



金属增材制造数值模拟

陈嘉伟¹, 熊飞宇¹, 黄辰阳¹, 廉艳平^{1,2*}

1. 北京理工大学先进结构技术研究院, 北京 100081;

2. 北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081

*联系人, E-mail: yanping.lian@bit.edu.cn

收稿日期: 2020-05-17; 接受日期: 2020-06-17; 网络出版日期: 2020-08-13

国家自然科学基金(编号: 11972086)资助项目

摘要 金属增材制造过程是一个多尺度多物理场耦合问题, 包括复杂的传热传质、相变和材料微观组织演化等物理现象. 因此, 本文从传热传质和材料微观组织演化两个方面, 详细论述了金属增材制造的数值模拟研究现状. 以所关注的物理现象和求解问题的尺度不同为主线归纳了已有的热源模型、传热传质数值计算模型(包括粉末尺度的高保真热流耦合模型、基于连续体假设的热流耦合模型、基于连续体假设的热传导模型)和微观组织演化预测模型(包括相场模型、元胞自动机法、动力学蒙特卡洛法), 并分析了各个模型的优势和适用范围, 进一步论述了“过程-组织-性能”集成耦合模拟模型. 在此基础上, 总结了金属增材制造数值模拟面临的挑战和发展趋势.

关键词 金属增材制造, 多尺度多物理场, 传热传质, 微观组织, 数值模拟

PACS: 02.70.Dh, 47.11.Df, 64.70.D-, 81.30.-t, 44.05.+e

1 引言

金属增材制造技术(又称为金属3D打印技术)通过高能集中热束(激光、电子束或电弧等)逐点扫描-逐线搭接-逐层熔化凝固堆积材料, 可实现三维零件制造的“近净”成形, 被誉为一种低成本、短周期、设计制造一体化的变革性制造技术^[1]. 该技术在制造形状复杂、材料昂贵的金属零部件和小批量定制生产方面具有独特的优势, 因而在航空、航天、核电和医疗等领域有巨大的应用空间和发展前景^[2,3]. 依据打印材料的进给方式不同, 现有金属增材制造技术主要分为两类^[4]: 一类是采用喷嘴同轴送粉或者送丝的方式, 如激

光近净成形技术(Laser Engineered Net Shaping, LENS)和电弧增材制造(Wire Arc Additive Manufacturing, WAAM); 另一类是采用粉末床铺粉的方式, 如选区激光熔融技术(Selective Laser Melting, SLM)和选区电子束熔融技术(Selective Electron Beam Melting, SEBM). 现阶段, 金属增材制造技术发展所遇到的关键问题主要有两大类: 第一类是制造过程中热应力控制和变形开裂预防困难; 第二类是零件内部缺陷(诸如气孔、微裂纹、融合不良等)和力学性能不易控制. 这主要是因为制造过程的主要工艺参数、粉末熔池热物理过程状态波动和变化等的不连续和不稳定性都可能在沉积层局部区域产生上述各种冶金缺陷, 形成复杂的材料微

引用格式: 陈嘉伟, 熊飞宇, 黄辰阳, 等. 金属增材制造数值模拟. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2020, 50: 090007

Chen J W, Xiong F Y, Huang C Y, et al. Numerical simulation on metallic additive manufacturing (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2020, 50: 090007, doi: [10.1360/SSPMA-2020-0182](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2020-0182)

观组织, 进而引起最终成形零件的内部质量和力学性能不及预期以及变形开裂发生的可能性. 因此, 针对上述两类问题, 需要围绕“制造过程-微观组织-力学性能”内禀关系(以下简称“过程-组织-性能”关系, 如图1所示)^[5]开展系统深入的研究^[2], 从而优化工艺参数以实现制备零件的几何形貌和力学性能可控, 并提高其成功率和成形质量.

数值模拟是研究上述内禀关系的一种重要的手段. 金属增材制造过程是一个粉末流(床)、高能集中热束和基底沉积材料三者之间相互作用的多尺度多物理场耦合问题^[6], 涉及宏观尺度上的零件成形温度场和热致变形力学、介观尺度上熔池热致流动力学、微观尺度上熔池内的晶粒生长动力学^[7], 如图1所示. 另外, 时间尺度上存在着熔池成型的微秒量级, 单层扫描的秒量级, 大型部件成型的几天乃至数月的时间跨度. 这也导致传统的实验手段也很难对微熔池内传热、传质和糊状区材料微观组织演化过程进行原位观察与测量. 此外, 由于该物理过程十分复杂、涉及参数量巨大, 传统的“试错法”^[8]效率低、周期长、成本昂贵, 所得工艺参数也不一定最优. 因此, 采用数值模拟方法是开展金属增材制造控形控性工艺研究并揭示其内禀关

系的一种重要且高效的手段, 同时也有助于测量技术、测试方法和设计优化工具等增材制造其他技术方面的改进. 针对这一复杂的多尺度多物理场耦合问题, 国内外学者开展了一系列数值建模和计算模拟分析方法研究, 主要集中在温度场、热应力、熔池形貌、微观组织模拟研究等方面. 本文主要关注金属增材制造技术(如LENS, SLM及SEBM等)共性物理问题方面的数值模拟工作, 具体包括制造过程传热传质和材料微观组织演化过程的计算模拟分析.

金属增材制造过程模拟的核心是成形时间长的传热传质计算, 涉及非线性瞬态热传导、微熔池动力学以及热应力变形等, 与制备过程中的热束功率、扫描速度和扫描路径息息相关^[9]. 该过程的热分析模拟不仅决定了宏观尺度上热应力的分布, 也是微观组织演化过程模拟的基础. 按照尺度不同、面向的物理问题不同, 热分析模型大致可分为三类. 第一类热分析模型是粉末尺度下的热流耦合模型, 主要面向金属粉末颗粒的熔化过程、熔池内复杂流动及凝固过程的模拟, 以实现粉末尺度上高保真的离散求解, 从而揭示制造过程中缺陷的形成机理. 目前采用的数值模拟方法主要有三种: 有限体积法(Finite Volume Method,

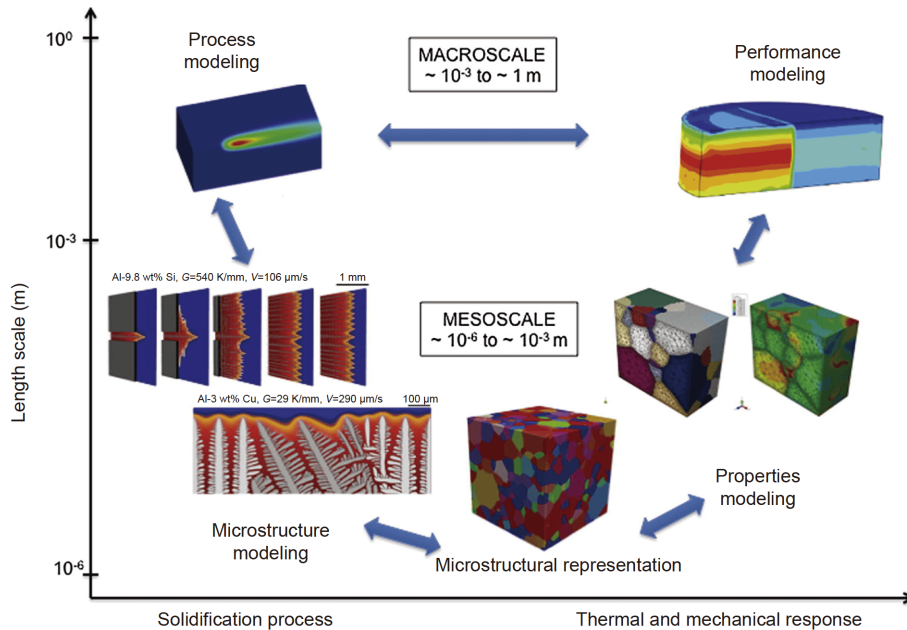


图1 (网络版彩图)金属增材制造的“过程-组织-性能”关系及相关尺度示意图^[5](图片来自文献, 已获得授权)

Figure 1 (Color online) Schematic diagram of “process-microstructure-properties” relationship and the associated length scales for metallic additive manufacturing. Reprinted with permission from ref. [5], Copyright©2017 Elsevier.

FVM)、格子玻尔兹曼法(Lattice-Boltzmann Method, LBM)和任意拉格朗日欧拉法(Arbitrary Lagrange-Euler, ALE). 这三种方法均可精确考虑表面张力、马兰戈尼(Marangoni)效应, 并可以结合界面追踪算法(如流体力学法和水平集法等)进行界面识别. 第二类热分析模型是基于连续体假设下的热流耦合模型, 其中将粉床或者进入熔池内的粉末颗粒等效为连续体, 从而减少离散规模提高计算效率, 并更大限度地考虑熔池内的对流传热过程, 以保证熔池形貌和温度场的计算精度. 目前主要采用的模拟方法包括FVM法和有限元法(Finite Element Method, FEM). 第三类热分析模型是基于连续体假设的热传导模型, 不再显式地模拟熔池内部的流动传质过程, 从而极大地减少计算量, 以实现部件级规模问题的热分析, 具有求解控制方程数少、计算量小的特点. 但是, 由于包含较多简化和假设, 该模型计算精度不如前两种模型. 在该模型中, 常用的数值模拟方法为FEM, 从而便于进一步开展部件级规模问题的热应力分析. 其中, 第二和第三类热分析模型也用于以金属丝材为母材的电弧增材制造过程中的“热-流-固”耦合模拟, 以探究其熔池动力学行为和打印构件的残余应力分布^[10-14]. 本文重点关注以粉末作为母材的金属增材制造数值模拟方法及相关工作, 因此关于电弧增材制造数值模拟的工作不再详细展开叙述.

掌握材料微观组织的演化规律是控制零件内部冶金组织一致性和力学性能优异性的关键所在. 由于增材制造的逐点扫描-逐线搭接-逐层熔化凝固的工艺特性, 每一点沉积材料将经历一系列短时、非稳态的热循环过程. 这导致前沉积层的凝固材料将经历不同组合且复杂的三种微观组织演化过程(液相线与固相线之间的凝固初生相、热影响区的晶粒粗化和固态相变等), 体现出对制造过程的强烈依赖性和多变性. 目前, 用于金属增材制造过程材料微观组织演化过程模拟的数值计算方法主要有三种: 相场(Phase Field, PF)模型、元胞自动机法(Cellular Automation, CA)和动力学蒙特卡洛法(Kinetic Monte Carlo, KMC). 其中, PF模型具有较高精度, 可以模拟枝晶的形貌, 包括枝晶分枝结构和粗化等, 但因其计算量巨大, 所能模拟的枝晶的个数有限, 通常用来模拟二维问题和开展枝晶生长物理机制研究. 与PF相比, CA方法是一种模拟晶粒轮廓生长过程的算法, 计算效率高. CA方法可以在介观尺度

上模拟糊状区晶粒的外延式生长和域内形核及生长的过程, 给出整个熔池内的材料微观组织形貌、晶向信息和织构等. 相比于CA方法, KMC是建立于晶界界面能最小原理基础上的一种概率模型, 其计算效率更高, 但需额外引入模型以建立模拟过程中的温度场和时间与真实温度信息和时间的关联. 相较于PF和CA, KMC缺乏晶粒生长的物理机理, 并且不能给出晶粒的有效晶向信息, 难以模拟晶粒竞争生长过程和最终的微观组织织构. 但是, KMC可有效预测晶界的迁移, 非常适合模拟热影响区中的晶粒粗化问题.

综上, 金属增材制造过程是一个多尺度多物理场问题. 本文详细论述了上述三种热分析模型和微观组织预测模型分别在金属制造过程的传热传质和材料微观组织演化两个关键问题上的应用研究进展.

2 金属增材制造过程的物理描述

针对本文关注的金属增材制造多尺度多物理场问题的两个方面, 本节给出相应的传热传质过程的控制方程和材料微观组织演化过程的物理机理描述.

2.1 传热传质过程的控制方程

在第1节中提到的三类热分析模型中, 第一类模型所对应的控制方程可以退化到其余模型. 因此, 针对第一类热分析模型(粉末尺度的“热-流”耦合模型), 下面介绍其基于欧拉描述的控制方程. 该控制方程所采用的基本假设如下所列: (1) 熔池中的液体为牛顿、不可压缩流体; (2) 金属的液相和固相密度为定值; (3) 熔池周边的糊状区假设为各向同性多孔介质; (4) 采用热源模型来考虑热束与材料的作用过程; (5) 忽略由于蒸发带来的质量损失和成分变化.

相应的连续性方程、能量守恒以及动量守恒方程, 如下^[15,16]:

连续性方程:

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0, \quad (1)$$

动量守恒方程:

$$\frac{d\mathbf{V}}{dt} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \cdot \mathbf{V} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{V} + \mathbf{g} \beta (T - T_m) - \frac{\nu}{K \rho_1} \mathbf{V} + \mathbf{g}, \quad (2)$$

能量守恒方程:

$$\frac{dh}{dt} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \cdot h = \frac{1}{\rho} \left(\nabla \cdot \frac{k}{\rho c} \nabla T \right) + q, \quad (3)$$

其中, $\mathbf{V}$ 表示流体速度, p 是流体压力, ν 是流体运动黏度, $\mathbf{g}$ 是重力加速度, ρ 是材料密度, h 是材料焓值, T 是温度, k 是热传导率, c 是比热容, q 是热源(在第3节中具体介绍). 在方程(2)中, 等式右端第三项是基于Boussinesq近似的熔池内部浮力项, β 为热膨胀系数, T_m 是熔点; 等式右端第四项是达西项(Darcy Term), 表示糊状区内流体在多孔介质处的阻尼力, ρ_l 代表材料液态时的密度, K 代表着流体流动的渗透率并由如下Kozeny-Carman公式确定^[16]:

$$K = K_0 \frac{f_l^3}{(1-f_l)^2}, \quad (4)$$

其中 K_0 是表征多孔介质形态的常数, f_l 表示流体体积分数.

边界条件包括部分: 流场边界条件和热边界条件. 在气/液界面上的流场边界条件主要包括表面张力 $\gamma(T)$ 和反冲压力 p_{recoil} , 分别如下:

$$\gamma(T) = \left[\sigma_m + \frac{d\sigma}{dT}(T - T_m) \right] \mathbf{n}\kappa, \quad (5)$$

$$p_{\text{recoil}} = 0.54 p_0 \exp \left(\frac{\Delta H_v^*(T - T_v)}{RTT_v} \right), \quad (6)$$

其中, $\mathbf{n}$ 是界面法向量, κ 是界面曲率, σ 是表面张力系数, σ_m 是材料处于熔点时的表面张力系数. 材料表面张力系数随温度变化的变化率为 $\frac{d\sigma}{dT}$, 在温度分布不均匀时将导致所谓的Marangoni效应, 是熔池内流动的主要驱动力. 该系数的正负值可以决定影响熔池的流动方向不同. 反冲压力是由于流体受热蒸发, 带动了表面流体的流动, 主要作用于热束正下方的熔池表面. 当反冲压力大于表面张力时, 容易导致飞溅等物理现象的产生. 式(6)中, ΔH_v^* 表示的是材料蒸发的焓值, R 是

理想气体状态常量, T_v 是材料汽化温度, 而 p_0 则是标准大气压. 其他流场边界条件不再赘述.

