

# Lattice Boltzmann Method を用いた三次元金属積層造形の溶融凝固解析

## Numerical Simulation for Powder-Bed-Fusion Process using Thermal Free-Surface Lattice Boltzmann Method

- 齊藤 弘樹, 株式会社 IHI, 〒 235-8501 神奈川県横浜市磯子区新中原町 1 番地, E-mail : saito8171@ihi-g.com  
 鈴木 康祐, 信州大工, 〒 380-8553 長野県長野市若里 4-17-1, E-mail : kosuzuki@shinshu-u.ac.jp  
 吉野 正人, 信州大工, 〒 380-8553 長野県長野市若里 4-17-1, E-mail : masato@shinshu-u.ac.jp
- Hiroki SAITO, IHI Corporation, 1, Shin-nakahara-cho, Isogo-ku, Yokohama 235-8501, Japan  
 Kosuke SUZUKI, Shinshu University, 4-17-1 Wakasato, Nagano 380-8553, Japan  
 Masato YOSHINO, Shinshu University, 4-17-1 Wakasato, Nagano 380-8553, Japan

Thermal Free-Surface Lattice Boltzmann Method developed by Körner is implemented as a 2D-simulation tool for the fusion process of metal powders irradiated by electron beam. Several physical phenomena involving in melt and solidification such as melted metal flow, wetting, phase transition, energy absorption and powder stacking are assembled, which enables us to investigate the relationship between product qualities and process parameters. In this study, the numerical results are compared with analytical, experimental and other numerical ones quantitatively in some validation scenarios. In addition, the simulations for the electron beam melting are performed and the wall qualities show the good agreements with the experiments. Consequently its effectiveness is demonstrated.

### 1. 緒言

三次元積層造形は、従来の加工方法では実現が難しかった複雑形状を作り出すことが可能であり、産業界で広く普及し始めている。その中でも、金属材料の積層造形は航空宇宙業界で既に適用されており、例えば、多数のパーツからなる燃料噴射ノズルを一体成形することで大幅なコスト削減が可能になっている。金属積層造形は粉末の供給方法や熱源の違いなどで様々な方式が提案されているが、本研究では金属粉末を敷き詰め、電子ビームで熱を加えて溶融結合させる Powder-Bed 方式かつ電子ビーム方式の金属積層造形 (EBM, Electron Beam Melting) を扱う。EBM はレーザー方式の積層造形などと比較して造形速度が速い、粉末の飛散を防止するための予熱プロセスによって熱変形を防ぐことができる、真空中で造形を行うため材料の酸化を防ぐことができるなどの特徴があるが、その一方で、一般的にレーザーよりも電子ビーム径が太く、使用する粉末が大きいために造形精度が低い、レーザー方式ほど適用可能な材料が多くないなどの課題が挙げられる。

EBM による造形物の表面粗さや空隙率などの造形精度は電子ビームの出力や直径、走査速度などのビーム条件、金属粉末の粒径分布や粉末層の体積率などの粉末条件によって決まる。これらを最適な条件に設定することで高精度な造形が可能になるが、ビーム条件や粉末条件が与える影響は十分に解明されていない。実験的にこれらの関係を明らかにするのは高コストであるため、数値解析的なアプローチが有効だと考えられる。金属の溶融凝固現象は粉末の積層、電子ビームのエネルギー吸収、エネルギーの移流拡散、相変化、溶融金属の流動、濡れなどの様々な物理現象が影響し合うため非常に複雑だが、これらを考慮した溶融凝固現象に対する数値解析的なアプローチとして Lattice Boltzmann Method (LBM) を用いた例がいくつか報告されている<sup>(1-3)</sup>。これらの研究では全て Körner et al.<sup>(4)</sup> によって提案された自由界面を追跡し、流体と熱を同時に解く Thermal Free-Surface Lattice Boltzmann Method (Thermal FSLBM) をベースにしている。

これまで飯田ら<sup>(5)</sup>によって同様の手法が実装され、いくつかの検証がなされたが、定量的な検証はまだ十分とは言えない。そこで本研究では、Thermal FSLBM を用いた 2 次元の溶融凝固解析手法を実装し、いくつかの検証問題について定量的な比較を行い、さらに EBM を模擬した解析を行うことで本手法の有効性を確認することを目的とした。

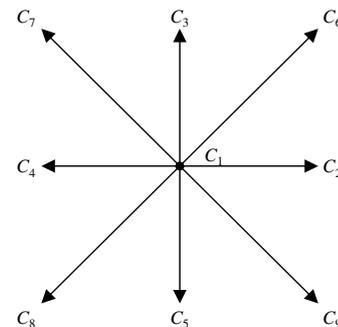


Fig. 1: D2Q9 model

### 2. 数値解析手法

溶融金属の流動や熱は Thermal FSLBM で解析可能だが、EBM を模擬した解析を行うためには、それに加えて粉末の積層、電子ビームのエネルギー吸収をモデル化する必要がある。本研究では、粉末の積層は 2 次元平面内の幾何学的な計算のみで再現し、電子ビームのエネルギー吸収は実験値に基づく定式化によってモデル化を行った。

#### 2.1 Thermal FSLBM

**2.1.1 Multi-Distribution Method** 一般的な LBM では、計算領域を一边  $\delta_x$  の正方格子で分割し、各格子点には速度  $\mathbf{c}_i$  を持つ仮想粒子があると考え、流体運動を仮想粒子の微視的な並進と衝突でモデル化する。ここで、2 次元 LBM 解析では Fig.1 に示すように仮想粒子の並進方向を格子点上に留まる 1 方向、格子点を中心とした上下左右 4 方向と斜め 4 方向の 9 方向に限定する D2Q9 モデル ( $i \in \{1, \dots, 9\}$ ) が良く用いられる。各格子点における流体密度  $\rho$ 、速度  $\mathbf{u}$  とエネルギー密度  $\varrho$  は速度分布関数  $f_i$  と  $h_i$  を用いて、以下のように与えられる。

$$\rho = \sum_i f_i, \quad \rho \mathbf{u} = \sum_i \mathbf{c}_i f_i, \quad \varrho = \sum_i h_i \quad (1)$$

エネルギー密度は以下の式で温度と結び付けられる。

$$\varrho = \int_0^T \rho c_p(T') dT' + \rho H(T) \quad (2)$$

式 (2) の第一項は顕熱、第二項は潜熱に関連する。合金は固相線温度  $T_S$  と液相線温度  $T_L$  の間で液相と固相が共

存するため、潜熱は  $T_S \sim T_L$  間を線形補間して決められる。

$$H(T) = \begin{cases} 0 & T \leq T_S \\ L(T - T_S)/(T_L - T_S) & T_S < T < T_L \\ L & T_L \leq T \end{cases} \quad (3)$$

