

レーザ積層造形における結晶集合組織形成機構解明のための改良 CA 法によるシミュレーション

久保 順¹ 小泉雄一郎² 石本卓也² 中野貴由²

¹ 株式会社 CAPCAST

² 大阪大学大学院工学研究科マテリアル生産科学専攻

J. Japan Inst. Met. Mater. Vol. 85, No. 3 (2021), pp. 103-109

© 2021 The Japan Institute of Metals and Materials

Modified Cellular Automaton Simulation of Metal Additive Manufacturing

Jun Kubo¹, Yuichiro Koizumi², Takuya Ishimoto² and Takayoshi Nakano²

¹ CAPCAST Inc., Shimotsuke 329-0434

² Division of Materials and Manufacturing Science, Graduate School of Engineering, Osaka University, Suita 565-0871

Metal additive manufacturing (AM) technologies are attracting attentions not only as a forming process but also as microstructure controlling processes. In powder bed fusion (PBF) AM, crystal orientations can be controlled by scanning strategies of energy beam. To optimize microstructures, computer simulations for predicting microstructures play very important roles. In this work, we have developed simulation programs to explain the mechanism of the crystal orientation control. First, we simulated the shape of melt pool by analyzing the heat transfer using apparent heat conductivity when the penetration of laser beam through keyholes was taken into consideration because of the evaporation and accompanying convections. It was assumed that the primary crystal growth direction can be determined by the temperature gradient, and the crystals grow keeping the growth direction as generally recognized. The shapes of simulated melt pools agree well with experimental observations. The modified cellular automaton simulations successfully reproduced two typical textures with different preferential orientations along the building directions of $\langle 001 \rangle$ and $\langle 011 \rangle$ when the bidirectional scanning with and without a rotation of 90° was accomplished between the layers. [doi:10.2320/jinstmet.J2020028]

(Received June 30, 2020; Accepted November 27, 2020; Published January 18, 2021)

Keywords: additive manufacturing, simulation, melt pool, crystallographic texture

1. 緒 言

近年、金属積層造形法は様々な分野で応用が拡大しつつある。部材をボトムアップで付加的に形成することを大きな特徴とする金属積層造形法は、複雑形状を有する 3 次元構造物を作製する手段として高度に発達してきた。一方で近年、本手法が形状に加えて金属材料の材質、とりわけ結晶集合組織(結晶配向性)を制御する方法論としても極めて有用であることが明らかにされつつある¹⁻⁵⁾。結晶集合組織は、形状因子とは独立にヤング率や降伏応力といった力学特性を支配する主要な金属組織学的因子の 1 つであり、その自在な制御は金属製部材の高機能化に不可欠である。

一方で、計算機シミュレーションは、造形物の形状最適化(トポロジー最適化)⁶⁾、造形時のサポート形状や造形パターンの最適化⁷⁾、残留応力の予測⁸⁾、ポアの発生要因解明⁹⁾、造形物の形状に基づく機能性評価¹⁰⁾といった幅広い面でその重要性を増している。しかしながら、金属材料の機能に直結する結晶集合組織形成機構の理解や、その制御をターゲットとした計算機シミュレーションは確立されてはいない。その 1 つの大きな要因として、金属積層造形法が熱源の走査に伴い形成される微小な溶融池を単位とする、急速な溶融・凝固に

基づく手法であることが挙げられる。実機中での *in-situ* 観察・計測は極めて困難であるため、一般的に種々の物理現象や物理量を仮定してシミュレーションは実施される。

本研究では、bcc 構造を有する β 型チタン合金におけるレーザ積層造形法(Selective Laser Melting: SLM)に見出された、レーザスキャンストラテジー(積層ごとのレーザ走査方向の組合せ)に依存した結晶配向性形成挙動に着目し、セルラーオートマトン(Cellular Automaton)法を基盤としたシミュレーションを構築することでその形成機構を解明することを目的とした。現在行われている金属積層造形法の結晶集合組織のシミュレーションのほとんどが結晶の成長方向及び等軸晶や柱状晶といった結晶粒の形態の予測¹¹⁾を主眼としているのに対し、本研究では、従来の CA 法に改良を加えることで、集合組織の結晶方位を含む形成過程をより詳細に求めた。

