

## АННОТАЦИЯ

Работа посвящена моделированию процесса селективного плавления многокомпонентного материала и изучению изменения концентраций его компонент. Это может помочь предсказывать количественный состав итогового сплава, что позволит судить об итоговых механических параметрах, микроструктуре готового изделия, напечатанного методом аддитивного производства. Такая возможность актуальна и крайне востребована, так как позволяет не проводить большое количество дорогостоящих экспериментов и подобрать необходимый сплав исходя из результатов расчёта.

В работе сформулировано несколько моделей изменения концентрации компонентов в сплаве, в которых моделируется многокомпонентное испарение:

Нульмерная, в предположении быстрого перемешивания и упрощённой и неизменной формы ванны расплава,

Трёхмерная, учитывающая нагревание источником, плавление, конвекцию Марангони с помощью эффективного коэффициента и диффузию в расплаве.

Модель, которая берёт за основу данные сложного гидродинамического расчёта и считает конвекцию компонентов в квазистационаре.

С помощью этих моделей исследуется влияние многокомпонентного испарения на итоговый состав сплава.

## СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ . . . . .	3
1 ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР . . . . .	5
1.1 Расчёт испарения . . . . .	5
1.1.1 Поток испарения . . . . .	5
1.1.2 Поток конденсации . . . . .	5
1.1.3 Структура потока испарения . . . . .	6
1.1.4 Давление насыщенного пара . . . . .	10
1.1.5 Неидеальность расплава . . . . .	11
1.2 Форма бассейна расплава . . . . .	11
1.2.1 Скрытая теплота плавления . . . . .	14
1.2.2 Конвекция Марангони . . . . .	15
2 МОДЕЛИРОВАНИЕ . . . . .	17
2.1 Нульмерная модель . . . . .	17
2.2 Трёхмерная модель . . . . .	20
2.2.1 Численная схема . . . . .	22
2.2.2 Валидация модели . . . . .	23
2.3 Модель для учёта сложных гидродинамических процессов . .	28
3 РЕЗУЛЬТАТЫ . . . . .	30
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК . . . . .	32

## ВВЕДЕНИЕ

Аддитивное производство методом лазерного и электронно пучкового спекания металлического порошка – это относительно новое, но довольно перспективное направление в области производства деталей и компонентов. Такой метод оказался крайне актуален и востребован сегодня, что заметно по высокому спросу на исследования в его области.

Причины популярности этого метода заключаются в следующих факторах:

- Скорость и гибкость производства деталей для малых и средних серий. По сравнению с традиционными методами, где время на производство одной детали сокращается только с ростом количества деталей.
- Дешевизна производства деталей для малых серий. Так же как и со скоростью, цена одной детали снижается только с ростом количества произведённых деталей. К примеру изготовить формы для литья какой-либо сложной детали очень часто обходится гораздо дороже, чем напечатать методом SLM (Selective Laser Melting).
- Автоматизация и точность производства. Больше точной работы может быть доверено машине и меньше пространства для ошибок рабочих.
- Возможность создавать сложные геометрии, что может быть невозможно при использовании традиционных методов. Кроме того, аддитивное производство позволяет персонализировать изделия.
- Меньшее количество отходов и экологических проблем: аддитивные технологии позволяют использовать только нужное количество материала, что снижает количество отходов и экологическую нагрузку.

Важным и востребованным направлением в этом методе производства является моделирование процесса спекания порошка. Как правило для получения детали с необходимым качеством, составом, свойствами и без нежелательных артефактов, приходится проводить несколько экспериментов

и печатать одну и ту же модель несколько раз с разными параметрами и каждый раз проверять, удовлетворяет ли она необходимым требованиям. На это уходит большое количество времени, сил и ресурсов. Поэтому для удешевления и ускорения процедуры подбора параметров печати используется моделирование. Делая выводы из расчётов, можно кардинально сократить количество долгих и дорогостоящих экспериментов по производству интересующей детали.

Данная работа посвящена моделированию процесса аддитивного производства методом селективного спекания металлического порошка лазером или электронным пучком с целью изучения изменения концентраций компонентов сплава в процессе его плавления. При таком процессе, металл под источником энергии разогревается до очень высоких температур, что приводит к интенсивному испарению и, как следствие, появлению давления отдачи, потере тепла и массы.

Очень часто для производства детали требуется использовать определённый сплав с определённым количественным составом и определёнными свойствами. При его выборе очень важно учитывать тот факт, что в процессе участвуют компоненты сплава с разными параметрами, что влечет за собой разные скорости испарения разных компонент. Таким образом, итоговая концентрация более летучего компонента всегда будет ниже, чем изначальная, поскольку его испарение происходит более интенсивно.

# 1 ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

## 1.1 Расчёт испарения

### 1.1.1 Поток испарения

Для того, чтобы измерить потери компонентов при испарении с сильно разогретой поверхности металла необходимо оценить поток испарения и конденсации. Эти вопросы были исследованы в работе *Knight C. J.* [1].

Максимальный поток испарения вещества оценивается на основании предположения, что поток испарения не может превышать поток конденсации в состоянии равновесия [2], на основе чего в работе [3] была выведена следующая формула:

$$j^+ = p_s \sqrt{\frac{m_A}{2\pi k T_s}}, \quad (1.1)$$

где  $p_s$  и  $T_s$  – давление и температура непосредственно над поверхностью конденсированной фазы.

### 1.1.2 Поток конденсации

Однако помимо испарения имеет место и конденсация. Для её описания вводится коэффициент  $\phi < 1$ , ограничивающий  $j^+$ . Таким образом формула потока испарения принимает такой вид:

$$j^{evap} = \phi j^+ = \phi p_s \sqrt{\frac{m_A}{2\pi k T_s}}, \quad (1.2)$$

Для оценки коэффициента испарения в работе [4] на основе статьи [1] была получена следующая формула:

$$\phi = \sqrt{2\pi\gamma} \cdot M_{Kn} \cdot \frac{\rho_{Kn}}{\rho_s} \sqrt{\frac{T_{Kn}}{T_s}}, \quad (1.3)$$

где  $\gamma$  – показатель адиабаты материала,  $M_{Kn} = \frac{u_{Kn}}{c_{Kn}}$  – число Маха на выходе из слоя Кнудсена,  $u_{Kn}$  и  $c_{Kn}$  – скорость газа и скорость звука в этой же точке соответственно,  $\rho_{Kn}, \rho_s$  – плотность пара на выходе из слоя Кнудсена, плотность пара у поверхности соответственно,  $T_{Kn}, T_s$  – температура пара на выходе из слоя Кнудсена, температура пара у поверхности соответственно.

### 1.1.3 Структура потока испарения

Неизвестным остаётся число Маха на выходе из слоя Кнудсена. Чтобы понять, что это за параметр и как его можно найти, рассмотрим модель столба пара над испаряющейся поверхностью. В ней поток испарения представится в виде газодинамической задачи Римана о распаде разрыва.

Картина структуры столба пара представлена на рис. 1.1. Здесь присутствуют обычные компоненты из задачи, такие как ударная волна, контактный разрыв и волна разрежения. Также у основания учитывается наличие слоя Кнудсена, в нём происходит максвеллизация распределения скоростей молекул, вылетевших с поверхности металла. Соотношения для этих переходов выведены Найтом в его статье [1].

Слой Кнудсена моделируется исходя из предположения, что распределение скоростей частиц, вылетающих с поверхности имеет форму половины от распределения максвелла со средней скоростью равной нулю (рис. 1.2).

Это предположение позволяет связать параметры с разных сторон слоя Кнудсена [1] 1.4, 1.5. Зависимость этих величин от числа Маха представлена на рисунке

$$\frac{T_{Kn}}{T_s} = \left[ \sqrt{\left(1 + \pi \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \frac{M_{Kn}}{2}\right)^2} - \sqrt{\pi} \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \frac{M_{Kn}}{2} \right)^2} \right] \quad (1.4)$$

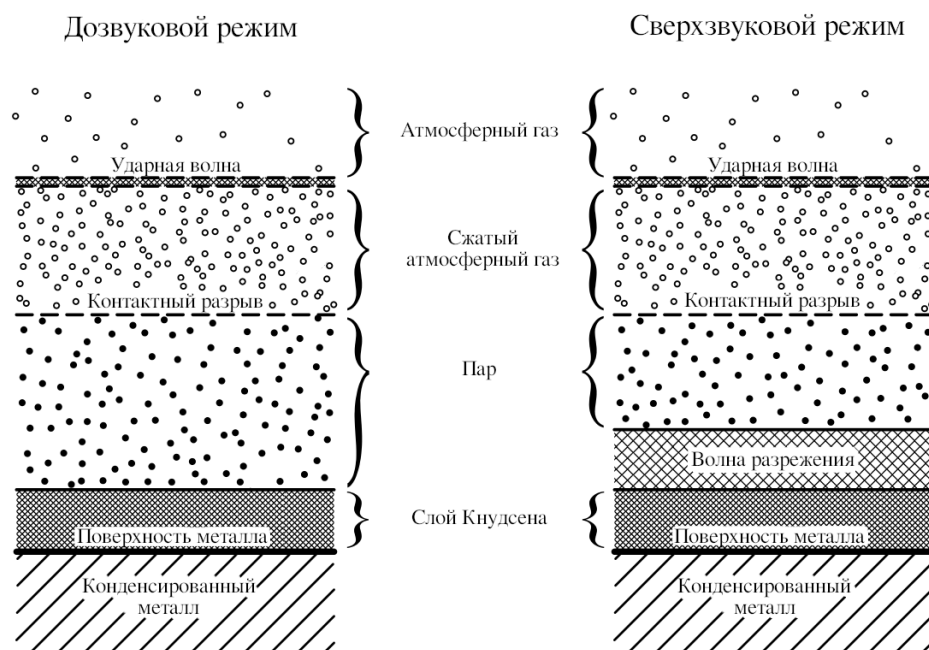


Рисунок 1.1 – Схематическое представление распределения структуры потока пара над поверхностью испарения. В режимах: дозвуковом (слева) и сверхзвуком (справа) [4].

