



РОСАТОМ

ГОСУДАРСТВЕННАЯ КОРПОРАЦИЯ ПО АТОМНОЙ ЭНЕРГИИ «РОСАТОМ»

ФГУП “РФЯЦ-ВНИИЭФ”

«Разработка комплекса программного обеспечения для моделирования физических процессов, протекающих при селективном лазерном сплавлении с целью прогнозирования структуры, свойств материалов, а также получения изделий с заданными свойствами, и проведения топологической оптимизации изделий (Виртуальный 3D-принтер.)»

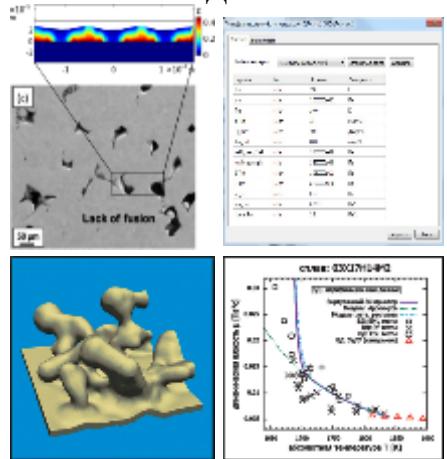
Докладчики:

Быков Александр Николаевич
Потапкин Борис Васильевич
Кривилев Михаил Дмитриевич

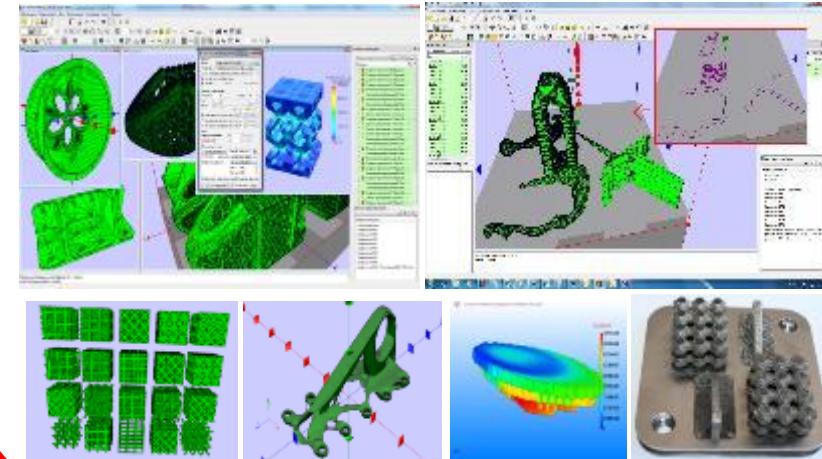
Соисполнители проекта ЕОПТ-МТ-97

“Виртуальный 3D-принтер”

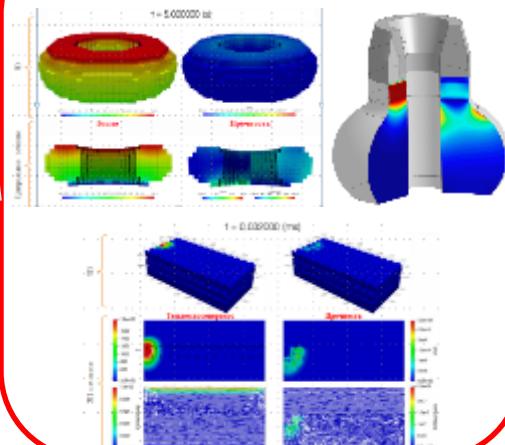
УдГУ



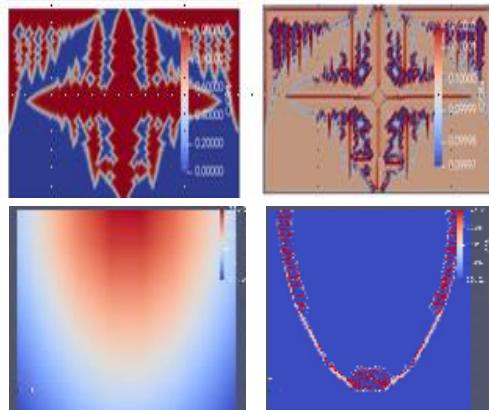
РФЯЦ-ВНИИЭФ



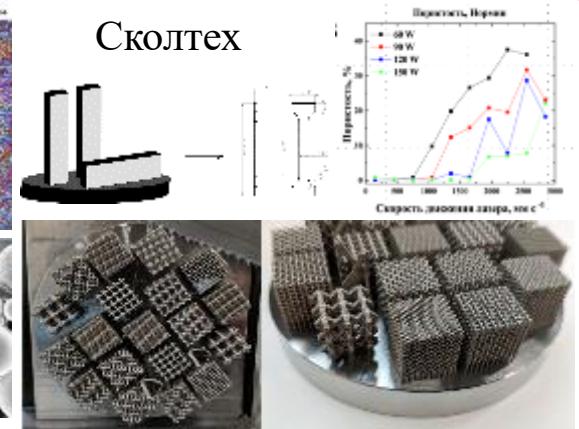
КНИТУ-КАИ



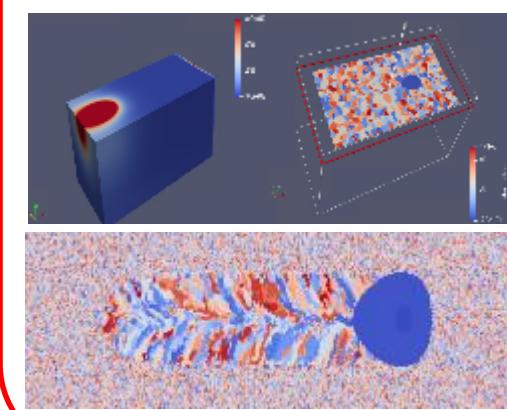
НИЦ КИ



Сколтех

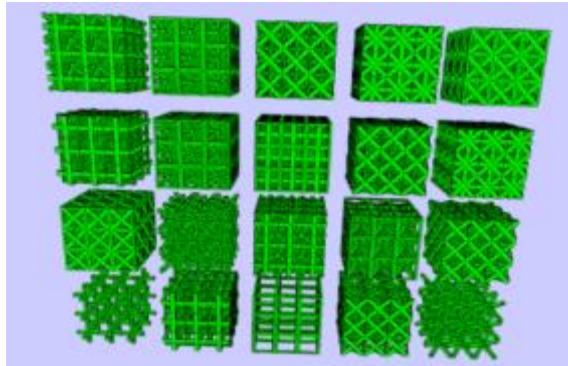
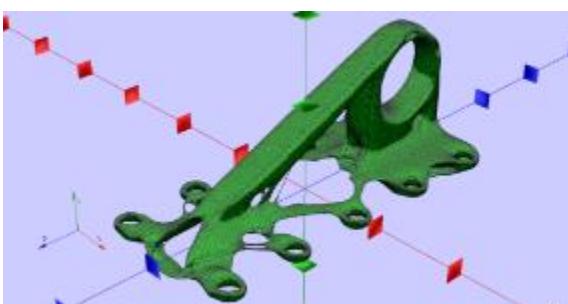
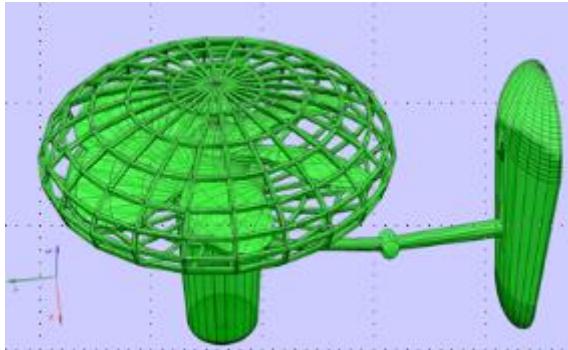


КИНТЕХ

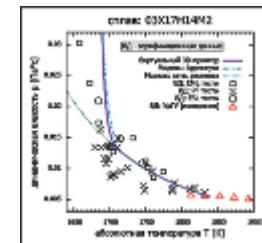
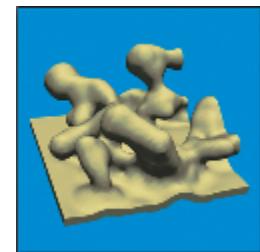
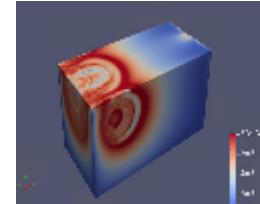
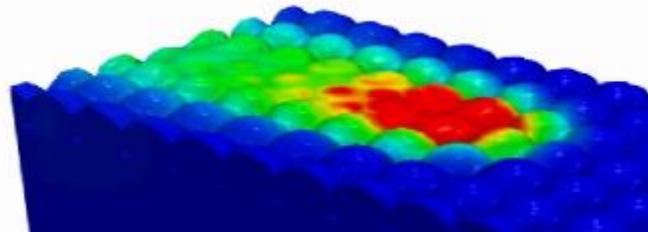
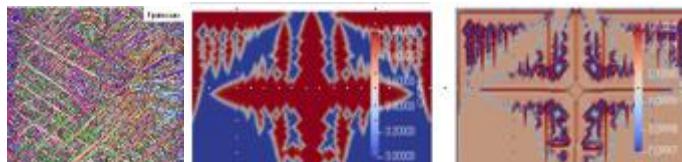


Составные части «Виртуального 3D-принтера».

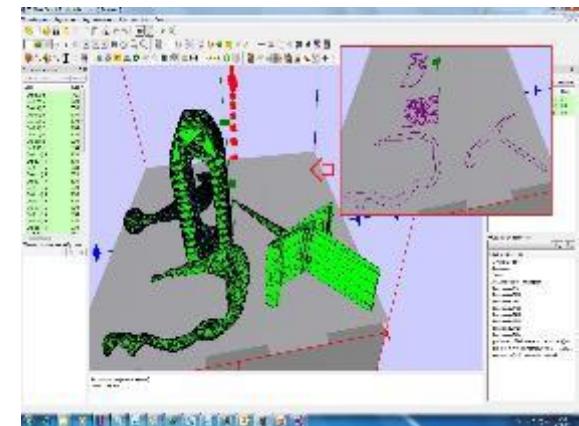
Блок «Проектирование»



Блок «Моделирование»



Блок «Производство»

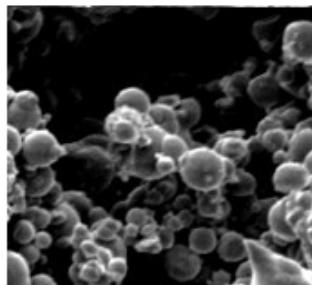


Многомасштабность – МАКРО-, МЕЗО-, МИКРОУРОВНИ.