2. SLM によるレーザスキャンストラテジーに依存した β 型チタン合金(Ti-15Mo-5Zr-3Al)の集合組織形成

Ti-15Mo-5Zr-3Al 合金(mass%)を用いた SLM 造形による結晶集合組織形成挙動¹⁾を Fig. 1 に示す。熱源であるレーザ

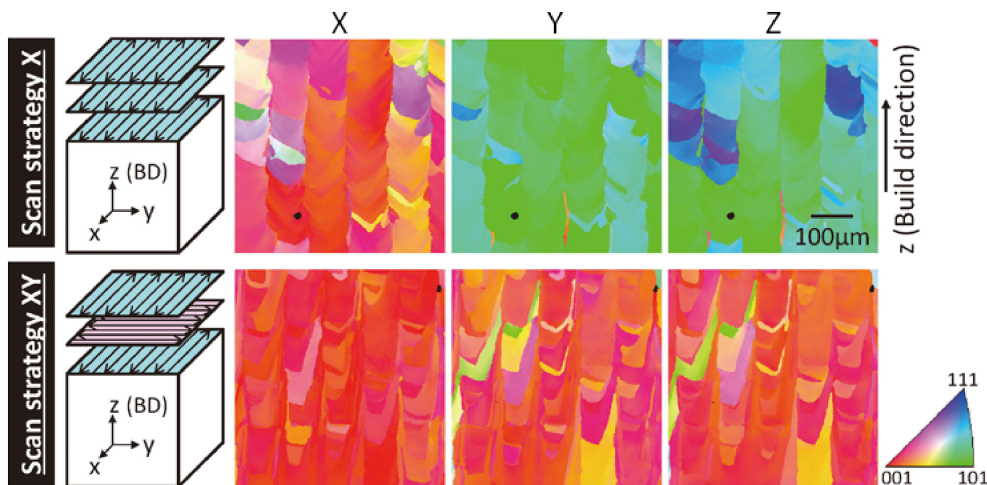


Fig. 1 Experimental inverse pole figure (IPF) maps¹⁾ on the vertical cross sections (y-z plane) of beta-type Ti-15Mo-5Zr-3Al alloy fabricated by SLM with Scan strategy X (without rotation) and Scan strategy XY (with 90° rotation) [after T. Ishimoto *et al.*¹⁾].

のスキャンストラテジーを変更するだけで、観察される結晶方位が顕著に異なっている。熱源をX軸方向にしか走査しない場合(スキャンストラテジーX)では、X(走査)方向に<100>、Y方向とZ(造形)方向に<110>が強く配向化した単結晶様の集合組織が形成された。一方で、層ごとに熱源の走査方向をX軸方向とY軸方向で交互に変えた場合(スキャンストラテジーXY)では、X方向、Y方向、Z方向の全てで<100>が配向化した。このように熱源の走査パターンの違いにより異なる結晶配向性が形成される要因について、シミュレーションを用いて検討した。

3. 解析方法

解析対象はTi-15Mo-5Zr-3Al合金を用いたパウダーベッド方式のSLM造形とした。解析では主に造形中の伝熱解析と結晶方位解析の2つについて計算を行った。

3.1 伝熱解析

伝熱解析は以下の式(1)に示す熱移動方程式を解いて温度分布の時間変化を求めた¹²⁾。その際、対流や蒸発といった式(1)では表現できない影響があると考えられるため、実験結果の溶融池形状と一致するように補正係数を調整した。

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \left(l \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + m \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + n \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) - \rho L \frac{df_L}{dt} \quad (1)$$

但し、各変数の意味は次のとおりである。c:比熱、ρ:密度、T:温度、t:時間、λ:熱伝導率、L:潜熱、f_L:液相率、l, m, n:伝熱の異方向性を考慮した補正係数。

Fig. 2に示すような造形部分 600μm×600μm×600μmの下に高さ3mmのベース部分を設けた直方体を、サイズ10μmのメッシュで分割した有限要素モデルを用いて解析を行った。本解析で用いた各パラメータをTable 1に示す。造形部分とその周囲の金属粉末間の境界条件である熱伝達係数については未知であるため、鑄造解析で一般的に使用している¹³⁾金属間の熱伝達係数より小さく、金属-空気間の熱伝達係数より大きい値(4188.0 W・m⁻²・K⁻¹)を用いた。また、温度

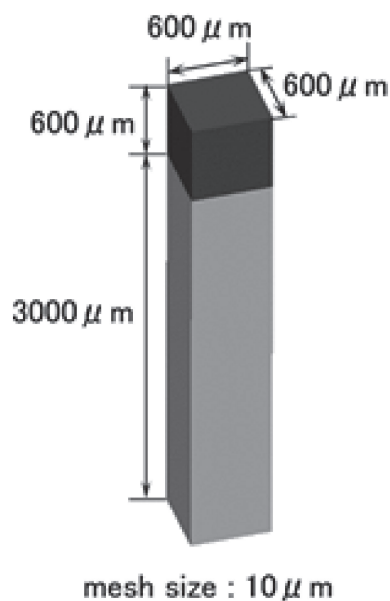


Fig. 2 FEM model for analysis.

分布変化の実測は、超急凝固である金属積層造形プロセスでは困難なため、解析結果の妥当性は造形中の溶融池形状を実験で得られた溶融池形状と比較することで確認した¹⁴⁾。

3.2 結晶方位解析

Fig. 1に示した通り、SLM造形ではレーザーの走査経路の違いにより得られる結晶方位が異なる場合がある。この理由を古典的な凝固理論を参考にして検討した。柱状晶と等軸晶が観察される一般的な凝固を考えると、結晶の成長はFig. 3の模式図^{15,16)}に示すように、凝固の初期には温度勾配の方向即ち等温面に垂直な方向に向かって進行する。このときチル晶のように微細なランダム方位の結晶から凝固が始まる場合であっても、優先成長方位(立方晶では<100>方位)が温度勾配方向に配向した結晶が優先して成長することが知られている。但し、温度勾配方向に優先成長方向が配向していても、その成長方向を軸とした回転による方位差を持った様々な結