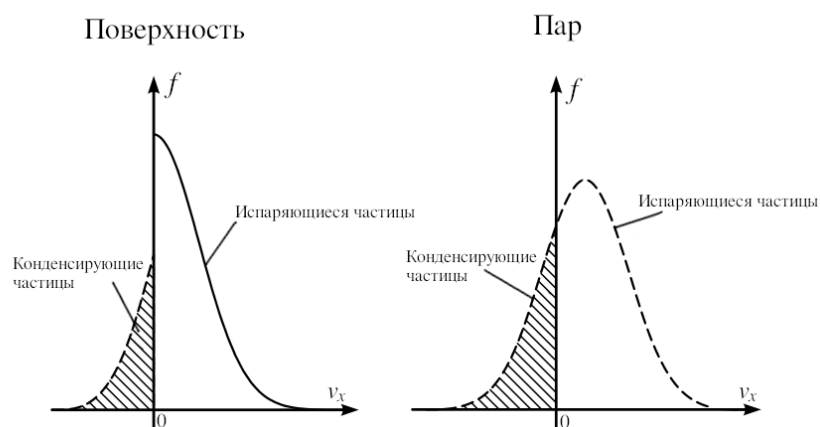


Рисунок 1.2 – Распределение вертикальной компоненты скорости частиц на поверхности и на верхней границе слоя Кнудсена(в паре)

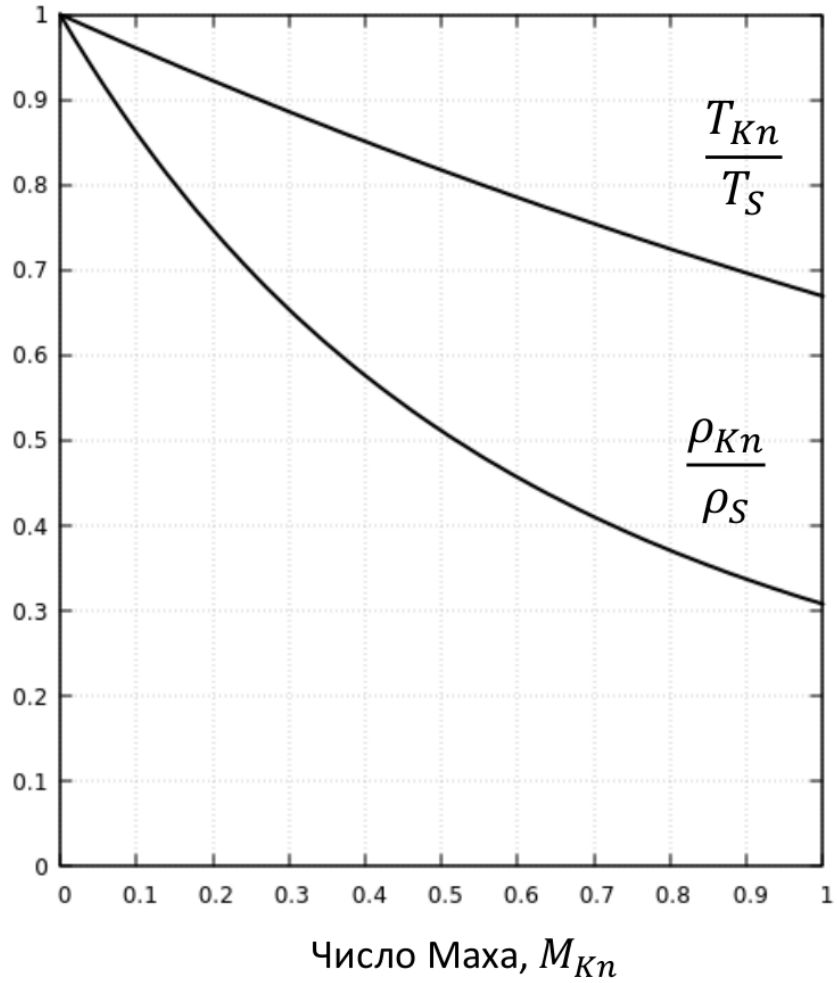


Рисунок 1.3 – Зависимость соотношения для плотностей и температур на поверхности и на выходе из слоя Кнудсена от числа Маха.

$$\frac{\rho_{Kn}}{\rho_s} = \sqrt{\frac{T_s}{T_{Kn}}} \left[ \left( m^2 + \frac{1}{2} \right) \exp \left( M_{Kn}^2 \right) \operatorname{erfc} \left( M_{Kn} \right) - \frac{M_{Kn}}{\sqrt{\pi}} \right] + \frac{1}{2} \frac{T_s}{T_{Kn}} \left[ 1 - \sqrt{\pi} M_{Kn} \exp \left( M_{Kn}^2 \right) \operatorname{erfc} \left( M_{Kn} \right) \right] \quad (1.5)$$

Уравнение адиабаты Гюгонио, соотношения на контактном разрыве и волне разряжения позволяют связать параметры газа на выходе из слоя Кнудсена и в атмосфере [4]:



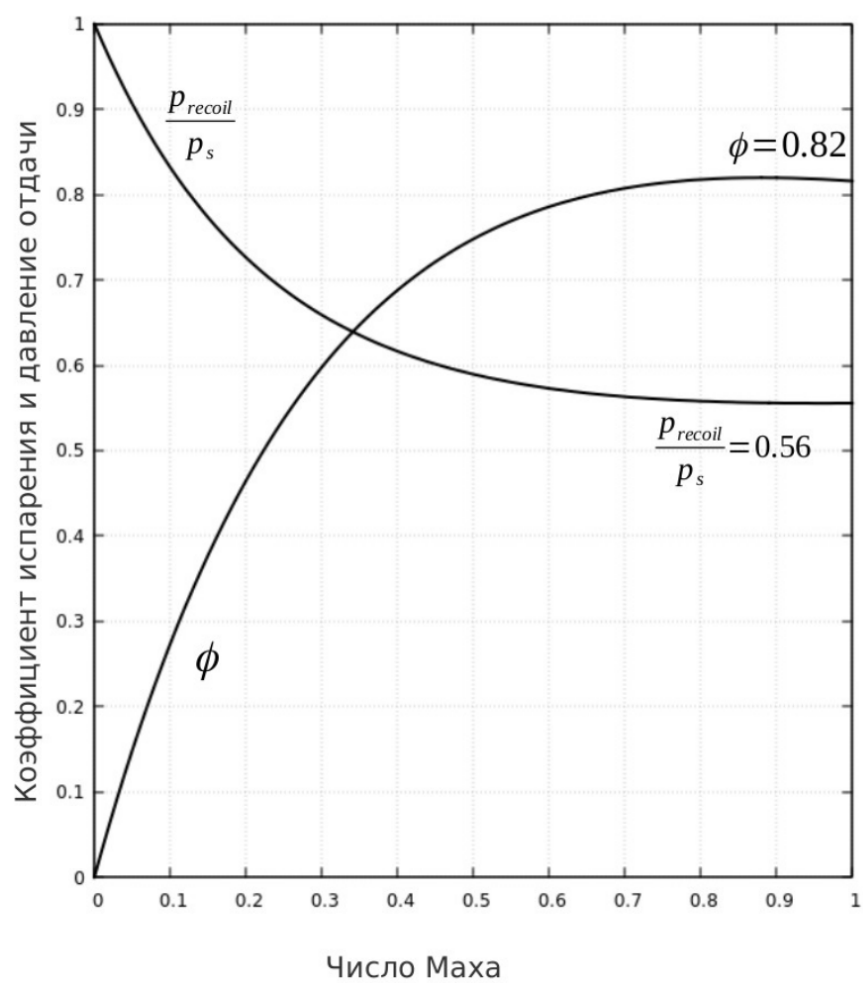


Рисунок 1.4 – Зависимость коэффициента испарения от числа Маха. На рисунке также присутствует давление отдачи, но в этой работе оно не рассматривается.

$$\frac{p_s}{p_a} = \left( \frac{\rho_{Kn} T_{Kn}}{\rho_s T_s} \right)^{-1} \cdot \left\{ 1 + \gamma \cdot M_{Kn} \frac{c_{Kn}}{c_a} \times \right. \\ \left. \times \left[ \frac{\gamma + 1}{4} \cdot M_{Kn} \cdot \frac{c_{Kn}}{c_a} + \sqrt{1 + \left( \frac{\gamma + 1}{4} \cdot M_{Kn} \cdot \frac{c_{Kn}}{c_a} \right)^2} \right] \right\} \quad (1.6)$$

#### 1.1.4 Давление насыщенного пара

В полученном уравнении для числа Маха остаётся неизвестным давление насыщенного пара. Его можно оценить разными способами. В работе [4] используется формула, полученная из уравнения Клапейрона-Клаузиуса:

$$p_s = p_{atm} \cdot \exp \left\{ - \frac{m_A L_{vap,0}}{k} \cdot \left[ \frac{1}{T_s} \sqrt{1 - \left( \frac{T_s}{T_{crit}} \right)^2} - \frac{1}{T_{boil}} \sqrt{1 - \left( \frac{T_{boil}}{T_{crit}} \right)^2} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{1}{T_s} \left( \arcsin \left( \frac{T_s}{T_{crit}} \right) - \arcsin \left( \frac{T_{boil}}{T_{crit}} \right) \right) \right] \right\}. \quad (1.7)$$

где  $(p_{atm}, T_{boil})$  и  $(p_s, T_s)$  – две точки на кривой перехода между газом и жидкостью на фазовой диаграмме материала,  $T_{crit}$  – критическая температура материала.

