

DOI: 10.7511/jslx20231123003

基于离散元与相场法的激光选区熔化数值模拟

常珂, 梁晨光, 易敏*

(南京航空航天大学 航空学院 & 航空航天结构力学及控制全国重点实验室, 南京 210016)

摘要:在激光选区熔化制造过程中,多物理场耦合特征明显,涉及传热、相变、熔池流动以及晶粒生长等复杂的物理现象,给质量调控带来了极大挑战。本文基于离散元法与相场法,提出了集成粉床-熔池-微结构演化的计算框架,实现激光选区熔化的高保真数值模拟。首先,采用离散元模拟了辊筒铺粉过程,讨论了铺粉工艺参数对粉床质量的影响;其次,提出了热-流-微结构耦合的非等温相场模型,验证了相场模拟计算研究熔池气液两相流动行为的可行性,并研究了反冲压力和马兰戈尼效应对熔池行为的影响;最后,实现了铺粉-单层扫描的全过程仿真,再现了激光选区熔化过程中熔池的流动、凝固以及晶粒演化等现象。

关键词:激光选区熔化;铺粉;相场法;熔池;微结构演化

中图分类号: V256; O302

文献标志码: A

文章编号: 1007-4708(2024)05-0830-07

1 引言

激光选区熔化技术因成型精度高、加工速度快、设计周期短和材料外形局限小等优点而广泛应用于航空航天、能源动力、医疗和交通等领域^[1-3]。在激光选区熔化过程中,高能激光束与粉末和熔池的相互作用对微结构产生重要的影响^[4]。因此,为了调控微结构来改善激光选区熔化零件的力学性能^[5],必须探究激光-熔池-微结构的相互作用机理。

由于传统的试错法效率低且成本高,数值模拟是研究激光选区熔化过程中激光-熔池-微结构耦合机理的有效方法。近年来,经过学者的努力,激光选区熔化的多场耦合模型取得了一系列成果^[6-8]。其中,应用最为广泛的是热-流耦合模型。该模型将热传导方程和熔池动力学方程结合,用于研究熔池的流动和传热分析。在模拟尺度上,热-流耦合模型从等效连续体逐渐扩展到粉末尺度^[9,10],通常采用离散元法模拟刮刀、辊筒的铺粉过程,可以实现更符合实际情况的粉床铺设,直接计算激光对粉末颗粒的加热及熔化效果。而且粉末之间的空隙及其在熔池内的演化行为也可以考虑在内,进而得到凝固区域的孔隙率。进一步,将

热流耦合模型得到的温度分布作为微观组织结构模拟的输入,可以预测凝固后的晶粒形貌。基于这种算法,Yang等^[11]以温度结果为输入,用相场法模拟了增材制造中晶粒的形核、生长和粗化过程,Xiong等^[12]将元胞自动机与粉末尺度的热流耦合模型相结合,研究增材制造熔池对晶粒生长的影响。

上述顺序耦合算法虽然提高了计算效率,但在微结构模拟中并没有考虑气孔/气泡等缺陷对晶粒生长的影响,无法研究缺陷行为对微结构演化的作用机理。相场法作为模拟微结构演化的主要手段,同时可以很好地与多物理场方程耦合,展现出了巨大的潜力。如Yang等^[13]建立了热-熔-微结构耦合的非等温相场模型,用有限元法实现了固-液-气多相流的全耦合求解,但未考虑马兰戈尼效应和反冲压力等表面效应,无法充分体现熔池的流动及匙孔等缺陷的形成过程。

为了揭示激光、粉床、熔池以及微结构演化之间的内在联系,本文将离散元和相场法相结合,在相场模型中考虑了马兰戈尼效应和反冲压力等表面对熔池形貌的影响,实现了从铺粉到激光扫描的单层激光选区熔化全过程仿真。针对316 L不锈钢粉末,研究了铺粉参数对粉床质量的影响,并

收稿日期:2023-11-23;修改稿收到日期:2023-12-15。

基金项目:国家重点研发计划青年科学家项目(2022YFB4600700);国家科技重大专项(J2019-IV-0014-0082);国家青年人才项目资助。

作者简介:易敏*(1987-),男,博士,教授(E-mail:yimin@nuaa.edu.cn)。

引用本文:常珂,梁晨光,易敏.基于离散元与相场法的激光选区熔化数值模拟[J].计算力学学报,2024,41(5):830-836.

CHANG Ke, LIANG Chen-guang, YI Min. Numerical simulation of selective laser melting by combining discrete element method and phase-field method[J]. Chinese Journal of Computational Mechanics, 2024, 41(5): 830-836.

