

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ В СЛОЕ ГИДРОКСИАПАТИТА В ПРОЦЕССЕ СЕЛЕКТИВНОГО ЛАЗЕРНОГО СПЕКАНИЯ

Виктор Павлович Бессмельцев

Институт автоматизации и электрометрии СО РАН, 630090, Россия, г. Новосибирск, пр. Академика Коптюга, 1, кандидат технических наук, зав. лабораторией, тел. (383)333-24-91, e-mail: bessmelt@iae.nsk.su

Андрей Андреевич Иванов

Институт автоматизации и электрометрии СО РАН, 630090, Россия, г. Новосибирск, пр. Академика Коптюга, 1, инженер-программист, тел. (923)120-05-14, e-mail: fylhtq744@bk.ru

Формирование костных имплантатов на основе гидроксиапатита методом прямого спекания с использованием лазерных аддитивных технологий является перспективным. Однако в настоящее время технологии прямого сплавления гидроксиапатита позволяет получить пространственное разрешение по XY не лучше 2 мм, при этом для реальных изделий требуется около 200 мкм. Процесс формообразования характеризуется широким диапазоном параметров, и проведение натурных экспериментов для подбора режимов обработки, позволяющих увеличить разрешение, требует больших временных затрат. В связи с этим разработана и реализована численная модель, позволяющая симулировать процесс селективного лазерного плавления порошка гидроксиапатита. Данная модель может быть применена для определения допустимого диапазона параметров процесса.

Ключевые слова: селективное лазерное спекание, моделирование, гидроксиапатит, аддитивные технологии, метод конечных объемов, теплопроводность.

SIMULATION OF THE TEMPERATURE DISTRIBUTION IN A HYDROXYAPATITE LAYER DURING SELECTIVE LASER SINTERING

Victor P. Bessmeltsev

Institute of Automation and Electrometry SB RAS, 1, Prospect Akademik Koptyug St., Novosibirsk, 630090, Russia, Ph. D., Head of Laboratory, phone: (383)333-24-91, e-mail: bessmelt@iae.nsk.su

Andrey A. Ivanov

Institute of Automation and Electrometry SB RAS, 1, Prospect Akademik Koptyug St., Novosibirsk, 630090, Russia, Engineer-Programmer, phone: (923)120-05-14, e-mail: fylhtq744@bk.ru

The production of the hydroxyapatite based bone implants by the direct sintering using laser additive technologies is promising. However, at the present time, the direct melting of the hydroxyapatite technologies make it possible to obtain the spatial XY resolution not better than 2 mm, while for a real products about 200 μm are required. The production process is characterized by the wide range of parameters, and carrying out field experiments for the selection of the processing modes, allowing to increase the resolution, requires a lot of time. In this regard, the numerical model that allows to simulate the process of selective laser melting of the hydroxyapatite powder has been developed and implemented. This model can be applied to determine the acceptable range of the processing parameters.

Key words: selective laser sintering, simulation, hydroxyapatite, additive technologies, finite volume method, thermal conductivity.

Введение

В последние несколько лет аддитивные технологии получили широкое применение в различных областях производства. В основе всех технологий данного типа лежит послойное формирование изделия посредством дозированной подачи энергии и строительного материала в область построения. Геометрическая структура объекта задается его трехмерной моделью, разработанной с помощью САПР, на основании которой формируется набор двумерных сечений, что позволяет осуществить послойное формообразование изделия.

Одной из возможных областей применения аддитивных технологий является производство трехмерных пористых структур (скаффолдов), на основе которых осуществляется восстановление естественных тканей костей. К ним предъявляется ряд требований [1]:

- скаффолды и продукты их распада должны быть биосовместимыми и нетоксичными;
- пористая внутренняя структура, для активной миграции клеток внутрь скаффолда. Средний размер пор около 150 мкм;
- для обеспечения опорной функции скелета механическая прочность должна быть сопоставима с прочностью настоящей человеческой кости. Прочность на сжатие вдоль длинной оси 100–230 МПа (10 МПа для губчатой кости) [2], модуль Юнга 7–30 ГПа, предел прочности на разрыв 50–151 МПа;
- повторение контуров собственной кости человека.

