

航空エンジン向け金属材料を対象とした組織予測技術の開発

Development of a Microstructure Prediction Model for Aeroengine Metallic Materials

浦谷 政 翔 技術開発本部生産技術センター加工技術部
齋藤 実奈子 技術開発本部生産技術センター加工技術部
西井 崇 技術開発本部生産技術センター加工技術部 主査

金属製航空エンジン部品は、鋳造や粉末冶金、鍛造などの塑性加工で生産される。一般に鍛造品は強度のばらつきが小さく、高い信頼性が要求される部品に適用されており、特に信頼性が重要な部品には、寸法要求や強度要求に加えて、微視的な内部組織に対する要求が設定される。そのため、加工中の内部組織変化の把握が重要となる。そこで当社では、加工中の組織変化過程で起こる物理現象を理論式で表現した、新たな組織予測技術を開発している。本稿では、その取組みの一部である結晶塑性シミュレーションについて述べる。

Aeroengine parts are produced by carrying out casting, powder metallurgy, and plastic forming techniques such as forging. Forged products usually have little variation in terms of strength so this method is applied when a high degree of reliability is needed. In addition to the product's dimensions and strength, requirements are also set with regard to the quality of the microstructure if a particularly high degree of reliability is required. Based on these requirements, IHI is developing a new microstructure prediction model that takes into consideration the physical mechanism that occurs during the forming process in order to accurately simulate the microstructure evolution. This paper discusses crystal-plasticity finite element method (CP-FEM) simulations, which form part of the new model.

1. 緒 言

航空エンジンは、高い品質が求められる製品であり、金属製部品では、生産工程の一部に塑性加工が適用されている。特に高い信頼性が要求される鍛造部品の場合には、通常の寸法要求に加えて、微視的な内部組織に対しても品質要求が設定される。この内部組織に対する要求の代表的な例として結晶粒径があり、ある一定の範囲内に組織制御を行う必要がある。近年は、ニアネットシェイプ鍛造（鍛造で最終製品に近い形状まで仕上げる加工方法）の適用も進められており、形状と内部組織の両方をより高精度に制御できる工程設計技術が求められている。

塑性加工を適用した生産工程の開発には、開発期間の短縮やコスト削減のために、シミュレーションの活用が欠かせない。塑性加工後の部品形状は、主に汎用ソルバを用いた有限要素法 (Finite Element Method : FEM) による変形解析で、実用レベルの予測が可能になってきている。一方、内部組織の予測については、以前よりパラメータフィッティングに基づく実験式による組織予測を用いて検討されてきた。しかし、幅広い加工条件に対応できない、加工履歴の影響を考慮できないなどの課題があり、実用性は十分でない。そのため、工程開発時の試作検証は避けら

れないのが現状である。

組織予測が難しいとされる要因の一つは、加工プロセスにおける内部組織変化の複雑さにある。たとえば、圧縮機の翼部品の生産工程では熱間鍛造が適用されており、素材加熱、鍛造、冷却、熱処理などの工程を経るが、そのプロセス中には回復、再結晶、粒成長などの現象が生じる。このとき、内部組織はひずみ量やひずみ速度、温度などの影響を受けながら時々刻々と変化するため、実験式として現象を表現することは容易ではない。

近年、計算機の発展に伴い、組織変化の過程で起こる物理現象を理論式で表現し、物理的な意味を有する手法に基づいた新しい組織予測技術が注目を集めている。その一つとして、すべり変形などの金属材料の物理的な変形メカニズムを考慮する結晶塑性シミュレーションが挙げられる。結晶塑性シミュレーションでは、加工条件に合わせた特別な仮定を設けずに、巨視的な変形中の微視的な結晶粒レベルのひずみ分布や結晶方位の変化を予測できることが期待される。ひずみ量や結晶方位差は、再結晶や粒成長などの組織変化に影響を及ぼす⁽¹⁾。したがって、まずはそのような組織変化の因子を予測することが重要となる。