ここで、 $L$  は潜熱（融解熱）である。熱的な挙動は流れの挙動に影響を及ぼさないと想定し、エネルギー密度は passive scalar として扱う。したがって、これらは連成せずに流れを解いた後に熱を解くため、速度分布関数の時間発展方程式は、

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t + \delta_t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{\delta_t}{\tau_f} (f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u})) + F_i \quad (4)$$

$$h_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t + \delta_t) = h_i(\mathbf{x}, t) - \frac{\delta_t}{\tau_h} (h_i(\mathbf{x}, t) - h_i^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u})) + E_i \quad (5)$$

となる。ここで、 $\mathbf{e}_i = \mathbf{c}_i \delta_t$ 、 $\delta_t$  は時間刻み幅、 $\tau_f$  と  $\tau_h$  は緩和時間と呼ばれる無次元パラメータ、 $f_i^{\text{eq}}$  と  $h_i^{\text{eq}}$  は局所平衡分布関数、 $F_i$  と  $E_i$  は外力項である。緩和時間は動粘度  $\nu$  と熱拡散率  $\alpha$  を用いて以下で表される。

$$\tau_f = \frac{\nu}{c_s^2} + \frac{1}{2} \delta_t, \quad \tau_h = \frac{\alpha}{c_s^2} + \frac{1}{2} \delta_t \quad \text{with } c_s^2 = \delta_x^2 / 3\delta_t^2 \quad (6)$$

ここで、 $c_s^2 = \delta_x^2 / 3\delta_t^2$  である。また、局所平衡分布関数は以下で与えられる。

$$f_i^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u}) = \omega_i \rho \left( 1 + \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right) \quad (7)$$

$$h_i^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u}) = \omega_i \rho \left( 1 + \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right) \quad (8)$$

式 (7), (8) の  $\omega_i$  は仮想粒子の並進方向に付与される重みであり、 $\omega_1 = 4/9, \omega_2, \dots, \omega_5 = 1/9, \omega_6, \dots, \omega_9 = 1/36$  である。

**2.1.2 自由界面の追跡** 自由界面を追跡するためには気液二相流を扱う必要があり、稲室<sup>(6)</sup>によって二相系 LBM の定式化が行われたものの、密度差が大きい場合は安定した計算が困難である。しかしながら、EBM は装置内が真空状態になるため、金属と雰囲気気体の密度差は  $10^8 \sim 10^9$  にも及び、雰囲気気が溶融金属の流体に与える影響はほとんど小さいと見なすことができる。Thermal FSLBM はこの点に着目し、各格子に気体 ( $C_g$ )、液体 ( $C_l$ )、固体 ( $C_s$ )、気液界面 ( $C_{li}$ )、固気界面 ( $C_{si}$ )、壁 ( $C_o$ ) の 6 つのセルタイプを付与し、気体セルと壁セルは流体の運動もエネルギー密度の移流拡散も解かない。Fig.2 はセルタイプの例である。LBM は隣合うセルの速度分布関数を用いて式 (4), (5) を計算するが、気体セルは速度分布関数を持たない。そのため、界面セルは気体セルと液体、固体セルが直接隣合わないよう配置され、界面セルには境界条件が適用される。自由界面の挙動を追跡するために、気液界面セルはセル内の質量  $m = \varphi \rho \delta_x^3$  を計算し、 $\varphi$  の値に応じてセルタイプを変更する。

$$\varphi(\mathbf{x}, t) = \frac{m(\mathbf{x}, t)}{\rho(\mathbf{x}, t) \delta_x^3}, \quad \begin{cases} \varphi = 0 & \rightarrow C_g \\ 0 < \varphi < 1 & \rightarrow C_{li} \\ \varphi = 1 & \rightarrow C_l \end{cases} \quad (9)$$

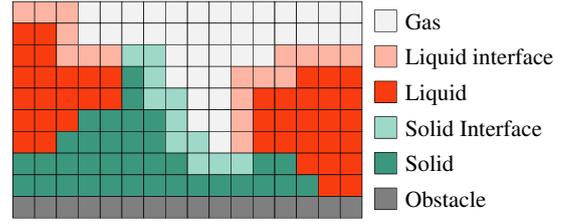


Fig. 2: Cell type for Thermal FSLBM (the original image in Markl<sup>(2)</sup>).

$m$  の時間変化量は界面において質量が保存されるように、隣接セルの速度分布関数との差分で計算する (簡略のために  $(\mathbf{x}, t)$  を  $(\mathbf{x})$  と表記)。

$$\Delta m_i(\mathbf{x}) = \begin{cases} f_i^{\text{out}}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i) - f_i^{\text{out}}(\mathbf{x}) & \mathbf{x} + \mathbf{e}_i \in C_l \\ \bar{\varphi} (f_i^{\text{out}}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i) - f_i^{\text{out}}(\mathbf{x})) & \mathbf{x} + \mathbf{e}_i \in C_{li} \\ 0 & \mathbf{x} + \mathbf{e}_i \in \text{otherwise} \end{cases} \quad (10)$$

with  $\bar{\varphi} = \frac{1}{2}(\varphi(\mathbf{x}) + \varphi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i))$

$\bar{i}$  は  $i$  と逆方向 ( $\mathbf{e}_{\bar{i}} = -\mathbf{e}_i$ ) を表し、 $f_i^{\text{out}}(\mathbf{x})$  は位置  $\mathbf{x}$  のセルから  $\mathbf{e}_i$  方向の隣接セルに並進する速度分布関数である。質量の時間発展は、時刻  $t$  の  $\Delta m_i(\mathbf{x}, t)$  を用いて、

$$m(\mathbf{x}, t + \delta_t) = m(\mathbf{x}, t) + \sum_{i=1}^9 \Delta m_i(\mathbf{x}, t) \quad (11)$$

