Моделирование формирования зеренной структуры сплава AlSi10Mg в условиях селективного лазерного сплавления / Е.М. Дымнич, В.А. Романова, А. Бородина, Р.Р. Балохонов. – DOI: 10.15593/perm.mech/2025.5.01 // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2025. – № 5. – С. 5–17.

Perm Polytech Style: Dymnich E.M., Romanova V.A., Borodina A., Balokhonov R.R. Simulation of grain structure evolution in Al-Si alloys during laser powder bed fusion. *PNRPU Mechanics Bulletin,* 2025, no. 5, pp. 5-17. DOI: 10.15593/perm.mech/2025.5.01

пермский политех

ВЕСТНИК ПНИПУ. МЕХАНИКА
№ 5, 2025
PNRPU MECHANICS BULLETIN
https://ered.pstu.ru/index.php/mechanics/index



Научная статья

DOI: 10.15593/perm.mech/2025.5.01
УДК 004.942:548.5

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ЗЕРЕННОЙ СТРУКТУРЫ СПЛАВА AlSi10Mg В УСЛОВИЯХ СЕЛЕКТИВНОГО ЛАЗЕРНОГО СПЛАВЛЕНИЯ

Е.М. Дымнич[1], В.А. Романова[1,2], А. Бородина[1,2], Р.Р. Балохонов[1,2]

[1]Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Российская Федерация
[2]Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Российская Федерация

О СТАТЬЕ

Получена: 17 сентября 2025 г.
Одобрена: 13 октября 2025 г.
Принята к публикации:
25 октября 2025 г.

Ключевые слова:

селективное лазерное сплавление, алюминиево-кремниевые сплавы, термические поля, кристаллизация, зеренная структура, кристаллографическая текстура, EBSD-анализ, метод конечных разностей, метод клеточных автоматов.

АННОТАЦИЯ

Настоящая работа посвящена разработке и валидации модели формирования зеренной структуры алюминиево-кремниевого сплава AlSi10Mg в процессе селективного лазерного сплавления. Разработанная модель включает расчет пространственно-временной эволюции термических полей, вызванных действием лазера, и установление прямой связи между локальной термической историей (градиентами температуры, скоростями охлаждения) с процессом формирования зеренной структуры. Для решения этой задачи предложен подход, объединяющий расчет температурных полей методом конечных разностей и моделирование кристаллизации методом клеточных автоматов. Важной особенностью модели является учет процессов эпитаксиального и конкурирующего типов роста зерен, а также процесса зародышеобразования во множественных ваннах расплава. В рамках реализации метода клеточных автоматов форма растущего дендрита аппроксимировалась октаэдрической поверхностью в соответствии с кристаллографическими особенностями кристаллизации ГЦК сплавов. Разработанная модель была применена для моделирования формирования зеренной структуры при двунаправленной стратегии сканирования. Было показано, что предложенная модель способна адекватно воспроизводить характерные особенности кристаллизации в процессе селективного лазерного сплавления. Приведены результаты валидации построенной модели зеренной структуры сплава AlSi10Mg на основе сравнения геометрических характеристик и кристаллографических ориентаций зерен с экспериментальными данными. Сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными показало качественное и количественное согласие, что свидетельствует о корректном воспроизведении геометрических особенностей зеренной структуры в модели.

© **Дымнич Екатерина Михайловна** – к. ф.-м. н., м. н. с., e-mail: dymnich@ispms.ru
Романова Варвара Александровна – д. ф.-м. н., г. н. с., e-mail: varvara@ispms.ru
Бородина Анжелика – аспирант, e-mail: anzhelika.borodina@ispms.ru
Балохонов Руслан Ревович – д. ф.-м. н., заведующий лабораторией механики структурно-неоднородных сред, e-mail: rusy@ispms.ru

Ekaterina M. Dymnich – PhD in Physical and Mathematical Sciences, Junior Researcher, e-mail: dymnich@ispms.ru
Varvara A. Romanova – Doctor in Physical and Mathematical Sciences, Leading Researcher, e-mail: varvara@ispms.ru
Anzhelika Borodina – PhD Student, e-mail: anzhelika.borodina@ispms.ru
Ruslan R. Balokhonov – Doctor in Physical and Mathematical Sciences, e-mail: rusy@ispms.ru

Эта статья доступна в соответствии с условиями лицензии Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)
This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

SIMULATION OF GRAIN STRUCTURE EVOLUTION IN Al-Si ALLOYS DURING LASER POWDER BED FUSION

E.M. Dymnich[1], V.A. Romanova[1], A. Borodina[1,2], R.R. Balokhonov[1]

[1]Institute of Strength Physics and Material Science SB RAS, Tomsk, Russian Federation
[2]National Research Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation

ARTICLE INFO

Received: 17 September 2025
Approved: 13 October 2025
Accepted for publication:
25 October 2025

Keywords:

selective laser melting, aluminum-silicon alloys, thermal fields, crystallization, grain structure, crystallographic texture, EBSD analysis, finite difference method, cellular automata.

ABSTRACT

This study focuses on the development and validation of a model for grain structure formation in the aluminum-silicon alloy AlSi10Mg during selective laser melting (SLM). The developed model incorporates calculations of the spatiotemporal evolution of thermal fields induced by laser action and establishes a direct correlation between local thermal history (temperature gradients, cooling rates) and grain structure formation processes. To address this challenge, we propose an integrated approach combining finite difference method for temperature field calculations and cellular automaton modeling of crystallization. A key feature of the model is its consideration of both epitaxial and competitive grain growth mechanisms, as well as nucleation processes in multiple melt pools. Within the cellular automaton framework, the growing dendrite morphology was approximated by an octahedral surface, consistent with the crystallographic characteristics of FCC alloy solidification. The developed model was applied to simulate grain structure formation under a bidirectional scanning strategy. Results demonstrate that the proposed model effectively reproduces characteristic solidification features observed in selective laser melting processes. We present validation results comparing geometric characteristics and crystallographic orientations of grains with experimental data. The comparison shows both qualitative and quantitative agreement, confirming the model's ability to accurately reproduce key geometric features of the grain structure.

Введение

Современные аддитивные технологии открывают новые возможности для создания объектов сложной формы с уникальными механическими характеристиками. Одной из наиболее привлекательных перспектив применения аддитивного производства является возможность получения материала с требуемыми свойствами для конкретных условий эксплуатации. Установлено, что ключевым фактором, определяющим механические характеристики и эксплуатационные свойства изделий, изготовленных методами аддитивного производства, является их микроструктура, в частности зеренная структура [1; 2]. Размер, форма и ориентация зерен напрямую влияют на механические свойства конечных продуктов аддитивного производства [3].

Благодаря уникальному сочетанию физико-химических и технологических свойств, оптимально соответствующих требованиям аддитивного производства, алюминиево-кремниевые сплавы (силумины) стали одними из наиболее востребованных материалов для применения в селективном лазерном сплавлении (СЛС) [4]. Эти сплавы, в частности сплав AlSi10Mg, широко применяются в высокотехнологических отраслях, что делает управление их зеренной структурой особенно актуальной задачей. Согласно экспериментальным данным [5–8], структура силуминов, полученных СЛС, существенно отличается от структуры сплавов того же химического состава, но полученных традиционными методами (например, литьем) [9–11]. Формирование сложной микроструктуры, включая зоны с зернами разной морфологии и текстуры, обусловлено экстремальными условиями СЛС: высокой скоростью изменения температуры (10^5–10^7 K/c) [12], высокими температурными градиентами (~10^6 K/м) [13] и неоднократным переплавлением материала при нанесении следующих треков и слоев [14; 15]. В настоящее время подбор режимов СЛС, обеспечивающих оптимальные структуру и свойства, основан на стратегии проб и ошибок, требующей проведения большого количества дорогостоящих испытаний. В связи с этим, разработка моделей численного моделирования, связывающих параметры СЛС с формированием зеренной структуры, критически важна для оптимизации технологии и дальнейшего прогнозирования механических свойств изделий.

Большинство подходов к моделированию, основанных на физике процессов, протекающих в условиях СЛС, комбинируют расчет термических полей и кинетики кристаллизации. Для моделирования термических процессов, характерных для СЛС, предложен ряд моделей и подходов. Среди макроскопических подходов следует отметить модель динамического осаждения [16; 17], подход для расчета эволюции остаточных напряжений методом конечных элементов, рассматривающий порошковый слой как гомогенизированную сплошную среду [18], модели, описывающие динамику ванны расплава с использованием методов конечных элементов и конечного объема или методов Больцмана [19; 16]. Для анализа термической истории в рамках решения краевых задач широко применяют метод конечных разностей (МКР), позволяющий учесть нестационарные тепловые потоки [20].

Для описания эволюции зеренной структуры в процессе СЛС применяются различные геометрические и физически обоснованные методы [20]. Среди последних наиболее распространенными являются методы фазового поля [21–30], метод Монте-Карло [31–33] и метод клеточных автоматов [34–38]. Первые работы по применению метода клеточных автоматов для описания эволюции зеренной структуры в процессе СЛС в сочетании с решением термической задачи методом конечных разностей были выполнены в двумерном приближении [35]. Позднее этот подход был распространен на трехмерный случай [37; 39; 40].

Несмотря на значительный прогресс в области моделирования, задача по построению физически обоснованных моделей формирования зеренной структуры алюминиевых сплавов в условиях СЛС остается актуальной. Среди основных проблем – построение моделей, учитывающих области с различной структурой, существенно отличающейся по размерам, форме и ориентации зерен. Такие модели предполагают достаточно высокую степень детализации для согласия с экспериментальными данными. Еще одной проблемой является учет эффектов, связанных со сложной термической историей, характерной для аддитивных технологий.