在材料域表面涉及的主要热边界条件包括气/液界面上的热对流和热辐射(自然边界条件):

$$-k \frac{\partial T}{\partial n} = h_c(T - T_0) + \varepsilon_\theta \sigma_{\text{sb}}(T^4 - T_r^4), \quad (7)$$

其中, T_r 是室温, ε_θ 是材料的辐射率, σ_{sb} 是Stefan-Boltzmann常数, 而 h_c 是对流换热系数(对于成型腔内含有气流的工艺, 需要考虑强制对流换热系数^[17]). 此外, 当流体温度超过材料汽化温度时, 还需在气/液界面上考虑蒸发导致的热损失热通量 q_{evap} 边界条件:

$$q_{\text{evap}} = \frac{0.82 \Delta H_v^*}{\sqrt{2\pi MRT}} p_0 \exp \left(\frac{\Delta H_v^*(T - T_v)}{RTT_v} \right), \quad (8)$$

其中, M 表示的是材料的摩尔质量.

其他热边界条件(如第一类本质边界条件、绝热边界条件)以及控制方程所涉及的初始条件, 视具体建模而定^[18-20], 在此不再赘述.

在金属增材制造的过程中, 熔池内材料会经历复杂的相变过程^[21]. 通常采用等效比热容法和焓值法考虑其中的相变潜热^[22]. 在等效比热容法中, 等效的比热容 c_{eff} 的计算如下^[22]:

$$c_{\text{eff}}(T) = \begin{cases} c_s(T), & (T < T_s), \\ c_m(T) + \frac{L}{T_l - T_s}, & (T_s < T < T_l), \\ c_l(T), & (T > T_l), \end{cases} \quad (9)$$

其中, $c_s(T)$ 表示材料处于固态时随温度变化的比热容, $c_m(T)$ 表示材料为熔融态时随温度变化的比热容, $c_l(T)$ 表示材料液态时随温度变化的比热容, L 表示材料的固液相变潜热, T_s 和 T_l 分别表示材料的固相线温度和液相线温度.

在焓值法中, 将材料焓值与温度相关的曲线进行分段处理, 如下^[22]:

$$h(T) = \begin{cases} \int_{T_r}^T \rho c_s(T) dT, & (T < T_s), \\ \int_{T_r}^{T_s} \rho c_s(T) dT + \int_{T_s}^T \left[\rho \left(\frac{dL}{dT} \right) + \rho c_m(T) \right] dT, & (T_s < T < T_l), \\ \int_{T_r}^{T_s} \rho c_s(T) dT + \rho L + \int_{T_s}^{T_l} \rho c_m(T) dT + \int_{T_l}^T \rho c_l(T) dT, & (T \geq T_l), \end{cases} \quad (10)$$

其中, 包含了相变区域的潜热所造成的影响. 与等效比热容法相比, 焓值法将比热容表现为温度的平滑函数, 不会出现等效比热容法中的间断行为, 便于数值求解.

2.2 材料微观组织演化过程的物理机理

在长时间的增材制造过程中, 每一点沉积材料将经历如图2所示的一系列短时、非稳态的热循环过程, 相应的材料微观组织演化过程涉及微观到宏观多个尺度^[23]. 在该过程中, 材料最先加热至液态(或气态), 随后冷却至液相线以下, 并逐步由液态转化为熔融态或固态, 此时称为凝固初生相. 在金属增材制造过程中观察到三种主要初生相的晶粒形态包括: 柱状枝晶、等轴枝晶以及两者的混合. 这3种形态的晶粒取决于凝固面上的温度梯度(G)和凝固速率(R), 即所谓 GR 凝固图^[24]. 进一步, 定义 G/R 为形态参数, 其值与凝固模式相关, 例如相对较大的 G/R 值将生成柱状枝晶, 较小的 G/R 值将生成等轴枝晶; 定义 $G \cdot R$ 为冷却速率, 其值与晶粒尺寸相关, 冷却速度越大晶粒越细小. 对于某些多相合金材料, 位于热影响区的材料将经历晶粒粗化以及随后的固态相变过程. 例如, 对于Ti-6Al-4V多相合金, 零件的微观结构由大部分次生相 α' 以及少量的 α 相与初生相 β 组成^[25].

晶粒形核有多种方式, 如表面形核、外延式生长形核、异质形核、枝晶断裂或脱离等. 其中, 我们将后三者统称为域内形核. 一旦晶粒形核, 晶粒就会沿着晶粒生长偏好取向生长, 如立方晶粒的生长偏好取向为 $\langle 100 \rangle$. 如果生长偏好取向与局部温度梯度方向一致性越好, 则该晶粒将获得更大的生长优势. 在金

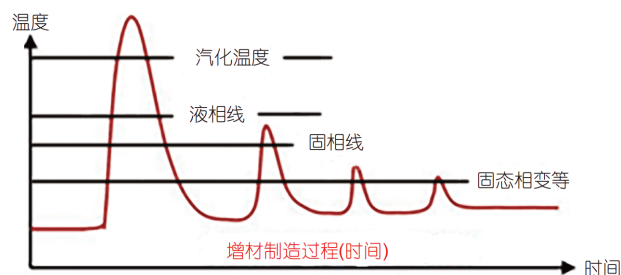


图2 (网络版彩图) 金属增材制造过程中的热循环及微观组织演化过程示意图

Figure 2 (Color online) Schematic diagram of thermal cycling and microstructure evolution during the metal additive manufacturing progress.

属增材制造过程中, 常见的形核方式为域内形核和熔池边界处外延式生长^[26]. 由外延式生长的柱状晶可以沿建造方向贯穿多层; 同时, 这些柱状晶在生长过程中将发生竞争生长, 那些晶向与局部温度梯度一致性较好的晶粒往往能生长成为更粗大的柱状晶.

3 热源模型

金属增材制造数值模拟研究中, 经常采用热源模型来等效处理激光/电子束与金属材料的相互作用过程^[27,28]. 其中, 常用热源模型主要包括面热源、体热源和射线追踪热源模型.

(1) 面热源模型

目前, 常见的面热源模型是高斯面热源模型^[29], 其表达式如下^[30]:

$$q(x, y) = \frac{2AP}{\pi\omega^2} \exp\left(-\frac{2(x^2 + y^2)}{\omega^2}\right), \quad (11)$$

其中, A 表示粉末对热束的吸收率, P 表示热源功率, x, y 表示热源的空间坐标(热束焦点位于 $x-y$ 平面上), ω 表示热束半径.

(2) 体热源模型

在高斯面热源的基础上, 体热源模型进一步考虑了激光和电子束对金属粉末层穿透深度^[31]上的能量吸收分布形式(如对于镍粉末激光穿透深度约为 $20 \mu\text{m}$). 文献中常见的体热源模型有三种, 分别如下.

第一种是高斯体热源模型^[32], 其表达式如下:

$$q(x, y, z) = \frac{2AP}{\pi\omega^2\eta} \exp\left(-2\frac{x^2 + y^2}{\omega^2}\right) \exp\left(-\frac{|z|}{\eta}\right), \quad (12)$$

其中, η 表示激光对于粉末层的穿透深度并假设在深度范围内热流密度呈指数衰减形式, 因此该高斯体热源模型又称指数衰减体热源.

第二种体热源模型是双椭球体热源模型^[30,33,34]. 该模型考虑了熔池的实际几何形状, 并用两个具有相同短轴但不同长轴的半椭球体来近似, 如图3所示. 该热源模型的表达式如下:

$$q(x, y, z) = \begin{cases} \frac{6\sqrt{3}AP}{a_f b c \pi \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{3x^2}{a_f^2} - \frac{3y^2}{b^2} - \frac{3z^2}{c^2}\right), & (x \geq 0), \\ \frac{6\sqrt{3}AP}{a_r b c \pi \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{3x^2}{a_r^2} - \frac{3y^2}{b^2} - \frac{3z^2}{c^2}\right), & (x < 0), \end{cases} \quad (13)$$

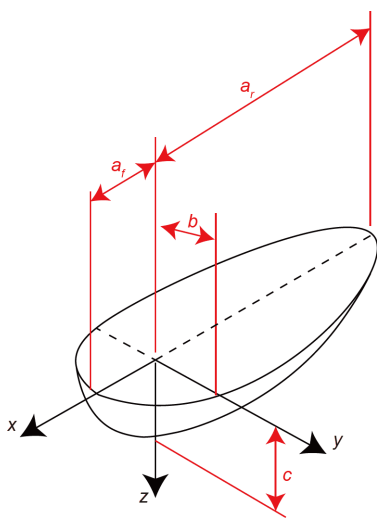


图3 (网络版彩图)双椭球热源模型示意图

Figure 3 (Color online) Sketch of the double ellipsoidal heat source model.

其中, a_f , a_r 分别表示热束焦点前后沿扫描方向的椭球半轴长度, b , c 分别表示平面内垂直于扫描方向和深度方向上椭球的半轴长度.

第三种体热源模型为基于高保真吸收率的高斯热源模型. 上述第一种和第二种热源模型中, 粉末层对于激光/电子束的吸收率都是作为一种材料参数(常数)或固定规律(指数衰减)被加入到热源模型中. 针对激光/电子束会在粉末颗粒间进行多次吸收和反射的这一复杂物理过程, Tran等人^[35]基于蒙特卡洛法模拟了热源在粉末层中的高保真衰减规律与吸收率分布, 并与高斯热流密度分布相耦合, 给出了具有高保真吸收率的高斯体热源模型, 如下:

$$q(x, y, z) = \frac{2P}{\pi\omega^2} \exp\left(-\frac{2(x^2 + y^2)}{\omega^2}\right) \frac{dA}{dz}, \quad (14)$$

其中, dA/dz 表示粉末层深度方向的吸收率分布, 即通过拟合蒙特卡洛法的计算结果确定.

(3) 射线追踪热源模型

射线追踪热源模型是在分析步开始时将热束离散为按高斯分布的若干条射线, 射线按照入射方向依次作用在颗粒表面上. 离散出的每条射线所具有的能量 E_r 表示为

$$E_r = \Delta t_r P w_r(r_r), \quad (15)$$

其中, Δt_r 表示射线生成的时间增量步, w_r 表示权重系数. 依据射线在粉末颗粒表面的反射、吸收规律, 确

定金属材料吸收的热量. Wessels等人^[36]采用该模型模拟了激光热束作用下单个金属粉末颗粒融化的过程(详见参考文献^[36]的图13).

综上可知, 高斯面热源模型、高斯体热源模型、双椭球体热源模型、基于高保真吸收率的高斯热源模型和射线追踪热源模型的计算精度依次提高, 但计算效率递减, 同时对离散网格精细程度要求也不同. 射线追踪热源模型对材料域网格(或质点)离散精度要求最高, 常用于金属增材制造的粉末尺度高保真数值模拟(第4节中介绍的第一类热分析模型); 高斯面热源模型对材料域网格离散精度要求最低, 常用于基于连续体假设的金属增材制造传热过程的模拟(第4节中介绍的第三类热分析模型). 其余热源模型对网格离散精度要求居中, 可用于第4节介绍的多种热分析模型中.

4 金属增材制造传热传质过程数值模拟

金属增材制造传热传质过程的数值模拟结果是微观尺度上零件内部冶金缺陷和材料微观组织演化过程模拟以及宏观尺度上热应力演化分布预测的基础. 依据所关注的物理现象和求解问题的尺度不同, 该传热传质过程的数值模拟可分为三类: 粉末尺度高保真“热-流”耦合模型、基于粉末连续体假设的“热-流”耦合模型以及基于连续体假设的热传导模型.

4.1 粉末尺度的热流耦合模型

该类热分析模型, 主要面向金属粉末受热熔化、流动以及凝固过程的模拟分析(图4)^[37], 以FVM, LBM和ALE计算方法求解为主. 该类模型采用2.1节的控制方程, 即耦合纳维-斯托克斯方程和热对流扩散方程描述微熔池内的传质传热, 采用粉末尺度上的高保真网格离散, 可精确考虑表面张力、Marangoni效应, 从而被广泛用于揭示制造缺陷的形成机理.

在采用FVM求解该粉末尺度的热流耦合模型方面, Yan等人^[38]提出了针对SEBM工艺的多物理场耦合算法. 其中, 采用离散元法模拟真实的粉末层铺设过程, 采用FVM法模拟金属粉末熔化凝固过程, 采用流体体积法重构熔池表面, 如图5所示. 基于该模型, Yan等人重现了Ti-6Al-4V单道成形中的球化和不平直两种缺陷的形成过程, 并指出, 球化现象源于基板未充分熔化, 而不平直现象则归因于随机分布的粉末及其与

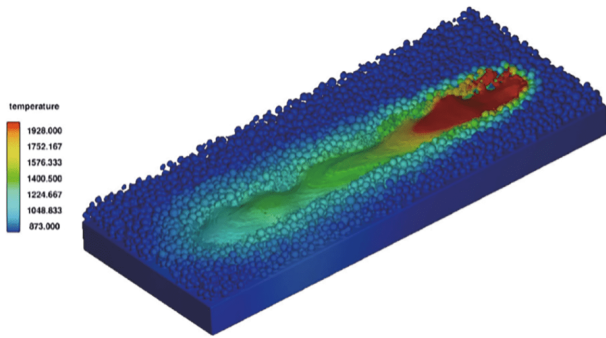


图4 (网络版彩图) SEBM工艺Ti-6Al-4V合金单道成形温度场云图^[37](图片来自文献, 已获得授权)

Figure 4 (Color online) Temperature field of a single-track for Ti-6Al-4V alloy with SEBM [37]. Reprinted with permission from ref. [37]. Copyright©2018 Springer.

熔池的不规则黏附. 进一步, Yan等人^[39]将该模型用于多层多道过程的数值模拟, 研究了层间熔化规律对成形质量的影响, 指出在搭接区内未熔合易导致孔隙缺陷, 如图6所示. 基于相同的模型和DEM-FVM顺序耦合算法, Lee等人^[40]针对SLM工艺, 研究了激光热源作用下IN718合金粉床的传热传质过程, 计算结果表明熔池前端位于热源下方的凹陷区是汽化反冲压力作用的结果, 熔池内的向后表面流动归因于Marangoni效应.

这些预测结果均已实验观察结果相吻合.

此外, Wang等人^[41]采用FVM和DEM的顺序耦合算法模拟了SLM工艺Ti-6Al-4V合金粉床的成形过程. 计算结果表明, 在给定热输入不变的情况下, 铺粉越厚则孔隙率越高、成形表面越粗糙; 单道成形表面的波纹密集程度与温度梯度大小和粉末的平均尺寸呈正相关, 这是因为温度梯度越大导致Marangoni效应越强, 粉末尺度越大而在表面张力作用下带来的不稳定性越大, 与实验结果吻合较好(详见参考文献[41]的图10).