С помощью аддитивных технологий становится возможным производство пористых структур с регулируемым размером и распределением пор в единичных экземплярах в соответствии с требуемой формой. В качестве исходного материала для производства скаффолдов могут применяться металлы, биокерамики, биоактивные стекла и полимеры, а также их сочетания. Наибольший интерес представляют биокерамики (гидроксиапатит, в частности, как основная минеральная составляющая естественных костей), гарантирующие биологическую совместимость и отсутствие токсичности [1].

Для производства скаффолдов из гидроксиапатита могут применяться следующие технологии аддитивного производства: лазерная стереолитография (stereolithography, SLA) [3, 4], моделирование методом послойного наплавления (fuseddepositionmodelling, FDM) [5], селективное лазерное плавление (selectivelasermelting, SLM) и селективное лазерное спекание (selectivelasersintering, SLS). При этом если речь идет о первых двух технологиях, то необходимо использование дополнительного полимерного связующего, удаляемого в процессе постобработки, что требует дополнительного времени, кроме того в результате неполного удаления полимера может приводить к формированию токсичных соединений. Технологии SLS, SLM допускают применение дополнительного связующего, но при этом позволяют полностью обходиться без него [6]. Несмотря на достаточную механическую прочность изделий из гидроксиапатита для имитации губчатой кости, его прочности оказывается недостаточно для ис-

пользования в несущих областях костей. Существует ряд исследований, посвященных зависимости прочности изделий из гидроксиапатита от температурных режимов обработки [7–9]. Согласно им, необходимо ограничивать максимальную температуру в ходе обработки, а также сокращать время воздействия.

Несколько работ посвящены режимам обработки чистого гидроксиапатита методом селективного лазерного спекания. В процессе SLS порошок из гидроксиапатита (или другого материала) распределяется тонким ($\sim 10\text{--}100$ мкм) слоем в области обработки, и с помощью лазерного луча нагревается до температуры спекания в областях, соответствующих двумерному сечению формируемого объекта. В процессе обработки слоя осуществляется его связь с предыдущим, что в результате приводит к формированию трехмерного изделия. Процесс характеризуется размером частиц, толщиной слоя порошка, скоростью движения лазерного луча, его мощностью, размером пятна и траекторией движения. При этом размер пятна определяет разрешение печати (необходимо добиться разрешения ~ 100 мкм). Однако в настоящее время технологий прямого сплавления гидроксиапатита позволяет производить изделия с разрешением около 2 мм [6, 10], что связано с низкой теплопроводностью материала и высокой температурой плавления, требующими увеличения размеров пятна лазера для обеспечения равномерного прогрева слоя порошка.

Таким образом, требуется разработать режимы обработки порошка гидроксиапатита методом селективного лазерного спекания с применением пятна малого размера, контролируя температурное распределение в пределах обрабатываемого слоя для повышения прочности изделий. Так как процесс характеризуется широким набором параметров, подбор параметров обработки методом проведения натуральных экспериментов становится нецелесообразным, в связи с этим возникает задача разработки численной модели процесса лазерного спекания порошков с малой теплопроводностью и режимов обработки, включающих многократное сканирование, предположительно позволяющее обеспечить равномерный прогрев слоя, сохраняя при этом малый размер лазерного пятна.

Физическая постановка задачи

При рекомендуемых температурах обработки гидроксиапатита материал не переходит к стадии полного плавления, так что можно считать, что основным механизмом распространения тепла в слое порошка является кондуктивный механизм теплопереноса, описываемый уравнением теплопроводности:

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

где T – температура; t – время; x , y , z – пространственные координаты; $\rho(T)$, $c(T)$, $k(T)$ – соответственно плотность, удельная теплоемкость и коэффициент теплопроводности среды в зависимости от температуры; Q – источ-

ник тепла. Под средой здесь понимается слой порошка, рассматриваемый в качестве однородного материала с усредненными параметрами.

