

Modélisation par la méthode de Monte-Carlo et Lancer de rayons de la fusion laser de poudres de polymère: approche par la méthode des éléments discrets.

Xin LIU¹, M'hamed BOUTAOUS^{1*} et Shihe XIN¹

¹Université de Lyon, CNRS, INSA-Lyon, CETHIL, UMR5008, F-69621, Villeurbanne, France
*(auteur correspondant : mhamed.boutaous@insa-lyon.fr)

Résumé - La fusion laser de poudres (SLS) est l'une des principales technologies de fabrication additive des polymères thermoplastiques. Le processus implique des couplages multiphysiques: rayonnement et conduction dans un milieu granulaire et semi-transparent, fusion, coalescence, densification par diffusion de l'air. Ce travail propose une modélisation de tous ces couplages par une approche basée sur la méthode des Éléments Discrets, en considérant l'interaction laser-matière et la diffusion de Mie. Le modèle global est validé par une comparaison à des analyses expérimentales et numériques.

1. Introduction

Le principe de la fabrication additive est de produire un objet à partir d'un fichier de CAO, couche par couche, par addition de matière que l'on transforme localement grâce à une source d'énergie. Bien que pour les métaux, des pièces industrielles sont déjà sur le marché, l'arrivée de ces technologies pour la production de pièces en matière plastique est encore à ses débuts.

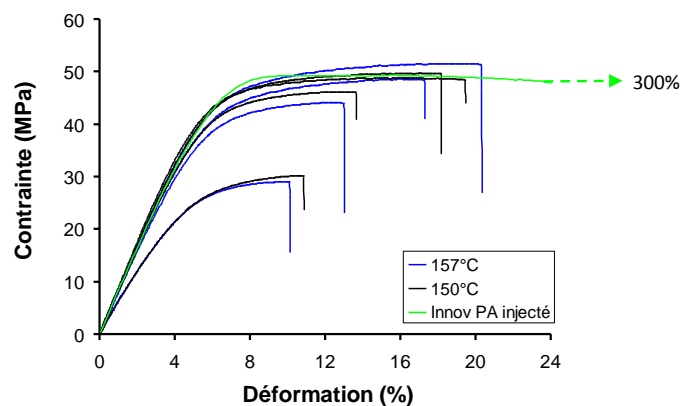


Figure 1 : Courbes de traction pour des éprouvettes en PA12, obtenues par différents procédés [1]: Fusion laser (noir frittée à 150°C, bleu à 157°C), injection (vert).

Afin de faire accepter les objets issus de ces technologies pour leur utilisation en industrie, il est nécessaire de garantir leurs performances mécaniques comparées aux procédés classiques, comme le montre la figure 1, tirée de [1], où l'on voit bien que la déformation à la rupture de pièces issues de ces procédés est très en deçà de celles obtenues par des pièces issues des procédés classiques (moulage par injection dans ce cas).

La modélisation numérique est dans ce cas un outil indispensable pour optimiser les procédés et bien investiguer les multiples phénomènes physiques qui leur sont liés.

Cet article présente une modélisation numérique du procédé SLS. L'interaction laser matière est modélisée en utilisant la méthode du lancer de rayons couplée avec la méthode de Monte-Carlo, afin de quantifier la distribution du rayonnement laser dans un lit de poudre puis d'estimer la quantité d'énergie absorbée par le matériau. Cette énergie est ensuite intégrée dans l'équation de la chaleur permettant de modéliser les transferts thermiques dans un lit de poudre de polymère, simulant le frittage laser, par une source mobile. Toutes les cinétiques de changement de phase, de coalescence des grains et de diffusion de l'air dans le matériau sont prises en compte, et les propriétés thermophysiques du milieu sont toutes thermo-évolutives. Afin de mieux représenter le caractère granulaire du milieu considéré, la méthode des éléments discrets est développée pour résoudre les équations régissant le problème puis réaliser une étude paramétrique du procédé. La figure 2 montre les étapes et les blocs de modèles associés afin de simuler le frittage de couches de poudre de polymères.