となる。

**2.1.3 セルタイプの更新** 気液界面セルと流体、気体セル間のセルタイプの更新は式 (9) に基づいて行う。その際、Fig.2 に示したように流体セルと気体セルは隣接せず、間には気液界面セルが存在する必要がある。したがって、気液界面セルが流体セルになったときは隣接する気体セルを気液界面セルに変更する。逆のパターンも同様に処理する。また、溶融と凝固の相変化はエネルギー密度から式 (2) で得られる温度と相変化温度  $T_P$  を比較してセルタイプを変更する。Fig.3 は各セルタイプから別のセルタイプへの変化の模式図であり、実線は体積分率や温度に関するセルタイプの変化、破線は気体セルと流体、固体セルを隣接させないための変化である。実装上は 1 タイムステップ毎にセルタイプが繰り返し変化することを防ぐために、体積分率と温度の基準にマージン  $\epsilon_\varphi, \epsilon_T$  を設定する。また、気体セルが気液界面セルに変化した際は、密度、速度、エネルギー密度などの巨視量は周囲セルの平均値で初期化し、これらの値を用いて式 (7), (8) で速度分布関数を初期化する。

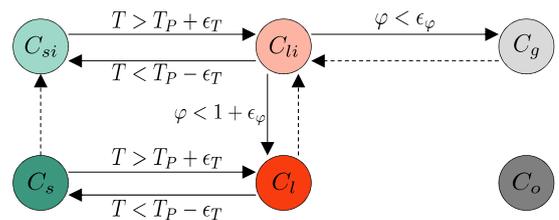


Fig. 3: Diagram of cell type conversions (the original image in Markl<sup>(2)</sup>).

**2.1.4 自由界面における境界条件** 式 (4), (5) は隣接セルの速度分布関数を用いるが, 気体セルは速度分布関数を持たないので, 以下の境界条件を適用する.

$$f_i(\mathbf{x}, t) = f_i^{\text{eq}}(\rho_g, \mathbf{u}) + f_i^{\text{eq}}(\rho_g, \mathbf{u}) - f_i(\mathbf{x}, t),$$

$$\forall \mathbf{x} \in C_{li} \wedge \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_i > 0 \quad (12)$$

$$h_i(\mathbf{x}, t) = h_i(\mathbf{x}, t), \quad \forall \mathbf{x} + \mathbf{e}_i \in C_g \quad (13)$$

ここで,  $\mathbf{n} = -\nabla\varphi/\|\nabla\varphi\|$  は界面の気体側を指す単位法線ベクトルである. 式 (12) は圧力境界条件, 式 (13) は断熱境界条件であり, 雰囲気圧力  $\rho_g$  は表面張力  $\sigma$  と曲率  $\kappa$  を用いて以下のように得られる.

$$P_g = \frac{1}{3}\rho_g - \kappa\sigma, \quad \text{with } P_g = \frac{1}{3} \quad (14)$$

**2.1.5 濡れ性** 濡れ性は溶融池の形状に大きく影響を与えるため重要な要素である. Attar et al.<sup>(1)</sup> は法線ベクトルや曲率の計算過程において, 固体, 固気界面, 壁セルの体積分率  $\varphi$  を接触角に対応した値で置き換えることで濡れ性を導入した.  $\varphi = 0$  で置き換えれば接触角  $0^\circ$ ,  $\varphi = 1$  で置き換えれば接触角  $180^\circ$  となる.

## 2.2 粉末の積層計算

Powder-Bed 方式は装置内のベースプレートが鉛直方向に下がり, そこにタンクから粉末が供給され, レーキによって余分な粉末を取り除き, 電子ビームが照射される. このプロセスを繰り返して対象物が造形されるが, 造形途中は溶融した金属が重力や表面張力などによって形状を変えながら流動し, 冷え固まるため, 複雑な表面形状の上に次の層の粉末が供給される. 数値解析では, DEM (Discrete Element Method) を用いることで Powder-Bed 方式の粉末供給を模擬でき, Markl<sup>(2)</sup> による 3 次元溶融凝固解析においても用いられている. DEM は粉末を自由に挙動できる円や球の要素でモデル化し, 要素同士の接触や滑動を考慮して, 粉末の挙動を逐次計算する手法だが, 計算する粉末の数が増えると計算負荷が大きくなる. 一方で, Meakin et al.<sup>(7)</sup> により提案された Rain model は粉末を一つずつ計算領域上方から落下させ, 接触と移動を繰り返しながら位置を確定させる手法である. 複数の粉末の挙動を同時に考慮できないが, 粉末位置は幾何学的な計算のみで計算できるので負荷が小さいメリットがある. Rain model は Attar<sup>(1)</sup> による 2 次元溶融凝固解析でも用いられており, 本研究でもこれを採用した.

EBM ではベースプレートが下がった分だけ粉末が充填されるため, Rain model で粉末配置を確定した後で余分な粉末を取り除く必要がある. ここでは, 層厚さを  $10 \mu\text{m}$  もしくは直径の 20% 以上オーバーしている粉末を取り除くこととした. また, EBM で充填される粉末の体積率は  $\phi = 50 \sim 60\%$ <sup>(2)</sup> となることがわかっている. 体積率はランダムに粉末を取り除くことで調整可能である.

層厚さ  $l = 400 \mu\text{m}$ , 体積率  $\phi = 0.55$  で計算した例を Fig.4 に示す. Fig.4 の左図は Rain model の計算後の粉末配置, 右図は層厚さと体積率の調整を行った後の粉末配置である. 様々なサイズの粉末があってもオーバーラップせずに適切に配置されており, 体積率は設定値に調整されていることがわかる. 任意形状の上に粉末を配置させる場合は, Rain model の計算前に表層の位置に直径  $d_x$  のダミー粉末を配置すれば良い.

## 2.3 電子ビームのエネルギー吸収

金属粉末の溶融凝固によって形成される溶融池の形状は電子ビームから供給されるエネルギーが材料にどれだけ蓄積されるかが重要な要素である. したがって, 金属粉末のエネルギー吸収量を正確にモデル化することが重要となる. Monte Carlo シミュレーションは個々の電子軌道を計算するため, 高精度な計算が期待できるが, 一度に大量の電子軌道を計算する必要があり, 負荷が高い.

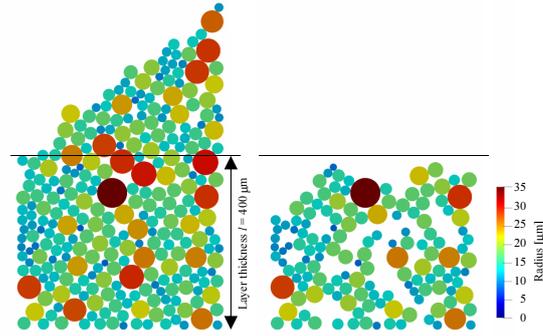


Fig. 4: Example of simulation for Powder-Bed using Rain model(left,  $l = 400 \mu\text{m}$ ,  $\phi = 0.55$ ) and the adjusted configuration by removing extra powders. The final volume fraction is 0.55.

