

El、Scopus 收录 中文核心期刊

#### 基于半解析VOF-DEM的激光直接沉积多尺度过程模拟

王泽坤, 刘谋斌

# WHOLE-PROCESS CROSS-SCALE MODELLING OF LASER DIRECT DEPOSITION WITH SEMI-RESOLVED VOF-DEM COUPLING

Wang Zekun and Liu Moubin

在线阅读 View online: https://doi.org/10.6052/0459-1879-21-361

# 您可能感兴趣的其他文章

#### Articles you may be interested in

# 颗粒群碰撞搜索及CFD-DEM耦合分域 求解的推进算法研究

RESEARCH ON PARTICLE SWARM COLLISION SEARCH AND ADVANCEMENT ALGORITHM FOR CFD–DEM COUPLING DOMAIN SOLVING

力学学报. 2021, 53(6): 1569-1585

### 基于DEM-FEM耦合方法的海上风机结构冰激振动分析

ANALYSIS OF ICE–INDUCTED STRUCTURE VIBRATION OF OFFSHORE WIND TURBINES BASED ON DEM–FEM COUPLED METHOD

力学学报. 2021, 53(3): 682-692

# 流向磁场作用下圆柱绕流的直接数值模拟

DIRECT NUMERICAL SIMULATIONS ON THE TURBULENT FLOW PAST A CONFINED CIRCULAR CYLINDER WITH THE INFLUENCE OF THE STREAMWISE MAGNETIC FIELDS 力学学报. 2020, 52(6): 1645-1654

刀子子报. 2020, 52(0): 1043-1034

柔性微粒介电泳分离过程的多尺度模拟

MULTISCALE SIMULATION OF THE DIELECTROPHORESIS SEPARATION PROCESS OF FLEXIBLE MICROPARTICLE 力学报. 2019, 51(2): 405-414

# 脉冲激光与正激波相互作用过程和减阻机理的实验研究

EXPERIMENTAL STUDY ON PROCESS AND MECHANISMS OF WAVE DRAG REDUCTION DURING PULSED LASER INTERACTING WITH NORMAL SHOCK

力学学报. 2018, 50(6): 1337-1345

#### 基于LBM的铝微滴斜柱沉积水平偏移研究

A LATTICE–BOLTZMANN METHOD SIMULATION OF THE HORIZONTAL OFFSET IN OBLIQUE COLUMN DEPOSITION OF ALUMINUM DROPLETS

力学学报. 2021, 53(6): 1599-1608

2021 年 12 月

金属增材制造中的关键力学问题与前沿计算技术专题

# 基于半解析 VOF-DEM 的激光直接 沉积多尺度过程模拟<sup>1)</sup>

王泽坤 刘谋斌 2)

(北京大学工学院,北京 100871)

摘要 与传统铸造技术相比,基于金属粉末的增材制造技术因其生产周期短、可操作性强而在航空航天、生物医学等领域具有很好的优越性.尤其是激光直接沉积技术,因其自由度高,在复杂构件制造、部件修复中有着广泛的运用.但是该激光直接沉积过程涉及多物理场、跨尺度、极端高温高压环境和相变问题,仅靠实验不能很好地研究其中的机理.已有数值模拟技术一般通过预设或者射入拉格朗日点作为颗粒输入,不能做到同时考虑环境气体、颗粒碰撞和相变过程.本文在近期发展的基于核函数近似背景流场的半解析 CFD-DEM 耦合方法中引入了流体体积分数法 (VOF),发展了可以同时模拟含热、刚体颗粒、相变和自由液面及相变界面的半解析 VOF-DEM (或半解析 CFD-DEM-VOF)方法,从而首次实现了真实物理环境下激光直接沉积技术的数值模拟.其中,VOF 中的气相为环境气体,液相为熔融和凝固的金属相,界面通过 iso-Advector 重构,DEM 为未熔化的金属粉末,且流体网格可解析离散元颗粒形状.这一模拟框架可以有效复现颗粒之间的碰撞、粘结、熔化、融合,以及熔池熔道的形成,为激光直接沉积技术的数值模拟提供了开拓性的范式,并可以被应用到其他带相变的颗粒系统中.

关键词 激光直接沉积技术,颗粒流动,半解析 CFD-DEM 耦合,数值模拟框架

中图分类号: O359+.1 文献标识码: A doi: 10.6052/0459-1879-21-361

# WHOLE-PROCESS CROSS-SCALE MODELLING OF LASER DIRECT DEPOSITION WITH SEMI-RESOLVED VOF-DEM COUPLING<sup>1)</sup>

Wang Zekun Liu Moubin<sup>2)</sup>

(College of Engineering, Peking University, Beijing 100871, China)

**Abstract** Compared to casting and other traditional manufacturing techniques, metallic powder-based additive manufacturing is manifesting its superiority in many fields like aerospace engineering, bio-medical engineering due to its short product cycle and feasibility. Among them, laser direct deposition, which has higher degree of freedom, has been widely employed in manufacturing and repairing complicated components. However, during its process, cross-scale multi-physics phenomena and phase change simultaneously happen under the laser spot, with extremely high temperature and pressure gradient, which makes experiments per se incompetent in investigations. In previous simulation frameworks, powders are inserted as Lagrangian points without consideration of ambient fluid, particle-particle interactions and phase change. The proposed framework here introduces volume of fluid technique into the recently-developed kernel approximation-based semi-resolved CFD-DEM, leading to a new semi-resolved VOF-DEM (or semi-

1) 国家重点研发计划 (2018YFB0704000) 和国家自然科学基金资助项目 (12032002).

2) 刘谋斌, 教授, 主要研究方向: 增材制造、流固耦合及光滑粒子动力学的数值模拟. E-mail: mbliu@pku.edu.cn

引用格式:王泽坤,刘谋斌.基于半解析 VOF-DEM 的激光直接沉积多尺度过程模拟.力学学报,2021,53(12):3228-3239

Wang Zekun, Liu Moubin. Whole-process cross-scale modelling of laser direct deposition with semi-resolved VOF-DEM coupling. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2021, 53(12): 3228-3239

<sup>2021-07-28</sup> 收稿, 2021-08-20 录用, 2021-08-21 网络版发表.

resolved CFD-DEM-VOF) method which takes both thermodynamics, solid particles, phase change and free surfaces into consideration. Therefore, for the first time, the developed semi-resolved VOF-DEM model realizes the simulation of real physics involved in direct laser deposition. In this framework, shielding gas and metal, either melted or solidified, are two phases in VOF, and the interface between them is reconstructed by iso-Advector. DEM represents the unmelted solid particle, and CFD cells herein can resolve the metal particles thanks to the kernel approximation. Hence, the collision, adhesion, melting and coalescence of metallic particles, formation and evolution of molten pool and tracks are all reproduced. It is believed that this semi-resolved VOF-DEM modeling framework can provide a paradigm for simulation of direct laser deposition, along with other fields where particle system evolves with phase change.

Key words direct laser deposition, particulate flow, semi-resolved VOF-DEM, modelling framework

# 引 言

与传统的铸造等减材制造技术相比, 增材制造 技术有着设计灵活、制造周期短、制造复杂几何构 型能力强等不可替代的优越性,因此逐渐被广泛运 用到航空航天精密器件、生物组织或义肢、梯度功 能材料[1]、印刷电子[2],甚至土木工程领域的大型构 件的制造中,且被认为是"第三次工业革命"的标志[3]. 其中,基于金属粉末的选区熔化技术和直接沉积技 术是常用的两种打印金属构件的方式.选区熔化技 术在制造方向铺设金属粉末,然后分块进行多道激 光打印,实现金属粉末熔化粘合及凝固.按此循环往 复,沿着制造方向多次进行,从而层层"打印"出构件 的三维形貌. 而直接沉积技术, 则将粉末通过同轴喷 口喷出,使粉末汇聚在喷口下方时正好被激光击 中、熔化.汇聚点可在熔池上方或熔池中.随着喷口 的移动,可以实现任意方位打印.因此,直接沉积技 术可以被运用到精密或昂贵器件的修复中[4].

