

М. С. Орлова, С. А. Никифоров, А. И. Горунов

ОБЗОР МЕТОДОВ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ИЗМЕНЕНИЯ ЗЕРЕННОЙ СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛА В ПРОЦЕССЕ ПЛАВЛЕНИЯ И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ДЛЯ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Ключевые слова: математическое моделирование, кристаллизация, аддитивные технологии, метод фазового поля, метод клеточных автоматов, метод Монте-Карло.

В данной работе представлен сравнительный обзор методов моделирования эволюции микроструктуры в процессе плавления и кристаллизации при воздействии лазерного источника излучения. Рассмотрены физические основы процессов плавления и кристаллизации, а также основные подходы к их моделированию. Подробно рассмотрены принципы построения моделей на основе методов фазового поля, клеточных автоматов и Монте-Карло. Наиболее точным с физической точки зрения методом моделирования микроструктурных изменений является метод фазового поля, позволяющий учитывать явления сегрегации, роста дендритов и влияние формы ванны расплава на направление и форму роста зерен. Однако метод фазового поля имеет недостаток в виде сложности его программной реализации и больших вычислительных затрат. Метод клеточных автоматов является более простым и эффективным с точки зрения реализации, но, как и метод Монте-Карло, носит случайный стохастический характер и уступает в точности. Приведены результаты исследований последних лет, связанных с моделированием изменения микроструктуры при процессах прямого лазерного выращивания и селективного лазерного плавления различными методами. Выявлены тенденции к созданию новых алгоритмов оптимизации расчета, используемых для создания моделей кристаллизации, таких как применение адаптивных сеток и модифицированного алгоритма подвижной рамки. Необходимость расчета динамики температурного поля, возникающего вследствие лазерного воздействия на материал, послужила предпосылкой к созданию связанных мультифизических моделей, сочетающих в себе методы моделирования эволюции микроструктуры и температурного воздействия (метод конечных элементов, метод сглаженных частиц и метод моделирования свободной поверхности).

M. S. Orlova, S. A. Nikiforov, A. I. Gorunov

A REVIEW OF NUMERICAL MODELING METHODS FOR THE EVOLUTION OF THE METAL GRAIN STRUCTURE DURING MELTING AND CRYSTALLIZATION FOR ADDITIVE TECHNOLOGIES

Keywords: mathematical modeling, crystallization, additive technologies, phase field method, cellular automata method, Monte Carlo method.

This paper presents a comparative review of modeling methods for the evolution of microstructure during melting and crystallization under the influence of a laser source. The physical foundations of the melting and crystallization processes, as well as the main approaches to their modeling, are considered. The principles of models development based on phase field, cellular automata and Monte Carlo methods are discussed in detail. From a physical point of view, the most accurate method of modeling microstructural changes is the phase field method, which allows taking into account the phenomena of segregation, dendrite growth, and the influence of the shape of the melt pool on the direction and shape of grain growth. However, the phase field method has a disadvantage in the form of the complexity of its software implementation and high computational costs. The cellular automata method is simpler and more efficient in terms of implementation, but, like the Monte Carlo method, it is random stochastic in nature and inferior in accuracy. The results of recent studies related to the modeling of microstructure changes during direct metal deposition and selective laser melting by various methods are presented. Trends towards the creation of new calculation optimization algorithms used to create crystallization models, such as the use of adaptive mesh and a modified firefly algorithm, have been identified. The need to calculate the dynamics of the temperature field resulting from laser exposure to the material served as a prerequisite for the creation of related multiphysical models combining methods for modeling the evolution of microstructure and dynamics of temperature effects (finite element method, smoothed particle hydrodynamics and volume of fluid method).

Введение

В настоящее время в промышленности происходит постепенный переход от традиционных субтрактивных технологий к аддитивным. Суть аддитивных технологий заключается в послойном выращивании детали, при котором весь материал и энергия расходуются лишь на создание необходимой геометрии. Аддитивное производство (АП) позволяет создавать изделия со сложной геометрией и внутренней сетчатой структурой, что способствует облегчению конструкций и активному применению аддитивных технологий в аэрокосмической,

автомобильной, медицинской и строительной отраслях промышленности [1-3].

Основным применением аддитивных технологий в промышленности является металлическая печать с использованием в качестве источника энергии лазерного излучения. Данный сектор АП включает в себя технологию прямого лазерного осаждения (Direct Energy Deposition, DED) и технологию селективного лазерного плавления (Selective Laser Melting, SLM) [1,3]. Различие технологий состоит в способе подачи материала и лазерного излучения к зоне плавления. В технологии DED материал в виде металлического порошка или проволоки вместе с лазерным излучением и потоком защитного газа

подается через сопло непосредственно в зону наплавки. В технологии SLM металлический порошок наносится тонким слоем на всю площадь подложки, а лазерный луч сканирует поверхность лишь в определенных участках, формируя объемную деталь слой за слоем.

При этом физико-механические характеристики получаемого изделия зависят от целого ряда параметров технологического процесса и от параметров материала. Мощность излучения, размер пятна лазерного луча, скорость и траектория его сканирования, толщина порошкового слоя, температура в рабочей камере оказывают значительное влияние на процесс плавления и кристаллизации материала, что напрямую сказывается на формируемой микроструктуре [4-7]. Высокая скорость охлаждения ванны расплава создает температурный градиент, способствующий росту вытянутых столбчатых зерен и образованию мелкокристаллической структуры вблизи поверхности [7,8]. Направленность формируемой зеренной структуры напрямую влияет на анизотропию свойств выращиваемой детали, а средний размер зерен – на физико-механические свойства детали, такие как предел текучести и твердость [9,10].

Для определения оптимальных параметров процесса выращивания металлических изделий необходимо проведение ряда практических экспериментов с различными комбинациями этих параметров. На полученных тестовых образцах происходит измерение основных физико-механических параметров, после чего результаты измерений анализируются и определяется наиболее подходящий режим для необходимых условий эксплуатации. Универсальным решением, позволяющим уменьшить материальные и временные затраты на подбор оптимального режима технологического процесса, в данном случае является создание численной модели процесса плавления и кристаллизации в ходе лазерного выращивания [11].

С помощью численной модели появляется возможность визуализировать эволюцию микроструктуры в процессе фазовых переходов, что не представляется возможным при реальных физических процессах плавления и кристаллизации. Таким образом, можно легко проследить влияние различных параметров технологического процесса на формирование микроструктуры выращиваемого изделия.

Физические основы плавления и кристаллизации

Процессы плавления и кристаллизации лежат в основе множества технологических процессов, таких как аддитивное производство, сварка и литье. Моделирование этих процессов на микроструктурном уровне представляет собой сложную многомасштабную задачу, требующую учета взаимосвязи между термодинамикой, кинетикой и формирующейся микроструктурой. Фундаментальной физической основой для описания

фазовых переходов первого рода, к которым относятся плавление и кристаллизация, является классическая теория Гиббса, рассматривающая зарождение новой фазы как преодоление энергетического барьера, связанного с образованием поверхности раздела.

С точки зрения моделирования, ключевым уравнением является условие равновесия на границе раздела фаз, выраженное через скачок температуры и известное как условие Гиббса-Томсона:

$$T_m = T_0 - \Gamma - \beta v_n, \quad (1)$$

где T_m – фактическая температура плавления искривленной поверхности, T_0 – равновесная температура плавления для плоской поверхности, Γ – капиллярная постоянная, β – кинетический коэффициент, v_n – нормальная скорость движения границы.

Это уравнение является основой для большинства моделей, описывающих эволюцию фронта фазы.