本稿では、基礎的な検討として航空エンジン向け材料である Alloy718 の冷間単軸圧縮変形を対象に、結晶塑性シ

ミュレーション結果と実験結果を比較検証した結果と考察について述べる。

2. 解析方法

2.1 結晶塑性 FEM の概要

ここでは、結晶塑性 FEM の概要を簡単に述べる。結晶塑性シミュレーションの詳細については、参考文献 (2) を参照されたい。

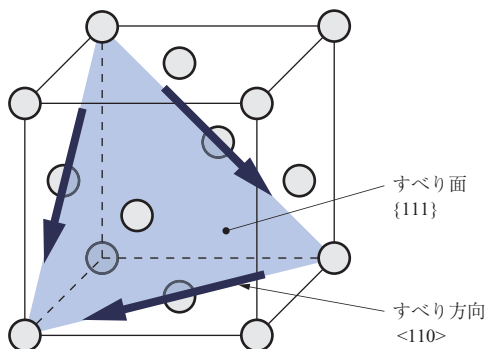
金属材料の塑性変形の基本的なメカニズムとして、すべり変形が挙げられる。たとえば、Alloy718 などは面心立方構造 (Face Centered Cubic : FCC) を有する。第 1 図に FCC 金属の代表的なすべり系を示す。図に示すような面と方向の組合せをすべり系と呼ぶが、すべり系に沿って原子が移動することにより、塑性変形が生じることが知られている。結晶塑性 FEM では、この微視的な変形をすべり速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ で表し、分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ (巨視的な応力 σ をすべり系の方向に分解した力) が、すべり抵抗 $g^{(\alpha)}$ より大きくなるすべり系 α のみが塑性変形を担うと考える。これを数式で表現すると、(1)、(2) 式となる⁽³⁾。

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^m \text{sign}(\tau^{(\alpha)}) \quad \dots\dots\dots (1)$$

$$\tau^{(\alpha)} = \sigma : (s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)}) \quad \dots\dots\dots (2)$$

- $\dot{\gamma}_0$: 参照すべり速度
- m : ひずみ速度依存性指数 (0.001 ~ 0.020 程度の定数)
- $s^{(\alpha)}$: すべり方向ベクトル
- $m^{(\alpha)}$: すべり面法線ベクトル

(1) 式では、たとえば $m = 0.020$ のとき、 $1/m = 50$ と



(注) (1) すべり系は結晶構造に依存しており、面心立方構造の場合、すべり面は {111}、すべり方向は <110> となる。
(2) 図示されているのは一部で、等価な面と方向の組合せが合計 12 個ある。

第 1 図 FCC 金属の代表的なすべり系
Fig. 1 Slip systems in the FCC metal

大きな指数になるため、 $\tau^{(\alpha)} > g^{(\alpha)}$ のとき $|\dot{\gamma}^{(\alpha)}| > 0$ となり、すべり変形が生じるとする。この結晶レベルのすべり変形は、巨視的な変形速度を特徴付ける速度勾配テンソルの塑性部分に結び付けられ、FEM の理論式に組み込まれる。

塑性変形が生じると、金属材料の内部組織ではさまざまな変化が生じるが、加工硬化 (材料に塑性変形を与えると、硬くなる現象) は代表的なものの一つである。加工硬化のモデル式はさまざまなものが提案されているが、本稿では、Alloy718 と同じ FCC に属するアルミニウム合金に適用例がある (3)、(4) 式⁽⁴⁾ を採用した。

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta=1}^N h_{\alpha\beta} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \quad \dots\dots\dots (3)$$

$$h_{\alpha\beta} = q_{\alpha\beta} \frac{d\tau(\gamma)}{d\gamma} + (1 - q_{\alpha\beta}) \frac{d\tau(\gamma)}{d\gamma} \delta_{\alpha\beta}, \quad \dots (4)$$

$$\frac{d\tau(\gamma)}{d\gamma} = h_0 \text{sech}^2 \frac{h_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0}$$

- N : すべり系の数
- γ : 累積せん断ひずみ
- $q_{\alpha\beta}$: 相互作用マトリクス
- h_0 : 初期硬化係数
- τ_0 : 臨界分解せん断応力
- τ_s : 飽和分解せん断応力
- $\delta_{\alpha\beta}$: クロネッカのデルタ