Применяемый подход с валидацией на экспериментальных данных был применен для расчета температурных полей, используемых напрямую при описании кинетики кристаллизации. Результаты настоящего исследования вносят вклад в понимание связи между технологическими параметрами СЛС, термической историей и зеренной структурой сплава AlSi10Mg, что необходимо для оптимизации процесса с целью достижения требуемых свойств конечных продуктов изделий аддитивного производства.

1. Модель зеренной структуры

1.1. Моделирование термических полей, возникающих в процессе селективного лазерного сплавления

Характеристики стационарного термического поля, создаваемого установившимся движущимся лазерным лучом в процессе СЛС, были получены путем решения уравнения теплопроводности:

$$\rho(T)c(T)\frac{\partial T}{\partial t}=\nabla\left(k(T)\nabla T\right)+q, \qquad (1)$$

где T – искомая функция температуры; ρ – плотность; c – удельная теплоемкость; k – коэффициент теплопроводности; q – объемный источник тепла; t – время. Значения теплофизических свойств, входящих в уравнение (1), представлены на рис. 1. Параметры ρ, c и k, зависящие от температуры, были рассчитаны с использованием программного обеспечения JMatPro®. Удельные теплоты плавления (474 кДж/моль, рассчитанные по JMatPro®) и парообразования (10 800 кДж/кг [41]) учтены в функции $c(T)$ через соответствующее увеличение теплоемкости в интервале фазового перехода. Уравнение (1) было решено методом конечных разностей с применением явной схемы [37].

В рамках математического описания процесса СЛС источник тепла, имитирующий воздействие лазерного излучения, может быть представлен объемным гауссовым распределением плотности теплового потока [37]. Данное распределение задается в локальной системе координат (x', y', z'), связанной с лазерным пятном, движущимся с постоянной скоростью:

$$q(x',y',z')=\frac{6\sqrt{3Q}}{\pi\sqrt{\pi}R^3c}e^{-3\left(\frac{x'^2+y'^2}{R^2}+\frac{z'^2}{s^2}\right)}, \qquad (2)$$

где Q – мощность источника, зависящая от параметров энерговложения; R – радиус луча; s – характерная глубина источника. Q и s были подобраны в соответствии со значениями ширины и глубины ванн расплава, наблюдаемыми в эксперименте. Система координат источника передвигалась относительно системы координат образца в соответствии со скоростью и траекторией движения луча. Направления, связанные с образцом, будут обозначаться аббревиатурами BD – направление, совпадающее с направлением послойного построения образца; SD – параллельно направлению сканирования и TD – направление, перпендикулярное направлениям BD и SD. Радиус лазерного луча R был равен радиусу луча в эксперименте – 40 мкм. При таком значении R комбинация значений Q = 160 Вт и s = 125 мкм приводит к образованию ванны расплава шириной 200 мкм и глубиной 130 мкм, что полностью соответствовало значениям, наблюдаемым в эксперименте. Такой подбор параметров обеспечил косвенный учет конвекционного члена за счет течения расплава, в явном виде отсутствующего в уравнении (1).

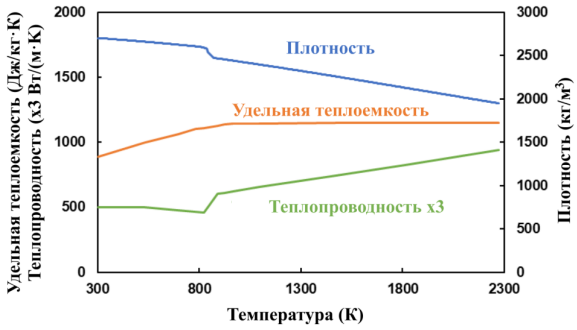


Рис. 1. Теплофизические свойства сплава AlSi10Mg, полученного СЛС

Fig. 1. Thermophysical properties of the AlSi10Mg alloy produced by laser powder bed fusion (LPBF)

При численном моделировании тепловых процессов в трехмерной расчетной области необходимо корректно учесть механизмы теплообмена на границах путем за-

дания граничных условий. На поверхности сканирования тепловые потери, обусловленные конвективным теплообменом с окружающей средой и излучением, задавались граничным условием следующего вида:

$$k(T)\frac{\partial T}{\partial z} = -h(T - T_a) - \varepsilon\sigma_b\left(T^4 - T_a^4\right), \qquad (3)$$

где T_a – значение температуры окружающей среды; h – коэффициент теплопередачи; ε – коэффициент излучения и σ_b – постоянная Стефана – Больцмана. Значения h и ε были взяты из литературы – 50 [39] и 0,2 Вт/(м^2·K) [42] соответственно. Для описания тепловых граничных условий на остальных поверхностях применялся трехмерный аналитический метод Розенталя [43]. Определенные подобным образом граничные условия считаются подходящими для применения, поскольку границы находятся на достаточно большом расстоянии от источника тепла.

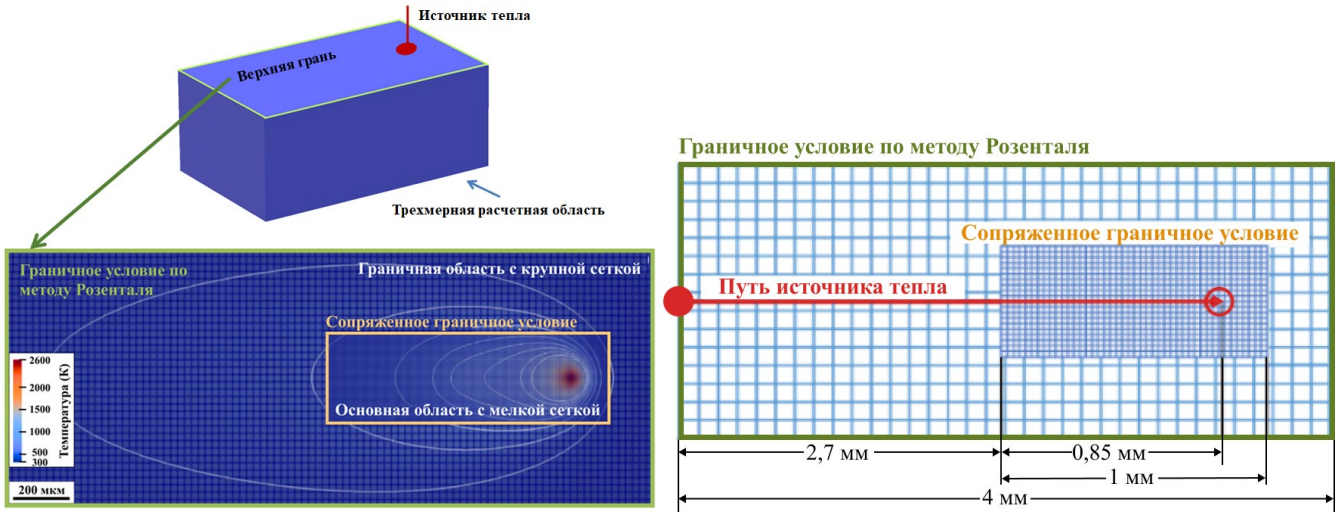
Для оптимизации вычислительных затрат области были аппроксимированы сетками с различной степенью детализации. На каждом временном шаге текущая температура каждого элемента на границе области, аппроксимированной мелкой сеткой (шаг сетки – 2 мкм), определялась с помощью линейной интерполяции температуры ячеек соседней области, аппроксимированной более грубой сеткой (шаг сетки – 12 мкм). Схема подхода проиллюстрирована на рис. 2, *a*. Как видно из рис. 2, *a*, корреляция изотерм двух областей говорит о корректности определенных таким образом граничных условий. В рамках подхода было получено поле температур для объемов с мелкой (1×0,3×0,24 мм^3) и грубой (4×1×0,5 мм^3) сетками.

На рис. 2, *b*, показана траектория движения источника тепла. Для получения стационарного теплового поля источник тепла сканировал область с крупной сеткой до тех пор, пока не достигал области с более мелкой сеткой и не проходил 85 % ее длины. Полученное на этом шаге тепловое поле в области с мелкой сеткой применялось в качестве входных данных для последующего моделирования процесса формирования зеренной структуры.

Стоить отметить, что возникающие в ходе СЛС термические напряжения могут влиять на процесс кристаллизации и в общем случае должны учитываться в модели. Однако в настоящей работе эффекты, связанные с возникновением термических напряжений, не рассматривались.