激光直接沉积过程跨越粉末-熔道-构件从微观 到宏观3个尺度,且存在激光-热-相变-流体的多物 理场耦合、粉末-粉末/粉末-熔体相互作用及高温 高压等极端物理环境,仅通过实验难以摸透其中的 关键物理现象及机理<sup>[5]</sup>.因此,数值模拟成为了研究 直接沉积技术中熔池流动、匙孔及微气孔形成、熔 道尺寸、空中熔池形成等现象的重要手段<sup>[6]</sup>.因直 接沉积技术存在复杂的颗粒-流体相互作用及相变,仅 有少数学者建立了初步的模拟框架.例如 Alimardani 等<sup>[7]</sup>通过人工控制粉末质量流量,在三维宏观尺度 模拟了多层的沉积过程.模拟过程考虑了激光、材 料、给粉量等多个因素,获得了与实验相符的基板 熔池温度场与熔池形态.但颗粒的微观行为未在模 型内体现,因而该模拟框架不能捕获细节性的机理, 而适合大规模工程实际的研究.Katinas<sup>[8]</sup>等利用不 考虑撞击的拉格朗日点,模拟了同轴送粉直接沉积 技术中粉末的铺设过程. 粉末锥的形态、温度分布 与实验吻合较好,并且形成的熔池尺寸也与实验符 合. 但是该模型没有考虑颗粒间的撞击和传热, 也无 法模拟颗粒在熔化时形态的变化,只能通过颗粒数 量转化得到质量流量,从而估计熔池的尺寸, Choi 等<sup>[9]</sup> 通过液滴喷射的方式将已经熔化的颗粒注入计算 域.他的模型中还考虑了马兰格尼效应、相变、蒸 发和熔融液滴的碰撞,并研究了上述作用对熔池形 貌演化的影响.他们模拟所得到的平均表面粗糙度 和实验较为符合.但是,他们的数值模拟是二维的, 与三维实际的粉末及熔池的空间分布有本质区别. 此外,他们直接将熔融的颗粒射入计算域,而未考 虑粉末在熔化前与空气和其他粉末的相互作用,因 此粉末进入熔池的形态未必符合真实物理情况. Wang 等<sup>[10]</sup> 通过建立高精度数值模型,结合试验验 证,研究了非线性送粉率、激光/粉末失焦和热积累 对过度堆积、表面不平整等缺陷的影响.同时他们 还提出了减少这两类缺陷的有效方式. Ibarra-Medina 和 Pinkerton<sup>[11]</sup>则耦合了计算流体力学与拉格朗日 点,重现了粉末在激光光斑下的沉积过程.热传导、 热辐射与强制对流也均被考虑计算,模拟所得的温 度分布和给粉量与实验符合较好.但是他们的模拟 框架未能考虑颗粒碰撞、熔化及熔池的形成.

上述模拟框架虽能较好地重现熔池的温度场与 尺寸,但是对于颗粒尺度的细节的捕获能力有限.究 其原因,在以下两点:(1)工程实际问题中的颗粒流 动的数值模拟,因其庞大的计算量,不能用细密网格 解析颗粒边界的全解析即计算流体力学-离散元耦 合(computational fluid dynamics-discrete element method 耦合,CFD-DEM 耦合)<sup>[12]</sup>.而在通过半理论 半经验拖曳力模型计算的非解析 CFD-DEM 耦合中, 因需要合理重构背景流场的信息,如背景速度、压 力

力、颗粒体积分数、温度等,背景的流体计算网格 常常需要在3倍颗粒直径左右<sup>[13-16]</sup>,因此无法刻画 颗粒熔化后的形状.(2)缺乏有效的刚体颗粒、环境 气体、熔融金属、凝固金属之间复杂相互作用的模 拟框架.

近期发展的半解析 CFD-DEM 耦合技术可将网 格加密至与颗粒尺寸相当甚至略小于颗粒.再通过 核函数重构出合适的背景流场,以实现颗粒在与其 尺寸相当的流体网格中的运动的数值模拟<sup>[13]</sup>.本文 通过在半解析 CFD-DEM 引入流体体积分数法 (volume of fluid, VOF),处理自由液面和相变界面, 发展了半解析 VOF-DEM (或半解析 CFD-DEM-VOF)模拟框架,可以模拟刚体颗粒达到熔点后的熔 化,以及未熔颗粒与熔池的相互作用,并准确捕捉金 属-环境气体的界面.由此,半解析 VOF-DEM 模拟 框架实现了跨尺度的喷口--刚体颗粒-环境气体-熔 体-凝固体之间复杂相互作用的数值模拟,最大程度还 原激光直接沉积技术打印构件过程中的种种物理现象.

#### 1 模型提法及控制方程

本文的模拟框架是基于传统非解析 VOF-DEM 耦合进行的,并通过核函数重构颗粒背景流场发展 半解析 CFD-DEM 耦合方法,实现颗粒-流体间质 量、动量、能量的相互作用的精准、高效计算.其 中,环境气体与熔化、凝固的金属部分由基于有限 体积元的 VOF 求解,界面通过 iso-Advector 重构,未 熔化的刚体颗粒的运动用离散元求解.具体控制方 程如下.

#### 1.1 基于 VOF 的场控制方程

VOF<sup>[17]</sup> 是基于二元论的思想,将两种流体用 0和1表示,而界面则通过体积分数的权重表示,例 如体积分数α=0.5,则表示两种流体在该CFD网格 中的流体总体积里各占一半.而各物理量,如密度ρ, 亦由体积分数加权估计得到:ρ=αρ1+(1-α)ρ2,其 中下标1,2代表第一和第二相,即ρ1和ρ2分别为第 一相和第二相的密度,下文中其他物理参数亦是如 此.求解量,例如速度 U,温度 T,在 VOF 体系中不需 要体积分数加权.在本框架中,两相流体分别为环境 金属相 (包括熔化和凝固的)和环境气体相,其界面 通过几何重构法 iso-Advector<sup>[18]</sup>进行重构.对于这两 项,需要满足连续性方程为

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon \rho) + \nabla \cdot (\varepsilon \rho U) = 0 \tag{1}$$

其中 t 为时间,  $\varepsilon$  为流体 (包括环境气体、熔化和凝固的金属)体积分数.因此 $1-\varepsilon$ 则为离散元颗粒在流体网格中的体积分数,  $\alpha \varepsilon$ 则是熔化和凝固金属在网格中的体积分数, 而 $(1-\alpha)\varepsilon$ 是环境气体的体积分数.

