

АННОТАЦИЯ

Работа посвящена моделированию процесса селективного плавления многокомпонентного материала и изучению изменения концентраций его компонента. 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 математической модели.

В работе сформулировано несколько моделей изменения концентрации компонентов в сплаве: нульмерная, двух и трёх мерная без гидродинамики, а также модель для расчёта концентраций на основе поля скоростей, рассчитанного в программе KiSSAM с гидродинамикой.

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 | 8 |
| 1.1.5 Неидеальность расплава | 9 |
| 1.2 Форма бассейна расплава | 9 |
| 1.2.1 Скрытая теплота плавления | 10 |
| 1.2.2 Конвекция Марангони | 11 |
| 2 МОДЕЛИРОВАНИЕ | 13 |
| 2.1 Нульмерная модель | 13 |
| 2.2 Модель конвекции | 15 |
| 3 РЕЗУЛЬТАТЫ | 20 |
| БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК | 21 |

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 поверхности 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 γ – 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, ρ_{Kn}, ρ_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]:

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

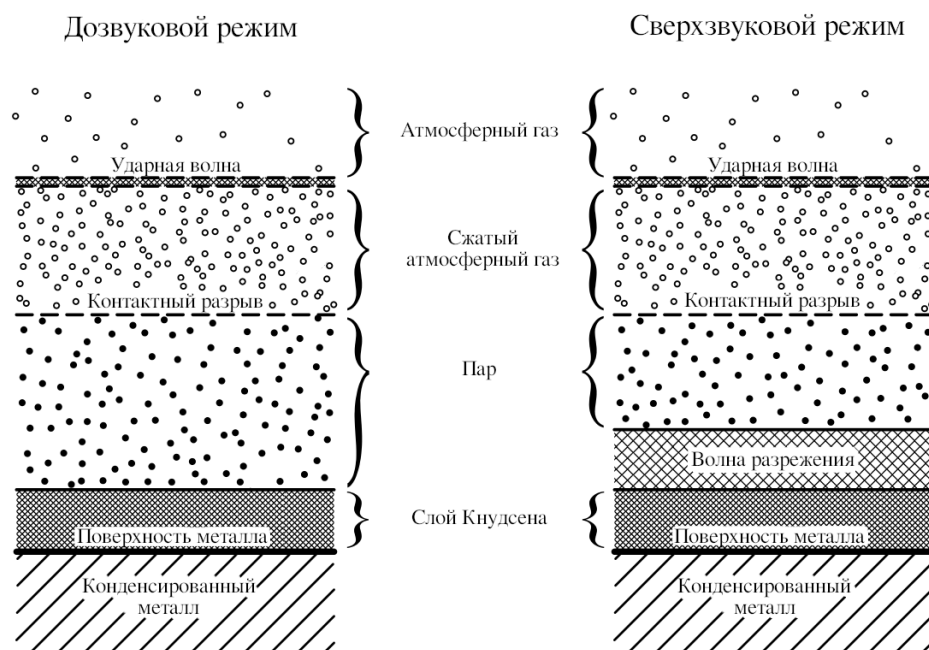


Рисунок 1.1 – Схематическое представление распределения структуры потока пара над поверхностью испарения. В режимах: дозвуковом (слева) и сверхзвуком (справа) [4].

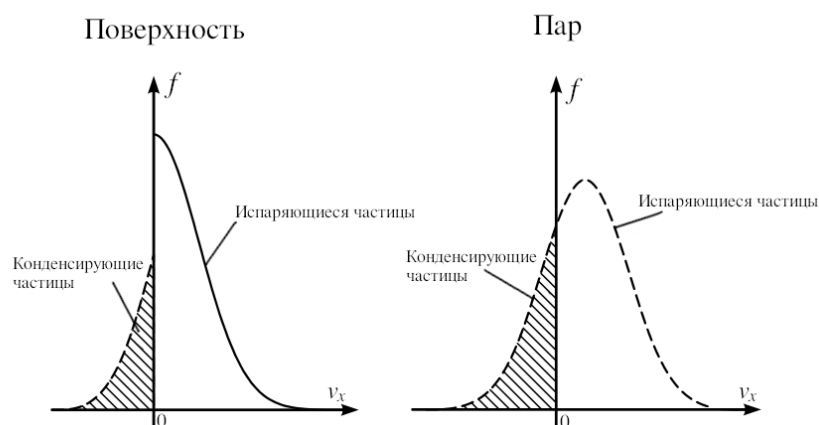


Рисунок 1.2 – Распределение вертикальной компоненты скорости частиц на поверхности и на верхней границе слоя Кнудсена(в паре)

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

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

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

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 давления 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.

