

Nouveau modèle thermique stabilisé pour la simulation en fabrication additive à l'échelle de la pièce

C. Bellot¹, N. Akkari²

¹ Safran Tech, Modelling and Simulation, Rue des Jeunes Bois, Châteaufort, 78114 Magny-Les-Hameaux, France, INSA Lyon, camillebellot@outlook.fr

² Safran Tech, Modelling and Simulation, Rue des Jeunes Bois, Châteaufort, 78114 Magny-Les-Hameaux, France, nissrine.akkari@safrangroup.com

Résumé — De très nombreux phénomènes thermiques ont un impact sur la forme et la résistance des pièces en Fabrication Additive (FA), ainsi, les coûts de calcul pour une simulation à l'échelle de la pièce deviennent vite inabordable. Cet article propose un nouveau modèle thermique réduisant les coûts de calcul et décrivant fidèlement les petites échelles de temps du laser et les grandes de diffusion. Après validation numérique, la confrontation du modèle avec des valeurs expérimentales en Laser Beam Melting prouve la fidélité du modèle et du cadre d'étude contenant les phénomènes dominants en FA.

Mots clés — stabilisation thermique, coût de calcul, fabrication additive.

1 Introduction

En fabrication additive, les possibilités topologiques et de personnalisation des propriétés mécaniques sont grandes, mais les phénomènes mis en jeu étant mal connus, l'influence des paramètres de fabrication est difficile à prévoir. Aujourd'hui encore, beaucoup d'organisations misent sur les essais à grande échelle pour concevoir de manière optimale et certifier leurs pièces. Ainsi, la modélisation de la fabrication additive est un enjeu clé pour garantir la qualité industrielle.

La simulation thermique est d'une grande importance puisque ce sont les champs de température qui permettent de prédire les contraintes résiduelles et la microstructure. Seulement, de grandes difficultés subsistent au niveau du temps de calcul. En effet, en FA, le couplage de phénomènes (domaines solide, liquide et granulaire, interaction avec le laser...) ainsi que les nombreuses échelles physiques (allant du grain de poudre à la pièce entière en passant par le bain de fusion) rendent la modélisation numérique de ces procédés difficile. L'objectif de ce travail est de présenter un nouveau modèle thermique à faible coût permettant de décrire les différentes échelles de temps, i.e. les échelles rapides d'interaction laser-matière et les grandes plus lente pour la diffusion de la chaleur, en permettant l'utilisation de maillages grossiers grâce à la stabilisation des phénomènes. Ce modèle est validé vis à vis de résultats expérimentaux du procédé Laser Beam Melting.

La modélisation sur maillage grossier avec l'équation de la chaleur de Fourier (1) entraîne l'apparition de températures négatives de très grandes amplitudes dues à des instabilités numériques (voir figure 1).

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + Q = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} \quad (1)$$

La simulation thermique étant une donnée d'entrée pour les modèles mécaniques et métallurgiques, la présence de températures non-physiques entraînerait une erreur importante sur ces calculs. Ces instabilités numériques obligent donc à augmenter la taille du modèle en réduisant la taille de maille.

Ces phénomènes d'instabilités en thermique sont rencontrés et traités dans de nombreux domaines comme la simulation de moulage ou de forgeage, mais encore peu pour la FA, bien que certains auteurs mentionnent ces difficultés [1]. Les solutions trouvées dans la littérature ne sont donc pas forcément adaptées à ce domaine. Ces phénomènes sont dues, numériquement, à la violation du principe du maximum qui peut avoir lieu lors de la résolution de l'équation de la chaleur de Fourier avec des sources de chaleur trop importantes [2].