与基于欧拉描述的FVM方法相比, ALE方法兼具拉格朗日算法和欧拉算法的优势, 在处理流固耦合问题方面具有显著的优势. 目前, 美国Lawrence-Livermore国家实验室(Lawrence Livermore National Laboratory, LLNL)的金属增材制造研究组^[42,43]基于其内部开发的ALE3D程序(具体算法为杂交的FVM和FEM)开展了粉末尺度的高保真“热-流-固”耦合数值模拟. 其中, 分别采用ALE3D的Particle Pack工具生成金属粉末呈随机分布的粉床; ALE3D的欧拉算法部分求解流场和温度场, ALE3D的拉格朗日算法部分求解材料的运动和变形. 针对激光粉床熔合技术, Khairallah等人^[43]研究了316L不锈钢金属粉末熔化凝固成形过程,

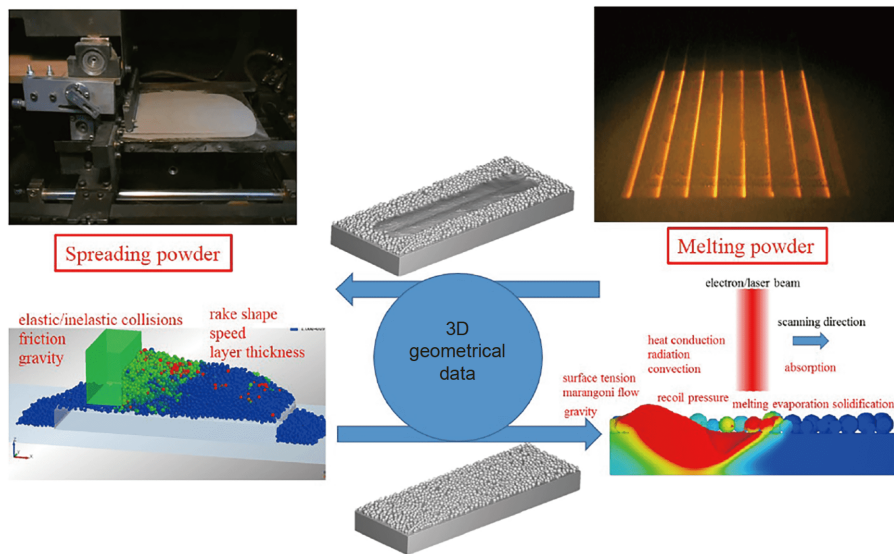


图5 (网络版彩图)基于离散元方法的铺粉过程模型模拟重力、摩擦、碰撞等作用下的铺粉过程, 基于FVM法的高保真热分析模拟粉末的加热、熔化、流动、凝固等传质传热过程, 两个模型间交互传递基于STL格式的三维几何数据^[38](图片来自文献, 已获得授权)

Figure 5 (Color online) The powder spreading process model based on the discrete element method simulates the powder spreading process subject to gravity, friction, collision, etc., and the high-fidelity thermal analysis based on the finite volume method for the heat transfer and mass transfer process of the powder heating, melting, flow, solidification, etc. The 3D geometry data transferred between two models is based on the STL format [38]. Reprinted with permission from ref. [38]. Copyright©2018 Elsevier.

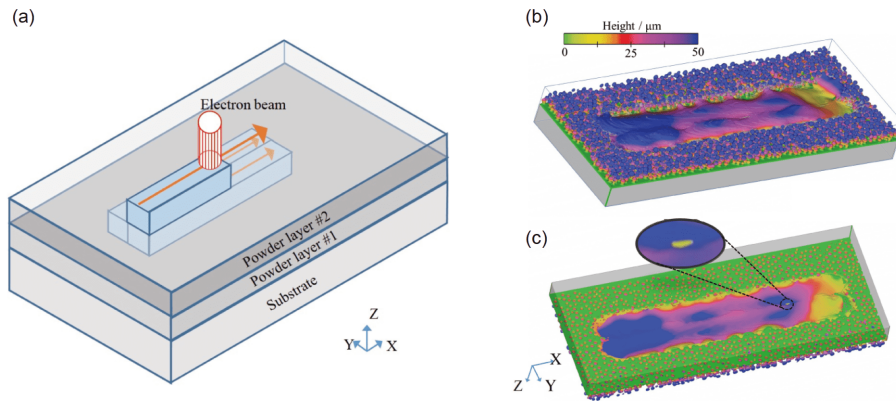


图6 (网络版彩图) SEBM打印Ti-6Al-4V合金的两层两道计算结果. (a) 扫描路径示意图; (b) 最终计算结果, 颜色表示相对于基板的高度; (c) 从底部视图且仅显示两层粉床的材料区域, 其中局部放大图显示了预测的打印过程中出现的孔隙^[39]. 由于未考虑气体, 该模型不能够预测与圈闭气体相关的孔隙(图片来自文献, 已获得授权)

Figure 6 (Color online) Numerical results of the two-layer two-track case for Ti-6Al-4V alloy with SEBM. (a) A schematic diagram of the scanning path. (b) The final simulation result. The color represents the height relative to the substrate. (c) The bottom view of the numerical result only for the deposited two-layer powder bed, where the closeup presents the predicted void during the printing process [39]. Since gas phase is not considered in this model, the void caused by trapped gas can not be predicted. Reprinted with permission from ref. [39], Copyright©2018 Elsevier.

考虑了表面张力、蒸发及其反冲压力、Marangoni效应等主要的驱动力, 揭示了熔池流动、材料飞溅、孔洞形成、粉床剥蚀等现象的物理机理, 如图7所示. 其中, 左侧为熔池演化过程的时序图, 给出了熔池形成后流场速度在各个区域的分布规律, 具体为前端凹陷区、中间过渡区和尾端区. 在前端凹陷区反冲压力占主导, 导致了热源下方熔池内复杂的流场并伴随着材料飞溅, 如右侧所示; 在中间过渡区及尾端区主要是表面张力(Marangoni效应)占主导, 驱动液体向后及低温区流动, 并伴随着颈缩和剥蚀现象. 基于数值模拟结果, Khairallah等人^[43]进一步分析了在熔池不同位置处孔隙形成的机理, 但并没有给出相应的应力应变场分析. 进一步, Khairallah等人^[44]基于该高保真多物理场模型着重研究了纳秒尺度下的材料飞溅现象, 并揭示了飞溅诱导缺陷形成的机制. 计算结果表明, 预烧结、恰当的激光功率及其功率增长速度可有效减少飞溅现象的产生.

此外, LBM方法也被广泛用于金属增材制造粉末尺度的传热传质分析^[45-47]. 不同于主要用于求解基于连续体假设控制方程的FVM和ALE等方法, LBM是一种基于介观模拟尺度的计算流体力学方法, 非常适合此类问题求解. Körner等人^[46]首先基于二维LBM模拟了Ti-6Al-4V合金粉末的选区电子束熔融过程, 考虑了

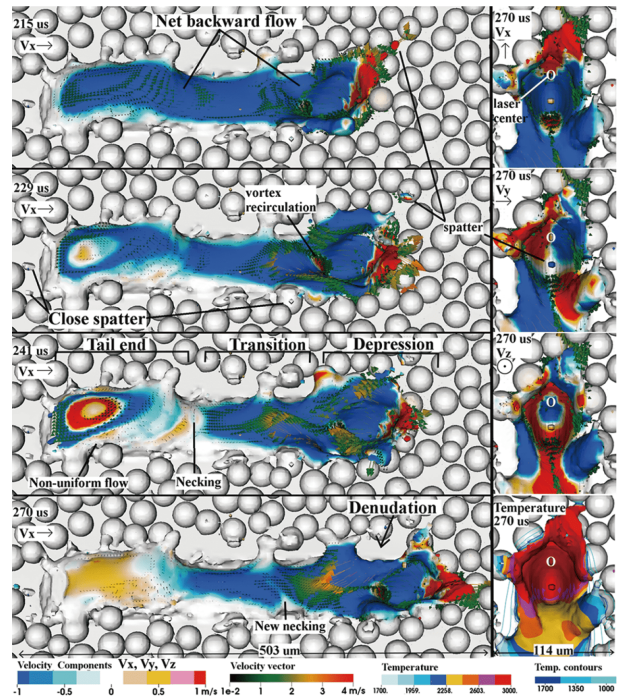


图7 (网络版彩图)基于ALE3D模拟激光粉床熔合工艺316L不锈钢粉末熔池温度和速度的计算结果, 展示了材料飞溅和剥蚀现象^[43](图片来自文献, 已获得授权)

Figure 7 (Color online) Numerical results of temperature and velocity fields over the melting for 316L stainless steel powder bed fusion using ALE3D, where the material splashing and denudation phenomena are captured. Reprinted with permission from ref. [43], Copyright©2016 Elsevier.

表面张力、浸润等物理现象, 随后发展了三维模型并进一步考虑了蒸发和反冲压力等因素(详见参考文献[47]的图9). 在该模型中, 界面识别采用了流体体积法(Volume of Fluid, VOF), 但表面张力系数被设为常值从而忽略了Marangoni效应. 与Körner等人的工作不同, Zheng等人^[48]在LBM三维模型中考虑了Marangoni效应, 数值模拟研究了IN625合金选区激光熔融工艺. 其中, 数值计算结果表明, 激光扫描速率过快会导致未熔合现象从而产生孔隙, 而提高粉末填充率一般来说可以提高成品致密度, 但也易导致因发生未熔合而产生的孔隙.

4.2 基于连续体假设的热流耦合模型

基于连续体假设的热分析模型将粉床和进入熔池的金属粉末集合等效为连续体并进行“热-流”耦合模拟, 主要关注的物理量是金属熔池形貌尺寸和考虑热对流效应的温度场(图8). 该类热分析模型主要采用FVM^[49]和ALE^[27]等方法离散求解第2.1节的控制方程, 虽可考虑表面张力、Marangoni效应等物理因素, 但因没有精细离散单个金属粉末颗粒而无法直接用于材料飞溅、球化、剥蚀等物理现象的探究.

Lian等人^[49]采用该类模型研究了基于直接能量沉积(Directed Energy Deposition, DED)工艺的IN718合金薄墙(Thin-Wall)件成形过程. 其中, 采用FVM进行数值模拟, 并假设熔池表面为平面以进一步提高计算效率. 随着激光热源移动, 其下方的网格单元被依次激活, 从而获得成形过程中温度场分布和熔池内的流场分布, 如图8(b)所示. 为了定量比较激光扫描速度和功率对温度场分布的影响, Lian等人^[49]提取了扫描道中心纵

截面熔池边界上的温度梯度绝对值和冷却速率的分布曲线, 如图9所示. 其中, 图9(a)是单道扫描下, 激光热源功率为540 W, 扫描速度范围为200–400 mm/min的5个工况计算结果; 图9(b)是单道扫描下, 激光扫描速度为200 mm/min, 热源功率范围为340–540 W的5个工况计算结果; 图9(c)是激光扫描速度为200 mm/min, 热源功率范围为390 W, 单向扫描单道8层的计算结果. 计算结果表明, 对于给定的激光功率和扫描速度取值范围: (1) 从熔池顶部到底部, 温度梯度值递增, 冷却速率在半对数坐标下近似呈双线性分布且在熔池底部取最小值; (2) 固定激光功率, 扫描速度越大熔池深度越小, 温度梯度越大, 冷却速率越大; (3) 固定扫描速度, 激光功率越大熔池深度越大, 温度梯度分布趋势一致, 冷却速率变化趋势在熔池上部和底部分别变小和变大; (4) 对于单道多层工况, 随着层数的增加, 熔池深度逐渐变大并趋于稳定, 温度梯度变化和冷却速率变化类似于固定扫描速度增加激光功率的趋势, 但逐渐趋于稳定.

进一步, Gan等人^[50]在该模型中引入基于最小能量原理的简化气/液界面控制方程来确定熔池表面形貌, 从而避免引入熔池表面为平面的假设以提高计算精度. 采用该改进的模型, Gan等人^[50]针对2018年美国国家标准技术标准局举办的金属增材制造数值模拟挑战赛提供的实验结果开展了数值模拟研究. 该实验设置为激光以不同的功率和移动速度单道扫描IN625基板, 包括3种组合工况: (Case A) 150 W, 450 mm/s; (Case B) 195 W, 800 mm/s; (Case C) 195 W, 1200 mm/s. 三种工况下, 熔池横截面尺寸的数值预测结果如图10(a)–(c)中红色虚线所示, 与实验结果吻合良好. 同时,

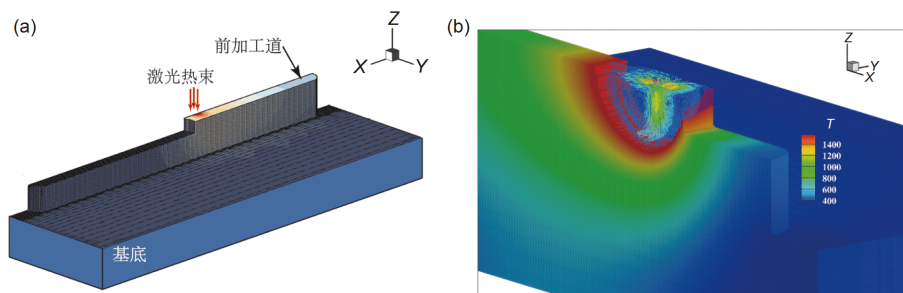


图8 (网络版彩图) (a) 基于连续体假设的直接能量沉积工艺热流耦合分析模型; (b) 温度场云图及熔池内的流场图^[49](图片来自文献, 已取得授权)

Figure 8 (Color online) (a) Continuum-based thermo-fluid flow coupling numerical model for directed energy deposition; (b) temperature field contour and the flow field within the molten pool ^[49]. Reprinted with permission from ref. ^[49], under the terms of the Creative Commons CC BY License.

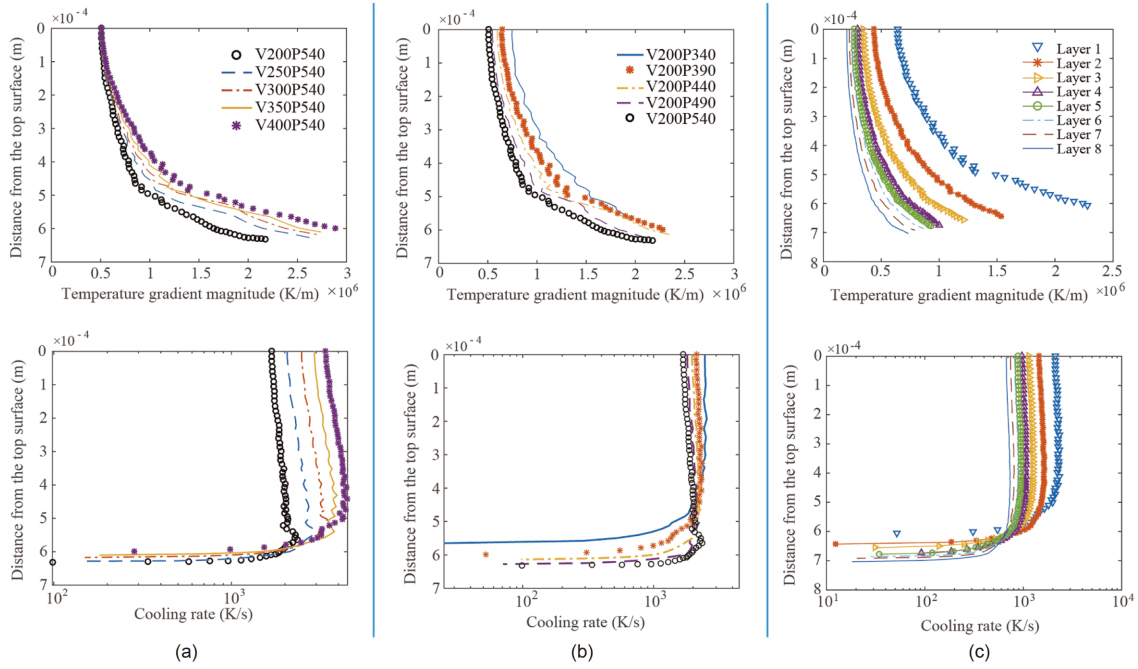


图9 (网络版彩图) IN718合金直接能量沉积工艺过程中熔池边界上的温度梯度(第一行图)和冷却速率(第二行图)分布曲线^[49]. (a) 5个工况的单道扫描计算结果, 其中激光功率固定为540 W, 扫描速度范围为200–400 mm/min; (b) 5个工况的单道扫描计算结果, 其中激光扫描速度为200 mm/min, 功率范围为340–540 W; (c) 单道8层计算结果, 其中激光功率为390 W, 扫描速度为200 mm/min (图片来自文献, 已取得授权)

Figure 9 (Color online) Profiles of temperature gradient (first row) and cooling rate (second row) along the boundary of the molten pool for IN718 alloy with directed energy deposition [49]. (a) Numerical results of 5 single scan track cases with constant laser power of 540 W and scan speed varying from 200 to 400 mm/min; (b) numerical results of 5 single scan track cases with constant laser scan speed of 200 mm/min and laser power varying from 340 to 540 W; (c) numerical results of the single-track eight-layer cases with laser power of 390 W and scan speed of 200 mm/min. Reprinted with permission from ref. [49], under the terms of the Creative Commons CC BY License.