深入探究了激光选区熔化过程中温度场、熔池和晶粒的行为和演化规律。

2 铺粉过程离散元建模与模拟

2.1 离散元模型

在离散元模型中,第 i 个颗粒的平动和转动方程由牛顿第二定律给出,即

$$m_i \frac{d\mathbf{u}_i}{dt} = \sum_j \mathbf{F}_{ij} + m_i \mathbf{g} \quad (1)$$

$$I_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \sum_j \mathbf{T}_{ij} \quad (2)$$

式中 m_i , \mathbf{u}_i , I_i 和 $\boldsymbol{\omega}_i$ 分别为第 i 个颗粒的质量、速度、转动惯量和角速度, \mathbf{g} 为重力加速度, \mathbf{F}_{ij} 和 \mathbf{T}_{ij} 为颗粒 j 作用在颗粒 i 上的合外力和力矩。 \mathbf{F}_{ij} 一般由两部分力组成,包括接触力和阻尼力。

考虑到黏附力对粒径小于 $100 \mu\text{m}$ 的颗粒运动有很大的影响,本文采用基于 Hertz-Mindlin 理论的 JKR (Johnson-Kendall-Roberts) 接触模型^[14],法向接触力可以表示为接触半径的函数,即

$$F_{cn} = \frac{4E^*a^3}{3R^*} - \sqrt{16\pi\gamma E^*a^3} \quad (3)$$

式中 E^* 为当量杨氏模量, R^* 为当量半径, a 为接触半径, γ 为颗粒的表面能。接触半径 a 与法向重叠量 δ_n 之间的关系为

$$\delta_n = \frac{a^2}{R^*} - \sqrt{\frac{2\pi\gamma a}{E^*}} \quad (4)$$

考虑到系统中由于粘性阻尼引起的能量耗散,法向阻尼力可表示为

$$F_{dn} = -\sqrt{\frac{20}{3}} \frac{\ln e_n}{\sqrt{\pi^2 + \ln^2 e_n}} \sqrt{m^* E^* a} \dot{\delta}_n \quad (5)$$

式中 e_n 为法向恢复系数。同样的,可得到切向阻尼力为

$$F_{ds} = -\sqrt{\frac{80}{3}} \frac{\ln e_s}{\sqrt{\pi^2 + \ln^2 e_s}} \sqrt{m^* G^* a} \dot{\delta}_s \quad (6)$$

式中 e_s 为切向恢复系数, G^* 为当量剪切模量, $\dot{\delta}_s$ 为切向速度。

切向接触力与切向重叠量有关,可表示为

$$F_{ct} = -8G^* a \delta_t \quad (7)$$

颗粒一旦发生滑动,切向接触力将遵循 Mohr-Coulomb 准则,即

$$F_{ct} = \begin{cases} F_{ct} & (|F_{ct}| < \mu_t (F_{cn} + 2F_{po})) \\ -\mu_t (F_{cn} + 2F_{po}) & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (8)$$

式中 μ_t 为滑动摩擦系数, F_{po} 为颗粒非实际接触的最大黏附力,即

$$F_{po} = 3\pi\gamma R^* \quad (9)$$

颗粒的滚动可以通过扭矩来计算,即

$$M_r = -\mu_r F_{cn} R_i \quad (10)$$

式中 μ_r 为滚动摩擦系数, R_i 为颗粒 i 的半径。

2.2 模型验证

铺粉过程在离散元开源框架 Yade 中进行计算模拟,JKR 接触模型由自主编写的 C++ 程序实现,需先验证程序的正确性。JKR 模型的主要难点在于对式(4)接触半径的求解,式(4)可以改写成一元四次方程

$$c_4 a^4 + c_3 a^3 + c_2 a^2 + c_1 a + c_0 = 0 \quad (11)$$

式中 $c_0 = R^{*2} \delta_n^2$, $c_1 = -4\pi\gamma R^{*2}/E^*$, $c_2 = -2R^* \delta_n$, $c_3 = 0$, $c_4 = 4$ 。式(11)的判别式总是负数,所以该公式有两个实根和两个虚数根。 a 有实际物理意义,因此方程正确的解应该大于 $\sqrt{R^* \delta_n}$ 。