1.2. Моделирование процесса кристаллизации

Формирование зеренной структуры моделировалось модифицированным методом клеточных автоматов, предложенным ранее в работах [44; 45]. Перечень параметров, использованных в моделировании с применением метода клеточных автоматов и конечных разностей, приведен в таблице. Область моделирования представляла собой объем 800×900×460 мкм^3 (SD×TD×BD), дискретизированный однородной сеткой с шагом 2 мкм (объем ячейки составляет 8 мкм^3). Каждой ячейке был присвоен ряд атрибутов, включая температуру, индекс, индекс зародышеобразования и фазовое состояние. Кристаллографическая ориентация каждого зерна определялась набором углов Эйлера. В качестве входных данных для моделирования кристаллизации в процессе СЛС использовалась поликристаллическая структура, имитирующая структуру опорной пластины с размером зерна 30 мкм со случайным распределением кристаллографических ориентаций [39].



a *b*

Рис. 2. Схемы расчетной области, демонстрирующие подход к постановке граничных условий (*a*), траекторию источника тепла и размеры областей с разбиением сетками разной детализации (*b*)

Fig. 2. Schematics of the computational domain demonstrating the boundary condition setup approach (*a*), the heat source scanning strategy, and the dimensions of regions with different mesh refinement levels (*b*)

Параметры, используемые в моделировании кристаллизации в процессе СЛС методами клеточных автоматов и конечных разностей [43]

Parameters used in the simulation of crystallization during LPBF by cellular automaton and finite difference methods [43]

Параметр (единица измерения)	Значение	Источник
Размер области с крупной сеткой в рамках конечно-разностного моделирования (мм^3)	4×1×0,5	-
Размер области с мелкой сеткой в рамках конечно-разностного моделирования (мм^3)	1×0,3×0,24	-
Размер ячеек для областей с мелкой и крупной сетками в рамках конечно-разностного моделирования (мкм)	2 и 12	-
Мощность источника тепла (Вт)	160	Калибровка
Радиус пятна лазерного луча R (мкм)	40	Эксперимент
Характеристическая глубина источника тепла s (мкм)	125	Калибровка
Температура окружающей среды и начальная температура T_a, T_0 (K)	298	Эксперимент
Скорость сканирования V (м/с)	1,2	Эксперимент
Коэффициент теплопередачи h (Вт/(м^2·K))	50	[35]
Коэффициент излучения ε	0,2	[42]
Температура плавления T_l (K)	873	JMatPro®
Температура кипения (K)	2740	[41]
Удельная теплота плавления (кДж/кг)	474	JMatPro®
Удельная теплота парообразования (кДж/кг)	10800	[41]
Размер расчетной области при моделировании методом клеточных автоматов (мм^3)	0,8×0,9×0,46	
Размер расчетной ячейки в рамках моделирования методом клеточных автоматов (мкм)	2	-
Расстояние между центрами соседних треков (мкм)	110	Эксперимент
Толщина слоя (мкм)	30	Эксперимент
Количество центров зарождения/мм^{3}на границе ванны расплава n	$3\cdot10^7$	-
Стандартное отклонение распределения Гаусса для вероятности зародышеобразования σ (K)	70	-
Параметр инкубационного времени зарождения, C_{inc} (K·c)	$2{,}8\cdot10^{-3}$	[46]

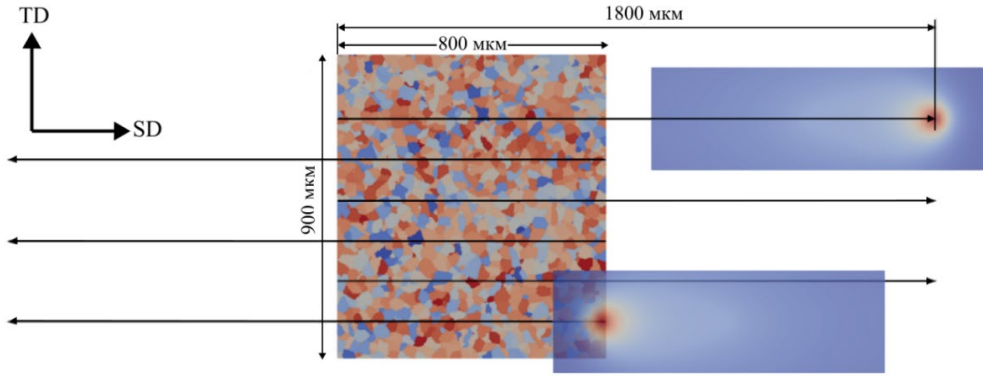


Рис. 3. Вычислительные области и стратегия сканирования (тонкие черные стрелки) для моделирования кристаллизации в процессе СЛС методом клеточных автоматов. Тепловое поле накладывается в начале первого трека и в конце последнего

Fig. 3. Computational domains and scanning strategy (thin black arrows) for simulating crystallization during LPBF process using the cellular automaton method. The thermal field is applied at the start of the first track and the end of the last track

В ходе моделирования опорная пластина использовалась в качестве базового (нулевого) слоя, на котором методом клеточных автоматов была воспроизведена последовательная кристаллизация 12 слоев. Каждый слой формировался в результате шести двунаправленных проходок лазерного излучения, при этом направление сканирования в соседних треках изменялось на противоположное.

Стоит отметить, что на данном этапе моделирования расчет термических полей не выполнялся. Вместо этого для актуализации температурного состояния клеточных автоматов на каждом шаге кристаллизации использовалось ранее смоделированное термическое поле, перемещаемое синхронно с траекторией лазерного воздействия. Такой подход позволил упростить вычислительный процесс, сохранив при этом физическую достоверность моделирования.

Как показано на рис. 3, длина сканирования задавалась больше размера вычислительной области для того, чтобы обеспечить полное попадание зоны расплава в исследуемый участок. На каждом временном шаге считывались данные перемещающегося теплового поля для актуализации информации о температуре в сканируемых ячейках расчетной сетки. Далее был применен подход для обновления агрегатного состояния, индекса зерна и соответствующих ориентаций, предложенный в работе [35]. Данный подход позволил учесть эпитаксиальный рост зерен, их конкурентное взаимодействие,

а также процессы гетерогенного зародышеобразования, обеспечивая тем самым более точное описание роста зерен в ходе кристаллизации.

При повышении температуры ячейки до температуры плавления ее состояние изменялось на жидкое. Смежные с ней ячейки переводились в переходное состояние и подчинялись одному из механизмов роста кристалла. Центр роста, ассоциированный с главными диагоналями дендрита, ориентированными вдоль направления <001> (характерного для кристаллизации ГЦК-металлов), проецировался на центр каждой граничной ячейки. Для математического описания морфологии дендрита использовалась аппроксимация октаэдрической поверхностью в соответствии с моделью Gandin и Rappaz [47]. Скорость роста дендритов v в сплаве AlSi10Mg была описана как функция переохлаждения ΔT (детальное описание представлено в [37]) на основе модели Kurz – Giovanola – Trivedi [48]:

$$v = 7{,}3\times10^{-8}\Delta T^{3{,}34}. \quad (4)$$

Данный подход позволил учесть кинетику кристаллизации с учетом термодинамических и микроструктурных особенностей процесса. Величина временного шага δt рассчитывалась на основе максимальной скорости роста в соответствии с критерием, зарекомендовавшим себя в ряде исследований [49–51]. Данный способ позволяет адаптивно выбирать шаг интегрирования, обеспечивая точное воспроизведение кинетики кристаллизационных процессов:

$$\delta t \le f\frac{\Delta x}{v_{\max}}. \quad (5)$$

Здесь $f \le 1$ – константа (в настоящей работе значение равнялось 0,25) и Δx – размер ячейки. Для минимизации эффектов от анизотропии, связанной с искусственно введенной пространственной сеткой, был применен метод децентрированного октаэдрического роста [46]. В рамках данного подхода ячейки, расположенные в жидкой фазе и попадающие в зону влияния растущей октаэдрической поверхности, переводились в переходное состояние с наследованием индекса и кристаллографической ориентации материнского зерна. Переход в твердое состояние осуществлялся после полного охвата соседних ячеек фронтом кристаллизации [52].

Согласно традиционным подходам к описанию объемного зародышеобразования, новые зерна преимущественно зарождаются в верхней центральной части ванны расплава, где отношение температурного градиента к темпу роста имеет небольшое значение. Однако такие подходы не могут обеспечить корректное описание эволюции микроструктуры сплава AlSi10Mg, полученного СЛС. Согласно экспериментальным данным, зародышеобразование в основном происходит в области, прилегающей к нижней границе ванн расплава, где твердые непроплавленные частицы порошка и частицы кремния могут действовать в качестве новых центров зарождения. Для корректного воспроизведения этого эффекта в моделировании была использована усовершенствованная модель зарождения, разработанная Mohebbi и Ploshikhin [37], лишенная ограничений классических подходов. В этой модели P – вероятность размещения в ячейке зародыша – рассчитывается как:

$$P = \frac{n\Delta x^3}{\sqrt{2\pi}\sigma}e^{-\left(\frac{T_i^{\max}-T_l}{\sqrt{2}\sigma}\right)^2}, \quad (6)$$

где n – плотность центров зарождения на 1 мм^3; Δx – размер ячейки в сетке; T_l – температура перехода в жидкое состояние; $T_i^{\max}$ – максимальная температура, которую испытывает ячейка в жидком состоянии и σ – стандартное отклонение распределения Гаусса. Значение n было подобрано таким образом, чтобы соответствовать экспериментально полученным данным о микроструктуре. Для корректного описания кинетики процесса зарождения в модель был введен дополнительный критерий, учитывающий инкубационный период образования зародышей. Данный параметр задавался как функция степени переохлаждения ΔT, что позволило более точно воспроизвести временные характеристики процесса зародышеобразования ΔT [37]:

$$\tau(T) = \frac{C_{inc}}{\Delta T}, \quad (7)$$

в которой постоянная C_{inc} принимает значение, равное $2{,}8\cdot10^{-3}$ К·с [46]. Как только зародыш был сформирован в соответствии с (6), для него начинался нормированный период зародышеобразования θ_i. Начальное значение θ_i равно нулю, а с последующими временными шагами δt оно изменялось в соответствии с соотношением

$$\delta\theta_i = \frac{\delta t}{\tau(\Delta T_i)}, \quad (8)$$

где ΔT_i – текущее значение переохлаждения ячейки. Зародыш становился активным центром зарождения со случайной кристаллографической ориентацией, когда θ_i становится равным единице. В этом случае родительская ячейка становилась растущей переходной и подчинялась вышеописанному алгоритму роста.