Так как слой порошка является пористым, имеет место поглощение энергии лазера в объеме в результате частичного отражения лазерного излучения от поверхности частиц и описывается экспоненциально затухающим вглубь (закон Бэра – Ламберта). Источник тепла описывается следующей формулой:

$$Q = \frac{2\alpha P \gamma}{\pi \omega^2} e^{-\gamma z} e^{-2\frac{(x-x_c)^2}{\omega^2}} e^{-2\frac{(y-y_c)^2}{\omega^2}}, \quad (2)$$

где α – коэффициент поглощения лазерного излучения средой; P – мощность лазерного излучения; γ – коэффициент затухания; ω – радиус лазерного пятна по уровню e^{-2} ; $x_c = x_0 + v_x t$, $y_c = y_0 + v_y t$ – координаты текущего положения центра лазерного луча; x_0 , y_0 – координаты центра лазерного луча в начале эксперимента; v_x , v_y – компоненты скорости движения лазерного луча, ось z здесь направлена вверх и отсчитывается от поверхности слоя порошка.

Для всех открытых поверхностей, кроме верхней поставлено условие тепловой изоляции:

$$k(T) \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} = 0, \quad (3)$$

где \vec{n} – вектор нормали к поверхности. На верхней поверхности условие конвективного теплообмена с окружающей средой:

$$k(T) \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} = h(T_0 - T), \quad (4)$$

где h – коэффициент теплоотдачи; T_0 – температура окружающей среды.

Дискретизация уравнений

Для решения поставленной задачи предлагается применять метод конечных объемов ввиду его консервативности в пределах всего рассматриваемого объема, а также простоты реализации. Для осуществления дискретизации уравнения (1) осуществляется его интегрирование по объему и к правой части применяется формула Гаусса – Остроградского, сводящая интеграл величины по объему к интегралу ее потока по поверхности объема. В результате получаем

$$\rho(T)c(T)V \frac{\partial T}{\partial t} = \oint_S k(T) \nabla T \vec{n} dS, \quad (5)$$

где V – объем рассматриваемой области (конечного объема, в пределах которого температура считается одинаковой); S – поверхность конечного объема.

В ходе моделирования задачи рассматривается область в виде прямоугольного параллелепипеда, который разбивается на конечные объемы плоскостями параллельными его граням. В результате каждый конечный объем обладает шестью гранями и уравнение (5) можно представить в виде суммы потоков через них:

$$\rho_i(T_i)c_i(T_i)V_i \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\tau} = \sum_{j=0}^5 \frac{k_i(T_i) + k_j(T_j)}{2} \frac{T_j^n - T_i^n}{r_{ij}} S_{ij}, \quad (6)$$

где i – индекс рассматриваемого конечного объема; n – номер временного шага; τ – разница по времени между последовательными временными шагами; j – индекс одного из шести соседних конечных объемов; r_{ij} , S_{ij} – расстояние между центрами конечных объемов и площадь границы между ними. В случае если рассматриваемый конечный объем находится на границе и не обладает всеми соседями, соответствующие потоки рассчитываются согласно уравнениям (3), (4).

Необходимо также проинтегрировать по объему источник тепла, описываемый уравнением (2). С учетом использования прямоугольной сетки получим:

$$Q_i = \int_{z_1}^{z_2} dz \int_{y_1}^{y_2} dy \int_{x_1}^{x_2} Q dx = \frac{P}{4} (e^{\gamma z_2} - e^{\gamma z_1}) \times \\ \times \left(\operatorname{erf} \left(\sqrt{2} \frac{x_2 - x_c}{\omega} \right) - \operatorname{erf} \left(\sqrt{2} \frac{x_1 - x_c}{\omega} \right) \right) \left(\operatorname{erf} \left(\sqrt{2} \frac{y_2 - y_c}{\omega} \right) - \operatorname{erf} \left(\sqrt{2} \frac{y_1 - y_c}{\omega} \right) \right), \quad (7)$$

где x_1 , x_2 , y_1 , y_2 , z_1 , z_2 – координаты границ рассматриваемого объема.

