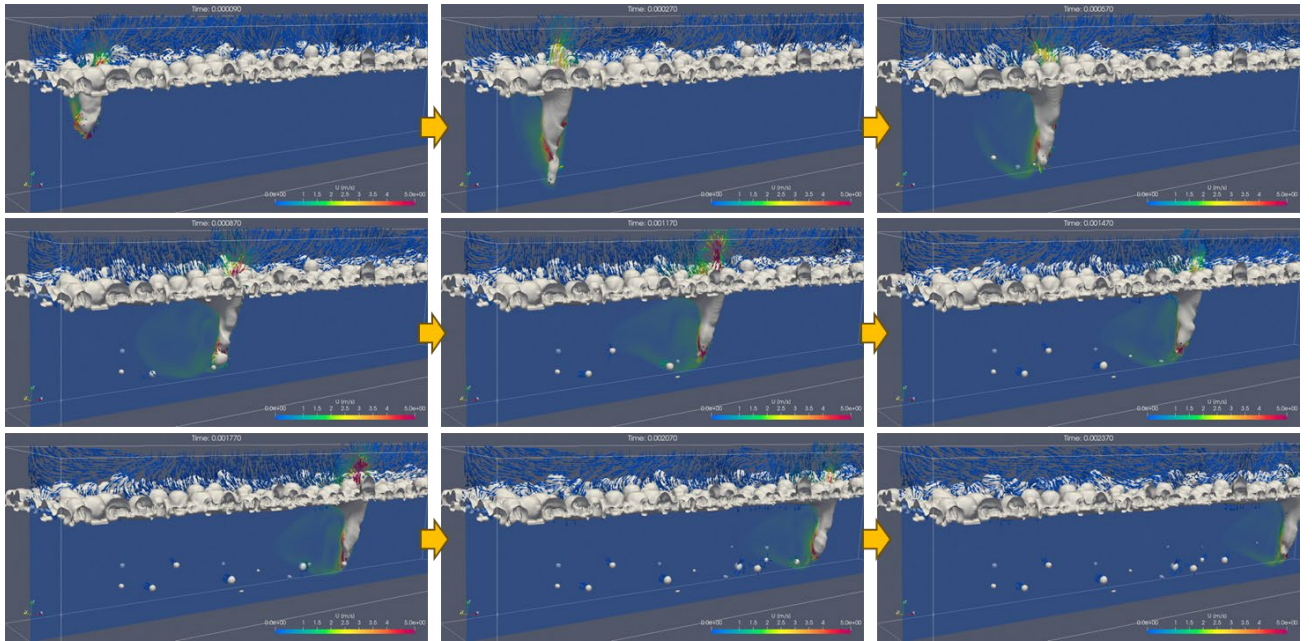


図9. レーザ出力300 W、走査速度 500 mm/sでのレーザ照射流体解析結果

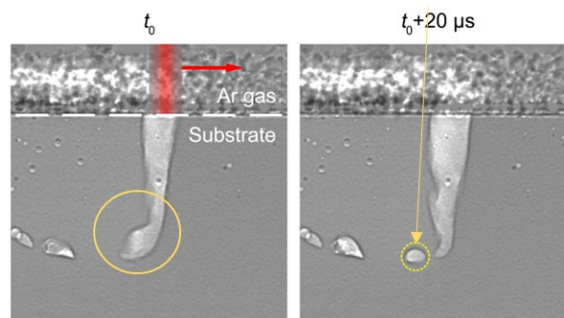


図10. 参考文献データ：シンクロトンXでのレーザ照射下での欠陥形成過程のその場観察[1].

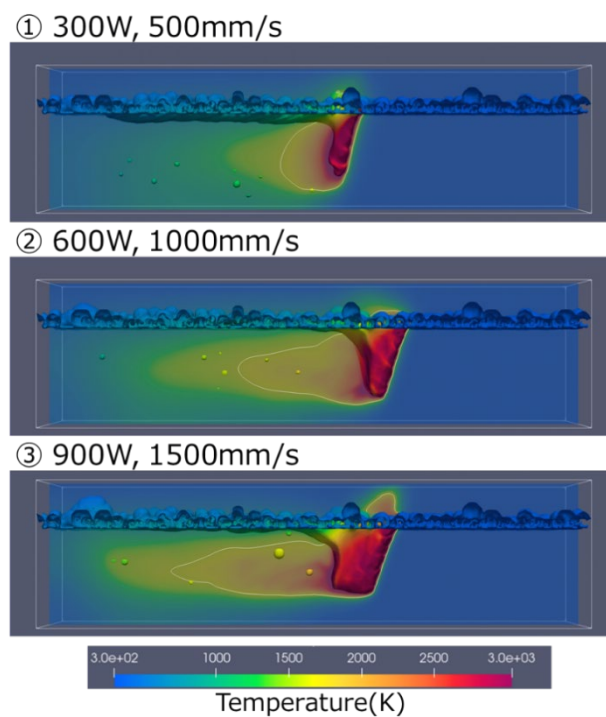


図11. 異なるレーザ条件での熔融挙動の変化

件では、ガス欠陥位置が深く次層造形時に、欠陥がそのまま残存する可能性が高いが、900Wの場合、欠陥位置が表面近傍へと移動しており、次層造形時に再熔融させられることで消失する可能性が高い。これまでこのような欠陥形成のダイナミクスから、欠陥密度の変化についての議論は殆どなされておらず、非常に興味深い知見を得ることが出来た。

前項のDEM解析結果により得られた、異なる平均粒度分布に対するパウダーベッド予測結果について、次の手順で熔融凝固解析を実施し、粒度分布が熔融凝固挙動へ与える影響について調査した。レーザ出力は300W、走査速度：1000mm/sとし、鉛直下向きのレーザをx方向に900 μm 移動させる解析を行った。境界条件は先の解析と同様とした。同じ粒度分布について実施した5回のDEM解析結果について、充填率が最も平均値に近い粒子配置結果を、その粒度分布の代表例とした。その例に対し、図12示すように、パウダーベッドをXY平面でY方向に5分割し、5回別々に流体解析を実施した。図13に異なる平均粒度に対する熔融凝固解析結果をまとめている。ここでは、レーザスキャンにより生じた熔融プールの幅(W)と深さ(D)の平均値を求め、平均粒度に対してプロットしている。WとDの定義は図13右図に示す通りである。熔融プール幅は、粒径との相関がほとんど認められず、概ねスポット径に対応した80 μm 程度の値であった。一方で、熔融池深さは粒径が大きくなるほどやや深くなる傾向が認められた。これは図3でも示したように平均粒度が大きくなるにつれて、1層辺りの実質厚さが薄くなるためであると考えられる。パウダーベッドが薄くなることで、より大きなレーザエネルギーが基材側へ到達し、より深い熔融プールの形成につながっている。

また、ここまでは広く利用されているガウシアンタイプのエネルギー分布を有するレーザを対象とした解析を実施したが、本プロジェクトではより浅く広い熔融プールを構築できるフラットトップタイプのレーザ熱源による組織形成予測にも取り組んでいる。図14に模式図を示す。そこで、フラットトップ (FT) タイプの熱源に対する熔融凝固挙動の予測を行った。解析では、レーザスポット径80、120、160 μm で、熱源内ではほぼ均一なエネルギー分布を仮定したFTタイプの入熱を与え、レーザ出力300W、スキャン速度 500 mm/sとして解析を実施した。図15に解析結果を示

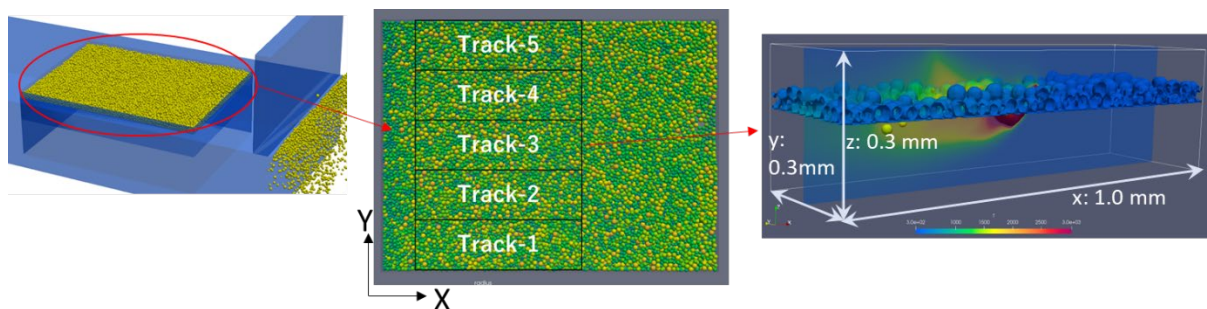


図12. DEM解析により得られたパウダーベッド予測結果を流体解析へ適用するフロー。

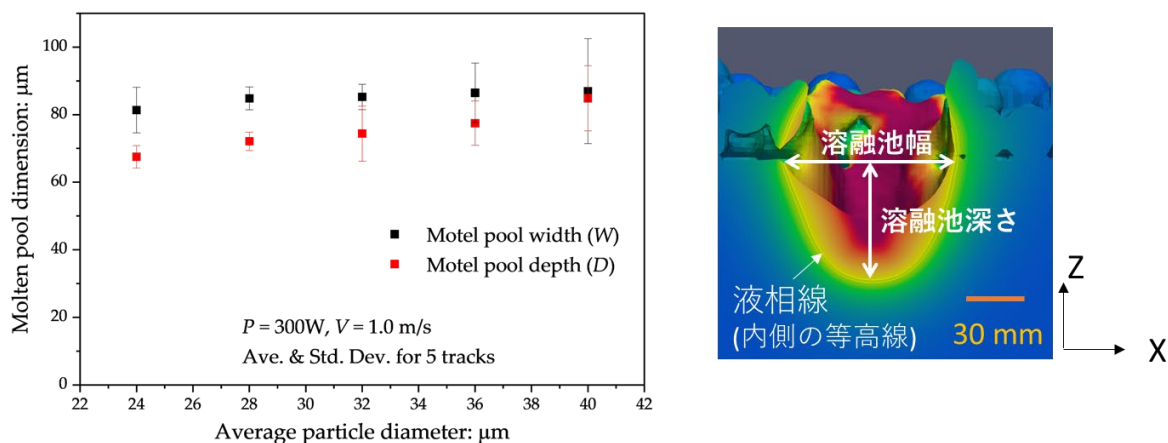


図13. 異なる平均粒度を有するパウダーベッドに対する熔融凝固解析結果：粉末平均粒径と熔融プールの幅(W)と深さ(D)の相関。

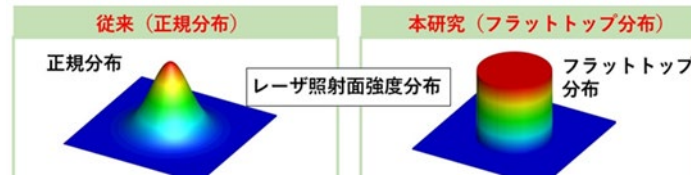


図14 レーザ照射面強度分布：（左）ガウシアンタイプ、（右）フラットトップタイプ。

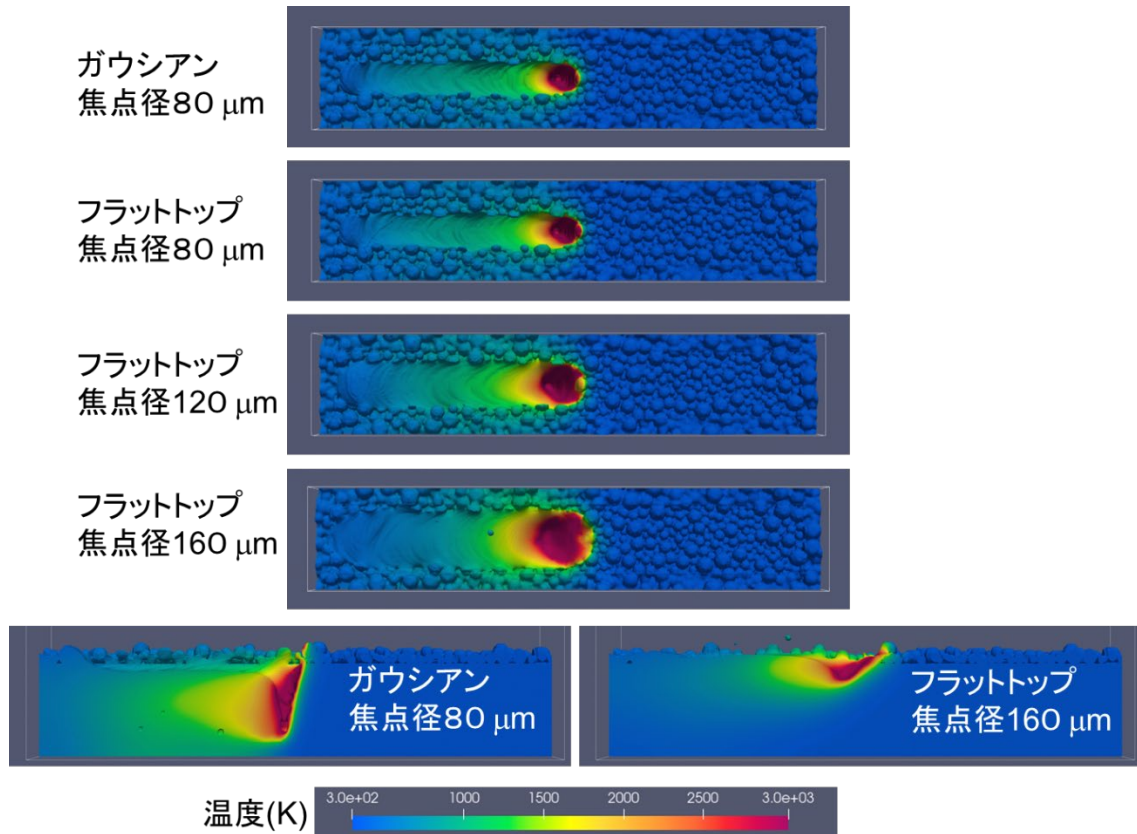


図15. ガウシアンレーザとフラットトップレーザでの溶融凝固挙動の比較。

す。図には、同じレーザ出力とスキャン速度で、レーザ径 $80\mu\text{m}$ のガウシアンレーザの場合も比較として示している。色の変化は温度分布に対応している。図から明らかなようにFTタイプの熱源を用いる場合についても、パウダーベッドに対する流体解析を実施することが可能となった。俯瞰図(xy面)では、レーザ径の変化以外にはあまり明瞭な違いが認められなかった。一方で、図15下のxz断面では、両者での溶融プール形状の劇的な違いが認められた。予想された通り、FTレーザでは浅い溶融プールが形成されるに留まり、同じレーザ出力でありながら、ガウシアンレーザと比較しその最大深さは約1/4程度となっていた。このことは、FTレーザを用いることで、全く異なる欠陥形成や組織形成が生じることを示唆しており、レーザ光のエネルギー分布特性を制御することでも、造形材料の組織制御や特性制御が可能であることが明らかとなった。