Также для описания давление насыщенного пара можно использовать уравнение Антони. Оно полу эмпирически описывает зависимость температуры насыщенного пара от его давления для различных веществ и имеет следующий вид:

$$\log_{10}(p) = A - \frac{B}{C + T} \quad (1.8)$$

здесь  $T$  – температура насыщенного пара,  $A, B, C$  – параметры вещества, получаемые экспериментально.

Таким образом, приравнявая 1.7 и 1.6 мы получаем уравнение 1.1.4, решение которого при заданной температуре поверхности  $T_s$  даст число Маха, которое уже позволит найти конденсацию.

$$\left(\frac{P_s}{P_a}\right)_{Clap.} = \left(\frac{P_s}{P_a}\right)_{Hugoniot}$$

На рисунке 1.5 изображены левая и правая части уравнения 1.1.4. Решения для Ti6Al4V изображены на

### 1.1.5 Неидеальность расплава

При реальной работе со сплавами важно учитывать химические реакции между их компонентами, так как они могут существенно повлиять на процесс испарения.

Для описания многокомпонентности будем считать, что поведение пара во всей структуре потока испарения следует закону Дальтона – т.е. равно сумме парциальных давлений паров компонентов.

Таким образом формула для потока испаряющихся частиц 1.1, 1.3 преобразится в следующий вид [4]:

$$j^\alpha = \phi^\alpha \chi^\alpha \gamma_{\text{акт}}^\alpha p_s^\alpha \cdot \sqrt{\frac{m_A^\alpha}{2\pi k T_s}} \quad (1.9)$$

где  $\gamma_{\text{акт}}^\alpha$  – коэффициент активности компонента  $\alpha$ ,  $\chi^\alpha$  – его мольная доля.

Коэффициенты активности компонентов оцениваются из парциальных энергий Гиббса:

$$\gamma_{\text{акт}}^\alpha(T_s, \chi) = \exp \left[ \frac{\Delta G_\Gamma^\alpha(T_s, \chi)}{RT_s} \right] \quad (1.10)$$

## 1.2 Форма бассейна расплава

Для того, чтобы предсказать состав сплава детали, изготовленной методом селективного спекания металлического порошка, помимо описания модели испарения необходимо описать поведение вещества в самом бассейне расплава под источником энергии.

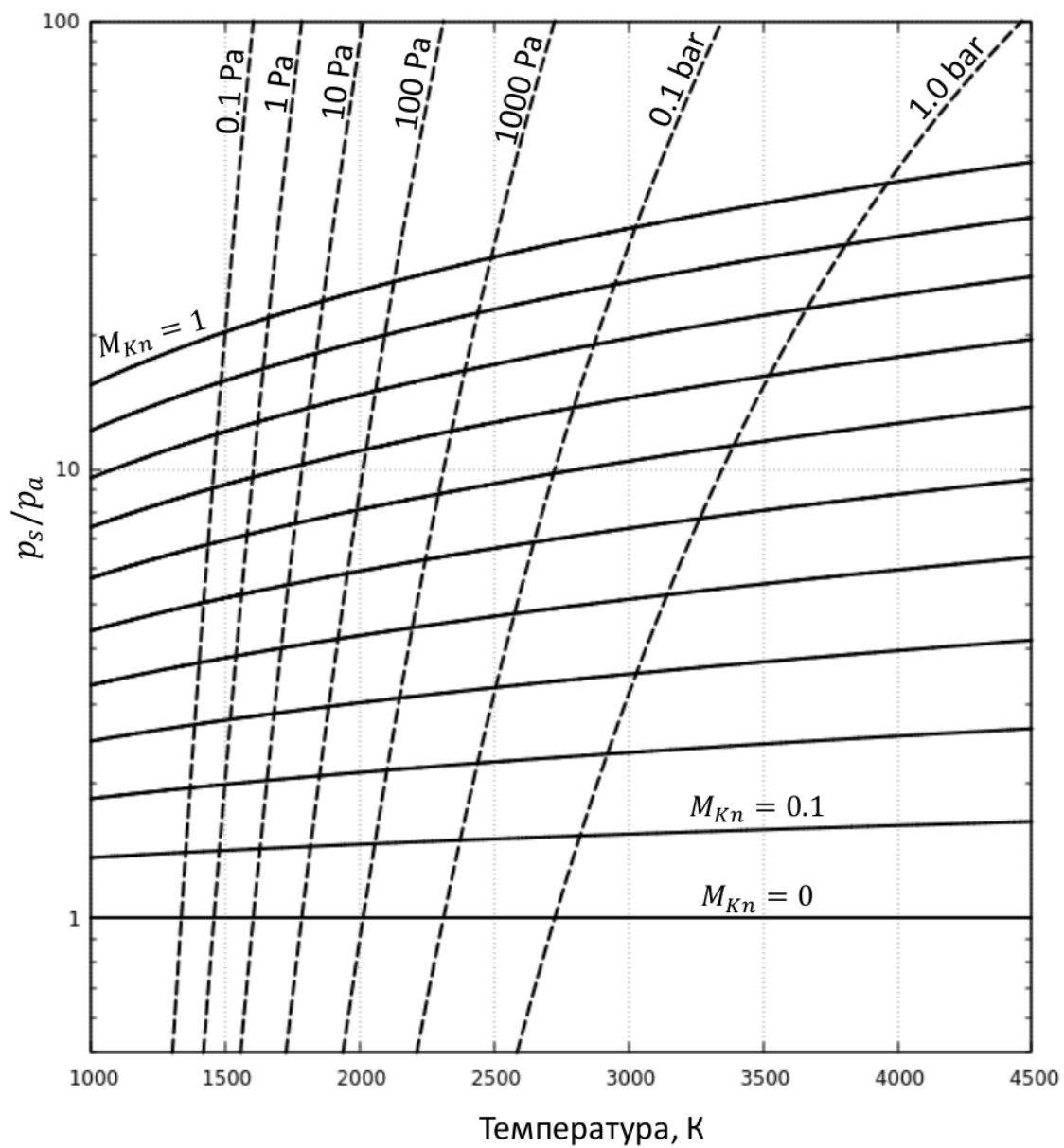


Рисунок 1.5 – Диаграмма решений уравнения 1.1.4. Сплошными линиями нарисованы газодинамические соотношения, пунктиром – зависимость давления насыщенного пара от температуры.

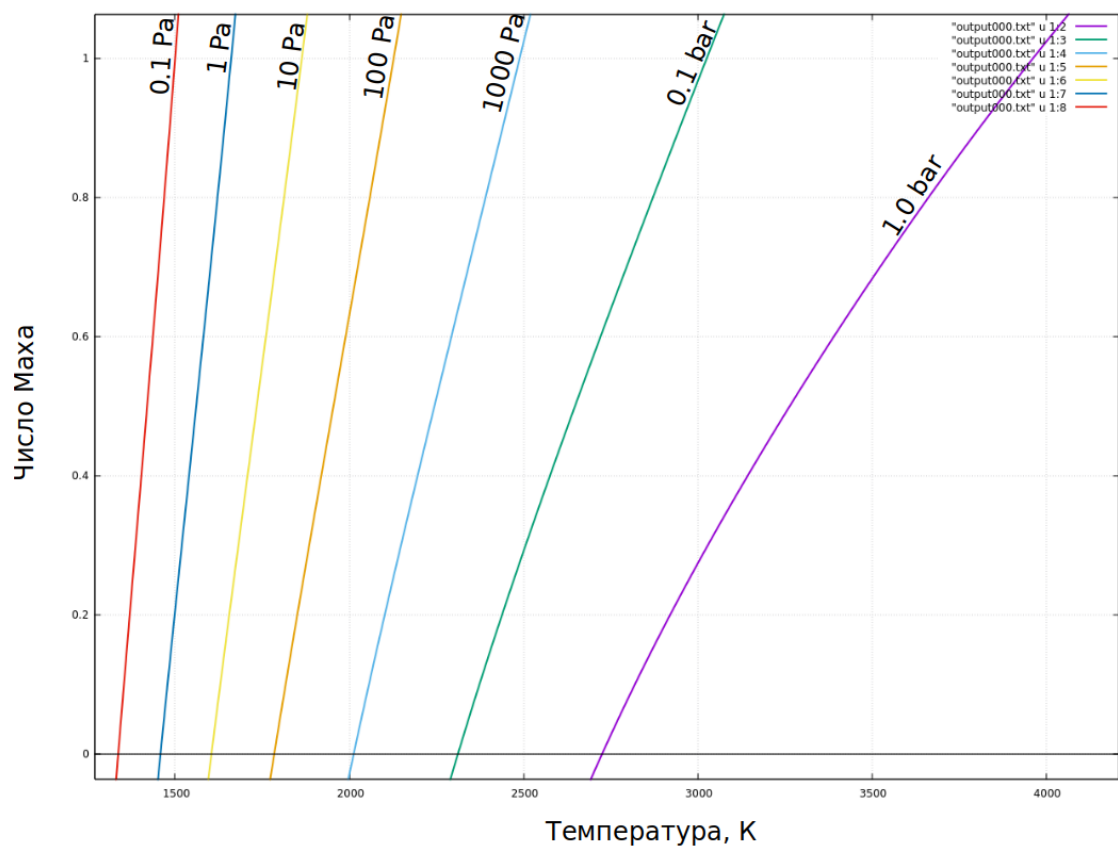


Рисунок 1.6 – Численные решения уравнения 1.1.4 – зависимости числа Маха от температуры для разных давлений. На рисунке решения выступают за границы  $Ma_{Kn} < 1$  и  $Ma_{Kn} > 0$ , однако в реальности таких значений встречаться не будет

