

Simulation C-NEM du procédé de Fusion Laser Sélective de thermoplastiques (SLM)

Denis DEFAUCHY, Gilles REGNIER, Yann ROUCHAUSSE et Patrice PEYRE

PIMM, UMR 8006 CNRS – Arts et Métiers, 151 Bd de l'Hôpital, 75013 Paris

Résumé

Les pièces thermoplastiques fabriquées à partir de poudre par fusion laser sélective sont de plus en plus utilisées dans l'aéronautique et l'espace. Ce procédé est intéressant car il ne nécessite aucun outillage et offre la possibilité de créer des géométries complexes quasiment sans limitation géométrique. Mais, les propriétés mécaniques des pièces sont très liées à la coalescence des grains et à la densification du matériau lors du procédé, qui dépendent de paramètres matériau (viscosité, tension de surface, géométrie des grains, absorptivité laser, propriétés thermiques) et procédé (température de préchauffage, puissance laser, vitesse laser, diamètre laser, épaisseur des couches). L'objectif de nos travaux est de comprendre et d'optimiser le phénomène de coalescence des grains de poudre lors du procédé.

Pour cela, nous développons une simulation numérique bi dimensionnelle du procédé à l'aide de la méthode C-NEM (Constrained Natural Element Method). Un travail particulier est effectué pour représenter l'interface liquide/air afin de prendre en compte au mieux l'action de la tension de surface. Le maillage est adapté à la courbure locale en surface et en volume près des interfaces. L'interaction laser/matière est modélisée par un modèle de Beer-Lambert qui a été identifié par des mesures d'absorption d'un faisceau au travers du lit de poudre.

Ainsi, nous pouvons analyser l'influence des paramètres matériau et procédé sur une tranche de couche de poudre afin d'obtenir des informations sur le procédé à l'échelle microscopique. La géométrie et l'empilement des grains de poudre ont été modélisés à partir de mesures en tomographie par absorption de rayons X. Nous pouvons évaluer la qualité du soudage des grains dans la profondeur de la couche et l'état de densification du matériau par un critère basé sur l'évolution de la courbure des interfaces.

1- La fabrication additive par laser de thermoplastiques

1.1. Le procédé de fabrication additive

Le procédé de fabrication directe par fusion laser sélective peut-être mis en œuvre sur des polymères aptes à être soudés : matériaux amorphes et semi cristallins. Les pièces sont créées couche par couche par fusion laser ($\text{CO}_2 - 10.6 \mu\text{m}$) locale d'un lit de poudre. La poudre est d'abord stockée dans un réservoir d'alimentation préchauffé. Elle est ensuite déplacée à l'aide d'un rouleau ou racleur jusqu'à la zone de fabrication. Un second préchauffage par rayonnement infra rouge porte la poudre à une température proche de sa température de fusion (polymère semi cristallin) ou de transition vitreuse (polymère amorphe). La fusion laser permet de fusionner la zone voulue en apportant juste l'énergie nécessaire au changement d'état. Le plateau de fabrication descend ensuite d'une épaisseur donnée, laissant la place pour la couche suivante. Cette nouvelle couche induit un premier refroidissement du polymère en fusion et sa cristallisation éventuelle, puis le refroidissement global est maîtrisé en profondeur dans la zone de fabrication afin de réduire les distorsions du polymère. A la fin de la fabrication, le bac est rempli de poudre non fondue dans laquelle se trouve la pièce solidifiée.

1.2. Etude expérimentale du procédé

L'état final de la matière fondue dépend des conditions expérimentales et de la nature des matériaux. Ainsi, deux poudres (PA6 & PA12) fondues par laser dans les mêmes conditions (Figure 1) ne présentent pas le même état de densification. Alors que le PA6 semble avoir plutôt bien fondu, on remarque que le PA12 présente des grains juste attachés entre eux, n'ayant pas eu le temps de coalescer.

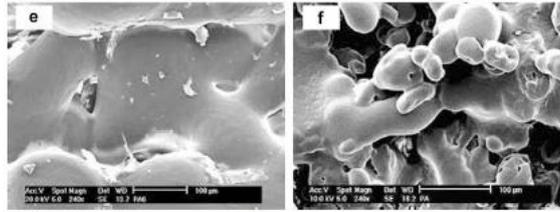


Figure 1: Micrographie (*240) de poudre PA6 (e) et PA12 (f)[1]

Les propriétés mécaniques de résistance à la flexion et de traction des pièces obtenues diminuent très rapidement avec l'augmentation des porosités, celles-ci ne dépendant pas uniquement de la porosité, mais aussi des directions de fabrication.