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 α , χ^α – 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, поимимо описания модели испарения необходимо описать поведение вещества в самом бассейне расплава под источником энергии.

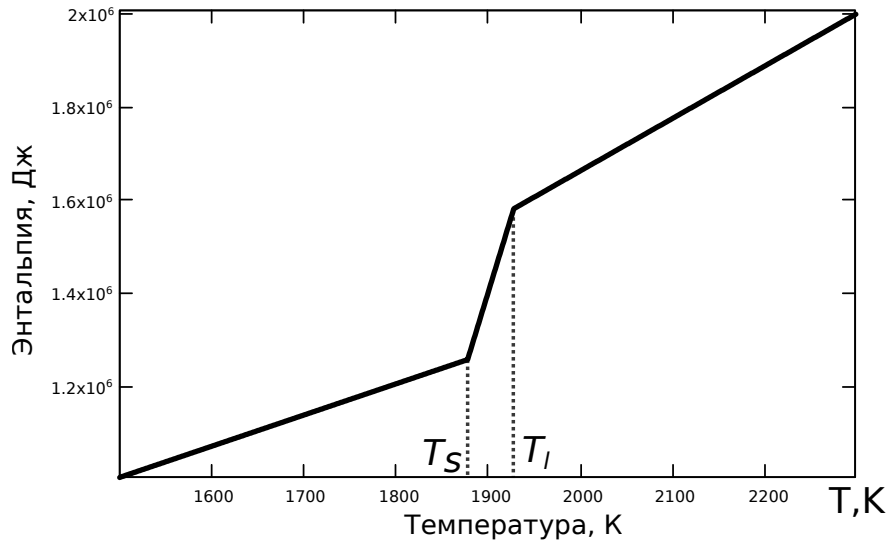


Рисунок 1.3 – Зависимость энтальпии от температуры для сплава Ti6Al, где $T_s = 1878$, $T_l = 1928$ [4]

1.2.1 Скрытая теплота плавления

Для того, чтобы описать форму бассейна расплава и считать распространение компонентов в нём, нужно описать теплопередачу и фазовый переход между твёрдой и жидкой фазами. Для этого вводится следующая связь между энтальпией и температурой:

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

сгде $C_{p,s}$, $C_{p,l}$ – теплоёмкости в твёрдой и жидкой фазе соответственно, T_s , T_l – крайние температуры полностью твёрдой и жидкой фазы, при которых фазового перехода нет, h_f – энтальпия фазового перехода.

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

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.* [5]. 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, ρ - плотность жидкости (кг/м³), $C_{p,l}$ - удельная теплоемкость жидкости, k_l - термическая проводимость покоящейся жидкости (Вт/м·К), μ - динамическая вязкость (кг/м·с), ΔT - 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:

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

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

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

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

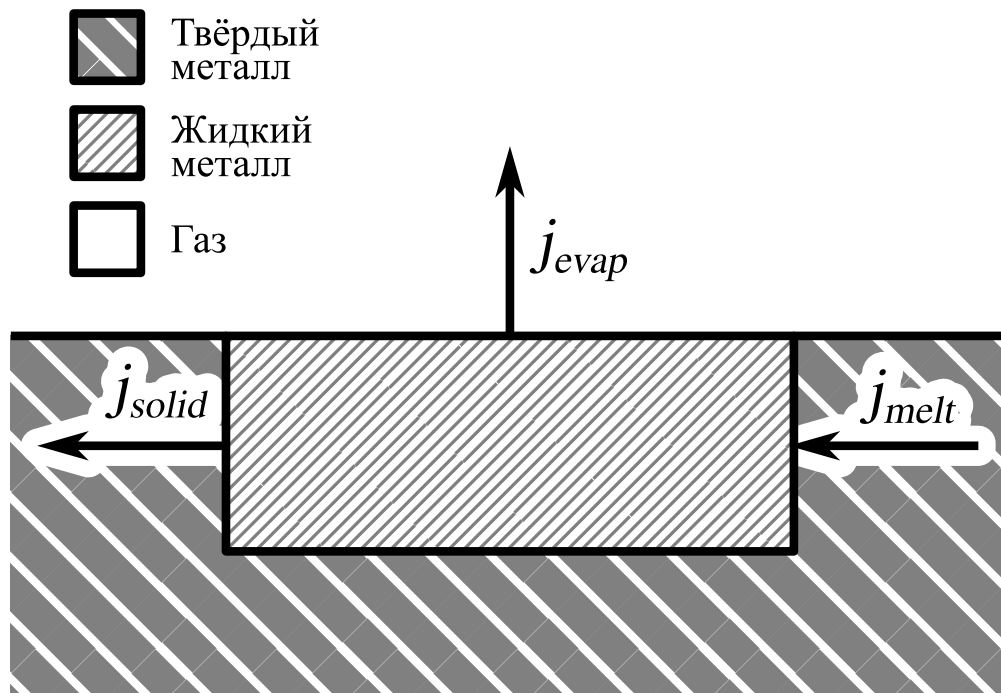


Рисунок 2.1 – Нульмерная модель бассейна расплава. Здесь j_{evap} – поток испарения, j_{melt} , j_{solid} – потоки приходящего (плавящегося) и уходящего (застывающего) вещества соответственно, определяемые скоростью движения источника.

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.