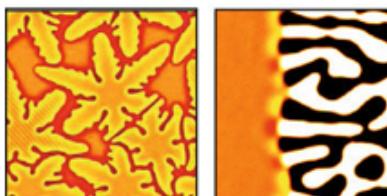
МАКРОУРОВЕНЬ – УРОВЕНЬ ИЗДЕЛИЯ

структурный уровень – от нескольких сплавленных слоев до всего изделия,
пространственный масштаб – от 1 мм^3 до 1000 мм^3



МЕЗОУРОВЕНЬ – УРОВЕНЬ СЛОЯ ПОРОШКА

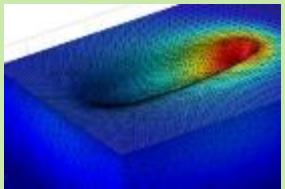
структурный уровень – от одиночных частиц порошка до нескольких слоев компакта,
пространственный масштаб – от 1 мкм^3 до 1 мм^3



МИКРОУРОВЕНЬ – УРОВЕНЬ ЗЁРЕН

структурный уровень – от одиночных атомов до элементов кристаллической субструктуры,
пространственный масштаб – от $0,1 \text{ нм}^3$ до 10 мкм^3

МЕЗОУРОВЕНЬ



«Тепломассоперенос мезоуровень»



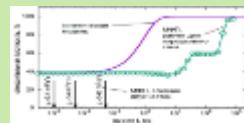
«Клеточные автоматы»,
«Микроструктура»

Расчеты на мезоуровне – точные и долгие, позволяют исследовать процессы и рассчитать различные зависимости для быстрого использования

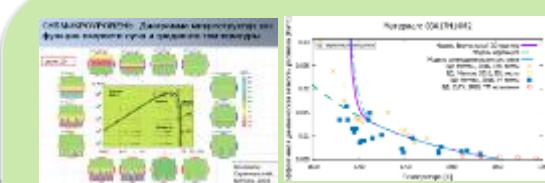
Решение проблем типа:

- 1) «Плохие дорожки» - большая пористость, материал плохо расплавлен (спечен);
- 2) Микроструктура не обеспечивает нужный уровень прочностных свойств.

Интеграция. УРОВЕНЬ СОГЛАСОВАНИЯ



«Усадка и дефекты»,
«Геометрия зоны сплавления»



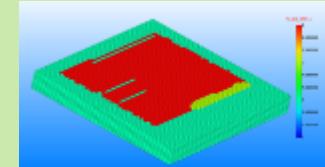
«Теплофизические свойства» и
«УРС» (БД свойств материалов)

Использование различных расчетно-экспериментальных данных для быстрого использования в расчетах

Оптимальные
режимы работы
оборудования

www.rosatom.ru

МАКРОУРОВЕНЬ



«Тепло макроуровень» и
«Прочность макроуровень»

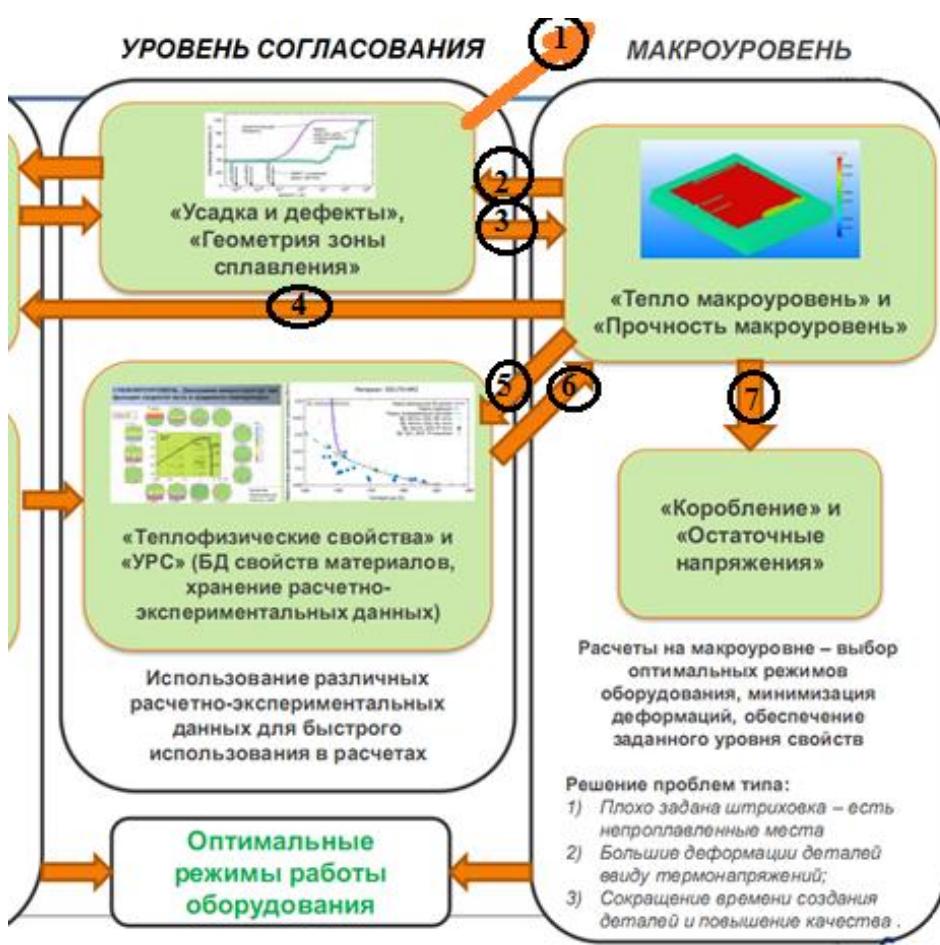
«Коробление» и
«Остаточные напряжения»

Расчеты на макроуровне – выбор оптимальных режимов оборудования, минимизация деформаций, обеспечение заданного уровня свойств

Решение проблем типа:

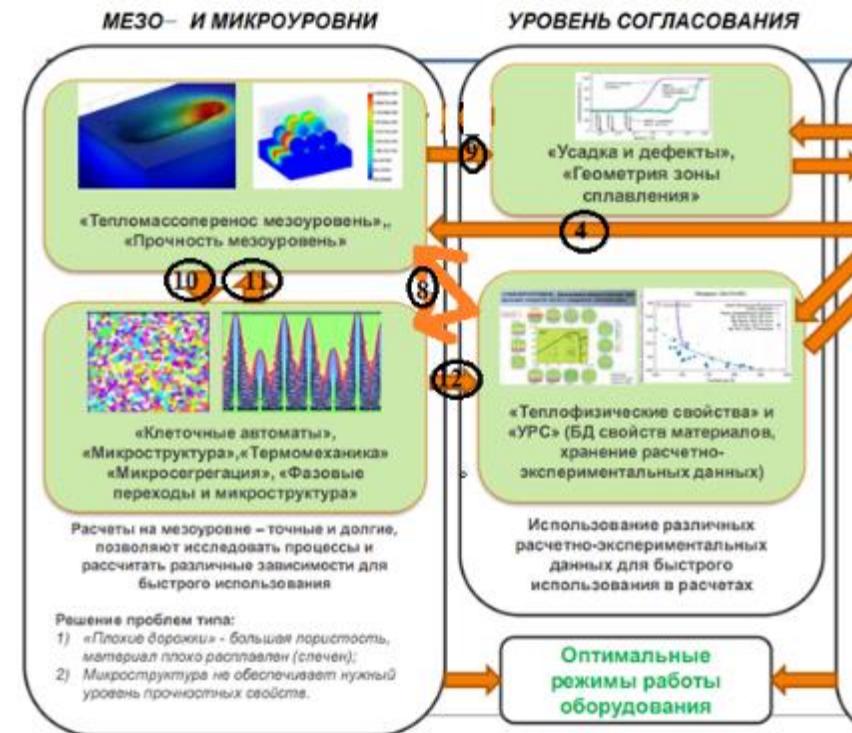
- 1) Плохо задана штриховка – есть непроплавленные места
- 2) Большие деформации деталей ввиду термонапряженй;
- 3) Сокращение времени создания деталей и повышение качества .

Обмен данными между макроуровнем и уровнем согласования



- 1) Передача технологических карт для использования на стадии предпечатной подготовки.
- 2) Передача температур и текущего значения пористости (усадки) для использования экспресс-модели усадки, геометрии фрагмента детали и параметров слоя и штриховки для расчетов в ГЗС.
- 3) Возврат новых значений пористости (усадки).
- 4) Данные о температурах, градиентах температур.
- 5) Температура, градиенты температуры, скорость сканирования, остаточная пористость.
- 6) Теплофизические свойства, механические св-ва по карте микроструктур.
- 7) Данные о температурах, градиентах температур, остаточной пористости и механических свойствах материала для расчета деформаций и остаточных напряжений.

Обмен данными между мезоуровнем и уровнем согласования



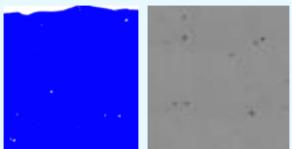
- 4) Температура, градиенты температуры, скорость сканирования, геометрия области (с порошком), параметры штриховки.
- 8) Необходимые свойства из БД.
- 9) Данные для экспресс-моделей модулей «ГЗС» и «Усадка и дефекты».
- 10) Данные для расчета микроструктуры (распределения примесей, температур, градиентов температур).
- 12) Типы первичной и зеренной микроструктуры и мех. св-ва (теория прочности поликристаллических материалов) для прочностных расчетов на мезоуровне.