様々な解析パラメータが内在しており、実際に観察される溶融プールサイズ等の予測を精度良く行うためには、実験で得られたデータとの比較と各パラメータの最適化が必要となる。様々なレーザ出力と走査速度に対して、シングルトラック試験を行った。実験条件を図16にまとめる。基材としてHastelloy X板材を用い、粉末層を1層分敷いた状態で、レーザ照射を行った。スキャン方向に対する垂直断面組織を観察し、溶融プール形状の評価を行った。図17にレーザ出力 $P(W)=(100, 180, 300, 500, 700)$ 、レーザ走査速度 $v=900\text{ mm/s}$ の場合の、断面観察組織を示す。レーザ出力が増加するにつれ、溶融深さが顕著に増加していくことが認められる。図13右に示したように溶融池幅 W および溶融深さ D を測定しデータの蓄積を行った。図18に W 、 D の値

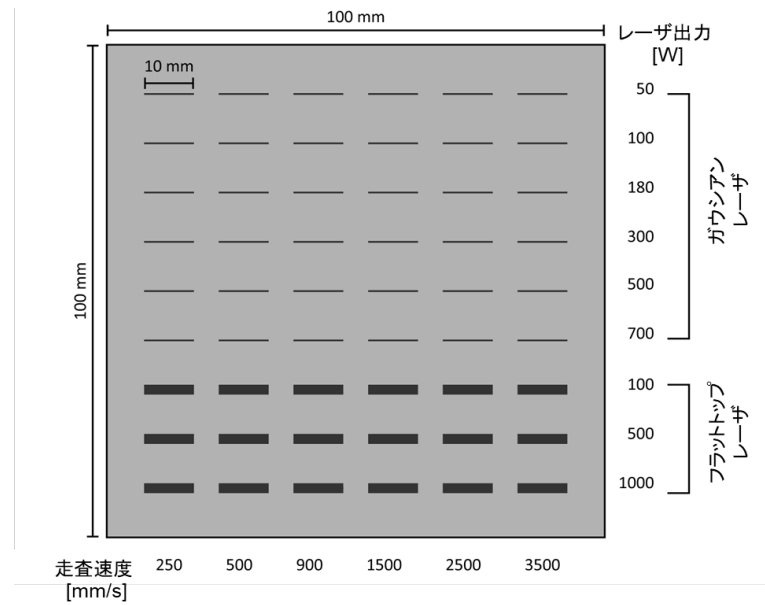


図16. シングルトラック実験条件

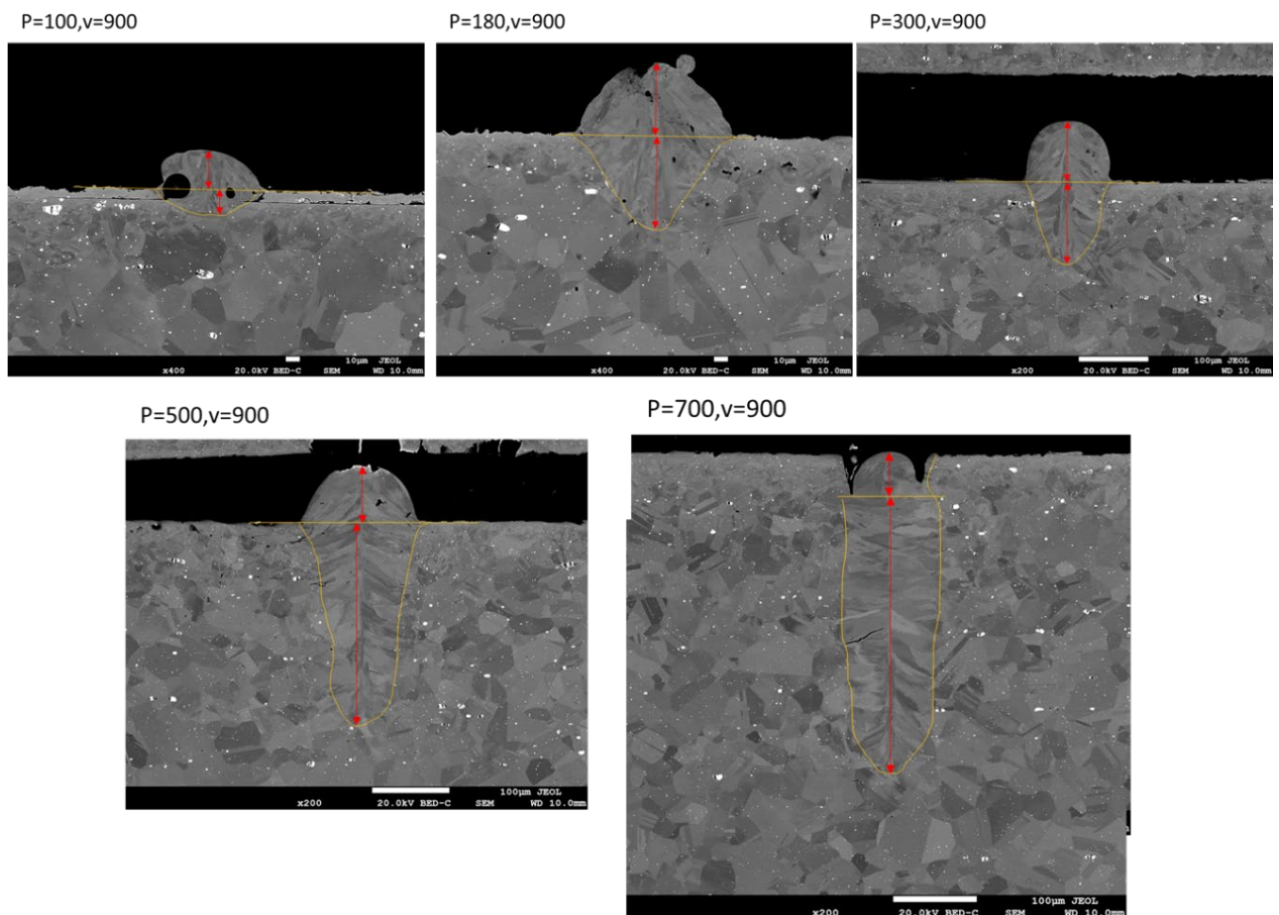


図17. シングルトラック試験の断面観察像：レーザ出力 P (W)=(100, 180, 300, 500, 700)、レーザ走査速度 $v=900$ mm/s.

をレーザ出力に対して、黒線でプロットしている。また、同図には流体解析において、様々な反射率モデルおよび反射係数を適用して得られた予測結果を示している。反射率モデルには、固定値、Fresnel モデル、および Hagan-Ruben モデルを用いた。溶融深さ D に関しては、反射率は固定値として 0.4 とした場合に、実験結果と良い一致が認められた。一方で、溶融池幅については、いずれのモデルも実験値に比べて小さく予測しており、またその際は非常に大きなものであった。そこで、実際のレーザ照射部近傍の温度場を高速カメラと二色温度法により評価し、流体解析による温度場予測結果との比較を行った。図 19 に、溶融プール先端を原点として、レーザスキャン方向逆向きの原点からの距離に対する温度の変化を示す。橙色の丸印が実験によるモニタリングデータであり、黒、赤、青の実線は流体解析による予測結果を表している。図から明らかのように、モニタリングデータと比べて、解析による予測では最大温度部後方の温度低下を大きく、実験データでは液相線を超えた温度域が 1mm 以上も存在するのに対し、0.1mm 程度しか存在していない。このことから、実際の現象では温度が高く溶融池が幅方向にも広がる時間があるのに対し、計算では温度を低く予測しておりすぐに凝固が生じ、溶融池が狭くなっていることが分かる。この要因として、レーザ照射による溶融部では金属の蒸気が発生しており、この発生した蒸気による Vapor plume 生じ、放熱が抑制されたことが考えられる。そこで、この Vapor plume の効果を表す追加熱源モデルを新たに開発した。溶融プール上方にガウス分布を有する移動熱源を仮定するものであり、その半径 R_{vp} についてはフィッティングパラメータとすることで、実験データの再現を試みた。図 20 に結果を示す。追加熱源の半径 R_{vp} を $200\mu\text{m}$ とすると、実験で得られた溶融プール幅と良い一致が得られることが明らかとなり、課題であった溶融プール形状の再現が可能となった。

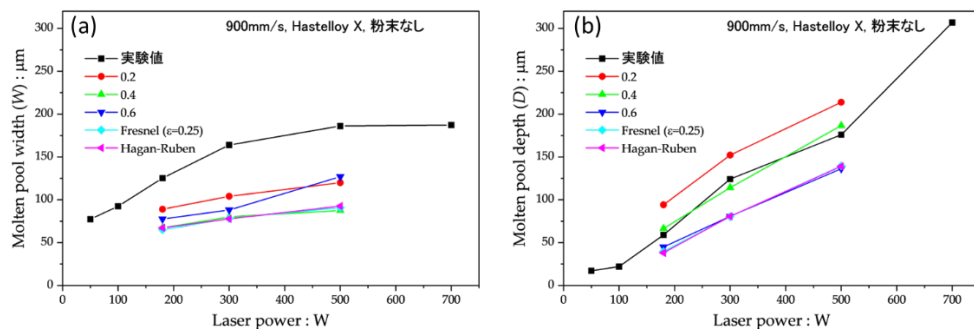


図 18. レーザ出力と溶融池幅と深さの相関。

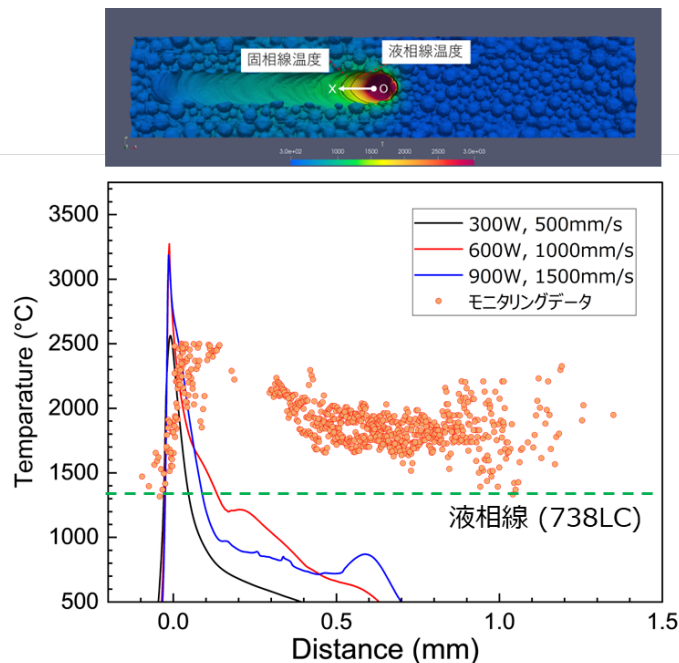


図 19. 溶融プール先端からの距離に対する温度変化：
橙丸印が実験データ、黒、赤、青線が流体解析による予測結果を表す。

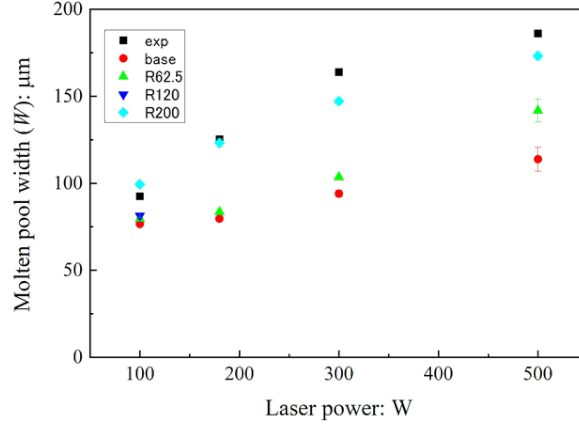


図 20. 追加熱源モデルによる溶融池幅の予測結果：

黒■印は実験値、赤丸は追加熱源無し、他のシンボルは異なる R_{vp} 値 (μm) に対する予測結果。

(3) 凝固時に形成される結晶組織、 γ' 相の析出予測技術

レーザスキャンによる溶融凝固過程に形成される結晶流組織の予測を可能とするために、格子ボルツマン法による流動解析とマルチフェーズフィールド法を連成させた、新しい組織予測技術を開発した。以下に開発した計算手法についてまとめる。

まず、系は雰囲気ガスの気相、溶融プールの液相、そして基板と金属粉床の固相の3相系であるため、各相間の界面の捕捉、特に気液間の自由表面の追跡が必要である。そこで、本研究では保存型Allen-Cahn方程式 (CAC) を導入した。気液間では次のように表現される。

$$\text{Sh} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (u_\alpha \phi) = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left\{ M_\phi \left[1 - \frac{4}{|\nabla \phi|} \frac{4\phi(1-\phi)}{w} \right] \frac{\partial \phi}{\partial x_\alpha} \right\}. \quad (1)$$

ここで、 ϕ は界面における気相と液相の存在割合を示し、 $0 \leq \phi \leq 1$ である。この微分方程式を直接差分法等で解くと多大な計算時間を有するため、本研究では格子ボルツマン法の一つである改良Lattice Kineticスキーム (MLKS) にて計算する。これは、次式で表現される。

$$\phi(\mathbf{x}, t + \Delta t) = \sum_{i=1}^N \{ f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta t, t) + A E_i [\phi(\mathbf{x}, t) - \phi(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta t, t)] \}, \quad (2)$$

ここで、 A は緩和係数、 f_i^{eq} は平衡分布関数であり次式で与えられる。

$$f_i^{\text{eq}} = E_i \phi (1 + 3 \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}) + 3 E_i \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{n} M_\phi \frac{4\phi(1-\phi)}{w}, \quad (3)$$

式(*34)における拡散係数 M_ϕ と緩和係数 A の間には次の関係がある。

$$M_\phi = \frac{1}{6} (1 - A) \Delta x. \quad (4)$$

しかし、系は3相で形成されるため、式(*34)を多相系に拡張する必要がある。これは、次式のマルチフェーズCAC方程式 (MP-CAC) で与えられている。

$$\text{Sh} \frac{\partial \phi_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (u_\alpha \phi_i) = M_\phi \left\langle \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left\{ 1 - \frac{1}{|\nabla \phi_i|} \frac{4\phi_i(1-\phi_i)}{w} \right\} \frac{\partial \phi_i}{\partial x_\alpha} - \frac{\phi_i^2}{\sum_{k=1}^N \phi_k^2} \sum_{j=1}^{N_p} \left[\frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left\{ 1 - \frac{1}{|\nabla \phi_j|} \frac{4\phi_j(1-\phi_j)}{w} \right\} \frac{\partial \phi_j}{\partial x_\alpha} \right] \right\rangle. \quad (5)$$

ここで、

$$\sum_{i=1}^{N_p} \phi_i = 1, \quad 0 \leq \phi_i \leq 1. \quad (6)$$

であり、 N_p は系における相の数（3）である。これをMLKSで表現すると、次式のように導出された。

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi_i(\mathbf{x}, t + \Delta t) = \sum_{j=1}^N \{ f_j^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_j \Delta t, t) + AE_j [\phi_i(\mathbf{x}, t) - \phi_i(\mathbf{x} - \mathbf{c}_j \Delta t, t)] \} \\ - \frac{\phi_i^2}{\sum_{k=1}^{N_p} \phi_k^2} \sum_{j=1}^{N_p} \{ \xi_k^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_k \Delta t, t) + AE_k [\phi_j(\mathbf{x}, t) - \phi_j(\mathbf{x} - \mathbf{c}_k \Delta t, t)] \} - \phi_j(\mathbf{x}, t) \}, \\ f_j^{\text{eq}} = E_j \phi_i (1 + 3\mathbf{c}_j \cdot \mathbf{u}) + 3E_j \mathbf{c}_j \cdot \mathbf{n} M_\phi \frac{4\phi_i(1-\phi_i)}{W}, \\ \xi_k^{\text{eq}} = E_k \phi_j + 3E_k \mathbf{c}_k \cdot \mathbf{n} M_\phi \frac{4\phi_j(1-\phi_j)}{W}, \quad i = \text{Liquid, Gas, Solid}. \end{array} \right. \quad (7)$$