需要注意的是当两邻近颗粒非接触时,黏附力仍有作用。为了减小计算量,当颗粒之间的间隙大于临界间隙时,则不考虑黏附力,临界间隙定义为

$$\delta_{io} = \frac{1}{2} \frac{1}{6^{1/3}} \frac{a_0^2}{R^{*2}} \quad (12)$$

式中 a_0 为 $F_{cn} = 0$ 时的接触半径,即没有外力作用时的平衡状态。

如图 1 所示,根据 C++ 程序求出式(11)的接触半径 a ,并绘出归一化的法向接触力 F_{cn}/F_{po} 、相对接触半径 a/a_0 与相对法向重叠量 δ_n/δ_{io} 的关系曲线。在两个颗粒靠近过程中,在点①处物理上并无接触,但是有接触力作用,主要是黏附力;在点②处,法向接触力为 $-F_{po}$;在点③处,颗粒才产生物理上的接触,法向重叠量由负转正。吸引力会推动颗粒扩大接触(不考虑施加外力),直至到达平衡点④。需要注意的是,在点③与点④之间,虽然法向重叠量是正的,但是法向接触力仍是吸引力。在点①左侧,颗粒间不存在相互作用。与文献结果一致,证明了编写的 C++ 程序求解 JKR 模型的正确性。

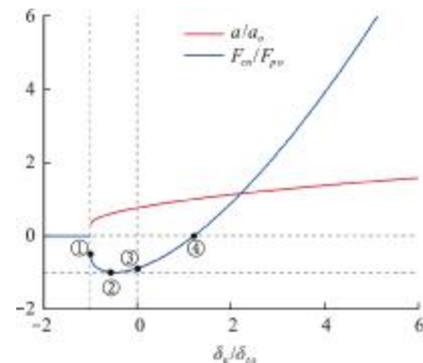


图 1 JKR 接触模型的力-位移关系

Fig. 1 Force-displacement relationship of JKR contact model

2.3 粉床质量的表征与铺粉结果讨论

采用上述建立并验证的离散元模型对粉床的铺设过程进行数值计算,如图2所示。初始阶段产生足够多颗粒以形成粉末堆,粉末颗粒粒径分布满足高斯分布,平均直径 $d_m = 30 \mu\text{m}$;之后,辊筒从左向右移动并逆时针旋转形成一个长 $L = 2000 \mu\text{m}$ 、预期厚度 $D_d = 120 \mu\text{m}$ 的粉床;最终,通过粉层表面粗糙度(Ra)和平均配位数(CN)两个指标来表征粉床质量。配位数越大,表面粗糙度越小,则铺粉质量越好。本文模拟的粉末材料是316 L不锈钢,相关参数列入表1。

表1 离散元模拟材料参数

Tab.1 Material parameters in DEM simulation

参数	数值	参数	数值
密度 $\rho/\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	7900	法向恢复系数 e_n	0.4
杨氏模量 E/Pa	2.11×10^8	切向恢复系数 e_s	0.3
泊松比 ν	0.27	滑动摩擦系数 μ_i	0.46
表面能 $\gamma/\text{mJ} \cdot \text{m}^{-2}$	1	滚动摩擦系数 μ_r	0.01

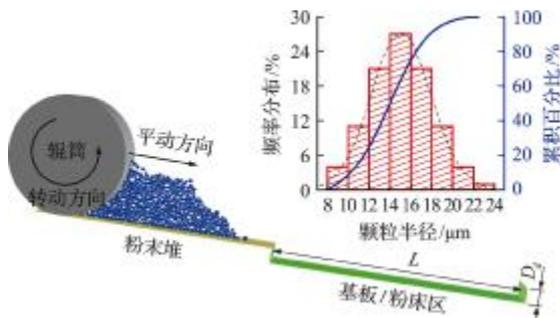


图2 辊筒铺粉过程及粉末粒径分布

Fig.2 Schematic diagram of roller-powder spreading process and particle size distribution of powders

如图3所示,预期厚度为 $D_d = 120 \mu\text{m}$,只改变辊筒平动速度。当平动速度超过 0.1 m/s 后,随着速度的增加,粉床的配位数和表面质量快速下降,因此过快的铺粉速度对粉床质量是不利的。在辊筒平动速度 $0.01 \text{ m/s} \sim 0.1 \text{ m/s}$ 范围内,铺粉速度对粉层表面粗糙度的影响很小,但配位数的变化比

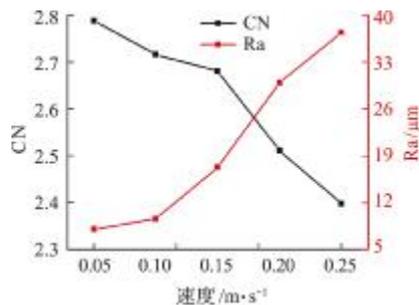


图3 辊筒平动速度对粉床质量的影响

Fig.3 Effects of the roller translational velocity on the powder bed

较明显。这是由于在较慢的铺粉速度下,颗粒受到辊筒力的作用时间更久,需要接触更多的颗粒来获得法向支持力,从而抵消较大的外力以维持平衡。

铺层厚度也是影响铺粉质量以及后续工艺参数的重要因素。如图4所示,在铺层厚度 $0 d_m \sim 3.5 d_m$ 范围内,随着铺层厚度增加,粉层表面质量以及配位数都显著提高。在超过 $3.5 d_m$ 厚度后,虽然铺层越厚粉床质量越好,但改善效果并不显著。与三维铺粉的厚度对粉床质量的影响规律基本一致。考虑到后续的粉末熔化过程,过厚铺层的底部粉末不易被激光完全熔化,从而形成缺陷导致打印件的力学性能下降。因此,粉床的厚度需要控制在合理范围内。