晶方位の柱状晶が成長する．そして，凝固の進行に伴い温度勾配の方向が変化し，結晶の優先成長方向と温度勾配方向が異なった場合，凝固初期のように温度勾配方向に優先成長方位が配向した成長はしない．このとき，過冷度が小さく新しい結晶核が生成しない場合には，それまで優先配向していた結晶の成長がその結晶の成長にとって優位ではない温度勾配の下であっても継続することが広く知られている．これらを Fig. 1 の実験結果に適用して考えた．

N 層目のレーザーによる溶融池の最深部が N-2 層目まで届いているとすると Fig. 4 に示す模式図のような状態だと考えられる．Fig. 4 中の C 領域とパウダーの界面では未溶融部であるパウダー部から柱状晶が成長することはないため，界面

に新たな結晶核が生成されてそれが成長する．そして，その初期の成長方向は Fig. 3 のように温度勾配方向となる．このとき，対流の影響がなければ温度勾配方向は C 領域とパウダーの界面から垂直な方向となる．しかし，実際には Fig. 4 の図中に示したような対流が起こっているため，さらに傾いていると考えられる．本研究では式(1)の補正係数を Table 1 に示す値とすることで見かけの Z 方向熱伝導率を大きくして，この対流の影響を模擬している．また，金属積層造形においてはレーザー走査速度が凝固界面の移動速度に対して十分に大きい場合が多いため，凝固界面は走査方向にはほぼ平行となる．従って Fig. 4 の C 領域はスキャンストラテジー X とスキャンストラテジー XY のどちらであっても熱源の移動する方向 (Fig. 4 では X 方向) に $\langle 100 \rangle$ が配向し，その他の軸方向 (Fig. 4 では Y 方向と Z 方向) には $\langle 110 \rangle$ が配向すると考えられる．

スキャンストラテジー X の N+1 層目の模式図を Fig. 5(a) に示す．図中の C' 領域は Fig. 4 における C 領域と同一であ

Table 1 Parameters used for simulation.

Density	5010.0 [kg/m ³]
Specific heat	540.1 [J/kg.K]
Conductivity	7.496 [W/m.K]
Latent heat	389.4 [kJ/kg]
Liquidus temperature	1933.0 [K]
Solidus temperature	1843.0 [K]
Modification factor (l)	1.0
Modification factor (m)	1.0
Modification factor (n)	200.0
Input energy	360.0 [W]
Scanning speed	1200.0 [mm/s]
Scan pitch	0.1 [mm]
Thickness	0.06 [mm]
Time for supplying powder layer	1.0 [s]

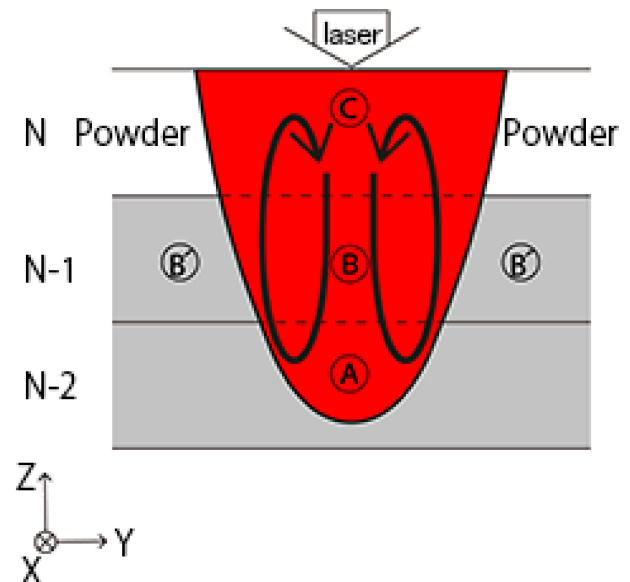
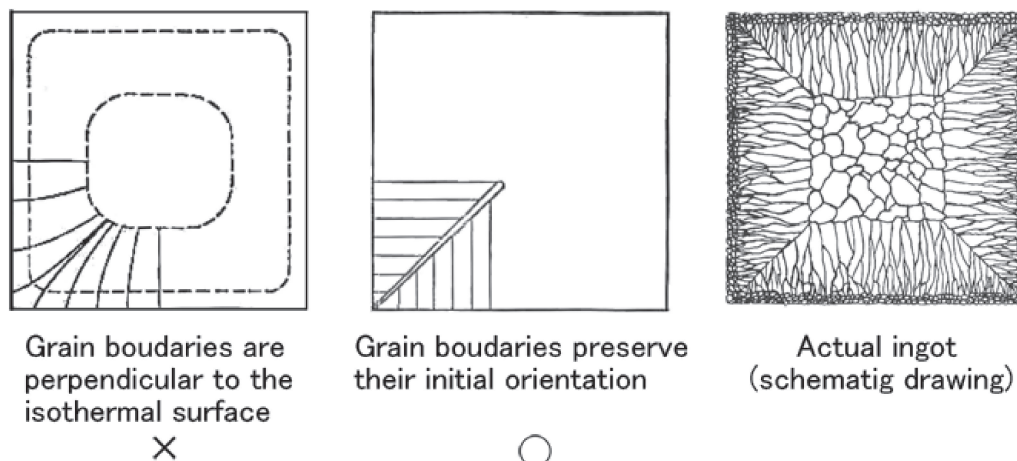


Fig. 4 Schematic illustrations of Nth layer melt pool.