式(7)の検証として、図21に示すような、密度の異なる液相間界面に置いたガス球体の界面エネルギーの違いによる平衡形を比較した。

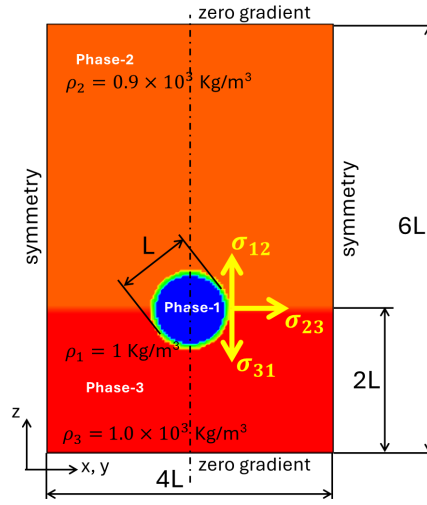


図 21. 液相間のガス球モデル

ここで、界面エネルギー σ_{31} と σ_{23} は1 N/m. とし、一方、 σ_{12} は0.3 N/m（ケース1）、1.0 N/m（ケース2） and 1.5 N/m（ケース3）とした。計算結果を図22に示す。 σ_{12} の違いによるガス球の形状の差が示されていることが確認された。

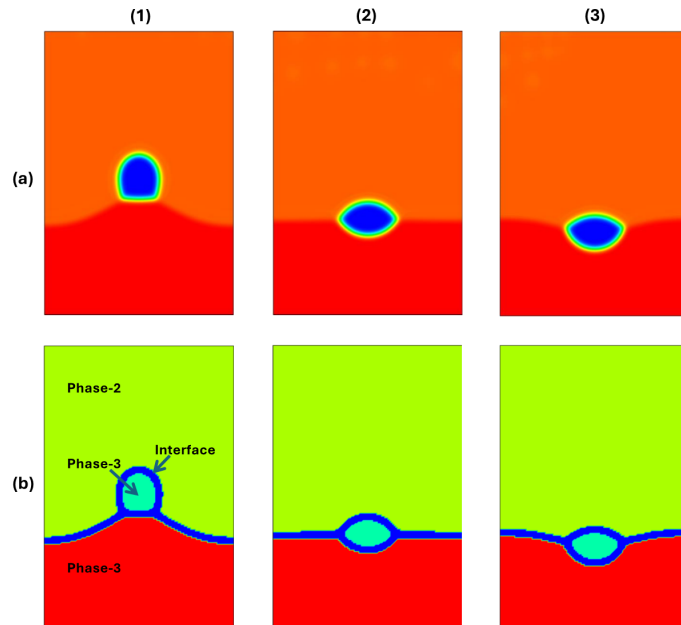


図22. 界面エネルギー σ_{12} の違いによるガス球形状の違い、(1) ケース1, (2) ケース2、(3) ケース3

同様に気液の流れに対してMLKSを適用することで、式(*40)との良好な連成が得られる。MLKSによる流れの圧力 $p(\mathbf{x}, t)$ は次式の繰り返し式で収束計算される。

$$p(\mathbf{x}, t + \Delta t) = p(\mathbf{x}, t) + \frac{\omega(\mathbf{x}, t)}{3} \sum_{i=1}^{15} [\Delta P_i + g_i^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t)], \quad (8)$$

ここで、 g_i^{eq} は平衡分布関数であり、次式で定義される。

$$g_i^{\text{eq}} = E_i \left[3\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u} + \frac{9}{2}(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2}\mathbf{u}^2 \right], \quad (9)$$

式(8)中の ΔP_i は次式で与える。

$$\Delta P_i = \frac{3}{2} E_i \left[\frac{1}{\rho(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta t, t)} + \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t)} \right] [p(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x) - p(\mathbf{x})], \quad (10)$$

また、 ω は加速緩和係数であり、

$$\omega(\mathbf{x}, t) = \frac{\rho(\mathbf{x}, t) - \rho_G}{\rho_L - \rho_G} (\omega_{\max} - \rho_G) + \rho_G, \quad \rho_G \leq \omega_{\max} \leq \rho_L. \quad (11)$$

で与える。密度は、 $\rho = \phi(\rho_G - \rho_L) + \rho_L$ で線形補間する。ここで ϕ は界面での気液の存在割合を示し、 $0 \leq \phi \leq 1$ である。本計算では、全て3次元で実施しており、表1に示すMLKSの粒子速度 $\mathbf{c}_i$ と重み E_i に対するD3Q15モデルを適用した。

表1 D3Q15モデル

i	$\mathbf{c}_i$	E_i
1	(0,0,0)	$\frac{2}{9}$
2, 3, 4, 5, 6, 7	($\pm 1, 0, 0$), ($0, \pm 1, 0$), ($0, 0, \pm 1$)	$\frac{1}{9}$
8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15	($\pm 1, \pm 1, \pm 1$)	$\frac{1}{72}$

式(8)にテーラー展開を代入して、総和を実施すると、空間密度が変化する場合の圧力ポアソン方程式が得られる。すなわち式(*1)は非圧縮性ナビエーストックス方程式の圧力方程式と等価である。

MLKSにおける流速 $\mathbf{u}$ は、次式で与えられる。

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t + \Delta t) = \sum_{i=1}^{15} \mathbf{c}_i \{ \Delta P_i(\mathbf{x}, t + \Delta t) + g_i^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t) + 3A_u E_i c_{i\beta} [u_\beta(\mathbf{x}, t) - u_\beta(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t)] + 3A_u E_i c_{i\beta} V_\beta(\mathbf{x}, t) \} + \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t)} \mathbf{F}_{\text{SV}} \Delta x + \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t)} \mathbf{F}_{\text{rc1}} \Delta x + \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t)} \mathbf{F}_{\text{buoy}} \Delta x, \quad (12)$$

ここで、 A_u は緩和係数であり、粘性係数 μ と次の関係がある。

$$\mu = \frac{1}{6} \rho (1 - A_u) \Delta x, \quad (13)$$

粘性係数は、 $\mu = \phi(\mu_G - \mu_L) + \mu_L$ と補間する。式(12)に空間方向と時間方向それぞれテーラー展開を代入して、総和を計算するとナビエーストックス方程式が得られるのであるが、

$$V_\beta = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \mu}{\partial x_\beta} \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right) \Delta x. \quad (14)$$

を入れることで、粘性項が適切に表現できる。式(12)中の $\mathbf{F}_{\text{SV}}$ と $\mathbf{F}_{\text{rc1}}$ は、それぞれ気液間の界面

張力、レーザービームによる金属蒸気圧力による力の項である。 $\mathbf{F}_{SV}$ は次式で与える。

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{F}_{SV} = \sigma_{GL} \cdot \chi \cdot \frac{\nabla \rho(\mathbf{x}, t)}{\rho_L - \rho_G} \cdot \frac{\rho(\mathbf{x}, t)}{(\rho_L + \rho_G)/2} + \frac{d\sigma_{GL}}{dT} [\nabla T - (\mathbf{n} \cdot \nabla T) \mathbf{n}] \cdot \frac{|\nabla \rho(\mathbf{x}, t)|}{\rho_L - \rho_G} \cdot \frac{\rho(\mathbf{x}, t)}{(\rho_L + \rho_G)/2}, \\ \mathbf{F}_{rc1} = p_{rc1} \cdot \frac{\nabla \rho(\mathbf{x}, t)}{\rho_L - \rho_G} \cdot \frac{\rho(\mathbf{x}, t)}{(\rho_L + \rho_G)/2}, \end{array} \right. \quad (15)$$

ここで、 $\mathbf{n}$ は界面単位法線ベクトル、 χ は曲率で、それぞれ、

$$\mathbf{n} := \frac{\nabla \rho(\mathbf{x}, t)}{|\nabla \rho(\mathbf{x}, t)|}, \quad (16)$$

$$\chi = -\nabla \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}, t). \quad (17)$$

と表現される。界面エネルギーにはマランゴニ効果（温度依存性）を考慮する。また、金属蒸気力 $\mathbf{F}_{rc1}$ の圧力 p_{rc1} には、Anisimovモデルを適用する。

$$p_{prc} = \frac{1+\beta_R}{2} p_0 \cdot \exp \left[\frac{L_V M_{SLD}}{RT_{vap}} \left(1 - \frac{T_{vap}}{T} \right) \right], \quad T \geq T_{vap}, \quad (18)$$

最後に式(12)の $\mathbf{F}_{buoy}$ は重力による対流力を示し、次式で与える。

$$\mathbf{F}_{buoy} = g_k [\beta_G \rho_G \phi + \beta_L \rho_L (1 - \phi)] (T - T_M) - (\rho - \rho_G) g_k. \quad (19)$$

ここで、 β_G と β_L は、それぞれ気相と液相の体積膨張率である。

最後に、式(7)と連成しながら、固液間の溶融と凝固組織形成の計算に、マルチフェーズフィールド方程式を適用する。これは次式で表現される。

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = \sum_{j=1}^{N_p} \frac{K_{ij}}{N} \left\{ \left(\frac{\delta G}{\delta \phi_j} - \frac{\delta G}{\delta \phi_i} \right) + \frac{2\pi}{\delta_{MPF}} \sqrt{\phi_i \phi_j} \Delta g_{ij} \right\}. \quad (20)$$

ここで、 ϕ_i は固液の存在割合を示すだけでなく、個々の結晶粒の存在割合も示している。このため、冷却過程における多結晶凝固組織の計算を可能にしている。 Δg_{ij} は界面駆動力を示しており、本計算では元素濃度分布（成分拡散）まではまだ考慮していないため、融点 T_M と溶融エントロピー ΔS から、 $\Delta g_{ij} = \Delta S(T_M - T)$ と算定する。

さらに開発したプログラムを大型計算機上で動作可能とし、MPIおよびOpenMPハイブリッド並列による大規模モデルの計算高速化を図った。さらに基材部組織には現実の多結晶組織を模擬する目的でボロノイ分布に従う多結晶構造を導入し、より実材料に近い状態を表現できるようにした。NIMS独自のプログラムであり、世界的にも極めて先進的な予測技術である。図23に、レーザー出力 $p=800W$ 、走査速度 $v=1000 \text{ mm/s}$ の場合に予測した凝固組織の予測結果を示す。レーザスキャンに伴う表面および断面での色の変化は、カラーバーで示す温度分布の変化を表している。ボロノイモデルで多結晶構造を表現した基材部の色の違いは、結晶方位の違いを表している。Ni基合金の物性を用い、レーザは手前側から奥へ向かって移動するモデルである。前節でも見たように高出力レーザにより、深い溶融プールが形成され、金属蒸気によるガスを巻きこんだ溶融プールが複雑に変化しながら、凝固が進んでいく様子が明瞭に示されている。図では小さく分かりにくい、パウダーベッド表面での溶融部からの液滴の飛散や、溶融プール内での小さいガスポアの流動など、極めて精緻な計算を実現できている。また、図24は、レーザー出力 $p=400W$ 、走査速度 $v=1000 \text{ mm/s}$ の場合に予測された凝固組織について、溶融部（赤い領域）の移動と共に示している。レーザ照射部が左から右へと移動するに伴い、基材の初期組織が一旦溶融し、その後、エピタキシャル成長により固液界面部から基材の結晶方位を引き継いだ形で柱状の結晶

粒が形成されている。レーザ積層造形で見られる柱状晶の形成過程を上手く解析することに成功している。格子ボルツマン法による高速かつ高精度な流体解析とマルチフェーズフィールド法を連成した、このようなレーザ造形プロセスの組織予測技術は、これまで報告が無く世界的に見ても極めて画期的な成果である。

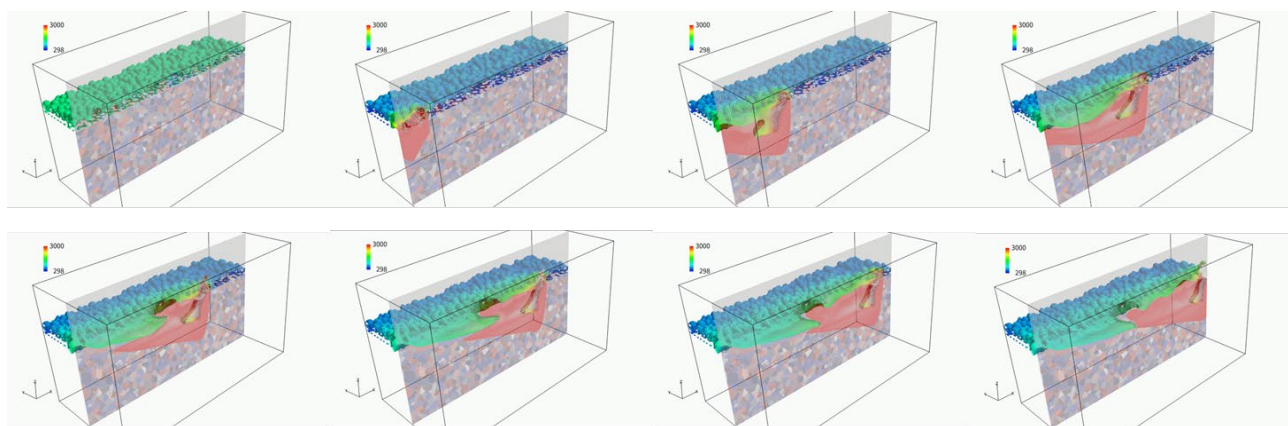


図23. 開発した格子ボルツマンフェーズフィールド法により予測された、レーザ照射に対する温度場と溶融流動挙動、および凝固組織 ($p=800\text{W}$, $v=1000\text{ mm/s}$) .

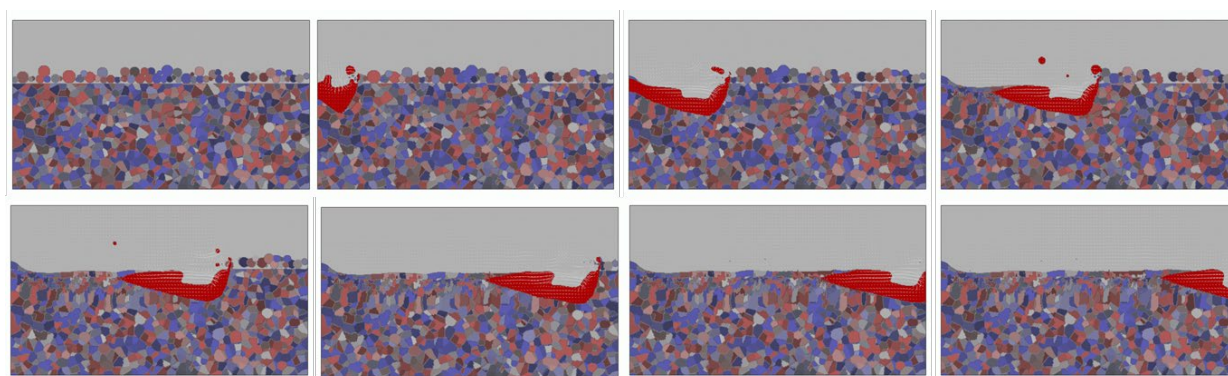


図24. レーザスキャンにより形成される凝固組織の予測 ($p=400\text{W}$, $v=1000\text{ mm/s}$) .