对于复杂颗粒流动,通常使用 Model A 的非解析 CFD-DEM 耦合方式<sup>[19]</sup>,其动量方程则为<sup>[20-21]</sup>

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon\rho U) + \varepsilon\rho U \cdot \nabla U = \nabla \cdot [\varepsilon\mu(\nabla U + U\nabla)] + \\ \varepsilon \left[ -\nabla P + \rho g + \sigma_{\kappa} \nabla \alpha + \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}T} (I - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \cdot \nabla T |\nabla \alpha| \right] + \\ \varepsilon Dc \cdot \frac{(1 - \alpha_m)^2}{\alpha_m^3 + Dcs} U - F_p$$
(2)

其中 $\mu$ 为加权后的流体黏性系数,本文所使用的均为 层流模型.对于湍流的情况,可以通过解 RANS 模型 求得等效湍流黏性系数,叠加在物理流体黏性上,*Dc* 和*Dcs*为达西系数,该项用于模拟糊状区的速度突变, 其中 $\alpha_m$ 为熔化体积分数,且有 $\alpha_m = \frac{\alpha}{2} \left\{ 1 + \operatorname{erf} \left[ \frac{4}{T_l - T_s} \cdot \left( T - \frac{T_l + T_s}{2} \right) \right] \right\}$ ,这里的 $T_l 和 T_s$ 分别为金属液相线与 固相线<sup>[20]</sup>.*P*为压力,*g*为重力加速度,  $\sigma$ 是表面张力系 数,  $\kappa$ 是曲率:  $\kappa = -\nabla \cdot \frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|} = -\nabla \cdot n$ ,其中 *n*为金属相 的外法相方向.  $\frac{d\sigma}{dT}$ 是表面张力系数随温度的线性变 化率, *I* 是单位矩阵,该项是由于温度梯度导致的表 面张力不平衡而形成的马兰格尼力,往往在熔池形 貌中有着决定性影响<sup>[22]</sup>. *F*<sub>p</sub>是颗粒对流体的作用力<sup>[19]</sup>

$$\boldsymbol{F}_{p} = \frac{1}{V_{\text{cell}}} \sum_{i=1}^{n} \left( \boldsymbol{f}_{\text{drag},i} + \boldsymbol{f}_{\text{Mag},i} + \boldsymbol{f}_{\text{vm},i} \right)$$
(3)

即分别是*i*颗粒上的拖曳力、Magnus 力、虚拟质量 力在体积为 $V_{cell}$ 的流体网格上的平均,*n* 为网格内的 颗粒总数.其中 Magnus 力与虚拟质量力有标准表达 式,具体可参见文献 [23-26].拖曳力则采用的是 Gidaspow 模型<sup>[27-28]</sup>,  $f_{drag,i} = \beta V_i (\bar{U} - v_i)$ ,其中 $\bar{U}$ 是颗 粒的背景流场,由核函数重构得到,具体会在下节展 示, $V_i = v_i$ 则是颗粒*i*的体积与速度矢量,系数 $\beta$ 可 由下式计算

$$\beta = \begin{cases} \frac{3\varepsilon\rho}{4d_i} \|\bar{\boldsymbol{U}} - \boldsymbol{v}_i\| C_d \omega_d, & \varepsilon > 0.74\\ 150\frac{(1-\varepsilon)\mu}{\varepsilon d_i} + 1.75\frac{\rho}{d_i} \|\bar{\boldsymbol{U}} - \boldsymbol{v}_i\|, & \varepsilon \leqslant 0.74 \end{cases}$$
(4)

其中*d<sub>i</sub>*为颗粒的直径, *C<sub>d</sub>*为拖曳力系数, *ω<sub>d</sub>*的拟合 公式可参见文献 [29-30].

最后, 温度方程则写为<sup>[20, 31]</sup>  

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon \rho C_p T) + \nabla \cdot (\varepsilon \rho C_p T U) = \nabla \cdot (\varepsilon k \nabla T) - L \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon \rho \alpha_m) + \nabla \cdot (\varepsilon \rho U \alpha_m) \right] - \varepsilon |\nabla \alpha| \left[ h_c (T - T_{\text{ref}}) + \sigma_{\text{sb}} (T^4 - T_{\text{ref}}^4) - Q_l \right] + Q_p, \quad (5)$$

其中*C<sub>p</sub>*和 *k* 为体积分数加权的比热容和热传导系数,可根据温度非线性变化<sup>[32]</sup>, *L* 为金属的潜热, *h<sub>c</sub>* 为强制对流热交换系数, *T<sub>ref</sub>* 为参考环境温度, *σ<sub>sb</sub>* 为 史蒂芬–波尔兹曼常数. *Q<sub>l</sub>*为激光热源.一般可用面热源 或者体热源,或其混合<sup>[33]</sup>,一个常用的面热源表达式为

$$Q_{l} = \frac{2\eta P_{l}}{\pi R_{l}^{2}} \exp\left\{\frac{-2[(x - X_{l}(t))^{2} + (y - Y_{l}(t))^{2}]}{R_{l}^{2}}\right\}$$
(6)

其中η为金属的激光吸收率,可以设置为常数,亦或 是通过光线追踪法进行计算<sup>[34]</sup>. *P*<sub>1</sub>和*R*<sub>1</sub>分别为激光 功率、半径, *x*和*y*为流体网格的平面坐标, *X*<sub>1</sub>和*Y*<sub>1</sub> 分别为激光轨迹. *Q*<sub>p</sub>为颗粒热源,考虑了颗粒与背 景流体的强制对流换热和热辐射<sup>[35-36]</sup>

$$Q_{p} = -\frac{1}{V_{\text{cell}}} \sum_{i=1}^{n} S_{i} \left[ \eta \sigma_{sb} \left( T_{i}^{4} - \bar{T}^{4} \right) + h_{i} \left( T_{i} - \bar{T} \right) \right]$$
(7)

其中 $S_i$ 为颗粒的迎风面积,  $T_i$ 和 $\overline{T}$ 分别为颗粒i的 温度和其背景流体通过核函数插值得到温度.  $h_i$ 是 颗粒对背景流体的强制对流系数, 可通过颗粒Nu数 估计:  $h_i = Nu_i k_f / d_i$ , 其中颗粒i的 $Nu_i$ 可通过颗粒雷 诺数 $Re_i (= \rho d_i |v_i|/\mu)$ 和普朗特数Pr由下式估计<sup>[37]</sup>

$$Nu_{i} = 2 + \begin{cases} 0.6\varepsilon^{3.5}Re_{i}^{1/2}Pr^{1/3}, & Re_{i} \leq 200\\ \varepsilon^{3.5}\left(0.5Re_{i}^{1/2} + 0.02Re_{i}^{0.8}\right)Pr^{1/3}, & \\ 200 < Re_{i} \leq 1500\\ 0.000\ 045\varepsilon^{3.5}Re_{i}^{1.8}, & Re_{i} > 1500 \end{cases}$$
(8)

在较高的雷诺数的情况下, 往往需要考虑湍流 效应. 此时还需要求解湍流的控制方程, 例如 RANS 模型中的湍动能、湍流耗散方程, 从而计算等效湍 流黏性μ<sub>t</sub>和等效湍流热传导系数k<sub>t</sub>, 并分别叠加到 方程式 (2) 和式 (5) 的物理黏性μ、物理热传导系 数 k 上. 具体控制方程和计算方法可参见文献 [31, 38-39].

#### 1.2 颗粒运动方程

颗粒运动采用牛顿第二定律计算,控制方程 为<sup>[40-41]</sup>

$$m_{i}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}_{i}}{\mathrm{d}t} = V_{i}\left[-\overline{\nabla P} - \rho \boldsymbol{g} + \mu \nabla \cdot (\overline{\nabla U} + \overline{U}\overline{\nabla})\right] + V_{i}\left[\sigma_{K}\nabla\alpha + \frac{d\sigma}{dT}\left[\nabla T - \boldsymbol{n}(\boldsymbol{n}\cdot\nabla T)\right]|\nabla\alpha|\right] + m_{i}\boldsymbol{g} + \boldsymbol{f}_{d,i} + \boldsymbol{f}_{\mathrm{vm},i} + \boldsymbol{f}_{\mathrm{Mag},i} + \sum \left(\boldsymbol{f}_{li,j} + \boldsymbol{f}_{ci,j}\right) \quad (9)$$

方程右端依次为颗粒的压力梯度力、浮力、黏性 力、经过气液表面时的表面张力与 Marangoni 力、颗 粒自重、拖曳力、虚拟质量力、Magnus 力,求和符 号内的分别为颗粒间或颗粒与壁面间的润滑力<sup>[42]</sup>、 碰撞力.其中 *m<sub>i</sub>* 为颗粒质量,带上划线的物理量为 核函数平均得到的背景量,拖曳力、虚拟质量力、 Magnus 力如上节所述.颗粒 *i* 和颗粒 *j* 间的润滑力 表示为

$$f_{li,j} = \frac{3}{2}\pi\mu \left(\frac{2d_id_j}{d_i+d_j}\right)^2 \frac{\mathbf{v}_{n,ij}}{h_{ij}} \tag{10}$$

其中  $d_j$  是颗粒 j 的直径, 如相互作用发生在颗粒与 壁面间, 则 $d_j = \infty$ ,  $h_{ij}$  是两颗粒表面最近距离,  $v_{n,ij}$ 为两个颗粒的对心相对速度, 即 $v_{n,ij} = (v_j - v_i) \cdot e_{ij}e_{ij}$ ,  $v_j \ge j$  颗粒的速度矢量,  $e_{ij}$ 是颗粒 j 球心指向颗粒 i 球心的单位矢量:  $e_{ij} = (x_i - x_j)/|(x_i - x_j)|$ ,  $x_i$ 和 $x_j$  为 两颗粒的空间位置矢量.