С математической точки зрения, полная задача моделирования связывает уравнение для движения границы с уравнениями переноса тепла и вещества. Уравнение теплопроводности с источником тепла с выделением скрытой теплоты записывается как:

$$\rho \cdot C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(k \nabla T) + L_v \left(\frac{\partial f_s}{\partial t} \right), \quad (2)$$

где ρ – плотность, C_p – теплоемкость, k – теплопроводность, L_v – скрытая теплота плавления, f_s – доля твердой фазы.

Аналогично, для сплавов необходимо решать уравнение диффузии для каждого компонента, где источником служит перераспределение примесей между твердой и жидкой фазами, описываемое равновесным коэффициентом разделения как отношение концентраций твердой и жидкой фаз $k = C_s/C_L$.

Вычислительная сложность заключается в необходимости отслеживания движущейся и быстро изменяющейся границы раздела. Можно выделить два основных подхода к моделированию:

1) *Методы с явным отслеживанием границы* (Front-Tracking). В этих методах граница раздела представляется как явная поверхность, дискретизированная набором маркеров или узлов. Движение каждого узла рассчитывается на основе локальной кривизны и скорости, определяемой из условий Гиббса-Томсона и потоков тепла/вещества. Преимуществом является высокая точность описания физики на границе. Однако, эти методы чрезвычайно сложны в реализации, особенно в трехмерном случае и при топологических изменениях, таких как слияние дендритов или образование изолированных жидких включений. Они часто используются для фундаментальных исследований, например, роста одиночного дендрита.

2) *Методы с неявным описанием границы* (Front-Capturing). Эти методы получили широкое распространение благодаря своей гибкости. Наиболее популярным среди них является метод фазового поля (ФП, Phase-Field). На сегодняшний день это доминирующий подход для моделирования микроструктурной эволюции. В методе ФП вводится

непрерывный параметр порядка φ , который плавно меняется от -1 (твердая фаза) до +1 (жидкая фаза) в узкой области, представляющей границу. Эволюция системы описывается минимизацией функционала свободной энергии Гинзбурга-Ландау. Уравнение фазового поля автоматически учитывает и капиллярные, и кинетические эффекты, а также сложные морфологические переходы. Его главное преимущество – отсутствие необходимости явно отслеживать границу; она возникает как изоконтур поля φ . Это делает метод идеальным для моделирования ветвления дендритов, образования ячеистых структур и конкурентного роста зерен. Современные разработки, такие как модели с двойным фазовым полем для многокомпонентных сплавов и методы гетерогенного зарождения, активно развиваются, что отражено в работах последних лет [12,13].

Основной вычислительной проблемой для метода фазового поля является требование к разрешению: толщина границы η должна быть много меньше характерного размера микроstructures (например, радиуса кривизны кончика дендрита), что приводит к необходимости использования очень мелких сеток. Для решения данной проблемы используются адаптивные сетки, локально сгущающиеся в области границы раздела. Другой тенденцией является развитие многомасштабных моделей, где метод фазового поля используется на микроуровне для калибровки параметров (например, кинетического коэффициента β) для более грубых моделей, таких как клеточные автоматы (КА), которые, в свою очередь, могут охватывать макроскопические объемы [14].

В следующих разделах представлены тенденции развития основных методов моделирования микроstructures применительно к процессам плавления и кристаллизации, при лазерном плавлении.

Метод фазового поля

Метод ФП как метод моделирования эволюции микроstructures в процессе кристаллизации и плавления появился в середине 1980-ых годов. В качестве предпосылок к возникновению метода ФП можно назвать введение Л. Д. Ландау понятия параметра порядка при термодинамическом описании материалов и введение В. Л. Гинзбургом градиента параметра порядка, представляющего границу раздела фаз [15]. Появление метода также связано с работами Джона Хилларда и Джона Кана об исследовании подвижной границы между твердой и жидкой фазами [16]. Уилером, Беттингером и Макфадденом в начале 1990-ых годов была представлена первая модель затвердевания сплава на основе метода ФП [17].

Метод ФП основан на термодинамике необратимых процессов и является наиболее точным, с точки зрения описания физической природы процесса, методом моделирования изменения и формирования микроstructures. Основанный на теории Гинзбурга-Ландау метод ФП описывает границу раздела фаз в виде плавно изменяющейся

функции. Каждый элемент микроstructures (зерно или дендрит) описывается в виде параметра порядка. Фазовым полем при этом называется совокупность всех параметров порядка.

Изменение фазового поля по времени выражается через функциональную производную свободной энергии Гиббса в виде уравнения Аллена-Кана или зависящего от времени уравнения Гинзбурга-Ландау:

$$\frac{\partial \eta(r, t)}{\partial t} = -L \frac{\delta F}{\delta \eta(r, t)}, \quad (3)$$

где L – подвижность межфазной границы, η – параметр порядка, F – функционал свободной энергии Гиббса.

Функционал свободной энергии Гиббса F в общем случае может быть представлен с следующим виде [18]:

$$F = \int_V (f_{chem} + f_{grad} + f_{mech} + f_{ext}) dv, \quad (4)$$

где f_{chem} – объемная плотность химической энергии, f_{grad} – объемная плотность энергии градиента, f_{mech} – объемная плотность механической энергии, f_{ext} – объемная плотность внешней энергии.

Для задач моделирования процессов плавления и кристаллизации при воздействии лазерного излучения модель фазового поля совмещается с тепловой моделью. Однако, из-за того, что метод ФП описывает процессы на микроуровне, а тепловая модель – на мезоуровне, появляется необходимость в введении расчетных сеток с разным численным разрешением. В работе [19] авторы для интерполирования температурного профиля на сетку метода ФП используют полином Тейлора второго порядка и метод наименьших квадратов. Таким образом расчет изменения температурного поля может производиться на более крупной сетке и занимать меньшее время, не теряя при этом точность расчета метода ФП.

Для сокращения вычислительных затрат при решении задач моделирования эволюции микроstructures методом ФП может применяться метод параллельных вычислений или алгоритмы подвижной рамки. Такахаши и соавторы [20] предложили модифицированный алгоритм подвижной рамки (MFA), в котором активная расчетная область ограничивается окрестностью ванны расплава и с движением лазерного источника также передвигается по всей расчетной области. Размер области и ее положение динамически определяется, исходя из местоположения ванны расплава. По мере изменения ее местоположения новые участки области подгружаются из хранилища в графический процессор (рис. 1).

Робертсом и Марианом [21] предложен 2.5-мерный подход решения задачи кристаллизации расплава при лазерном воздействии. Расчетная область представляет собой плоскость, в которой происходит расчет изменения температурного и фазового полей. В случае, когда зародышеобразование происходит в ванне расплава, то ориентация зерна наследуется от нижележащего зерна из предыдущего слоя. Таким образом в двумерном случае моделируется процесс

столбчатого роста зерен. Процесс зародышеобразования моделируется как пуассоновский процесс и определяется через критический радиус R^* и свободную энергию для нуклеации ΔG^* :

$$R^*(T) = \frac{2\gamma_i T_m}{\rho h_l (T_m - T_i)}, \quad (5)$$

$$\Delta G^*(T) = \frac{16\pi\gamma_i^3 T_m^2}{3\rho^2 h_l^2 (T_m - T_i)^2}, \quad (6)$$

где γ_i – энергия межфазной границы, T_m – плотность температура плавления, ρ – плотность материала, h_l – скрытая теплота плавления.