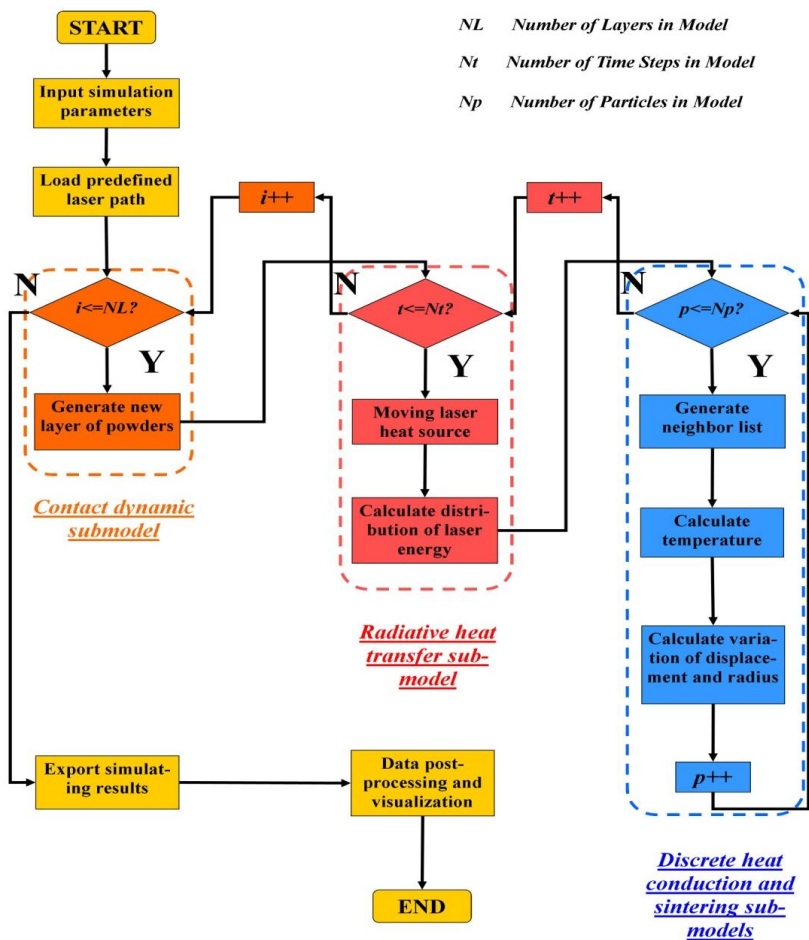


Figure 2 : Diagramme de résolution et du couplage entre les différentes étapes de transformation des couches de poudre et leurs modèles associés.

2. Histoire thermique du matériau dans le procédé

La fusion laser est utilisée principalement avec des polymères semi-cristallins. Les étapes du cycle de fabrication sont multiples et complexes : la poudre déposée est préchauffée dans le(s) bac(s) d'alimentation ; la couche qui vient d'être fondue est maintenue à une température suffisamment élevée pour prévenir une cristallisation prématurée entraînant un retrait et une

possible déformation; les polymères ont un caractère semi-transparent vis-à-vis du rayonnement laser et ne l'absorbent que partiellement; bien que des consignes de température soient appliquées sur ses parois, les gradients thermiques dans le bac de fabrication sont inévitables en raison de la mauvaise conductivité thermique des polymères. De plus, le caractère granulaire du lit de poudre nécessite d'introduire soit des lois d'homogénéisation adéquates soit des approches prenant en compte le caractère discret du milieu. Toute cette « histoire thermique » conditionne la consolidation de la pièce et sa microstructure finale.

2.1. Interaction laser-poudre

Dans l'approche milieu continu, l'énergie transmise du faisceau laser au matériau est souvent modélisée comme un flux de chaleur avec une distribution de type gaussienne. Dong et al. [2] ont développé un modèle à base d'éléments finis 3D pour prédire l'évolution de la température et de la densité dans les poudres de polymères amorphes frittées, où le flux de chaleur est considéré comme une source de chaleur surfacique. Labeas et al. [3] et Defauchy [1] ont utilisé la loi de Beer-Lambert pour estimer l'atténuation de l'énergie laser dans le lit de poudre. Dans tous ces travaux, l'effet de la diffusion sur l'interaction laser-particules est ignoré. Ilea et al. [4] ont utilisé la méthode de Monte Carlo basée sur la théorie de Mie pour analyser l'effet de diffusion sur le faisceau laser dans un lit de poudre de polymère non-absorbant.