(4) 式では、 $h_{\alpha\beta}$ は常に正の値であり、微視的なすべりが生じると、すべり抵抗が大きくなることを表現している。

また結晶方位は、巨視的な変形に伴って、時々刻々と回転し変化する。これは、弾性スピテンソル W^e を用いて、(5) 式によりすべり方向ベクトルとすべり面法線ベクトルに回転を与えることで表現する。

$$\dot{s}^{(\alpha)} = W^e s^{(\alpha)}, \quad \dot{m}^{(\alpha)} = W^e m^{(\alpha)} \quad \dots\dots\dots (5)$$

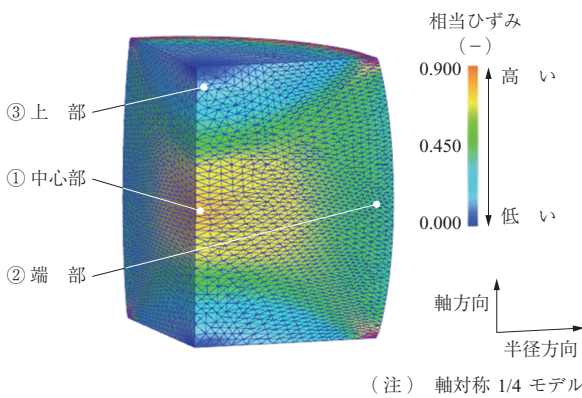
以上が結晶塑性 FEM の概要である。それぞれの構成式は、多くの研究者によってさまざまな形に発展を遂げており、さらに複雑で高度なものも多く提案されている。本稿では、比較的シンプルで取り扱いやすいことから、現段階では上述の構成式を用いている。

2.2 結晶塑性 FEM の解析手順

(1) 有限要素モデルの作成

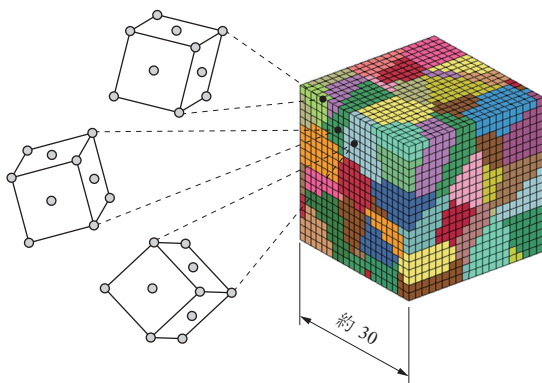
結晶塑性 FEM は試験片全体をモデル化すると膨大な計算時間を要し、計算コストが非常に高い。そのため、試験片内部の微小領域を評価対象として抽出し、複数の結晶粒を含む立方体 (1 辺の長さは約

30 μm 相当とした)としてモデル化した。第2図に単軸圧縮変形後の試験片内部のひずみ分布およびEBSD (Electron Backscatter Diffraction, 電子線後方散乱回折) 評価位置を示す。あらかじめ剛塑性FEMによる試験片全体の変形解析を行い、第2図に示すように変形後のひずみ状態が明瞭に異なる①中心部、②端部、③上部の3点を評価位置に選定した。解析結果における相当ひずみは、それぞれ0.8, 0.5, 0.2程度であった。第3図に作成した有限要素モデルを示す。結晶粒界の生成には、図に示すように、ボロノイ分割(空間内の多数の点を、どの点に最も近いかによって分割する方法)を適用し⁽⁵⁾、一つの結晶粒の大きさ・形状を複数個の6面体ソリッド要素で表現した。要素数は8000個、結晶粒の数は100個とした。また、各結晶粒に与える変形前の結晶方位には、変形前の試験片のEBSD測定から得られ



第2図 単軸圧縮変形後の試験片内部のひずみ分布およびEBSD評価位置

Fig. 2 Strain distribution in a workpiece subjected to uniaxial compression and three observation points in EBSD



(注) (1) 結晶粒ごとに色分けされている。
 (2) 各結晶粒は異なる結晶方位を有する。
 (3) 左側のFCC結晶格子の向きはイメージを示す。

第3図 作成した有限要素モデル(単位: μm)

Fig. 3 Finite element model used in the CP-FEM (unit: μm)

た実験データを直接用いた。

(2) 材料パラメータの同定

変形に伴う応力の変化を正しく再現するためには、応力とひずみの関係を決める材料パラメータを同定する必要がある。第4図にパラメータ同定結果を示す。Alloy718棒材の一軸引張試験を実施し、結晶塑性FEMにおける応力とひずみの関係が合うように、(4)式の h_0 , τ_0 , τ_s の値を同定した。