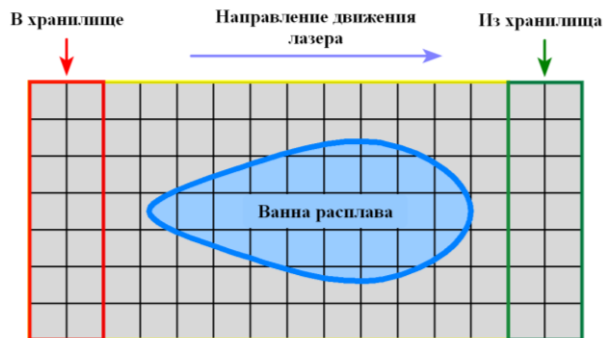


Рис. 1 – Схема передачи данных в MFA

Fig. 1 – Schematic of data transfer during MFA

В работе [22] предложена модель SPH-PFM, совмещающая метод сглаженных частиц (SPH) с методом ФП. Модель SPH использовалась для динамического моделирования ванны расплава при действии лазерного источника и включала решение уравнения Навье-Стокса с учетом сил поверхностного натяжения и течений Марангони. Далее информация о форме ванны расплава и сформированном температурном поле использовалась для решения модели фазового поля.

В комбинации с методом ФП для расчета тепловой эволюции также может использоваться метод конечных элементов (МКЭ). В исследовании [23] проводится моделирование эволюции микроструктуры суперсплава In718 во время процесса SLM. Для связи двух методов, то есть для приведения результатов расчета температурного поля методом МКЭ к временной и пространственной сетке для метода ФП, была использована кубическая сплайновая интерполяция. В работе [24] для связи метода ФП и МКЭ использовался интерполяционный полином Лагранжа.

Для задач моделирования кристаллизации расплава при АП в сочетании с методом ФП при расчете температурных градиентов в ванне расплава и скорости охлаждения может использоваться метод моделирования свободной поверхности (VOF) [25,26].

В работе [27] для учета влияния кинетической анизотропии на процесс кристаллизации расплава стали 316L вводится функция ориентации границы раздела фаз $\mu_{ij}(n_{ij})$:

$$\mu_{ij}(n_{ij}) = \mu_0 \left(1 + \varepsilon (n_{1,ij}^4 + n_{2,ij}^4 + n_{3,ij}^4 - 3) \right), \quad (7)$$

где μ_0 – модуль подвижности, ε – параметр анизотропии, n_{ij} – вектор нормали к границе раздела фаз.

На рис. 2 приведены результаты расчета кристаллизации материала после прохождения лазерного луча при различных параметрах анизотропии. Введение учета кинетической анизотропии позволяет смоделировать явление конкурентного роста зерен.

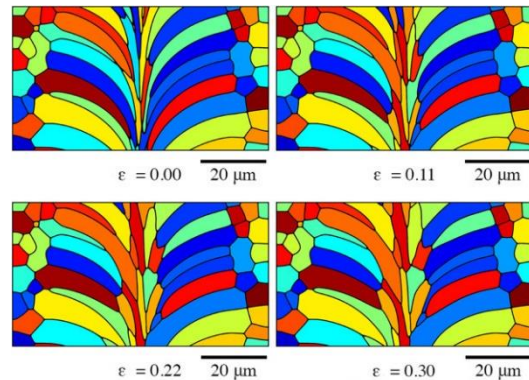


Рис. 2 – Конечная микроструктура вдоль верхней поверхности при различных параметрах анизотропии [27]

Fig. 2 – The final microstructure along the upper surface at various anisotropy parameters [27]

Одним из преимуществ метода ФП при моделировании кристаллизации является возможность моделирования роста дендритов. Однако для задач моделирования роста кристаллов в виде дендритов необходимо высокое пространственное разрешение расчетной сетки, что создает большие вычислительные затраты. Для оптимизации расчета при моделировании роста дендритов методом ФП в работе [28] используются адаптивные сетки (ADM). На границе фаз происходит уточнение пространственной сетки, тогда как в остальной области расчета размер сетки остается прежним.

Метод клеточных автоматов

Клеточные автоматы как математическая концепция были впервые предложены Джоном фон Нейманом в 1948 году [29]. Значительный вклад в развитие теории КА внесли работы Станислава Улама [30], Норберта Винера и Артуро Розенблута [31], которые исследовали применение дискретных систем для моделирования различных физических процессов.

В материаловедении метод КА начал активно применяться с 1990-х годов для моделирования процессов кристаллизации и формирования микроструктуры [32]. Важным этапом стало внедрение КА-моделей для прогнозирования зеренной структуры при затвердевании металлов [33, 34].

Метод клеточных автоматов является одним из наиболее эффективных подходов для моделирования эволюции микроструктуры в процессах АП, таких как DED и SLM. Благодаря балансу между вычислительной эффективностью и точностью, КА-

модели позволяют прогнозировать размер зерен, их морфологию, текстуру и распределение примесей в условиях быстрой кристаллизации, характерной для АП [35-38].

Клеточный автомат представляет собой дискретную систему, состоящую из: регулярной решетки (двумерной или трехмерной), конечного набора состояний для каждой ячейки, правил перехода между состояниями.

Формально КА определяется кортежем:

$$A = (L, S, N, f), \quad (8)$$

где L – расчетная сетка, S – множество состояний, N – окрестности состояний, f – функция перехода.

В КА-моделях процессов эволюции микроструктуры расчетная область дискретизируется на ячейки, каждая из которых характеризуется состоянием (жидкая, твердая, граничная), ориентацией кристалла, номером зерна и долей твердой фазы. Процессы зародышеобразования (нуклеации) и роста зерен описываются детерминированными и вероятностными правилами, учитывающими термодинамические и кинетические параметры.

В работе [35] представлена количественно модифицированная микроскопическая КА-модель, разработанная для моделирования эволюции микроструктуры никелевого суперсплава In718 в процессах кристаллизации и плавления при воздействии лазерного источника. Ключевым достижением работы является решение проблемы сохранения концентрации вещества [39] за счет заимствования подхода из моделей с размытым интерфейсом. В основе новой математической формулировки лежит уравнение диффузии вещества и перераспределения компонентов расплава:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \left(D(f_s) \nabla \left(\frac{C}{p(f_s)} \right) \right), \quad (9)$$

где C – средняя концентрация вещества в ячейке, $D(f_s)$ – коэффициент диффузии, зависящий от доли твердой фазы, $p(f_s)$ – функция преобразования, зависящий от доли твердой фазы.

Данный подход позволяет рассматривать всю расчетную область как единую фазу, что обеспечивает строгое сохранение концентрации вещества без необходимости дополнительных корректировок.

Вторым значительным прорывом стала интеграция механизмов как кристаллизации, так и плавления в рамках единой модели. Для описания кинетики этих процессов использована модель KGT (Kurz-Giovanola-Trivedi) [40,41], в которой скорость движения интерфейса определяется следующим выражением:

$$V_n = a(\Delta T)^b, \quad (10)$$

где a и b – кинетические коэффициенты.

Авторы модифицировали кинетические коэффициенты ($a = 1,4981 \cdot 10^7 \text{ м} \cdot \text{с}^{-1} \cdot \text{К}^{-3}$, $b = 3$), что позволило модели вычислять отрицательные скорости (плавление) при отрицательном переохлаждении ($\Delta T < 0$), сохраняя при этом согласованность с оригинальной моделью KGT для условий кристаллизации ($\Delta T > 0$).

В исследовании [36] представлена усовершенствованная трехмерная КА-модель, разработанная для моделирования эволюции зеренной и субзеренной структуры в сплаве Al-10Si в условиях АП, в частности, при лазерном воздействии и повторном сканировании поверхности. Ключевым нововведением работы является интеграция в КА-модель механизмов эвтектического роста, что позволяет динамически моделировать переходы между дендритным и эвтектическим режимами кристаллизации в зависимости от локальных термических условий и перераспределения компонентов расплава. Модель сочетает в себе данные термического анализа МКЭ, отслеживание перераспределения раствора, моделирование нуклеации и кинетики роста в условиях быстрой кристаллизации.