Une analyse bibliographique très poussée est proposée dans la thèse de Liu [5]. À notre connaissance, la plupart, sinon toutes les études sur la diffusion thermique dans ces milieux granulaires, utilisent la méthode des éléments finis (FEM) et considèrent le lit de poudre comme équivalent à un milieu homogène. De plus, ces modèles ignorent souvent l'effet de la diffusion sur la distribution de la puissance du laser dans le lit de poudre.

Dans ce travail, nous avons considéré une distribution Gaussienne de la puissance du laser et développé une méthode de lancer de rayon couplée avec la méthode de Monte-Carlo pour simuler le phénomène de diffusion dans le matériau. Pour cela, nous nous sommes basés sur la théorie de Mie qui décrit le déplacement de la lumière dans des milieux granulaires dont la taille des particules est de l'ordre de 5 fois la longueur d'onde du rayonnement (cf Figure 3).

Cela a permis d'apporter des améliorations aux modélisations existantes et offre un certain nombre d'avantages dans la définition du processus de fusion des couches de polymère:

- avoir la forme réelle de la répartition des flux de chaleur dans la poudre,
- suivre localement l'évolution des particules de matière grâce à l'utilisation de la méthode des éléments discrets.

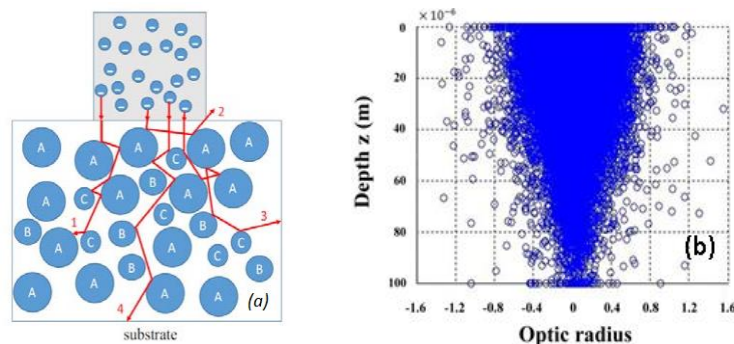


Figure 3 : Interaction laser poudre de polymère: (a) phénomène de réfraction, (b) distribution du flux de chaleur apporté par le laser dans la poudre.

On remarquera sur la Figure 3b que la distribution du flux de chaleur dans la poudre a une forme complexe (conique avec atténuation dans l'épaisseur). La distribution est plus large et plus intense en surface qu'en profondeur, ce qui diffère des approches traditionnelles, et présente un sens physique plus réaliste

2.2. Validation de la méthode de Monte Carlo/ lancer de rayon

Il est difficile de trouver dans la littérature des résultats de simulations semblables à la nôtre. Cependant le travail de Gusarov et al. [6], sur le rayonnement dans les milieux granulaires s'y rapproche. Nous proposons une comparaison des résultats à ceux de Gusarov et al. qui ont proposé un modèle 3D (2D axisymétrique) de l'équation de transfert radiatif avec une résolution numérique basée sur la méthode des ordonnées discrètes.

La figure 4 présente une comparaison de la répartition de l'énergie radiative 2D pour différents albédos ρ . Les flux radiatifs sont normalisés par rapport au flux incident q_0 , $\bar{q}_z = q_z/q_0$ dans des coordonnées adimensionnées $\tau_r = \alpha r$ et $\tau_z = \alpha z$, ($\tau_z = 0$ sur la surface). L'albédo $\rho = \frac{\alpha_{sca}}{\alpha}$ caractérise l'effet de la diffusion sur le transfert par rayonnement, α étant le coefficient d'atténuation.