Fig. 3 Schematic illustrations of crystal growth in casting [after Chalmers¹⁵⁾ and Flemings¹⁶⁾].

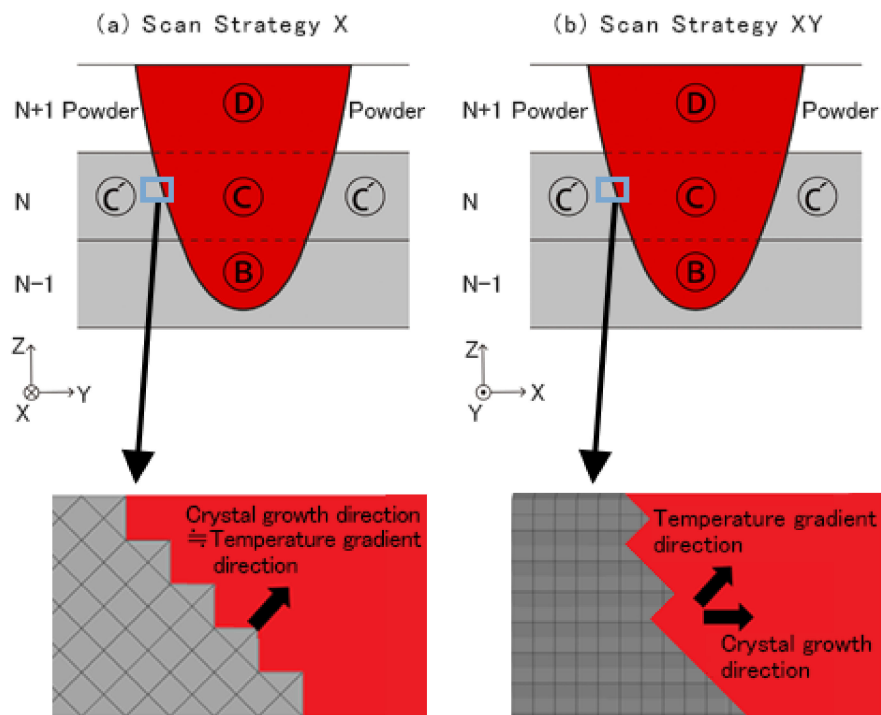


Fig. 5 Schematic illustrations of (N+1)th layer melt pool. (a) scan strategy X, (b) scan strategy XY.

り、X 軸方向に $\langle 100 \rangle$ 、Y 軸方向と Z 軸方向に $\langle 110 \rangle$ が配向している。C と C' 界面で新たな核が生成しなければ、前述の通りに C 領域では隣合う C' 領域の優先成長方向を引き継いで柱状晶が成長するため、C' 領域と同様に X 軸方向に $\langle 100 \rangle$ 、Y 軸方向と Z 軸方向に $\langle 110 \rangle$ が配向する (Fig. 5(a) 下)。このように積層されていくためスキャンストラテジー X ではどの層でも X 軸方向に $\langle 100 \rangle$ 、Y 軸方向と Z 軸方向に $\langle 110 \rangle$ が主に配向することとなる。

一方、スキャンストラテジー XY の N+1 層目の模式図を Fig. 5(b) に示す。スキャンストラテジー X の場合と同様に Fig. 5(b) の C' 領域は Fig. 4 における C 領域 (X 軸方向に $\langle 100 \rangle$ 、Y 軸方向と Z 軸方向に $\langle 110 \rangle$ が配向) を表す。また、C 領域と C' 領域の界面を拡大すると Fig. 5(b) 下のようにになると考えられる。このとき Fig. 5(b) は Fig. 5(a) と比較して Z 軸を中心として 90° 回転させたものであるため、溶融面と接する C' 領域の結晶方位は Fig. 5(a) とは異なっている。前述の通り、C 領域と C' 領域の界面において結晶核が生成しなければ、隣合う未溶融部 (C' 領域) の優先成長方向を引き継いで柱状晶が成長する。このとき優先成長方向 $\langle 100 \rangle$ は Fig. 5(b) の場合には X 軸方向と定まるが、 $\langle 100 \rangle$ 方向は正負を考えなければ $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ の 3 方向が存在し、そのうち 1 つが定まったのみであり残りの 2 方向は定まっていない。柱状晶の結晶成長において既存の優先成長方向が温度勾配方向よりも支配的であることは前述した通りだが、優先成長方向ではない残り 2 つの $\langle 100 \rangle$ 方向は温度勾配方向の影響を受けると仮定して以下のように考えた。スキャンストラテジー X のような温度勾配方向と優先成長方向がほぼ一致しているような場合は、温度勾配方向の影響は受けずに優先成長方向を軸とした回転は起こらないとした。それに対し

て、温度勾配方向と優先成長方向が大きく異なるスキャンストラテジー XY の場合は優先成長方向を軸とした回転が起これるとした。具体的には優先成長方向ベクトルと温度勾配方向ベクトルを含む平面を求め、その平面内で優先成長方向と垂直な方向を 2 つ目の $\langle 100 \rangle$ 方向とした。2 つの $\langle 100 \rangle$ 方向が定まれば残りの $\langle 100 \rangle$ 方向についても決定できる。