図 25 では、 $p=800\text{W}$, $v=1000\text{ mm/s}$ の条件で予測された凝固組織を示している。キーホール型の深い溶融プールの形成により、拔熱方向が水平方向となり、溶融プール左右の基材結晶からエピタキシャル成長により水平方向へ凝固組織が形成している。左右からの粒成長が中央部でぶつかる（中央部が最後に凝固する）ことで、中央部に真っすぐな粒界が出来ている。図の一番右に、比較のために実験で観察した凝固組織の結晶方位分布を示す。シミュレーションによる予測と非常に良い一致が認められ、溶融プール左右の基材組織から結晶方位を引き継ぎ、水平方向に結晶が成長している。さらに、中央部に縦に真っすぐな粒界が形成されている点も、良く一致している。開発した組織予測技術は、定性的には非常に良く実際の組織を再現出来ていると言える。さらに解析モデルの拡張を行い、複数スキャン、複数層の堆積に対応したモデルの開発を行った。1層目の複数スキャンの計算完了後、1層目と同じ粉末層モデルを1層目の凝固組織予測結果データの上に配置して、2層目の入力モデルとすることで、2層目の計算を行う。このようなプロセスを繰り返すことで、5層まで積層した解析を実施した。図 26 には、1層辺りに間隔 $84\text{ }\mu\text{m}$ で2回レーザをスキャンさせた後、次の粉末層を載せ、再び2回レーザをスキャンさせた場合の計算結果例を示す。2層目では、1層目スキャン後での柱状凝固組織が再溶融された後、溶融部底部側では柱状晶の形成が継続されている一方で、表面側では流動により波打った形で凝固組織が形成していた。図 27 には、5層の積層過程の計算での温度場のスナップショットを並べている。図 28 にはこの計算により予測された凝固組織と、予測された粒度分布の例(xz 面)を示

している。積層造形における特徴的な柱状晶が再現されており、またレーザスキャン部で細かい粒となる傾向も表現出来ている。同条件での実際のハステロイ X の造形では、xy 面、xz 面、それぞれでの平均粒径は $50\sim60\mu\text{m}$ 、 $100\sim120\mu\text{m}$ であった。解析では、それぞれ $55\mu\text{m}$ 、 $78\mu\text{m}$ となっており、予測誤差はそれぞれ約 1%、29% であった。目標の予測精度を達成したと言える。

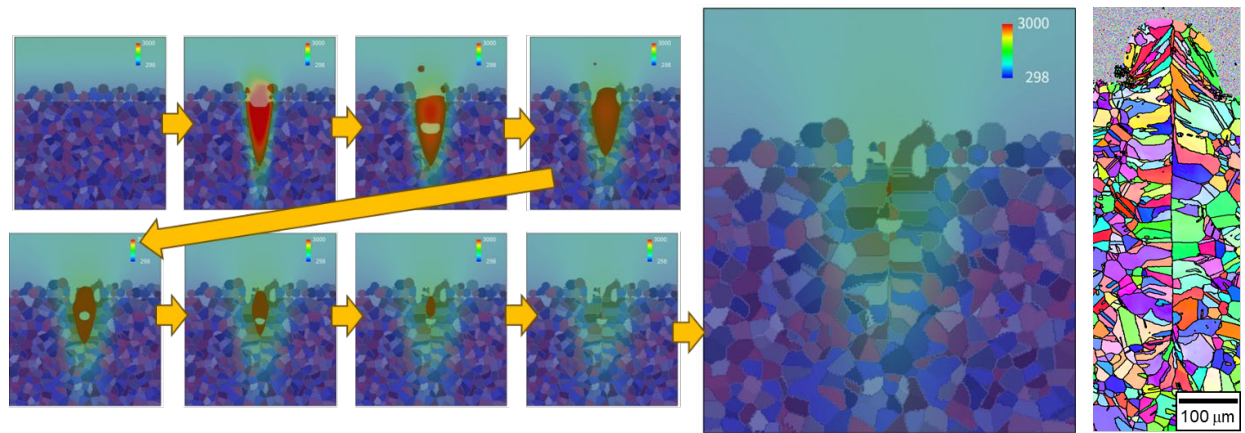


図25. キーホール型の溶融プールによって形成された凝固組織。カラーバーは温度分布（単位℃）。一番右図は、実験により得られたシングルビード断面での結晶方位分布。

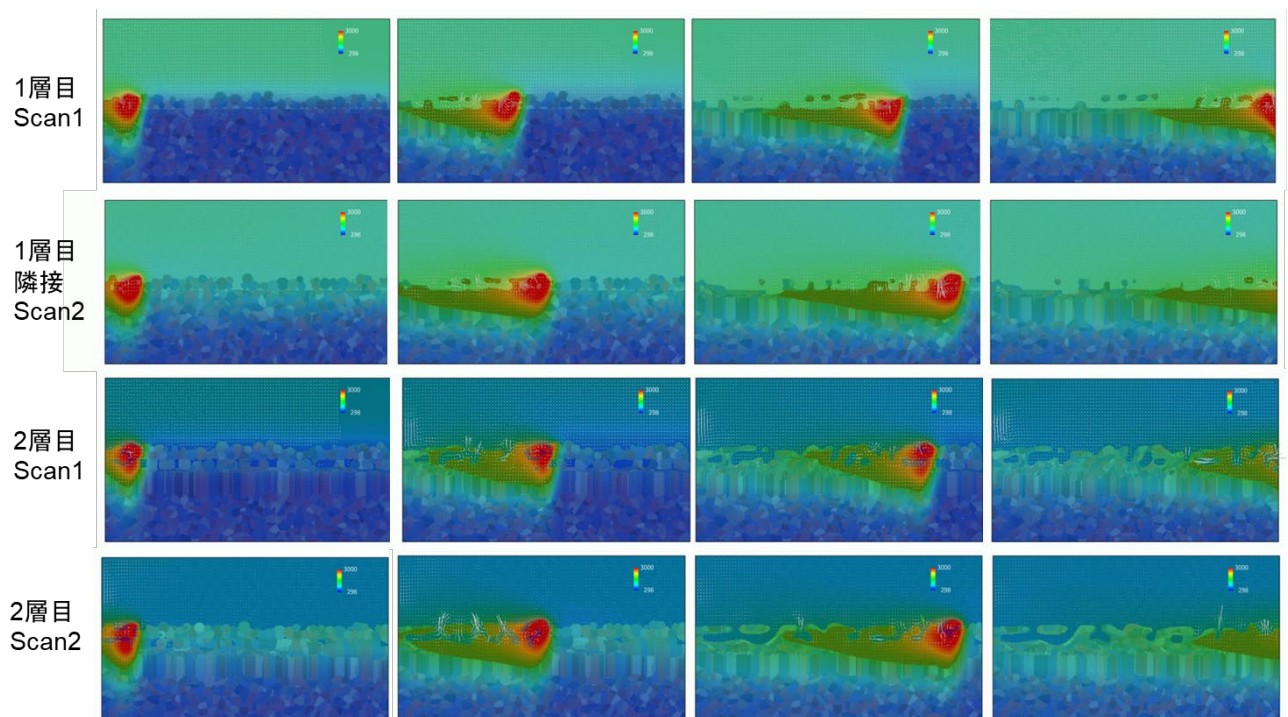


図26. 複数スキャンおよび複数層の積層課程での凝固組織形成シミュレーション。

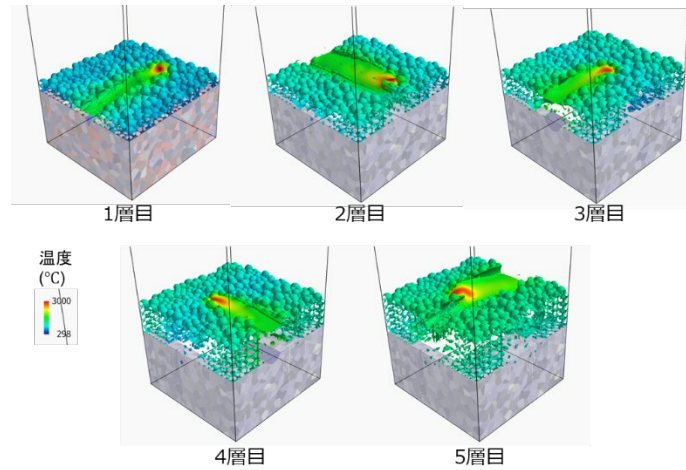


図27. 5層の積層過程における組織予測シミュレーション.

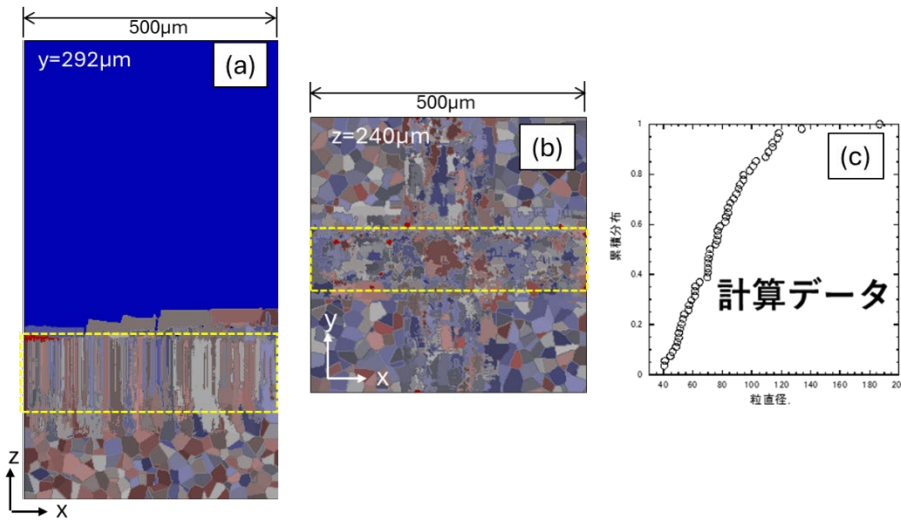


図28. 積層シミュレーションで計算された凝固組織 ((a)zx面、(b)xy面) と、xz面の粒径分布.

目標としていたマルチスキャンかつ複数層に渡る造形によって形成される凝固組織の予測技術を構築することができた。原理的にはさらに多くのスキャン数および積層数を計算可能であるが、多くのコンピュータリソースを必要とするため、局所的な組織予測に現状は留まる。ここで得られた組織を入力モデルとし、次項では応力ひずみ曲線を推定した結果を報告する。

また、析出強化型Ni基超合金の場合を想定し、積層造形過程での γ' 析出予測技術の開発も実施した。Inconel 738LCを対象として、マルチフェーズフィールド法により、冷却速度 5×10^5 K/s、温度勾配 5×10^6 K/mの条件下で凝固シミュレーションを実施し、得られた各元素の分布状態、偏析状態を出発として、図27、28で示した5層の積層過程で予測された温度履歴を適用することで、 γ' ($\text{Ni}_3(\text{Al}, \text{Ti})$)の析出予測を行った。図29に凝固完了時のAl元素の偏析状態を例として示しており、図30にはそこから冷却していく過程での、Ti元素の濃度分布変化、および γ' の析出予測結果を表している。これらの結果より、凝固セル界面のAlやTi偏析部から優先的に γ' が生成し、その後、周辺部でも元素の拡散に伴い析出が生じると予想される。平均冷却速度が大きいほど生成が早く、 γ' 相分率の増加速度も大きくなる。ただし、 γ' 相分率の増加速度そのものは非常に小さく、厳密な核生成モデルを適用すると、造形ままの条件では生成しない可能性が示唆される。これは実際の実験での観察結果とも良く一致している。開発したモデルは、熱処理過程にも適用できることから、今後、熱処理時の γ' 析出を定量的に評価し、モデルの予測と比較検証を行う予定である。

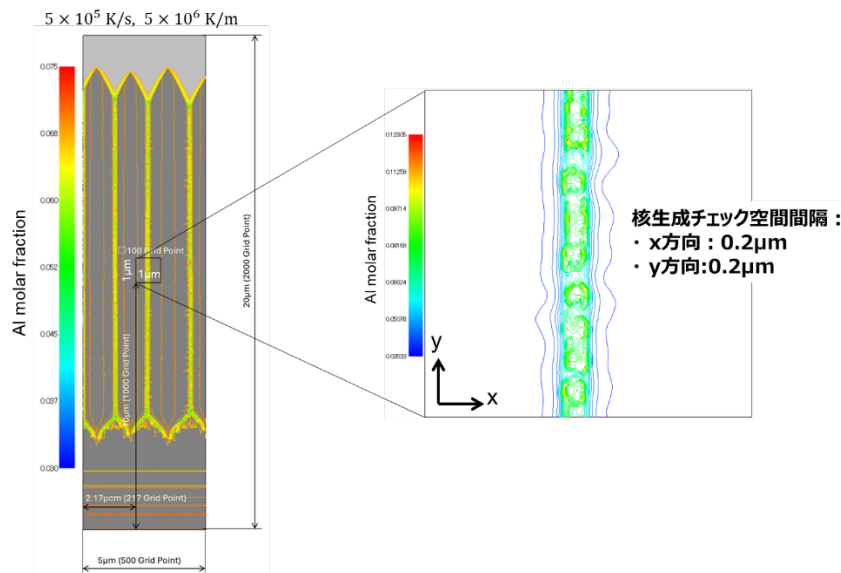


図29. マルチフェーズフィールド法による凝固セルの予測例と凝固完了時のAl元素の分布(右図).