EBM のように溶融池の表面形状が時々刻々と変化する場合には, その都度電子ビームからのエネルギー吸収を計算する必要があるため Monte Carlo シミュレーションは適していない. そこで, 本研究では Klassen et al.<sup>(8)</sup> による半経験式に基づくモデル化を採用した. このモデルでは, 式 (5) の外力項  $E_i$  が以下のように与えられる.

$$E_i = \omega_i E_{\text{beam}} \cdot \mathcal{H}(x, y, t) \cdot \mathcal{V}(z) \quad (15)$$

ここで,  $E_{\text{beam}} = U \cdot I \cdot \delta_t$  は  $\delta_t$  間に電子ビームから供給される総エネルギー [J] であり,  $U = E_0/e$  は加速電圧 [kV],  $E_0$  は電子の運動エネルギー [keV],  $e$  は電気素量 [C],  $I$  は電流 [A] であり,  $x, y$  は照射平面内の座標,  $z$  は照射表面からの深さを表す. また,  $\mathcal{H}$  は電子ビーム照射平面内のエネルギー分布 [ $1/\text{m}^2$ ],  $\mathcal{V}$  は照射面からの深さ方向のエネルギー分布 [ $1/\text{m}$ ] である.

**2.3.1 平面内のエネルギー分布** 照射平面内のエネルギー分布にはガウス分布が良く用いられ, 中心から離れるほど投入エネルギーは小さくなる. 走査速度  $\mathbf{v} = (v_x, v_y)$  で電子ビームが走査する場合, 位置  $\mathbf{x} = (x, y)$  における  $\mathcal{H}$  は時刻  $t$  における位置電子ビームの中心位置  $\mathbf{x}_b(t) = (x_0 + v_x t, y_0 + v_y t)$  に対して以下のように表される.

$$\mathcal{H}(x, y, t) = \frac{1}{2\pi\sigma_b^2} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma_b^2} \sum_{i=0}^1 (x_i - x_{b,i}(t))^2\right] \quad (16)$$

ここで,  $x_0, y_0$  は電子ビームの初期位置,  $\sigma_b$  はガウス分布の標準偏差であり, 電子ビーム直径は  $w = 4\sigma_b$  で与えられる.

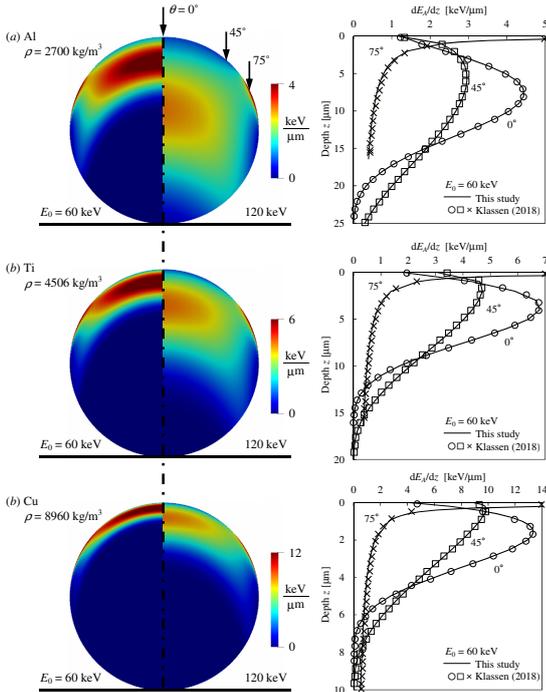
**2.3.2 深さ方向のエネルギー分布** Klassen et al.<sup>(8)</sup> は様々な材料の平板へ様々な角度で電子ビームを照射した際の実験データから電子の反射率と透過率の半経験式を構築し, これらを用いて吸収される電子のエネルギーの深さ方向の累積分布  $\mathcal{E}_A = E_A/E_0$  を以下のように得た.

$$\mathcal{E}_a(z, Z, E_0, \theta) = (1 - \eta_B \cdot \mathcal{E}_B) \cdot (1 - \eta_T \cdot \mathcal{E}_T) \quad (17)$$

$Z$  は材料の原子番号,  $\theta$  は照射角度である. また,  $\eta_B$  と  $\eta_T$  は電子の反射率と透過率,  $\mathcal{E}_B$  と  $\mathcal{E}_T$  は反射電子, 透過電子のエネルギーであり, これらの定式化は Klassen et al.<sup>(8)</sup> や Klassen<sup>(9)</sup> に詳しい.

$\mathcal{E}_A$  は吸収エネルギーの累積分布を表すので, 深さ  $z$  における分布は差分で得られる.

$$\mathcal{V}(z) = \frac{\mathcal{E}_A(z'_{i+1}, Z, E_0, \theta) - \mathcal{E}_A(z'_i, Z, E_0, \theta)}{\varphi \cdot \Delta z} \quad (18)$$



**Fig. 5:** Energy absorption in depth direction. Aluminium, titanium and copper powders are irradiated with 60 keV and 120 keV electrons. The absorption profiles for the angle of incidence is 0°, 45° or 75° (solid lines) are compared with Klassen's results<sup>(9)</sup> (points).

$z'_i = z \cos \theta$  は表面に対して角度  $\theta$  で電子ビームが入射したときの表面垂直方向の深さであり、 $z'_{i+1} = (z + \epsilon \cdot \delta_x) \cos \theta$  は LBM のセル一つ分深い位置を表す。

**2.3.3 金属粉末内のエネルギー分布** Fig.5 に直径 60  $\mu\text{m}$  の Al, Ti, Cu 粉末に対して、 $\mathcal{H} = 1$  とした電子ビームを照射した際の  $\nu$  の分布を示す。Fig.5 の左図は  $E_0 = 60, 120 \text{ keV}$  の 2 条件それぞれに対応したエネルギー分布、右図は照射角度  $\theta = 0^\circ, 45^\circ, 75^\circ$  の位置における深さ方向のプロファイルである。右図では Klassen<sup>(9)</sup> による同様の計算結果と比較しており、良く一致していることが確認できる。また、エネルギー分布のピーク位置は材料密度が低く、 $E_0$  が大きいほど深くなる性質がある。これは材料密度が高いほど電子の進路が阻害されて深くまで透過できなくなり、 $E_0$  が大きいほど電子が加速され深くまで透過するためである。左図に着目するとこの性質が良く表れていることがわかる。