Важным аспектом является учет неравновесных эффектов, таких как захват примеси, через введение зависящего от скорости коэффициента распределения k_v по модели Азиза [42]:

$$k_{v,i} = \frac{k_i + \frac{a_0 v}{D_i}}{1 + \frac{a_0 v}{D_i}}, \quad (11)$$

где нижний индекс i – фаза сплава, k_i – равновесный коэффициент распределения фазы i , a_0 – толщина диффузного слоя на границе твердого тела и жидкости.

Для описания эвтектического роста использована модифицированная модель ТМК (Trivedi-Magnin-Kurz) [43], которая связывает вместе такие параметры, как переохлаждение ΔT , скорость роста v и расстояние между слоями λ , системой уравнений, решаемых итерационно.

В контексте моделирования процессов проволоочной лазерной наплавки (WLAM) значительный интерес представляет работа [44], где разработана комплексная модель прогнозирования микроструктуры на основе метода КА. Авторы предложили оригинальный подход к моделированию коаксиального WLAM-процесса с тремя лазерными пучками, интегрирующий термогидродинамические расчеты и кинетику кристаллизации.

В основе модели лежит гибридный подход Cellular Automaton – Finite Element (CAFE), обеспечивающий сильную двустороннюю связь между решением уравнений тепломассопереноса и моделированием роста зерен (рис. 3). Состояние каждой ячейки классифицируется на основе локальных значений температуры и функции уровня [45].

Важной особенностью модели является использование специализированного программного обеспечения Physalurgy, учитывающего термодинамические свойства многокомпонентного сплава In718.

Для многомасштабного моделирования микроструктуры при аддитивном производстве значительный интерес представляет работа [46], где разработана комплексная многофакторная модель, связывающая макропроцессы тепломассопереноса с микроскопической эволюцией структуры при

лазерной наплавке никелевого сплава In625. Авторы предложили оригинальный подход, сочетающий трехмерное моделирование мультифизических полей с моделированием методом КА динамики кристаллизации. Особенностью метода является преобразование параметров кристаллизации (градиента температуры G и скорости кристаллизации R) из пространственной области во временную, что позволяет точно прогнозировать микроструктуру по всему поперечному сечению наплавленного валика.

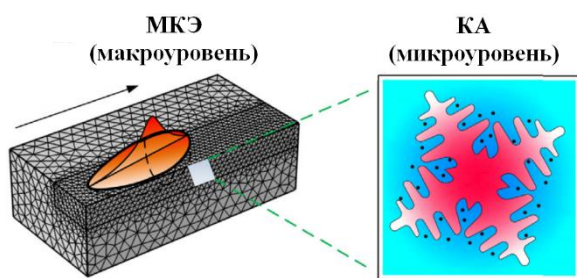


Рис. 3 – Схематическая диаграмма модели CAFE с переходом из макроуровня в микроуровень

Fig. 3 – The schematic diagram of the CAFE model with the transition from the macro-scale to the micro-scale

Для учета влияния макроскопических тепловых полей на микроструктуру используются многомасштабные модели, связывающие МКЭ или SPH с КА [45,47,48].

В работе [45] макроскопическое температурное поле, рассчитанное с помощью МКЭ, интерполировалось на КА-сетку с использованием билинейной интерполяции. Это позволило учесть влияние градиента температуры G и скорости кристаллизации R на рост и морфологию дендритов и зерен.

В модели SPH-CA (рис. 4), предложенной Ма и соавторами [48], температура в центре ячейки в модели, основанной на методе КА, вычислялась через взвешенное суммирование по частицам SPH в зоне воздействия:

$$T_i = \sum_{j=1}^n T_j W_{ij}, \quad (12)$$

где W_{ij} – сглаживающая функция ядра.

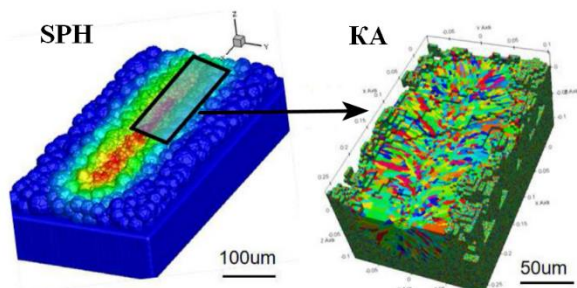


Рис. 4 – SPH-CA связанная модель

Fig. 4 – SPH-CA coupled model

Такие подходы обеспечивают высокую точность передачи данных между масштабами.

Метод Монте-Карло

История применения метода Монте-Карло (МК) для моделирования эволюции микроструктуры является ярким примером миграции математического аппарата из одной научной области в другую, где он обрел новую жизнь. Зародившийся в недрах статистической физики и теории вероятностей как инструмент для решения детерминистических задач путем случайных испытаний, метод Монте-Карло прошел путь от моделирования простейших физических систем до прогнозирования сложных микроструктурных превращений в реальных материалах.

Фундаментальной предпосылкой для его применения в материаловедении стало осознание того, что многие процессы, определяющие микроструктуру – рекристаллизация, рост зерен, фазовые превращения – носят стохастический, вероятностный характер на микроуровне и управляются стремлением системы к минимуму свободной энергии. Пионерские работы Метрополиса, Розенблютта и Теллера в 1953 году, в которых был предложен знаменитый алгоритм отбора конфигураций, заложили вычислительный фундамент. Однако, переход от моделирования идеализированных магнитных систем (модель Изинга) к описанию реальных микроструктур произошел позднее, благодаря работам таких ученых, как Маулл (Maull) и др., которые в 1970-х и 1980-х годах адаптировали так называемую модель Поттса – обобщенную модель Изинга, где спин может принимать множество дискретных значений (состояний). Именно эта многозначная переменная состояния стала цифровым аналогом кристаллографической ориентации зерна.

Метод МК на основе модели Поттса остается одним из наиболее популярных подходов для моделирования эволюции микроструктуры в процессах аддитивного производства благодаря своей вычислительной эффективности и способности учитывать стохастическую природу роста зерна. В основе метода лежит дискретная решетка, где каждому узлу присваивается целочисленное значение спина, представляющее кристаллографическую ориентацию. Соседние узлы с одинаковыми спинами образуют зерно, а границы зерен определяются участками с различными спинами. Энергия системы рассчитывается по формуле:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^L (1 - \delta(q_i, q_j)), \quad (13)$$

где N – общее число узлов, L – число соседей (например, 26 для трехмерного случая), q_i и q_j – спины узлов, δ – символ Кронекера.

Эволюция микроструктуры происходит за счет случайного переприсвоения спинов с вероятностью, определяемой по алгоритму Метрополиса:

$$P = \begin{cases} \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T_s}\right), & \Delta E > 0 \\ 1, & \Delta E \leq 0 \end{cases}, \quad (14)$$

где ΔE – изменение энергии, $k_B T_s$ – эффективная температура Монте-Карло, не связанная с физической температурой, но влияющая на шероховатость границ.

Одним из ключевых усовершенствований классической модели Поттса стало введение температурно-зависимой подвижности границ зерен, что особенно важно для моделирования процессов с высокими градиентами температуры, таких как лазерное плавление. Работа [49] предложила модификацию, в которой подвижность границ $M(T)$ описывается уравнением Аррениуса:

$$M(T) = M_0 \exp\left(-\frac{Q}{R \cdot T(t,i)}\right), \quad (15)$$

где M – предэкспоненциальный множитель, Q – энергия активации, R – газовая постоянная, $T(t,i)$ – локальная температура.