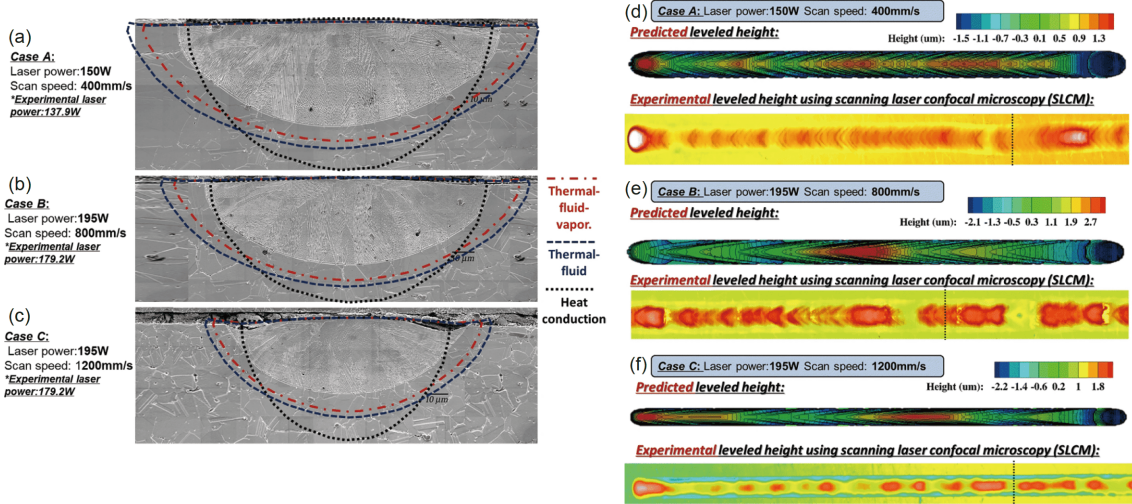


图10 (网络版彩图)不同工况下的实验结果与数值计算结果的对比^[50]. (a)–(c) 熔池横截面尺寸对比; (d)–(f) 熔池凝固表面上的波纹分布对比(图片来自文献, 已取得授权)

Figure 10 (Color online) Comparisons between experimental and simulation results for the three cases [50]. (a)–(c) The comparison of the transverse cross-sectional dimensions of the molten pool; (d)–(f) the comparison of the chevron distribution over the solidified surface of the molten pool. Reprinted with permission from ref. [50], Copyright©2019 Springer.

图10(a)–(c)中还对比分析了热-流耦合模型(不考虑蒸发)和热传导模型(不考虑流动与蒸发)的计算结果, 分别如图中蓝色虚线和黑色虚线所示. 表1对比了熔池长度的三种模型预测结果与实验结果, 表明考虑蒸发现象的热流耦合模型预测结果与实验结果吻合最好. 此外, 表1还列出了冷却速率的数值预测结果和实验结果(注: 由于温度测试技术限制, 实验中冷却速率为测量点从固相线温度冷却到1000°C时的平均冷却速率), 也表明考虑蒸发的热流耦合模型预测结果与实验值吻合最好, 而不考虑蒸发的热传导模拟预测结果值最小. 进一步, 图10中(d)–(f)对比了熔池凝固后表面波纹分布数值模拟结果(考虑蒸发的热流耦合模型)与实验结果, 两者吻合, 表明扫描速度越大, 则波纹的间距越大.

此外, Gan等人^[27]采用该类模型模拟了Co基合金激光送粉熔化过程, 其中采用了基于ALE的移动网格技术显式追踪了熔池表面的演化过程. Gu研究组^[51]基于FVM模拟了TiC/AlSi10Mg复合材料颗粒选区激光熔融过程, 其中采用VOF重构了熔池表面的演化过程, 并揭示了线能量输入对于表面粗糙度的影响, 即给定工况下线能量输入越大, 表面质量越好.

4.3 基于连续体假设的热传导模型

基于连续体假设的热传导模型主要关注的是制造过程中已成形零件的整体温度场分布, 并忽略单个粉末熔化行为和熔池动力学行为. 该类分析模型主要采用FEM离散求解基于拉格朗日描述的热扩散方程, 即第2.1节中对流速度为0的能量守恒方程. 因此, 相比于上述两种热分析模型, 该类模型具有求解控制方程数少, 计算量小等优点, 因而可用于部件级规模问题的模拟分析. 同时, 由于采用拉格朗日描述, 该热分析模型易与热应力分析模型直接耦合, 以模拟分析零件制备过程中的残余应力和残余应变分布.

针对粉床熔合工艺, 在基于连续体假设的热分析模型中, 需要建立粉床的等效密度及其等效热传导系数. 等效密度计算相对简单, 可由粉床的粉末密度确定. 粉床的等效热传导系数计算较为复杂且有多种模型^[52–57], 其中常用的预测模型为Sih模型^[55,57]:

$$\frac{k_e}{k_g} = (1 - \sqrt{1 - \varepsilon}) \left(1 + \frac{\varepsilon k_R}{k_g} \right) + \sqrt{1 - \varepsilon} \left[\left(\frac{2}{1 - \frac{k_g}{k_s}} \left(\frac{1}{1 - \frac{k_g}{k_s}} \ln \frac{k_s}{k_g} - 1 \right) \right) + \frac{k_R}{k_g} \right], \quad (16)$$

$$k_R \approx 4F\sigma_{sb}T^3x_R, \quad (17)$$

其中, k_e 表示粉床的等效热传导系数, k_g 表示粉末间隙中气体的热传导系数, k_s 表示粉末母材的热传导系数, ε 表示粉末层的孔隙率, k_R 表示由辐射产生的热传导系数, F 为表观系数取值为1/3, T 表示粉末的温度, x_R 表示粉末颗粒间热辐射的有效长度, 通常取粉末颗粒的等效直径长度. 此外, 为了近似考虑熔池内Marangoni对流效应对传热的影响, 需要修改熔池内材料的热传导系数. 例如, 魏雷等人^[58]通过增加热传导率的大小来近似模拟熔池内对流传热机制; Zhang等人^[34]依据实验数据拟合了各向异性的等效热传导系数模型, 考虑了不同方向上热对流的强弱对传热的影响.

该类热分析模型主要应用于与热应力分析模型的耦合计算, 以分析制备零件的残余应力和残余应变分布. Gu等人^[59]采用该类热分析模型与应力分析模型顺序耦合的方式, 研究了SLM工艺下Ni, Ti双组分合金粉末床单层多道成型的残余应力分布和开裂原因. 如图11所示的单层多道扫描冷却后残余应力分布, 计算结果表明残余应力在每道扫描末端处最大, 因此成型区域边缘处则是产生开裂的主要位置. Denlinger等人^[60]采用与上述相同的热-力耦合模型, 分析了选区激光熔

表1 熔池长度与冷却速率数值模拟结果与实验结果的对比^[50]

Table 1 Comparison of the molten pool length and cooling rate between numerical results and experimental data [50]

模型	工况A: 150 W, 400 mm/s		工况B: 195 W, 800 mm/s		工况C: 195 W, 1200 mm/s	
	熔池长度 (μm)	冷却速率 (K/s)	熔池长度 (μm)	冷却速率 (K/s)	熔池长度 (μm)	冷却速率 (K/s)
实验结果	659±21	(6.20±0.799)×10 ⁵	782±21	(9.35±1.43)×10 ⁵	754±46	(12.8±3.94)×10 ⁵
考虑蒸发的热流耦合模型	502	5.44×10 ⁵	772×10 ⁵	7.59×10 ⁵	717×10 ⁵	12.14×10 ⁵
不考虑蒸发的热流耦合模型	542	5.11×10 ⁵	843×10 ⁵	6.89×10 ⁵	785×10 ⁵	11.4×10 ⁵
不考虑蒸发的热传导模型	564	4.3×10 ⁵	883×10 ⁵	6.35×10 ⁵	832×10 ⁵	10.1×10 ⁵

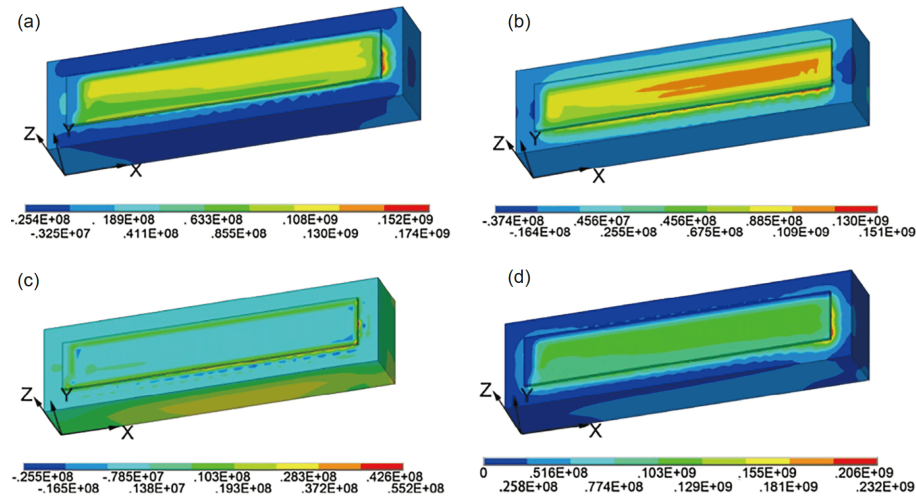


图11 (网络版彩图) Ni-Ti合金粉末在SLM工艺下冷却后残余应力分布. (a) 沿扫描方向的应力分量 σ_{xx} ; (b) 垂直扫描方向的应力分量 σ_{yy} ; (c) 沿建造方向的应力分量 σ_{zz} ; (d) von Mises应力^[59](图片来自文献, 已取得授权)

Figure 11 (Color online) The residual stress distributions as the Ni-Ti powder bed cooled down with SLM. (a) x-component of stress along the scan direction; (b) y-component of stress transversal to the scan direction; (c) z-component of stress along the build direction; (d) von Mises stress. Reprinted with permission from ref. [59], Copyright©2016 Elsevier.

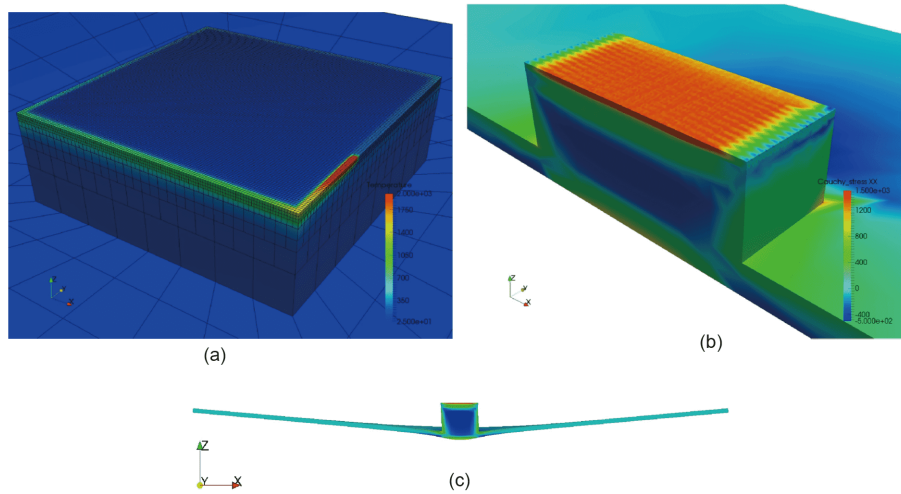


图12 (网络版彩图) IN718合金在SLM工艺下多层沉积过程的计算结果. (a) 扫描第37层时温度分布云图; (b) 38层沉积完成后残余应力分量 σ_{xx} 云图; (c) 工件的最终变形情况(变形放大为5倍)^[60](图片来自文献, 已取得授权)

Figure 12 (Color online) Numerical results of multi-layers deposition for IN718 alloy with SLM. (a) Temperature contour plot during the deposition process for 37th layer; (b) residual stress component, σ_{xx} (MPa), distribution after deposition is completed; (c) final distortion of the workpiece (5× magnification of distortion). Reprinted with permission from ref. [60], Copyright©2017 Elsevier.

融工艺下IN718合金的38层沉积立方体的残余应力与变形的演化情况. 如图12所示, 计算结果表明零件完全冷却后, 最后一层以拉应力分布为主, 而其余各层则以压应力分布为主; 同时, 由于熔合的材料主要发生收缩和塑性变形, 基板产生了向下的弯曲变形, 如图12(c)所示.

在更大尺寸零件成形过程热分析模拟方面, Johnson等人^[61]研究了基于LENS工艺的304L不锈钢圆管成型过程的温度和残余应力分布, 计算结果表明, 每层扫描完毕后激光沿建造方向的垂直移动会引起温度梯度的改变, 进而产生了沿建造方向上不连续的应力梯度分布(详见参考文献[61]的图3和7). 姜亚琼等人^[62]采

用该类模型研究了基于LENS工艺的TC4航空T型缘条结构件成型过程中不同扫描路径对温度场和应力场的影响(详见参考文献[62]的图6和图8). 计算结果表明, 零件温度场沿高度方向均呈现垂直向上的温度梯度分布, 残余应力最大区域主要集中在零件两端和与基板连接的根部位置. 该工作充分体现了基于连续体假设的热传导模型在求解物理问题规模上的优势.

4.4 传热传质过程数值模拟总结与展望

本节总结归纳了以粉末作为母材的金属增材制造传热传质过程数值模拟的三类主要热分析模型及其应用. 基于求解的控制方程和计算量, 这三类热分析模型分别针对金属粉末增材制造不同尺度上的物理问题并具有不同的适用范围, 具体如下.

第一类热分析模型为粉末尺度高保真“热-流”耦合模型. 该模型求解的物理问题控制方程数最多, 离散求解单个金属粉末颗粒的受热熔化-凝固过程, 从而可以模拟复杂的熔池演化过程. 但因其模型复杂、计算量大, 该模型主要用于探究粉末尺度上制造缺陷的形成机理, 如球化、剥蚀、飞溅、气孔和夹杂等. 该模型常采用的数值模拟方法为FVM, LBM和ALE等方法.

第二类热分析模型为基于连续体假设的热流耦合模型. 该模型求解的物理问题控制方程等同于第一类热分析模型, 但不再关注单个金属颗粒热力学行为而是将粉末集统一看作等效连续体来处理, 因而极大地降低了问题的离散规模. 该模型主要面向熔池形貌尺寸和考虑对流效应的温度场模拟, 可以求解更大规模的问题, 如多层多道扫描. 该模型常采用的数值模拟方法为FVM和ALE等方法.