Уровни моделирования

Макроуровень:

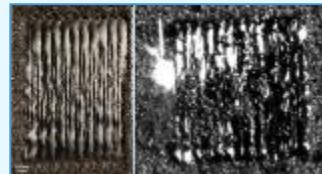
- Напряжения
- Перекашивание

Дорожка – 3 CPU*hrs
 Слой (~1 мм²) – 24 CPU*hrs
 Объемный образец (~1 мм³) – 1500 CPU*hrs
 Производительность >10⁷ ячеек/с, линейный скейлинг, на кластере



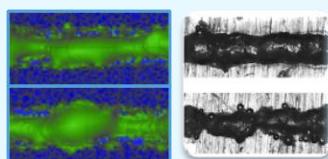
Часть детали: ~2x2x2 мм³

- Пористость
- Остаточные напряжения
- Однородность
- Температурная история / Скорость отвердевания



Слой: 0.1x1x1 мм³

- Однородность
- Шероховатость
- Толщина



Дорожка: ~50x50x3000 мкм³

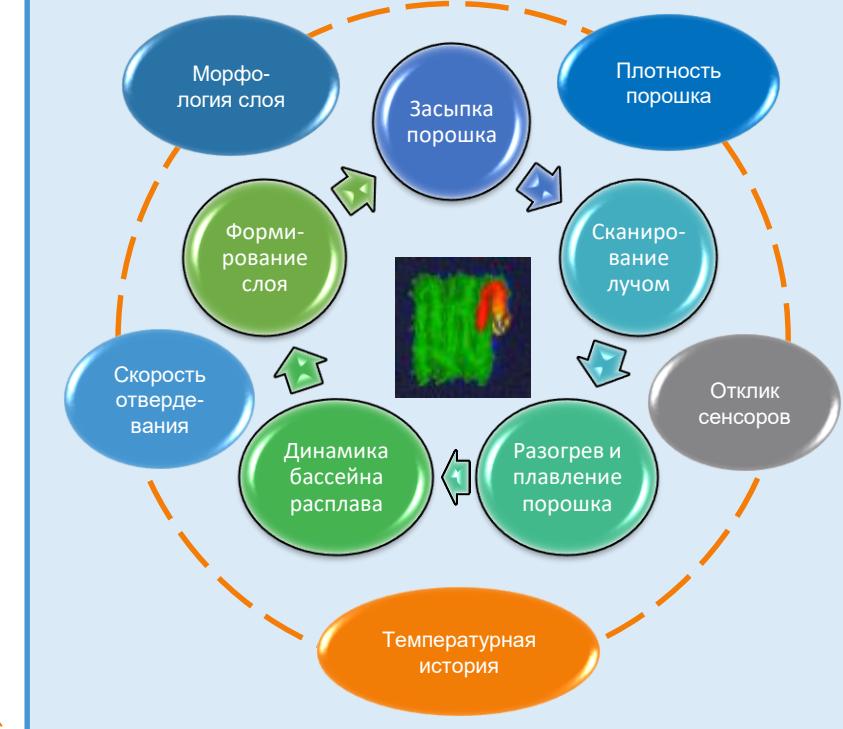
- Однородность
- Ширина
- Глубина
- Ширина области денудации

Температурная история

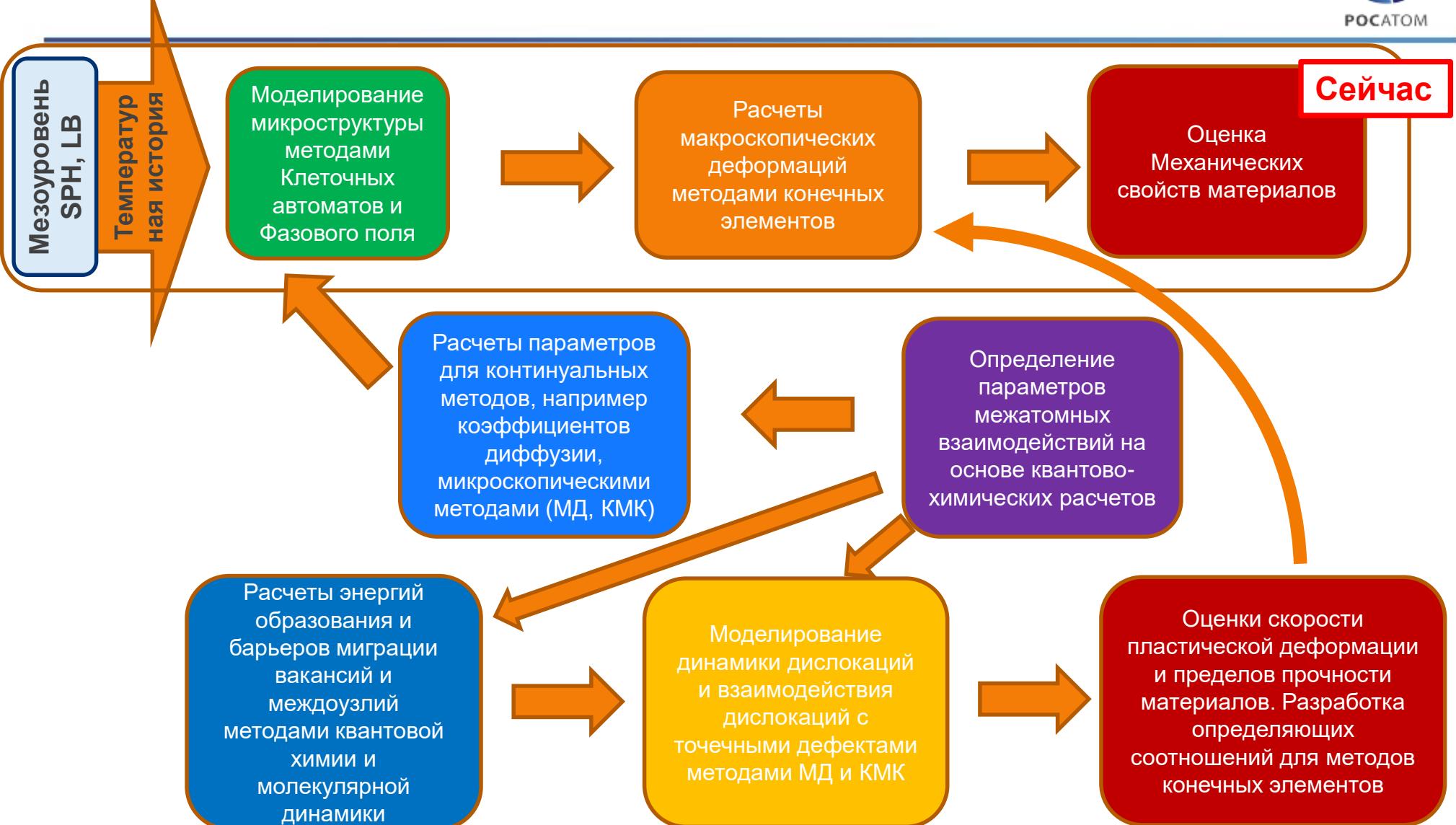
Микроструктура: Моделирование методами Клеточных автоматов и Фазового поля

Разработана численная модель СЛП и процесса ЭЛП на мезоскопическом уровне.

Моделируется полный цикл аддитивного производства



Блок моделирования микроструктуры в многоуровневой схеме



Модуль гидродинамики:

Моделирование селективного лазерного и электронно-лучевого плавления на мезоскопическом уровне

Скорость
сканирования,
мм/с

эксперимент

расчет

1000

400мкм

450мкм

глубина 66мкм

глубина 72мкм

3000

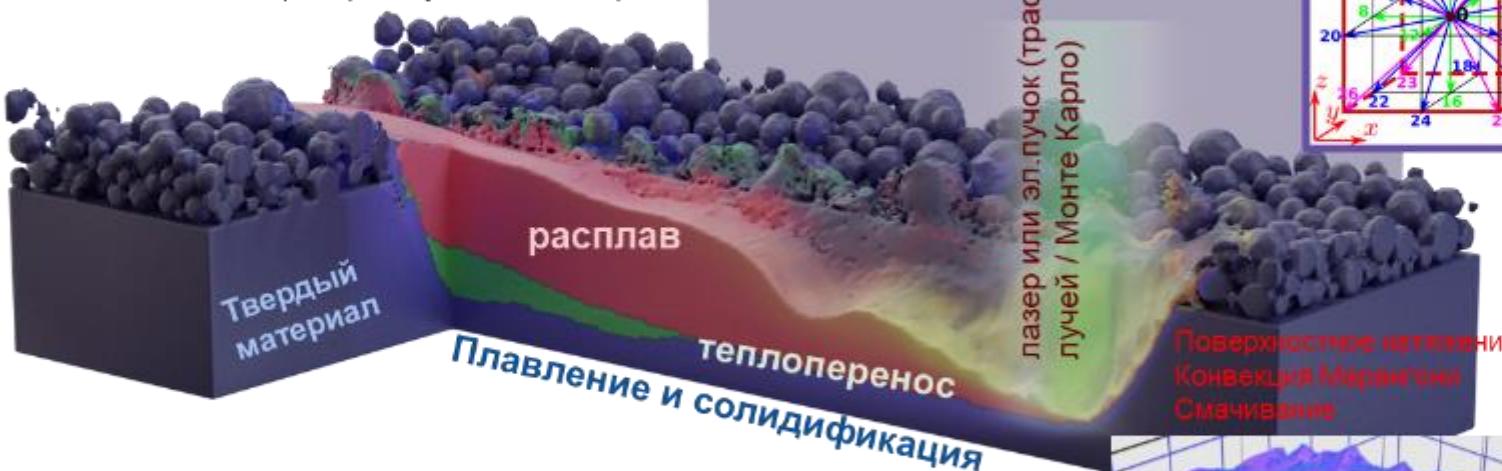
258мкм

225мкм

глубина 18мкм

глубина 20мкм

Валидация (эл.пучок, титан)

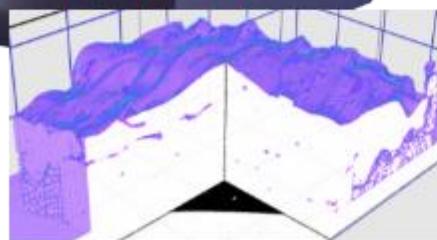


Высокопроизводительный код для GPU

- Модель реализована на языке CUDA C++ для GPU
- Достигнутая производительность 10^8 ячеек в секунду при размере вычислительной области до 10^8 ячеек;
- Время моделирования 1 мм дорожки на одной видеокарте 1 час.