### 3. 結果・考察

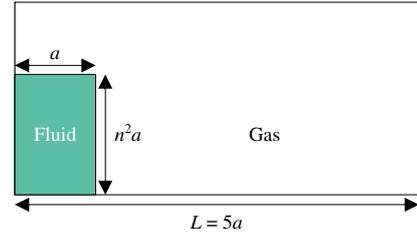
金属の溶融凝固現象において重要な物理現象に着目したいくつかの計算を行い、Thermal FSLBM の妥当性の検証を行った。また、EBM を模擬した解析を行うことで、本手法を用いて数値解析的に造形精度とプロセスパラメータの関係を調べることの有効性を確認した。

#### 3.1 ダムブレイク

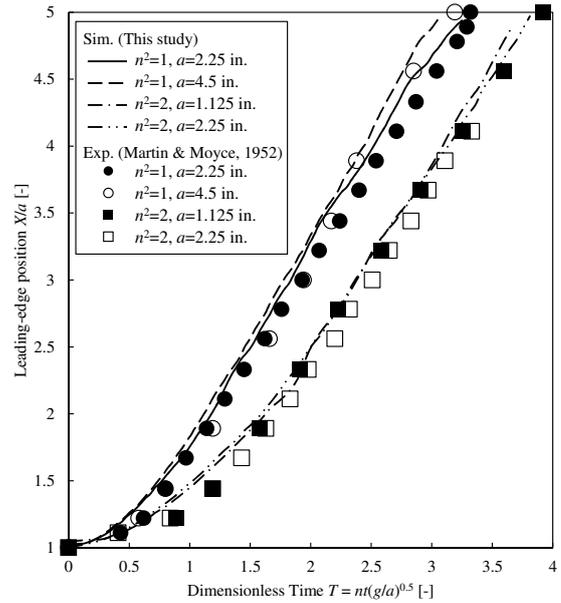
自由界面の追跡について検証を行うためにダムブレイク解析を行い、実験値との比較を行った。Fig.6 に初期条件における解析領域を示す。解析領域左下に幅  $a$ 、高さ  $n^2 a$  の長方形の液相を配置する。この液相は重力によって崩壊し、自由界面が変動しながら流動する。液相は密度  $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$ 、動粘度  $\nu = 1.0 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ 、表面張力  $\sigma = 72.75 \times 10^{-3} \text{ N} \cdot \text{m}$ 、重力  $g = 9.81 \text{ m/s}^2$  とし、 $\delta_x = 10 \mu\text{m}$ 、 $\delta_t = 2 \mu\text{s}$  で計算を行った。

Fig.7 に時刻  $t$  における液相の先端位置を Martin et al.<sup>(10)</sup> による実験と比較した結果を示す。液相のアスペクト比  $n^2 = 1, 2$  について、幅  $a$  を変化させた計 4 条件

の比較を行ったが、どの条件でも実験結果と良く一致していることが確認できる。



**Fig. 6:** Schematic image of dam break problem.



**Fig. 7:** Comparison of numerical and experimental solution of the dam break problem.

#### 3.2 濡れ性

濡れ性について検証を行うために、微小液滴の落下計算を行い、解析値との比較を行った。液滴が壁面上に落下し、重力、濡れ性と表面張力が平衡状態に達した後の形状は接触角によって支配される。Fig.8 は平衡状態時の液滴形状を示しており、接触角  $\theta$ 、初期状態で半径  $R$  の液滴の平衡状態時の高さ  $h$  は、

$$h = R(1 - \cos \theta) \sqrt{\frac{\pi}{(\theta - \sin \theta \cos \theta)}} \quad (19)$$

となる。それぞれ半径  $R = 120, 240, 12 \mu\text{m}$  の水、鉱油、水銀の液滴について、接触角  $\theta = 30^\circ \sim 150^\circ$  まで変化させ、Tab.1 に示す条件で計算を行った。

Tab.2 に計算結果と式 (19) との相対誤差を示す。接触角  $\theta = 90^\circ$  付近が比較的精度が高く、 $\theta = 30^\circ, 150^\circ$  に近づくほど誤差が大きくなる傾向にあり、接触角が小さい方が誤差が大きい。本手法における濡れ性は法線や曲率の計算過程において固体、固気界面、壁セルにおける体積率を接触角に対応した値で置き換えることで実現する。曲率の計算は壁面に隣接する気液界面で行われるが、気液界面は液相と気相の生成に付随して、これらが隣接しないように生成される。したがって、Fig.9 に示すように接触角が小さい場合は気液界面が実際の形状を模擬できず、接触角が実際よりも大きく評価されるため、結果として液滴高さが過大評価される傾向にある。これは界面の先端位置が壁と接していないときに人工的に気液界面セルを生成することで改善することができる<sup>(11)</sup>。

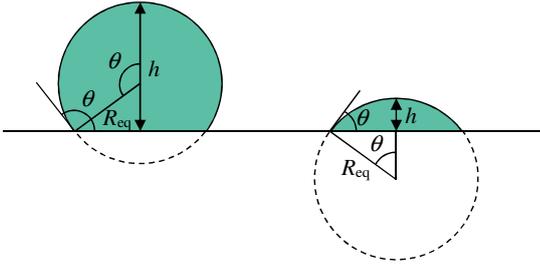


Fig. 8: Shapes of equilibrium droplet on flat plate.

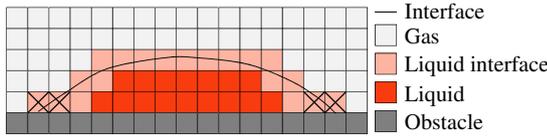


Fig. 9: Artificial gas-liquid interface for small contact angle. Artificial interface cells(liquid interface with cross mark) are generated if the front edge of real interface doesn't touches on wall cells (the original image in Stefan<sup>(11)</sup>).

Tab. 1: Calculation properties for wetting problem

Property	Unit	Water	Oil	Mercury
Radius	$\mu\text{m}$	120	240	12
Density	$\text{kg}/\text{m}^3$	1000	800	13600
Kinetic viscosity	$\text{mm}^2/\text{s}$	1.0	19.1	0.11
Surface tension	$\text{mN}/\text{m}$	72.75	29.4	476.0
$\delta_x$	$\mu\text{m}$	10	20	1
$\delta_t$	$\mu\text{s}$	0.341	1.48	0.1

Tab. 2: Relative errors between numerical and analytical results with different liquids for contact angles  $30^\circ < \theta < 150^\circ$ .