Quand $\rho = 0$, et le flux radiatif est entièrement et directement absorbé par les particules (pas de diffusion). La comparaison (Fig. 4) montre que les résultats de notre méthode sont en bon accord avec ceux de la littérature, et constitue une validation de notre modèle.

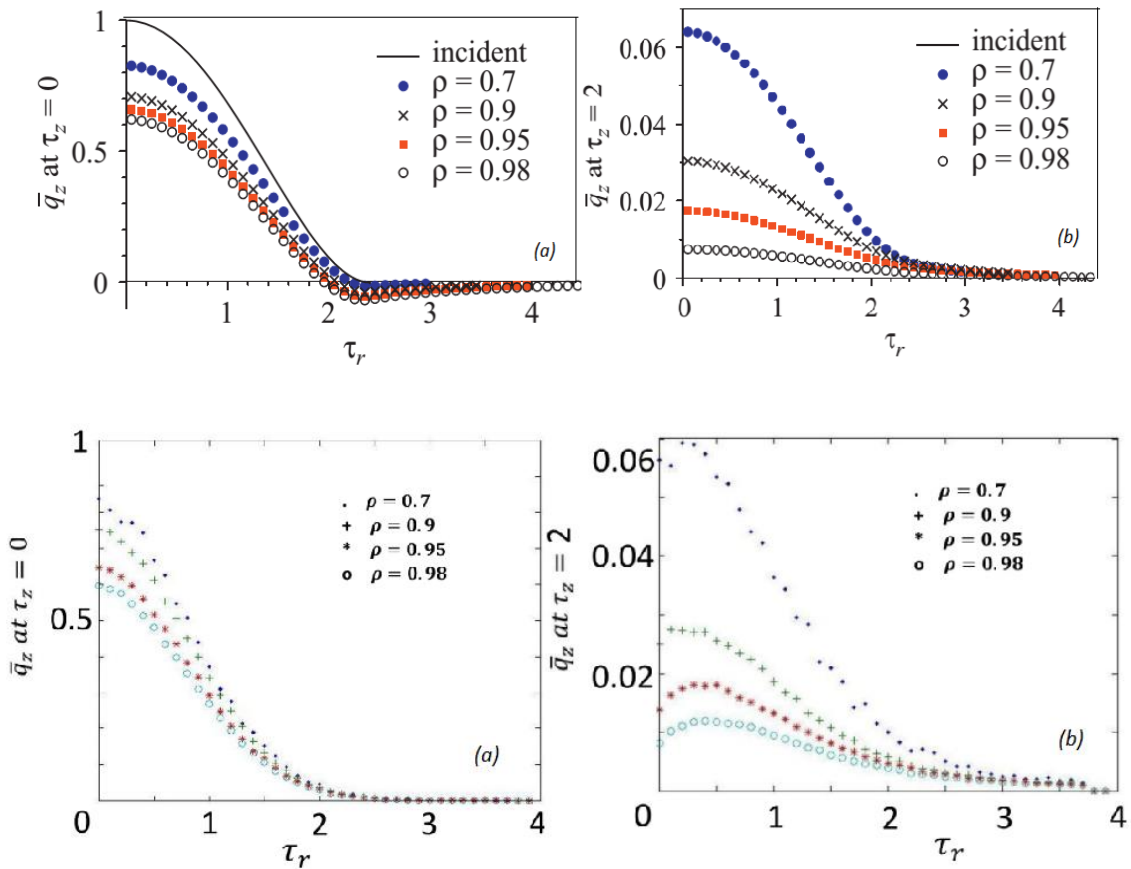


Figure 4 : Distribution normalisée de l'intensité du laser dans la poudre, pour deux valeurs de l'épaisseur optique $\tau_z=0$ (surface supérieure) et $\tau_z=2$ (surface inférieure), à différents albédos ρ : (a) (b) résultats de Gusarov et al. [6]; (c) (d) résultats de ce travail.