以上のような考え方にに基づきシミュレーションを実施した。シミュレーションではまず伝熱解析により各時間での温度を求めた。それぞれの要素が固相線温度を下回った時点で、その周囲に固相線温度以下の要素がなければそこに結晶核が発生し、その成長方向はその温度勾配方向とした。逆に固相線温度を下回ったとき、周囲に固相線温度以下の要素が他があれば、その成長方向を引き継ぐとした。このように隣の要素の状態からその要素の状態変化を逐次決定するといった、セルラーオートマトン (CA) 法的な考え方^{17,18)}を用いて結晶組織を時間発展させた。その際に熱源の移動方向に垂直な平面における温度勾配方向から結晶成長方向とは別の $\langle 100 \rangle$ 方向についても求めた。

4. 解析結果

4.1 伝熱解析

Fig. 6 にシミュレーションで得た溶融池の形状を実際の造形体にて観察された溶融線と比較して示す。およそその溶融池形状はスキャンストラテジー X とスキャンストラテジー XY とでそれぞれ造形体において観察された溶融線の形状と一致している。シミュレーションにおいて、熱源の移動方向に垂直な断面では U 字状の溶融池形状が認められる。これはスキャンストラテジー X の実験において全面に見られる鱗状

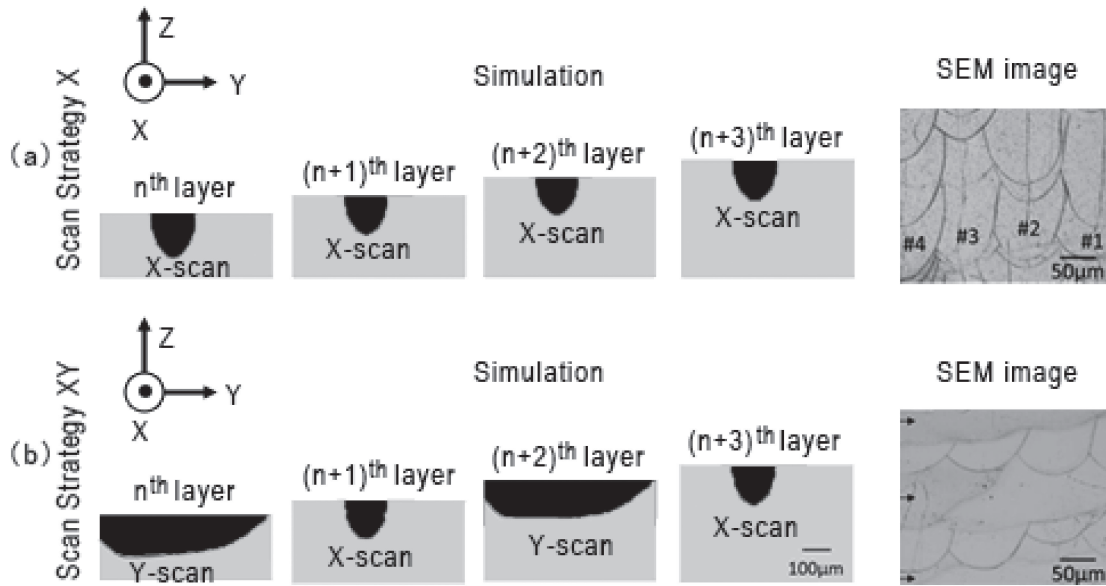


Fig. 6 Comparison between the geometries of simulated melt pools and fusion lines experimentally observed by SEM (after Ishimoto *et al.*¹⁾).

の模様(溶融線)の形状と対応している。スキャンストラテジー XY の場合は Z 軸方向に約 100 μm 間隔を空けて観察される下向きに凸の円弧状の溶融線と対応している。スキャンストラテジー XY の場合、Y スキャンにおいて走査方向に伸長した溶融池が形成されている。以上より、いずれのスキャンストラテジーの場合においても、実際の造形における溶融池形成の状況が再現できているといえる。

4.2 結晶方位分布

スキャンストラテジー X のシミュレーション結果を Fig. 7 と Fig. 8 に示す。Fig. 7 は最初の数層の結果であり、未溶融部のみを表示している。Fig. 8 にスキャンストラテジー X のシミュレーションで得られた方位マップ(下段)と実験にて取得された Inverse Pole Figure(IPF)マップ(上段)との比較を示す。シミュレーション結果では、各軸方向と $\langle 100 \rangle$ 方向との間の角度 ϕ の余弦($\cos \phi$)を左側に示すカラーバーに対応する色で表現している。 $\cos \phi$ の値が 1.0($\phi = 0^\circ$)であれば $\langle 100 \rangle$ 方位、 $1/\sqrt{2}$ ($\phi = 45^\circ$)であれば $\langle 110 \rangle$ 方位を表している。スキャンストラテジー X では X 方向は主に $\langle 100 \rangle$ 方位に配向し、Y 方向と Z 方向は主に $\langle 110 \rangle$ 方位に配向することが実験にて確認されており、これがシミュレーションでも概ね再現されている。Fig. 8 の上段に示した実験結果では X 方向と Z 方向の結果の一部に青あるいは紫の $\langle 111 \rangle$ 方位に近い結果が得られている。この理由として、実験ではこの部分の凝固界面が走査方向と平行ではなかったことが考えられるが、その原因は今後の検討が必要である。シミュレーションにおいてはレーザーの移動速度が十分に速く凝固界面が走査方向にほぼ平行であったため $\langle 111 \rangle$ 方位は配向しなかった。また、シミュレーションでは Y 方向と Z 方向が $\langle 100 \rangle$ 配向した結晶粒(Fig. 8 の下段中央及び右の赤い縦のライン)が伸びているが、これは溶融池の最深部から真っ直ぐ造形方向(Z 方向)に伸びており、溶融池の左右から伸びる Y 方向と Z 方向が $\langle 110 \rangle$ 配向した結晶粒と粒界を生じている。これは Fig. 6 に