撞击力则通过 Hertz-Mindlin 模型<sup>[43]</sup> 求得

$$\boldsymbol{f}_{c,ij} = \left(k_n \delta_{ij} \boldsymbol{e}_{ij} - \gamma_n \boldsymbol{v}_{n,ij}\right) + \left(k_t \boldsymbol{t}_{ij} - \gamma_t \boldsymbol{v}_{t,ij}\right)$$
(11)

其中第一个括号为法向接触力,第二个括号为切向 接触力,  $k_n$ ,  $\gamma_n$ ,  $k_t$ ,  $\gamma_t$ 为弹性常数,  $\delta_{ij}$ ,  $t_{ij}$ ,  $v_{t,ij}$ 分别为 两颗粒的重叠量、切向矢量和切向相对速度<sup>[26, 44-45]</sup>. 颗粒的旋转则由

$$\boldsymbol{I}_{i} \cdot \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\omega}_{i}}{\mathrm{d}t} = \sum_{j}^{m} \frac{1}{2} \left( \boldsymbol{x}_{j} - \boldsymbol{x}_{i} \right) \times \left( k_{t} \boldsymbol{t}_{ij} - \gamma_{t} \boldsymbol{v}_{t,ij} \right)$$
(12)

计算,式中*I*<sub>i</sub>和ω<sub>i</sub>为颗粒的转动惯量和角速度.

颗粒的能量传递满足能量守恒

$$m_i C_{p,i} \frac{\mathrm{d}T_i}{\mathrm{d}t} = S_i \left[ h_i \left( \overline{T} - T_i \right) + \eta \sigma_{sb} \left( \overline{T}^4 - T_i^4 \right) \right] + S_i \left( \eta I_i + m_i L \frac{\mathrm{d}\alpha_{m,i}}{\mathrm{d}t} \right) + \sum_j \frac{4k_i k_j}{k_i + k_j} \sqrt{A_{c,ij}} \left( T_j - T_i \right)$$
(13)

方程右端依次考虑了颗粒表面与背景流场的换热、 热辐射、激光热源、相变潜热以及最后一项:相接 触的颗粒间的热传导.其中*C<sub>p,i</sub>和k<sub>i</sub>*是颗粒*i*的比热 容和热传导系数(*k<sub>j</sub>*则是颗粒*j*的热传导系数),*L*<sub>i</sub>是 激光热源辐照在颗粒上单位面积的功率<sup>[46]</sup>

$$I_{i} = \frac{2\eta P_{l}}{\pi R_{l}^{2}} \exp\left\{\frac{-2\left[(x_{i} - X_{l}(t))^{2} + (y_{i} - Y_{l}(t))^{2}\right]}{R_{l}^{2}}\right\}$$
(14)

力

其中 $x_i$ 及 $y_i$ 是颗粒的平面坐标. $\alpha_{m,i}$ 是颗粒的熔 化度

$$\alpha_{m,i} = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \operatorname{erf}\left[\frac{4}{T_l - T_s} \left(T_i - \frac{T_l + T_s}{2}\right)\right] \right\}$$
(15)

A<sub>c,ij</sub>为相撞颗粒的接触面积,可由弹性常数推导得到[47-48].

#### 1.3 VOF-DEM 耦合技术

上述两节分别介绍了流体、颗粒的运动和温度的计算方法. 在计算过程中, 由于动量和能量存在复杂的耦合关系, 在计算颗粒和背景流体之间的动量、能量交换时, 需要用到两相的参数信息. 因此, 模拟框架分为 3 个模块, 基于有限体积元 (finite volume method, FVM)的流体计算模块、基于离散元 (DEM) 的颗粒计算模块和信息交互模块. 该框架是基于成熟的、验证完备的开源代码 CFDEM 二次开发<sup>[49-50]</sup> 而成, 对于一步 VOF-DEM 耦合, 具体的执行过程如下.

(1) 在 FVM 模块中, 为加速后续计算的收敛, 先 进行动量预测.

(2) 在 DEM 模块中判断颗粒是否熔化. 在本框架下, FVM 网格的尺寸与颗粒直径相当, 甚至小于

颗粒直径,因此若颗粒熔化了,则须将颗粒的温度、 速度、体积分数映射到 FVM 网格上,然后将 DEM 中对应的颗粒删除.若颗粒未熔化,判断颗粒是否与 相邻颗粒或壁面碰撞,如果有碰撞发生,则按式 (11)和式(12)右端计算碰撞产生力和力矩.

(3) 界面模块从 FVM 中获得速度、温度和压力 等信息, 从 DEM 中获得颗粒速度、温度、位置和直 径等信息, 以计算拖曳力、压力梯度力、虚拟质量 力、Magnus 力、颗粒-流体热交换和热辐射等颗粒 与流体间的动量、能量交换.

(4) 将上一步计算所得到的颗粒-流体动量、能量交换代入流体的动量和能量方程, 即式 (2) 和式 (5), 求解流体的速度与温度. 同时通过连续性方程求 解 VOF 的体积分数场. 再通过 PISO 算法<sup>[51]</sup> 求解压 力, 更新速度.

(5) 根据温度更新熔化率和其他物理参数.

(6) 将第(3)步计算所得到的颗粒-流体动量、
能量交换以及第(2)步得到的碰撞力与力矩代入式
(9)、式(12)和式(13),更新颗粒的运动与温度.

将该流程整理为流程图,如图 1 所示.该流程同时计算了颗粒与流场、颗粒与颗粒/壁面之间动量与能量交换,颗粒在激光作用下的熔化,熔池的动力 学演化及凝固,大大弥补了以往模型模拟直接沉积 技术真实物理状况的不足.



图 1 半解析 VOF-DEM 在直接沉积技术中运用的流程图

Fig. 1 Flow chart of implementation of the semi-resolved VOF-DEM in direct laser deposition

### 2 半解析耦合技术在 VOF-DEM 中的运用

在上节的介绍中,流体和颗粒间存在的复杂耦 合现象均可用半理论半经验的公式模化.在这些计 算中,即如式(4)、式(7)~式(9)和式(13),都存在 背景量如背景压强,背景黏性力,亦或是颗粒与流体 的相对物理量,如相对速度、相对加速度、相对温 度.其中在计算相对物理量时,颗粒的信息(如颗粒 速度)是确定的,而背景流场的信息(如流体速度)需 要获取.对于非解析 CFD-DEM 耦合而言,背景量即 为颗粒所在背景网格所存储的物理量.因此使用细 密网格时,所获得的数据会严重受到颗粒的影响,而 不是真正的"背景"信息.在本研究框架下,因需要刻 画出颗粒的熔化过程,网格尺寸会与颗粒尺寸相当, 甚至少于颗粒尺寸,此时则需引入核函数收集颗粒 附近的流体信息,近似背景流场(如图 2).