Важным шагом в процессе моделирования микроструктуры являлось сопряжение результатов решения задач теплопереноса и кристаллизации. Хотя строгое описание требует рассмотрения обратных связей между тепловыми процессами и структурными преобразованиями [53], в целях оптимизации вычислительных затрат в настоящем исследовании учитывалось лишь прямое воздействие термических характеристик на формирование микроструктуры.

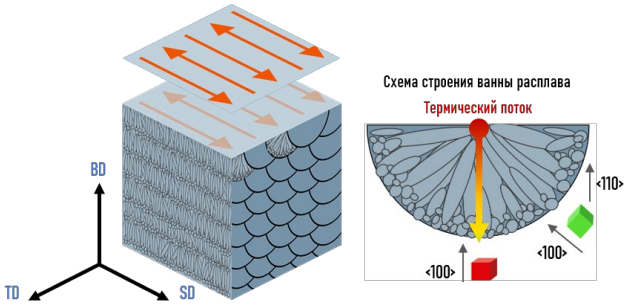
Для получения значений температуры T_i^{CA} из данных стационарного движущегося теплового поля T_j^{FD} для каждой ячейки расчетной области была применена односторонняя (прямая) связь [42; 43]:

$$\left(T_i^{CA}\right)=\sum_{j=1}^{8}\left(N_j T_j^{FD}\right). \quad (9)$$

Здесь N_i – коэффициент интерполяции, связанный с j-й ячейкой термического поля, окруженной восемью другими ячейками. N_i рассчитывается с применением конечно-элементных функций формы первого порядка для 8-узловых кубических элементов [54].

2. Анализ модельной зеренной структуры

Валидация разработанной модели была проведена на основе сравнения результатов моделирования с экспериментальными данными, полученными методом дифракции обратно рассеянных электронов (EBSD). Условия печати экспериментального материала соответствовали режимам и параметрам, задаваемым в моделировании. Схема печати экспериментальных образцов представлена на рис. 4, *a*.



a *b*

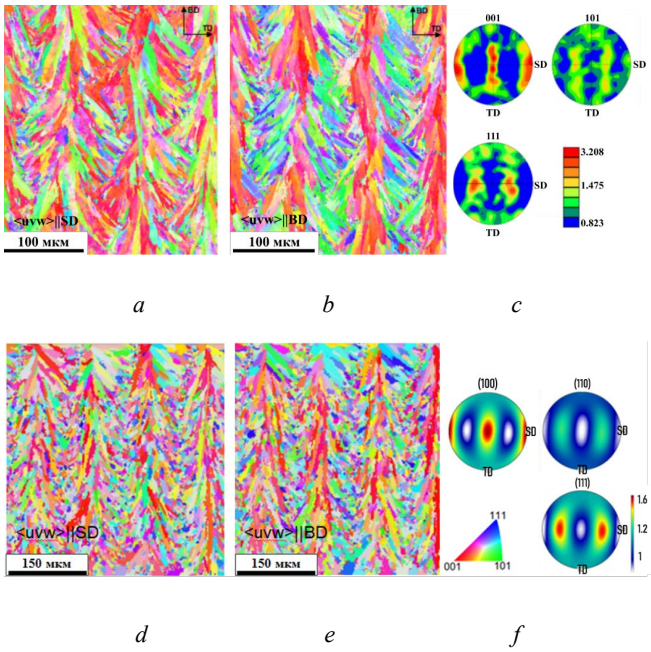
Рис. 4. Схема печати образца (*a*) и схема зеренного строения (*b*) в поперечном сечении трека в сплаве AlSi10Mg, полученного СЛС

Fig. 4. Sample printing schematic (*a*) and grain structure in a track cross-section (*b*) in an AlSi10Mg alloy produced by LPBF

На рис. 5, *a*, *b*, представлены изображения экспериментальной и модельной зеренных структур в сечениях, перпендикулярных направлению сканирования SD, в цветах обратных полюсных фигур (ОПФ) относительно направлений SD (рис. 5, *a*) и BD (рис. 5, *b*). Соответствующие полюсные фигуры {001}, {101}, {111}, построенные для данных сечений, приведены на рис. 5, *c*, *d*. Сравнение модельной зеренной структуры (рис. 5, *d*, *e*) с экспериментальными данными (рис. 5, *a*, *b*) показало, что построенная модель качественно и количественно воспроизводит основные структурные особенности материала.

Анализ картин зеренных структур в цветах ОПФ (рис. 5, *a*, *b*, *d*, *e*) показал, что как в экспериментальных, так и в модельных образцах формируется веерообразная зеренная структура в соответствии с формой и строением ванн расплава (рис. 4, *b*). Приграничные области ванн расплава характеризуются наличием мелких равноосных зерен со случайной кристаллографической ориентацией. Во-первых, это обусловлено максимальной степенью переохлаждения материала вблизи границ расплава, что способствует интенсивному гомогенному зарождению и подавлению роста крупных зерен [55–58]. Во-вторых, в данных областях значительную роль играет гетерогенное зарождение зерен на нерастворимых частицах кремния, интенсивно выделяющихся в этих областях [59].

По мере удаления от границ ванн расплава в центральных и боковых частях треков образуются столбчатые зерна, вытянутые вдоль направления термического потока (см. рис. 4, *b*). Известно, что кристаллизация гранецентрированных кубических кристаллов происходит по направлениям <100>. При этом зерна с кристаллографической ориентацией <100> вдоль термического потока демонстрируют преимущественный рост. Термический поток в ванне расплава направлен перпендикулярно ее границе. В соответствии с этим зерна в центральных частях треков имеют преимущественную ориентацию <100>||BD, а в боковых частях треков ориентация зерен меняется между <110> и <111> относительно BD (см. схему на рис. 4, *b*). При этом кристаллизация зерен с кубической ориентацией протекает за счет эпитаксиального роста с предыдущего слоя при сравнительно невысоких степенях переохлаждения, тогда как в боковых частях границах ванн происходит образование новых зерен, которые растут по направлению к центрам треков. Это согласуется с данными многих работ, например, [56; 15].

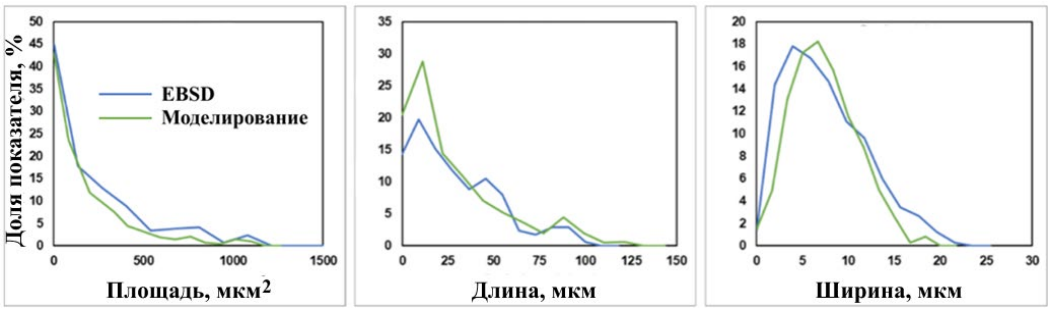


a *b* *c*

d *e* *f*

Рис. 5. Зеренные структуры в цветах обратных полюсных фигур (*a*, *b*, *d*, *e*) относительно направлений ||SD (*a*, *d*) и ||BD (*b*, *e*) и соответствующие полюсные фигуры {001}, {110} и {111} (*c*, *f*), полученные экспериментально (*a*–*c*) и численно (*d*–*f*)

Fig. 5. Grain structures color-coded based on inverse pole figure (IPF) (*a, b, d, e*) relative to the ||SD (*a, d*) and ||BD (*b, e*) directions, and corresponding {001}, {110}, and {111} pole figures (*c, f*), obtained experimentally (*a–c*) and numerically (*d–f*)



a *b* *c*

Рис. 6. Статистические распределения геометрических характеристик зерен модельной и экспериментальной структур: площадь (*a*), длина (*b*) и ширина (*c*) зерен

Fig. 6. Statistical distributions of geometric characteristics of grains in simulated and experimental structures: area (*a*), length (*b*), and width of grains (*c*)

Важной характерной особенностью как модельной, так и экспериментальной зеренных структур является выраженная кристаллографическая текстура. Сравнение полюсных фигур для сечений, перпендикулярных направлению SD, показало, что основные компоненты экспериментальной и расчетной текстур идентичны (ср. рис. 5, *c* и *f*). Полюсные фигуры в обоих случаях показывают наличие сильной кубической текстуры <001>||BD с углом рассеяния порядка 15°. Такая кристаллографическая текстура характерна для ГЦК-металлов, изготовленных СЛС [60–62]. Мелкие равноосные зерна на границах ванны расплава в основном имеют случайную ориентацию [63; 64] в соответствии с кинетикой их роста. Многими авторами отмечается [9; 57–61; 65], что вышеуказанные особенности зеренной структуры приводят к формированию выраженной анизотропии механических свойств.

На рис. 6, *a–c*, приведены статистические распределения геометрических характеристик зерен модельной и экспериментальной структур в терминах занимаемой площади, длины и ширины. Сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными показало удовлетворительное качественное и количественное согласие, что свидетельствует о корректном воспроизведении геометрических особенностей зеренной структуры в разработанной модели.