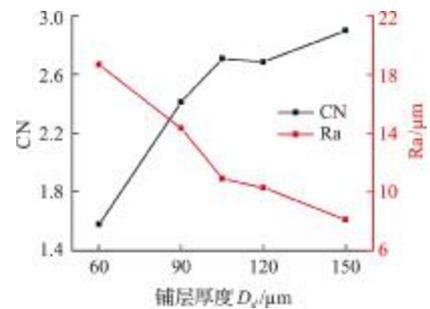


图4 铺层厚度对粉床质量的影响

Fig.4 Effects of the layer thickness on the powder bed

3 热-流-微结构耦合相场模型

3.1 数值模型

针对增材制造中高能激光束产生较大的局部温度梯度,基于前期开发的增材制造非等温相场模型^[5,13],本文进一步完善了热-流-微结构多场耦合的相场模型,如图5所示。通过引入一系列序参量来区分不同的相,其中 $\rho = 1$ 为固相/液相,而 $\rho = 0$ 表示气相; $\rho = 1$ 时, $\phi = 1$ 和 $\rho - \phi = 1$ 分别表示固相和液相;当 $\phi = 1$ 时,固体内的晶粒取向场为 $\{\eta_i\} (i=1, 2, \dots, N)$,仅存在一个时 $\eta_i = 1$,其余均等于0。系统的总自由能表示为

$$F = \int (f_{loc} + f_{grad} + f_{ht}) dV \quad (13)$$

式中 f_{loc} 为局部自由能密度,与相本身的能量相关; f_{grad} 为梯度自由能密度,与界面相关; f_{ht} 为与热量相关的自由能密度项。

控制序参量 ϕ , η_N 和 ρ 演化方程分别为

$$\frac{D\phi}{Dt} = -L_\phi \frac{\delta F}{\delta \phi}, \quad \frac{D\eta_N}{Dt} = -L_\eta \frac{\delta F}{\delta \eta_N} \quad (14, 15)$$

$$\frac{D\rho}{Dt} = \nabla \cdot (M \cdot \nabla \frac{\delta F}{\delta \rho}) \quad (16)$$

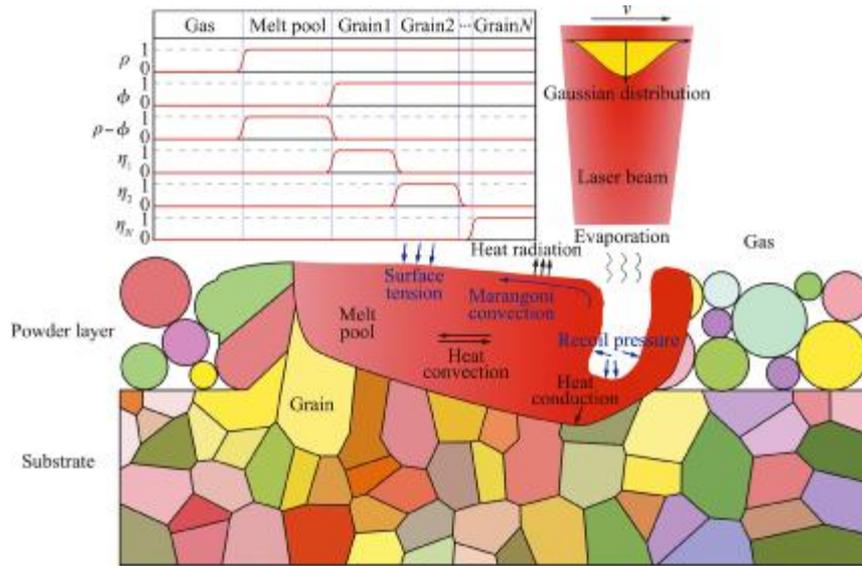


图5 热-流-微结构耦合相场模型
Fig. 5 Heat-fluid-microstructure coupled phase-field model

式中 L_ϕ 为控制固体界面移动速率的参数, L_η 为控制晶界移动速率的参数, M 为控制界面扩散的界面迁移率。

为了便于模拟熔池动力学行为,做出以下假设,熔池内的金属液体密度变化忽略不计,流体流动为层流。因此可以采用不可压流 Navier-Stokes 方程进行描述,即

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (17)$$

$$\rho_l \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \rho_l \mathbf{g} + \mathbf{f}_{sf} + \mathbf{f}_{vp} + \nabla \cdot [\mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] \quad (18)$$