Contact angle [ $^\circ$ ]	Water	Oil	Mercury
30	21.46 %	42.60 %	21.46%
40	23.06 %	32.18 %	14.72%
50	17.59 %	17.69 %	17.81%
60	7.03 %	14.22 %	14.22%
70	5.10 %	11.87 %	5.10%
80	3.93 %	3.91 %	3.91%
90	3.16 %	3.12 %	3.13%
100	2.83 %	2.68 %	2.82%
110	2.97 %	2.95 %	2.97%
120	2.83 %	2.79 %	2.79%
130	2.44 %	2.50 %	2.51%
140	6.19 %	6.16 %	5.79%
150	5.18 %	9.06 %	5.02%

### 3.3 非定常熱伝導

一次元の非定常熱伝導問題を解き、エネルギーの移流拡散方程式の検証を行う。Fig.10に示すように、長さ  $L$  の計算領域の一部を初期温度  $T_0 = 2000 \text{ K}$  の液相で満たし、 $x = 0$  の境界を  $T_{x=0} = 3000 \text{ K}$  の等温境界、それ

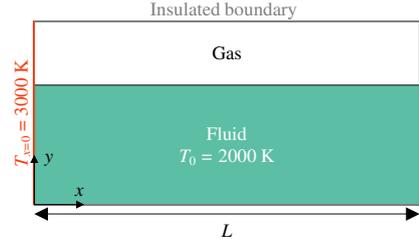


Fig. 10: Sketch of validation scenario of energy equation.

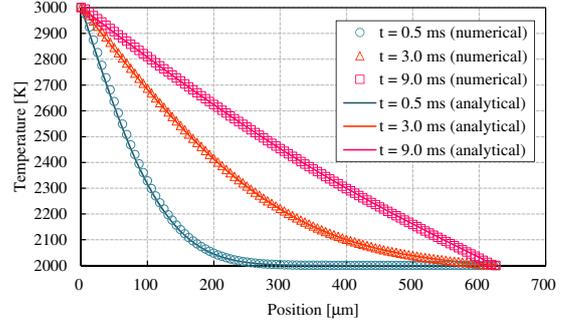


Fig. 11: Comparison of numerical and analytical solutions of temperature distribution in non-stable heat conduction problem at three different times.

以外を断熱境界とし、気液界面にも断熱境界を設定した。この時、時刻  $t$ 、位置  $x$  における温度は以下の式で表される。

$$T(x, t) = \frac{2\Delta T}{x} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \sin\left(n\pi \frac{x}{L}\right) \exp\left(-\alpha n^2 \pi^2 \frac{t}{L^2}\right) + \frac{\Delta T}{L} x + T_0 \quad (20)$$

ここで、 $\Delta T = T_{x=0} - T_0$ 、 $\alpha$  は熱拡散率である。

Fig.11に  $L = 625 \mu\text{m}$ 、 $\alpha = 9.93 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$  とした場合の  $t = 0.5, 3.0, 9.0 \text{ ms}$  における温度分布について、計算結果と式(20)との比較を示す。全ての条件において解析解と良く一致しており、エネルギーの移流拡散は正しく計算できていることが確認できる。

### 3.4 相変化

次に固相から液相に変化する場合など二相間の境界位置の時間変化を扱うステファン問題を計算し、解析値と比較することで相変化の検証を行う。計算領域全体が固相の純金属で満たされているとし、初期温度を融点温度に設定する。境界の一つを融点以上の温度の等温境界とし、残りの境界を断熱境界とすると、等温境界から熱が供給され、潜熱分のエネルギーが蓄えられると液相に変化し、相変化点は次第に等温境界から遠ざかるように移動する。この時、相変化点は  $h(t)$  の解析解は以下のようになる<sup>(12)</sup>。

$$h(t) = 2\lambda\sqrt{\alpha t} \quad (21)$$

$$\lambda \exp(\lambda^2) \text{erf}(\lambda) = St/\sqrt{\pi}$$

ここで  $St$  は系を支配する無次元パラメータのステファン数である。

$$St = \frac{c_p \cdot (T - T_m)}{L} \quad (22)$$

$c_p$  は比熱、 $T$  は境界温度、 $T_m$  は融点温度、 $L$  は潜熱を表す。本計算では、液相と固相で物性値は変化しないとし、 $\rho = 4000 \text{ kg}/\text{m}^3$ 、 $c_p = 700 \text{ J}/(\text{kgK})$ 、 $L = 290000 \text{ J}/\text{kg}$ 、

$T_m = 1900 \text{ K}$  とし,  $T = 1965 \text{ K}$  の境界条件を与えた.  $St = 0.157$  で一定とし,  $\alpha = 3 \times 10^{-7}$ ,  $3 \times 10^{-6}$ ,  $7 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$  の三条件で計算を行った. なお, 計算は  $t_{\max} = 18 \text{ ms}$  まで行い, 計算領域は熱拡散距離の 2 倍である  $4\sqrt{\alpha t_{\max}}$  より長く設定した.

Fig.12 に計算結果と式 (21) との比較を示す. どの条件においても解析解と良く一致しており, 相変化が正しく計算されていることが確認できる.

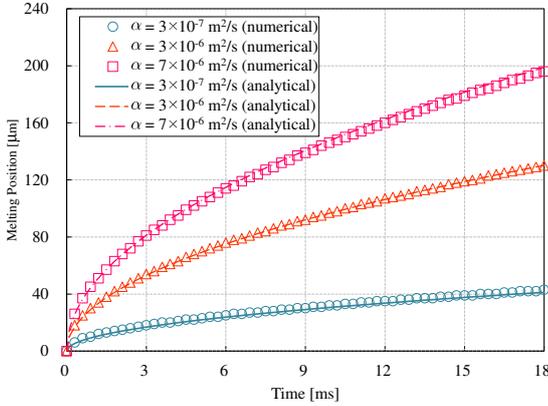


Fig. 12: Comparison of numerical and analytical solutions of the Stefan problem for three different thermal diffusivities.