第三类热分析模型为基于连续体假设的热传导模型. 该模型求解的物理问题控制方程为热传导方程, 在第二类模型的基础上进一步忽略了熔池内金属液体流动, 相较于前两类模型考虑的物理现象比较单一. 由于其模型简单、计算量小, 该模型主要面向部件级大尺度问题的模拟求解. 此外, 该类模型采用拉格朗日描述, 更易与热应力分析模型进行耦合, 可以快速预测出零件在制造过程中的残余应力与残余应变分布. 该模型常采用的数值方法主要为FEM.

虽然目前在面向不同问题和不同尺度下均有相应的热分析模型, 但各类模型都存在一定的局限性和亟待解决的问题, 具体如下.

(1) 粉末尺度的“热-流”耦合模型和基于连续体假设的“热-流”耦合模型都是采用Euler描述的控制方程和流体动力学算法求解, 不能有效模拟热应力以及与其相关的缺陷形成过程, 如微裂纹、变形等. 此外, 熔池与其周边金属粉末和基底材料的相互作用对熔池动力学研究极为重要, 残余应力和变形对结构形貌演化研究非常关键并会影响材料力学性能和零件的承载性能. 因此, 如何在物理力学建模中显式考虑热、流和固相之间的强耦合, 发展能够实现“热-流-固”强耦合问题的高保真计算模型和数值方法, 是一个亟待解决的问题. 目前, Wessels等人^[36]基于最优输运无网格法建立了“热-流-固”强耦合模型, 模拟求解了有限个金属粉末的受热熔化、流动和凝固的过程; 光滑粒子流体动力学(Smoothed Particle Hydrodynamics, SPH)法也被用于粉末尺度下^[63-66]或基于连续体假设^[67]的“热-流-固”耦合模拟, 如Wriggers研究组^[64]使用该方法研究了材料沉积过程中的熔池动力学行为和工艺参数对熔覆道质量的影响; 陈嵩涛等人^[68]基于无网格伽辽金法^[69]研究了选区激光熔融技术中材料熔覆沉积过程的温度场演化过程. 上述研究展现了无网格法在“热-流-固”耦合问题求解中的潜在应用价值, 因此基于无网格法建立金属增材制造过程粉末尺度的“热-流-固”强耦合数值模型是一个重要的发展方向^[70].

(2) 在基于连续体假设的热分析模型中引入了较多的假设, 致使相应的等效材料参数难以确定, 无法定量研究制造缺陷, 如未熔合、球化、飞溅和剥蚀等. 因此, 如何充分发挥各类模型的优势来高效分析过程参数与形貌演化、制造缺陷、残余应力分布之间的关系是亟待解决问题. 例如, 可以依据第一类模型得出的粉末及熔池热力学行为和缺陷形成的演化规律或结果, 建立等效简化模型, 再将该等效模型耦合到基于连续体假设的模拟中以确定相应的材料参数并研究相应的温度场、残余应力、缺陷分布等问题, 从而发挥各类模型的优势, 以实现金属增材制造过程的高效计算模拟分析. 因此, 采用等效模型逐尺度递进的方式建立“热-流-固”弱耦合模型, 也是一个值得关注的发展方向.

5 材料微观组织模型及其模拟方法

对于金属增材制造技术, 了解并掌握材料微观组

织演化过程的物理机理是控制零件内部冶金组织一致性和力学性能优异性的关键所在. 由于逐道逐层的制造工艺特性, 前加工道的沉积材料将经历一系列短时、非稳态的热循环过程, 导致材料将经历复杂的微观组织演化过程, 并表现出对制造过程参数的强烈依赖性和多变性. 目前, 材料微观组织数值模拟方法主要有PF模型、CA法和KMC法等. 按照枝晶模拟的分辨率不同, 这些模型又可分为微观模型和介观模型. 本节主要介绍微观模型PF模型、介观模型CA法和KMC法在金属增材制造中的应用.

5.1 微观尺度PF模型及其应用

PF模型可以用于模拟材料凝固过程中枝晶形成过程、粗化现象以及固态相变等微观组织演化过程, 在定量描述枝晶形貌方面具有突出的优势^[71-73]. 但因其计算量巨大, PF模型以二维问题模拟居多, 所模拟的区域尺度有限, 通常用于晶体生长动力学物理机理研究. 针对不同的微观组织演化过程, PF模型也不同, 其理论比较复杂, 涉及参数众多, 并且部分参数不能从实验中直接获得. 因此, 本节仅限于PF模型在模拟枝晶形貌方面的应用介绍.

目前, PF模型主要用于金属增材制造过程材料凝固初生相的模拟研究, 并将多元合金近似处理为二元合金. Fallah等人^[74]针对激光送粉增材制造工艺, 初步采用二维PF模型并结合基于连续体假设的热传导模型研究了Ti-6Al-4V合金熔池中心凝固界面上不同位置枝晶的一次枝晶间距变化趋势. 计算结果表明, 由于熔池凝固界面上局部温度梯度和凝固速率不同, 一次枝晶间距在熔池底部最大、在中部最小, 并与实验结果和与Hunt模型^[24]的解析结果趋势相吻合. 进一步, Gong和Chou^[75]采用二维PF模型研究了SEBM工艺Ti-6Al-4V合金成形过程中的 β 相枝晶形貌演化过程及其竞争生长现象. 其计算结果表明, 过冷度越大, 枝晶生长速度越大. 因此, 扫描速度越大, 枝晶间距和晶粒尺寸越小(详见参考文献^[75]的图6).

在此基础上, Sahoo和Chou^[76]研究了温度梯度对枝晶形貌演化过程的影响, 指出温度梯度越大, 枝晶间距和尺寸越小. 为了获得精度更高的熔池截面形状和糊状区温度场, Acharya等人^[77]将二维PF与基于连续体假设的热流耦合模型相结合, 预测分析了SLM工艺IN718合金凝固组织的一次枝晶间距、溶质偏析、

晶界位向差、二次枝晶等问题. 计算结果表明, (1) 预测的一次枝晶间距的范围为1–4 μm , 与实验测量值范围1–3 μm 吻合较好, 如图13所示; (2) 扫描速度对枝晶的晶向分布和二次枝晶生长有着显著的影响, 如图14所示; (3) 扫描速度越大, 枝晶晶向越倾向于激光移动方向且二次枝晶生长越充分.

除了模拟枝晶形貌, 也有其他学者将PF模型进行简化以在介观尺度上模拟微观组织的演化过程. 例如, Liu等人^[78]采用二维PF模型预测了SEBM工艺Ti-6Al-4V合金的多层扫描工况下材料凝固初生相, 其中忽略了溶质扩散方程以减少计算量. 针对单道多层工况, Liu等人^[78]获得的微观组织如图15所示. 预测结果重现了实验中观察到的横截面典型微观组织特征: 熔池两侧向内倾斜且呈现竞争生长的柱状晶、位于熔池中心且其<001>与中心轴平行的柱状晶、熔池边缘的细小等轴晶等. 但是, 考虑到金属增材制造熔池内温度分布不均匀, 基于二维模型预测的微观组织有一定的局限性, 无法反映整个熔池内的微观组织演化过程及其空间分布特性.

5.2 CA法及其应用

CA方法是应用较为广泛的材料微观组织介观尺度模拟方法. 该方法是由Gandin和Rappaz等人^[79,80]提出, 并主要用于金属材料凝固组织初生相模拟. 目前, CA法已广泛应用于金属增材制造中材料凝固组织演

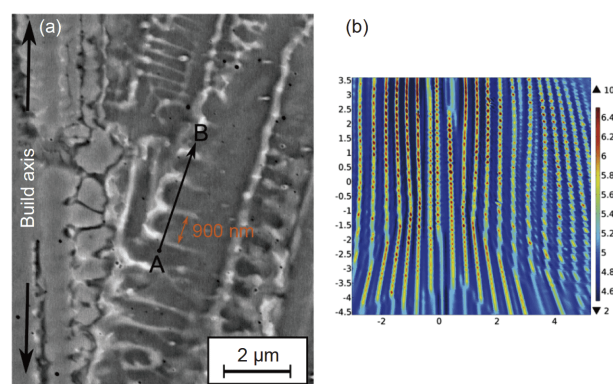


图13 (网络版彩图)选区激光熔融过程IN718合金一次枝晶间距对比^[77]. (a) 实验结果; (b) 预测结果(图片来自文献, 已取得授权)

Figure 13 (Color online) Comparison of primary dendrite arm spacing for IN718 alloy with SLM [77]. (a) Experimental data, (b) predicted result. Reprinted with permission from ref. [77], Copyright©2017 Elsevier.

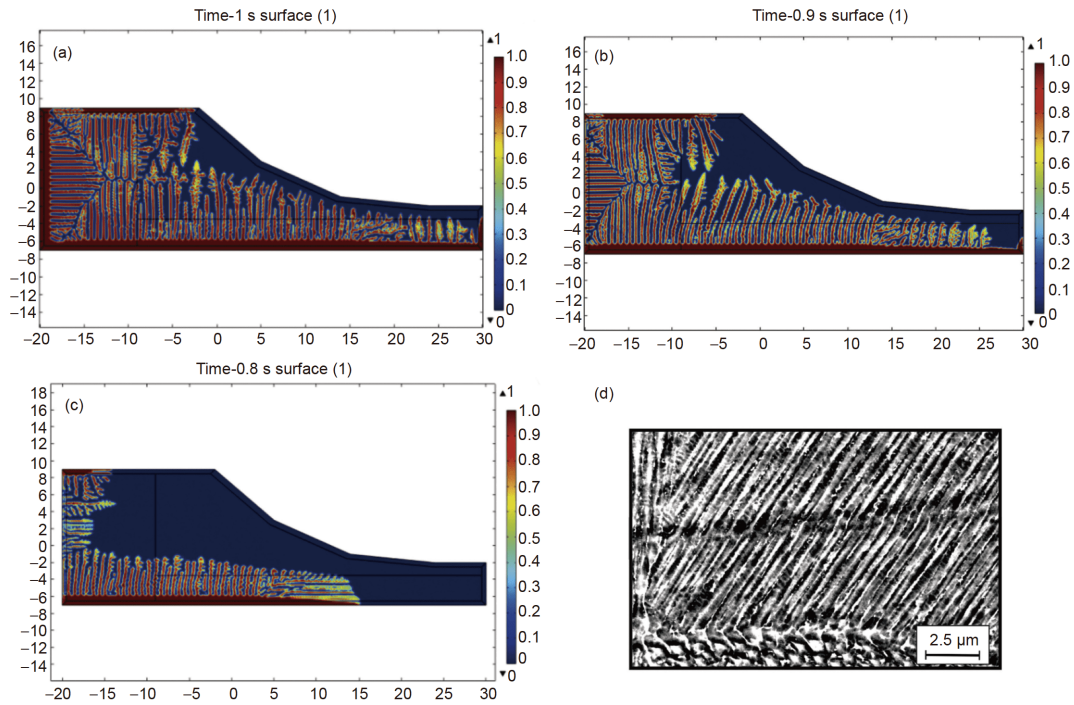


图14 (网络版彩图)选区激光熔融过程IN718合金单道扫描纵截面上沿扫描方向枝晶晶向^[77]. (a)–(c) 数值模拟结果, 扫描速度依次为0, 984和1640 mm/s的PF数值模拟结果; (d) 激光功率为335 W, 扫描速度为1600 mm/s实验结果(图片来自文献, 已取得授权)

Figure 14 (Color online) Longitudinal cross section of single track showing orientation of dendrites in scan direction for IN718 alloy with SLM. (a)–(c) Numerical results for cases with scan speed of 0, 984, and 1640 mm/s, respectively; (d) experimental data with laser power of 335 W and scan speed of 1600 mm/s. Reprinted with permission from ref. [77], Copyright©2017 Elsevier.

化过程模拟^[37,49,81–83].

与PF模型不同, CA方法不解析枝晶形貌细节, 而是直接模拟其轮廓(包络)的生长过程. 在CA方法中, 采用规则的网格离散计算区域, 根据形核模型确定潜在的形核单元, 依据晶体生长动力学理论确定新生晶核的生长速度. 目前的CA法大多采用连续形核模型^[79], 其中潜在形核点数由形核密度来确定, 并通过随机算法确定潜在的形核单元; 单元形核的条件则为该形核点处的过冷度(称为临界过冷度), 并符合由平均过冷度 ΔT_m 与方差 ΔT_o 确定的Gauss分布. 当一个潜在形核单元达到形核条件且并未被其他晶粒捕获时, 则在此单元新生成一个晶核, 并通过随机算法确定其晶向信息. 因此, CA法中的晶粒形核模型是一个概率模型. 对于立方晶系, CA法假设该晶核的外包络为正八面体, 如图16所示. 该八面体的中心位于晶核所在单元的形心, 8条对角线对应于枝晶的相应尖端, 其长度则表示为枝晶尖端生长速度在时间上的积分. 在CA中, 枝晶尖端的生长速度 $v(\Delta T)$ 通常表示为过冷度的多项

式函数,

$$v(\Delta T) = \alpha_1 \Delta T + \alpha_2 \Delta T^2 + \alpha_3 \Delta T^3, \quad (18)$$

其中, α_1 , α_2 , α_3 为生长系数, 通过拟合晶体生长动力学模型来确定, 如KGT模型(Kurz-Giovanola-Trivedi)^[84]. 当该包络覆盖其周边的液态邻居单元中心时, 则通过偏心生长算法^[80]在该单元生成一个子包络并携带该晶粒的晶向信息. 这样晶核就通过不断捕获周边的液态单元而逐渐长大.

CA法所采用的网格单元尺寸通常需要小于所模拟问题的二次枝晶间距. 因此, 针对金属增材制造过程的材料微观组织模拟, CA网格单元尺寸一般需要小于 $10 \mu\text{m}$ ^[37]. 这导致CA法模拟大尺度问题时的离散规模大、计算耗时的问题. 为此, Lian等人^[37]基于MPI技术开展了金属增材制造三维CA算法的并行化研究, 建立了虚拟拓扑区域分解算法, 并给出了确保CA算法中包络捕获单元、晶向信息交互正确的信息传递算法, 可实现大规模并行计算. 采用该并行算法, Lian等人^[37]

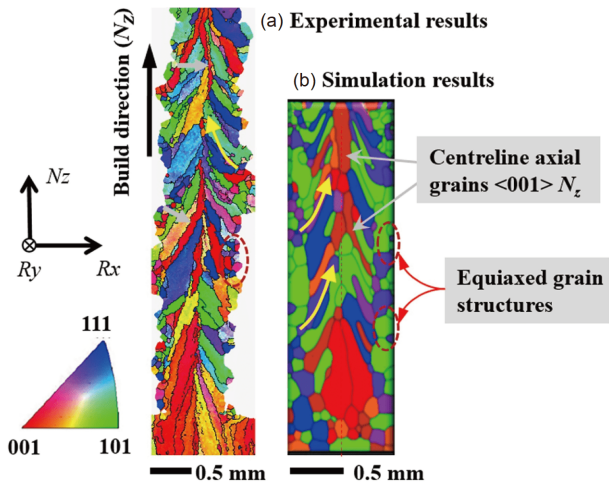


图15 (网络版彩图) SEBM工艺Ti-6Al-4V合金凝固初生相实验与PF模拟结果对比^[78]. (a) 实验中重构的 β 相晶粒组织EBSD图; (b) β 相晶粒组织数值模拟结果. 其中, 黄色箭头所示的 β 晶粒, 灰色箭头所示的中心晶粒和边缘处的细等轴晶都是横截面上微观组织形貌的典型特征(图片来自文献, 已取得授权)

Figure 15 (Color online) Comparison of experimental and simulation results for Ti-6Al-4V alloy with SEBM [78]. (a) An EBSD map of reconstructed β -grain structures based on experimental data; (b) predicted β -grain structures. The inward slanted columnar β -grain (yellow arrows), centerline axial grains (gray arrows) and fine equiaxed grains at the edges are the obvious characteristics of the microstructure morphology of the cross section. Reprinted with permission from ref. [78], Copyright©2018 Elsevier.