(3) 境界条件の設定

選択した微小領域ごとに異なるひずみ状態を再現するため、境界条件を以下のように設定した。

- ① 通常の剛塑性FEMにより、対象とする評価位置の試験片内部の変位履歴データを求める。
- ② その変位履歴を結晶塑性FEMの強制変位境界条件として適用し、解析モデルの六つの表面に与える。

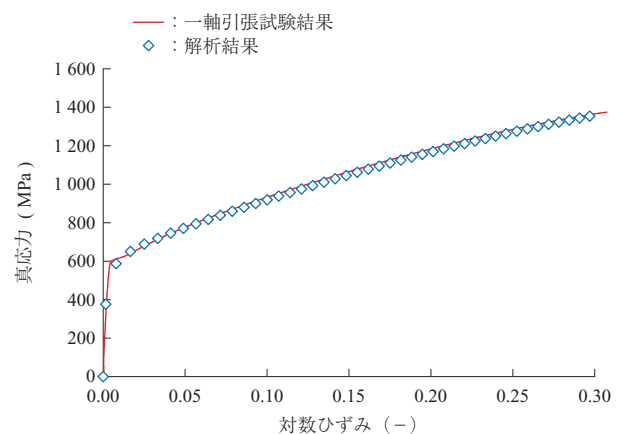
すなわち、評価位置ごとに有限要素モデルと境界条件を与え、評価位置の数だけ計算を行った。

(4) 解析の実行

本稿では、汎用FEMソフトウェアのユーザサブルーチン機能を利用して、結晶塑性プログラムコードを独自に開発して組み込み、計算した。

3. 実験方法

解析結果の妥当性評価に用いるデータを取得するため、Alloy718の冷間単軸圧縮試験を実施した。直径19 mm \times



(注) m (ひずみ速度依存性指数): 0.020
 $\dot{\gamma}_0$ (参照すべり速度): 0.033
 τ_0 (臨界分解せん断応力): 190 MPa
 τ_s (飽和分解せん断応力): 470 MPa
 h_0 (初期硬化係数): 300

第4図 パラメータ同定結果

Fig. 4 Stress-strain curves obtained in the uniaxial tension test conducted in the experiment and the CP-FEM

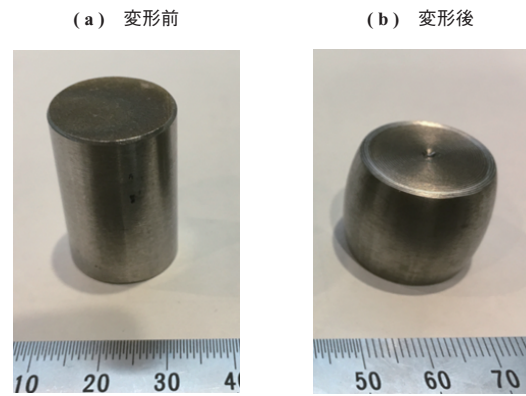
高さ 28 mm の円柱材を試験片とし、プレス機を用いて、平均ひずみ速度が約 0.5 s^{-1} 、圧縮率（変形後高さ／初期高さ）40%の変形を与えた。