Это позволяет более реалистично моделировать рост зерен в зонах с различной термической историей [50].

Еще одним значительным шагом в развитии метода МК стало создание динамического кинетического метода МК (Dynamic KMC), предложенного [51].

Традиционные модели предполагают постоянные размеры зоны плавления (ЗП) и зоны термического влияния (ЗТВ), что не учитывает изменение тепловых условий в процессе построения детали. Dynamic KMC использует данные термического моделирования методом конечных элементов или экспериментальной термографии для обновления размеров ЗП и ЗТВ на каждом временном шаге:

$$\begin{cases} \text{ЗП}_j \\ \text{ЗТВ}_j \end{cases} = \begin{cases} \bar{\chi}, & \forall T(\bar{\chi}, t) \geq T_m \\ \bar{\chi}, & \forall T_R < T(\bar{\chi}, t) < T_m' \end{cases}, \quad (16)$$

где $\bar{\chi}$ – координаты в расчетной области, T_m – температура плавления, T_R – температура рекристаллизации.

Это позволяет учитывать внутрислоевое и межслоевое накопление тепла, что приводит к более точному предсказанию морфологии зерен в различных областях изделия. На рис. 5 из статьи [51] наглядно показаны различия в размере и форме зерен в центральных и краевых областях тонкостенной конструкции, что подтверждает важность учета нестационарных тепловых условий.

Для моделирования кристаллографической структуры в методах МК был разработан подход, учитывающий влияние локального градиента температуры на направление роста зерен. В работе [52] для прогнозирования структуры в сплаве Ti-6Al-4V, полученного методом лазерного плавления, вводится параметр θ – угол рассогласования между направлением градиента температуры и ближайшей нормалью к плоскости кристалла $\langle 001 \rangle$. Зерно с минимальным θ имеет преимущество в росте, что моделирует конкурентный отбор зерен с предпочтительной ориентацией. На рис. 6 показано хорошее соответствие между предсказанными и экспериментальными полюсными фигурами, хотя

интенсивность структуры в модели несколько занижена.

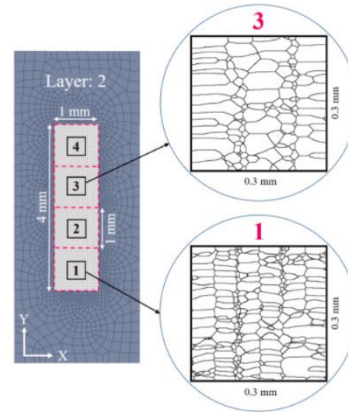


Рис. 5 – Вид прогнозируемой зеренной структуры сверху для второго слоя [51]

Fig. 5 – Planar view of the grain structure prediction for 2nd layer [51]

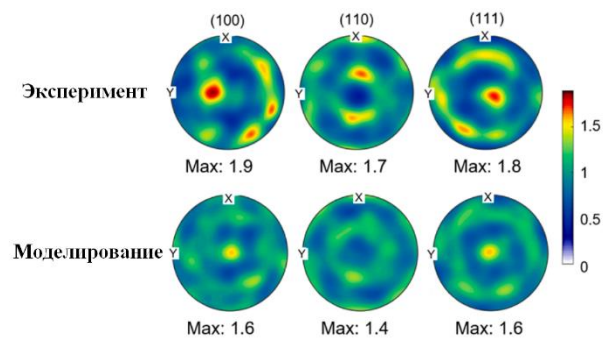


Рис. 6 – Сравнение двухмерных полюсных фигур в плоскости XY, полученных экспериментально и в результате моделирования [52]

Fig. 6 – Comparing the 2D experimental XY pole figures to the 3D simulated pole figures [52]

Сравнение методов

Рассмотренные выше методы моделирования эволюции микроструктуры при лазерном воздействии имеют свою специфику и область применения.

Метод ФП помогает получить наиболее точные результаты моделирования в связи с возможностью учета влияния ряда сопутствующих физических явлений в модели, например, капиллярных и кинетических эффектов. Данный аспект позволяет использовать метод ФП для моделирования роста зерен различного рода: не только равноосных, но и столбчатых, а также дендритных. Существенным недостатком метода является необходимость минимизации шага по временной и пространственной сеткам при расчете, что приводит к большим вычислительным затратам.

Метод КА позволяет проводить моделирование с меньшими вычислительными затратами и является более эффективным и распространенным методом моделирования эволюции микроструктуры в сравнении с методом ФП. Однако метод КА требует явного задания кинетики роста зерен и правил нуклеации, а результаты моделирования с

использованием этого метода зависят от разрешения сетки. Приблизительное описание формы и направлений роста дендритов при моделировании методом КА не может полностью отражать реальные физические явления.

Метод МК является наиболее простым в реализации и обладает высокой вычислительной эффективностью. Вероятностная природа метода МК формирует избирательный рост столбчатых зерен при моделировании, что уменьшает точность моделирования. Метод МК не учитывает такие физические явления, как рост дендритов, сегрегацию, конкурентный рост зерен и переохлаждение расплава, что позволяет применять данный метод лишь для проведения приблизительной качественной оценки микроструктуры.

Для создания сквозных прогностических моделей, охватывающих весь диапазон от макроскопических тепловых полей до микроскопической структуры, отдельные методы всё чаще объединяют в гибридные вычислительные методы.

Например, метод КА может быть использован в комбинации с методом ФП для создания модели более точной с точки зрения физических микропроцессов. Метод ФП точно определяет параметры роста зерен или форму и направление в случае роста дендритов и передает данные для дальнейшего моделирования методом КА. Создание согласованной модели, основанной на двух методах, позволяет сохранить баланс между точностью и эффективностью моделирования.

В комбинации с методами ФП, КА и МК для расчета температурного поля могут использоваться такие методы, как МКЭ, SPH и VOF. За счет интерполяции результатов расчет тепловой картины с более крупной сеткой на более мелкую для расчета микроструктурных изменений происходит ускорение расчета без потери точности. Уже устоявшейся комбинацией двух методов стало совмещение метода КА и МКЭ – CAFE, эффективно связывающего моделирование на микро- и мезоуровнях.

Заключение

Прогнозирование микроструктуры материала, формируемой в ходе АП, с помощью численного моделирования на данный момент является актуальной и развивающейся областью научных исследований. Существующие на данный момент методы моделирования кристаллизации и плавления материала при лазерном воздействии модифицируются и создают все более приближенные к реальному процессу модели. На данный момент наиболее точным методом моделирования процессов эволюции микроструктуры остается метод ФП. Одним из основных направлений развития для метода ФП и метода КА стали оптимизация алгоритмов и снижение вычислительных затрат. Применение адаптивных сеток (ADM) и алгоритмов оптимизации, например, модифицированного

алгоритма подвижной рамки (MFA), позволяют повысить скорость проводимых вычислений, не теряя при этом точности. Использование методов моделирования микроструктурных изменений в комбинации с методами расчета тепловой картины позволяет создать связанные модели, описывающие процесс кристаллизации при лазерном воздействии на материал с высокой точностью.

Работа выполнена за счет предоставленного в 2024 году Академией наук Республики Татарстан гранта на осуществление фундаментальных и прикладных научных работ в научных и образовательных организациях, предприятиях и организациях реального сектора экономики Республики Татарстан.