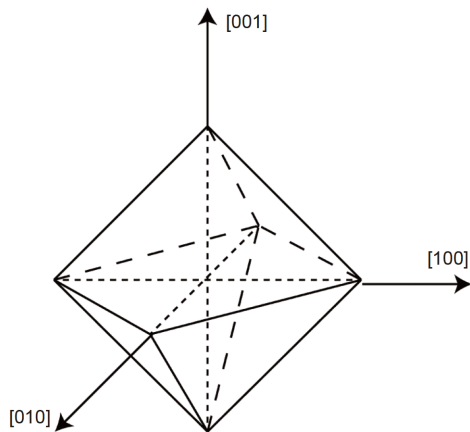


图16 正八面体包络

Figure 16 Regular octahedral envelope.

初步预测了SEBM工艺Ti-6Al-4V合金的凝固初生相, 与实验结果在定性上保持一致, 如图17所示. 同时, 计算结果表明, 由于金属增材制造的特性极易产生负载不平衡, 导致并行效率下降.

针对金属增材制造中常见的晶体外延式生长现

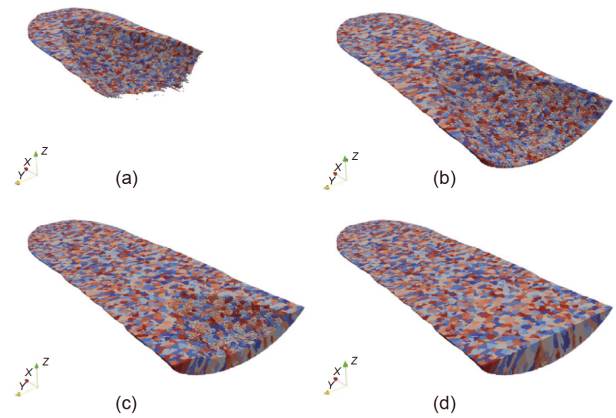


图17 (网络版彩图) SEBM工艺Ti-6Al-4V合金熔池内微观组织演化过程按时间递增的计算结果. (a) 0.3492, (b) 1.1342, (c) 1.4291, (d) 1.8427 ms^[37](图片来自文献, 已取得授权)

Figure 17 (Color online) Evolution of the molten pool microstructure represented by four snapshots at increasing times for Ti-6Al-4V with SEBM. (a) 0.3492, (b) 1.1342, (c) 1.4291, and (d) 1.8427 ms [37]. Reprinted with permission from ref. [37], Copyright©2018 Springer.

象, Lian等人^[49]建立了相应的外延式生长成核模型. 面向激光直接能量沉积工艺, Lian等人^[49]研究了激光功率、扫描速度和扫描策略对IN718合金微观组织演化的影响, 并进行了统计分析. 图18为单道工况下微观组织预测结果及其晶粒信息统计分析. 其中, 图18(a)为所预测的材料微观组织的三维视图, 颜色代表不同的晶粒取向; 图18(b)为中心纵截面上熔池熔覆区的微观组织, 结果表明在熔池底部为以外延式生长为主的柱状晶, 柱状晶上部为域内形核的等轴晶, 这与熔池从上到下的温度梯度和冷却速率分布有关(第4.2节, 图9); 并且, 晶粒倾向于沿激光扫描方向确定的温度梯度方向生长. 对于给定的工艺参数范围, 图18(c)表明激光功率越大则晶粒尺寸越大, 图18(d)表明扫描速度越大则晶粒尺寸越小, 并且晶粒尺寸对激光扫描速度变化更敏感. 进一步, Lian等人^[49]模拟了不同扫描策略下单道多层的工况. 图19中给出了单向扫描策略下前8层加工道的材料微观组织数值计算结果, 再现了实验结果的柱状晶与等轴晶交替出现的“三明治结构”. 其中, 图19(c)极图表明该微观组织有一定的织构, 并且高亮点表示晶粒晶向倾向于由激光扫描方向(从左至右)所决定的温度梯度方向.

近期, Lian等人将CA法与粉末尺度的高保真热流耦合热分析模型相耦合, 研究了SEBM工艺多道多层扫描下Ti-6Al-4V合金凝固初生相微观组织演化过程,

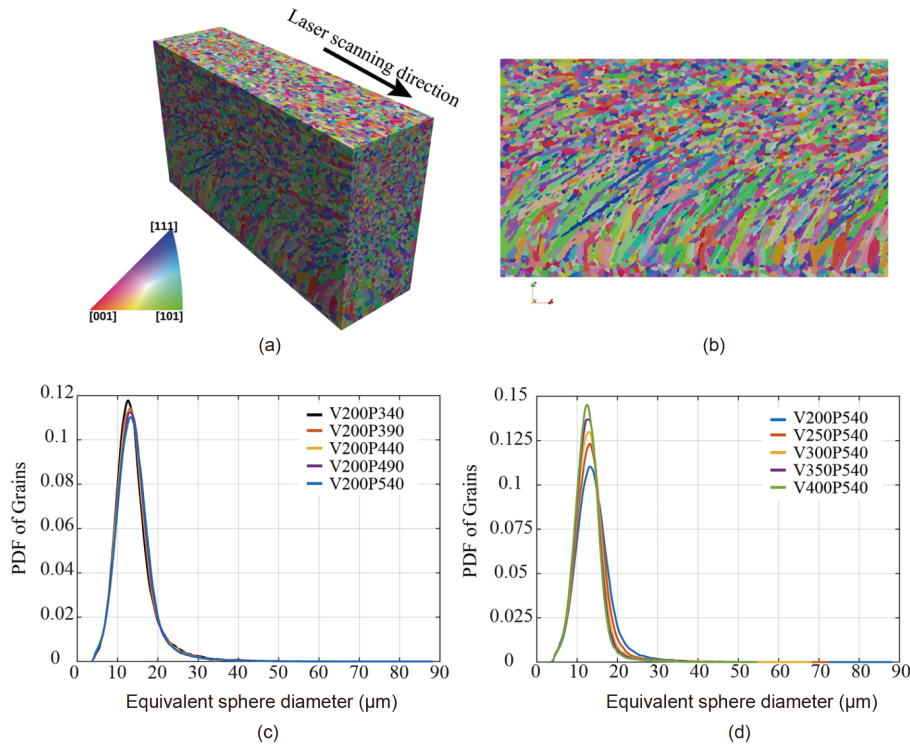


图18 (网络版彩图)直接能量沉积工艺IN718合金单道扫描工况下材料微观组织数值结果. (a) 三维视图; (b) 微观组织XZ截面; 晶粒等效球直径概率密度函数分布; (c) 激光扫描速度为常值(200 mm/min), 功率范围为340–540 W; (d) 激光功率为常值(540 W), 扫描速度变化范围为200–400 mm/min^[49] (图片来自文献, 已取得授权)

Figure 18 (Color online) Simulation results of single scan track for IN718 alloy with directed energy deposition. (a) 3D view of the microstructure; (b) XZ cross-sectional view of the microstructure; probability distribution function of grain size quantified by equivalent sphere diameter; (c) constant laser scan speed (200 mm/min), variable laser power value within the range of 340–540 W; (d) constant laser power (540 W), variable scan speed within the range of 200–400 mm/min^[49]. Reprinted with permission from ref. [49], under the terms of the Creative Commons CC BY License.

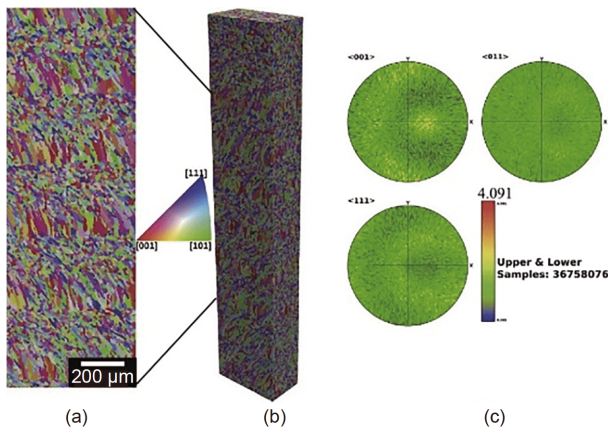


图19 (网络版彩图)单道多层IN718合金的微观组织数值模拟结果^[49]. (a) XZ 截面视图; (b) 三维视图; (c) 极图(图片来自文献, 已取得授权)

Figure 19 (Color online) Simulation results of microstructure for single-track multi-layer IN718 alloy^[49]. (a) XZ cross section view; (b) 3D view; (c) pole figure. Reprinted with permission from ref. [49], under the terms of the Creative Commons CC BY License.

如图20所示, 揭示了搭接区内复杂微观组织的形成过程, 并重现了实验中观察到的部分熔化粉末颗粒对微观组织影响的现象.

此外, Shi等人^[83]采用三维CA法研究了316L不锈钢选区激光熔融过程中材料微观组织的演化过程, 并详细对比分析了域内形核和外延式生长之间的竞争关系, 以及不同类型激光光源对微观组织的影响; Panwisawas等人^[85]采用三维CA法模拟了激光增材制造过程中Ti-6Al-4V合金的微观组织初始相; Dezfoli等人^[81]采用三维CA法研究了激光增材制造过程中辅助激光热源对材料微观组织的影响, 表明通过增加二次激光热源可以调控和改善微观组织. 这些研究工作均表明, 三维CA法有助于揭示金属增材制造过程的微观组织演化机理, 从而可以辅助工艺参数优化以调控材料微观组织.

除了上述的CA法, Zhu等人^[86]进一步考虑了溶质

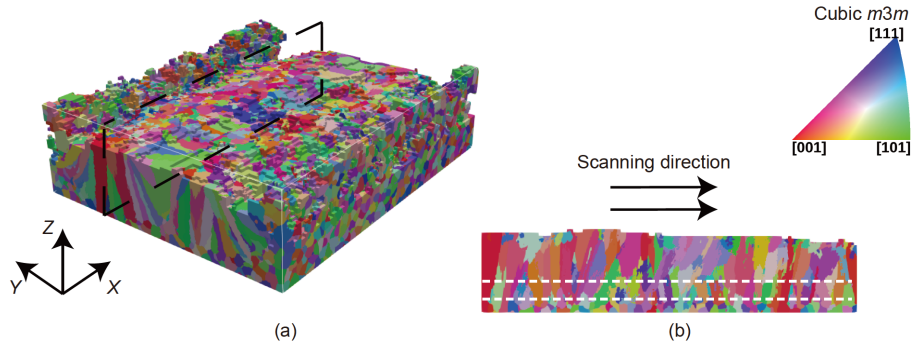


图20 (网络版彩图)高保真粉末尺度SEBM工艺Ti-6Al-4V合金微观组织数值模拟结果. (a) 三维视图, 两侧为部分熔化的粉末颗粒; (b) 纵截面视图, 图中虚线表示第一层和第二层的熔合线

Figure 20 (Color online) High fidelity powder scale simulation result of microstructure for Ti-6Al-4V alloy with SEBM. (a) 3D view, where partially melted powders located in both side are shown; (b) longitudinal cross-section view, where dashed lines are fusion lines for the first and second layers.

再分布和固液界面曲率过冷度, 建立了一种改进的CA法, 可模拟微观尺度的枝晶形貌. 该算法在金属增材制造数值模拟中也有应用^[58], 但由于其功能与PF模型接近, 本文不再对此展开介绍.

5.3 KMC法及其应用

在金属增材制造微观组织模拟中, 另一种常用的介观尺度模拟方法是基于Potts模型的KMC法. 与PF模型和CA法不同, KMC是一种基于晶界自由能最小原理的随机算法. 在该算法中, 整个计算区域被离散为规则的格子(Lattice), 每一个格子分配一个晶粒标识符. 相邻格子的晶粒标识符一致则代表它们属于同一个晶粒, 反之则属于不同晶粒. 不同晶粒之间具有晶界, 系统的总晶界能表示为^[87]

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^L 1 - \delta(q_i, q_j), \quad (19)$$

其中, N 为格子总数, L 为格子总邻居数(对于二维和三维问题分别取值8和26), q_i 为格子 i 的标识符, δ 是克罗内克函数. 基于Potts模型, KMC将随机选择晶界上的2个邻居格子并将它们的晶粒标识符改为一致. 若修改后的系统自由能变化 $\Delta E < 0$, 则接受修改, 否则以一定概率接受修改. 为此, 模型将产生一个(0,1)范围内的随机数, 并与下式的概率值进行比较, 作为晶粒标识是否修改的依据^[88]:

$$p = \begin{cases} M(T), & \Delta E \leq 0, \\ M(T) e^{-\frac{\Delta E}{k_B T_s}}, & \Delta E > 0, \end{cases} \quad (20)$$

其中, k_B 为Boltzmann常数, T_s 为蒙特卡洛数值计算温度, T 是物理意义上的温度, $M(T)$ 表示与温度相关的晶界迁移能力, 称为晶界迁移率(Grain Boundary Mobility), 其表达式如下:

$$M(T) = M_0 \exp\left(\frac{-Q}{RT}\right), \quad (21)$$

其中, Q 是晶界运动的活化能, M_0 是Arrhenius前置因子, R 是气体常数. 因此, KMC法主要是一种概率型算法, 并没有直接引入和实现晶体生长动力学等物理机理, 计算效率高于PF和CA算法. 此外, KMC的时间计算步定义为遍历循环一遍计算区域内所有格子, 并不具有物理时间含义.

KMC法在部件级尺度上的微观组织模拟中有较多的应用. Rodgers等人^[88]首先采用KMC并结合一个假定的移动温度场分布函数, 模拟了不同金属增材制造技术、不同材料体系下的微观组织演化过程, 并与实验结果进行了定性和定量比较. 参考文献^[88]的图10展现了预测的LENS工艺401L不锈钢正交截面上的微观组织形貌, 其与实验结果在定性上吻合较好. 此外, Rodgers等人^[88]也指出如何确定计算参数值是KMC算法应用的一个重大挑战. 进一步, Johnson与Rodgers等人^[61]将KMC和基于连续体假设的热传导模型相结合, 模拟了部件级的LENS工艺制备的304L不锈钢圆筒的微观组织(详见参考文献^[61]的图10). 其中, 数值模拟结果重现了实验中观察到的筒底为等轴晶、等轴晶在约28%筒高处转变为贯穿筒壁的柱状晶以及在筒顶部再次变为细小等轴晶等现象, 但是在晶粒尺寸以及筒内壁处的

微观组织结果与实验结果相比误差较大. 同时, 由于没有考虑晶向信息, KMC无法预测微观组织织构以及与晶向相关的竞争生长等物理现象.

KMC法也被用于金属增材制造中热影响区晶粒粗化演化过程的模拟. 针对已熔合材料后续经历反复热循环进而影响其晶粒形貌的问题, Wei等人^[89]采用KMC研究了激光送粉熔合技术IN718合金单道多层扫描中材料凝固初生相的粗化过程. 其数值模拟结果揭示了反复加热和冷却中晶粒粗化、移动熔池形貌、重熔和再凝固等因素导致材料微观组织随打印层数变化的机理, 并展现了KMC在模拟晶粒粗化过程中晶界相互吞并物理现象方面的优势.