On remarquera que pour des albédos proches de 1 et vers l'extérieur du faisceau, des valeurs négatives de flux sont proposées par Gusarov, dues à la prise en compte de la rétrodiffusion (backscattering), ce qui est négligé dans notre cas. De même, notre modèle prévoit un minimum local au centre du faisceau. Ce phénomène est lié à la nature même des méthodes de lancer de rayon, basées sur une description aléatoire et statistique. Le phénomène est atténué en augmentant le nombre de rayons lancés, au prix d'un temps de calcul plus élevé.

2.3. Transferts thermiques dans le matériau

Le passage du faisceau laser ne dure que quelques fractions de seconde, selon la vitesse de balayage, puis le matériau commence à subir des transformations multiples: transfert de chaleur dans les couches, fusion, coalescence des particules, diffusion du gaz emprisonné entre ces dernières, refroidissement, cristallisation, retrait et déformation de la pièce suite à la génération des contraintes dans le matériau.

Afin d'illustrer l'importance du choix de la méthode de description des phénomènes, la Figure 5, issue de Liu [4, 7,8], présente une comparaison entre l'évolution de la température dans l'épaisseur d'une couche de poudre durant un passage du faisceau laser, via une approche de type Beer-Lambert (Fig. 5a) ou en prenant en compte la diffusion de Mie (Fig. 5b).

Dans la simulation numérique, 20308 sphères de diamètre de 50 μm sont déposées de manière aléatoire dans une boîte de dimensions 2000 μm * 1000 μm * 1200 μm . Le faisceau laser balaye le lit de poudre dans la direction longitudinale avec des vitesses différentes. Le diamètre ϕ du faisceau laser est de 0,7 mm, avec une puissance $P = 50\text{W}$. La température initiale T_o du lit de poudre et la température ambiante T_a sont les mêmes (293,15 K). La densité, la conductivité thermique k , la chaleur spécifique initiale C_{po} des particules et la chaleur latente de fusion ΔH sont respectivement de 1030 kg/m^3 , 0,13W/mK, 2500 J/kgK, 90,8 KJ/kg. La chaleur massique effective C_p dépend de la température. Les températures de début et de fin de fusion sont respectivement 448 K et 507 K. Le coefficient d'atténuation effectif de la loi de Beer-Lambert $\alpha = 9000 \text{ m}^{-1}$. La simulation est réalisée par un code développé sous Fortan.

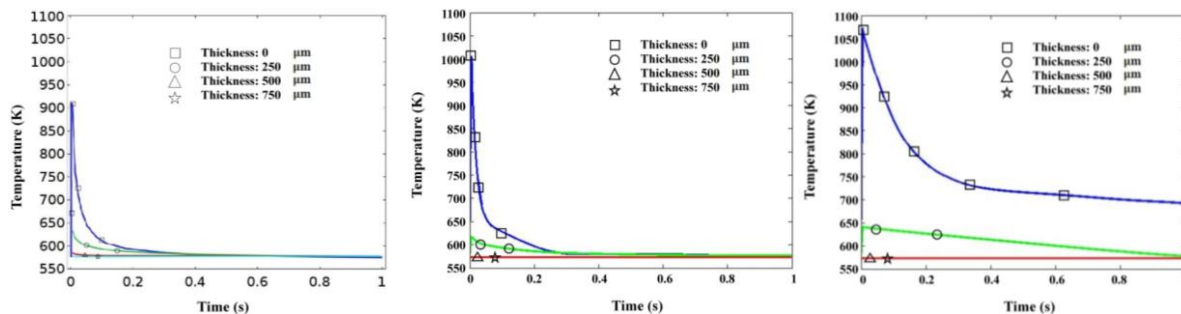


Figure 5 – Evolution de la température à différentes épaisseurs dans la poudre: modèle par éléments finis et atténuation de type Beer-Lambert [1] (à gauche), méthode par éléments finis et théorie de Mie (au centre) et méthode des éléments discrets du présent travail (à droite).