Physiquement, on peut expliquer ces oscillations numériques par la non-validation des hypothèses émises dans l'équation de la conduction de Fourier ; ces hypothèses étant que la conduction est instanta-

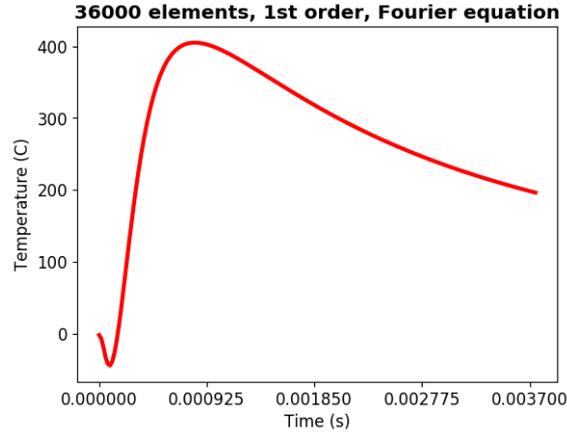


FIGURE 1 – Numerical instabilities in LBM modelling

nément établie dans la matière et qu'ainsi, la vitesse de propagation de la chaleur est infinie. Elles sont valides dans la plupart des applications, mais pas lorsque les sources de chaleur sont de densité trop importante. Cattaneo [3] et Vernotte [4] ont montré qu'un terme hyperbolique modélisant le front d'onde de chaleur doit être ajouté à l'équation de Fourier qui devient donc l'équation de la chaleur avec l'effet non-Fourier (équation (2)). L'ajout d'un temps de relaxation permet de décrire l'accumulation de chaleur qui a lieu proche de la source avant la diffusion.

$$\nabla(k \nabla T) = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \tau_0 \rho c_p \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + Q + \tau_0 \frac{\partial Q}{\partial t} \quad (2)$$

avec k la conductivité thermique, ρ la masse volumique, c_p la capacité thermique et τ_0 le temps de relaxation.

D'après [5], l'application de cette équation permet de supprimer les oscillations numériques proche des températures maximales et de bien décrire la source de chaleur mais entraîne des instabilités avec des températures négatives lors du refroidissement.

D'autres auteurs ont développé des techniques purement numériques permettant de réduire les instabilités. Dans [2], les auteurs montrent qu'en augmentant le pas de temps de la résolution éléments finis pour que ce pas de temps soit plus grand que le temps qu'il faut à la chaleur pour pénétrer un élément, les instabilités sont supprimées. Cette stratégie se nomme la condition de profondeur de pénétration et est l'idée fondatrice derrière la méthode diffusion-split développée par [6]. Dans cette dernière, la matrice de conductivité est séparée en 2 matrices dont une satisfaisant le principe du maximum et l'autre entrant dans un terme de source exprimé explicitement, le problème :

$$C \frac{T_{n+1} - T_n}{\Delta t} + K T_{n+1} = F$$

avec C la matrice de capacitance et K la matrice de conductivité, devient :

$$C \frac{T_{n+1} - T_n}{\Delta t} + K^* T_{n+1} = F + S$$

Avec $S = (K^* - K) T_n$

Avec une conductivité modifiée k^* :

$$\begin{cases} k^*(T) = k(T) \text{ si } \Delta t \geq \Delta t_{pp} \\ k^*(T) = k(T) \frac{\Delta t_{pp}}{\Delta t} \text{ si } \Delta t \leq \Delta t_{pp} \\ \Delta t_{pp} = \alpha \frac{\rho c_p}{k} \Delta x^2 \\ \alpha \simeq 1 \end{cases}$$

Avec α la profondeur de pénétration, Δt_{pp} le pas de temps respectant la condition de profondeur de pénétration, Δx la taille de maille.

Ce travail se déroule en trois parties distinctes : tout d'abord un nouveau modèle thermique et un cadre d'étude pour la simulation du procédé LBM sont développés, puis le nouveau modèle est testé sur un cas représentatif mais simplifié et enfin une validation expérimentale sur cet ensemble cadre d'étude/nouveau modèle est effectuée.