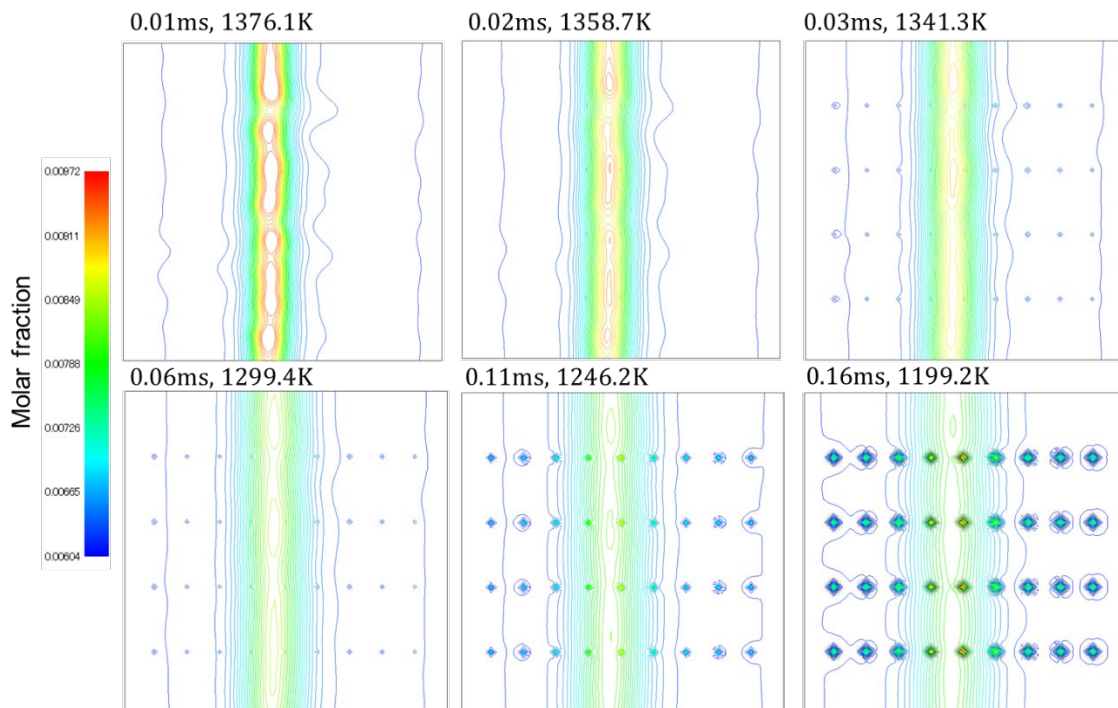


図30. 凝固完了後の冷却過程におけるTi元素の濃度分布変化と γ' 析出挙動の予測.

(4) 組織特徴量に基づいた応力-ひずみ曲線の予測技術

Hastelloy X造形体を作製し、その断面観察をSEMおよびEBSD結晶方位解析を実施した。得られた結晶方位分布データやアスペクト比等の微視組織特徴量を統計的に抽出し、微視組織モデルをコンピュータ内で再構築する技術を構築した。この技術を用いて、異なる三つのレーザ条件（レーザ出力 p 、スキャン速度 v ）=（500 W, 3333 mm/s）、（500W, 2083 mm/s）、（300W, 714 mm/s）で作製した造形体の微視組織再現モデル（代表体積要素）を構築した（図31）。異なる色は結晶方位を表しており、各条件で作製した造形体の実際の結晶方位分布と統計的に同等となっている。z方向の厚さの違いは、xz面（レーザに平行な断面、zが造形方向）で観察された微視組織の周期性の違いに起因する。次に構築した代表体積要素を用い、結晶塑性解析（Damask利用）により仮想的に荷重を負荷することで、この微視組織モデルの応力-ひずみ応答を解析により導出することを試みた。シミュレーションでは各軸に平行な荷重を与え、その方向の応力

ひずみ特性を求めた。また、この解析においても非常に多くの解析パラメータが存在し最適化が必要であるため、同条件で作製した造形体試料から引張試験片を作成し、室温での応力-ひずみ曲線を導出した。引張試験は、造形方向に負荷する場合と、造形方向に垂直な方向に負荷する場合について実施した。実験で得られた応力-ひずみ曲線と、結晶塑性解析による予測曲線を比較し、誤差が最小になるよう解析パラメータの最適化を行った。最も誤差を最小にすることが出来た予測結果を図32にまとめる。それぞれ実線が実験データ、シンボルが計算による予測となっている。レーザ条件 ($p=300\text{W}$, 714mm/s) の試料では、造形方向に垂直な方向の予測結果と実験結果の差異が降伏点近傍で認められるが、その他の方向、およびレーザ条件では非常に良い一致を示している。平均として、目標としていた降伏応力値の予測誤差10%以内を実現することができた。

開発した結晶塑性解析では、三次元微視組織モデルの構築が必要であり、また一つのモデルに対してワークステーションで1日程度の解析時間が必要であった。実際に観察される組織の特微量から速やかに力学特性を予測するという事は、現状、困難である。そこで、最適化したパラメータを用いた結晶塑性解析を、任意の仮想的な微視組織構造を有するモデルに適用することで、仮想実験を行い学習データを蓄積することで、微視組織特微量から機械学習による応力ひずみ曲線を予測する技術の開発を行った (図33)。

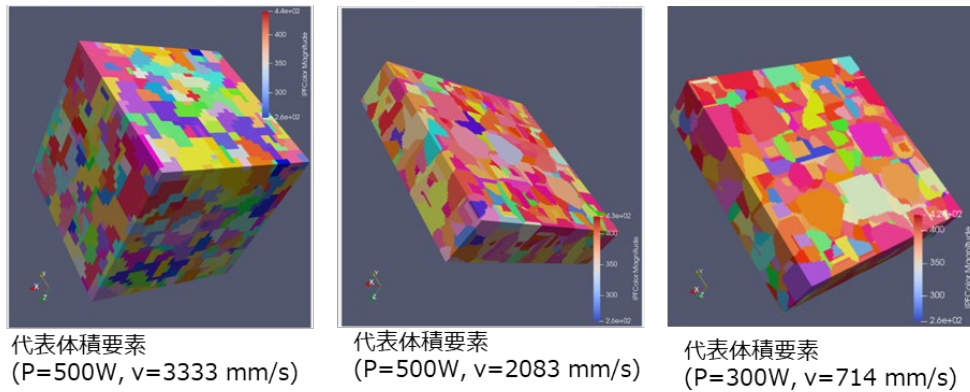


図31. 各レーザ条件で造形したサンプルに対して再構築された代表体積要素。

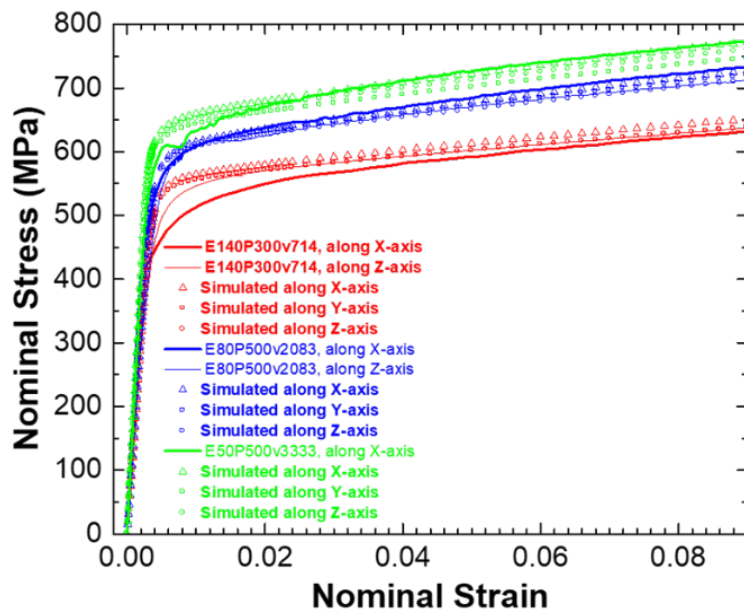


図32. ハステロイX造形体での実験とシミュレーションによる応力ひずみ曲線の比較。

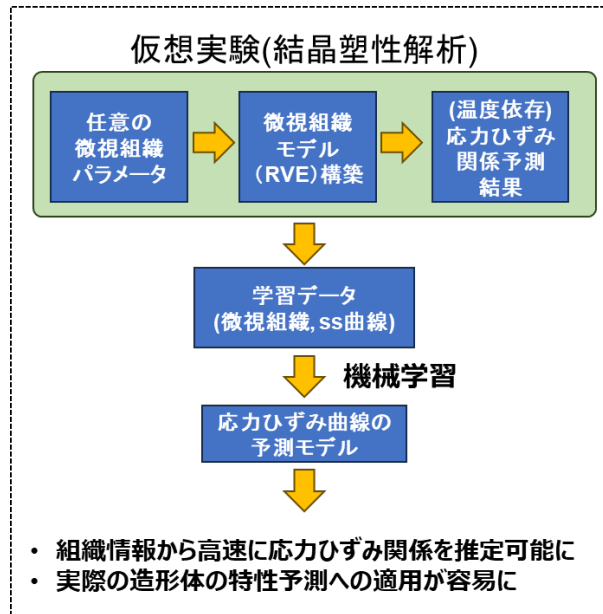


図33. 結晶塑性解析による仮想実験を通じて、組織-応力ひずみ曲線データを蓄積し、機械学習による予測モデルを構築する概念図。

様々な機械学習アルゴリズムを検討した結果、決定木アンサンブル法の一つである Alternating Model Trees (AMT) 法が高い予測精度を実現できることが判明した。訓練後の実際の AMT 構造の例を図34(a)に示す。また、図34(b)では学習時に未使用のデータ (検証データ) と、開発した予測モデル (AMT) との比較を示している。実線は結晶塑性解析の計算データ、青色のシンボルは機械学習による予測結果となっている。極めて良い一致が得られており、誤差は0.3%となっている。

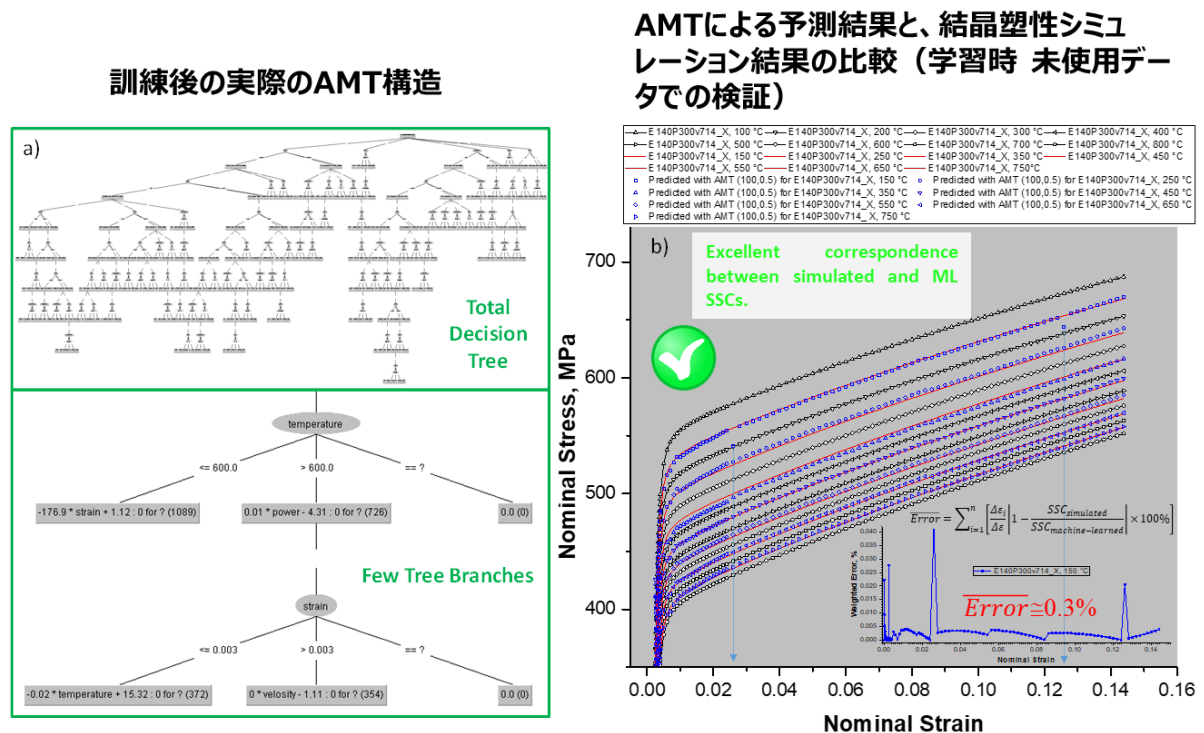


図34. 訓練後のAMT機械学習モデル(a)、機械学習モデルでの予測結果とシミュレーション結果の比較。

図35には、前項 (3) で報告した格子ボルツマンマルチフェーズフィールド法を用いて得られた、5層の積層後の凝固組織を入力として、結晶塑性解析による局所的な応力ひずみ曲線を予測したフローを示している。レーザ条件は (p=333W、v=1000 mm/s) となっている。図35 (中)

は模式図であるが、このように得られた組織結果から中央部の赤枠線で示す立方体部分を抜き出し、局所的な応力ひずみ応答を予測するための代表体積要素を構築した。さらに、図35（右）は、実際に抜き出して再構成された微視組織モデルであり、このモデルを用いて局所的な力学応答を結晶塑性解析により予測した。また、この微視組織の有する特徴量を用いて、機械学習モデルによる予測も行った。その結果を図36に示す。赤色はx方向（造形方向に垂直）負荷に対する応答、青色はz方向（造形方向）負荷に対する応答となっている。□と△がレーザ条件（ $P=333\text{W}$ 、 $v=1000\text{ mm/s}$ ）に対して結晶塑性解析および機械学習による予測モデルで予測された結果である。z方向の場合に、両者の誤差が大きいが、降伏応力として誤差10%未満には収まっている。完全に同じ条件の実験データが存在しなかったため、ここではレーザ条件（ $P=300\text{W}$ 、 $v=909\text{ mm/s}$ ）で作製されたサンプルの引張試験結果を実線で示している。実線と□を比較すると良い一致が認められる。また、実験ではx方向の方が、z方向よりも高い応力を出しているが、この異方性の傾向も計算で予測できている。○のデータは、断面観察より得られた組織特徴量を入力として機械学習モデルにより予測した結果である。z方向の予測は極めて良い一致を示している。

この取り組みを通じて、各計算技術を接続することで、仮想実験によりレーザ造形Ni基合金の応力ひずみ応答を予測できるフレームを構築することが出来た。

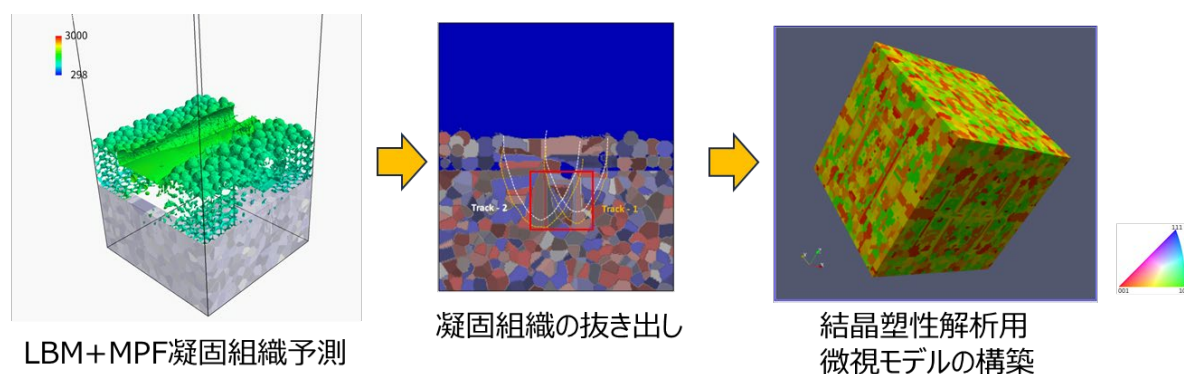


図35. 前項(3)の流体解析-組織予測連成により予測された凝固組織から、代表体積要素を構築したフロー図：（左）表面性状および温度場、（中）レーザスキャン断面での凝固組織（模式図）、（右）実際に再構築された代表体積要素。