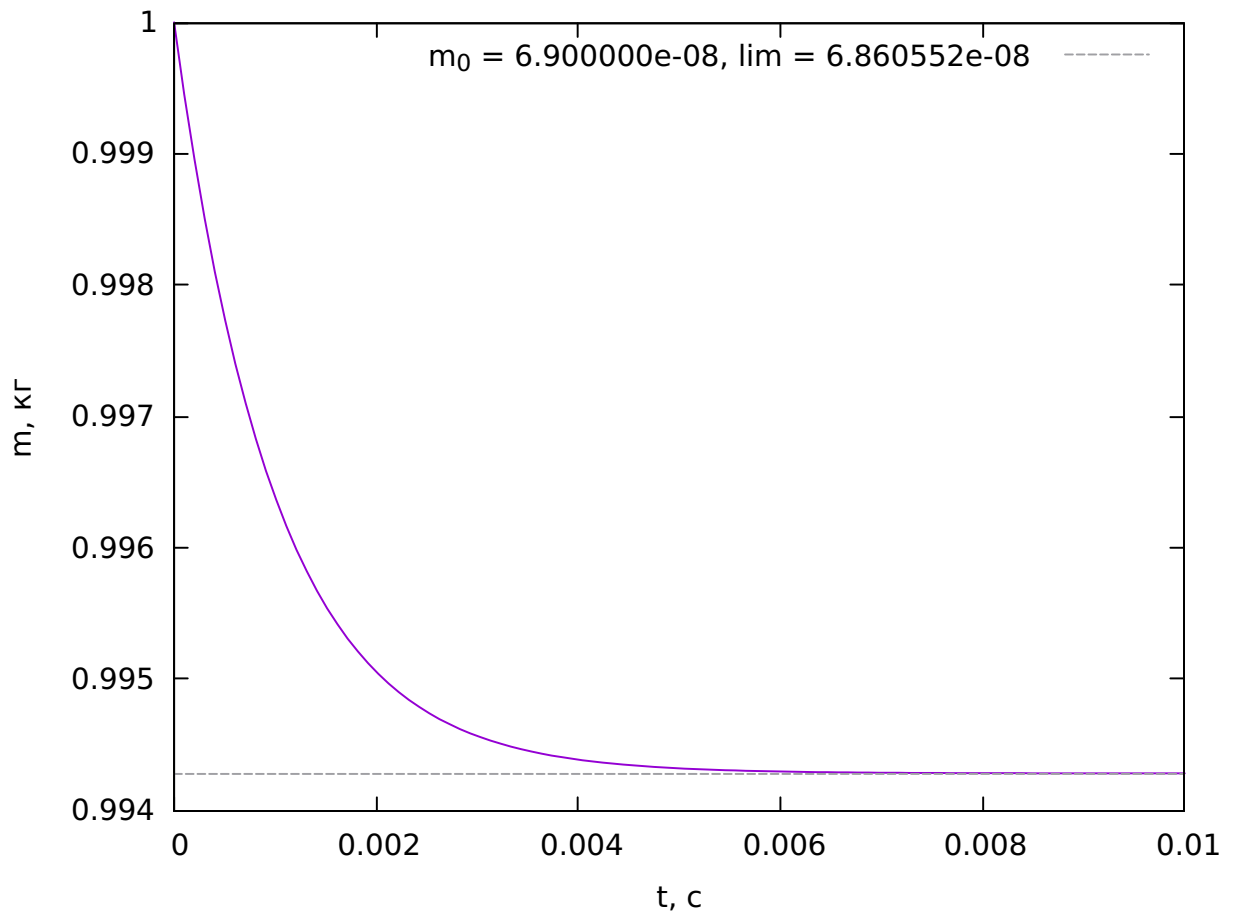


Рисунок 2.2 – Аналитическое решение уравнения 2.1

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

Уравнение для 2 компонент:

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

2.2 Модель конвекции

$$\frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} = \begin{cases} -\frac{v_i}{2\Delta x_i} (3u_i - 4u_{i-1} + u_{i-2}), & v_i > 0 \\ \frac{v_i}{2\Delta x_i} (3u_i - 4u_{i+1} + u_{i+2}), & v_i < 0 \end{cases} \quad (2.8)$$