Методы:

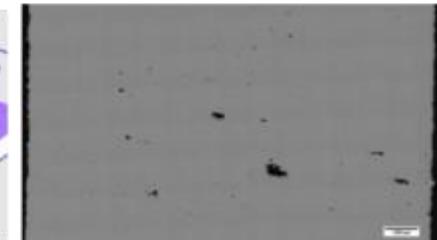
- Гидродинамика - Решеточный метод Больцмана (LBM)
- Газодинамика - RKDG



Расчет пористости



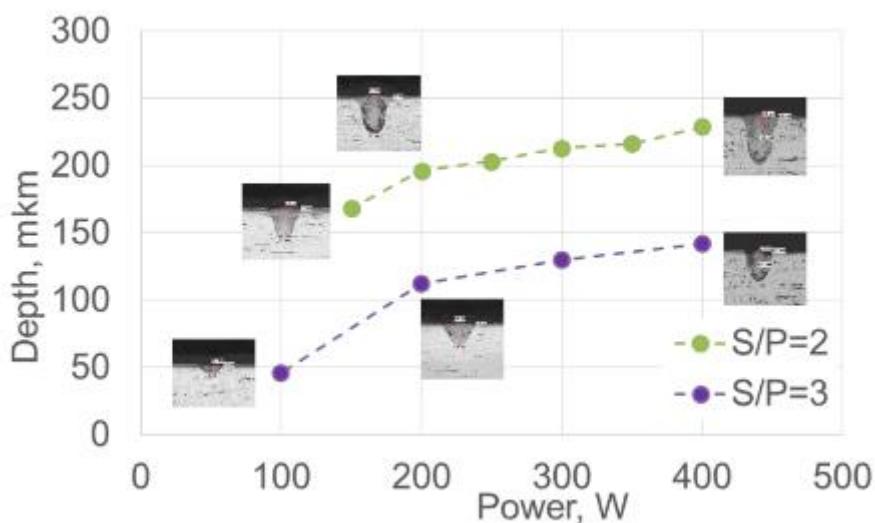
Моделирование наплавки слоя



Пористость в эксперименте

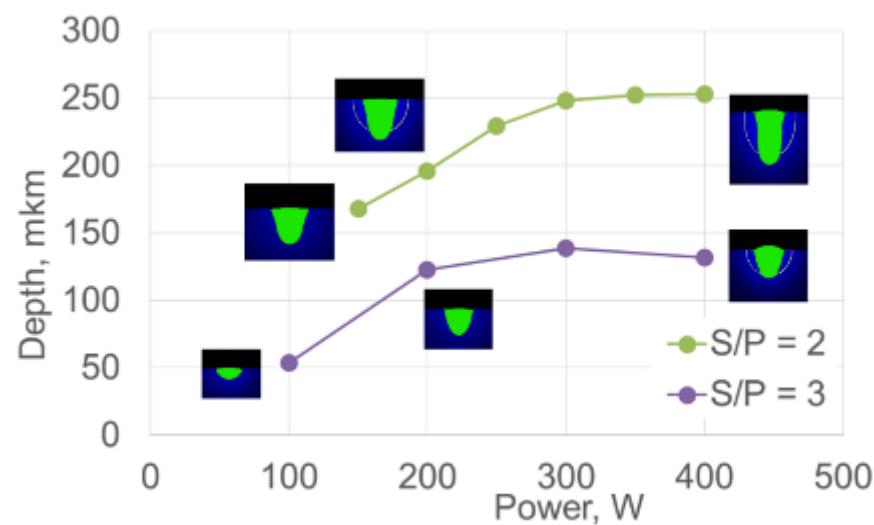
Валидация модуля гидродинамики: моделирование наплавления дорожки на подложке (СЛП)

Материал:
Inconel625



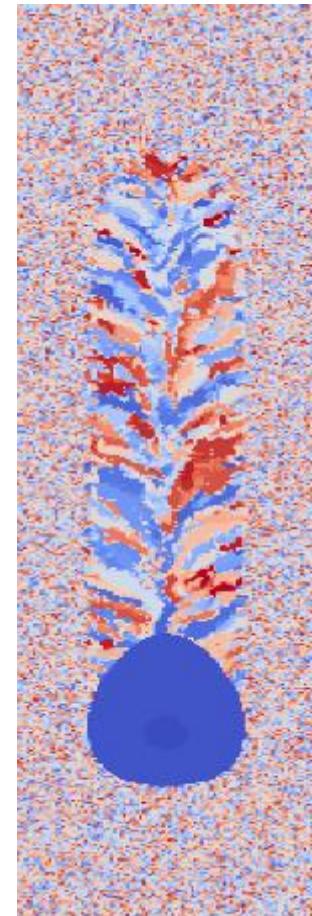
Эксперимент: зависимость
глубины дорожки от мощности
лазера

Диаметр пучка 100 мкм



Моделирование: зависимость
глубины дорожки от мощности
лазера

Модуль «Клеточные автоматы»



[1] G.J. Wagner et. al., Materials and Design 169 (2019) 107672

[2] C. Korner et. al., Acta Materialia 152 (2018) 119

[3] T. Rodgers et. al. – Computational Materials Science, T.135, 2017, 78c

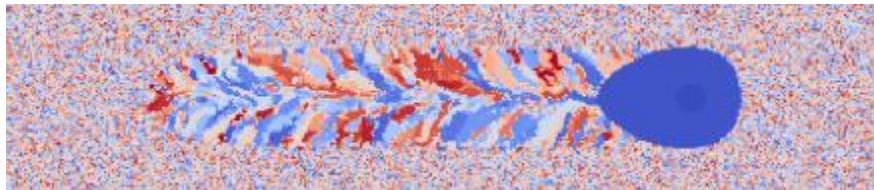
[4] Gandin, Ch-A., and Michel Rappaz. - Acta metallurgica et materialia 42.7 (1994): 2233-2246.

Модуль «Клеточные автоматы»: результаты верификации



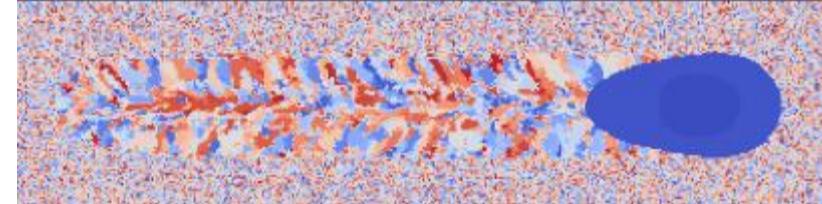
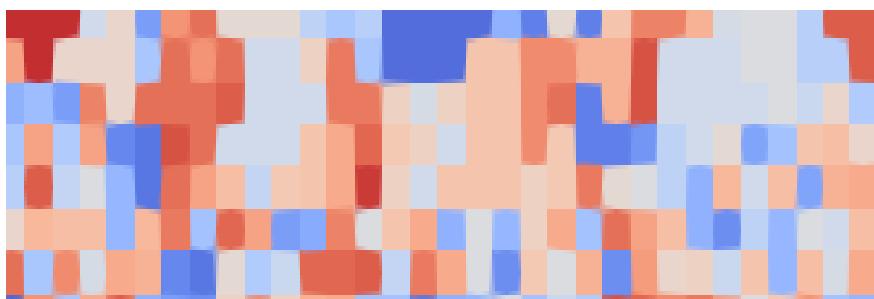
$P = 137.9 \text{ Вт}$, $S = 400 \text{ мм/с}$, $D4s = 170 \text{ мкм}$

Сечение
плоскости
подложки

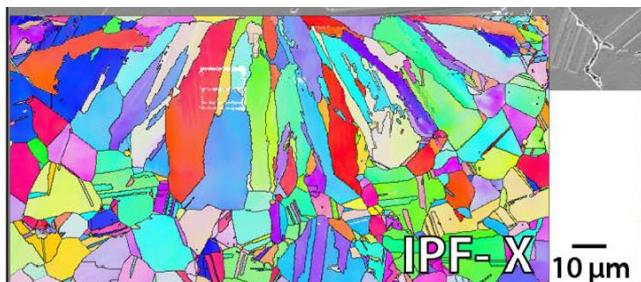


$P = 179.2 \text{ Вт}$, $S = 800 \text{ мм/с}$, $D4s = 170 \text{ мкм}$

Поперечное
сечение



Эксперимент:
Поперечное
сечение
(EBSD)



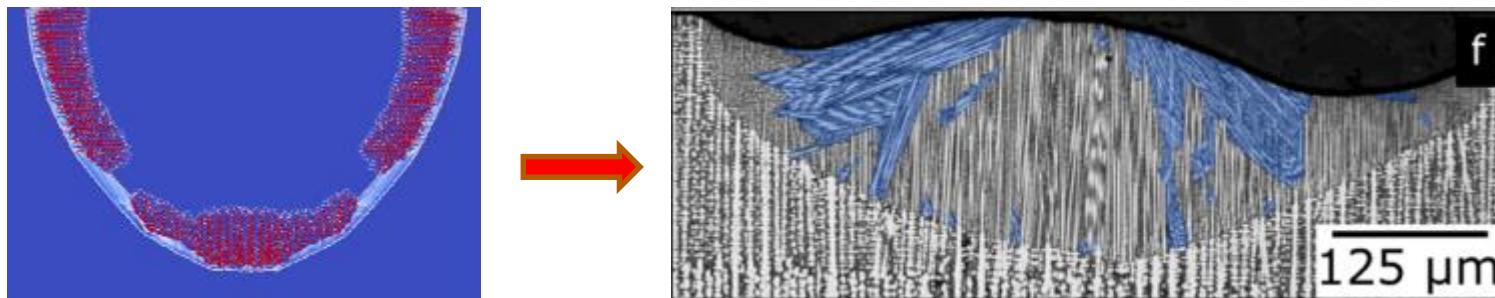
M.R. Stoudt et.al., Location-Specific Microstructure Characterization Within IN625 Additive Manufacturing Benchmark Test Artifacts, Integrating Materials and Manufacturing Innovation (2020) 9:54–69, <https://doi.org/10.1007/s40192-020-00172-6>

Модуль «моделирование микроструктуры» методом Фазового Поля.