Параметры модели и материала

Для определения корректности реализации предложенной модели предлагается сравнить полученные с ее помощью результаты с результатами аналогичного исследования [11]. Для этого адаптированы следующие параметры, приведенные в табл. 1.

В табл. 2 из исследования [11] приведены параметры материала при различных температурах. Так как не уточняется, каким образом были получены значения в промежуточных значениях температуры, в данной работе применена линейная интерполяция. Кроме того, в работе [11] не рассматривается процесс усадки, однако плотность вещества при температуре 1 300 °С возрастает до значений, соответствующих сплошному гидроксипатиту.

Таблица 1

Параметры модели

Ширина, длина и высота рассматриваемой области, мм	4×20×2
Начальная температура, °С	20
r_{ij} , мм	0,2
α	0,87
P , Вт	10
ω , мм	$\sqrt{2}$
h , Вт/(м ² ·К)	20
v_x ; v_y , мм/с	0; 3,(3)

Таблица 2

Эффективные параметры слоя порошка гидроксиапатита при различных температурах

Температура, °С	20	100	200	300	500	1 300
Теплопроводность, Вт/(м·К)	0,087	0,12	0,13	0,15	0,18	1,3
Удельная теплоемкость, Дж/(кг·К)	950	1 300	1 500	1 700	1 800	765
Плотность, кг/м ³	1 454	1 454	1 454	1 454	1 485	3 182

В связи с несоответствием данных, представленных в табл. 2, и описанием механизма эксперимента, а также тем, что в рассматриваемой задаче имеет значение только произведение удельной теплоемкости и плотности, предлагается считать плотность среды постоянной (равной 1 454 кг/м³), а значение удельной теплоемкости выбирать таким, чтобы произведение параметров соответствовало табл. 2. Так как в опорном исследовании источник тепла предполагается поверхностным, то параметр γ выбран большим для имитации поглощения всей энергии лазера поверхностью слоя порошка.

Результаты и обсуждение

Для оценки корректности реализации и работы алгоритма проведено сравнение с результатами, полученными в исследовании [11], посредством воспроизведения численных экспериментов. В них рассматривается движение лазерного пятна с постоянной скоростью по прямой траектории параллельной оси y и координатой x соответствующей середине рассматриваемой области (рис. 1). Результатами численного эксперимента является эволюция температуры в выделенных точках. На рис. 2 представлены зависимости температуры в точках от времени, полученные с использованием разработанной модели (черная сплошная линия), а также результаты исследования [11] (зеленая пунктирная линия). На рис. 2, а присутствуют зависимости для трех точек: опорная точка располагается на поверхности рассматриваемой области на траектории центра лазерного пятна, вторая точка располагается аналогично первой, но отстоит от нее на

8 мм по ходу движения лазерного пятна, третья точка также расположена на поверхности и отстоит от второй на 0,6 мм в направлении оси x . На рис. 2, б также представлены зависимости для трех точек: опорная точка располагается также как для рис. 2, а, две другие расположены под ней через одинаковые расстояния (0,4 мм).

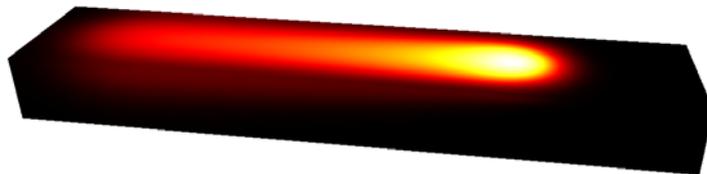


Рис. 1. Характерный вид температурного распределения для рассматриваемого численного эксперимента

Из рис. 2, а видно, что по результатам данного исследования максимальная температура поверхности ниже, чем в исследовании [11], а относительное ее снижение при отступе в сторону соответствует ему. Сделано предположение, что это результат использования метода конечных объемов, так как при его использовании энергия поглощается не поверхностью непосредственно, а приповерхностным объемом, толщина которого соответствует шагу дискретизации по оси z . Проведен аналогичный эксперимент с уменьшенным шагом дискретизации, что ожидается привело к повышению температуры поверхности в результате локализации поглощенной энергии. Также заметим, что нагревание поверхности в модели данного исследования происходит раньше, что соответствует форме лазерного пятна, также из рис. 2, б видно, что температура глубоких точек более высокая по сравнению с результатами исследования [11], кроме того остывание поверхности требует больше времени. Это можно объяснить тем, что энергия лазерного излучения сначала «проваливается» вглубь слоя, а затем подогревает поверхность изнутри.