Заключение

В рамках настоящей работы реализована трехмерная модель кристаллизации сплава AlSi10Mg в условиях селективного лазерного сплавления. В основе моделирования заложен подход клеточных автоматов, дополненный алгоритмами учета характерных физических процессов, включая эпитаксиальный рост, конкурентное взаимодействие растущих кристаллов и гетерогенное зародышеобразование. Это позволило точно воспроизвести морфологию и пространственное распределение зерен в сплаве.

Валидация разработанной модели была проведена на основе экспериментальных данных, полученных с применением EBSD-анализа. Было установлено качественное и количественное соответствие между экспериментальными данными и результатами моделирования.

Преимущество разработанной модели заключается в возможности описания поликристаллической структуры аддитивно-изготовленных силуминов в зависимости от параметров процесса СЛС. Это открывает перспективы для целенаправленного управления процессом кристаллизации с целью получения материалов с заданными характеристиками. Особый интерес представляет адаптация разработанного подхода к другим алюминиевым сплавам и композиционным материалам для аддитивных технологий.

Библиографический список

1. Unravelling the multi-scale structure–property relationship of laser powder bed fusion processed and heat-treated AlSi10Mg / P. Van Cauwenbergh [et al.] // Scientific Reports. – 2021. – Vol. 11, no. 1. – 6423. DOI: 10.1038/s41598-021-85047-2

2. Научные подходы к микро-, мезо- и макроструктурному дизайну объемных металлических и полиметаллических материалов с использованием метода электронно-лучевого аддитивного производства / Е.А. Колубаев, В.Е. Рубцов, А.В. Чумаевский, Е.Г. Астафурова // Физическая мезомеханика. – 2022. – Т. 25 (4). – С. 5– 18.

3. Effects of build orientation and heat treatments on the tensile and fracture toughness properties of additively manufactured AlSi10Mg / L.C. Araújo [et al.] // International Journal of Mechanical Sciences. – 2022. – Vol. 213. – 106868. DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2021.106868

4. Microstructure, porosity and mechanical properties of selective laser melted AlSi10Mg / J. Chen, W. Hou, X. Wang, S. Chu, Z. Yang // Chinese Journal of Aeronautics. – 2020. – Vol. 33, no. 7. – P. 2043–2054. DOI: 10.1016/j.cja.2019.08.017

5. Evaluation of the stress-strain relationship of constituent phases in AlSi10Mg alloy produced by selective laser melting using crystal plasticity FEM / D-K. Kim, J-H. Hwang, E-Y. Kim, Y-U. Heo, W. Woo, S-H. Choi // Journal of Alloys and Compounds. – 2017. – Vol. 714. – P. 687–97. DOI: 10.1016/j.jallcom.2017.04.264

6. Additive manufactured AlSi10Mg samples using Selective Laser Melting (SLM): Microstructure, high cycle fatigue, and fracture behavior / E. Brandl, U. Heckenberger, V. Holzinger, D. Buchbinder // Materials & Design. – 2012. – Vol. 34. P. 159–69. DOI: 10.1016/j.matdes.2011.07.067

7. Altenbach H., Öchsner A., editors. State of the Art and Future Trends in Material Modeling. vol. 100, Cham: Springer International Publishing; 2019. DOI: 10.1007/978-3-030-30355-6.

8. Maeshima, T. Solute clustering and supersaturated solid solution of AlSi10Mg alloy fabricated by selective laser melting / T. Maeshima, K. Ohishi // Heliyon. – 2019. – Vol. 5. – e01186. DOI: 10.1016/j.heliyon.2019.e01186

9. Additive manufacturing of metallic components – Process, structure and properties / T. DebRoy, H.L. Wei, J.S. Zuback, T. Mukherjee, J.W. Elmer, J.O. Milewski, A.M. Beese, A. Wilson-Heid, A. De, W. Zhang // Progress in Materials Science. – 2018. – Vol. 92. – P. 112– 224. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2017.10.001

10. 3D printing of Aluminium alloys: Additive Manufacturing of Aluminium alloys using selective laser melting / N.T. Aboulkhair, M. Simonelli, L. Parry, I. Ashcroft, C. Tuck, R. Hague // Progress in Materials Science. – 2019. – Vol. 106. – 100578. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2019.100578.

11. Effect of the Boundary Orientation of Melt Pool on Mechanical Property and Fracture Path in Selective-Laser-Melted AlSi10Mg Alloy / Z. Jiang, Y. Li, H. Luo, B. Zhou, Y. Liang, Y. Liang // Met. Mater Int. – 2022. – Vol. 28. – P. 2934–2946. DOI: 10.1007/s12540-022-01199-4

12. Microstructural origin of anisotropic tensile ductility of AlSi alloy manufactured by laser powder bed fusion / Y. Otani, N. Takata, A. Suzuki, M. Kobashi, M. Kato // Scripta Materialia. – 2023. – Vol. 226. – 115259. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2022.115259

13. Review on the correlation between microstructure and mechanical performance for laser powder bed fusion AlSi10Mg / L. Zhao, L. Song, J.G. Santos Macías, Y. Zhu, M. Huang, A. Simar, Z. Li // Additive Manufacturing. – 2022. – Vol. 56. – 102914. DOI: 10.1016/j.addma.2022.102914.

14. On the Selective Laser Melting (SLM) of the AlSi10Mg Alloy: Process, Microstructure, and Mechanical Properties / F. Trevisan, F. Calignano, M. Lorusso, J. Pakkanen, A. Aversa, E. Ambrosio, M. Lombardi, P. Fino, D. Manfredi // Materials. – 2017. – Vol. 10. – 76. DOI: 10.3390/ma10010076.

15. Microstructure of selective laser melted AlSi10Mg alloy / X. Liu, C. Zhao, X. Zhou, Z. Shen, W. Liu // Materials & Design. – 2019. – Vol. 168. – 107677. DOI: 10.1016/j.matdes.2019.107677

16. Körner, C. Mesoscopic simulation of selective beam melting processes / C. Körner, E. Attar, P. Heinl // Journal of Materials Processing Technology. – 2011. – Vol. 211. – P. 978–987. DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2010.12.016

17. Discrete element simulation and experimental study of powder spreading process in additive manufacturing / S. Haeri, Y. Wang, O. Ghita, J. Sun // Powder Technology. – 2017. – Vol. 306. – P. 45–54. DOI: 10.1016/j.powtec.2016.11.002

18. Metal additive-manufacturing process and residual stress modeling / M. Megahed, H-W. Mindt, N. N'Dri, H. Duan, O. Desmaison // Integr. Mater. Manuf. Innov. – 2016. – Vol. 5. – P. 61–93. DOI: 10.1186/s40192-016-0047-2.

19. Laser powder-bed fusion additive manufacturing: Physics of complex melt flow and formation mechanisms of pores, spatter, and denudation zones / S.A. Khairallah, A.T. Anderson, A. Rubenchik, W.E. King // Acta Materialia. – 2016. – Vol. 108. – P. 36–45. DOI: 10.1016/j.actamat.2016.02.014.

20. A Review of Computational Approaches to the Microstructure-Informed Mechanical Modelling of Metals Produced by Powder Bed Fusion Additive Manufacturing / O. Zinovieva, V.A. Romanova, E. Dymnich, A. Zinoviev, R. Balokhonov // Materials. – 2023. – Vol. 16, no. 19. – 6459. DOI: 10.3390/ma16196459

21. Князева, А.Г. Уточнение базовых уравнений теории фазового поля для неизотермических условий / А.Г. Князева // Физическая мезомеханика. – 2024. – Т. 27(6). – С. 33–54.

22. Application of finite element, phase-field, and CALPHAD-based methods to additive manufacturing of Ni-based superalloys / T. Keller [et al.] // Acta Materialia. – 2017. – Vol. 139. – P. 244–253. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.05.003

23. Galenko, P., Phase-field model with relaxation of the diffusion flux in nonequilibrium solidification of a binary system // Physics Letters A. – 2001. – Vol. 287. – P. 190–197.

24. Lu, L-X. Phase field simulation of powder bed-based additive manufacturing / L-X. Lu, N. Sridhar, Y-W. Zhang // Acta Materialia. – 2018. – Vol. 144. – P. 801–809. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.11.033

25. On the primary spacing and microsegregation of cellular dendrites in laser deposited Ni–Nb alloys / S. Ghosh, L. Ma, N. Ofori-Opoku, J.E. Guyer // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. – 2017. – Vol. 25. – 065002. DOI: 10.1088/1361-651X/aa7369

26. Gong, X. Phase-Field Modeling of Microstructure Evolution in Electron Beam Additive Manufacturing / X. Gong, K. Chou // JOM. – 2015. – Vol. 67. – P. 1176–1182. DOI: 10.1007/s11837-015-1352-5.