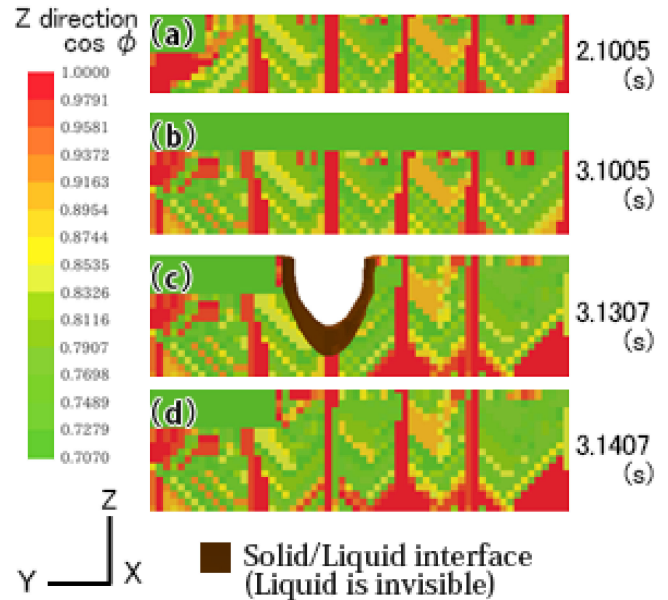


Fig. 7 Early stage analysis results of scan strategy X at (a) 2.1005 s, (b) 3.1005 s, (c) 3.1307 s, (d) 3.1407 s.

示した溶融池最深部の曲率半径が大きいため、溶融池中央部分で Z 軸方向に $\langle 100 \rangle$ 配向した結晶が成長したのと考えられる。もし溶融池の曲率半径が小さければ、凝固界面が Z 軸と垂直となる領域の幅は小さく、ここに Z 軸に $\langle 100 \rangle$ 配向した結晶が形成されたとしても、横からの Z 軸に $\langle 110 \rangle$ 配向した結晶の成長が優勢な場合には淘汰される^{4,19)}。このような結晶粒は、Fig. 8 の上段中央及び右に示した実験で得られた熱源の走査方向に対して垂直な面の IPF マップでも一部の赤い領域が縦に細長い結晶粒として造形方向である Z 方向に伸びているのが観察されている。このように結晶粒は溶融池の両側から成長し、溶融池の中心部で粒界を生じる。

一方、スキャンストラテジー XY のシミュレーション結果を Fig. 9 と Fig. 10 に示す。Fig. 9 は最初の数層の解析結果で

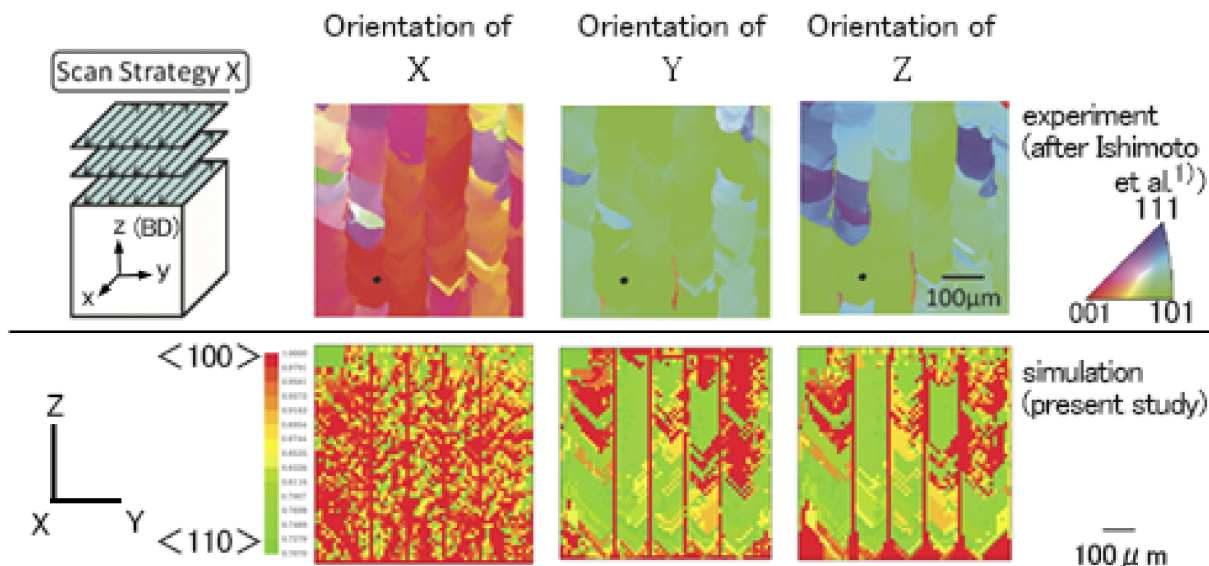


Fig. 8 Comparison of analysis results (lower side) with experimental results (upper side: after Ishimoto *et al.*¹⁾) of scan strategy X.