Les résultats de la figure (5) montrent un gradient thermique important dans la couche, bien représenté par la méthode des éléments discrets, alors que la méthode des éléments finis en milieu homogène équivalent prévoit une homogénéisation de la température très rapide après le passage du laser. De plus, l'introduction de la diffraction par la théorie de Mie, même avec une approche Eléments Finies et milieu homogène (Figure du Centre), apporte une amélioration dans la description des températures en surface et des temps d'homogénéisation thermique. Afin de comparer les mêmes phénomènes, nous avons choisi de prendre les mêmes hypothèses et les mêmes données matériau que l'auteur [1]. Notamment, l'hypothèse de négliger l'enthalpie de changement de phase est considérée dans ce calcul pour des besoins de

comparaison. Elle est corrigée dans la suite de nos simulations, en considérant dans l'équation de bilan thermique, une méthode de chaleur spécifique modifiée, détaillée dans Peyre et al. [9]. Cette correction conduit d'ailleurs à réduire les valeurs maximales des températures atteintes, qui semblent sur ces calculs dépasser les valeurs de pyrolyse du polymère.

Après la fusion, la coalescence et la densification sont deux phénomènes primordiaux, dont les cinétiques conditionnent la porosité et donc la qualité finale du produit. Plusieurs travaux consacrés aux cinétiques de coalescence existent dans la littérature, mais ils concernent des particules isolées ou des procédés classiques (rotomoulage) dans lesquels les cinétiques thermiques sont différentes [10-11]. Un effort important reste donc à accomplir afin de caractériser ces phénomènes, surtout le mécanisme d'évacuation du gaz menant à la densification de ce milieu au comportement viscoélastique.

Ces phénomènes doivent avoir lieu avant le début de la cristallisation, sans quoi les poches de gaz emprisonnées forment des porosités importantes, préjudiciables au comportement mécanique de la pièce. Cela engendre une contrainte supplémentaire sur le procédé, particulièrement pour des polymères semi-cristallins, dont les températures de fusion et de cristallisation sont parfois très proches, comme le montre la figure 6 [12], représentant la fenêtre de processabilité caractérisée grâce à des mesures calorimétriques.

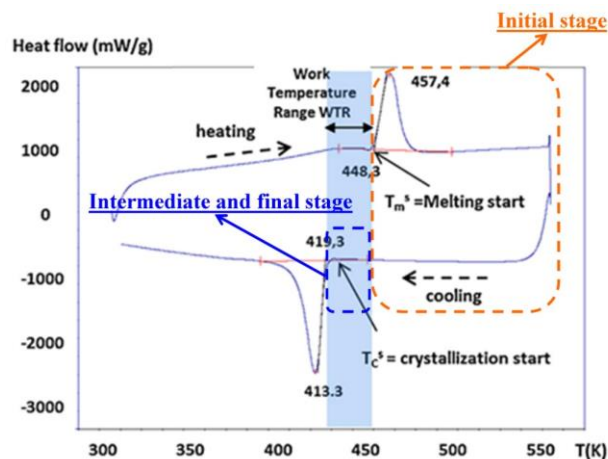


Figure 6 : Diagramme de DSC illustrant la fenêtre de mise en œuvre pour le procédé de fusion laser [12]: T_c et T_m , températures de cristallisation et de fusion, respectivement.

Dans ce travail, issu de la thèse de Liu au laboratoire [4], nous avons démontré que la méthode des éléments discrets permet de mieux comprendre la physique de transformation des couches de polymère. Néanmoins, cette technique est coûteuse en temps de calculs et ne s'applique donc qu'à des domaines de taille très réduite.

La coalescence est prise en compte dans ce travail via un modèle viscoélastique tiré des travaux de Bellehumeur et al. [10], établissant un bilan des forces visqueuses et de tension de surface entre particules sphériques.

La densification résultant de la diffusion du gaz dans le milieu viscoélastique est modélisée comme proposé par Pokluda et al. [11], en supposant que la cinétique de réduction de bulles est contrôlée par la différence de pression entre le polymère liquide et la poche de gaz. On a ainsi proposé une prédiction des dimensions (largeur et profondeur) de la zone fondue (liquide) lors du passage du faisceau laser, en fonction de certains paramètres du procédé, notamment la puissance du laser. La figure 7 présente une comparaison concluante entre des mesures expérimentales réalisées par une équipe italienne [12] et nos prédictions numériques, dans le cas d'un PA12 [5].

