

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
“УДМУРТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ”

На правах рукописи
УДК 519.6:538.93:004.942

Кривилев Михаил Дмитриевич

**ДВУХУРОВНЕВОЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА И СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ В
МЕТАЛЛУРГИИ МЕЗОСКОПИЧЕСКИХ ОБЪЕМОВ**

05.13.18 — Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

Диссертация на соискание учёной степени
доктора физико-математических наук

Ижевск 2017

Оглавление

Введение	6
1 Современные проблемы и подходы в механике и теплофизике многофазных сред	17
1.1 Метод многоуровневого анализа как основа для численного моделирования сложных систем и процессов	19
1.2 Уравнения переноса в многофазных средах	29
1.2.1 Уравнения механики сплошных гетерогенных сред	30
1.2.2 Уравнения баланса в теплофизике кристаллизации слитков	34
1.3 Проблема осреднения в многофазных средах	39
1.3.1 Осреднение уравнений	39
1.3.2 Осреднение механических и теплофизических характеристик	51
1.4 Модели физико-химических процессов при кристаллизации металлических расплавов	61
1.5 Многоуровневое моделирование кристаллизации	74
1.6 Выводы к главе 1	79
2 Метод двухуровневого математического моделирования процессов переноса и структурообразования	81
2.1 Концептуальная постановка задачи	82
2.1.1 Числа подобия для систем с фазовыми границами	82
2.1.2 Анализ пространственно-временных масштабов процессов	86
2.1.3 Критерии применимости двухуровневого подхода .	92

2.2	Математическая постановка задачи кристаллизации мезоскопических объемов	94
2.3	Численные методы: алгоритмическая реализация	102
2.4	Численные методы: дискретизация уравнений	109
2.5	Программная реализация и проблемно-ориентированные программы для ЭВМ	112
2.6	Выводы к главе 2.	116
3	Двухуровневая модель селективного лазерного плавления металлических порошков	118
3.1	Обзор экспериментальных данных и сущностная постановка задачи	119
3.2	Математическая постановка задачи	132
3.2.1	Постановка задачи на макроуровне. Расчет полей температуры, пористости и степени усадки	132
3.2.2	Постановка задачи на мезоуровне. Расчет эффективной теплопроводности, сегрегации компонентов, консолидации частиц	139
3.3	Алгоритмическая компоновка двухуровневой модели и численная реализация	152
3.4	Идентификация параметров и верификация модели	163
3.5	Выводы к главе 3	171
4	Анализ результатов двухуровневого моделирования процессов селективного лазерного плавления	172
4.1	Моделирование механизмов переноса и структурообразования на мезоуровне	174
4.1.1	Расчет эффективного коэффициента теплопроводности	174
4.1.2	Результаты изучения усадки порошка и формирования остаточной пористости	181

4.2	Результаты вычислительных экспериментов с использованием двухуровневой модели	188
4.2.1	Расчет и оптимизация термических режимов лазерного плавления	188
4.2.2	Моделирование синтеза композитных покрытий Fe–Ni	194
4.2.3	Моделирование получения покрытий на основе Fe–Cr ₂ O ₃	203
4.3	Выводы к главе 4	209
5	Моделирование отбора микроструктуры в бесконтейнерных методах высокоскоростной кристаллизации расплавов	211
5.1	Постановка задачи и формулировка математической модели	212
5.2	Моделирование получения порошковых материалов при распылении в инертной атмосфере	226
5.3	Моделирование высокоскоростной кристаллизации сплавов на основе железа в методе электромагнитной левитации	230
5.4	Моделирование фазового расслоения сплава Co–Cu при различных скоростях закалки	237
5.5	Выводы к главе 5	243
6	Моделирование кинетики смачивания, вязкого течения и структурообразования в процессах пайки твердым припоем алюминиевых сплавов	244
6.1	Постановка задачи и формулировка математической модели	244
6.2	Моделирование кинетики вязкого течения в зоне формирования мениска при пайке твердым припоем	254
6.3	Выводы к главе 6	260
	Заключение	261
	Литература	265

Приложения	296
А Результаты интеллектуальной деятельности	297
Б Теплофизические свойства порошков и режимы лазерной обработки	300
В Теплофизические свойства металлических расплавов, изученных методами бесконтейнерной кристаллизации	305
Г Теплофизические свойства систем, исследовавшихся в задачах смачивания	308
Д Верификация модели СЛП в экспериментах с одной дорожкой	309
Е Расширенная модель гетерогенного зарождения кристаллических фаз	312

Введение

В диссертационной работе представлены результаты математического моделирования сопряженных процессов переноса и структурообразования при кристаллизации расплавов для решения комплексных задач в области металлургии, металлофизики и теплофизики. В предложенном методе использован двухуровневый подход с разбиением задачи на макро- и мезоскопический пространственно-временные уровни, что позволяет повысить точность математических моделей при сохранении числа степеней свободы. Объектами исследования выступают металлические расплавы двойных и тройных сплавов, претерпевающие фазовое превращение в условиях диффузионного и конвективного переноса в мезоскопических объемах расплавов. Обоснованы этапы концептуальной, математической и алгоритмической постановки двухуровневого подхода и применяемые при программной реализации численные методы. На основании разработанного подхода осуществлено решение современных технических задач, имеющих важное практическое значение: селективного лазерного плавления порошков, получения порошковых материалов при бесконтейнерной кристаллизации и пайки алюминиевых сплавов твердым припоем. Практическое внедрение заключается в создании трех проблемно-ориентированных комплексов программ для ЭВМ, предназначенных для использования в качестве компонентов систем цифрового производства.

Актуальность темы и степень ее разработанности. Методология многоуровневого описания материалов успешно применяется в современной науке для решения комплексных задач в области теории разрушения и механики композитов [1–8], математического моделирования процессов деформации поликристаллических [9, 10] и композиционных

материалов [11–13], формирования микроструктуры материалов [14–16]. Важной особенностью этой методологии является то, что она определяет общую концепцию согласования математических моделей физических явлений, протекающих на различных пространственно-временных масштабах, не ограничивая при этом выбор алгоритмов описания конкретных систем. Таким образом, в каждой предметной области разбиение исходной задачи на подзадачи и определение алгоритмов согласования решений на различных уровнях является отдельной научной проблемой.

Для анализа процессов кристаллизации на практике используются два основных класса моделей. В первом случае расчет объемной кристаллизации слитков производится при решении континуальных сопряженных уравнений баланса внутренней энергии, количества вещества, импульса и энтропии. Этот подход основан на теории двухфазной зоны (ТДЗ), наиболее эффективен для прогнозирования макроструктуры слитков и позволяет делать оценки степени сегрегации компонентов на макроскопическом (уровня представительного макрообъема) масштабе [17–20]. Второй подход базируется на применении метода фазового поля (МФП) для многокомпонентных сплавов, основанного на записи вариационных уравнений для термодинамических потенциалов и функции параметра порядка. МФП физически точен, однако в практических задачах эффективно описывает процессы структуро- и фазообразования только на атомном и мезоскопическом (т.е. отдельных кристаллитов) масштабах. Таким образом, разработка двухуровневой макро-мезоскопической модели для анализа систем, претерпевающих фазовые превращения “расплав—кристаллическая фаза”, является важной актуальной задачей. Решение такой задачи позволяет значительно улучшить точность макроскопических математических моделей при сохранении их вычислительной эффективности, что имеет практическое значение. Следует отметить, что зарубежные научные группы [14, 21–23] проводят активные исследования в этой области, поэтому создание отечественных разработок важно для развития науки и технологий.

Объектами исследования диссертационной работы выступают металлические расплавы двойных и тройных сплавов, претерпевающие фазовые превращения в условиях диффузионного и конвективного переноса при кристаллизации мезоскопических (с линейными размерами порядка 10^{-2} м и менее) объемов расплава. Такие условия реализуются при производстве функциональных покрытий и материалов, где высокие скорости изменения термодинамических параметров требуют разработки макро-мезоскопического подхода для адекватного описания движения фазовых границ. **Предметом исследования** является кинетика процессов переноса и структурообразования в системах, претерпевающих фазовые переходы “расплав – твердая фаза”. Поставленная проблема актуальна для оптимизации аддитивных технологий, получения металлических порошков, режимов пайки твердым припоем, на примере которых показаны применимость и прикладная значимость развитого в диссертации подхода.

Целью работы является разработка двухуровневого макроскопического–мезоскопического подхода для описания динамики движения фазовых границ и прогнозирования микроструктуры в металлургических процессах мезоскопических объемов. Для достижения поставленной цели в диссертации поставлены и решены следующие **научные задачи:**

1. Анализ предложенных в литературе методов осреднения и согласования решений на различных уровнях. Определение характеристических чисел процессов переноса в многофазных системах и принципов их использования при концептуальной постановке задач с фазовыми превращениями.
2. Анализ представительных объемов на различных пространственно-временных масштабах в задачах кристаллизации. Особенности концептуальной постановки задачи на основе данных лабораторного эксперимента.

3. Разработка двухуровневого подхода к описанию процессов переноса и структурообразования при кристаллизации мезоскопических объемов расплава в широком диапазоне скоростей охлаждения. Постановка краевых задач и алгоритмов согласования моделей на различных уровнях. Оценка точности и границ применимости метода.
4. Алгоритмическая компоновка и программная реализация комплексов программ для моделирования селективного лазерного плавления, бесконтейнерной кристаллизации и пайки твердым припоем с целью математического моделирования указанных технологических процессов.
5. Моделирование, анализ процессов теплопереноса, компактирования, кристаллизации, структуро- и фазообразования в методе селективного лазерного плавления (СЛП) для оптимизации 3D печати металлических изделий.
6. Изучение методом вычислительного эксперимента режимов теплопереноса, компактирования порошка, химической сегрегации компонентов при высокоскоростном лазерном синтезе (ВЛС) функциональных композитных покрытий.
7. Расчет механизмов многофазного зарождения и отбора кристаллических фаз в бесконтейнерных методах высокоскоростной кристаллизации, включая распыление расплава в инертной атмосфере и электромагнитную левитацию.
8. Математическое моделирование кинетики вязкого течения, диффузии кремния, дендритного роста и отбора микроструктуры в зоне пайки твердым припоем сплавов Al–Si промышленного значения.

Научная новизна работы заключается в следующем:

1. Разработан двухуровневый подход для описания процессов переноса и структурообразования в металлических расплавах, претерпевающих фазовые превращения, который позволил при сохранении вычислительной эффективности улучшить соответствие результатов макроскопических моделей кристаллизации с экспериментальными данными.
2. Предложена формулировка модели многофазного течения в формализме фазового поля, в которой на линии контакта фаз вводится граничное условие диффузионного типа и обосновывается выбор интерполяционной функции для фазового поля, обеспечивающий численную устойчивость.
3. Обоснован алгоритм реализации двухуровневой модели, который производит представительную выборку макроточек при решении задач на мезоуровне и осуществляет динамическое согласование решений на различных уровнях в зависимости от скорости изменения термодинамических параметров. Указанный подход применим для описания систем со слабой корреляцией по пространственным координатам или времени, где допускается расщепление задач на уровни и параллелизация их численного решения.
4. Проведен выбор численных схем, эффективных для решения задач в области металлургии мезоскопических объемов, исследована область их устойчивости, определены границы применимости.
5. Реализованы и верифицированы три проблемно-ориентированных программы для ЭВМ для моделирования теплофизических процессов в металлургии мезоскопических объемов.
6. Впервые методом двухуровневого моделирования изучены сопряженные теплофизические процессы, протекающие при короткоимпульсном лазерном плавлении (ЛП) в композитных металлических

порошках. Показано, что достижимы режимы ЛП порошка, его компактирования и последующей высокоскоростной кристаллизации, способствующие формированию композитных функциональных покрытий, которые наследуют неоднородность химического состава порошковой смеси.

7. Двухуровневое моделирование бесконтейнерной кристаллизации расплавов позволило получить новые данные по механизмам структурообразования в сплавах на основе железа. Теоретически рассчитаны и обоснованы скорости охлаждения и фазовый отбор при кристаллизации расплава $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}_1$, позволяющие достичь высокой остаточной намагниченности при производстве редкоземельных постоянных магнитов.
8. Результаты моделирования пайки твердым припоем показали, что кинетика смачивания и формирования мениска в зоне соединения лимитируется, в первую очередь, протеканием физико-химической реакции на линии смачивания, скорость протекания которой определяется потенциалами взаимодействия молекул в высокотемпературной области и химическим составом.

Научно-практическая значимость и использование результатов работы. Разработанная модель имеет практическую значимость в области производства функциональных материалов с улучшенными магнитными, механическими и электрохимическими свойствами. Такие материалы часто получают кристаллизацией из многокомпонентных металлических расплавов, когда затвердевание происходит с большими скоростями охлаждения, достигаемыми за счет закалки поверхностных слоев или частиц малого объема. Определим данный класс задач как область металлургии мезоскопических объемов. В работе предложены комплексные математические модели и решены три актуальные технические задачи на основе результатов вычислительного эксперимента. Показаны пути управления структурно-фазовыми характеристиками магнитных матери-

алов на основе железа за счет расчета скоростей охлаждения, гидродинамического течения и многофазного зарождения в методах бесконтейнерной кристаллизации, включая получение порошковых материалов. Изучены тепловые режимы и многофазное течение в зоне оплавления при селективном лазерном плавлении металлических порошков в методе 3D печати. Установлены основные лимитирующие факторы при формировании мениска расплава и кристаллической субструктуры в зоне пайки твердым припоем. Практическое внедрение заключается в создании трех проблемно-ориентированных комплексов программ для ЭВМ, предназначенных для оптимизации технологических процессов.

Методология и методы исследования. Апробация разработанных моделей проведена путем сравнения с экспериментальными данными, полученными соавторами публикаций в рамках совместных исследовательских проектов. Экспериментальные методы включают распыление в капельных трубах, электромагнитную левитацию, высокоскоростную видеосъемку и термометрирование поверхности образцов в режиме реального времени, коротко- и длинноимпульсное лазерное плавление порошков, прямое наблюдение формы мениска. Структурно-фазовые и электрохимические исследования образцов выполнялись методами металлографии, СЭМ, ПЭМ, РФЭС, потенциодинамического анализа и механических испытаний на микротвердость и износ.

При построении двухуровневых моделей и решении уравнений переноса использованы методы математической физики и вычислительной математики. Дискретизация моделей выполнена методами конечных разностей и конечных элементов. Реализация комплексов программ проведена с помощью языков программирования C++, Pascal и метаязыка для аналитического программирования вариационных задач на вычислительной платформе Comsol MultiPhysics. Разработанные комплексы программ поддерживают портируемость на различные операционные системы за счет функционального разделения программного кода на расчетные модули и модули интерфейса. При этом выбор операционной си-

стемы производится на этапе компиляции. Для ускорения расчетов на этапе вычислительного эксперимента реализована многопоточная обработка данных за счет программирования и исполнения скриптов на языке командного интерпретатора операционной среды.

Положения, выносимые на защиту:

1. Двухуровневый подход к описанию процессов переноса и структурообразования, протекающих в условиях интенсивного тепломассопереноса и движущихся фазовых границ, в металлических расплавах.
2. Физико-математические модели процессов селективного лазерного плавления, высокоскоростного лазерного плавления, бесконтейнерной кристаллизации и пайки твердым припоем в расплавах мезоскопического объема.
3. Алгоритм реализации двухуровневой модели, определяющий способ разбиения континуальной модели на уровни, постановку краевых задач и схему согласования решений на макро- и мезоскопическом масштабах.
4. Численные схемы и алгоритмы для интегрирования уравнений динамики многофазных сред при описании кристаллизующихся систем, в которых происходит изменение объема.
5. Проблемно-ориентированные комплексы программ для проведения вычислительного эксперимента в задачах металлургии мезоскопических объемов при получении функциональных материалов.
6. Результаты математического моделирования вязкого течения, тепломассопереноса, многофазного зарождения фаз, кристаллического роста и отбора микроструктуры в задачах металлургии мезоскопических объемов.

Достоверность результатов, полученных в диссертации, обеспечивается удовлетворительным соответствием между результатами расчета

и экспериментальными данными, полученными при исследовании трех комплексных процессов в области металлургии малых объемов.

Апробация работы проведена на российских и международных конференциях: X Национальной конференции по росту кристаллов, 2002, Москва; Всероссийской конференции “Высокопроизводительные вычисления и технологии”, 2003, Ижевск; 7th International Conference on Brazing, High Temperature Brazing and Diffusion Welding, 2004, Aachen; EUROMAT-2007, Nurnberg; 13th International Conference on Rapidly Quenched & Metastable Materials, 2008, Dresden; Первой и Второй международных конференциях “Трехмерная визуализация научной, технической и социальной реальности. Кластерные технологии моделирования”, 2009, 2010, Ижевск; III Всероссийской конференции по наноматериалам НАНО-2009, Екатеринбург; MRS Fall Meeting, 2010, Boston; IX Всероссийской конференции “Физикохимия ультрадисперсных (нано-) систем”, 2010, Ижевск; 3rd International Conference on Advances in Solidification Processes, 2011, Aachen; Десятая Всероссийская конференция “Физикохимия ультрадисперсных (нано-) систем”, 2012, Ростов-на-Дону; V Всероссийской конференции по наноматериалам, 2013, Звенигород; XVIII Зимней школы по механике сплошных сред, 2013, Пермь; Frontiers in Solidification Research, 2014, Cologne; 8th International Conference on High Temperature Capillarity, Bad-Herrenalb; Fifth Serbian Congress on Theoretical and Applied Mechanics, 2015, Arandjelovac; Вторая российская конференция по магнитной гидродинамике, 2015, Пермь; 12th Meeting of the International Working Group of the Electromagnetic Levitation Facility Users onboard the ISS, 2015, Cologne, 2015; II и III Международных конференциях “Аддитивные технологии: настоящее и будущее”, 2016, 2017, Москва; XV International Conference On Intergranular And Interphase Boundaries In Materials, 2016, Москва; VII Всероссийской конференции с международным участием “Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии”, 2016, Ижевск; XX Международном Менделеевском съезде по общей и при-

кладной химии, 2016, Екатеринбург; VI ежегодном Форуме “Информационные технологии в ВПК”, 2017, Ижевск; Международной конференций “Структурно-фазовые превращения в материалах: теория, компьютерное моделирование, эксперимент”, 2017, Екатеринбург; Международном симпозиуме “Неравновесные процессы в сплошных средах”, 2017, Пермь и других.

Диссертационная работа докладывалась полностью на научных семинарах, проведенных в ПНИПУ, ИМСС УрО РАН (г. Пермь), ИПМ им. Келдыша, МИСИ, ОИВТ (г. Москва), ОмГТУ (г. Омск), ИТ СО РАН и ИТПМ СО РАН (г. Новосибирск), ИМ УрО РАН (г. Ижевск).

Публикации. Содержание диссертационной работы достаточно полно отражено в 70 работах, из них 22 работы опубликованы в журналах, входящих в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций, 18 статей в зарубежных изданиях, индексируемых в международных базах цитирования Web of Science, Scopus и Springer, 30 статей в прочих периодических изданиях и трудах конференций. Получено 3 свидетельства на регистрацию программы для ЭВМ.

Личный вклад автора Диссертация является научно-квалификационной работой, включающей результаты, полученные лично автором и в соавторстве. Формулировка целей и задач исследования, а также интерпретация результатов проведенных вычислительных экспериментов выполнены самостоятельно. Выводы диссертационной работы и положения, выносимые на защиту, сформулированы лично автором. Метод двухуровневого моделирования процессов переноса и структурообразования в металлургии мезоскопических объемов, схема согласования моделей и интерпретация результатов вычислительных экспериментов разработаны и реализованы автором диссертационного исследования. Развитие метода высокоскоростного лазерного плавления, анализ бесконтейнерной кристаллизации, изучение кинетики вязкого течения реализованы совместно с соавторами публикаций. Соискатель

являлся руководителем и ответственным исполнителем 4 проектов при поддержке РФФИ, Российского космического агентства, международных научных программ Erasmus Mundus и Fulbright. Участвовал в качестве соисполнителя в 7 проектах РФФИ, Минобрнауки РФ и Европейского космического агентства ЕКА.

Благодарности. Автор благодарит Г. А. Гордеева, В. Е. Анкудинова, С. Л. Ломаева, Д. Д. Афлятунову, И. В. Шутова за помощь в проведении расчетов и экспериментальных исследований. Постановка экспериментов и анализ экспериментальных данных проведены совместно с д.т.н. Е. В. Харанжевским, д.х.н. С. М. Решетниковым (УдГУ, Ижевск), д.ф.-м.н. П. К. Галенко (Йена, Германия), проф. Я. Франсаером, д-ром Давидом Ванден Абеле (KUL, VKI, Бельгия), д-ром Т. Фолькманом (DLR, Германия), проф. Д. Матсоном (Tufts U, США), проф. Д. Секуличем (UKY, США), проф. С. Месаровичем (WSU, США) в рамках выполненных совместных российских и международных проектов.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения, списка литературы из 260 наименований, шести приложений и изложена на 316 страницах, включая 21 таблицу и 68 рисунков.

1. Современные проблемы и подходы в механике и теплофизике многофазных сред

Первая глава содержит обзор существующих проблем и современных подходов в математическом моделировании сопряженных физико-химических процессов в системах с многофазной структурой. Показано, что для анализа нестационарных процессов переноса в таких системах использование многоуровневого моделирования обеспечивает повышение точности расчетов. В качестве успешных примеров рассмотрены подходы физической мезомеханики, квантово-химического моделирования и моделей турбулентного течения вязких сред. Отмечено, что многоуровневый подход является методологическим приемом, пригодным для математического моделирования различных классов объектов. При этом формулировка многоуровневой модели, адекватно описывающей поведение объектов, требует детального рассмотрения взаимосвязи физических явлений для корректной постановки краевых задач на различных пространственно-временных уровнях. Далее проанализирована проблема осреднения и согласования решений на различных пространственно-временных масштабах. В соответствии с целью работы анализ сконцентрирован на разработанных методах осреднения термодинамических переменных и их потоков на макроскопическом и мезоскопическом пространственных уровнях (далее макроуровень и мезоуровень соответственно). Рассмотрены основные математические модели, относящиеся к кристаллизации металлических расплавов, включая уравнения баланса, теорию двухфазной зоны, метод фазового поля, уравнения окислительно-восстановительных реакций, уравнения термодинамики необратимых процессов и химической термодинамики.

Список обозначений и русско-английских соответствий в главе 1

- МПКА — метод подвижных клеточных автоматов
- ОС — определяющие соотношения
- НДС — напряженно-деформированное состояние
- МД — молекулярная динамика
- HMS — иерархическая многоуровневая модель
- КДХ — карта деформационных характеристик
- coarse-graining (*англ.*) — “грубозеренное осреднение”
- heterogeneous multiscale method (НММ) (*англ.*) — неоднородный многоуровневый метод
- ДУЧП — дифференциальное уравнение в частных производных
- coarse-grained time-stepper (*англ.*) — дискретное пристрелочное уравнение
- equation-free framework (*англ.*) — процедура решения эволюционного уравнения произвольного вида
- gap-tooth scheme (*англ.*) — интервальное приближение
- patch dynamics (*англ.*) — приближенная динамика
- projective integration method (*англ.*) — метод интегральных проекций
- lattice Boltzmann method (*англ.*) — сеточный метод Больцмана
- volume of fluid method (*англ.*) — метод объема жидкости
- cell problem (*англ.*) — задача на ячейке
- ОМС — обобщенный метод самосогласования

- ТДЗ — теория двухфазной зоны
- ДЗ — двухфазная зона
- САПР — система автоматического проектирования
- МФП — модель фазового поля
- mobility (*англ.*) — подвижность
- ФП — фазовое поле
- КФП — кристаллическое фазовое поле
- dendrite envelope approach (*англ.*) — метод эффективного пакета дендрита
- SAFE (Cellular Automaton — Finite Element)) method *англ.* — гибридный метод клеточных автоматов и конечных элементов
- *ab initio* — первопринципный

1.1. Метод многоуровневого анализа как основа для численного моделирования сложных систем и процессов

Метод многоуровневого анализа получил свое развитие при попытке научного решения сложных практических задач. К их числу относится в первую очередь проблема теоретического описания нагружения деформируемого твердого тела, обладающего поликристаллическим строением. Основы этого направления были заложены В.Е. Паниным (Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск) и В.А. Лихачевым (Санкт-Петербургский государственный университет) в начале 80-х годов XX века при попытке непротиворечиво связать теорию дислокаций и механику сплошной среды. Существовавшие ранее схемы пластической деформации структурно-неоднородной среды основывались на

комбинации различных видов кристаллографических сдвигов, т.е. учитывали трансляционный характер деформации. Для устранения существовавших противоречий была предложена [1, 4] концепция структурных уровней деформации, которая рассматривает деформируемое твердое тело как многоуровневую систему, в которой пластическое течение является результатом самосогласованного развития сдвиговой устойчивости на различных пространственных уровнях (рис. 1.1). К их числу были отнесены микро-, мезо- и макроскопические уровни. При этом мезоскопический уровень включает описание поведения субзерен, зерен, конгломератов зерен и других элементов. Это означает, что проведенная граница между уровнями весьма условна, скорее правильнее говорить о наборе структурных элементов, которые подвергаются элементарным актам деформации и при этом оказывают взаимное влияние на механизмы деформации на других уровнях. Тогда физическую систему — деформируемое твердое тело — логично определить как иерархическую систему, обладающую структурным подобием.

Изначально зародившись как чисто феноменологический подход, основанный на анализе и обобщении множества данных лабораторных экспериментов по механическим испытаниям, физическая мезомеханика была позднее теоретически подтверждена с развитием многоуровневого моделирования. Большой вклад в развитие многоуровневых моделей деформации поликристаллических материалов внесли научные школы С.Г. Псахье (Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск) и П.В. Трусова (Пермский научно-исследовательский политехнический университет, Пермь), работы П.В. Макарова (Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск). Важно отметить, что первые значительные результаты в развитии многоуровневых моделей были получены в области композиционных материалов благодаря пионерским работам С.Д. Волкова [2] (Уральский политехнический институт, Екатеринбург), Б.Е. Победря [3] (Московский государственный университет, Москва) и позднее Ю.В. Соколкина (Перм-

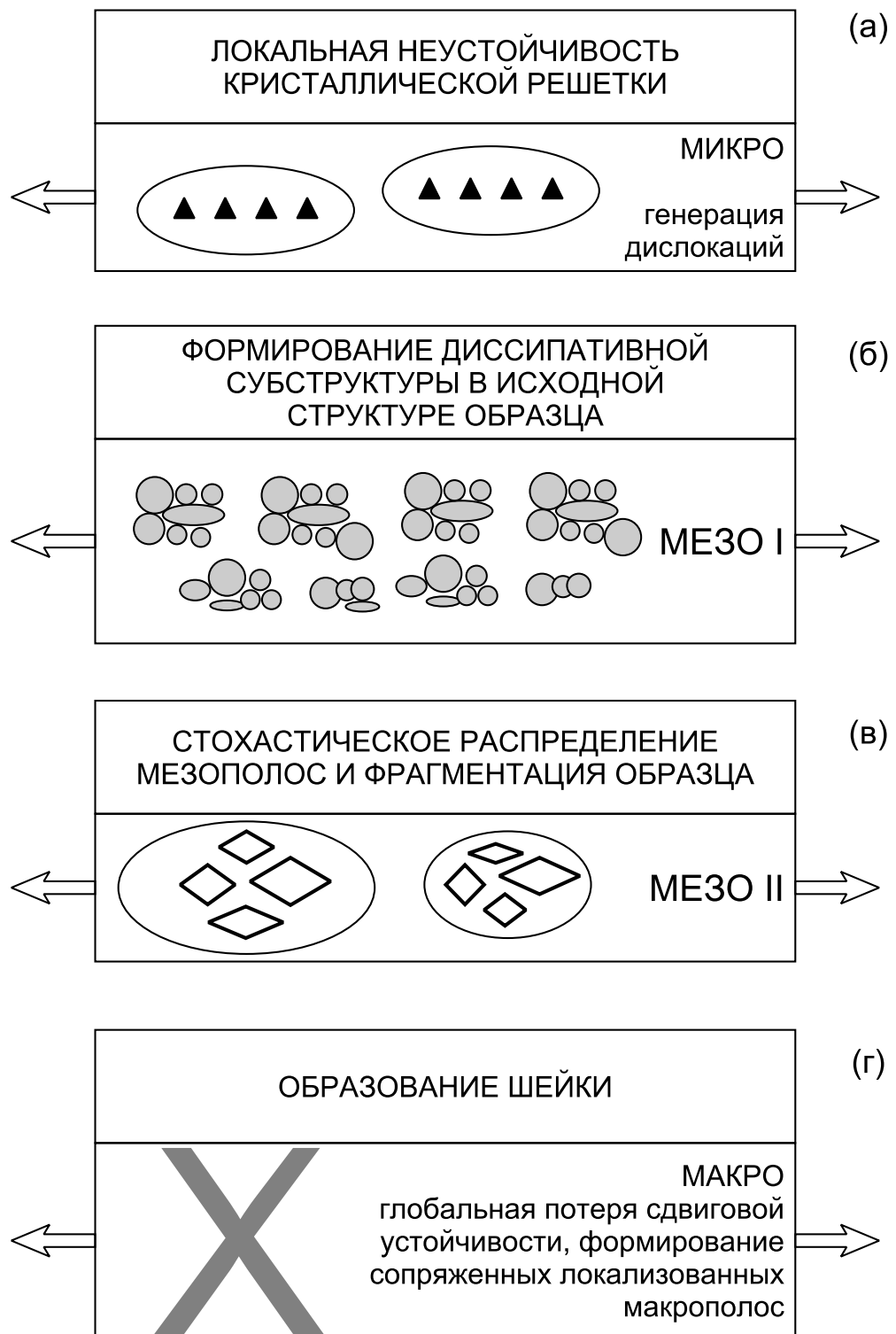


Рис. 1.1. Схема масштабных уровней потери сдвиговой устойчивости в деформируемом теле: а — микро; б — мезо I; в — мезо II; г — макро [4].

ский научно-исследовательский политехнический университет, Пермь), где были впервые рассмотрены теоретические аспекты согласования решений на разных уровнях.

В [5] развит метод подвижных клеточных автоматов (МПКА, *mobile automata method — англ.*) для математического моделирования процессов пластической деформации материалов, разрушения, возникновения повреждений и распространения трещин, фазовых (в первую очередь твердофазных) превращений и химических реакций. Метод МПКА является дальнейшим развитием метода частиц, где проведено расширение ближнего взаимодействия частиц на парное взаимодействие автоматов и взаимодействие типа погруженной частицы. В результате уравнение движения для каждого автомата разбивается на трансляционную и вращательную составляющие. Сила взаимодействия определяется как функция отклика — степени относительной деформации автомата. Определение формы поверхности с помощью множества клеточных автоматов и законов их взаимодействия позволяет эффективно моделировать контактные задачи, учитывающие взаимодействие трущихся пар на микро-скопическом уровне. Будучи основанным на феноменологических принципах, метод МПКА способен качественно описывать различные явления, связанные с деформацией и взаимодействием твердых тел. При этом его количественная точность, как и для других моделей этого класса, обусловлена точностью выбранных потенциалов взаимодействия и взаимосвязи воздействия и отклика — определяющих соотношений (ОС). В [7] была предпринята попытка более строгой формализации многоуровневой модели путем записи ОС для разных уровней материала. Были точно даны определения уровней и записаны эволюционные уравнения для внутренней структуры материала. На основании разработанной модели исследованы вначале случай простого нагружения, а далее высокоскоростная упругопластическая деформация металлов в ударных волнах.

В двухуровневой модели упругопластического деформирования поликристаллических материалов [24] производится запись ОС для описания эволюции микроструктуры поликристаллических материалов. В этой модели реализуется более точный расчет механизмов деформации, поскольку на каждом масштабном уровне решается полная краевая задача, включающая уравнение движения, ОС и граничные условия. Разбиение объекта исследования на уровни производится за счет введения макроточки и мезоточки. Макроточка рассматривается как элемент описания однородного напряженно-деформированного состояния (НДС) на макроскопическом уровне. Мезоточка определяется границами однородного НДС на уровне отдельного кристаллита либо зерна с малоугловым расхождением между субзернами (рис. 1.2(а)). Далее определяется процедура согласования на макроскопическом и мезоскопическом уровнях, которая позволяет производить взаимное сопряжение решений на обоих уровнях. При таком рассмотрении решение задачи деформирования на мезоуровне позволяет рассчитать эффективные характеристики напряженного состояния на макроуровне. Эволюция микроструктуры и ее влияние на НДС деформируемого тела вводится посредством внутренних переменных, которые зависят от НДС, рассчитываемого на уровне отдельных зерен. Для этого определена процедура включения внутренних переменных в ОС [25].

Для численного анализа предложен алгоритм [26], который определяет порядок реализации двухуровневой модели на ЭВМ, рис. 1.2(б), и заключается в следующем. В начальный момент времени известно распределение макросвойств с предыдущего шага. Далее производится поиск скоростей перемещений, макродеформаций и макронапряжений на макроуровне. Интегрирование по времени дает макронапряжения и макродеформации в конце временного шага нагружения. На каждом шаге нагружения устанавливается взаимосвязь уровней модели итерационным способом. Для этого на основании данных макроуровня определяются условия нагружения, деформации и вращения мезоточек, соответствующие

ющих элементам кристаллографической структуры. Полученные данные мезоуровня передаются обратно на макроуровень как эффективные упругие характеристики. Производится уточнение макронапряжений и макродеформаций до достижения заданного по макропараметрам порога точности.

К преимуществам предложенного двухуровневого метода также следует отнести его масштабируемость, когда макро- и микромеханические модели поведения материалов эффективно сопрягаются с уравнениями переноса. В диссертации [27] развита двухуровневая модель поведения сталей при термомеханических воздействиях с учетом фазовых превращений. Постановка задачи включает определение НДС на макроуровне I (уровне изделия), макроуровне II (уровне представительного макрообъема) и мезоуровне (уровне отдельных зерен или кристаллитов). Дополнительно вводятся уравнение теплопроводности и уравнение диффузии для представительного макрообъема. Объемные доли фаз описываются кинетическим уравнением, зависящим от свободной энергии Гиббса, которая в свою очередь определяется упругой энергией НДС. Согласованное решение уравнений модели на различных уровнях позволило определить важные характеристики процесса нагружения. Проведен расчет объемной доли мартенсита при стали AISI 301 при простом и сложном нагружении. Выполнено моделирование поведения стали с учетом диффузионного ферритного превращения.

Таким образом, эти работы наглядно показали, что применение многоуровневых моделей [9] дает возможность проведения полномасштабного вычислительного эксперимента в области механики деформируемого тела с высокой достоверностью получаемых результатов. Среди работ западных ученых в области многоуровневого моделирования механики материалов отметим результаты Д. Раабе (D. Raabe, Institut für Metallkunde und Metallphysik, Aachen) и Д. Роосе (D. Roose, KU Leuven). В монографии [14] рассмотрены общие подходы в вычислительной математике сплошных сред. Проанализированы расчетные мето-



(б)

Рис. 1.2. Двухуровневая модель стационарных процессов упругопластического деформирования, предложенная в [24, 26]. (а) Схема взаимодействия макро- и мезоуровней. (б) Алгоритм двухуровневого подхода на шаге макронагружения.

ды для описания материалов на нано-микроскопических уровнях, включая первопринципные квантовомеханические (*ab-initio*) модели и методы молекулярной динамики (МД, molecular dynamics — *англ.*). На микро- и мезоскопическом уровнях рассмотрены статистические модели описания дислокаций, фазополевой подход и метод клеточных автоматов. Для моделирования на мезо-макроскопическом масштабе применяются модели поликристаллических тел, основанные на различных гипотезах взаимосвязи механических свойств на различных масштабах. Приведенный перечень методов показывает, что создание универсального подхода для описания материалов, обладающих сложной иерархической структурой, затруднительно. Единственно правильным направлением вычислительного материаловедения является совершенствование уже разработанных подходов и их грамотное сопряжение для получения полного теоретического описания материалов. Одна из возможных схем сопряжения “физико-механические свойства” — “теоретические методы” — “характеристики материалов” — “функциональные свойства” приведена на рис. 1.3.

В исследованиях [10] развивается иерархическая многоуровневая модель (hierarchical multi-scale(HMS) model - *англ.*), которая позволяет производить расчет напряжений и деформаций заготовок при обработке давлением. Разработанная модель хорошо адаптирована к высоким степеням деформации, наблюдаемым при прокатке металлов и сплавов, когда происходит существенное изменение текстуры материала. Для этого разработана специальная процедура сопряжения двух уровней. В начальный момент времени строится карта деформационных характеристик (КДХ) на макроскопическом уровне путем осреднения механических свойств согласно данным по исходной текстуре материала. Далее начинается расчет деформирования материала, при котором осуществляется периодическая проверка соответствия КДХ фактической текстуре материала. После превышения установленного уровня погрешности производится перестройка КДХ согласно новым данным. Важным преиму-

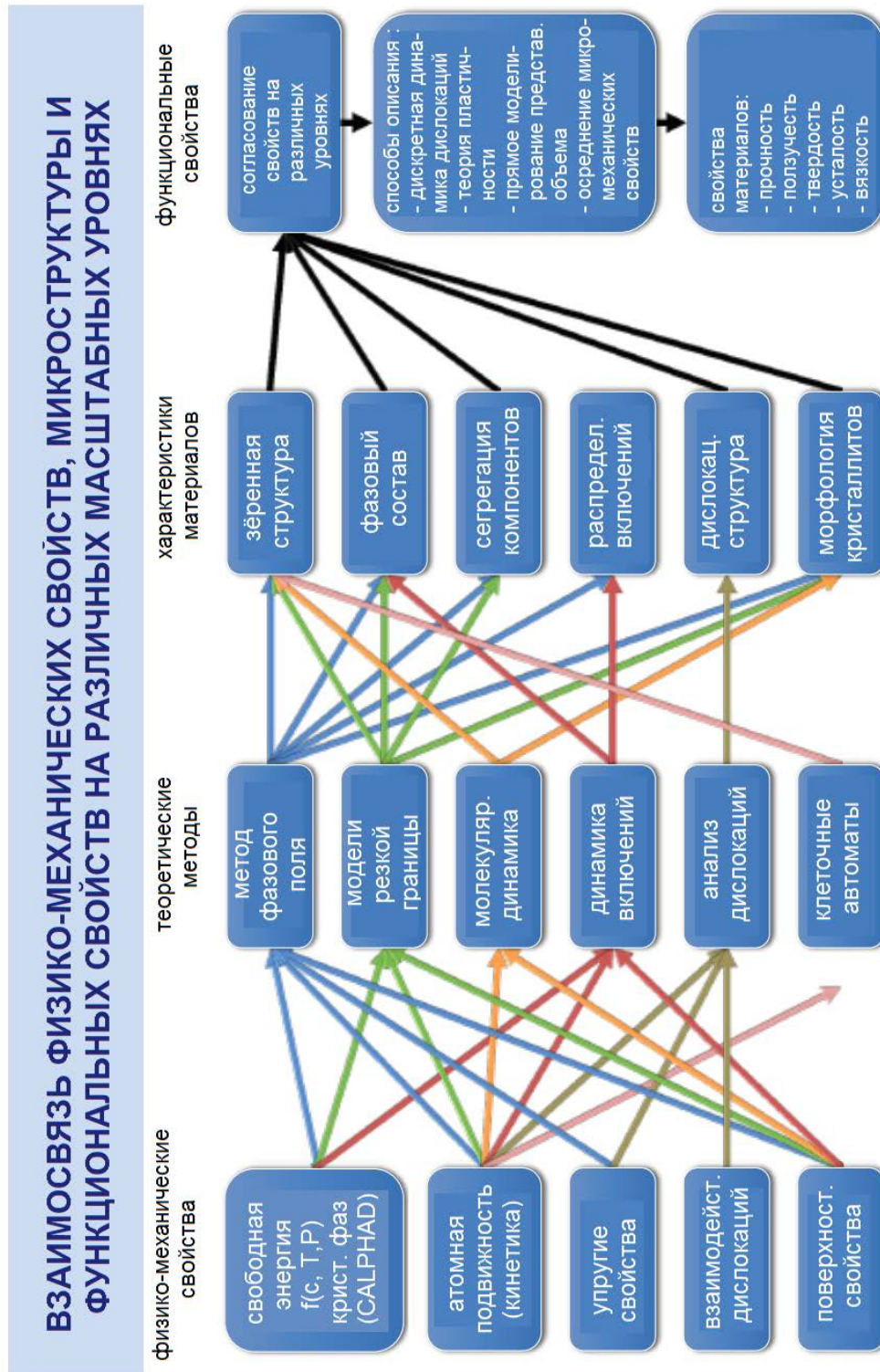


Рис. 1.3. Взаимосвязь микроструктуры и функциональных свойств материалов. Схема сопряжения “физико-механические свойства” — “теоретические методы” — “характеристики материалов” — “функциональные свойства”. Стрелки указывают на взаимосвязь элементов схемы, где различный цвет стрелок соответствует множественным связям одного элемента с элементами другой колонки [28].

ществом такого подхода является расчет деформационного поведения на мезоуровне не на каждом временном шаге и только в определенной выборке представительных объемов на макроуровне. Этот прием позволяет существенно поднять скорость вычислений с возможностью расчета мехобработки изделий в прокатном производстве. Следовательно, вопрос осреднения решений и процедуры согласования уровней является таким же важным, как и формулировка основных уравнений, если ставится задача разработки математических моделей для исследования промышленных технологий.

Отметим кратко также другие области применения многоуровневого моделирования, показавшие свою значимость в решении важных фундаментальных и прикладных задач. В первую очередь, это задачи гидро(несжимаемые среды) и аэродинамики (сжимаемые среды) по обтеканию тел при высоких числах Рейнольдса Re и больших числах Маха. Вычислительная гидроаэродинамика в практических приложениях использует RANS метод [29], который по сути является двухуровневым. Это связано с каскадом диссипации энергии в турбулентном течении, когда происходит передача кинетической энергии на более низкий пространственный уровень за счет каскадного образования мелких вихрей. В итоге достигается пространственный масштаб $l_\nu \sim Re^{-3/4}$ вязкой диссипации, где происходит преобразование во внутреннюю энергию за счет вязкого трения (рис. 1.4). Таким образом, в большинстве практически значимых ситуаций при $Re \gtrsim 10^4$ масштаб вязкой диссипации составляет $l_\nu \sim 1 \div 10$ мкм. В таких условиях явления на мезоскопическом уровне моделируются с помощью подсеточных моделей, которые осуществляют осреднение вихревых структур малого размера и учитывают их вклад в баланс момента импульса. Область использования подсеточных моделей сильно зависит от конкретной задачи и требует предварительной проверки применимости. Развивающиеся в последнее время методы больших (LES — *англ.*) и динамических вихрей (DES — *англ.*) позволили устранить неоднозначность в выборе подсеточной модели за

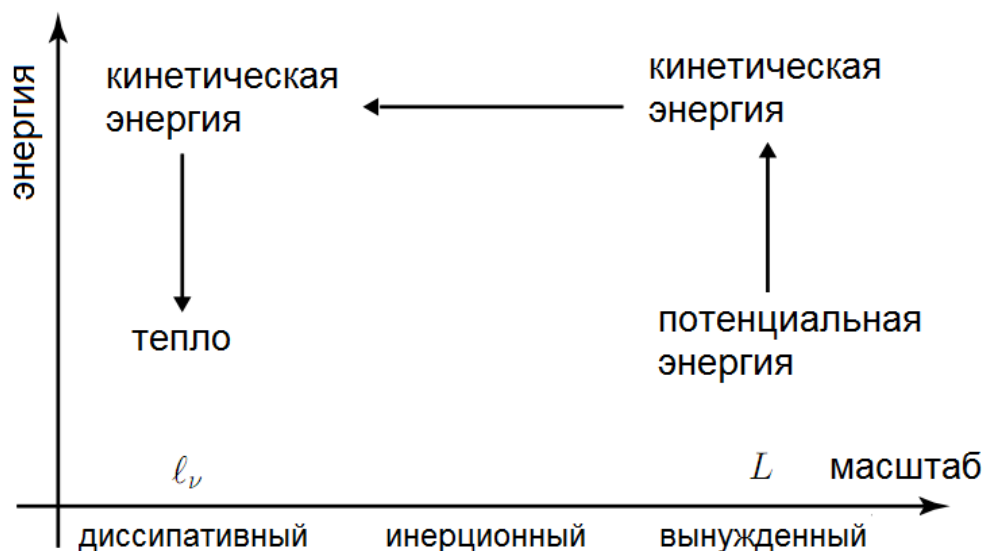


Рис. 1.4. Каскад диссипации кинетической энергии в турбулентном течении [30].

счет адаптивного расчета уравнений Навье-Стокса в пограничных областях и областях с высоким локальным числом Рейнольдса. Хотя в литературе RANS, LES и DES методы обычно не классифицируются как многоуровневые, при их разработке использована идея разбиения задачи на разные пространственно-временные уровни. В завершение обзора отметим работы М. Карплюса, А. Уоршела и М. Левитта по многоуровневому моделированию комплексных химических систем, удостоенные Нобелевской премии по химии в 2013 г. Сочетание квантомеханического подхода для описания химических реакций с методом молекулярной динамики в приложении к движению частиц позволили решить важные задачи в области вычислительной биохимии, в частности исследовать поведение сложных молекулярных органических систем.

1.2. Уравнения переноса в многофазных средах

В предыдущем разделе акцент в обсуждении был сделан на механике деформируемого поликристаллического твердого тела как научной области, где многоуровневый подход получил наибольшее развитие и практическое использование. В настоящем разделе вначале вы-

полним критический анализ моделей многофазных сред с позиций механики дисперсных сред, развитых в работах Р.И. Нигматулина [31] и В.Я. Рудяка [32, 33]. Далее рассмотрим модели описания процессов переноса с позиций теплофизики кристаллизации слитка на основе работ В.Т. Борисова, В.А. Журавлева и Ф.В. Недопекина [34–36]. После этого будет рассмотрена проблема осреднения уравнений и выбора представительного объема в гетерогенных средах.

1.2.1. Уравнения механики сплошных гетерогенных сред

Для описания механики гетерогенных сред в [31] вводится понятие многоскоростного континуума, который представляет набор нескольких континуумов, соответствующих различным фазам многофазной системы. Далее на его основе производится определение субстанциональной производной и запись уравнений сохранения для массы, полной энергии системы как суммы кинетической и внутренней энергий, уравнений сохранения импульса и момента импульса. Уравнения сохранения изначально формулируются на основе простых феноменологических соображений — балансов величин, включающих источники слагаемые и потоки на границе локального объема. После применения теоремы Остроградского-Гаусса и суммирования по фазам выводятся уравнения, которые по форме похожи на соотношения для гомогенных сред, но содержат дополнительные слагаемые, связанные с диффузионными скоростями $\vec{w}_i$. Скорости $\vec{w}_i$ представляют собой скорости $\vec{v}_i$ движения i -й составляющей относительно скорости центра масс смеси и среды в целом — барицентрической скорости $\vec{v}$:

$$\vec{w}_i = \vec{v}_i - \vec{v}, \quad \sum_{i=1}^N \rho_i \vec{w}_i = 0, \quad (1.1)$$

$$\rho = \sum_{i=1}^N \rho_i, \quad \rho \vec{v} = \sum_{i=1}^N \rho_i \vec{v}_i, \quad (1.2)$$

где ρ_i — удельная плотность i -й компоненты в единице объема. Тогда уравнения баланса массы, импульса и энергии определяются соответственно уравнениями

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_i \vec{v}_i = \sum_{j=1}^N J_{ji}, \quad (1.3a)$$

$$\rho_i \frac{d_i \vec{v}_i}{dt} = \nabla^k \sigma_i^k + \rho_i \vec{g}_i + \sum_{j=1}^N (\mathbf{P}_{ji} - J_{ji} \vec{v}_i), \quad (1.3б)$$

$$\rho_i \frac{d_i}{dt} \left(u_i + \frac{v_i^2}{2} \right) = \nabla \cdot (\vec{c}_i - \vec{q}_i) + \rho_i \vec{g}_i \cdot \vec{v}_i + \sum_{j=1}^N \left[E_{ji} - J_{ji} \left(u_i + \frac{v_i^2}{2} \right) \right], \quad (1.3в)$$

$$(i, j = 1, 2, \dots, N; \quad J_{ji} = -J_{ij}, \quad \mathbf{P}_{ji} = -\mathbf{P}_{ij}, \quad E_{ji} = -E_{ij}),$$

где J_{ji} характеризует интенсивность перехода массы из j в i компоненту в единице объема смеси и в единицу времени, тензор σ_i^{kl} и вектор $\vec{g}_i$ характеризуют воздействие внешних поверхностных и массовых сил, приходящихся на i составляющую, u_i — удельные внутренние энергии составляющих, $\mathbf{P}_{ji}$ представляет интенсивность обмена импульсом между j -й и i -й компонентами, $\vec{c}_i$ — вектор, характеризующий работу внешних поверхностных сил ($c_i^n = \sigma_i^n \cdot \vec{v}_i$), $\vec{q}_i$ соответствует тепловому потоку через поверхность, E_{ji} — интенсивность обмена энергией между j -й и i -й компонентами.

Для замыкания полученной системы уравнений требуется ввести термодинамические уравнения состояния фаз, которые определяют функцию зависимых переменных системы уравнений (1.3) от макроскопических параметров, в качестве которых, как правило, выбирают параметры давления p и температуры T . В системах с фазовыми переходами дополнительно требуется определить баланс энтропии s (или в качестве

альтернативы энтальпии i):

$$\rho \frac{Ds}{Dt} = \rho \frac{D^{(\text{ext})}s}{Dt} + \rho \frac{D^{(\text{int})}s}{Dt}, \quad (1.4a)$$

$$\rho \frac{D^{(\text{ext})}s}{Dt} = - \sum_{i=1}^N \nabla^k \left(\frac{q_i^k}{T_i} \right), \quad (1.4б)$$

$$\rho \frac{D^{(\text{int})}s}{Dt} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\tau_i^{kl} e_i^{kl}}{T_i} + q_i^k \nabla^k \left(\frac{1}{T_i} \right) + \sum_{j=1}^{i-1} \left[F_{ji}^k (v_j^k - v_i^k) \left(\frac{\kappa_{ji}}{T_i} + \frac{\kappa_{ij}}{T_j} \right) \right] + \right. \quad (1.4в)$$

$$\left. + \sum_{j=1}^N \left[\frac{Q_{ji}}{T_i} + J_{ji} \left(s_i + \frac{i_{ji} - i_i}{T_i} + \frac{(\vec{v}_{ji} - \vec{v}_i)^2}{2T_i} \right) \right] \right).$$

Уравнение (1.4) учитывает изменение энтропии как за счет притока энтропии извне при теплообмене с внешней средой, так и внутреннее производство за счет фазовых переходов. Таким образом, теоретическая модель описания механики многофазной среды, представленная основными уравнениями (1.1)–(1.4), может быть в первом приближении интерпретирована как система уравнений переноса, где помимо учета переноса среды как целого вводятся дополнительные слагаемые, учитывающие потоки на межфазных границах и производство энтропии за счет фазовых переходов. Отметим, что эта модель содержит наиболее общую постановку задачи и учитывает явления сжимаемости сред, вязкого трения на межфазных поверхностях и условия совместного деформирования фаз. В результате она хорошо соответствует решению прикладных задач в области течения (обтекания) в дисперсных средах.

Вопросы построения моделей переноса в гомогенных и гетерогенных средах исчерпывающе рассмотрены в монографии [32,33]. Отмечено, что феноменологический подход позволяет получить уравнения баланса, которые описывают физические системы, где релаксационные процессы пренебрежимо малы. При наличии эффектов памяти и дальнедействующих потенциалов взаимодействия частиц правильнее использовать подходы статистической аэрогидродинамики. Это позволяет, с одной стороны, выполнить корректный анализ нелинейных эффектов в вязких сре-

дах, с другой стороны, достигается строгое с точки зрения статистической физики описание состояния системы как на макроскопическом, так и микроскопическом уровнях. В результате феноменологические модели переноса выводятся как частный случай более общей теории статистической аэрогидромеханики.

С этой целью в [32, 33] проводится анализ широкого круга теоретических вопросов. Отмечается, что феноменологические уравнения переноса выведены в приближении сплошной среды и подразумевают локальность по времени и пространственным координатам. В результате описание вязкой среды получается детерминированным и не учитывает стохастичности протекающих явлений, возникающей, в частности, из-за неповторяемости условий рассеяния при столкновении частиц. Для учета этого эффекта предлагается разбить потенциал взаимодействия на регулярную и стохастические части силы (потенциала) взаимодействия, т.е. определить нелокальность по времени. Наличие стохастических составляющих в уравнениях движения делает рассеяние при столкновении двух молекул неупругим. Дополнительно в модели взаимодействия частиц требуется перейти от двухчастичных потенциалов к многочастичным, что позволяет включить в рассмотрение нелокальность по пространству. Полученное описание естественным образом учитывает в модели сплошной среды флуктуационный характер микроскопических параметров. Основным результатом развиваемого подхода является вывод обобщенных уравнений гидродинамики, которые применимы как для молекулярных смесей (растворов и расплавов), так и для дисперсных жидкостей. Для дисперсных жидкостей предлагается смешанный кинетико-гидродинамический подход, когда несущий компонент описывается системой гидродинамических уравнений, а дисперсный компонент — кинетическим уравнением.

В применении к настоящей работе интересным является анализ еще двух теоретических аспектов, рассмотренных в монографии. Во-первых, предлагается классификация гетерогенных сред по трем при-

знакам: 1) агрегатному состоянию, 2) соотношению внутренних структурных элементов, 3) плотности дисперсной фазы. Классификация проводится на основе критериев подобия, определяемых на основе длины пробега, размера частиц, объемной концентрации дисперсной фазы и других параметров. Во-вторых, подробно рассмотрен вопрос релаксационных эффектов в процессах переноса. С этой целью рассматриваются соотношения между термодинамическими потоками и силами, в которых вводится понятие релаксационного ядра переноса. Этот формализм важен в процессах высокоскоростной кристаллизации, где при больших скоростях движения фронта затвердевания возникают значительные релаксационные эффекты, приводящие к изменению механизма сегрегации химических компонентов.

1.2.2. Уравнения баланса в теплофизике кристаллизации слитков

В области теплофизики кристаллизации непрерывного слитка в литературе [34–36] также была предложена математическая модель гидродинамики и тепломассобмена. В отличие от рассмотренной выше модели, при формулировке уравнений изначально уделяется особое внимание физическим аспектам, важным для задач кристаллизации. Учет прочих физических явлений производится либо в виде поправочных коэффициентов, либо ими пренебрегается. Отметим наиболее важные физические допущения такой математической модели: (1) кристаллизация объемных заготовок протекает при постоянных температуре и давлении; (2) течение расплава в двухфазной зоне является несжимаемым, формирование усадочных раковин происходит за счет изменения удельного объема при кристаллизации; (3) тангенциальные напряжения при вязком трении между расплавом и стенкой изложницы пренебрежимо малы; (4) при формировании двухфазной зоны фильтрационное течение достаточно хорошо описывается законом Дарси; (5) достигаемые числа Рейнольдса относятся к малым и переходным числам, следовательно, в гидродинами-

ческих моделях нет необходимости использования подсеточных моделей; (6) фазовое состояние системы однозначно определяется из фазовой диаграммы по температуре, давлению и концентрации компонентов; (7) для многофазных сплавов, как правило, задача сводится к квазибинарной системе. С учетом сделанных допущений основные уравнения модели процессов тепломассопереноса при кристаллизации могут быть записаны для системы из N компонентов в виде [36]:

– уравнение баланса массы i -го компонента

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -\nabla \cdot \rho_i \vec{v}_i + \sum_{j=1}^m \nu_{ji} r_j, \quad (1.5)$$

где r_j — скорость j -ой реакции, m — число химических реакций, ν_{ji} — коэффициенты пропорциональности, положительные для продуктов и отрицательные для исходных компонентов в реакции;

– уравнение массопереноса (баланса компонентов)

$$\rho \frac{\partial c_i}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J}_i + \sum_{j=1}^m \nu_{ji} r_j, \quad (1.6)$$

где $c_i = \rho_i / \rho$ — массовая концентрация i -го компонента, $\rho = \sum_{i=1}^N \rho_i$ — полная плотность смеси; $\vec{J}_i$ — диффузионный поток i -го компонента;

– закон сохранения полной энергии системы

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{q}_e, \quad (1.7)$$

$$e = v^2/2 + e_p + u + e_{EM},$$

где e — полная удельная энергия, которая включает удельную кинетическую энергию $v^2/2$, удельную потенциальную энергию e_p , удельную внутреннюю энергию u и удельную электромагнитную энергию e_{EM} , поток $\vec{q}_e$ энергии определен ниже;

– полный поток энергии $\vec{q}_e$

$$\vec{q}_e = \rho e' \vec{v} + \vec{v} \tilde{p} + \sum_{i=1}^N (e_p)_i \vec{q}_i + \vec{q}_T + \vec{q}_{EM}, \quad (1.8)$$

где слагаемые в правой части определяют конвективный поток энергии, поток энергии, обусловленный механической работой, совершаемой над системой, потоки потенциальной, тепловой и электромагнитной энергий соответственно с учетом $e' = e - e_{EM}$, $(e_p)_i$ — удельной потенциальной энергии i -го компонента,.

Последние два уравнения (1.7) и (1.8) исключительно важны для задач кристаллизации, поэтому их записывают в явном виде с выделением всех слагаемых — удельных энергий различной физической природы:

– баланс удельной кинетической энергии [36]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \frac{\vec{v}^2}{2} \right) = -\nabla \cdot \left(\vec{v} p + \rho \frac{\vec{v}^2}{2} \vec{v} \right) + \tilde{p} : \nabla \vec{v} + \rho \vec{v} \cdot \vec{f} + \rho z \vec{v} \cdot \vec{E} - \vec{i} \cdot (\vec{v} \times \vec{B}), \quad (1.9)$$

где слагаемое $\tilde{p} : \nabla \vec{v}$ соответствует бискалярному произведению тензоров напряжения $\tilde{p}$ и скоростей деформации $\nabla \vec{v}$ и показывает внутреннюю плотность источника кинетической энергии; $\vec{f} = \sum_{i=1}^N \rho_i \vec{f}_i / \rho$, $z = \sum_{i=1}^N \rho_i z_i / \rho$ — среднемассовые сила и электрический заряд; $\vec{i} = \sum_{i=1}^N z_i \vec{q}_i$ — ток проводимости;

– баланс потенциальной энергии

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e_p) = -\nabla \cdot \left(\rho e_p \vec{v} + \sum_{i=1}^N e_p \vec{q}_i \right) - \rho \vec{f} \cdot \vec{v} - \sum_{i=1}^N \vec{q}_i \cdot \vec{f}_i + \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^N (e_p)_i \nu_{ji} r_j, \quad (1.10)$$

где $e_p = \sum_{i=1}^N \rho_i (e_p)_i / \rho$ — среднемассовая потенциальная энергия;

– баланс внутренней энергии

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{q}_T - \tilde{p} : \nabla \vec{v} - \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^N (e_p)_i \nu_{ji} r_j + \vec{i} \cdot (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) + \sum_{i=1}^N \vec{q}_i \cdot \vec{f}_i, \quad (1.11)$$

где второе и третье слагаемые правой части показывают плотности внутренних источников внутренней энергии, последние два слагаемых — плотности внешних источников, связанных с воздействием электромагнитных и массовых сил;

– баланс электромагнитной энергии

$$\frac{\partial e_{EM}}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{q}_{EM} - \vec{j} \cdot \vec{E}, \quad (1.12)$$

где $e_{EM} = (\vec{E} \cdot \vec{D} + \vec{H} \cdot \vec{B})/2$ — электромагнитная энергия, рассчитанная на единицу объема, $\vec{q}_{EM} = \vec{E} \times \vec{H}$ — вектор плотности электромагнитной энергии, $w_{EM} = \vec{j} \cdot \vec{E}$ — плотность внутренних стоков электромагнитной энергии (джоулево тепло).

Для согласованного описания необходимо к системе уравнений (1.5)–(1.12) добавить баланс другого термодинамического параметра — энтропии, которая отражает изменение фазового состава при фазовых переходах:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial s}{\partial t} = & -\nabla \cdot \left[\frac{\vec{q}_T - \sum_{i=1}^{N-1} (\mu_i - \mu_N) \vec{q}_i}{T} \right] - \frac{1}{T^2} \left[\vec{q}_T - \sum_{i=1}^N \vec{q}_i (h_i - h_N) \right] \cdot \nabla T - \\ & - \frac{1}{T} \left[\tilde{\Pi}_b^0 : \widetilde{\nabla \vec{v}} + \Pi \nabla \cdot \vec{v} - \vec{i} \cdot (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \right] + \\ & - \frac{1}{T} \left[\sum_{i=1}^{N-1} \vec{q}_i \cdot \left((v_i - v_N) \nabla p + \frac{\partial(\mu_i - \mu_N)}{\partial c_i} \nabla c_i - (\vec{f}_i - \vec{f}_N) \right) + \sum_{j=1}^m A_j r_j \right], \end{aligned} \quad (1.13)$$

где $\tilde{p} = \delta \tilde{p} + \tilde{p}_b = \delta \tilde{p} + \delta \tilde{\Pi} + \tilde{\Pi}_b^0$, Π и $\tilde{\Pi}_b^0$ — первый инвариант и девиатор тензора вязких напряжений $\tilde{p}_b$, $\widetilde{\nabla \vec{v}}$ — симметричная часть девиатора тензора скоростей деформации, $A_j = \sum_{i=1}^N (\mu_i + (e_p)_i) \nu_{ji}$ — химическое сходство j -ой реакции, h_i — удельная энтальпия i -го компонента.

Для замыкания системы уравнений производится выбор одного из принципов, задающих направление необратимых процессов, например, принцип неубывания энтропии или принцип максимума производства энтропии для замкнутых систем [35]. Также задаются соотношения между

обобщенными термодинамическими потоками и обобщенными термодинамическими силами, например, согласно соотношениям Онзагера. Таким образом, в кристаллизации непрерывного слитка при формулировке математической модели детально определяются уравнения для массового, теплового, энергетического и энтропийного балансов. При этом кристаллизация соответствует уменьшению свободной энергии системы Гиббса (при $p, T = \text{const}$), что определяет траекторию изменения состояния системы. В неизотермическом случае в качестве критерия обычно используется условие максимума производства энтропии, но возможны и другие критерии. По этой причине система уравнений (1.5)–(1.13) (для кристаллизации слитков) и система (1.1)–(1.4) (для механики дисперсных сред) не отличаются в принципиальной постановке задачи. Отличия находятся в степени детализации различных слагаемых. Физические аспекты, связанные с переносом импульса, вязким трением и сжимаемостью, актуальны в механике дисперсных сред. Для кристаллизации наиболее важны в первую очередь теплофизические аспекты.

В завершение раздела отметим, что в задачах непрерывной кристаллизации объемных слитков отсутствует необходимость в применении многоуровневого подхода, поскольку скорости изменения параметров малы и континуальное описание адекватно описывает протекающие процессы переноса. Для учета изменяющегося фазового состава системы в этом случае достаточно использовать эффективные теплофизические характеристики, являющиеся функцией объемных долей фаз в локальном объеме. Физическая ситуация кардинально меняется при рассмотрении высоконеравновесных процессов кристаллизации. Такие условия зачастую формируются при затвердевании мезоскопических объемов расплава. В этом случае физико-химические процессы, протекающие на микроскопическом уровне (уровне отдельных частиц в порошковых средах или дендритных кристаллов в двухфазной системе), оказывают взаимное влияние на макроскопические процессы. Другой пример — это задачи пластического деформирования поликристаллических тел, где также

становится обоснованным использование двухуровневого подхода. В результате двухуровневые математические модели оказываются способны описывать динамику изменения состояния системы гораздо точнее, чем макроскопические континуальные модель, использующие эффективные теплофизические характеристики.

1.3. Проблема осреднения в многофазных средах

1.3.1. Осреднение уравнений

Соотношения (1.1)–(1.4) и (1.5)–(1.13) механики многофазных сред могут быть получены не только феноменологически на основании анализа балансов потоков и источниковых слагаемых в локальном объеме. Указанные уравнения могут быть альтернативно выведены после осреднения уравнений, описывающих микроскопическое движение в физической системе на уровне частиц, причем осреднение должно выполняться как в объеме фаз, так и на межфазных поверхностях. Таким образом, методика осреднения уравнений является одним из ключевых элементов при построении многоуровневых моделей. Этой тематике ранее был посвящен ряд диссертационных исследований, выполненных С.В. Мозолиным (Москва, 1984), О.А. Ивановой (Москва, 1993), М.В. Соловейчик (Москва, 1993), В.Ю. Дубинской (Москва, 1994), А.С. Слуцким (Санкт-Петербург, 2005). (Работы приведены в хронологическом порядке.) В теории затвердевания наиболее строгое определение макроточки было дано И.Л. Воробьевым и Г.Ф. Баландиным (Москва, 1980) при формулировке уравнений двухфазной зоны. Рассмотрим в этом разделе основные понятия и определения, связанные с процедурой осреднения.

В литературе описано несколько методов осреднения: пространственное; временное; пространственно-временное; вероятностное. Как отмечено в [31], “Все эти методы приводят практически к одинаковым системам осредненных уравнений, и различие методов проявляется лишь при их обосновании, при выборе основных гипотез и при разработке

методов экспериментального измерения средних параметров и выявления связей между ними”. Пространственное осреднение может проводиться либо по объему, либо в плоском сечении объема в зависимости от рассматриваемой физической характеристики. В некоторых случаях осреднение проводится по произвольной поверхности, соответствующей границе раздела фаз. Для этого в точке P осреднения, определяемой радиус-вектором $\vec{r}$, задается либо элементарный объем δV , либо плоское сечение δs , для которых точка P является геометрическим центром:

$$\vec{r} = \frac{1}{\delta V} \int_{\delta V} \vec{r}' d'V = \frac{1}{\delta s} \int_{\delta s} \vec{r}' d's.$$

Далее для корректного проведения осреднения накладывается ограничение, что линейный размер δx объема δV или сечения δs во много раз превосходит размер l неоднородности осредняемого поля и много меньше, чем характеристический пространственный масштаб L анализируемого физического явления:

$$L \gg \delta x \gg l, \quad \delta x \sim (\delta V)^{1/3} \sim (\delta s)^{1/2}.$$

Определим далее объемную и поверхностную доли i -й фазы в элементарном объеме или плоском сечении как

$$\alpha_{Vi} = \delta V_i / \delta V, \quad \alpha_{si} = \delta s_i / \delta s, \quad \sum_{i=1}^N \alpha_{Vi} = \sum_{i=1}^N \alpha_{si} \equiv 1.$$

Введем усредненные значения $\langle \varphi'_i \rangle_{Vi}$ и $\langle \varphi'_i \rangle_{si}$ скалярного поля φ по объемам фаз δV_i и сечениям δs_i согласно определениям

$$\langle \varphi'_i \rangle_{Vi} = \frac{1}{\delta V_i} \int_{\delta V_i} \varphi'_i d'V, \quad \langle \varphi'_i \rangle_{si} = \frac{1}{\delta s_i} \int_{\delta s_i} \varphi'_i d's. \quad (1.14)$$

Поскольку результат осреднения зависит от формы, расположения и размеров элементарного объема (сечения), то необходимо ввести некоторые условия на интервал значений линейного размера δx области осреднения. Рисунок 1.5 показывает, что функции $\langle \varphi'_i \rangle_{Vi}$ и $\langle \varphi'_i \rangle_{si}$ имеют участок $\delta x_{\min} < \delta x < \delta x_{\max}$, где функция выходит на локальный асимптотический предел. В этом случае в литературе [31] определяют такое

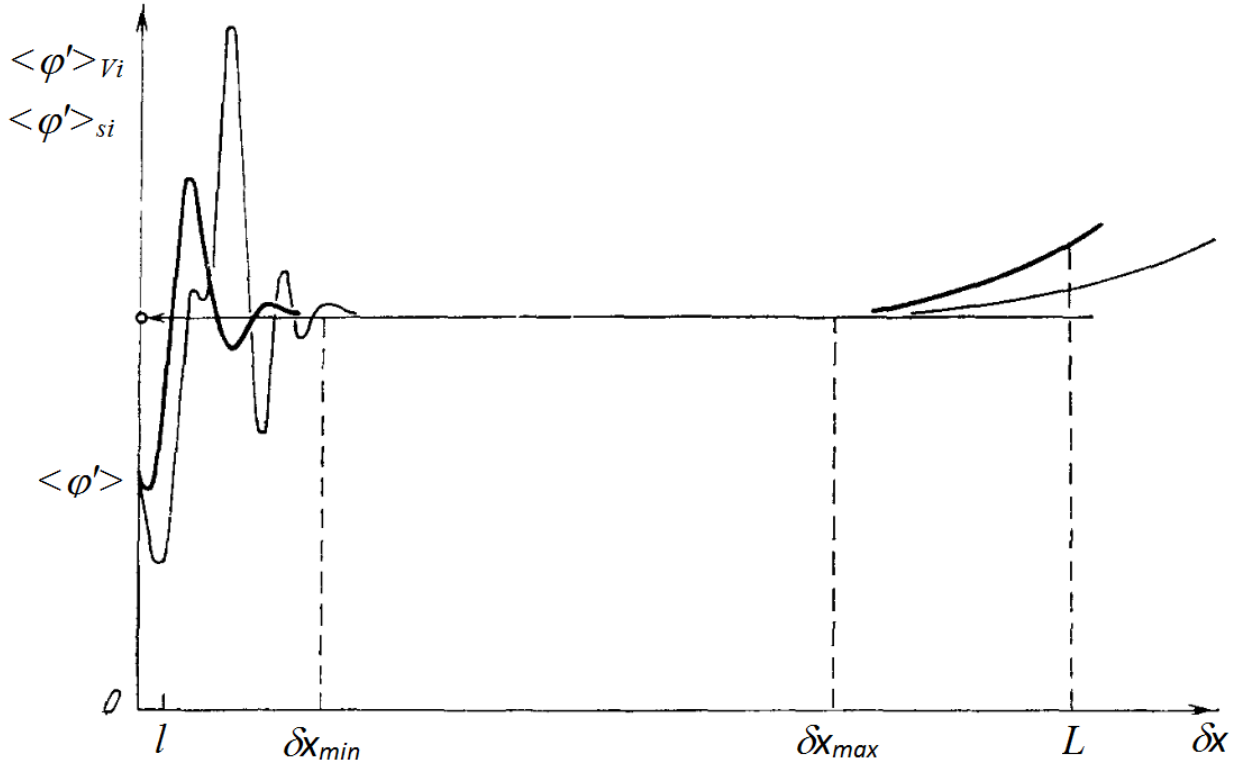


Рис. 1.5. Изменение среднеобъемных $\langle \varphi' \rangle_{Vi}$ и средних по сечению $\langle \varphi' \rangle_{si}$ величин как функции линейного размера δx области осреднения [31].

поведение $\langle \varphi' \rangle$ как устойчивое, регулярное и представительное. Следовательно, при осреднении решений в многофазной среде интегрирование величин по элементарному объему (сечению) может быть заменено на интегрирование осредненных полей переменной φ :

$$\int_{V_i} \varphi'_i d'V = \int_V \alpha_{Vi} \langle \varphi'_i \rangle_{Vi} dV, \quad \int_{si} \varphi'_i d's = \int_s \alpha_{si} \langle \varphi'_i \rangle_{si} ds. \quad (1.15)$$

Выражения (1.15) являются определяющими, поскольку позволяют переходить от атомного к микроскопическому или от микро- к макроскопическому пространственным масштабам на этапе согласования решений при построении многоуровневых моделей.

Подход к осреднению решения на различных уровнях был успешно развит при решении ряда конкретных задач. В первую очередь отметим методы осреднения на основе асимптотического анализа, развитого Н.С. Бахваловым и Г.П. Панасенко для механики композитов [37]. В основе этого метода лежит важное допущение о различии простран-

ственных масштабов l и L микромеханических свойств и макроскопического нагружения соответственно. Если $l \ll L$ и микромеханические свойства меняются периодически или квазипериодически с масштабом l , то для решения краевой задачи с коэффициентами, имеющими период l , вводятся два масштаба пространственных координат. Определим малый параметр $\varepsilon = l/L$, характеризующий степень неоднородности среды [38]. Рассмотрим одномерную краевую задачу теплопроводности

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left[a \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) \frac{du}{dx} \right] &= q(x), \\ u(0) &= 0, \quad u(L) = 0, \end{aligned} \quad (1.16)$$

где u — безразмерная температура, $a(x/\varepsilon)$ — коэффициент, пропорциональный тепловой проводимости материала, правая часть $q(x)$ изменяется медленнее, чем коэффициент $a(x/\varepsilon)$. Теперь вместо одной пространственной переменной вводятся две новые пространственные координаты: “медленная” $y = x$ и “быстрая” $\eta = x/\varepsilon$. Оператор дифференцирования по пространству при этом преобразуется как $d/dx = \partial/\partial y + \varepsilon^{-1} \partial/\partial \eta$ и вместо исходного обыкновенного дифференциального уравнения получается уравнение в частных производных по y и η . Решение (1.16) ищется в виде разложения по степеням ε : $u = u_0(\eta, y) + \varepsilon^{-1} u_1(\eta, y) + \dots$. Первый член u_0 разложения не зависит от быстрых координат и представляет собой осредненную (макроскопическую) часть решения. Последующие слагаемые вносят поправки, пропорциональные ε^n ($n = 1, 2, \dots$ — порядок поправки по ε) и описывают локальные вариации решения на микроскопическом уровне.

После этого производится асимптотическое расщепление исходной краевой задачи по параметру малости ε , где получающаяся последовательность краевых задач является рекуррентной и решается далее на заданной ячейке размерами $0 \leq \eta \leq 1$. Решение задач на ячейке позволяет найти поправки u_i к макроскопическому решению u_0 . Затем производится осреднение по быстрым координатам и получается выражение

для неизвестного эффективного коэффициента a^* :

$$a^* = \left[\int_0^1 a^{-1} d\eta \right]^{-1},$$

который входит в решение краевой задачи на макроскопическом уровне

$$a^* \frac{d^2 u_0}{dy^2} = q(y), \quad u_0(0) = 0, \quad u_0(L) = 0.$$

Полученное решение является приближенным, поскольку получено с точностью до $O(\varepsilon)$. Это может быть рассмотрено как разумная плата за решение сложной краевой задачи с быстропеременными коэффициентами. Фактически решение задачи на ячейке преобразует проблему к более простой краевой задаче. При этом допускается повышение точности решения за счет учета более высоких порядков разложения.

Далее рассмотрим следующий вопрос, методологически важный для теоретического моделирования многофазных сред. Уравнения механики сплошных гетерогенных сред выводятся из феноменологических балансовых соотношений для макроскопических величин, их потоков и источниковых слагаемых в соответствии с экспериментально установленными зависимостями между потоками и обобщенными термодинамическими силами. Большинство макроскопических уравнений могут быть выведены путем осреднения уравнений движения на микроскопическом уровне. Для этого выполняется их преобразование согласно следующему алгоритму [31].

1. Уравнения движения на микроуровне (уравнения микродвижения) интегрируются по элементарному объему δV_i , занятому i -ой фазой.
2. Полученные уравнения преобразуются, используя формулы (1.15) для объемного и поверхностного осреднения.
3. Значение зависимой переменной раскладывается в виде суммы среднего по фазам слагаемого и флуктуационного отклонения.
4. При осреднении среднее от флуктуаций тождественно равно нулю.

5. В итоге в уравнении движения присутствуют члены, зависящие только от среднего по фазам значения параметра.
6. Выделяя из уравнения слагаемые с i -ой фазой, получаем уравнение баланса для конкретного компонента смеси.