2 Développements

2.1 Nouveau modèle thermique en FA

D'après la revue bibliographique détaillée dans la partie précédente, on remarque qu'il existe un modèle physique pour stabiliser les températures proches de la source de chaleur mais qui entraîne d'autres instabilités au niveau du refroidissement et une méthode purement numérique permettant d'augmenter la conductivité artificiellement et qui a un impact sur les temps longs de la conduction. Le travail effectué a pour but d'adapter la méthode diffusion-split à la résolution éléments finis de l'équation de la chaleur prenant en compte l'effet non-Fourier. Avec cette stratégie, les petites échelles de temps d'accumulation de la chaleur proche de la source et les grandes de diffusion sont prises en compte. La pertinence de ce modèle est prouvée dans les parties suivantes.

Les développements numériques sont faits grâce à la méthode des éléments finis couplées avec une discrétisation temporelle implicite d'ordre 1 pour la méthode diffusion-split et d'ordre 2 (Crank-Nicholson, pour mieux discrétiser la dérivée temporelle d'ordre 2) pour la méthode non-Fourier et le nouveau modèle.

Ainsi, la discrétisation éléments fini avec un schéma temporel de Crank-Nicholson pour l'équation non-Fourier est sous forme matricielle :

$$M \frac{T_{n+1} - 2T_n + T_{n-1}}{(\Delta t)^2} + C \frac{T_{n+1} - T_n}{\Delta t} + K_{1/2} T_{n+1} = F - K_{1/2} T_n$$

avec M la matrice de masse, $K_{1/2}$ la matrice de conductivité issue de la discrétisation temporelle de Crank-Nicholson. Cette discrétisation devient avec l'application du nouveau modèle :

$$M \frac{T_{n+1} - 2T_n + T_{n-1}}{(\Delta t)^2} + C \frac{T_{n+1} - T_n}{\Delta t} + K^* T_{n+1} = F - K_{1/2} T_n + S$$

$$\text{Avec } S = (K^* - K_{1/2}) T_n$$

Les équations matricielles présentées ici sont en linéaire pour des raisons de simplicité. La résolution non-linéaire implique l'ajout d'un solveur itératif Newton-Raphson.

2.2 Cadre d'étude pour la modélisation de LBM

Comme expliqué dans l'introduction, les coûts de calcul - pour une simulation à l'échelle de la pièce avec la prise en compte de tous les phénomènes physiques - deviennent trop importants. Dans ce cas d'étude, le domaine est simulé de manière continue (pas de phase liquide, ni granulaire). Les calculs sont effectués en thermique non-linéaire pour prendre en compte les variations de propriétés thermiques en fonction de la température et de la phase. Des résultats sont présentés d'abord pour une seule couche (voir un seul cordon) puis pour plusieurs couches. Ainsi, l'ajout de couches suit la stratégie muette avec les paramètres recommandés par [7], c'est à dire le calcul est fait sur le domaine entier, mais les propriétés thermiques des couches inactives sont modifiées pour qu'elles aient un impact négligeable. A l'inverse de [7] qui conseille de réinitialiser les vertex des couches inactives à la température initiale entre chaque pas de temps, il a été choisi, dans ce travail, pour réduire le temps de calcul, de ne les réinitialiser qu'entre chaque passe de laser. L'apport de chaleur est apporté surfaciquement par une distribution gaussienne lorsqu'une seule couche est simulée (équation 3) [8]. Par contre, lors de simulations multi-couches, la chaleur est appliquée en terme de source sphérique volumique (équation (4))[9], [10]. Ces sources de chaleur reproduisent fidèlement la trajectoire et les paramètres du laser procédé.

$$q_{\text{surf}}(x - vt, z) = \beta \frac{P}{2\pi r_0^2} e^{-\frac{(x-vt)^2 + (z-z_0)^2}{2r_0^2}} \quad (3)$$

$$Q(x - vt, y, z) = \beta \frac{6\sqrt{3}P}{r_0^3 \pi \sqrt{\pi}} e^{-3\frac{(x-vt)^2 + (y-y_0)^2 + (z-z_0)^2}{r_0^2}} \quad (4)$$

avec r_0 le rayon de la source, P sa puissance, β l'absorptivité du matériau et vt (v la vitesse du laser), y_0 et z_0 la position de la source suivant les axes x , y et z , respectivement. Les conditions aux limites en

dehors de la source sont de convection et radiation avec un coefficient de convection et une émissivité uniforme. Enfin, en thermique non linéaire les propriétés thermiques dépendent de la température et sont celles de l'alliage métallique TA6V [11] : la masse volumique et la capacité thermique sont interpolées linéairement, la conductivité est augmentée dans la phase liquide de manière à prendre en compte les échanges de chaleur par convection dans le bain de fusion [12].