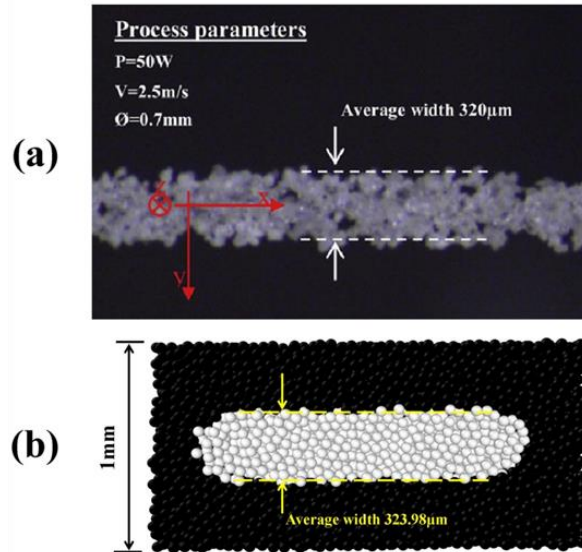


Figure 7 : Vue de dessus du volume de matière fondu et mesure de la largeur moyenne : (a) mesure expérimentale [12], (b) simulation numérique.

Il existe peu de résultats expérimentaux alimentant la littérature, ce qui est d'ailleurs un des challenges à venir. En conséquence, nous n'avons pu réaliser de comparaison de l'évolution de la géométrie de la zone fusionnée qu'en certains points, en fonction de la densité d'énergie utilisée. Néanmoins un bon accord est obtenu, comme le montrent la figure 7.

Ces résultats confortent la validité de l'approche de l'interaction laser matière par la théorie de Mie. Bien que ce genre de modélisation ne soit pas très adapté pour un suivi direct du procédé, car nécessitant des temps de calcul importants, il permet néanmoins d'accéder à de précieuses informations, nécessaires à la compréhension des mécanismes de transformation du polymère lors de la fusion laser. Ce calcul permet notamment d'avoir accès à l'histoire thermique de chaque couche dans le matériau en fonction des paramètres du procédé. La Figure 8 montre, de manière explicite, l'évolution de la température en fonction du temps, pour 5 couches successives d'un PA.12, dans la face d'un cube de dimensions $2 \times 2 mm^2$.

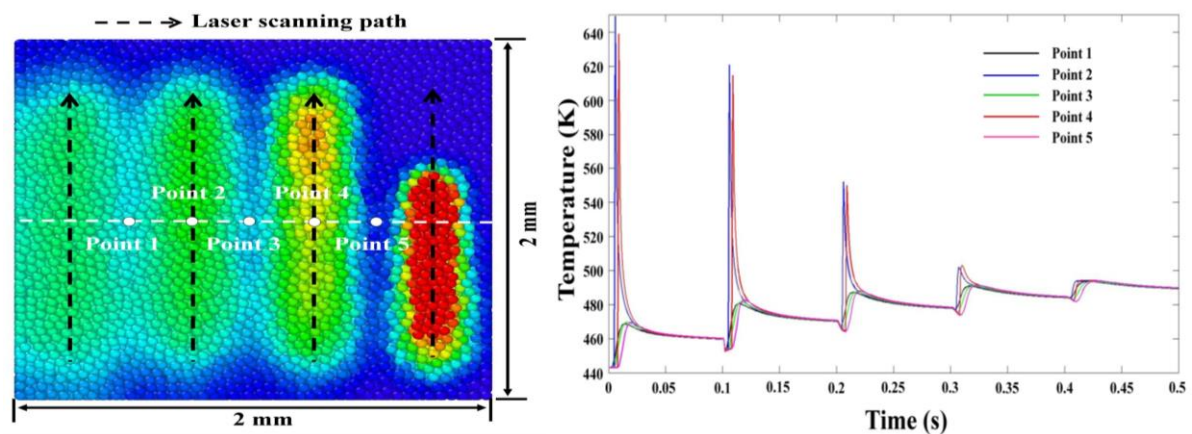


Figure 8 : Champ de température global en surface et évolution en fonction du temps de la température en un point pour cinq couches successives de poudre.