Проанализируем подробнее проблему осреднения дифференциальных уравнений, которая в англоязычной литературе определяется термином *homogenization* [38, 39]. Этот термин отличается от понятия *averaging* — осреднения в нелинейных задачах механики — хотя в русскоязычной литературе такого терминологического разделения не производится. В качестве примера рассмотрим проблему описания стохастического броуновского движения большой, в сравнении с размерами молекул, частицы в жидкости, определяемую в одномерной задаче уравнениями Ланжевена [39]

$$dv(t) = -\frac{\gamma}{m}v(t)dt + \frac{1}{m}dW(t), \quad dx(t) = v(t)dt, \quad (1.17)$$

где $v(t)$ и $x(t)$ соответствуют скорости и координате частицы в момент времени t , m — масса частицы, γ — коэффициент сопротивления, $W(t)$ определяет стохастическое со стандартным отклонением σ изменение движения частицы броуновского типа в результате столкновений. Уравнение (1.17) является физически более точным, чем макроскопическое уравнение на плотность, поскольку определяет движение одиночной частицы, которое детерминировано. Однако прямое численное моделирование этого уравнения для большого числа частиц в системе численно неоправданно. Вместо этого традиционным подходом является формулировка макроскопического уравнения, в котором отражена только практически измеряемая характеристика — распределение частиц по скоростям, а другие пространственно-временные масштабы исключены. Тогда для большого числа частиц вероятность $f(x, v, t) dx dt$ нахождения частицы в объеме $[x, x + dx] \times [v, v + dv]$ фазового пространства в момент

времени t определяется кинетическим уравнением

$$\partial_t f(x, v, t) + v \partial_x f(x, v, t) = \partial_v \left(\frac{\gamma}{m} v f(x, v, t) + \frac{\sigma^2}{2m^2} \partial_v f(x, v, t) \right), \quad (1.18)$$

где ∂_v соответствует частной производной по скорости. Далее основные макроскопические характеристики системы, такие как усредненная плотность, импульс и кинетическая энергия, получаются записью моментов 0, 1 и 2 порядка для скорости:

$$M_0 = \bar{\rho}(x, t) = m \int_{-\infty}^{\infty} f(x, v, t) dv, \quad (1.19a)$$

$$M_1 = m\bar{v}(x, t) = m \int_{-\infty}^{\infty} v f(x, v, t) dv, \quad (1.19б)$$

$$M_2 = \bar{e}_k(x, t) = \frac{m}{2} \int_{-\infty}^{\infty} v^2 f(x, v, t) dv. \quad (1.19в)$$

В результате динамику изменения системы можно записать через балансовые соотношения, в которых временная производная i -го момента зависит от пространственной производной более высокого $(i + 1)$ -го момента:

$$\partial_t M_i + \partial_x M_{i+1} = 0. \quad (1.20)$$

При $i = 0$ получаем уравнение баланса массы:

$$\partial_t \bar{\rho}(x, t) + \partial_x m\bar{v}(x, t) = 0.$$

Такая рекурсия позволяет сформировать *замкнутую* систему уравнений, которая описывает поведение системы на макроскопическом уровне и строго выводится из уравнений микроуровня. Указанная процедура формулировки макроскопических уравнений как кинетических уравнений для моментов низкого порядка известна в зарубежной литературе как “грубозеренное осреднение” (coarse-graining — *англ.* [39]). При этом используются приближения большого количества частиц и затухания моментов высших порядков в результате диссипации. В зависимости от области применения этот метод также известен как метод гомогенизации, осреднения, построения сеточных моделей в классической механике, равновесной статистической физике, неравновесной термодинамике, теории ренорм-групп, кинетической теории, теории турбулентности.

Для некоторых задач, связанных с нелинейными или стохастическими процессами, такое осреднение не может быть выполнено *аналитическими* методами, поскольку невозможно *apriori* определить функцию распределения зависимой величины. В этом случае применяется *численное* осреднение решений на микроуровне, которое позволяет определить коэффициенты макроскопического уравнения. Кроме того, некоторые практические задачи не могут быть подвергнуты осреднению по одной из двух причин: (1) макроскопическая модель не определена во всей области определения для пространственных или временных переменных (проблема несвязности решения); (2) макроскопическое уравнение известно из эксперимента или выводится из общих соображений (т.е. феноменологически), однако его вывод путем осреднения микроскопических моделей (проблема незамкнутости задачи) невозможен. Для такой ситуации в литературе предложен неоднородный многоуровневый метод (heterogeneous multiscale method (НММ) — *англ.*) [39, 40], который предполагает использование решения на микроуровне для построения решения на макроуровне, где балансовое или кинетическое уравнение или неточно определено, или неизвестно.

Метод НММ фактически основан на расщеплении задачи на два уровня исходя из предположения, что закон согласования решений между уровнями определен и макроскопическое изменение состояния $U(\vec{X}, t)$ системы осуществляется итерационно путем динамического обмена с данными микросостояния $u(\vec{x}, t)$. Здесь и далее строчные и прописные символы соответствуют микроуровню и макроуровню соответственно. Проанализируем этот метод подробнее.

Пусть уравнение движения, описывающее изменения состояния системы на микроскопическом уровне, представлено дифференциальным уравнением в частных производных (ДУЧП) параболического типа

$$\partial_t u(\vec{x}, t) = f(u(\vec{x}, t)). \quad (1.21)$$

Предположим, что макроскопическое уравнение движения существует, но не может быть получено из осреднения микроскопического уравнения. Обозначим это уравнение как

$$\partial_t U(\vec{X}, t) = F(U(\vec{X}, t)). \quad (1.22)$$

Перейдем к дискретным аналогам уравнений движений на обоих уровнях:

- на микроскопическом уровне дискретное уравнение напрямую следует из уравнения (1.21)

$$u(\vec{x}, t + dt) = s(u(\vec{x}, t), dt); \quad (1.23)$$

- на макроскопическом уровне конструируется дискретное пристрелочное уравнение (coarse-grained time-stepper - *англ.*)

$$\bar{U}(\vec{X}, t + \delta t) = \bar{S}(\bar{U}(\vec{X}, t), \delta t), \quad (1.24)$$

где δt соответствует шагу по времени на макроуровне, и черта над символами показывает, что введенное дискретное уравнение является только дискретной аппроксимацией уравнения (1.22), точный вид которого неизвестен.

Далее для определения пристрелочного дискретного уравнения (1.24) определим функции согласования решений на уровнях отображениями

$$\mu : U(\vec{X}, t) \rightarrow u(\vec{x}, t) \equiv \mu(U(\vec{X}, t)), \quad (1.25a)$$

$$M : u(\vec{x}, t) \rightarrow U(\vec{X}, t) \equiv M(u(\vec{x}, t)). \quad (1.25b)$$

Пусть в начальный момент времени t_0 задано решение $\bar{U}(\vec{X}, t_0)$ на макроуровне. Тогда процедура решения для двухуровневой модели осуществляется по следующему алгоритму:

1. Используя отображение μ , определяем соответствующее начальное решение $\bar{u}(\vec{x}, t_0)$ для микроуровня, согласованное с макроскопическим решением $\bar{U}(\vec{X}, t_0)$.

2. Применяем дискретное уравнение движения $u(\vec{x}, t + \delta t) = s(u(\vec{x}, t), \delta t)$ для микроуровня и вычисляем микросостояние $\bar{u}(\vec{x}, t)$ для следующего момента времени $t \in [t_0, t_0 + \delta t]$.
3. Тогда макроскопическое решение $\bar{U}(\vec{X}, t_0 + \delta t)$ для времени $t_0 + \delta t$ получается после применения обратного отображения M .

Если провести разбиение указанной процедуры на несколько временных шагов на микроуровне, полагая $\delta t = k dt$, то алгоритм численного определения пристрелочного дискретного уравнения (1.24) на макроуровне может быть окончательно переписан в виде

$$\bar{U}(\vec{X}, t + \delta t) = \bar{S}(\bar{U}(\vec{X}, t), \delta t) = M(s^k(\mu(\bar{U}(\vec{X}, t)), dt)), \quad (1.26)$$

где верхний индекс k обозначает число применений оператора s для прохождения k шагов на микроуровне.

Таким образом, введена процедура определения макроскопического уравнения движения, которое неизвестно в явной форме, т.е. формализована процедура решения эволюционного уравнения произвольного вида (equation-free framework — *англ.*) [41]. Процедура позволяет описать динамику изменения системы путем численного интегрирования решения на микроуровне при условии известного отображения решений с микроуровня на макроуровень и обратно. В заключение опишем два расширения этого метода — интервальное приближение (gap-tooth scheme — *англ.*) и приближенную динамику (patch dynamics — *англ.*) [39], которые позволяют понизить вычислительные затраты при интегрировании двухуровневых моделей [41]. Это особенно актуально при решении нестационарных 3D задач с большим числом степеней свободы.

В интервальном приближении решение на макроуровне описывается в традиционном приближении сплошной среды в дискретном наборе точек — макроузлах расчетной области. Далее определяется набор макроточек, каждая из которых содержит один макроузел и включает не менее одного представительного объема. При этом локальные макроточки

покрывают всю расчетную область, и характеристический размер макроточки равен $l_{\text{макро}} \sim (V_{\text{макро}}^{1/3})$. В окрестности каждого макроузла определяются локальные объемы (мезоточки), в которых ищется решение на микроуровне, с размерами $l_{\text{мезо}} \sim (V_{\text{мезо}}^{1/3}) \leq l_{\text{макро}}$, меньшими или равными размеру макроточки. Варьируя отношение $\beta = l_{\text{мезо}}/l_{\text{макро}}$, выбирается точность решения двухуровневой модели. В первом предельном случае: $\beta = 1$, мезоточки покрывают всю расчетную область, и уравнения микродвижения решаются во всей расчетной области. Во втором предельном случае: $\beta \ll 1, \beta > 0$, вокруг каждого макроузла анализируется решение только в малом локальном объеме, гораздо меньшем, чем объем макроточки. Пусть при $t = t_0$ известно начальное решение $U(\vec{X}, t_0)$ задачи на макроуровне. Далее итерационная схема интервального приближения строится следующим образом.

1. Используя отображение (1.25)а для μ , определяется начальное микроскопическое решение $\bar{u}_i(\vec{x}, t_0)$, согласованное с макроскопическим решением, в каждой i -ой мезоточке, содержащей i -ый макроузел.
2. Используя дискретное уравнение на микроуровне (1.23), находится решение $\bar{u}_i(\vec{x}, t)$ для каждой мезоточки в момент времени $t \in [t_0, t_0 + \delta t]$ для соответствующей краевой задачи.
3. Решение на макроуровне определяется с использованием обратного преобразования (1.25)б для $M(u(\vec{x}, t))$.

В результате получается пристрелочное уравнение движения для макроскопического уровня, как было описано выше для НММ метода. Схема интервального метода приведена в [39] и показана на рис. 1.6. Отличительным свойством интервального приближения является значительное сокращение числа степеней свободы при решении задачи на микроуровне. Отметим, что повышение скорости компенсируется появлением двух особенностей. Во-первых, при отображении с макро- на микроуровень необходимо зачастую восстанавливать не только решение $U(\vec{X}, t_0)$,

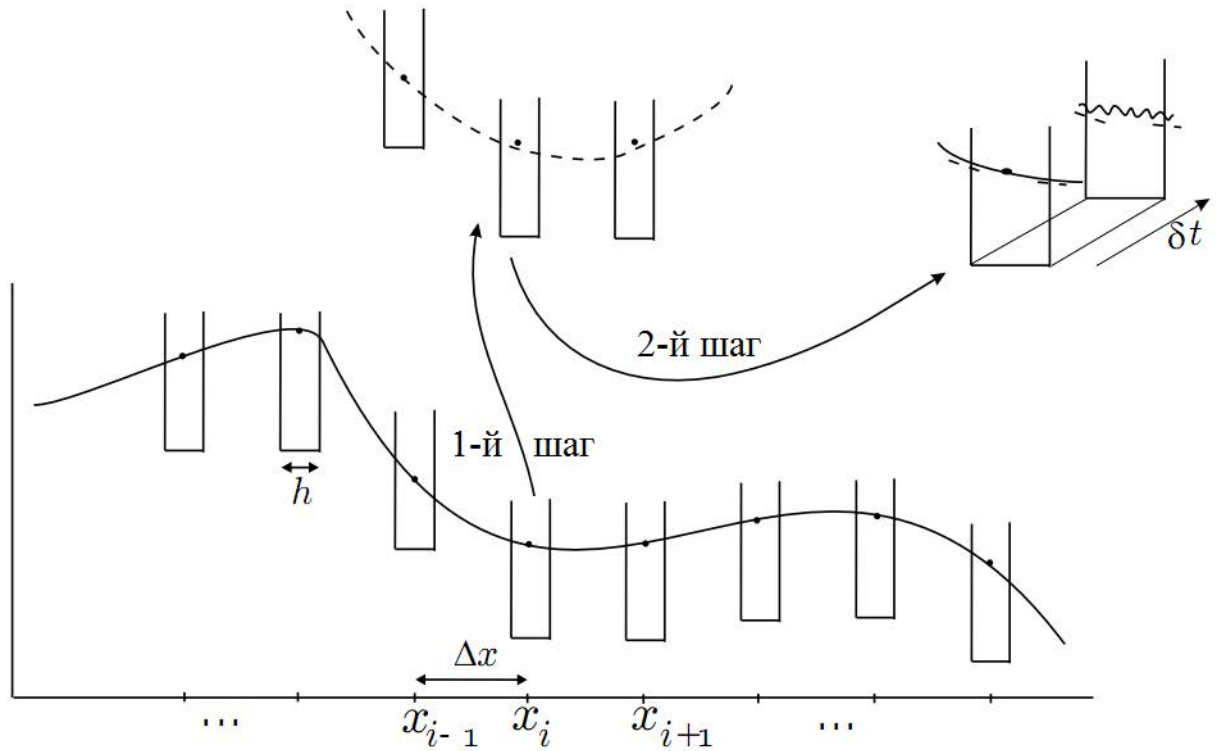


Рис. 1.6. Графическое представление интервального приближения на примере одномерной нестационарной задачи. Производится определение мезоточек размера h в окрестности каждого макроузла x_i . Далее на первом шаге производится интерполяция начального решения в выбранной мезоточке, используя средние значения в соседних макроузлах и условие непрерывности производных. На втором шаге решение в i -ой мезоточке находится в момент времени $t + \delta t$, используя уравнение движения для микроуровня [39].

но также его пространственные производные $\nabla^k U(\vec{X}, t_0)$, если правая часть (1.22) от них зависит. Во-вторых, определение в локальном объеме краевой задачи, которая воспроизводит условия нахождения локального мезообъема *внутри* объема всей расчетной области, не всегда тривиально. Тем не менее, сочетание интервального приближения с методом интегральных проекций (projective integration method — *англ.*) показывает хорошие результаты и определяет метод приближенной динамики.

Метод интегральных проекций [42] основывается на анализе эволюции системы на малых временах δt , которые много меньше харак-

теристического времени макроуровня Δt . Для ряда задач временные производные, полученные на δt , могут быть успешно использованы для проведения интегрирования на временах Δt , если сохраняется условие точности и устойчивости интегрирования. Метод интегральных проекций особенно эффективен для систем с полосчатым спектром собственных значений, где сценарии поведения системы формируют ограниченный набор сценариев, классифицируемых еще на этапе анализа системы. Далее динамика изменения состояния описывается путем выбора наиболее близкого сценария для мгновенной конфигурации системы. Один из наиболее успешных примеров использования такого метода — решение уравнений Навье-Стокса для несжимаемой многофазной среды сеточным методом Больцмана (lattice Boltzmann method — *англ.*). Это позволяет ускорить скорость вычислений на 2-3 порядка величины [43] в сравнении с решением этой задачи методом объема жидкости (volume of fluid — *англ.*), где производится определение положения межфазной границы на основании прямого расчета полей скоростей, давлений и капиллярных напряжений.

1.3.2. Осреднение механических и теплофизических характеристик

Одним из наиболее практически значимых вопросов в механике и теплофизике многофазных сред является определение эффективных механических и теплофизических параметров, если известны характеристики каждого вида включений, их форма, пространственное распределение и ориентация. При анализе этого вопроса возможны два принципиально разных подхода. *При первом подходе* производится переход от неоднородного, случайно ориентированного материала к его упрощенной модели, в которой предполагается пространственно периодическая структура включений (квазипериодическая аппроксимация). Действительно, в большинстве практических приложений дисперсия пространственных

характеристик включений невелика. Это позволяет моделировать свойства композита, рассматривая его поведение в пределах одной пространственной ячейки и заменяя влияние остальных ячеек самосогласованным усредненным полем напряжений или температур. *Во втором подходе* дисперсия свойств на множестве включений значительна, поэтому результаты анализа на одной ячейке зависят от этой ячейки и свойств включения ($N = 2$) или включений в случае многофазного ($N > 2$) композита, где N — общее число фаз. В такой ситуации значимые результаты могут быть получены только при описании поведения выделенной для рассмотрения области композита с объемом не менее представительного объема, определенного согласно рис. 1.5. Кратко рассмотрим и критически проанализируем основные модели, развитые в обоих подходах.

Осреднение для материалов с периодической структурой. Математические основы для анализа композиционных материалов были заложены в оригинальных работах С.Д. Волкова, В.П. Ставрова [2] и Б.Е. Победря [3], где был впервые предложен математический аппарат для описания сплошной среды со сложной внутренней структурой. В [2] развит метод статистического описания случайно ориентированных композитов, который был успешно апробирован при проведении расчетов на ЭВМ и позволил получить удовлетворительное согласие с лабораторными испытаниями. Исследование композитов базируется на исследовании структуры материала и построении гистограмм распределения включений или волокон как исходных данных для математической модели. Дополнительно вводятся понятия элементов структуры и индикаторной функции, определяющей распределение фаз в композите. Далее определяются моменты распределения для индикаторной функции, которые зависят от типа композита, что позволяет естественным образом перейти к методам статистической механики.

Продолжение исследований [2] проведено в [3], где автор дополняет статистический метод рассмотрением композитов методами механики

деформируемого твердого тела и, самое главное, разбиением задачи на макроуровень всего деформируемого тела и микроуровень включений. Суть предложенного в [3] теоретического метода сводится к корректной постановке краевых задач на каждом пространственном уровне и согласованию решений. Такой подход позволил получить решение не только для задач статического нагружения, но также оказался ограниченно применим для некоторых проблем с динамическим нагружением. В дальнейшем развитые методы [2, 3] были использованы и расширены другими авторами.

В работе [44] предложен простой аналитический метод оценки эффективных характеристик, основанный на методе самосогласования (методе эффективной среды). В целом этот метод является развитием методов осреднения, рассмотренных изначально в классической монографии Р. Кристинсена [45] по механике композитов. Анализ проведен для четырехфазной модели “ядро-оболочка-связующее-эффективная среда”, где сферические включения помещены в связующую среду (матричный материал) и каждое включение структурно состоит из ядра и оболочки. Хотя с использованием предложенного в [44] подхода получены выражения для различных эффективных характеристик, методологически способ решения был одинаковым и состоял из нескольких этапов.

1. В сферической системе координат (r, θ, φ) , где геометрический центр включения совпадает с началом координат, полагается однородное на бесконечности $r \rightarrow \infty$ механическое или термическое нагружение материала.
2. Записывается условие равновесия (для механического нагружения) или стационарное уравнение теплопроводности (для теплового нагружения).
3. С учетом симметрий краевой задачи решение ищется как степенная функция от r в каждой подобласти отдельно, при этом вид коэф-

коэффициентов в разложении определяется из условий сшивки решений на межфазных границах.

4. Решая краевую задачу для многофазной области, где решение самосогласовано между фазами, получаем явный вид коэффициентов разложения.
5. В случае $N > 2$ итоговое решение имеет вид функции, которая в свою очередь зависит от суперпозиции эффективных характеристик двухфазных композитов, содержащих только фазу включения.

В результате были выведены выражения [44] для

- объемного модуля K упругости

$$\frac{1}{3K + 4G} = \sum_{i=1}^N \frac{\mu_n}{\mu} \frac{1}{3K_{*n} + 4G},$$

где μ_n — объемное содержание включений n -го типа, $\mu = \sum_{n=1}^N \mu_n$, K_{*n} — объемный модуль композита, содержащего составные включения только одного n -го типа;

- модуля сдвига G

$$\langle \varepsilon_{xx} \rangle = -T/2G,$$

где $\langle \varepsilon_{xx} \rangle = \langle \partial u_x / \partial x \rangle$ — деформации, усредненные по разным типам включений, и T определяет однородное поле напряжений $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = -T$, $\sigma_{zz} = 2T$,

- коэффициента линейного термического расширения α

$$\frac{K\alpha}{3K + 4G} = \sum_{n=1}^N \frac{\mu_n}{\mu} \frac{K_{*n}\alpha_{*n}}{3K_{*n} + 4G},$$

α_{*n} — коэффициент линейного расширения композита, содержащего составные включения одного n -го типа,

– удельной теплоемкости c_σ

$$\rho c_\sigma = \sum_{n=1}^N \frac{\mu_n}{\mu} \rho_{*n} c_{\sigma}^{*n} + 36T_0 \left(\frac{K\alpha^2}{3K + 4G} - \sum_{n=1}^N \frac{\mu_n}{\mu} \frac{K_{*n}(\alpha_{*n})^2}{3K_{*n} + 4G} \right),$$

где T_0 соответствует температуре, при которой рассчитывается теплоемкость,

– коэффициента теплопроводности λ

$$\frac{1}{3\lambda} = \sum_{n=1}^N \frac{\mu_n}{\mu} \frac{1}{2\lambda + \lambda_{*n}},$$

λ_{*n} — коэффициент теплопроводности композита, содержащего составные включения n -го типа.

Как следует из приведенных уравнений, эффективные механические и теплофизические характеристики являются функциями этих же характеристик, рассчитанных для набора двухфазных композитов, содержащих n -ую фазу, и связанных законом обратных величин.

Осреднение для материалов со случайной структурой. Анализ композитов со статистическими разбросами размеров, формы, ориентации (только в случае включений, для которых возможно определить понятие ориентации) и упругих свойств фаз включений производится с использованием обобщенного метода самосогласования (ОМС), предложенного в [11]. Метод ОМС основан на том же подходе, который используется в базовом методе самосогласования, когда осуществляется переход от сложноструктурной многофазной среды к ячейке с одиночным включением. В результате ОМС позволяет свести задачу вычисления эффективных упругих характеристик и моментов деформационных полей в элементах структуры композита от стохастической краевой задачи для неоднородной среды к решению задачи на ячейке (cell problem — *англ.*). Постановка задачи на ячейке включает решение проблемы об одиночном включении, которое механически взаимодействует с однородной средой

с искомыми эффективными упругими свойствами. При этом случайное взаимное расположение включений и вариативность их ориентаций учитываются в решении опосредовано через неоднородные упругие свойства переходного слоя, вводимого для установления взаимодействия включения и однородной среды. Рассмотрим кратко основные моменты этого подхода.

В ОМС для представительного объема композита вводятся (1) глобальные $\vec{r}$ и локальные $\vec{\xi}_{(k)}$ для k -го включения координаты, (2) коэффициенты подобия $\alpha_{(k)}$ для k -го включения, (3) глобальные индикаторные функции $\omega_f(\vec{r})$, которые принимают значение 1, если $\vec{r}$ указывает на включение f -ой фазы, (4) относительное объемное содержание ν_f составных волокон в композите. Тогда представительная реализация статистически однородного тензорного поля упругих свойств $\mathbf{C}(\vec{r})$ задается разложением в ряд [11]

$$\mathbf{C}(\vec{r}) = \sum_{f=1}^F \sum_{k=1}^N \omega_{(f)}^{(k)}(\vec{r}) \mathbf{C}^{(f,k)} + (1 - \omega(\vec{r})) \mathbf{C}^M \quad (1.27)$$

через индикаторные функции $\omega_{(f)}^{(k)}$ k -го включения f -й фазы и соответствующие им тензоры упругих свойств $\mathbf{C}^{(f,k)}$. Здесь индекс M соответствует матричной фазе и $\omega(\vec{r}) = \sum_{f=1}^F \omega_f(\vec{r})$. Таким образом, поля индикаторных функций учитывают случайное взаимное расположение, форму и размеры включений в объеме композита. Далее вводятся приведенные поля вероятностей различных порядков $g = 0, 1, 2, \dots$ для f -й фазы включений с целью учета особенностей взаимного расположения включений в композите:

$$\bar{\omega}_f^{(g)}(\vec{\xi}) \equiv \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \alpha_{(k)}^\beta \chi_{(k)}^g \omega_f(\vec{r}_{(k)} + \alpha_{(k)} \vec{\xi}), \quad (1.28)$$

где коэффициенты $\chi_{(f,k)}$ задают пропорциональное отклонение действительных значений тензора упругих свойств для соответствующей фазы и включения от номинальных значений. Далее производится классификация моделей случайных структур и выделяются следующие классы:

предельно полидисперсные структуры; монофракционные структуры с конечной вариацией размеров включений; гибридные структуры. Для каждого класса производится анализ полей вероятностей различных порядков и определение индикаторных функций, что требуется для последующего расчета упругих свойств по методу ОМС.

В конечном итоге процедура решения задачи сводится к нижеследующей последовательности этапов [11].

- *Постановка макроскопической задачи деформации (для представительного объема).* Записывается уравнение равновесия относительно поля смещений $\vec{u}(\vec{r})$ для представительной области V композита с полем упругих свойств $\mathbf{C}(\vec{r})$

$$\frac{\partial}{\partial r_j} \left(\mathbf{C}_{ijmn}(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r_n} u_m(\vec{r}) \right) = 0, \quad (1.29)$$

что соответствует однородному полю макродеформации ε^* на значительном удалении от начала координат, при этом $u_j = \varepsilon_{ij}^* r_j$.

- *Определение индикаторной функции.* Для выбранной структуры композита на основании вероятностного анализа распределения включений определяются индикаторные функции $\bar{\omega}_f^{(g)}(\vec{r})$, уравнение (1.28), для всех фаз.
- *Определение тензора концентраций осредненных деформаций.* Эффективный тензор упругих свойств $\mathbf{C}^*$ определяется либо по уравнению (1.27), либо его альтернативной формой

$$C_{ijmn}^* = \sum_{f=1}^{F+1} \nu_f C_{ijpq}^{(f)} N_{pqmn}^{(f)}, \quad (1.30)$$

где $\nu_f = \langle \omega_f \rangle$ и вводится тензор $\mathbf{N}^{(f)}$ концентраций осредненных деформаций для f -й фазы композита согласно

$$\langle \varepsilon_{ij} \rangle_f = N_{ijmn}^{(f)} \varepsilon_{mn}^* \quad (1.31)$$

и $\langle \dots \rangle_f$ — оператор осреднения по области f -й фазы композита.

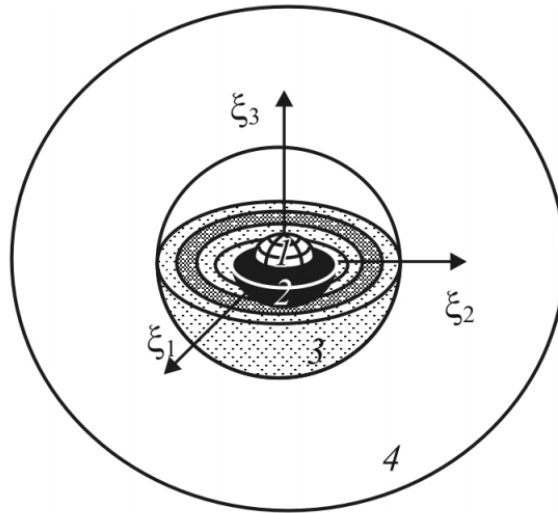
- *Расчет осредненных деформаций.* Для определения компонент тензора $\mathbf{N}^{(f)}$ необходимо определить компоненты $\langle \varepsilon_{ij} \rangle_f$ путем перехода к локальным координатам и осредненному в локальной системе координат полю деформаций $\bar{\varepsilon}(\vec{\xi})$.
- *Постановка локально-осредненной краевой задачи (для ячейки).* Краевая задача для локального объема включает уравнение равновесия (1.29), записанное уже для локальных полей. Для выполнения самосогласования краевые условия определяются на основании постановки макроскопической краевой задачи.
- *Введение межчастичного взаимодействия в локальную задачу.* В случае композита со случайно ориентированными включениями в локальное поле деформаций $\varepsilon(\vec{\xi})$ вводится поле случайных пульсации $\Delta^{(f)}$, которое описывает случайное взаимное расположение включений для точки $\vec{\xi}$. В результате в ОМС происходит переход от одночастичного взаимодействия “включение — однородная среда” к учету многочастичного взаимодействия. Таким образом, появляется возможность определения полей деформаций для локального объема, окруженного включениями различных типов и размеров.
- *Решение локальной задачи.* Производится решение локально-осредненной задачи, на основании осреднения полученного решения определяются компоненты тензора $\mathbf{N}^{(f)}$ согласно (1.31).
- *Определение эффективных упругих свойств.* Производится подстановка в (1.30) и окончательно определяются компоненты эффективного тензора упругих свойств $\mathbf{C}^*$.

Приведенный алгоритм замечателен тем, что принцип самосогласования фактически обозначает решение двухуровневой задачи — на уровне представительного объема и локальной ячейки с многочастичным потенциалом взаимодействия, — что позволяет логично и точно решить сложную стохастическую краевую задачу. Рисунок 1.7а показывает, что

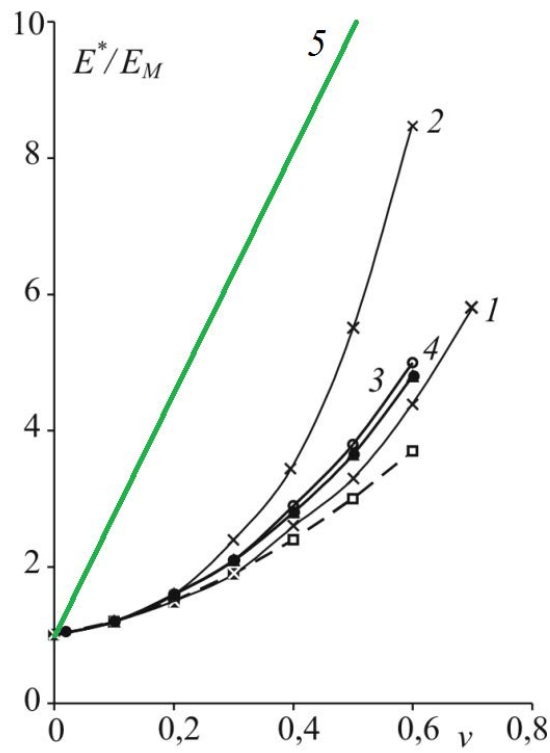
в численных моделях для введения в модель многочастичного взаимодействия используется приближение переходного дискретизированного слоя. В классическом методе согласования такой слой либо вырожден (имеет нулевую толщину), либо обладает свойствами матричного материала. В ОМС многослойный переходный слой играет важную роль и позволяет фактически проводить анализ для композитов с произвольной структурой. На рис. 1.7б приведено изменение модуля упругости по мере увеличения доли ν сферических включений. Отметим, что полученное решение обладает существенно нелинейным характером и значительно отклоняется от линейного решения, которое может быть получено по простому правилу смеси $E^* = (1 - \nu)E_{\text{матр.}} + \nu E_{\text{вкл.}}$.

Таким образом, двухуровневый подход, развитый в методе ОМС в механике композитов, показал хорошее соответствие эксперименту. При этом важно отметить, что сведение задачи механического поведения композитного материала только к анализу одной ячейки с эффективным полем напряжений не дает высокой точности. В ряде случаев требуется расчет выделенного объема, который содержит данные по вариативности свойств в результате стохастического распределения волокон. В работе [12] предложен двухуровневый подход к построению модели текстильных композитов, который позволяет значительно улучшить данные в сравнении с методом самосогласования. Результаты расчета показывают не только микромеханические свойства композита, но и позволяют прогнозировать большие пластические деформации, которые весьма распространены для данного класса материалов.

Процессы теплопереноса в неоднородных средах существенно зависят от структурно-фазовых характеристик не только в сплошных средах, но и в жидкостях. При кристаллизации в расплаве присутствуют растворенные частицы оксидных и карбидных фаз, которые влияют на процессы теплопереноса. Как показано [46], вязкость и теплопроводность наножидкостей нелинейно зависят от концентрации дисперсной фазы наночастиц, их размеров и материала. По этой причине при описании



(a)



(б)

Рис. 1.7. (а) Схема расчетной области локально-осредненной задачи, где 1 и 2 — фазы составного сферического включения, 3 — переходный дискретизированный слой, 4 — однородная среда. (б) Безразмерный эффективный модуль Юнга E^*/E_M композита со сферическими включениями как функция объемной доли ν_o включений. Модуль Юнга для включений $E_I = 20E_M$, где E_M соответствует модулю Юнга для матрицы. 1 и 2 — решения для модели полидисперсных, 3 и 4 — для монодисперсных структур, 5 — линейное решение, полученное по правилу смеси, • — экспериментальные данные [11].

теплофизических свойств таких систем неприменимо правило линейного рычага. Добавление частиц, как правило, приводит к увеличению вязкости, однако регистрируемая в эксперименте [46] вязкость существенно выше линейной модели Эйнштейна, которая учитывает только объемную концентрацию частиц. Для описания зависимости вязкости от размера частиц авторами [46] была предложена регрессионная модель, расширяющая формулу Бэтчалора для крупнодисперсных жидкостей. Для коэффициента теплопроводности наножидкостей показан выход на уровень насыщения при достижении концентрации ~ 10 об. %, при этом коэффициент увеличивается с ростом размера наночастиц. Экспериментально также установлено, что коэффициент теплопроводности наножидкости зависит от плотности частиц, но практически не зависит от их теплопроводности. Дополнительно исследован коэффициент теплоотдачи в ламинарном и турбулентном режимах течения. Коэффициент теплоотдачи растет с увеличением числа Рейнольдса в ламинарном режиме, при этом добавление $1 \div 2$ % наночастиц приводит к значительному, до 40 – 100%, увеличению коэффициента теплоотдачи. В турбулентном режиме существует зависимость как от концентрации частиц, так и от их размера. В этом режиме классифицированы два фактора, оказывающие противоположное влияние на коэффициент теплообмена. Это эффекты (а) увеличения теплопроводности смеси за счет наночастиц и (б) увеличения вязкости, что приводит к уменьшению локального числа Рейнольдса. Баланс этих факторов определяет эффективный коэффициент теплообмена и приводит или к его повышению, или к понижению в сравнении с референтной (без частиц) жидкостью.

1.4. Модели физико-химических процессов при кристаллизации металлических расплавов

При кристаллизации многокомпонентных металлических расплавов в литейном производстве протекает множество взаимосвязанных физико-

химических процессов, которые в конечном итоге определяют свойства отливок. В связи с этим вопрос построения адекватной теории и методов математического моделирования кристаллизации активно развивается, начиная с пионерских работ отечественных ученых Д.К. Чернова и позднее Г.П. Иванцова. Фактически исследования Д.К. Чернова послужили основой для феноменологического описания структурно-фазовых состояний посредством построения фазовых диаграмм. Работы Г.П. Иванцова стали первой попыткой перехода от чисто феноменологического описания кристаллического роста к попытке построения первой аналитической модели для параболического дендрита. Таким образом, можно справедливо считать, что активное развитие математических моделей кристаллизации с конца 80-х годов XX века обусловлено большим научным заделом, созданным в предыдущие сто лет российскими и зарубежными металловедом. Проанализируем основные классы моделей, развитые в области кристаллизации, с точки зрения их преимуществ и ограничений при решении практически значимых задач.

Континуальные модели. Под континуальными моделями определим такие модели, в которых многофазное состояние кристаллизующейся системы описывается с помощью осредненных теплофизических параметров — средних температуры, давления, энтропии, скорости течения. В результате при описании состояния в выделенном локальном объеме системы пренебрегают ее многофазным строением с морфологически сложной поверхностью раздела фаз и вводят интегральные характеристики — относительные доли твердой, жидкой, газообразной фаз. В результате основные уравнения (1.5)–(1.13) переноса для многофазной среды могут быть переписаны в приближении усредненных вложенных макроконтинуумов с использованием модельного уравнения баланса [36]

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle \bar{z} \rangle}{\partial t} + \frac{1}{W_0} \left[\int_{\Omega} \left[(\bar{z}_2 \vec{u}_2 - \bar{z}_1 \vec{u}_1) + (\bar{q}_2 - \bar{q}_1) + (\bar{z}_1 - \bar{z}_2) \vec{\varepsilon}' \right]_{\Omega} \vec{n} d\Omega \right] + \\ + \nabla \langle \bar{z} \vec{u} \rangle = -\nabla \langle \bar{q} \rangle + \langle Q \rangle, \end{aligned} \quad (1.32)$$

где усреднение проводится для двух — твердой и жидкой — фаз с объемами W_1 и W_2 соответственно, $W_0 = W_1 + W_2$. Здесь $\langle \bar{z} \rangle = (1/W_0) \int_{W_0} \bar{z} dW$ — среднеобъемное значение величины $\bar{z}$, для которой выводится уравнение баланса, $\vec{\varepsilon}'$ — скорость движения границы раздела фаз, Ω — суммарная поверхность раздела фаз в объеме W_0 , оцениваемая для различных режимов кристаллизации на основе экспериментальных данных; $\bar{z}_i \vec{u}_i$, $\bar{q}_i$, $\bar{z}_i$ ($i = 1, 2$) — значения конвективного потока, диффузионного потока и искомой функции непосредственно на поверхности раздела фаз Ω со стороны твердой и жидкой фазы; $\langle \bar{z} \vec{u} \rangle$, $\langle \bar{q} \rangle$ и $\langle Q \rangle$ — среднеобъемные значения конвективного потока, диффузионного потока и мощности источников функции $\bar{z}$. Уравнение (1.32) служит основой для записи осредненных уравнений неразрывности, теплопереноса, массопереноса и течения в зоне кристаллизации.

Для замыкания системы уравнений между собой применяется теория двухфазной зоны (ТДЗ, mushy zone theory — *англ.*), развитая В.Т. Борисовым [17, 47, 48], В.А. Журавлевым [35] и одновременно М. Флемингом [18], которая определяет уравнения взаимосвязи между концентрацией, температурой и долей твердой фазы внутри двухфазной зоны (mushy zone — *англ.*). Формирование двухфазной зоны (ДЗ) при кристаллизации позволяет достичь устойчивости, когда диффузионное переохлаждение на фронте кристаллизации эффективно снимается путем формирования развитой поверхности раздела фаз в двухфазном состоянии. Позднее на основе ТДЗ В.М. Голодом [49], Ф.В. Недопекиным [36], Н.А. Авдониным, В.В. Белоусовым, А.Н. Черепановым, В.М. Колодкиным, В.В. Васькиным и С.Р. Галлямовым были развиты математические модели кристаллизации. Современные САПР системы автоматизации литейных технологий LVM Flow, Magma Soft, ProCast и другие основаны на ТДЗ, поскольку она позволяет решать задачи по кристаллизации отливок больших объемов. Отличительной особенностью метода является точный учет энтальпии образования фаз при жидкофазных и твердофазных фазовых переходах, что позволяет достичь высокой

предсказательной точности. По эффективности практического применения метод ДЗ может быть сопоставлен с RANS моделями в механике турбулентных течений. На уровне численной реализации в этом случае используется метод клеточных автоматов, где состояние каждой ячейки описывается на основе решения балансовых уравнений для всех зависимых переменных при постановке соответствующей краевой задачи.

При анализе проблем, где происходит кристаллизация без образования ДЗ, например, при выращивании полупроводниковых кристаллов направленной кристаллизацией, получили широкое развитие модели с резкой границей раздела фаз. В этом случае граница раздела остается плоской благодаря росту в положительном температурном градиенте. Таким образом, математическая модель кристаллизации может быть записана в виде сопряженных уравнений Навье-Стокса, как правило, в приближении Буссинеска, уравнений массообмена и теплообмена. При этом для стабилизации фронта в производстве применяются вращающиеся или бегущие магнитные поля, которые вводятся в модель через силу Лоренца. Исследования в данной области развиты в работах Т.П. Любимовой и ее учеников [50].

В работах О.С. Мажоровой [51] решена задача о движении фронта кристаллизации в процессах эпитаксиального роста из трехкомпонентного расплава, что потребовало совместного решения уравнений переноса для различных компонентов. Были записаны законы сохранения массы и внутренней энергии — уравнения диффузии и теплопроводности соответственно для жидкой и твердой фаз. На фронте кристаллизации учитывались балансные соотношения для потоков тепла и массы, кроме того, накладывалось уравнение связи, соответствующее равновесной фазовой диаграмме. В результате уравнения на фазовой границе сводились к системе уравнений для пяти переменных, которая имела существенно нелинейный характер. При построении континуальной и дискретных моделей в [51] было получено несколько интересных результатов. Во-первых, было показано, что построение устойчивой численной схемы

возможно только при совместном решении полной системы уравнений на каждом временном шаге. Схемы с последовательным решением приводят к неустойчивым алгоритмам для такого класса задач. Во-вторых, задача с подвижной фазовой границей путем преобразований переменных сведена к задаче с фиксированными границами, что значительно ускоряет процедуру расчета и позволяет использовать адаптивную стационарную сетку. Как известно, динамическая адаптивная сетка вносит существенную погрешность в решение при ее перестроении. В настоящей работе использован подобный метод при нахождении нестационарного течения вокруг капли расплава после инжектирования в камеру, когда толщина пограничного гидродинамического слоя нелинейно увеличивается во времени в зависимости от времени и числа Рейнольдса. В-третьих, при решении системы уравнений на фазовой границе итерационным методом в [51] была применена двухступенчатая схема: вначале итерационный процесс выполнялся по пяти независимым переменным, далее пересчитывались значения двух нелинейных параметров, и процедура вычисления повторялась. Это позволило провести линеаризацию системы по двум параметрам, в результате вместо решения системы семи уравнений решалась система для пяти уравнений, и сходимость достигалась за 3—8 итераций. Таким образом, предложенный метод комбинирует подходы итерационного решения Ньютона и метода релаксации, что позволяет добиться лучшего контроля за сходимостью решения при меньшем числе нелинейных уравнений.

Исследование алгоритмов решения уравнений Навье-Стокса в задачах кристаллизации проведено в [52]. Отмечено, что уравнения Навье-Стокса для несжимаемой жидкости не содержат уравнения для давления, которое входит в уравнение баланса импульса в виде градиентного слагаемого, и это приводит к сложностям при построении дискретной вычислительной модели. Для решения этой проблемы часто используется переход от уравнения баланса импульса и уравнения несжимаемости к уравнению баланса импульса и уравнению Пуассона для дав-

ления. Это позволяет проводить расчет уравнений последовательно, при этом условие несжимаемости обеспечивается с помощью процедуры типа предиктор-корректор [52]. Для этого важно добиться консервативности дискретной модели, иначе вычислительная модель не будет обеспечивать сохранение кинетической энергии. Для выполнения поставленных требований предложена и обоснована разностная схема, где сеточные операторы определяются на разнесенных сетках. Для каждого слагаемого в уравнении баланса определяется соответствующий объем интегрирования, что обеспечивает наследование разностными операторами свойств исходных дифференциальных операторов. Дополнительно классифицированы методы решения уравнения для давления в схеме типа предиктор-корректор, которые обеспечивают задание давления в точке при требуемой точности выполнения условия несжимаемости.

Проблема кристаллизации капель воды при выпадении замерзающих осадков исследована в [53]. Решалась задача Стефана на движущейся границе ледовой корки, формирующейся при попадании капли в холодный приповерхностный слой. Учитывались кривизна границы раздела фаз и изменение условий теплообмена с высотой. Математическая модель записывалась в сферической системе координат и включала уравнение теплопереноса для двухсредной “вода — лед” системы. Решение полного нестационарного уравнения теплопереноса для краевой задачи, соответствующей фактическим физическим условиям, позволило уточнить значения для времени и скоростей кристаллизации капель. В настоящей диссертации исследуется кристаллизация металлических капель расплава при распылении, для которой используется близкая к [53] теплофизическая постановка задачи.

Модели структурообразования. Формирование кристаллической субструктуры (дендритов, ячеек, сферолитов) описывается двумя типами моделей. К *первому типу* относятся аналитические модели направленного дендритного роста, которые, в силу их сложности, решаются чис-

ленными методами. Эти модели основаны на записи баланса переохлаждений на вершине растущего дендрита с учетом его формы (радиуса вершины) и скорости роста. Модель роста параболического дендрита, предложенная Г.П. Иванцовым [54], вводила в рассмотрение основные эффекты, связанные с тепловым и концентрационным переохлаждениями, а также с эффектом Гиббса-Томсона для квазиравновесного роста. Позднее модель Иванцова была расширена в модели LKT-ВСТ [55, 56], где учитывались кинетические фазовые диаграммы при быстрой кристаллизации. Недавно модель LKT-ВСТ была существенно уточнена для кристаллизации при скоростях, сопоставимых со скоростью диффузии V_D , которая для большинства систем составляет порядка $10^0 - 10^1$ м/с. В литературе была предложена модель [57] локально-неравновесного затвердевания, учитывающая конечную скорость диффузионного переноса примеси. В результате удалось получить хорошее соответствие с экспериментальными данными, которые при скоростях $V \sim V_D$ показывают переход к химически безразделительному затвердеванию [16]. Последние модели дендритного роста также включают учет эффекта скорости конвекции в зоне кристаллического роста [58, 59].

Ко второму типу относятся модели численного решения эволюционных уравнений баланса, которые позволяют производить расчет различных условий конвекции, скоростей охлаждения при произвольном химическом составе. В работах [60, 61] А.Р. Уманцевым и В.В. Виноградовым был использован метод клеточных автоматов для моделирования дендритного структурообразования. Позднее этот метод был использован П.К. Галенко и М.Д. Кривилевым для анализа микроструктуры в слитках методом вычислительного эксперимента [20] и моделирования перехода к безразделительному затвердеванию [62, 63]. Начиная с 2000 года активно развивается модель фазового поля (МФП, phase field method — *англ.*) [15]. Метод ФП получил широкое развитие благодаря использованию формализма записи эволюционного уравнения для термодинамического состояния системы. При кристаллизации изменение со-

стояния системы сопровождается уменьшением свободной энергии. Следовательно, определив свободную энергию через параметр порядка — переменную фазового поля, становится возможным моделировать широкий класс явлений, связанных со структурообразованием. Поскольку метод ФП широко используется в настоящей работе и применим не только в физике кристаллизации, но и в механике деформации материалов, отметим основные уравнения этого подхода.

Возможны альтернативные формулировки МФП в зависимости от внешних условий, в которых находится система. Обычно используются два формализма, записанные в терминах либо свободной энергии Гельмгольца $F = U - TS$ (при сохраняющихся в процессе (V, T)), либо свободной энергии Гиббса $G = U - TS + pV$ (при сохраняющихся (p, T)). Если процесс происходит при постоянных (p, V, T) , то может быть показано соответствие между собой этих подходов. В этом случае конечные уравнения модели получаются одинаковыми для свободной энергии Гельмгольца и свободной энергии Гиббса, так как константа pV исчезает при взятии вариационной производной. При этом понимается, что это приближение не всегда справедливо для реальных систем, где объем, давление и молярный объем меняются благодаря возникновению напряжений и деформаций кристаллической решетки в результате фазовых превращений при постоянной температуре. Как следствие, возникает неточность при включении энергии деформации в функционал свободной энергии, которая может быть уточнена специальными приемами. В результате, строго говоря, записываемая свободная энергия системы не относится ни к гиббсовскому типу, ни к виду Гельмгольца. Тем не менее, использованное допущение вносит некритическую погрешность в результаты анализа по МФП физических систем с фазовыми переходами.

Определим функционал свободной энергии F для случая в виде

$$F(\varphi, \nabla\varphi, p, T, c_i) = \int \left[\left(\frac{1}{2}\kappa|\nabla\varphi|^2 + Wg(\varphi) \right) + f^{\text{хим.}}(\varphi, p, T, c_i) + \right. \quad (1.33) \\ \left. + f^{\text{упр.}}(\varphi, e_{ij}^{\text{упр.}}) + f^{\text{пласт.}}(\varphi, e_{ij}^{\text{пласт.}}) \right] dV = \int f_{\text{полн.}} dV, \quad (1.34)$$

где φ — переменная фазового поля, p — давление, T — температура, c_i — концентрация i -го компонента. Первое и второе слагаемые в подынтегральном выражении отвечают за избыточную энергию поверхности раздела фаз. Вклад градиентного слагаемого $\frac{1}{2}\kappa|\nabla\varphi|^2$ в свободную энергию возрастает, если ширина границы уменьшается, т.е. возрастает градиент концентрации на границе. Слагаемое $Wg(\varphi)$ имеет вид двухямного потенциала Гинзбурга-Ландау $g(\varphi) = \varphi^2(1 - \varphi)^2$ с высотой барьера W в потенциале и препятствует размыванию границы. Третье слагаемое определяет вклад, связанный с химической природой, и находится из справочных значений молярных энергии для каждой фазы при заданных давлении, температуре и химическом составе. Четвертое и пятое слагаемые задают вклад энергии упругой и пластической деформации, где $e_{ij}^{\text{упр.}}$ и $e_{ij}^{\text{пласт.}}$ — локальные микродеформации, вызванные напряжениями в кристаллической решетке.

Физический смысл φ определяется задачей и может быть интерпретирован либо как доля твердой фазы в локальном объеме для задачи жидко-твердого фазового перехода $\text{Ж} \rightarrow \text{Т}$, либо как концентрация компонентов при переходах $\text{Ж} \rightarrow \text{Ж}_1 + \text{Ж}_2$ или $\text{Т} \rightarrow \text{Т}_1 + \text{Т}_2$ при фазовом расслоении. В широком смысле параметр φ описывает изменение симметрии в локальном объеме среды, что соответствует фазовому переходу любой природы.

Далее записываются уравнения движения для термодинамических параметров системы в зависимости от типа переменной. Для сохраняющегося параметра порядка, например, для концентрации, используется

уравнение Кана-Хиллиарда:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J} = \nabla \cdot \left[M_i \nabla \frac{\delta F}{\delta c_i} \right] = \nabla \cdot [M_i \nabla \mu_i],$$

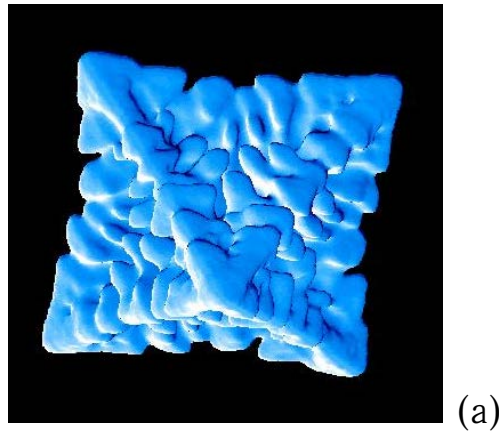
где M_i — подвижность (mobility — *англ.*) и μ_i — химпотенциал для i -го компонента. Для несохраняющегося параметра порядка используется зависящее от времени уравнение Гинзбурга-Ландау:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -L \frac{\delta F}{\delta \varphi},$$

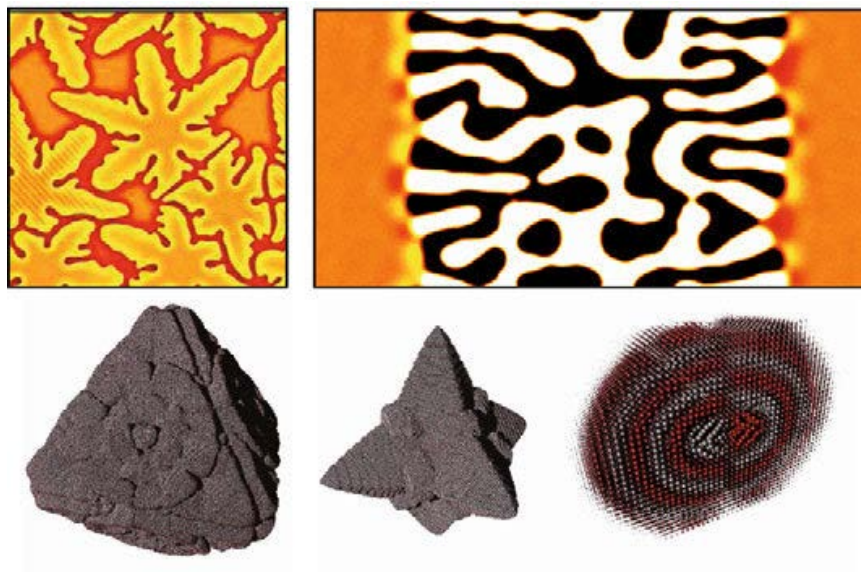
где L — кинетический коэффициент. Для замыкания системы уравнений ставится краевая задача, которая обычно сводится либо к периодическим граничным условиям, либо к условиям Дирихле (I рода) или Неймана (II рода) для переменной фазового поля. Начальные условия определяются либо однородными, либо в виде случайного распределения малой амплитуды, либо на основе экспериментальных данных.

Таким образом, метод ФП изначально согласуется с принципами термодинамики необратимых процессов для определения направления эволюции системы и при этом включает функционал для свободной энергии системы с межфазными границами, вид которого определяется в соответствии с наблюдаемыми экспериментальными условиями и термодинамическими базами данных. Рисунок 1.8 демонстрирует некоторые результаты вычислительного эксперимента по выращиванию дендритных и эвтектических структур. Наиболее развитым на сегодняшний момент считается программный пакет MICRESS (технический университет Аахена), который позволяет проводить моделирование структурообразования для разных типов сплавов [22].

Атомистические модели. В качестве основных атомистических моделей в задачах кристаллизации используются методы МД и кристаллического фазового поля (КФП, phase field crystal — *англ.*). Методами молекулярной динамики исследованы проблемы высокоскоростных фазовых переходов, определены такие важные параметры как подвижность



(a)



(б)

Рис. 1.8. (а) Трехмерный дендрит никеля, полученный при кристаллизации из переохлажденного расплава на вычислительной сетке 360^3 узлов [64]. (б) Результаты моделирования дендритных и эвтектических структур PF и PFC методами [65].

атомов [66], поверхностная энергия, эффекты сегрегации примесей на поверхности движущегося фронта кристаллизации [67], описаны процессы кристаллизации белков. Среди зарубежных групп следует отметить работы коллективов под руководством М. Аста (M. Asta), Д. Хойта (J. Hoyt), Ф. Спаепена (F. Spaepen). Методами МД активно занимаются в группах В.И. Мажукина (Москва), Б.Р. Гельчинского (Екатеринбург), Б.Н. Галимзянова, А.В. Мокшина (Казань) и в других российских группах.

Кристаллическое фазовое поле представляет собой другой альтернативный подход, где от дискретного подхода, связанного с моделированием движения отдельных частиц, осуществлен переход к континуальному подходу. В результате поле локальной атомной симметрии системы описывается с помощью модельного функционала свободной энергии. Развившись из МФП, метод КФП стал перспективным подходом к моделированию процессов, протекающих в интервале между атомными и микроскопическими масштабами. Это позволило описать процессы образования дефектов, формирования межзеренных границ, отбора кристаллических фаз при кристаллизации. Метод КФП в отечественных исследованиях мало представлен. Отметим работы группы П.К. Галенко по расчету структурных диаграмм железа в зависимости от переохлаждения [68]. Среди зарубежных исследователей значительные результаты получены в последних исследованиях К. Элдера (K. Elder), Н. Проватаса (N. Provatas) и М. Асле Заема (Mohsen Asle Zaeem).

Термодинамические и реакционные модели. Модели, основанные на формализме ТДЗ и МФП, используют фазовые диаграммы, термодинамические функции и параметры сплавов, которые должны быть введены в качестве исходных данных расчета. Точность определения указанных данных напрямую влияет на результаты моделирования кинетики фазовых превращений, механизмов фазового отбора и структурно-фазовых характеристик изделий при термической обработке металлов

и металлургических процессов. В качестве источников данных применяются метод расчета фазовых диаграмм CALPHAD (CALculation of PHase Diagrams) и реализованные на его основе программные пакеты ThermoCalc и Pandat, пакеты для термохимического анализа FactSage и база термодинамических параметров DICTRA.

Метод CALPHAD изначально был разработан для расчета фазовых диаграмм многокомпонентных сплавов на основе оптимизации свободной энергии Гиббса G [69]. Выражения для G выводятся при таком подборе параметров термодинамической модели, когда модель начинает соответствовать полученным экспериментально данным для линий фазового равновесия. В результате на выходе процедуры оптимизации свободной энергии получаются уравнения для $G(p, T, c_i)$, которые включают зависимость от макроскопических параметров. При этом в зависимости от типа сплава применяются различные модели твердых растворов типа замещения или внедрения в приближении идеальных, регулярных или субрегулярных смесей. Для анализа многокомпонентных систем используется разложение по бинарным подсистемам.

Пакет DICTRA (DIffusion Controlled TRAnsformations) использует аналогичный принцип оптимизации G для расчета температур- и концентрационно зависимых атомных мобильностей (или коэффициентов диффузии) [69]. Для верификации результатов используются данные по диффузии и самодиффузии, хотя следует отметить, что число систем, поддерживаемых DICTRA, весьма ограничено. Если CALPHAD и DICTRA больше используют подходы физического материаловедения, то программное обеспечение FactSage [70] применяет методы химической термодинамики. FactSage использует более точные выражения для энтальпий образования фаз, лучше определена зависимость термодинамических функций в широком диапазоне температур, сделан переход от концентраций к активности элементов, что правильнее с точки зрения физической химии. Как следствие, FactSage применим для анализа фазовых равновесий в химических реакциях как функции температуры, дав-

ления и химического состава реагирующей смеси. Среди российских исследователей работы по термодинамике сплавов и термохимии проводят группы Ю.Я. Андреева, А.В. Дуба (Москва), Н.П. Лякишева (Москва), А.Г. Тюрина (Челябинск).

Задачи термодинамики тесно связаны с сопряженными задачами термоупругости и химических реакций. В [71] исследуется сопряженная задача твердофазных превращений и формирования НДС при твердофазном горении, возникающем, например, в технологии СВС. Показано, что возможно существование области устойчивого горения, если скорость реакции уменьшается под действием возникающих термонапряжений.

При анализе кинетики химических реакций вычисление термодинамических потенциалов может быть дополнено подходами статистической физики. Например, для реакций, протекающих по механизму Ленгмюра—Хиншельвуда, в [72] развита модель решеточного газа, где на основе записи гамильтониана системы исследованы процессы адсорбции, десорбции и химических реакций на поверхности катализатора. Применение модели позволило проанализировать стационарные состояния адсорбционного слоя, что требуется для точного расчета кинетики поверхностной реакции.

1.5. Многоуровневое моделирование кристаллизации

Явление кристаллизации многокомпонентных сплавов относится к многоуровневому процессу, поскольку появление двухфазной зоны приводит к развитию микро/макроконвекции и микро/макросегрегации. Различные условия конвекции, скорости охлаждения и температурные градиенты способствуют развитию разнообразных типов микроструктуры. При характерном размере литых изделий 10^0 м характерный размер элементов микроструктуры составляет, как правило, 10^{-5} м. Следовательно, различие пространственных масштабов в 5 порядков делает обоснованным развитие многоуровневых подходов к описанию кристал-

лизации, которые можно отнести к трем основным типам [23]. (1) Решение задач на микроуровне с большой точностью, используя адаптивные сетки [73], поскольку в основном процессы переноса в ДЗ определяют свойства изделия. Этот подход требует значительных вычислительных затрат, поскольку шаг сетки должен быть менее радиуса $R_{\text{верш.}} \sim 10^{-6}$ м вершины дендрита. (2) При решении задачи на макроуровне используются упрощенные модели микроуровня, которые позволяют учесть скорость кристаллического роста и изменение доли твердой фазы в локальных объемах расплава. К ним относится, например, метод эффективного пакета дендрита (dendrite envelope approach — *англ.*) [74]. Часто используются правило рычага и приближение Шейле. (3) Реализация многоуровневого моделирования, когда производится связывание микромоделей и макромоделей [75].

Многоуровневый подход является наиболее перспективным с точки зрения практических задач, где требуется получить решение для больших отливок за приемлемое время. Ограничимся обзором двух подходов, предложенных в литературе [21, 23], поскольку они отражают основные концепции в этой области.

В [21] и публикациях, указанных в ссылках к статье, развит 3D CAFE (Cellular Automaton - Finite Element — *англ.*) метод или гибридный метод клеточных автоматов и конечных элементов. На макроуровне решается уравнение теплопроводности, записанное через энтальпию, как рассматривалось выше в модели двухфазной зоны. Численная модель реализуется методом конечных элементов, не требует перестройки вычислительной сетки и по этой причине экономична. Расчет выполняется с шагом Δt , выбираемым менее характеристического времени теплопереноса. На микроуровне осуществляется процедура отслеживания и продвижения границы фронта кристаллизации путем решения кинетического уравнения. Этот алгоритм реализован методом клеточных автоматов как наиболее простым способом численной реализации. При этом положе-

ние границы и доля твердой фазы в ячейках определяется индикаторной функцией.

Важно отметить, что в [21] детально обсужден вопрос динамического связывания уровней и предложено два алгоритма. При слабом связывании интегрирование по времени на микроуровне производится итерационно с временным шагом δt , и данные микроуровня учитываются на макроуровне только после достижения следующей итерации на макроуровне. При полном связывании результаты расчета на микроуровне после каждого микрошага учитываются в значениях температуры. Далее, поскольку решение уравнения на микроуровне зависит от линеаризованной по времени температуры на макроуровне, такое связывание приводит к более точным результатам вычислительного эксперимента. С использованием 3D CA-FE подхода были решены важные задачи по кристаллизации авиационных лопаток из жаропрочных Al сплавов.

В работе [23] развивается многоуровневый метод отбора, основанный на методе НММ [39, 40], рассмотренном ранее в разделе 1.3.1. В системах с большим разбросом в масштабах протекающих процессов целесообразно проводить анализ и классификацию решений на микроуровне, чтобы в последующем использовать эту информацию для интегрирования на макроуровне. В результате скорость вычислений значительно увеличивается, особенно в подобластях, где решение меняется медленно на определенных временных интервалах всего процесса. Таким образом, происходит удовлетворительная потеря точности при значительном ускорении скорости вычислений. Рисунок 1.9 показывает общую схему метода отбора. При полном решении уравнений микроуровня (пустые стрелки со штриховой обводкой) осуществляется осреднение данных микроуровня (доли твердой фазы f^x и морфологии кристаллитов Λ^x в микрообъеме) для решения задачи макроуровня (поля температур T , доли твердой фазы f). При решении методом отбора вначале получается решение во множестве локальных объемов всей области, далее решения классифицируются и используются для интегрирования уравнений мак-

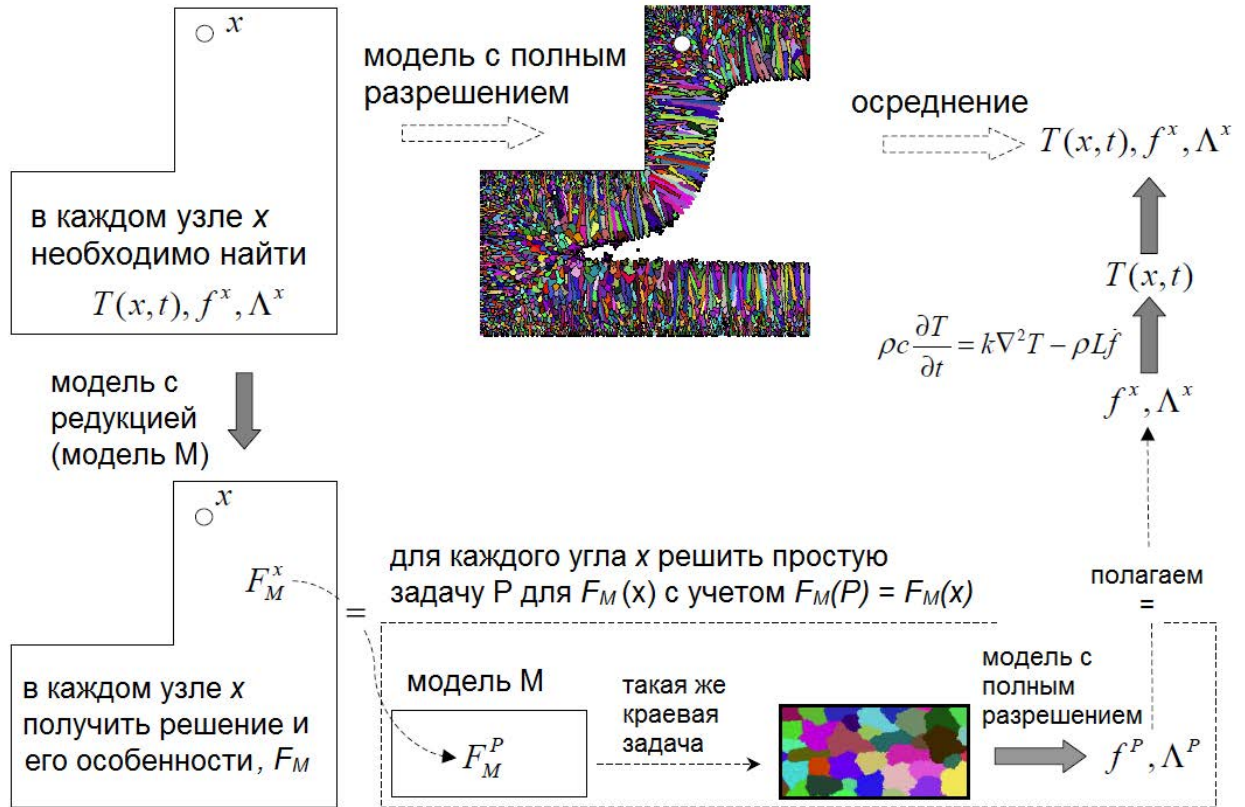
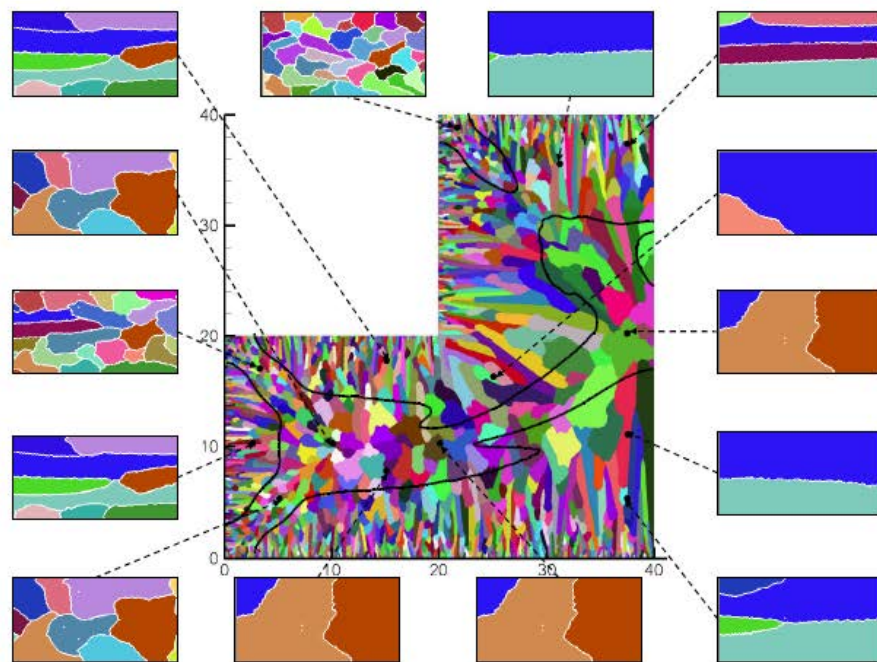


Рис. 1.9. Схема многоуровневого подхода к моделированию кристаллизации, развитая в [23]. Стрелки со штриховой обводкой показывают полный метод решения, стрелки с заполнением соответствуют методу отбора.

роуровня. Периодически в зависимости от результатов проверки полноты и актуальности множества микрорешений производится его обновление. В итоге решения для микроструктуры, полученные обоими методами (полного решения и методом отбора), хотя и имеют видимые отличия, но при этом граница перехода между зонами макроструктуры слитка хорошо коррелирует в обоих методах, рис. 1.10. В настоящей диссертационной работе развивается и обосновывается подход двухуровневого моделирования, методологически близкий к методу НММ [39, 40] и методу отбора [23].

(а) решение уравнений микроуровня во всей области



(б) решение уравнений микроуровня с отбором

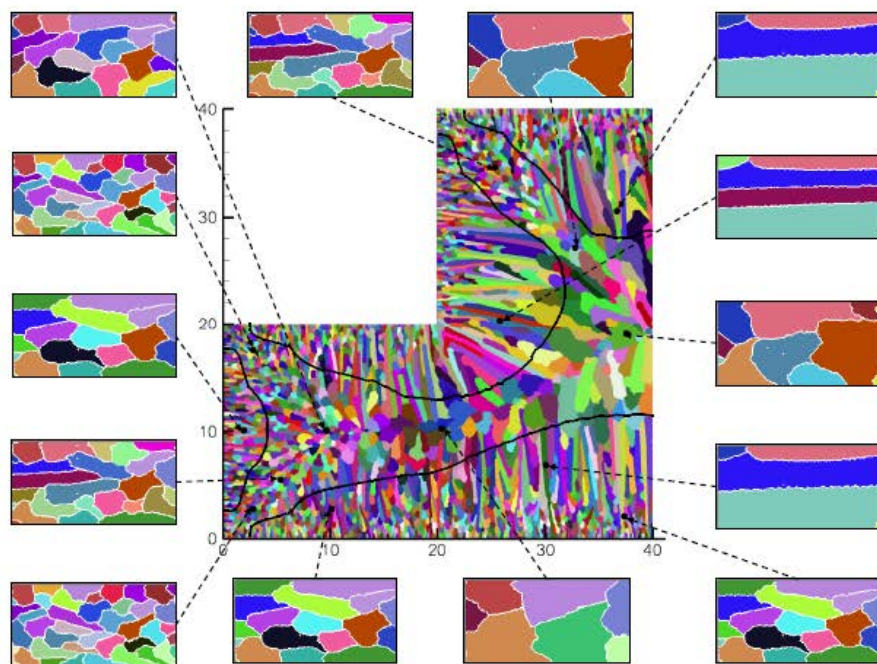


Рис. 1.10. Результаты моделирования макроструктуры слитка [23] методом отбора. Сравнение результатов расчета с (а) решением уравнений микроуровня во всей области (во всех мезоточках) или (б) по алгоритму отбора (в отобранных мезоточках). Черная сплошная линия показывает границу перехода от столбчатого к равноосному дендритному росту.

1.6. Выводы к главе 1

1. Уравнения механики сплошных сред выводятся из феноменологических балансовых соотношений для макроскопических величин, их потоков и источниковых слагаемых в соответствии с экспериментально установленными зависимостями между потоками и обобщенными термодинамическими силами. Большинство макроскопических уравнений могут быть выведены путем осреднения уравнений движения на микроскопическом уровне.
2. Для некоторых задач, связанных с нелинейными или стохастическими процессами, такое осреднение невыполнимо *аналитическими* методами, поскольку невозможно определить функцию распределения состояний системы на микроуровне. В этом случае в литературе предложено *численное* осреднение решений на микроуровне, которое позволяет доопределить коэффициенты макроскопического уравнения движения.
3. В области механики многофазных сред исчерпывающе развиты методы осреднения решений и характеристик гетерогенных материалов. Разработанные методы осреднения верифицированы и могут быть адаптированы к решению многомасштабных задач по кристаллизации металлических расплавов, методики решения которых недостаточно развиты в отечественных исследованиях.
4. Создан большой задел по описанию деформации неоднородных сред в механике композитных материалов. С этой целью производится построение двухуровневой модели материала, в которой микромеханические эффекты, связанные с особенностями внутренней структуры материала, вводятся в модель посредством внутренних переменных. Согласование решений на макро- и микроскопическом уровнях осуществляется через: (1) постановку краевой задачи на микроуровне на основе макроскопического решения;

- (2) осреднение решений на микроуровне в объеме представительного объема макроуровня для определения эффективных значений механических характеристик или параметров напряженного деформированного состояния. Развитая методология показала высокую эффективность и точность при анализе сложных видов нагружения поликристаллических материалов.
5. В теории кристаллизации металлических расплавов предложен ряд многоуровневых моделей для описания процессов переноса и структурообразования, где производится решение согласованных многомасштабных задач. К настоящему моменту наиболее проработаны пространственные уровни “элементарные частицы” — “атомы” — “микроструктура”, где связывание решений на разных уровнях производится методами первопринципного (*ab initio*), молекулярно-динамического (molecular dynamics) и фазополевого (phase-field) моделирования.
6. На уровнях “микроструктура” — “мезоструктура” — “макροструктура” согласование решений в предложенных в литературе моделях производится для наиболее простых характеристик — доли твердой фазы, химического состава, температуры. Актуальной является разработка двухуровневого макро-мезоскопического подхода к описанию кристаллизации, в котором проводится расчет процессов переноса и фазовых переходов на микроуровне (или мезоуровне) для определения коэффициентов макроскопических кинетических моделей. Новый подход позволит значительно улучшить предсказательную точность численного моделирования по кристаллизации многокомпонентных расплавов.

На основании полученных при обзоре литературы выводов были сформулированы цель и задачи настоящего диссертационного исследования, которые приведены во введении.

2. Метод двухуровневого математического моделирования процессов переноса и структурообразования

Вторая глава посвящена формулировке развиваемого в работе подхода двухуровневого моделирования процессов переноса и структурообразования (далее в тексте — ДМПС) при кристаллизации из жидкого состояния. Подробно рассмотрены стадии концептуальной, математической и алгоритмической постановок задач. На стадии концептуальной постановки проведена систематизация чисел подобия с позиций их применимости для характеристики многофазных систем. Сделан анализ пространственно-временных масштабов процессов переноса для систем, в которых протекает кристаллизация. Подробно рассмотрена характеристическая длина, связанная с фазовой границей, поскольку ее корректная оценка необходима как для определения представительного объема на мезомасштабе, так и для использования в модели фазового поля. На основе выполненных оценок предложен критерий для области применимости двухуровневого подхода. Математическая постановка макромезоскопической модели включает формулировку нестационарных краевых задач на каждом масштабном уровне. В главе приводится процедура согласования решений на различных уровнях. Отдельно анализируется вопрос определения количества и отбора локальных мезообъемов для представительного описания системы на мезоуровне. На стадии алгоритмической постановки определена общая структура двухуровневой модели. Предложены эффективные численные методы и алгоритмы решения таких моделей в области кристаллизации. В заключение главы описана программная реализация трех предметно-ориентированных программных комплексов, использованных для решения практически значимых задач.

Основные результаты, представленные в главе 2, опубликованы в [76–83].

Список обозначений в главе 2

- ДМПС — двухуровневое моделирование процессов переноса и структурообразования
- ППС — процессы переноса и структурообразования
- ВЭ — вычислительный эксперимент
- ЗУ — замыкающие уравнения
- МКР — метод конечных разностей
- МКЭ — метод конечных элементов

2.1. Концептуальная постановка задачи

2.1.1. Числа подобия для систем с фазовыми границами

Присутствие в физической системе фазовых границ значительно меняет механизмы процессов переноса тепла, компонентов и импульса, поскольку фазовая граница, как правило, служит источником/стоком для внутренней энергии, концентрации компонентов, энтропии. В качестве примера приведем выделение скрытой теплоты и сегрегацию химических компонентов при движении фронта кристаллизации. На границе двух жидких сред нормальная составляющая скорости течения обращается в нуль, в результате реализуется условие равенства тангенциальной компоненты скорости и касательного напряжения. На границе жидкой и твердой фаз обе компоненты скорости течения зануляются. Таким образом, в дополнение к числам подобия, традиционно рассматриваемым при моделировании процессов переноса в однофазных системах, необходим анализ безразмерных критериев подобия, связанных со свойствами

фазовой границы. Проведенный анализ чисел подобия используется на следующей стадии — математической постановки задачи — для определения значимых слагаемых в уравнениях баланса.