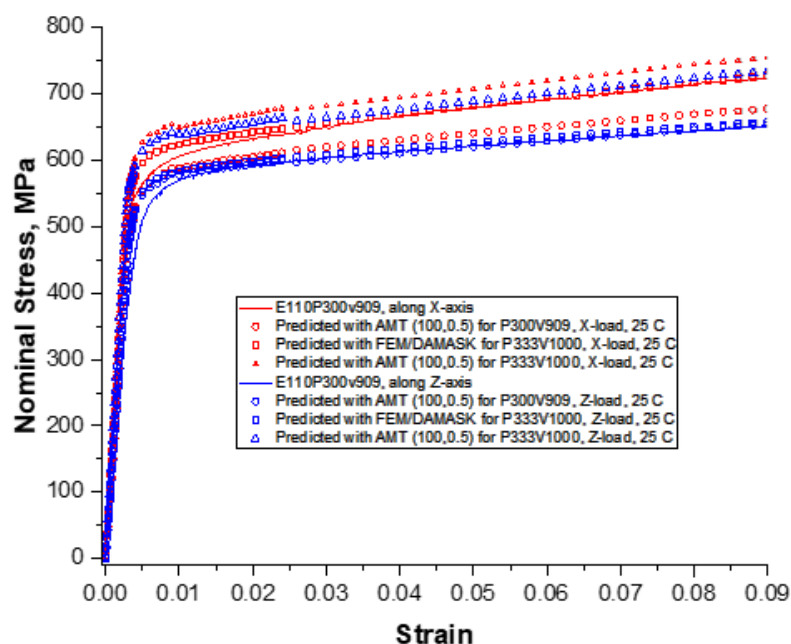


図36. 流体解析による複数層積層の温度場予測および凝固組織予測、微視モデル再構築を経て、結晶塑性解析または機械学習モデルにより計算のみで予測された応力-ひずみ曲線。

(5) 部材全体のマクロな温度分布、残留応力分布・ひずみ分布の予測技術

有限要素解析 (FEM) においてバース&デス法を適用し、図37に示すようなモデル形状 (左上) について造形中のマクロな温度場の予測を試みた。そろばんのコマが二つ並んだような形状となっているが、下部の円柱部から一つ目のコマの造形が進んでいく過程では、レーザ照射にさらされる最表面の面積が増加していき、したがって一層辺りの入熱量が増加していく。このために、造形中に温度上昇が生じることになる。逆に、コマ上部の断面積が減少していく過程では、温度低下が予想されることになる。実際に、ハステロイXにより造形した写真を、設計モデルと並べて示す (左上) (写真ではサポートがついているために、コマ部分の形状が分からない点に注意)。このモデルに対し、FEMによる温度場予測を行った結果が、図37下の温度変化グラフである。横軸は造形時間となっている。青線がシミュレーション結果であり、赤い線は高速赤外線カメラにより測定した造形中の最表面温度データについて、中央部平均温度を算出したものである。計算結果と実験結果は非常に良い一致を示しており、造形中のマクロな温度分布を適切に予測出来ていると言える。また、図37右上には、二つ目のコマの最も面積の大きい部分を造形した直後の温度分布の例である。二つ目のコマの方が一つ目のコマと比べ、まだ温度が高く、一方で下部の円柱部では大きく温度が低下していることが理解できる。抜熱に対するサポートの影響についても、考慮した計算モデルとなっている。適切に解析モデルを構築することで、造形中の温度場を精度良く予測できることが明らかとなった。

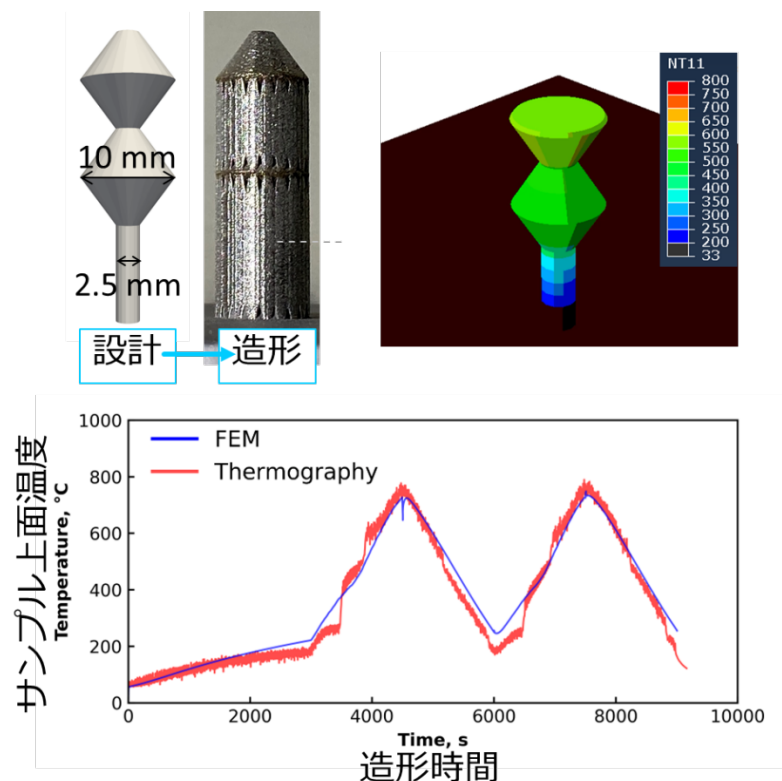


図37. (左上) モデル造形体のデザインと実際の造形写真、(右上) FEMによる造形中の温度場予測例、(下図) FEMに造形全体に渡っての、サンプル上面での温度変化予測結果と、実験による計測結果との比較。

次に応力場・ひずみ場の予測と実験による検証を行った。図38に示すNISTの解析モデルを用いて、造形中の温度場、応力場およびひずみ場の解析を実施した。FEM解析には商用有限要素解析ソフト ABAQUS (ダッソー社製) を用いた。解析により予測された造形体の変形と、実際の造形体での計測結果を比較し、予測精度の検証を行った。NISTモデルはアメリカのNational

Institute of Standards and Technology (NIST) が提案したもので、残留応力および変形を定量的に評価するための試験片形状として知られている。複数の脚を有する橋のような形状となっており、造形後に図38（右）の赤点線部を切断することで、造形体内部の残留応力が解放され、上に凹に反る。この反り量を評価することで内在していた残留応力を評価することができる。実際のサンプル作成ではハステロイXを適用した。造形プレート上に同時に4つのサンプルを同条件で作製した。図39に造形した試料外観（応力解放前）と、三次元形状測定装置による応力解放後の変形量分布を示す。切断による応力解放により、端部が大きく変形していることが理解できる。4つの試料の最大変位の平均は、 0.95 ± 0.04 mmであった。図40にFEMに解析結果例を示す。それぞれ、温度分布（左上）、Mises応力分布（右上）、残留応力解放後のz方向変位分布（左下、右下）となっている。プロセス中の温度場、および内部も含めた応力場、ひずみ場を計算することが出来ており、定量的にも妥当な結果が得られている。計算での残留応力解放後の平均最大変位を求めると、 0.77 ± 0.01 mmであった。実験での計測値と比較すると、変位の予測誤差は約19%となっており、目標とした50%以内を実現することが出来ている。このマクロな弾塑性解析において、局所的な組織特徴量に基づいて予測された応力ひずみ曲線データを部位毎に提供することが出来れば、より正確な計算が可能となる。本プロジェクトにおいて、このようなフローを可能とする要素技術の確立と基盤の構築を実現することが出来たと言える。

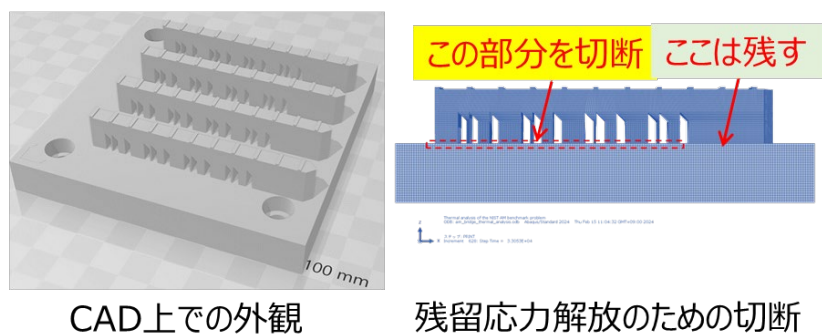


図38. NIST形状モデルおよび解析モデル。

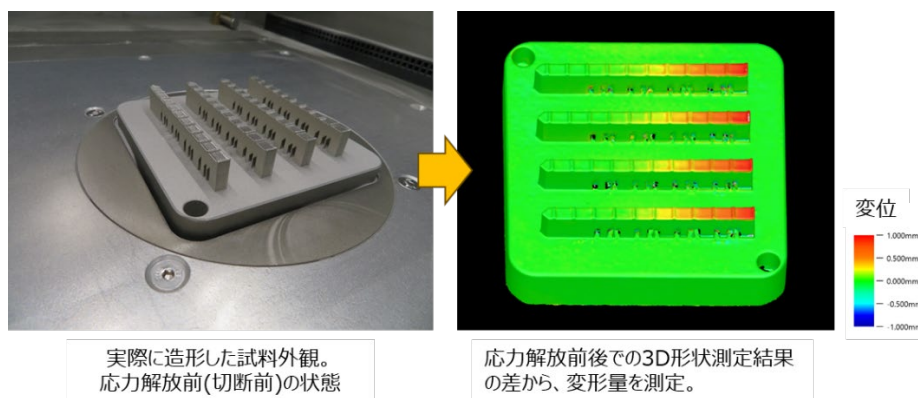


図39. 作製した試験片外観（左）と、応力解放後のz方向変位分布測定結果（右）。

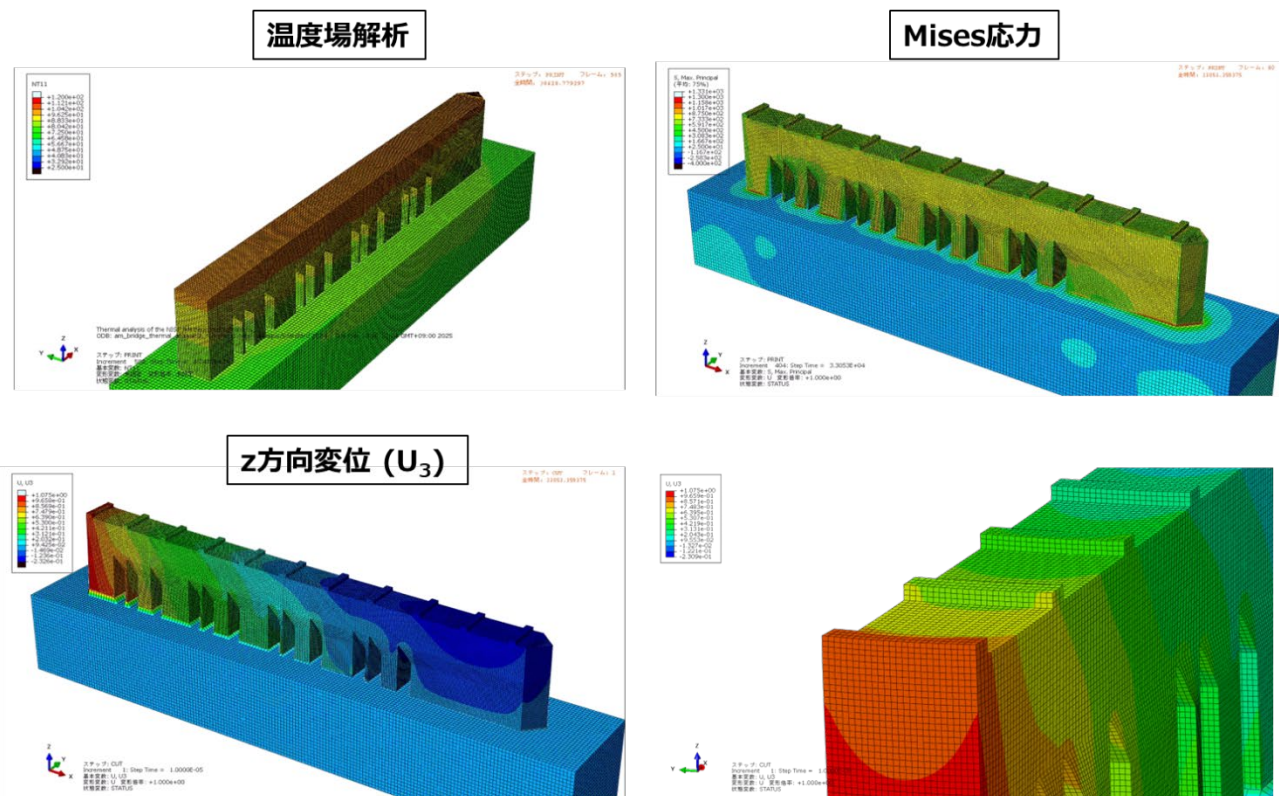


図40. NISTモデルによる造形中および応力解放後の温度場、応力場、変位分布の予測結果。

(6) 解析技術を活用し能動的な温度場制御を行い、一方向凝固状および単結晶状組織形成への挑戦

本プロジェクトにおいて、挑戦的課題として設定した、高い結晶配向性を有する一方向凝固状組織、さらには単結晶状組織を有する造形体の作成に取り組んだ。初年度、純Ni単結晶バルク板材上に、ハステロイXのパウダーベッドを形成し、フラットトップ (FT) レーザにより1層分だけ堆積させた場合に、エピタキシャル成長により単結晶組織を得られる条件を見出した(図41)。条件探索においては、ハステロイX多結晶板材の上にシングルトラック試験および、マルチトラック試験を行い、その断面での熔融プール形状および凝固組織を詳細に分析することで、指針を得た。

さらに複数層の造形において単結晶組織形成を図った。図42では、異なるレーザ条件および予熱温度でバルク単結晶板材 (TMS238) 上に造形したハステロイXの断面組織について、造形方向の結晶方位分布を示している (IPF-Z)。いずれの場合も造形方向 (紙面縦方向) に細長い柱状晶が形成されているが、レーザ出力が低い場合と比べ、出力が大きくなるにつれ、柱状晶が造形方向および造形方向と垂直方向に大きくなり、また造形方向の結晶配向が[001]に揃う傾向が顕著に認められた。レーザ出力 900W、スキャン速度 250 mm/sでは非常に配向性の高い組織を得ることに成功した。また、興味深い発見として、基材単結晶とハステロイX造形体の界面近傍で多数のランダムな配向を有する等軸状の細かい結晶粒が認められた。このことから、少なく

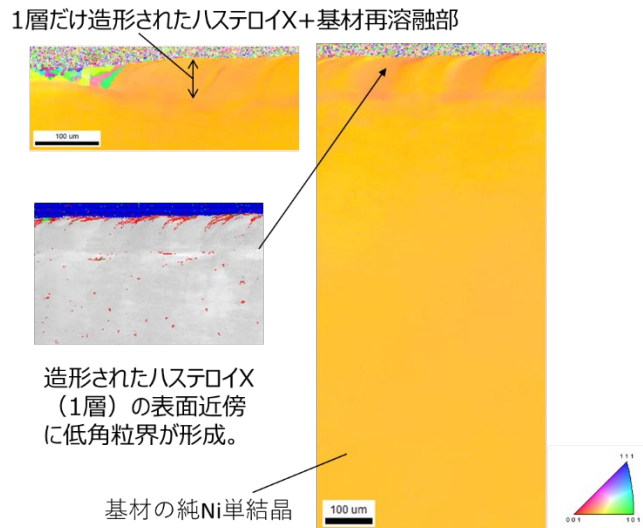


図41. バルク単結晶板（純Ni）上で1層だけ造形したHX組織（EBSDマップ（IPF-Z））.