Литература

1. S. Patel, Y. Liu, Z. Siddique, I. Ghamarian, *J. Manuf. Process.*, **131**, 1179-1201 (2024). DOI: 10.1016/j.jmapro.2024.09.101.
2. M. Armstrong, H. Mehrabi, N. Naveed, *J. Manuf. Process.*, **84**, 1001-1029 (2022). DOI: 10.1016/j.jmapro.2022.10.060.
3. Y. Yang, R. Jiang, C. Han, J. Chen, H. Li, Y. Wang, J. Tang, H. Zhou, W. Hu, B. Zheng, Z. Liu, C. Song, D. Wang, *Additive Manufacturing Frontiers*, **3**, 4, 200160 (2024). DOI: 10.1016/j.amf.2024.200160.
4. A.A. Rasheed, O.B. Omiyale, M.T. Adamolekun, O.R. Akinnusi, B.A. Osasona, E.O. Olowolayemo, *J. Alloys Compd.*, **8**, 100129 (2025). DOI: 10.1016/j.jacomc.2025.100129.
5. S. Zhang, Y. Wang, L. Lv, H. Deng, Q. Bian, Q. Hu, L. Tan, F. Liu, *J. Alloys Compd.*, **1020**, 179465 (2025). DOI: 10.1016/j.jallcom.2025.179465.
6. L. Hao, W. Wang, J. Zeng, M. Song, S. Chang, C. Zhu, *J. Mater. Res. Technol.*, **25**, 3189-3199 (2023). DOI: 10.1016/j.jmrt.2023.06.144.
7. A. Abdali, S.H. Nedjad, H.H. Zargari, A. Saboori, M. Yildiz, *J. Mater. Res. Technol.*, **29**, 5530-5538 (2024). DOI: 10.1016/j.jmrt.2024.03.008.
8. Y. Wang, S. Huang, C. Ma, C. Wang, Y. Jiang, Y. Zhao, X. Lin, *Mater. Charact.*, **229**, 115482 (2025). DOI: 10.1016/j.matchar.2025.115482.
9. R. Nandhakumar, K. Venkatesan, *Mater. Today Commun.*, **35**, 105538 (2023). DOI: 10.1016/j.mtcomm.2023.105538.
10. J.S. Tiley, S.L. Kim, T.A. Parthasarathy, G.T. Loughnane, R. Kublik, A.A. Salem, *Mater. Sci. Eng. A*, **685**, 178-186 (2017). DOI: 10.1016/j.msea.2016.12.068.
11. N. Jyeniskhan, K. Shomenov, M.H. Ali, E. Shehab, *Int. J. Lightweight Mater. Manuf.*, **7**, 6, 860-881 (2024). DOI: 10.1016/j.ijlmm.2024.06.004.
12. B. Echebarria, R. Folch, A. Karma, M. Plapp, *Phys. Rev. E*, **70**, 061604 (2004). DOI: 10.1103/PhysRevE.70.061604.
13. D. Tourret, A. Karma, *Acta Mater.*, **61**, 17, 6474-6491 (2013). DOI: 10.1016/j.actamat.2013.07.026.
14. M. Ohno, *ISIJ Int.*, **60**, 12, 2745-2754 (2020). DOI: 10.2355/isijinternational.ISIJINT-2020-174.
15. I. Steinbach, H. Salama, *Lectures on Phase Field*, Springer Cham, 2023, C. 7-9.
16. J.W. Cahn, J.E. Hilliard, *J. Chem. Phys.*, **28**, 2, 258-267 (1958). DOI: 10.1063/1.1744102.
17. A.A. Wheeler, W.J. Boettinger, G.B. Phys. Rev. E, **47** (1993). DOI: 10.1103/PhysRevE.47.1893.
18. S.B. Biner, *Programming Phase-Field Modeling*, Springer Cham, 2017, C. 15-19.
19. A.F. Chadwick, J.G.S. Macías, A. Samaei, G.J. Wagner, M.V. Upadhyay, P.W. Voorhees, *Acta Mater.*, **282**, 120482 (2025). DOI: 10.1016/j.actamat.2024.120482.

20. Y. Takahashi, S. Sakane, T. Takaki, *Comput. Mater. Sci.*, **261**, 114265 (2026). DOI: 10.1016/j.commatsci.2025.114265.
21. C. Roberts, J. Marian, *J. Mater. Res. Technol.*, **28**, 3641-3654 (2024). DOI: 10.1016/j.jmrt.2023.12.222.
22. W. Li, L. Meng, Q. Zhang, Y. Liu, S. Wang, J. Ma, Y. Zhou, D. Zhou, H. Wang, W. Cheng, Z. You, X. Niu, Y. Zhao, *J. Mater. Res. Technol.*, **28**, 3037-3051 (2024). DOI: 10.1016/j.jmrt.2023.12.206.
23. Y. Qiu, Y.-J. Li, X.-H. Feng, A. Zhang, Y.-S. Yang, *Trans. Nonferrous Met. Soc. China*, **34**, 2, 560-575 (2024). DOI: 10.1016/S1003-6326(23)66417-9.
24. X.X. Yao, X. Gao, Z. Zhang, *J. Mater. Res. Technol.*, **20**, 934-949 (2022). DOI: 10.1016/j.jmrt.2022.07.101.
25. H. Xiang, J. Chen, *Mater. Today Commun.*, **47**, 113206 (2025). DOI: 10.1016/j.mtcomm.2025.113206.
26. A. Jammal, G. Wang, Z. JiaXin, H. Yang, S. Yang, Y. Zhong, Y. Rong, *J. Manuf. Process.*, **50**, 24-33 (2020). DOI: 10.1016/j.jmapro.2019.12.024.
27. A.F. Chadwick, P.W. Voorhees, *Acta Mater.*, **211**, 116862 (2021). DOI: 10.1016/j.actamat.2021.116862.
28. T. Takaki, *ISIJ Int.*, **54**, 2, 437-444 (2014). DOI: 10.2355/isijinternational.54.437.
29. J.V. Neumann, A.W. Burks, *Theory of Self-Reproducing Automata*, University of Illinois Press, 1966, 25 c.
30. R.E. Bellman, *PSAM*, **14** (1962). DOI: 10.1090/psapm/014.
31. N. Wiener, A. Rosenblueth, *Arch. Inst. Cardiol. Mex.*, **16**, 3, 205-265 (1946).
32. M. Rappaz, C.-A. Gandin, *Acta Metall. Mater.*, **41**, 2, 345-360 (1993). DOI: 10.1016/0956-7151(93)90065-Z.
33. C.-A. Gandin, M. Rappaz, *Acta Metall. Mater.*, **42**, 7, 2233-2246 (1994). DOI: 10.1016/0956-7151(94)90302-6.
34. C.-A. Gandin, M. Rappaz, *Acta Mater.*, **45**, 5, 2187-2195 (1997). DOI: 10.1016/S1359-6454(96)00303-5.
35. Z. Wang, Z. Chen, Q. Zhang, X. Wang, *J. Cryst. Growth*, **652**, 128052 (2025). DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2024.128052.
36. K. Kang, L. Yuan, C. Sun, J. Miranda, A. B. Phillion, *Mater. Des.*, **256**, 114244 (2025). DOI: 10.1016/j.matdes.2025.114244.
37. A. Azarniya, X. G. Colera, M. J. Mirzaali, S. Sovizi, F. Bartolomeu, M. S. Weglowski, W. W. Wits, C. Y. Yap, J. Ahn, G. Miranda, F. S. Silva, H. R. M. Hosseini, S. Ramakrishna, A. A. Zadpoor, *J. Alloys Compd.*, **804**, 163-191 (2019). DOI: 10.1016/j.jallcom.2019.04.255.
38. J. Zhang, S. Zhang, G. Xiang, C. Shu, X. Li, X. Zhu, Q. Gu, L. Hua, S. g. Xue, Z. Yao, *J. Mater. Res. Technol.*, **38**, 4892-4907 (2025). DOI: 10.1016/j.jmrt.2025.08.121.
39. M.F. Zhu, D.M. Stefanescu, *Acta Mater.*, **55**, 5, 1741-1755 (2007). DOI: 10.1016/j.actamat.2006.10.037.
40. W. Kurz, B. Giovanola, R. Trivedi, *Acta Metallurgica*, **34**, 5, 823-830 (1986). DOI: 10.1016/0001-6160(86)90056-8.
41. O. Hunziker, D. Dye, R.C. Reed, *Acta Mater.*, **48**, 17, 4191-4201 (2000). DOI: 10.1016/S1359-6454(00)00273-1.
42. M. J. Aziz, *J. Appl. Phys.*, **53**, 1158-1168 (1982). DOI: 10.1063/1.329867.
43. R. Trivedi, P. Magnin, W. Kurz, *Acta Metallurgica*, **35**, 4, 971-980 (1987). DOI: 10.1016/0001-6160(87)90176-3.
44. Z. Kong, G. Guillemot, M. Bellet, C.-A. Gandin, *Materialia*, **42**, 102461 (2025). DOI: 10.1016/j.mtla.2025.102461.
45. G. Meng, Y. Gong, J. Zhang, L. Zhu, H. Xie, J. Zhao, *Int. J. Heat Mass Transf.*, **191**, 122798 (2022). DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2022.122798.
46. L. Chen, J. Wang, Q. Wang, S. Zhao, T. Yu, Y. Zhao, *Int. J. Heat Mass Transf.*, **239**, 126538 (2025). DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2024.126538.
47. H. Fang, H. Ge, Q. Zhang, Y. Liu, J. Yao, *Int. J. Heat Mass Transf.*, **216**, 124554 (2023). DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2023.124554.
48. J. Ma, X. Niu, Y. Zhou, W. Li, Y. Liu, M. Shen, H. Wang, W. Cheng, Z. You, *J. Mater. Res. Technol.*, **27**, 600-616 (2023). DOI: 10.1016/j.jmrt.2023.09.296.
49. T. M. Rodgers, D. Moser, F. Abdeljawad, O. D. U. Jackson, J. D. Carroll, B. H. Jared, D. S. Bolintineanu, J. A. Mitchell, J. D. Madison, *Addit. Manuf.*, **41**, 101953 (2021). DOI: 10.1016/j.addma.2021.101953.
50. L. Zhou, G. Liu, M. Sun, Q. Tu, J. Li, *J. Mater. Res.*, **38**, 1706-1718 (2023). DOI: 10.1557/s43578-023-00923-z.
51. S. Sunny, H. Yu, R. Mathews, A. Malik, W. Li, *Addit. Manuf.*, **37**, 101649 (2021). DOI: 10.1016/j.addma.2020.101649.
52. B. C. Whitney, T. M. Rodgers, A. G. Spangenberg, A. A. Rezwan, D. M. O. Zapiain, D. A. Lados, *Materialia*, **38**, 102279 (2024). DOI: 10.1016/j.mtla.2024.102279.