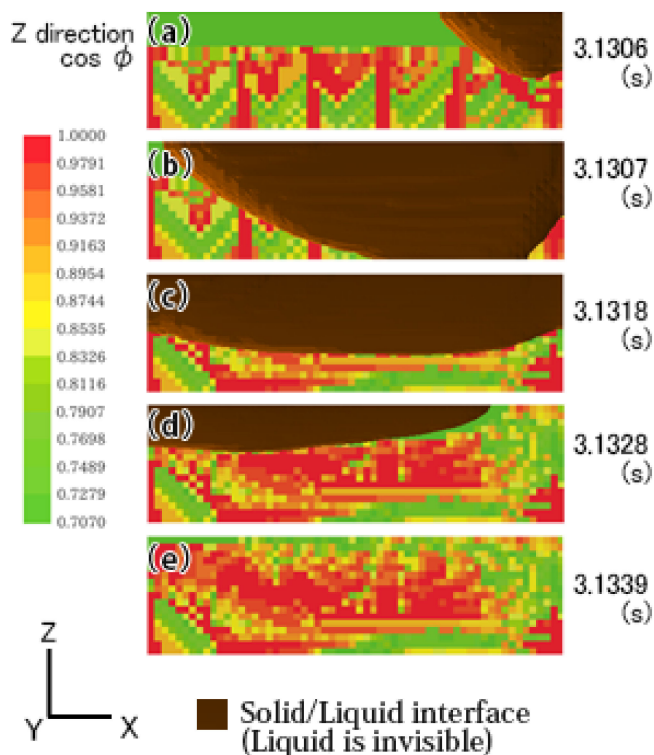


Fig. 9 Early stage analysis results of scan strategy XY at (a) 3.1306 s, (b) 3.1307 s, (c) 3.1318 s, (d) 3.1328 s, (e) 3.1339 s.

あり、液相部分は非表示とし、固相部分のみを結晶方位を表す色で示し、固液界面を茶色で表示している。液相部分を非表示としている3次元断面のため溶融池最深部を含む断面の奥にある固液界面も見えているが、茶色で表示した固液界面から溶融池形状がわかる。

Fig. 10 に最終的なスキャンストラテジー XY のシミュレーションで得られた方位マップと実験にて取得された IPF マップとの比較を示す。Fig. 9 では最初にスキャンストラテジー X と同様な Z 軸に $\langle 110 \rangle$ 配向した結晶が現れているが、その後その部分が再溶融して Z 軸に $\langle 100 \rangle$ 配向した結晶が

新たに形成されている。Fig. 10 に最終的に得られた結晶方位マップの結果を、実験で得られている結晶方位マップと比較して示す。X 軸方向、Y 軸方向、Z 軸方向共に $\langle 100 \rangle$ 配向している領域が多いことがわかる。最上部では $\langle 110 \rangle$ も確認されているが、これは Fig. 9 に示したような再溶解、再凝固が一番上の層では起こっていないためだと考えられる。また、Y 軸方向、Z 軸方向では左右(特に図の左側)においても $\langle 110 \rangle$ 領域が確認できる。これは粉体の物性値や溶融池との境界条件(熱伝達係数)がわからず正確な値でなかったためだと予想している。非常に高速かつ微細な領域での現象であるため、実測が困難であり、そのため計算の妥当性の確認は容易ではないが今後解析の精度を向上させるためには実現象の測定が課題になるだろう。

5. 結 言

立方晶系金属の SLM 造形において、スキャンストラテジー X とスキャンストラテジー XY という熱源の走査パターンの違いにより結晶方位分布に違いが生じるという実験事実のメカニズム解明を目的とした解析を行った。報告されている実験事実と古典的な凝固理論及び鋳物の凝固シミュレーション技術をベースにして、レーザ走査で形成される溶融池内の結晶成長過程をモデル化し、それをセルラーオートマトン法的に解くことでその特徴的な結晶方位分布を解析により再現した。金属積層造形は非常に高速かつ微細な領域での現象であるため、実現象を観察することは容易ではない。しかしながら計算の妥当性を検証するためには、より多くの実験結果を得ることが重要となる。今後は広い範囲の合金組成や造形条件の実験結果と解析結果を比較検討することにより、境界条件や物性値などのパラメータの精度を上げることによって計算の精度を上げることが求められる。