Globalement, la qualité finale des pièces dépend du cycle thermique local lors de la fabrication, résultat du couplage d'un ensemble de paramètres matériaux et procédé dont il faut quantifier l'importance. Expérimentalement ou bien numériquement, l'importance des divers paramètres du procédé a été étudiée et hiérarchisée. Nous pouvons ainsi classer les paramètres d'influence primaire par ordre d'importance : puissance laser, température de préchauffage, vitesse laser puis épaisseur de couche.

Au niveau thermique, la fenêtre opératoire du procédé est très faible, de l'ordre d'une dizaine de degrés proche de la température de fusion du matériau, avec un intervalle de l'ordre de 10°C aux alentours de 350°C pour les matériaux PEEK. Une mauvaise maîtrise de ces paramètres induit des défauts dans l'état de la matière et dans sa forme.

La majeure partie des travaux réalisés sur ce procédé vise à déterminer empiriquement les meilleures conditions de densification. Aucune approche prédictive n'a concerné l'optimisation du soudage des grains, à l'échelle locale.

1.3. Etude analytique et numérique du procédé

Les premiers travaux réalisés [2,3] pour comprendre la coalescence des grains de fluide ont conduit à la mise en place d'un modèle analytique basé sur des hypothèses réductrices fortes pour décrire la cinétique de coalescence de grains. Ils ont montré que les trois paramètres qui l'influencent sont la viscosité μ , la tension de surface σ et le diamètre des grains d . Plus tard [4], une résolution plus fine des équations de Frenkel et Eshelby est réalisée, et montre que la viscoélasticité des polymères n'a pas d'influence notable sur la cinétique de coalescence. D'autres travaux [5,6] permettent de montrer que le modèle de Frenkel-Eshelby n'est pas tout à fait représentatif de la réalité dans un cas bi dimensionnel (cylindres infinis) à l'aide d'un calcul analytique plus précis tenant compte des équations locales des fluides intégrées sur des volumes simples. Les auteurs mènent alors une analyse poussée sur la cinétique de la coalescence de deux cylindres infinis avec un rapport de diamètre allant de 1 à l'infini, et servira pour la validation des résultats de simulation.

Très peu de travaux ont été réalisés pour simuler la coalescence de grains en 3D. Les premiers modèles sont axi symétriques [7] afin d'analyser l'influence de la présence de plusieurs grains à la suite. Un modèle éléments finis 3D fait son apparition en 1998 [8] et permet d'obtenir des cinétiques de coalescence dans les premiers instants. Beaucoup de difficultés numériques ont été rencontrées [9], du fait de grandes déformations particulièrement, des problèmes de définition de l'interface qui influencent directement la bonne prise en compte de la tension de surface, et des difficultés de convergence numérique de la résolution itérative.

Le but de notre approche est d'aller plus loin dans la simulation de la coalescence et du procédé de fusion laser sélective, et de comparer les résultats de notre modèle à des données expérimentales

2- Mise en place de la simulation du procédé

2.1.Objectif

Nous souhaitons créer un outil permettant de caractériser la qualité de la densification et les épaisseurs de poudre soudée. Cela nous permettra d'analyser l'influence des paramètres matériau et procédé lors de la fusion laser sélective, afin de prédire les meilleures conditions pour obtenir une bonne tenue mécanique des pièces (densité proche de 1), tout en optimisant les temps de fabrication en prédisant les épaisseurs de couches présentant une bonne qualité de soudage.

2.2. Choix de la méthode

Différentes méthodes permettent de simuler la mécanique des fluides. Nous avons choisi d'implémenter la méthode C-NEM (Constrained Natural Element Method). Elle a été développée sur les bases de la NEM [10] qui présente de grandes similarités avec une méthode éléments finis classique. La première différence réside dans l'interpolation des champs faite par de nouvelles fonctions de formes (Sibson), qui présentent la particularité de ne pas être nulles là où les fonctions de formes éléments finis linéaires le sont (frontières des éléments). Ainsi, on ne se limite plus à des éléments, c'est pourquoi on parle de méthode sans maillage. La deuxième différence réside dans l'intégration SCNI (Stabilized Conform Nodal Integration) des champs sur le domaine. Concrètement, si la matrice de rigidité et la matrice thermique sont différentes entre les éléments finis et la méthode C-NEM, le reste est inchangé.