3 Résultats sur un modèle simplifié

Pour valider le nouveau modèle vis à vis du modèle de Fourier, de diffusion-split et de non-Fourier, les développements sont d'abord effectués sur un cas simple d'un cordon de lasage sur un pavé en TA6V. Les calculs sont effectués en thermique linéaire avec les propriétés thermiques prises à température ambiante.

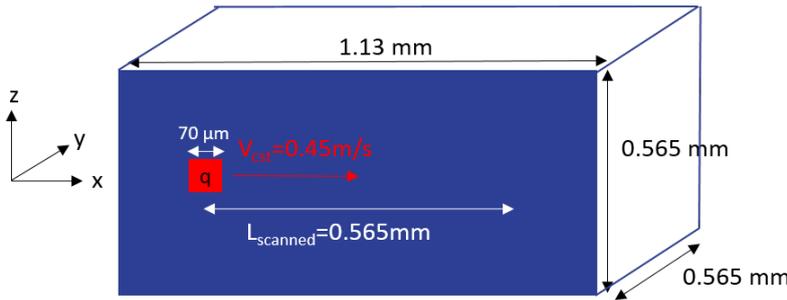


FIGURE 2 – Schéma du modèle simplifié

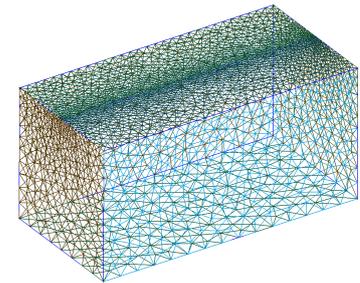


FIGURE 3 – Maillage pour la validation du modèle

Les résultats (figures 4 et 5) montrent que la stratégie purement numérique de diffusion-split ne permet pas, dans ce cas là, de transcrire fidèlement les transferts thermiques observés avec le modèle de Fourier. En effet, l'augmentation de la conductivité au pas de temps courant pour une revalorisation au pas de temps suivant adoucit très fortement les gradients de température. A l'inverse, cette méthode permet de drastiquement réduire les températures négatives de part la réduction des chocs thermiques. Comme l'avait montré la revue bibliographique, la résolution de l'équation non-Fourier permet de mieux percevoir les hautes températures proches de la source, mais de par l'augmentation des gradients, accentue les instabilités numériques. Le modèle développé ici permet de jouir des qualités de l'équation hyperbolique de la chaleur et de la technique diffusion-split. Les instabilités numériques sont grandement réduites sans que les phénomènes thermiques ne soient "écrasés".