内部組織の変化を調査するため、変形前および変形後の試験片を中心断面で切断・研磨し、第 2 図に示す三つの評価位置で EBSD 測定により組織観察した。

4. 結果と考察

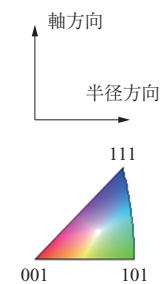
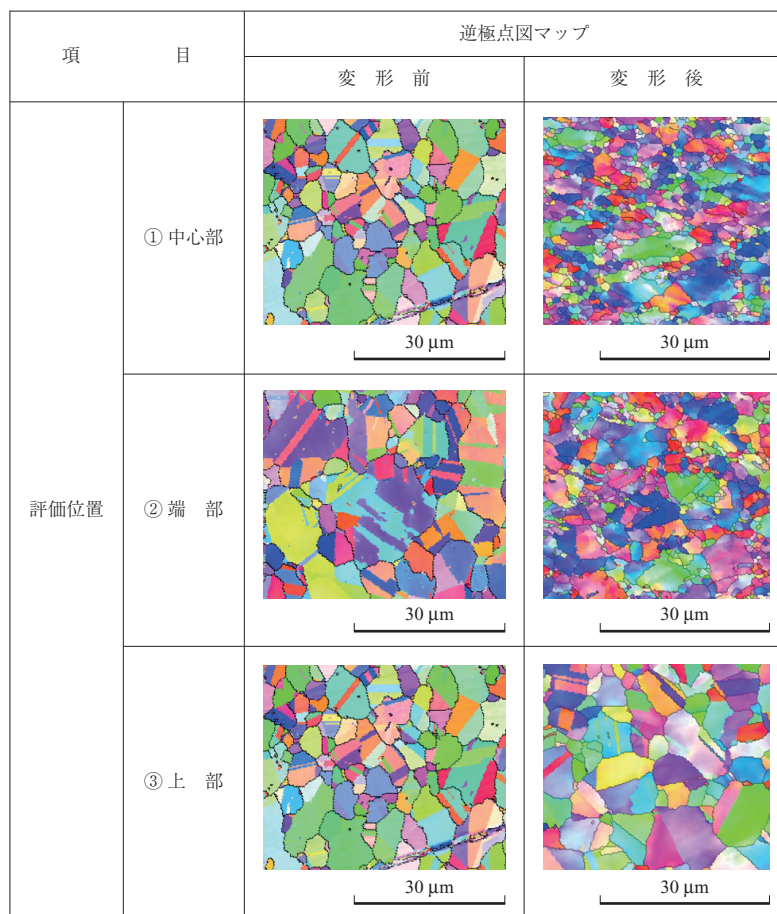
4.1 冷間単軸圧縮試験

まず、実験結果について述べる。第 5 図に変形前後の試験片の外観を、EBSD 測定結果として、第 6 図に各評

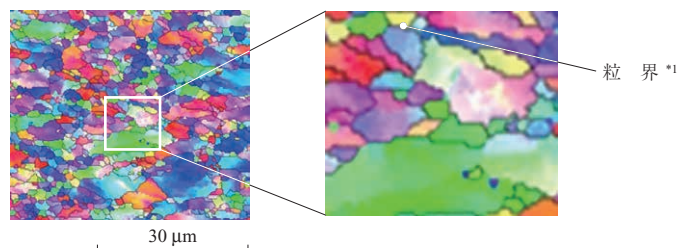


第 5 図 変形前後の試験片の外観
Fig. 5 Photographs of the workpiece

(a) 変形前後の逆極点図マップ



(b) 粒界拡大図



(注) *1: 双晶境界を除く方位差 5 度以上の境界

第 6 図 変形前後の逆極点図マップ (EBSD 測定)
Fig. 6 Inverse pole figure maps obtained using EBSD data