具体的,对于颗粒 *i* 所需要的网格上的背景物 理量*ŋ*,如速度、加速度、温度和体积分数等,有

$$\bar{\eta} = \frac{\sum_{J=1}^{N} \varepsilon_J V_{\text{cell},J} \eta_J k_{i,J} \left( |\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_J| \right)}{\sum_{J=1}^{N} \varepsilon_J V_{\text{cell},J} k_{i,J} \left( |\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_J| \right)}$$
(16)

其中 N 为颗粒光滑域内的流体网格总数, J 为其中 的某一个流体网格的编号, k<sub>i,J</sub> 是以网格 J 到颗粒 *i*之间距离|**r**<sub>i</sub>-**r**<sub>J</sub>|为自变量的核函数.因背景量需要 尽量剥离颗粒本身的影响,故在核函数重构时,还需 附加流体体积分数作为权重(ε<sub>J</sub>).而核函数一般选 为较为光滑的且有一定物理意义的高斯函数,也可 选择光滑粒子动力学中常用的 3 次或 5 次样条函 数<sup>[52-53]</sup>.本框架中,使用高斯核函数<sup>[13]</sup>



图 2 颗粒在光滑域内通过核函数重构背景流场

Fig. 2 Kernel function approximates the background information for a particle within its smoothing distance

$$k_{i,J}\left(|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_J|\right) = \exp\left(-\frac{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_J|^2}{2H_i^2}\right)$$
(17)

其中 $H_i$ 为颗粒i所带核函数的核宽, 且 $H_i = \kappa d_i$ , 通 常 $\kappa$ 为1.5到2, 以满足核心光滑域在颗粒直径3到 4倍之间<sup>[13, 16, 54]</sup>, 从而获得最佳精度. 因此, 例如求 解拖曳力常用的相对速度, 可写为

$$\frac{\bar{\boldsymbol{U}} - \boldsymbol{v}_{i} =}{\frac{\sum_{J=1}^{N} \varepsilon_{J} V_{\text{cell},J} \boldsymbol{U}_{J} \exp\left[-|\boldsymbol{r}_{i} - \boldsymbol{r}_{J}|^{2} / (2\kappa^{2}d_{i}^{2})\right]}{\sum_{J=1}^{N} \varepsilon_{J} V_{\text{cell},J} \exp\left[-|\boldsymbol{r}_{i} - \boldsymbol{r}_{J}|^{2} / (2\kappa^{2}d_{i}^{2})\right]} - \boldsymbol{v}_{i} \quad (18)$$

但是特别地,对于求解颗粒运动所需的压力梯 度力与黏性力(方程(9)中),因其本质是将颗粒表面 的压力或黏性力的表面积分,通过高斯定理转化为 颗粒内部压力与黏性力的积分,故在通过高斯核函 数重构背景压强梯度和速度梯度时,无需添加流体 体积分数的权重

$$\bar{\eta}|_{=\nabla P,\nabla U} = \frac{\sum_{J=1}^{N} V_{\text{cell},J} \eta_J k_{i,J} (|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_J|)}{\sum_{J=1}^{N} V_{\text{cell},J} k_{i,J} (|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_J|)}$$
(19)

虽然高斯核函数有无穷大定义域,但为减少搜 索光滑域内网格信息的计算开销,通常会对函数进 行截断,即有一定的搜索半径.因网格位置信息为网 格中心点的位置所确定,避免出现网格仅部分在核 宽范围内而未能检索到的情况,搜索半径一般定为 1.2 至 1.5 倍的核宽.

因此,通过结合半解析 CFD-DEM 和 VOF,发展 了半解析 VOF-DEM,即半解析 CFD-DEM-VOF 模 拟方法.基于该方法的数值模拟框架可实现颗粒在 与其尺寸相当甚至小于颗粒的尺寸的流体网格中进 行计算,并进一步模拟颗粒的熔化、融合等行为.

#### 3 基础算例验证与模型展示

对直接输粉技术中颗粒行为的观测非常困难, 难以通过实验观测验证模型框架的精度.因此,本文 仅先对其子求解器进行标准算例的逐步验证.首先, 对于仅有一种背景流体,不带温度的最基本颗粒流 动问题,已对基于 CFDEM<sup>[55]</sup> 开发的半解析 CFD-DEM 算法<sup>[13]</sup>进行了验证.结果证实,半解析算法无

3233

论对简单的单颗粒运动,亦或是多粒径颗粒床的统 计学行为,都有远超过非解析算法的精度,而其计算 量仍与非解析算法相当,即远小于全解析 CFD-DEM 耦合的计算量<sup>[13]</sup>.后又将其运用于磨料高速气 射流加工技术中,发现半解析耦合框架在高雷诺 数、窄管道中的颗粒流动问题中,仍然相对于非解 析耦合显示出与实验、理论解的高度吻合<sup>[56]</sup>.在该 求解器基础上,又将热流固耦合问题纳入半解析 CFD-DEM 框架中,经过与实验对比验证,结果表明 半解析算法能够相较于非解析算法获得更好的颗粒 及流场温度分布、颗粒空间分布,能够捕捉到原本 非解析模拟难以捕捉的现象,如流体优势通道<sup>[31]</sup>.

因此基于以往的数项研究,基本可以确定半解 析 CFD-DEM 在气固或液固两相流中,即使雷诺数 高、壁面效应明显、颗粒尺寸分异且存在热传递, 也能获得相对于非解析更高的精度.此外,至于粉末 增材制造中激光与金属的相互作用,曾建立激光选 区熔化的模拟框架,并且数值模拟的结果与实验对 比,获得了较好的定性结果,并能解释制造过程中的 诸多机理<sup>[20]</sup>.因此本文主要验证半解析 VOF-DEM 方法在模拟自由液面方面的准确性 (3.1 节),并简单 验证激光与金属板相互作用下熔池的形貌 (3.2 节). 最后在 3.3 节中,展示本文的半解析 VOF-DEM 热 流固耦合框架在直接沉积技术中的运用.

#### 3.1 半解析 CFD-DEM-VOF 耦合方法的算例验证

本节将所开发的半解析 VOF-DEM耦合方法 (不考虑热传导部分),运用到两个标准算例 (单颗粒 入水、多颗粒溃坝)中,以验证其准确性.首先是单颗 粒入水算例:一个密度为 2500 kg/m<sup>3</sup>,半径为 0.001 35 m 的颗粒悬挂于水面上的空气中,距离水面 0.02 m,水 深 0.11 m.该问题较为简单,通过斯托克斯近似拖曳 系数可以求得解析解.运用相同的拖曳力模型,也可 在半解析 VOF-DEM 耦合方法中进行计算.计算结 果如图 3 所示:颗粒运动的速度与垂直位移均与解 析解符合,且在气液界面,颗粒的速度被光滑过度.

第二个标准算例为一个带固体颗粒的溃坝实 验<sup>[40]</sup>.实验中水箱尺寸在3个方向分别为0.2m,0.1m 及(超过)0.3m,计算域亦如此大.水体初始在水箱 的一侧,尺寸为0.05m,0.1m和0.1m.其中有3883 个平均直径为2.7mm的玻璃颗粒随机沉积在水体 底部,堆积高度约15mm,其他具体材料物性参数可





参见文献 [40]. 在本文的模拟中,半解析 VOF-DEM 耦合方法耦合所使用的网格尺寸为颗粒直径的 0.8 倍,对比目的所使用的非解析 CFD-DEM 网格尺 寸是颗粒的 3 倍.

半解析 VOF-DEM 耦合方法的数值模拟结果 (蓝色)与非解析耦合的结果(绿色)及实验在4个时 刻的对比如图4所示:可视化结果可见,非解析模拟 得到的流体前沿位移、冲击高度,远不达实验所得 数据,而半解析的结果基本与实验吻合.定量地看, 实验中设置了4个观测点<sup>[57]</sup>,分别是在0.1s时流体 前沿A的横坐标,0.2s时流体冲击高度B的纵坐标, 0.3s时指定冲击高度C点流体的厚度(横坐标),0.4s 时流体回落的外凸点D与内凹点E的横纵坐标.数 值模拟结果与实验的定量对比如图5所示.结果显 示,半解析 VOF-DEM 相较于非解析结果,与实验有 着极高的吻合度.