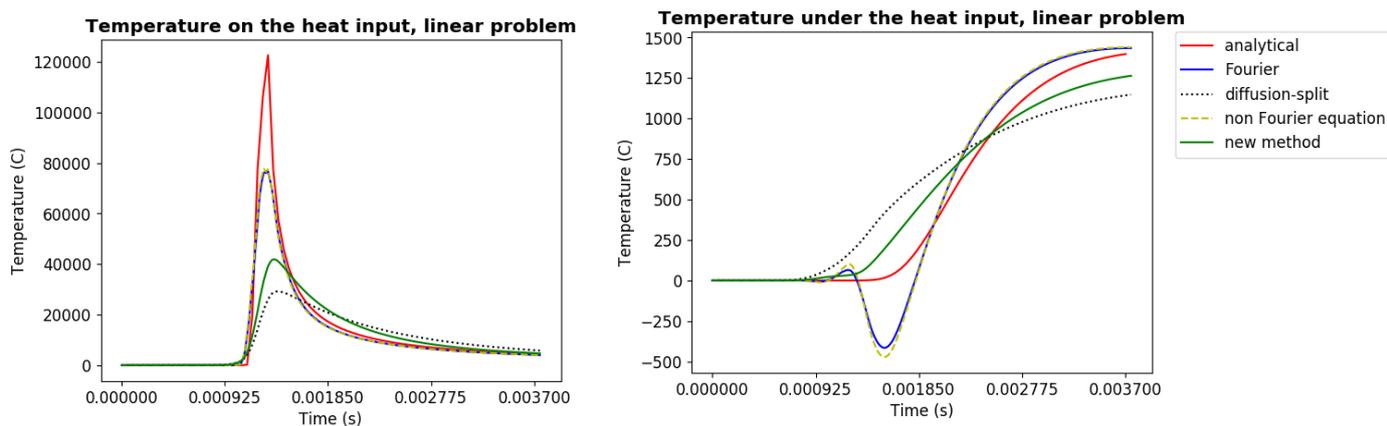


FIGURE 4 – Température sur et sous la source en thermique linéaire pour les différents modèles

Le même calcul a été fait en thermique non-linéaire, ce qui permet de valider ces conclusions et qui sera présenté durant le congrès. Cette méthode est d'ailleurs avantageuse par le passage à la thermique non-linéaire avec l'augmentation de la conductivité en fonction de la température : dans le cas linéaire, la nouveau modèle ne capte pas complètement les maximaux de température, alors qu'en non-linéaire, la

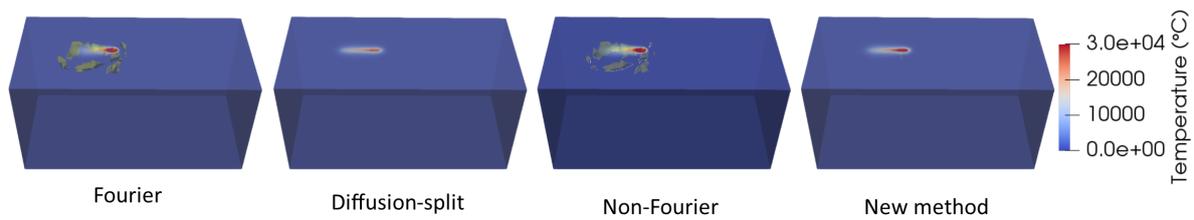


FIGURE 5 – Température pour les différents modèles en thermique linéaire à 1/3 de la simulation, les températures négatives sont en jaune

différence avec Fourier est négligeable. Ainsi, dans ce cas simplifié, le nouveau modèle permet de gagner en temps de calcul. Le résultat étant stabilisé, le solveur non linéaire (Newton-Raphson) converge plus rapidement, ce qui permet de gagner environ 25% de temps par rapport au modèle de Fourier. Enfin, de manière plus macroscopique, on peut montrer que le nouveau modèle permet de grossir le maillage sans faire apparaître d'instabilité. Pour des éléments quadratiques en thermique non-linéaire par exemple, un maillage de 36000 éléments suffit pour ne pas voir apparaître de température négative avec ce modèle alors que 112000 éléments sont nécessaires pour le modèle de Fourier, soit un temps de calcul divisé par 7.

On peut aussi établir certaines lois pour le choix des paramètres de pénétration de la chaleur et du temps de relaxation. Ce dernier est un paramètre matériau qui est imposé ici à $10^{-8}s$, ce qui est proche des valeurs de la littérature [13]. La pénétration de la chaleur est quant à elle, dépendante de la taille de maille et du pas de temps, mais est de l'ordre de 1. On remarque qu'en divisant par deux la taille de maille, α doit être multiplié par deux et que la variation est inverse avec le pas de temps.