5.4 微观组织预测模型与其他模型的耦合

材料微观组织预测模型不包含温度场的求解, 因此需要与热分析模型相耦合. 耦合方式可分为强耦合与弱耦合. 弱耦合也称为顺序耦合, 即将热分析的结果作为微观组织预测模型的输入; 强耦合也称为双向耦合, 需要联立求解热分析模型与微观组织预测模型以精确处理相变过程中的潜热计算. 由于传热与微观组织演化这两类物理问题的尺度不同, 材料微观组织预测模型所需的网格单元尺寸和时间步长均小于热分析模型, 导致强耦合模型比弱耦合模型计算效率低、计算复杂^[90]. 因此, 弱耦合模型的使用更为广泛. 例如, Lian课题组^[39,49]分别将粉末尺度的热流耦合模型和基于连续假设的热流耦合模型与CA法进行顺序耦合, Rai等人^[91,92]将粉末尺度的热流耦合模型的LBM方法与CA法进行了弱耦合, Johnson等人^[61]将基于连续体假设的热传导有限元模拟与KMC法进行了弱耦合.

在金属增材制造数值模拟中, 将获得的材料微观组织三维数值模拟结果与晶体塑性力学模型相结合可预测材料的力学性能, 从而形成“过程-组织-性能”的集成耦合模拟. 该耦合模拟是揭示“过程-组织-性能”内禀关系和研究控形控性机理的关键所在, 也是难点所在. 因此, 如何集成“过程”、“组织”和“性能”的物理力学模型和数值模拟方法并发展高效的耦合算法, 是目前国际前沿热点研究方向. 在这方面, Yan等人^[39]建立了金属增材制造“过程-组织-性能”的多尺度多物理场顺序耦合数值模拟方法. 针对Ti-6Al-4V合金选区电子束熔融技术, 该方法采用高保真有限体积法模拟金属粉末熔化、凝固的热-流耦合过程, 进一步与CA有限元

法耦合模拟材料的微观组织初始相, 然后采用晶体塑性自洽聚类分析方法^[39]并基于一定的假设预测所得材料微观组织决定的材料疲劳性能, 通过该耦合模型建立了过程参数跟材料力学性能的联系. 进一步, Liu等人^[93]则采用基于连续体假设的热传导模型并结合PF法模拟了Ti-6Al-4V合金的微观组织, 采用基于快速傅立叶变换的弹-黏塑性(Fast Fourier Transform-based Elasto-Viscoplastic, EVP-FFT)模型预测了材料的力学性能. 此外, 基于一定的假设, 张昭等人^[94]通过耦合瞬态热传导有限元模型、KMC法和晶体塑性有限元法研究了激光送粉熔合技术钛合金微观组织演化过程及相应力学性能. 由于不能有效模拟晶向信息以确定晶体塑性学分析中所用的滑移系, KMC预测的材料微观组织不能直接用于预测材料的力学性能. 因此, 在“过程-组织-性能”的集成耦合模拟中, 常用的微观组织模型是PF和CA.

5.5 微观组织数值模拟总结与展望

目前的微观组织算法主要应用于材料凝固初生相和枝晶形貌等方面的预测. 在上述的微观组织模拟模型中, PF模型包含更多的物理机理控制方程, 可以获得枝晶形貌细节, 计算精度高, 但因计算量大而难以用于金属增材制造三维大尺度问题的模拟求解, 目前主要用于二维问题有限枝晶个数的模拟; CA法采用基于形核物理机理的随机算法与晶体生长动力学理论相结合的原理, 在介观尺度上模拟凝固微观组织及其结构, 具有计算量小、计算效率高等优点, 目前主要用于凝固初生相模拟; KMC法是基于晶界界面能最小原理的一种概率模型, 相比于CA法其计算效率更高, 但不显著包含晶向信息、计算参数确定比较复杂、需额外引入模型以建立MC温度和时间步与物理温度和时间的相关等方面的局限性, 目前主要用于凝固初生相和晶粒粗化过程的模拟.

虽然上述材料微观组织预测模型和算法在金属增材制造数值模拟中有着大量的应用, 但是在一些基础理论和算法上还存在着亟待解决的问题.

(1) 与传统铸造工艺凝固过程的温度场特点不同, 金属增材制造技术中材料将经历高温温度梯度和高冷却速率的熔化-凝固过程. 已有的材料微观组织预测模型主要还是基于准平衡态凝固理论和模型, 因此还需进一步考虑高温温度梯度和高冷却速率的非平衡态凝固理论.

(2) 基于金属增材制造热循环过程特性, 前加工道凝固材料将经历非常复杂的微观组织演化过程, 如凝固初生相、反复晶粒粗化、反复固态相变等. 材料的力学性能很大程度上取决于最终的材料微观组织. 因此, 发展能够高效高精度模拟材料微观组织整个演化过程的直接数值模拟方法仍是一个亟待解决的问题. 为此, 如何将PF法、CA法和KMC法三种算法进行耦合以发挥各自算法的优势则是解决该问题的一个重要研究方向.

(3) 在“过程-组织-性能”集成耦合模拟中, 材料微观组织预测模型通过顺序耦合算法与“过程”模拟和“性能”预测模型进行了集成. 如何建立三者间的强耦合算法以提高计算精度并揭示一些重要的制造缺陷形成机理, 如热致微裂纹^[95]等, 仍是一个亟待解决的问题.

(4) 由于金属增材制造过程在时间和空间上跨越多个尺度, 打印零件的各个点经历的温度历程不尽相同, 因此其材料微观组织模拟计算量大、数据规模大. 同理, 已有的“过程-组织-性能”集成耦合模型也受限于计算量大而难以很好地解决金属增材制造控形控性工艺参数优化的问题. 为此, 如何将数据挖掘技术、深度机器学习方法与该数值模拟相结合, 建立“制造过程”、“微观组织”以及“力学性能”关键物理量之间的高效预测模型是一个重要的发展方向.

6 总结

金属增材制造过程是一个多尺度多物理场耦合问题, 数值模拟是探究其形性控制物理机理并辅助优化工艺参数的一类重要手段. 本文详细论述了传热传质和材料微观组织演化两个关乎形性控制的关键问题的数值模拟研究现状. 针对传热传质模拟分析, 已有的数值计算模型可以归纳为三类: 粉末尺度高保真热流耦合模型、基于连续体假设的热流耦合模型和基于连续体假设的热传导模型. 其中, 第一类模型以单个金属粉末颗粒为研究对象, 模拟其受热熔化-凝固过程及复杂的熔池演化过程, 可用于分析制造过程微观缺陷的形成机理; 第二类模型将粉末层视为连续体, 以熔池为主要研究对象, 模拟熔池内的金属液体流动和传热过程, 可用于分析熔池形貌尺寸和考虑对流效应的温度场分布; 第三类模型在第二类模型基础上, 忽略了熔池内的金属液体流动行为, 以整个扫描道或层为研究

对象, 模拟部件级大尺度问题的温度场演化过程, 一般与热应力分析模型相耦合以模拟零件的残余应力和应变分布. 针对材料微观组织模拟分析, 本文归纳了在金属增材制造中使用的三类主要模型和算法: PF模型、CA法和KMC法. 其中, PF模型包含更多的物理机理控制方程, 以枝晶形貌细节为研究对象, 但因计算量大而主要用于二维问题有限枝晶个数的模拟以及晶体生长机理研究; CA法将随机形核与确定性晶体生长动力学理论相结合, 以晶粒轮廓为研究对象, 主要用于三维问题中凝固初生相组织及其织构模拟; KMC法是基于晶界界面能最小原理的一种概率模型, 相比于PF模型和CA法其计算效率最高, 主要用于三维问题中凝固初生相和晶粒粗化过程的模拟. 此外, 本文还论述了热分析模型与材料微观组织预测模型的耦合算法, 其中以顺序耦合(弱耦合)为主. 进一步, 归纳了现有的“过程-组织-性能”的集成耦合分析模型.

针对已有模型存在的缺点和局限性, 本文论述了亟待解决的问题和发展方向. 针对传热传质模拟分析, 目前的计算模型主要是“热-流”耦合和“流-固”耦合为主, 亟待发展“热-流-固”强耦合计算模型以进一步提高数值计算模型的计算精度和应用广度. 为此, 本文提出了两个主要发展方向: 基于各类模型的优势, 采用等效模型逐尺度递进的方式建立“热-流-固”弱耦合模型; 在统一拉格朗日描述框架下, 如基于无网格法, 建立金属增材制造过程粉末尺度的“热-流-固”强耦合模型. 针对材料微观组织模拟分析, 已有模型主要是分别针对凝固初生相、晶粒粗化过程等的模拟, 与热分析模型的耦合主要为顺序耦合方式, 缺乏能够统一考虑凝固初生相、晶粒粗化以及固态相变等复杂演化过程的预测模型, 以及与热分析模型的强耦合算法. 为此, 本文提出两个主要发展方向: 基于三种微观组织计算模型, 建立其耦合算法以实现微观组织复杂演化过程的精确模拟; 建立“过程-组织”模拟的强耦合算法以实现对于传热传质过程中潜热的精确计算. 此外, 针对金属增材制造数值模拟中存在的计算模块多、计算量庞大的问题, 如何将数据挖掘技术、深度机器学习算法与大量数值模拟结果相结合以建立金属增材制造“过程-组织-性能”内禀关系的高效预测模型也是一个值得关注的研究方向.

金属增材制造过程的建模和计算模拟方法仍在不断发展当中, 还未形成整体解决方案的通用商用软件计算模块. 目前, 已有商用软件(如Abaqus, Ansys等)中

已经实现了基于传热传质第三类模型的金属增材制造热分析模块. 因此, 可以预见在不远的将来, 更多的计算模型将被引入到通用商业软件中, 成为分析金属增材制造控形控性工艺和优化工艺参数的有效工具.

参考文献

- 1 Wang H M. Materials' fundamental issues of laser additive manufacturing for high-performance large metallic components (in Chinese). *Acta Aeron Astron Sin*, 2014, 35: 2690–2698 [王华明. 高性能大型金属构件激光增材制造: 若干材料基础问题. *航空学报*, 2014, 35: 2690–2698]
- 2 DebRoy T, Wei H L, Zuback J S, et al. Additive manufacturing of metallic components—Process, structure and properties. *Prog Mater Sci*, 2018, 92: 112–224
- 3 Lin X, Huang W D. High performance metal additive manufacturing technology applied in aviation field (in Chinese). *Mater China*, 2015, 34: 684–688 [林鑫, 黄卫东. 应用于航空领域金属高性能增材制造技术. *中国材料进展*, 2015, 34: 684–688]
- 4 Wei L, Lin X, Wang M, et al. Numerical simulation on laser additive manufacturing process for metal components (in Chinese). *Aeronaut Manuf Technol*, 2017, 13: 15–25 [魏雷, 林鑫, 王猛, 等. 金属激光增材制造过程数值模拟. *航空制造技术*, 2017, 13: 15–25]
- 5 Francois M M, Sun A, King W E, et al. Modeling of additive manufacturing processes for metals: Challenges and opportunities. *Curr Opin Solid State Mater Sci*, 2017, 21: 198–206
- 6 Yang W, Wang H T, Li T F, et al. X-Mechanics—An endless frontier. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2019, 62: 014601
- 7 Gu D D, Dai D H, Xia M J, et al. Cross-scale physical mechanisms for structure and performance control of metal components processed by selective laser melting additive manufacturing (in Chinese). *J Nanjing Univ Aeron Astron*, 2017, 49: 645–652 [顾冬冬, 戴东华, 夏木建, 等. 金属构件选区激光熔化增材制造控形与控性的跨尺度物理学机制. *南京航空航天大学学报*, 2017, 49: 645–652]
- 8 Kappes B, Moorthy S, Drake D, et al. Machine learning to optimize additive manufacturing parameters for laser powder bed fusion of inconel 718. In: *Proceedings of the 9th International Symposium on Superalloy 718 & Derivatives: Energy, Aerospace, and Industrial Applications*. Heidelberg: Springer International Publishing, 2018. 595–610
- 9 Smith J, Xiong W, Yan W, et al. Linking process, structure, property, and performance for metal-based additive manufacturing: Computational approaches with experimental support. *Comput Mech*, 2016, 57: 583–610
- 10 Cadiou S, Courtois M, Carin M, et al. Heat transfer, fluid flow and electromagnetic model of droplets generation and melt pool behaviour for wire arc additive manufacturing. *Int J Heat Mass Transfer*, 2020, 148: 119102
- 11 Bai X, Colegrove P, Ding J, et al. Numerical analysis of heat transfer and fluid flow in multilayer deposition of PAW-based wire and arc additive manufacturing. *Int J Heat Mass Transfer*, 2018, 124: 504–516
- 12 Ding J, Colegrove P, Mehnert J, et al. A computationally efficient finite element model of wire and arc additive manufacture. *Int J Adv Manuf Technol*, 2014, 70: 227–236
- 13 Li R, Xiong J, Lei Y. Investigation on thermal stress evolution induced by wire and arc additive manufacturing for circular thin-walled parts. *J Manuf Proc*, 2019, 40: 59–67
- 14 Huang H, Ma N, Chen J, et al. Toward large-scale simulation of residual stress and distortion in wire and arc additive manufacturing. *Addit Manuf*, 2020, 34: 101248
- 15 Lee Y S, Zhang W. Mesoscopic simulation of heat transfer and fluid flow in laser powder bed additive manufacturing. In: *26th Solid Freeform Fabrication Symposium*. Austin, 2015. 1154–1165
- 16 Qi H, Mazumder J, Ki H. Numerical simulation of heat transfer and fluid flow in coaxial laser cladding process for direct metal deposition. *J Appl Phys*, 2006, 100: 024903
- 17 Gouge M, Michaleris P. *Thermo-Mechanical Modeling of Additive Manufacturing*. Oxford: Elsevier Inc., 2017
- 18 Dong L, Correia J P M, Barth N, et al. Finite element simulations of temperature distribution and of densification of a titanium powder during metal laser sintering. *Addit Manuf*, 2017, 13: 37–48
- 19 Dai D, Gu D. Thermal behavior and densification mechanism during selective laser melting of copper matrix composites: Simulation and experiments. *Mater Des*, 2014, 55: 482–491
- 20 Hussein A, Hao L, Yan C, et al. Finite element simulation of the temperature and stress fields in single layers built without-support in selective laser melting. *Mater Des*, 2013, 52: 638–647
- 21 Hurly J J. Thermophysical properties of gaseous CF_4 and C_2F_6 from speed-of-sound measurements. *Int J Thermophys*, 1999, 20: 455–484