Кинетический метод Гинзбурга-Ландау со несколько параметрами порядка

$$G[\{\varphi_k\}, \{c_n\}] = \int d^3r \left(f(\{\varphi_k\}, \{c_n\}, T) + \sum_{k=1}^N \frac{1}{2} \left| \sigma_k \left(\frac{\nabla \varphi_k}{|\nabla \varphi_k|} \right) \nabla \varphi_k \right|^2 \right)$$

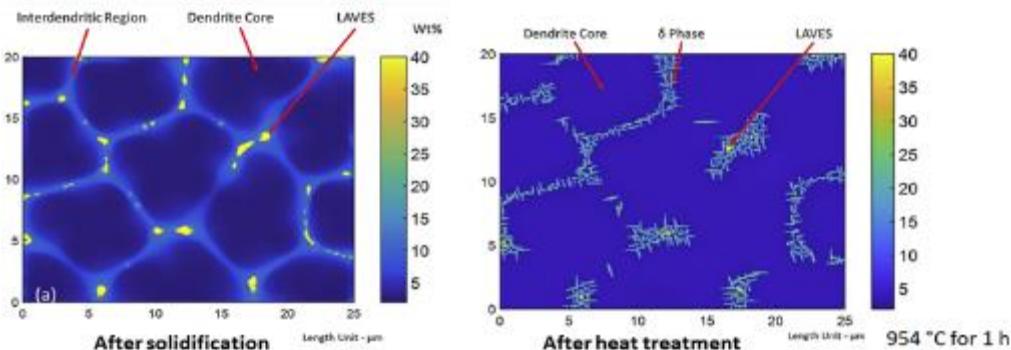
Формирование дендритных структур, сегрегация, влияние напряжений



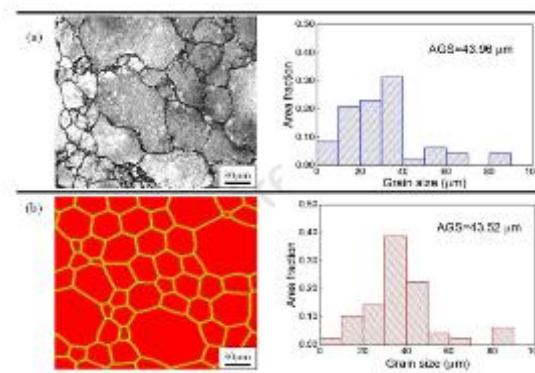
Форма фронта солидификации, микросегрегация Nb в сплаве Inconel 718, 2019-2021

Рекристаллизация, 2022-2024

Выделение вторичных фаз 2022-2024

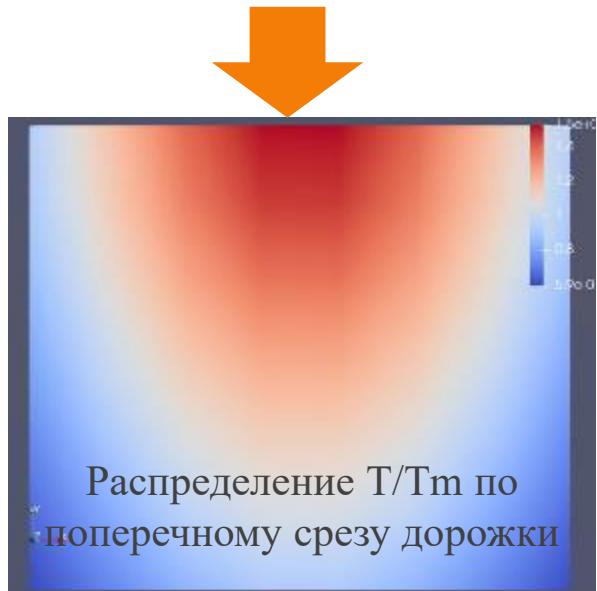
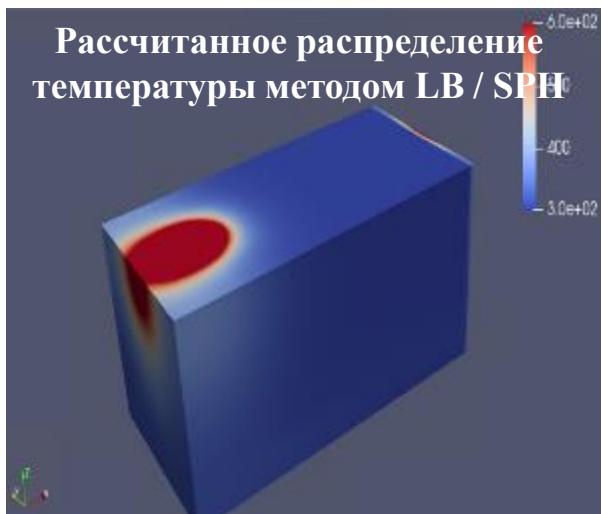


Kumara et al, Additive Manufacturing 25 (2019) 357–364.

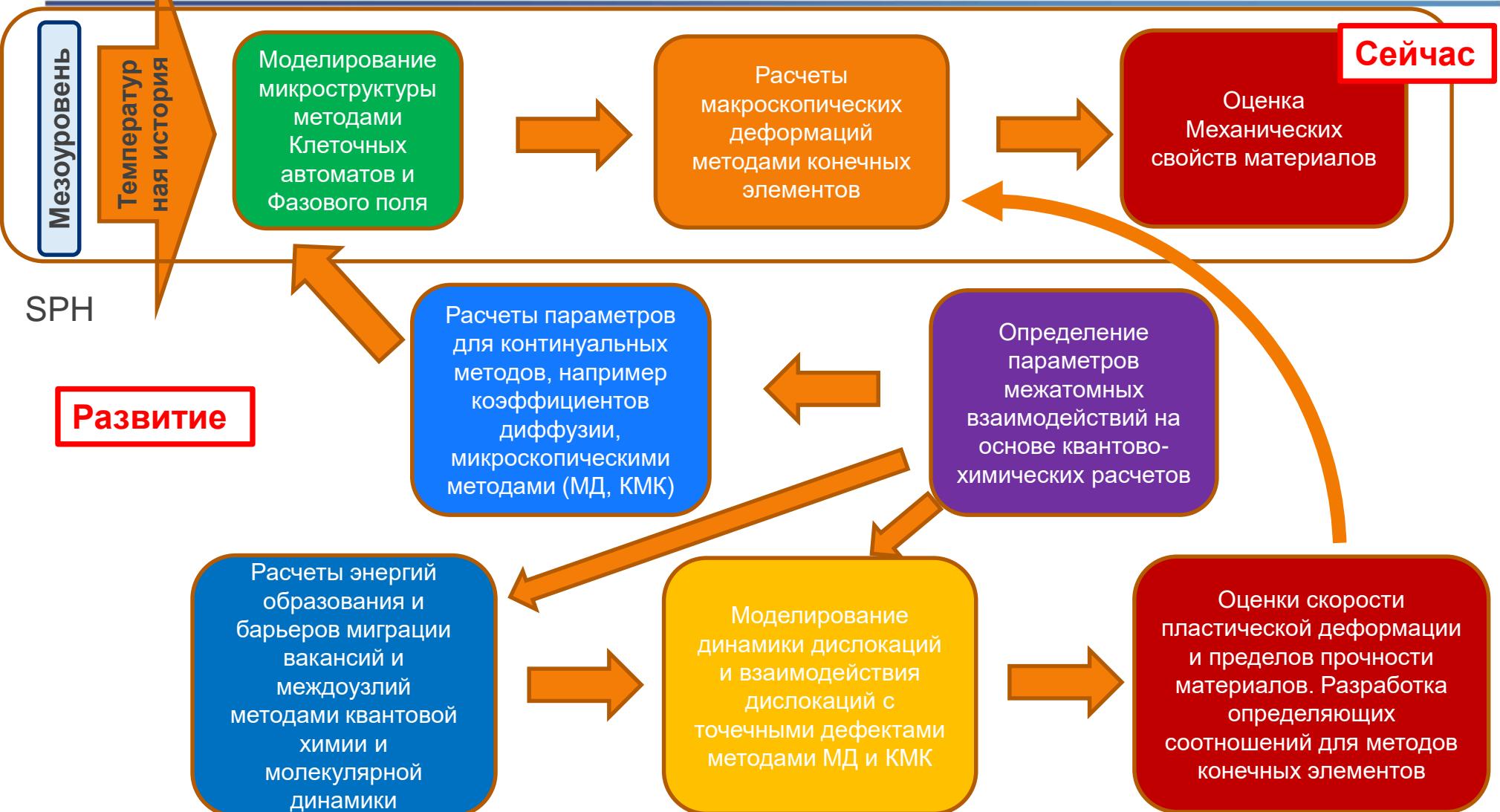


Y. Cai, C.Y. Sun, Y.L. Li, S.Y. Hu, N.Y. Zhu, E.I. Barker, L.Y. Qian, International Journal of Plasticity, 2020

Интеграция модулей гидродинамики и фазового поля



Блок моделирования микроструктуры в многоуровневой схеме

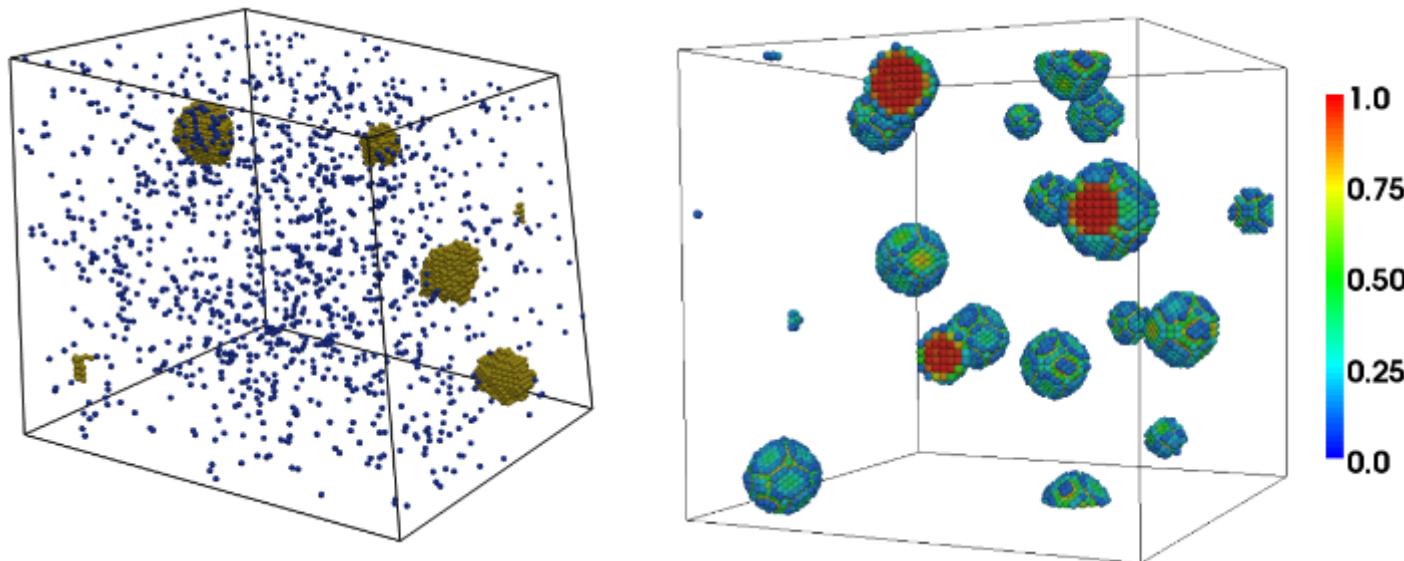


Моделирование фазовых превращений распада сплавов и выделения вторичных фаз

Подход к моделированию преципитации:

Шаг 1. Расчет фазовой диаграммы: Монте-Карло на основе квантово-химических расчетов межатомных взаимодействий, либо CALPHAD (интерполяция эксперимента).