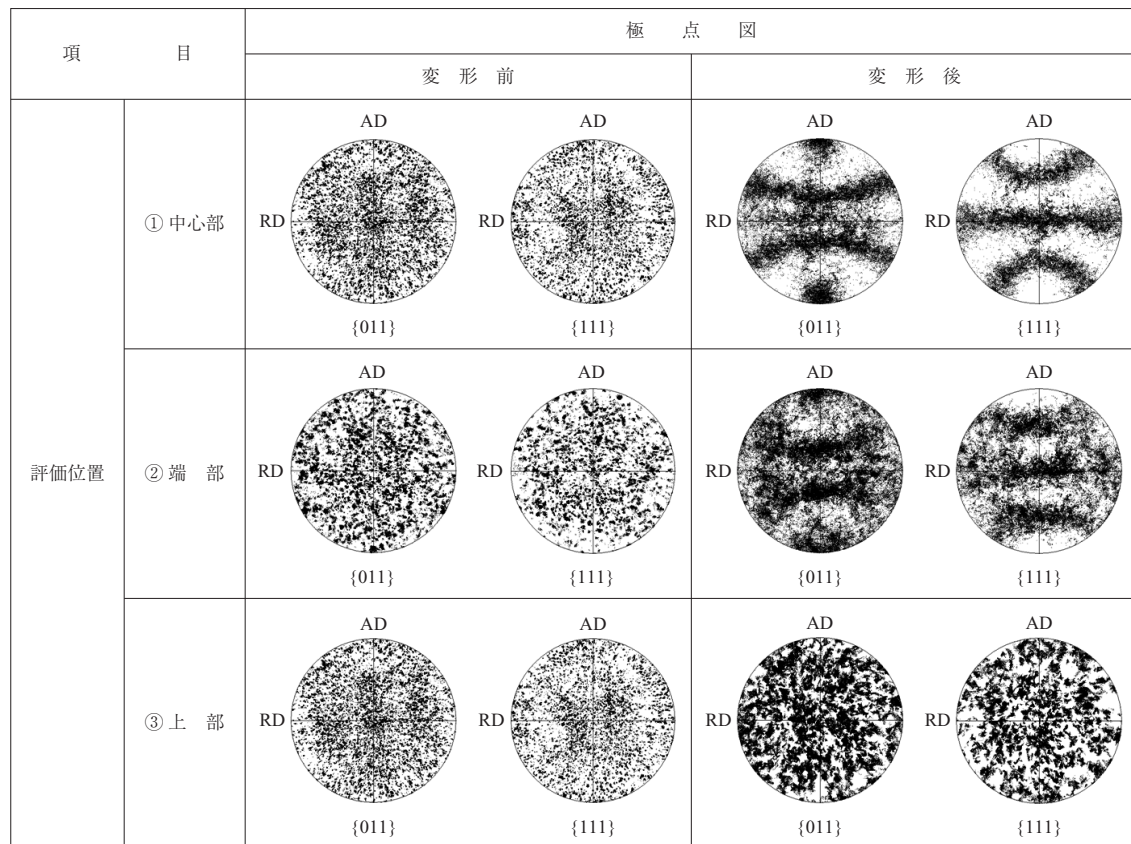
価位置における変形前後の逆極点図マップ（観察面に対する結晶方位をカラーで示した図）（- (a)）を示す。黒色の線は粒界（双晶境界を除く方位差 5 度以上の境界）（- (b)）であり、結晶粒の中の色が結晶方位を表す。試験片内部の位置によって結晶粒の形状は異なり、また、色の見え方もやや異なることが分かる。すなわち、① 中心部や ② 端部では、試験片軸方向に平たい形状になった結晶粒が散見され、変形によって結晶粒が歪んだことが分かる。また一つの結晶粒の中でも色がグラデーションのように変化しているものが多く、変形によって結晶粒の中で微小な結晶方位差が生じたことが分かる。一方、③ 上部では、変形前と比較して顕著な違いは見られない。

第 7 図に変形前後の極点図（試料座標系を基準として、材料内の結晶方位の分布を示した図）を示す。円の下にある数字は、極点図において注目する結晶面を表している。極点図では、円の中にあるプロットの分布を見ることで、測定領域全体における結晶方位の集積傾向を理解できる。変形前では各評価位置でほぼ同様のランダムなプロットであったものが、変形後では明らかに ① 中心部、② 端

部、③ 上部でそれぞれ異なる集積傾向を示していることが分かる。① 中心部では、プロットの過疎がはっきりとしており、結晶方位が特定の向きにそろっている。② 端部でも、① 中心部とは傾向が異なるが、結晶方位が特定の向きにそろっている。このような集積傾向の違いは、評価位置によって巨視的なひずみ状態が異なり、結晶方位が回転しやすい方向に違いが生じるためと考えられる。一方、③ 上部では、変形前から大きく変わっておらず、依然としてランダムなプロットである。これは、③ 上部が試験片上下端面のデッドメタル域（材料内部において局所的に変形を受けない領域）に位置しており、ほとんど変形しないためと考えられる。