4 Comparaison expérimentale

L'expérience citée ici est issue de [14] et la mise en donnée est en partie inspirée par cet auteur. Considérons la fabrication d'un parallélépipède rectangle de $5 \times 5 \times 7,5 \text{ mm}^3$ en TA6V. Ce pavé est fabriqué sur un substrat cylindrique de 2mm d'épaisseur et de 99mm de diamètre. Un thermocouple est placé dans le substrat à 1,5mm sous la première couche du pavé. La machine est à une température ambiante de $28,5^\circ\text{C}$. Chaque cycle de fabrication est divisé en 1s de passage du laser sur la pièce, puis de 16,5s de temps de repos destiné à l'étalement d'une nouvelle couche de poudre. Le maillage est créé de manière à ce que les couches de la pièce soient maillées finement (taille d'élément de l'ordre de grandeur du diamètre du laser), puis le maillage est fortement déraffiné dans la profondeur.

Les caractéristiques de la simulation sont expliquées partie 2.2.

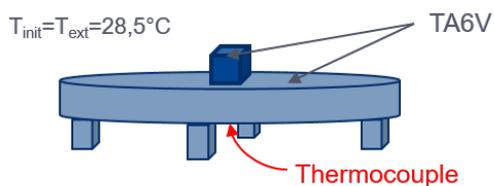


FIGURE 6 – Schéma de l'expérience

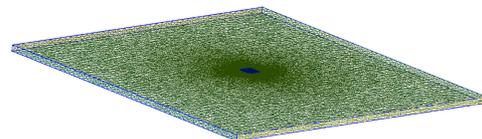


FIGURE 7 – Maillage pour la simulation

4.1 Comparaison sur une couche

Dans cette partie, seule la première couche est simulée, ce qui permet de se soustraire des difficultés d'ajout de couche et de pouvoir utiliser une source surfacique de distribution gaussienne. Les résultats vis à vis de l'expérimental sont présentés figure 8. Ceux-ci permettent de dire que le nouveau modèle permet de mieux décrire les phénomènes longs de diffusion que le modèle de Fourier. L'erreur au sens de la norme L2 sur le point présenté vis à vis des données expérimentales est de 11,09% pour le nouveau

modèle et de 29,42% pour le modèle de Fourier. De plus, cette erreur est concentrée sur le temps de lasage (première seconde) puisque cette même erreur calculée sur le temps de repos descend à 6,92% pour le nouveau modèle (et reste inchangée pour le modèle de Fourier). Les phénomènes observés sont plus fidèles à l'expérimental avec le nouveau modèle car les résultats sont stabilisés (voir figure 9) ce qui empêche la propagation d'erreur et car les phénomènes d'accumulation de chaleur étant pris en compte par le modèle, la description de la source est aussi plus physique. Notons ici qu'à iso-modèle, le nouveau modèle permet de réduire de 45% le temps de calcul par rapport à celui de Fourier.