### 3.5 金属プレートへのワンパス解析

次に, 金属プレートに対して電子ビームを一度だけ走査した際の溶融池の深さと高さを既存の解析結果, 実験結果と比較する. 計算条件は比較対象である Markl<sup>(2)</sup> に合わせた. Fig.13 に示す  $2.7 \text{ mm} \times 1.05 \text{ mm}$  の計算領域に, 一般的に EBM で用いられる Ti-6Al-4V の金属プレートを高さ  $1 \text{ mm}$  で配置し, 直径  $w = 4\sigma_b = 400 \mu\text{m}$ , 出力  $P = 300 \text{ W}$  の電子ビームを計算領域奥行き方向に走査した. Tab.3 に物性値を示す. なお, 熱伝導率  $\lambda$  は温度依存性を考慮して以下を用いた.

$$\lambda(T) = \begin{cases} -0.32 + 0.0146T & T \leq T_S \\ -6.66 + 0.0183T & T \geq T_L \\ \frac{\lambda(T_L) - \lambda(T_S)}{T_L - T_S}(T - T_S) + \lambda(T_S) & \text{else} \end{cases} \quad (23)$$

各境界には造形中の平均的な温度である  $873 \text{ K}$  の等温境界条件とし, 計算開始時に予熱処理を模擬するために  $1000 \text{ K}$  の初期温度を与えた.

Fig.14 に走査速度を変化させた場合の溶融池サイズについて, Markl による 3 次元解析の結果と実験結果との比較を示す. この結果から, 走査速度が速くなれば電子ビームから供給される熱流束が小さくなるため溶融池のサイズが小さくなる一般的な傾向を良く捉えられていることがわかる. また, 実験値の誤差範囲内に収まっていることから, 本計算手法が溶融凝固現象を精度良く計算可能であることが確認できた. 3 次元解析との差異がみられるが, これは 3 次元解析では奥行き方向の熱伝導も考慮できることに起因し, 奥行き方向の熱伝導で供給されるエネルギー分だけ溶融する範囲が広がると考えられる. これは Fig.14 において 3 次元解析の方が溶融池サイズが大きくなる結果として表れている.

### 3.6 EBM 解析

最後に実際の EBM による造形を模擬した解析を行い, 既存の解析結果, 実験結果と比較する. ここでの比較対象は Körner et al.<sup>(13)</sup> による 2 次元解析と実験結果である. ワンパス解析と同様に Ti-6Al-4V を用いたが, 物性値は Körner et al. に合わせて Tab.4 のように設定し, 各境界は  $937 \text{ K}$  の等温境界とした. 解析では, 層厚さ  $l = 70 \mu\text{m}$

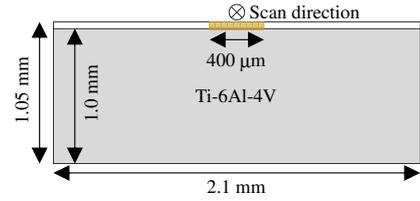


Fig. 13: Calculation domain for single line melting.

Tab. 3: Material properties of Ti-6Al-4V for single line melting simulation.

Property	Unit	Value
Atomic number	—	21.5
Density	$\text{kg}/\text{m}^3$	4420
Kinetic viscosity	$\text{mm}^2/\text{s}$	1.13
Surface tension	$\text{N}/\text{m}$	1.52
Wetting angle	$^\circ$	60
Liquidus temperature	K	1928
Solidus temperature	K	1878
Specific heat capacity at $T_L$	$\text{J}/(\text{kgK})$	1126
Specific heat capacity at $T_S$	$\text{J}/(\text{kgK})$	700
Latent heat	$\text{J}/\text{kg}$	290000

で粉末配置, 予熱処理として  $1023 \text{ K}$  に初期温度を設定, 電子ビームによる溶融凝固計算, 溶融金属が完全に凝固するまで計算を継続までを 1 サイクルとして計 27 サイクルの計算を行った. また, 直径  $w = 4\sigma_b = 350 \mu\text{m}$  の電子ビームを奥行き方向に走査し, 単位長さ当たりのエネルギーを表す線エネルギー  $E_L = P/v_y = 1.0, 2.0 \text{ J}/\text{mm}$  の 2 条件に関して造形物の幅を比較した.

Fig.15 は実験で得られた造形物の断面と複数の粉末配置に対する解析結果を示したものである. 線エネルギーの各条件において, 実験と定性的に良く一致した形状が得られていることが確認できる. Fig.16 は各線エネルギーの条件について, 走査速度と造形物の幅を比較した結果である. この結果から, 線エネルギーが大きい方が造形物の幅が広くなり, 線エネルギーが同じであれば, 走査速度が異なっても造形物の幅は同程度になる一般的な傾向が捉えられていることがわかる. また, Körner et al. による解析結果と良く一致しており, 実験結果との比較では誤差範囲に収まっていることが確認できる. 解析結果とのわずかな差異は粉末配置の違いの他, Körner et al. では本手法よりも簡易な電子ビームモデルを使用していることなどが原因として挙げられる. この比較によって, Thermal FSLBM が正しく実装されており, EBM の溶融凝固現象を模擬した解析が可能であることが確認された.

### 4. 結言

EBM の適切な造形条件を得るための数値解析的アプローチとして Thermal FSLBM を実装し, 様々な定量的な検証を行い, その有効性を確認した. しかしながら, ここまでの検証で接触角が小さい場合の対応や 3 次元解析への拡張が必要であることが示されており, 加えて現段階では蒸発の影響を考慮できておらず, 計算手法に改善の余地がある. 蒸発は Klassen<sup>(9)</sup> によって, 蒸発による潜熱に相当するエネルギーを除き, 蒸発圧を気液界面の境界条件として付与する手法が考案されており, 比較的容易に実装が可能である. 今後はこれらの改善に加えて, 本手法を用いて走査速度やビーム径, 電子ビーム間のオフセット距離などの電子ビーム条件, 粉末径分布や体積率などの粉末条件が造形精度に及ぼす影響を調査する.