式中 \mathbf{u} 为速度矢量, ρ_l 为密度, p 为压强, μ 为动力黏性系数, \mathbf{f}_{sf} 为表面张力的体力形式,与温度和液相本身的性质有关。Yan 等^[15]将连续表面力引入多相流计算,其中表面张力的体力形式为 $\mathbf{f}_{sf} = \delta_\Sigma(\nabla_\Sigma \sigma - \sigma \kappa \mathbf{n})$, δ_Σ 为狄拉克函数,满足 $\int_{-\infty}^{\infty} \delta_\Sigma dx = 1$, 其表达式为 $\delta_\Sigma = 3\sqrt{2} \xi |\nabla \rho|^2$, $\kappa = \nabla \cdot \mathbf{n}$ 为曲率, $\nabla_\Sigma \sigma$ 为表面张力切向分量, σ 为表面张力系数,其表达式为

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{\partial \sigma}{\partial T}(T - T_0) \quad (19)$$

式中 σ_0 为参考温度时的表面张力系数, T_0 为参考温度, $\partial \sigma / \partial T$ 为表面张力温度梯度系数。

\mathbf{f}_{vp} 为蒸汽反冲压力的体力形式,与温度和液相本身的性质相关。Pang 等^[16]引入 Clausius-Clapeyron 方程表示饱和蒸汽压 p_s , 即

$$p_s(T_s) = p_0 \exp \left[\frac{\Delta H_v}{k_B T_v} \left(1 - \frac{T_v}{T_s} \right) \right] \quad (20)$$

式中 p_0 为标准大气压, ΔH_v 为蒸发潜热, k_B 为玻

尔兹曼常数, T_v 为蒸发温度, T_s 为表面温度。蒸汽反冲压力 p_r 与饱和蒸汽压 p_s 的关系为

$$p_r(T_s) = \frac{1 + \beta}{2} p_s(T_s) \quad (21)$$

式中 β 为反冲系数,其取值范围为 $0.18 \sim 1$ ^[17]。同表面张力类似,引入 δ_Σ 将其体力化,最终得到反冲压力为 $\mathbf{f}_{vp} = -\mathbf{n} \delta_\Sigma p_s$ 。

温度场满足能量守恒方程,即

$$\frac{\partial e}{\partial T} \frac{DT}{Dt} + \frac{\partial e}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) + q_v + S_{rad} + S_{con} \quad (22)$$

式中 q_v 为热源项,采用高斯分布的体热源形式, S_{rad} 和 S_{con} 分别为热辐射和热对流引起的能量耗散。

3.2 模型验证

通过经典案例气液两相流动中的气泡运动验证本文提出的热-流-微结构耦合相场模型,气泡相关参数列入表 2,其中 $Re = \rho_l VR / \mu_l$, $Eo = \rho_l VR^2 / \sigma_0$, $V = \sqrt{gR}$ 。

表 2 运动气泡计算参数

Tab. 2 Calculation parameters of moving bubbles

参数	数值
气体密度 $\rho_g / \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	1
液体密度 $\rho_l / \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	1000
气体粘性系数 $\mu_g / \text{N} \cdot \text{s} \cdot \text{m}^{-2}$	0.1
液体粘性系数 $\mu_l / \text{N} \cdot \text{s} \cdot \text{m}^{-2}$	10
重力加速度 $g / \text{m} \cdot \text{s}^{-2}$	0.98
表面张力系数 $\sigma_0 / \text{N} \cdot \text{m}^{-1}$	1.96
气泡半径 R / m	0.25
Re	35
Eo	125

计算区域尺寸如图 6(a)所示,初始气泡静止。由于气泡与液体间存在较大密度差,气泡开始向上运动,其下边界优先向内凹陷,逐渐挤压两侧,形成气膜并逐渐生长,如图 6(c)所示。进一步在下边界液体的运动惯性下脱落,此现象和 Chen 等^[18]报道的研究结果一致。

气泡在运动过程中的质心高度变化情况如图 6(b)所示。 $t=0$ 时气泡静止,随后加速上升,可以看出,虽然在不同时刻气泡的形状差异较大,但是其质心运动速度几乎无变化,处于匀速运动状态,表明气泡在运动时外形的变化对其整体的受力情况影响较小。