Le calcul des fonctions de forme Sibson contraintes est basées sur les cellules de Voronoï autour des nœuds du domaine avec prise en compte des frontières. Le calcul des matrices est effectué à l'aide d'une intégration stabilisée (valeur moyenne du gradient sur des sous domaines, appliquée aux nœuds – Intégration nodale), avec comme support les cellules de Voronoï autour des nœuds tronquées par les frontières. L'intégration SCNI donne de meilleurs résultats qu'une intégration par points de Gauss du fait de la forme rationnelle des fonctions de forme Sibson. Le degré d'interpolation de la pression doit être une fois inférieur à l'interpolation des vitesses.

Cette méthode, à mi chemin entre les méthodes éléments finis et les méthodes sans maillages, présente la particularité de très bien prendre en compte l'influence des nœuds à proximité d'un point d'évaluation (Figure 2 [10]). Les diamètres des cercles rouges autour des nœuds représentent la contribution de chaque fonction de forme à l'interpolation au point x (point central).

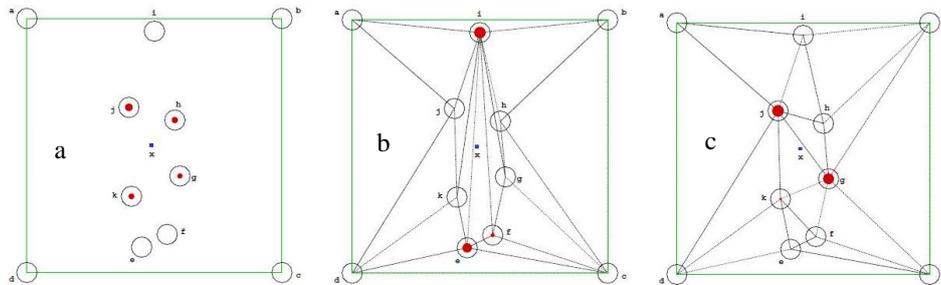


Figure 2: Comparaison de l'influence des nœuds périphériques – NEM (a) – FEM (b & c)

En éléments finis, on voit que le maillage a une grande influence sur l'interpolation des champs, et que ce ne sont pas forcément les nœuds les plus proches qui sont pris en compte, alors que la méthode des éléments naturels prend en compte tous les plus proches voisins selon leur proximité.

L'un des avantages de cette méthode est de ne pas rencontrer de problèmes lorsque des nœuds se retrouvent alignés, alors qu'en éléments finis, cela induirait des éléments plats problématiques avec nécessité de faire du remaillage.

Les conclusions de la thèse d'Illoul [10] sont les suivantes : « L'approche CNEM donne des résultats d'une qualité supérieure aux éléments finis linéaires, que le maillage éléments finis soit optimisé ou non. Il faut cependant noter l'importance du gradient stabilisé. Ainsi, si une démarche gradient stabilisé est appliquée à l'interpolation éléments finis, pour un maillage de Delaunay ou un maillage optimisé, les approches CNEM et éléments finis donnent, en élasticité linéaire, des résultats de qualité similaire ».

Cette méthode récente a été mise en place dans le cadre de la simulation du procédé de cisailage adiabatique [10], et a été utilisée récemment pour simuler le soufflage de bouteilles [11], le perçage laser [12] et la nano impression (Teyssedre et al., Projet ANR SINCRONE).

2.3. Mise en place du code hydrodynamique

Dans un premier temps, nous mettons en place une simulation isotherme de coalescence de deux grains, puis de coalescence d'un grain sur un support, en partant des équations locales d'équilibre pour un fluide newtonien dans lequel on néglige les effets d'inertie (1).

$$\begin{cases} \operatorname{div} \sigma + f_d = 0 \\ \sigma = -pI + 2\mu D \\ \operatorname{div}(V) = 0 \end{cases} \quad (1)$$

avec σ le tenseur des contraintes, f_d les efforts volumiques appliqués, p la pression hydrostatique, I le tenseur identité, μ la viscosité, D le tenseur des taux de déformation et V la vitesse.