Шаг 2. 3D метод фазовых полей либо кинетическое Монте-Карло, параметризованные с использованием данных, полученных на шаге 1.



Преципитаты Cu в сплаве FeCu с содержанием Cu 1.3%. Результаты моделирования по методу Монте-Карло (слева) и методу фазовых полей (справа). V. Vaks et al, Solid State Phenomena Vols. 172-174 (2011) pp 1146-1155.

Моделирование методом молекулярной динамики и кинетического Монте-Карло



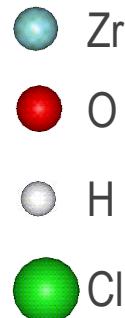
Пример: процесс осаждения оксидной плёнки методом ALD

кМК-ДР

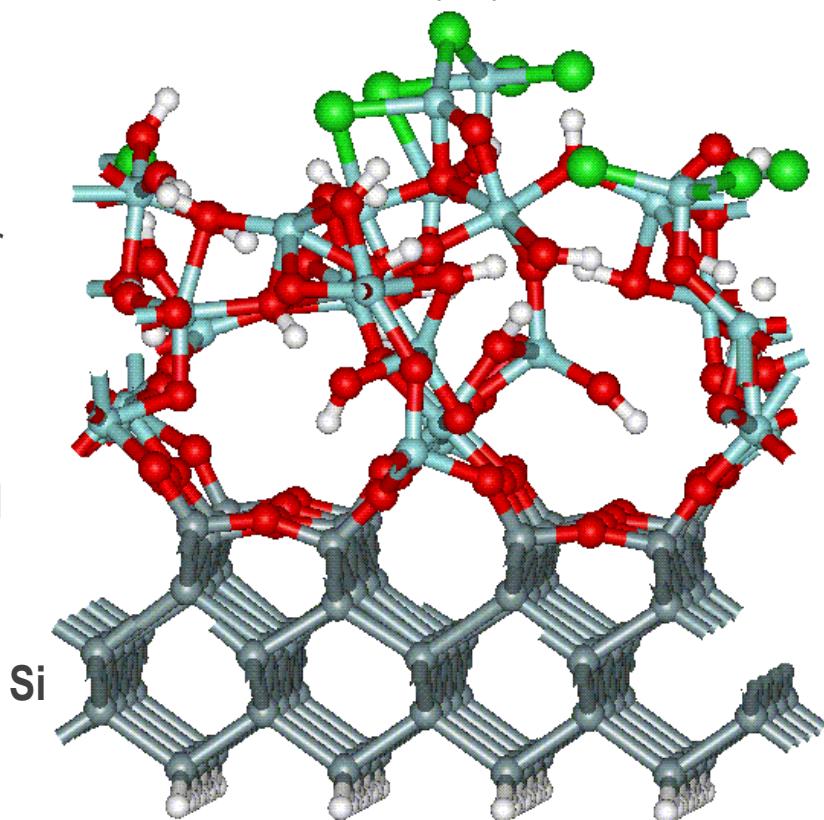


1. Выбор реакции ZrCl + ZrOH
2. Реализация реакции
3. Релаксация структуры

$$P_i = \frac{k_i}{\sum_j k_j}$$



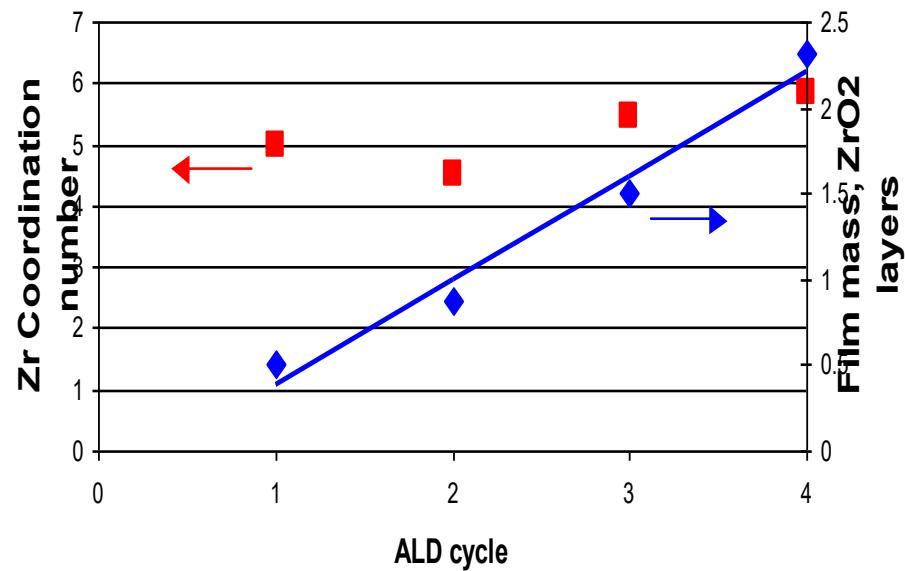
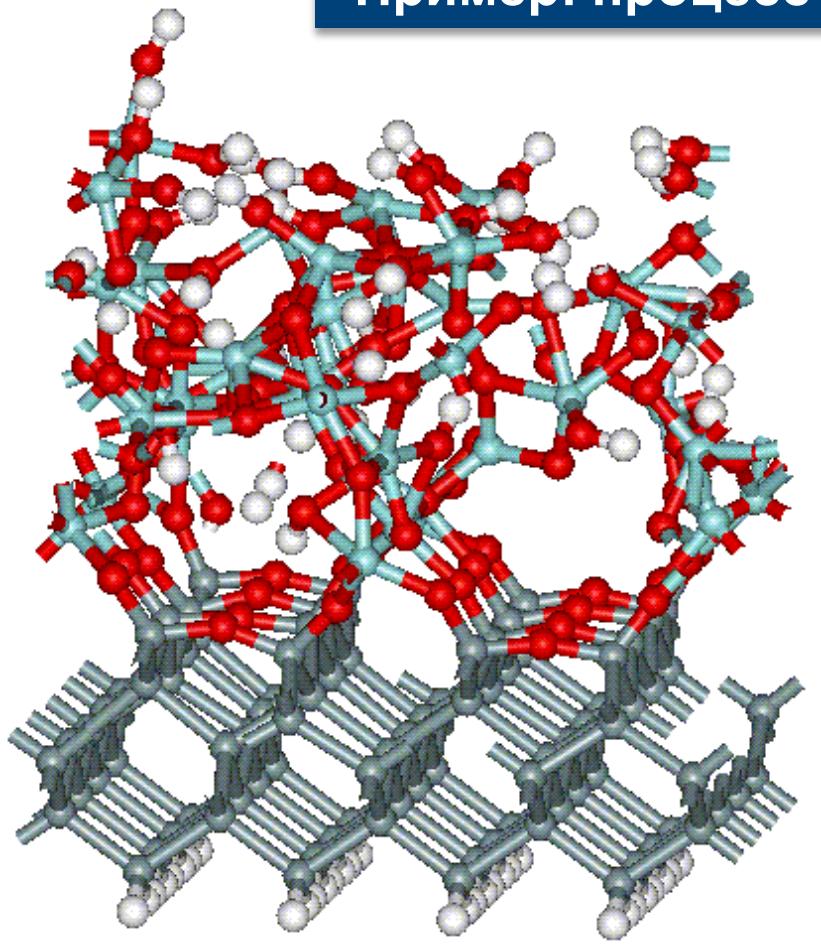
$$\Delta t = -\frac{\ln \xi}{\sum_j k_j}$$