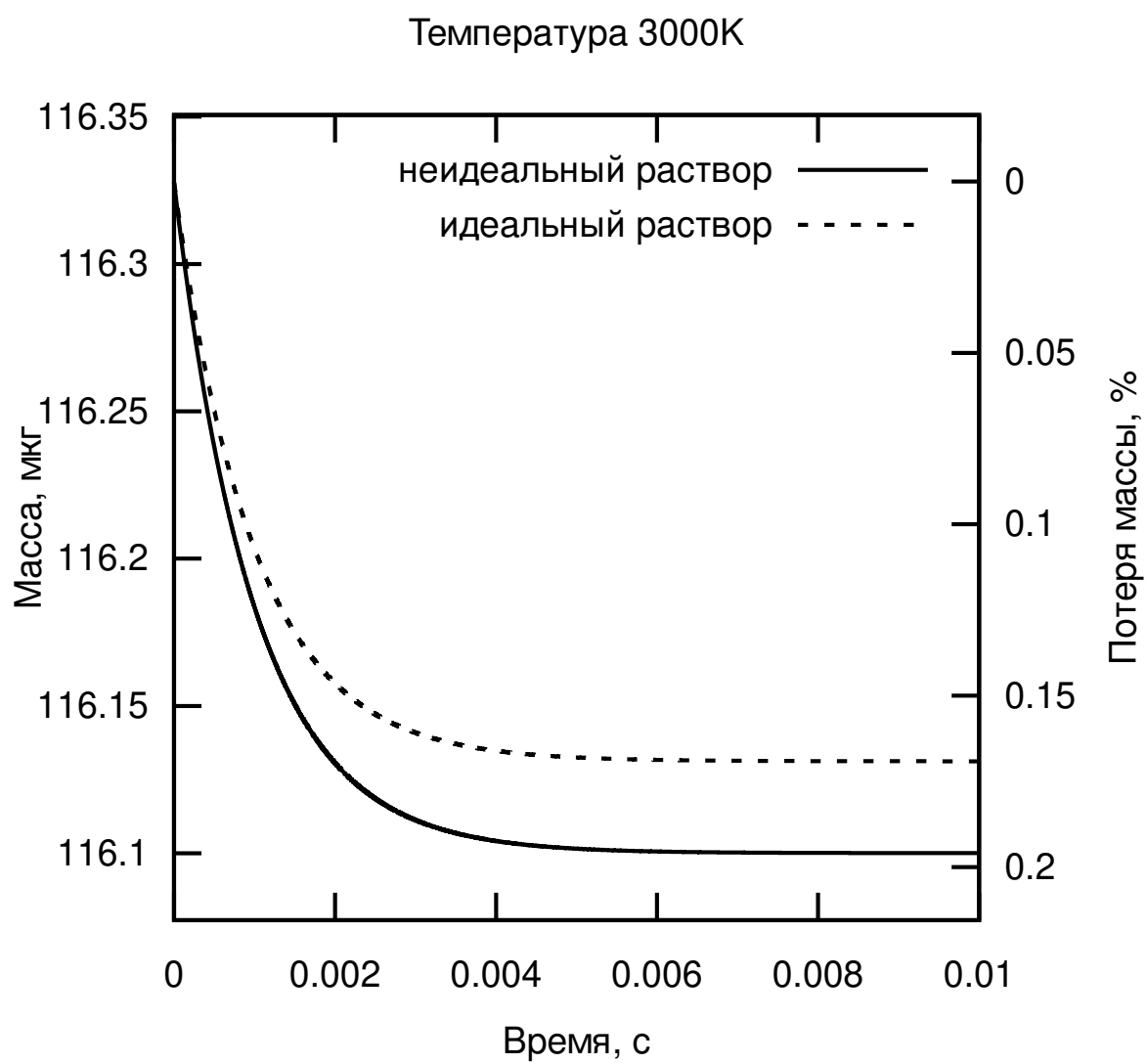
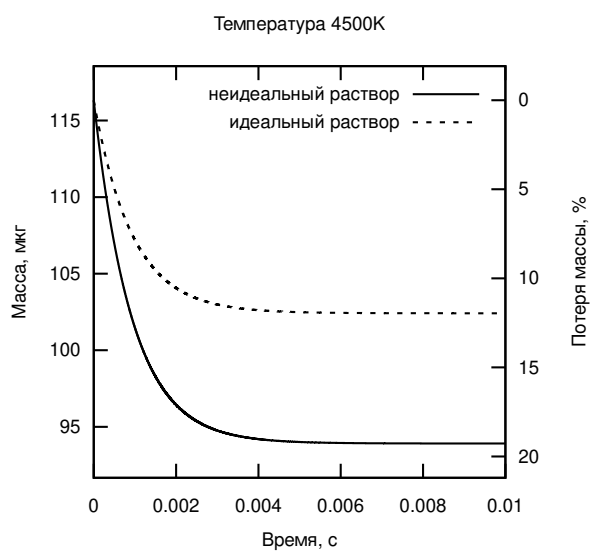
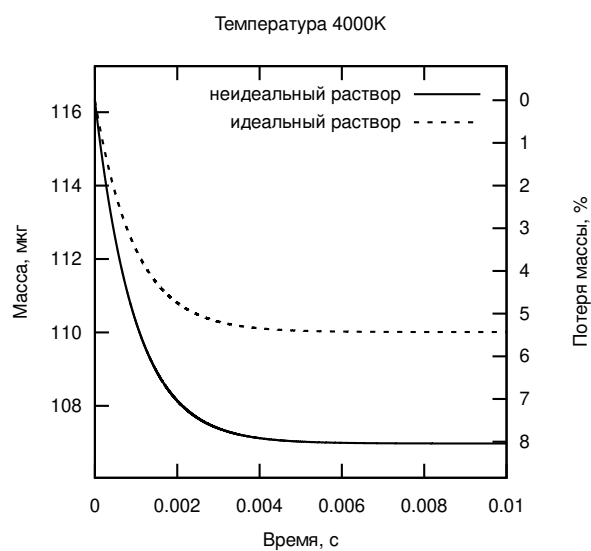
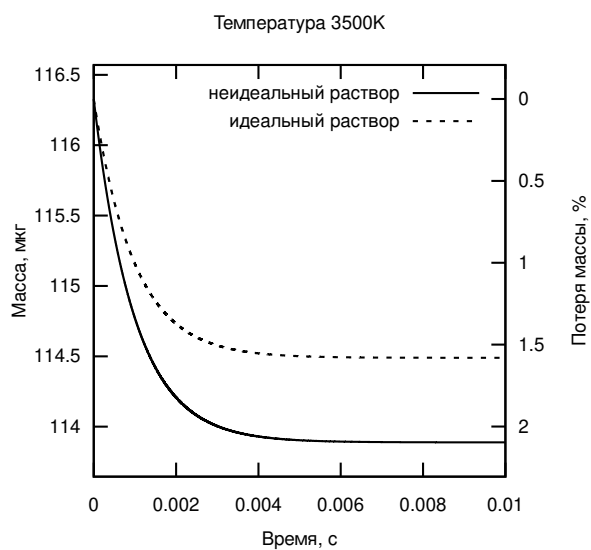