通过以上模拟,及以往对单颗粒、喷动床、管 道颗粒输运的验证<sup>[13,31,56]</sup>,基本可以确认,半解析耦



Fig. 4 Simulation results from unresolved and semi-resolved VOF-DEM versus experiment

合策略无论在气-固、液-固两相,亦或是气-液-固 三相耦合中,均表现远优于非解析模拟.同时在高雷 诺数、窄计算域、传热问题中也能出色得定性复现 实验结果.



图 5 流体前沿在 4 个时刻的位置: 实验与数值模拟的对比 Fig. 5 Flow frontier at four moments: experiments versus simulations

#### 3.2 相变

过去的研究,已开发出耦合 CFD-DEM 及 VOF 的 激光选区熔化技术<sup>[20]</sup>.其中铺粉及粉末熔化按次序 进行,因此不需要带传热的 VOF-DEM 耦合,相对于 本研究框架,较为简单.在上述研究中,也对熔化部 分的模拟器进行了基本验证,结果显示该代码可以 很好地模拟出粉床中各类空隙的产生过程、演变规 律<sup>[33]</sup>,熔道及深熔孔的形成<sup>[20,33]</sup>.因此在本文中,仅 展示一个简单的点焊算例验证.He 等<sup>[58]</sup>利用功率 为 1967 W 的激光,半径分别控制为 0.428 mm 和 0.57 mm,对 304 不锈钢材料进行辐照,分别形成两 个熔池.采用其热源模型<sup>[58]</sup> 对该问题进行了数值模 拟,模拟结果如图 6 和图 7 所示.图中蓝色到红色的 渐变即为α<sub>m</sub>从 0~1 的变化,即红色为熔池,所标注 的数字分度值为 0.1 mm.结果可见,开发的求解器 可以很好得定量模拟出金属的相变和熔池的形成.



#### -----

3.3 直接沉积技术的数值模拟

在以往的研究中,半解析耦合已分别在气 固/液-固、带热传导、带自由液面的气-液-固等不 同问题的颗粒流动中运用,并展现出了出色的精 度<sup>[13, 31, 56]</sup>.同时激光与粉床的相互作用的求解器,也 有了基本的验证<sup>[20, 33]</sup>.因此,相信基于所开发的半解 析 VOF-DEM 耦合方法,可以应用于模拟激光直接 沉积过程,对其中的诸多重要物理现象进行复现,并 解释其中的机理.

本文将分别展示直接输粉技术中少数颗粒相遇时的不同情形,和熔道的形成过程.首先,设计一个 算例,算例计算域为 1.4 mm × 1.4 mm × 1.1 mm,4 个 直径为 96 µm 的高温合金 Inconel718 颗粒分别设置 在 4 个角落,并距离三侧壁面均 50 µm.颗粒初始速 度汇向计算域中心,x和 y 轴的速度分量大小均为 0.3 m/s, 垂直方向为 0.9 m/s, 方向向下. 颗粒密度 8380 kg/m<sup>3</sup>, 碰撞恢复系数 0.9, 初始温度为 573 K, 熔点 1580 K, 比热 650 J/(kg·K), 激光吸收率为 0.51. 激光半径为 27 μm. 以上情况基本接近预热的高温 合金粉末 (材料物性参数可参见文献 [33, 59]) 在喷 口下汇聚的真实情况, 故所展示的各类颗粒行为, 可 供相关研究参考.

设计了 3 个算例, 分别重现了激光直接沉积技 术中的 3 类典型颗粒相互作用. 第一个算例, 激光功 率设计得较低, *P*<sub>l</sub> = 300 W, 因此, 颗粒的相互碰撞发 生在熔化之前, 对熔化的行为没有影响. 如图 8(a) 所示, 颗粒或熔体的温度初始为 800 K, 在高斯激光 热源的辐照下, 不断升温. 在发生碰撞后, 基本遵守 动量守恒, 4 个颗粒的水平速度分量分别被反弹至 相反方向. 在颗粒分开后才被加热达到熔点, 故在基 板上形成了 4 滩熔迹. 颗粒在熔化前后的空间轨迹 由黑色虚线表示.

如图 8(b) 所示的是第 2 个算例,其中 P<sub>l</sub> = 300 W. 因激光功率较高,在颗粒相互碰撞之前颗粒 已经熔化. 当 4 个熔体相互接触时,由于 4 个球动量 相当,且表面张力远大于惯性力 (*Ca* = 0.0038),它们 将融为一体,形成空中熔池,在碰撞点垂直下落.

在第3个算例中, P<sub>l</sub>=300W, 但右侧的两个颗粒的比热被提高至1390J/(kg·K), 以推迟其熔化.在这个算例中, 左侧两个颗粒在汇聚前已经熔化. 熔化后, 因熔体具有流动性, 受到空气阻力影响, 熔体不能维持球形, 在迎风面积方向增大, 变为扁扁的饼形.因此, 两个熔体在到达预定的刚体接触点前(计算域中央), 便已经接触(饼形的半径大于颗粒原半径).因巨大的表面张力, 瞬间融合. 也因所受阻力较其是球体时更大, 左侧的两个颗粒(熔体)比右侧的

两个颗粒更晚到达计算域中央,其轨迹如图 8(c) 黑 线所示. 但融合后的熔体在与右侧两个未熔化颗粒 撞击后,从未熔化的两个颗粒之间穿出,并破碎溅落 到基板上. 而未熔颗粒继续沿原方向行进,其轨迹如 图 8(c) 蓝线所示,在而后的加温过程中,他们也分别 熔化,形成两摊熔迹.

以上便是在直接输粉技术中常见的 3 种颗粒相 互作用的形态. 由数值模拟可知, 在一定的输粉速率 下, 如果激光功率不够, 如算例一, 粉末会在汇聚点 以下的环状区域内熔化, 难以形成较深且稳定的熔 池; 反之, 如果激光功率过高, 颗粒会过早熔化而因 巨大的阻力变为扁平状, 易于破碎; 同时, 如果颗粒 粒径分异较大, 可能在聚焦点同时存在熔化和未熔 化的颗粒, 他们相互作用也容易导致已形成的空中 熔池破碎.

而后,进行了真实工况下全尺度情景的模拟.其 中喷口轮廓与铅垂的夹角为 26°, 喷口在出口处内外 径分别为 5 mm, 6 mm, 平均直径为 0.1 mm 的高温 合金 Inconel718 颗粒以 1 m/s 的速度从喷口入射,流 量为 0.416 g/s. 激光束  $P_l = 1600$  W,  $R_l = 0.45$  mm. 基 板水平移动速度为 y 方向-0.4 m/s (向左). CFD 网格 尺寸为颗粒直径的 0.8 倍, 固体壁面通过 stl 网格设 置. 其模拟结果如图 9 所示. 图中左侧为整个计算域 的实际模拟尺度,包括喷口、粉末、熔道和基板.具 体放大到右侧,则可以看到金属颗粒在被加热到液 相线后,发生熔化.在这个过程中,颗粒被从离散元 刚体单元转化为 VOF 中的金属相体积分数. 随着熔 体向中心聚拢,来自各径向的熔融颗粒凝并在一起, 形成更大的熔体垂直下落至基板,随着基板或喷口 的移动,逐渐形成熔道.此外,图中还可见熔道表面 微有皱褶, 皱褶方向与激光行进方向相反, 该现象亦



Fig. 8 Three featured particle-particle interactions in laser direct deposition



图 9 实际工况下激光直接沉积过程的数值模拟 Fig. 9 Simulation of laser direct deposition process under actual working conditions

与实际相符.