В литературе встречается более ста различных чисел подобия, упоминаемых также как безразмерные комплексы или критерии подобия. Такое значительное количество определяется большим числом различных физических эффектов, которые могут быть сопоставлены между собой. При теоретическом анализе конкретных задач, как правило, используется не более 5 — 10 чисел [31, 36, 84], что обусловлено слабым влиянием других чисел, отвечающих за малозначимые в данной задаче эффекты. Определим следующие группы чисел подобия, важные для процессов переноса и структурообразования в мезоскопических объемах.

Первая группа. Соотношение конвективного и диффузионного механизмов переноса.

- Число Рейнольдса $Re = UL/\nu$, где U , L — характеристические скорость течения и длина объекта (или области течения) соответственно, ν — кинематическая вязкость. Определяет преимущественно конвективный (при $Re \gg 1$) или диффузионный (при $Re \ll 1$) перенос импульса.
- Число Пекле тепловое $Pe_T = UL/a$, где a — температуропроводность. Определяет преимущественно конвективный (при $Pe_T \gg 1$) или диффузионный (при $Pe_T \ll 1$) перенос внутренней энергии.
- Число Пекле концентрационное $Pe_C = UL/D$, где D — коэффициент диффузии. Определяет преимущественно конвективный (при $Pe_C \gg 1$) или диффузионный (при $Pe_C \ll 1$) перенос компонентов.

Вторая группа. Соотношение ширины пограничных слоев.

- Число Прандтля $Pr = \nu/a$. Определяет, что ширина вязкого погранслоя много больше ($Pr \gg 1$) или много меньше ($Pr \ll 1$), чем ширина температурного погранслоя.
- Число Шмидта $Sc = \nu/D$. Определяет, что ширина вязкого погранслоя много больше ($Sc \gg 1$) или много меньше ($Sc \ll 1$), чем ширина концентрационного погранслоя.
- Число Льюиса $Lu = D/a$. Практически всегда $Lu \ll 1$ для сплошных сред, поэтому редко учитывается.

Третья группа. Соотношение капиллярных, инерционных и гравитационных эффектов.

- Число Бонда $Bo = L^2 \rho g / \sigma$, где ρ – плотность, σ — поверхностное натяжение. При $Bo \ll 1$ фазовая граница пассивна к развитию неустойчивости Рэлея-Тейлора в гравитационном поле.
- Число Вебера $We = L \rho U^2 / \sigma$. При $We \ll 1$ фазовая граница пассивна к развитию неустойчивости Кельвина-Гельмгольца под действием сил вязкого трения.
- Число Лапласа $La = L \rho \sigma / \mu^2$, где μ — абсолютная вязкость. Определяет стабилизирующее действие вязкости на развитие неустойчивости границы. При $La \gg 1$ этим эффектом можно пренебречь.

Четвертая группа. Нестационарность процессов.

- Число Фурье тепловое $Fo_T = a \Delta t / L^2$. Показывает, как время изучаемого процесса соотносится со временем диффузионного нагрева. При $Fo_T \gtrsim 1$ требуется решение нестационарной задачи.
- Число Фурье концентрационное $Fo_C = D \Delta t / L^2$. Показывает, как время изучаемого процесса соотносится со временем диффузионного переноса компонентов. При $Fo_C \gtrsim 1$ требуется решение нестационарной задачи.

- Число Фурье гидродинамическое диффузионное $Fo_\nu = \nu \Delta t / L^2$. Показывает, как время изучаемого процесса соотносится с временем диффузионного переноса импульса. При $Fo_\nu \gtrsim 1$ требуется решение нестационарной задачи.
- Число Фурье гидродинамическое конвективное $Fo_U = U \Delta t / L$. Показывает, как время изучаемого процесса соотносится со временем конвективного переноса импульса. При $Fo_U \gtrsim 1$ требуется решение нестационарной задачи.

Пятая группа. Теплоперенос на внешних границах.

- Число Нуссельта $Nu = hL/k_{\text{внеш.}}$, где h — коэффициент теплообмена, $k_{\text{внеш.}}$ — коэффициент теплопроводности внешней среды. Чисто диффузионный теплообмен соответствует $Nu = 2$. Отметим, что в литературе [85] встречается несколько определений h , которые приводят к различным предельным значениям.
- Число Био $Bi = hL/k_{\text{внут.}}$. Показывает отношение внутреннего теплового сопротивления к наружному. Для задач кристаллизации металла на воздухе $Bi \ll 1$.

В задачах кристаллизации отливок, где объем расплава значителен, рассматриваются также эффекты, связанные с архимедовой силой в поле гравитации Земли. Эти эффекты включают анализ чисел подобия Эйлера, Фруда, Грасгофа. Термокапиллярная конвекция определяется критерием Марангони, и фильтрационное течение определяется числом Дарси. Далее эти эффекты не учитываются, поэтому анализируются фазовые переходы в мезоскопических объемах расплава, где влияние сил гравитации и других упомянутых эффектов незначительно.

2.1.2. Анализ пространственно-временных масштабов процессов

Процессы переноса и структурообразования (ППС) в сплошных средах характеризуются конечной скоростью распространения возмущений. В случае диффузионных механизмов переноса эта скорость определяется межчастичным, молекулярным взаимодействием. При конвективном переносе скорость соответствует скорости течения. В результате при изучении ППС методами вычислительного эксперимента (ВЭ) важно провести анализ поведения системы в пограничном слое [85], где зависимые переменные меняются наиболее быстро. Теория пограничного слоя [86] оказалась полезной при решении многих практически важных задач. Особенностью этой теории является то, что в ней не предложено универсальных решений. Фактически полученные выражения для пограничного слоя зависят от типа задачи (стационарная/нестационарная), геометрии обтекаемых тел и режимов обтекания, определяемых числами Рейнольдса, Пекле и Шмидта.

Осуществим анализ характерных масштабов ППС для физических систем, уделив особое внимание наличию движущихся фазовых границ. Пусть l_Θ обозначает характерную пространственную длину неоднородности какой-либо физической величины, указанной нижним индексом Θ и описывающей состояние многофазной системы. Обозначим как τ_Θ характерное время изменения Θ в области с размером l_Θ . Таким образом, под характерным масштабом здесь и далее понимается характерный размер, на котором имеет место существенное изменение величины θ . Определим, что на таком масштабе значение Θ изменяется по пространству или во времени в e раз, т.е. математически определяется условиями

$$e^{-1} \leq \Theta(t + \tau_\Theta, \vec{r}_1) / \Theta(t, \vec{r}_1) \leq e, \quad \forall t, \quad (2.1)$$

$$e^{-1} \leq \Theta(t, \vec{r}_2) / \Theta(t, \vec{r}_1) \leq e, \quad \forall |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \leq l_\Theta. \quad (2.2)$$

Величина e выбрана в качестве критериального порога неслучайно, поскольку экспоненциальный вид распределения часто встречается в зада-

чах диффузии. Тогда пространственно-временные масштабы классифицируем в соответствии с частными решениями задач кристаллизации.

Первая группа. Ширина пограничного концентрационного или теплового слоя, формирующегося перед фронтом кристаллизации, движущимся с постоянной скоростью $V = \text{const}$, либо при высокоскоростной неравновесной кристаллизации, либо при квазиравновесной кристаллизации на масштабах, меньших капиллярной длины:

- ширина концентрационного погранслоя: $l_C = D/V$,
- ширина теплового погранслоя: $l_T = a/V$.

На фронте кристаллизации происходит сегрегация компонентов и выделяется скрытая теплота фазового перехода [62]. Профили концентрации и температуры приведены на рис. 2.1 и получены при решении автомодельного уравнения [87].

Вторая группа. Ширина фазовой границы между двумя фазами в равновесном состоянии определяется фазовым полем φ :

- ширина диффузной фазовой границы

$$l_\varphi = \sqrt{\frac{\kappa}{2\Delta f_{\max}}} = 4\sqrt{\frac{2\kappa}{W}},$$

где φ — переменная фазового поля, определяющая переход от одной фазы к другой на расстоянии l_φ , $\Delta f_{\max}$ — высота барьера в зависимости плотности свободной энергии f от φ .

Профиль фазового поля по нормали к границе приведен на рис. 2.2. Концепция диффузной границы раздела фаз и ее определения через свободную энергию приведены в оригинальных работах Кана и Хиллиарда [88]. Вид свободной энергии был рассмотрен ранее в главе 1 на стр. 69 в уравнении (1.33). Коэффициент κ при градиентном слагаемом в выражении для свободной энергии F и высота барьера W потенциала связаны с

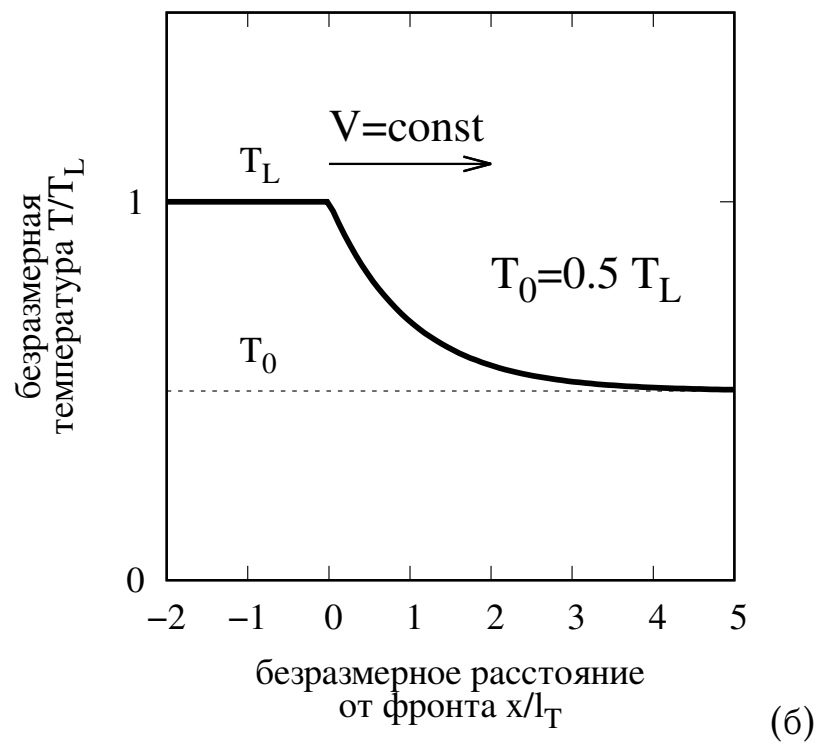
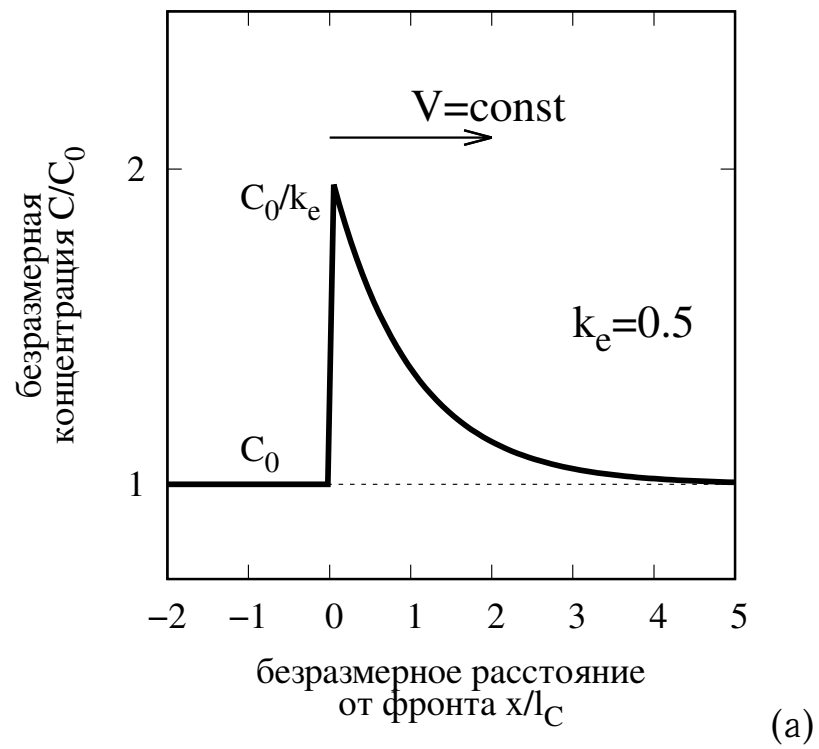


Рис. 2.1. Формирование пограничного диффузионного концентрационного (а) и температурного (б) пограничных слоев с характерной шириной $l_C = D/V$ и $l_T = a/V$ соответственно.

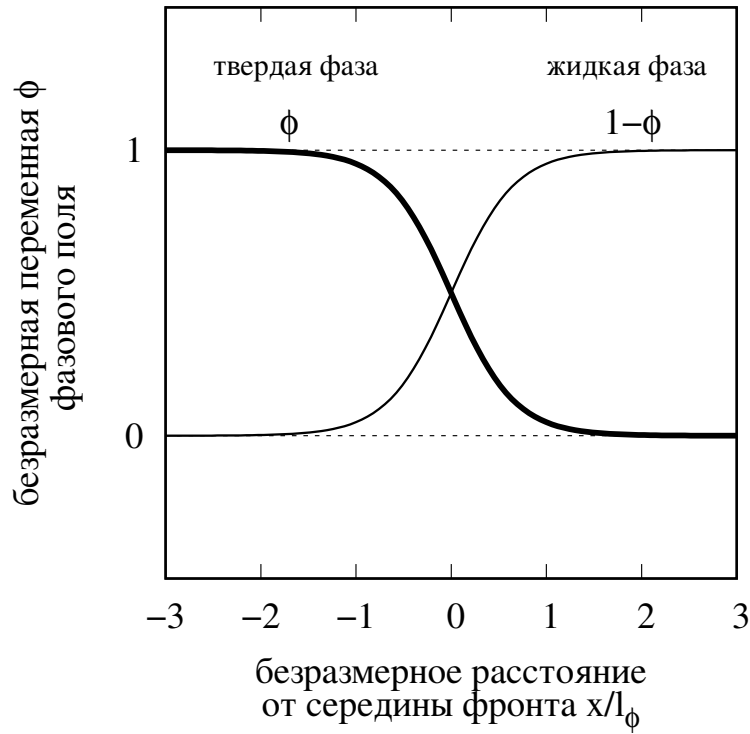


Рис. 2.2. Изменение переменной фазового поля φ вдоль нормали к фазовой границе “твердая фаза — жидкая фаза”.

поверхностным натяжением (поверхностной энергией в случае твердой фазы) уравнением [88]:

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} \kappa (\nabla \varphi)^2 d\eta = \int_0^1 \sqrt{2\kappa \Delta f} d\varphi = \frac{1}{12} \sqrt{2\kappa W},$$

где η соответствует пространственной координате вдоль нормали к границе раздела.

Третья группа. Характеристические длины турбулентного течения:

- характеристическая длина конвективного течения $l_U = L$ равна протяженности L области развития течения,
- характеристическая длина вязкой диссипации $l_\nu \sim \text{Re}^{-3/4} l_U$ [30].

В турбулентных течениях диссипация энергии и импульса происходит путем каскадного перехода от более крупных к более мелким вихрям [29]. В результате потенциальная энергия системы во внешнем поле сил преобразуется в кинетическую энергию течения. Вязкое трение

является непосредственной причиной развития неустойчивости течения. Диссипация кинетической энергии во внутреннюю энергию происходит на длинах вязкой диссипации l_ν . Таким образом, l_ν является оценочной нижней границей для размера вихрей в турбулентном течении.

Четвертая группа. Характеристические времена турбулентного течения:

- конвективное макроскопическое время $\tau_U = l_U/U$ развития конвекции, определяется макроскопическим размером всей системы и характеристической скоростью U , соответствует времени конвективного переноса импульса, внутренней энергии или компонентов по конвективному механизму внутри системы,
- динамическое характеристическое время $\tau_U^{dyn} = \text{Re}^{-1/2} \tau_U$, определяющее время диссипации кинетической энергии за счет вязкости [30],
- адвективное время $\tau_U^{adv} = \text{Re}^{-3/4} \tau_U$, необходимое для переноса мелко-вихревых структур на расстояние l_ν макроскопической скоростью течения U [30].

Конвективное время $\tau_U = l_U/U$ определяет развитие как гидродинамического течения, так и распространения тепла и компонентов в области по конвективному механизму, поскольку перенос внутренней энергии и компонентов происходит одновременно с конвективным переносом массы для растворов с близкой плотностью компонентов.

Пятая группа. Характеристические времена установления пограничного слоя:

- диффузионное время установления концентрационного профиля $\tau_C = L^2/D$,
- диффузионное время установления теплового профиля $\tau_T = L^2/a$,
- диффузионное время установления гидродинамического профиля $\tau_\nu = L^2/\nu$.

Диффузионные времена соответствуют единой функциональной зависимости и определяются коэффициентами диффузии, температуропроводности и кинетической вязкости, имеющими одну размерность.

В задачах кристаллизации возникают дополнительные характеристические длины, времена и скорости, связанные с образованием фазовых границ и формированием микроструктуры. К таким величинам отнесем:

- размер $l_{\text{субст.}}$ кристаллической субструктуры (микроструктуры), определяемый расстоянием между первичными осями дендритов или расстоянием между ячейками/пластинами;
- корреляционную длину $l_{\text{корр.}}$, определяющую пространственную периодичность расположения фаз при протекании процессов фазового расслоения;
- скорость диффузии V_D химических компонентов, определяющую максимальную скорость распространения примесных атомов в расплаве, при достижении которой реализуется переход к безразделительному затвердеванию [62].

Оценка вышеприведенных характеристических масштабов необходима для правильной концептуальной постановки многоуровневой модели. Используя оценки ширины диффузной границы l_φ , размера микроструктуры $l_{\text{субст.}}$ или корреляционной длины $l_{\text{корр.}}$, производится определение представительных объемов на мезо- и микроскопическом уровнях на стадии математической постановки.

2.1.3. Критерии применимости двухуровневого подхода

Определим критерии применимости и границы использования подхода ДМПС в области физики фазовых переходов.

Требования к решению. При построении двухуровневых моделей производится согласование решений на различных пространственных уровнях. Согласование решения с нижнего на верхний уровень осуществляется через процедуру осреднения, рассмотренную ранее подробно в главе 1. Если поле зависимой переменной нерегулярно, т.е. ее функция от пространственной координаты разрывна или ее первая производная разрывна, то процедура осреднения приводит к неправильным результатам. Аналогичные выводы можно сделать по отношению к нерегулярным во времени решениям. Исходя из этого сформулируем следующие критерии.

Первый критерий применимости ДМПС. При построении двухуровневых моделей процессов переноса необходимо выполнение условия регулярности решений по пространству и времени. В противном случае не выполняется требование сходимости решения при уменьшении размера макроточки до представительного объема мезоуровня.

Требования к уравнениям модели. Нестационарные уравнения, описывающие процессы переноса и структурообразования в системах, претерпевающих фазовые превращения, не должны содержать нелинейные зависимости. Такие зависимости, в случае их присутствия, подлежат линеаризации. Модели с обратной связью, колебательными и волновыми явлениями плохо исследуются с использованием ДМПС. Системы эволюционного типа, учитывающие предысторию, в предельных случаях сводятся к уравнениям гиперболического типа, что также затрудняет

использование ДМПС. Лучше всего ДМПС реализуется для диссипативных систем. На основании этого сформулируем

Второй критерий применимости ДМПС. Метод ДМПС применим к решению уравнений в частных производных параболического типа. Нелинейные слагаемые на этапе формулировки модели подвергаются линеаризации.

Требования к разномасштабности процессов. Имеет смысл использовать двухуровневый подход только в случае, если присутствует существенное (на один порядок величины и более) различие в пространственных масштабах ППС. В обзоре метода асимптотического анализа, приведенном в главе 1, это требование сводится к наличию “быстрых” и “медленных” переменных. Под “быстрыми” и “медленными” переменными понимается различие в периодичности решения или во времени, или в пространстве. При малых отличиях (менее одного порядка величины) масштабов двухуровневое моделирование не показывает значительного выигрыша в скорости вычислений. При этом точность решения существенно ниже, чем для одноуровневой модели с мелкой вычислительной сеткой. Таким образом, последний критерий определим следующим образом.

Третий критерий применимости ДМПС. Реализация двухуровневой модели требует наличия процессов переноса с существенно различающимися пространственными и/или временными масштабами.

Далее рассмотрим несколько примеров применения представленных критериев. Уравнения Навье-Стокса содержат нелинейное слагаемое, которое при больших значениях числа Рейнольдса приводит к стохастичности поля течений. Для применения двухуровневого подхода требуется провести линеаризацию нелинейного слагаемого с помощью подсеточной модели турбулентности. В итоге при расчете используется осредненное

поле течения, для которого известны его флуктуационные характеристики.

При кристаллизации ультрадисперсных металлических капель ограниченная растворимость примесных компонентов и выделение скрытой теплоты кристаллизации при высокой скорости движение межфазной поверхности приводит к возникновению в математической модели значительных градиентов концентрации и температуры. Оценим пространственные масштабы l_C и l_T неоднородности концентрации и температуры согласно выражений, приведенных в предыдущем разделе. При характерных для металлических систем значениях $D \sim 10^{-9}$ м²/с, $a \sim 10^{-6}$ м²/с и характерной скорости $V \sim 10^{-2}$ м/с масштабы l_C и l_T составляют 0.1 и 100 мкм соответственно. Течение жидкой фазы в ультрадисперсных системах, как правило, контролируется силами вязкого трения, следовательно, масштаб гидродинамических течений определяется протяженностью самой системы $l_U = L = 100$ мкм при характерном радиусе дисперсной частицы $r = 50$ мкм. Таким образом, масштабы l_T и l_U больше масштаба l_C на 2—3 порядка. Одновременный анализ распределений концентрации, температуры и скорости течения в таком случае вычислительно затратен в силу больших различий в масштабах протекающих процессов. Следовательно, использование метода ДМПС оправдано.

2.2. Математическая постановка задачи кристаллизации мезоскопических объемов

Структурообразование в многокомпонентных металлических системах, претерпевающих фазовые превращения, реализуется на микро- и мезоскопических масштабах из-за ограниченных скоростей движения фазовых поверхностей и переноса химических компонентов. В свою очередь, процессы вязкого течения расплава, нестационарного переноса тепла, химические реакции, протекающие на макроскопическом масштабе всего образца, оказывают критическое влияние на морфологиче-

скую устойчивость фазовых границ. Эта взаимосвязь в конечном итоге определяет отбор фазового состава и морфологических особенностей окончательной микроструктуры. Таким образом, полная математическая модель, учитывающая ППС в кристаллизующейся системе, содержит уравнения различного типа (алгебраические, ОДУ, ДУЧП) для описания нестационарных процессов, протекающих на различных масштабах.

Определим полную математическую модель ППС, учитывающую все сопряженные процессы, в виде множеств:

- 1) независимых переменных $\{X_i\}$;
- 2) зависимых переменных $\{Y_i\}$;
- 3) уравнений баланса $\{A_i\}$;
- 4) краевых условий $\{\Gamma_i\}$;
- 5) замыкающих уравнений $\{F_i\}$, устанавливающих связи между зависимыми переменными;
- 6) зависимостей $\{G_i\}$ теплофизических характеристик от локальной структуры среды.

Полная модель характеризуется большим числом степеней свободы и трудноразрешима в общем виде даже на современных ЭВМ, поскольку предполагает вычисления с мелкой сеткой, соответствующей наименьшему пространственному масштабу, наблюдаемому в затвердевающей системе. В практических задачах часто осуществляется анализ чисел подобия и запись на их основе сокращенной системы, включающей только значимые уравнения баланса и/или слагаемые в уравнениях. В результате предсказательная точность ВЭ уменьшается.

Для адекватного теоретического описания динамики формирования микроструктуры предлагается метод ДМПС [62, 76–78, 81], состоящий в разложении полной модели на набор разноуровневых задач, описывающих все физические явления на соответствующих пространственно-

временных масштабах. Применение подобного метода к описанию дисперсных систем наиболее эффективно в силу малых линейных размеров образцов. Введем в рассмотрение микро-, мезо- и макроскопический масштабы кристаллизации $l_{\text{микро}}$, $l_{\text{мезо}}$ и $l_{\text{макро}}$ соответственно со следующими интервалами значений:

$$\text{макро : } l_{\text{макро}} > 1000 \text{ мкм}, \quad (2.3)$$

$$\text{мезо : } 1000 \text{ мкм} \geq l_{\text{мезо}} \geq 1 \text{ мкм}, \quad (2.4)$$

$$\text{микро : } 1 \text{ мкм} > l_{\text{микро}}. \quad (2.5)$$

Изучение системы на микроскопическом масштабе позволяет предсказать кристаллографическую и дислокационную структуру материала, сформированную под влиянием сегрегации компонентов. Мезоскопический масштаб необходим для расчета динамики движения межфазных поверхностей «металл» — «газовая фаза» и механизмов теплопереноса в многофазных (с точки зрения агрегатного состояния вещества) системах. Макроскопическое моделирование важно для введения в модель условий обработки материалов и расчета тепловых и гидродинамических полей в образцах.

Математически подход ДМПС основывается на методе редукции числа степеней свободы при сохранении числа уравнений и, соответственно, числа зависимых переменных. Для этого уравнения баланса разбиваются на группы МАКРО и МЕЗО и решаются на различных масштабах с выполнением процедуры согласования, рис. 2.3. Для этого на основе оценки характеристических чисел процессов переноса, характеристических пространственных масштабов и времен производится декомпозиция полной модели на задачи, оперирующие на макро- и мезоуровнях. Каждая задача описывает только одно физическое явление (например, диффузию компонентов, теплоперенос и т.д.), используя в качестве исходных данных поля зависимых переменных, рассчитанные в других задачах, но при этом сохраняется связность модели. Другими словами, в каждое отдельное уравнение входят скалярные или векторные поля,

рассчитываемые другими уравнениями. Уточнение краевых условий $\{\Gamma_i\}$ для мезоскопических моделей, т.е. согласование “сверху-вниз”, производится на основе решения макроскопических моделей. Согласование задач “снизу-вверх” производится путем уточнения зависимостей $\{F_i\}$ и $\{G_i\}$ на основе данных мезоскопических моделей.

Уравнения баланса $\{A_i\}$ в наиболее общем виде записываются в двух приближениях. Первый вид представлен интегродифференциальным уравнением (1.32), приведенным ранее в разделе 1.4, которое определяет изменение осредненной в макроточке зависимой величины. Уравнение (1.32) включает пять слагаемых: (1) частную производную зависимой величины от времени; (2) учет на межфазной границе конвективного и диффузионного потоков, а также потока, обусловленного движением самой границы; (3,4) диффузионный и конвективный среднеобъемные значения потоков; (5) объемное источниковое слагаемое. Второй вид уравнений баланса для величины Θ формулируется в виде ДУЧП

$$d(\vec{r}) \frac{\partial \Theta}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \Theta = \nabla \cdot c(\vec{r}) \nabla \Theta + f_{\text{объем.}} + f_{\text{поверх.}}, \quad (2.6)$$

где d — обобщенный массовый коэффициент, $\vec{u}$ — скорость конвективного течения, c — коэффициент диффузионного переноса. Уравнение (2.6) содержит временное, конвективное, диффузионное, объемное и поверхностное источниковые слагаемые. Зависимость коэффициента $d(\vec{r})$ от пространственных координат позволяет учесть неоднородные по плотности (стратифицированные) среды, а коэффициент $c(\vec{r})$ позволяет учитывать неоднородность транспортных характеристик в пространстве.

Отметим, что модель фазового поля, используемая в настоящей работе, позволяет учитывать естественным образом все эффекты, связанные с фазовой границей, в виде источниковых слагаемых. В результате нет необходимости рассчитывать в явном виде движение границы, требующее больших вычислительных затрат в моделях с резкой границей. Вместо этого в МФП производится расчет объемного распределения

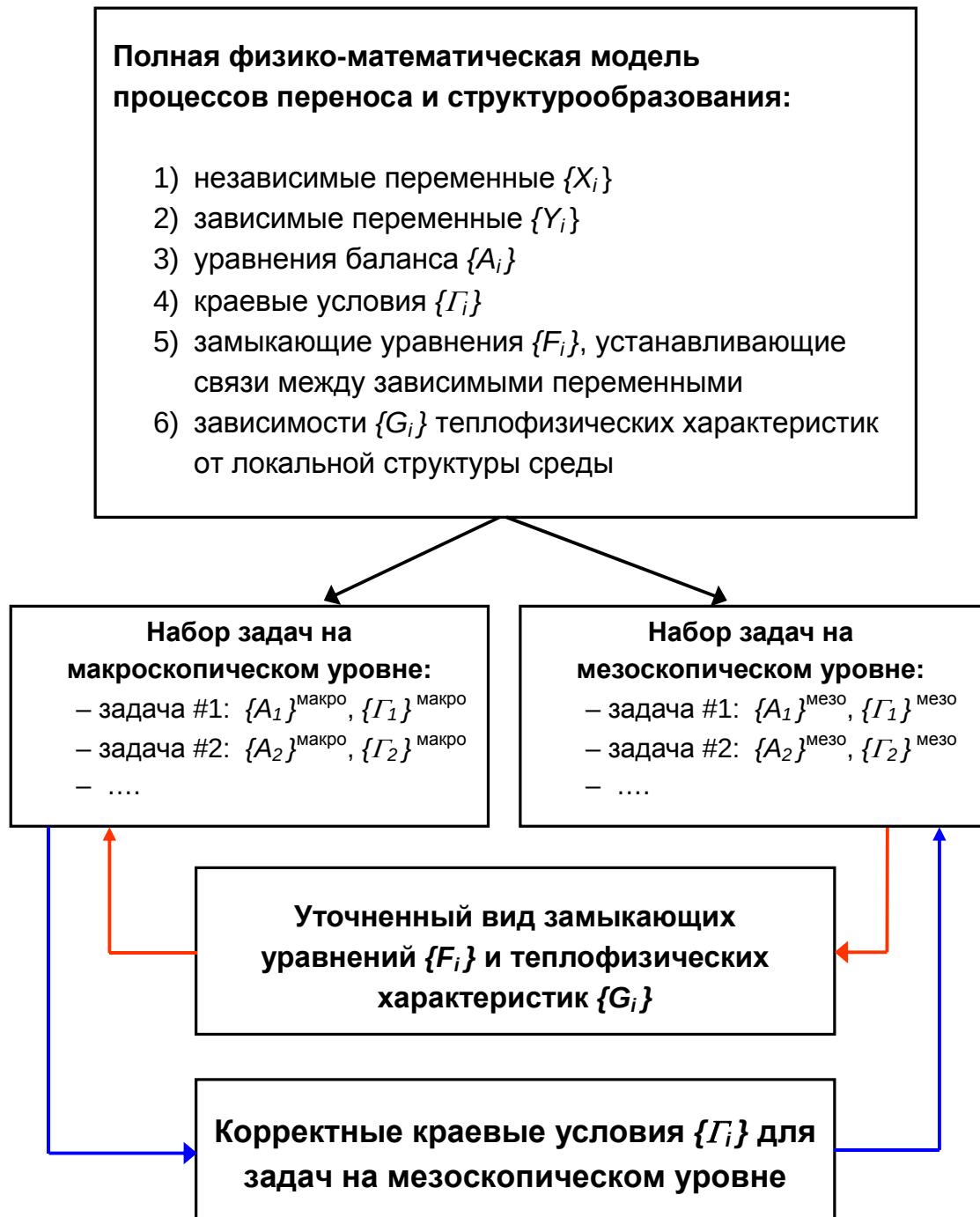


Рис. 2.3. Метод разбиения полной модели на задачи макроscopicкого и мезоскопического уровней.

ФП — переменной φ . Положение границы далее определяется естественным образом вдоль изоповерхности со значением $\varphi = 0,5$ или $\varphi = 0,0$ в зависимости от используемого вида потенциала.

Краевые условия $\{\Gamma_i\}^{МАКРО}$ макроуровня задаются в виде линейных, нелинейных или специальных граничных условий согласно классификации [36]. Линейные граничные условия содержат зависимую функцию и ее первую производную для определения непрерывности переменной или потока на границе. Нелинейные условия определяют радиационный теплообмен или массообмен с учетом химической реакции на границе. Специальные граничные условия задаются на подвижных границах фазового перехода и учитывают источник или сток зависимой величины. Выбор граничных условий на макроуровне производится согласно классическим подходам теплофизики, когда условия задаются либо на основе экспериментальных данных, либо исходя из известных физических принципов.

Краевые задачи $\{\Gamma_i\}^{МЕЗО}$ мезоуровня определяются путем интерполяции решения на макроуровне на поверхности, соответствующей границам расчетной области мезоуровня. Используется интерполяция решения кубическими сплайнами, что обеспечивает непрерывность исследуемой функции и ее первой производной. Если граница мезообъема совпадает с фазовой границей, то требуется задавать не только функцию, но и ее производную. В этом случае при построении модели на макроуровне требуется дополнительный анализ: соответствует ли выбранная на макроуровне численная схема достаточному порядку точности, чтобы обеспечить корректное вычисление производной. В терминах метода конечных элементов требуется обеспечить соответствие базовых функции и решения классу гладкости C^1 или выше.

Замыкающие уравнения $\{F_i\}$, устанавливающие связи между зависимыми переменными, являются одними из наиболее важных элементов двухуровневой модели. Именно эти соотношения выступают в качестве замыкающих уравнений (ЗУ) между зависимыми макроскопи-

ческими переменными в одноуровневых моделях. Определение вида ЗУ в одноуровневых моделях производится на основе эмпирически установленных закономерностей или теоретических гипотез и моделей. Как правило, ЗУ способны описывать конкретный тип взаимодействий в физической системе. При различных типах взаимодействия в одноуровневых моделях производится выбор ЗУ, подходящих для конкретного взаимодействия, на основе какого-либо критерия. Известным примером такого подхода является зависимость коэффициента сопротивления сферы в набегающем потоке как функции числа Рейнольдса. Однако для физических систем со сложной внутренней структурой (поликристаллической тело в условиях нагружения, кристаллизация металлических расплавов в неравновесных условиях) указанный метод определения ЗУ приводит к большой погрешности при проведении ВЭ.

В двухуровневом подходе ЗУ для макроуровня формулируются при решении задач на мезоуровне либо в представительном объеме макроуровня, либо в мезообъеме. В результате в численной модели корректно учитываются как изменение параметров состояния системы на макроскопическом уровне, так и эволюция ее внутренней структуры на мезоскопическом уровне. В задачах кристаллизации мезоскопическое моделирование позволяет определить ЗУ для следующих процессов, связанных со структурообразованием:

- изменения проницаемости дендритного каркаса;
- роста локальной плотности порошковых материалов при спекании;
- эволюции дендритной или ячеистой микроструктуры;
- формирования остаточной газовой пористости;
- микросегрегации химических компонентов в сплавах;
- прочих процессах.

Результаты расчета на мезоуровне анализируются и в виде ЗУ передаются на макроуровень. При этом исчезает необходимость вывода ЗУ в

явной форме, поскольку эволюция микроструктуры вычисляется во всех макроточках. В общем случае ЗУ формулируется на основе регрессионного анализа данных расчета на мезоуровне. В практических задачах вид регрессионной модели определяется заранее, еще на этапе тестовых расчетов. Таким образом, при проведении двухуровневого ВЭ при согласовании данных мезоуровня с данными макроуровня определяются только параметры регрессионной модели, которая и является ЗУ для макроуровня. Проводя аналогии с методом двухуровневого моделирования НДС поликристаллических тел [9, 25], кинетические и замыкающие уравнения $\{F_i\}$ содержат явные внутренние переменные, которые входят в ОС рассматриваемого масштабного уровня.

Зависимости $\{G_i\}$ теплофизических характеристик от локальной структуры среды определяются на основе прямого моделирования процессов переноса на мезоуровне. Согласно терминологии двухуровневого моделирования НДС — это этап вычисления неявных внутренних переменных. Расчет производится либо в представительном объеме макроуровня, включающем достаточное число структурных элементов физической системы, либо в мезообъеме, содержащем один структурный элемент. В первом случае определяются теплофизические характеристики среды, включая:

- эффективную проницаемость дендритного каркаса;
- эффективную температуропроводность;
- удельную поверхность;
- прочие характеристики.

Второй класс характеристик связан с кинетическими характеристиками движения межфазных поверхностей. К таким характеристикам относятся:

- подвижность фронта кристаллизации;

- кинетический коэффициент роста;
- смачиваемость твердых включений/границ;
- подвижность линии сопряжения трех фаз в трехфазных системах;
- константы химических реакций;
- прочие кинетические характеристики.

Кинетические характеристики передаются на макроуровень как функции температуры, химического состава, микрошероховатости поверхностей. Отметим, что часто расчет кинетических характеристик требует применения подходов МД и химической термодинамики. Хотя они и не укладываются в определение уровней (2.3), упомянутые эффекты важны для ППС на мезоскопическом уровне. По этой причине они рассматриваются в этом классе.

В заключение отметим, что основным научным результатом применения подхода двухмасштабного моделирования процессов переноса, сопряженных с фазовыми переходами I рода, является повышение точности вычислительного эксперимента в задачах кристаллизации за счет учета динамики фазовых границ на мезоскопическом уровне.

2.3. Численные методы: алгоритмическая реализация

Формализуем алгоритм реализации ДМПС в наиболее общем виде, используя этапы проведения ВЭ, предложенные в [89, 90].

1. *Сущностная постановка задачи.* Оценка геометрических размеров и теплофизических характеристик кристаллизующейся системы. Постановка научной проблемы. Определение параметров, подлежащих в задаче анализу.
2. *Концептуальная постановка задачи.* Анализ пространственно-временных масштабов процессов переноса и структурообразования.

Анализ безразмерных чисел подобия. Выявление основных физико-химических процессов, протекающих в системе, и их параметризация с помощью макроскопических и мезоскопических параметров.

3. *Математическая постановка задачи. Формулировка полной модели.* Запись уравнений баланса для зависимых переменных. Исключение слагаемых в уравнениях баланса, вкладом которых можно пренебречь согласно критериям подобия. Постановка краевых задач для всех уравнений баланса. Определение замыкающих уравнений.
4. *Математическая постановка задачи. Разработка структуры двухуровневой модели.* Разбиение уравнений на задачи макро- и мезоскопического уровней. Выбор процедуры определения представительного объема на каждом уровне. Формулировка процедуры согласования решений между уровнями.
5. *Реализация модели в виде программного кода.* Построение конечно-разностной модели путем дискретизации уравнений методами КЭ, КО или КР. Алгоритмическая компоновка этапов реализации двухуровневой модели. Программирование и отладка исполняемого кода.
6. *Идентификация параметров.* Определение значений входных данных и их погрешностей на основании доступных экспериментальных данных и литературных источников. Подготовка входных параметров.
7. *Верификация модели.* Исследование вычислительной устойчивости численной модели. Проведение тестовых расчетов на сохранение баланса. Сопоставление полученных решений с доступными экспериментальными данными и аналитическими решениями.
8. *Уточнение модели.* В случае расхождения тестовых расчетов с верификационными данными проводится уточнение модели. Уточ-

нение уравнений баланса, замыкающих уравнений, краевых задач. Проверка представительности выбранных вычислительных объемов на каждом уровне.

9. *Проведение вычислительного эксперимента.* Формирование матрицы эксперимента. Выполнение расчетов. Сохранение полученных решений.
10. *Анализ результатов.* Постобработка и систематизация результатов ВЭ. Сопоставление результатов с контрольными данными. Построение регрессионных моделей. Разработка рекомендаций.

На рис. 2.4 приведена схема взаимодействия задач, обобщающая алгоритм реализации двухуровневой модели и выполнения вычислительного эксперимента для описания кристаллизации мезоскопических объемов. Графическое описание соответствует ГОСТ 19.701-90 (ИСО 5807-85) для схем взаимодействия задач, который допускает множественные связи между элементами схемы и передачу управления двух типов (временную и постоянную) между задачами. Цветовая разметка показывает разделение задач согласно их функциональному назначению. После загрузки исходных данных (символ № 1) модуль управления задачами (символ № 2) осуществляет временную передачу управления (передача Т-типа, см. схему и обозначения на ней) в блок решения задач на макроскопическом уровне (символ № 3), где интегрируются нестационарные задачи (символы № 4–6) на одном временном шаге макромасштаба. Далее осуществляется возврат управления в модуль управления, подготовка данных (символ № 7) для постановки краевых задач мезоуровня и передача управления в блок решения задач на мезоуровне (символ № 8). После этого уточненные замыкающие уравнения, теплофизические и кинетические параметры (символ № 12) передаются в модуль управления. Осуществляется проверка адекватности рассчитанных данных мезоуровня и их передача на следующем временном шаге в задачи макроуровня.

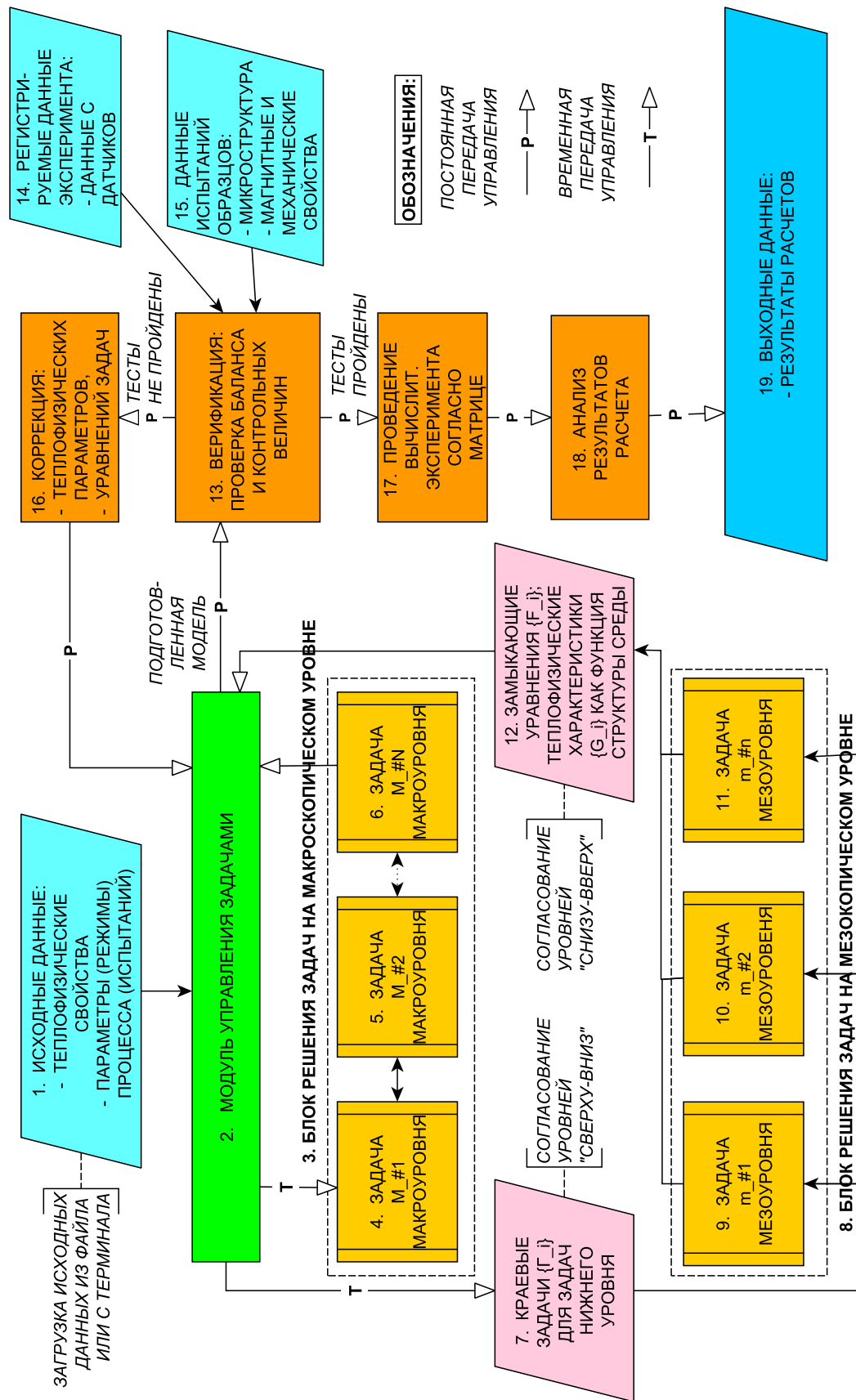


Рис. 2.4. Схема взаимодействия задач при проведении двухуровневого вычислительного эксперимента в области металлургии мезоскопических объемов.

Правая часть схемы описывает дальнейшую схему взаимодействия модулей. Подготовленная модель передается для выполнения в блок верификации модели (символ № 13). Верификация проводится путем проверки сохраняющихся величин (проверки баланса) и сравнением с аналитическими решениями, если они существуют для исследуемой задачи. Дополнительно в этом блоке осуществляется сопоставление с данными лабораторного эксперимента, регистрируемыми в режиме реального времени (символ № 14), и с результатами испытаний образцов (символ № 15).

Если тестовые расчеты неудовлетворительны, то производится коррекция теплофизических параметров и/или уравнений модели (символ № 16). Для этого управление возвращается в модуль управления для перестройки компонентов численной модели и компиляции нового программного кода. Если тестовые расчеты пройдены успешно, то управление передается в расчетный блок (символ № 17) для проведения ВЭ согласно матрице эксперимента. После этого осуществляется обработка результатов расчета в модуле постобработки (символ № 18). В заключение формируются массив выходных данных ВЭ (символ № 19) и отчет о результатах анализа ВЭ.

Новизной предложенного алгоритма реализации двухуровневой модели является способ согласования решений на различных масштабных уровнях. Рисунок 2.5 показывает алгоритм процедуры согласования. В начале расчетного блока производится расчет на макроуровне сопряженных полей зависимых переменных во всех макроточках расчетной области (символ № 1). Далее происходит передача данных макроуровня на мезоуровень для определения краевых задач мезоуровня (символ № 2). На мезоуровне вычислительная область всей физической системы покрывается большим числом мезообъемов. По этой причине прямой расчет задач мезоуровня в каждом мезообъеме приведет к большим вычислительным затратам. Вместо этого проводится анализ макроскопических полей и выбор на его основе *ограниченного* набора локальных мезообъемов

для дальнейшего моделирования (символ № 3). Множество мезообъемов должно быть представительным, чтобы полностью характеризовать различные условия термообработки и локальные состояния внутри системы. В задаче лазерного плавления порошков, приведенной на рис. 2.5 в качестве иллюстрации, критерием отбора мезообъема для расчета являются: (а) высокий градиент температуры, или (б) высокая скорость нагрева/охлаждения. Это широко распространенные критерии при реализации метода адаптивных сеток в математическом моделировании. Здесь вместо адаптивной сетки макроуровня строится адаптивный набор мезообъемов, который позволяет описать изменение состояния кристаллизующейся системы на макроуровне с учетом эволюции микроструктуры на мезоуровне.

После этого в выбранном наборе мезообъемов осуществляется решение задач мезоуровня в выбранных локальных мезообъемах (символ № 4). Основной целью этого этапа является уточнение ЗУ макроуровня $\{F_i\}$ и эффективных теплофизических и кинетических параметров $\{G_i\}$, учитывающих состояние физической системы на мезоуровне, например, микроструктуру. Таким образом, на этапе № 4 решаются несопряженные задачи мезоуровня, что повышает сходимость и скорость их вычислений. На следующем этапе реализуется осреднение решений на мезоуровне для получения моделей $\{F_i\}$ и $\{G_i\}$ в отобранных макроточках и аппроксимации решений в прочих макроточках макроуровня (символ № 5). В заключение происходит передача уточненных ЗУ в виде моделей $\{F_i\}$ и эффективных характеристик $\{G_i\}$ в задачи макроуровня (символ № 6) и начинается следующая итерация расчетного цикла на макроуровне.

Предложенная схема реализации двухуровневой модели исключает необходимость синхронного расчета задач на макро- и мезоуровнях на каждом временном макрошаге расчета. Следовательно, она является эффективной и хорошо зарекомендовала себя при моделировании задач кристаллизации мезоскопических объемов. Представительность выбран-

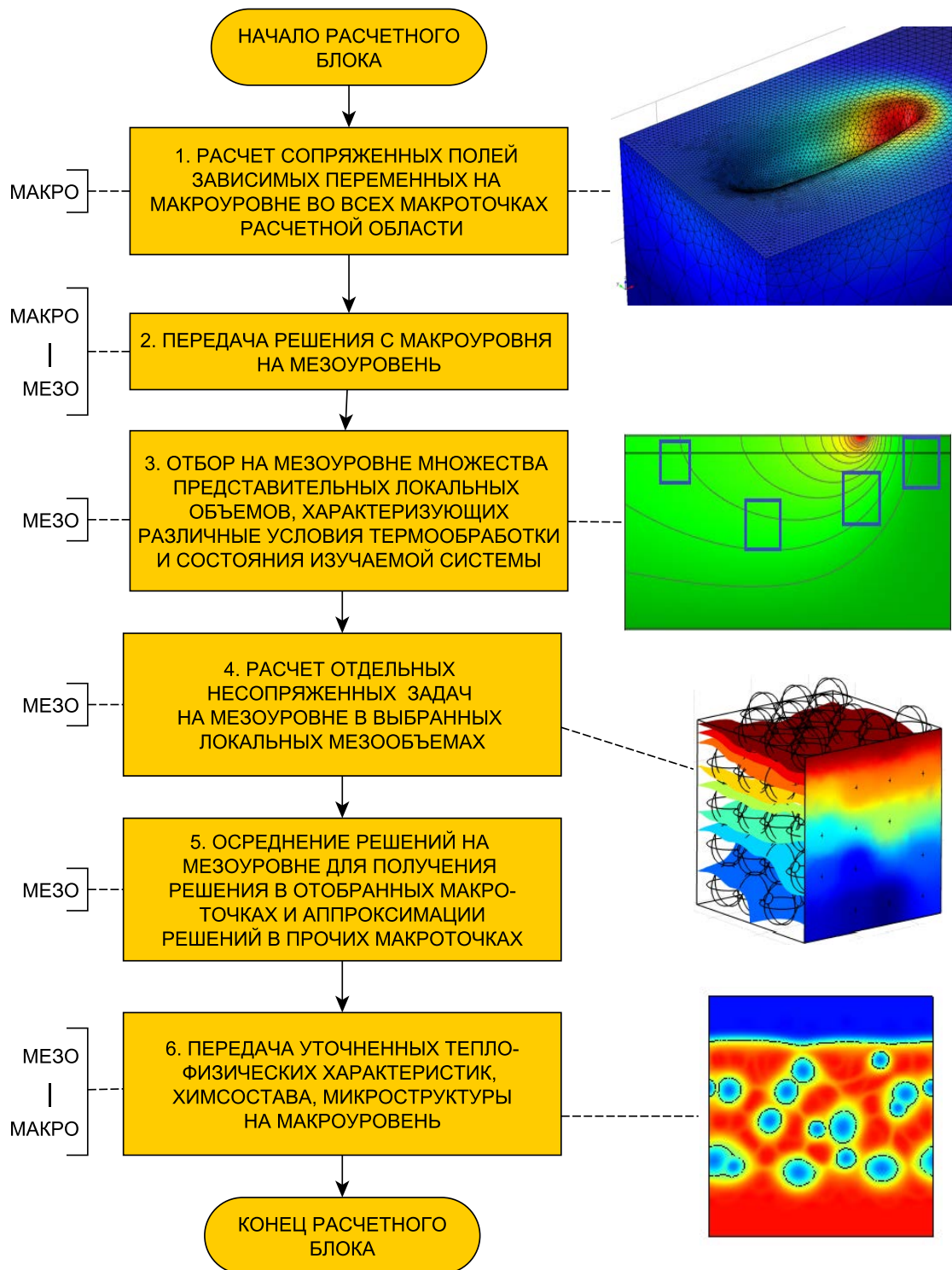


Рис. 2.5. Схема согласования решений на макроскопическом и мезоскопическом уровнях при интегрировании нестационарных краевых задач по времени. В правой колонке приведены поясняющие рисунки для задачи двухуровневого моделирования лазерного плавления металлических порошков, рассматриваемого далее в главах 3 и 4.

ного набора мезообъемов обеспечивается за счет проверки моделей $\{F_i\}$ и характеристик $\{G_i\}$. Если наблюдается большое изменение полей на макроуровне при интегрировании одного временного макрошага, то это обозначает неправильный расчет на мезоуровне. В этом случае производится новая выборка мезообъемов, содержащая большее количество элементов. Таким образом, предложенный подход условно можно назвать итерационным на уровне разных масштабов. Подход ограниченно применим для исследования проблем деформации поликристаллических материалов, где требуется постоянное согласование решений на разных масштабах из-за сильной зависимости решений на разных уровнях. В задачах кристаллизации такие ограничения отсутствуют, поэтому предложенная схема реализации полностью применима.

2.4. Численные методы: дискретизация уравнений

Дискретизация уравнений математической модели по пространственным переменным производилась методами конечных разностей (МКР) и конечных элементов (МКЭ). Выбор МКР обусловлен простой записью разностных уравнений для нестационарных уравнений ДУЧП параболического типа, содержащих пространственно-зависимые коэффициенты. Как известно, недостатком МКР является сложность построения разностной сетки, если граница вычислительной области имеет сложную геометрию. Таким образом, МКР использовался в основном для решения задач на мезоуровне, где решение искалось в кубической вычислительной области с регулярной сеткой и применялись линейные граничные условия.

Метод МКЭ позволяет решать вычислительные задачи в областях со сложной геометрией границы, положение которой изменяется во времени. Дополнительным преимуществом является формулировка численной задачи в слабой форме, что позволяет перейти от минимизации невязки решения в узлах к минимизации невязки на элементе. Кроме

того, вариационная постановка задачи естественным образом включает в численную модель принципы термодинамики необратимых процессов. Для задач кристаллизации это сводится к минимизации свободной энергии физической системы при переходе от неравновесного в равновесное состояние. Недостатками МКЭ при решении таких задач являются: (а) необходимость перестройки якобиана решения, требующая вычислительных затрат и (б) плохая адаптивность решателя при расчете задач с высокими градиентами или скоростями изменения зависимой величины. В этом случае использование метода конечного объема более предпочтительно.

Для компенсации этой особенности в численных моделях, дискретизированных МКЭ, использовались следующие приемы. Если в задаче предполагались или высокие значения градиента зависимой переменной (производной по пространственным координатам), или процесс был сильно нестационарным (производная по времени), то применялись линейные интерполяционные функции и первый порядок аппроксимации по времени. Это соответствовало линейным лагранжевым конечным элементам и формуле дифференцирования назад первого порядка соответственно. Указанный подход был применен [83] для описания импульсной лазерной обработки металлических порошков в главе 3. В задачах, где требовалось решение уравнений с нелинейными слагаемыми, использовались квадратичные и кубические конечные элементы с полиномами Эрмита. Такой подход применялся для решения уравнений Навье-Стокса для несжимаемой жидкости при малых и средних (до $Re = 1500$) числах Рейнольдса. В этом случае итерационное решение численных нелинейных уравнений показало лучшую сходимость для элементов с более высоким порядком базисных функций. Такой подход был реализован в задаче описания бесконтейнерной кристаллизации металлических капель в главе 5.

Во всех задачах использовалась слабая формулировка МКЭ в постановке Галеркина [91]. Дискретизация уравнений по времени производилась с использованием разностной схемы Эйлера первого порядка и

формулы дифференцирования назад различных порядков. Оба метода являются широко распространенными и применимыми для широкого круга нестационарных задач, хотя и не являются экономичными и абсолютно устойчивыми.

Построение численных моделей потребовало разработки новых численных методов. В задаче описания лазерной обработки порошков производится расчет полей зависимых переменных в порошковом слое, который испытывает усадку. В результате происходит изменение плотности порошка во времени, и верхняя граница порошкового слоя движется. Традиционным подходом к решению данной задачи является использование адаптивных сеток, перестроение которых производится периодически по мере движения границы области. При этом происходит накопление ошибки в решении из-за аппроксимации решения на новой сетке при ее перестроении. Для компенсации этой проблемы предложен двухшаговый подход, реализующий следующий алгоритм вычислений.

1. Вертикальная координата верхней границы порошкового слоя задается новой зависимой переменной $Z = f(x, y, t)$, являющейся функцией двух других пространственных координат x, y и времени t . Другими словами, вводится дополнительное уравнение движения для поверхности раздела газовой и металлической фаз.
2. Определения базисных функции $[N]$, где квадратные скобки обозначают вектор-строку, теперь зависят от Z , что позволяет деформировать конечно-элементную сетку без перерасчета якобиана на каждом временном шаге.
3. При ухудшении качества сетки ниже установленного критерия, когда геометрические высоты конечного симплекс-элемента, проведенные из любых двух узлов, отличаются в 3 и более раза, производится перестройка сетки для предотвращения инвертированных элементов.

Преимуществом предложенного подхода является сокращение числа операций пересчета якобиана решения за счет введения в модель одной дополнительной переменной. Это позволяет значительно ускорить расчеты для задач, где физическая система находится в режиме периодического термического воздействия. Для вышеупомянутой задачи лазерной обработки в период времени между импульсами наблюдаются умеренные температурные градиенты и скорости охлаждения, когда не требуется обновление якобиана на каждом расчетном шаге. Дополнительным преимуществом введения переменной Z является явное определение положения фазовой границы “газовая инертная атмосфера–порошковый слой” и точный расчет тепловых и массовых потоков на границе с учетом ее положения и вектора нормали.

Таким образом, при разработке подхода ДМПС в области численных методов получены два основных новых результата. Первый результат состоит в оригинальной алгоритмической компоновке двухмасштабного моделирования процессов переноса и структурообразования при металлургии мезоскопических объемов. Второй результат состоит в расширении метода конечных элементов для анализа квазипериодических процессов теплообмена, когда движение фазовых границ учитывается неявно введением зависимости базисных функций от дополнительной внутренней переменной.

2.5. Программная реализация и проблемно-ориентированные программы для ЭВМ

С использованием подхода ДМПС реализованы три проблемно-ориентированных программных комплекса “Компьютерная оптимизация процессов лазерной обработки порошков” [78, 92, 93], “Моделирование теплофизических процессов при бесконтейнерной кристаллизации” [62, 77, 79–81, 94], “Анализ режимов пайки легких сплавов твердым

припоем” [95–98]. Отметим ключевые особенности программной реализации комплексов программ.

Архитектура и портируемость программного кода. Архитектура программного кода соответствует классической схеме “предобработчик — обработчик — постобработчик”. Программный код имеет модульную структуру с обработкой разных задач в отдельных модулях. Запуск этапов проведения ВЭ осуществлялся с помощью программного скрипта, написанного на языке командного интерпретатора и запускаемого из командной строки. За счет этого обеспечивалось портирование программ между платформами Windows и Linux. Для каждой операционной системы готовились собственные наборы предобработчиков и постобработчиков, что позволило отделить разработку расчетного блока и блока интерфейса с пользователем. Выбор операционной системы производился заданием ключа при компиляции исполняемого кода: в зависимости от значения ключа использовался соответствующий набор интерфейсных модулей. Часть операций предобработки и постобработки данных осуществлялась с использованием бесплатных и коммерческих пакетов программ и специализированных библиотек.

Языки программирования. Подготовка исполняемого кода производилась с использованием следующих языков высокого уровня и их компиляторов:

- C++, стандарт языка C++03 (ISO/IEC 14882:2003), 2003 г. GNU компилятор gcc версии 4.8.2 и более ранних. Интегрированная среда разработки Borland C++ версии 4.5 и библиотеки визуальных элементов BWCC.
- Pascal, стандарт языка ISO 10206 Extended Pascal, 1991 г. GNU компилятор gpc версии 20050331, основанный на компиляторе gcc-3.4.4.

- встроенного метаязыка для аналитического программирования вариационных задач на вычислительной платформе Comsol MultiPhysics. Интегрированная среда разработки Comsol Multiphysics версий 3.5 и 4.3 (лицензии на использование №1056903 и №17073369).

При генерации исполняемого кода использовался уровень оптимизации – O2. Связывание объектного кода проводилось статическим способом.

Многопоточность. Для сокращения времени расчетов в современных ЭВМ используется многопоточность, которая обеспечивается либо на уровне программного обеспечения с использованием библиотек MPI или аналогов, либо на уровне операционной системы с использованием многопоточности (multithreading — *англ.*). Во всех задачах, исследованных в работе, число степеней свободы в отдельной задаче не превышало 2×10^6 на каждом уровне. При таких условиях организация многопоточности за счет распараллеливания кода не является оптимальной. Вместо этого многопоточность обеспечивалась тремя методами.

1. При решении систем линейных уравнений блочно-диагонального вида использовался решатель MUMPS [99] со встроенной многопоточностью на уровне операционной системы.
2. Основные затраты вычислительного времени в двухуровневой модели связаны с решением задач на мезоуровне, где необходимо проводить расчет во множестве мезообъемов для различных типов процессов переноса и структурообразования. Поскольку задачи на мезоуровне несопряжены, символ №8 на рис. 2.4, то имеется возможность их параллельного запуска. При этом есть возможность как разделения разных задач мезоуровня по потокам, так и распределения расчетов одной задачи с различными мезообъемами на несколько процессоров.

3. Ключевым фактором для такой организации многопоточности является независимость вычислительных задач между собой. Краевые задачи мезоуровня, как уже отмечалось, определяются на основе решения макроуровня. Запуск расчета для каждого конкретного мезообъема сводится к вызову команды для исполнения в фоновом режиме. Барьерная синхронизация при этом выполняется управляющим модулем после успешного окончания всех запущенных параллельных задач мезоуровня.

Подготовка входных данных (предобработка). Подготовка входных данных состояла в анализе экспериментальных условий и идентификации параметров модели. Регистрируемые данные эксперимента (символ № 17 на рис. 2.4) вводились в виде аналитических кусочно-непрерывных функции и табличных данных. Данные испытаний образцов (символ № 18 на рис. 2.4) вводились в виде графических изображений и табличных данных для дальнейшего сопоставления с результатами ВЭ на стадии постобработки. Входные данные загружались из файлов параметров расчета и библиотек теплофизических параметров.

Обработка выходных данных (постобработка). Обработка выходных данных осуществлялась как собственными программными средствами, так и с использованием специализированных пакетов.

- Построение графиков функций проводилось с использованием бесплатного пакета Gnuplot версии 5.2 и более ранними.
- Вывод графических изображений в формате gif реализован с использованием библиотеки gd 2.0.33.
- Вывод графических изображений в формате postscript реализован на основе стандарта Level 1, 1984 г. языка Postscript.

- Трехмерная визуализация полей распределения производилась с использованием лицензионных коммерческих пакетов Comsol Multiphysics версий 3.5, 4.3 и пакета Tecplot (лицензия на использование № L17525).

Формат входных и выходных данных. При разработке программных комплексов остро стоит проблема совместимости форматов входных и выходных данных различных версий. В процессе разработки формат данных меняется, что приводит к несовместимости старых данных и исполняемого кода. Для решения этой проблемы использовались файлы данных со следующей структурой. Каждый элемент данных содержал: (1) имя объекта данных, (2) его тип и размер, (3) текстовое пояснение назначения, (4) содержимое объекта данных в символьном виде или в виде бинарного кода в виде контейнера. Это обеспечило возможность простого обновления данных старых форматов до последней версии. Для этого производился анализ структуры данных в файле и программировался соответствующий конвертер.

2.6. Выводы к главе 2.

1. В работе развит двухуровневый подход к математическому моделированию процессов переноса и структурообразования (ДМПС) в задачах металлургии мезоскопических объемов. Предложенный метод использует принцип многомасштабного моделирования физических систем со сложной структурой межфазных поверхностей, развитый ранее в механике многофазных сред.
2. Разбиение модели на уровни производится на основе анализа чисел подобия и оценки пространственно-временных масштабов процессов переноса и структурообразования, при этом учитываются масштабы, связанные с шириной фазовой границы. Определены

критерии применимости ДМПС, накладывающие ограничения на регулярность решения, типы используемых в модели уравнений и разномасштабность процессов.

3. Предложена схема алгоритмической компоновки двухуровневой модели и алгоритм выполнения двухуровневого вычислительного эксперимента в области кристаллизации металлических расплавов. Описана схема согласования решений на разных уровнях, которая определяет постановку краевых задач на мезоуровне с использованием данных макроуровня. Решение задач мезоуровня передается на макроуровень в виде эффективных теплофизических параметров и кинетических и феноменологических моделей.
4. На макроуровне используется традиционный подход к решению сопряженных континуальных уравнений процессов переноса. Реализация двухуровневой модели на мезоуровне включает следующие особенности: (1) производится решение несопряженных между собой задач; (2) проводится выборка множества мезообъемов, являющаяся представительной для решения на макроуровне; (3) при моделировании нестационарных задач выборка мезообъемов периодически обновляется в соответствии с заданным уровнем представительности и изменением решения на макроуровне.
5. Предложенный подход ДМПС реализован на языках высокого уровня в виде проблемно-ориентированных комплексов программ, поддерживающих многопоточность вычислений для использования на современных ЭВМ.

В следующих главах с использованием предложенного двухуровневого подхода и разработанных комплексов программ проведено математическое моделирование трех актуальных задач в области технологии функциональных материалов.

3. Двухуровневая модель селективного лазерного плавления металлических порошков

В третьей главе формулируется двухуровневая модель процесса селективного лазерного плавления (СЛП) металлических порошков. Эта технология является одним из наиболее перспективных и быстроразвивающихся методов аддитивного производства промышленных изделий. При лазерном плавлении порошков происходит значительное изменение структуры материала, поскольку частицы порошка подвергаются плавлению, консолидации и высокоскоростному затвердеванию. В результате характерные размеры структурных элементов изменяются, следовательно, использование двухмасштабного подхода для анализа поведения такой системы является обоснованным. Описаны все этапы постановки вычислительной задачи, ее численной реализации, идентификации параметров и верификации модели. Верификация проведена с использованием обширного объема экспериментальных данных, включая специально поставленные лабораторные эксперименты.

Основные результаты, представленные в главе 3, опубликованы в [68, 78, 83, 93, 100].

Список обозначений в главе 3

- СЛП — селективное лазерное плавление
- ВЛС — высокоскоростной лазерный синтез
- ЛС — лазерное спекание
- ЛП — лазерное плавление
- ЛИ — лазерное излучение

- РФЭС — рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия
- ВЛП — высокоскоростное лазерное плавление
- МФП — метод фазового поля

3.1. Обзор экспериментальных данных и сущностная постановка задачи

Методы селективного и высокоскоростного лазерного плавления.

Развитие лазерной техники в последние десятилетия привело к созданию ряда перспективных промышленных технологий. К их числу относится лазерный синтез функциональных покрытий на основе композитных металлических [101,102] и металл-керамических [103] порошковых смесей. Улучшенные механические и электрохимические свойства получаемых покрытий и изделий обуславливают их широкое применение в машиностроении, химической промышленности, медицине и энергетике [104]. Обзоры [105,106] последних достижений и методов в области аддитивных технологий показывают их высокую практическую значимость и приемлемую себестоимость. Важную роль в дальнейшем развитии таких технологий играет создание теоретических основ синтеза композитных материалов.

Метод лазерного спекания (ЛС) порошковых материалов был разработан в конце 1980-х гг. как процесс быстрого воспроизведения прототипов деталей. В основе метода ЛС лежит лазерная обработка порошковой смеси с различными температурами плавления. В результате лазерного нагрева осуществляется синтез материала со сложной структурой, в которой тугоплавкие керамические или металлические частицы связываются посредством более легкоплавкой органической или металлической матрицы. Уникальность метода ЛС заключается в возможности использования широкого спектра материалов. При этом гибкость метода достигается благодаря непосредственному компьютерному управлению

процессом. В отличие от традиционных методов изготовления деталей, когда требуется механическая обработка, трехмерные детали изготавливаются непосредственно путем послойного спекания порошка. Металлические и металл-керамические композитные изделия, изготовленные методом ЛС, применяются в мелкосерийном и единичном производстве, например, для изготовления инструмента, литейных форм, в том числе для литья под давлением, а также для нанесения защитных коррозионностойких и износостойких покрытий. В медицине ЛС используется для создания протезов и имплантатов.

Послойное лазерное спекание порошков представляет собой многократно повторяющийся процесс, включающий несколько стадий: (а) нанесение порошкового слоя, выравнивание и уплотнение его роликом; (б) лазерная обработка (сканирование) порошкового слоя с полным проплавлением легкоплавкой компоненты порошковой смеси; (в) чистка полученного слоя; (г) сдвиг столика с образцом вниз на величину толщины одного слоя; (д) повторение всего процесса. Обработка осуществляется в камере с продувкой инертным газом и управляется компьютером для получения заданной 3D-геометрии детали.

Для обеспечения высокого качества изготавливаемых изделий и высоких механической прочности и износостойкости необходима также высокая плотность спекаемых деталей. Предварительное измельчение порошков приводит к снижению пористости и шероховатости деталей при ЛС. Для достижения высокой плотности изделий требуется полное плавление порошкового слоя, что получило развитие в так называемых технологиях лазерного плавления [107]. Лазерное плавление (ЛП) приводит к формированию значительных остаточных напряжений вследствие высокого градиента температуры в поверхностных слоях материала. Эти напряжения могут в дальнейшем приводить к разрушению деталей или искажению геометрии, расслоению и трещинообразованию. В дополнение к термическим напряжениям термокапиллярные эффекты также создают серьезные препятствия как для формирования заданной

геометрии детали, так и для качественного межслоевого соединения. Вследствие этого успешное производство плотных изделий методом ЛП до сих пор ограничено узким диапазоном используемых материалов, среди которых можно отметить нержавеющую сталь и высокоуглеродистые стали.

Общей чертой технологий ЛС и ЛП является низкая скорость введения тепловой энергии. Наиболее часто в этих процессах используется либо непрерывный режим генерации лазерного излучения, либо производится импульсная обработка с частотой излучения в единицы герц. Энергетические характеристики лазерного излучения играют исключительно важную роль в формировании качественных деталей, но вместе с тем другие параметры — схема и направление сканирования — могут значительно сократить термические деформации и расслоение деталей [108].

В работах [109, 110] нами предложен метод (патент РФ [111]) высокоскоростного лазерного плавления (ВЛП) ультрадисперсных металлических порошков, основанный на сверхбыстром лазерном нагреве локального участка порошкового слоя и последующем скоростном отводе тепла вглубь образца, при этом время одного цикла “нагрев-охлаждение” составляет порядка 10^{-5} с. Обработка осуществляется при высоких значениях градиента температуры, поэтому предъявляются особые требования к подготовке порошка. Порошковая металлическая или композитная смесь подвергается размолу в высокоэнергетической шаровой мельнице планетарного типа до достижения размера частиц порошка не более 1 мкм. Следовательно, уменьшается и толщина каждого слоя многослойного покрытия. Высокая локальность скоростной лазерной обработки ультрадисперсных материалов позволяет избежать недостатков, присущих традиционным ЛС и ЛП технологиям, таким как термические напряжения, крупные поры, неровность поверхности с высокой шероховатостью. На стадии охлаждения после действия лазерного импульса происходит неравновесное высокоскоростное затвердевание расплавлен-

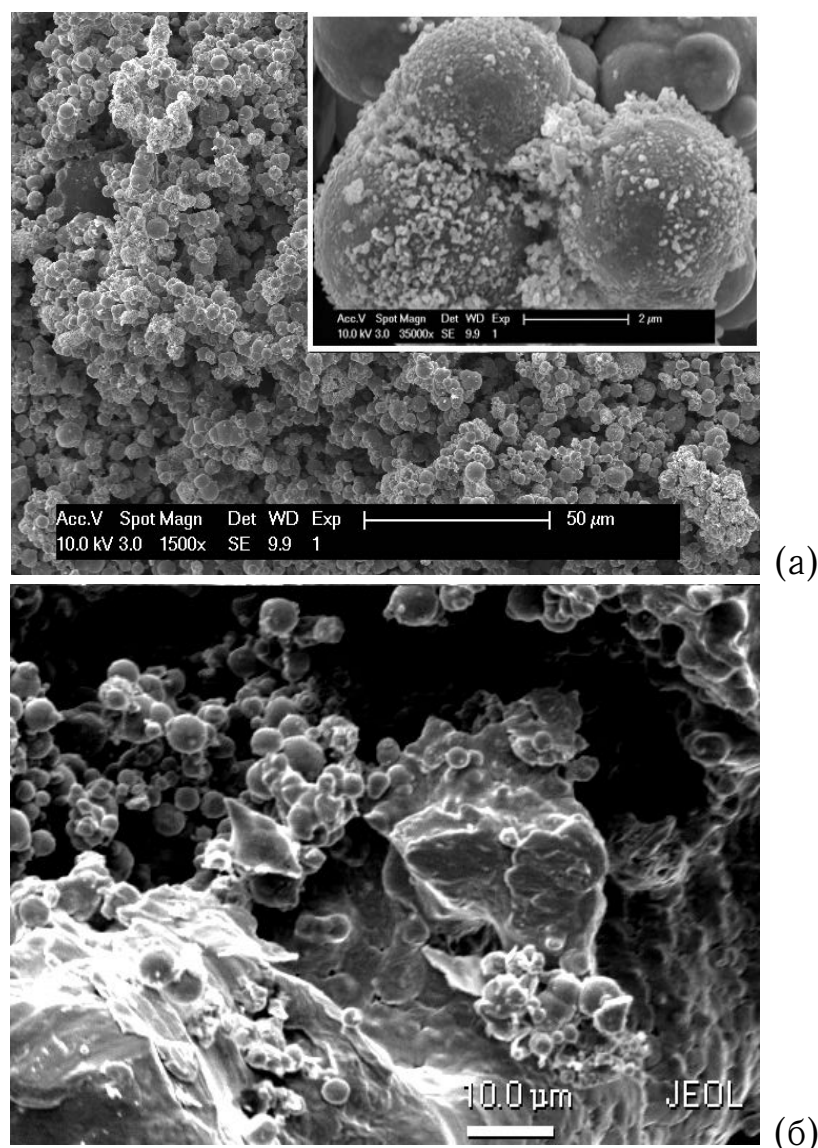


Рис. 3.1. Изменение морфологии и дисперсности композитного порошка Fe–3.2 вес.%Ni в процессе ВЛП. (а) СЭМ изображение порошка перед обработкой. (б) СЭМ изображение поверхности покрытия, полученного после ВЛП обработки.

ной части порошка с формированием метастабильного структурного состояния [16]. Рисунок 3.1 показывает изменение структуры материала после ВЛП обработки.

Особенностью микроструктуры является система связанных пор разного масштаба: от наноразмерных пор до пор размером в несколько микрометров. Результаты исследований структуры [112] показывают сложную зависимость структурных параметров спеченных слоев от ре-

жимов лазерного излучения. Конечная пористость полученных покрытий зависит как от режимов лазерной обработки порошка, так и от химического состава порошковой смеси и распределения частиц по размеру. Твердость и износостойкость покрытий может сильно варьироваться при изменении энергетических характеристик лазерного излучения. Достижение оптимальных значений пористости и твердости спеченных покрытий позволяет повысить износостойкость в условиях как абразивного, так и нормального окислительного изнашивания по сравнению со сплошными поверхностями деталей из таких же сплавов, что и наносимое покрытие.

Эмпирический поиск энергетических режимов лазерной обработки, обеспечивающих получение заданного структурно-фазового состояния, крайне затруднителен и трудоемок. Фактически только в очень узком диапазоне режимов излучения формируются удовлетворительные по качеству слои. К настоящему времени накоплен значительный экспериментальный и теоретический материал о взаимосвязи режимов обработки и микроструктуры композитных слоев. Установлено [113], что увеличение удельной мощности W поглощаемого излучения приводит к резкому росту плотности покрытия в интервале лазерного излучения $W \lesssim 0.2$ кДж/мм³. При $0.2 \lesssim W$ [кДж/мм³] $\lesssim 0.8$ плотность увеличивается с меньшей скоростью. При $W \gtrsim 0.8$ кДж/мм³ плотность остается постоянной с ростом W при одновременном изменении морфологии, когда формируются сверхплотные композитные слои с протяженными порами. На морфологию структуры также оказывает влияние способ сканирования поверхности [113, 114].