A l'aide d'une formulation variationnelle, nous intégrons ces équations sur le domaine et mettons en place un système usuel $KU = F$ à résoudre par une méthode itérative après quelques modifications de la forme du système afin de le rendre convergent (prise en compte d'un caractère quasi incompressible du fluide). Les nœuds sont ensuite déplacés à l'aide des vitesses déterminées. La tension de surface est intégrée au vecteur F , appliquée sur chaque nœud par l'intermédiaire d'un terme de contour analogue à une pression.

Nous avons choisi d'adapter le pas de temps aux vitesses calculées à chaque nœud, car la prise en compte de la tension de surface décrite ci-dessus induit des mouvements locaux d'oscillation de frontière, et nous avons choisi de limiter la rotation locale des segments autour de chaque nœud à une valeur angulaire (minimisation des rotations locales à l'aide des formules d'Al Kashi).

La méthode C-NEM permet de ne pas avoir à remailler globalement. Cependant, nous avons dû ajouter des procédures de remaillage local des frontières dépendant de la courbure locale. Ainsi, la frontière est remaillée avec un critère en nombre de degrés par nœud. Le maillage en volume près des frontières doit être adapté lui aussi, nous avons choisi de respecter un facteur de forme des triangles liés aux nœuds de l'interface. Nous avons choisi d'étudier l'évolution de la courbure moyenne de l'interface adimensionnée par la courbure moyenne initiale, qui lors de la simulation doit évoluer de 100 % à une valeur plus faible. Nous remaillons donc tous les 1% d'évolution de cette courbure adimensionnée. Enfin, les nœuds en volume, créés proche des interfaces, sont supprimés tous les 5 % d'évolution de la courbure après leur création, afin que ceux-ci ne restent pas inutilement loin des interfaces suite à des mouvements importants.

La présence de cavités nous impose d'ajouter des conditions de Lagrange sur la variation de leur volume afin de les maintenir dans le domaine.

La viscosité suit une loi d'Arrhenius, les nœuds solides ne sont pas intégrés au calcul (simplification du système à résoudre) et l'état liquide/solide suit la physique des matériaux semi cristallins. Le matériau devient liquide en passant au dessus de sa température de fusion (T_f), et solide en dessous de sa température de cristallisation (T_c).

2.4. Mise en place du code thermique

La figure 3 présente un modèle du domaine que nous souhaitons étudier. Le polymère apparaît en bleu, et la zone d'étude contient quelques grains de polymère. Les contours du domaine (en rouge) sont maintenus à la température de préchauffage, un laser parcourt le domaine de gauche à droite, modélisé par une action volumique, et un flux d'échange par convection avec l'air est représenté par les flèches bleues. Nous avons fait apparaître les conditions limites en déplacement: le bas du domaine est totalement bloqué et les bords latéraux sont bloqués dans leur mouvement horizontal, assez loin de la zone d'étude.

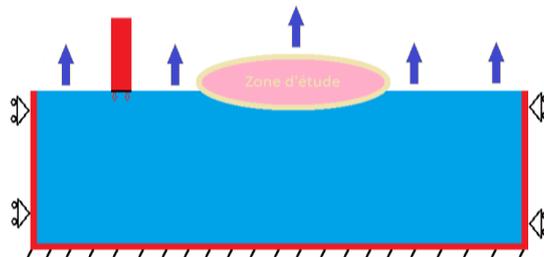


Figure 3 : Conditions aux limites de simulation

Nous partons de l'équation locale de la chaleur (2).

$$\lambda \Delta T + P = \rho c \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2)$$

avec T la température (K), λ la conductivité thermique ($W.m^{-1}.K^{-1}$), ρ la masse volumique ($Kg.m^{-3}$), c la chaleur spécifique massique du matériau ($J.Kg^{-1}.K^{-1}$), P la puissance produite au sein du matériau ($W.m^{-3}$).

Nous mettons alors en place une formulation variationnelle et déterminons la température des nœuds au pas suivant par un schéma implicite.