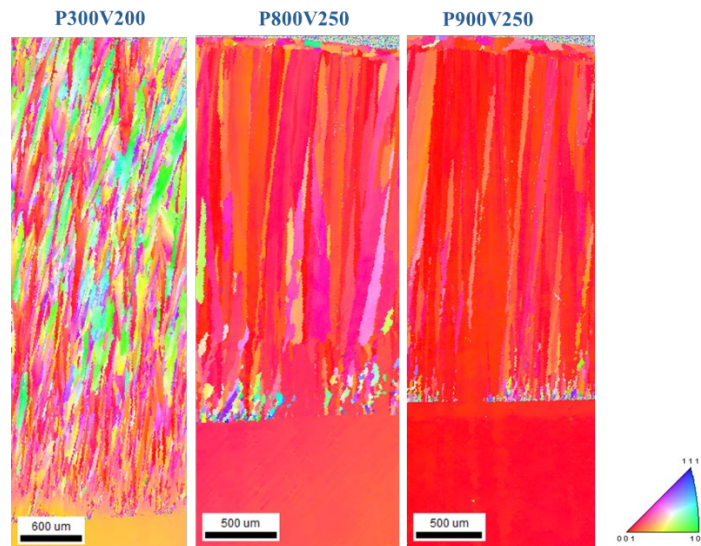


図42. 異なるレーザ条件でバルク単結晶板（TMS238）上へ造形したHX断面組織（EBSDマップ（IPF-Z））.

とも基材合金組成とハステロイX組成が混ざり合う界面部では、様々な方位を有する結晶粒の核生成が生じており、それらの成長と消滅を経て、図42で観察された組織となっていることが明らかとなった。一方向凝固組織あるいは単結晶組織を形成させるためには、エピタキシャル成長を生じさせることが重要であるが、ここで観察されたような新たな結晶粒の核生成および生じた粒の安定性が重要な因子となっている可能性が示唆される。

また、FTレーザ造形により、単結晶組織を得るためには柱状晶の形成が必須であると考えられることから、まず、シングルトラックの温度場解析に基づき、柱状晶等軸晶遷移による組織変化を推定し、単結晶形成可能な条件範囲を絞り込む技術の構築を行った。遷移のクライテリアについては、文献で報告されているInconel 718の凝固マップを参照し、温度場解析より温度勾配Gと凝固速度Rを算出し、凝固マップのどの領域に当てはまるかの判別を試みた。図43は横軸にレーザ走査速度、縦軸にレーザ出力を取り、各条件で計算を行った結果をまとめたものである。図中、黄色で示す領域は溶融プールの凝固過程において柱状晶が形成される領域、濃い橙色で示される領域は等軸晶が形成すると予想される領域になる。また、右下の青紫でハッチングされている領域は、エネルギー不足により溶融せず、逆に左上のピンクで示される領域は、エネルギー過剰で適用した解析時間内に凝固が完了しなかった領域である。この結果、水色点線で示す条件範囲では凝固過程に等軸晶が形成される可能性があり、一方向凝固組織、さらには単結晶組織を形成するには適していないと推定された。その他の領域では、柱状晶の

みが形成されるものと推定された。特にレーザ出力200～500W、走査速度100～500の領域では溶融プールが平たく、柱状晶が上向き（レーザと平行方向）に成長しやすいと考えられた。

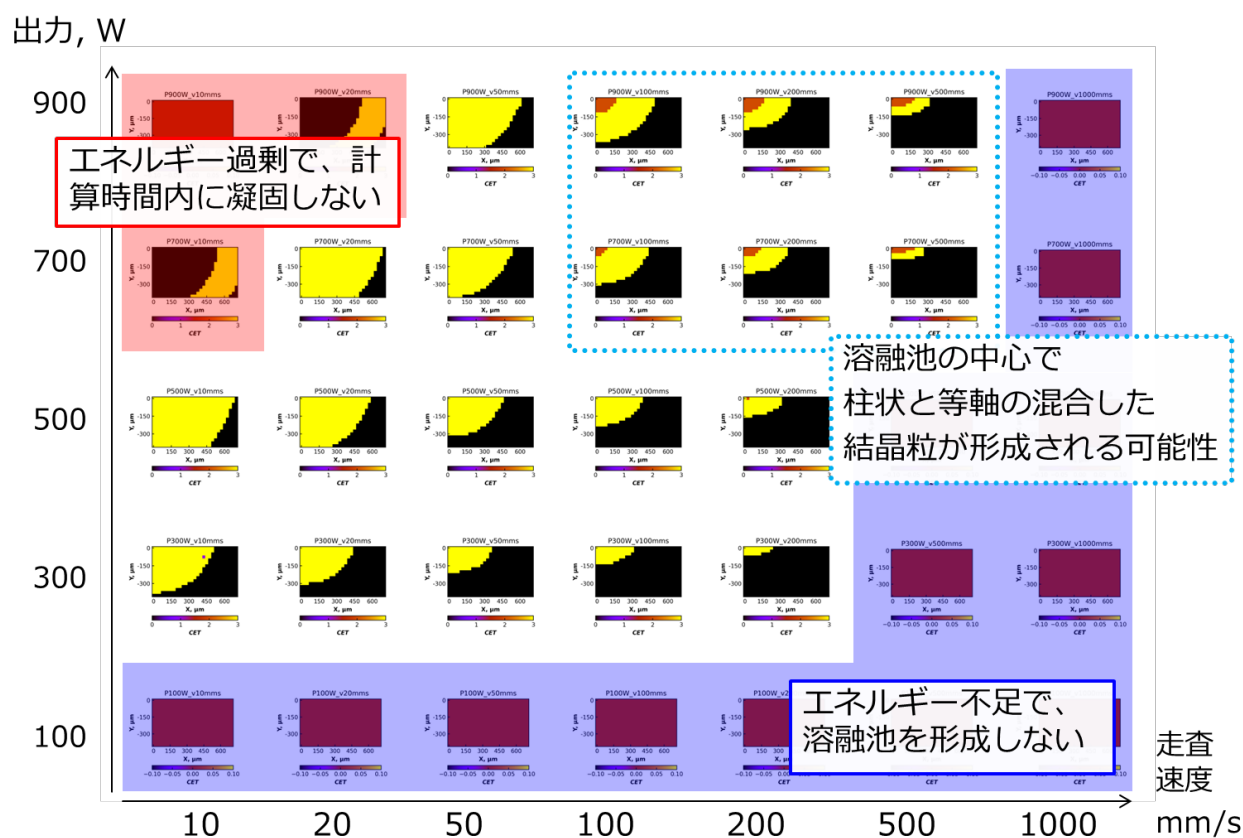


図43 シングルトラック熱解析より推定された柱状晶および等軸晶形成マップ

これに対し、様々なレーザ条件でFTレーザを用いたシングルトラック試験を、ハステロイX基材に対し実施し、レーザスキャン方向の断面組織をEBSDにより詳細に分析した。その結果、実験的にはレーザ出力を装置最大の1000 Wとし、スキャン速度を200 mm/sとした場合に、溶融プール凝固部で柱状晶の割合が最大となる結果となった。各条件、一断面での分析結果のみのため、ばらつきが評価できていないが、傾向としてエネルギー密度が増加するほど柱状晶の割合が高くなった。図43で予測した等軸晶-柱状晶遷移予測とは異なる結果となったが、これはクライテリアのベースがInconel 718となっており、今回の実験データに基づいてハステロイXに合わせた改良を行う必要があるものと考えられる。

さらに、様々なレーザ条件に対して、マルチトラック試験を実施し、適切なハッチ幅、および基材予熱温度について検討を進めたうえで、実際の円柱造形試験を行い、レーザ条件と組織との相関について調査した。基材にはFTレーザで造形した純Niを用いた。この基材は造形方向に[100]が配向した単結晶状組織となっており、ハステロイXの造形時に種結晶として機能することが期待された。図44、45にレーザ出力300～1000 W、スキャン速度 200～500 mm/sで得られた試料のxz断面での結晶方位分布を示す。それぞれIPF-z（造形方向）およびIPF-x（造形方向に垂直）となっている。多くのレーザ条件で、純Ni基材に対する造形初期段階では、基材の結晶方位を引き継いだ粒成長が認められるが、一旦、結晶方位が乱れる傾向が生じた。これは基材の組成とハステロイXの組成が混合した遷移領域において、核生成が生じ、基材とは異なる結晶方位を有する粒成長を促すことでエネルギー的に安定な状態を得ようとすることに起因しているものと推定される。また、急激に熱特性が変化することも要因と考えられるが、今後、詳細な検討が必要である。全体として、レーザ出力が高くなるほど、造形方向(IPF-z)、および造

形方向に垂直方向 (IPF-x) とともに結晶配向が揃っていく傾向が認められ、造形方向に $[100]$ 、造形方向と垂直な方向に $[110]$ が配向している。一方向凝固状組織を得ることは出来たといえる。造形方向、造形垂直方向の両方での高い配向性は、 $P=1000\text{ W}$ 、 $v=250$ あるいは 300 mm/s の試料で認められ、この辺りの条件が最も単結晶状組織を得られる可能性があることが示唆された。

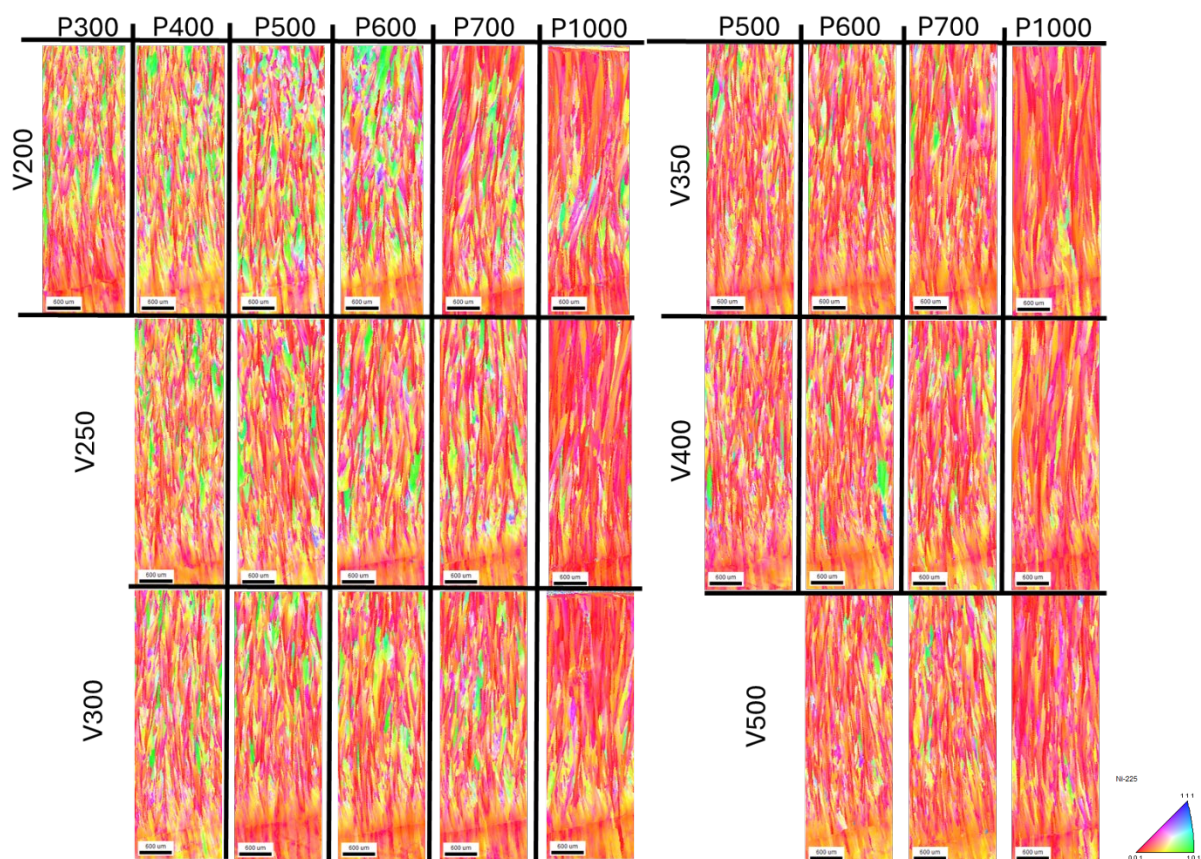


図44. 純Ni単結晶状基材の上に造形されたハステロイXについて、造形方向に平行な断面での結晶方位マップ (IPF-z, z方向は造形方向)。

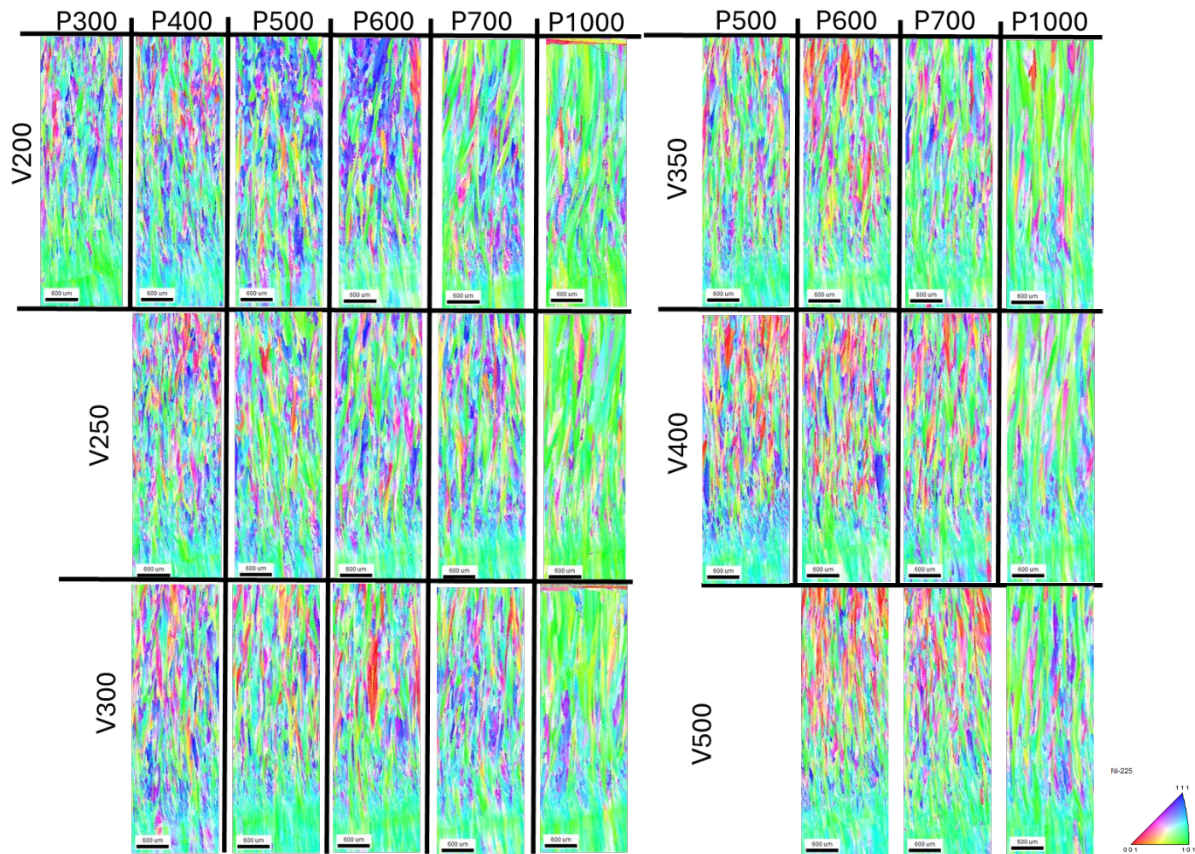


図45. 純Ni単結晶状基材の上に造形されたハステロイXについて、造形方向に平行な断面での結晶方位マップ (IPF-x, x方向は造形方向と垂直)。

このレーザ条件と結晶配向性の相関について理解し、その配向性制御を可能とするために、セルラーオートマトン (CA) 法による結晶配向の予測技術の開発を行った。レーザ出力と走査速度に対し、造形体の結晶組織およびその結晶配向性が変化していく過程を予測することが可能となった。CA法による予測結果と実験結果を比較すると、界面近傍における核生成密度 N_0 が凝固組織の形成に大きな影響を与えることが明らかとなった。この核生成密度に適切な値を用いることで、単結晶性を表すM-indexのレーザ条件依存性について、実験結果と定性的に良い一致を得ることが出来、レーザ条件との相関マップの予測が可能となった (図46)。M-indexは1が完全な単結晶を意味する。今後、より詳細にプロセス条件を詰めることで、より単結晶性の高い組織を実現できると考えられた。