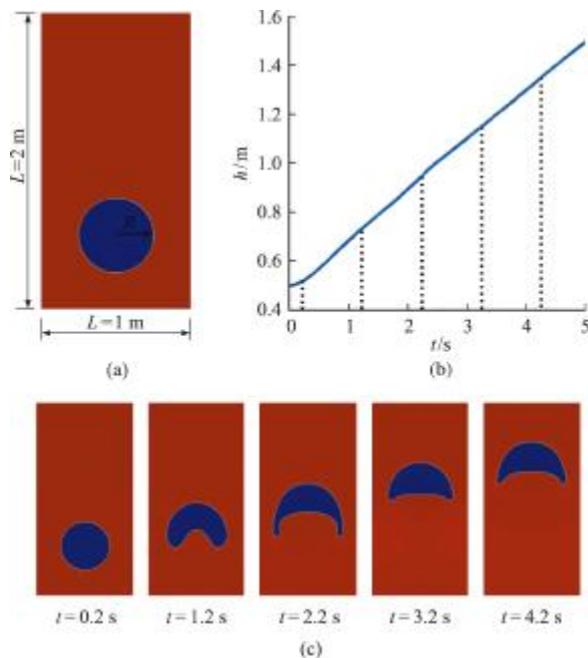


图 6 气泡上升中外形和高度变化
Fig. 6 Change of bubble shape and height when rising

随后对激光扫描产生的熔池行为进行了研究,采用的计算参数列入表 3。表面张力和蒸汽反冲压力对熔池行为的影响如图 7 所示。不考虑马兰戈尼效应和反冲压力时,气液界面各处的表面张力大小一致,这并不会引起液面明显的变化。而当考虑马兰戈尼效应的影响时,激光导致的熔池表面温度梯度,熔池表面液体向激光源两侧流动,从而出现不平稳的波动,进而会影响熔池凝固时的形貌。

相比由温度梯度引起的表面张力差异,蒸汽反冲压力造成的熔池流动现象则更为明显。当熔池表面的温度未达到液相蒸发温度时,蒸发现象不明显,反冲压力也几乎不存在。当液相表面达到蒸发温度时,法向的反冲压力会使得熔池表面迅速下凹,这比马兰戈尼效应的效果更为显著。同时,凹

陷通常位于激光直射的部位,且随着激光的移动而发生移动,由于激光存在反射,导致部分能量聚集在锁孔处,因此锁孔的形成也和反冲压力的作用密切相关^[19]。

表 3 熔池演化计算参数

Tab. 3 Calculation parameters for melt pool evolution

参数	数值	参数	数值
激光功率 P/W	100	蒸发温度 T_v/K	3084
扫描速度 $v/m \cdot s^{-1}$	1	密度 $\rho_s/kg \cdot m^{-3}$	8084
熔化温度 T_m/K	1748	表面张力系数 $\sigma_0/N \cdot m^{-1}$	1.15

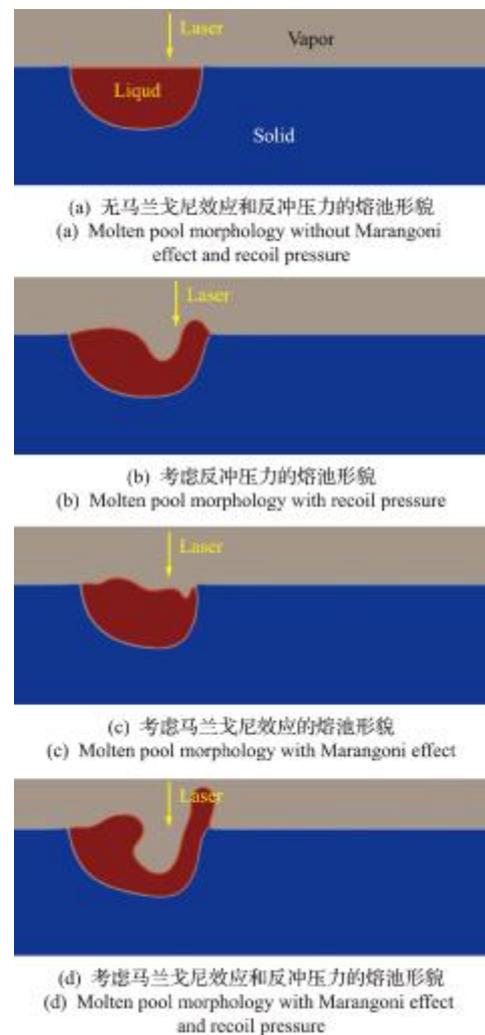


图 7 表面力对熔池形貌的影响
Fig. 7 Effect of surface forces on molten pool morphology

3.3 单层扫描

通过离散元铺粉得到的粉床,进一步研究了单层粉床的熔池-微结构演化规律。如图 8(a)所示,基底为随机生产的 Voronoi 晶粒,基底上方粉末层平均直径为 $30 \mu m$,激光功率 $150 W$,扫描速度 $1.5 m/s$ 。对于单层扫描,粉末层厚度与激光能量密度直接影