References

1. S. Patel, Y. Liu, Z. Siddique, I. Ghamarian, *J. Manuf. Process.*, **131**, 1179-1201 (2024). DOI: 10.1016/j.jmapro.2024.09.101.
2. M. Armstrong, H. Mehrabi, N. Naveed, *J. Manuf. Process.*, **84**, 1001-1029 (2022). DOI: 10.1016/j.jmapro.2022.10.060.
3. Y. Yang, R. Jiang, C. Han, J. Chen, H. Li, Y. Wang, J. Tang, H. Zhou, W. Hu, B. Zheng, Z. Liu, C. Song, D. Wang, *Additive Manufacturing Frontiers*, **3**, 4, 200160 (2024). DOI: 10.1016/j.amf.2024.200160.
4. A.A. Rasheed, O.B. Omiyale, M.T. Adamolekun, O.R. Akinnusi, B.A. Osasona, E.O. Olowolayemo, *J. Alloys Compd.*, **8**, 100129 (2025). DOI: 10.1016/j.jacomc.2025.100129.
5. S. Zhang, Y. Wang, L. Lv, H. Deng, Q. Bian, Q. Hu, L. Tan, F. Liu, *J. Alloys Compd.*, **1020**, 179465 (2025). DOI: 10.1016/j.jallcom.2025.179465.
6. L. Hao, W. Wang, J. Zeng, M. Song, S. Chang, C. Zhu, *J. Mater. Res. Technol.*, **25**, 3189-3199 (2023). DOI: 10.1016/j.jmrt.2023.06.144.
7. A. Abdali, S.H. Nedjad, H.H. Zargari, A. Saboori, M. Yildiz, *J. Mater. Res. Technol.*, **29**, 5530-5538 (2024). DOI: 10.1016/j.jmrt.2024.03.008.
8. Y. Wang, S. Huang, C. Ma, C. Wang, Y. Jiang, Y. Zhao, X. Lin, *Mater. Charact.*, **229**, 115482 (2025). DOI: 10.1016/j.matchar.2025.115482.
9. R. Nandhakumar, K. Venkatesan, *Mater. Today Commun.*, **35**, 105538 (2023). DOI: 10.1016/j.mtcomm.2023.105538.
10. J.S. Tile, S.L. Kim, T.A. Parthasarathy, G.T. Loughnane, R. Kublik, A.A. Salem, *Mater. Sci. Eng. A*, **685**, 178-186 (2017). DOI: 10.1016/j.msea.2016.12.068.
11. N. Jyeniskhan, K. Shomenov, M.H. Ali, E. Shehab, *Int. J. Lightweight Mater. Manuf.*, **7**, 6, 860-881 (2024). DOI: 10.1016/j.ijlmm.2024.06.004.
12. B. Echebarria, R. Folch, A. Karma, M. Plapp, *Phys. Rev. E*, **70**, 061604 (2004). DOI: 10.1103/PhysRevE.70.061604.
13. D. Tourret, A. Karma, *Acta Mater.*, **61**, 17, 6474-6491 (2013). DOI: 10.1016/j.actamat.2013.07.026.
14. M. Ohno, *ISIJ Int.*, **60**, 12, 2745-2754 (2020). DOI: 10.2355/isijinternational.ISIJINT-2020-174.
15. I. Steinbach, H. Salama, *Lectures on Phase Field*, Springer Cham, 2023, P. 7-9.
16. J.W. Cahn, J.E. Hilliard, *J. Chem. Phys.*, **28**, 2, 258-267 (1958). DOI: 10.1063/1.1744102.
17. A.A. Wheeler, W.J. Boettinger, G.B. Phys. Rev. E, **47** (1993). DOI: 10.1103/PhysRevE.47.1893.
18. S.B. Biner, *Programming Phase-Field Modeling*, Springer Cham, 2017, P. 15-19.
19. A.F. Chadwick, J.G.S. Macías, A. Samaei, G.J. Wagner, M.V. Upadhyay, P.W. Voorhees, *Acta Mater.*, **282**, 120482 (2025). DOI: 10.1016/j.actamat.2024.120482.
20. Y. Takahashi, S. Sakane, T. Takaki, *Comput. Mater. Sci.*, **261**, 114265 (2026). DOI: 10.1016/j.commatsci.2025.114265.