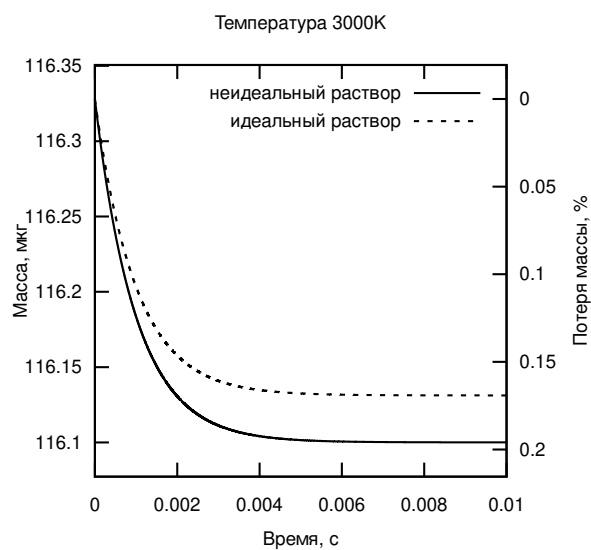
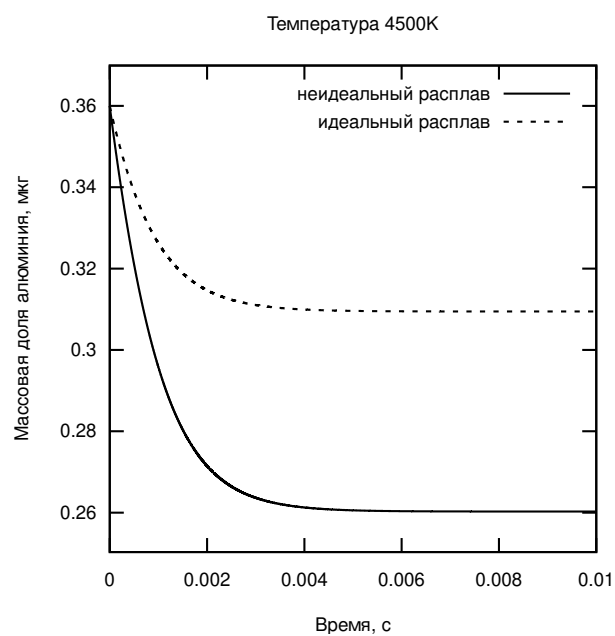
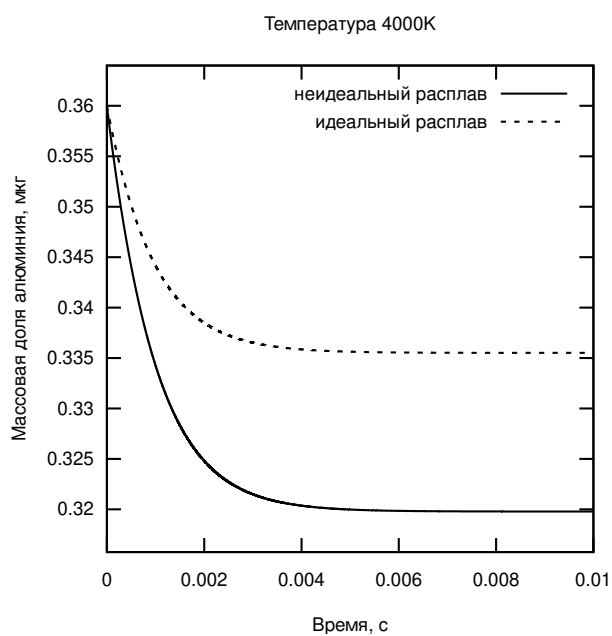
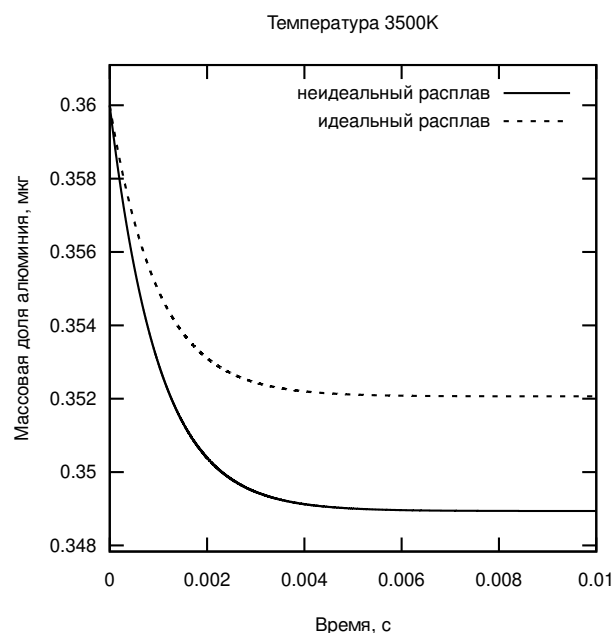
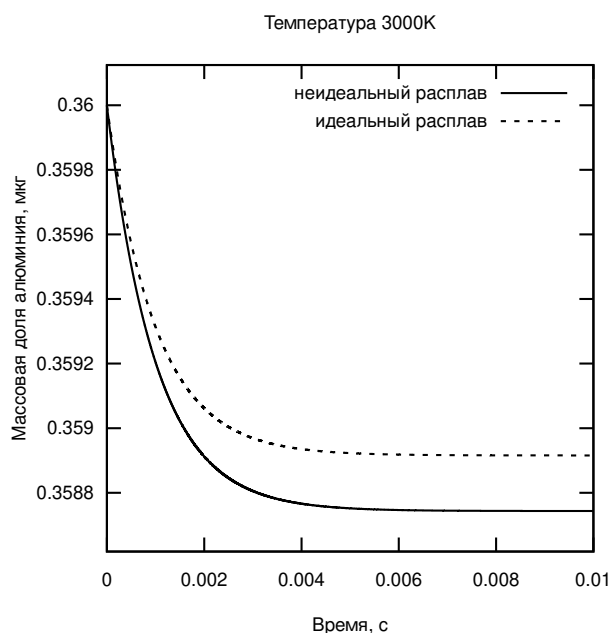