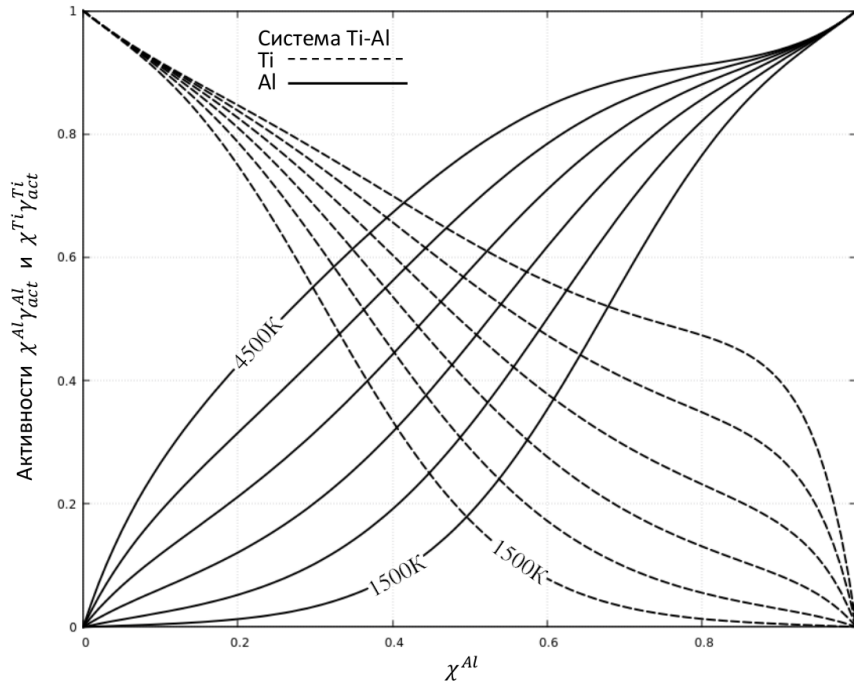


Рисунок 1.7 – Зависимости коэффициента активности, умноженного на мольную долю от мольно доли компонента.

### 1.2.1 Скрытая теплота плавления

Во время нагрева подложки в какой-то момент начинается плавление материала и часть теплоты будет уходить на фазовый переход. Для этого вводится следующая связь между энтальпией и температурой [5] 1.11.

$$h = \begin{cases} C_{p,s}T, & T < T_s \\ C_{p,s}T + h_f \frac{T-T_s}{T_l-T_s}, & T_s < T < T_l \\ C_{p,l}(T - T_l) + h_f + C_{p,s}T_l, & T_l < T \end{cases} \quad (1.11)$$

сгде  $C_{p,s}$ ,  $C_{p,l}$  – теплоёмкости в твёрдой и жидкой фазе соответственно,  $T_s$ ,  $T_l$  – крайние температуры в твёрдой и жидкой фазах, при которых не происходит плавления или затвердевания соответственно,  $h_f$  – энтальпия фазового перехода.

Такой подход позволяет моделировать теплоту плавления и более медленный рост температуры во время фазового перехода.

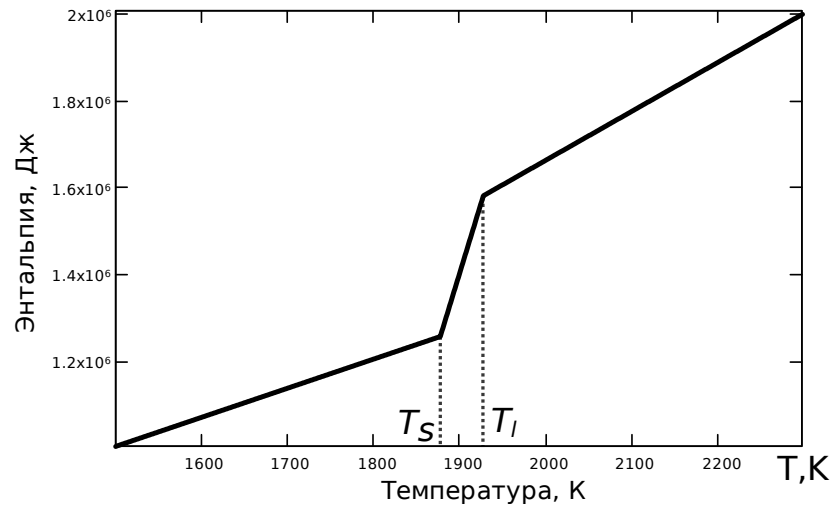


Рисунок 1.8 – Зависимость энтальпии от температуры для сплава Ti6Al, где  $T_s = 1878$ ,  $T_l = 1928$  [4]

### 1.2.2 Конвекция Марангони

Помимо скрытой теплоты плавления на форму бассейна расплава будет влиять эффекты, связанные с конвекцией. Однако в этой работе не проводится прямого численного моделирования гидродинамики. Поэтому применяется подход, описанный в работе *Balbaa, M.; Elbestawi, M.* [6]. Для учёта конвекции, связанной с эффектом Марангони используется эффективный коэффициент теплопроводности:

$$k_{eff} = k_l + hL \quad (1.12)$$

где  $k_{eff}$  – эффективный коэффициент теплопроводности,  $k_l$  – коэффициент теплопроводности в неподвижной жидкости,  $h$  – коэффициент конвективной теплопроводности и  $L$  – характерный размер мелтпула, обычно берётся равным половине его ширины.

Значение коэффициента конвективной теплопроводности внутри жидкого металла может быть рассчитано из числа Нуссельта, используя уравнение 1.13, которое определяет соотношение между конвективной и кондуктивной теплопередачей. Поскольку конвекция в жидком металле вызывается

эффектом Марангони, число Нуссельта может быть рассчитано как функция числа Марангони, как показано в уравнениях 1.14 и 1.15.

$$Nu = \frac{hL}{k_l} \quad (1.13)$$

$$Nu = 1.6129 \ln(Ma) - 10.183 \quad (1.14)$$

$$Ma = -\frac{d\sigma}{dT} \frac{L\Delta T \rho C_{p,l}}{\mu k_l} \quad (1.15)$$

где  $Nu$  - число Нуссельта,  $Ma$  - безразмерное число Марангони,  $dT$  - градиент температуры поверхностного натяжения (Н·м/К),  $L$  - характерная длина,  $\rho$  - плотность жидкости (кг/м<sup>3</sup>),  $C_{p,l}$  - удельная теплоемкость жидкости,  $k_l$  - термическая проводимость покоящейся жидкости (Вт/м·К),  $\mu$  - динамическая вязкость (кг/м·с),  $\Delta T$  - максимальный градиент температуры в расплавленной зоне, который принимается как разница температур между центром области плавления (максимальной температурой) и границей области плавления (температурой приведения в твердое состояние), и рассчитывается по формуле 1.16.

$$\Delta T = \frac{-C_{p,l} + \sqrt{C_{p,l}^2 + 2 \left( \frac{d\sigma}{dT\mu} \right)^2 dt \frac{Q_v}{\rho}}}{\left( \frac{d\sigma}{dT\mu} \right)^2} \quad (1.16)$$

$$dt = \frac{L}{v} \quad (1.17)$$



## 2 МОДЕЛИРОВАНИЕ

Во время селективного спекания порошкового металла под воздействием лазеров или пучков электронов, энергия от них вызывает нагрев частиц порошка на поверхности. При этом в точке воздействия источника энергии образуется область, где образуется бассейн расплавленного металла, который в последствии застывает и соединяется с предыдущими областями, создавая непрерывную деталь.

Моделирование поведения компонентов в этой области – потери от испарения, диффузия, конвекция, плавление и застывание – позволяет судить об итоговом составе получившейся детали и, как следствие, о её механических свойствах и микроструктуре.

### 2.1 Нульмерная модель

В процессе движения по засыпанному слою порошка, область расплава следует за источником и через какое-то время её размеры перестают расти и до смены направления движения сохраняются около определённого значения. Поэтому в данной модели рассматривается поведение концентраций компонентов в предположении бесконечно быстрой диффузии в бассейне расплава неизменной прямоугольной формы. На рисунке 2.1 изображена геометрическая интерпретация модели.