21. C. Roberts, J. Marian, *J. Mater. Res. Technol.*, **28**, 3641-3654 (2024). DOI: 10.1016/j.jmrt.2023.12.222.
22. W. Li, L. Meng, Q. Zhang, Y. Liu, S. Wang, J. Ma, Y. Zhou, D. Zhou, H. Wang, W. Cheng, Z. You, X. Niu, Y. Zhao, *J. Mater. Res. Technol.*, **28**, 3037-3051 (2024). DOI: 10.1016/j.jmrt.2023.12.206.
23. Y. Qiu, Y.-J. Li, X.-H. Feng, A. Zhang, Y.-S. Yang, *Trans. Nonferrous Met. Soc. China*, **34**, 2, 560-575 (2024). DOI: 10.1016/S1003-6326(23)66417-9.
24. X.X. Yao, X. Gao, Z. Zhang, *J. Mater. Res. Technol.*, **20**, 934-949 (2022). DOI: 10.1016/j.jmrt.2022.07.101.
25. H. Xiang, J. Chen, *Mater. Today Commun.*, **47**, 113206 (2025). DOI: 10.1016/j.mtcomm.2025.113206.
26. A. Jammal, G. Wang, Z. JiaXin, H. Yang, S. Yang, Y. Zhong, Y. Rong, *J. Manuf. Process.*, **50**, 24-33 (2020). DOI: 10.1016/j.jmapro.2019.12.024.
27. A.F. Chadwick, P.W. Voorhees, *Acta Mater.*, **211**, 116862 (2021). DOI: 10.1016/j.actamat.2021.116862.
28. T. Takaki, *ISIJ Int.*, **54**, 2, 437-444 (2014). DOI: 10.2355/isijinternational.54.437.
29. J.V. Neumann, A.W. Burks, *Theory of Self-Reproducing Automata*, University of Illinois Press, 1966, 25 p.
30. R.E. Bellman, *PSAM*, **14** (1962). DOI: 10.1090/psapm/014.
31. N. Wiener, A. Rosenbluth, *Arch. Inst. Cardiol. Mex.*, **16**, 3, 205-265 (1946).
32. M. Rappaz, C.-A. Gandin, *Acta Metall. Mater.*, **41**, 2, 345-360 (1993). DOI: 10.1016/0956-7151(93)90065-Z.
33. C.-A. Gandin, M. Rappaz, *Acta Metall. Mater.*, **42**, 7, 2233-2246 (1994). DOI: 10.1016/0956-7151(94)90302-6.
34. C.-A. Gandin, M. Rappaz, *Acta Mater.*, **45**, 5, 2187-2195 (1997). DOI: 10.1016/S1359-6454(96)00303-5.
35. S. Wang, Z. Chen, Q. Zhang, X. Wang, *J. Cryst. Growth*, **652**, 128052 (2025). DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2024.128052.
36. K. Kang, L. Yuan, C. Sun, J. Miranda, A. B. Phillion, *Mater. Des.*, **256**, 114244 (2025). DOI: 10.1016/j.matdes.2025.114244.
37. A. Azarniya, X. G. Colera, M. J. Mirzaali, S. Sovizi, F. Bartolomeu, M. S. Weglowski, W. W. Wits, C. Y. Yap, J. Ahn, G. Miranda, F. S. Silva, H. R. M. Hosseini, S. Ramakrishna, A. A. Zadpoor, *J. Alloys Compd.*, **804**, 163-191 (2019). DOI: 10.1016/j.jallcom.2019.04.255.
38. J. Zhang, S. Zhang, G. Xiang, C. Shu, X. Li, X. Zhu, Q. Gu, L. Hua, S.g. Xue, Z. Yao, *J. Mater. Res. Technol.*, **38**, 4892-4907 (2025). DOI: 10.1016/j.jmrt.2025.08.121.
39. M.F. Zhu, D.M. Stefanescu, *Acta Mater.*, **55**, 5, 1741-1755 (2007). DOI: 10.1016/j.actamat.2006.10.037.
40. W. Kurz, B. Giovanola, R. Trivedi, *Acta Metallurgica*, **34**, 5, 823-830 (1986). DOI: 10.1016/0001-6160(86)90056-8.
41. O. Hunziker, D. Dye, R.C. Reed, *Acta Mater.*, **48**, 17, 4191-4201 (2000). DOI: 10.1016/S1359-6454(00)00273-1.
42. M. J. Aziz, *J. Appl. Phys.*, **53**, 1158-1168 (1982). DOI: 10.1063/1.329867.
43. R. Trivedi, P. Magnin, W. Kurz, *Acta Metallurgica*, **35**, 4, 971-980 (1987). DOI: 10.1016/0001-6160(87)90176-3.
44. Z. Kong, G. Guillemot, M. Bellet, C.-A. Gandin, *Materialia*, **42**, 102461 (2025). DOI: 10.1016/j.mtla.2025.102461.
45. G. Meng, Y. Gong, J. Zhang, L. Zhu, H. Xie, J. Zhao, *Int. J. Heat Mass Transf.*, **191**, 122798 (2022). DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2022.122798.
46. L. Chen, J. Wang, Q. Wang, S. Zhao, T. Yu, Y. Zhao, *Int. J. Heat Mass Transf.*, **239**, 126538 (2025). DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2024.126538.
47. H. Fang, H. Ge, Q. Zhang, Y. Liu, J. Yao, *Int. J. Heat Mass Transf.*, **216**, 124554 (2023). DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2023.124554.
48. J. Ma, X. Niu, Y. Zhou, W. Li, Y. Liu, M. Shen, H. Wang, W. Cheng, Z. You, *J. Mater. Res. Technol.*, **27**, 600-616 (2023). DOI: 10.1016/j.jmrt.2023.09.296.
49. T. M. Rodgers, D. Moser, F. Abdeljawad, O. D. U. Jackson, J. D. Carroll, B. H. Jared, D. S. Bolintineanu, J. A. Mitchell, J. D. Madison, *Addit. Manuf.*, **41**, 101953 (2021). DOI: 10.1016/j.addma.2021.101953.
50. L. Zhou, G. Liu, M. Sun, Q. Tu, J. Li, *J. Mater. Res.*, **38**, 1706-1718 (2023). DOI: 10.1557/s43578-023-00923-z.
51. S. Sunny, H. Yu, R. Mathews, A. Malik, W. Li, *Addit. Manuf.*, **37**, 101649 (2021). DOI: 10.1016/j.addma.2020.101649.
52. B. C. Whitney, T. M. Rodgers, A. G. Spangenberg, A. A. Rezwan, D. M. O. Zapiain, D. A. Lados, *Materialia*, **38**, 102279 (2024). DOI: 10.1016/j.mtla.2024.102279.

© **М. С. Орлова** – аспирант кафедры Лазерных и аддитивных технологий (ЛАТ), Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева (КНИТУ им. А.Н. Туполева), Казань, Россия, MSOrlova@kai.ru; **С. А. Никифоров** – старший преподаватель кафедры ЛАТ, КНИТУ им. А.Н. Туполева, SANikiforov@kai.ru; **А. И. Горун** – д.т.н., профессор кафедры ЛАТ, КНИТУ им. А.Н. Туполева, AIGorunov@kai.ru.

© **M. S. Orlova** – PhD-student, Department of Laser and Additive Technologies (LAT), Kazan National Research Technical University named after A.N. Tupolev (KNRTU named after A.N. Tupolev), Kazan, Russia, MSOrlova@kai.ru; **S. A. Nikiforov** – Assistant Professor of the LAT department, KNRTU named after A.N. Tupolev, SANikiforov@kai.ru; **A. I. Gorunov** – Doctor of Sciences (Technical Sci.), Professor of the LAT department, KNRTU named after A.N. Tupolev, AIGorunov@kai.ru.

Дата поступления рукописи в редакцию – 23.10.25.

Дата принятия рукописи в печать – 10.10.25.