Un travail particulier a été réalisé afin de déterminer et modéliser l'interaction laser/matière. Sur le banc d'essai développé au laboratoire [14], nous avons mesuré la transmission d'un faisceau laser CO_2 à travers des couches de poudre de différentes épaisseurs et nous avons déterminé le coefficient d'extinction de la poudre en utilisant un modèle de Beer-Lambert (3). Un travail important a été réalisé afin de calculer la profondeur sous laser des nœuds sur un domaine présentant des porosités traversées par le rayonnement. Ainsi, nous avons calculé la quantité de vide présente au dessus de chaque nœud du domaine, ayant préalablement déterminé les nœuds de la surface supérieure sous laser.

$$I(z) = (1 - R_e)I_0 e^{-kz} \quad (3)$$

avec I le terme source ($W.m^{-3}$), z la profondeur sous matière (m), R_e la réflectivité laser, I_0 le coefficient de puissance laser ($W.m^{-3}$) et k le coefficient d'extinction laser (m^{-1}).

Le pas de temps déterminé à l'aide des vitesses est ponctuellement diminué pour respecter la convergence numérique de la résolution thermique.

2.4. Validation

Dans un premier temps, nous avons validé le code hydrodynamique en simulant une goutte pendante soumise à la gravité, et en déterminant la tension de surface imposée à l'aide de la mesure de sa géométrie. Nous avons obtenu des résultats parfaits sur une goutte stabilisée.

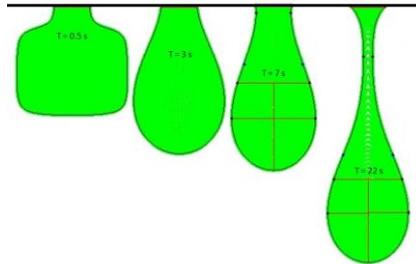


Figure 4 : Simulation d'une goutte pendante

Dans un second temps, nous avons validé le code thermique en imposant un flux de convection sur le bord d'un domaine rectangulaire (Neumann), puis une température (Dirichlet) et avons comparé nos résultats avec les solutions analytiques connues. Nous avons finalement simulé un passage laser et comparé nos résultats avec des simulations sur COMSOL.

3- Premiers résultats de simulation

3.1. Paramètres matériau et procédé

Nous avons étudié les paramètres de la poudre afin d'entrer les données matériau dans la simulation. Ainsi, nous avons déterminé expérimentalement la tension de surface à l'aide de la technique de la goutte pendante et l'évolution de sa viscosité avec la température par des mesures en rhéologie. Puis, nous avons caractérisé la géométrie et l'organisation des grains à l'aide de mesures en microtomographie par absorption des rayons X afin de modéliser le domaine sous CATIA et d'exporter le maillage initial dans Matlab.

Nous présentons la simulation du procédé de fusion laser sélective sur une tranche de couche de poudre de PEEK. La zone étudiée est carrée de côté 500 μm . Les paramètres matériaux sont donc ceux d'un PEEK classique (T_f 340°C, T_c 300°C, ρ 1300 $Kg.m^{-3}$, C_p 1300 $J.Kg^{-1}.K^{-1}$, λ 0.25 $W.m^{-1}.K^{-1}$, k 13000 m^{-1} , coefficient d'échange par convection 13 $W.m^{-2}.K^{-1}$, réflectivité laser de l'ordre de 20 %). Notons en particulier que la viscosité de ces matériaux est importante, de l'ordre de 3000 Pa.s, suivant une loi d'Arrhenius.

Nous choisissons une température de préchauffage du polymère et un air ambiant à 290 °C. Enfin, le faisceau laser a une puissance de 5 W, une distribution uniforme en surface, un diamètre de 300 μm , et se déplace à une vitesse de 0.5 $m.s^{-1}$ sur une longueur de 1100 μm .