Уравнение на потоки 2.1 и формулы для каждого потока выглядят следующим образом 2.2 - 2.4:

$$\dot{m} = j_{melt} - j_{solid} - j_{evap} \quad (2.1)$$

$$j_{melt} = \lambda m \quad (2.2)$$

$$j_{solid} = \lambda m_0 \quad (2.3)$$

$$\lambda = \frac{v_{beam}}{L} \quad (2.4)$$

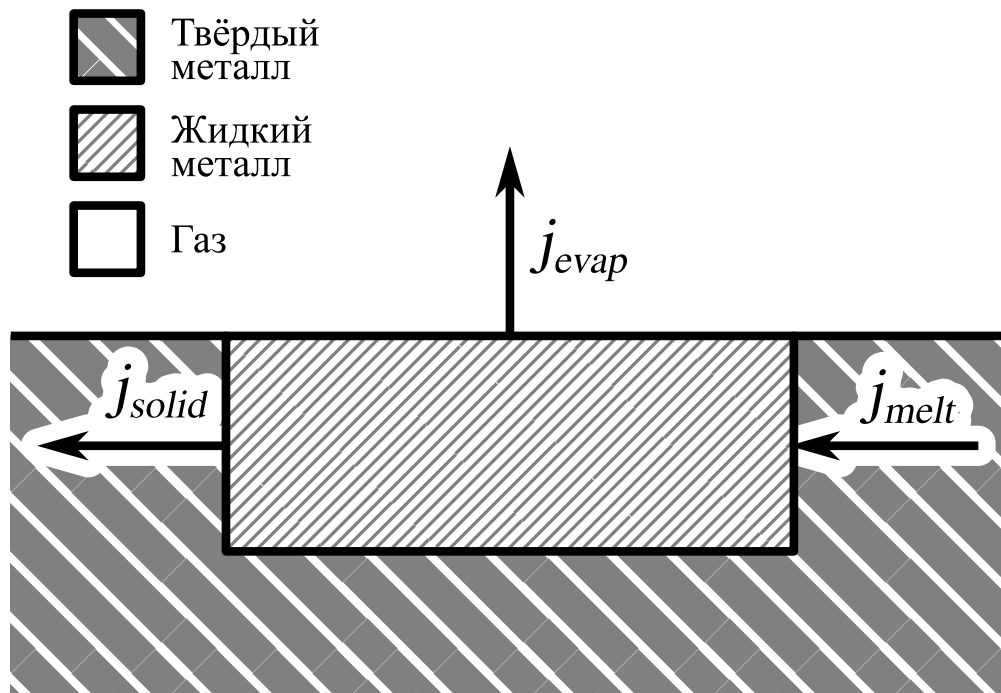


Рисунок 2.1 – Нульмерная модель бассейна расплава. Здесь  $j_{evap}$  – поток испарения,  $j_{melt}$ ,  $j_{solid}$  – потоки приходящего (плавящегося) и уходящего (застывающего) вещества соответственно, определяемые скоростью движения источника.

здесь  $v_{beam}$  – скорость сканирования, а  $m$  и  $m_0$  – текущая и начальная масса содержимого бассейна.

Таким образом уравнения 2.1 - 2.4 в связке с уравнениями для расчёта испарения 1.2 - 1.7 формируют систему, описывающую данную нульмерную модель.

Стоит отметить, что данная модель не учитывает многокомпонентности, а уравнение 2.1 может быть решено аналитически:

$$m = m_0 - \frac{j^{evap}}{\lambda}(1 - e^{-\lambda t}) \quad (2.5)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} m = m_0 - \frac{j^{evap}}{\lambda} \quad (2.6)$$

На рис. 2.2 изображено решение для бассейна расплавленного алюминия температурой 3000К, диаметром источника 0.1 мм, размеры бассейна раплава – 1000×300×100 мкм – длина, ширина и глубина соответственно.

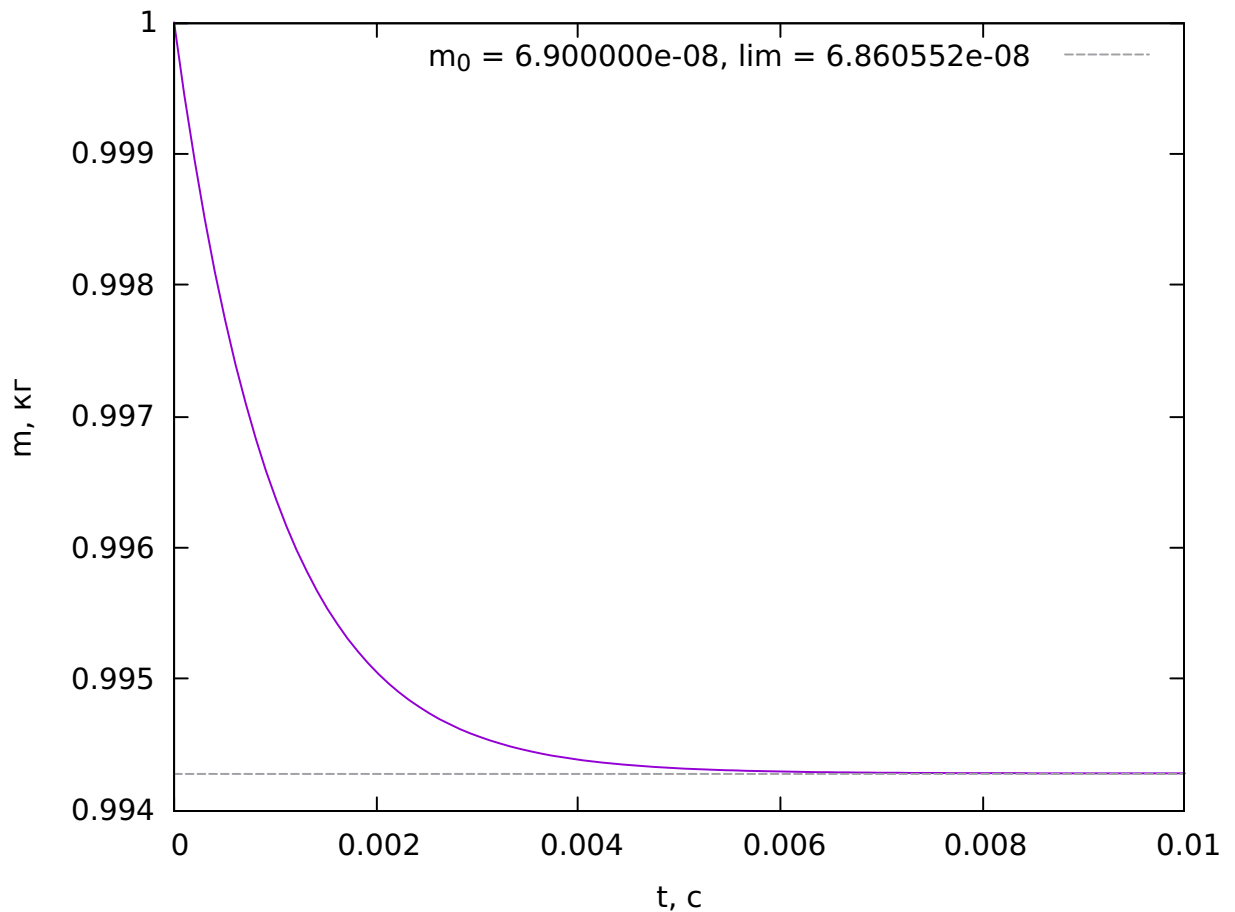


Рисунок 2.2 – Аналитическое решение уравнения 2.1

Параметры материала, необходимые для расчёта испарения были взяты из работы [4].

Однако для уравнения, записанного двух компонент компонент 2.7 аналитическое решение гораздо сложнее и в этой работе оно считается численно.

$$\dot{m}_\alpha = -j_\alpha \gamma_\alpha^{\text{акт}} \frac{\mu_\alpha}{m_\alpha} \frac{1}{\sum_\alpha \frac{\mu_\alpha}{m_\alpha}} + \lambda(m_\alpha^0 - m_\alpha) \quad (2.7)$$

Для этого уравнения были построены различные решения для разных температур. Они представлены на рисунках 2.3, 2.4. Очень важно отметить, что учёт активности играет довольно большую роль в итоговом составе сплава. Так важно понимать, что полученные в этой модели оценки для потерь являются оценкой сверху, так как при отсутствии такого интенсивного перемешивания, легколетучий компонент около поверхности будет в дефи-

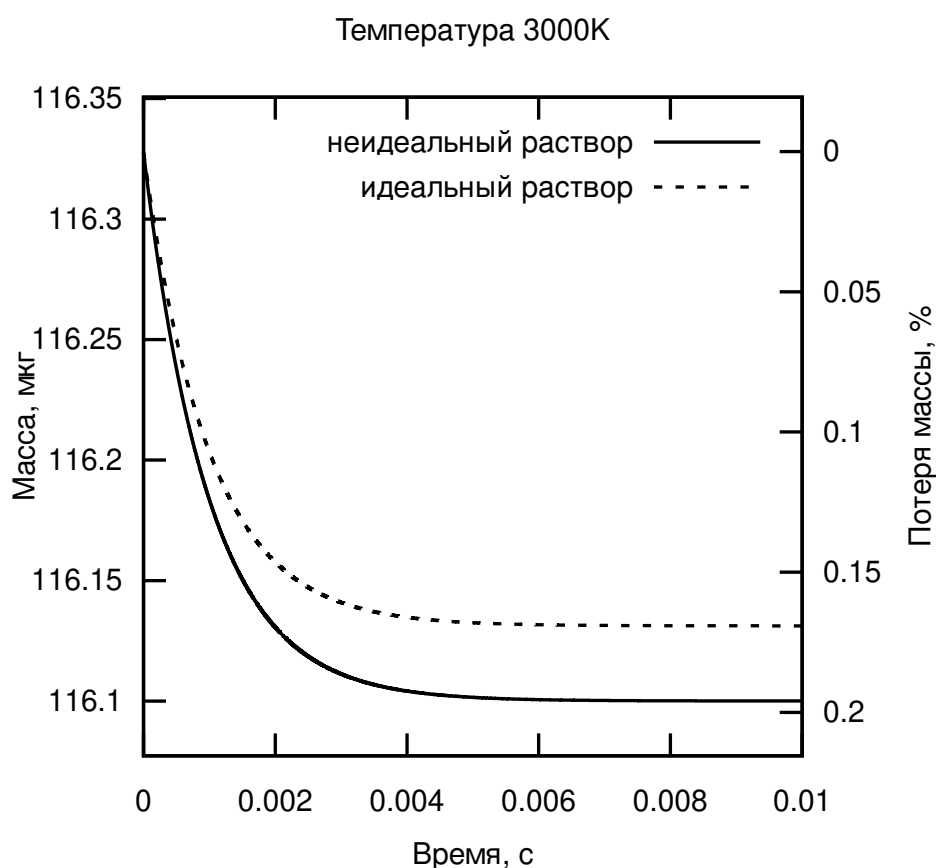


Рисунок 2.3 – Численное решение уравнения 2.1

ците. Поэтому его доставка и, следовательно испарение будут зависеть от процессов переноса.