Ces simulations numériques, bien que très utiles pour la compréhension des phénomènes et pour l'optimisation du procédé et de la qualité des pièces, nécessitent des validations expérimentales pertinentes. Aujourd'hui, aussi bien du côté académique qu'industriel, ce

travail reste à accomplir, car il existe peu de données expérimentales publiées qui permettraient de valider les modèles et d'alimenter les logiciels de pilotage des procédés.

3. Conclusion

Afin de rendre la fabrication additive viable industriellement et bien exploiter ses avantages potentiels par rapport à la fabrication conventionnelle, il est nécessaire d'améliorer les propriétés mécaniques des pièces, leur respectabilité, développer de nouveaux matériaux et augmenter la vitesse de production. Ces défis sont liés au manque de compréhension de l'impact des paramètres du procédé sur les différents phénomènes physiques qu'ils induisent, et donc des relations entre procédé, structure et comportement final des objets résultants.

Dans ce travail, nous avons développé un modèle multi-physique, basé sur les méthodes des éléments discrets et de Monte-Carlo/Lancer de rayons, pour mieux comprendre les mécanismes physiques liés à ces procédés afin de proposer des solutions pour leur optimisation. Les résultats sont corroborés par des résultats expérimentaux et théoriques de la littérature.

Les calculs proposés montrent que la diffusion du rayonnement influence fortement la distribution de l'énergie laser dans le milieu granulaire, et conditionne ainsi l'histoire thermique du matériau, qui elle-même conditionne les évolutions de la structure et donc du comportement final des pièces fabriquées par frittage.

Références

- [1] D. Defauchy, Simulation du Procédé de Fabrication Directe de Pièces Thermoplastiques Par Fusion Laser de Poudres, *Ph.D. Thesis*, Arts et Métiers PatisTech, Paris, France, (2013).
- [2] L. Dong, A. Makradi, S. Ahzi, Y. Remond, Three-Dimensional Transient Finite Elements Analysis of the Selective Laser Sintering Process, *J. Mater. Process. Technol.* 209 (2009) 700-706.
- [3] G.N. Labeas, et al. Optimization of Laser Transmission Welding Process for Thermoplastic Composite Parts using Thermo-Mechanical Simulation, *J. Compos. Mater.* 44 (2010) 113-130.
- [4] M. Iliea, J-C. Kneip, S. Matte, A. Nichici, C. Roze, T. Girasole, Laser beam scattering effects in non-absorbent inhomogenous polymers, *Opt. Lasers Eng.* 45 (2007) 405-412.
- [5] X. Liu, Numerical modeling and simulation of Selective Laser Sintering in polymer Powder Bed, *Ph.D. Thesis*, INSA de Lyon, France, (2017).
- [6] A.V. Gusarov, I. Smurov, Radiation Transfer in Metallic Powder Beds Used in Laser Processing, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 111 (2010) 2517-2527
- [7] X. Liu, M. Boutaous, S. Xin, D. Siginer, "Modeling the radiative heat transfer in selective laser sintering of polymers: scattering effect", *Proceedings of the ASME IMECE2015*, Houston, (2015).
- [8] X. Liu, M. Boutaous, S. Xin, Scattering effect in radiative heat transfer during selective laser sintering of polymers, *19th International ESAFORM Conference*, 27-29 April, Nantes (2016).
- [9] P. Peyre et al. Experimental and numerical analysis of the selective laser sintering (SLS) of PA12 and PEEK semi-crystalline polymers, *J. Mater. Process. Technol.* 225 (2015) 326-336.
- [10] C. Bellehumeur et al. The role of viscoelasticity in polymer sintering, *Rheol. Acta*, 37, 270-278, (1998)
- [11] O. Pokluda et al. Modification of Frenkel's Model for Sintering, *AIChE Journal*, 43, (1997), 3253-3256.
- [12] A. Franco A, M. Lanzetta and L. Romoli, "Experimental analysis of selective laser sintering of polyamide powders: an energy perspective", *Journal of Cleaner Production*, 18, (2010), 1722-1730.