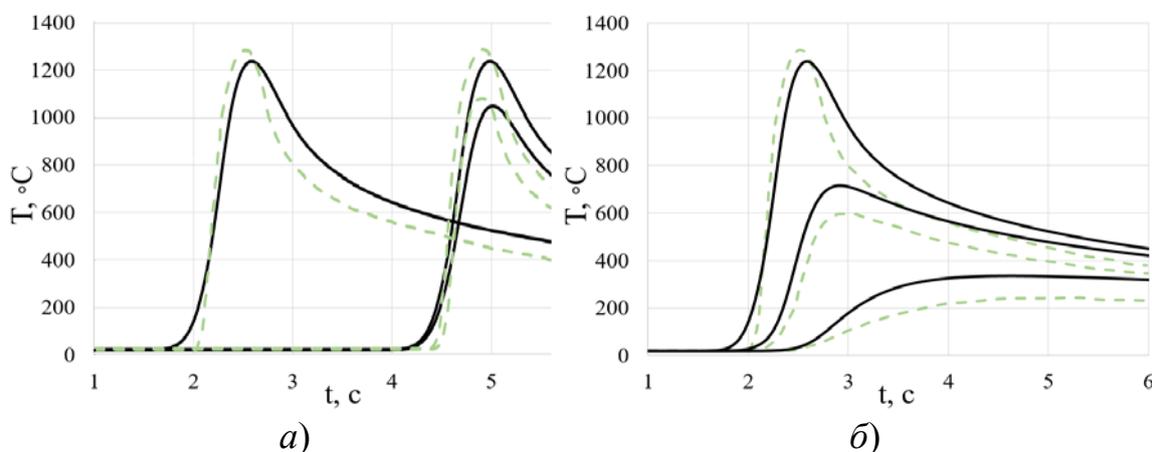


Рис. 2. Зависимость температуры в выделенных точках от времени в процессе селективного лазерного спекания

Также сопоставлены результаты зависимости максимальной температуры поверхности в зависимости от скорости сканирования (рис. 3). Синей пунктирной линией показаны результаты исследования [11]. Оранжевой результаты моделирования с шагом по оси z равным 0,2 мм, а серой для уменьшенного в два раза шага. Уменьшение шага приводит к повышению температуры поверхности за счет локализации энергии.

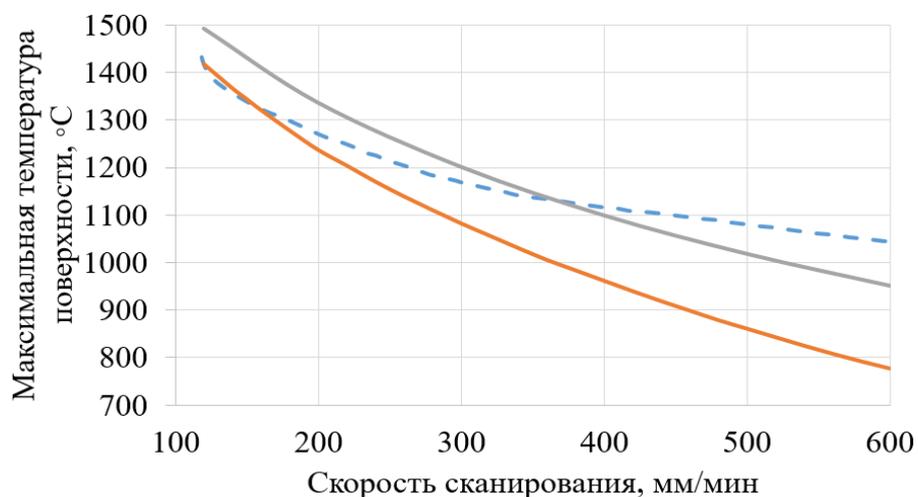


Рис. 3. Зависимость максимальной температуры поверхности от скорости сканирования