Lors de la simulation, nous étudions l'évolution de la courbure moyenne de la surface supérieure, adimensionnée à la courbure initiale. De même, nous caractérisons l'état de soudage à l'aide d'un paramètre S (4) calculé à l'aide du temps de reptation du PEEK (5) dont les paramètres sont définis dans la littérature [13]. Lorsque S est nul, le soudage n'a pas eu lieu, entre 0 et 1, il y a soudage partiel, et au dessus de 1, le soudage est parfait.

$$S = \int_{T_f}^{T_c} \frac{1}{t_r(T)} dt \quad (4)$$

$$t_r(T) = A e^{\frac{E}{RT}} \quad (5)$$

$$A = 7,3 \cdot 10^{-6} s ; E = 59000 J.mol^{-1}$$

3.2. Simulation de la fusion d'une tranche de poudre

Nous présentons ci-dessous un résultat de simulation C-NEM du procédé de fusion laser sélective (Figure 5).

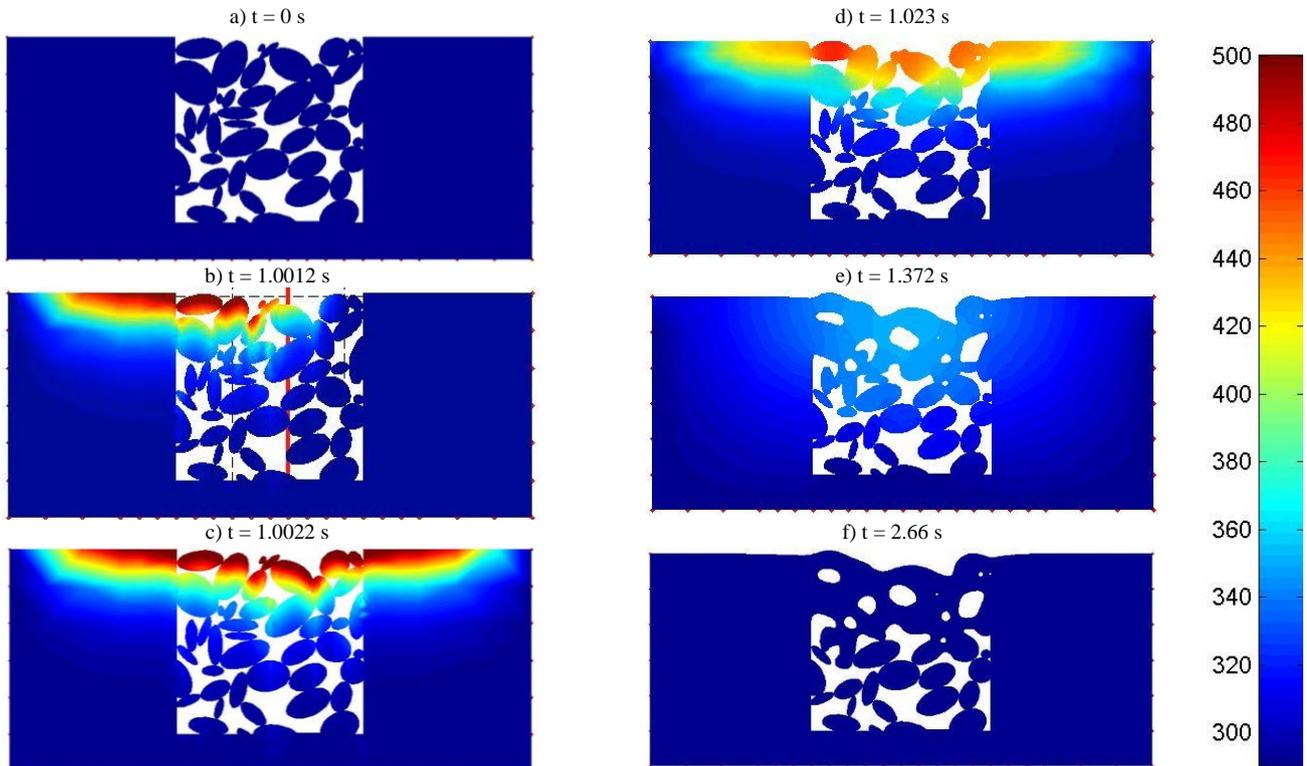


Figure 5 : Simulation du procédé de fusion laser sélective

a) Etat initial – b) Passage laser – c) Fin de passage laser – d) & e) refroidissement – f) Etat final

Le laser chauffe la poudre à 555 °C. Le refroidissement est très rapide, un état de bon soudage est apparu 0.202 s après le passage laser, et la solidification totale 1.66 s après le passage laser. Nous obtenons une profondeur de soudage complet de l'ordre de 330 μm (Figure 6). La courbure adimensionnée atteint alors une valeur de 44 %.