本研究は、日本学術振興会科学研究費補助金基盤研究(S)(JP18H05254)の支援を受けて実施された。

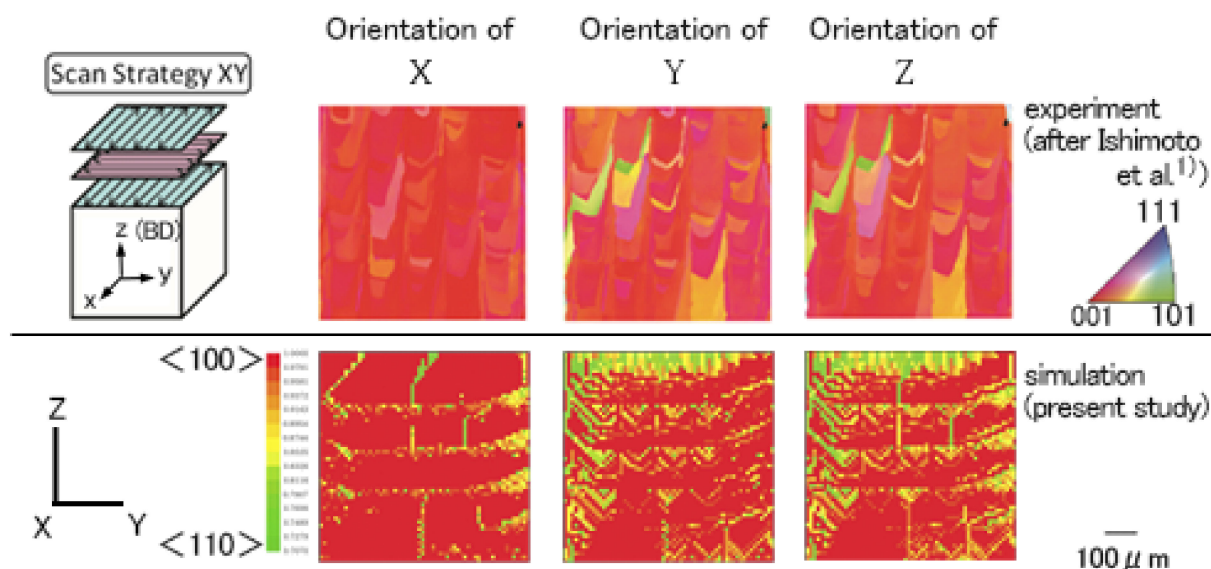


Fig. 10 Comparison of analysis results (lower side) with experimental results (upper side: after Ishimoto *et al.*¹¹⁾) of scan strategy XY.

文 献

- 1) T. Ishimoto, K. Hagihara, K. Hisamoto, S.-H. Sun and T. Nakano: *Scr. Mater.* **132** (2017) 34-38.
- 2) S.-H. Sun, K. Hagihara and T. Nakano: *Mater. Des.* **140** (2018) 307-316.
- 3) K. Hagihara, T. Nakano, M. Suzuki, T. Ishimoto, Suyalatu and S.-H. Sun: *J. Alloy. Compd.* **696** (2017) 67-72.
- 4) S.-H. Sun, T. Ishimoto, K. Hagihara, Y. Tsutsumi, T. Hanawa and T. Nakano: *Scr. Mater.* **159** (2019) 89-93.
- 5) T. Nagase, T. Hori, M. Todai, S.-H. Sun and T. Nakano: *Mater. Des.* **173** (2019) 107771.
- 6) Y. Saadlaoui, J.-L. Milan, J.-M. Rossi and P. Chabrand: *J. Manuf. Syst.* **43** (2017) 178-186.
- 7) M. Langelaar: *Struct. Multidiscipl. Optimizat.* **57** (2018) 1985-2004.
- 8) L. Parry, I.A. Ashcroft and R.D. Wildman: *Addit. Manuf.* **12** (2016) 1-15.
- 9) B. Cheng, L. Loeber, H. Willeck, U. Hartel and C. Tuffile: *J. Mater. Eng. Perform.* **28** (2019) 6565-6578.
- 10) T. Maconachie, M. Leary, B. Lozanovski, X. Zhang, M. Qian, O. Faruque and M. Brandt: *Mater. Des.* **183** (2019) 108137.
- 11) R. Shi, S. Khairallah, T.W. Heo, M. Rolchigo, J.T. McKeown and M.J. Matthews: *JOM* **71** (2019) 3640-3655.
- 12) K. Kubo and R.D. Pehlke: *Metall. Trans. B* **16** (1985) 359-366.
- 13) I. Ohnaka: *Computer dennetsu gyouko kaiseki nyumon*, (Maruzen, Tokyo, 1985) p. 339.
- 14) A. Klassen, T. Scharowsky and C. Körner: *J. Phys. D* **47** (2014) 275303.
- 15) B. Chalmers: *PRINCIPLES OF SOLIDIFICATION*, (John Wiley & Sons, Inc., New York, 1964) p. 263.
- 16) M.C. Flemings: *Solidification Processing*, (McGRAW-HILL BOOK COMPANY, New York, 1974) p. 135.
- 17) K. Kubo: *J. JFS* **83** (2011) 485-493.
- 18) K. Kubo: *J. JFS* **83** (2011) 533-538.
- 19) T. Ishimoto, S. Wu, Y. Ito, S.-H. Sun, H. Amano and T. Nakano: *ISIJ Int.* **60** (2020) 1758-1764.