Заключение

Разработана численная модель распределения температуры в слое порошка гидроксиапатита для процесса селективного лазерного плавления. Проведены численные эксперименты, с целью сопоставления полученных с их помощью результатов с результатами аналогичного исследования. Выявлено существенное влияние шага дискретизации на распределение энергии в момент поглощения, это может быть компенсировано использованием неравномерного шага дискретизации, чему будет уделено внимание в дальнейших исследованиях. Результаты, полученные с помощью предложенной модели правдоподобны, на ее основе будет разработано приложение, предназначенное для проведения численных экспериментов с целью разработки режимов обработки гидроксиапатита, с применением многократного сканирования, позволяющего увеличить разрешение печати.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Turnbull G. 3D bioactive composite scaffolds for bone tissue engineering / J. Clarke, F. Picard и др. // Bioactive Materials. – 2017. – Т. 3. – № 3. – Р. 278–314.
2. Хенч Л. Биоматериалы, искусственные органы и инжиниринг тканей / Л. Хенч, Д. Джонс ; пер. с англ. Ю. Л. Цвирко, ред. А. А. Лушникова. – М. : Техносфера, 2007. – 304 с.

3. Scalera F. Development and characterization of UV curable epoxy/hydroxyapatite suspensions for stereolithography applied to bone tissue engineering / C. Corcione, F. Montagna и др. // *Ceramics International*. – 2014. – Т. 40. – № 10. – P. 15455–15462.
4. Ferrage L. A review of the additive manufacturing (3DP) of bioceramics: alumina, zirconia (PSZ) and hydroxyapatite / G. Bertrand, P. Lenormand и др. // *Journal of the Australian Ceramic Society*. – 2017. – Т. 53. – № 1. – P. 11–20.
5. Scheithauer U. Thermoplastic 3D printing – an additive manufacturing method for producing dense ceramics / E. Schwarzer, H. Richter, T. Moritz // *International Journal of Applied Ceramic Technology*. – 2015. – Т. 12. – № 1. – P. 26–31.
6. Feng P. A novel two-step sintering for nano-hydroxyapatite scaffolds for bone tissue engineering / M. Niu, C. Gao et al. // *Scientific reports*. – 2014. – Т. 4.
7. Wang J. Nanocrystalline hydroxyapatite with simultaneous enhancements in hardness and toughness / L. Shaw // *Biomaterials*. – 2009. – Т. 30. – № 34. – P. 6565–6572.
8. Bose S. Microwave-processed nanocrystalline hydroxyapatite: simultaneous enhancement of mechanical and biological properties / S. Dasgupta, S. Tarafder, A. Bandyopadhyay // *Acta Biomaterialia*. – 2010. – Т. 6. – № 9. – P. 3782–3790.
9. Lin K. Fabrication of dense hydroxyapatite nanobioceramics with enhanced mechanical properties via two-step sintering process / L. Chen, J. Chang // *International Journal of Applied Ceramic Technology*. – 2011. – Т. 9. – № 3. – P. 479–485.
10. Shuai C. Structure and properties of nano-hydroxyapatite scaffolds for bone tissue engineering with a selective laser sintering system / C. Gao, Y. Nie et al. // *Nanotechnology*. – 2011. – Т. 22. – № 28.
11. Shuai C. Simulation of dynamic temperature field during selective laser sintering of ceramic powder / P. Feng, C. Gao et al. // *Mathematical and Computer Modelling of Dynamical Systems*. – 2013. – Т. 19. – № 1. – P. 1–11.

© В. П. Бессмельцев, А. А. Иванов, 2019