## 2.2 Трёхмерная модель

Однако чтобы лучше описывать и изучать динамику компонентов в этом процессе необходимо учитывать больше эффектов. К примеру диффузия и конвекция компонентов под поверхностью испарения может приводить к тому, что концентрация легколетучего компонента у поверхности сильно снижается и, следовательно, испаряться будет гораздо меньше.

Следующая модель описывает теплопроводность, теплоту плавления, конвекцию марангони и диффузию компонентов в расплаве.

На прямоугольной области – подложке – решается уравнение теплопроводности 2.8.

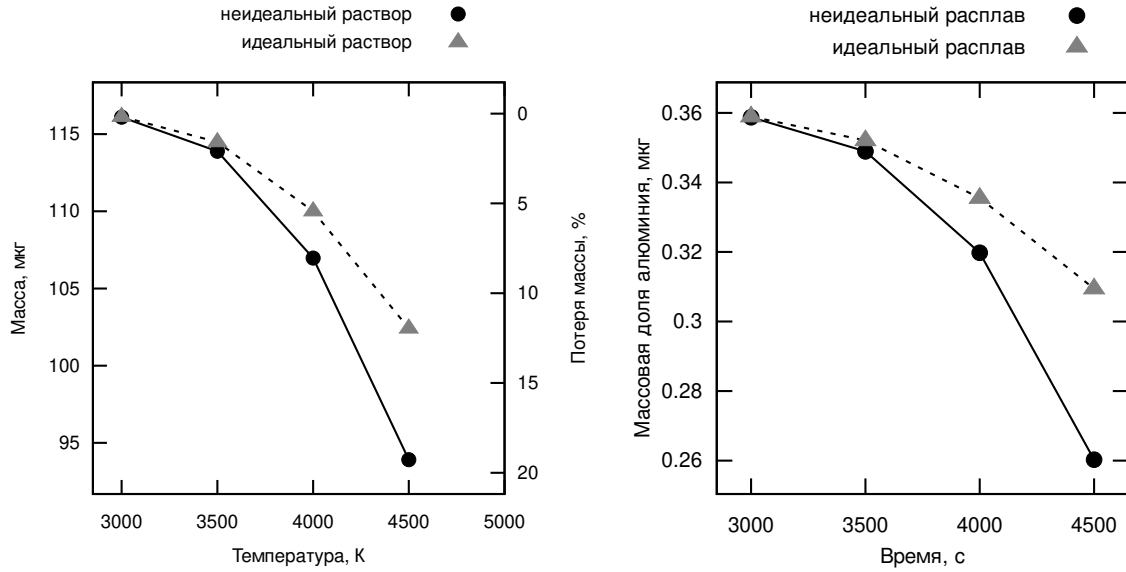


Рисунок 2.4 – Потери в сплаве TiAl по прошествии 0.01с при разных температурах с учётом неидеальности и без. На рисунке слева общая потеря массы материала, на рисунке справа массовая доля алюминия.

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \alpha \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right), \quad (2.8)$$

где  $\alpha = \chi \rho^{-1}$ ,  $h$  – удельная энтальпия,  $\chi$  – коэффициент теплопроводности,  $\rho$  – плотность. Важно отметить, что в уравнении в левой части стоит энтальпия. Она связывается с температурой по формуле 1.11, как уже было описано выше.

Граничное условие для этого уравнения представляют из себя постоянное значение  $T_{amb} = 300K$  на всех границах, кроме верхней, контактирующей с атмосферой и через которую идёт испарение. На этой границе устанавливается граничное условие на поток. В него входит как источник  $q_{source}$ , так и потери  $q_{evap}$  – уравнение 2.9.

$$\chi \frac{\partial T_{\Gamma}}{\partial z} \Big|_{z=0} = q_{source} - q_{evap}, \quad (2.9)$$

Однако в жизни всё сложнее и очень сильное влияние на теплоперенос оказывает конвекция, связанная с гидродинамикой и которая в данной работе напрямую не моделируется. Но конвекцию, связанную с эффектом Маран-

гони возможно описать эффективным коэффициентом теплопроводности, как это показано в 1.12 выше.

Следующий важный шаг в построении модели это описать поведение компонентов расплава в самом бассейне. Особенно важно это сделать потому, что от того, как металлы себя поведут и в каких концентрациях они окажутся у поверхности, будет зависеть то, сколько какого компонента в итоге испарится. В этой модели описывается перенос за счёт диффузии. В области расплава решается уравнение 2.10.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \left( \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) \quad (2.10)$$

Граничные условия для этого уравнения задаются следующим образом. На границе с твёрдой фазой поток задаётся равным нулю 2.11, а на границе с газом 2.12 – поток испарения. Если температуры для испарения будет недостаточно, то поток испарения будет просто равен нулю.

$$D \frac{\partial c}{\partial x} = 0. \quad (2.11)$$

$$D \frac{\partial c}{\partial z} = -j_{evap}(T) \quad (2.12)$$

### 2.2.1 Численная схема

Описанная в этой работе трёхмерная модель реализовывалась для расчёта на графических процессорах. Это несёт целый ряд преимуществ: высокая производительность в решении задач, которые можно разбить на большое количество задач более мелких, а так же возможность легко масштабировать программу для более мощных ресурсов.

Чтобы использовать преимущества графического процессора, было решено использовать явную схему для решения уравнений теплопроводности и диффузии:

$$\frac{h_{n,m,l}^{k+1} - h_{n,m,l}^k}{\Delta t} = \alpha \left( \frac{T_{n-1,m,l}^k - 2T_{n,m,l}^k + T_{n+1,m,l}^k}{dr^2} + \frac{T_{n,m-1,l}^k - 2T_{n,m,l}^k + T_{n,m+1,l}^k}{dr^2} + \frac{T_{n,m,l-1}^k - 2T_{n,m,l}^k + T_{n,m,l+1}^k}{dr^2} \right) \quad (2.13)$$

$$\frac{c_{n,m,l}^{k+1} - c_{n,m,l}^k}{\Delta t} = D \left( \frac{c_{n-1,m,l}^k - 2c_{n,m,l}^k + c_{n+1,m,l}^k}{dr^2} + \frac{c_{n,m-1,l}^k - 2c_{n,m,l}^k + c_{n,m+1,l}^k}{dr^2} + \frac{c_{n,m,l-1}^k - 2c_{n,m,l}^k + c_{n,m,l+1}^k}{dr^2} \right) \quad (2.14)$$

Здесь индекс  $k$  означает шаг по времени, индексы  $n, m, l$  – по координатам  $x, y, z$  соответственно.

Граничные условия для уравнения теплопроводности из 2.9 становятся 2.15.

$$\chi \frac{T_{n,m,l}^k - T_{n,m,l-1}^k}{\Delta z} \Big|_{z=0} = q_{source} - q_{evap}, \quad (2.15)$$

Чтобы понять как устроены граничные условия для уравнения диффузии можно посмотреть на рисунок 2.5. На нём изображено возможное окружение ячейки с жидкостью. Сверху газ, с которым граничное условие – поток  $j_{evap}$ . Справа и снизу – твёрдая фаза, следовательно поток равен нулю. Наконец, граница на границе с жидкостью уравнение считается как обычно.

На рисунках 2.6 - 2.8 показаны примеры расчётов этой модели в разных сечениях.

### 2.2.2 Валидация модели

Для того чтобы проверить реализованную модель были проведены расчёты с разным шагом по сетке ( $dr$  в уравнении 2.13). Результаты некоторых из этих расчётов для сплава Ti6Al4V приведены на рисунке 2.9 друг рядом с другом для наглядности. Сравнивалось количество общей потерянной массы

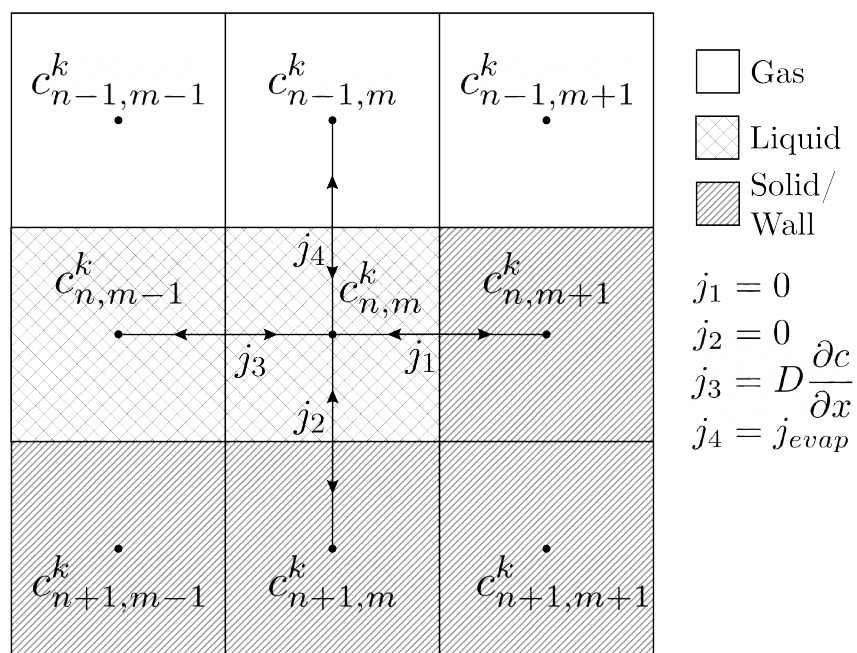


Рисунок 2.5 – Наглядно продемонстрированные граничные условия на уравнение диффузии.