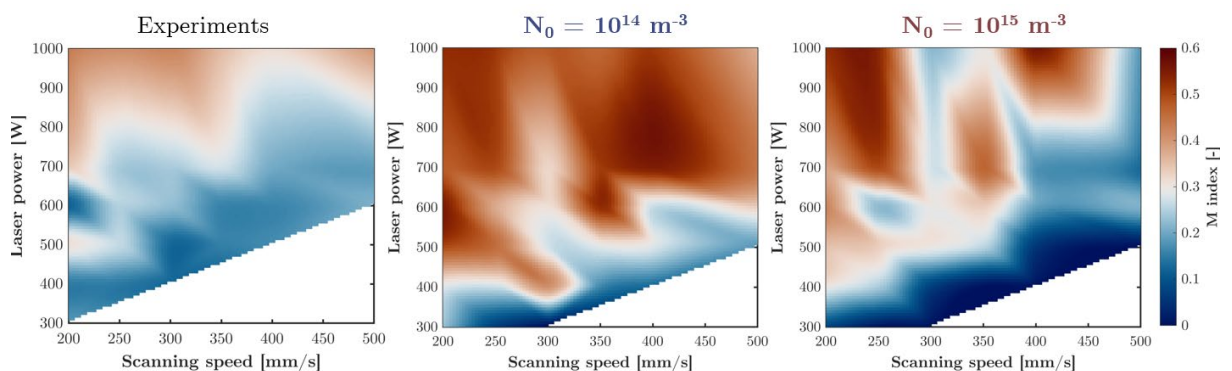


図46. 実験およびセルラーオートマトン法により予測されたレーザ条件とM-indexの相関。

最後の取り組みとして、図44や45で得られた高い配向性を実現した微視組織について、今回造形した円柱以外の形状での造形における再現に取り組んだ。図47に示すように、まず円柱造形時の温度場を推定し（図47左）、次に同じ条件で異なる形状（角柱や末広がり等）の造形を行う際の温度場を計算し（図47中央）、その差が $\pm 20^{\circ}\text{C}$ 以内になるように入熱量を導出した（図47右）。ただし、全ての層ではなくターゲットとした層のみを対象として条件設定を行った。この導出した入熱量に基づいて、レーザー条件等を決定した。図48に角柱および斜め端部をもつ末広がり形状の場合の断面組織を示す。それぞれの試料についてIPF-z, IPF-xの結晶方位マップを示している。ある程度、円柱の場合と同等の一方向凝固状組織を再現できたと言えるが、より複雑など造形体の場合など、今後、検証および課題抽出を進めていく必要がある。

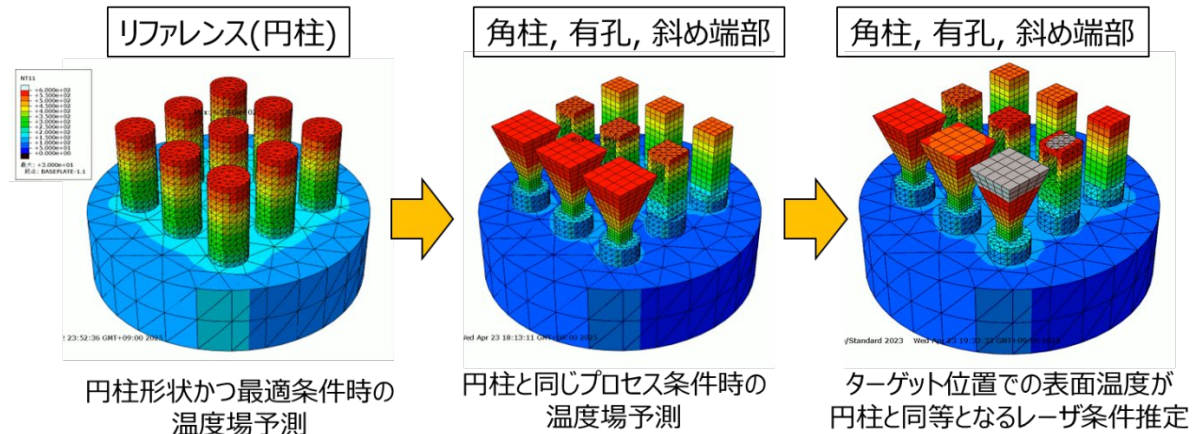


図47. 異なるモデル形状での温度場の予測と、円柱形状と同等となる入熱量の推定.

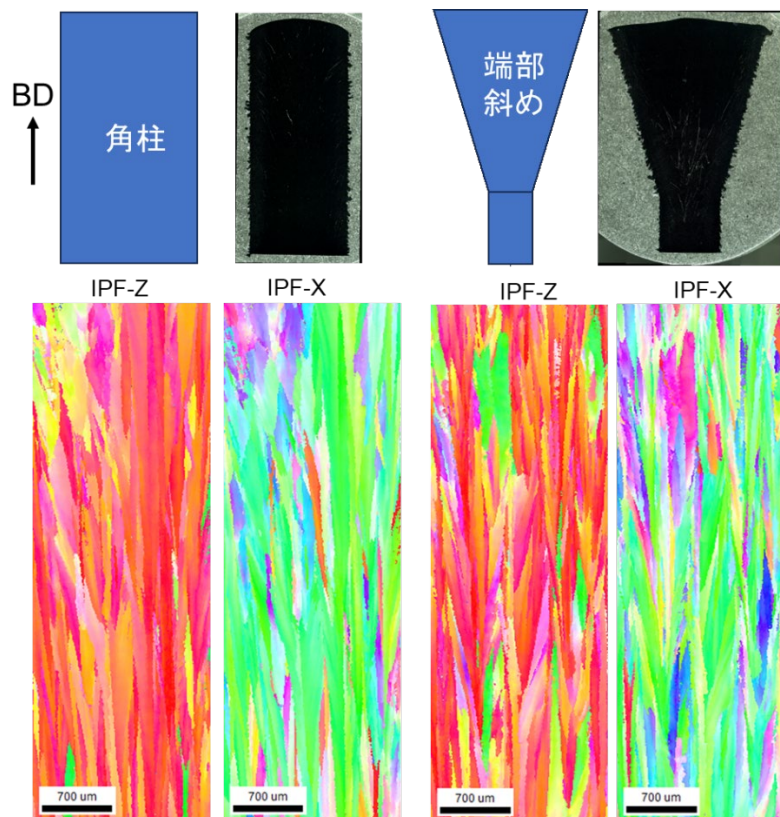


図48. 異なるモデル形状での造形方向に平行な断面での結晶方位マップ.

4. 委託業務全体の成果

4. 1 計画時に想定していなかった成果（副次的成果）や、目標を超える成果

最終年度の成果についてはこれから論文発表を行っていくものもあるが、本報告書執筆時点で、国際論文誌に7件の発表、学会講演大会にて17件の発表を行った。目に見える定量値として想定を超える成果を挙げることが出来た。

また、流体解析を用いた溶融凝固挙動のシミュレーションでは、溶融プール形状の再現を反射率モデルや熱源のエネルギー分布などのパラメータ最適化で、当初実現できるものと考えていたが、これらの最適化では溶融プール幅の再現が困難であることが明らかとなった。そこで、蒸気によるVapor Plumeの影響に着目し、追加熱源モデルを与えた新しいモデルを構築することで、溶融プール幅を再現可能となった。これは世界的に見ても新しい提案であり、これから論文を準備するところであるが、本分野において新規な物理モデルとして発展していく可能性がある。

さらに単結晶基材をシードとしての単結晶状組織形成では、凝固時の核生成が当初考えていた以上に重要な因子であることが明らかとなり、この核生成をパラメータとして組織予測プログラムを開発したところ、凝固組織の配向性について実験において観察される傾向をより上手に予測することが可能となった。

4. 2 研究課題の発展性（間接的成果を含む）

3D積層造形プロセスでは、複雑形状を有する部材を製造しつつも、部位毎の組織制御や特性制御が必要であり、そのようなプロセスの最適化を実験による試行錯誤のみで実現することは極めて困難である。本プロジェクトで開発したマルチフィジックスシミュレーションは、デジタルツイン構築のための重要要素技術の集合体であり、学術、産業両面で、今後の3D積層造形プロセスの発展に大きく貢献できると考えられる。また、得られた成果は学会発表、論文発表という形で積極的に周知しており、後に続く研究者や技術者が容易に引用し、参考とできるようにしている。今後、得られた技術をより具体的な部材の製造へと適用し、技術の有用性を検証すると共に、さらなる発展のための課題抽出を行う。また、本プロジェクトは物理モデルに基づく数値解析を柱として取り組んだため、個々の解析技術は理論的な裏付けが強固なものとなっている。一方で、非常に計算コストが重く、日々の部材開発で適用するには、現在のPC能力では時間がかかりすぎるという課題がある。この点については、今後のコンピュータの発展に期待すると共に、数値計算での仮想実験でデータを蓄積し、その結果をもとに機械学習による予測モデルの構築を図ることで、解決できると考えている。このような取り組みは、本プロジェクトにおいても、結晶塑性解析による微視組織モデルからの応力ひずみ曲線予測において、組織特徴量を入力パラメータとして、高い精度で数値解析結果を再現できる機械学習モデルを開発し、十分な有用性があることを示している。今後、数値解析による予測モデルの高精度化と共に、このような機械学習による置換モデルの開発を進めることで、実部材開発における利便性が飛躍的に向上するものと期待される。また、計算技術を活用した一方向凝固状組織あるいは単結晶状組織の形成では、多元系のハステロイXを対象にかなり配向性の高い組織を得ることが出来た。今後、計算技術をさらに活用することで、より複雑な形状においても同様の組織制御が可能であることが期待できる。このような高い配向性を有するNi基合金積層造形材のクリープや疲労特性については、ほとんど調べられていないことから、力学特性について組織との相関から詳細に調査していくことも重要と考えられる。これらの取り組みにより、さらに3D造形技術の利用範囲が拡大すると共に、国際競争力のある高性能部品の製造技術として確立していくことで、日本の産業競争力の発展に大いに寄与するものと期待される。

4. 3 研究成果の発表・発信に関する活動

本プロジェクトで取り組んだレーザ3D造形プロセスのマルチフィジックスシミュレーション技術の開発成果が評価され、鉄鋼協会において白石記念賞を研究代表者の渡邊が受賞した。

プロジェクト全体を通じて、積極的な学会発表、論文発表を行い、プロジェクト終了時点で7件の国際論文誌での論文発表、21件の学会や講演会での発表を行い、そのうち招待講演7件を行った。当然ながら防衛装備庁の安全保障技術研究推進制度により支援を受けた旨、謝辞に記

載させていただいた。また、日本AM研究会（現：（一社）日本Additive Manufacturing学会）の研究会で本プロジェクトの取り組みについて紹介し、日本最大のAM技術に関する産官学ネットワークに対し、成果をアピールすると共に、本産業分野の発展に貢献した。

5. プロジェクトの総合的推進

5. 1 研究実施体制とマネジメント

毎週火曜午前に進捗会議を開催し、先週の成果や課題についての共有を行い、円滑なプロジェクト推進を図った。物質・材料研究機構の定年制研究員6名、特別研究員3名、ポスдок研究員1名、任期制エンジニア1名、研究業務員2名の体制で取り組み、体制に相応しい成果を挙げたと考えている。また予算の大部分は人件費に充て、特別研究員を確保し、確実なプロジェクトの遂行と成果の創出を図った。

5. 2 経費の効率的執行

年度計画に沿って、年度当初から着実な予算執行を行った。

6. まとめ、今後の予定

レーザ3D積層造形プロセスのマルチフィジックスシミュレーション技術を大型計算機を活用して開発し、パウダーベッド形成予測、流体解析によるレーザ照射に伴う温度場および熔融凝固挙動の予測、流体解析とマルチフェーズフィールド解析の連成による結晶組織予測、微視組織再現モデルによる応力-ひずみ曲線予測技術、造形体形状を考慮したマクロな温度場・応力場・ひずみ場予測、これらの要素技術開発について開発目標を達成した。これらの取り組みを通じて、マクロ温度場解析による境界条件抽出、流体解析、組織予測、応力ひずみ曲線予測の各結果を接続し、仮想実験により、造形条件から力学特性を推定するフレームを構築することができた。また、レーザ照射時の温度場解析を活用することで等軸晶-柱状晶遷移についてレーザ条件との相関を推定し、バルクNi基合金単結晶基材上あるいは純Ni単結晶造形材への、円柱形状Hastelloy Xの一方向凝固状組織および単結晶状組織を有する造形材作製に取り組んだ。適切なプロセス条件により、エピタキシャル成長によって、単結晶基材からの結晶方位を維持することができ、特に高エネルギー密度条件において、mmオーダーで高い結晶配向性を有する組織を得ることが出来た。この挙動については、セルラーオートマトン法を用いた組織形成予測技術を用いて定性的に説明することが可能となった。今後は、タービンブレードなど、具体的な航空機エンジン用実部材をターゲットとして、本プロジェクトで開発したマルチフィジックスシミュレーション技術を発展活用し、従来プロセスでは不可能な複雑形状と、部位毎に最適化した環境適合型組織を両立した3D造形による部材製造技術の確立に取り組む予定である。

7. 研究発表、知的財産権等の状況

(1) 研究発表等の状況

種別	件数
雑誌論文	7件
学会発表	17件
展示・講演	4件
雑誌・図書	6件
プレス	該当なし
その他	該当なし

(2) 知的財産権等の状況

該当なし

(3) その他特記事項

該当なし