再继续放大至空中熔池 (融合后的大块熔体), 如图 10 所示,可见激光直接沉积技术中典型的几种 状态,如因刚体碰撞而弹出粉末汇聚点而未来得及 熔化的颗粒、在汇聚点熔化形成空中熔池的颗粒、 熔化颗粒与刚体颗粒粘结、因与未熔颗粒碰撞而破 碎的熔体,正如图 8 所示情形.此外,巨大熔体落至 基板上的熔池后,还会发生溅射.由于存在喷嘴和基 板直接的相对运动,溅射方向倾向于激光扫描相背 方向.



图 10 熔道的形成 Fig. 10 Formation of molten track

由此可见,开发的带传热传质的半解析 VOF-DEM (或称半解析 CFD-DEM-VOF) 耦合方法,可以 很好地定性描述激光直接沉积技术中存在的种种现 象,为其中的机理提供解释,有望成为未来模拟研究 激光直接沉积的重要工具.

### 4 总结与展望

本文通过在基于核函数重构背景流场的半解 析 CFD-DEM 引入 VOF 技术,发展了可以同时考虑 含热、刚体颗粒的运动、相变和自由液面及相变界 面的半解析 VOF-DEM 数值模拟框架. 该模拟框架 可以将含自由液面的流体网格缩小至颗粒尺寸,甚 至小于颗粒尺寸,从而大大提高了数值模拟的精度. 通过一系列验证后,将其成功用于激光直接沉积技 术的跨尺度数值模拟. 由于网格小于颗粒尺寸,模型 可以描述颗粒的熔化行为.

本文的主要结论与贡献,可归纳如下:

(1) 将半解析 CFD-DEM 的耦合策略运用到 VOF-DEM 后,发展了半解析 VOF-DEM 耦合方法. 该方法可降低流体网格的尺寸.再通过 iso-Advector 重构 VOF 中气液两相的界面,数值模拟的精度得到 了大大提高.

(2) 半解析 VOF-DEM 耦合框架考虑了相变、 激光模型等热力学模型,首次实现了符合真实物理 的全尺度激光直接沉积技术数值模拟.

(3) 该模型框架首次实现了直接沉积技术中颗 粒间的碰撞、融合、破碎、粘结, 熔体飞溅等现象 的同步模拟, 为解释其中机理提供了有力工具.

报

力

然而,由于同时存在复杂的跨尺度、多物理 场、多元颗粒体系、相变和高雷诺数的耦合模拟, 目前本框架的精度还有提高的空间.在本文中,我们 先首次提出该框架,并定性复现了激光直接沉积过 程中的诸多复杂现象.在未来的工作中,我们还将不 断优化模型提高精度.此外,该模型未来不仅有望为 激光直接沉积技术提供重要的数值模拟技术支撑, 对其他涉及相变的复杂颗粒体系,例如飞机结冰<sup>[60-63]</sup>、 天然气水合物开采<sup>[64]</sup>等,也有巨大的运用前景.

#### 参考文献

- Thompson SM, Bian L, Shamsaei N, et al. An overview of direct laser deposition for additive manufacturing. Part I: Transport phenomena, modeling and diagnostics. *Additive Manufacturing*, 2015, 8: 36-36
- 2 钱垒, 兰红波, 赵佳伟等. 电场驱动喷射沉积 3D 打印. 中国科学: 技术科学, 2018, 48: 773-782 (Qian Lei, Lan Hongbo, Zhao Jiawei, et al. Electric-field-driven jet deposition 773D printing. *Scientia Sinica Technology*, 2018, 48: 773-782 (in Chinese))
- 3 兰红波,李涤尘,卢秉恒. 微纳尺度 3D 打印. 中国科学: 技术科学, 2015, 45: 919-940 (Lan Hongbo, Li Dichen, Lu bingheng. Mircoand nanoscale 3D printing. *Scientia Sinica Technology*, 2015, 45: 919-940 (in Chinese))
- 4 Petrat T, Graf B, Gumenyuk A, et al. Laser metal deposition as repair technology for a gas turbine burner made of inconel 718. *Physics Procedia*, 2016, 83: 761-768
- 5 Zhang K, Liu WJ, Shang XF. Research on the processing experiments of laser metal deposition shaping. *Optics and Laser Technology*, 2007, 39: 549-557
- 6 Dass A, Moridi A. State of the art in directed energy deposition: from additive manufacturing to materials design. *Coatings*, 2019, 9: 418-443
- 7 Alimardani M, Toyserkani E, Huissoon JP. Three-dimensional numerical approach for geometrical prediction of multilayer laser solid freeform fabrication process. *Journal of Laser Applications*, 2007, 19: 14-25
- 8 Katinas C, Shang WX, Shin YC, et al. Modeling particle spray and capture efficiency for direct laser deposition using a four nozzle powder injection system. *Journal of Manufacturing Science and Engineering*, 2018, 140: 041014
- 9 Choi J, Han L, Hua Y. Modeling and experiments of laser cladding with droplet injection. *Journal of Heat Transfer*, 2005, 127: 978-986
- 10 Wang SH, Zhu LD, Dun YC, et al. Multi-physics modeling of direct energy deposition process of thin-walled structures: defect analysis. *Computational Mechanics*, 2021, 67: 1229-1242
- Ibarra-Medina J, Pinkerton AJ. Numerical investigation of powder heating in coaxial laser metal deposition. *Surface Engineering*, 2011, 27: 754-781
- 12 Walayat K, Wang ZK, Usman K, et al. An efficient multi-grid finite element fictitious boundary method for particulate flows with thermal convection. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2018, 126: 452-465
- 13 Wang ZK, Teng YJ, Liu MB. A semi-resolved CFD-DEM approach for particulate flows with kernel based approximation and Hilbert

curve based searching strategy. *Journal of Computational Physics*, 2019, 384: 151-169

- 14 Fullmer WD, Musser J. CFD-DEM solution verification: fixed-bed studies. *Powder Technology*, 2018, 339: 760-764
- 15 Boyce CM, Holland DJ, Scott SA, et al. Limitations on fluid grid sizing for using volume-averaged fluid equations in discrete element models of fluidized beds. *Industry and Engineering Chemistry Re*search, 2015, 54: 10684-10697
- 16 Penn A, Padash A, Lehnert M, et al. Asynchronous bubble pinch-off pattern arising in fluidized beds due to jet interaction: A magnetic resonance imaging and computational modeling study. *Physical Review Fluids*, 2020, 5: 094303
- 17 Hirt CW, Nichols BD. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, 1981, 39: 201-225
- 18 Roenby J, Bredmose H, Jasak H. A Computational method for sharp interface advection. *Royal Society Open Science*, 2016, 3: 160405
- 19 Zhou ZY, Kuang SB, Chu KW, et al. Discrete particle simulation of particle-fluid flow: Model formulations and their applicability. *Journal of Fluid Mechanics*, 2010, 661: 482-510
- 20 Wang ZK, Yan WT, Liu W, et al. Powder-scale multi-physics modeling of multi-layer multi-track selective laser melting with sharp interface capturing method. *Computational Mechanics*, 2019, 63: 649-661
- 21 Li XN, Liu MY, Dong TT, et al. VOF-DEM simulation of single bubble behavior in gas-liquid-solid mini-fluidized bed. *Chemical Engineering Research and Design*, 2020, 155: 108-122
- 22 Hojjatzadeh SMH, Parab ND, Yan WT, et al. Pore elimination mechanisms during 3D printing of metals. *Nature Communications*, 2019, 10: 3088
- 23 Mei R. An approximate expression for shear lift force on a spherical particle at a finite reynolds number. *International Journal of Multiphase Flow*, 1992, 18: 145-147
- 24 Loth E, Dorgan AJ. An equation of motion for particles of finite reynolds number and size. *Environmental Fluid Mechanics*, 2009, 9: 187-206
- 25 Zbib H, Ebrahimi M, Ein-Mozaffari F, et al. Comprehensive analysis of fluid-particle and particle-particle interactions in a liquid-solid fluidized bed via CFD-DEM coupling and tomography. *Powder Technology*, 2018, 340: 116-130
- 26 Wang ZK, Yang X, Liu MB. A four-way coupled CFD-DEM modeling framework for charged particles under electrical field with applications to gas insulated switchgears. *Powder Technology*, 2020, 373: 433-445
- 27 Gidaspow D, Multiphase Flow and Fluidization Continuum and Kinetic Theory Descriptions. San Diego: Academic Press, 1994
- 28 Yang SL, Wang S, Luo K, et al. Numerical investigation of the backmixing and non-uniform characteristics in the three-dimensional full-loop circulating fluidized bed combustor with six parallel cyclones. *Applied Thermal Engineering*, 2019, 153: 524-535
- 29 Wang S, Luo K, Hu CS, et al. CFD-DEM simulation of heat transfer in fluidized beds: Model verification, validation, and application. *Chemical Engineering Science*, 2019, 197: 280-295
- 30 刘巨保, 王明, 王雪飞等. 颗粒群碰撞搜索及 CFD-DEM 耦合分域 求解的推进算法. 力学学报, 2021, 6: 1569-1585 (Liu Jubao, Wang Ming, Wang Xuefei, et al. Research on particle swarm collision search and advancement algorithm for CFD-DEM coupling domain solving. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2021, 6: 1569-1585 (in Chinese))