В работе [115] выполнено трехмерное численное моделирование процесса ЛС с использованием так называемого метода двух уровней: теплофизические параметры принимаются постоянными на малых масштабах, но являются функциями температуры и соответственно координат на масштабе всего образца. Такой подход применим при моделировании спекания порошков с большим изменением плотности. Хотя

адекватность модели [115] подтверждена сравнением с экспериментом, она не включает в рассмотрение фазовые превращения и ограничена применением к органическим системам. В работе [116] предложена модель анализа ЛС, основанная на расчете тепловых полей в спекаемом порошке. Наряду с зависимостью теплофизических параметров от температуры введена зависимость от пористости порошка, которая является функцией времени и координат описываемого локального объема в слое порошка. Адекватность моделирования [116] была подтверждена сравнением с данными термографирования в ИК диапазоне. Предложенная модель также ограничена системами без протекания фазовых переходов.

Приведенный обзор показывает актуальность задачи теоретического описания процессов СЛП и процессов ВЛП, в частности, когда наблюдаются сверхвысокие скорости нагрева (до 10^7 – 10^8 К/с) локальных областей порошкового слоя. Как следует из экспериментальных данных [110], ВЛП приводит к формированию неоднородного спеченного слоя, где химическое распределение компонентов наследовано от исходного многокомпонентного порошка. В связи с вышеизложенным целью проведенных исследований являлось двухуровневое моделирование физико-химических процессов в СЛП и ВЛП методах.

Сущностная постановка задачи. Слой металлического порошка, нанесенный на подложку с другими теплофизическими свойствами, подвергается высокоскоростному лазерному плавлению импульсным лазером. Известны толщина порошкового слоя и его насыпная плотность; теплофизические свойства и дисперсионный состав порошка и подложки; режимы обработки, включая мощность, скорость, частоту и эффективный диаметр луча. Модель должна прогнозировать температурные градиенты в зоне оплавления, скорости нагрева и охлаждения, определять остаточную газовую пористость и усадку порошка в результате обработки, степень адгезии покрытия с подложкой, сегрегацию химических

компонентов для проведения оптимизации режимов ВЛП обработки в процессе вычислительного эксперимента.

Анализ масштабов процессов и чисел подобия. Согласно определенной в главе 2 процедуре проведения ДМПС выполнен анализ пространственно-временных масштабов физико-химических процессов при обработке порошков методами СЛП и ВЛП, табл. 3.1. Отметим основные отличия методов ВЛП и СЛП: а) в ВЛП используются порошки с размером частиц $0,1 \div 4$ мкм, что меньше на один порядок размера частиц в СЛП, б) при ВЛП проводится импульсная лазерная обработка с длительностью импульса в микросекундном интервале, СЛП соответствует обработке с миллисекундным импульсом или в безимпульсном непрерывном режиме, в) мгновенная мощность во время импульса значительно выше в ВЛП, чем в СЛП. Данные из табл. 3.1 показывают, что для традиционных СЛП процессов масштабы процессов на макро- и мезоуровнях достаточно близки. По этой причине расчеты, предложенные в литературе [117, 118], используют одноуровневый подход в моделировании сопряженных процессов переноса и структурообразования в СЛП. В методе ВЛП, напротив, наблюдается больше различие масштабов, что делает оправданным применение ДМПС.

Таблица 3.1

Анализ пространственно-временных масштабов процессов переноса и структурообразования при высокоскоростном (ВЛП) и селективном (СЛП) лазерном плавлении, рассчитанные при температуропроводности $a = 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$

Параметр	ВЛП (покрытия)	СЛП (объем. изделия)	един. измер.	уровень анализа
пространственные масштабы процесса				
толщина порошкового слоя	20	100	мкм	макро
размер частиц	0,1 ÷ 10	30 ÷ 70	мкм	мезо
ширина границы “расплав—твердая фаза”	2 ÷ 5		нм	атомн.
временные масштабы процесса				
длительность импульса	10^{-4}	5	мс	мезо- макро
время между импульсами	0,03	10	мс	макро
временные масштабы диффузионного теплопереноса				
на масштабе слоя L^2/a	0,4	40	мс	макро
на масштабе частицы d^2/a	$10^{-5} \div 10^{-1}$	5	мс	мезо- макро

Таблица 3.2

Оценка чисел подобия в порошковом слое при обработке методом ВЛП

Группа	число	значение	группа	число	значение
I	Re	3, 1	IV	Fo _T	1, 7
	Pe _T	0, 09		Fo _C	5×10^{-4}
	Pe _C	280		Fo _ν	0, 05
II				Fo _U	0, 15
	Pr	0, 03	V	Nu	0, 002
	Sc	90		Bi	$1, 3 \times 10^{-5}$
III	Lu	3×10^{-4}			
	Bo	$1, 6 \times 10^{-5}$	*учитываемые масштабы: $L = 20$ мкм, $\Delta t = 0, 03$ мс, $U = 0, 1$ м/с		
	We	8×10^{-4}			
	La	$1, 2 \times 10^4$			

В таблицах 3.2 и 3.3 представлены оценки чисел подобия в процессах ВЛП и СЛП соответственно. Сравнение режимов обработки показывает, что в ВЛП процессах, табл. 3.2, доминирующим процессом является диффузионный перенос тепла ($Pe_T < 1$), конвекция слабо развита ($Re \sim 1$) и охлаждение на поверхности типа свободной конвекции ($Nu < 1$). Поскольку $Fo_T \sim 1$ и $Fo_C, Fo_\nu, Fo_U < 1$, то в нестационарной задаче следует в первую очередь анализировать переходные явления в теплотеносе. Напротив, в СЛП процессах, табл. 3.3, конвекция оказывает существенное влияние на все процессы переноса ($Re \sim 100$, $Pe_T > 1$). При этом за время процесса развиваются тепловые и концентрационные поля, сопряженные с течением ($Fo_U > 10$). В обоих ВЛП и СЛП процессах конвекция оказывает большое влияние на перенос химических компонентов ($Pe_C > 100$).

Таблица 3.3

Оценка чисел подобия в порошковом слое при обработке методом СЛП

Группа	число	значение	группа	число	значение
I	Re	78	IV	Fo _T	23
	Pe _T	2, 2		Fo _C	7×10^{-3}
	Pe _C	7×10^3		Fo _ν	0, 6
II				Fo _U	50
	Pr	0, 03	V	Nu	0, 01
	Sc	90		Bi	6×10^{-5}
III	Lu	3×10^{-4}	*учитываемые масштабы: $L = 100$ мкм, $\Delta t = 10$ мс, $U = 0, 5$ м/с		
	Bo	4×10^{-4}			
	We	0, 1			
	La	6×10^4			

Концептуальная постановка задачи. На основе анализа масштабов процессов и чисел подобия сделаны следующие допущения:

1. *Характеристики порошкового слоя.* Принимается, что толщина слоя много меньше толщины подложки, поэтому ее нагреванием при плавлении следующего слоя пренебрегается, что ведет к повышению расчетных остаточных напряжений. Размер частиц на полпорядка и порядок величины меньше толщины слоя.
2. *Теплофизические параметры порошка* учитываются в виде эффективных значений как функции от локальной пористости и температуры.
3. *Теплоперенос в газовых порах* не учитывается. Оценка тепловых потоков показывает, что тепловой поток через металлический скелет значительно превышает поток через газовую фазу для большинства металлов.
4. *Температура на поверхности* не превышает температуру кипения. При достижении температурой пороговых значений, близких к температуре кипения, начинается испарение материала, что приводит к резкой интенсификации теплообмена.
5. *Коэффициент теплообмена.* В литературе [85] отмечено, что переход к кипению повышает эффективный коэффициент теплообмена на 1–3 порядка в зависимости от системы. В модели фазовый переход “расплав—пар” учитывается резким увеличением коэффициента теплообмена вблизи температуры кипения. Потеря вещества при кипении не учитывается.
6. *Влияние конвекции* на теплоперенос и усадку порошкового слоя меняется на различных этапах импульсной обработки. В исследуемых режимах ЛИ в начальный период времени нагрева диффузионный теплоперенос превалирует над конвективным. При возникновении зоны оплавления конвекция усиливается, однако в ВЛП

процессах это совпадает с окончанием импульса и затвердеванием. С учетом этого в модели рассчитывается конвекция под действием капиллярных сил и пренебрегается макроскопической конвекцией.

7. *Кинетика усадки.* Спекание и плавление порошка являются многофакторными физическими процессами, определяемыми гранулометрическим составом порошка, его реологическими свойствами, линейным расширением металлической и газовой фаз, капиллярными явлениями [106]. Реология и макрокинетика спекания определяются в литературе [119–121] путем сопряжения аналитических моделей и экспериментальных данных. Для описания усадки в настоящей работе использовано кинетическое уравнение аррениусовского типа, предложенное в [122] для полимерных порошков. Такое уравнение является феноменологическим, и точность его использования зависит от выбора управляющих параметров – энергии активации и предэкспоненциального множителя. Эволюционная зависимость между газовой пористостью, температурой, вязкостью адекватно отражает макрокинетику спекания [123], поэтому область применимости данного уравнения была экстраполирована на металлические порошки.
8. *Фильтрационное течение.* Оценим возможность реализации фильтрационного течения через пористую структуру композитного порошкового слой, где один из компонентов расплавлен. Согласно модели Козени-Кармана для расширенного закона Дарси [124] для порошка с пористостью $\varepsilon = 0,3$, диаметром частиц $\langle d \rangle = 3$ мкм при удельной поверхности Козени $S_0 = 9 \times 10^5$ м², градиенте давления $\nabla p \sim 10^9$ Па/м, вязкости расплава $\nu \sim 10^{-3}$ Па·с характеристическая скорость течения составляет $|\vec{v}| = 0,047$ м/с. Следовательно, фильтрацией жидкости сквозь порошок на протяжении времени импульса можно пренебречь.

9. *Пренебрегается зональной ликвацией*, поскольку ширина двухфазной зоны пренебрежимо мала при достигаемых температурных градиентах (до 10^7 К/м), скоростях нагрева (до 10^6 К/с) и скоростях затвердевания (до 0.1 – 1 м/с).
10. *Коэффициент поглощения*. В [125] экспериментально показано, что коэффициент поглощения лазерного излучения для порошков нержавеющей сталей, сплава Ti-6Al-4V и алюминия практически не зависит от температуры в диапазоне до $T < 500^\circ$ С. Коэффициент поглощения принят в модели постоянным и не зависящим от температуры.
11. *Эффект экранирования ЛИ* плазменным факелом не учитывается. Для оценки тепловых потерь в плазменном факеле проанализированы литературные источники [126, 127]. Большая локальная мощность лазерного излучения приводит к образованию плазмы в защитной газовой атмосфере или на воздухе. При низкой степени ионизации в эрозионном факеле, характеризующемся низкой температурой плазмы, эрозионный факел практически прозрачен для инфракрасного и оптического диапазонов. Для создания непрерывного оптического разряда в инертных газах необходимо достигнуть высокой пороговой мощности (для аргона — 670 Вт, для гелия — 7600 Вт [126]). Указанные мощности не достигаются для миллисекундного импульсного ЛИ, но регистрируются для наносекундного импульсного ЛИ, где мгновенная мощность около 3 кВт.
12. *Тип теплового источника*. В статье [128] показано, что в металлических порошках характер поглощения более сложный, чем в оптически однородных средах, из-за совмещения поглощения и диффузного рассеяния ЛИ. Таким образом, тепловой источник при лазерной обработке порошков является объемным [129]. Источник ЛИ рассматривался в модели как поверхностный тепловой источник, что обусловлено плавлением высокодисперсных порошков.

Для таких порошков нами было экспериментально показано [130], что в начальном состоянии насыпки мощность объемного излучения практически полностью затухает на глубине нескольких частиц порошка.

3.2. Математическая постановка задачи

3.2.1. Постановка задачи на макроуровне. Расчет полей температуры, пористости и степени усадки

Математическая модель ВЛП/СЛП процессов на макроуровне формулируется [78, 83, 93, 131, 132] в приближении сплошной среды. Объект моделирования формализован до одиночного металлического порошкового слоя Ω_P , нанесенного на подложку Ω_S , рис. 3.2. Подложкой в процессе плавления служат полученные на предыдущих этапах обработки слои. При исследовании прямолинейного движения лазерного луча по поверхности порошкового слоя трехмерная модель СЛП обладает симметрией относительно плоскости $\partial\Omega_{Sym}$, образованной осью x , соответствующей направлению движения лазерного луча, и осью z . Два полупространства, разделяемые $\partial\Omega_{Sym}$, являются симметричными, поэтому в трехмерной модели рассматривается только одна четверть пространства $y \leq 0, z \leq 0$, рис. 3.2.

На макроуровне решаются сопряженные уравнения для температуры T , энтальпии H и локальной пористости ε . Для описания теплофизических процессов, происходящих в порошковой среде Ω_P , вводится [93, 133] уравнение теплопроводности с фазовыми переходами в пористой среде. Уравнение получено с помощью модели двухфазной зоны [34, 134], расширенной на случай высоких скоростей нагрева среды и теплопереноса по механизмам теплопроводности и радиационного теплопереноса. Для изучения сплавов с узким температурным интервалом кристаллизации и сложными фазовыми диаграммами осуществлен переход от модели с одной зависимой переменной T к модели с двумя

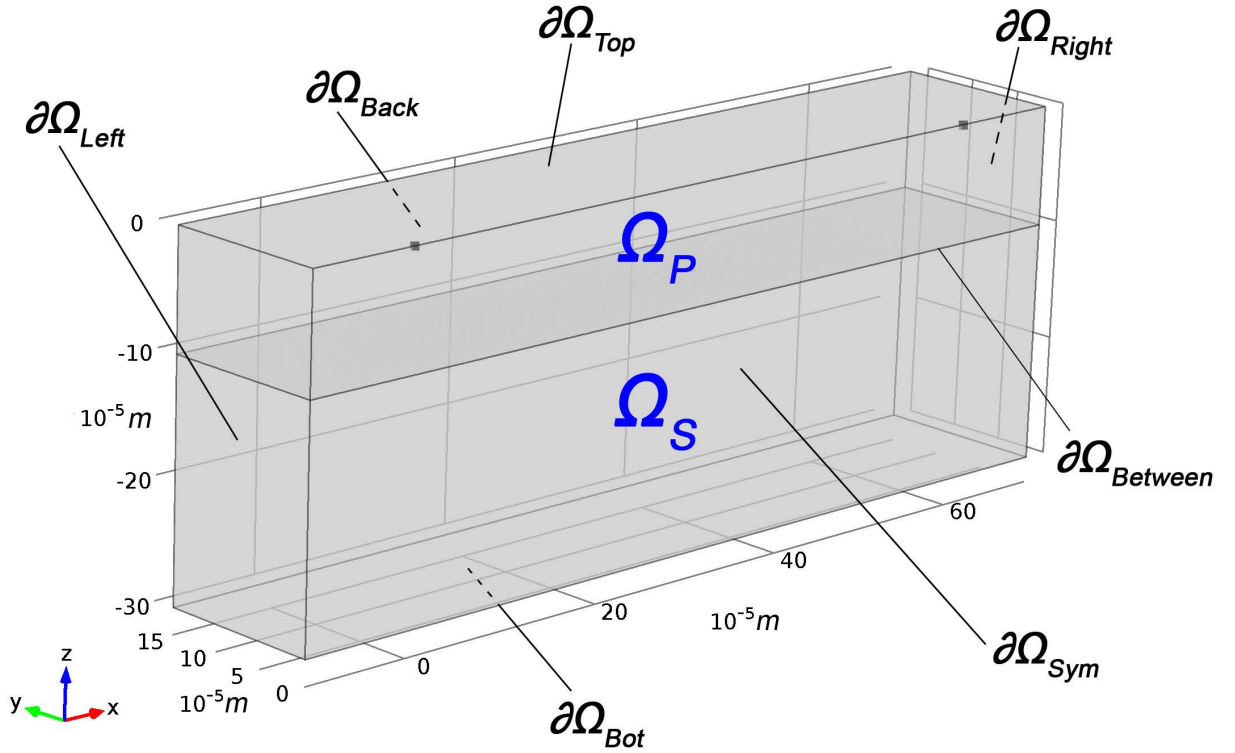


Рис. 3.2. Схема трехмерной расчетной области для моделирования ВЛП/СЛП, где Ω_P и Ω_S обозначают порошковый слой и подложку соответственно. Границы области обозначены символами $\partial\Omega_i$ с нижним индексом i , нумерующим границу.

переменными – температурой T и удельной энтальпией H . Это позволяет [34] точно учитывать теплоту фазового перехода при сохранении абсолютной вычислительной устойчивости модели. Баланс внутренней энергии записывается в виде системы двух уравнений

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial T}{\partial H} (H) \frac{\partial H}{\partial t}, \quad (3.1)$$

$$(1 - \varepsilon) \frac{\partial H}{\partial t} = \nabla \cdot (k_{\text{эфф.}}(\varepsilon) \nabla T), \quad (3.2)$$

где t — время, $k_{\text{эфф.}}(\varepsilon)$ — эффективной коэффициент теплопроводности.

Дополнительно решается кинетическое уравнение для нахождения локальной пористости ε порошкового слоя:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = -\varepsilon A \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right), \quad (3.3)$$

где A — предэкспоненциальный множитель, контролирующий кинетику спекания, E_a — энергия активации вязкого течения, R — универсальная газовая постоянная.

Уравнение (3.3) отвечает процессу уменьшения пористости в результате вязко-пластичного течения порошковой среды, находящейся под влиянием капиллярных сил [82, 122], и включает зависимость от температуры аррениусовского типа. Если параметр E_a достаточно легко оценивается из экспериментов, то второй — варьируемый параметр A — используется для согласования модели с экспериментом. В настоящей работе A определяется при моделировании консолидации частиц в рамках отдельной задачи на мезоуровне. Коэффициент теплопроводности $k_{\text{эфф}}$ как функция пористости также устанавливается численно на мезоуровне отдельных частиц и их конгломератов.

Функция зависимости температуры от энтальпии $T(H)$ является ступенчатой из-за скачка теплоемкости в интервале температур фазового перехода. В настоящей модели она интерполируется полиномом $T_{\text{интерп.}}(H)$ с перегибом при температуре $T = T_m$ плавления, рис. 3.3(а). При этом функция частной производной $\partial T / \partial H$, входящая в уравнение (3.1), имеет минимум, соответствующий фазовому переходу, рис. 3.3(б). Предложенный подход, хотя и вносит погрешность за счет интерполяции $T(H)$ гладкой функцией, является гораздо более точным, чем использование эффективной теплоемкости [134], испытывающий скачок в области фазового перехода. Для области подложки Ω_S на макроуровне решаются только уравнения на температуру и энтальпию, поскольку Ω_S состоит из сплошного материала с пористостью $\varepsilon(\Omega_S, t) \equiv 0 = \text{const}$.

На границах $\partial\Omega_{Sym}$, $\partial\Omega_{Back}$, $\partial\Omega_{Left}$ и $\partial\Omega_{Right}$ задаются условия нулевого потока $\vec{q}$:

$$\vec{n} \cdot \vec{q}_H = 0, \quad (3.4)$$

$$\vec{n} \cdot \vec{q}_T = 0, \quad (3.5)$$

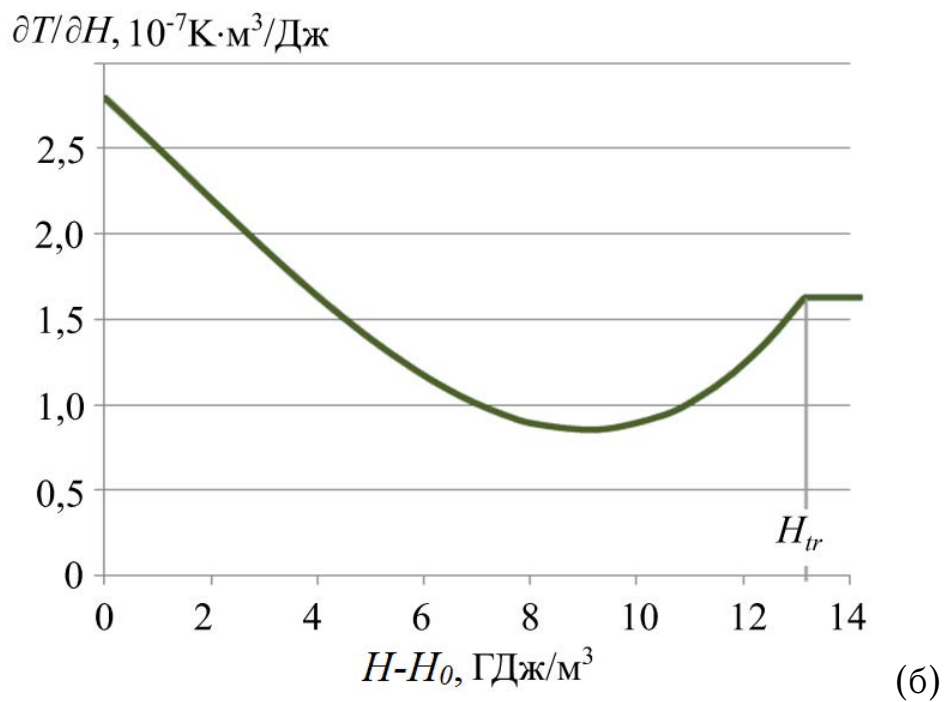
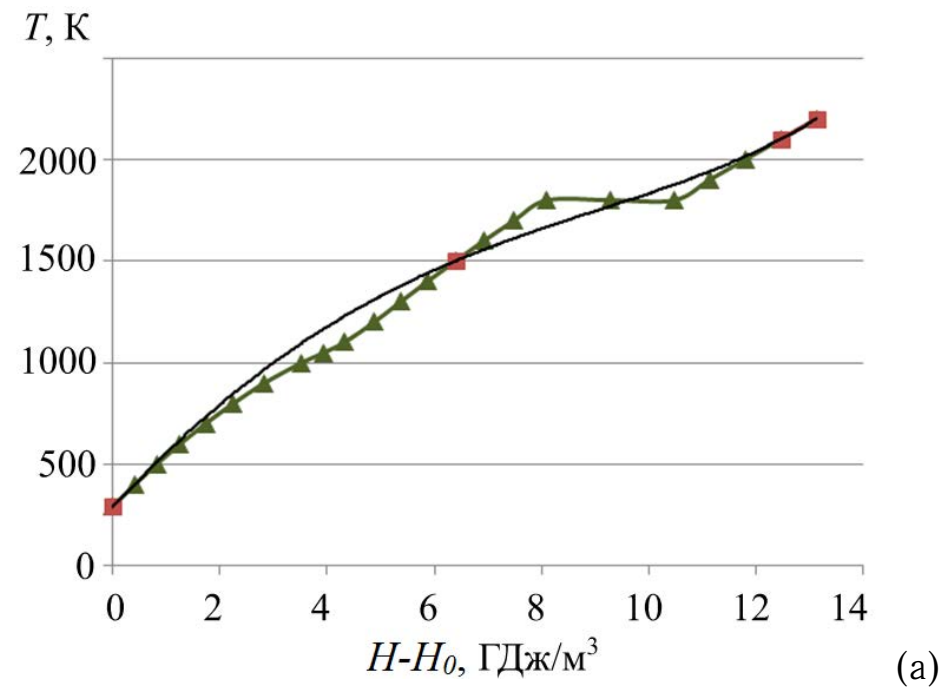


Рис. 3.3. Графики зависимости $T(H - H_0)$ (а) и ее производной $\partial T / \partial H$ (б) для железа, где H_0 — удельная энтальпия при температуре окружающей среды $T_{\text{окр.}}$. Справочные экспериментальные данные обозначены Δ . Отрезок интерполяционной функции $T_{\text{интерп.}}(H)$ показан сплошной линией.

где $\vec{n}$ — вектор нормали, направленный внутрь расчетной области, и нижний индекс задает переменную, для которой вводится поток.

На границе $\partial\Omega_{Between}$, разделяющей порошковый слой и подложку, полагается непрерывность поля температуры T и теплового потока $\vec{q}$, для пористости задается скачок значений:

$$T|_+ = T|_-, \quad \vec{q}_T|_+ = \vec{q}_T|_-, \quad (3.6)$$

$$\varepsilon|_- = 0, \quad \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} \right|_+ = f_\varepsilon(t, \varepsilon), \quad (3.7)$$

где знак '+' соответствует порошковому слою Ω_P , знак '-' соответствует подложке Ω_S . Отметим, что поведение ε в Ω_P описывается кинетическим уравнением (3.3) ОДУ типа, зависящим от времени и не зависящим от пространственных координат. Следовательно, условия непрерывности переменной и потока, задаваемые для T и H , здесь неприменимы. В качестве $f_\varepsilon(t, \varepsilon)$ в простейшем случае используется выражение аррениусовского типа из (3.3), но допустимы и более сложные зависимости.

На верхней границе Ω_{Top} задается тепловой поток от источника ЛИ и охлаждение поверхности за счет конвекции и излучения:

$$\vec{n} \cdot \vec{q}_H|_{\partial\Omega_{Top}} = F(x, y, t) + h_{эфф.}(T) (T_{окр.} - T) + \sigma\sigma_{SB} (T_{окр.}^4 - T^4), \quad (3.8)$$

где σ — излучательная способность металла, σ_{SB} — константа Стефана-Больцмана, $h_{эфф.}(T)$ — коэффициент конвективного теплообмена, зависящий от температуры. Испарение металла с поверхности вводится следующим образом: функция $h_{эфф.}(T)$ осуществляет плавный переход от конвективного охлаждения поверхности к охлаждению за счет испарения при достижении температуры кипения [85], рис. 3.4.

Поверхностный источник $F(x, y, t)$ привязан к верхней границе Ω_{Top} , меняющей положение в процессе усадки. Плотность мощности теплового источника $F(x, y, t)$ соответствует нормальному зако-

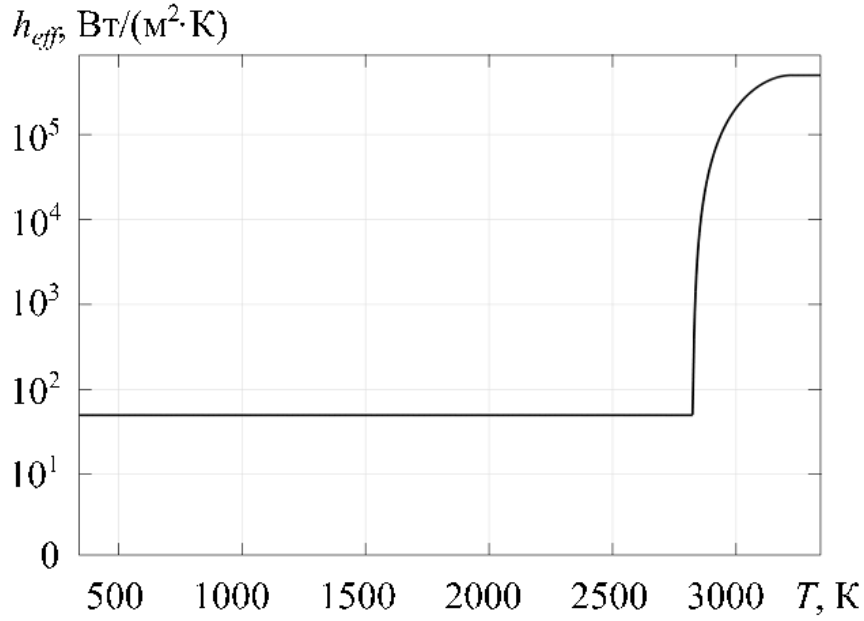


Рис. 3.4. Функция зависимости эффективного коэффициента $h_{\text{эфф.}}(T)$ теплообмена от температуры поверхности T .

ну [126, 127]:

$$F(x, y, t) = k_{\text{погл.}} J_{\text{max}} F_t(t) \exp\left(-\frac{(x_{\text{луча}}(t) - x)^2 + (y_{\text{луча}}(t) - y)^2}{2\sigma_{\text{луча}}^2}\right), \quad (3.9)$$

$$x_{\text{луча}}(t) = x_0 + V_{\text{луча}}t, \quad y_{\text{луча}} = y_0, \quad (3.10)$$

$$J_{\text{max}} = \frac{1}{2\pi\sigma_{\text{луча}}^2} \frac{E_{\text{имп.}}}{\tau_{\text{имп.}}}, \quad (3.11)$$

где $k_{\text{погл.}}$ — коэффициент поглощения ЛИ, J_{max} обозначает пиковую плотность мощности лазера в фокусе лазерного луча, $F_t(t)$ задает импульсную модуляцию ЛИ, $\sigma_{\text{луча}} = R_{\text{луча}} \cdot 0,55738$ — характеристический эффективный радиус, при котором около 80% энергии лазера [135], распределенной по нормальному закону, сконцентрировано в пятне с эффективным диаметром луча $R_{\text{луча}} = 200 \div 400$ мкм, $(x_{\text{луча}}(t), y_{\text{луча}}(t))$ — координаты центра луча в момент времени t , $E_{\text{имп.}} = P/\nu_{\text{имп.}}$ — энергия одиночного импульса, P — номинальная мощность луча, $\tau_{\text{имп.}}$ и $\nu_{\text{имп.}}$ — продолжительность и частота импульсов соответственно и $\tau_{\text{имп.}} \neq 1/\nu_{\text{имп.}}$.

Распределение мощности по времени определено функцией $F_t(t)$, при этом скважность $S_{\text{имп}}$ излучения может быть определена следующим

образом:

$$S_{\text{имп.}} = \frac{1}{\tau_{\text{имп.}} \nu_{\text{имп.}}}, \quad (3.12)$$

$$F_t(t) = \Theta(\tau_{\text{имп.}} - t \bmod (1/\nu_{\text{имп.}})), \quad (3.13)$$

где $\Theta(t)$ — функция Хевисайда, $\bmod$ — операция деления по модулю для действительных чисел. Граничные условия на нижней поверхности подложки $\partial\Omega_{\text{Bot}}$ имитируют среду с неограниченной теплоемкостью:

$$H|_{\partial\Omega_{\text{Bot}}} = H(T_{\text{окр.}}), \quad (3.14)$$

$$T|_{\partial\Omega_{\text{Bot}}} = T_{\text{окр.}}. \quad (3.15)$$

Для определения динамики усадки порошка введем новую зависимую переменную Z — вертикальную координату верхней границы порошкового слоя по оси z . Для этого определим среднюю по слою исходной толщиной h_0 плотность порошка в точке (x, y) как

$$\rho(x, y) = \rho_{\text{max}} \frac{1}{h_0} \int_{\Omega_P} (1 - \varepsilon) \, dz. \quad (3.16)$$

Тогда координата Z верхней границы вычисляется согласно

$$Z|_{\partial\Omega_{\text{Top}}} = \left(\frac{(1 - \varepsilon_0)h_0}{h_0 - \int_z \varepsilon \, dz} - 1 \right) h_0, \quad (3.17)$$

где ε_0 — начальная пористость. Интеграл $\int_z \varepsilon \, dz$ вычисляется, исходя из баланса массы внутри локального объема $dx \times dy \times h_0$ в точке (x, y) .

Для получения замкнутой системы уравнений определим начальные условия, соответствующие комнатной температуре $T_{\text{окр.}}$ и насыпной плотности ε_0 :

$$H(t = 0) = H(T_{\text{окр.}}), \quad (3.18)$$

$$T(t = 0) = T_{\text{окр.}}, \quad (3.19)$$

$$\varepsilon(t = 0) = \varepsilon_0. \quad (3.20)$$

3.2.2. Постановка задачи на мезоуровне. Расчет эффективной теплопроводности, сегрегации компонентов, консолидации частиц

РАСЧЁТ ЭФФЕКТИВНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ПОРОШКА

Для определения эффективного коэффициента теплопроводности $k_{\text{эфф.}}(\varepsilon, T)$ порошка как функции локальной пористости ε и температуры T на мезоуровне решаются прямая и обратная задачи. С этой целью вначале решается [136, 137] прямая задача теплопроводности в двухфазной среде “твердые частицы порошка — поры с газовой фазой”. Далее для получения эффективной теплопроводности производится сопоставление с аналитическим автомодельным решением для нестационарного теплопереноса в сплошной среде. Аппроксимируя численное решение прямой задачи аналитическим автомодельным решением, определяется эффективный коэффициент теплопроводности. При такой постановке есть возможность исследовать влияние не только пористости порошка, но также влияние дисперсионного состава и неоднородности насыпки.

Постановка прямой задачи теплопереноса. Постановка прямой задачи выполняется для представительного объема (ПО) макроуровня. Согласно нашим оценкам [136], ПО включает от 3^3 до 5^3 частиц порошка, что находится на нижнем пределе статистической достаточности количества элементов в статистическом ансамбле для гранулированных сред [138, 139]. Рисунок 3.5 показывает двухфазную расчетную область, соответствующую выделенному объему порошкового слоя с заданной пористостью и случайной насыпкой частиц. Расчетная область разбита на подобласти, соответствующие разным фазам: обозначены область $\Omega_{\text{нагр.}}$, играющая роль нагревателя, металлическая $\Omega_{\text{мет.}}$ и газовая $\Omega_{\text{газ.}}$ фазы.

Рассмотрим двухфазную среду, состоящую из металлического порошка и пор между частицами. Поры заполнены инертным газом или

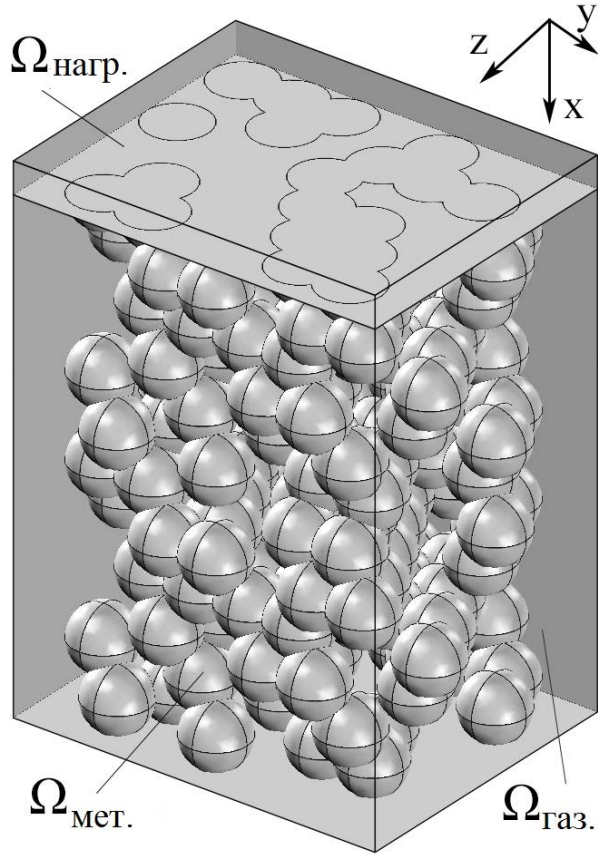


Рис. 3.5. Схема расчетной области для расчета эффективного коэффициента теплопроводности порошкового слоя на мезоуровне.

Насыпная пористость $\varepsilon_0 = 0,54$. На рисунке обозначены границы подобласти $\Omega_{\text{нагр.}}$, вводимой для обеспечения теплового контакта с поверхностным источником. Металлическая и газовая фазы обозначены как $\Omega_{\text{мет.}}$ и $\Omega_{\text{газ.}}$ соответственно.

вакуумированы. Относительный объем газовой фазы, как и ранее, характеризуется пористостью $\varepsilon = V_{\text{газ.ф.}}/V_0$, где $V_{\text{газ.ф.}}$ и V_0 соответствуют объемам газовой фазы и всей области. Запишем уравнение теплопроводности в металлической фазе

$$C_{p,\text{мет.}} \rho_{\text{мет.}} \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k_{\text{мет.}} \nabla T), \quad (3.21)$$

где C_p — удельная теплоемкость при постоянном давлении, ρ — плотность, k — коэффициент теплопроводности. Для газа диффузионный теплотенос определяется аналогично:

$$C_{p,\text{газ.}} \rho_{\text{газ.}} \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k_{\text{газ.}} \nabla T). \quad (3.22)$$

При вакуумировании уравнение (3.22) вырождается, теплоперенос по диффузионному механизму в порах отсутствует.

На границе между металлической и газовой фазами задается непрерывность температуры и теплового потока:

$$T_{\text{мет.}} = T_{\text{газ.}}, \quad k_{\text{мет.}} \nabla T \Big|_{\partial\Omega_{\text{мет.}}} = k_{\text{газ.}} \nabla T \Big|_{\partial\Omega_{\text{газ.}}}, \quad (3.23)$$

где $\partial\Omega_{\text{мет.}/\text{газ.}}$ означает поверхность раздела фаз со стороны металлической или газовой фазы соответственно.

Внешние граничные условия и начальные условия задаются в виде:

$$T = T_m, \quad \text{на } \Omega_{\text{нагр.}}, \text{ при } t > 0, \quad (3.24)$$

$$k \nabla T = 0, \quad \text{на прочих внешних границах, при } t > 0, \quad (3.25)$$

$$T = T_{\text{окр.}}, \quad \text{при } t = 0, \quad (3.26)$$

где $T_{\text{окр.}}$ — температура окружающей среды, T_m — температура плавления, задаваемая на границе-нагревателе $\Omega_{\text{нагр.}}$ в начальный момент времени. Температура плавления выбрана как максимальная температура, которой достигает порошковый слой, сохраняя при этом твердое агрегатное состояние. Такая задача также соответствует максимальному температурному градиенту в расчетной области.

Цель решения прямой задачи состоит в нахождении влияния геометрических характеристик порошка (пористости, дисперсности и т.п.) на эффективные характеристики теплопроводности среды. В силу этого допустимо пренебречь зависимостью теплофизических параметров от температуры:

$$\begin{aligned} C_{p,\text{газ.}} &= \text{const}, & C_{p,\text{мет.}} &= \text{const}, \\ \rho_{\text{газ.}} &= \text{const}, & \rho_{\text{мет.}} &= \text{const}, \\ k_{\text{газ.}} &= \text{const}, & k_{\text{мет.}} &= \text{const}. \end{aligned} \quad (3.27)$$

В реальных физических системах и лабораторных экспериментах допущение (3.27) неприменимо.

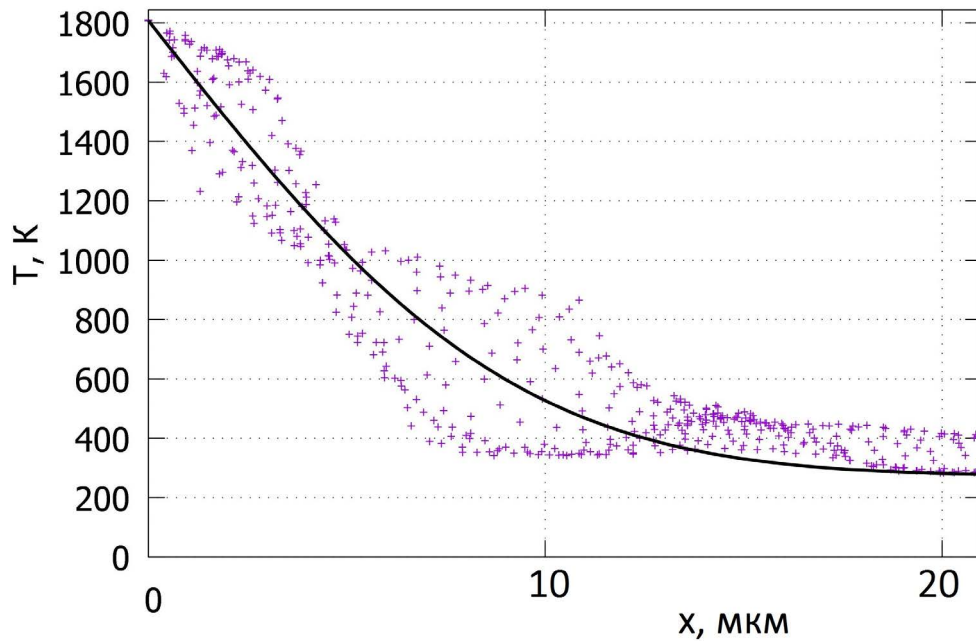


Рис. 3.6. Мгновенный снимок распределения температуры $T(x, t = 10^{-5} \text{ с})$ в порошковом слое железа как функция расстояния x до нагревателя $\Omega_{\text{нагр.}}$. Результаты решения прямой задачи обозначены символами $+$, решение обратной задачи показано сплошной линией.

Расчет проводился при пористости $\varepsilon = 0,65$ (65%) и обработке в воздушной атмосфере. Эффективная температуропроводность составила $\alpha_{\text{эфф.}} = 0,7 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$ при $\alpha_{Fe} = 2,265 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$ для чистого железа.

Постановка обратной задачи теплопереноса. Решение обратной нелинейной задачи теплопроводности проводилось методом, аналогичным [140] для периодических волн и задач с пульсирующим источником. Коэффициентная обратная задача теплопроводности решена по методу аппроксимации набора распределений температуры $T(x, y, z, t)$ в объеме пористой среды функциями автомодельного вида для известного решения. Известно, что постановка краевой задачи с граничным условием первого рода имеет обратное решение, устойчиво, и нахождение решения обратной задачи возможно без регуляризации.

Для нахождения обратного решения с помощью статистической обработки данных прямого численного расчета запишем модель, близкую по форме к прямой задаче. Обратная краевая задача соответствует пря-

мой задаче, но уравнения записываются для эффективных теплофизических характеристик пористой среды [141]:

$$\begin{aligned}\frac{\partial T_a}{\partial t} &= \alpha_{\text{эфф.}} \nabla^2 T_a, \\ T_a(x=0, t) &= T_m, \\ T_a(x=\infty, t) &= T_{\text{окр.}}, \\ T_a(t=0) &= T_{\text{окр.}},\end{aligned}\tag{3.28}$$

где T_a — температура одномерной задачи, решаемой аналитическим способом, $\alpha_{\text{эфф.}}$ — эффективный коэффициент температуропроводности, определяемый выражением

$$\alpha_{\text{эфф.}} = \frac{k_{\text{эфф.}}}{(C_p \rho)_{\text{эфф.}}}.\tag{3.29}$$

Решение задачи (3.28) в автомодельном виде имеет вид [142, 143]

$$T_a(x, t) = T_m - (T_m - T_{\text{окр.}}) \operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{4\alpha_{\text{эфф.}} t}} \right).\tag{3.30}$$

Для связывания прямой и обратной задач численное решение прямой задачи преобразуем к одномерному виду усреднением трехмерного решения в плоскостях $y-z$, т.к. создаваемый источником тепловой поток направлен вдоль направления x :

$$\langle T(x, t) \rangle = \frac{1}{y_0 z_0} \int_0^{y_0} \int_0^{z_0} T(x, y, z, t) dy dz,\tag{3.31}$$

где $T(x, y, z, t)$ — численное решение двухфазной прямой задачи, и интегрирование проводится в области с площадью сечения $S = y_0 \cdot z_0$ и протяженностью x_0 . Преобразование $T(x, y, z, t) \rightarrow \langle T(x, t) \rangle$ позволяет использовать данные $\langle T(x, t) \rangle$ для решения обратной коэффициентной задачи минимизацией невязки $\Phi(\alpha_{\text{эфф.}})$ по параметру $\alpha_{\text{эфф.}}$:

$$\Phi(\alpha_{\text{эфф.}}) = \sum_j [\langle T \rangle_j(x, t) - T_{a,j}(x, t)]^2\tag{3.32}$$

для всех полученных точек j дискретного решения $T(x, t)$. Минимизация производится по методу Левенберга-Марквардта. Найденные таким

образом коэффициенты $\alpha_{\text{эфф.}}$ отражают усредненную эффективную теплопроводность порошкового слоя.

Для определения эффективного коэффициента $k_{\text{эфф.}}$ теплопроводности запишем эффективную удельную на объем теплоспособность среды $(C_p \cdot \rho)_{\text{эфф.}}$ как сумму удельных теплоспособностей металла и газа:

$$(C_p \rho)_{\text{эфф.}} = \varepsilon (C_p \rho)_{\text{газ.}} + (1 - \varepsilon) (C_p \rho)_{\text{мет.}}. \quad (3.33)$$

Тогда согласно определению температуропроводности $\alpha = k / (C_p \rho)$ окончательно получаем

$$k_{\text{эфф.}} = \alpha_{\text{эфф.}} [\varepsilon (\rho C_p)_{\text{газ.}} + (1 - \varepsilon) (\rho C_p)_{\text{мет.}}]. \quad (3.34)$$

В данном выражении $(\rho C_p)_{\text{газ.}} = \rho_{\text{газ.}} C_{p,\text{газ.}}$ определено для газовой фазы и $(\rho C_p)_{\text{мет.}} = \rho_{\text{мет.}} C_{p,\text{мет.}}$ — для металла. При этом решение обратной задачи включает пористость ε .

Таким образом, обратная задача теплопроводности решалась в автоматическом приближении с помощью статистического анализа прямых численных решений двухсредней задачи для случайной насыпки частиц, рис. 3.6, откуда находился эффективный коэффициент температуропроводности $\alpha_{\text{эфф.}}$. Далее $\alpha_{\text{эфф.}}$ пересчитывался в эффективный коэффициент теплопроводности $k_{\text{эфф.}}$, позволяя определить зависимость $k_{\text{эфф.}}(\varepsilon)$.

МОДЕЛЬ ФАЗОВОГО ПОЛЯ ДЛЯ РАСЧЁТА СЕГРЕГАЦИИ КОМПОНЕНТОВ

Для описания плавления, кристаллизации и сегрегации химических компонентов при лазерной обработке применен метод фазового поля (МФП), в котором для каждой из фаз в многофазной системе вводится параметр порядка φ_i (i — индекс фазы), являющийся непрерывной функцией пространственных координат и времени и обозначаемый термином “фазовое поле” i -го компонента. В случае двухфазной жидко-твёрдой системы будем рассматривать два параметра порядка φ_1 и φ_2 , соответствующие твёрдой и жидкой фазам. С физической точки зрения значение параметра порядка φ_i в любой точке системы описывает объемную долю i -ой фазы в бесконечно малом локальном объеме. Таким

образом, в объеме фазы i имеем значения параметров порядка $\varphi_i = 1$ и $\varphi_{j \neq i} = 0$. Границы раздела фаз в таком случае описываются переходной областью между фазами, в которой параметры порядка принимают значения $0 < \varphi < 1$, рис. 2.2. Такая переходная область имеет конечную ширину и поэтому называется размытой или диффузной границей раздела фаз.

Концепция описания границы между фазами как диффузной границы раздела, обладающей конечной шириной и характеризующейся непрерывным, хотя и резким изменением физических характеристик, была введена в описание фазовых равновесий Ван-дер-Ваальсом и фазовых превращений – Джоном Каном [144]. Используя функционал Гинзбурга-Ландау, концепция диффузной границы была далее переформулирована в виде системы эволюционных уравнений Аллена-Кана и Кана-Хиллиарда, которые являются базовыми уравнениями для одной из традиционных формулировок ФП. В настоящее время метод ФП является термодинамически согласованным подходом к описанию широкого класса явлений (см., например, обзор [145] и монографию [15]).

Для двухфазной твердо-жидкой металлической системы с двумя параметрами порядка эволюционные уравнения для параметров порядка φ_i и удельной концентрации c_α компонентов бинарной системы следуют из условия минимизации функционала свободной энергии Гиббса (подробный вывод уравнений приведен в [146]). Для удобства записи уравнений будем использовать для параметров порядка индексы S и L , обозначающие твердую и жидкую фазы.

$$\frac{M_S + M_L}{M_S M_L} \frac{\partial \varphi_S}{\partial t} = \varepsilon_S^2 \nabla^2 \varphi_S - \varepsilon_L^2 \nabla^2 \varphi_L - (g + f)'_{\varphi_S} + (g + f)'_{\varphi_L}, \quad (3.35)$$

$$\frac{M_S + M_L}{M_S M_L} \frac{\partial \varphi_L}{\partial t} = -\varepsilon_S^2 \nabla^2 \varphi_S + \varepsilon_L^2 \nabla^2 \varphi_L + (g + f)'_{\varphi_S} - (g + f)'_{\varphi_L}, \quad (3.36)$$

$$\frac{\partial c_\alpha}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\frac{D_\alpha D_\varphi (\nabla g'_{c_\alpha} + \nabla f'_{c_\alpha})}{g''_{c_\alpha} + f''_{c_\alpha}} - \vec{j}_\alpha^{AT} \right), \quad (3.37)$$

где $\alpha = A, B$ — индекс химического компонента, M_i — подвижность i -го фазового поля в диффузной границе раздела фаз, пропорциональная

кинетическому коэффициенту μ и обратно пропорциональная ширине границы δ , ε_i – коэффициент, учитывающий вклад градиентного по φ_i квадратичного слагаемого в функционал свободной энергии и связанный с поверхностной энергией σ границы раздела фаз соотношением $\varepsilon_i = \sqrt{2\sigma\delta}$, D_α – коэффициент диффузии компонента α , $\vec{j}_\alpha^{AT}$ – антитраппинговый поток, определенный ниже. Для учета изменения диффузионной подвижности атомов в разных фазах в уравнении (3.37) используется функция $D_\varphi = 1 - \varphi_S$. Значения параметра порядка $\varphi_S = 1$ и $\varphi_S = 0$ определяют твердую и жидкую фазы соответственно. Функция $g(T, c_\alpha, \varphi_i)$ описывает молярную плотность свободной энергии двухфазной системы как суперпозицию вкладов объемов фаз, а $f(\varphi_i)$ определяет вклад поверхности раздела в свободную энергию. Функции g и f выражаются через плотности свободных энергий G_i отдельных фаз и поверхностную энергию σ :

$$\begin{aligned} g(T, c_\alpha, \varphi_i) &= G_S(T, c_\alpha)p(\varphi_S) + G_L(T, c_\alpha)p(\varphi_L), \\ f(\varphi_i) &= \frac{9\sigma}{\delta}\varphi_S^2\varphi_L^2, \end{aligned} \quad (3.38)$$

где интерполяционная функция $p(\varphi)$ задана полиномом третьей степени $p(\varphi) = \varphi^2(3 - 2\varphi)$.

Параметры порядка φ_S , φ_L и концентрации компонентов c_A , c_B являются линейно зависимыми, так как должны выполняться условия баланса $\varphi_S + \varphi_L = 1$ и $c_A + c_B = 1$. Несмотря на линейную зависимость параметров порядка и концентраций, модель (3.35)–(3.38) записана для полного набора независимых переменных φ_S , φ_L , c_A , c_B , что позволяет при необходимости расширить ее на случай многофазной и многокомпонентной системы.

В приближении идеального раствора плотности свободной энергии G_S и G_L записываются в виде

$$\begin{aligned} G_S(T, c_\alpha) &= \frac{RT}{V_m} \left(c_A \ln c_A + c_B \ln c_B + c_A F_A(T) + c_B F_B(T) \right), \\ G_L(T, c_\alpha) &= \frac{RT}{V_m} (c_A \ln c_A + c_B \ln c_B), \end{aligned} \quad (3.39)$$

где R — универсальная газовая постоянная, T — температура, V_m — молярный объем. Безразмерные функции F_A и F_B определяются из условия равновесия фаз и для равновесной фазовой диаграммы с прямыми линиями ликвидуса и солидуса имеют вид [147]

$$F_A(T) = \ln \left(\frac{1 + (T_m - T)/m_e}{1 + k_{eB}(T_m - T)/m_e} \right), \quad (3.40)$$

$$F_B(T) = -\ln k_{eB},$$

где k_{eB} — коэффициент распределения примесного компонента В, рассчитанный по равновесной диаграмме состояния ($k_{eB} = c_S/c_L$, где c_S и c_L — концентрация компонента В в твердой и жидкой фазах соответственно на границе раздела фаз), m_e — тангенс угла наклона равновесной линии ликвидуса.

В настоящее время численное решение уравнений модели ФП в пространстве трех или двух измерений с использованием реальной нанометрической ширины диффузной границы δ затруднительно из-за высоких затрат вычислительного времени и аномального использования памяти компьютера при расчетах. Поэтому для многих практически значимых задач структурообразования при численном решении уравнений модели ФП применяется увеличение параметра δ ширины границы на два или три порядка по величине [22]. При этом, однако, сама граница аккумулирует примесь сверх равновесного значения даже при малой скорости затвердевания. Поэтому введение в модель потока антитраппинга (так называемого антизахвата) $\vec{j}_\alpha^{AT}$ в уравнении (3.37) необходимо для коррекции химического состава внутри широкой диффузной границы. В настоящей работе учет $\vec{j}_\alpha^{AT}$ проведен на основе расширения модели ФП, предложенного Кармой [148]:

$$\vec{j}_\alpha^{AT} = -a_{AT}\delta(1 - k_{e\alpha})c_{L\alpha}e^{u(c_\alpha, \varphi_L)} \frac{\partial \varphi_L}{\partial t} \frac{\nabla \varphi_L}{|\nabla \varphi_L|}, \quad (3.41)$$

где $a_{AT} = 1/(2\sqrt{2})$ — константа, определенная из условия нормировки, $c_{L\alpha} = c_\alpha^0/k_{e\alpha}$ — концентрация химического компонента α на фазовой

границе, а функция $u(c_\alpha, \varphi_L)$ определена как

$$u(c_\alpha, \varphi_L) = \frac{2c_\alpha/c_\alpha^0}{1 + k_{e\alpha} - (1 - k_{e\alpha})\varphi_L}. \quad (3.42)$$

Поток (3.41) обеспечивает диффузию примеси из границы для уменьшения ее аномальной концентрации, получающейся в результате аномального захвата примеси широкой диффузной границей.

Помимо антитраппинга необходимо учесть коррекцию на кинетику движения широкой границы, то есть при увеличении ширины границы нужно менять и ее мобильность. Метод ФП предполагает выполнение скейлинговых зависимостей между физическими параметрами (поверхностной энергией и шириной диффузной границы) и параметрами самого фазового поля (мобильностью). Проведенный анализ показал [149], что для согласованности модели мобильность должна изменяться обратно пропорционально квадрату ширины границы:

$$M_\varphi \sim 1/\delta^2. \quad (3.43)$$

Поэтому при увеличении ширины границы, например, на порядок величины, необходимо уменьшить значение мобильности фазового поля на два порядка по величине.

Модель (3.35)–(3.43) фазового перехода в двухфазной двухкомпонентной системе записана в изотермическом приближении, когда температура T принимается на рассматриваемом масштабе одинаковой в различных точках системы, но меняющейся во времени. Действительно, оценки характеристических масштабов неоднородности теплового поля l_T и градиентов температур в порошковом слое показывают, что это приближение будет справедливо на масштабах порядка 1 мкм при общей глубине порошкового слоя от 40 до 100 мкм. Размер частиц порошка в эксперименте составлял порядка 1 мкм. В качестве граничных условий задается нулевой градиент параметров порядка и отсутствие потока компонентов на границе $\partial\Omega$ расчетной области. В начальный момент времени $t = 0$ имеется неоднородное распределение переменных $\varphi_1, \varphi_2, c_A, c_B$ в

соответствии с наблюдаемым в эксперименте распределением компонентов и фаз:

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \cdot (\nabla \varphi_i) \big|_{\partial\Omega} &= 0, \quad \mathbf{n} \cdot (\nabla c_\alpha) \big|_{\partial\Omega} = 0, \\ \varphi_i \big|_{t=0} &= \varphi_i^0(\mathbf{r}), \quad c_\alpha \big|_{t=0} = c_\alpha^0(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (3.44)$$

где $\mathbf{n}$ — вектор нормали к границе $\partial\Omega$ и $\mathbf{r}$ — радиус-вектор.

МОДЕЛЬ КОНСОЛИДАЦИИ ПОРОШКА

Расчет течения многофазной среды при консолидации частиц порошка выполнен с помощью модели [82] фазового поля, сформулированной [150] для текучих сред. Пусть агрегатное состояние системы в каждой точке характеризуется переменной φ фазового поля, которая для задачи двухфазного течения соответствует объемной доле жидкой фазы. Тогда в предельных случаях $\varphi = 1$ и $\varphi = 0$ определяют только жидкую или только газовую фазу, рис. 3.7. Очевидно, что φ соответствует относительной локальной плотности системы как

$$\frac{\rho}{\rho_{\max}} = 1 - \varepsilon = \frac{1}{V} \int_V \varphi(\vec{r}) dV. \quad (3.45)$$

где ε — пористость, введенная в модель на макроскопическом уровне ранее. Тогда свободная энергия Гельмгольца двухфазной системы при постоянных давлении p и объеме V содержит вклады как обеих фаз, так и поверхностного натяжения вдоль поверхности раздела S :

$$F(\varphi) = \int_V [f(\varphi) + 0,5 \kappa (\nabla \varphi)^2 dV] + \int_S \gamma(\varphi) dS, \quad (3.46)$$

где κ — градиентный коэффициент, $\gamma(\varphi)$ — функция поверхностного натяжения от φ . Если в системе задано постоянное давление $p = p_0$, то для соответствия газовой фазы значению $\varphi = 0$ плотность свободной энергии должна быть определена через двухямный потенциал вида

$$f(\varphi) = -p_0 + \Delta f(\varphi); \quad \Delta f(\varphi) = 0,25 W \varphi^2 (1 - \varphi)^2, \quad (3.47)$$

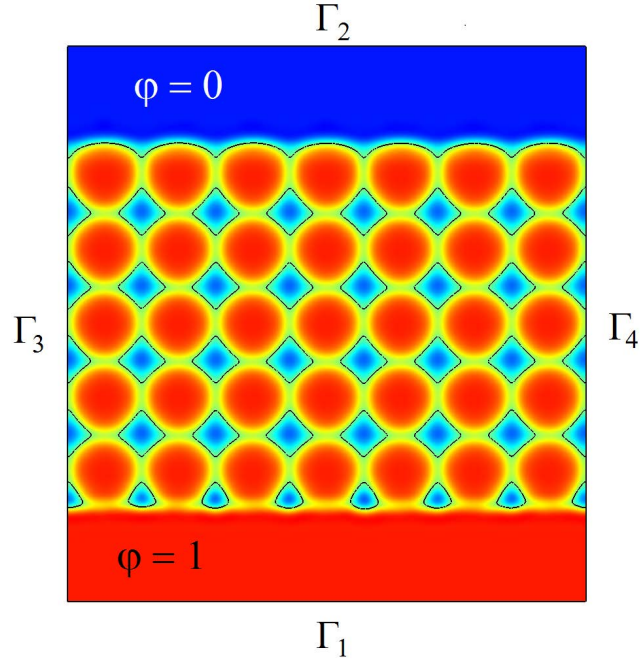


Рис. 3.7. Двухфазная область в порошковом слое в начале лазерного плавления. Красный и синий цвета соответствуют жидкому металлу $\varphi = 1$ и газовым порам $\varphi = 0$. Желтый и зеленый цвета соответствуют диффузной зоне, вводимой на границе жидкой и газообразной фаз в модели фазового поля. В нижней части области на Γ_1 задан слой жидкого металла ($\varphi = 1$), формирующийся при плавлении подложки. В верхней части на Γ_2 задана газовая атмосфера ($\varphi = 0$). Граница раздела определяется изоуровнем $\varphi = 0.5$.

где W является высотой барьера в потенциале. Переход между фазами происходит через диффузную границу шириной h , в которой реологические свойства плавно меняются согласно

$$\mu(\varphi) = \mu_{\text{жид.}} \psi_0(\varphi) + \mu_{\text{газ.}} (1 - \psi_0(\varphi)), \quad (3.48)$$

$$\rho(\varphi) = \rho_{\text{жид.}} \psi_0(\varphi) + \rho_{\text{газ.}} (1 - \psi_0(\varphi)), \quad (3.49)$$

$$(3.50)$$

где μ , $\mu_{\text{жид.}}$ и $\mu_{\text{газ.}}$ — эффективная абсолютная вязкость и вязкость жидкой/газовой фаз соответственно, плотность ρ имеет аналогичную схему обозначений. Интерполяционная функция $\psi_0(\varphi)$ в работе выбрана в виде

полинома 3-й степени:

$$\psi_0(\varphi) = \begin{cases} 0, & \varphi \leq 0, \\ \varphi^2 (3 - 2\varphi), & 0 < \varphi < 1, \\ 1, & \varphi \geq 1. \end{cases} \quad (3.51)$$

С учетом этих определений и предполагая несжимаемость среды, основные уравнения модели консолидации порошка принимают вид:

$$\rho(\varphi) \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \mu(\varphi) (\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T) + \rho(\varphi) \vec{g} + M \nabla \varphi, \quad (3.52a)$$

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0, \quad (3.52b)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \varphi = \nabla \cdot (B \nabla M), \quad (3.53a)$$

$$M = \frac{\partial f}{\partial \varphi} - \kappa \nabla^2 \varphi, \quad (3.53b)$$

где $\vec{v}$ — скорость гидродинамического течения, $\vec{g}$ — ускорение свободного падения, M — химический потенциал, B — мобильность.

Уравнения (3.52) Навье-Стокса определяют баланс импульса в двухфазной системе. Градиент вязкости не учитывается, поскольку его вклад незначителен. В дополнение к традиционному градиентному, вязкостному и гравитационному слагаемым уравнение (3.52) включает слагаемое $M \nabla \varphi$ с поверхностным натяжением. Возможны различные варианты определения этого слагаемого [151], все из которых физически корректны, но обладают разной вычислительной сложностью. Наиболее простой и численно стабильный вариант использован в (3.52). Уравнение (3.53) описывает изменение фазового поля во времени и учитывает как конвективный, так и диффузионный механизмы переноса фазового поля, т.е. границы раздела фаз.

Краевая задача определена следующим образом. Для фазового поля φ определены условие Дирихле на Γ_1 и Γ_2 и периодические граничные условия на Γ_3 и Γ_4 , рис. 3.7. Для химпотенциала задан нулевой

поток на Γ_1 и Γ_2 и периодические условия на Γ_3 и Γ_4 . Для скорости $\vec{v}$ течения задается условие прилипания на Γ_1 и свободная поверхность (давление и отсутствие вязких напряжений) на Γ_2 . В начальный момент времени $t = 0$ в расчетной области задаются периодическая структура расплавленных металлических капель:

$$\varphi = 1 \text{ на } \Gamma_1, \quad \varphi = 0 \text{ на } \Gamma_2, \quad (3.54a)$$

$$\nabla M = 0 \text{ на } \Gamma_1 \text{ и } \Gamma_2, \quad (3.54б)$$

$$\vec{v} = 0 \text{ на } \Gamma_1, \quad \tau = 0, \quad p = p_0 \text{ на } \Gamma_2, \quad (3.54в)$$

$$\varphi, M, \vec{v}, p \text{ периодичны на } \Gamma_3 \text{ и } \Gamma_4, \quad (3.54г)$$

$$\varphi = \varphi_0(\vec{r}), \quad M = M(\varphi_0(\vec{r})), \quad \vec{v} = \vec{0}, \quad p = p_0 \text{ при } t = 0. \quad (3.54д)$$

3.3. Алгоритмическая компоновка двухуровневой модели и численная реализация

Схема алгоритмической компоновки двухуровневой модели ВЛП/СЛП приведена на рис. 3.8. На макроуровне решаются сопряженные уравнения (3.1), (3.2), (3.3) и (3.17) для температуры T , энтальпии H , пористости ε и положения Z границы порошкового слоя соответственно. На мезоуровне производится описание физических эффектов, которые имеют локальный характер. Это анализ эффективной теплопроводности, консолидации порошка и сегрегации химических компонентов. Поскольку все процессы мезоуровня обладают малой корреляционной длиной, задачи мезоуровня возможно решать как локальные и несопряженные.

На схеме рис. 3.8 приведены данные макроуровня, передаваемые с макроуровня на мезоуровень и используемые для постановки краевых задач мезоуровня. К ним относятся поля переменных макроуровня: нестационарное температурное поле $T(t, \vec{r})$ и мгновенное распределение $\varepsilon(\vec{r})$ пористости. С мезоскопического уровня на макроуровень передаются замыкающие уравнения, кинетические и термодинамические парамет-

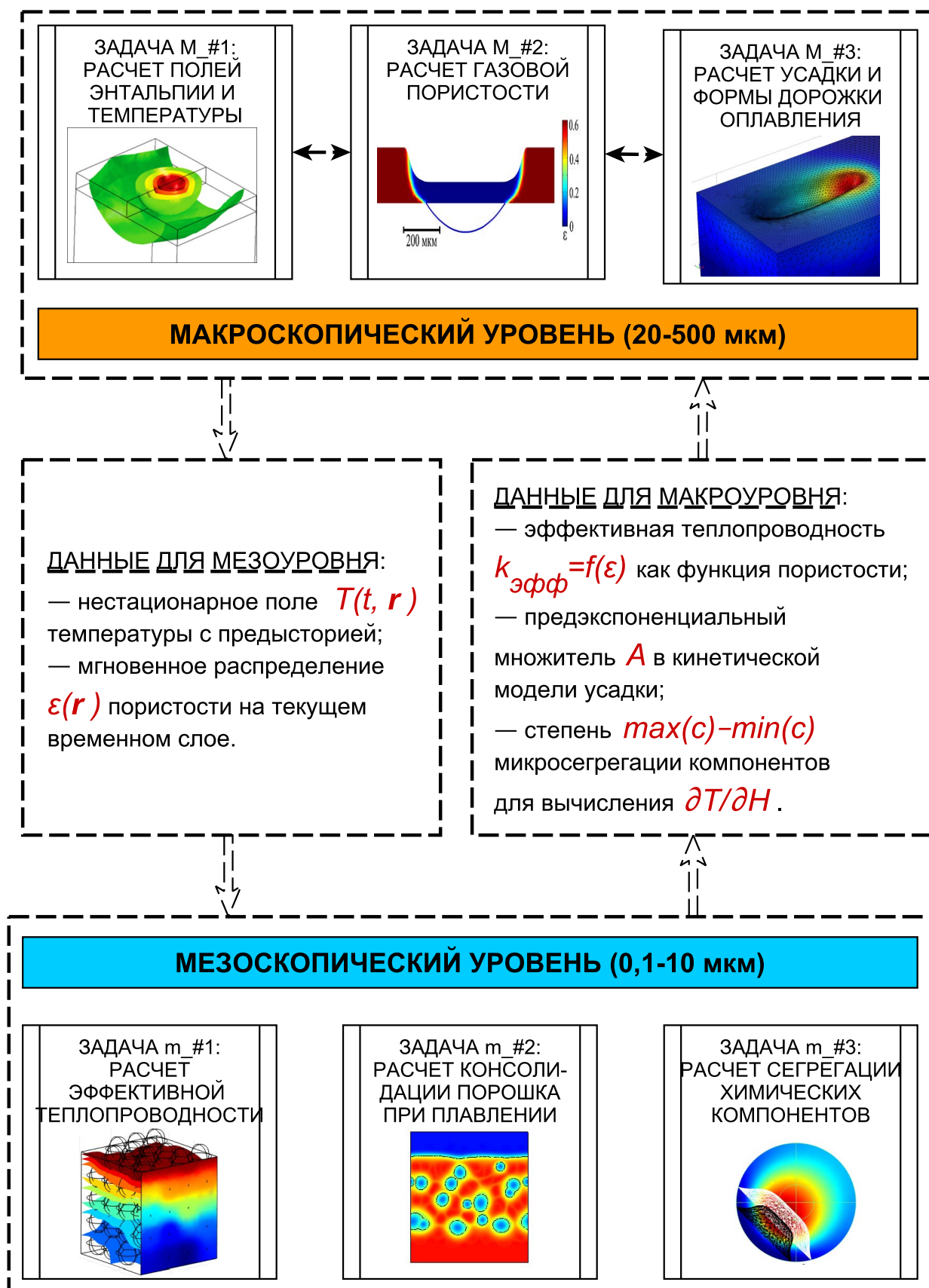


Рис. 3.8. Схема разбиения задач и согласования решений на макро- и мезоуровнях при описании ВЛП/СЛП порошков.

ры для уточнения уравнений макроуровня. К ним относятся функция эффективной теплопроводности $k_{\text{эфф.}}(\varepsilon)$, параметр A кинетической модели усадки и степень сегрегации $c_{\text{max}} - c_{\text{min}}$ компонентов для определения производной $\partial T / \partial H$ в уравнении для энтальпии H .

Поскольку задачи мезоуровня решаются только в отобранном множестве мезообъемов, характеризующем все мезообъемы, то требуется процедура аппроксимации решений в других мезообъемах. На основании переданных с мезоуровня данных конструируется карта микроструктурных состояний, которая далее интерполируется на всю расчетную область макроуровня. Предложенная схема согласования подробно обсуждалась в разделе 2.3 на стр. 107. Рисунок 2.5 в том же разделе поясняет схему согласования для задачи лазерной обработки. Общая структура алгоритма решения двухуровневой задачи приведена на рис. 3.9.

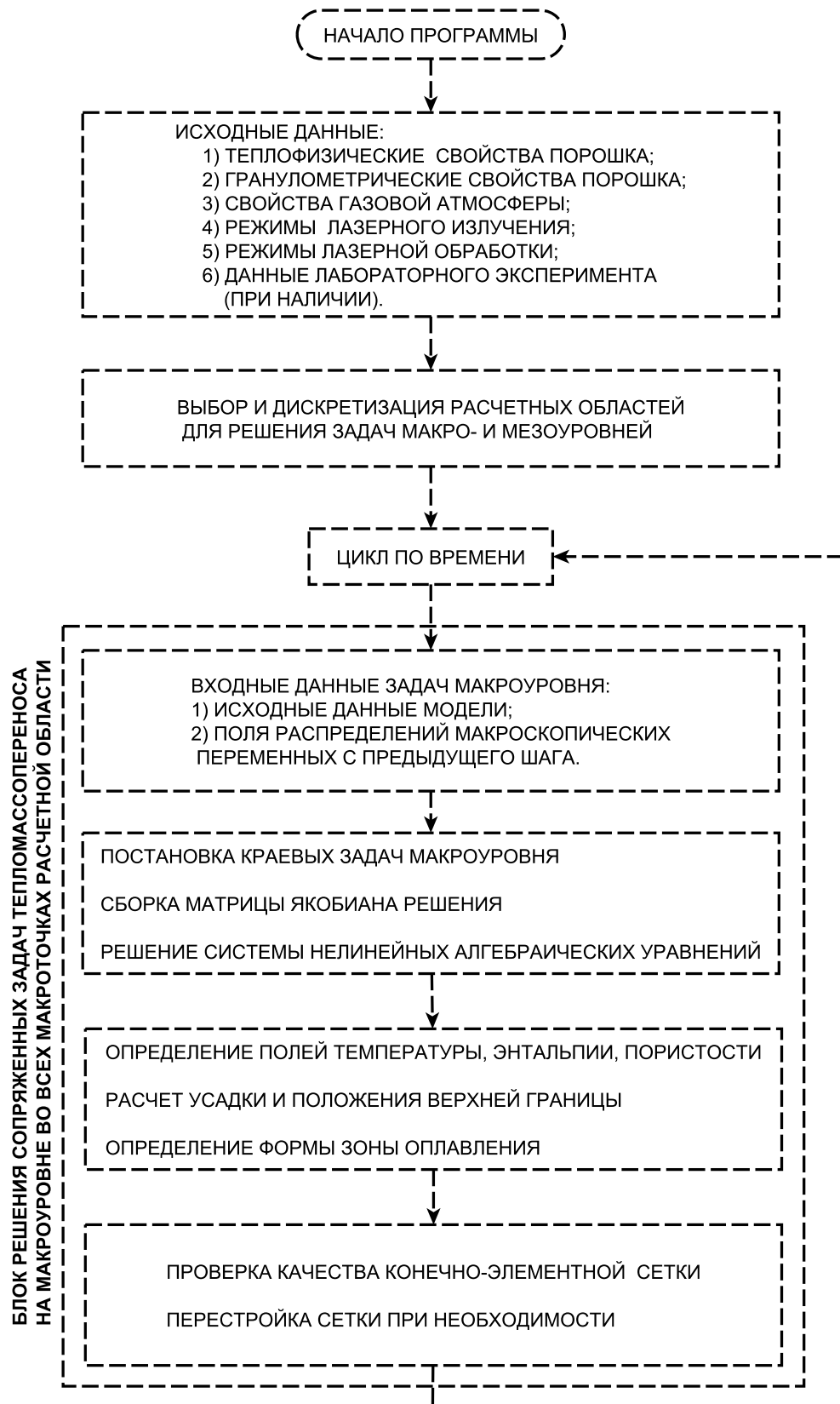
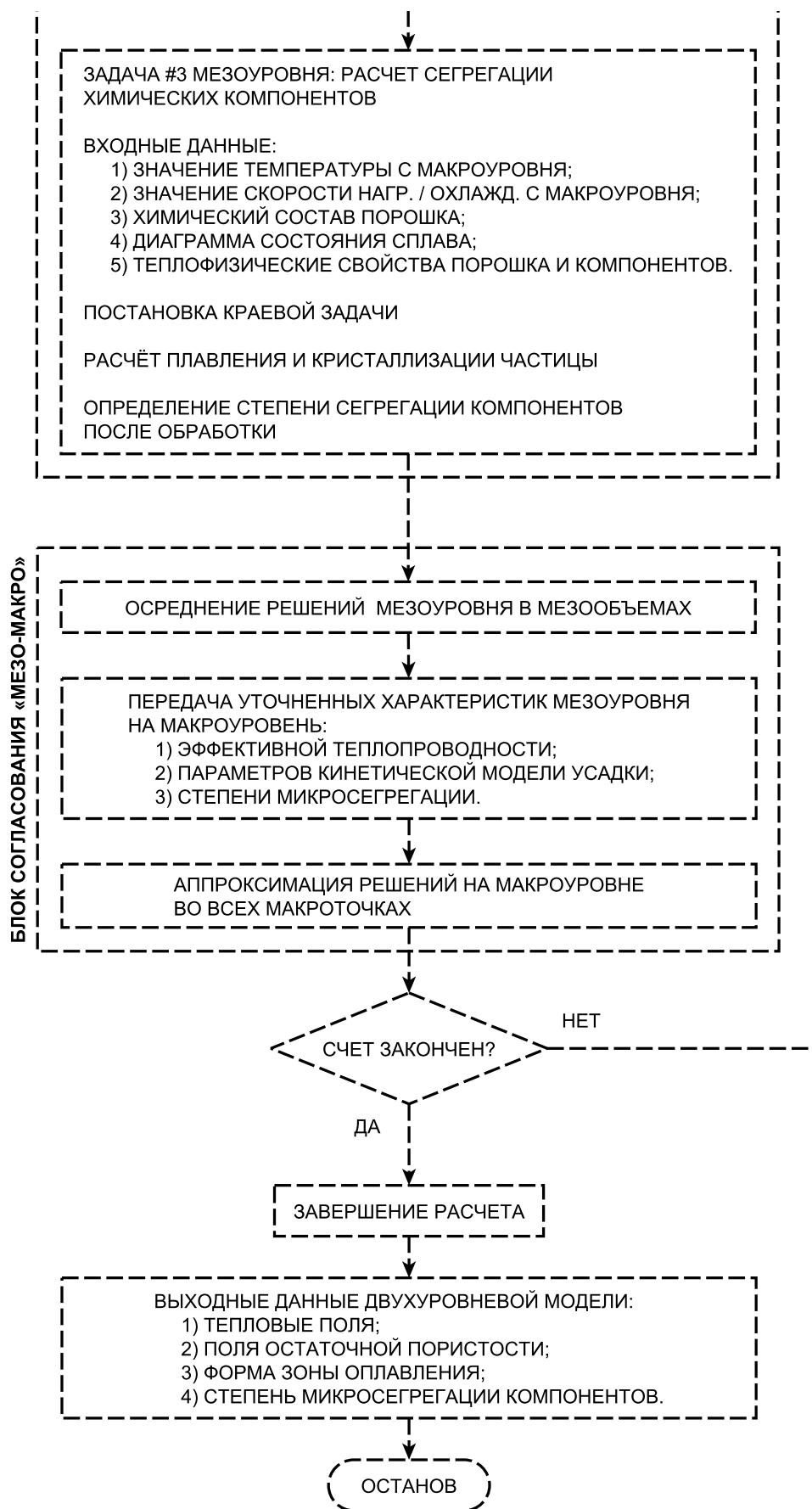


Рис. 3.9. Блок-схема алгоритма двухуровневого моделирования процессов лазерного плавления металлических порошков.