- 22 Lewis R W, Nithiarasu P, Seetharamu K N. *Fundamentals of the Finite Element Method for Heat and Fluid Flow*. Chichester: John Wiley & Sons Ltd, 2004
- 23 Isac M, Guthrie R I L. *Solidification. Treatise Process Metall.* Amsterdam: Elsevier, 2014. 497–514
- 24 Trivedi R, Kurz W. Theory of microstructural development during rapid solidification. *Sci Technol Undercooled Melt*, 1986, 3: 260–267
- 25 Al-Bermani S S, Blackmore M L, Zhang W, et al. The origin of microstructural diversity, texture, and mechanical properties in electron beam melted Ti-6Al-4V. *Metall Mat Trans A*, 2010, 41: 3422–3434
- 26 Basak A, Das S. Epitaxy and microstructure evolution in metal additive manufacturing. *Annu Rev Mater Res*, 2016, 46: 125–149
- 27 Gan Z, Yu G, He X, et al. Numerical simulation of thermal behavior and multicomponent mass transfer in direct laser deposition of Co-base alloy on steel. *Int J Heat Mass Transfer*, 2017, 104: 28–38
- 28 Manvatkar V, De A, DebRoy T. Spatial variation of melt pool geometry, peak temperature and solidification parameters during laser assisted additive manufacturing process. *Mater Sci Tech*, 2015, 31: 924–930
- 29 Li Y, Gu D. Parametric analysis of thermal behavior during selective laser melting additive manufacturing of aluminum alloy powder. *Mater Des*, 2014, 63: 856–867
- 30 Goldak J, Chakravarti A, Bibby M. A new finite element model for welding heat sources. *MTB*, 1984, 15: 299–305
- 31 Gusarov A V, Yadroitsev I, Bertrand P, et al. Model of radiation and heat transfer in laser-powder interaction zone at selective laser melting. *J Heat Transfer*, 2009, 131: 1
- 32 Liu S, Zhu H, Peng G, et al. Microstructure prediction of selective laser melting AlSi10Mg using finite element analysis. *Mater Des*, 2018, 142: 319–328
- 33 Dunbar A J, Denlinger E R, Gouge M F, et al. Experimental validation of finite element modeling for laser powder bed fusion deformation. *Addit Manuf*, 2016, 12: 108–120
- 34 Zhang Z, Huang Y, Rani Kasinathan A, et al. 3-Dimensional heat transfer modeling for laser powder-bed fusion additive manufacturing with volumetric heat sources based on varied thermal conductivity and absorptivity. *Opt Laser Tech*, 2019, 109: 297–312
- 35 Tran H C, Lo Y L. Heat transfer simulations of selective laser melting process based on volumetric heat source with powder size consideration. *J Mater Proc Tech*, 2018, 255: 411–425
- 36 Wessels H, Bode T, Weißenfels C, et al. Investigation of heat source modeling for selective laser melting. *Comput Mech*, 2019, 63: 949–970
- 37 Lian Y, Lin S, Yan W, et al. A parallelized three-dimensional cellular automaton model for grain growth during additive manufacturing. *Comput Mech*, 2018, 61: 543–558
- 38 Yan W, Qian Y, Ge W, et al. Meso-scale modeling of multiple-layer fabrication process in selective electron beam melting: Inter-layer/track voids formation. *Mater Des*, 2018, 141: 210–219
- 39 Yan W, Lian Y, Yu C, et al. An integrated process-structure-property modeling framework for additive manufacturing. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2018, 339: 184–204
- 40 Lee Y S, Zhang W. Modeling of heat transfer, fluid flow and solidification microstructure of nickel-base superalloy fabricated by laser powder bed fusion. *Addit Manuf*, 2016, 12: 178–188
- 41 Wang Z, Yan W, Liu W K, et al. Powder-scale multi-physics modeling of multi-layer multi-track selective laser melting with sharp interface capturing method. *Comput Mech*, 2019, 63: 649–661
- 42 Matthews M J, Guss G, Khairallah S A, et al. Denudation of metal powder layers in laser powder bed fusion processes. *Acta Mater*, 2016, 114: 33–42
- 43 Khairallah S A, Anderson A T, Rubenchik A, et al. Laser powder-bed fusion additive manufacturing: Physics of complex melt flow and formation mechanisms of pores, spatter, and denudation zones. *Acta Mater*, 2016, 108: 36–45
- 44 Khairallah S A, Martin A A, Lee J R I, et al. Controlling interdependent meso-nanosecond dynamics and defect generation in metal 3D printing. *Science*, 2020, 368: 660–665
- 45 Thürey N, Pohl T, Rude U, et al. Optimization and stabilization of LBM free surface flow simulations using adaptive parameterization. *Comput Fluids*, 2006, 35: 934–939
- 46 Körner C, Attar E, Heinel P. Mesoscopic simulation of selective beam melting processes. *J Mater Proc Tech*, 2011, 211: 978–987
- 47 Ammer R, Markl M, Ljungblad U, et al. Simulating fast electron beam melting with a parallel thermal free surface lattice Boltzmann method. *Comput Math Appl*, 2014, 67: 318–330

- 48 Zheng M, Wei L, Chen J, et al. A novel method for the molten pool and porosity formation modelling in selective laser melting. *Int J Heat Mass Transfer*, 2019, 140: 1091–1105
- 49 Lian Y, Gan Z, Yu C, et al. A cellular automaton finite volume method for microstructure evolution during additive manufacturing. *Mater Des*, 2019, 169: 107672
- 50 Gan Z, Lian Y, Lin S E, et al. Benchmark study of thermal behavior, surface topography, and dendritic microstructure in selective laser melting of Inconel 625. *Integr Mater Manuf Innov*, 2019, 8: 178–193
- 51 Dai D, Gu D. Tailoring surface quality through mass and momentum transfer modeling using a volume of fluid method in selective laser melting of TiC/AlSi10Mg powder. *Int J Machine Tools Manuf*, 2015, 88: 95–107
- 52 Antony K, Arivazhagan N, Senthilkumaran K. Numerical and experimental investigations on laser melting of stainless steel 316L metal powders. *J Manuf Proc*, 2014, 16: 345–355
- 53 Patil R B, Yadava V. Finite element analysis of temperature distribution in single metallic powder layer during metal laser sintering. *Int J Mach Tools Manuf*, 2007, 47: 1069–1080
- 54 Yagi S, Kunii D. Studies on effective thermal conductivities in packed beds. *AIChE J*, 1957, 3: 373–381
- 55 Sih S S, Barlow J W. The prediction of the emissivity and thermal conductivity of powder beds. *Particul Sci Tech*, 2004, 22: 427–440
- 56 Gusarov A V, Laoui T, Froyen L, et al. Contact thermal conductivity of a powder bed in selective laser sintering. *Int J Heat Mass Transfer*, 2003, 46: 1103–1109
- 57 Shen X F. Numerical Simulation and Sintering Zone Prediction of Direct Laser Sintering of Multi-Component Metal Powders (in Chinese). Dissertation for Doctoral Degree. Chengdu: Sichuan University, 2005. 54–60 [沈显峰. 多组元金属粉末直接激光烧结过程数值模拟及烧结区域预测. 博士学位论文. 成都: 四川大学, 2005. 54–60]
- 58 Wei L, Lin X, Wang M, et al. Cellular automation simulation of the molten pool of laser solid forming process (in Chinese). *Acta Phys Sin*, 2015, 64: 1–8 [魏雷, 林鑫, 王猛, 等. 激光立体成形中熔池凝固微观组织的元胞自动机模拟. 物理学报, 2015, 64: 1–8]
- 59 Gu D, He B. Finite element simulation and experimental investigation of residual stresses in selective laser melted Ti-Ni shape memory alloy. *Comput Mater Sci*, 2016, 117: 221–232
- 60 Denlinger E R, Gouge M, Irwin J, et al. Thermomechanical model development and *in situ* experimental validation of the Laser Powder-Bed Fusion process. *Addit Manuf*, 2017, 16: 73–80
- 61 Johnson K L, Rodgers T M, Underwood O D, et al. Simulation and experimental comparison of the thermo-mechanical history and 3D microstructure evolution of 304L stainless steel tubes manufactured using LENS. *Comput Mech*, 2018, 61: 559–574
- 62 Jiang Y Q, Lin X, Ma L, et al. Effects of scanning patterns on the thermal/stress field during laser solid forming T-shape chord of Ti-6Al-4V alloy (in Chinese). *Chin J Lasers*, 2014, 41: 1–9 [姜亚琼, 林鑫, 马良等. 沉积路径对激光立体成形钛合金T型缘条热/应力场的影响. 中国激光, 2014, 41: 1–9]
- 63 Weirather J, Rozov V, Wille M, et al. A smoothed particle hydrodynamics model for laser beam melting of Ni-based alloy 718. *Comput Math Appl*, 2019, 78: 2377–2394
- 64 Fürstenau J P, Wessels H, Weibfens C, et al. Generating virtual process maps of SLM using powder-scale SPH simulations. *Comp Part Mech*, 2020, 7: 655–677
- 65 Zohdi T I. Laser-induced heating of dynamic particulate depositions in additive manufacturing. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2018, 331: 232–258
- 66 Russell M A, Souto-Iglesias A, Zohdi T I. Numerical simulation of laser fusion additive manufacturing processes using the SPH method. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2018, 341: 163–187
- 67 Liu S, Liu J, Chen J, et al. Influence of surface tension on the molten pool morphology in laser melting. *Int J Thermal Sci*, 2019, 146: 106075
- 68 Chen S T, Duan Q L, Wang Y N, et al. Efficient meshfree method for heat conduction in selective laser sintering process (in Chinese). *J Mech Eng*, 2019, 55: 135–146 [陈嵩涛, 段庆林, 王依宁, 等. 选区激光烧结过程传热分析的高效无网格法. 机械工程学报, 2019, 55: 135–146]
- 69 Meng Z J, Cheng H, Ma L D, et al. The dimension splitting element-free Galerkin method for 3D transient heat conduction problems. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2019, 62: 040711
- 70 Liu M, Zhang Z. Smoothed particle hydrodynamics (SPH) for modeling fluid-structure interactions. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2019, 62: 984701
- 71 Cartalade A, Younsi A, Régnier É, et al. Simulations of phase-field models for crystal growth and phase separation. *Proc Mater Sci*, 2014, 7: 72–

- 72 Steinbach I. Why solidification? Why phase-field?. *JOM*, 2013, 65: 1096–1102
- 73 Chen L Q. Phase-field models for microstructure evolution. *Annu Rev Mater Res*, 2002, 32: 113–140
- 74 Fallah V, Amooezaei M, Provatas N, et al. Phase-field simulation of solidification morphology in laser powder deposition of Ti-Nb alloys. *Acta Mater*, 2012, 60: 1633–1646
- 75 Gong X, Chou K. Phase-field modeling of microstructure evolution in electron beam additive manufacturing. *JOM*, 2015, 67: 1176–1182
- 76 Sahoo S, Chou K. Phase-field simulation of microstructure evolution of Ti-6Al-4V in electron beam additive manufacturing process. *Addit Manuf*, 2016, 9: 14–24
- 77 Acharya R, Sharon J A, Staroselsky A. Prediction of microstructure in laser powder bed fusion process. *Acta Mater*, 2017, 124: 360–371
- 78 Liu P W, Ji Y Z, Wang Z, et al. Investigation on evolution mechanisms of site-specific grain structures during metal additive manufacturing. *J Mater Proc Tech*, 2018, 257: 191–202
- 79 Rappaz M, Gandin C A. Probabilistic modelling of microstructure formation in solidification processes. *Acta Metall Mater*, 1993, 41: 345–360
- 80 Gandin C A, Rappaz M. A 3D cellular automaton algorithm for the prediction of dendritic grain growth. *Acta Mater*, 1997, 45: 2187–2195
- 81 Dezfoli A R A, Hwang W S, Huang W C, et al. Determination and controlling of grain structure of metals after laser incidence: Theoretical approach. *Sci Rep*, 2017, 7: 41572
- 82 Chen S, Guillemot G, Gandin C A. Three-dimensional cellular automaton-finite element modeling of solidification grain structures for arc-welding processes. *Acta Mater*, 2016, 115: 448–467
- 83 Shi R, Khairallah S A, Roehling T T, et al. Microstructural control in metal laser powder bed fusion additive manufacturing using laser beam shaping strategy. *Acta Mater*, 2020, 184: 284–305
- 84 Kurz W, Fisher D J. Dendrite growth at the limit of stability: Tip radius and spacing. *Acta Metall*, 1981, 29: 11–20
- 85 Panwisawas C, Qiu C, Anderson M J, et al. Mesoscale modelling of selective laser melting: Thermal fluid dynamics and microstructural evolution. *Comput Mater Sci*, 2017, 126: 479–490
- 86 Zhu M F, Hong C P. A modified cellular automaton model for the simulation of dendritic growth in solidification of alloys. *ISIJ Int*, 2001, 41: 436–445
- 87 Rodgers T M, Madison J D, Tikare V, et al. Predicting mesoscale microstructural evolution in electron beam welding. *JOM*, 2016, 68: 1419–1426
- 88 Rodgers T M, Madison J D, Tikare V. Simulation of metal additive manufacturing microstructures using kinetic Monte Carlo. *Comput Mater Sci*, 2017, 135: 78–89
- 89 Wei H L, Knapp G L, Mukherjee T, et al. Three-dimensional grain growth during multi-layer printing of a nickel-based alloy Inconel 718. *Addit Manuf*, 2019, 25: 448–459
- 90 Gandin C A, Desbiolles J L, Rappaz M, et al. A three-dimensional cellular automation-finite element model for the prediction of solidification grain structures. *Metall Mat Trans A*, 1999, 30: 3153–3165
- 91 Rai A, Markl M, Körner C. A coupled cellular Automaton-Lattice Boltzmann model for grain structure simulation during additive manufacturing. *Comput Mater Sci*, 2016, 124: 37–48
- 92 Rai A, Helmer H, Körner C. Simulation of grain structure evolution during powder bed based additive manufacturing. *Addit Manuf*, 2017, 13: 124–134
- 93 Liu P W, Wang Z, Xiao Y H, et al. Integration of phase-field model and crystal plasticity for the prediction of process-structure-property relation of additively manufactured metallic materials. *Int J Plast*, 2020, 128: 102670
- 94 Zhang Z, Ge P, Tan Z J, et al. Numerical simulation of microstructural evolutions and prediction of mechanical properties in laser additive manufacturing (in Chinese). *Ordinance Mater Sci Eng*, 2018, 41: 1–7 [张昭, 葛芑, 谭治军, 等. 激光增材制造微观结构模拟与力学性能预测. 兵器材料科学与工程, 2018, 41: 1–7]
- 95 Martin J H, Yahata B D, Hundley J M, et al. 3D printing of high-strength aluminium alloys. *Nature*, 2017, 549: 365–369

Numerical simulation on metallic additive manufacturing

CHEN JiaWei¹, XIONG FeiYu¹, HUANG ChenYang¹ & LIAN YanPing^{1,2*}

¹ *Institute of Advanced Structure Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China;*

² *State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China*

The metallic additive manufacturing process is a multi-scale and multi-physics coupling problem, including complex physics phenomena, i.e., mass and heat transfer, phase transformation, and material microstructure evolution. Therefore, in this work, we thoroughly reviewed the numerical simulation studies on metallic additive manufacturing in two folds, the mass and heat transfer, and material microstructure evolution. In light of the physics phenomena and the length scale of the problems concerned, we summarized the commonly used heat source models, mass and heat transfer numerical models (including powder scale high fidelity thermo-fluid flow coupling model, continuum-based thermo-fluid coupling model, and continuum-based heat conduction model), and the microstructure prediction models (including phase-field model, cellular automaton method, kinetic Monte Carlo method) followed by the discussions on their advantages and applicability. Furthermore, the “process-structure-property” integrated numerical models are reviewed. The numerical simulation challenges for the metallic additive manufacturing are finally presented in addition to the prospect.

metallic additive manufacturing, multi-scale multi-physics, heat and mass transfer, microstructure, numerical simulation

PACS: 02.70.Dh, 47.11.Df, 64.70.D-, 81.30.-t, 44.05.+e

doi: [10.1360/SSPMA-2020-0182](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2020-0182)