- 31 Wang ZK, Liu MB. Semi-resolved CFD-DEM for thermal particulate flows with applications to fluidized bed. *International Journal of Heat and Mass Transer*, 2020, 159: 120150
- 32 Valencia JJ, Quested PN. Thermophysical Properties. ASM Handbook, 15: 468-481
- 33 Wang ZK, Liu MB. Dimensionless analysis on selective laser melting to predict porosity and track morphology. *Journal of Materials Processing Technology*, 2019, 273: 116238
- 34 Liu BQ, Fang G, Lei LP, et al. A new ray tracing heat source model for mesoscale CFD simulation of selective laser melting (SLM). *Applied Mathematical Modeling*, 2020, 79: 506-520
- 35 Wu H, Gui N, Yang XT, et al. Numerical simulation of heat transfer in packed pebble beds: CFD-DEM coupled with particle thermal radiation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2017, 110: 393-405
- 36 Bellan S, Kodama T, Matsubara K, et al. Heat transfer and particulate flow analysis of a 30 kW directly irradiated solar fluidized bed reactor for thermochemical cycling. *Chemical Engineering Science*, 2019, 203: 511-525
- 37 Piton M, Huchet F, Le Corre O, et al. A coupled thermal-granular model in flights rotating kiln: Industrial validation and process design. *Applied Thermal Engineering*, 2015, 75: 1011-1021
- 38 Menter FR. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. AIAA Journal, 1994, 32: 1598-1605
- 39 Mei R, AdrianRJ, Hanratty TJ. Particle dispersion in isotropic turbulence under stokes drag and basset force with gravitational settling. *Journal of Fluid Mechanics*, 1991, 225: 481-495
- 40 Sun XS, Sakai M. Three-dimensional simulation of gas-solid-liquid flows using the DEM–VOF method. *Chemical Engineering Science*, 2015, 134: 531-548
- 41 Brackbill JU, Kothe D, Zemach C. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 1992, 100: 335-354
- 42 Barnocky G, Davis RH. The lubrication force between spherical drops, bubbles and rigid particles in a viscous fluid. *International Journal of Multiphase Flow*, 1989, 15: 627-638
- 43 谭援强,肖湘武,张江涛等. 尼龙粉末在 SLS 预热温度下的离散 元模型参数确定及其流动特性分析. 力学学报, 2019, 51: 56-63 (Tan Yuanqiang, Xiao Xiangwu, Zhang Jiangtao, et al. Determination of discrete element model contact parameters of Nylon powder at SLS preheating temperature and its flow characteristics. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2019, 51: 56-63 (in Chinese))
- 44 Tsuji Y, Tanaka T, Ishida T. Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizonal pipe. *Powder Technology*, 1992, 71: 239-250
- 45 Caserta AJ, Navarro HA, Cabezas-Gómez L. Damping coefficient and contact duration relations for continuous nonlinearspring-dashpot contact model in DEM. *Powder Technology*, 2016, 302: 462-479
- 46 Wen SY, Shin YC, Murthy JY, et al. Modeling of coaxial powder flow for the laser direct deposition process. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2009, 52: 5867-6877
- 47 Kloss C, Goniva C. LIGGGHTS Open source disceret element sim-

ulations of granular materials based on LAMMPS. *TMS Supplement*al Proceedings, 2011, 2: 781-788

- 48 Sun J, Chen MM. A theoretical analysis of heat transfer due to particle impact. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 1988, 31: 969-975
- 49 Jasak H. Error Analysis and estimation for the finite volume method with applications to fluid flows. [PhD Thesis]. London: Imperial College of London, 1996
- 50 Kloss C, Goniva C, Hager A, et al. Models, algorithms and validation for opensource DEM and CFD-DEM. *Progress in Computational Fluid Dynamics*, 2012, 12: 140-152
- 51 Issa RI. Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator splitting. *Journal of Computational Physics*, 1986, 62: 40-65
- 52 Liu MB, Liu GR, Lam KY. Constructing smoothing functions in smoothed particle hydrodynamics with applications. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2003, 155: 263-284
- 53 Liu MB, Liu GR, Particle Methods for Multiscale and Multiphysics. Singapore: World Scientific, 2015
- 54 Ismail NI, Kuang SB, Yu AB. CFD-DEM study of particle-fluid flow and retention performance of sand screen. *Powder Technology*, 2021, 378: 410-420
- 55 Hager A, Kloss C, Pirker S, et al. Parallel resolved open source CFD-DEM: method, validation and application. *Journal of Computational Multiphase Flow*, 2014, 6: 13-27
- 56 Zhu GP, Li HZ, Wang ZK, et al. Semi-resolved CFD-DEM modeling of gas-particle two-phase flow in the micro-abrasive air jet machining. *Powder Technology*, 2021, 381: 585-600
- 57 Pozzetti G, Peters B. A multiscale DEM-VOF method for the simulation of three-phase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 2018, 99: 186-204
- 58 He X, Fuerschbach PW, DebRoy T. Heat transfer and fluid flow during laser spot welding of 304 stainless steel. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2003, 36: 1388-1139
- 59 Juan JV, Peter NQ. Thermophysical properties. ASM Handbook, 2008, 15: 468-481
- 60 张大林, 陈维建. 飞机机翼表面霜状冰结冰过程的数值模拟. 航空 动力学报, 2004, 19: 137-141 (Zhang Dalin, Chen Weijian. Numerical simulation of rime ice accretion process on airfoil. *Journal of Aerospace Power*, 2004, 19: 137-141 (in Chinese))
- 61 Kinzel M, Hanson D. Application of the discrete element method to ice accretion geometries//46th AIAA Fluid Dynamics Conference, Washington DC, 2016
- 62 Wu ZL, Cao YH. Numerical simulation of airfoil aerodynamic performance under the coupling effects of heavy rain and ice accretion. *Advances in Mechanical Engineering*, 2016, 8: 1-9
- 63 Li Y, Wang C, Chang SN, et al. Simulation of ice accretion based on roughness distribution. *Process Engineering*, 2011, 17: 160-177
- 64 王宏乾,周博,薛世峰等.可燃冰沉积物力学特性的离散元模拟分 析.力学研究, 2018, 7: 85-94 (Wang Hongqian, Zhou Bo, Xue Shifeng, et al. Discrete element simulation analysis of mechanical behavior of the gas hydrate-bearing sediments. *International Journal of Mechanics Research*, 2018, 7: 85-94 (in Chinese))