27. Sahoo, S. Phase-field simulation of microstructure evolution of Ti–6Al–4V in electron beam additive manufacturing process / S. Sahoo, K. Chou // Additive Manufacturing. – 2016. – Vol. 9. – P.14–24. DOI: 10.1016/j.addma.2015.12.005

28. Phase-field simulation of solidification morphology in laser powder deposition of Ti–Nb alloys / V. Fallah, M. Amoorezaei, N. Provatas, S.F. Corbin, A.A. Khajepour // Acta Materialia. – 2012. – Vol. 60. – P. 1633–1646. DOI: 10.1016/j.actamat.2011.12.009

29. The Origin of Microstructural Diversity, Texture, and Mechanical Properties in Electron Beam Melted Ti-6Al-4V / S.S. Al-Bermani, M.L. Blackmore, W. Zhang, I. Todd // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2010. – Vol. 41, no. 13. – P. 3422–3434. DOI: 10.1007/s11661-010-0397-x

30. Antonysamy, A.A. Effect of build geometry on the β-grain structure and texture in additive manufacture of Ti6Al4V by selective electron beam melting / A.A. Antonysamy, J. Meyer, P.B. Prangnell // Materials Characterization. – 2013. – Vol. 84. – P. 153–168. DOI: 10.1016/j.matchar.2013.07.012

31. Rodgers, T.M. Simulation of metal additive manufacturing microstructures using kinetic Monte Carlo / T.M. Rodgers, J.D. Madison, V. Tikare // Computational Materials Science. – 2017. – Vol. 135. – P. 78–89. DOI: 10.1016/j.commatsci.2017.03.053

32. Influence of manufacturing geometric defects on the mechanical properties of AlSi10Mg alloy fabricated by selective laser melting / P. Wang, H. Lei, X. Zhu, H. Chen, D. Fang // Journal of Alloys and Compounds. – 2019. – Vol. 789. – P. 852–859. DOI: 10.1016/j.jallcom.2019.03.135.

33. Damage modeling of metallic alloys made by additive manufacturing / M. Taheri Andani, M. Ghodrati, M.R. Karamooz-Ravari, R. Mirzaeifar, J. Ni // Materials Science and Engineering: A. – 2019. – Vol. 743. – P. 656–664. DOI: 10.1016/j.msea.2018.11.125

34. An integrated process–structure–property modeling framework for additive manufacturing / W. Yan [et al.] // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. – 2018. – Vol. 339. – P. 184–204. DOI: 10.1016/j.cma.2018.05.004

35. Evolution of grain structure during laser additive manufacturing. Simulation by a cellular automata method / A. Zinoviev, O. Zinovieva, V. Ploshikhin, V. Romanova, R. Balokhonov // Ma-

terials & Design. – 2016. – Vol. 106. – P. 321–329. DOI: 10.1016/j.matdes.2016.05.125

36. Understanding grain evolution in additive manufacturing through modeling / J. Akram, P. Chalavadi, D. Pal, B. Stucker // Additive Manufacturing. – 2018. – Vol. 21. – P. 255–268. DOI: 10.1016/j.addma.2018.03.021

37. Mohebbi, M.S. Implementation of nucleation in cellular automaton simulation of microstructural evolution during additive manufacturing of Al alloys / M.S. Mohebbi, V. Ploshikhin // Additive Manufacturing. – 2020. – Vol. 36. – 101726. DOI: 10.1016/j.addma.2020.101726

38. Chen, R. Cellular automaton simulation of three-dimensional dendrite growth in Al–7Si–Mg ternary aluminum alloys / R. Chen, Q. Xu, B. Liu // Computational Materials Science. – 2015. – Vol. 105. – P. 90–100. DOI: 10.1016/j.commatsci.2015.04.035

39. Zinovieva, O. Three-dimensional modeling of the microstructure evolution during metal additive manufacturing / A. Zinoviev, O. Zinovieva, V. Ploshikhin // Computational Materials Science. – 2018. – Vol. 141. – P. 207–220. DOI: 10.1016/j.commatsci.2017.09.018

40. Three-dimensional analysis of grain structure and texture of additively manufactured 316L austenitic stainless steel / O. Zinovieva, A. Zinoviev, V. Romanova, R. Balokhonov // Additive Manufacturing. – 2020. – Vol. 36. – 101521. DOI: 10.1016/j.addma.2020.101521.

41. Morel, V. The Critical Temperature of Aluminum / V. Morel, A. Bultel, B.G. Chéron // International Journal of Thermophysics. – 2009. – Vol. 30. – P. 1853–1863. DOI: 10.1007/s10765-009-0671-6

42. Simulations of microstructure coupling with moving molten pool by selective laser melting using a cellular automaton / X. Ao, H. Xia, J. Liu, Q. He // Materials & Design. – 2020. – Vol. 185. – 108230. doi: 10.1016/j.matdes.2019.108230

43. A physically-based computational approach for processing-microstructure-property linkage of materials additively manufactured by laser powder bed fusion / V. Romanova, M.S. Mohebbi, E. Dymnich, R. Balokhonov, V. Ploshikhin // International Journal of Mechanical Sciences. – 2022. – Vol. 219. – 107103. DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2022.107103

44. Gandin, Ch.-A. Three-dimensional probabilistic simulation of solidification grain structures: Application to superalloy precision castings / Ch.-A. Gandin, M. Rappaz, R. Tintillier // MTA. – 1993. – Vol. 24. – P. 467–479. DOI: 10.1007/BF02657334

45. Rappaz, M. Probabilistic modelling of microstructure formation in solidification processes / M. Rappaz, Ch.-A. Gandin // Acta Metallurgica et Materialia. – 1993. – Vol. 41. – P. 345–360. DOI: 10.1016/0956-7151(93)90065-z

46. Shao, G. Prediction of phase selection in rapid solidification using time dependent nucleation theory / G. Shao, P. Tsakiropoulos // Acta Metallurgica et Materialia. – 1994. – Vol. 42, no. 9. – P. 2937–2942. DOI:10.1016/0956-7151(94)90391-3

47. Gandin, Ch.-A. A 3D Cellular Automaton algorithm for the prediction of dendritic grain growth / Ch.-A. Gandin, M. Rappaz // Acta Materialia. – 1997. – Vol. 45. – P. 2187–2195. DOI: 10.1016/s1359-6454(96)00303-5

48. Kurz, W. Theory of microstructural development during rapid solidification / W. Kurz, B. Giovanola, R. Trivedi // Acta Metallurgica. – 1986. – Vol. 34, no. 5. – P. 823–830.

49. Strategy of computational predictions for mechanical behaviour of additively manufactured materials / O. Zinovieva, A. Zinoviev, V. Ploshikhin, V. Romanova, R. Balokhonov // Materials Science and Technology. – 2018. – Vol. 34, no. 3. – P. 1591–1605. DOI: 10.1080/02670836.2018.1489939

50. A three-dimensional cellular automation-finite element model for the prediction of solidification grain structures / Ch.-A. Gandin, J.-L. Desbiolles, M. Rappaz, Ph. Thevoz // Metallurgical and Materials Transactions A. – 1999. – Vol. 30, no. 12. – P. 3153–3165.

51. Rafique, M.M.A. Probabilistic Modelling of Microstructural Evolution in Zr Based Bulk Metallic Glass Matrix Composites during Solidification in Additive Manufacturing / M.M.A. Rafique // Engineering. – 2018. – Vol. 10, no. 04. – pp. 130–141. DOI: 10.4236/eng.2018.104010

52. A cellular automaton finite volume method for microstructure evolution during additive manufacturing / Y. Lian, Z. Gan, C. Yu, D. Kats, W.-K. Liu, G.J. Wagner // Materials & Design. – 2019. – Vol. 169, no. 6. –107672. DOI: 10.1016/j.matdes.2019.107672

53. Knyazeva A. G. Sviazannaa model′ sinteza na podlozhke // Matematicheskoe modelirovanie v estestvennykh naukakh. – 2023. – № 1. – С. 166-169.

54. Zienkiewicz O.C. The finite element method: its basis and fundamentals / Zienkiewicz, R.L. Taylor, J.Z. Zhu. – Elsevier, Amsterdam Heidelberg, 2010. – 802 p.

55. Thijs L. Microstructure and Texture of Metal Parts Produced by Selective Laser Melting: doctoral thesis / L. Thijs – KU Leuven, Faculty of Engineering Science, 2014. – 294 p.

56. Microstructure evolution and thermal properties of an additively manufactured, solution treatable AlSi10Mg part / P. Yang, L.A. Deibler, D.R. Bradley, D.K. Stefan, J.D. Caroll, // Journal of Materials Research. – 2018. – Vol. 33, no. 23. – P. 4040–4052. DOI: 10.1557/jmr.2018.405

57. Lathabai, S. Additive Manufacturing of Aluminium-Based Alloys and Composites // Fundamentals of Aluminium Metallurgy. – 2018. – P. 47–92. DOI:10.1016/B978-0-08-102063-0.00002-3

58. Influence of process-induced microstructure and imperfections on mechanical properties of AlSi12 processed by selective laser melting / S. Siddique, M. Imran, E. Wycisk // Journal of Materials Processing Technology. – 2015. – Vol. 221. – P. 205–213. doi: 10.1016/j.jmatprotec.2015.02.023

59. Fine-structured aluminium products with controllable texture by selective laser melting of pre-alloyed AlSi10Mg powder / L. Thijs, K. Kempen, J.-P. Kruth, J. Van Humbeeck // Acta Materialia. – 2013. – Vol. 61, no. 5. – P. 1809–1819. DOI: 10.1016/j.actamat.2012.11.052

60. Solidification pattern, microstructure and texture development in Laser Powder Bed Fusion (LPBF) of Al10SiMg alloy / H. Qin, V. Fallah, Q. Dong, M. Brochu, M. Daymond, M. Gallerneault // Materials Characterization. – 2018. – Vol. 145. – P. 29–38. DOI: 10.1016/j.matchar.2018.08.025

61. Change in microstructure of selectively laser melted AlSi10Mg alloy with heat treatments / N. Takata, H. Kodaira, K. Sekizawa, A. Suzuki, M. Kobashi // Materials Science and Engineering: A. – 2017. – Vol. 704, no. 67. – P. 218–228. DOI: 10.1016/j.msea.2017.08.029

62. Influence on microstructure, strength and ductility of build platform temperature during laser powder bed fusion of AlSi10Mg / J.G. Santos Macías [et al.] // Acta Materialia. – 2020. – Vol. 201. – P. 231–243. DOI: 10.1016/j.actamat.2020.10.001