Моделирование методом молекулярной динамики и кинетического Монте-Карло



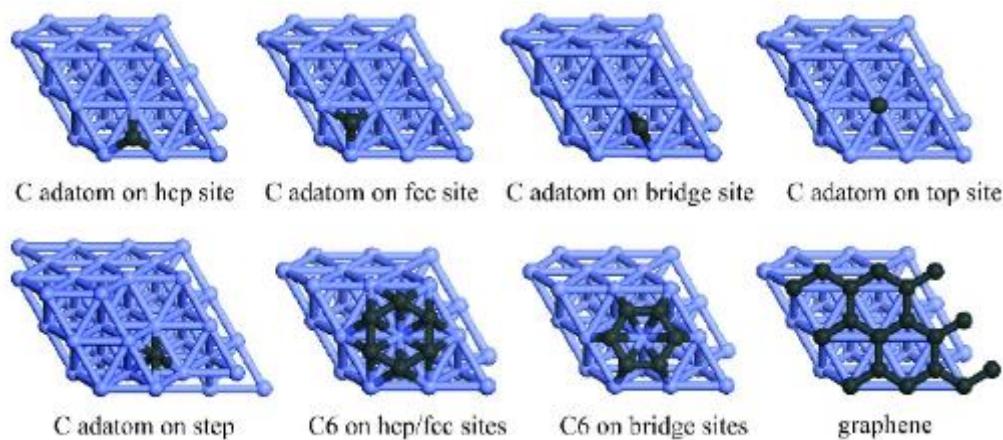
Пример: процесс осаждения плёнки



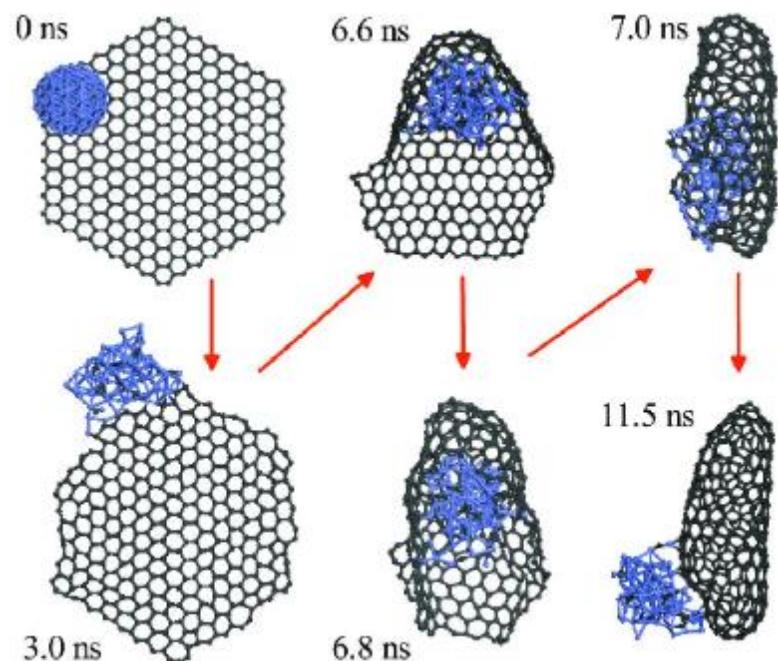
Квантово-химическое моделирование

Пример: система Ni-C

Расчет потенциалов взаимодействия для
Ni-Ni и Ni-C на основе данных кванто-
химического моделирования



Расчет трансформации
фуллерена с адсорбированным
кластером никеля на основе
полученных потенциалов

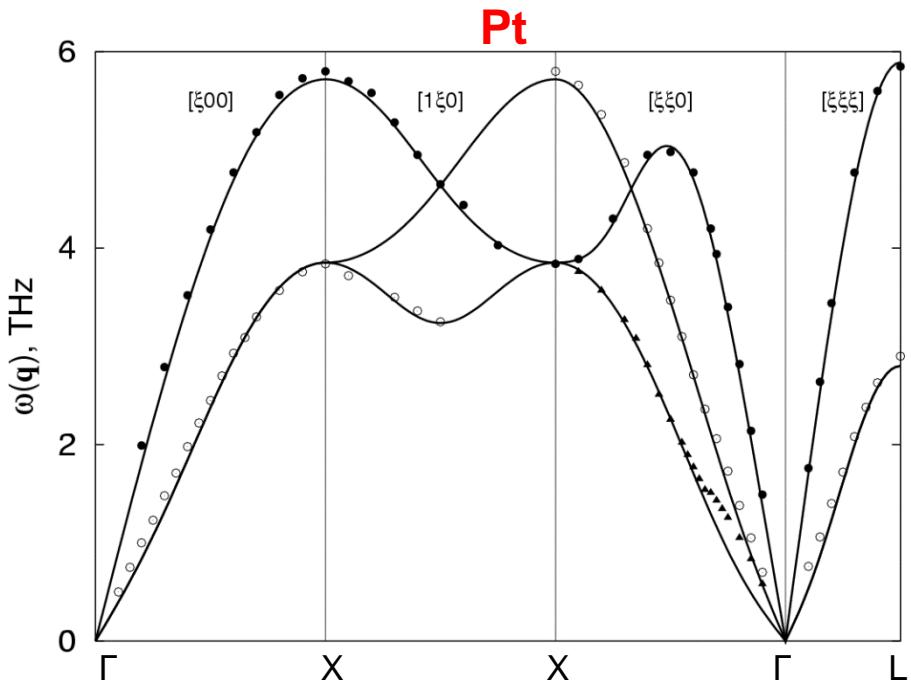


Анализ фононного спектра

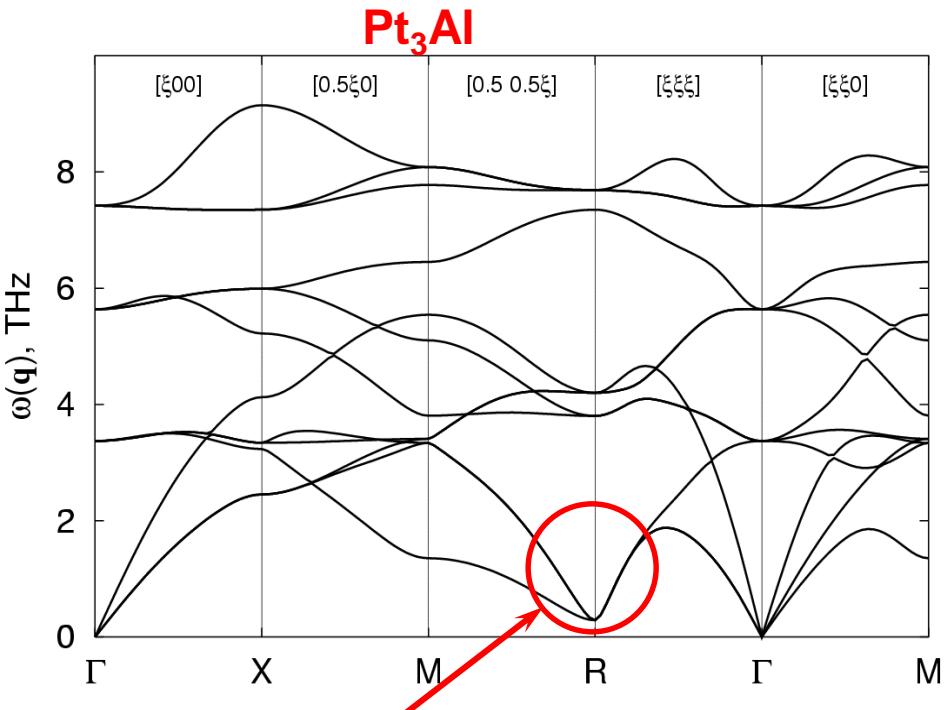


Расчет фононных спектров

Теория линейного отклика в рамках метода псевдопотенциалов



Эксперимент: D.H.Dutton, B.N.Brockhouse, and A.P.Miller, Can. J. Phys. 50, 2915 (1972)



Премартенситное смягчение: структурная нестабильность по отношению к структуре $D0'_c$

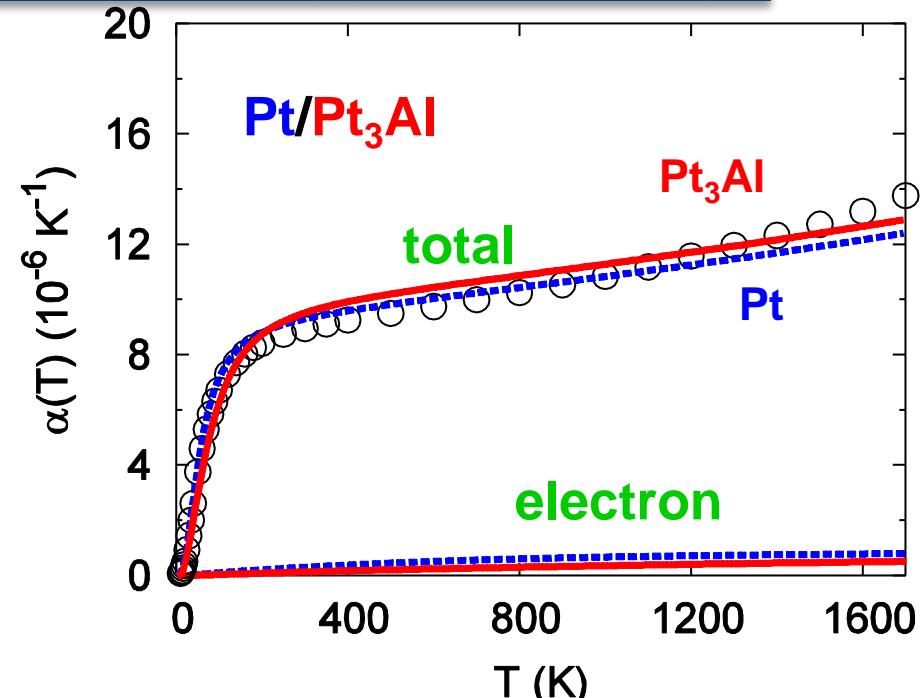
Какие факторы определяют поведение $\alpha(T)$ в сплавах γ/γ'

Прямые первопринципные
расчеты теплового расширения

$$\alpha(T) = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = -\frac{1}{B_T} \frac{\partial^2}{\partial T \partial V} (F^{(ph)} + F^{(e)})$$

$$\frac{\partial^2 F^{(ph)}}{\partial T \partial V} = -\frac{1}{V} \sum_{\lambda} \gamma_{\lambda} \left(\frac{\hbar \omega_{\lambda}}{T} \right)^2 \frac{\exp(\hbar \omega_{\lambda}/T)}{(\exp(\hbar \omega_{\lambda}/T) - 1)^2}$$

$$\gamma_{\lambda} = -\frac{\partial \ln \omega_{\lambda}}{\partial \ln V}$$

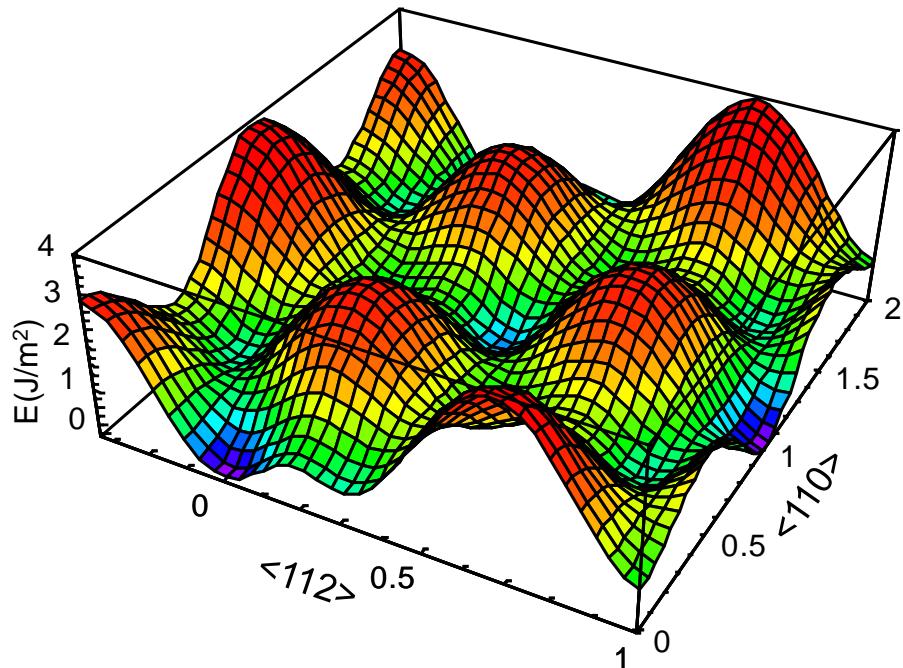


Тепловое расширение в группе платиновых металлов и сплавов в 1.5-2 раза меньше, чем в системе Ni/Ni₃Al