Конец рисунка.

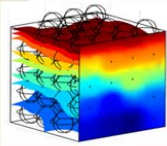
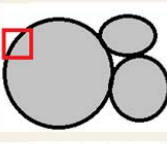
масштаб. уровень	моделир. объект	представит. объем	характеристики
макро	порошковый слой		от 1/10 до 1/7 толщины слоя → от 3 ³ до 5 ³ частиц
мезо	ансамбль частиц		от 1/10 до 1/7 диаметра частицы
атомный	фазовая граница		от 1/10 до 1/7 ширины границы

Рис. 3.10. Выбор представительного объема на разных масштабных уровнях.

Одним из важных этапов построения двухуровневой модели является выявление представительного объема (ПО) на каждом масштабном уровне. Ошибка на данном этапе приводит либо к неверным результатам моделирования, либо к неэффективной дискретизации вычислительной области. Схема на рис. 3.10 определяет алгоритм выбора ПО на разных масштабных уровнях. На макроуровне размер точки интегрирования принимается как $1/10 \div 1/7$ от толщины порошкового слоя, что содержит от 33 до 53 частиц порошка и соответствует ПО макроуровня. При расчете эффективной теплопроводности, консолидации и сегрегации на мезоуровне точка интегрирования выбирается меньше ширины фазовой границы h_φ и много меньше размера частиц. Это позволяет решать многофазную задачи и обеспечивает представительность точки интегрирования, поскольку она много больше ПО атомного уровня. Отметим, что h_φ увеличен в расчетах до $h_\varphi \sim 0,1 \div 1$ мкм, поскольку было доказано [152], что МФП сводится к пределу резкой границы и позволяет искусственно увеличивать h_φ при контролируемой потере точности.

Для решения разработанной физико-математической модели (3.1)–(3.54) ВЛП/СЛП использовались численные методы. Дифферен-

циальные уравнения сводились к системе линейных уравнений методом конечных элементов (МКЭ) в классической постановке Галеркина [153, 154]. В трехмерной постановке зависимые переменные T , H , ε интерполируются базисными линейными функциями $[N]$ на каждом элементе l построенной конечно-элементной сетки:

$$T(l) = N_i \Phi_{1i} + N_j \Phi_{1j} + N_k \Phi_{1k} + N_p \Phi_{1p} = [N] \{\Phi_1\}, \quad (3.55a)$$

$$H(l) = N_i \Phi_{2i} + N_j \Phi_{2j} + N_k \Phi_{2k} + N_p \Phi_{2p} = [N] \{\Phi_2\}, \quad (3.55б)$$

$$\varepsilon(l) = N_i \Phi_{3i} + N_j \Phi_{3j} + N_k \Phi_{3k} + N_p \Phi_{3p} = [N] \{\Phi_3\}, \quad (3.55в)$$

где Φ_1 , Φ_2 и Φ_3 — значения зависимых переменных T , H , ε в узлах трехмерного конечного элемента, скобки $[]$ и $\{\}$ соответствуют вектору-строке и вектору-столбцу. Важной особенностью построенной численной модели является зависимость базисных функций от другой зависимой переменной Z , так как положение узлов сетки в порошковом слое меняется во времени в результате усадки. Для упрощения модели положение узлов z сетки внутри порошкового слоя принято пропорциональным смещению Z верхней границы и вычисляется из соотношения $z = z_0 (Z/h_0)$, где z_0 — начальное положение узлов КЭ сетки. В двумерном пространстве $\partial\Omega_{Top}$, где двумерный элемент является гранью трехмерного, зависимая переменная Z интерполируется следующими линейными функциями:

$$Z(x, y) = Z(l) = L_i Z_i + L_j Z_j + L_k Z_k = [L] \{Z\}. \quad (3.56)$$

Далее нестационарные уравнения (3.1), (3.2), (3.3), (3.17) записывались в вариационной постановке по методу невязок, где в качестве

весовых функций использовались базисные функции

$$\int_{\Omega_P + \Omega_S} [N]^T \left(\frac{\partial \left[\frac{\partial T}{\partial H}(H) N \right] \{\Phi 2\}}{dt} - \frac{\partial [N] \{\Phi 1\}}{dt} \right) dV = 0, \quad (3.57a)$$

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_P} [N]^T \left(\nabla ([k(\varepsilon) \nabla N] \{\Phi 1\}) - \frac{\partial [(1 - \varepsilon) N] \{\Phi 2\}}{dt} \right) dV + \\ & \int_{\Omega_S} [N]^T \left(\nabla ([k_0 \nabla N] \{\Phi 1\}) - \frac{\partial [N] \{\Phi 2\}}{dt} \right) dV + \\ & + \int_{\partial \Omega_{Top}} [L]^T F(x, y, t) dS = 0, \end{aligned} \quad (3.57б)$$

$$\int_{\Omega_P} [N]^T \left(- \left[A \exp \left(- \frac{E_a}{RT} \right) N \right] \{\Phi 3\} - \frac{\partial [N] \{\Phi 3\}}{dt} \right) dV = 0, \quad (3.57в)$$

$$\int_{\partial \Omega_{Top}} [L]^T \left(\left(\frac{(1 - \varepsilon_0) h_0}{h_0 - \int_z \varepsilon dz} - 1 \right) h_0 - [L] \{Z\} \right) dS = 0. \quad (3.57г)$$

Далее полученные вариационные уравнения приводились к матричному виду, при этом учитывалось, что некоторые матричные элементы нельзя выносить из-под знака производной по времени, поскольку они зависят от изменяющейся во времени переменной Z . Следующим шагом является запись численной схемы для нестационарной задачи. Использовалась формула дифференцирования назад первого порядка. Это соответствует линейной аппроксимация по времени, что сводится к разностной схеме Эйлера. Выбор первого порядка обсуждался ранее и связан с высокой нестационарностью процесса. Формула дифференцирования назад второго и более высоких порядком дает плохую сходимость для задачи импульсной лазерной обработки. В момент включения импульса решение быстро меняется. Таким образом используемый в формулах дифференцирования назад и Рунге-Кутты прием понижения ошибки аппроксимации за счет исключения более высоких членов разложения оказывается неэффективным. После всех преобразования получается нелинейная система уравнения для значений переменных в узлах сетки, которая решалась методом Ньютона-Рафсона [155] с применением пакетов линейной

алгебры. Вывод уравнений численной модели подробно отражен в работах [83, 156]. Система вариационных уравнений (3.57) для всех конечных элементов в итоге сводится к следующему матричному виду

$$[K_1]\{\Phi 1\}^{(n)} + [K_2]\{\Phi 2\}^{(n)} + \{F_1\} = 0, \quad (3.58a)$$

$$[K_3]\{\Phi 1\}^{(n)} + [K_4]\{\Phi 2\}^{(n)} + \{F_2\} = 0, \quad (3.58б)$$

$$[K_5]\{\Phi 3\}^{(n)} + \{F_3\} = 0, \quad (3.58в)$$

$$[K_6]\{Z\}^{(n)} + \{F_4\} = 0, \quad (3.58г)$$

где матрицы $[K_i]$ и столбы $\{F_j\}$ определены выражениями

$$[K_1] = - \int_{Al} [N]^T [N] dA \Big|^{(n)}, \quad (3.59a)$$

$$[K_2] = \int_{Al} [N]^T \left[\frac{\partial T}{\partial H} (\Phi 2^{(k)}) N \right] dA \Big|^{(n)}, \quad (3.59б)$$

$$\begin{aligned} \{F_1\} = & - \int_{Al} [N]^T [N] dA \Big|^{(n-1)} \{\Phi 1\}^{(n-1)} - \\ & - \int_{Al} [N]^T \left[\frac{\partial T}{\partial H} (\Phi 2^{(n-1)}) N \right] dA \Big|^{(n-1)} \{\Phi 2\}^{(n-1)}, \end{aligned} \quad (3.59в)$$

$$\begin{aligned} [K_3] = & \left(- \int_{Al \in \Omega P} [\nabla N]^T \left[k(\Phi 3^{(k)}) \nabla N \right] dA - k_0 \int_{Al \in \Omega S} [\nabla N]^T [\nabla N] dA \right) \Big|^{(n)} \Delta t - \\ & - \left(\int_{Sl \in \partial \Omega Top} [L]^T [h(\Phi 1^{(k)}) L] dS \right) \Delta t, \end{aligned} \quad (3.60a)$$

$$[K_4] = - \int_{Al \in \Omega P} [N]^T [(1 - \Phi 3^{(k)}) N] dA - \int_{Al \in \Omega S} [N]^T [N] dA \Big|^{(n)}, \quad (3.60б)$$

$$\begin{aligned} \{F_2\} = & \left(- \int_{Al \in \Omega P} [N]^T [(1 - \Phi 3^{(n-1)}) N] dA - \int_{Al \in \Omega S} [N]^T [N] dA \right) \times \\ & \times \{\Phi 2\} \Big|^{(n-1)} + \left[(F(x, y, t) + h(\Phi 1^{(k)}) T_{\text{окр.}} + \right. \\ & \left. + \sigma \sigma_{SB} (T_{\text{окр.}}^4 - (\Phi 1^{(k)})^4) \right) \int_{Sl \in \partial \Omega Top} L dS \Big]^T \Big|^{(n)} \Delta t, \end{aligned} \quad (3.61a)$$

$$[K_5] = \left(- \int_{Al \in \Omega P} [N]^T \left[A \exp \left(- \frac{E_a}{R \Phi 1^{(k)}} \right) N \right] dA \right) \Big|^{(n)} \Delta t - \quad (3.62a)$$

$$- \int_{Al} [N]^T [N] dA \Big|^{(n)}, \quad (3.62б)$$

$$\{F_3\} = - \int_{Al} [N]^T [N] dA \{\Phi 3\} \Big|^{(n-1)}, \quad (3.62в)$$

$$[K_6] = - \int_{Sl \in \partial \Omega Top} [L]^T [L] dA \Big|^{(n)}, \quad (3.62г)$$

$$\{F_4\} = \left[\left(\frac{(1 - \varepsilon_0) h_0}{h_0 - \int_z \varepsilon dz} - 1 \right) h_0 \int_{Sl \in \partial \Omega Top} L dS \right]^T \Big|^{(n)}. \quad (3.62д)$$

Представленный матричными уравнениями (3.59)–(3.62) алгоритм реализован с помощью программного кода, написанного на высокоуровневом языке среды MatLab R2013a, и его создание включало два этапа. На первом этапе был написан текст М-файла программы, содержащего операции в соответствии с алгоритмом реализации, уравнения, вспомогательные функции и значения всех параметров модели. Дальнейшее выполнение алгоритма осуществлялось интерпретатором согласно указаниям в программе. Синтезируемый М-файл соответствовал формату, установленному для программного пакета Comsol Multiphysics 4.3. На втором этапе реализации выполнялись экспорт М-файла на сервер пакета Comsol Multiphysics, запуск, проведение расчетов по заложенному в модели алгоритму, а также сохранение данных на внешнем носителе для последующего анализа и визуализации. При решении системы приведенных линейных уравнений использовался прямой решатель MUMPS [99] с возможностью параллелизации. Созданные вычислительные модели были объединены в программный комплекс “Программный комплекс “Компьютерная оптимизация процессов лазерной обработки порошков” [92], свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2010614748, рис. А.1 в Приложениях.

3.4. Идентификация параметров и верификация модели

Идентификация параметров модели производилась на основе результатов лабораторного эксперимента и литературных данных, табл. 3.4. Большинство параметров определялось прямыми и косвенными методами измерений при подготовке и проведении экспериментов в рамках выполненных научных исследований. Ряд параметров, например, температурозависимые коэффициент поглощения и удельная теплоемкость, брались из литературы из-за высокой трудоемкости их экспериментального определения. В Приложениях в табл. Б.1 приведены значения теплофизических параметров, использованные в расчетах.

Верификация модели включала два этапа. На первом этапе производилась проверка баланса сохраняющихся величин и сравнение с аналитическими решениями:

1. Проверка выполнения баланса энтальпии системы для частного случая плавления порошкового слоя, к которому подводится энергия ЛИ и отсутствует теплоотвод.
2. Сравнение с аналитическим решением для задачи нагревания полубесконечной сплошной среды круговым поверхностным источником [142].
3. Сравнение с аналитическим решением задачи Стефана для плавления полубесконечной среды при фиксированном тепловом потоке на границе.

Все проверки показали согласие с аналитическим решением в пределах 5% при расчетах на мелкой разностной сетке. Второй этап верификации включал сравнение с данными лабораторного эксперимента по импульсной лазерной обработке порошка железа. Для этого использовались одинаковые матрицы вычислительного и лабораторного эксперимента, где варьируемыми параметрами являлись энергия и длительность импульсов. Полученные в лабораторном эксперименте микрошлифы (более 80)

Таблица 3.4

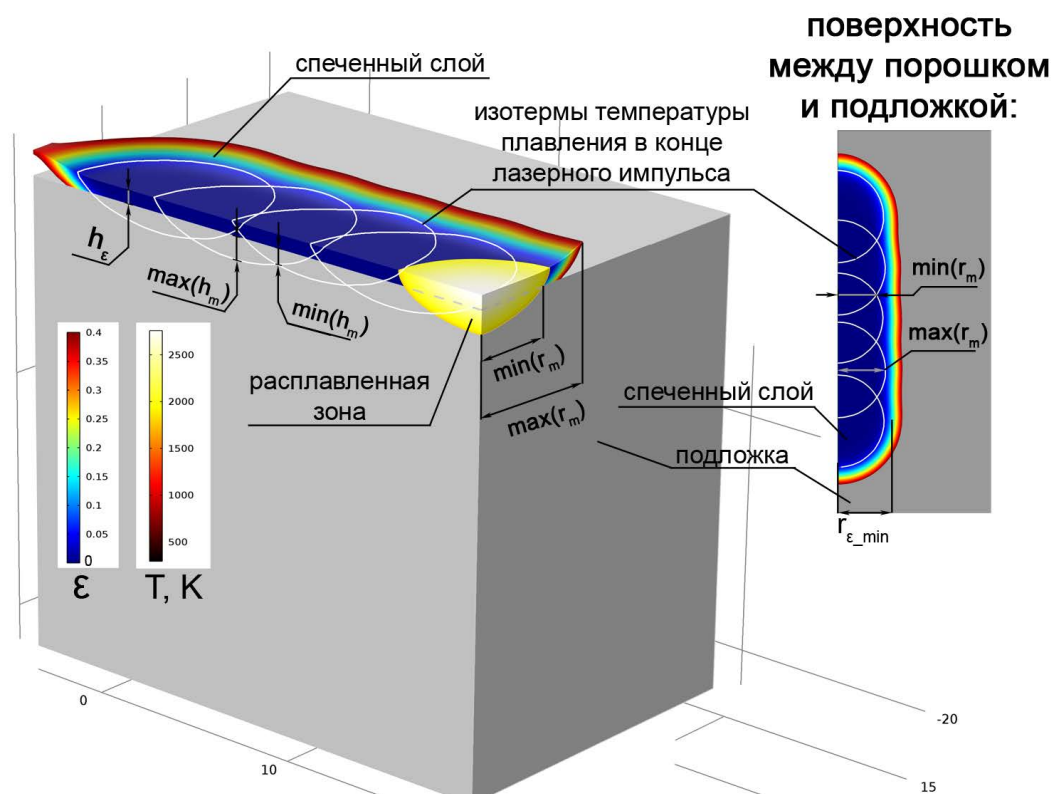
Идентификация параметров модели ВЛП/СЛП на основе выполненных лабораторных экспериментов и литературных данных

параметр модели	лабор. экспер.	литература (теор.расч.)	литература (экспер.)
<i>1-я группа: теплофизические свойства порошка</i>			
теплопроводность	да		
удельная теплоемкость		да	да
теплота фазового перехода		да	да
плотность и пористость	да		
химический состав	да		
коэффициент поглощения ЛИ		да	да
коэффициент затухания ЛИ	да	да	
<i>2-я группа: гранулометрические свойства порошка</i>			
распределение частиц по размерам	да		
<i>3-я группа: свойства газовой атмосферы</i>			
тип инертной атмосферы	да		
давление газа в камере	да		
степень чистоты газа	да		
<i>4-я группа: режимы лазерного излучения</i>			
энергия импульса	да		
продолжительность импульса	да		
частота генерации импульсов	да		
эффективный диаметр луча	да		
<i>5-я группа: режимы лазерной обработки</i>			
скорость сканирования	да		
тип штриховки	да		

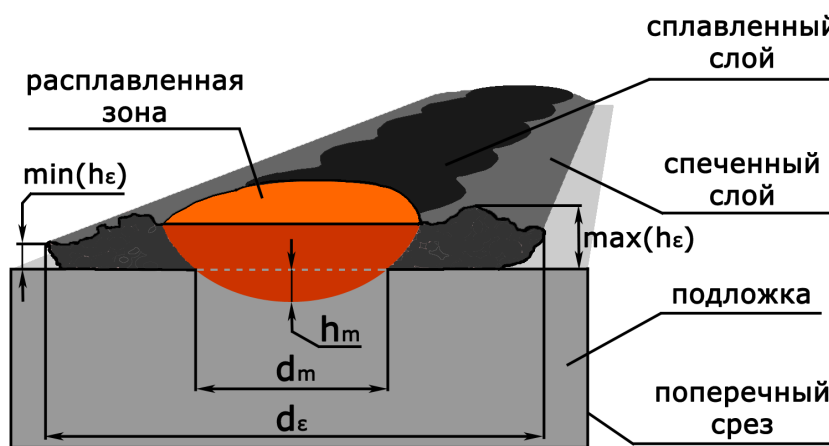
были подвергнуты металлографическому анализу, краткие выводы которого приведены в Приложении в разделе Д.

На рис. 3.11 приведены результаты численного моделирования формы и выбранная параметризация зоны оплавления. При верификации проведено сравнение следующих количественных характеристик: глубины h_m проплавления в подложку; ширины d_m сплавления порошкового слоя и подложки; толщины h_ε и ширины d_ε оплавленной дорожки. Данные параметры одновременно оценивались на шлифах в лабораторном эксперименте и по визуальным изображениям результатов численного эксперимента.

Как видно из рисунков 3.12, 3.13, 3.14 и 3.15, получено удовлетворительное количественное соответствие вычислительного и лабораторного экспериментов. Наблюдаемые отличия в результатах находятся в рамках погрешности математической модели: отсутствием учета поверхностного натяжения на свободной поверхности, отсутствием расчета конвекции в зоне оплавления и потерей вещества при испарении. Таким образом, положительные результаты верификации модели подтверждают возможность ее применения для анализа и оптимизации технологических процессов ВЛП/СЛП металлических порошков.



(а)



(б)

Рис. 3.11. (а) Визуализация результатов численного моделирования плавления порошка железа под действием лазерного излучения с параметрами: $E_{\text{имп.}} = 4,3$ Дж, $R_{\text{луча}} = 400$ мкм, $\tau_{\text{имп.}} = 1,5$ мс, $V_{\text{луча}} = 12$ мм/с, $\nu_{\text{имп.}} = 30$ Гц. (б) Параметризация поперечного сечения дорожек для сравнения результатов вычислительного и лабораторного экспериментов.

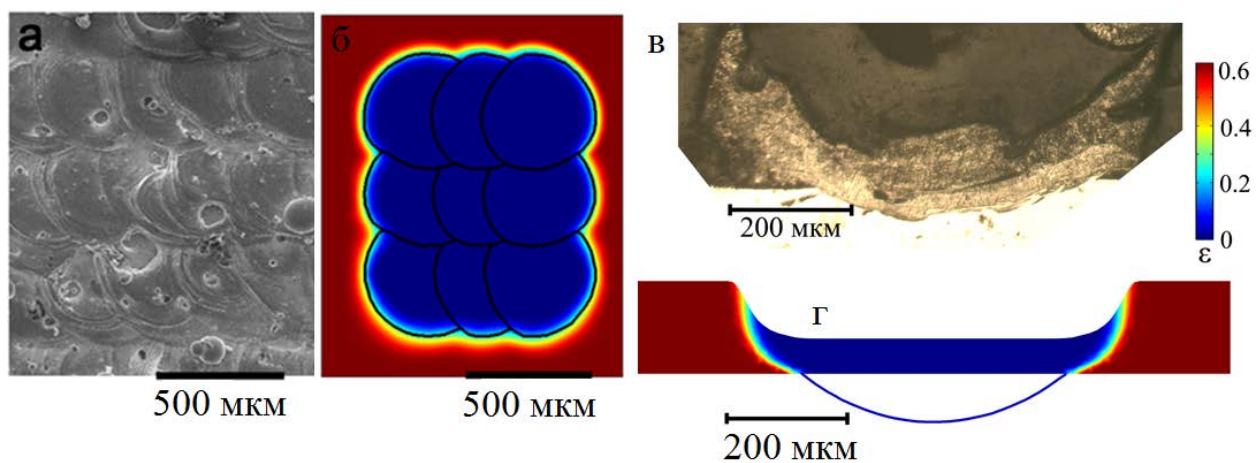


Рис. 3.12. Сравнение результатов расчетов ВЛП/СЛП порошка железа. Вид поверхности дорожки в эксперименте (а) и расчетах (б). Сравнение профиля поперечного сечения дорожки в эксперименте (в) и расчетах (г).

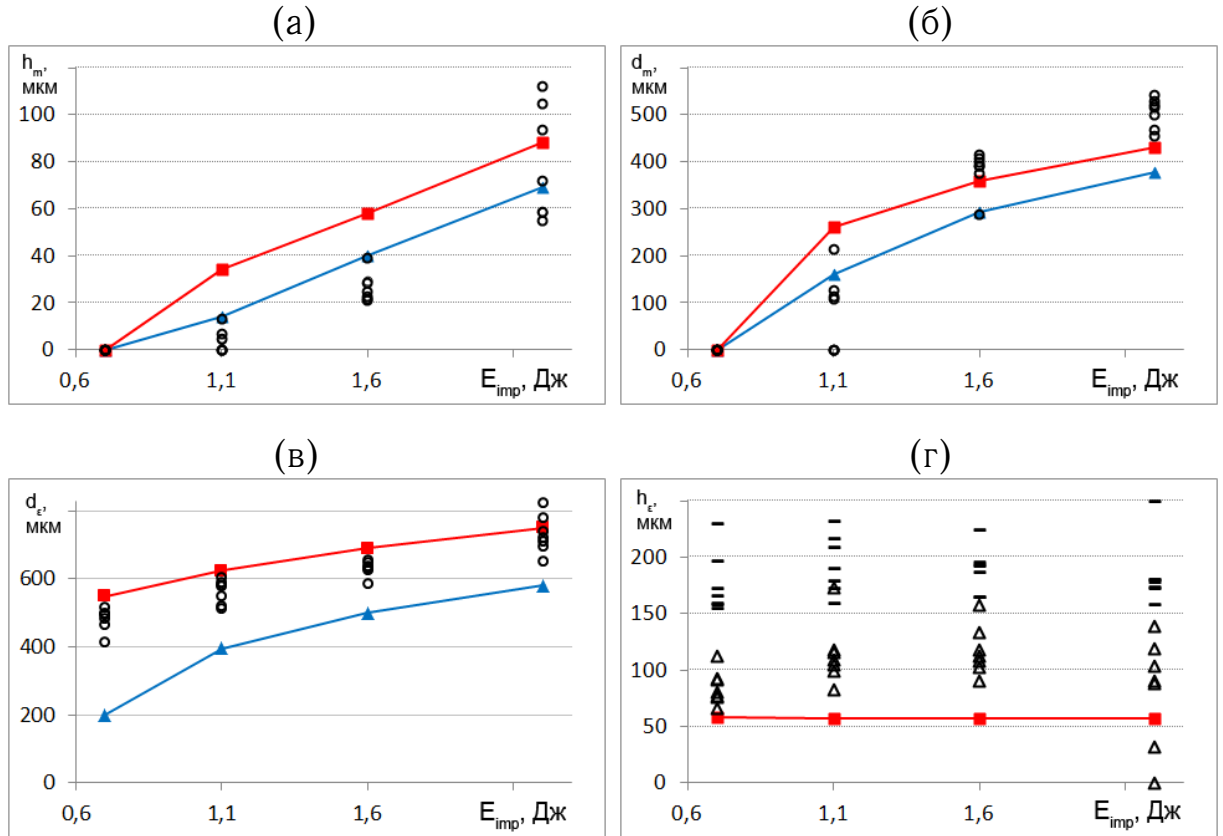


Рис. 3.13. Сравнение результатов вычислительного ($\square$ и $\triangle$) и лабораторного ($\bigcirc$) экспериментов. Влияние энергии импульса $E_{\text{имп.}}$ на характеристики зоны оплавления для параметров лазерного излучения: $R_{\text{луча}} = 200$ мкм, $\tau_{\text{имп.}} = 4$ мс, $V_{\text{луча}} = 10$ мм/с, $\nu_{\text{имп.}} = 50$ Гц. На (а – в) символы $\square$ и $\triangle$ соответствуют максимальному и минимальному значениям характеристик дорожки. На (г) символ $\square$ обозначает толщину h_ϵ дорожки в расчетах, символы $-$ и $\triangle$ показывают максимальное и минимальное значения параметра h_ϵ на образцах.

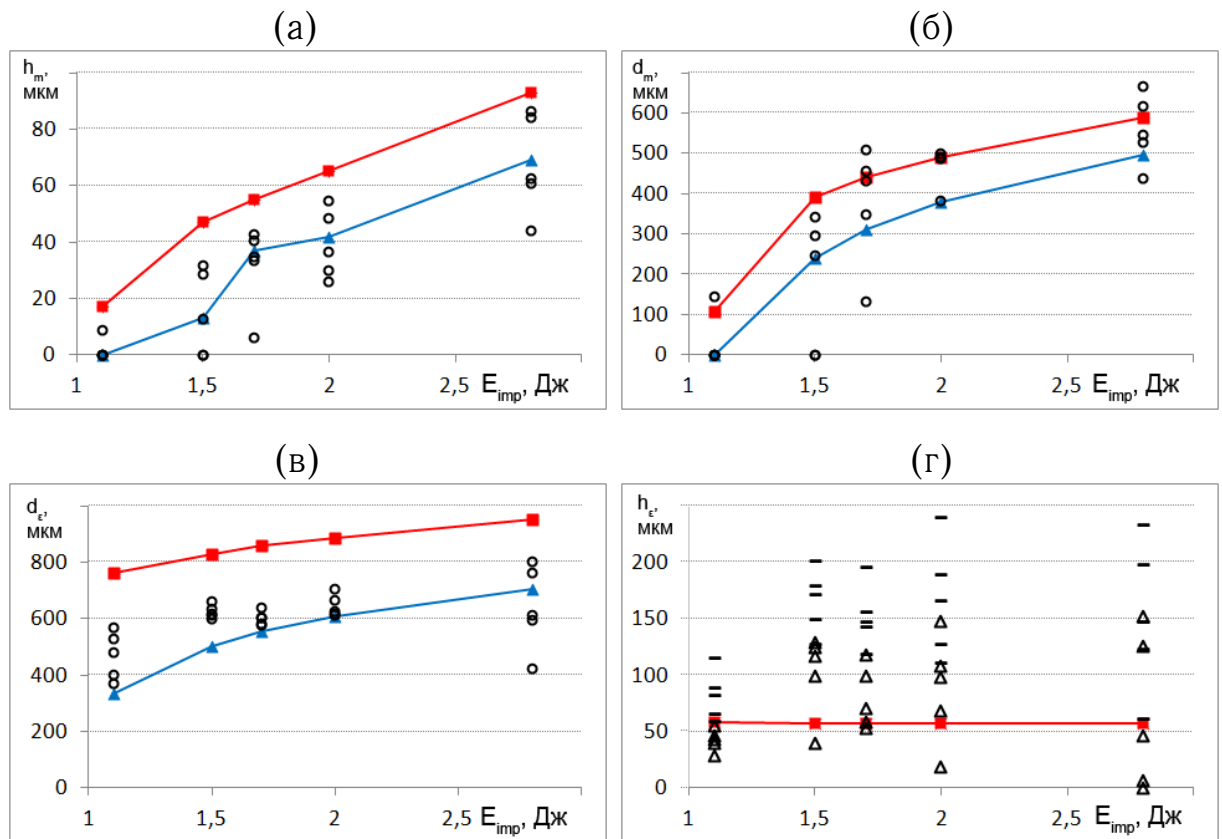


Рис. 3.14. Сравнение результатов вычислительного ($\square$ и $\triangle$) и лабораторного ($\bigcirc$) экспериментов. Влияние энергии импульса $E_{\text{имп.}}$ на характеристики зоны оплавления для параметров лазерного излучения:

$$R_{\text{луча}} = 300 \text{ мкм}, \tau_{\text{имп.}} = 3 \text{ мс}, V_{\text{луча}} = 15 \text{ мм/с}, \nu_{\text{имп.}} = 50 \text{ Гц}.$$

Обозначения аналогичны рис. 3.13.

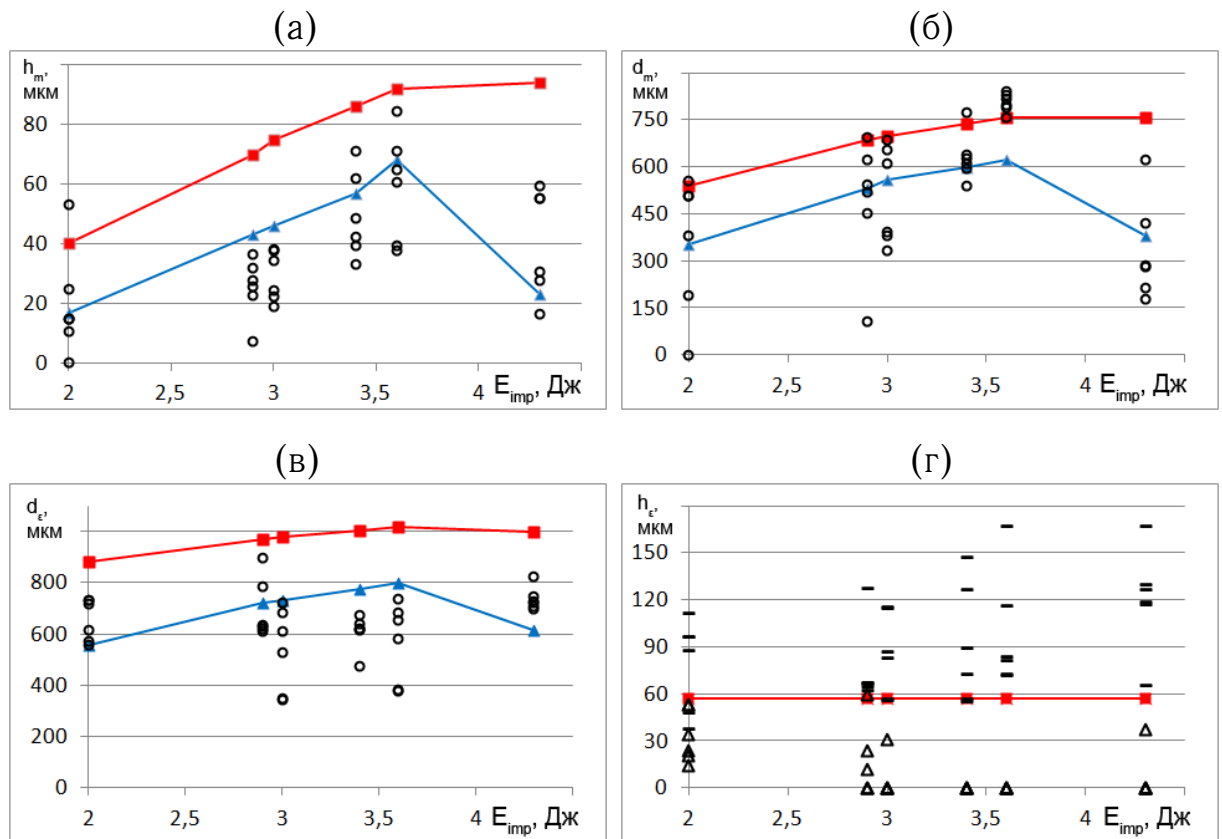


Рис. 3.15. Сравнение результатов вычислительного ($\square$ и $\triangle$) и лабораторного ($\circ$) экспериментов. Влияние энергии импульса $E_{\text{имп.}}$ на характеристики зоны оплавления для параметров лазерного излучения:

$$R_{\text{луча}} = 400 \text{ мкм}, \tau_{\text{имп.}} = 1,5 \text{ мс}, V_{\text{луча}} = 20 \text{ мм/с}, \nu_{\text{имп.}} = 50 \text{ Гц}.$$

Обозначения аналогичны рис. 3.13.

3.5. Выводы к главе 3

1. Сформулирована двухуровневая модель селективного лазерного плавления металлических порошков. На макроскопическом масштабе модель описывает тепловые поля, поля локальной газовой пористости и движение поверхности зоны оплавления при лазерном плавлении. На мезоскопическом масштабе модель позволяет рассчитывать эффективную теплопроводность порошковых сред, изучать механизмы консолидации порошка и сегрегации химических компонентов, проводить термохимический анализ окислительно-восстановительных реакций.
2. Двухуровневая математическая модель СЛП реализована в виде программного комплекса — программы для ЭВМ “Компьютерная оптимизация процессов лазерной обработки порошков”, позволяющего проводить численное моделирование лазерного плавления металлических порошков в импульсном и непрерывном режимах.
3. Предложена методика моделирования процессов плавления, вязкого многофазного течения, кристаллизации порошка на мезоскопическом уровне отдельных частиц с использованием формализма фазового поля. Разработанный формализм естественным образом учитывает термодинамические свойства и потенциалы различных фаз и может быть расширен на твердофазные превращения.

4. Анализ результатов двухуровневого моделирования процессов селективного лазерного плавления

В четвертой главе проведена апробация развитой двухуровневой модели селективного лазерного плавления металлических порошков. Изучены процессы локального теплопереноса в порошках железа, сплава Al–Si и тантала. На основании результатов вычислительного эксперимента предложена регрессионная модель для расчета эффективной теплопроводности порошков. На мезоуровне изучены процессы плавления, консолидации и затвердевания отдельных частиц. Полученные данные использованы для решения задач оптимизации режимов СЛП для порошка железа и ВЛП синтеза композитных покрытий на основе порошковых композиций Fe–Ni и Fe–Cr₂O₃. Совместно с соавторами разработана новая технология получения функциональных покрытий с широким спектром функциональных свойств.

В аддитивных технологиях изготовления объемных деталей используются четыре основных группы металлических порошков:

1. Порошки на основе нержавеющей стали типа 03X17H14M2 (AISI316L, CL20ES — международная спецификация), которые обладают хорошей текучестью и позволяют получать изделия с низкой остаточной пористостью на уровне 0,2 – 0,5%.
2. Порошки на основе алюминия вблизи эвтектического состава Al-12 ат.%Si. Изделия обладают малой плотностью, микроструктура хорошо контролируется и состоит из α -Al и эвтектики Al–Si.
3. Порошки на основе титана с легирующими добавками алюминия, ванадия и молибдена класса BT6. Изделия обладают хорошими

прочностными свойствами, малой плотностью, однако порошки дорогостоящие и обладают высокой окисляемостью.

4. Порошки на основе тантала обладают биосовместимостью, используются для производства медицинских имплантатов, применяются в радиоэлектронной промышленности для производства высокочастотных конденсаторов.

Для моделирования процессов ВЛП/СЛП был выбран порошок железа как модельный материал для первой группы порошков. Кроме того, с использованием метода ВЛП в ФГБОУ ВО “УдГУ” были разработаны различные классы функциональных покрытий с улучшенными механическими и электрохимическими свойствами, раздел А в Приложениях. Эти покрытия получены с использованием легированных порошков железа. Теплофизические свойства порошковых систем, которые анализировались методами математического моделирования в настоящей работе, приведены в разделе Б в Приложениях. К их числу относятся высокодисперсное карбонильное железо (табл. Б.1), Al-12Si (Б.3), Ta (Б.4), Fe–Ni (Б.5). В табл. Б.6 указаны свойства инертных газов, использованных при верификации модели. Технологические параметры обработки импульсным лазером ОКБ BULAT LRS-300, которые использовались в вычислительном и лабораторном экспериментах, показаны в табл. Б.7. Далее рассмотрим результаты моделирования физико-химических процессов, протекающие в порошках на мезоскопическом уровне при лазерном плавлении.

Основные результаты, представленные в главе 4, опубликованы в [82, 110, 130, 157–159].

Список обозначений в главе 4

- СЛП — селективное лазерное плавление
- ВЛС — высокоскоростной лазерный синтез

- ЛС — лазерное спекание
- ЛП — лазерное плавление
- ЛИ — лазерное излучение
- РФЭС — рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия
- ВЛП — высокоскоростное лазерное плавление
- ПЭМ — просвечивающая электронная микроскопия
- СЭМ — сканирующая электронная микроскопия
- РСА — рентгеноструктурный анализ

4.1. Моделирование механизмов переноса и структурообразования на мезоуровне

4.1.1. Расчет эффективного коэффициента теплопроводности

Прямая задача теплопроводности (3.21) — (3.27) решалась численно МКЭ. Определение размера расчетной области и размера конечных элементов проводилось в соответствии с алгоритмом выбора представительного объема на разных масштабных уровнях, представленным ранее на рис. 3.10. Параметры дискретизации и размеры ПО для высокодисперсных (средний размер частиц $\langle d \rangle = 3$ мкм) и промышленных СЛП порошков ($\langle d \rangle = 45$ мкм) приведены в табл. 4.1. Размеры расчетной области соответствовали примерно 12, 8 и 7 слоям частиц вдоль направлений x , y и z соответственно. В диапазоне средних ε в пористой порошковой среде существует множество мелких включений газовой фазы, в этом случае средний размер элемента уменьшался.

Вычислительный эксперимент проводился для представительных на макроуровне объемов порошков железа, алюминия и тантала. Матрица расчетов включала анализ эффективной теплопроводности в полном диапазоне пористости $\varepsilon \in [0..1)$ с шагом $\Delta\varepsilon = 0,04$. При каждом наборе

Таблица 4.1

Размеры вычислительной области мезоуровня и параметры дискретизации, где d — диаметр частиц, L_x — линейный размер области в направлении x , ε — пористость, $N_{\text{эле.}}$ — количество конечных элементов, N_{DOF} — количество степеней свободы, $\langle l \rangle$ — средний размер конечного элемента

d , мкм	L_x , мкм	ε	$N_{\text{эле.}}$	N_{DOF}	$\langle l \rangle$, мкм
3	23	0,2	252000	45300	0,5
3	23	0,54	803700	140000	0,42
3	23	0,78	508000	88000	0,49
45	350	0,2	241000	49700	7
45	350	0,55	905000	161000	5,9
45	350	0,8	420000	98200	6,1

параметров проводилось три расчета с различной случайной конфигурацией частиц. В дальнейшем решалась обратная задача, и полученное значение эффективного коэффициента теплопроводности наносилось на график $k_{\text{эфф.}}(\varepsilon)$.

Результаты моделирования на мезоуровне приведены на рис. 4.1 и 4.2. На графиках нанесены точки, полученные в численных расчетах, а также аппроксимирующие кривые, полученные методом регрессионного анализа. Расчеты для железа, рис. 4.1(а), показали, что распределение точек имеет существенную дисперсию, особенно в области средних значений $\varepsilon \in [0,1..0,3]$. Это связано с влиянием на теплоперенос случайной насыпки частиц на мезоскопическом масштабе. Обработка на воздухе и в вакууме незначительно меняет характер зависимости $k_{\text{эфф.}}(\varepsilon)$. Несмотря на высокую удельную теплоемкость воздуха на единицу массы, его удельная теплоемкость на единицу объема невелика в сравнении с теплоемкостью единицы объема металла. Таким образом, для сред с достаточно высокой теплопроводностью (Fe, Al–Si, Al, Ta) влияние газовой фазы незначительно и заметно только вблизи перколяционного порога [160, 161]. На графиках видно, что в интервале $\varepsilon \in [0,6..0,8]$

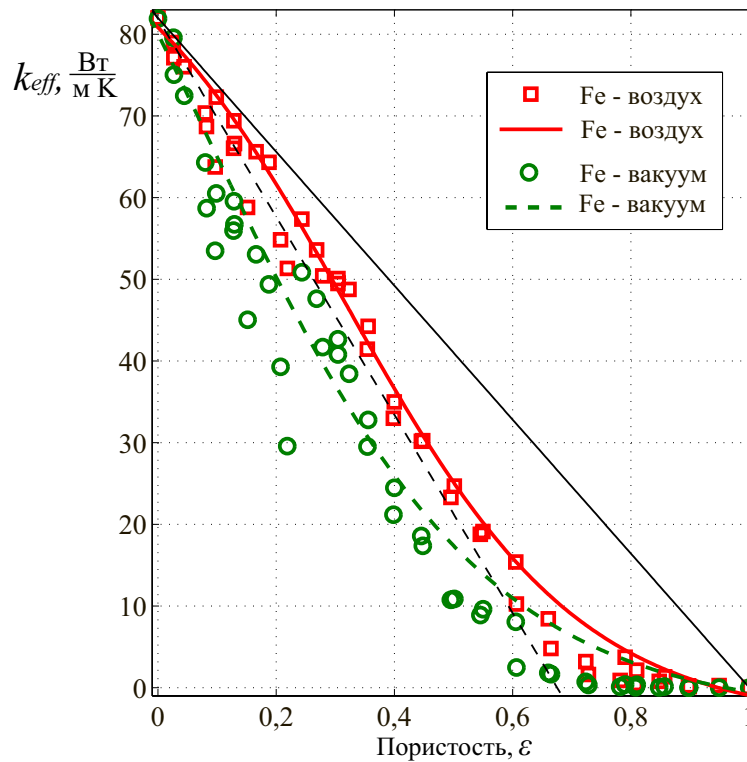


Рис. 4.1. Зависимость эффективной теплопроводности $k_{\text{эфф.}}$ от пористости ε для высокодисперсного порошка железа в вакууме ($\bigcirc$) и в воздушной атмосфере ($\square$). Линиями обозначены регрессионные модели $k_{\text{эфф.}}(\varepsilon)$ для каждой газовой среды. Прямая черная тонкая линия и тонкая пунктирная линии — линейная модель Лыкова [162] и перколяционная модель соответственно.

перколяционная модель достигает нуля, но расчетная модель показывает небольшую термическую проводимость.

Особенностями высокодисперсного порошка железа являются его высокая удельная поверхность $S_{\text{уд.}}$ и малая плотность насыпки. При пористости $\varepsilon \sim 0,56-0,61$ теплопроводность в воздухе и аргоне составляет $k_{\text{эфф.}}(\varepsilon = 0,58) \sim 18$ Вт/м/К. В вакууме эффективная теплопроводность падает до $k_{\text{эфф.}}(\varepsilon = 0,58) = 12$ Вт/м/К. После начала процесса лазерного плавления происходит уменьшение пористости, что приводит к резкому повышению тепловой проводимости. Теплопроводность железа в вакууме возрастает более резко и близка к линии перколяционной модели, в

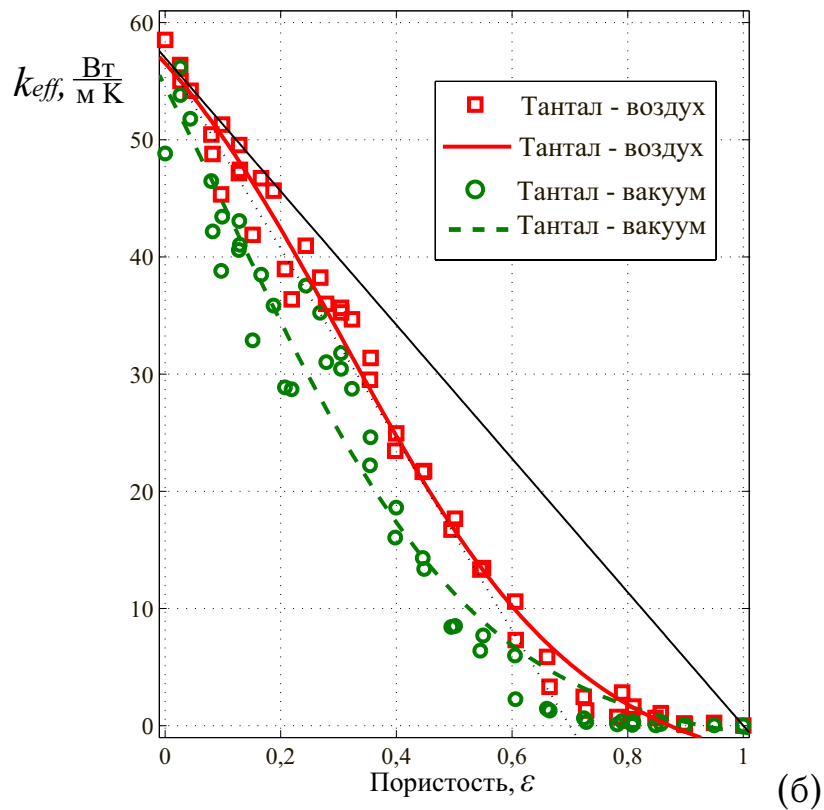
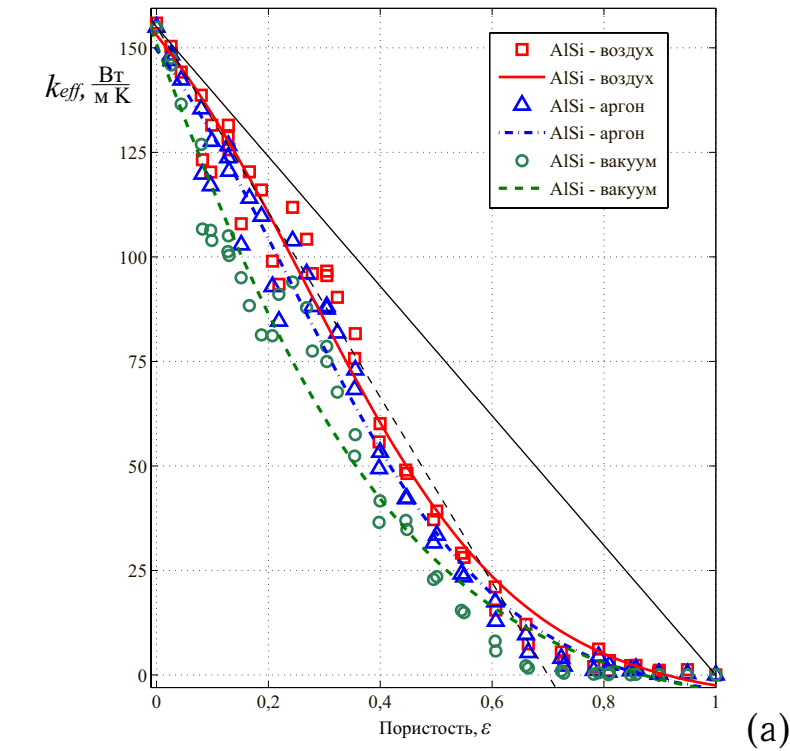


Рис. 4.2. Зависимость эффективной теплопроводности $k_{\text{эфф.}}$ от пористости ε для порошка алюминия Al-12ат.%Si (а) и тантала (б) в вакууме ($\bigcirc$), в воздушной атмосфере ($\square$) и в аргоне ($\triangle$). Линиями обозначены регрессионные модели $k_{\text{эфф.}}(\varepsilon)$ для каждой газовой среды. Прямая черная тонкая линия и тонкая пунктирная линии — линейная модель Лыкова [162] и перколяционная модель соответственно.

которой эффективная теплопроводность линейно убывает до $k_{\text{эфф.}} = 0$ при достижении порога $\varepsilon_{\text{крит.}} = 0,7$.

Результаты моделирования для порошков сплава алюминия и тантала, рис. 4.2, показали, что разброс точек гораздо меньше, чем он наблюдался для железа. Благодаря высокой теплопроводности Al $k_{\text{мет.}} = 155$ Вт/К/м разница между теплопроводностью в вакууме и в воздушной среде для средних значений пористости $\varepsilon = 0,5$ составляет меньше 20%, и эта разница уменьшается с уменьшением пористости. Таким образом, для эффективного плавления ЛИ алюминиевый порошок необходимо обрабатывать с высокой плотностью мощности, например, импульсным лазером. В то же время, теплопроводность Al порошка и получаемых компактов может понижаться [163–165] из-за активного образования оксидов на поверхностях, которые плохо проводят тепло. Характер зависимости для воздуха, аргона и вакуума близок к перколяционной модели. Результаты моделирования для тантала дают зависимости, близкие к порошкам железа, хотя разброс значений $k_{\text{эфф.}}(\varepsilon)$ меньше, чем у железа. Это связано с тем, что плотность тантала и соответственно его удельная теплоемкость на единицу объема выше. Следовательно, порошок тантала требует высокой энергии при СЛП, что подтверждается в экспериментах [135].

Результаты расчета эффективной теплопроводности были сведены к регрессионной модели, которая использовалась в качестве функции состояния при решении уравнений переноса на макроуровне. В качестве гладкой регрессионной модели предложена аппроксимация функцией

$$k_{\text{эфф.}} = A \frac{k_{\text{мет.}}}{2} \text{th}(B\varepsilon - C) + D \frac{k_{\text{газ.}}}{2}, \quad (4.1)$$

где th — гиперболический тангенс, коэффициенты B и C определяются таким образом, чтобы сформировать полуволну в правой верхней четверти. Анализ результатов вычислений показал, что для систем с высокой теплопроводностью металла $B \sim 3,4$, $C \sim 1,2$. Для систем, где газ ока-

зывает влияние на теплоперенос, $B \sim 4,2$, $C \sim 2$. Коэффициенты $A \sim 1$ и $D \sim 1$ в обоих случаях.

Таким образом, для порошков с низкой теплопроводностью металлического скелета теплоперенос в порах может быть существенным. Высокодисперсные порошки железа более подвержены перегреву, чем промышленные СЛП порошки, что может влиять на качество обработки. Эффективная теплопроводность $k_{\text{эфф.}}(\varepsilon)$ в вакууме близка к нижнему пределу теплопроводности, определяемому моделью Максвелла [160], и при достижении перколяционного порога значительно падает. Для порошков с высокой теплопроводностью металлической фазы теплопереносом в порах можно пренебречь.

Дополнительно изучено влияние дисперсионного состава порошка и степени теплового контакта между частицами на теплопроводность. На рис. 4.3 показано влияние дисперсности при случайной насыпке частиц на эффективную теплопроводность порошка железа с размерами частиц $d = 3$ мкм. Влияние дисперсности при фиксированной пористости незначительно, таким образом, насыпка из частиц с низким разбросом по размерам, использованная при проведении ВЭ, является хорошим приближением. В лабораторных экспериментах высокий разброс по диаметрам частиц позволяет увеличить плотность начальной насыпки порошка, то есть поднять его эффективную теплопроводность.

На рисунке 4.4 показано влияние площади теплового контакта соседних частиц. Изменение теплового контакта вводилось в модель через степень перекрытия ξ сферических частиц в расчетной области. Согласно теоретическим моделям элементарной ячейки [160], при понижении размеров контактного пятна при перекрытии частиц меньше 10% происходит значительное ухудшение теплопроводности металлического скелета, что обусловлено фактическим вырождением контактного пятна в точку. Расчеты показали слабую зависимость от величины перекрытия частиц для порошка в воздушной среде. В вакууме конвективный и диффузионный перенос тепла через поры отсутствует, реализуется только

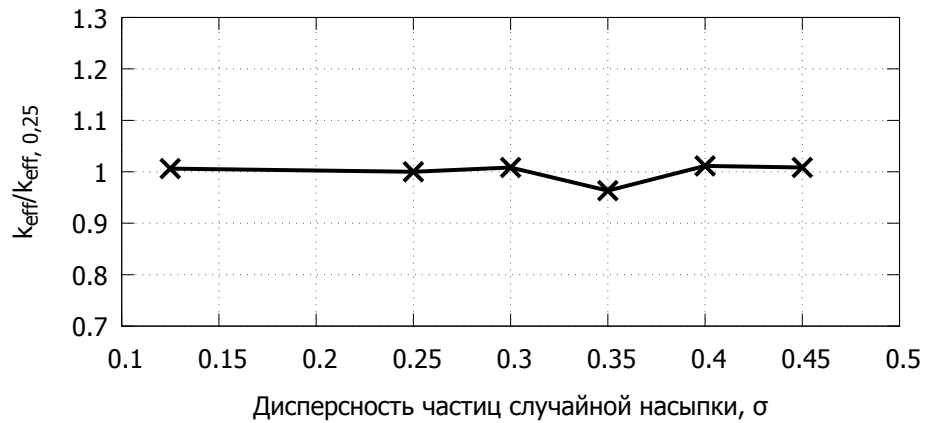


Рис. 4.3. Влияние дисперсии σ в логнормальном распределении диаметра $\langle d \rangle$ частиц на эффективный коэффициент теплопроводности $k_{\text{эфф.}}$ при случайной насыпке и фиксированной пористости $\varepsilon = 0,38$. Коэффициент $k_{\text{эфф.}}$ обезразмерен на $k_{\text{эфф.}}$ железа при $\sigma = 0,25$.

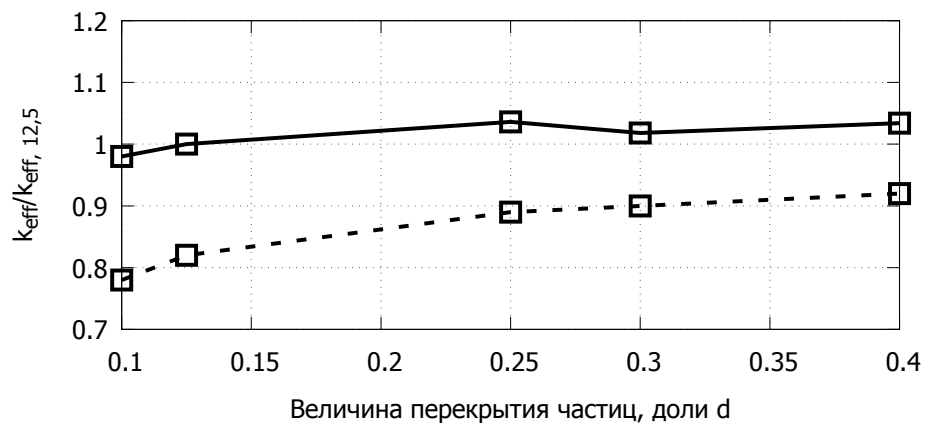


Рис. 4.4. Относительная теплопроводность высокодисперсного порошка железа в воздушной атмосфере (непрерывная линия) и вакууме (пунктирная линия) при различной величине перекрытия частиц.

Коэффициент $k_{\text{эфф.}}$ обезразмерен на $k_{\text{эфф.}}$ при степени перекрытия $\xi = 0,125$ частиц, что для сферической частицы диаметром $d = 3$ мкм соответствует диаметру контактного

$$\text{пятна } d_{\text{конт.пятна}} = 1,7 \text{ мкм.}$$

радиационный перенос, поэтому влияние диаметра контактного пятна увеличивается.

При проведении двухуровневого ВЭ использовался диаметр перекрытия $\xi = 0,125$, что для сферической частицы $d = 3$ мкм соответствует смещению центров частиц друг к другу на $0,375$ мкм при $d_{\text{конт.пятна}} = 1,7$ мкм. Это соответствует насыпке порошка с уплотнением. Стоит отметить, что в лабораторном эксперименте теплоперенос эффективно реализуется при свободной насыпке, при этом $d_{\text{конт.пятна}} = (0,1 \div 0,3)\langle d \rangle$ частицы, что обусловлено неидеальной сферичностью частиц или деформацией при насыпке. Также при нагреве происходит твердофазное диффузионное сплавление частиц [106], что способствует увеличению диаметра контактного пятна.

4.1.2. Результаты изучения усадки порошка и формирования остаточной пористости

Как показал проведенный анализ эффективной теплопроводности, площадь теплового контакта частиц определяет термическое сопротивление порошковых сред. Таким образом, важно понимать, как меняется структура порошкового слоя в процессе лазерного нагрева. В данном разделе приведены результаты моделирования консолидации частиц порошка железа методом фазового поля (3.37) – (3.44). Гранулометрический анализ показал, что средний размер частиц равен $\langle d \rangle = 3$ мкм при очень малой дисперсии $\sigma < 1,0$ мкм, что связано с технологией его производства термохимическим способом. Таким образом, расчеты для одномодального — с одним размером частиц — порошка могли быть сопоставлены напрямую с результатами лабораторного эксперимента.

В первой серии расчетов выполнена оценка характеристического времени $\tau_{\text{конс.}}$ слияния двух расплавленных частиц в отсутствии гравитации и контакта с другими частицами. Хотя поставленная задача не соответствует экспериментальным условиям, она позволяет оценить нижний предел времени консолидации, если учитываются только капиллярные силы ($La \sim 10^3$) и вязкость. Числа Бонда ($Bo = 1,3 \times 10^{-6}$) и

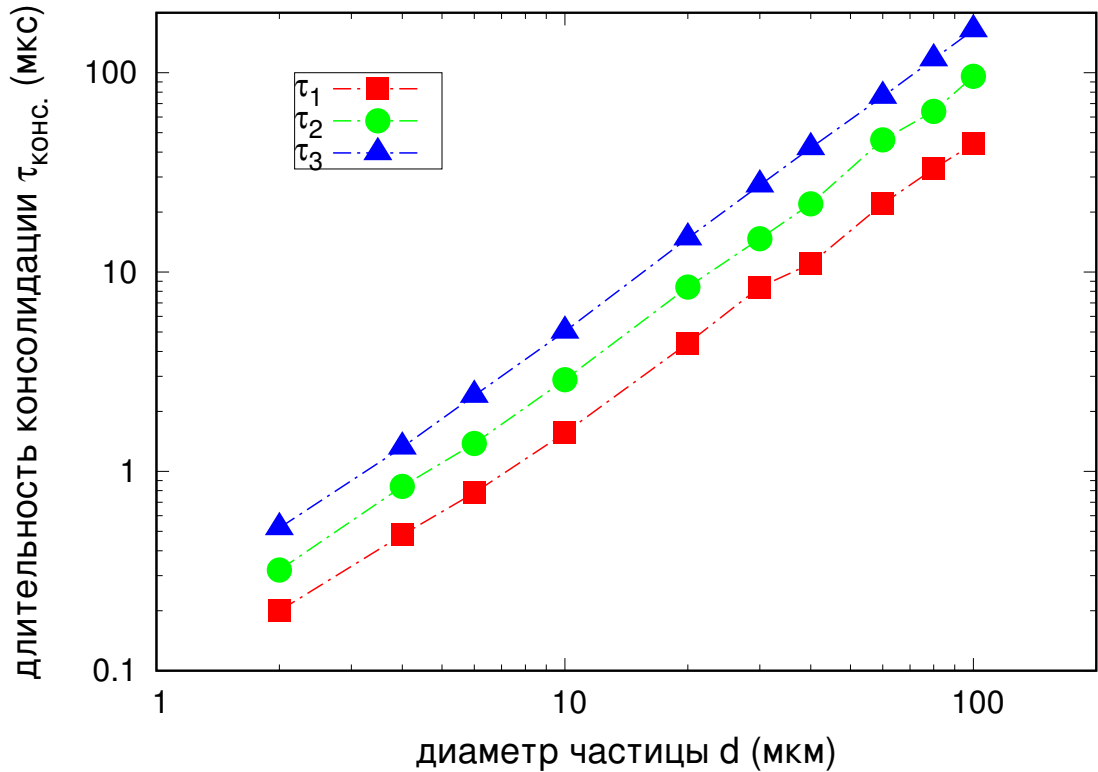


Рис. 4.5. Характерная длительность $\tau_{\text{конс.}}$ консолидации двух расплавленных частиц порошка как функция их диаметра d . Интервалы τ_1 , τ_2 и τ_3 соответствуют формированию шейки, средней и окончательной стадиям консолидации соответственно.

Лапласа показывают, что динамика вязкого течения контролируется поверхностным натяжением, поэтому высокодисперсные частицы должны иметь малое время консолидации. Согласно результатам расчетов, приведенным на рис. 4.5, время $\tau_{\text{конс.}}$ растет в диапазоне от 1 до 200 мкс, если диаметр частицы $\langle d \rangle$ увеличивается с 1 до 100 мкм. В двойных логарифмических координатах расчетные точки соответствуют линейной функции. Увеличение $\langle d \rangle$ влечет за собой рост числа Бонда, следовательно, значение вязкостных эффектов возрастает.

Во второй серии расчетов исследовалась кинетика консолидации для регулярного массива частиц, рис. 4.6. В этом случае каждая частица взаимодействует с несколькими ближайшими соседями в объеме порошкового слоя. На внешней поверхности порошкового слоя число соседей

меньше, поэтому происходит быстрое формирование слоя расплава на границе с атмосферой. Механизм консолидации в основных чертах соответствуют задаче для двух частиц, но кинетика всего процесса сложнее. Основное отличие состоит в том, что полная консолидация занимает значительно больше времени: времена $\tau_{\text{конс.}}$ составляют 3 и 500 мкс для двух частиц и массива соответственно. Анализ изменения структуры фазовых границ на рис. 4.6 показывает, что выделяются три стадии консолидации. На первой стадии происходит образование шеек и формирование связного металлического каркаса. На второй стадии реализуется слияние газовых включений и уменьшение удельной поверхности под действием капиллярных сил. На третьей стадии происходит выход газовых включений на поверхность под действием архимедовой силы. Последняя стадия занимает продолжительное время от 50 до 500 мкс, что было объяснено сочетанием двух эффектов: (1) малым объемом газовых включений и их слабой подъемной силой, (2) значительным гидродинамическим сопротивлением для сферических включений такого объема. Этот вывод согласуется с оценкой отношения подъемной силы и сил вязкого трения, поскольку число Архимеда составляет $Ar \sim 10^{-6}$.

Дальнейший анализ был направлен на изучение кинетики консолидации. На рисунке 4.7 приведено сравнение результатов фазополевого моделирования с кинетической моделью аррениусовского типа (3.3), используемой на макроуровне. На графике нанесены данные моделирования как для двух частиц, так и для представительного массива частиц. Кинетическая модель прогнозирует плавное увеличение относительной плотности порошка в интервале времени $0.1 < t < 10$ мс после начала консолидации. Результаты ФП моделирования показывают двухступенчатую кинетику. Образование шеек заканчивается после 2 мс, и начинается увеличение плотности с 38% до 60% за счет объединения и выхода на поверхность газовых включений, расположенных близко к внешней поверхности расплава. Отметим, что газовые включения на этой стадии объединены микроканалами, способствующими отводу газа. Как только

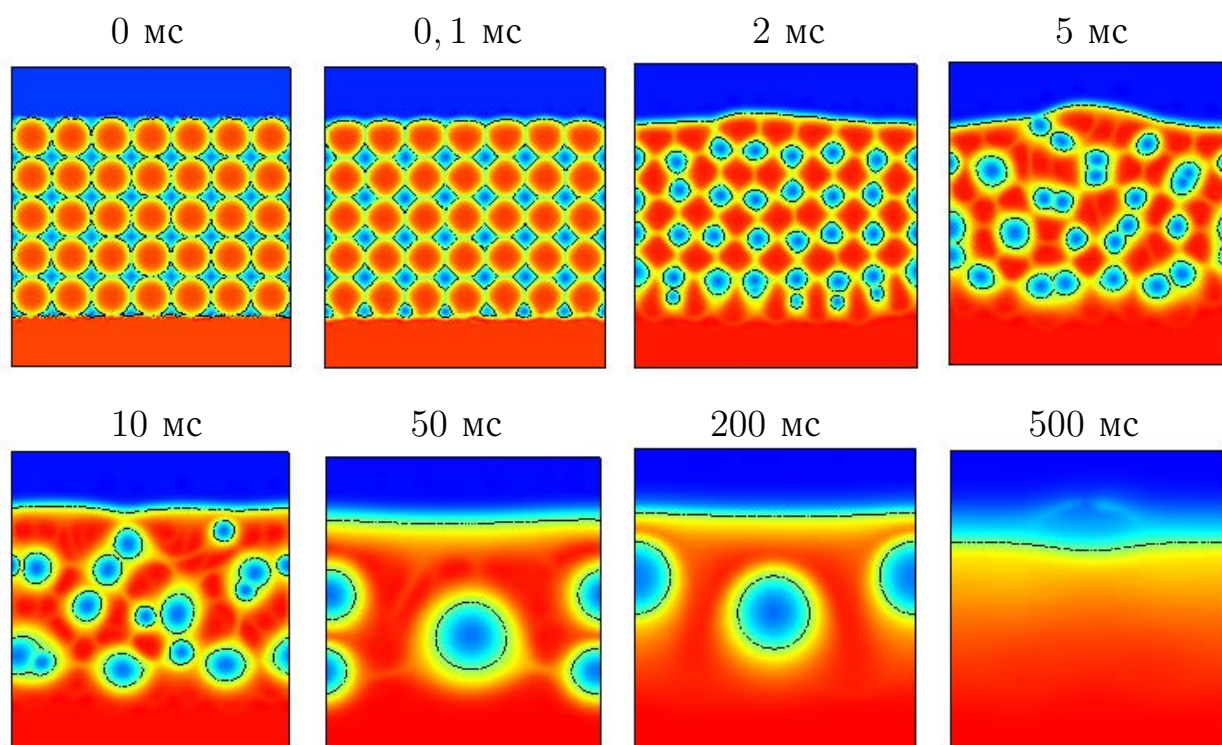


Рис. 4.6. Моделирование консолидации расплавленных частиц железа с размером $d = 3$ мкм методом фазового поля.

первая стадия закончена, плотность перестает увеличиваться, газовые включения находятся в расплаве, и наблюдается их слияние. Как только достигается достаточный размер для подъема на поверхность за счет архимедовой силы, включения выходят на поверхность, и жидкофазная консолидация порошка заканчивается.

Таким образом, на основании данных ВЭ можно заключить, что кинетика консолидации является многоступенчатым процессом, и это обусловлено затрудненным выходом газовых включений на поверхность. Данный вывод был нами подтвержден [166] в лабораторном эксперименте для высокодисперсного порошка железа. Таким образом, при импульсной обработке малая длительность импульса способствует формированию структуры с высокой пористостью, что востребовано при производстве каталитически активных функциональных материалов [167,168].

Из литературы [118] известно, что давление газа в зоне лазерной обработки достигает $10^0 - 10^2$ атм и оказывает большое влияние на про-

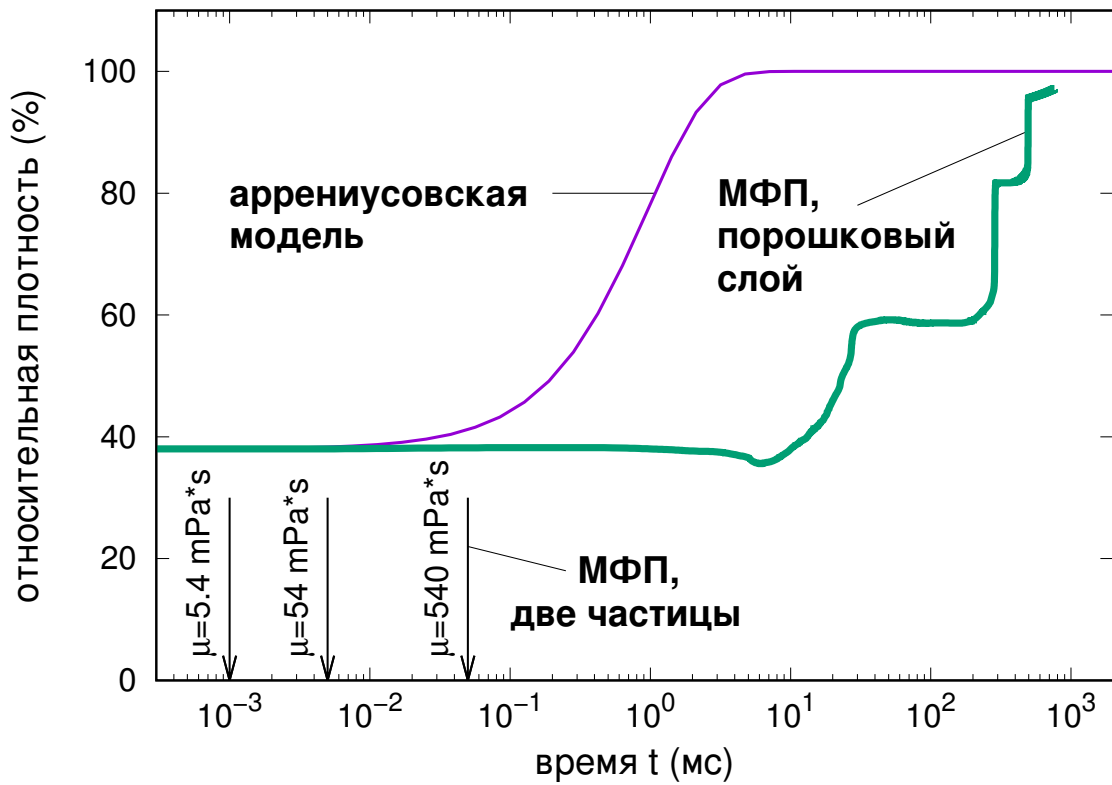


Рис. 4.7. Кинетика консолидации порошка железа на диаграмме относительной плотности как функции времени. Толстая линия показывает результаты фазополевого моделирования. Тонкая линия соответствует модели аррениусовского типа (3.3) с параметрами $A = 4 \times 10^4$, $E_a = 50$ кДж/моль, $T = T_m$. Стрелками указаны характерные времена консолидации для двух частиц, где μ — абсолютная вязкость.

текающие физико-химические процессы. Верхний предел соответствует пикосекундным импульсным лазерам. В традиционных СЛП процессах используется длинноимпульсный или непрерывный источник ЛИ, поэтому оценка давления в диапазоне $10^0 - 10^1$ атм является реалистичной. На рис. 4.8 приведена кинетика консолидации согласно расчетам, выполненным с варьируемым давлением в зоне обработки. Повышение давления в зоне обработки способствует консолидации, поскольку архимедова сила для газовых включений возрастает. Консолидация при 1 атм происходит в 3–4 раза медленнее, чем при давлении 10 атм.

На этом же графике показано влияние различных типов локальной упаковки при насыпке порошка, включая кубический, плотный и бимодальный типы. В бимодальном типе использовались частицы с размерами 2 и 4 мкм. Установлено, что плотная упаковка не изменяет скорость консолидации. Получен интересный результат, что при бимодальной упаковке относительная плотность растет быстрее, чем при кубической или плотной упаковке. При этом наблюдается одноступенчатая кинетика, плотность изменяется плавно и консолидация завершается в течение 10 мс, рис. 4.8. Этот результат согласуется с данными производителей промышленных СЛП порошков, которые разрабатывают двухмодальные порошки для производства изделий ответственного назначения, где требуется высокая относительная плотность $\rho/\rho_{\max} \geq 99,5\%$. Результаты ВЭ также согласуются с [118], где изучались плавление и консолидация порошка марки 316L: консолидация одномодального порошка замедляется, если средний диаметр частиц составляет 27 мкм при дисперсии 10 мкм. Это приводит к повышению микрошероховатости поверхности и высокой остаточной пористости. Описание стадий консолидации, полученное в настоящей работе, также согласуется с [123], где характеристическое время консолидации было экспериментально оценено как $10^{-3} - 10^{-2}$ с.

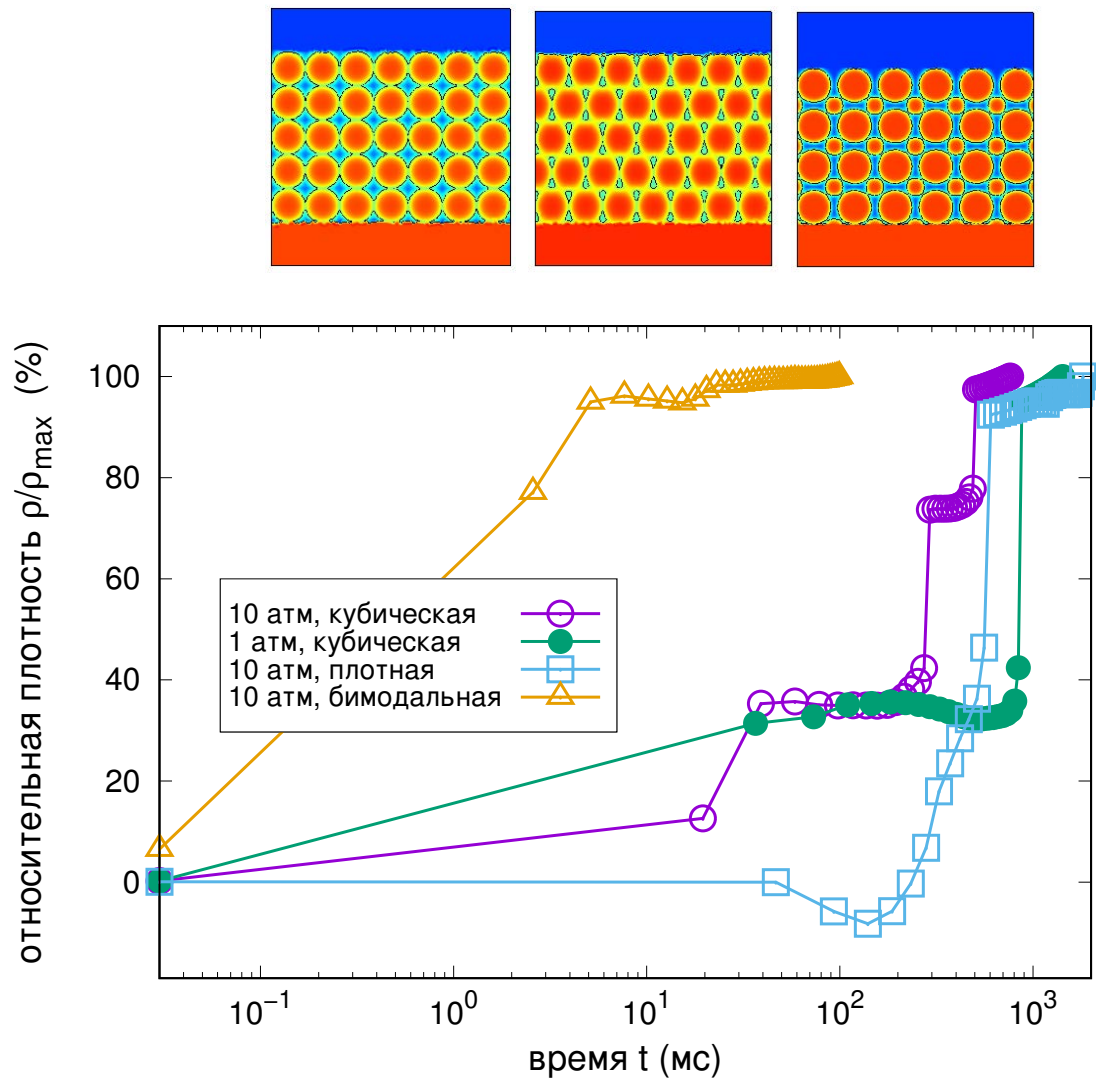


Рис. 4.8. Кинетика консолидации порошка железа с кубическим, плотным и бимодальным типами насыпки, рассчитанная для различных значений давления в зоне лазерного луча.

4.2. Результаты вычислительных экспериментов с использованием двухуровневой модели

Апробация двухуровневой модели выполнена проведением ВЭ для лазерного плавления порошков железа, композитных порошков Fe–Ni и Fe–Cr₂O₃ и сравнения результатов расчетов с данными металлографии, РЭМ, ПФЭМ и РФЭС. В процессе выполнения ВЭ выполнены исследования, значимые с практической точки зрения:

1. Сделан расчет тепловых полей и полей пористости для оптимизации режимов лазерного плавления.
2. Изучены процессы формирования кристаллической субструктуры при высокоскоростной кристаллизации зоны оплавления.
3. Проанализированы окислительно-восстановительные реакции в композитных порошках “металл–металлический оксид”.