63. Panwisawas, C. Metal 3D printing as a disruptive technology for superalloys / C. Panwisawas, Y.T. Tang, R.C. Reed // Nature Communications. – 2020. – Vol. 11, no. 1. – 2327. DOI: 10.1038/s41467-020-16188-7

64. Anwar, A.B. Selective laser melting of AlSi10Mg: Effects of scan direction, part placement and inert gas flow velocity on tensile strength / A.B. Anwar, Q.-C. Pham // Journal of Materials Processing Technology. – 2017. – Vol. 240. – P. 388–396. DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2016.10.015

65. A Study of Deformation and Fracture of the Eutectic in an Additively Manufactured Al-Si Composite Alloy / A.V. Zemlyanov [et al.] // Physical Mesomechanics. – 2023. – Vol. 26, no. 6. – P. 678–690. DOI: 10.1134/S1029959923060073

References

1. Van Cauwenbergh P., et al. Unravelling the multi-scale structure–property relationship of laser powder bed fusion processed and heat-treated AlSi10Mg, *Scientific Reports*, 2021, Vol. 11, no. 1, 6423. DOI: 10.1038/s41598-021-85047-2

2. Kolubaev E.A., Rubtsov V.E., Chumaevsky A.V., Astafurova E.G. Micro-, Meso- and Macrostructural Design of Bulk Metallic and Polymetallic Materials by Wire-Feed Electron-Beam Additive Manufacturing, *Physical Mesomechanics*, 2022, Vol. 26, P. 479– 491. DOI: 10.1134/s1029959922060017

3. L.C. Araújo, et al. Effects of build orientation and heat treatments on the tensile and fracture toughness properties of additively manufactured AlSi10Mg, International Journal of Mechanical Sciences, 2022, Vol. 213, 106868. DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2021.106868

4. Chen J., Hou W., Wang X., Chu S., Yang Z. Microstructure, porosity and mechanical properties of selective laser melted AlSi10Mg, Chinese Journal of Aeronautics, 2020, Vol. 33, no. 7, P. 2043–2054. DOI: 10.1016/j.cja.2019.08.017

5. Kim D-K., Hwang J-H., Kim E-Y., Heo Y-U., Woo W., Choi S-H. Evaluation of the stress-strain relationship of constituent phases in AlSi10Mg alloy produced by selective laser melting using crystal plasticity FEM, Journal of Alloys and Compounds, 2017, Vol. 714, P. 687–97. DOI: 10.1016/j.jallcom.2017.04.264

6. Brandl E., Heckenberger U., Holzinger V., Buchbinder D. Additive manufactured AlSi10Mg samples using Selective Laser Melting (SLM): Microstructure, high cycle fatigue, and fracture behavior, Materials & Design, 2012, Vol. 34. P. 159–69. DOI: 10.1016/j.matdes.2011.07.067

7. Altenbach H., Öchsner A., editors. State of the Art and Future Trends in Material Modeling. vol. 100, Cham: Springer International Publishing; 2019. DOI: 10.1007/978-3-030-30355-6.

8. Maeshima T., Ohishi K. Solute clustering and supersaturated solid solution of AlSi10Mg alloy fabricated by selective laser melting, *Heliyon*, 2019, Vol. 5, e01186. DOI: 10.1016/j.heliyon.2019.e01186

9. DebRoy T., Wei H.L., Zuback J.S., Mukherjee T., Elmer J.W., Milewski J.O., Beese A.M., Wilson-Heid A., De A., Zhang W. Additive manufacturing of metallic components – Process, structure and properties, Progress in Materials Science, 2018, Vol. 92, P. 112– 224. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2017.10.001

10. Aboulkhair N.T., Simonelli M., Parry L., Ashcroft I., Tuck C., Hague R. 3D printing of Aluminium alloys: Additive Manufacturing of Aluminium alloys using selective laser melting, *Progress in Materials Science*, 2019, Vol. 106, 100578. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2019.100578.

11. Jiang Z., Li Y., Luo H., Zhou B., Liang Y., Liang Y. Effect of the Boundary Orientation of Melt Pool on Mechanical Property and Fracture Path in Selective-Laser-Melted AlSi10Mg Alloy, Met. Mater Int, 2022, Vol. 28, P. 2934–2946. DOI: 10.1007/s12540-022-01199-4

12. Otani Y., Takata N., Suzuki A., Kobashi M., Kato M. Microstructural origin of anisotropic tensile ductility of Al-Si alloy manufactured by laser powder bed fusion, *Scripta Materialia*, 2023, Vol. 226, 115259. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2022.115259

13. Zhao L., Song L., Santos Macías J.G., Zhu Y., Huang M., Simar A., Li Z. Review on the correlation between microstructure and mechanical performance for laser powder bed fusion AlSi10Mg, *Additive Manufacturing*, 2022, Vol. 56, 102914. DOI: 10.1016/j.addma.2022.102914.

14. Trevisan F., Calignano F., Lorusso M., Pakkanen J., Aversa A., Ambrosio E., Lombardi M., Fino P., Manfredi D. On the Selective Laser Melting (SLM) of the AlSi10Mg Alloy: Process, Microstructure, and Mechanical Properties, *Materials*, 2017, Vol. 10, 76. DOI: 10.3390/ma10010076.

15. Liu X., Zhao C., Zhou X., Shen Z., Liu W. Microstructure of selective laser melted AlSi10Mg alloy, Materials & Design, 2019, Vol. 168, 107677. DOI: 10.1016/j.matdes.2019.107677

16. Körner C., Attar E., Heinl P. Mesoscopic simulation of selective beam melting processes, Journal of Materials Processing Technology, 2011, Vol. 211, P. 978–987. DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2010.12.016

17. Haeri S., Wang Y., Ghita O., Sun J. Discrete element simulation and experimental study of powder spreading process in additive manufacturing, Powder Technology, 2017, Vol. 306, P. 45–54. DOI: 10.1016/j.powtec.2016.11.002

18. Megahed M., Mindt H-W., N'Dri N., Duan H., Desmaison O. Metal additive-manufacturing process and residual stress modeling, Integr. Mater. Manuf. Innov, 2016, Vol. 5, P. 61–93. DOI: 10.1186/s40192-016-0047-2.

19. Khairallah S.A., Anderson A.T., Rubenchik A., King W.E. Laser powder-bed fusion additive manufacturing: Physics of complex melt flow and formation mechanisms of pores, spatter, and denudation zones, Acta Materialia, 2016, Vol. 108, P. 36–45. DOI: 10.1016/j.actamat.2016.02.014.

20. Zinovieva O., Romanova V.A., Dymnich E., Zinoviev A., Balokhonov R. A Review of Computational Approaches to the Microstructure-Informed Mechanical Modelling of Metals Produced by Powder Bed Fusion Additive Manufacturing, *Materials*, 2023, Vol. 16, no. 19, 6459. DOI:10.3390/ma16196459

21. Knyazeva A.G. Refinement of the basic equations of phase field theory under nonisothermal conditions // Fizicheskaya Mezomekhanika, 2024, Vol. 27, no. 6, P. 33–54. DOI: 10.55652/1683-805X_2024_27_6_33-54

22. Keller T., et al. Application of finite element, phase-field, and CALPHAD-based methods to additive manufacturing of Ni-based superalloys, Acta Materialia, 2017, Vol. 139, P. 244 – 253. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.05.003

23. Galenko P., Phase-field model with relaxation of the diffusion flux in nonequilibrium solidification of a binary system, Physics Letters A, 2001, Vol. 287, P. 190–197.

24. Lu L-X., Sridhar N., Zhang Y-W. Phase field simulation of powder bed-based additive manufacturing, Acta Materialia, 2018, Vol. 144, P. 801–809. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.11.033

25. Ghosh S., Ma L., Ofori-Opoku N., Guyer J.E. On the primary spacing and microsegregation of cellular dendrites in laser deposited Ni–Nb alloys, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng, 2017, Vol. 25, 065002. DOI: 10.1088/1361-651X/aa7369

26. Gong X., Chou K. Phase-Field Modeling of Microstructure Evolution in Electron Beam Additive Manufacturing, JOM, 2015, Vol. 67, P. 1176–1182. DOI: 10.1007/s11837-015-1352-5.

27. Sahoo S., Chou K. Phase-field simulation of microstructure evolution of Ti–6Al–4V in electron beam additive manufacturing process, Additive Manufacturing, 2016, Vol. 9, P.14–24. DOI: 10.1016/j.addma.2015.12.005

28. Fallah V., Amoorezaei M., Provatas N., Corbin S.F., Khajepour A. A. Phase-field simulation of solidification morphology in laser powder deposition of Ti–Nb alloys, Acta Materialia, 2012, Vol. 60, P. 1633–1646. DOI: 10.1016/j.actamat.2011.12.009

29. Al-Bermani S.S., Blackmore M.L., Zhang W., Todd I. The Origin of Microstructural Diversity, Texture, and Mechanical Properties in Electron Beam Melted Ti-6Al-4V, Metallurgical and Materials Transactions A, 2010, Vol. 41, no. 13, P. 3422–3434. DOI: 10.1007/s11661-010-0397-x

30. Antonysamy A.A., Meyer J., Prangnell P.B. Effect of build geometry on the β-grain structure and texture in additive manufacture of Ti6Al4V by selective electron beam melting, *Materials Characterization*, 2013, Vol. 84, P. 153–168. DOI: 10.1016/j.matchar.2013.07.012

31. Rodgers, T.M., Madison J.D., Tikare V. Simulation of metal additive manufacturing microstructures using kinetic Monte Carlo, Computational Materials Science, 2017, Vol. 135, P. 78–89. DOI: 10.1016/j.commatsci.2017.03.053

32. Wang P., Lei H., Zhu X., Chen H., Fang D. Influence of manufacturing geometric defects on the mechanical properties of AlSi10Mg alloy fabricated by selective laser melting, Journal of Alloys and Compounds, 2019, Vol. 789, P. 852–859. DOI: 10.1016/j.jallcom.2019.03.135.