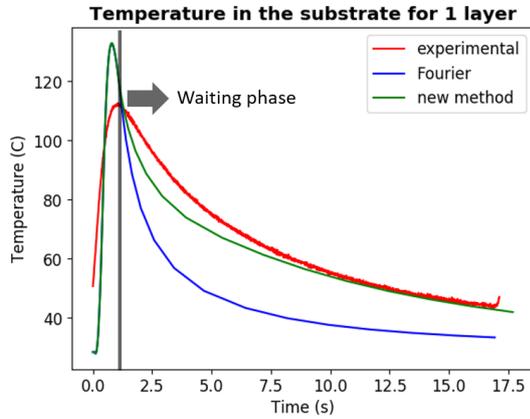


FIGURE 8 – Comparaison de la température avec l'expérimental pour une couche

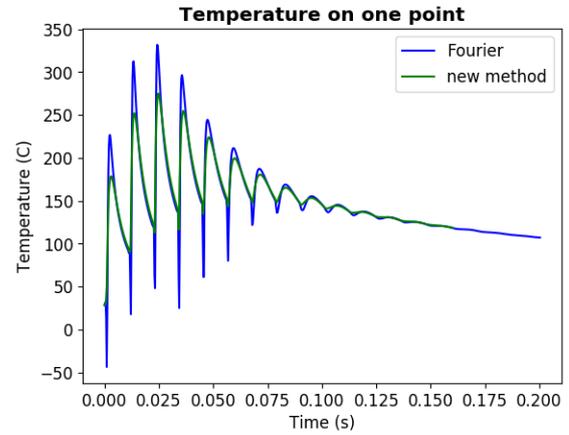


FIGURE 9 – Reduction des instabilités sur le cas expérimental

4.2 Comparaison sur un modèle multi-couches

La comparaison sur un modèle multi-couches a l'intérêt de coupler l'environnement de simulation LBM (ajout de couches muettes et source volumique) au modèle thermique développé. Les résultats figure 10 montrent que les phénomènes physiques diffèrent par rapport à la simulation précédente. Il semblerait que l'utilisation de sources volumiques permettent de mieux décrire les températures maximales dans le substrat (première seconde de chaque couche) mais s'éloigne de l'expérimental au niveau de la diffusion de la chaleur au cours du temps. Il est possible que les couches muettes aient un impact non négligeable pendant les temps longs de repos. Par contre, l'erreur par rapport à l'expérimental au sens de la norme L2 est toujours acceptable (10,09%). Le point fort de ce modèle est qu'il permet de bien simuler l'accumulation de chaleur qui a lieu entre deux couches et qui conduit à une température maximale plus élevée lors de la deuxième couche par rapport à la première. Enfin, bien que les gradients de température lors du refroidissement diffèrent légèrement par rapport à l'expérimental, l'erreur au sens de l'énergie locale est de 2,13% (avec l'énergie $E = \int_t \rho(T)c_p(T)dT$), ce qui prouve que le modèle reste proche des phénomènes physiques.

5 Conclusions et perspectives

Dans cet article, deux solutions issues de l'état de l'art ont été adaptées à la modélisation de LBM. La première, la technique diffusion-split, a l'intérêt d'être facilement adaptable aux codes existant et permet de modifier la conductivité de sorte à respecter le principe du maximum tout en restant relativement proche du modèle physique. Cette méthode a prouvé son efficacité au niveau de la réduction d'instabilités mais entraîne un très fort adoucissement des gradients thermiques ce qui modifie de façon notable les phénomènes physiques observés. La deuxième solution étudiée est l'ajout de l'effet non Fourier à l'équation de la chaleur. Cet effet a pour but la modélisation de l'accumulation d'énergie qui a lieu proche de la source de haute densité avant sa propagation dans le milieu et qui est négligée dans le modèle de conduction développé par Fourier. Ce modèle traite donc des petites échelles de temps proche de la source pour mieux décrire l'apport de chaleur. Ainsi, les maxima de températures sont plus précis avec cette méthode par rapport au modèle de Fourier, mais ce modèle ne traite pas des problèmes