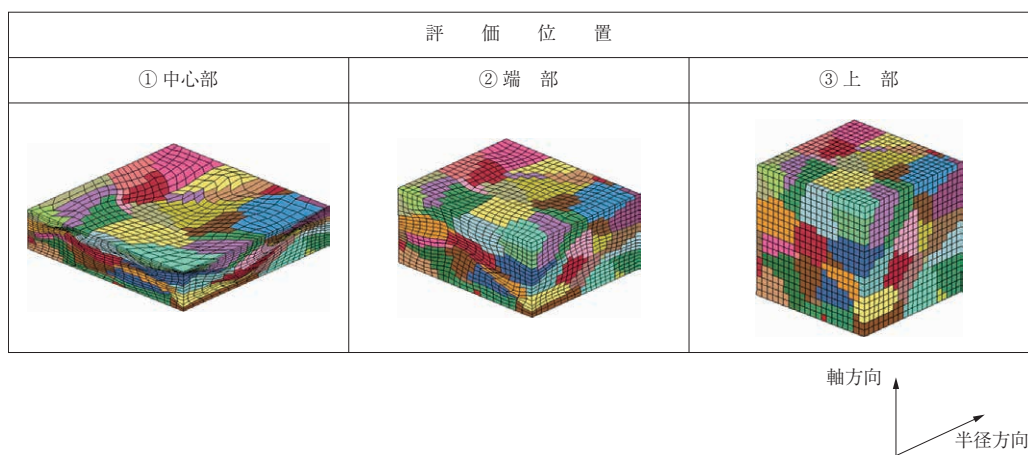
4.2 結晶塑性 FEM

第 8 図に各位置における変形後の微小領域の形状を示す。① 中心部では軸方向につぶれて等方的に広がった形状、② 端部では試験片の周方向に伸びた形状、③ 上部ではほとんど変形していない（デッドメタル域）形状になっており、それぞれ境界条件として与えた異なるひずみ状態を反映した結果が得られている。各要素が異なる形状



(注) AD (Axial Direction) : 軸方向
RD (Radial Direction) : 半径方向
{011}, {111} : 極点図において注目する結晶面

第 7 図 変形前後の極点図 (EBSD 測定)
Fig. 7 Pole figures obtained using EBSD data



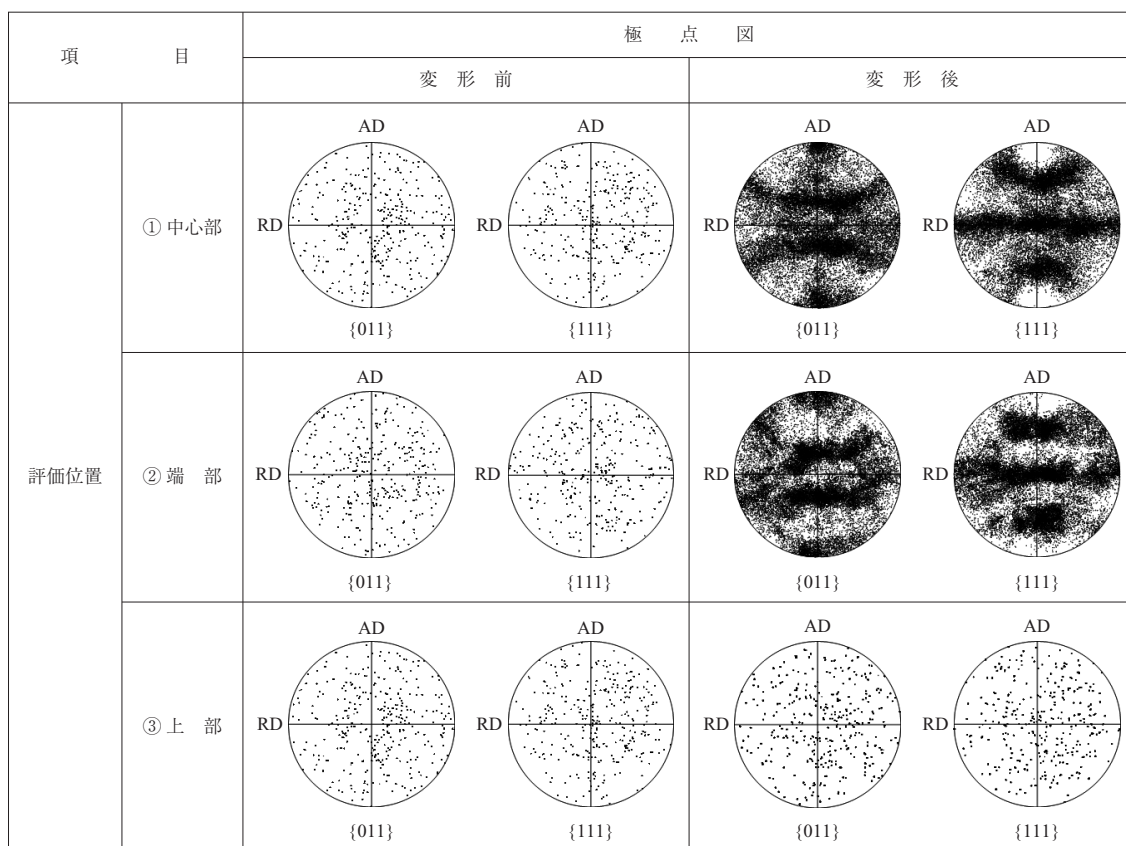
第 8 図 変形後の有限要素モデルの形状 (結晶塑性 FEM)
 Fig. 8 Shapes of finite element models after compression simulated using the CP-FEM