33. Taheri Andani M., Ghodrati M., Karamooz-Ravari M.R., Mirzaeifar R., Ni J. Damage modeling of metallic alloys made by additive manufacturing, Materials Science and Engineering: A, 2019, Vol. 743, P. 656–664. DOI: 10.1016/j.msea.2018.11.125

34. Yan W., et al. An integrated process–structure–property modeling framework for additive manufacturing, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2018, Vol. 339, P. 184–204. DOI: 10.1016/j.cma.2018.05.004

35. Zinoviev A., Zinovieva O., Ploshikhin V., Romanova V., Balokhonov R. Evolution of grain structure during laser additive manufacturing. Simulation by a cellular automata method, Materials & Design, 2016, Vol. 106, P. 321–329. DOI: 10.1016/j.matdes.2016.05.125

36. Akram J., Chalavadi P., Pal D., Stucker B. Understanding grain evolution in additive manufacturing through modeling, Additive Manufacturing, 2018, Vol. 21, P. 255–268. DOI: 10.1016/j.addma.2018.03.021

37. Mohebbi M.S., Ploshikhin V. Implementation of nucleation in cellular automaton simulation of microstructural evolution during additive manufacturing of Al alloys, Additive Manufacturing, 2020, Vol. 36, 101726. DOI: 10.1016/j.addma.2020.101726

38. Chen R., Xu Q., Liu B. Cellular automaton simulation of three-dimensional dendrite growth in Al–7Si–Mg ternary aluminum alloys, Computational Materials Science, 2015, Vol. 105, P. 90–100. DOI: 10.1016/j.commatsci.2015.04.035

39. Zinovieva O., Zinoviev A., Ploshikhin V. Three-dimensional modeling of the microstructure evolution during metal additive manufacturing, Computational Materials Science, 2018, Vol. 141, P. 207–220. DOI: 10.1016/j.commatsci.2017.09.018

40. Zinovieva O., Zinoviev A., Romanova V., Balokhonov R. Three-dimensional analysis of grain structure and texture of additively manufactured 316L austenitic stainless steel, Additive Manufacturing, 2020, Vol. 36,101521. DOI: 10.1016/j.addma.2020.101521.

41. Morel V., Bultel A., Chéron B.G. The Critical Temperature of Aluminum, International Journal of Thermophysics, 2009, Vol. 30, P. 1853–1863. DOI: 10.1007/s10765-009-0671-6

42. Ao X., Xia H., Liu J., He Q. Simulations of microstructure coupling with moving molten pool by selective laser melting using a cellular automaton, *Materials & Design*, 2020, Vol. 185, 108230. doi: 10.1016/j.matdes.2019.108230

43. Romanova V., Mohebbi M.S., Dymnich E., Balokhonov R., Ploshikhin V. A physically-based computational approach for processing-microstructure-property linkage of materials additively manufactured by laser powder bed fusion, International Journal of Mechanical Sciences, 2022, Vol. 219,107103. DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2022.107103

44. Gandin Ch.-A., Rappaz M., Tintillier R. Three-dimensional probabilistic simulation of solidification grain structures: Application to superalloy precision castings, MTA, 1993, Vol. 24, P. 467–479. DOI: 10.1007/BF02657334

45. Rappaz M., Gandin Ch.-A. Probabilistic modelling of microstructure formation in solidification processes, Acta Metallurgica et Materialia, 1993, Vol. 41, P. 345–360. DOI: 10.1016/0956-7151(93)90065-z

46. Shao G., Tsakiropoulos P. Prediction of phase selection in rapid solidification using time dependent nucleation theory, Acta Metallurgica et Materialia, 1994, Vol. 42, no. 9, P. 2937–2942. DOI:10.1016/0956-7151(94)90391-3

47. Gandin, Ch.-A., Rappaz M. A 3D Cellular Automaton algorithm for the prediction of dendritic grain growth, Acta Materialia, 1997. – Vol. 45. – P. 2187–2195. DOI: 10.1016/s1359-6454(96)00303-5

48. Kurz W., Giovanola B., Trivedi R. Theory of microstructural development during rapid solidification, Acta Metallurgica, 1986, Vol. 34, no. 5, P. 823–830.

49. Zinovieva O., Zinoviev A., Ploshikhin V., Romanova V., Balokhonov R. Strategy of computational predictions for mechanical behaviour of additively manufactured materials, Materials Science and Technology, 2018, Vol. 34, no. 3, P. 1591–1605. DOI: 10.1080/02670836.2018.1489939

50. Gandin Ch.-A., Desbiolles J.-L., Rappaz M., Thevoz Ph. A three-dimensional cellular automation-finite element model for the prediction of solidification grain structures, Metallurgical and Materials Transactions A, 1999, Vol. 30, no. 12, P. 3153–3165.

51. Rafique M.M.A. Probabilistic Modelling of Microstructural Evolution in Zr Based Bulk Metallic Glass Matrix Composites during Solidification in Additive Manufacturing, Engineering, 2018, Vol. 10, no. 04, pp. 130–141. DOI: 10.4236/eng.2018.104010

52. Lian Y., Gan Z., Yu C., Kats D., Liu W.-K., Wagner G.J. A cellular automaton finite volume method for microstructure evolution during additive manufacturing / // Materials & Design, 2019, Vol. 169, no. 6,107672. DOI: 10.1016/j.matdes.2019.107672

53. Knyazeva A. G. Sviazannaa model′ sinteza na podlozhke, Matematicheskoe modelirovanie v estestvennykh naukakh, 2023, № 1, C. 166-169.

54. Zienkiewicz O.C., Taylor R.L., Zhu J.Z. The finite element method: its basis and fundamentals. Elsevier, Amsterdam Heidelberg, 2010, 802 p.

55. Thijs L. Microstructure and Texture of Metal Parts Produced by Selective Laser Melting: doctoral thesis, KU Leuven, Faculty of Engineering Science, 2014, 294 p.

56. Yang P., Deibler L.A., Bradley D.R., Stefan D.K., Caroll J.D. Microstructure evolution and thermal properties of an additively manufactured, solution treatable AlSi10Mg part, Journal of Materials Research, 2018, Vol. 33, no. 23, P. 4040–4052. DOI: 10.1557/jmr.2018.405

57. Lathabai, S. Additive Manufacturing of Aluminium-Based Alloys and Composites, Fundamentals of Aluminium Metallurgy, 2018, P. 47–92. DOI:10.1016/B978-0-08-102063-0.00002-3

58. Siddique S., Imran M., Wycisk E. Influence of process-induced microstructure and imperfections on mechanical properties of AlSi12 processed by selective laser melting, Journal of Materials Processing Technology, 2015, Vol. 221, P. 205–213. doi: 10.1016/j.jmatprotec.2015.02.023

59. Thijs L., Kempen K., Kruth J.-P., Van Humbeeck J. Fine-structured aluminium products with controllable texture by selective laser melting of pre-alloyed AlSi10Mg powder, Acta Materialia, 2013, Vol. 61, no. 5, P. 1809–1819. DOI: 10.1016/j.actamat.2012.11.052

60. Qin H., Fallah V., Dong Q., Brochu M., Daymond M., Gallerneault M. Solidification pattern, microstructure and texture development in Laser Powder Bed Fusion (LPBF) of Al10SiMg alloy, Materials Characterization, 2018, Vol. 145, P. 29–38. DOI: 10.1016/j.matchar.2018.08.025

61. Takata N., Kodaira H., Sekizawa K., Suzuki A., Kobashi M. Change in microstructure of selectively laser melted AlSi10Mg alloy with heat treatments, Materials Science and Engineering: A, 2017, Vol. 704, no. 67, P. 218–228. DOI: 10.1016/j.msea.2017.08.029

62. Santos Macías J.G., et al. Influence on microstructure, strength and ductility of build platform temperature during laser powder bed fusion of AlSi10Mg, Acta Materialia, 2020, Vol. 201, P. 231–243. DOI: 10.1016/j.actamat.2020.10.001

63. Panwisawas C., Tang Y.T., Reed R.C. Metal 3D printing as a disruptive technology for superalloys, Nature Communications, 2020, Vol. 11, no. 1,2327. DOI: 10.1038/s41467-020-16188-7

64. Anwar A.B., Pham Q.-C. Selective laser melting of AlSi10Mg: Effects of scan direction, part placement and inert gas flow velocity on tensile strength, Journal of Materials Processing Technology, 2017, Vol. 240, P. 388–396. DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2016.10.015

Zemlyanov A.V., et al. A Study of Deformation and Fracture of the Eutectic in an Additively Manufactured Al-Si Composite Alloy / // Physical Mesomechanics, 2023, Vol. 26, no. 6, P. 678–690. DOI: 10.1134/S1029959923060073

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема FWRW-2021-0002.
Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
Вклад авторов равноценен.

Funding. The work was carried out as part of the state assignment of the Institute of Physics and Mathematics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, topic FWRW-2021-0002.
Conflict of interest. The authors declare no conflict of interest.
The authors' contributions are equal.