4.2.1. Расчет и оптимизация термических режимов лазерного плавления

Анализ тепловых полей и усадки. Рассмотрим основные результаты анализа тепловых полей и кинетики усадки в порошковом слое. На рис. 4.9 приведены результаты расчета температуры и формы зоны оплавления при лазерной обработке порошка железа. В области воздействия лазерного луча происходит плавление порошка и консолидация частиц. При этом за счет гауссова распределения энергии в луче происходит плавная усадка по краям, и профиль поперечного сечения имеет чашеобразную форму. Из анализа характерных пространственно-временных масштабов, табл. 3.2, следует, что во время импульса осуществляется интенсивный разогрев поверхностного слоя. Действительно, тепловой поток в подложку на 0,5 – 1 порядка величины меньше, чем тепловой поток со стороны поверхности, из-за высокой плотности мощности импульсного ЛИ. Охлаждение за счет радиационного теплопереноса в

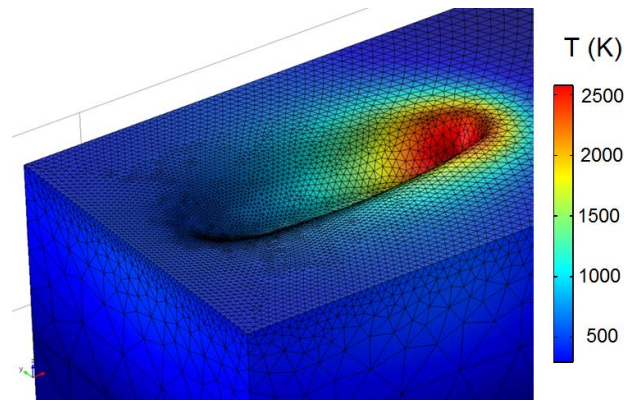


Рис. 4.9. Результаты расчета поля температуры и формы поверхности дорожки для порошка железа при прямолинейном движении лазерного луча. Цветной шкалой обозначена температура на поверхности порошкового слоя. В результате плавления и действия капиллярных сил происходит консолидация частиц, что приводит к усадке материала. Показана конечно-элементная расчетная сетка, деформируемая в численной модели в зависимости от степени усадки.

начале импульса на 2 порядка меньше теплового потока ЛИ и достигает значимых значений $(1 \div 5)\%$ только при температурах $T \sim 2000$ К. Конвективное охлаждение в атмосферу на начальных этапах незначительно при $T \lesssim T_m$. В процессе нагрева выше T_m и достижения температур $T_{\text{кип.}}$ кипения (интенсивного испарения) происходит выравнивание потоков подвода тепла и охлаждения. Таким образом, температура поверхности в расчетах никогда не превышала $T_{\text{кип.}}$. После окончания импульса происходит достаточно быстрое остывание за счет высокой теплопроводности металла, хорошего теплового контакта с подложкой и малого объема зоны оплавления.

Результаты на рис. 4.10 раскрывают кинетику усадки при импульсной обработке. Начальная пористость порошка составляет $\varepsilon_0 = 0,62$. Перед началом импульса, рис. 4.10(а), имеется сформированная предыдущими импульсами дорожка, в которой вдоль траектории движения луча произошла полная усадка до $\varepsilon = 0$. После начала импульса происходит быстрый нагрев выше T_m и формирование зоны оплавления,

рис. 4.10(б). Как обсуждалось выше, максимальная температура ограничена $T < T_{\text{кип.}}$, но интенсивное испарение стабилизирует температуру в диапазоне $2300 \lesssim T \lesssim 2700$ К при $T_{\text{кип.}} = 3050$ К, рис. 4.10 (б)–(д). Отметим, что площадь зоны оплавления в течение импульса меняется незначительно. Вместе с тем происходит движение фронта плавления в подложку. На рис. 4.10(г) и (д) заметно, что фронт плавления продвинулся дальше границы порошкового слоя и затронул подложку: область оплавления подложки показана серым цветом в нижней части зоны оплавления. Этот механизм оплавления подложки исключительно важен с технологической точки зрения, поскольку обеспечивает формирование трехмерного изделия послойным способом. Площадь зоны оплавления подложки значительно меньше зоны оплавления на поверхности. По этой причине применяется схема сканирования с перекрытием до 80%, что позволяет гарантировать равномерность оплавления подложки. В титановых изделиях ответственного назначения достигается глубина зоны оплавления до $h_{\text{оплав.}} = 6h_0$, где h_0 — толщина порошкового слоя. После окончания импульса, рис. 4.10(е), зона оплавления быстро затвердевает.

Анализ скоростей кристаллизации в зоне оплавления. Обработка материалов высокоэнергетическим лазерным излучением характеризуется возникновением в системе больших температурных градиентов G_T , скоростей $V_{\text{охл.}}$ охлаждения и скоростей $V_{\text{крист.}}$ кристаллизации, что соответствует термодинамически сильно неравновесной системе. Поскольку параметры G_T , $V_{\text{охл.}}$ и $V_{\text{крист.}}$ вместе с химическим составом оказывают определяющее влияние на отбор кристаллической субструктуры, проведем их оценку для процессов ВЛП/СЛП. Рисунок 4.11 показывает изменение $V_{\text{крист.}}$ после окончания импульса, когда происходит стягивание зоны оплавления к центру в результате кристаллизации. Вначале скорость кристаллизации линейно возрастает, поскольку реализуется линейный теплоотвод в подложку на поверхности всей зоны. Как только площадь зоны резко сокращается, скорость $V_{\text{крист.}}$ нелинейно возрастает

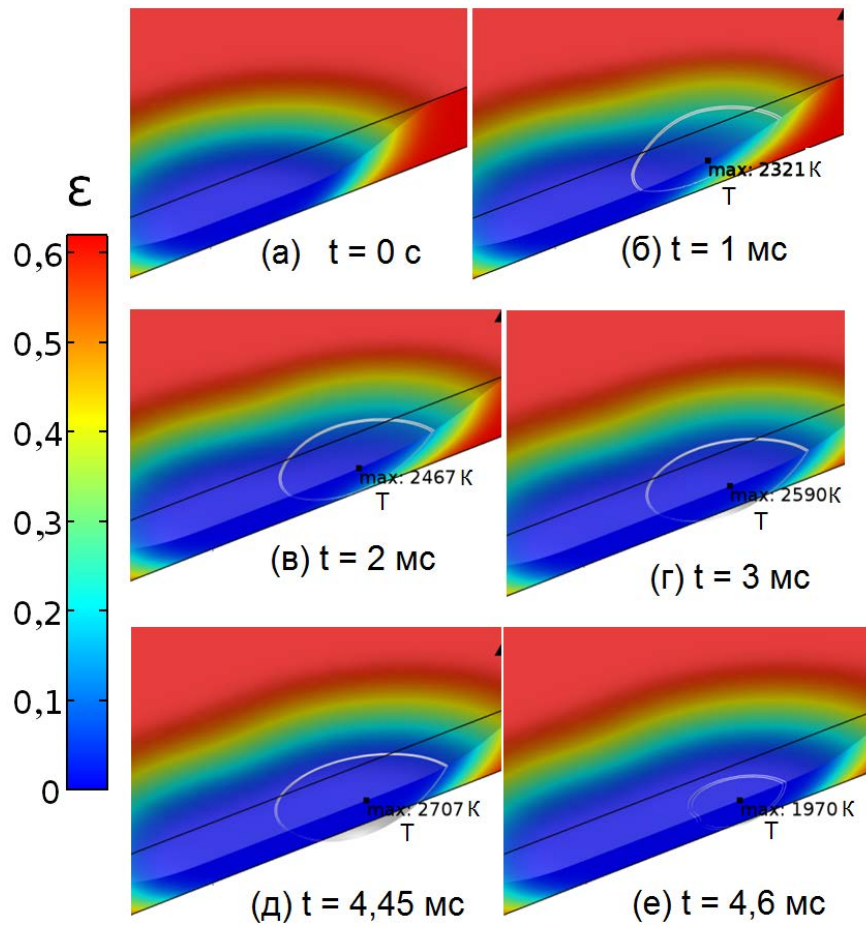


Рис. 4.10. Результаты расчета кинетики плавления и усадки высокодисперсного порошка железа во время импульсного лазерного воздействия. Длительность импульса $\tau_{\text{имп.}} = 4,5 \times 10^{-3}$ с, мощность лазера $P_{\text{ли}} = 50$ Вт, частота импульсов $\nu_{\text{имп.}} = 100$ Гц, радиус луча $R_{\text{луча}} = 400$ мкм. Цветовой шкалой показано распределение локальной пористости ε . Насыпная (начальная) пористость — $\varepsilon_0 = 0,62$. Белой линией обозначены изменяющиеся границы зоны оплавления, соответствующие изотерме $T = T_m$. Время $t = 0$ соответствует началу второго импульса.

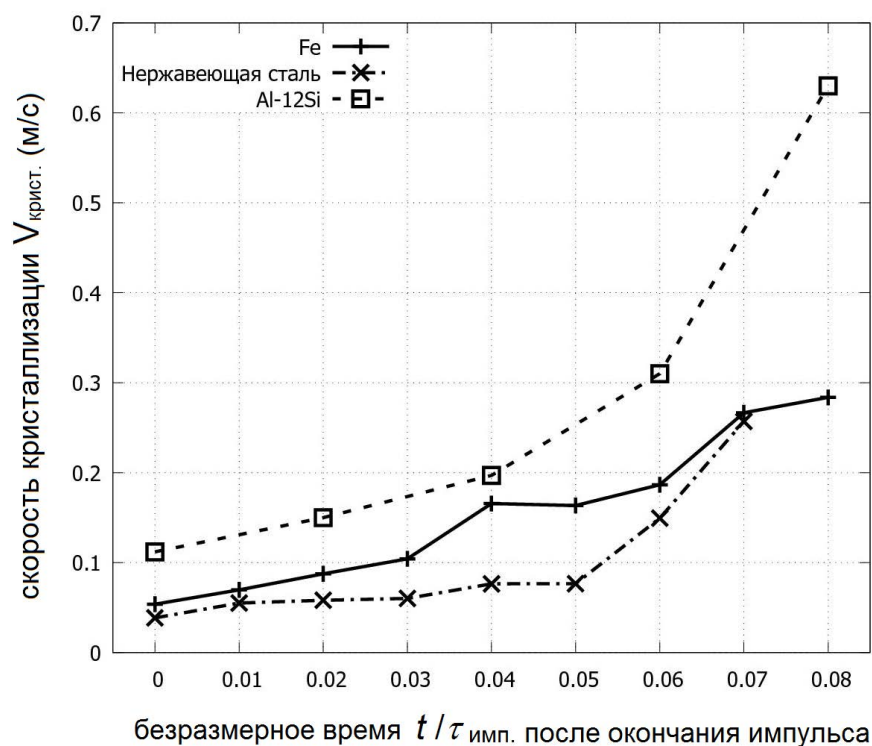


Рис. 4.11. Расчетная зависимость скорости $V_{крис.}$ фронта кристаллизации от безразмерного времени $t/\tau_{имп.}$ при СЛП высокодисперсного порошка Fe, нержавеющей стали 03X17H14M2 и алюминиевого порошка Al-12Si. Момент времени $t/\tau_{имп.} = 0$ на графике соответствует моменту окончания импульса и переходу от режима нагрева к режиму охлаждения. Параметры обработки: средняя мощность $P_{ли} = 50$ Вт, $\tau_{имп.} = 5$ мс, $\nu_{имп.} = 100$ Гц, $R_{луча} = 200$ мкм во всех случаях.

в 4 – 6 раза по отношению к начальной. Скорости $V_{крис.}$ для различных систем варьируются в диапазоне 0,1 – 1 м/с, при этом кристаллизация алюминия протекает с бóльшей $V_{крис.}$ за счет его высокой теплопроводности.

Оценки параметров $V_{крис.}$ и G_T , выполненные на основе серии расчетов для различных мощностей ЛИ и порошковых систем, приведены в табл. 4.2. В целом полученные значения соответствуют теплофизическим свойствам систем, прогнозируя малые $V_{охл.}$ и высокие G_T для нержавеющей стали. Алюминий, напротив, характеризуется высоки-

Таблица 4.2

Оценки максимальных значений скорости кристаллизации, скорости охлаждения, температурного градиента для порошков железа, нержавеющей стали 03X17H14M2 и сплава Al-12Si, полученные в результате вычислительного эксперимента; для каждой системы выбран диапазон мощности, где достигается оплавление порошкового слоя

Материал	P , Вт	$V_{\text{крист.}}$, м/с	$V_{\text{охл.}}$, К/с	G , К/м
Fe	$50 \div 100$	$0,25 \div 0,35$	$10^6 \div 10^7$	$(0,8 \div 2) \times 10^7$
Сталь	$10 \div 50$	$0,2 \div 0,3$	$(1 \div 1,5) \times 10^5$	$(2 \div 16) \times 10^7$
Al-12Si	$30 \div 80$	$0,65 \div 0,7$	$(1 \div 4) \times 10^7$	$(0,8 \div 1,18) \times 10^7$

ми $V_{\text{охл.}}$ и малыми в сравнении со сталью G_T . Как было нами ранее показано [62, 169, 170], при таких условиях лазерной обработки материалов создаются условия для перехода к безразделительному затвердеванию. В этом режиме скорость фронта кристаллизации настолько высока, что не успевает произойти сегрегация компонентов на движущемся фронте фазового перехода. В результате степень сегрегации падает, переходя в пределе при $V_{\text{крист.}} = V_D \sim 10^0 - 10^1$ м/с (V_D — скорость диффузии компонентов) к химически безразделительному затвердеванию, а кристаллическая субструктура вырождается. Данные эффекты подробнее рассматриваются в следующем разделе для композитной смеси порошков Fe и Ni.

Оптимизация режимов обработки. Процессы СЛП характеризуются большим числом управляющих параметров, что делает задачу оптимизации режимов обработки математически сложной. В литературе [105, 106, 127] и на основании проведенных нами исследований [78, 83, 93, 110] показано, что к их числу относятся мощность $P_{\text{ли}}$ лазерного излучения, пиковая мощность $P_{\text{имп.}} = P_{\text{ли}}/(\nu_{\text{имп.}} \tau_{\text{имп.}})$ в импульсе, радиус $R_{\text{луча}}$ луча, скорость $V_{\text{луча}}$ сканирования, толщина h_0 насыпки слоя, начальная пористость ε_0 и зависящий от нее коэффициент γ затухания ЛИ в порошке. В настоящей работе были проведены серии расчетов, в каждой из которых

два параметра являлись варьируемыми, остальные параметры фиксировались. Далее полученные данные анализировались, и выбирались значения параметров, которые приводят к наилучшим с технической точки зрения результатам.

Рационализация режимов любой производственной технологии производится согласно сформулированному для задачи критерию. В процессах СЛП возможны различные критерии: минимальная остаточная пористость и микрошероховатость, максимальная скорость послойного изготовления изделия, соответствие допускам на точность изготовления решетчатых структур и другие. На основе данных ВЭ были построены параметрические диаграммы, которые позволяют производить выбор режимов обработки. На рисунке 4.12 показана одна из полученных параметрических диаграмм, где вычислена площадь S_m зоны адгезии между слоем и подложкой после одиночного импульса. Используя эту диаграмму, проводится подбор требуемых режимов обработки. В частности, на основе этой диаграммы подбираются параметры мощности импульсной обработки: пиковая удельная мощность $J_{\max}$ [ГВт/м²] в импульсе (в центре лазерного пятна) и радиус $R_{\text{луча}}$ луча. При известном значении площади S_m легко оценить скорость изготовления изделий и подобрать рациональное перекрытие импульсов.

4.2.2. Моделирование синтеза композитных покрытий Fe–Ni

Обзор экспериментальных данных. Постановка задачи. В настоящей работе проанализирован [78, 110] синтез металл-металлических покрытий методом ВЛП, применяемый для формирования поверхности с заданными свойствами, на примере композитной смеси порошков Fe и Ni. Исследование электрохимических свойств таких покрытий показало [157], что получаемое функциональное покрытие обладает высокими антикоррозионными свойствами, при этом содержание никеля в 3–4 раза ниже, чем в нержавеющей сталях. Дополнительно установлено [171],

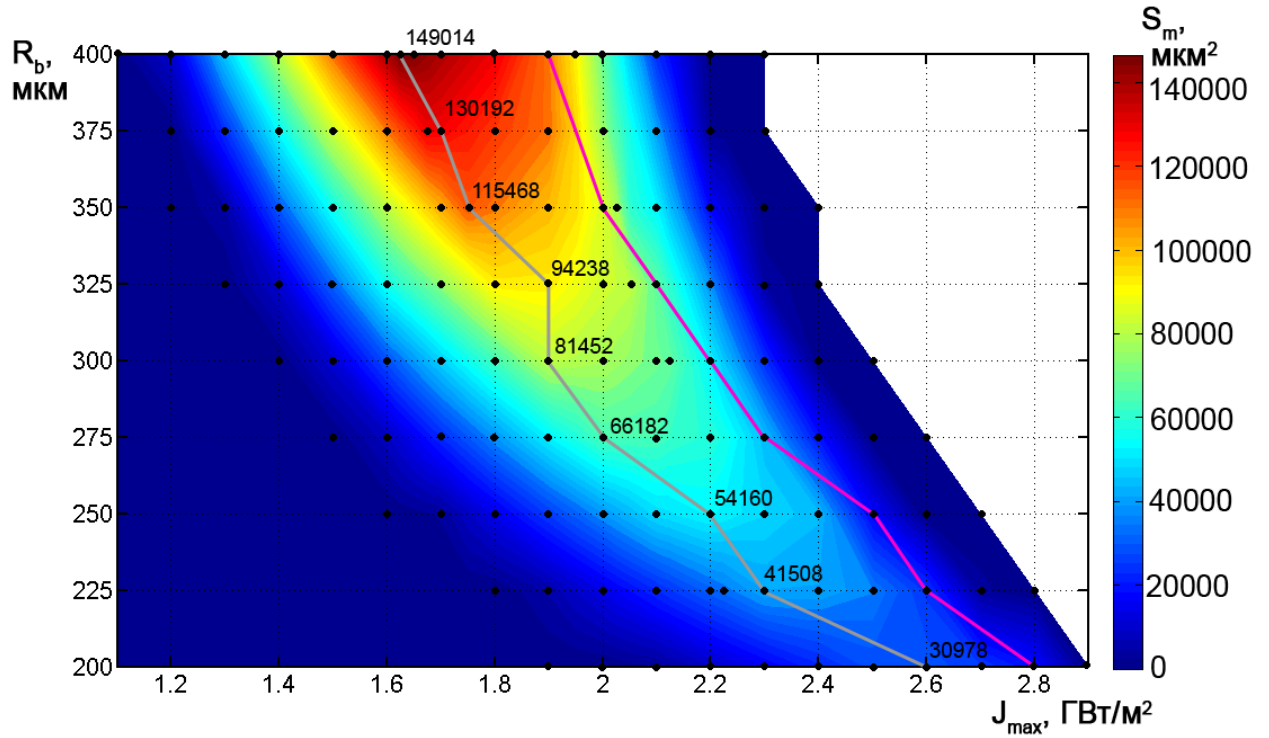


Рис. 4.12. Параметрическая диаграмма для оптимизации площади S_m , на которой наблюдается адгезия сплавленного порошкового слоя и подложки с выполнением обоих критериев достижения адгезии $\max_{t \in [0, \tau_{\text{имп.}}]} T \geq T_m$ и $\max \varepsilon \leq 0, 2$. Диаграмма построена для **одинокного** лазерного импульса в координатах пиковой удельной мощности J_{max} в луче и радиуса $R_{\text{луча}}$ луча. Фиолетовая линия разграничивает области: справа от линии используется критерий $\max \varepsilon \leq 0, 2$, слева — $\max_{t \in [0, \tau_{\text{имп.}}]} T \geq T_m$.

что поверхность образцов имеет более высокую катодную активность, чем железо-армко и никель. Это делает перспективным применение таких материалов в технологии электрохимического получения водорода для целей развития водородной энергетики.

Повышенная катодная активность композитных покрытий объяснена на основе данных структурно-фазовых исследований методами ПЭМ, РФЭС и РСА созданием на поверхности высокоактивных неравновесных наноразмерных фаз. Экспериментальный анализ полученных покрытий с содержанием никеля 3,2 и 10 вес.% Ni выявил образование композитного слоя, содержащего структурные элементы с нанокристаллитами никеля, рис. 4.13. Анализ данных РФЭС подтвердил наличие локальной химической неоднородности компонентов, формируемой за счет спекания ультрадисперсных частиц железа и никеля. Расшифровка рентгеновских дифрактограмм позволила оценить среднее значение размера кристаллитов никеля как 30 нм. Таким образом, целью исследований являлось выяснение механизмов формирования наноструктурного состояния в композитной смеси Fe–Ni при лазерной высокоскоростной обработке. Для этого необходимо было решить задачи по анализу стадий нагрева, плавления, консолидации и кристаллизации методом ДМПС.

Результаты двухуровневого моделирования и анализ. На макроскопическом уровне рассчитывались нестационарные тепловые поля, достигаемые скорости нагрева и охлаждения. Трехмерное моделирование тепловых полей проводилось с учетом фактических режимов ВЛП, измеренных характеристик порошка Fe–Ni и характеристик проникновения лазерного излучения в порошковом слое, приведенных в табл. Б.5 в Приложении. Далее полученные термограммы процесса передавались на мезоуровень, где выполнялось моделирование процессов переноса и структурообразования методом фазового поля. Уточнение параметров МФП, табл. 4.3, проведено сопоставлением значений модели с данными Европейской базы термодинамических данных чистых элементов (SGTE

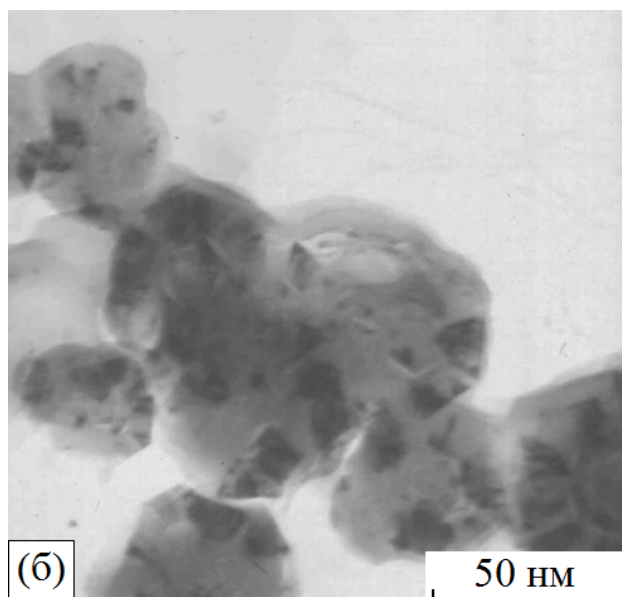


Рис. 4.13. Структура композита Fe–Ni, полученная методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Темные области на изображении соответствуют кристаллитам металлического никеля, расположенным на поверхности частиц железа.

database — *англ.*) [172,173]. Подробное описание процедуры выбора параметров фазового поля приведено в [78].

В исходной смеси частицы никеля располагаются между частицами железа, поэтому был произведен переход от задачи со случайной насыпкой частиц к одиночной модельной частице, которая имеет Fe ядро и Ni оболочку, рис. 4.14. Диаметр композитной частицы составлял 1 мкм. Концентрация никеля в оболочке была выбрана 5 вес.%, что при усреднении по всему объему частицы соответствует значению 3,2 вес.% Ni в исследуемом сплаве. Начало плавления наиболее вероятно на границе ядра и оболочки в силу разности температур плавления компонентов. На этой границе в начальный момент времени задавалась область жидкой фазы.

Далее была выполнена серия расчетов, где варьируемым параметром являлась скорость нагрева $V_{\text{нагр.}}$, которая принимала значения 1×10^8 , 1×10^9 , 3×10^9 , 4×10^9 и 5×10^9 К/с. Приведенные значения параметра $V_{\text{нагр.}}$ определялись на основании аппроксимации температурных

Таблица 4.3

Параметры модели фазового поля, использованные для расчета сплава
Fe–3,2 вес.% Ni

наименование параметра	обозн.	велич.
молярный объем, м ³ /моль	V_m	$1,25 \times 10^{-5}$
поверхностная энергия границы раздела жидкой и твердой фаз, Дж/м ²	σ	0,204
мобильность диффузной границы раздела фаз:	M_L, M_S	
— в 2D расчетах с учетом скейлинга (3.43)		
и		
потока $\vec{j}_\alpha^{AT}$ антизахвата		0,03
— в 3D расчетах без учета скейлинга и антизахвата		0,001
коэффициент диффузии никеля в жидкой фазе, м ² /с	D	$7,1 \times 10^{-9}$
тангенс угла наклона равновесной линии ликвидуса, К/вес.%	m_e	–2,4
равновесный коэффициент распределения на границе раздела фаз	k_{eB}	0,65
ширина границы раздела фаз, м	δ	3×10^{-7}

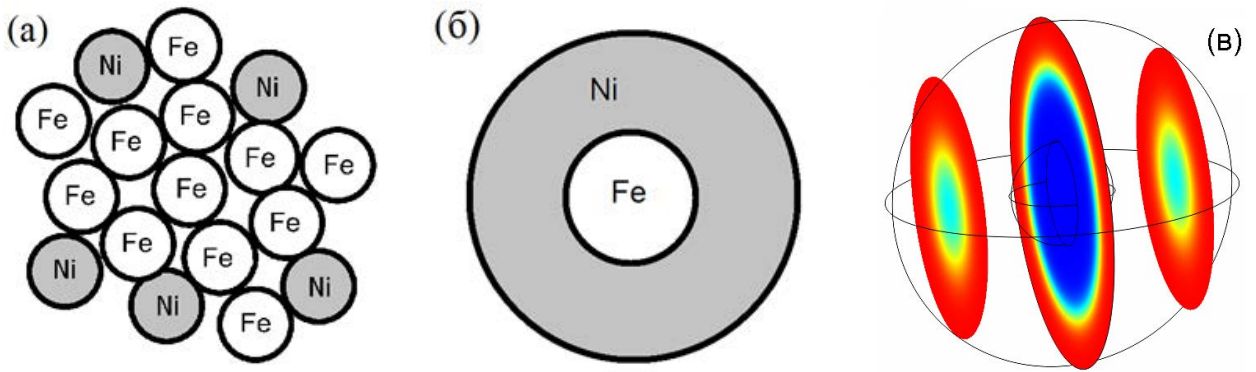


Рис. 4.14. Модель усреднения химического состава порошка железа с включениями никеля, использованная при моделировании. (а) Распределение частиц Fe и Ni в порошке. (б) Переход к композитной частице с железным ядром и никелевой оболочкой. Плавление начинается на границе раздела Fe и Ni фаз. (в) Распределение никеля в трехмерной расчетной модели, заданное в качестве начальных условий (3.44) для моделирования сегрегации компонентов.

профилей на стадии нагрева. Таким образом, значение $V_{\text{нагр.}}$ однозначно определяет расстояние от композитной частицы до поверхности образца и соответствует различным условиям тепловой обработки внутри порошкового слоя. Скорость охлаждения в расчетах принималась постоянной и равной $V_{\text{охл.}} = -2 \times 10^8$ К/с. Во-первых, отметим, что скорость охлаждения $V_{\text{охл.}}$ меньше скорости нагрева на 1-2 порядка, поскольку нагрев происходит лучевым способом, а охлаждение лимитируется теплопроводностью. Во-вторых, приведенные $V_{\text{нагр.}}$ и $V_{\text{охл.}}$ значительно выше, чем оценки, сделанные выше в табл. 4.2. Это объясняется короткоимпульсным режимом ВЛП с длительностью импульса $\tau_{\text{имп.}} = 10^{-7}$ с, что гораздо меньше $\tau_{\text{имп.}} = (1 \div 4) \times 10^{-3}$ с, чем в экспериментах с порошком железа.

Результаты моделирования представлены на рис. 4.15 и 4.16. Движение межфазной поверхности раздела фаз при высокой скорости нагрева $V_{\text{нагр.}} = 5 \times 10^9$ К/с показано в виде положения изоповерхностей переменной фазового поля ϕ_S в различные моменты времени на рис. 4.15. На стадии нагрева происходит постепенный рост области жидкой фа-

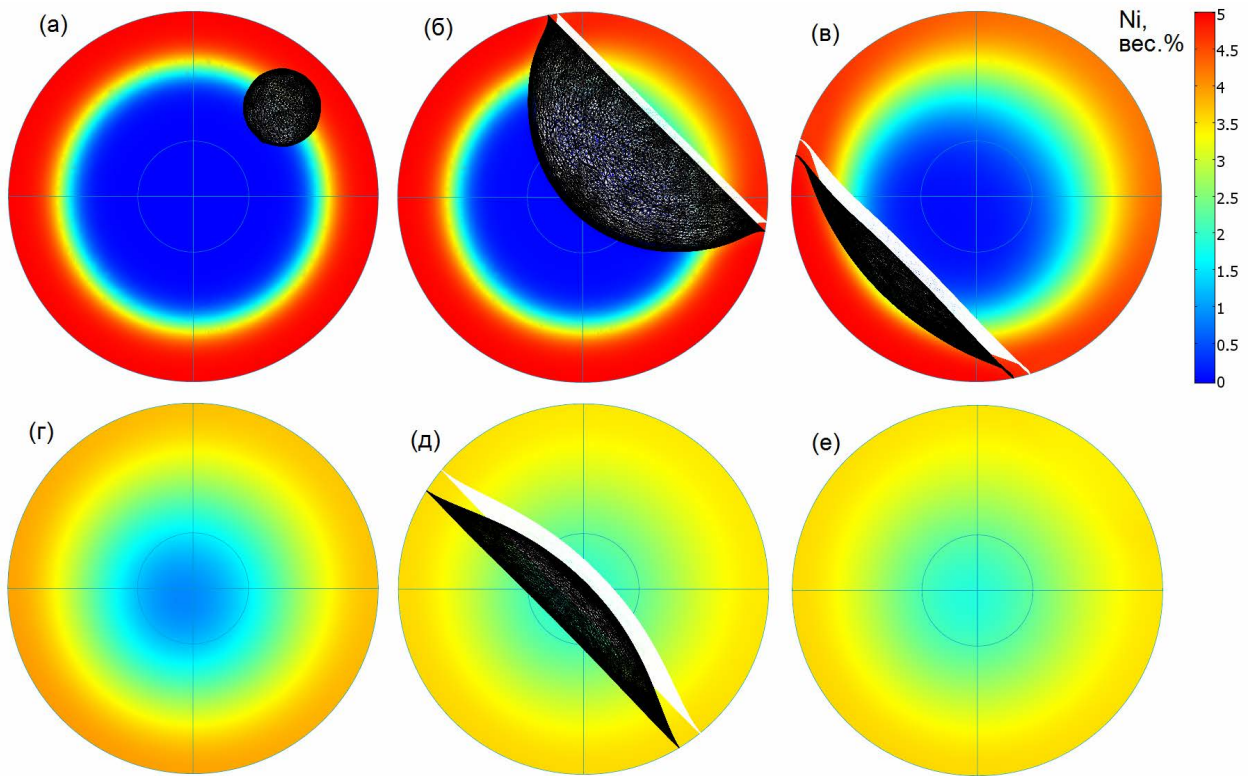


Рис. 4.15. Динамика движения межфазной поверхности и диффузии никеля с течением времени при плавлении с $V_{\text{нагр}} = 5 \times 10^9$ К/с. Положение границы раздела жидкой L и твердой S фаз представлено на рисунке изоповерхностями $\phi_S = 0,4$ (белый цвет) и $\phi_S = 0,6$ (черный цвет). Времена и стадии плавления: (а) $t = 0$, на границе железного ядра и никелевой оболочки присутствует сферический зародыш жидкой фазы, (б) $t = 0,6$ мкс, начало плавления, (в) $t = 1,2$ мкс, завершающая стадия плавления, (г) $t = 2,4$ мкс, диффузия компонентов в жидком состоянии, (д) $t = 3,6$ мкс, высокоскоростная кристаллизация, (е) $t = 3,9$ мкс, окончательное распределение концентрации компонентов после затвердевания.

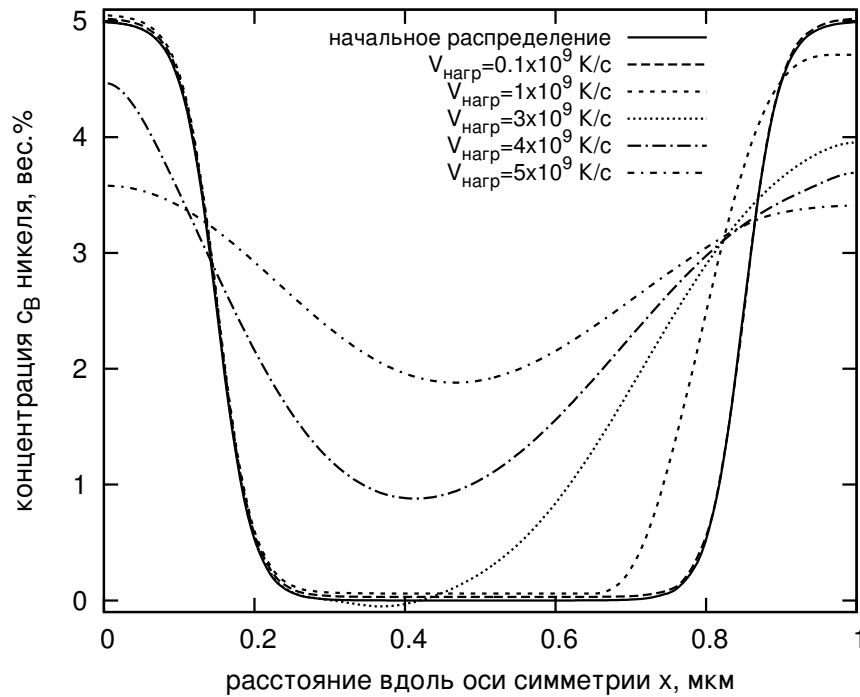


Рис. 4.16. Профили концентрации c_B никеля вдоль диаметра композитной частицы как функция скорости $V_{\text{нагр.}}$ нагрева, которая зависит от расстояния z между частицей и поверхностью порошкового слоя.

зы, рис. 4.15(б,в), что приводит к полному плавлению частицы (рис. 4.15(г)). Спустя 2 мкс после плавления начинается кристаллизация с последующим полным затвердеванием. Данное время нахождения частицы в жидком состоянии, определяемое величиной $V_{\text{нагр.}}$, оказывает критическое влияние на микросегрегацию никеля, как наглядно показано на рис. 4.16, где приведено окончательное распределение никеля после полного затвердевания частицы.

Профили концентрации, рассчитанные вдоль радиального направления, свидетельствуют об уменьшении разности Δc_B концентраций никеля в различных точках композитной частицы в зависимости от величины $V_{\text{нагр.}}$. При малых $V_{\text{нагр.}} = 10^8 \div 10^9$ К/с продолжительность стадии плавления недостаточна для выравнивания концентрации никеля при жидкофазной диффузии. В результате неоднородная по химическому составу структура композитной частицы сохраняется после спекания.

Указанные условия наблюдаются на глубине от 20 до 70 мкм от поверхности. Напротив, при больших $V_{\text{нагр.}} \sim 5 \times 10^9$ К/с, соответствующих поверхностному слою глубиной до 20 мкм, по результатам численного моделирования прогнозируется выравнивание концентрации никеля внутри композитной частицы. Разность Δ_{CB} уменьшается от исходного значения $\Delta_{CB} = 5$ вес.% вплоть до значения $\Delta_{CB} = 1 - 2$ вес.%. Важным результатом моделирования является оценка скорости $V_{\text{затв.}}$ затвердевания композитной частицы. Для случая $V_{\text{нагр.}} \sim 5 \times 10^9$ К/с, приведенного на рис. 4.15, время затвердевания составило порядка 0,5 мкс. Учитывая размер частицы, равный 1 мкм, получаем оценку $V_{\text{крист.}} \sim 2$ м/с. При такой высокой скорости возможен неравновесный захват примеси фронтом кристаллизации.

4.2.3. Моделирование получения покрытий на основе Fe–Cr₂O₃

Обзор экспериментальных данных. Постановка задачи. Вторым примером формирования функциональных покрытий является получение металл-керамических композиционных материалов методом ВЛП. Исследовалась система Fe–Cr₂O₃, в которой ультрадисперсный порошок оксида хрома (III) наносился на стальную подложку и обрабатывался лазерным лучом. Такой способ обработки относится к широкому классу методов микролегирования поверхности материалов. Рисунок 4.17 показывает результаты оптической и просвечивающей электронной микроскопии поверхностного слоя получившегося композита. На оптической микроскопии, рис. 4.17(а), заметна переходная область между зонами полного и неполного растворения оксида хрома в металлической матрице. В этой области оксид хрома виден в виде цветных зеленоватых разводов, что характерно для Cr₂O₃. Таким образом, лазерная обработка дает возможность проводить диспергирование включений без их полного растворения, что практически важно для получения износостойких покрытий с твердыми включениями. На рис. 4.17(б) обращает на себя внимание тот факт, что наноразмерные включения Cr₂O₃ с размерами менее 50 нм формируют так называемые специальные границы, в которых образуется переходный слой между матрицей и включениями. Такие границы связывают композиционный материал и позволяют получить высокую твердость и износостойкость. В традиционных методах производства твердосплавных материалов между матрицей и включениями зачастую имеется слабый механический контакт, что приводит к выкрашиванию включений из матрицы. С использованием ВЛП был разработан [158,174] метод получения износостойких покрытий на основе карбида вольфрама, которые показали высокие эксплуатационные свойства.

Анализ структурно-фазовых характеристик композитного слоя Fe–Cr₂O₃, выполненный независимо методами РФЭС и РСА, пока-

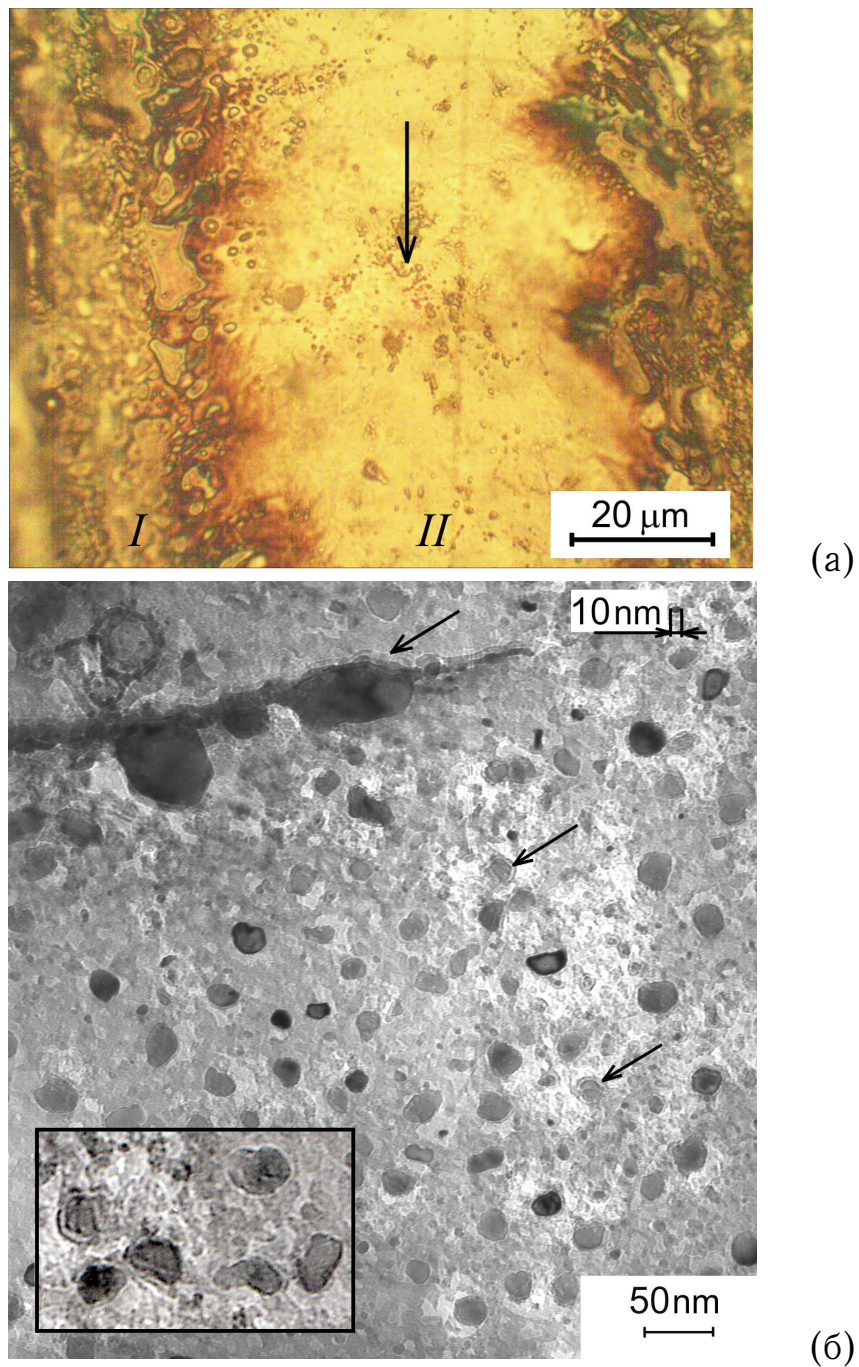
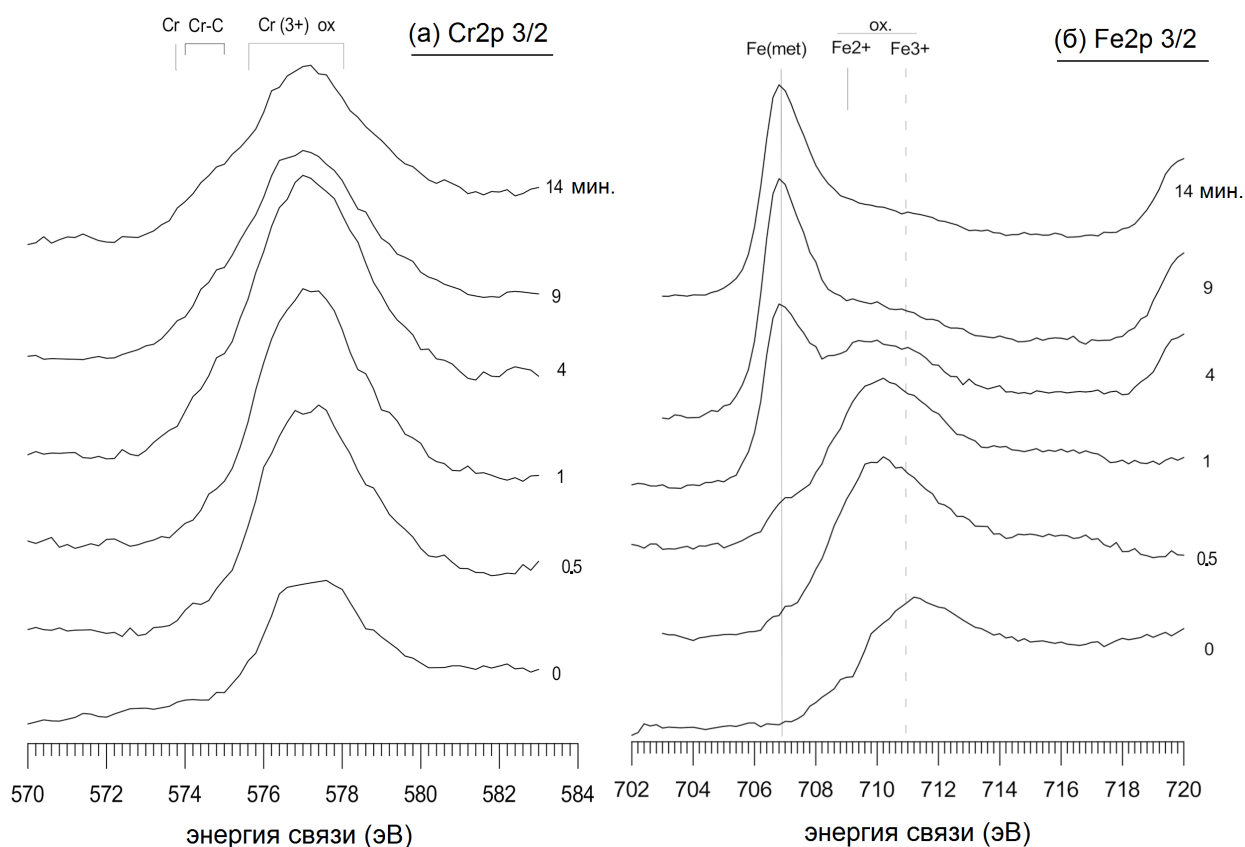


Рис. 4.17. (а) Изображение (x1000) поверхности стали с нанесенным на нее ультрадисперсным порошком Cr_2O_3 после короткоимпульсной лазерной обработки [159,175]. Стрелка показывает направление движения луча. Области I и II соответствуют зонам неполного и полного растворения оксида хрома в металлической матрице. (б) Светлопольное ПЭМ изображение микроструктуры в зоне неполного растворения Cr_2O_3 . Стрелками и во вкладке показано формирование специальных границ с хорошим контактом между металлической матрицей и включениями.

зал, что поверхностный слой после лазерной обработки содержит включения металлического хрома $\text{Cr}_{\text{метал.}}$. До обработки металлический неокисленный хром отсутствовал. Рисунок 4.18 и приведенная на рисунке таблица распределения элементов с различной степенью окисления показывают, что $\text{Cr}_{\text{метал.}}$ регистрируется на глубине от 4 до 14 нм. Согласно всем имеющимся данным, оксид хрома не может восстанавливаться железом, поскольку обладает значительно бóльшим выигрышем $\Delta_f G^\circ(\text{Cr}_2\text{O}_3) = -1058$ кДж/моль свободной энергии Гиббса при окислении, чем железо со значением $\Delta_f G^\circ(\text{Fe}_2\text{O}_3) = -742$ кДж/моль. Таким образом, целью двухуровневого моделирования было выяснение кинетики окислительно-восстановительных реакций в зоне лазерного легирования оксидом хрома (III) поверхности стали.

Результаты двухуровневого моделирования и анализ. На макроскопическом уровне был проведен ВЭ, в котором оценивались достигаемые в зоне оплавления температуры и время теплового воздействия. Далее полученные данные использовались для термодинамического анализа окислительно-восстановительных реакций в части определения смещения равновесия к исходным компонентам или продуктам реакций. Такой анализ необходим, поскольку рассматриваются металлургические процессы при высоких температурах, где возможно существенное отклонение термодинамических потенциалов от равновесных (при комнатной температуре) значений.

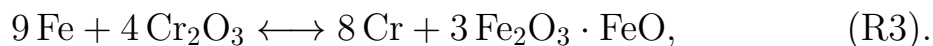
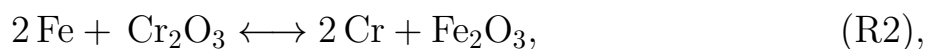
Возможные в зоне оплавления реакции условно делятся на три группы. Первая группа включает три реакции восстановления оксида



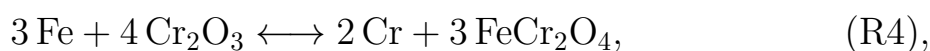
Δt трав. мин.	глуб., нм	концентрация элемента, ат.%							
		O	C	Fe, всего	Cr, всего	Fe окис. (+2, +3)	Fe метал. (0)	Cr окис. (+3)	Cr метал. (0)
0	0	46,0	48,7	0,7	4,6	0,7	0,0	4,6	0,0
0,5	1	58,4	6,6	22,8	12,2	22,8	0,0	12,2	0,0
1	3	58,9	6,2	20,5	14,5	18,7	1,8	14,5	0,0
4	11	54,6	4,6	21,7	19,1	9,6	12,1	17,4	1,7
9	24	42,1	3,3	37,5	17,1	11,7	25,7	15,0	2,1
14	38	36,5	3,8	45,4	14,3	12,5	32,9	12,3	2,0

Рис. 4.18. Результаты РФЭС поверхности покрытия $\text{Fe}+\text{Cr}_2\text{O}_3$ после травления поверхности ионами Ar^+ . (а,б) РФЭС спектры хрома и железа как функция энергии связи и времени травления. (таблица) Атомная концентрация элементов и их степень окисления (указана в круглых скобках) как функция времени травления Δt [159,175].

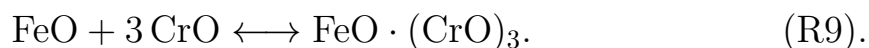
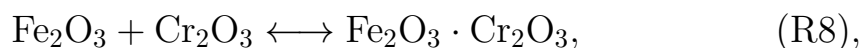
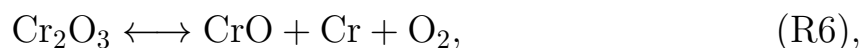
хрома (3+) путем образования простых и смешанных оксидов железа:



Ко второй группе относятся реакции восстановления оксида хрома (3+) в результате формирования хромшпинели и твердых растворов:



В третьей группе содержатся реакции, предложенные в литературе [176]:



В работе проведен расчет термодинамических потенциалов для окислительно-восстановительных реакций, используя формализм изменения свободной энергии Гиббса при формировании химических соединений. Анализ выполнен с использованием термохимического пакета FactSage 6.4 [70], который включает метод Calphad и базы данных энтальпий образования соединений. В отличие от широкоиспользуемого пакета Thermocalc, FactSage содержит обширную базу данных для оксидов металлов, а также точнее производит учет давления при расчете химических равновесий, что важно для металлургических процессов.

Термодинамические расчеты энергетических балансов реакций (R1) – (R5) подтвердили, что появление $\text{Cr}_{\text{метал.}}$ при лазерной обработке

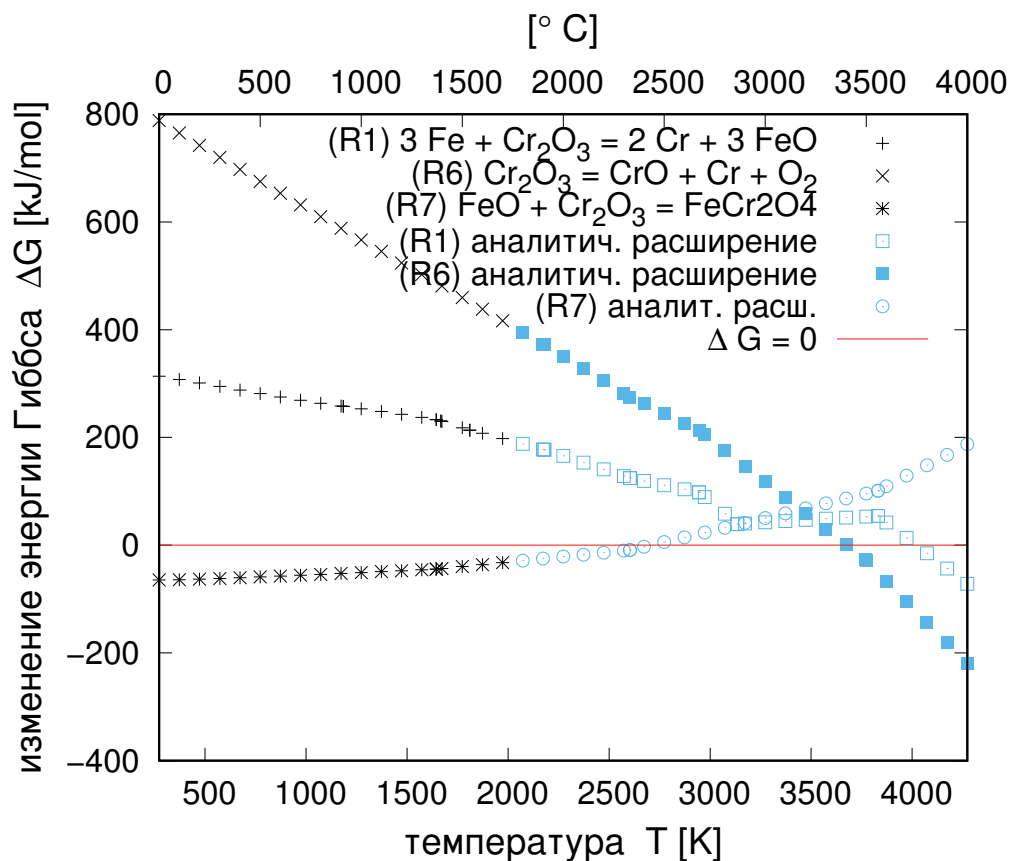


Рис. 4.19. Изменение свободной энергии Гиббса как функция температуры в химических реакциях (R1), (R6) и (R7), полученное в пакете FactSage 6.4 для термодинамических расчетов. Данные для температур $T < 2073 \text{ K}$ (1800°C) подтверждены экспериментальными измерениями. Высокотемпературные данные при $T > 2073 \text{ K}$ получены аналитическим расширением термодинамических потенциалов.

вызвано смещением при высоких $T > 2500^\circ\text{C}$ температурах равновесия в сторону окисления железа и восстановления оксида хрома. Рисунок 4.19 содержит результаты расчета изменения свободной энергии Гиббса для реакций (R1), (R6) и (R7). Образование хромшпинели FeCr_2O_4 по реакции (R7) при высоких температурах термодинамически невыгодно. При этом в реакциях (R1) восстановления оксида хрома железом и особенно частичного разложения до оксида хрома (II) равновесие смещается в сторону металлического хрома при температурах $T \sim (3000 \div 3500)^\circ\text{C}$. Такие реакции также приведены в литературных источниках. Например, в [177] для процесса электродугового переплава нержавеющей стали прогнозируется образование жидкого Fe–Cr расплава в контакте со Cr_2O_3 шлаком при температуре $T = 1873\text{ K}$ (1600°C).

4.3. Выводы к главе 4

1. Методом двухуровневого моделирования изучены сопряженные процессы переноса и структурообразования в методах селективного (СЛП) и высокоскоростного (ВЛП) лазерного плавления металлических порошков. Показано, что ВЛП композитных смесей позволяет получать функциональные материалы, наследующие неоднородность химического состава за счет высоких скоростей локального нагрева/охлаждения и большой скорости кристаллизации, сопоставимой со скоростью диффузии химических компонентов.
2. Теплоперенос в порошковых средах описывается нелинейной зависимостью эффективного коэффициента теплопроводности от пористости, которая существенно отличается от линейной и перколяционной моделей теплопереноса в пористых средах. На основе двухуровневого вычислительного эксперимента предложен метод оптимизации режимов СЛП/ВЛП металлических порошков, имеющий хорошее согласие с экспериментальными данными.

3. Консолидация частиц порошка и усадка порошкового слоя происходит по двухэтапной схеме, когда на первом этапе реализуется формирование связного пористого каркаса и консолидация газовых включения, на втором этапе происходит вывод газовых включений на поверхность. Прогнозирование второго этапа исключительно важно для контроля остаточной пористости в СЛП процессах.
4. При ВЛП композитных смесей “металл–металлический оксид” возможны окислительно-восстановительные реакции, протекание которых в обычных металлургических процессах термодинамически запрещено. К их числу относится восстановление оксидов хрома железом до металлического состояния при высоких $T \sim (3000 \div 3500)^\circ\text{C}$ температурах, достигаемых в зоне высокоэнергетической лазерной обработки.
5. Совместно с соавторами публикаций впервые разработан, запатентован и внедрен в производство метод ВЛП для получения функциональных покрытий с улучшенными эксплуатационными свойствами. Теоретические исследования выполнены с использованием программы для ЭВМ “Компьютерная оптимизация процессов лазерной обработки порошков”.

5. Моделирование отбора микроструктуры в бесконтейнерных методах высокоскоростной кристаллизации расплавов

В главе 5 выполнено теоретическое изучение многофазного зарождения, кристаллического роста и отбора микроструктуры при высокоскоростной кристаллизации металлических расплавов бесконтейнерными методами, включая распыление в капельных трубах (РКТ, drop tube processing (DTP) — *англ.*) и электромагнитную левитацию (ЭМЛ, electromagnetic levitation (EML) — *англ.*). Исследования проведены для магнито жестких и магнито мягких сплавов $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}_1$, $\text{Fe}_{50}\text{Co}_{50}$ и $\text{Co}_{50}\text{Cu}_{50}$. Экспериментальные данные получены в рамках космических экспериментов “Магнефаз” (Европейское космическое агентство (ЕКА), 2004 – 2018 гг.) и “Перитектика”, выполняемых на борту МКС (Роскосмос, ЕКА, НАСА, 2012 – 2018 гг.). Результаты математического моделирования позволили объяснить ряд наблюдаемых в эксперименте явлений и предсказать эффекты, трудно регистрируемые при испытаниях. В предыдущих главах была подробно рассмотрена методология двухуровневого подхода к моделированию кристаллизации. В этой и следующей главах кратко приведена формулировка двухуровневых моделей, и изложение в основном посвящено результатам вычислительного эксперимента.

Основные результаты, представленные в главе 5, опубликованы в [62, 77, 79–81, 94, 178].

Список обозначений в главе 5

- РКТ — распыление в капельных трубах

- ЭМЛ — электромагнитная левитация (EML, electromagnetic levitation — *англ.*)
- ГЦЗ — гетерогенный центр зародышеобразования
- КТЗ — классическая теория зародышеобразования

5.1. Постановка задачи и формулировка математической модели

Традиционно используемый в металлургии литейный способ предназначен для изготовления изделий с линейными размерами в диапазоне 0,1 — 10 м. При необходимости практикуется литье малых форм с размерами в диапазоне 0,01 — 0,1 м. В обоих случаях после заливки в литейную форму происходит активное охлаждение расплава в результате теплового контакта с ее стенками. Далее форма прогревается и скорость охлаждения стабилизируется в диапазоне единиц и долей градуса в секунду [34, 74, 87]. Хотя в целом процесс кристаллизации протекает в неравновесных условиях, во всех частях системы соблюдается локальное термодинамическое равновесие. Разработанные в последнее время методы бесконтейнерной кристаллизации [16, 179] позволяют достигать скоростей охлаждения $10^1 - 10^5$ К/с, что связано как с отсутствием контакта со стенками тигля, так и специальной очисткой расплава от примесей перед кристаллизацией. Это приводит к возможности быстрого переохлаждения расплава ниже температуры ликвидуса, когда система находится в состоянии глубоко переохлажденной жидкости. Таким образом, создаются условия для образования и роста кристаллических зародышей стабильных и метастабильных фаз [16, 180]. Многофазная кристаллизация, при которой конкурируют процессы зарождения фаз и их кристаллического роста [181–183], позволяет получать широкий спектр структурно-фазовых состояний материала.

В литературе ранее были предложены различные подходы к описанию кинетики зародышеобразования [184, 185], температурно-зависимой

поверхностной энергии [186], распределению и геометрии гетерогенных центров зародышеобразования (ГЦЗ, heterogeneous nucleation site (HNS) — *англ.*) [187, 188], оценке доли твердой фазы как функции скорости зарождения и времени [189–191]. Также были разработаны аналитические [55, 192, 193] и численные [194–196] подходы к моделированию кристаллизации, включая фазо-полевой метод [145]. В работах [197, 198] был предложен мультифизичный подход к моделированию нестационарного зародышеобразования. При этом описание нестационарных процессов при высокоскоростной кристаллизации является незаконченным по причине сложности и разнообразия протекающих физических процессов. В связи с этим целью двухуровневого моделирования бесконтейнерной кристаллизации является разработка методик количественного прогнозирования и управления микроструктурой сплавов в условиях высоких скоростей охлаждения. Особое внимание уделено анализу нестационарного многофазного зарождения на ГЦЗ, поскольку это является одним из ключевых факторов для отбора микроструктуры при быстрой закалке расплавов.

В работе сформулирована математическая модель [77, 81, 94, 199] многофазной кристаллизации, которая включает уравнения для расчета траекторий и скоростей движения, гидродинамических течений, теплообмена, многофазного зарождения и роста кристаллических фаз в переохлажденных металлических каплях. Рассмотрим вначале задачу кристаллизации капель при распылении расплава в инертной газовой атмосфере в капельной трубе.

Модель вязкого течения. Предположим, что инертный газ с абсолютной вязкостью μ и плотностью ρ обтекает с ускорением жидкую сферическую каплю с вязкостью $\tilde{\mu}$ и плотностью $\tilde{\rho}$. Далее по тексту верхний индекс $\sim$ используется для определения функций внутри ($0 \leq r \leq 1$) капли и без индекса определены функции для внешнего ($r > 1$) течения, где r — безразмерная радиальная координата, табл. 5.1. Тече-

Таблица 5.1

Используемые обозначения и преобразования к безразмерному виду в задачах бесконтейнерной кристаллизации

параметр	обозн.	преобраз.	пояснение
радиальная координата (м)	r	r/a	a — радиус капли
время, в гидродинамической задаче (с)	t	$t/(a^2/\nu)$	ν — кинем. вязкость газа
функция тока ($\text{м}^3 \text{с}^{-1}$)	Ψ	$\Psi/(U_{\text{стац.}} a^2)$	$U_{\text{стац.}}$ — стац. скорость капли
фактическая скорость капли (м с^{-1})	U	$U/U_{\text{стац.}}$	
радиальная компонента скорости течения (м с^{-1})	u_r	$u_r/U_{\text{стац.}}$	
тангенциальная компонента скорости течения (м с^{-1})	u_θ	$u_\theta/U_{\text{стац.}}$	
время, в задаче теплопереноса (с)	t	$t/(a^2/\tilde{\alpha})$	$\tilde{\alpha}$ — температуропроводность капли
температура (К)	T	$\frac{(T - T_{\text{газ.}})}{(T_L - T_{\text{газ.}})}$	T_L — температура ликвидус $T_{\text{газ.}}$ — температура газа
интенсивность зародышеобразования ($\text{м}^{-3} \text{с}^{-1}$)	I	$Ia^5/\tilde{\alpha}$	

ние вокруг капли аксиальносимметрично, поэтому трехмерные уравнения Навье-Стокса для задачи обтекания капли газом могут быть записаны в терминах функции тока $\Psi(r, \theta)$ в безразмерной форме, полученной в результате преобразований, также указанных в табл. 5.1:

$$\begin{aligned} E^4 \tilde{\Psi} + \frac{1}{2} \sin^2 \theta \tilde{\text{Re}} \left[\frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial r} \frac{\partial}{\partial \mu} \left(\frac{E^2 \tilde{\Psi}}{r^2 \sin^2 \theta} \right) - \frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial \mu} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{E^2 \tilde{\Psi}}{r^2 \sin^2 \theta} \right) \right] &= \beta_u \frac{\partial}{\partial t} (E^2 \tilde{\Psi}), \\ E^4 \Psi + \frac{1}{2} \sin^2 \theta \text{Re} \left[\frac{\partial \Psi}{\partial r} \frac{\partial}{\partial \mu} \left(\frac{E^2 \Psi}{r^2 \sin^2 \theta} \right) - \frac{\partial \Psi}{\partial \mu} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{E^2 \Psi}{r^2 \sin^2 \theta} \right) \right] &= \frac{\partial}{\partial t} (E^2 \Psi), \end{aligned} \quad (5.1)$$

с учетом граничных и начальных условий

$$\{\tilde{u}_r, \tilde{u}_\theta\} < M \quad \text{при } r = 0; \quad \Psi \rightarrow -\frac{1}{2} U r^2 (1 - \mu^2) \quad \text{при } r \rightarrow r_{\text{кап.труб.}}; \quad (5.2)$$

$$\tilde{u}_r = 0, \quad u_r = 0, \quad \tilde{u}_\theta = u_\theta, \quad \tilde{\tau}_{r\theta} = \tau_{r\theta} \quad \text{при } r = 1;$$

$$\tilde{\Psi} = \tilde{\Psi}_0, \quad \Psi = \Psi_0 \quad \text{при } t = 0,$$

где $\mu = \cos \theta$, $E^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1-\mu^2}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \mu^2}$ — оператор Стокса, $\text{Re} = 2aU_{\text{ss}}/\nu$ и $\tilde{\text{Re}} = 2aU_{\text{ss}}/\tilde{\nu}$ — внешнее и внутреннее числа Рейнольдса, $u_r = \frac{1}{r^2} \frac{\partial \Psi}{\partial \mu}$ и $u_\theta = \frac{1}{r\sqrt{1-\mu^2}} \frac{\partial \Psi}{\partial r}$ — радиальная и тангенциальная компоненты скорости вязкого течения, $r_{\text{кап.труб.}}$ — безразмерный радиус капельной трубы, $\tau_{r\theta}$ — тангенциальная компонента тензора вязких напряжений. Коэффициент $\beta_u = \nu/\tilde{\nu}$ служит для согласования времени в газовой и жидкой фазах. При $t = 0$ внешняя функция тока Ψ_0 выбрана в виде решения задачи для невязкого обтекания сферы. Внутренняя функция тока $\tilde{\Psi}_0$ выбиралась либо для случая отсутствия течения ($\vec{u} = \vec{0}$), либо в виде вихревого решения Адамара-Рабжинского. Нестационарные уравнения переноса импульса решались для нестационарной скорости $U = U(t)$ падения капли, которая учитывалась в граничных условиях (5.2).

Расчет скорости движения капли. Скорость $U = U(t)$ капли рассчитывается в соответствии со 2-м законом Ньютона, записанным в безраз-

мерной форме в скалярном виде:

$$\frac{dU}{dt} = \frac{1}{2} (1 - \hat{\rho}) \frac{\text{Re}}{\text{Fr}} - \frac{3}{16} \hat{\rho} \text{Re } U^2 C_D, \quad (5.3)$$

где $\text{Fr} = U_{\text{стац.}}^2 / ag$, $C_D = F_{\text{сопр.}} / (\frac{1}{2} \pi \rho U^2 a^2)$ — интегральный коэффициент сопротивления, $\hat{\rho} = \rho / \tilde{\rho}$ — отношение плотностей. Для уравнения (5.3) задается начальное условие $U(t = 0) = U_0$, где U_0 — скорость выбрасывания капли из сопла.

Модель теплопереноса. Теплоперенос вокруг капли описывается уравнением теплопроводности

$$\begin{aligned} \beta_T \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\text{Pe}}{2} \vec{u} \cdot \nabla T &= \nabla^2 T, \quad r > 1, \\ \frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + \frac{\tilde{\text{Pe}}}{2} \vec{u} \cdot \nabla \tilde{T} &= \nabla^2 \tilde{T}, \quad 0 \leq \tilde{r} \leq 1, \end{aligned} \quad (5.4)$$

где $\text{Pe} = 2aU_{\text{ss}}/\alpha$ и $\tilde{\text{Pe}} = 2aU_{\text{ss}}/\tilde{\alpha}$ — внешнее и внутреннее числа Пекле и $\beta_T = \tilde{\alpha}/\alpha$. Начальные условия соответствуют

$$\tilde{T} = 1, \quad T = 0 \quad \text{при } t = 0, \quad (5.5)$$

граничные условия задаются в виде:

$$\begin{aligned} T &= \tilde{T} && \text{при } r = 1, \\ -k \frac{\partial T}{\partial r} + J_{\text{рад.}} &= -k \frac{\partial T}{\partial r} && \text{при } r = 1, \\ T &\rightarrow 0 && \text{при } r \rightarrow r_{\text{кап.труб.}}, \end{aligned} \quad (5.6)$$

где k — теплопроводность и $J_{\text{рад.}}$ — тепловой лучевой поток, который в размерной форме определяется законом Стефана-Больцмана [85]: $J_{\text{рад.}} = \varepsilon \sigma_{SB} F_{12} (T_{\text{капли}}^4 - T_{\text{стены}}^4)$, где $T_{\text{капли}}$ и $T_{\text{стены}}$ — размерные температуры поверхностей капли и стены трубы соответственно, ε — коэффициент черноты, σ_{SB} — константа Стефана-Больцмана и F_{12} — коэффициент видимости.

Модель зарождения кристаллических фаз. Зарождение кристаллических фаз описывается с использованием классической теории зарождения (КТЗ, classical nucleation theory (CNT) — *англ.*) [179, 184, 185], которая была расширена для учета двух физических факторов — стохастичности по времени процесса зарождения и влияния смачиваемости и геометрических характеристик ГЦЗ:

$$I_{\text{зарожд.}} = I_0 \xi(c_{\text{ГЦЗ}}, P(r_{\text{ГЦЗ}})) \exp\left(-\frac{\Delta G^* f(\theta)}{k_B T}\right) D(P(r_{\text{ГЦЗ}}), r > r^*) a^3 \frac{a^2}{\tilde{\alpha}},$$

$$\Delta G^* = b \frac{\sigma^3(T)}{[\Delta G(T)]^2}, \quad (5.7)$$

где $I_{\text{зарожд.}}$ — безразмерная интенсивность зародышеобразования, I_0 — кинетический фактор, ξ — коэффициент, зависящий от механизма зарождения, $c_{\text{ГЦЗ}}$ — концентрация ГЦЗ, $P(r_{\text{ГЦЗ}})$ и $D(P(r_{\text{ГЦЗ}}))$ — плотность вероятности распределения ГЦЗ по размерам и ее интегральная функция распределения, $r_{\text{ГЦЗ}}$ и r^* — радиус ГЦЗ и критический радиус стабильного зародыша, ΔG^* — энергия активации, b — форм-фактор ($b = 16\pi/3$ для сферического зародыша), $\Delta G(T)$ — удельное на единицу объема изменение энергии Гиббса, $\sigma(T)$ — поверхностная энергия, $f(\theta)$ — каталитический фактор, зависящий от угла смачивания θ . Обоснование уравнений модели зарождения приведено в Приложении в разделе Е.

Зарождение является стохастическим процессом [200, 201], зависящим от формы зародыша и ГЦЗ, а также от смачиваемости ГЦЗ [187, 188], поэтому математическое моделирование зарождения является нетривиальной задачей. В модели стохастичность учитывалась генерацией случайной переменной пуассоновского типа [197], которая корректно учитывает процесс зарождения во времени. Этим модель отличается от детерминированного подхода, который дает количество потенциальных центров зарождения при заданном переохлаждении, но не описывает, как происходит активация этих центров во времени.

Модель термически-контролируемого роста. На масштабе всего образца (макроскопическом уровне) расчет роста кристаллической фазы

производится на основе решения уравнения для радиуса кристаллического зародыша. Все зародыши классифицируются на два типа в зависимости от механизма их роста. Рост зародышей первого типа контролируется теплоотводом от фазовой границы, если коэффициент распределения на фазовой диаграмме близок к единице, $k_e \gtrsim 0,8$ и сегрегация компонентов малозначительна. В этом случае применяется метод функции Грина для нестационарно теплового источника, расположенного на поверхности растущего сферического зародыша. Используя мультипольное разложение, вычисляется скорость роста радиуса зародыша, который испытывает действие тепловых полей других зародышей [77, 197]. Для этого температура в любой точке образца получается интегрированием по времени и по всем сферическим тепловым источникам. В данном подходе предполагается, что средняя температура по поверхности зародыша равна температуре ликвидус. Тогда уравнение для скорости $V_{\text{роста}}$ определяется тепловым балансом на фазовой границе:

$$\vec{V}_{\text{роста}} = -\frac{k}{\rho(L + C_p\Delta T)} \partial T / \partial \vec{n}, \quad (5.8)$$

где $\partial T / \partial \vec{n}$ — производная температуры по нормали к поверхности зародыша. Отметим, что метод функции Грина является классическим методом, который предполагает сложную процедуру интегрирования и имеет зависимость от числа членов в разложении. Вместе с тем, такой аналитический подход в задаче бесконтейнерной кристаллизации позволяет проводить расчет большого (до 10 000) числа зародышей, что актуально для квазикристаллов. Другие методы, включая МФП, не могут рассчитывать такое число кристаллов без суперкомпьютерных вычислительных технологий.

Модель сегрегационно-лимитируемого роста. Рост зародышей второго типа лимитируется сегрегацией и отводом примесных компонентов от фазовой границы, что приводит к формированию дендритной морфологии. В работе для такого случая использована комбинация двух

методов: численной модели [62, 79, 80, 178, 202–205] дендритного роста в приближении двухфазной зоны и модели осреднения дендритного пакета [74]. Первый метод позволяет рассчитать скорость роста дендрита и его морфологию. Второй метод использует полученные первым методом данные для осреднения степени сегрегации и оценки объема твердой фазы для учета в макроскопическом балансе. Мезоскопическая модель дендритного роста в сильнонеравновесных условиях сводится к уравнениям

$$C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) + L \frac{\partial G}{\partial t}, \quad (5.9a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} [(1 - G)c_L + kGc_L] + \nabla \cdot \vec{J} = 0, \quad (5.9б)$$

$$\tau_D \frac{\partial \vec{J}}{\partial t} + \vec{J} + D_L(1 - G)\nabla c_L = 0, \quad (5.9в)$$

$$\frac{\partial G}{\partial t} = \nabla \cdot [(1 - G)\vec{V}_{\text{роста}}] \geq 0, \quad (5.9г)$$

$$c_S = k_V c_L \quad (5.9д)$$

при граничных условиях

$$T = T_0, c_L = c_S = c_0, G = f(\vec{r}) \text{ при } t = 0, \quad (5.10a)$$

$$T|_{\vec{r} \rightarrow \infty} = T_0, \partial c / \partial \vec{n} = 0 \text{ на границах,} \quad (5.10б)$$

где $\vec{r}$ есть радиус-вектор, c_L и c_S — концентрация примеси в жидкой и твердой фазах соответственно, $0 \leq G \leq 1$ — объемная доля твердой фазы в локальном объеме и k_V — коэффициент распределения, зависящий от скорости.

Уравнение (5.9a) является уравнением переноса тепла в приближении малых чисел Пекле. Уравнение (5.9б) описывает баланс массы в локальном объеме двухфазной зоны. Уравнение (5.9в) является модифицированным законом Фика, учитывающим релаксацию диффузионного потока $\vec{J}$ к равновесному состоянию и записанным в линейном приближении. При малых скоростях затвердевания ($V_{\text{роста}} \ll V_D$, где V_D — скорость диффузии) имеем $\tau_D \rightarrow 0$, и (5.9в) преобразуется в классиче-

ский закон Фика $\vec{J} = -D(1 - G)\nabla c_L$. Классический закон Фика справедлив для описания локально-равновесного массопереноса в двухфазной зоне при затвердевании бинарных систем [20]. При высоких скоростях ($V_{\text{роста}} \sim V_D$) релаксационный член $\tau_D \frac{\partial \vec{J}}{\partial t}$ в уравнении (5.9в) качественно меняет механизм диффузионного переноса массы. В частности, при учете эффекта релаксации диффузионного потока концентрационный профиль на межфазной границе вырождается, и при $V_{\text{роста}} \geq V_D$ происходит переход к химически бездиффузионному затвердеванию [206]. Уравнение (5.9г) описывает изменение доли твердой фазы G [20]. Разность (5.9д) концентраций на межфазной границе зависит от коэффициента распределения k_V в локально-неравновесном приближении.