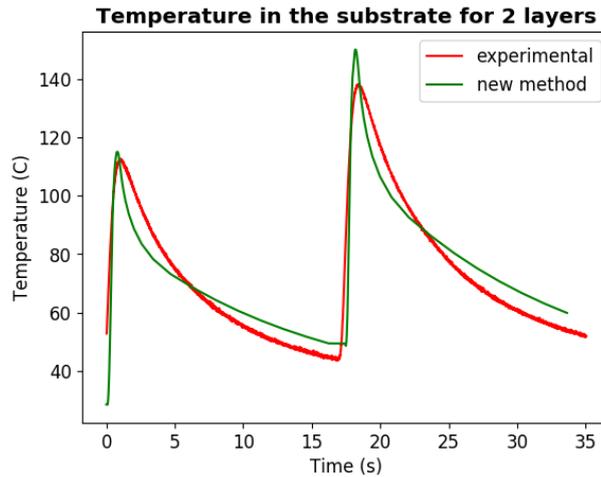


FIGURE 10 – Comparaison de la température avec l'expérimental pour deux couches

de chocs thermiques rencontrés proche des forts gradients de température. Un nouveau modèle alliant la description des petites échelles de temps par l'effet non-Fourier et stabilisant la diffusion a été développé. Il permet ainsi de simuler de manière stable la LBM tout en conservant des maillages grossiers et donc en gardant des temps de calcul abordables. Ce nouveau modèle a été testé vis à vis de résultats expérimentaux et il a été montré que le processus de diffusion est bien plus représentatif de la physique pour ce cas que le modèle de Fourier grâce à la prise en compte de l'accumulation de chaleur et grâce à la stabilisation des résultats. Dans un dernier temps, le modèle a été testé avec le cadre complet de modélisation de LBM, pour le comparer à des résultats expérimentaux multi-couches. Ce dernier travail a permis de valider le modèle vis à vis de la mise en donnée pour la modélisation de ce procédé.

On peut donc conclure que ce nouveau modèle thermique est une alternative intéressante pour la simulation en fabrication additive. Il permet de décrire précisément la diffusivité du matériau ainsi que l'interaction de la source de chaleur avec la matière. Sa grande stabilité, notamment sur des maillages grossiers, le rend efficace pour réduire les temps de calculs tout en gardant une grande fiabilité physique. La mise en donnée proposée pour la simulation à l'échelle de la pièce permet aussi de trouver un bon compromis entre temps de calcul et choix des phénomènes physiques à modéliser pour garder une grande fidélité.

Références

- [1] Z. Xiang, . Yin, G. Dong, X. Mei, and G. Yin. Modeling of the thermal physical process and study on the reliability of linear energy density for selective laser melting. *Results in Physics*, 9 :939 – 946, 2018.
- [2] M. Hogge and P. Gerrekens. One-dimensional finite element analysis of thermal ablation with pyrolysis. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 33 :609–634, 1982.
- [3] C. Cattaneo. A form of heat conduction equation which eliminates the paradox of instantaneous propagation. *C. R. Assemb. Comm. Int. Tech. Sucr.*, 247 :431, 1958. cited By 1.
- [4] P. Vernotte. Les paradoxes de la theorie continue de l'equation de la chaleur. *Compte Rendus*, 246 (1958), pp. 3154-3155, 1958.
- [5] W. Wu and X. Li. Application of the time discontinuous galerkin finite element method to heat wave simulation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 49(9) :1679 – 1684, 2006.
- [6] V.D. Fachinotti and M. Bellet. Linear tetrahedral finite elements for thermal shock problems. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, 16(5) :590–601, 2006.
- [7] P. Michaleris. Modeling metal deposition in heat transfer analyses of additive manufacturing processes. *Finite Elements in Analysis and Design*, 86 :51 – 60, 2014.
- [8] Z. Gan, G. Yu, X. He, and S. Li. Numerical simulation of thermal behavior and multicomponent mass transfer in direct laser deposition of co-base alloy on steel. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 104 :28 – 38, 2017.

- [9] V. Manvatkar, A. De, and T. DebRoy. Spatial variation of melt pool geometry, peak temperature and solidification parameters during laser assisted additive manufacturing process. *Materials Science and Technology*, 31(8) :924–930, 2015.
- [10] G. Pradinc. *Étude expérimentale assistée par simulation numérique du formage par ligne de chauffe de l’acier inoxydable austénitique AISI 304L*. PhD thesis, École de technologie supérieure, 2013.
- [11] R. Tricot. Thermomechanical treatment of titanium alloys for the aerospace industry. *6th World Conference on Titanium*, 76 :47–64, 01 1988.
- [12] C. Lampa, A.F.H. Kaplan, J. Powell, and C. Magnusson. An analytical thermodynamic model of laser welding. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 30(9) :1293, 1997.
- [13] S. Sieniutycz. The wave equations for simultaneous heat and mass transfer in moving media—structure testing, time-space transformations and variational approach. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 22(4) :585 – 600, 1979.
- [14] G. Marion, G. Cailletaud, C. Colin, M. Mazière, and D. Missoum-Benziane. Simulation des procédés de fabrication additive : aspects thermique, métallurgique et mécanique. Club Zset, 2015.