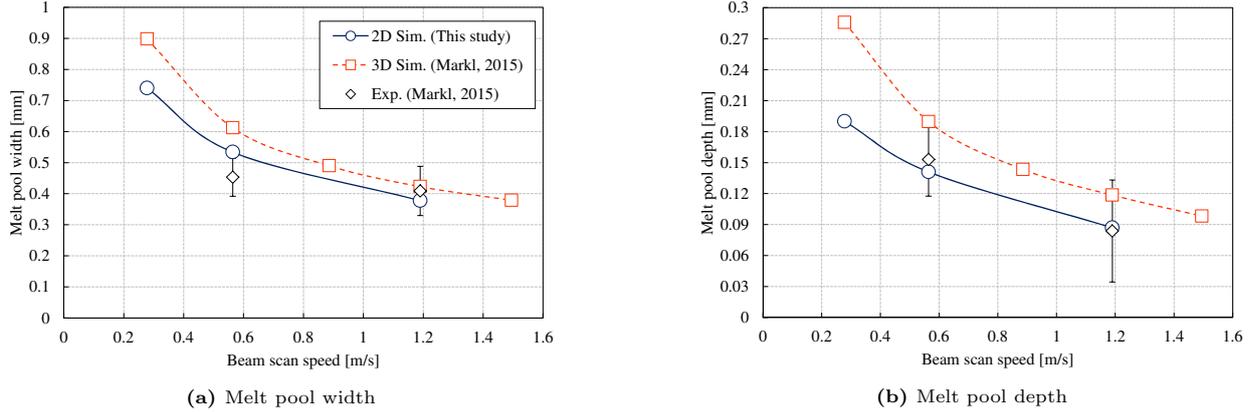


Fig. 14: Comparison of numerical and experimental melt pool size for different beam scan speed. Error bars indicate the standard deviations of the experimental results.

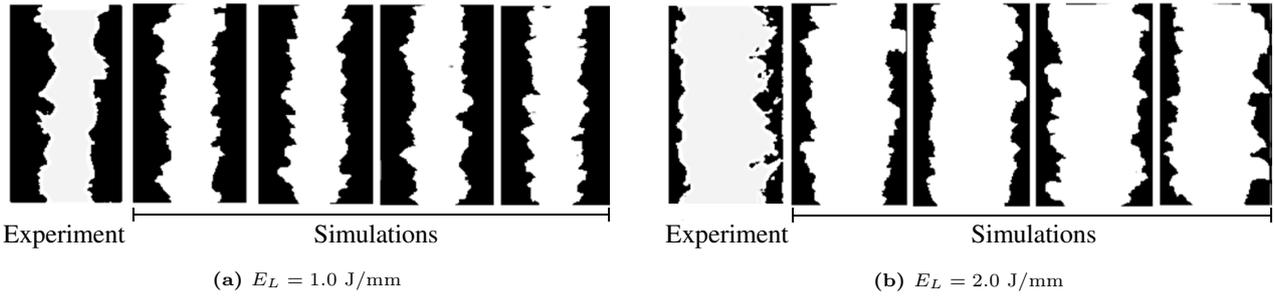


Fig. 15: Wall morphologies obtained by the experiment<sup>(13)</sup> (left one) and numerical simulations (four on right) for two different line energies (a)  $E_L = 1.0$  J/mm and (b)  $E_L = 2.0$  J/mm.

Tab. 4: Material properties of Ti-6Al-4V for EBM simulations.

Property	Unit	Value
Atomic number	—	21.5
Density	kg/m <sup>3</sup>	4000
Kinetic viscosity	mm <sup>2</sup> /s	1.25
Surface tension	N/m	1.65
Wetting angle	°	60
Liquidus temperature	K	1928
Solidus temperature	K	1878
Specific heat capacity	J/(kgK)	700
Thermal conductivity at $T_L$	W/(mK)	27.8
Thermal conductivity at $T_S$	W/(mK)	21.9
Latent heat	J/kg	370000

#### 参考文献

- (1) Attar, E. "Simulation of Selective Electron Beam Melting Processes", Ph. D. thesis, (2011).
- (2) Markl, M., "Numerical Modeling and Simulation of Selective Electron Beam Melting Using a Coupled Lattice Boltzmann Method and Discrete Element Method", Ph. D. thesis, (2015).
- (3) Degenhardt, R., "Advanced Lattice Boltzmann Models for the Simulation of Additive Manufacturing Processes", Ph. D. thesis, (2017).
- (4) Körner, C., Thies, M., Hofmann, T., Thürey, N.

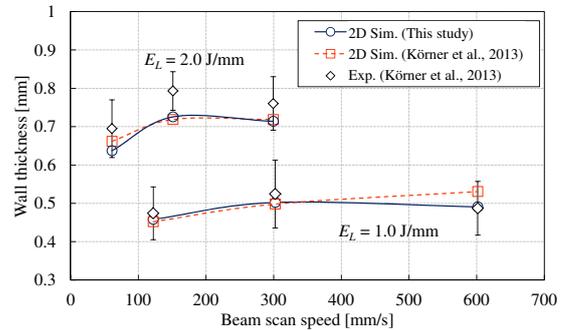


Fig. 16: Comparison of numerical and experimental wall thickness for two different line energies. Error bars indicate the standard deviations of the experimental results.

and Råde, U., "Lattice Boltzmann Model for Free Surface Flow for Modeling Foaming", Journal of Statistical Physics, 121 (2005), pp. 179-196.

- (5) 飯田 峻也, 吉野 正人, 鈴木 康祐, 米倉 一男, 齊藤 弘樹, "格子ボルツマン法を用いた積層造形における金属の溶融凝固解析の実装と検証", 第 31 回数値流体シンポジウム, (2017).
- (6) 稲室 隆二, "格子ボルツマン法: 新しい流体シミュレーション法", 物性研究, 77 (2001), pp.197-232.
- (7) Meakin, P. and Juillien, R., "Restructuring Effects in the Rain Model for Random Deposition", Journal de Physique, 48 (1981), pp. 1651-1662.
- (8) Klassen, A., Bauereiß, A and Körner, C., "Modeling of Electron Beam Absorption in Complex Geometries", J. Phys. D: Appl. Phys., 47 (2014).
- (9) Klassen, A., "Simulation of Evaporation Phenomena in Selective Electron Beam Melting", Ph. D.

- thesis, (2018).
- (10) Martin, J., C. and Moyce, W., J., "An Experimental Study of the Collapse of Liquid Columns on a Rigid Horizontal Plane", *Phil. Trans. R. Soc. Lond.*, 244 (1952), pp.312-325.
  - (11) Stefan, D., "Wetting Models for a Parallel High-Performance Free Surface Lattice Boltzmann Method", Ph. D. thesis, (2011).
  - (12) Huber, C., Parmigiani, A., Chopard, B., Manga, M. and Bachmann, O., "Lattice Boltzmann Model for Melting with Natural Convection", *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 29 (2008), pp. 1469-1480.
  - (13) K'Orner, C., Bauerei, A. and Attar, E., "Fundamental Consolidation Mechanism during Selective Beam Melting of Powders", *Modeling Simul. Mater. Sci. Enf.*, 21 (2013).