Для описания неравновесного затвердевания должна быть введена зависимость [87] между температурой, концентрацией и скоростью. Данная зависимость физически адекватна соотношению, учитывающему эффект Гиббса-Томпсона в бинарных системах, и дается уравнением

$$T_I = T_m + m_V c_L + \left[\Gamma(\theta) + \frac{\partial^2 \Gamma(\theta)}{\partial \theta^2} \right] K - V_{\text{роста}} / \mu(\theta), \quad (5.11)$$

где T_I есть температура на границе раздела фаз, T_m — температура равновесной кристаллизации основного компонента сплава, m_V — наклон кинетической линии ликвидус, Γ — константа капиллярности, K — локальная кривизна поверхности, θ — угол между нормалью и выделенным направлением роста, μ — кинетический коэффициент. Совместно с (5.9д) зависимость (5.11) однозначно определяет температуру T_I на границе как функцию неравновесного химического состава c_L . Из (5.11) может быть получена нелинейная зависимость для $V_{\text{роста}}$ в виде:

$$V_{\text{роста}} = \mu(\theta) [\Delta T - \Delta T_C(V_{\text{роста}}) - \Delta T_N(V_{\text{роста}}) - \Delta T_R - \Delta T_T], \quad (5.12)$$

где $\Delta T = T_m + m_e c_0 - T_0$ представляет собой полное начальное переохлаждение, c_0 и T_0 есть соответственно исходные концентрация и температура, ΔT_C , ΔT_N , ΔT_R , ΔT_T представляют компоненты переохлаждения

и определены функциями

$$\Delta T_C = m_v(c_0 - c_L), \quad (5.13a)$$

$$\Delta T_N = (m_e - m_V) c_0, \quad (5.13б)$$

$$\Delta T_R = -\Gamma K, \quad (5.13в)$$

$$\Delta T_T = T_I - T_0. \quad (5.13г)$$

В уравнении (5.11) и (5.12) функции поверхностной энергии и кинетики присоединения атомов определены выражениями

$$\Gamma(\theta) = \Gamma_0[1 + \epsilon_\Gamma \cos 4(\theta - \theta_\Gamma)], \quad (5.14)$$

$$\mu = \mu_0[1 - \epsilon_\mu \cos 4(\theta - \theta_\mu)], \quad (5.15)$$

которые справедливы для симметрии четвертого порядка растущего кристалла. Здесь ϵ_Γ и ϵ_μ являются коэффициентами анизотропии поверхностной энергии и кинетики ($\epsilon_\Gamma \ll 1$, $\epsilon_\mu \ll 1$), а θ_Γ и θ_μ — углы между выделенным направлением роста дендрита и направлениями минимума функций $\Gamma(\theta)$ и $\mu(\theta)$.

Как известно, введение стохастических параметров в детерминированную модель позволяет моделировать структуры, аналогичные наблюдаемым в экспериментах. Случайные флуктуации на границе раздела фаз были учтены стохастическим множителем $\eta(t, x, z)$ в выражении (5.15) для кинетического коэффициента

$$\mu = \mu_0[1 + \delta\eta(t, x, z)], \quad (5.16)$$

где $\delta \geq 0$ задает амплитуду стохастического шума, $\eta(t, x, z)$ — случайная функция координат и времени с равномерным распределением в интервале $[-1; 1]$. При $\delta > 0$ (5.12) вводит локальные отклонения в скорости $V_{\text{роста}}$ роста границы. Для вычисления локальной кривизны в двумерной задаче использовалась формула

$$K = \frac{d^2y/dx^2}{[1 + (dy/dx)^2]^{3/2}}, \quad (5.17)$$

где кривая $y(x)$ описывает границу раздела фаз, восстановленную из дискретной функции $0 < G < 1$ т.н. методом PLIC [207].

Модель фазового расслоения. Модель фазового расслоения $L \rightarrow L_1 + L_2$ переохлажденного бинарного расплава в области несмешиваемости записана в формализме МФП с использованием выражения [208] для изменения энергии Гиббса ΔG :

$$\Delta G(c, \nabla c, T) = \int \Delta g_{\text{общ.}} dV = \int \left(\frac{1}{2} \varepsilon_c^2 |\nabla c|^2 + \Delta g_{\text{объем.}}(c, T) \right) dV, \quad (5.18a)$$

$$\Delta g_{\text{объем.}}(c, T) = -\beta(T_{\text{крит.}} - T)(\Delta c)^2 + \gamma(\Delta c)^4 + \eta(\Delta c)^6, \quad (5.18б)$$

где c — относительная концентрация второго компонента, $\Delta c = c - c_{\text{крит.}}$ — отклонение от критической концентрации $c_{\text{крит.}}$, ε_c^2 — градиентный коэффициент и T — температура. Первое (градиентное) слагаемое определяет плотность избыточной свободной энергии на поверхности раздела фаз, пропорционально квадрату градиента концентрации и обратно пропорционально квадрату ширины границы. Объемная составляющая $\Delta g_{\text{объем.}}$ выбрана в соответствии с теорией Ландау-Девоншира, которая допускает большее отклонение от равновесия, чем классическая теория Гинзбурга-Ландау [184]. Потенциал в (5.18б) записан в виде разложения Тейлора вблизи критической точки как функция переохлаждения $\Delta T = T_{\text{крит.}} - T$ и Δc при $T < T_{\text{крит.}}$. Положительные коэффициенты β , γ и η выбираются, используя фазовую диаграмму сплава. Тогда неизотермическая МФП фазового расслоения определяется уравнениями [76]

$$\frac{\partial c}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla)c = -\nabla \cdot (-M \nabla \Psi) + Q(t, \mathbf{r}), \quad (5.19a)$$

$$\Psi = -\nabla \cdot \varepsilon_c^2 \nabla c + \frac{\partial g_{\text{объем.}}}{\partial c}, \quad (5.19б)$$

$$T(t) = T_{\text{крит.}} - V_{\text{охл.}} t, \quad (5.19в)$$

где $\vec{u}$ — скорость течения, M — атомная подвижность, Ψ — химпотенциал, $V_{\text{охл.}}$ — скорость охлаждения. Температура расплава принимается однородной в мезообъеме на масштабе расслоения. Слагае-

мое $Q(t, \mathbf{r})$ вводит в модель флуктуации химического состава. Пока температура $T \geq T_{\text{крит.}}$ выше критической, все флуктуации затухают. При достижении $T \leq T_{\text{крит.}}$ расплав становится метастабильным и расслаивается при появлении в системе критической флуктуации. Начальные условия задаются как $c = c_0$ и $T = T_{\text{крит.}}$ при $t = 0$. Для концентрации и химпотенциала задаются периодические граничные условия. Поле течения $\vec{u}$ определяется результатами расчетов на макроуровне [94].

Алгоритмическая компоновка двухуровневой модели. Схема алгоритмической компоновки двухуровневой модели бесконтейнерной кристаллизации приведена на рис. 5.1. На макроуровне решаются уравнения гидродинамики и теплопереноса, сопряженные с движением фронта кристаллизации в образцах и ростом кристаллических зародышей, рис. 5.1. На мезоуровне производится расчет физических эффектов, которые имеют локальный характер. Это анализ многофазного зарождения на гетерогенных центрах, расчет микроструктуры по модели дендритного кристаллического роста или фазовое расслоение для сплавов, которые не образуют твердых растворов. Поскольку все перечисленные процессы обладают малым корреляционным радиусом, задачи мезоуровня являются несопряженными.

На схеме также идентифицированы данные макроуровня, используемые для постановки краевых задач мезоуровня. К ним относятся поля переменных макроуровня: температуры $T(\vec{r})$ и скорости $\vec{u}(\vec{r})$ течения. Дополнительно передаются скорость $V_{\text{охл.}}$ охлаждения образца, концентрация $c_{\text{ГЦЗ}}$ и распределение $P(r_{\text{ГЦЗ}})$ по размерам гетерогенных центров зарождения. С мезоскопического уровня на макроуровень передаются функции интенсивности $I_{\text{зарожд.}}$ зарождения фаз; скорость $\partial G / \partial t$ прироста твердой фазы при дендритном росте для учета выделяющейся теплоты кристаллизации в тепловом балансе; скорость $V_{\text{роста}}$ роста дендритов. На основании переданных с мезоуровня данных уточняются агрегатное

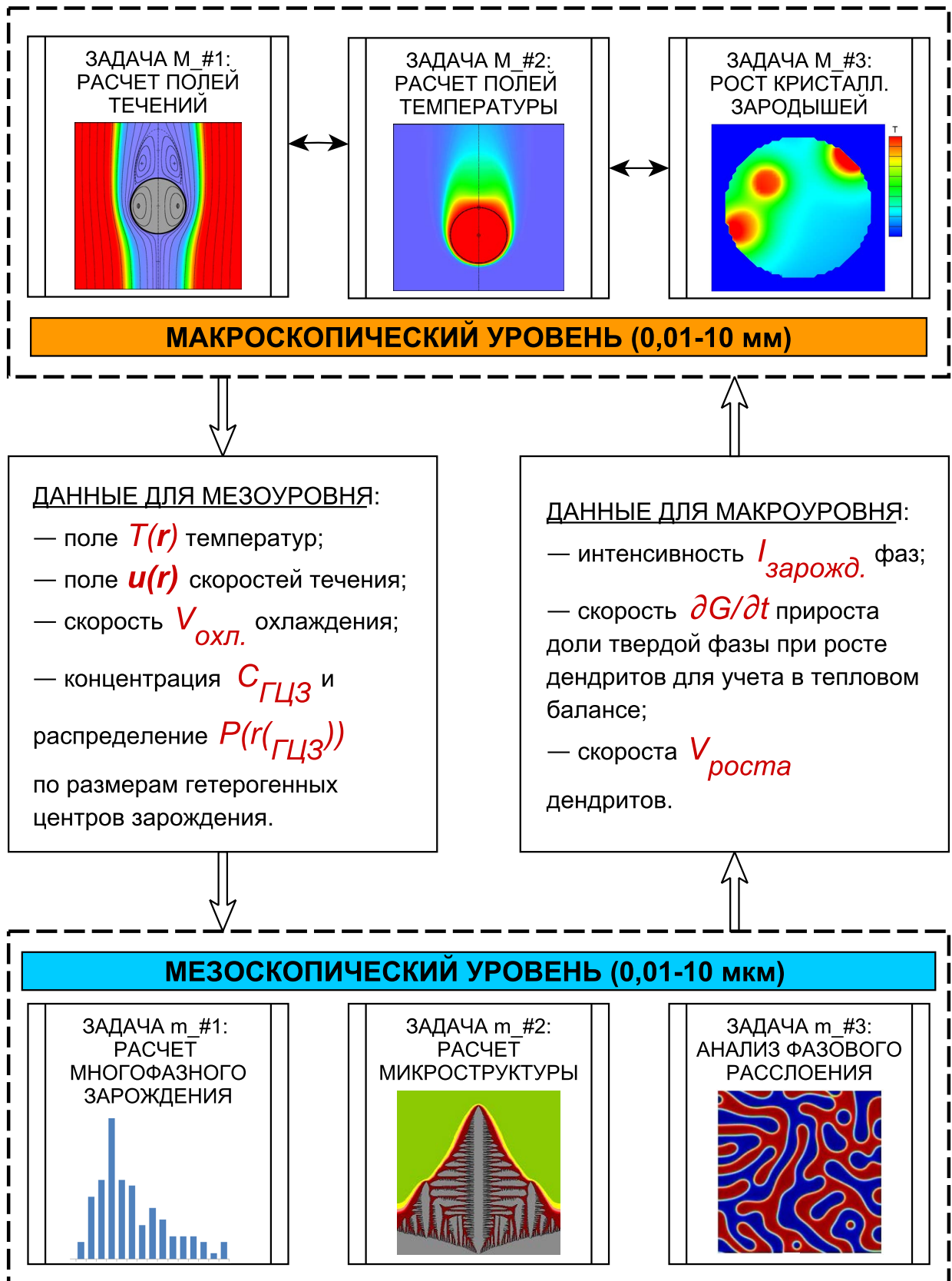


Рис. 5.1. Схема разбиения задач и согласования решений на макро- и мезоуровнях при описании бесконтейнерной кристаллизации металлических расплавов.

состояние (расплав или твердая фаза) и концентрация во всех точках макроуровня.

Программная реализация. Двухуровневая математическая модель (5.1) – (5.17) реализована с помощью программного кода, написанного на алгоритмических языках C++ и Pascal. Дискретизация континуальных уравнений выполнена методами конечных разностей и конечных элементов. Число степеней свободы составляло от 3×10^5 до 2×10^6 в зависимости от задачи. Созданные вычислительные модели были объединены в составе программы для ЭВМ “Моделирование теплофизических процессов при бесконтейнерной кристаллизации металлических расплавов” [209], свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № RU 2017662176.

Идентификация параметров и верификация модели. Теплофизические параметры определялись в результате прямых и косвенных измерений методами калориметрии и электромагнитной левитации в рамках совместных с соавторами публикаций проектов. Данные для сплавов $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}_1$, $\text{Fe}_{50}\text{Co}_{50}$ и $\text{Co}_{50}\text{Cu}_{50}$ приведены в Приложении в таблицах В.1, В.2 и В.3 соответственно. Мобильность M фазового поля рассчитывалась на основе данных о коэффициенте диффузии D и абсолютной вязкости μ как $D = -M/(\Delta g)''_{cc}$, где $(\Delta g)''_{cc}$ определяется на основе термодинамического анализа фазовой диаграммы. Постановка краевых задач макроуровня производилась на основе экспериментальных данных, полученных соавторами публикаций.

Верификация моделей включала три этапа. На первом этапе в консервативных моделях проводилась проверка баланса. В моделях фазового поля баланс массы сохранялся в пределах 0,1%. В моделях двухфазной зоны баланс отклонялся от теоретического значения с максимальным расхождением до 10%. Второй этап состоял в сравнении с автомодельными решениями. Третий этап включал в себя прямое сравнение с данными

лабораторных испытаний, проведенных в рамках космических экспериментов “Магнефаз” и “Перитектика” в наземных условиях и условиях микрогравитации на борту МКС.

5.2. Моделирование получения порошковых материалов при распылении в инертной атмосфере

Обзор экспериментальных данных. Постановка задачи. Внедрение в производство постоянных магнитов на основе редкоземельных металлов [210] с высокими показателями остаточной намагниченности привело к интенсивному изучению таких материалов. Выдающиеся свойства неодимиевых постоянных магнитов связаны с характеристиками ϕ фазы стехиометрического состава $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}_1$. При равновесных условиях, в соответствии с фазовой диаграммой [211], расплав $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}_1$ кристаллизуется с большим содержанием фазы $\gamma\text{-Fe}$, понижающей магнитные свойства. Для получения метастабильной ϕ фазы $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}_1$ производится закалка расплава методом распыления в инертной атмосфере. При этом метастабильная перитектическая ϕ фаза или проперитектическая χ фаза состава $\text{Nd}_2\text{Fe}_{17}\text{B}_x$, $x \sim 1$ кристаллизуются первыми. Дальнейшее компактирование порошка методами порошковой металлургии позволяет получать высокопроизводительные магниты.

Система Nd-Fe-B была исследована экспериментально методами капельных труб [212, 213] и электромагнитной левитации [214–217]. При этом выявлено три типа микроструктуры, представленных на рис. 5.2. Важной технической задачей является расчет режимов закалки, при которых происходит формирование “полезной” ϕ фазы, определяющей магнито жесткие свойства материала. Размеры затвердевших капель варьируются в диапазоне от 50 мкм до 2 мм, что соответствует скоростям охлаждения в диапазоне $V_{\text{охл.}} = 10^2 - 10^5$ К/с. По этой причине прямое экспериментальное наблюдение механизмов кристаллизации и фазового отбора является невозможным. Таким образом, целью двухуровневого

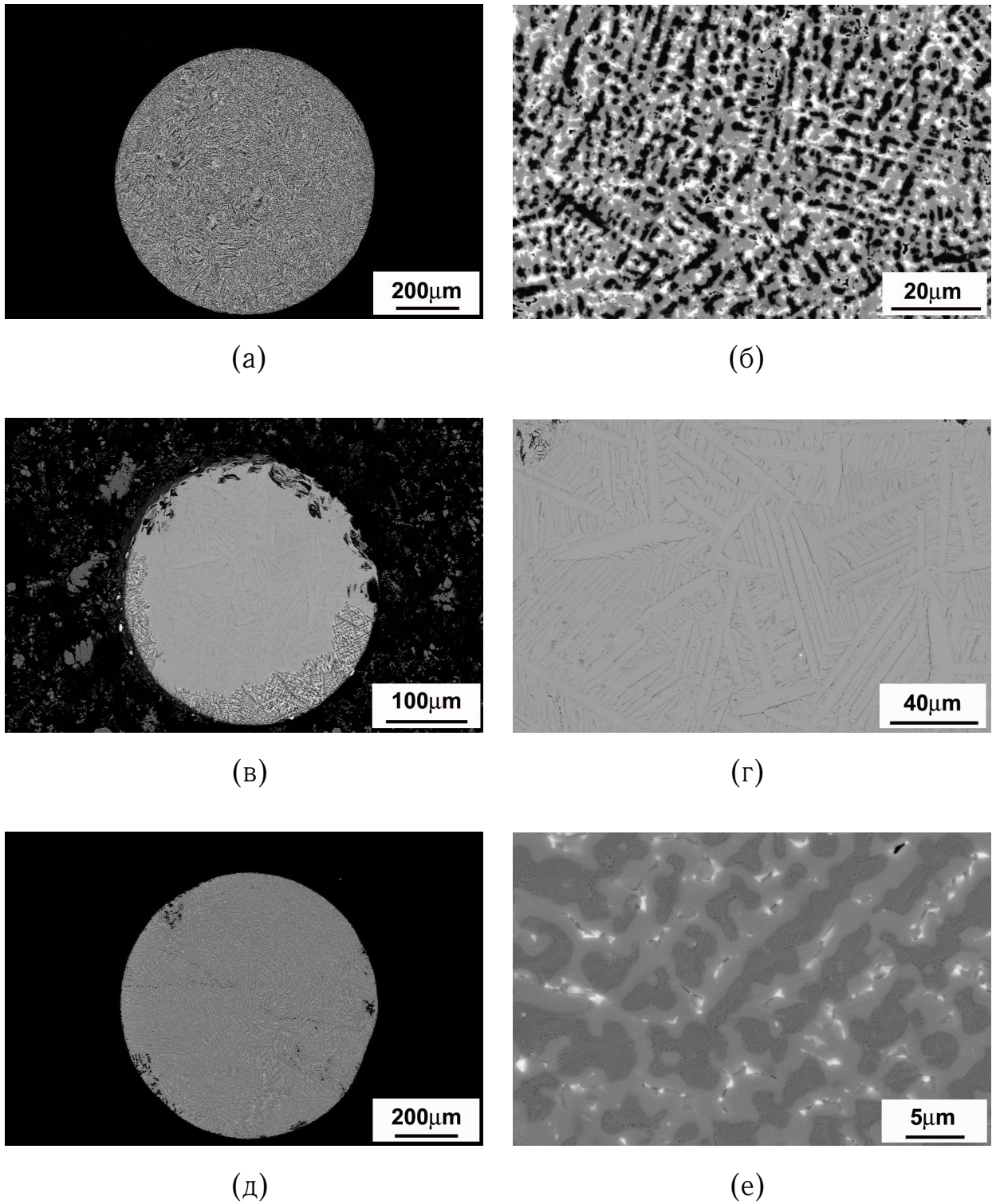


Рис. 5.2. СЭМ изображения различных типов микроструктуры в образцах сплава $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}_1$, полученных методом капельных труб. Приведены микроструктуры, где произошло первичное зарождение и формирование следующих фаз: (а,б) $\gamma\text{-Fe}$, (в,г) ϕ фазы, (д,е) χ фазы. При дальнейшем охлаждении первичная $\gamma\text{-Fe}$ фаза превращается в $\alpha\text{-Fe}$, и метастабильная χ фаза распадается на смесь $\gamma\text{-Fe} + \phi$.

моделирования являлся количественный анализ многофазной кристаллизации в переохлажденном расплаве Nd-Fe-B для оптимизации режимов получения порошковых материалов распылением.

Результаты двухуровневого моделирования и анализ. Для образцов сплава $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}_1$ выполнен анализ скорости движения капли в установке, гидродинамических течений внутри и снаружи образца, тепломассопереноса, многофазного зарождения и отбора микроструктуры, рис. 5.3. Моделирование проведено для образцов различного радиуса, и для каждого размера выполнялась серия из 50 расчетов с одинаковым набором параметров. Математическая модель естественным образом включает стохастичность зарождения кристаллических зародышей в соответствии с вычисляемой для каждой фазы интенсивностью зарождения, которая используется для генерации пуассоновой случайной величины. В результате вычисления с одним набором параметров в серии приводят к различным сценариям кристаллизации. Это полностью соответствует экспериментальным данным [212, 213], где различная микроструктура наблюдалась в образцах одного размера. Итоговые результаты [77] анализа приведены на рис. 5.4 для капель с радиусом 130, 330 и 980 мкм.

Все образцы охлаждаются ниже перитектической температуры $T_P(\phi)$, прежде чем начинается кристаллизация и температура образца резко возрастает, как показано на всех термограммах. Этот скачок температуры связан с высокоскоростным ростом зародышей ϕ или χ фаз. Зарождение γ -Fe не столь явно, но также заметно на термограммах в виде короткого плато на стадии охлаждения. Как только температура выросла до $T_P(\phi)$ или $T_P(\chi)$ и переохлаждение снято, то кристаллизация продолжается со значительно меньшей скоростью. На этой стадии затвердевание ограничено теплоотводом в атмосферу на поверхности капли. После окончания кристаллизации образец остывает.

В малых образцах с $a = 133$ мкм, рис. 5.4(а), наблюдается в основном двухступенчатая кристаллизация (расчеты A08, A03 и A14),

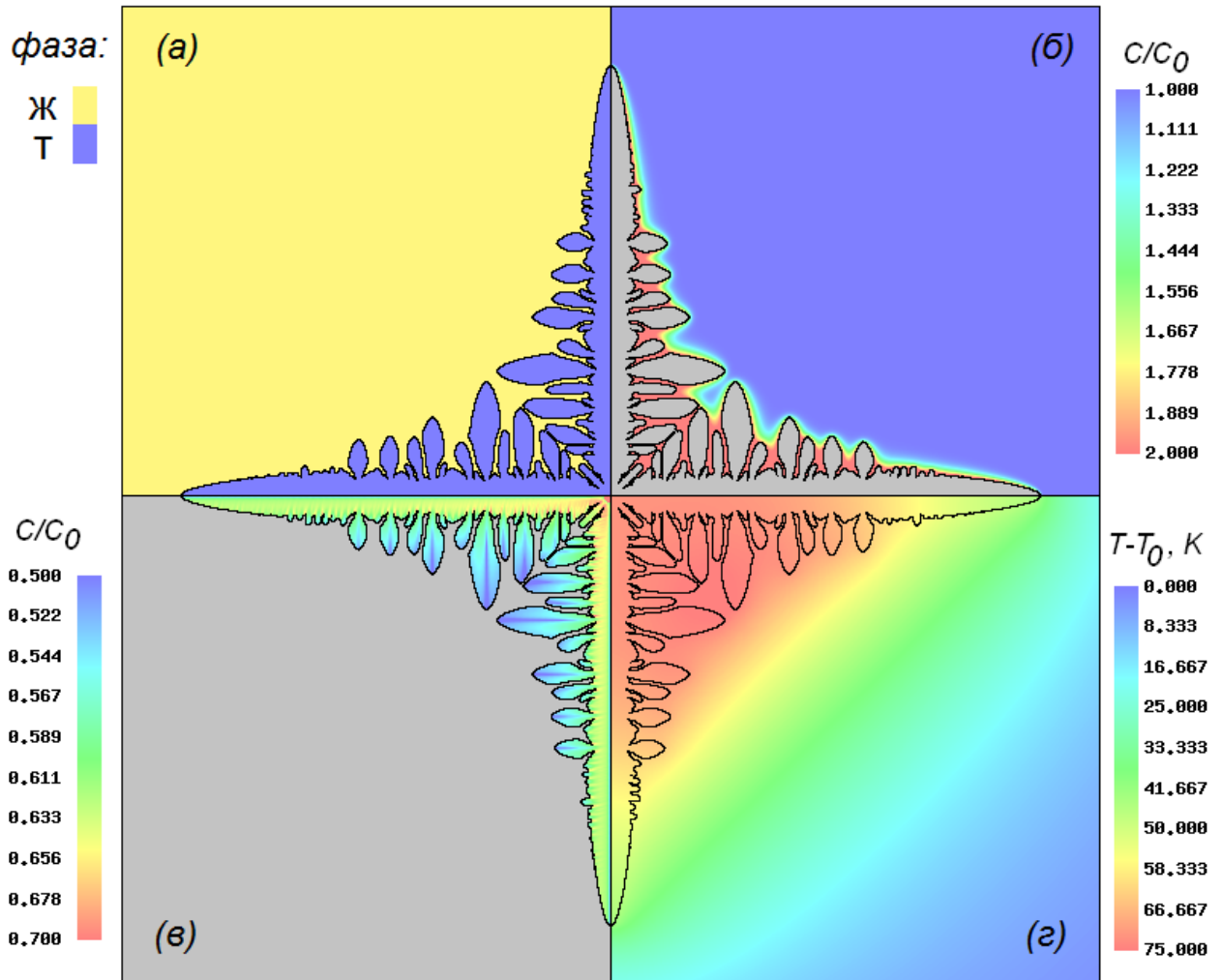


Рис. 5.3. Результат моделирования роста дендритного кристалла в системе Fe-C, который реализуется в условиях высокой сегрегации примесного компонента, как и рост γ -Fe в квазибинарном расплаве Fe-(Nd,B). (а) Фазовый состав. (б,в) Концентрация углерода в жидкой и твердой фазах соответственно. (г) Распределение температуры. Начальное переохлаждение $\Delta T = 150$ K.

где точки А и В соответствуют последовательному зарождению γ -Fe и χ фазы. Затвердевание начинается в диапазоне переохлаждений $\Delta T = (120 \div 200)$ К ниже ликвидуса $\gamma - \text{Fe}$. Некоторые расчеты прогнозируют одношаговую кристаллизацию (точки С и D на кривых A33 и A06), где первичной фазой является ϕ или χ .

В образцах среднего размера, рис. 5.4(б), кристаллизация начинается после зарождения γ -Fe, что сразу приводит к зарождению ϕ фазы. Кристаллизация происходит в интервале температур от 1370 до 1430 К, который соответствует переходу от первичного зарождения γ -Fe к ϕ фазе на метастабильной фазовой диаграмме. Модель прогнозирует, что микроструктура должна быть смесью α -Fe дендритов и зерен перитектической ϕ фазы при значительном преобладании ϕ фазы, что согласуется с фотографиями на рис. 5.2(в,г).

В больших образцах, рис. 5.4(в), формирование множественных зародышей γ -Fe приводит к локальному скачку температуры (точка Н), хотя это не препятствует дальнейшему охлаждению образца. При $T \sim 1440$ К (точка I) зарождение ϕ приводит к длинному плато при $T \sim T_P(\phi)$. Таким образом, в образцах должно наблюдаться большое содержание α -Fe. Единственная кривая приведена на расчетной термограмме для $a = 980$ мкм, так как результаты во всех 50 расчетах были похожи. Это значит, что вариативность сценариев кристаллизации больше в малых образцах, поскольку стохастичность играет большую роль в системах с малым объемом.

5.3. Моделирование высокоскоростной кристаллизации сплавов на основе железа в методе электромагнитной левитации

Обзор экспериментальных данных. Постановка задачи. Метод электромагнитной левитации относится к одной из наиболее информативных методик изучения процессов кристаллизации в переохлажденных металлических расплавах. При проведении эксперимента регистри-

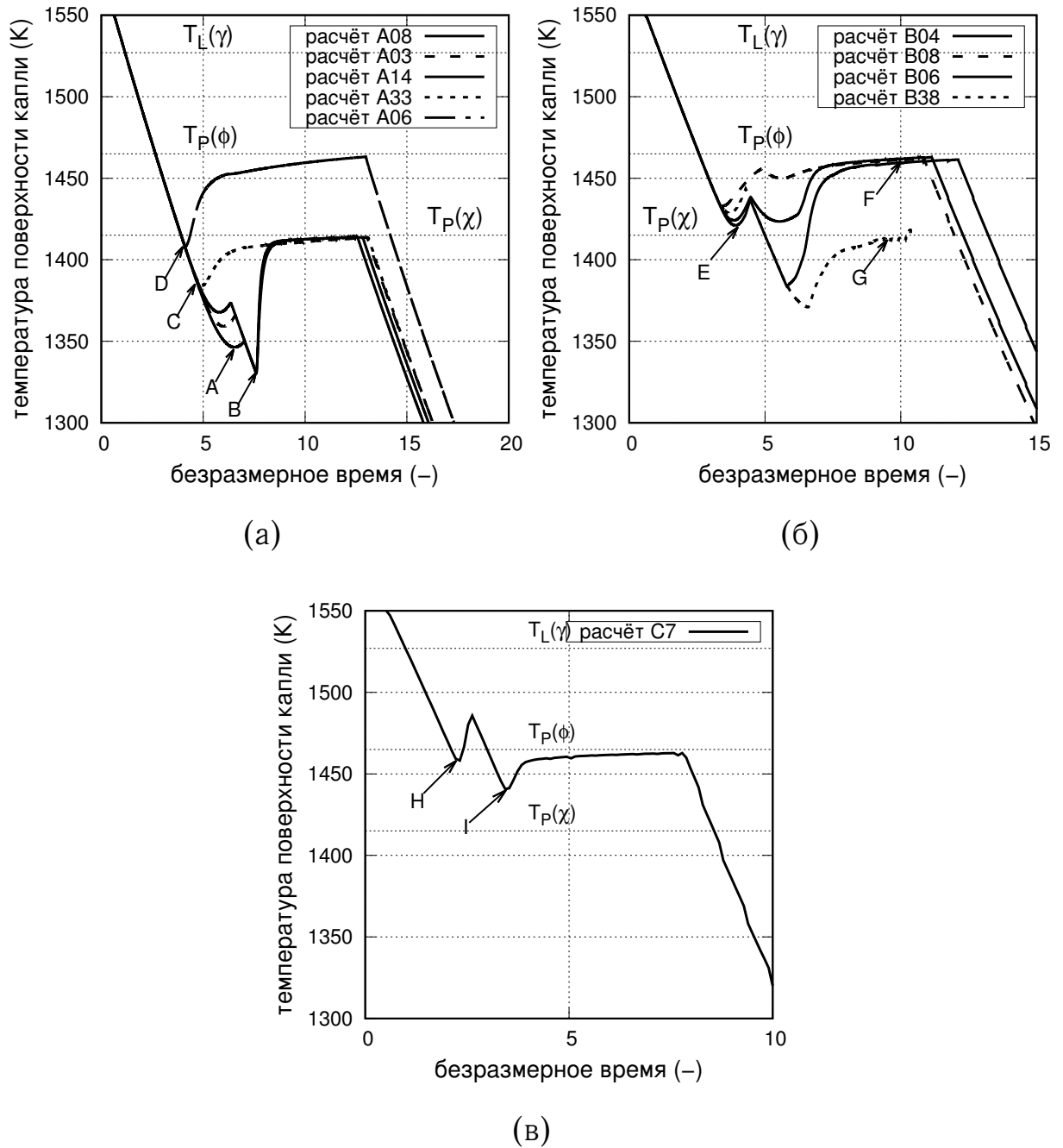


Рис. 5.4. Полученная в расчетах средняя температура поверхности капли как функция безразмерного времени и радиуса капли a :
 (а) 133 мкм, (б) 330 мкм, (в) 980 мкм. Время обезразмерено на величину $a^2/\tilde{\alpha}$, где $\tilde{\alpha}$ — температуропроводность расплава.
 Представленные термограммы соответствуют типичным сценариям, полученным для каждого a в серии из 50 расчетов, выполненных с одинаковыми параметрами.

руется множество параметров, которые в дальнейшем используются для анализа. Частота и амплитуда осцилляций левитирующей капли служат для точного определения плотности и вязкости расплава. Данные пирометра показывают температуру поверхности для регистрации термограммы. Сверхвысокоскоростная видеосъемка с частотой до 75 кГц позволяет измерять прямым методом скорость фронта кристаллизации и регистрировать многофазную кристаллизацию. На рис. 5.5(а) показаны рабочий элемент установки и образец во время проведения испытаний.

Для системы Fe–Co в широком диапазоне составов экспериментально регистрируется двухступенчатая кристаллизация, когда кристаллизация начинается с зарождения метастабильной ОЦК фазы и спустя время задержки $\tau_{\delta\gamma}$ начинает кристаллизоваться вторичная стабильная ГЦК фаза, рис. 5.5(б,в). На рисунке внутри области первичной ОЦК фазы (умеренно серая область) наблюдается рост вторичной ГЦК фазы (светло-серая область). Темно-серая область соответствует переохлажденной жидкости. Анализ изображения поверхности свидетельствует, что вторичная фаза начинает формироваться еще до окончания кристаллизации первичной фазы. Термограмма процесса, рис. 5.5(в), фиксирует двухступенчатую кристаллизацию, когда вначале происходит зарождение метастабильной ОЦК (δ) фазы и спустя время задержки $\tau_{\delta\gamma} = 0,1$ мс зарождается стабильная ГЦК (γ) фаза. Таким образом, время задержки является одним из главных факторов, определяющих фазовый отбор и микроструктуру образца после затвердевания.

В рамках космических экспериментов “Магнефаз” (2004-2018 гг.) и “Перитектика” (2012-2018 гг.) производится изучение многофазной кристаллизации перитектических сплавов. Целью двухуровневого моделирования являлось изучение процессов тепло- и массообмена в левитирующих образцах, включая анализ многофазной кристаллизации и отбор микроструктуры. С этой целью математическая модель (5.1) – (5.17) для кристаллизации порошковых материалов была расширена на случай электромагнитной левитации. Для этого в модель добавлены уравне-

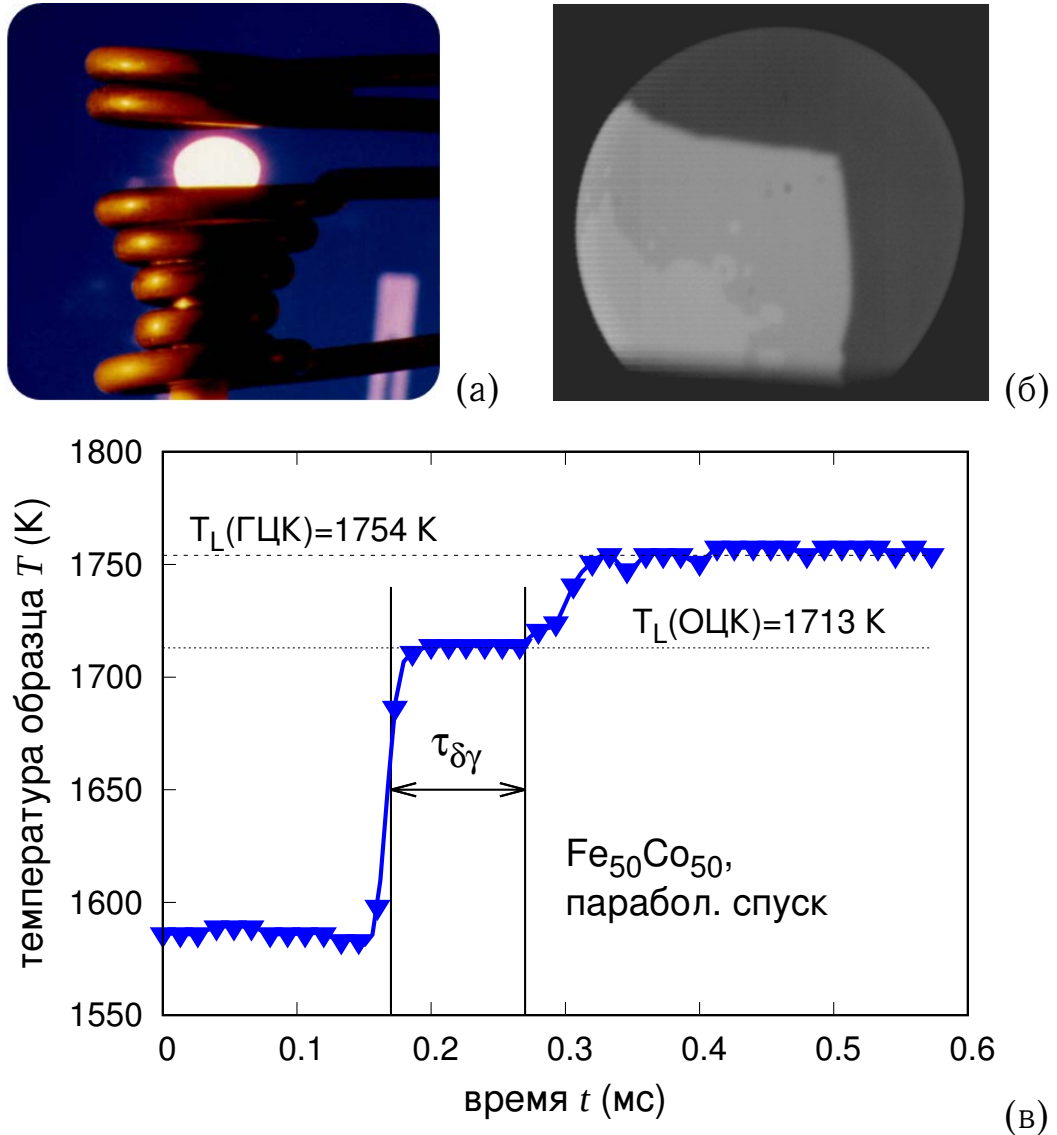


Рис. 5.5. Эксперименты по электромагнитной левитации и закалке металлических расплавов. (а) Фотография рабочего элемента установки, состоящего из двух медных охлаждаемых катушек, по которым течет переменный ток высокой частоты. Между катушками левитирует образец, нагретый во время испытания выше температуры плавления [217]. (б) Тепловизионное изображение поверхности образца $\text{Fe}_{50}\text{Co}_{50}$, снятое в момент кристаллизации, где показан момент конкурентного роста двух кристаллических фаз. Использована высокоскоростная видеосъемка с частотой 75 кГц. (в) Термограмма испытаний образца $\text{Fe}_{50}\text{Co}_{50}$.

ния магнитогидродинамики для расчета переменного электромагнитного поля, наведенных в образце вихревых токов Фуко и тепловых источников [94].

Результаты двухуровневого моделирования и анализ. С использованием разработанного комплекса программ выполнен расчет двухступенчатой кристаллизации сплава $\text{Fe}_{50}\text{Co}_{50}$ для сопоставления с результатами испытаний в наземных условиях и условиях микрогравитации, рис. 5.6 и 5.7. Регистрируемые в эксперименте данные, рис. 5.6, служат для идентификации параметров модели, поскольку изучаемая физическая система — левитирующая в переменном электромагнитном поле капля — является системой с обратной связью. Отклонение от оптимальных параметров испытаний приводит к биениям образца, так как наведенное в образце поле зависит от относительного положения капли в катушке. Капля во время испытаний находится в локальном потенциальном минимуме, выход из которого может легко привести к потере устойчивости.

Рисунок 5.7(б) содержит сравнение результатов вычислительного и лабораторного экспериментов. Получено хорошее согласие для зависимости времени задержки от переохлаждения. Модель показывает линейную зависимость с углом наклона -2.824 в двойных логарифмических координатах $\log(\tau_{\delta\gamma}) = f(\log(\Delta T))$. В настоящее время исследуется зависимость времени $\tau_{\delta\gamma}$ от уровня вынужденной конвекции, поскольку в экспериментах на МКС требуется значительно меньшее позиционирующее напряжение, чем в наземных условиях. Это позволяет регулировать уровень вынужденной конвекции в образце.

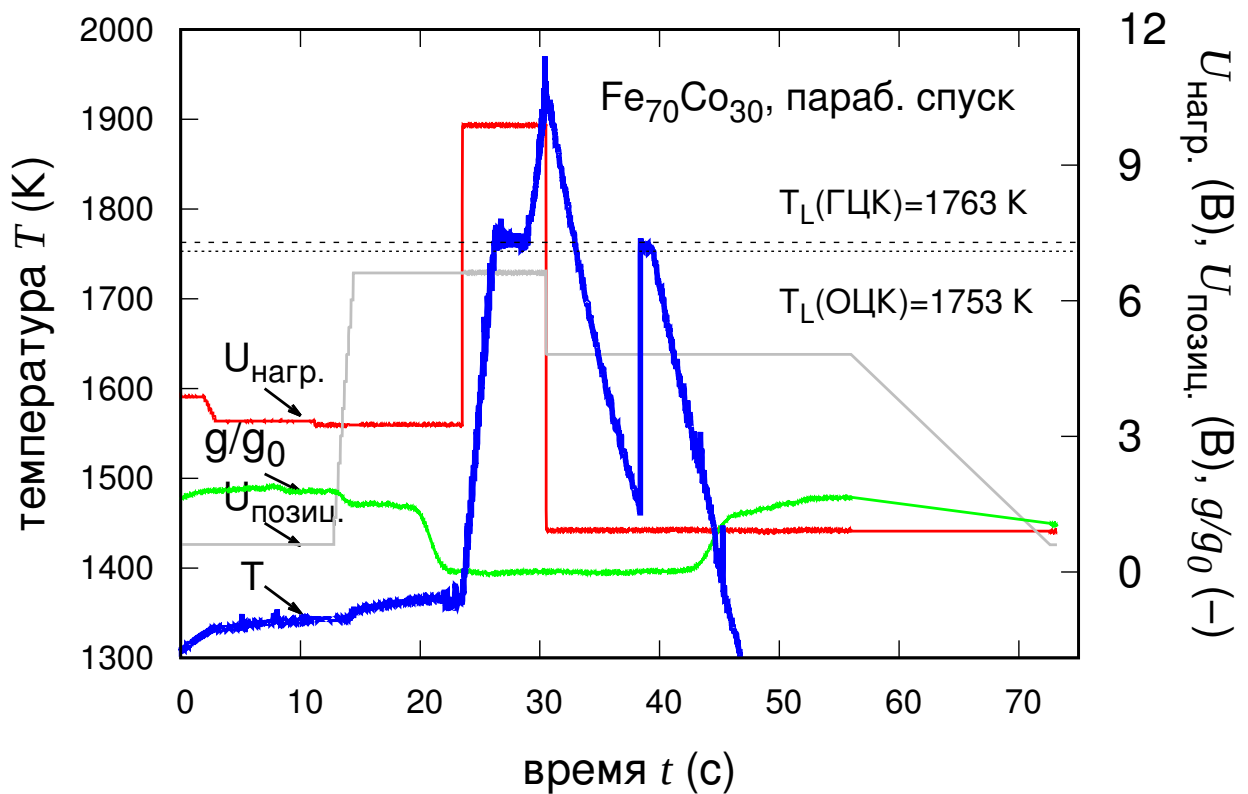


Рис. 5.6. Типичная термограмма одного цикла испытаний сплава $\text{Fe}_{70}\text{Co}_{30}$ при параболических спусках в условия микрогравитации. Регистрируются данные температуры образца T , напряжения $U_{\text{нагр.}}$ и $U_{\text{позиц.}}$ на нагревающей и позиционирующей катушках соответственно и уровень гравитации g/g_0 . На основании полученных данных производится идентификация параметров двухуровневой модели.

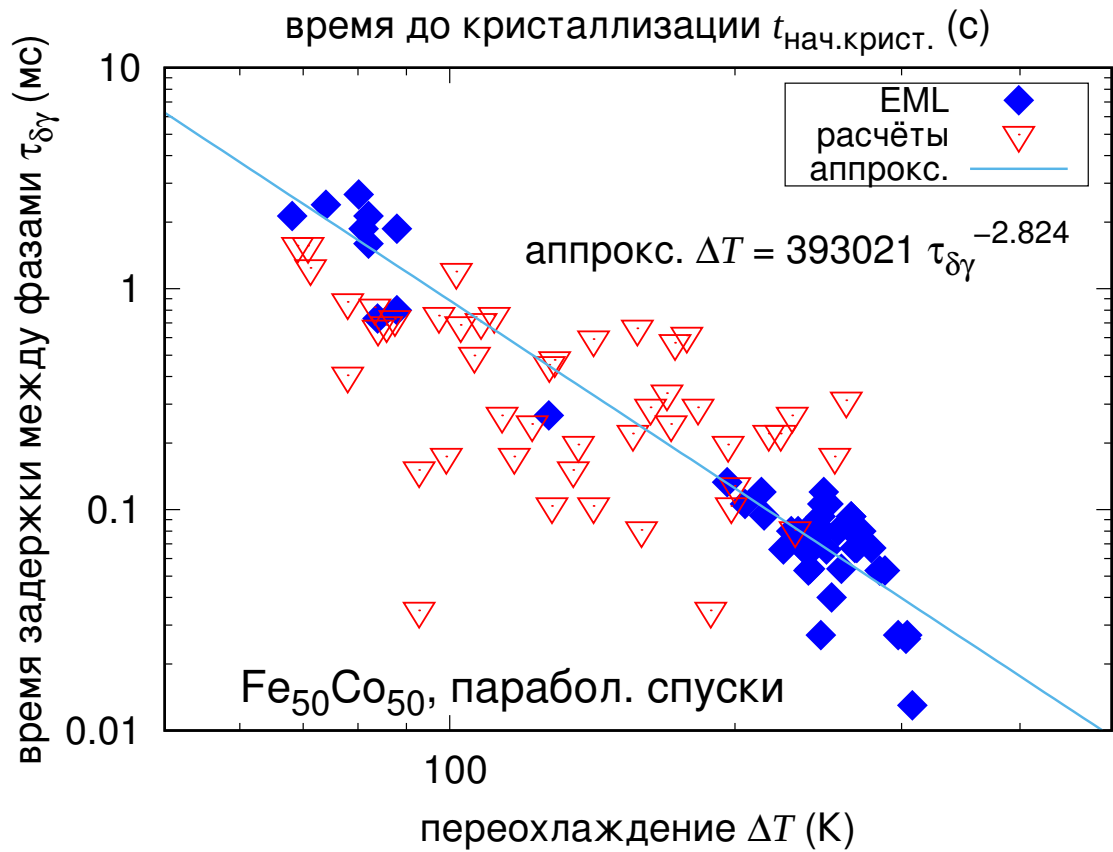


Рис. 5.7. Сравнение результатов расчетов (∇) и экспериментальных данных ($\diamond$) для времени задержки $\tau_{\delta\gamma}$ между зарождением фаз и времени задержки до начала кристаллизации $t_{\text{нач.крист.}}$ для Fe₅₀Co₅₀.

5.4. Моделирование фазового расслоения сплава Co–Cu при различных скоростях закалки

Обзор экспериментальных данных. Постановка задачи. Бинарные сплавы Fe–Cu и Co–Cu не образуют твердых растворов, что приводит при охлаждении таких расплавов ниже критической температуры к фазовому расслоению, известному в литературе также как спинодальный и бинодальный типы распада [218–220]. В результате при расслоении формируется характерная квазипериодическая (модулированная) микроструктура, характеризующаяся изогнутыми фазовыми границами наподобие морских волн. Большое число исследований [221–223] выполнено для твердых растворов, поскольку в этом случае процесс фазового расслоения $T \rightarrow T_1 + T_2$ определяется диффузией в твердой фазе с характерными значениями коэффициента диффузии $D \sim 10^{-12} - 10^{-11}$ м/с² и временем расслоения порядка минут и часов. Характеристики получающейся периодической микроструктуры хорошо анализируются методами рентгеноструктурного анализа, поскольку интенсивность рассеяния $I_{\text{расс.}}$ пропорциональна амплитуде структурного фактора [224]

$$I_{\text{расс.}} \sim \hat{S}(k, t) = \int d\vec{r} S(\vec{r}, t) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}), \quad (5.20a)$$

$$S(|\vec{r} - \vec{r}_0|, t) = \langle \delta c(\vec{r}, t) \delta c(\vec{r}_0, t) \rangle, \quad (5.20б)$$

$$\delta c(\vec{r}, t) = c(\vec{r}, t) - c_0, \quad (5.20в)$$

где $\hat{S}(k, t)$ — Фурье отображение двухточечной корреляционной функции $S(|\vec{r} - \vec{r}_0|, t)$ флуктуаций $\delta c(\vec{r}, t)$ концентрации c , c_0 — начальная концентрация сплава выше критической температуры, $\vec{k}$ — волновой вектор, t — время и усреднение $\langle \dots \rangle$ проводится по пространственным координатам.

Фазовое расслоение $J \rightarrow J_1 + J_2$ также регистрируется в переохлажденных металлических расплавах [225], однако до недавнего времени регистрировали только окончательную микроструктуру, поскольку характерные времена расслоения в переохлажденных ниже критической

температуры расплавах составляют порядка 1-10 мкс. В [226] впервые удалось экспериментально зарегистрировать начальные стадии фазового расслоения в расплаве $\text{Co}_{50}\text{Cu}_{50}$ с использованием специальной методики. В эксперименте левитирующая капля расплющивалась между двумя пластинами. Это позволило достичь скоростей охлаждения $10^5 - 10^6$ К/с, при которых удается зафиксировать процесс структурообразования с временем протекания 1 – 10 мкс, рис. 5.8. В связи с этим целью двухуровневого моделирования являлся теоретический анализ протекающих процессов теплопереноса и фазового расслоения в расплавах бинарных сплавов, подверженных фазовому расслоению.

Результаты двухуровневого моделирования и анализ. Разработанная математическая модель бесконтейнерной кристаллизации использовалась для расчета теплопереноса, скорости охлаждения, фазового расслоения и отбора микроструктуры в расплаве $\text{Fe}_{50}\text{Co}_{50}$. В расчетах было классифицировано три режима охлаждения, которые совпали с данными лабораторного эксперимента. В первом режиме $V_{\text{охл.}} \sim 10^1$ К/с, рис. 5.8(а), при кристаллизации реализуется дендритный рост, и результаты фазового расслоения не определяются на шлифах. Во втором режиме $V_{\text{охл.}} \sim 10^3 - 10^4$ К/с, рис. 5.8(б), регистрируются сферические включения первой фазы в матрице второй фазы, что соответствует окончанию распада. В третьем режиме $V_{\text{охл.}} \sim 10^5 - 10^6$ К/с, рис. 5.8(в), должна регистрироваться структура начальных стадий расслоения.

Рисунок 5.9(а) показывает результаты расчета фазового расслоения в неизотермическом случае. Трехмерные поля концентраций были проанализированы путем построения зависимости корреляционного коэффициента $R_{\text{КОРР.}}$ от корреляционной длины $L_{\text{КОРР.}}$, 5.9(б). Это позволило сравнить результаты моделирования и экспериментальные данные для параметра λ — размера элемента микроструктуры. Как следует из табл. 5.2, получено хорошее соответствие двухуровневой модели с моделью LBM [227] и экспериментом.

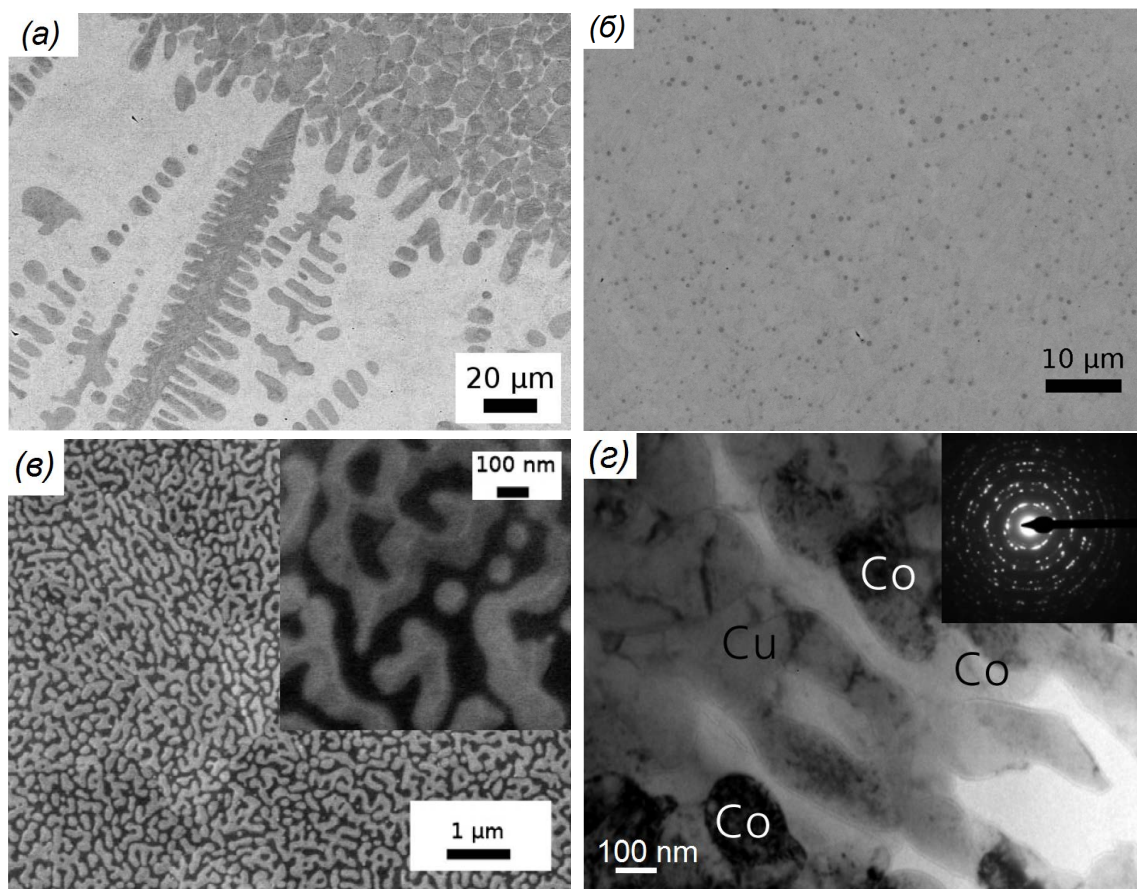


Рис. 5.8. Микроструктура образцов $\text{Co}_{50}\text{Cu}_{50}$, полученных после быстрой закалки левитирующей капли с различными скоростями $V_{\text{охл.}}$ [226]. (а) Закалка из переохлажденного состояния в результате спонтанной или вынужденной кристаллизации, $V_{\text{охл.}} \sim 10^1$ К/с. (б) Закалка при контакте с медной пластиной, $V_{\text{охл.}} \sim 10^3 - 10^4$ К/с. (в, г) Закалка при расплющивании капли между двумя пластинами, $V_{\text{охл.}} \sim 10^5 - 10^6$ К/с, где регистрируется типичная для фазового расслоения микроструктура. На (г) показано с высоким разрешением чередование областей, обогащенных Co и Cu. Электроннограмма во вкладке соответствует фазе с большим содержанием Co.

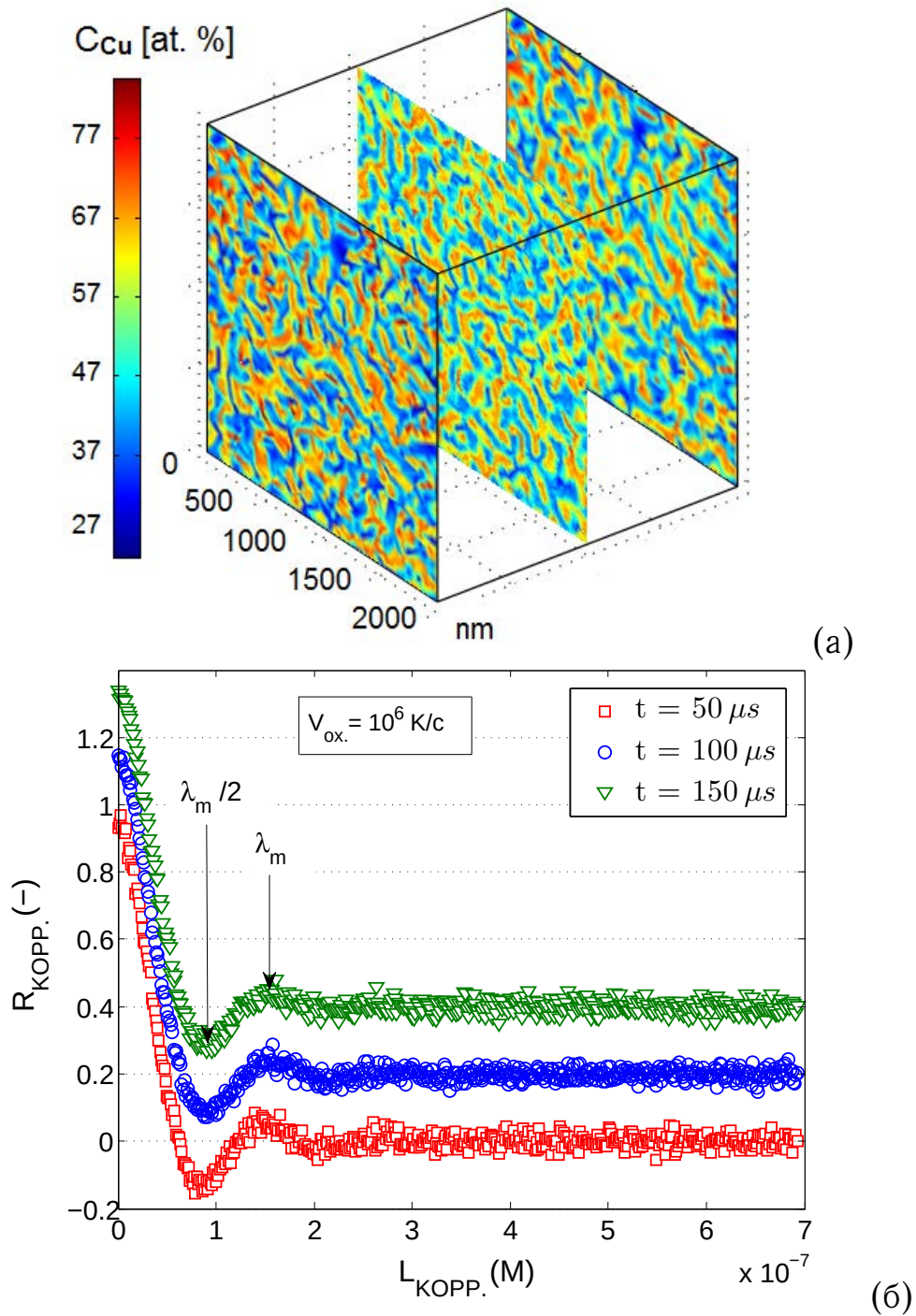


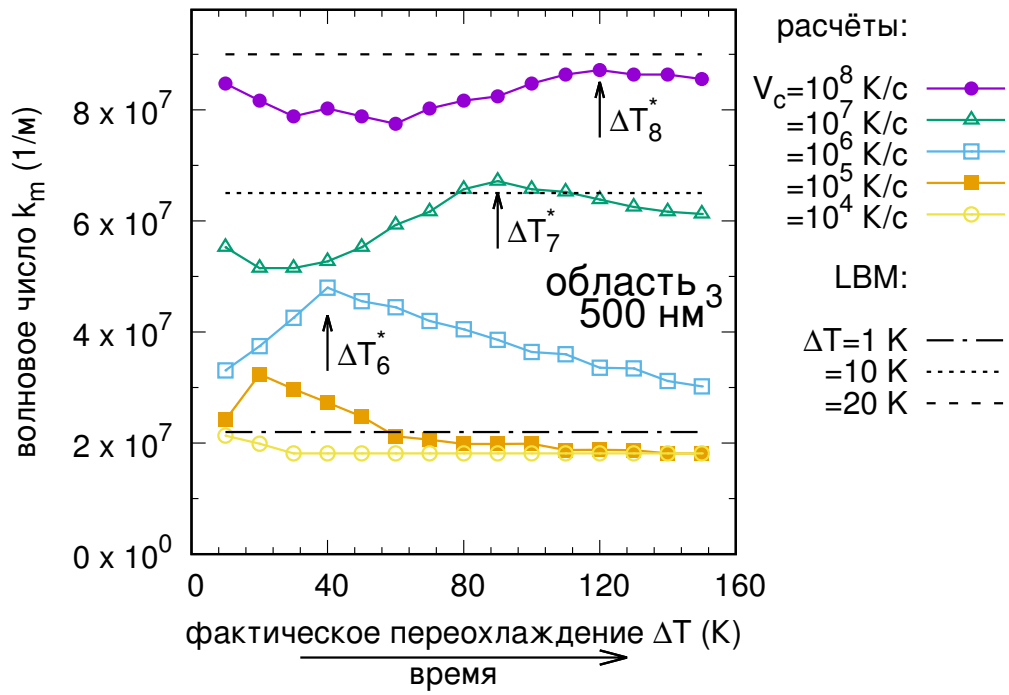
Рис. 5.9. Расчет размера микроструктуры при фазовом расслоении расплава $Fe_{50}Co_{50}$, охлаждаемого со скоростью $V_{охл.} = 10^6 \text{ K/c}$. Размер вычислительной области $L^3 = 2000^3 \text{ нм}^3$. (а) Сечения поля концентрации в момент времени $t = 50 \text{ мкс}$ при фактическом переохлаждении образца $\Delta T = 50 \text{ К}$. (б) Корреляционный коэффициент R_k , рассчитанный в различные моменты времени t . Для лучшего представления кривые при $t = 100$ и 150 мкс смещены вверх. Стрелками указаны значения $\lambda_m/2$ и λ , соответствующие половине и целой длине волны наиболее быстро растущей гармоники поля концентрации.

Таблица 5.2

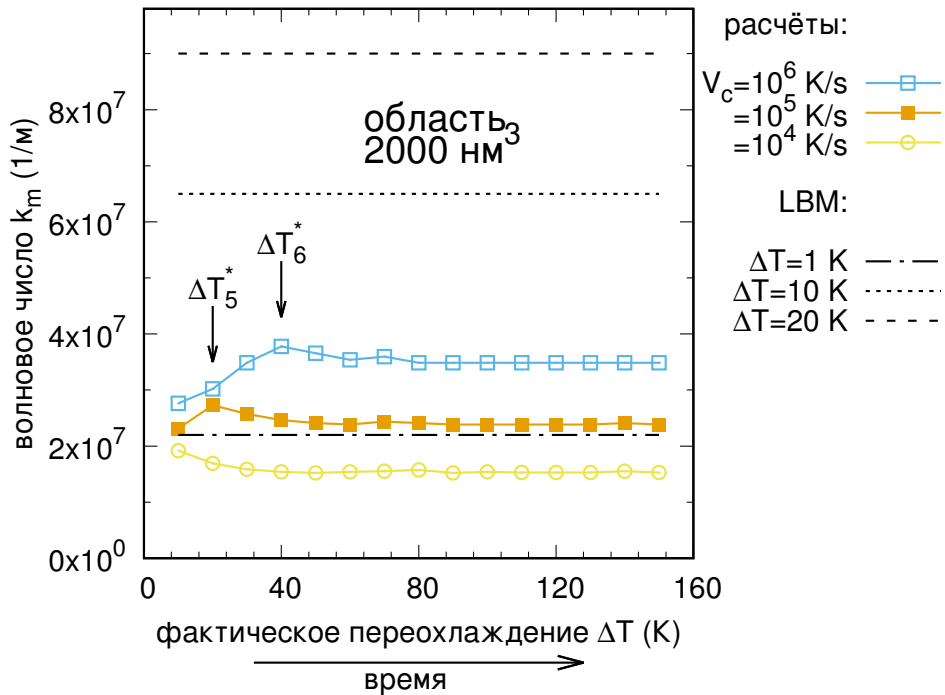
Сравнение результатов λ_{LBM} и $\lambda_{расч.}$ модели LBM [227] и настоящих расчетов соответственно при различных значениях скорости охлаждения $V_{охл.}$ с данными $\lambda_{экспер.}$ [226], где длина d_1 — среднее расстояние между двумя областями концентрационной неоднородности, длина d_2 — ширина области, богатой кобальтом

LBM	настоящие расчеты		эксперимент
λ_{LBM} , нм	$V_{охл.}$, К/с	$\lambda_{расч.}$, нм	$\lambda_{экспер. EXP}$, нм
33 ÷ 52	10^6	82 ÷ 93	SEM, InLens детектор:
	10^5	190 ÷ 210	$d_1 = 140$, $d_2 = 87$
	10^4	210 ÷ 210	светлопол. ТЕМ:
	10^2	450 ÷ 450	$d_1 = (120 \div 170)$, $d_2 = 100$

Интересный результат получен при анализе поведения волнового числа k_m наиболее быстро растущей гармоники как функции фактического переохлаждения ΔT образца, рис. 5.10. Все теоретические модели фазового расслоения предсказывают уменьшение с течением времени k_m , что связано с процессом укрупнения микроструктуры в результате обратной диффузии компонентов и минимизации поверхностной энергии в системе. При сверхвысоких $V_{охл.} \geq 10^5$ К/с скоростях охлаждения на основании результатов моделирования предсказан новый эффект, не описанный ранее, согласно нашим сведениям, в литературе. При охлаждении образца ниже критической температуры величина k_m вначале испытывает рост. Далее значение k_m стабилизируется, и после фактического переохлаждения ΔT_n (n — показатель степени $V_{охл.}$), рис. 5.10, система переходит в режим уменьшения k_m , как предсказывает классическая теория. Указанный эффект был подтвержден на расчетах с разными скоростями охлаждения и на разных расчетных областях. Физическое объяснение явления состоит в том, что в процессе охлаждения меняется вклад поверхностной энергии в общий баланс свободной энергии.



(a)



(б)

Рис. 5.10. Волновое число k_m быстро растущей гармоникой как функция фактического переохлаждения ΔT образца, охлаждаемого со скоростью $V_{\text{охл.}}$. Значение ΔT вычисляется из линейного соотношения $\Delta T = V_{\text{охл.}} t$. Значения ΔT_n^* , где n — показатель степени скорости охлаждения, показывают фактические переохлаждения, при которых временная производная $\partial k_m / \partial t$ меняет знак. Сравнение со значениями, полученными в LBM модели [227] для переохлаждений 1, 10 и 20 K, также приведено на графике. Расчеты выполнены в областях объемом (а) 500 нм³ и (б) 2000 нм³.

5.5. Выводы к главе 5

1. С использованием двухуровневого моделирования изучены сопряженные процессы переноса и структурообразования при бесконтейнерной кристаллизации в методах распыления в инертной атмосфере и электромагнитной левитации.
2. Моделирование многофазной кристаллизации магнитных материалов на основе железа выявило важные особенности процесса, не описанные подробно в литературе. Высокая переохлаждаемость металлических расплавов объяснена конкурентными процессами стохастического зарождения фаз на гетерогенных примесных центрах, стохастичностью процесса, кинетикой смачиваемости примесных центров расплавом и кристаллического роста.
3. Рассчитаны условия охлаждения расплава $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}_1$, позволяющие достичь большого содержания (про)перитектических фаз и высокой остаточной намагниченности редкоземельных порошковых материалов, используемых для получения постоянных магнитов.
4. В рамках международных космических экспериментов проведено исследование кристаллизации расплавов Fe–Co и Fe–Cr–Ni в условиях невесомости и слабого электромагнитного перемешивания расплава. Впервые показано, что кинетику образования кристаллической фазы определяют скорость конвективного перемешивания и смачиваемость поверхности гетерогенных примесных центров, зависящая от контактного угла, химического состава центра и реакций диффузионного (эрозионного) растворения.
5. Разработанная на основе двухмасштабной модели программа для ЭВМ “Моделирование теплофизических процессов при бесконтейнерной кристаллизации металлических расплавов” позволяет моделировать кристаллизацию переохлажденных расплавов и рассчитывать режимы получения порошковых материалов.

6. Моделирование кинетики смачивания, вязкого течения и структурообразования в процессах пайки твердым припоем алюминиевых сплавов

Глава 6 посвящена двухуровневому моделированию процессов вязкого течения и формирования микроструктуры в зоне соединения при пайке алюминиевых сплавов твердым припоем. Существующие теоретические модели не описывают кинетику формирования мениска с припоем, поскольку включают в рассмотрение только эффекты вязкости, инерции и поверхностного натяжения. Выполненный методами вычислительного эксперимента анализ показал, что эффекты слабореакционного смачивания, твердофазной диффузии и кристаллизации оказывают существенное влияние и их учет в математической модели позволяет достигнуть согласия с экспериментальными данными.

Основные результаты, представленные в главе 5, опубликованы в [95–98, 151, 228].

Список обозначений в главе 6

- ПТП — пайка твердым припоем

6.1. Постановка задачи и формулировка математической модели

В физике поверхностных явлений активно изучаются процессы переноса в тонких пленках. Это связано с большой значимостью этой области для описания смачивания поверхностей, испарения, образования пленочных многофазных сред со сложной структурой. Важным физическим фактором для таких задач являются силы поверхностного натяжения, которые в значительной степени определяют динамику системы. На-

коплен большой объем исследований по теплофизике однофазных пленок и фазовым переходам в них, в первую очередь, связанных с испарением. При этом многофазные пленки, в которых одновременно происходят процессы вязкого течения и фазовых переходов внутри жидкости, требуют комплексного изучения. В области металлургии подобные задачи возникают в технологии пайки твердым припоем (ПТП, *brazing* — *англ.*) легких сплавов.

Рассмотрим проблему описания кинетики формирования мениска при ПТП Т-образного соединения двух алюминиевых листов, рис. 6.1. При таком соединении один из листов плакируется тонким (35–45 мкм) слоем припоя. Температура плавления припоя $T_m^{\text{прип.}}$ на (65–85) °С ниже температуры $T_m^{\text{основы}}$ плавления основы. При нагреве сборной конструкции теплообменника в печи до температуры $T_m^{\text{прип.}} < T_{\text{выдерж.}} < T_m^{\text{основы}}$ выдержки происходит плавление припоя и его затекание в зону соединения. При этом вязкое течение осложнено следующими физико-химическими процессами:

1. На границе припоя и подложки происходит диффузия Si из припоя в подложку, что приводит к обеднению припоя кремнием и повышению его температуры плавления. В результате припой может начать кристаллизоваться еще до окончания формирования мениска.
2. Кристаллизация припоя на границе с основой меняет толщину пленки и может привести к ее разрыву, поскольку пленка имеет толщину от 35 до 45 мкм.
3. Для осуществления пайки необходимо удалить тонкий слой оксида алюминия с поверхности листа раскислителем. Разрушение оксидного слоя происходит неравномерно, что влияет на вязкое течение.
4. Движение контактной точки лимитируется не только эффектами вязкости, инерции и капиллярных сил. Дополнительно в контактной точке происходит физико-химическое высокотемпературное взаимодействие припоя с материалом вертикальной стенки.

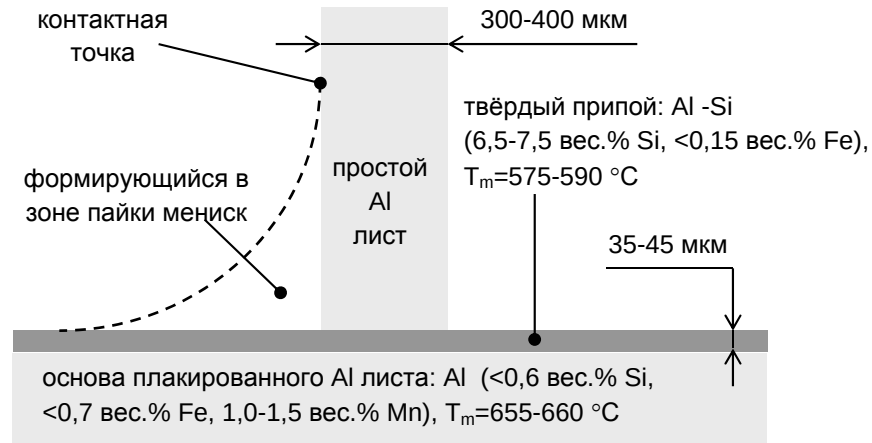


Рис. 6.1. Схема Т-образного соединения при пайке твердым припоем алюминиевых сплавов. Горизонтальный лист имеет композитную структуру. Из-за высокого содержания Si температура $T_m^{\text{прип.}}$ плавления припоя на $(65 - 85)^\circ\text{C}$ ниже температуры $T_m^{\text{основы}}$ плавления основы. При нагреве соединения в инертной атмосфере происходит плавление припоя и его затекание в зону соединения. При этом формируется вогнутый мениск с размерами $L_V \times L_H \sim 1 \times 1$ мм при толщине припоя 35 – 45 мкм.

5. Смачивание вертикальной стенки значительно зависит от степени микрошероховатости поверхности и направления царапин.

Вышеперечисленные аспекты показывают, что для адекватного количественного описания необходимо учитывать все факторы, протекающие на макроскопическом и мезоскопическом масштабах. В связи с этим в работе была поставлена цель разработки двухуровневой модели вязкого течения в пленках расплава толщиной до 100 мкм, учитывающей протекающие при этом физико-химические процессы. В качестве модельной задачи выбрана технология ПТП алюминиевых сплавов.

Модель вязкого течения. Математическая модель [98, 151] включает уравнения Навье-Стокса, сопряженные с нестационарным уравнением

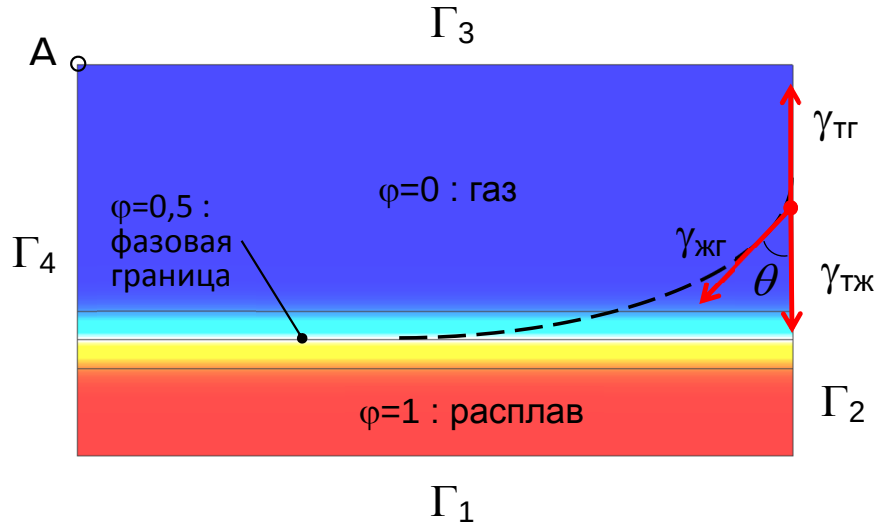


Рис. 6.2. Нумерация границ и начальные условия для задачи формирования мениска в результате смачивания вертикальной стенки тонким слоем расплава. Показано положение границы в начальный момент времени $t = 0$, определяемое по изолинии $\varphi = 0,5$. В контактной точке действуют силы поверхностного натяжения $\gamma_{тг}$, $\gamma_{тж}$ и $\gamma_{жг}$ вдоль границ раздела фаз. После достижения равновесной формы мениска выполняется равенство Юнга $\gamma_{тг} = \gamma_{тж} + \gamma_{жг} \cos \theta$.

для фазового поля:

$$\rho(\varphi) \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \mu(\varphi) (\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T) + \rho(\varphi) \vec{g} + M \nabla \varphi, \quad (6.1a)$$

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0, \quad (6.1б)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \varphi = \nabla \cdot (B \nabla M), \quad (6.1в)$$

$$M = \frac{\partial f}{\partial \varphi} - \kappa \nabla^2 \varphi, \quad (6.1г)$$

где $\vec{v}$ — скорость гидродинамического течения, $\vec{g}$ — ускорение свободного падения, M — химический потенциал, B — *объемная* мобильность фазового поля. Уравнения модели подробно разбирались ранее в главе 3 на стр. 149. Здесь приведем постановку краевой задачи и обсуждение условий сопряжения в контактной точке.