に歪んでいるのは、計算点によって初期結晶方位や変形の進行に伴う結晶方位変化が異なり、また変形勾配は応力状態と結晶方位によって決まるためである。

第 9 図に変形前後の極点図を示す。第 7 図の EBSD 測定の実験結果と比較すると、評価位置によって結晶方位の集積傾向が異なること、その傾向は実験結果とおおむね

一致していることが分かる。すなわち、通常の剛塑性 FEM の結果を基にして境界条件を設定し、微小領域を対象とした結晶塑性シミュレーションを行うことで、材料内部の結晶方位変化を予測できる可能性を見いだすことができた。

実際の加工プロセスでは、変形による結晶方位変化だけ



(注) AD (Axial Direction) : 軸方向
 RD (Radial Direction) : 半径方向
 {011}, {111} : 極点図において注目する結晶面

第 9 図 変形前後の極点図 (結晶塑性 FEM)
 Fig. 9 Pole figures obtained using the CP-FEM

でなく、再結晶や粒成長・相変態などの組織形成も生じ得る。これらの現象を再現するためには、結晶塑性 FEM と組織形成を表現するほかのシミュレーション手法（たとえば、Cellular Automata 法や Phase-Field 法）を組み合わせる方法が考えられる⁽⁵⁾、⁽⁶⁾。そのような方法によって、粒径の予測まで可能となるようにシミュレーション技術の枠組みを構築していくことは、今後の課題である。

5. 結 言

工程開発における開発期間の短縮、試作コストの削減を目的として、物理的意味をもつ手法に基づいたシミュレーションによる組織予測技術の開発に取り組んでいる。本稿では、Alloy718 の冷間単軸圧縮変形を対象として、結晶塑性シミュレーションにより結晶方位変化を予測できる可能性を示した。今後、実際の加工プロセスを対象とした内部組織予測を実現するため、要素的な技術の高度化およびシミュレーション技術の枠組みの構築を進めていく。

参 考 文 献

- (1) F. J. Humphreys and M. Hatherly : Recrystallization and Related Annealing Phenomena Second Edition Elsevier (2004. 2)
- (2) 黒田充紀, 志澤一之 : 結晶塑性の理論と応用 結晶の大変形から転位蓄積まで 塑性と加工 Vol. 43 No. 495 2002 年 4 月 pp. 33 - 43
- (3) D. Peirce, R. J. Asaro and A. Needleman : Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids Acta Metallurgica Vol. 31 Issue 12 (1983. 12) pp. 1 951 - 1 976
- (4) H. Kuramae, Y. Ikeya, H. Sakamoto, H. Morimoto and E. Nakamachi : Multi-scale parallel finite element analyses of LDH sheet formability tests based on crystallographic homogenization method International Journal of Mechanical Sciences Vol. 52 Issue 2 (2010. 2) pp. 183 - 197
- (5) H. Li, Xinxin Sun and He Yang : A three-dimensional cellular automata-crystal plasticity finite element model for predicting the multiscale interaction among heterogeneous deformation, DRX microstructural evolution and mechanical responses in titanium alloys International Journal of Plasticity Vol. 87 (2016. 12) pp. 154 - 180
- (6) L. Chen, J. Chen, R. A. Lebensohn, Y. Z. Ji, T. W. Heo, S. Bhattacharyya, K. Chang, S. Mathaudhu, Z. K. Liu and L.-Q. Chen : An integrated fast Fourier transform-based phase-field and crystal plasticity approach to model recrystallization of three dimensional polycrystals Computer methods in applied mechanics and engineering Vol. 285 (2015. 3) pp. 829 - 848