响了熔池流动及其凝固行为。

在激光能量持续输入下,粉末层和基底上部的晶粒逐渐熔化形成熔池,熔池面积逐渐增大。如图8(b)所示,一段时间以后,熔池面积基本维持稳定,熔池前沿颗粒随着激光移动而熔化,熔池后沿凝固。粉末间的孔隙呈现出两种规律,一种是粉末未完全熔融导致孔隙基本保持了原始形态;另一种是随着粉末完全熔化形成气泡,其中一小部分气泡随着晶粒的生长在凝固体中固定下来。在激光功率充足的情况下,激光能够将孔隙周围的固体物质完全熔化,导致孔隙沿着液态金属流动的方向向熔池表面移动。此现象在提高熔池性能方面具有积极的意义。

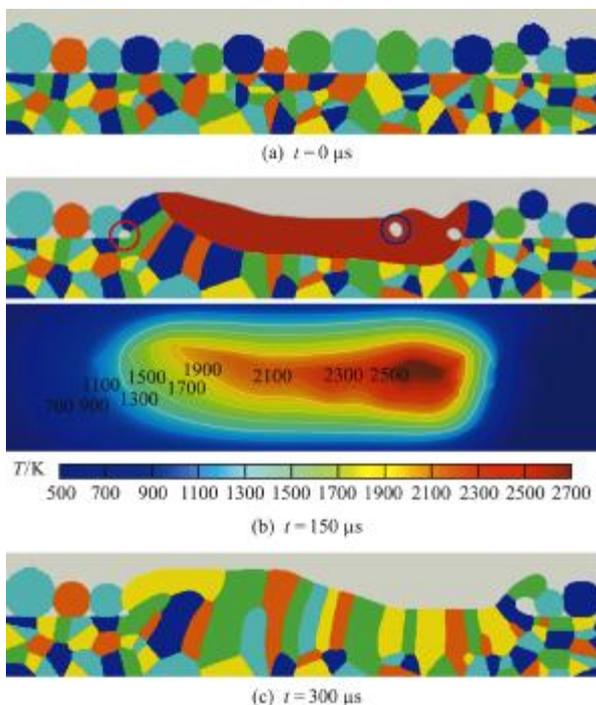


图8 激光选区熔化单层扫描结果
Fig.8 Simulation results of single layer SLM

此外,研究表明晶粒的生长方向通常受熔池中温度梯度的密切影响。从图8(b)所示的温度场分布可以看出,熔池前沿温度梯度较大,熔池后沿温度梯度较小。在熔池后沿凝固区域,晶粒沿着温度梯度的方向生长。此结果与实际观察到的情况一致。

随着扫描结束以及熔池完全凝固,最终形成的晶粒主要是柱状晶,如图8(c)所示。在马兰戈尼效应与反冲压力的协同作用下,熔融池表面呈现朝向激光移动反方向的流动,最终导致凝固过程中熔融池表面的不规则性,从而引起表面粗糙度的变化,对下一层铺粉的有效高度产生影响。

4 结 论

本文结合离散元法与相场方法,成功实现了激光选区熔化从铺粉到粉末熔化凝固的全过程数值模拟。主要研究内容和结论如下。

(1) 基于离散元开源代码 Yade 建立了 JKR 接触模型,验证了程序的正确性,并分析了铺粉参数对粉床质量的影响。

(2) 考虑马兰戈尼效应和反冲压力对熔池运动的作用,完善了热-流-微结构耦合相场模型。通过气液两相流问题的相场模拟,并与其他文献结果对比,验证了模型的正确性。

(3) 在激光扫描过程中,马兰戈尼效应和反冲压力会促使熔池流动更加剧烈,晶粒沿着温度梯度方向生长。

参考文献(References):

- [1] Yap C Y, Chua C K, Dong Z L, et al. Review of selective laser melting: Materials and applications[J]. *Applied Physics Reviews*, 2015, **2**(4): 041101.
- [2] 张海洲,白洁,马瑞,等.激光选区熔化成形技术在航空航天发动机制造领域的研究与应用现状[J]. *推进技术*, 2023, **44**(3): 6-21. (ZHANG Hai-zhou, BAI Jie, MA Rui, et al. Current progress and application of selective laser melting technology in aerospace engine manufacturing [J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2023, **44**(3): 1-16. (in Chinese))
- [3] Seabra M, Azevedo J, Araújo A, et al. Selective laser melting (SLM) and topology optimization for lighter aerospace components[J]. *Procedia Structural Integrity*, 2016, **1**: 289-296.
- [4] Li Y Z, Založnik M, Zollinger J, et al. Effects of the powder, laser parameters and surface conditions on the molten pool formation in the selective laser melting of IN718 [J]. *Journal of Materials Processing Technology*, 2021, **289**: 116930.
- [5] 易敏,常珂,梁晨光,等.增材制造微结构演化及疲劳分散性计算[J]. *力学学报*, 2021, **53**(12): 3263-3273. (YI Min, CHANG Ke, LIANG Chen-guang, et al. Computational study of evolution and fatigue dispersity of microstructures by additive manufacturing[J]. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2021, **53**(12): 3263-3273. (in Chinese))
- [6] Darabi R, Azinpour E, Reis A, et al. Multi-scale Multi-physics Phase-field coupled Thermo-mechanical approach for modeling of powder bed fusion process