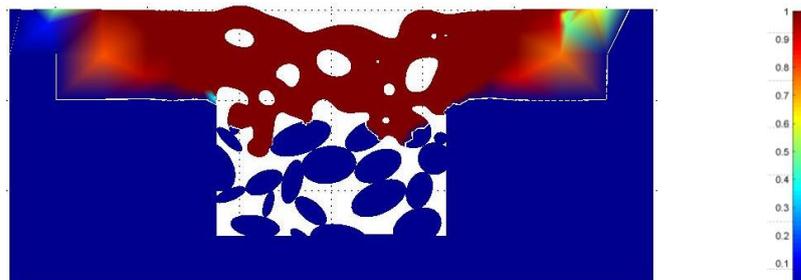


Figure 6 : Etat de soudage (0 non soudé – 1 Soudage parfait)

Conclusions - Perspectives

Ces résultats sont cohérents avec les données fournies par les entreprises partenaires du projet (Poly-Shape, Solution F). En parallèle, la réalisation d'un banc d'essai de fusion laser sélective [14] nous permettra prochainement de comparer nos résultats avec l'expérience. Nous allons en particulier réaliser des tirs laser pour comparer les profondeurs soudées mesurées par microscopie et les vitesses des nœuds du domaine mesurées à l'aide d'une caméra rapide.

Nous serons alors en mesure de mener une étude numérique de l'influence des paramètres matériau et procédé permettant d'analyser leur influence sur la qualité de fusion et de soudage de la poudre, dans le but d'optimiser le procédé en terme de qualité de pièces et de temps de fabrication.

Cette étude a été financée dans le cadre du projet FUI FADIPLAST

Références

- [1] G.Salmoria, J.Leite, R.Paggi, “The microstructural characterization of PA6/PA12 blend specimens fabricated by selective laser sintering”, *Polymer Testing*, **28-7** (2009), 746-751
- [2] J.Frenkel, “Viscous flow of crystalline bodies under the action of surface tension”, *J. Phys.*, **9-5** (1945), 385-391
- [3] J.Eshelby, “Discussion of Seminar on the Kinetics of Sintering”, *Metallurgical Transactions*, **185** (1949), 796–813
- [4] C.Bellehumeur, “Polymer sintering and its role in rotational molding” (1997)
- [5] R.W.Hopper, “Coalescence of two viscous cylinders by capillarity: Part I, Theory”, *Journal of the American Ceramic Society*, **76-12** (1993), 2947-2952
- [6] R.W.Hopper, “Coalescence of two viscous cylinders by capillarity: Part II, Shape evolution”, *Journal of the American Ceramic Society*, **76-12** (1993), 2953-2960
- [7] J.I.Martinez-Herrera, J.J.Derby, “Viscous sintering of spherical particles via finite element analysis”, *Journal of the American Ceramic Society*, **78-3** (1995), 645-649
- [8] H.Zhou, J.Derby, “Three-dimensional finite-element analysis of viscous sintering”, *Journal of the American Ceramic Society*, **81-3** (1998), 533-540
- [9] H.Zhou, J.Derby, “An assessment of a parallel, finite element method for three-dimensional, moving-boundary flows driven by capillarity for simulation of viscous sintering”, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **36-7** (2001), 841-865
- [10] A.L.Illoul, “Mise en oeuvre de la méthode des éléments naturels contrainte en 3D. Application au cisailage adiabatique”, 2008
- [11] B. Cosson, L.Chevalier, J.Yvonnet, “Optimization by the C-NEM Method of the Stretch-Blow Molding Process of a PET Bottle Near Tg”, *esaform* (2008)
- [12] J. Girardot, N. Ranc, M. Schneider, V. Favier, “Modélisation du procédé de perçage laser, interaction laser/matière à bas flux”, *2nd Workshop IRM-DSP* (2012)
- [13] C.Nicodeau, “Modélisation du soudage en continu de composites à matrice thermoplastique” (2005)
- [14] Y.Rouchausse, P. Peyre, G. Regnier, D. Defauchy, “Etude expérimentale du procédé de Fusion Laser Sélective de poudres thermoplastiques”, *Laserap '7* (2012)