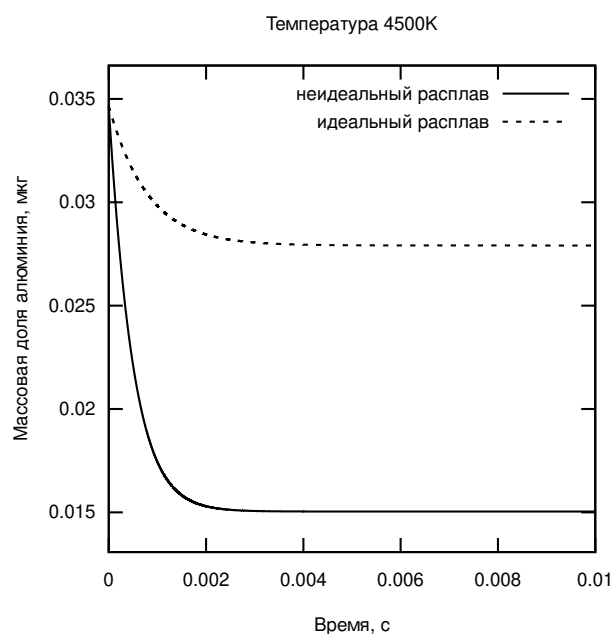
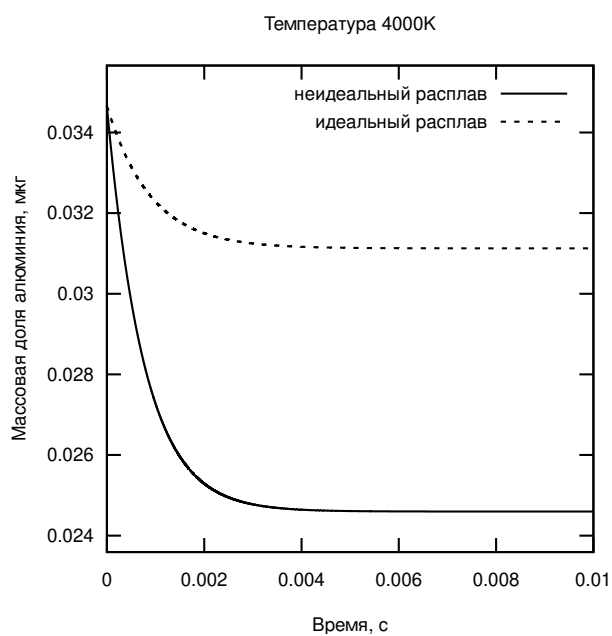
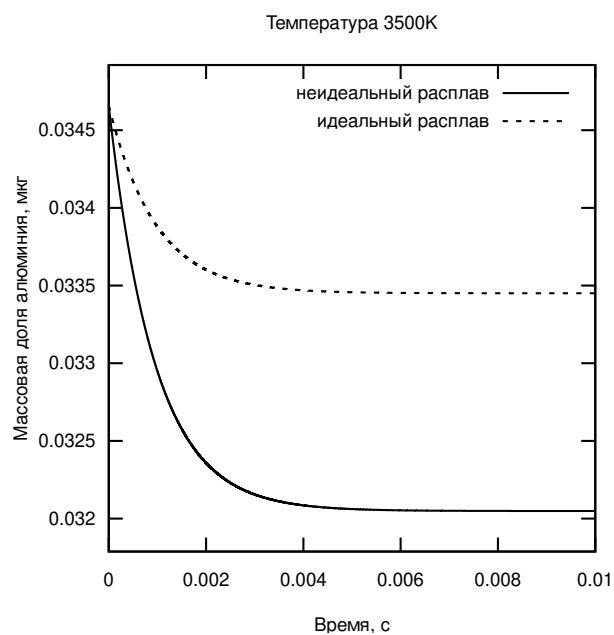
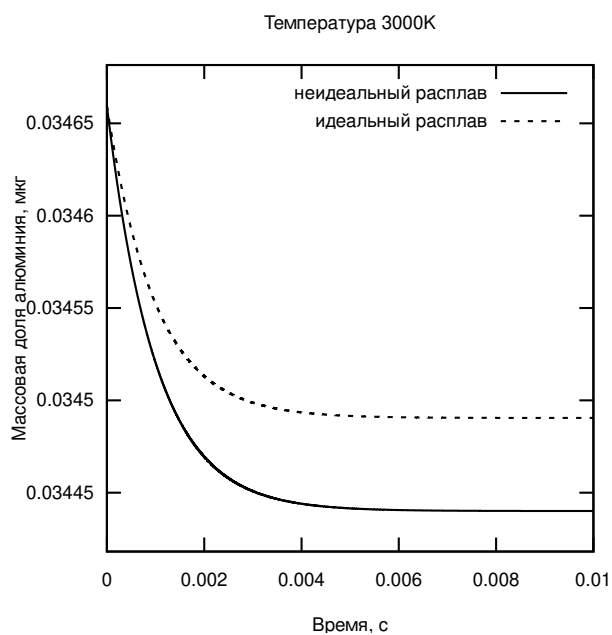


Рисунок 2.3 – Численное решение уравнения 2.1







3 РЕЗУЛЬТАТЫ

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. 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.