- [J]. *Applied Mathematical Modelling*, 2023, **122**: 572-597.
- [7] Leitz K H, Singer P, Plankensteiner A, et al. Multi-physical simulation of selective laser melting[J]. *Metal Powder Report*, 2017, **72**(5): 331-338.
- [8] Zhou R H, Liu H S, Wang H F. Modeling and simulation of metal selective laser melting process; A critical review[J]. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2022, **121**(9): 5693-5706.
- [9] Heeling T, Cloots M, Wegener K. Melt pool simulation for the evaluation of process parameters in selective laser melting [J]. *Additive Manufacturing*, 2017, **14**: 116-125.
- [10] Lu L X, Sridhar N, Zhang Y W. Phase field simulation of powder bed-based additive manufacturing[J]. *Acta Materialia*, 2018, **144**: 801-809.
- [11] Yang M, Wang L, Yan W T. Phase-field modeling of grain evolutions in additive manufacturing from nucleation, growth, to coarsening [J]. *NPJ Computational Materials*, 2021, **7**: 56.
- [12] Xiong F Y, Gan Z T, Chen J W, et al. Evaluate the effect of melt pool convection on grain structure of IN625 in laser melting process using experimentally validated process-structure modeling[J]. *Journal of Materials Processing Technology*, 2022, **303**: 117538.
- [13] Yang Y, Kühn P, Yi M, et al. Non-isothermal phase-field modeling of heat-melt-microstructure-coupled processes during powder bed fusion[J]. *JOM*, 2020, **72**(4): 1719-1733.
- [14] Johnson K L, Kendall K, Roberts A D, et al. Surface energy and the contact of elastic solids[J]. *Proceedings of the Royal Society of London A Mathematical and Physical Sciences*, 1971, **324**(1558): 301-313.
- [15] Yan J, Yan W, Lin S, et al. A fully coupled finite element formulation for liquid-solid-gas thermo-fluid flow with melting and solidification [J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2018, **336**: 444-470.
- [16] Pang S Y, Hirano K, Fabbro R, et al. Explanation of penetration depth variation during laser welding under variable ambient pressure[J]. *Journal of Laser Applications*, 2015, **27**(2): 022007.
- [17] Fabbro R, Hirano K, Pang S Y. Analysis of the physical processes occurring during deep penetration laser welding under reduced pressure[J]. *Journal of Laser Applications*, 2016, **28**(2): 022427.
- [18] Chen L, Garimella S V, Reizes J A, et al. The development of a bubble rising in a viscous liquid[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1999, **387**: 61-96.
- [19] Tan W D, Bailey N S, Shin Y C. Investigation of key-hole plume and molten pool based on a three-dimensional dynamic model with sharp interface formulation[J]. *Journal of Physics D Applied Physics*, 2013, **46**(5): 055501.

Numerical simulation of selective laser melting by combining discrete element method and phase-field method

CHANG Ke, LIANG Chen-guang, YI Min*

(College of Aerospace Engineering & State Key Laboratory of Mechanics and Control for Aerospace Structures, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China)

Abstract: Multi-physics coupling is a key characteristic of selective laser melting (SLM), involving complex physical phenomena such as heat transfer, phase transition, molten pool flow, and grain growth, which raise great challenges for quality control. In this paper, we propose a computational framework integrating the discrete element method (DEM) and phase-field method (PFM) to achieve high-fidelity numerical simulation of SLM. Firstly, the powder spreading process is simulated by DEM, and the effect of powder spreading parameters on the quality of the powder-bed layer is discussed. Secondly, a non-isothermal phase-field model including heat-fluid-microstructure coupling is presented, which is verified by the benchmark case of the gas-liquid two-phase flow behavior. In addition, the influence of recoil pressure and Marangoni effect on the molten pool behavior is studied. Finally, the whole process simulation of powder spreading and laser scanning of a single layer is realized, which reproduces the phenomena of molten pool flow, solidification and grain evolution during SLM process.

Key words: selective laser melting; powder spreading; phase-field method; molten pool; microstructure evolution