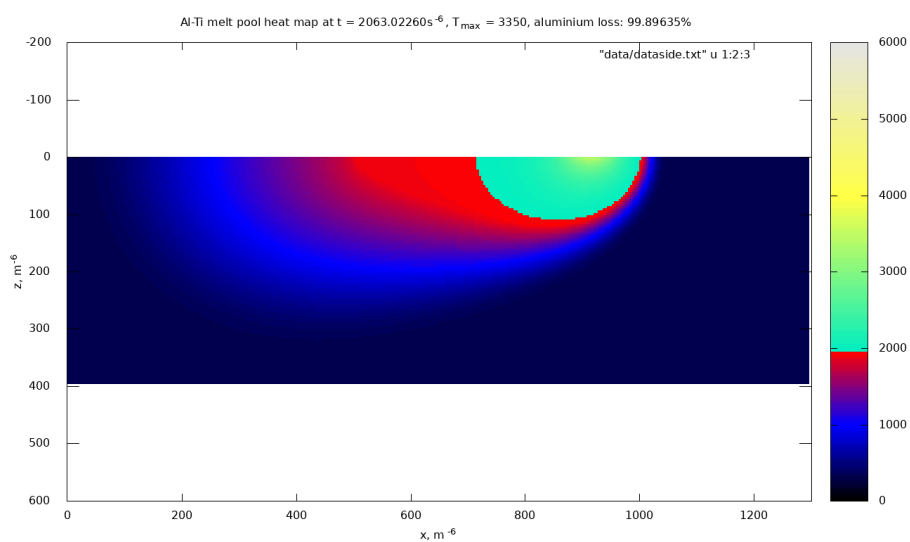


Рисунок 2.6 – Карта температур. Сечение вдоль XZ. Мощность пучка 300Вт, скорость сканирования 0.3м/с



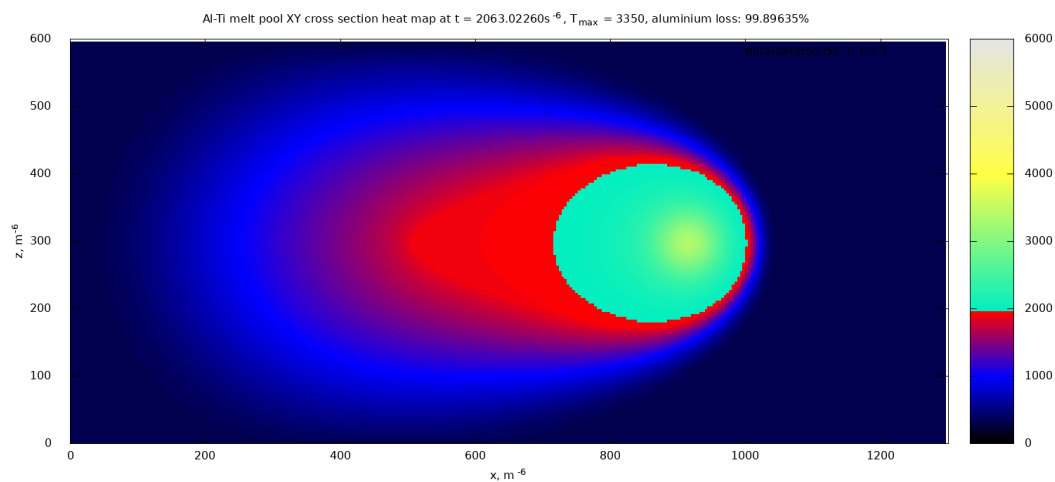


Рисунок 2.7 – Карта температур. Сечение вдоль XY. n

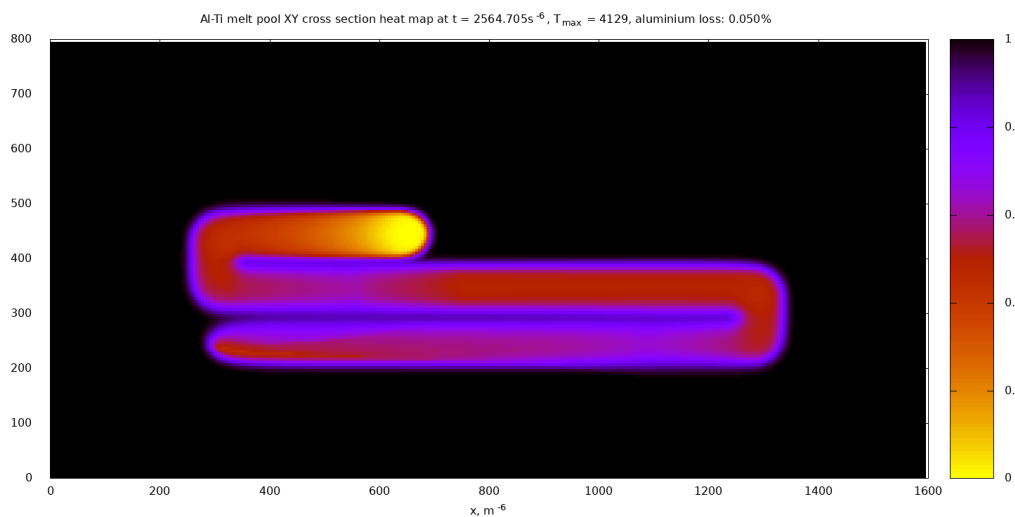


Рисунок 2.8 – Карта концентрации алюминия. Сечение вдоль XY. Мощность пучка 300Вт, скорость 1м/с

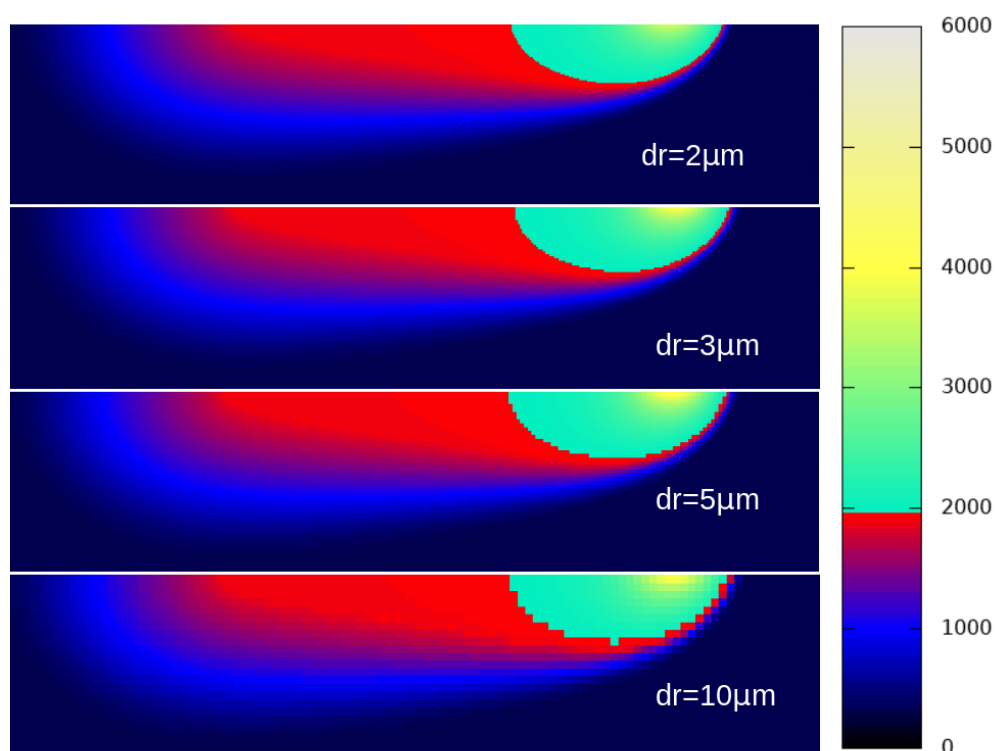


Рисунок 2.9 – Распределение температуры в подложке сплава Ti6Al4V, рассчитанное с разными шагами по сетке  $dr$

по итогу моделирования одной дорожки длиной 1 мм. В качестве референсного результата, с которым сравнивались все остальные, был использован расчёт с самым мелким шагом – 2 мкм. На рисунке можно видеть графики отклонения каждого из расчётов от референсного и отклонение итоговых значений от референсного.