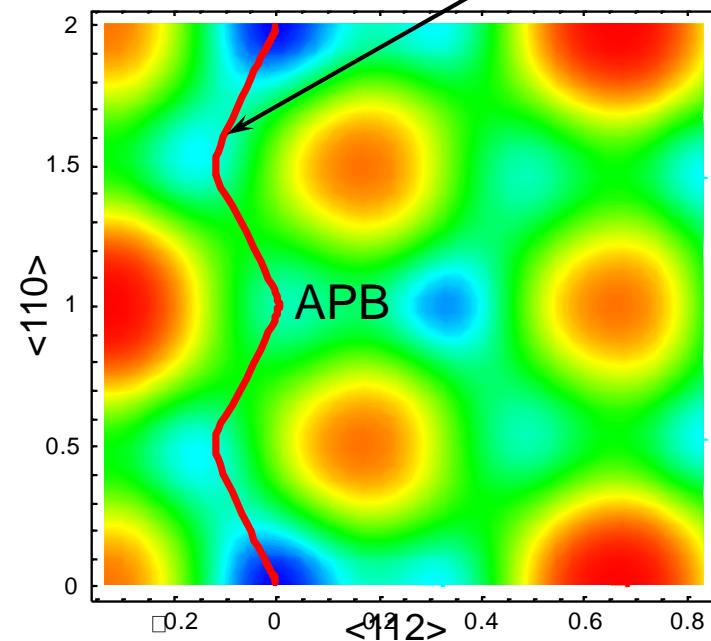
Дислокации в суперсплавах

Энергетика обобщенных дефектов упаковки: Ir₃Zr

{111} γ-поверхность



дислокационное расслоение

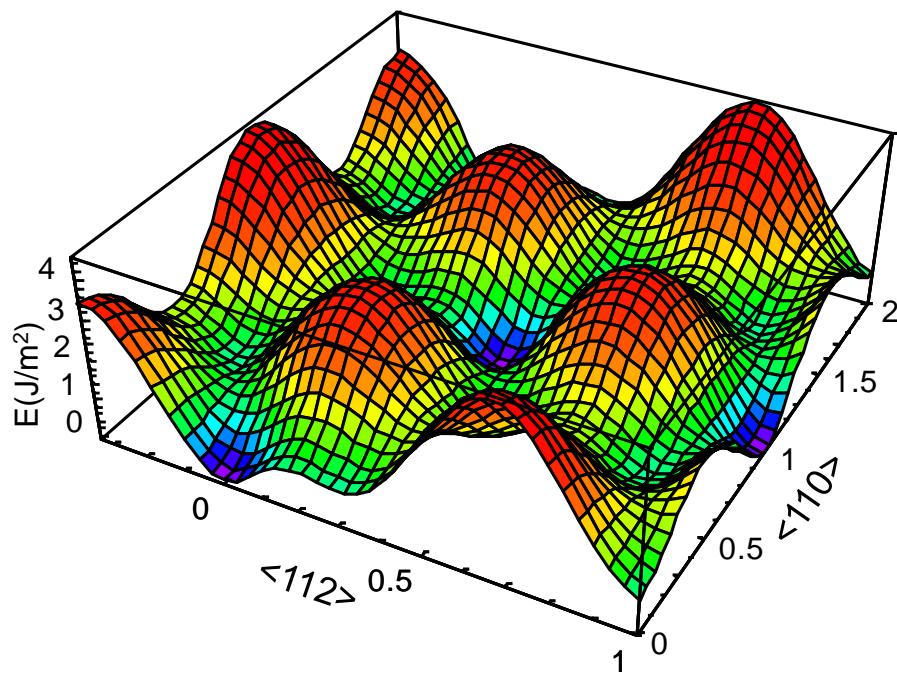


- супердислокации являются APB-связанными
- Расслоение Шокли: $[1\bar{1}0] \rightarrow \frac{1}{2}[1\bar{1}0] + \text{APB} + \frac{1}{2}[1\bar{1}0]$

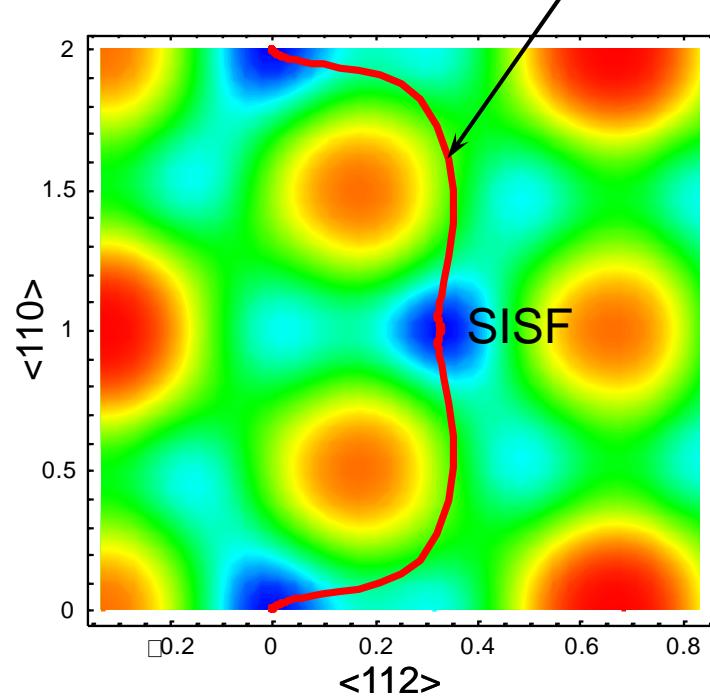
Дислокации в суперсплавах

Энергетика обобщенных дефектов упаковки: Ir₃Nb

{111} γ-поверхность

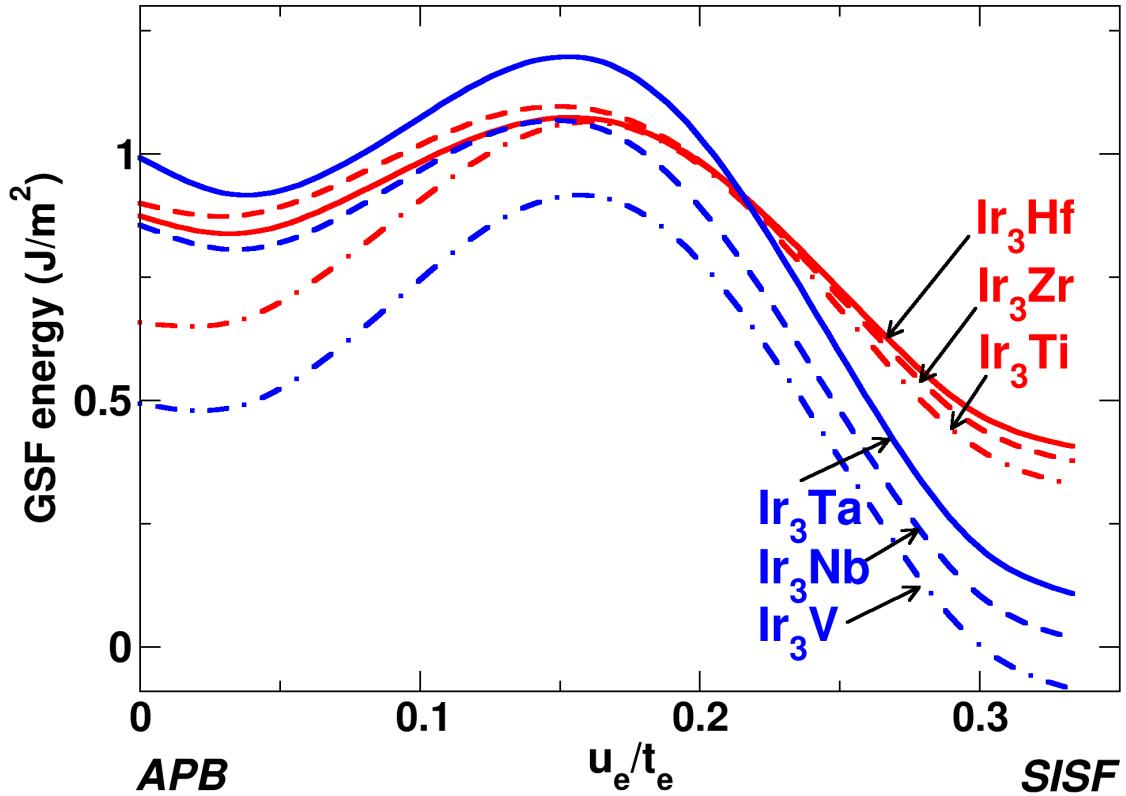


дислокационное расслоение



- супердислокации являются SISF-связанными
- расслоение Кэра: $[1\bar{1}0] \rightarrow \frac{1}{3}[2\bar{1}\bar{1}] + \text{SISF} + \frac{1}{3}[12\bar{1}]$

Энергетика обобщенных дефектов упаковки



2 группы:

- с “нормальным” SISF
 $\text{Ir}_3\text{Ti}, \text{Ir}_3\text{Zr}, \text{Ir}_3\text{Hf}$
- с низким SISF
 $\text{Ir}_3\text{V}, \text{Ir}_3\text{Nb}, \text{Ir}_3\text{Ta}$

SISF/APB контролирует
режим скольжения
дислокаций

Спасибо за внимание!