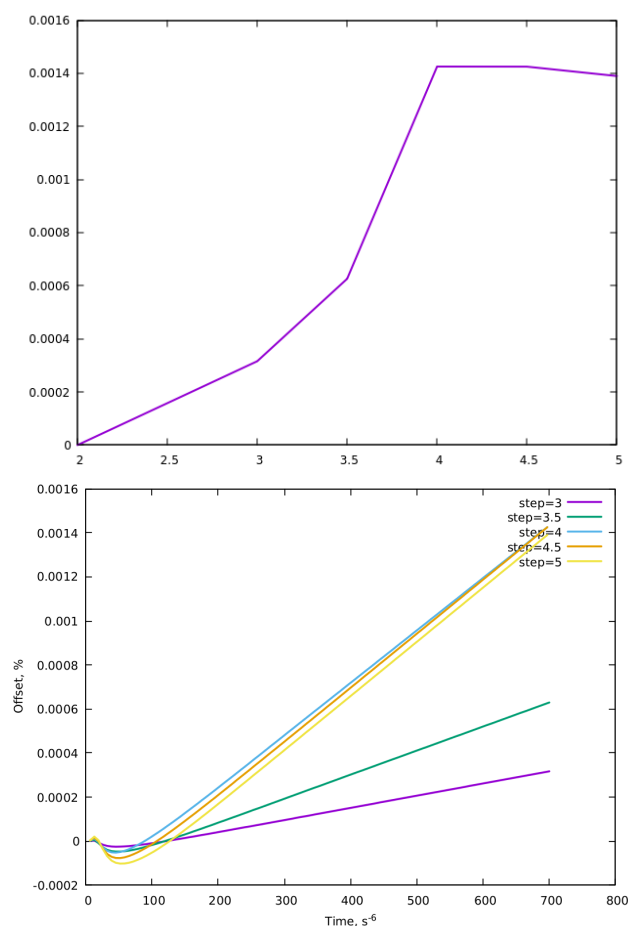


Рисунок 2.10 – Сверху – график ошибки конечной потери массы %, от шага по сетке мкм, снизу – графики ошибок потерь массы от времени для разных расчётов

Результаты моделирования были сопоставлены с результатами эксперимента, проведенного в работе [4]. В рамках эксперимента измерялись размеры полученных бассейнов расплавов и оценивалось, как учёт различных эффектов влияет на точность моделирования. Результаты сравнения представлены на рисунке 2.11, где приведены результаты расчетов модели с учетом эффективного коэффициента теплопроводности, без учета и результаты эксперимента [4].

Сравнивая результаты моделирования с учетом эффективного коэффициента теплопроводности ванны расплава и результаты расчетов без учета этого коэффициента, становится ясно, что в первом случае форма ванны расплава получается более близкой к реальности, чем во втором случае.

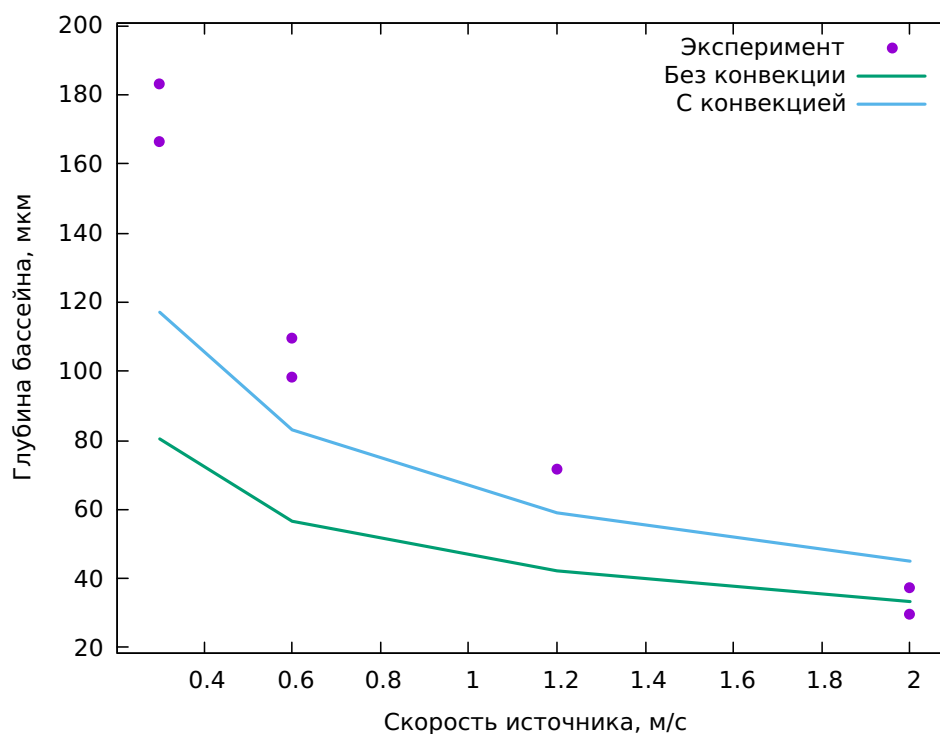


Рисунок 2.11 – Глубина бассейна расплава в зависимости от скорости сканирования.

Таким образом, учет эффективного коэффициента теплопроводности оказал значительное влияние на точность моделирования ванны расплава.

### 2.3 Модель для учёта сложных гидродинамических процессов

Однако чтобы ещё точнее описывать подвод легколетучего компонента к поверхности, необходимо учитывать конвекцию, вызванную сильными гидродинамическими эффектами, описание которых в рамках этой работы было бы слишком сложным. Поэтому было предложено интегрировать разработанную трёхмерную модель с более сложной программой, уже моделирующей тот же самый процесс селективного спекания металлических порошков, со всей сложной гидродинамикой, но для материала, состоящего из одной компоненты.

Первым шагом к такой интеграции служит модель, которая берёт за основу геометрию, температуру и поле скоростей, рассчитанные этой программой и считает конвекцию в квазистационаре. То есть мы исходим из

предположения, что форма расплавленного металла и структура потоков в нём меняются незначительно.

Основное уравнение, описывающее конвекцию в данной модели:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v_x \frac{\partial c}{\partial x} + v_y \frac{\partial c}{\partial y} + v_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0$$

А численная явная схема для уравнения выглядит следующим образом:

$$\frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} = \begin{cases} -\frac{v_i}{2\Delta x_i}(3u_i - 4u_{i-1} + u_{i-2}), & v_i > 0 \\ \frac{v_i}{2\Delta x_i}(3u_i - 4u_{i+1} + u_{i+2}), & v_i < 0 \end{cases} \quad (2.16)$$

Граничные условия сформулированы так, чтобы обеспечивать испарение на любой границе с газом и приток и отток массы на границах ячеек, смотрящих по направлению движения и против. А в самом поле скоростей из компоненты параллельной направлению движения источника вычитается лазера. С помощью такой замены координат мы транслируем эту геометрию через подложку, другими словами создаём эффект движения ванны с расплавом за источником.

### 3 РЕЗУЛЬТАТЫ

В рамках работы над исследованием влияния испарения на процесс селективного спекания многокомпонентных металлических порошков, стояла задача об описании динамики концентраций в ванне расплава. Этот процесс определяет в какой концентрации компоненты окажутся у поверхности, а значит и какой вклад в поток испарения и в потери, связанные с ним, они будут вносить. Область у поверхности всегда будет обеднена сильнее, чем более глубокие уровни расплава. Как только легколетучий компонент выходит из глубины, он сразу испаряется. Таким образом процессы переноса играют одну из важнейших ролей в формировании итогового материала и его состава.

Сначала была сформулирована нульмерная модель, которая описывает движение ванны расплава вслед за источником энергии и предполагает неизменную прямоугольную форму ванны расплава и очень быстрое перемешивание. В таком приближении можно судить о максимально возможном обеднении легколетучим компонентом, так как его наличие у поверхности всегда гарантировано предположением о быстром перемешивании.

По результатам расчётов на этой модели оказалось, что неидеальность расплава сильно влияет на итоговый состав, приводя к ещё более сильному обеднению. Также было отмечено, что концентрации компонентов выходят на режим и не меняются по истечении времени работы модели.

Затем для описания динамики концентраций в ванне расплава была сформулирована новая самосогласованная модель, считающая нагрев от источника, плавление, тепловые потери от испарения и эффективную конвекцию, вызванную эффектом Марангони. Таким образом форму ванны расплава не нужно брать снаружи. Также эта модель учитывает диффузию компонентов, возникающую вследствие испарения.

В этой модели не было выявлено сильного влияния неидеальности. Однако было замечено, что учёт эффектного конвективного коэффициента

приближает форму бассейна расплава к реальным, полученным в экспериментах.

Наконец, в рамках интеграции кода с программой KiSSAM с довольно сложной моделью, где считается гидродинамика и учитывается большое количество эффектов, описание которых в рамках этой работы было бы слишком сложным, была разработана модель, которая берёт за основу данные расчёта из неё, такие как геометрию, температуру, скорости и в считает конвекцию в квазистационаре.

Это привело к сильному (по сравнению с предыдущей моделью) росту потерь, связанных с испарением. В дальнейшем возможна дальнейшая интеграция с кодом программы KiSSAM.

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Knight Charles J. Theoretical modeling of rapid surface vaporization with back pressure // AIAA journal. — 1979. — Vol. 17, no. 5. — P. 519–523.
2. Hertz H. Ueber die Verdunstung der Flüssigkeiten, insbesondere des Quecksilbers, im luftleeren Raume // Annalen der Physik. — 1882. — Vol. 253, no. 10. — P. 177–193.
3. Langmuir Irving. The vapor pressure of metallic tungsten // Physical review. — 1913. — Vol. 2, no. 5. — P. 329.
4. Klassen Alexander. Simulation of Evaporation Phenomena in Selective Electron Beam Melting : doctoralthesis ; FAU University Press. — 2018. — P. xxiii, 238 S.
5. Hu Henry and Argyropoulos Stavros A. Mathematical modelling of solidification and melting: a review // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. — 1996. — Vol. 4, no. 4. — P. 371.
6. Balbaa Mohamed and Elbestawi Mohamed. Multi-Scale Modeling of Residual Stresses Evolution in Laser Powder Bed Fusion of Inconel 625 // Journal of Manufacturing and Materials Processing. — 2022. — Vol. 6, no. 1. — P. 2.