Краевая задача определена следующим образом, рис. 6.2. Для уравнений Навье-Стокса задается условие прилипания на границах Γ_1 и Γ_2 , где расплав контактирует с твердой подложкой. На границе Γ_3 задается условие открытой границы в виде нулевого тензора вязких напряжений и фиксированного давления в точке A границы. Существуют различные условия задания входного потока через Γ_4 . Один из возможных вариантов — нулевое вязкое напряжение и давление, которое определяется интегрированием плотности вдоль границы. Этот вариант является численно условно стабильным, поскольку течение многофазное. Вторым вариантом, если левая граница расположена далеко от правой границы — задание условия проскальзывания. В начальный момент времени течение отсутствует. Тогда граничные условия сводятся к

$$\vec{v} = 0 \text{ на } \Gamma_1 \text{ и } \Gamma_2, \quad (6.2a)$$

$$\tau = \mu (\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T) = 0 \text{ на } \Gamma_3, \quad p = p_0 \text{ в } A, \quad (6.2б)$$

$$\tau = \mu (\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T) = 0, \quad p = f(y) \text{ на } \Gamma_4 \text{ (вариант 1)}, \quad (6.2в)$$

$$\vec{v} \cdot \vec{n} = 0 \text{ на } \Gamma_4 \quad (\text{вариант 2}), \quad (6.2г)$$

$$\vec{v} = \vec{0} \text{ при } t = 0. \quad (6.2д)$$

Для фазового поля φ на Γ_1 фиксируется жидкая фаза $\varphi = 1$. На смачиваемой поверхности Γ_2 вводится кинетическое уравнение, предложенное Jасqmin [229] и являющееся фазовополевым аналогом баланса поверхностных энергий в контактной точке. На верхней границе Γ_3 задается нулевой поток фазового поля. На левой границе Γ_4 определено условие горизонтальности поверхности жидкости, что соответствует контактному углу $\theta = \pi/2$. В начальный момент времени задается пленка жидкости

высотой d . В итоге

$$\varphi = 1 \text{ на } \Gamma_1, \quad (6.3a)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = b (\kappa \vec{n} \cdot \nabla \varphi - \gamma'_\varphi) \text{ на } \Gamma_2, \quad (6.3б)$$

$$\partial \varphi / \partial y = 0 \text{ на } \Gamma_3, \quad (6.3в)$$

$$\nabla \varphi \cdot \vec{n} = 0 \text{ на } \Gamma_4, \quad (6.3г)$$

$$\varphi = \varphi_0(\vec{r}) = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh \left(\frac{3(y-d)}{2h} \right) \right] \text{ при } t = 0, \quad (6.3д)$$

где b — *контактная* мобильность фазового поля, $\gamma'_\varphi = d\gamma_{жг}/d\varphi$ — производная поверхностного натяжения мениска $\gamma_{жг}$, h — ширина диффузной фазовой границы. Отметим, что использование 6.3(б) позволяет перейти от широко используемого в контактных задачах условия проскальзывания к более физическому уравнению. Во-первых, уравнение 6.3(б) решается совместно с условием прилипания $\vec{v} = 0$, то есть проскальзывание запрещено. Во-вторых, движущая сила в контактной точке теперь строго определена на основе баланса свободных энергий, которые отражают действие сил поверхностного натяжения в контактной точке.

Для химпотенциала задается нулевой поток на всех границах, и его начальное значение вычисляется, используя исходное распределение фазового поля:

$$\nabla M = 0 \text{ на } \Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3 \text{ и } \Gamma_4, \quad (6.4a)$$

$$M = M(\varphi_0(\vec{r})). \quad (6.4б)$$

Система уравнений (6.1) — (6.4) описывает контактную задачу для многофазного течения, корректно учитывая физические явления в контактной точке. По этой причине модель способна количественно предсказывать кинетику ее движения. В работе была исследована устойчивость численной модели. При дискретизации математической модели и проведении расчетов была выявлена численная неустойчивость, связанная с реализацией уравнения 6.3(б) для скорости изменения фазового поля вдоль смачиваемой границы. По результатам анализа установлено,

что проблема связана с определением интерполяционной функции $\psi_0(\varphi)$, уравнение (3.51), для фазовой границы. Модель фазового поля допускает широкий выбор $\psi_0(\varphi)$, однако при решении контактной задачи требования гораздо более строгие математически. Интерполяция $\psi_0(\varphi)$ изменения свойств фазовой границы в контактной точке должна быть близка к распределению фазового поля между фазами в объеме. Только в этом случае численная модель устойчива.

Модель структурообразования. Расчет формирования микроструктуры выполнен с использованием модели сегрегационно-лимитируемого роста (5.9) — (5.17), сформулированной в главе 5 на стр. 218. При постановке краевой задачи учитывались данные термограмм $T = f(t)$, регистрируемых в экспериментах по ПТП алюминиевых сплавов:

$$T = T_0, c_L = c_S = c_0, G = G_0(\vec{r}) \text{ при } t = 0, \quad (6.5a)$$

$$T(\vec{r}) = f(t), \partial c / \partial \vec{n} = 0 \text{ на границах,} \quad (6.5b)$$

где $\vec{r}$ — радиус-вектор, c_L и c_S — концентрация примеси в жидкой и твердой фазах соответственно, $0 \leq G \leq 1$ — объемная доля твердой фазы в макроточке.

Алгоритмическая компоновка двухуровневой модели. Схема алгоритмической компоновки двухуровневой модели приведена на рис. 6.3. На макроуровне решаются: (1) уравнения гидродинамики для описания вязкого течения, (2) уравнения фазового поля для определения формы мениска и (3) уравнения модели дендритного роста для расчета микроструктуры.

На мезоуровне производится расчет физических эффектов, которые определяют физико-химические процессы и смачиваемость в контактной точке. Для этого, во-первых, производится решение прямых задач течения расплава по шероховатой поверхности. Во-вторых, смачивание металлической поверхности расплавом зависит от так называемого ло-

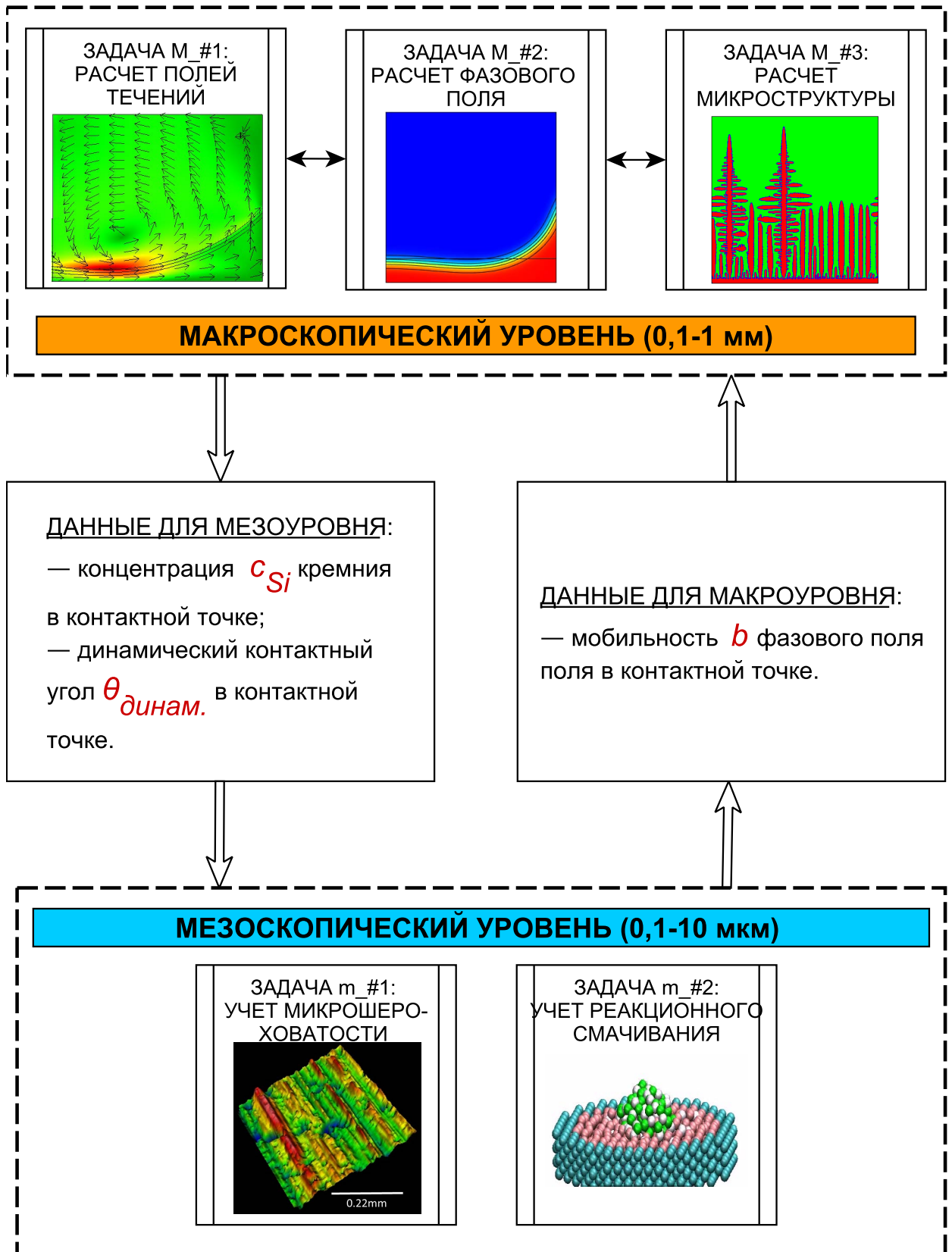


Рис. 6.3. Схема разбиения задач и согласования решений на макро- и мезоуровнях при описании пайки твердым припоем алюминиевых сплавов.

кального эрозионного воздействия. Для низкотемпературных жидкостей (воды, большинства органических жидкостей) скорость движения контактной точки определяется только двумя факторами: балансом сил поверхностного натяжения и частотой перескока молекул жидкости. Большинство расплавов плохо смачивает поверхности, поскольку потенциалы взаимодействия молекул расплава и молекул подложки невелики. При высоких температурах происходит изменение химического состава подложки, что способствует локальной эрозии и увеличению числа поступательных перескоков молекул расплава. Эти процессы описываются кинетическими молекулярными моделями, развитыми в работах Зайца, Томсиа и Каннона [230]. Результаты таких моделей используются для оценки контактной мобильности b .

Схема согласования решений показана также на рис. 6.3, на котором приведены данные макроуровня, используемые для постановки краевых задач мезоуровня. К ним относятся переменные макроуровня: концентрация c_{Si} кремния в контактной точке и динамический угол $\theta_{\text{динам.}}$ смачивания. С мезоскопического уровня на макроуровень передается мобильность b контактной точке. На основании полученного с мезоуровня значения b производится уточнение вида кинетического уравнения (6.3)(б), которое описывает скорость движения контактной точки на макроуровне.

Программная реализация. Математическая модель (6.1) – (6.5) реализована с помощью программного кода, написанного на алгоритмическом языке C++ и языке аналитического программирования вариационных задач в пакете Comsol MultiPhysics версии 3.5. Дискретизация континуальных моделей выполнена методами конечных разностей и конечных элементов. Число степеней свободы в расчетах составляло до 10^6 при максимальном времени вычислений 120 часов. Созданный программный код зарегистрирован как программа для ЭВМ “Компьютерное моде-

лирование технологии пайки твердым припоем” [231], свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № RU 2017662403.

Идентификация параметров и верификация модели. Модель применялась для анализа кинетики формирования мениска в трех системах: воды, силиконового масла и припоя Al–Si. Параметры, которые подробно описаны в литературе, определялись из справочников [232–235]. Таблицы Г.1 и Г.2 содержат термофизические параметры, использованные при моделировании. Некоторые параметры зависят от условий проведения экспериментов. По этой причине равновесный угол смачивания определялся прямым методом. Абсолютная вязкость силиконового масла также измерялась вискозиметром, поскольку производители реактивов допускают широкий диапазон значений.

Верификация модели включала сравнение с аналитическими решениями и данными лабораторных экспериментов. Проведено сравнение с аналитическими решениями для скорости поднятия мениска в тонком капилляре [236] и равновесной формы мениска [237], которое показало хорошее согласие с теорией. Конечной целью работы являлось изучение системы Al–Si, которая характеризуется слабым реакционным взаимодействием расплава и подложки. На этапе верификации сравнение с данными лабораторного эксперимента было вначале осуществлено для воды и силиконового масла, где такое взаимодействие не наблюдается. Результаты верификации приведены далее по тексту. Верификация позволила провести калибровку параметров фазового поля, которые в последующем были частично использованы для анализа многофазного течения припоя Al–Si.

6.2. Моделирование кинетики вязкого течения в зоне формирования мениска при пайке твердым припоем

Обзор экспериментальных данных. Постановка задачи. Эксперименты по изучению кинетики формирования мениска проводились [98, 238] с использованием установки для определения профиля мениска и динамического угла смачивания, представленной на рис. 6.4(а). Для этого камера с размещенным в ней образцом просвечивалась и профиль мениска регистрировался с помощью видеокамеры, соединенной с микроскопом, рис. 6.4(б). Частота сканирования составляла 1000 Гц для качественного разрешения нестационарного смачивания жидкостями с низкой вязкостью. В экспериментах с водой и силиконовым маслом вертикальная стеклянная пластина опускалась вниз до момента контакта с жидкой пленкой. В испытаниях с Al–Si готовилось Т-образное соединение, которое помещалось в печь и радиально нагревалось трубчатой муфельной печью с контролем температуры четырьмя термопарами.

Результаты измерений показали, рис. 6.4(в, г), что положение контактной точки для всех трех изученных систем описывается степенным законом $L_V \sim t^{1/n}$, где n — целое число. В литературе приводится диапазон значений $n = 1 \dots 10$ для различных систем. Для воды, силиконового масла и припоя Al–Si на основе измерений установлено, что на начальной стадии смачивания показатель равен $n = 2$. Закон $L_V \sim \sqrt{t}$ часто встречается в задачах капиллярных течений, поскольку соответствует режиму течения, ограниченному объемом входного потока. На поздних стадиях показатель режима становится равным $n = 5$, то есть течение замедляется.

Показательным является время достижения мениском стационарной формы, рис. 6.4(в, г). Для воды, силиконового масла и припоя Al–Si оно составляет 100 мс, 1 с и 60 с соответственно. Отметим при этом, что вязкость припоя составляет около 1 мПа·с и равна вязкости воды. Вязкость силиконового масла равнялась 10 мПа·с. Таким образом, бо-

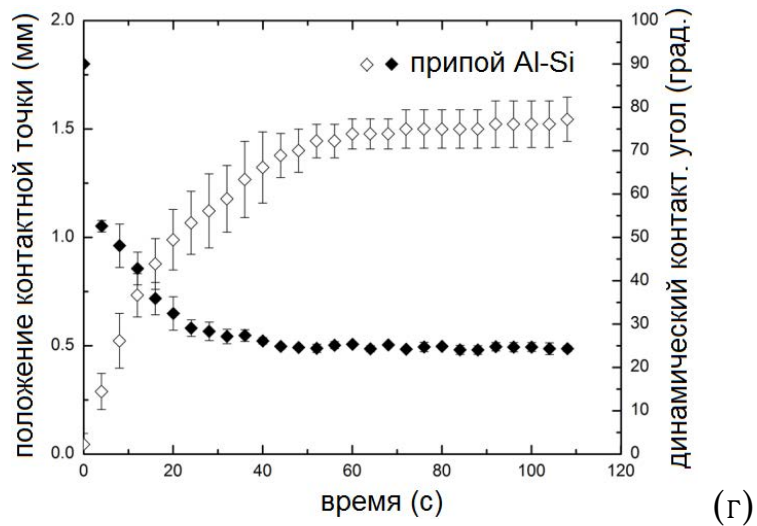
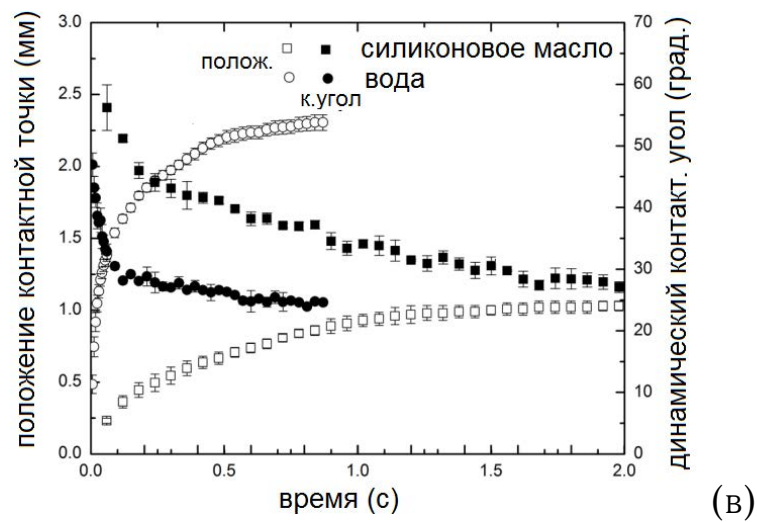
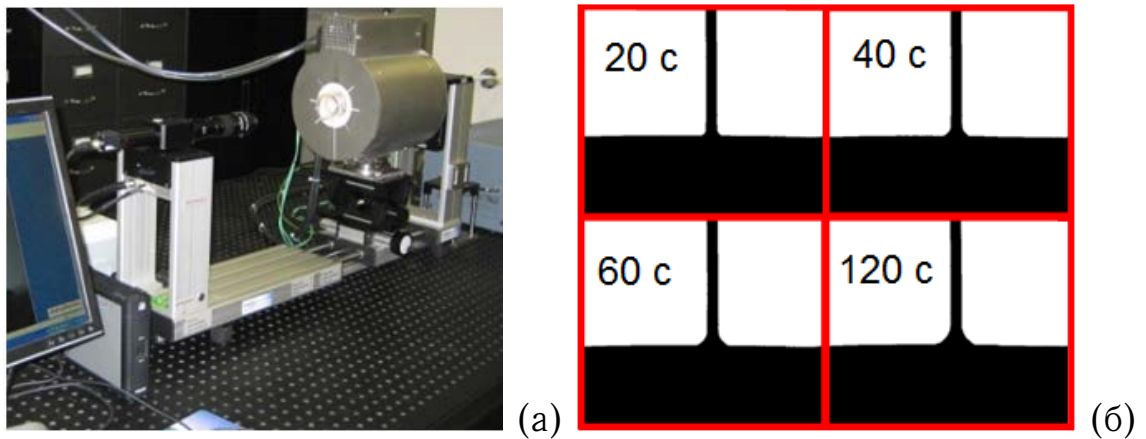


Рис. 6.4. (а) Установка для измерения кинетики формирования мениска и динамического контактного угла. (б) Изображения профиля мениска, полученные в различные моменты времени в экспериментах с Al–Si. (в, г) Динамический контактный угол θ и вертикальное положение L_V контактной точки в зависимости от времени в экспериментах с силиконовым маслом, водой и припоем Al–Si.

лее чем в 500 раз замедленная кинетика для Al–Si при сопоставимой вязкости не может быть объяснена простыми моделями вязкого течения в тонких пленках. В связи с этим целью исследований являлось математическое моделирование для разъяснения противоречия между теоретическими моделями и лабораторным экспериментом. Для этого было выполнено изучение сопряженных процессов переноса, структурообразования и слабореакционного смачивания в зоне пайки.

Результаты двухуровневого моделирования и анализ. Использование двухуровневого подхода позволило корректно описать механизм вязкого течения и кинетики контактной точки для экспериментально изученных систем, включая припой Al–Si, рис. 6.5(а). Приведено вертикальное положение L_V контактной точки в зависимости от времени в двойных логарифмических координатах. Для всех систем получено хорошее согласие с экспериментальными данными. На графиках наблюдается линейная зависимость $\log_{10}(L_V) \sim \frac{1}{2} \log_{10}(t)$ на начальных стадиях и уменьшение наклона до $\frac{1}{5}$ на поздних стадиях, как обсуждалось выше.

Рисунок 6.5(б) показывает кинетику формирования мениска при уменьшении толщины d пленки. Из графика следует, что при уменьшении d ниже критического значения $d = 50$ мкм формирование мениска лимитируется скоростью вязкого течения в тонкой пленке расплава. В пленках с $d \gtrsim 80$ мкм кинетика контактной точки лимитируется процессами слабореакционного смачивания и не зависит от d . Таким образом, на основании вычислительных экспериментов при различных наборах параметров было доказано, что основным лимитирующим фактором при формировании мениска в ПТП являются физико-химические процессы в контактной точке. Эффекты вязкого трения, инерции, капиллярных сил, фильтрационного течения относятся к второстепенным факторам.

После образования мениска вдоль линий сопряжения деталей и поддержки соединения не более пяти минут в технологии ПТП производится охлаждение изделия, что сопровождается кристаллизацией припоя и

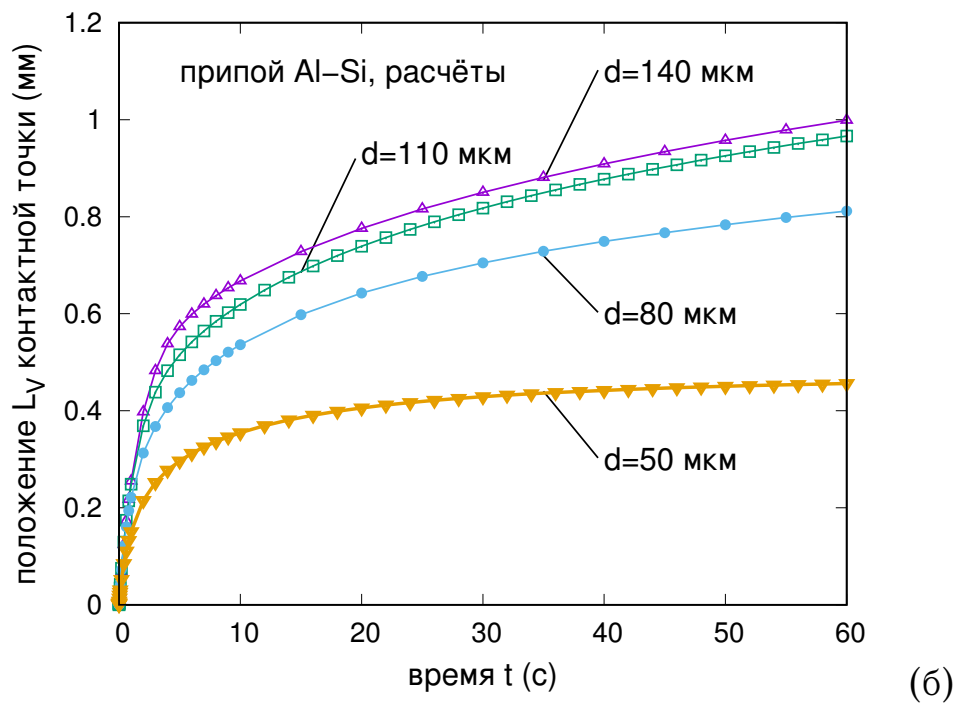
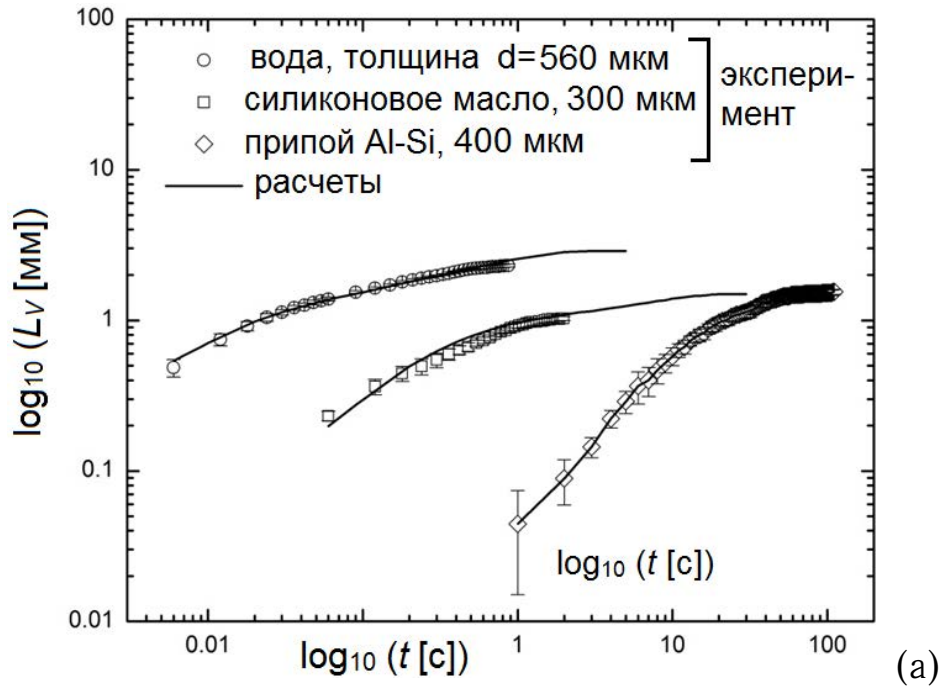


Рис. 6.5. Анализ кинетики движения контактной точки. (а) Сравнение результатов расчетов и экспериментов для воды, силиконового масла и припоя Al–Si. График построен в двойных логарифмических координатах, где L_V — вертикальное положение контактной точки, t — время, d — толщина пленки жидкости. (б) Кинетика движения контактной точки для припоя Al–Si, полученная в расчетах с различной толщиной d слоя припоя.

металлургическим соединением деталей. Формирование микроструктуры в паянных швах зависит от режимов и температуры выдержки. Как показано на рис. 6.6(а,б), микроструктура представлена смесью дендритов α -Al и эвтектики Al + Al-Si. Первый тип микроструктуры содержит мало α -Al фазы, преобладает эвтектика, и этот тип является предпочтительным с точки зрения механических свойств. Во втором типе преобладает крупнозеренная α -Al фаза, что служит источником остаточных напряжений и потенциально способствует разрушению шва по границам дендритов.

Для объяснения наблюдаемых экспериментальных результатов было проведено моделирование [95–97, 228] кристаллического структурообразования при различных режимах термической обработки. Варьируемым параметром являлась температура $T_{\text{выдерж.}}$ выдержки, которая задавалась ниже температуры ликвидуса. Результаты моделирования, рис. 6.6(б), находятся в качественном соответствии с экспериментальными данными. По результатам расчетов сделан вывод, что температура выдержки является основным управляющим параметром при отборе микроструктуры. Локальное увеличение температуры в зоне пайки, обусловленное выделением теплоты фазового перехода, не превышает 1 К, поэтому микроструктура формируется в условиях, близких к изотермическим. Следовательно, формирование дендритной структуры α -Al определяется преимущественно диффузией кремния в жидкой фазе. Отбор типа микроструктуры происходит в достаточно узком интервале температур: при уменьшении температуры выдержки на 10 К зафиксирован структурный переход от ансамбля дендритов к одиночному дендриту. Причина такого перехода заключается в различном соотношении концентрационного и капиллярного переохлаждений, которые оказывают дестабилизирующее и стабилизирующее влияние на поверхность раздела фаз. Как известно, это соотношение имеет большое значение в течение переходного периода затвердевания, когда происходит отбор длины волны морфологической неустойчивости фазовой границы “кристалл — расплав”.

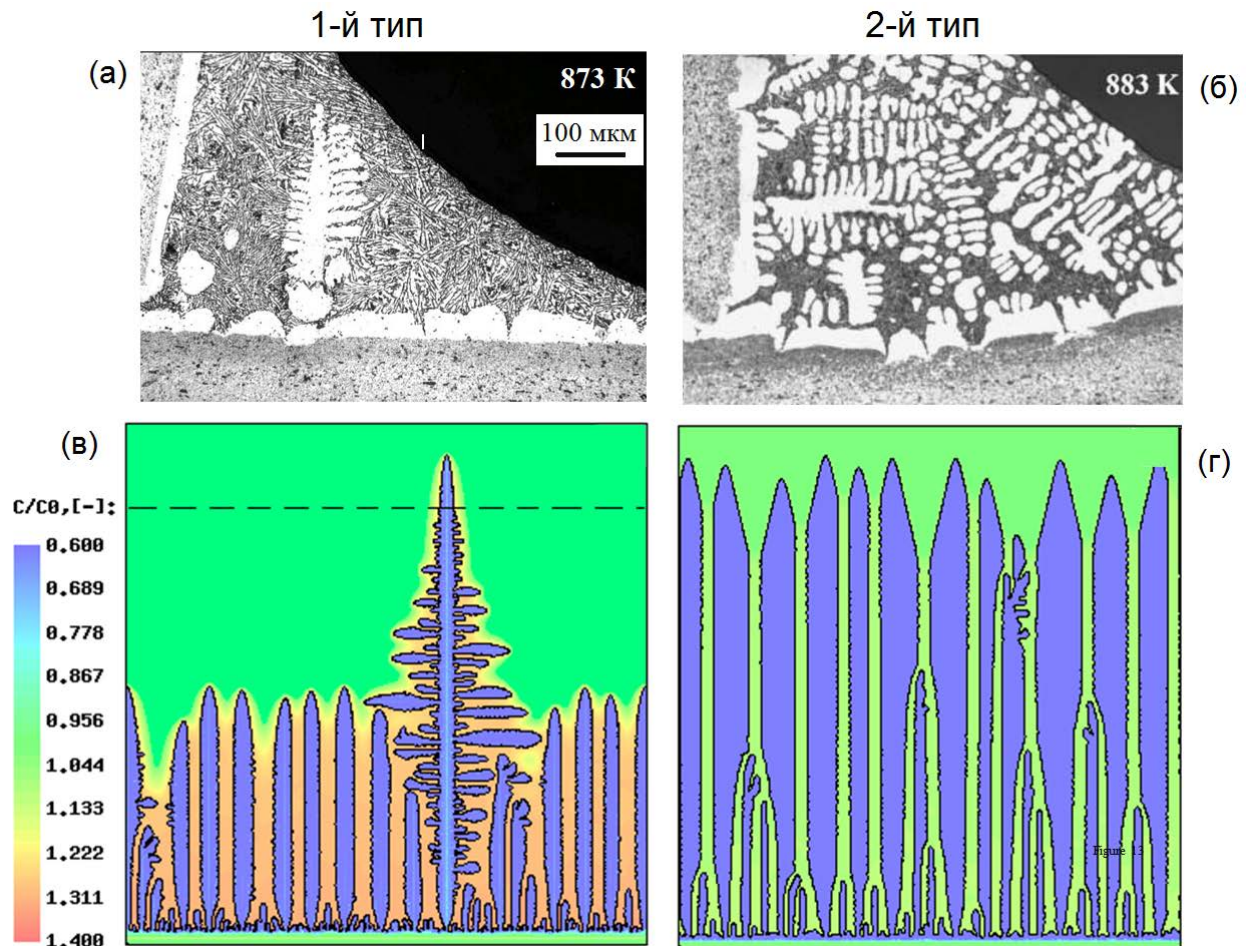


Рис. 6.6. Сравнение микроструктуры, полученной в эксперименте (а,б) и расчетах (в,г) при разных температурах выдержки $T_{\text{выдерж.}} = 873 \text{ K}$ и 883 K , что соответствует переохлаждениям 14 и 4 K ниже равновесного ликвидуса. Шкала слева показывает относительную концентрацию C/C_0 , где C_0 — начальная концентрация кремния в припое Al–Si.

6.3. Выводы к главе 6

1. Разработана двухуровневая макро-мезоскопическая модель для изучения сопряженных процессов вязкого течения, поверхностного натяжения, слабореакционного смачивания, диффузии компонентов и кристаллизации в тонком слое металлического расплава.
2. Решена контактная задача движения линии смачивания “жидкость — твердая поверхность — газовая фаза” в формализме фазового поля, где использовано граничное условие диффузионного типа и обоснован выбор интерполяционных функций, обеспечивающих численную устойчивость модели.
3. Впервые предложен согласованный метод оценки подвижности контактной точки для систем со слабым химическим взаимодействием, где происходит локальная эрозия поверхности при контакте расплава с плохо смачиваемой поверхностью.
4. Для технологии пайки твердым припоем Al–Si показано, что основным фактором, контролирующим кинетику формирования мениска, является поверхностная диффузия припоя вдоль стенки, которая зависит как от диффузии кремния в подложку, так и от сил межмолекулярного взаимодействия на линии смачивания. На поздних стадиях процесс осложняется формированием в зоне пайки дендритов α -Al, что изменяет механику вязкого течения и требует учета проницаемости дендритного каркаса.
5. На основе двухуровневой модели разработана программа для ЭВМ “Компьютерное моделирование технологии пайки твердым припоем”, которая позволяет проводить расчеты и оптимизацию режимов пайки алюминиевых сплавов твердым припоем.

Заключение

В диссертации получены следующие основные результаты:

1. Разработан метод двухуровневого математического моделирования процессов переноса, сопряженных с кристаллизацией, который применим для описания металлургических процессов в металлических расплавах мезоскопических объемов. Метод показывает высокую эффективность при изучении высокоскоростной кристаллизации, где наблюдается большая вариативность решений как по пространственным координатам, так и во времени. Такие процессы сопровождаются значительным изменением структуры фазовых границ, поэтому уточнение макроскопической модели на основе микроскопического моделирования приводит к повышению точности анализа нестационарных задач кристаллизации. (Пункт 1. Разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений.)
2. Предложены, обоснованы и алгоритмизированы физико-математические модели для процессов вязкого течения, тепло-массопереноса, смачиваемости, капиллярных явлений, зародышеобразования, кристаллического роста и отбора микроструктуры при высокоскоростной кристаллизации, где достигаются значительные отклонения от термодинамического равновесия. Предложена оригинальная формулировка контактной задачи смачивания в формализме фазового поля, обладающая вычислительной устойчивостью. Все модели основаны на предложенном в работе подходе двухуровневого моделирования процессов переноса и структурообразования. (Пункт 1. Разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений.)

3. В процессе реализации двухуровневых моделей создан эффективный способ алгоритмической компоновки для задач кристаллизации, который обладает следующими новыми элементами вычислительных методов (пункт 3. Разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий).

- Согласование задач на различных уровнях сводится к постановке краевых задач на мезоуровне на основе данных макроуровня, передаче эффективных теплофизических характеристик и феноменологических моделей с мезо- на макроуровень. Это позволяет применять различные методы пространственно-временной дискретизации уравнений, оптимальные для каждой краевой задачи на всех масштабных уровнях.
- Достигнуто сокращение вычислительных затрат при решении сопряженных нестационарных задач за счет динамического согласования задач с различными пространственно-временными масштабами путем оценки характеристических масштабов процессов и выбора различных шагов интегрирования по времени для разных процессов.
- В задаче моделирования лазерного плавления порошковых материалов исследована постановка задачи с движущейся верхней границей расчетной области. При ее дискретизации по методу конечных элементов использованы базовые функции, зависящие от координаты верхней границы. Это позволило применить метод деформируемой сетки, который не дает инвертированных конечных элементов и экономичнее использования в данной задаче адаптивных сеток.

4. Разработаны комплексы проблемно-ориентированных программ “Компьютерная оптимизация процессов лазерной обработки порошков”, “Моделирование теплофизических процессов при бесконтей-

нерной кристаллизации металлических расплавов” и “Компьютерное моделирование технологии пайки твердым припоем” для проведения вычислительного эксперимента и оптимизации промышленных технологий по получению функциональных материалов. (Пункт 4. Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента.)

5. Проведены комплексные исследования проблем металлургии расплавов мезоскопических объемов с применением технологии двухуровневого вычислительного эксперимента (пункт 5. Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента).

- Изучены процессы плавления, консолидации и кристаллизации при лазерном плавлении порошкового слоя; построены карты рациональных режимов обработки, при которых сочетаются высокая скорость сканирования, хорошая адгезия поверхностного слоя с подложкой и низкая остаточная пористость слоя.
- Теоретически рассчитаны и обоснованы скорости охлаждения и режимы фазового отбора при кристаллизации расплава $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}_1$, позволяющие достичь высокой остаточной намагниченности сплава при производстве редкоземельных постоянных магнитов.
- Для переохлажденного расплава Co-Co предсказана аномальная кинетика фазового расслоения при высокоскоростной закалке со скоростями охлаждения выше 10^5 K/с.
- Объяснена кинетика формирования мениска в процессах пайки твердым припоем алюминиевых сплавов; показано, что ки-

нетика лимитируется слабореакционным смачиванием на линии контакта.

6. Разработана система компьютерного моделирования высокоскоростного лазерного плавления порошков (ВЛП), которая была использована для теоретического обоснования режимов обработки при получении функциональных покрытий с улучшенными механическими и электрохимическими свойствами. Результаты внедрены в производство. (Пункт 8. Разработка систем компьютерного и имитационного моделирования.)

Таким образом, в процессе разработки двухуровневого подхода к математическому моделированию задач из области металлургии мезоскопических объемов расплава были взаимно увязаны и дополнены различные алгоритмы и подходы, существовавшие ранее. Это позволило достигнуть максимальной эффективности как с точки зрения точности результатов моделирования и их согласия с экспериментальными данными, так и с точки зрения оптимального использования вычислительных ресурсов. На основе данных двухуровневого вычислительного эксперимента решены комплексные задачи в области теплофизики и современного материаловедения.

Литература

1. Панин В. Е., Лихачев В. А., Гриняев Ю. В. Структурные уровни деформации твердых тел. — Новосибирск: Наука, 1985. — 254 с.
2. Волков С. Д., Ставров В. П. Статистическая механика композиционных материалов. — Минск: БГУ, 1978. — 205 с.
3. Победря Б. Е. Механика композиционных материалов. — М.: МГУ, 1984. — 336 с.
4. Панин В. Е. Основы физической мезомеханики // Физическая мезомеханика. — 1998. — N 1. — С. 5–22.
5. Псахье С. Г., Остермайер Г. П., Дмитриев А. И., Шилько Е. В., Смолин А. Ю., Коростелев С. Ю. Метод подвижных клеточных автоматов как новое направление дискретной вычислительной механики. Часть I. Теоретическое описание // Физическая мезомеханика. — 2000. — Т. 3. — N 2. — С. 5–13.
6. Валиев Р. З., Александров И. В. Объемные наноструктурные металлические материалы. Получение, структура и свойства. — М.: Академкнига, 2007. — 397 с.
7. Макаров П. В. Математическая многоуровневая модель упругопластического деформирования структурно-неоднородных сред: дис. ... докт. физ.-мат. наук: 01.04.07, 01.02.04. — Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, 1995. — 251 с.
8. Чекалкин А. А. Статистические многоуровневые модели механики композитов в задачах надежности, долговечности и ресурса: дис. ... докт. физ.-мат. наук: 01.02.04. — Пермский политехнический институт, 1998. — 322 с.

9. Трусов П. В., Швейкин А. И., Нечаева Е. С., Волегов П. С. Многоуровневые модели неупругого деформирования материалов и их применение для описания эволюции внутренней структуры // Физическая мезомеханика. — 2012. — Т. 15. — N 1. — С. 33–56.
10. Gawad J., Van Bael A., Eyckens P., Samaey G., Van Houtte P., Roose D. Hierarchical multi-scale modeling of texture induced plastic anisotropy in sheet forming // *Comp. Mater. Sci.* — 2013. — V. 66. — P. 65–83.
11. Паньков А. А. Методы самосогласования механики композитов. — Пермь: ПГТУ, 2008. — 252 с.
12. Vanaerschot A., Cox B., Lomov S., Vandepitte D. Multi-scale modelling strategy for textile composites based on stochastic reinforcement geometry // *Comput. Method Appl. M.* — 2016. — V. 310. — P. 906–934.
13. Geers M. C. D., Kouznetsova V. G., Brekelmans W. A. M. Multi-scale computational homogenization: trends and challenges // *J. Comp. Appl. Math.* — 2010. — V. 234. — P. 2175–2182.
14. Raabe D. The simulation of materials microstructures and properties. — Wiley-VCH, 1998. — 379 p.
15. Provatas N., Elder K. Phase-field methods in material science and engineering. — Wiley-VCH Verlag, 2010. — 298 p.
16. Херлах Д., Галенко П., Холланд-Мориц Д. Метастабильные материалы из переохлажденных расплавов. — М., Ижевск: РХД, 2010. — 481 с.
17. Борисов В. Т. Теория двухфазной зоны металлического слитка. — М.: Металлургия, 1987. — 224 с.
18. Флемингс М. Процессы затвердевания. — М.: Мир, 1977. — 424 с.

19. Журавлев В. А., Китаев Е. М. Теплофизика формирования непрерывного слитка. — М.: Металлургия, 1974. — 215 с.
20. Galenko P. K., Zhuravlev V. A. Physics of Dendrites. — Singapore: World Scientific, 1994. — 212 p.
21. Gandin Ch.-A., Desbiolles J.-L., Rappaz M., Thévoz Ph. A three-dimensional cellular automaton–finite element model for the prediction of solidification grain structures // Metall. Mater. Trans. A. — 1999. — V. 30A. — P. 3153–3165.
22. Schmitz G. J., Böttger B., Eiken J., Apel M., Viardin A., Carré A., Laschet G. Phase-field based simulation of microstructure evolution in technical alloy grades // Int. J. Adv. Eng. Sci. Appl. Math. — 2010. — V. 2. — N 4. — P. 126–139.
23. Tan L., Zabaras N. Multiscale modeling of alloy solidification using a database approach // J. Comput. Phys. — 2007. — V. 227. — N 1. — P. 728–754.
24. Трусов П. В., Ашихмин В. Н., Волегов П. С., Швейкин А. И. Моделирование эволюции структуры поликристаллических материалов при упругопластическом деформировании // Ученые записки Казанского университета. — 2010. — Т. 152. — N 4. — С. 225–237.
25. Трусов П. В., Ашихмин В. Н., Волегов П. С., Швейкин А. И. Определяющие соотношения и их применение для описания эволюции микроструктуры // Физическая мехомеханика. — 2009. — Т. 12. — N 3. — С. 61–71.
26. Ашихмин В. Н., Трусов П. В., Швейкин А. И. Двухуровневая модель стационарных процессов упругопластического деформирования. Часть 1. Алгоритм // Вычислительная механика сплошных сред. — 2008. — Т. 1. — N 3. — С. 15–24.

27. Исупова И. Л. Двухуровневая модель поведения сталей при термомеханических воздействиях с учетом фазовых превращений: дис. ... канд. физ.-мат. наук: 05.13.18. — ПНИПУ, 2014. — 134 с.
28. Modeling Across Scales: A Roadmapping Study for Connecting Materials Models and Simulations Across Length and Time Scales. — NIST, 2015. — 120 p.
29. Mathieu J., Scott J. An Introduction to Turbulent Flow. — Cambridge University Press, 2000. — 375 p.
30. Carati D. Large-eddy simulation for turbulent flows: from mathematical foundations to practical applications: PhD thesis. — Free University of Brussels, 2001. — 171 p.
31. Нигматулин Р. И. Динамика многофазных сред. Том 1. — М.: Наука, 1987. — 464 с.
32. Рудяк В. Я. Статистическая аэрогидромеханика гомогенных и гетерогенных сред. Т. 1. Кинетическая теория. — Новосибирск: Сибстрин, 2004. — 320 с.
33. Рудяк В. Я. Статистическая аэрогидромеханика гомогенных и гетерогенных сред. Т. 2. Гидромеханика. — Новосибирск: Сибстрин, 2005. — 468 с.
34. Борисов В. Т. Теория двухфазной зоны металлического слитка. — М.: Металлургия, 1987. — 224 с.
35. Журавлев В. А. Термодинамика необратимых процессов в задачах и решениях. — М.: Наука, 1979. — 136 с.
36. Недопекин Ф. В. Математическое моделирование гидродинамики и тепломассопереноса в слитках. — Ижевск: ИД Удмуртский университет, 1995. — 236 с.

37. Бахвалов Н. С., Панасенко Г. П. Осреднение процессов в периодических средах. — М.: Наука, 1984. — 352 с.
38. Андрианов И. В. Введение в асимптотические методы. URL: <http://mechmath.ipmnet.ru/math/asympt>. — Электронный ресурс, дата обращения: 27.07.2017.
39. Samaey G. Patch dynamics: macroscopic simulation of multiscale systems: PhD thesis. — KU Leuven, 2006. — 220 p.
40. E W., Engquist B. The heterogeneous multiscale methods // Commun. Math. Sci. — 2003. — V. 1. — N 1. — P. 87–132.
41. Kevrekidis I. G., Gear C. W., Hyman J. M., Kevrekidis P. G., Runborg O., Theodoropoulos C. Equation-free, coarse-grained multiscale computation: enabling microscopic simulators to perform system-level tasks // Commun. Math. Sci. — 2003. — V. 1. — N 4. — P. 715–762.
42. Gear C. W., Kevrekidis I. G. Projective methods for stiff differential equations: problems with gaps in their eigenvalue spectrum // SIAM J. Sci. Comput. — 2003. — V. 24. — N 4. — P. 1091–1106.
43. Степанов А. Е., Богданова М. В., Закиров А. В., Корнеев Б. А., Левченко В. Д., Потапкин Б. В. Численное моделирование процесса спекания порошка под действием излучения при аддитивном производстве // Доклад на II Международной конференции “Аддитивные технологии: настоящее и будущее” 16.03.2016 г., ВИАМ, Москва. — 2016.
44. Кочетков В. А. Расчет характеристик упругих и теплофизических свойств многофазного композита, содержащего составные или полые сферические включения // Механика композитных материалов. — 1994. — Т. 30. — N 4. — С. 512–519.
45. Кристинсен Р. Введение в механику композитов. — М.: Мир, 1982. — 334 с.

46. Рудяк В. Я., Минаков А. В., Краснолуцкий С. Л. Физика и механика процессов теплообмена в течениях наножидкостей // Физическая мезомеханика. — 2016. — Т. 19. — N 1. — С. 75–83.
47. Борисов В. Т. Кристаллизация бинарного сплава при сохранении устойчивости // Доклады АН СССР. — 1961. — Т. 136. — N 3. — С. 583–586.
48. Борисов В. Т. Двухфазная зона при кристаллизации сплава в нестационарном режиме // Доклады АН СССР. — 1962. — Т. 142. — N 3. — С. 581–583.
49. Галенко П. К., Голод В. М. Системный анализ литейных процессов // Литейное производство. — 1989. — N 10. — С. 4–7.
50. Lyubimova T. P., Khlybov O. A. Effect of rotating magnetic field on mass transfer during directional solidification of semiconductors // Magnetohydrodynamics. — 2016. — V. 52. — N 1. — P. 61–69.
51. Мажорова О. С., Попов Ю. П., Щерица О. В. Алгоритм расчета задачи о фазовом переходе в многокомпонентной смеси // Дифференциальные уравнения. — 2004. — Т. 40. — N 7. — С. 985–993.
52. Колмычков В. В., Мажорова О. С., Попов Ю. П. Анализ алгоритмов решения трехмерных уравнений Навье-Стокса в естественных переменных // Дифференциальные уравнения. — 2006. — Т. 42. — N 7. — С. 932–942.
53. Смородин Б. Л., Калинин Н. А., Давыдов Д. В. Моделирование процесса изменения температуры капель при выпадении замерзающих осадков // Метеорология и гидрология. — 2014. — N 9. — С. 34–40.
54. Иванцов Г. П. О росте сферического и иглообразного кристаллов бинарного сплава // Доклады АН СССР. — 1952. — Т. 83. — N 4. — С. 573–575.

55. Lipton J., Kurz W., Trivedi R. Rapid dendrite growth in undercooled alloys // *Acta Metall.* — 1987. — V. 35. — P. 957–964.
56. Boettinger W. J., Coriell S. R., Trivedi R. Application of dendritic growth theory to the interpretation of rapid solidification microstructures // *Rapid Solidification Processing: Principles and Technologies IV*. Ed. R. Mehrabian, P. A. Parrish. — Claitor's, Baton Rouge Louisiana, 1988. — P. 13–31.
57. Galenko P. K., Danilov D. A. Local nonequilibrium effect on rapid dendritic growth in a binary alloy melt // *Phys. Lett. A.* — 1997. — V. 235. — P. 271–280.
58. Alexandrov D. V., Galenko P. K. Selection criterion of stable dendritic growth at arbitrary Péclet numbers with convection // *Phys. Rev. E.* — 2013. — V. 87. — P. 062403–1-5.
59. Galenko P. K., Reuther K., Kazak O. V., Alexandrov D. V., Rettenmayr M. Effect of convective transport on dendritic crystal growth from pure and alloy melts // *Appl. Phys. Lett.* — 2017. — V. 111. — N 3. — P. 031602.
60. Уманцев А. Р., Виноградов В. В., Борисов В. Т. Математическое моделирование роста дендритов в переохлажденном расплаве // *Кристаллография.* — 1985. — Т. 30. — N 3. — С. 455–460.
61. Уманцев А. Р., Виноградов В. В., Борисов В. Т. Моделирование эволюции дендритной структуры // *Кристаллография.* — 1986. — Т. 31. — N 5. — С. 1002–1008.
62. Galenko P. K., **Krivilyov M. D.** Modeling of a transition to diffusionless dendritic growth in rapid solidification of a binary alloy // *Computational Materials Science.* — 2009. — V. 45. — N 4. — P. 972–980.

63. **Кривилев М. Д.** Кристаллическое структурообразование при высокоскоростном затвердевании бинарных сплавов: дис. ... канд. физ.-мат. наук: 01.04.07. — УдГУ, 2001. — 180 с.
64. Galenko P. K., Herlach D. M., Funke O., Phanikumar G. Phase-field modeling of dendritic solidification in undercooled droplets // In: Computational Modeling and Simulation of Materials III. — Techna Group Publishers, 2004. — 565–574 p.
65. Emmerich H., Löwen H., Wittkowski R., Gruhn T., Toth G. I., Tegze G., Gránásy L. Phase-field-crystal models for condensed matter dynamics on atomic length and diffusive times cales: an overview // Adv. Phys. — 2012. — V. 61. — N 6. — P. 665–743.
66. Hoyt J. J., Asta M., Karma A. Atomistic simulation methods for computing the kinetic coefficient in solid-liquid systems // Interface Sci. — 2002. — V. 10. — N 2–3. — P. 181–189.
67. Yang Y., Humadi H., Buta D., Laird B. B., Sun D., Hoyt J. J., Asta M. Atomistic simulations of nonequilibrium crystal-growth kinetics from alloy melts // Phys. Rev. Lett. — 2011. — V. 107. — P. 025505.
68. Анкудинов В. Е., Галенко П. К., Кропотин Н. В., **Кривилев М. Д.** Функционал атомной плотности и диаграмма структур в модели кристаллического фазового поля // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 2016. — Т. 149. — N 2. — С. 343–356.
69. Moelans N., Blanpain B., Wollants P. An introduction to phase-field modeling of microstructure evolution // Calphad. — 2008. — V. 32. — P. 268–294.
70. Bale C. W., Bélisle E., Chartrand P., Decterov S. A., Eriksson G., Hack K., Jung I.-H., Kang Y.-B., Melançon J., Pelton A. D. et al. FactSage thermochemical software and databases — recent developments // Calphad. — 2009. — V. 33. — P. 295–311.

71. Князева А. Г. Термомеханическая устойчивость фронта твердофазного превращения к двумерным возмущениям // Вестник ПНИПУ. Механика. — 2011. — N 4. — С. 88–124.
72. Мышлявцев А. В., Мышлявцева М. Д. Теоретический анализ влияния обратимости мономолекулярной и бимолекулярной стадий адсорбции на диаграммы кратности механизма Ленгмюра—Хиншельвуда // Доклады АН ВШ РФ. Сер. Естественные науки. — 2012. — N 1. — С. 6–18.
73. Provatas N., Goldenfeld N., Dantzig J. Efficient computation of dendritic microstructures using adaptive mesh refinement // Phys. Rev. Lett. — 1998. — V. 80. — P. 3308–3311.
74. Stefanescu D. M. Science and Engineering of Casting Solidification. — Kluwer Publishing, 2002. — 339 p.
75. Gao J., Kao A., Bojarevics V., Pericleous K., Galenko P. K., Alexandrov D. V. Modeling of convection, temperature distribution and dendritic growth in glass-fluxed nickel melts // J. Cryst. Growth. — 2017. — V. 471. — P. 66–72.
76. **Кривилев М. Д.**, Афлятунова Д. Д., Анкудинов В. Е., Гордеев Г. А. Многомасштабное теоретическое описание структурообразования в ультрадисперсных системах // Материаловедение. — 2012. — N 1. — С. 2–6.
77. **Krivilyov M.**, Volkman T., Gao J., Fransaer J. Multiscale analysis of the effect of competitive nucleation on phase selection in rapid solidification of rare-earth ternary magnetic materials // Acta Materialia. — 2012. — V. 60. — P. 112–122.
78. **Кривилев М. Д.**, Харанжевский Е. В., Лебедев В. Г., Данилов Д. А., Данилова Е. В., Галенко П. К. Синтез композитных

покрытий при высокоскоростном лазерном спекании металлических порошковых смесей // Физика металлов и металловедение. — 2013. — Т. 114. — N 10. — С. 871–893.

79. Галенко П. К., **Кривилев М. Д.** Конечно-разностная схема для моделирования кристаллического структурообразования в переохлажденных бинарных сплавах // Математическое моделирование. — 2000. — Т. 12. — N 12. — С. 11–23.
80. Галенко П. К., **Кривилев М. Д.** Изотермический рост кристаллов в переохлажденных бинарных сплавах // Математическое моделирование. — 2000. — Т. 12. — N 11. — С. 17–37.
81. **Krivilyov M.**, Fransaer J. Effects of transient heat and mass transfer on competitive nucleation and phase selection in drop tube processing of multicomponent alloys // Глава в книге: Solidification of Containerless Undercooled Melts. Ed. D. M. Herlach, D. M. Matson. — Wiley-VCH, 2012. — P. 139–160.
82. **Krivilyov M. D.**, Mesarovic S. Dj., Sekulic D. P. Phase-field model of interface migration and powder consolidation in additive manufacturing of metals // Journal of Materials Science. — 2017. — V. 52. — N 8. — P. 4155–4163.
83. Гордеев Г. А., **Кривилев М. Д.**, Анкудинов В. Е. Компьютерное моделирование селективного лазерного плавления высокодисперсных металлических порошков // Вычислительная механика сплошных сред. — 2017. — Т. 10. — N 3. — С. 293–312.
84. Krantz W. B. Scaling Analysis in Modeling Transport and Reaction Processes: A Systematic Approach to Model Building and the Art of Approximation. — Wiley, 2007. — 529 p.
85. Bird R., Stewart W. E., Lightfoot E. N. Transport phenomena. — Wiley, 2002. — 905 p.

86. Schlichting H. Boundary layer theory. — McGraw Hill company, 1979. — 817 p.
87. Kurz W., Fisher D. J. Fundamentals of Solidification. — Aedermannsdorf: Trans Tech Publication, 1992. — 305 p.
88. Cahn J. W., Hilliard J. E. Free energy of a nonuniform system. Part I. Interfacial free energy // J. Chem. Phys. — 1958. — V. 28. — N 2. — P. 258–267.
89. Введение в математическое моделирование. Под ред. П.В. Трусова. — М.: Логос, 2007. — 440 с.
90. Самарский А. А., Гулин А. В. Численные методы. — М.: Наука, 1989. — 430 с.
91. Формалев В. Ф., Ревизников Д. Л. Численные методы. — М.: Физматлит, 2004. — 400 с.
92. **Кривилев М. Д.**, Данилов Д. А., Лебедев В. Г., Галенко П. К. Программный комплекс “Компьютерная оптимизация процессов лазерной обработки порошков”. — Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2010614748. Дата регистрации в реестре: 21.07.2010.
93. **Кривилев М. Д.**, Харанжевский Е. В., Гордеев Г. А., Анкудинов В. Е. Управление лазерным спеканием металлических порошковых смесей // Управление большими системами. — 2010. — Т. 31. — С. 299–322.
94. Lomaev S., **Krivilyov M.**, Fransaer J. Exact analytical solution based on the vector potential technique for a conjugated hydrodynamic and Joule heating problem in an electromagnetically levitated drop // Magnetohydrodynamics. — 2016. — V. 52. — N 1. — P. 105–116.

95. **Кривилев М. Д.**, Галенко П. К. Моделирование дендритной кристаллизации в Al–Si сплавах при скоростной пайке // Материаловедение. — 2004. — N 5. — С. 11–14.
96. Sekulic D. P., Galenko P. K., **Krivilyov M. D.**, Walker L., Gao F. Dendritic growth in Al–Si alloys during brazing. Part 1: Experimental evidence and kinetics // International Journal of Heat and Mass Transfer. — 2005. — V. 48. — N 12. — P. 2372–2384.
97. Sekulic D. P., Galenko P. K., **Krivilyov M. D.**, Walker L., Gao F. Dendritic growth in Al–Si alloys during brazing. Part 2: Computational modeling // International Journal of Heat and Mass Transfer. — 2005. — V. 48. — N 12. — P. 2385–2396.
98. Fu H., Dehsara M., **Krivilyov M.**, Mesarovic S. Dj., Sekulic D. P. Kinetics of the molten Al–Si triple line movement during a brazed joint formation // Journal of Materials Science. — 2016. — V. 51. — N 4. — P. 1798–1812.
99. URL: <http://graal.ens-lyon.fr/MUMPS/>. — Дата обращения: 25.08.2017.
100. Ankudinov V., Gordeev G. A., **Krivilyov M. D.** Numerical simulation of heat transfer and melting of Fe-based powders in SLM processing // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. — 2017. — V. 192. — N 012026.
101. Kruth J. P. Material increment manufacturing by rapid prototyping techniques // CIRP Ann. — 1991. — V. 40. — N 2. — P. 603–614.
102. Abe F., Osakada K., Shiomi M., Uematsu K., Matsumoto M. The manufacturing of hard tools from metallic powders by selective laser melting // J. Mater. Process. Technol. — 2001. — V. 111. — N 1–3. — P. 210–213.

103. Viswanathana V., Lahab T., Balanib K., Agarwalb A., Seala S. Challenges and advances in nanocomposite processing techniques // Mater. Sci. Eng. R. — 2006. — V. 54. — N 5–6. — P. 121–285.
104. Bourell D. L., Marcus H. L., Barlow J. W., Beaman J. J. Selective laser sintering of metals and ceramics // Int. J. Powder Metall. — 1992. — V. 28. — N 4. — P. 369–381.
105. Шишковский И. В. Лазерный синтез функционально-градиентных мезоструктур и объемных изделий. — М.: Физматлит, 2009. — 424 с.
106. Шишковский И. В. Основы аддитивных технологий высокого разрешения. — СПб.: Питер, 2016. — 400 с.
107. Simchi A., Pohl H. Direct laser sintering of iron-graphite powder mixture // Mater. Sci. Eng. A. — 2004. — V. 383. — P. 191–200.
108. Kruth J. P. Selective laser melting of iron-based powder // J. Mater. Process. Technol. — 2004. — V. 149. — P. 616–622.
109. Харанжевский Е. В., Ипатов А. Г., Климова И. Н., Стрелков С. М. Лазерное спекание ультрадисперсных порошковых материалов на основе железа // Физика металлов и металловедение. — 2009. — Т. 108. — N 5. — С. 534–540.
110. Харанжевский Е. В., **Кривилев М. Д.** Лазерное спекание нанокompозитов Fe–Ni // Физика металлов и металловедение. — 2011. — Т. 111. — N 1. — С. 54–63.
111. Харанжевский Е. В., Ипатов А. Г., Галенко П. К., **Кривилев М. Д.**, Данилов Д. А. Способ изготовления покрытия на изделии методом послойного лазерного синтеза. — Патент РФ на изобретение № 2443506. Дата приоритета: 05.04.2010. Дата регистрации в реестре: 27.02.2012.

112. Харанжевский Е. В., Ипатов А. Г. Структура и топография поверхностных слоев, полученных лазерным высокоскоростным спеканием порошков Fe–C–Ni, Fe–C–Cu // Вестник УдГУ. Сер. Физика. Химия. — 2010. — N 1. — P. 76–85.
113. Simchi A., Pohl H. Effects of laser sintering processing parameters on the microstructure and densification of iron powder // Mater. Sci. Eng. A. — 2003. — V. 359. — N 1–2. — P. 119–128.
114. Kolosov S., Vansteenkiste G., Boudeau N., Gelin J. C., Boillat E. Homogeneity aspects in selective laser sintering // J. Mater. Process. Technol. — 2006. — V. 177. — N 1–3. — P. 348–351.
115. Dong L., Makradi A., Ahzi S., Remond Y. Three-dimensional transient finite element analysis of the selective laser sintering process // J. Mater. Process. Tech. — 2009. — V. 209. — P. 700–706.
116. Gao Y., Xing J., Zhang J., Luo N., Zheng H. Research on measurement method of selective laser sintering transient temperature // Optik. — 2008. — V. 119. — P. 618–623.
117. Khairallah S. A., Anderson A. Mesoscopic simulation model of selective laser melting of stainless steel powder // J. Mater. Process. Tech. — 2014. — V. 214. — P. 2627–2636.
118. Khairallah S. A., Anderson A. T., Rubenchik A., King W. E. Laser powder-bed fusion additive manufacturing: Physics of complex melt flow and formation mechanisms of pores, spatter, and denudation zones // Acta Mater. — 2016. — V. 108. — P. 36–45.
119. Ивенсен В. А. Кинетика уплотнения металлических порошков при спекании. — М.: Металлургия, 1971. — 265 с.
120. Скороход В. В. Реологические основы теории спекания. — Киев: Наукова думка, 1972. — 152 с.

121. German R. M. Liquid Phase Sintering. — Plenum Press, NY, 1985. — 236 p.
122. Dong L., Makradi A., Ahzi S., Remond Y. Three-dimensional transient finite element analysis of the selective laser sintering process // J. Mater. Process. Tech. — 2009. — V. 209. — P. 700–706.
123. Kruth J.-P., Levy G., Klocke F., Childs T. H. C. Consolidation phenomena in laser and powder-bed based layered manufacturing // Annals of the CIRP. — 2007. — V. 56. — N 2. — P. 730–759.
124. Шейдеггер А. Э. Физика течения жидкостей через пористые среды. — М.-Ижевск: ИКИ, НИЦ РХД, 2008. — 254 с.
125. King W. E., Anderson A. T., Ferencz R. M., Hodge N. E., Kamath C., Khairallah S. A., Rubenchik A. M. Laser powder bed fusion additive manufacturing of metals; physics, computational, and materials challenges // Appl. Phys. Rev. — 2015. — V. 2. — N 4. — P. 041304.
126. Григорьянц А. Г., Шиганов И. Н., Мисюров А. И. Технологические процессы лазерной обработки. — М.: Изд-во Баумана, 2006. — 664 с.
127. Gibson I., Rosen D., Stucker B. Additive Manufacturing Technologies. — Springer Science+Business Media, 2015. — 656 p.
128. Иванова А. М., Котова С. П., Куприянов Н. Л., Петров А. Л., Тарасова Е. Ю., Шишковский И. В. Физические основы процесса селективного лазерного спекания металл-полимерных порошковых композиций // Квантовая электроника. — 1998. — Т. 28. — N 5. — С. 433–438.
129. Gusarov A. V., Kruth J.-P. Modelling of radiation transfer in metallic powders at laser treatment // Int. J. Heat Mass Tran. — 2005. — V. 48. — P. 3423–3435.

130. Костенков С. Н., Харанжевский Е. В., **Кривилев М. Д.** Метод определения характеристик взаимодействия лазерного излучения с нанокompозитными порошковыми материалами // Физика металлов и металловедение. — 2012. — Т. 113. — N 1. — С. 98–103.
131. Харанжевский Е. В., **Кривилев М. Д.** Физика лазеров, лазерные технологии и методы математического моделирования лазерного воздействия на вещество. — Издательство Удмуртского университета, 2011. — 187 с.
132. **Кривилев М. Д.**, Анкудинов В. Е., Гордеев Г. А., Решетников С. М., Харанжевский Е. В., Галенко П. К. Метод трехмасштабного моделирования селективного лазерного сплавления композитных металлических порошков при импульсной обработке // Материалы II Международной конференции “Аддитивные технологии: настоящее и будущее”. — 2016. — 15 с.
133. Gordeev G. A., Ankudinov V. E., **Krivilyov M. D.**, Kharanzhevskiy E. V. Optimization of processing parameters in laser sintering of metallic powders // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. — 2012. — V. 27. — P. 012079.
134. Виноградов В. В., Тяжельникова И. Л. О теоретических аспектах формирования макро- и микроструктуры в затвердевающем металлическом слитке // Вестник УдГУ. Сер. Физика. Химия. — 2008. — С. 37–57.
135. Харанжевский Е. В. Высокоскоростное лазерное спекание металлических высокодисперсных порошков и композиционных материалов с металлической матрицей: дис. ... докт. техн. наук: 01.04.07. — УдГУ, 2015. — 379 с.
136. Анкудинов В. Е., **Кривилев М. Д.** Теоретический анализ зависимости теплофизических характеристик от пористости // Вестник УдГУ. Сер. Физика и химия. — 2012. — N 4. — С. 3–8.

137. Анкудинов В. Е. Теплоперенос и формирование кристаллической микроструктуры в металлических порошках на основе Fe и Al при селективном лазерном плавлении: дис. ... канд. физ.-мат. наук: 01.04.07. — УдГУ, 2017. — 157 с.
138. Прилоус Б. И. О введении понятия представительного объемного элемента в теорию структурированного континуума // Интерэкспо Гео-Сибирь. — 2013. — Т. 2. — N 2. — С. 115–120.
139. Зайцев А. В., Лукин А. В., Ташкинов А. А., Трефилов Н. В. Случайные структуры двухфазных композитов: синтез, закономерности, новая оценка характерных размеров представительных объемов // Математическое моделирование систем и процессов. — 2004. — Т. 12. — С. 30–44.
140. Филиппов Л. П. Измерения теплофизических свойств веществ методом периодического нагрева. — М.: Энергоатомиздат, 1984. — 104 с.
141. Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. — М.: Наука, 1972. — 736 с.
142. Carslaw H. S., Jaeger J. C. Conduction of heat in solids. — Oxford, Clarendon Press, 1984. — 510 p.
143. Полянин А. Д., Вязьмин А. В., Журов А. И., Казенин Д. А. Справочник по точным решениям уравнений тепло- и массопереноса. — М.: Факториал, 1998. — 368 с.
144. Cahn J. W. Theory of crystal growth and interface motion in crystalline materials // Acta Metall. Mater. — 1960. — V. 8. — P. 554–562.
145. Boettinger W.J., Warren J.A., Beckermann C., Karma A. Phase-field simulation of solidification // Annu. Rev. Mater. Res. — 2002. — V. 32. — P. 163–194.

146. Лебедев В. Г., Данилов Д. А., Галенко П. К. Об уравнениях модели фазового поля для неизотермической кинетики превращений во многокомпонентной и многофазной системе // Вестник УдГУ. Сер. Физика. Химия. — 2010. — N 1. — С. 26–33.
147. Lebedev V. G., Abramova E. V., Danilov D. A., Galenko P. K. Phase-field modeling of solute trapping: comparative analysis of parabolic and hyperbolic models // IJMR. — 2010. — V. 101. — N 4. — P. 473–479.
148. Karma A. Phase-field formulation for quantitative modeling of alloy solidification // Phys. Rev. Lett. — 2001. — V. 87. — N 11. — P. 115701.
149. Zhang L., Danilova E. V., Steinbach I., Medvedev D., Galenko P. K. Diffuse-interface modeling of solute trapping in rapid solidification: predictions of the hyperbolic phase-field model and parabolic model with finite interface dissipation // Acta Mater. — 2013. — V. 61. — N 11. — P. 4155–4168.
150. Anderson D. M., McFadden G. B., Wheeler A. A. Diffuse-interface methods in fluid mechanics // Annu. Rev. Fluid Mech. — 1998. — V. 30. — P. 139–165.
151. Dehsara M., Fu H., Mesarovic S. Dj., Sekulic D. P., **Krivilyov M.** (In)Compressibility and parameter identification in phase field models for capillary flows // Theoretical and Applied Mechanics, Article in Press, <https://doi.org/10.2298/TAM170803009D>. — 2017.
152. Karma A., Rappel W.-J. Phase-field method for computationally efficient modeling of solidification with arbitrary interface kinetics // Phys. Rev. E. — 1996. — V. 53. — N 4. — P. 3017–3020.
153. Сегерлинд Л. Применение метода конечных элементов. — М.: Мир, 1979. — 392 с.

154. Zienkiewicz O. C., Taylor R. L., Zhu J. Z. Finite element method — its basis and fundamentals. — Elsevier, 2005. — 769 p.
155. Press W. H., Teukolsky S. A., Vetterling W. T., Flannery B. P. Numerical recipes in C. — Cambridge University Press, 1992. — 1018 p.
156. Гордеев Г. А. Моделирование теплофизических процессов в порошках металлов при селективном лазерном плавлении: дис. ... канд. физ.-мат. наук: 05.13.18. — УдГУ, 2017.
157. Решетников С. М., Харанжевский Е. В., **Кривилев М. Д.** Коррозионно-электрохимическое поведение композитных слоев, полученных лазерным спеканием наноразмерных порошков железо—никель // Коррозия: материалы, защита. — 2011. — N 5. — С. 18–24.
158. Харанжевский Е. В., **Кривилев М. Д.**, Решетников С. М., Николаева И. С., Борисова Е. М. Коррозионно-электрохимические свойства карбидовольфрамовых покрытий, полученных короткоимпульсным лазерным облучением. Ч. 1. Получение и аттестация покрытий // Коррозия: материалы, защита. — 2015. — N 8. — С. 42–47.
159. **Krivilyov M.**, Kharanzhevskiy E., Reshetnikov S., Beyers L.J. Thermodynamic assessment of chrome-spinel formation in laser-sintered coatings with Cr₂O₃ particles // Metallurgical and Materials Transactions B. — 2016. — V. 47. — N 3. — P. 1573–1582.
160. Kaviany M. Principles of Heat Transfer in Porous Media. — Springer New York, 1995. — 726 p.
161. Галлямов С. Р. Порог протекания простой кубической решетки в задаче узлов в модели решетки Бете // Вестник УдГУ. Сер. Математика. Механика. Компьютерные науки. — 2008. — N 3. — С. 109–115.

162. Лыков А. В. Явления переноса в капиллярно-пористых телах. — М.: Гос. изд.-во техн.-теор. лит., 1954. — 296 с.
163. Thijs L. Microstructure and texture of metal parts produced by selective laser melting: PhD thesis. — KU Leuven — Faculty of Engineering Science, 2014. — 254 p.
164. Prashanth K. G., Debalina B., Wang Z., Gostin P. F., Gebert A., Calin M., Kühn U., Kamaraj M., Scudino S., Eckert J. et al. Tribological and corrosion properties of Al-12Si produced by selective laser melting // J. Mater. Res. — 2014. — V. 29. — N 17. — P. 2044—2054.
165. Chou R., Milligan J., Paliwal M., Brochu M. Additive manufacturing of Al-12Si alloy via pulsed selective laser melting // JOM. — 2015. — V. 67. — N 3. — P. 590–596.
166. Гордеев Г. А., **Кривилев М. Д.**, Анкудинов В. Е., Харанжевский Е. В., Богданов А. А. Компьютерное моделирование селективного лазерного плавления порошка карбонильного железа // Материалы II Международной конференции “Аддитивные технологии: настоящее и будущее”. — 2016. — 15 с.
167. Решетников С. М., Харанжевский Е. В., **Кривилев М. Д.**, Садиоков Э. Е., Гильмутдинов Ф. З. Материал электрода на основе железа для электрохимического получения водорода и способ его изготовления. — Патент РФ на изобретение № 2518466. Дата приоритета: 01.03.2013. Дата регистрации в реестре: 09.04.2014.
168. Решетников С. М., Харанжевский Е. В., **Кривилев М. Д.**, Садиоков Э. Е., Гильмутдинов Ф. З. Катод для электрохимического получения водорода и способ его изготовления. — Патент РФ на изобретение № 2553737. Дата приоритета: 01.03.2013. Дата регистрации в реестре: 22.05.2015.

169. Haranzhevskiy E. V., Danilov D. A., **Krivilyov M. D.**, Galenko P. K. Structure and mechanical properties of structural steel in laser resolidification processing // *Materials Science and Engineering A*. — 2004. — V. 375–377. — P. 502–506.
170. **Кривилев М. Д.**, Данилов Д. А., Харанжевский Е. В., Галенко П. К. Отбор микроструктуры при лазерной перекристаллизации конструкционной стали // *Вестник УдГУ. Сер. Физика*. — 2005. — N 4. — С. 117–128.
171. Решетников С. М., Харанжевский Е. В., **Кривилев М. Д.** Катодное выделение водорода на поверхности нанокompозитных слоев, полученных лазерным спеканием порошков железо-никель // *Химическая физика и мезоскопия*. — 2011. — Т. 13. — N 3. — С. 419–424.
172. Dinsdale A. SGTE data for pure elements // *Calphad*. — 1991. — V. 15. — P. 317–425.
173. Открытая база данных термодинамических данных химических элементов Европейской экспертной группы по термодинамике материалов SGTE. URL: <http://www.sgte.org>. — Дата обращения: 13.05.2012.
174. Kharanzhevskiy E., Ipatov A., Nikolaeva I., Zakirova R. Short-pulse laser sintering of multilayer hard metal coatings: structure and wear behavior // *Lasers in Manufacturing and Materials Processing*. — 2015. — Т. 2. — С. 91–102.
175. Kharanzhevskiy E., Reshetnikov S. Chromium oxide dissolution in steels via short pulse laser processing // *Appl. Phys. A*. — 2014. — V. 115. — P. 1469–1477.
176. Справочник химика. Том 2. Основные свойства неорганических и органических соединений. Под ред. Б.П. Никольского. — Л.: Химия, 1971. — 1168 с.

177. Kho T. S., Swinbourne D. R., Blanpain B., Arnout S., Langberg D. Understanding stainless steel making through computational thermodynamics. Part 1: Electric arc furnace melting // *Miner. Process Extr. M.* — 2010. — V. 119. — N 1. — P. 1–8.
178. Galenko P. K., **Krivilyov M. D.**, Buzilov S. V. Bifurcations in a sidebranch surface of a free-growing dendrite // *Physical Review E.* — 1997. — V. 55. — N 1. — P. 611–619.
179. Herlach D. M., Cochrane R. F., Egry I., Fecht H. J., Greer A. L. Containerless processing in the study of metallic melts and their solidification // *Int. Mater. Rev.* — 1993. — V. 38. — N 6. — P. 273–347.
180. Gao J., Volkmann T., Reutzel S., Herlach D. Characterization of the microstructure of gas-atomized Nd-Fe-B alloy particles of non-peritectic chemical compositions // *J. Alloy Compd.* — 2005. — V. 388. — N 2. — P. 235–240.
181. Volkmann T., Loeser W., Herlach D. M. Nucleation and phase selection in undercooled Fe-Cr-Ni melts: Part 1. Theoretical analysis of nucleation behavior // *Metall. Mater. Trans. A.* — 1997. — V. 28. — N 2. — P. 453–460.
182. Volkmann T., Loeser W., Herlach D. M. Nucleation and phase selection in undercooled Fe-Cr-Ni melts: Part 2. Containerless solidification experiments // *Metall. Mater. Trans. A.* — 1997. — V. 28. — N 2. — P. 461–469.
183. Perepezko J. H. Nucleation controlled phase selection during solidification // *Mater. Sci. Eng. A.* — 2005. — V. 413–414. — P. 389–397.

184. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика / Из сер. "Теоретическая физика" под ред. Ландау Л. Д. — М.: Наука, 1976. — Т. 5. — 584 с.
185. Turnbull D. Phase Changes // In: Solid State Physics: Advances in Research and Applications. — 1956. — P. 226–306.
186. Spaepen F., Meyer R. B. The surface tension in a structural model for the solid-liquid interface // Scripta Metall. Mater. — 1976. — V. 10. — P. 37–43.
187. Greer A. L., Quedstedt T. E. Heterogeneous grain initiation in solidification // Philos. Mag. — 2006. — V. 86. — N 24.
188. Qian M. Heterogeneous nucleation on potent spherical substrates during solidification // Acta Mater. — 2007. — V. 55. — P. 943–953.
189. Колмогоров А. Н. К статистической теории кристаллизации металлов // Изв. АН СССР. Сер. Матем. — 1937. — Т. 1. — N 3. — С. 355–359.
190. Johnson W. A., Mehl R. F. Reaction kinetics in processes of nucleation and growth // Trans. Am. Inst. Min. Engrs. — 1939. — V. 135. — P. 416–442.
191. Avrami M. Kinetics of phase change // J. Chem. Phys. — 1939. — V. 7. — P. 103.
192. Aaron H. B., Fainstein D., Kotler G. R. Diffusion-limited phase transformation: a comparison and critical evaluation of the mathematical approximations // J. Appl. Phys. — 1970. — V. 41. — N 11. — P. 4404–4410.
193. Nastac L., Stefanescu D. M. An analytical model for solute redistribution during solidification of planar, columnar, or equiaxed morphology // Metal. Mater. Trans. A. — 1993. — V. 24A. — P. 2107–2118.

194. Nastac L. Numerical modeling of solidification morphologies and segregation patterns in cast dendritic alloys // *Acta Mater.* — 1999. — V. 47. — N 17. — P. 4253–4262.
195. Jacot A., Rappaz M. A pseudo-front tracking technique for the modelling of solidification microstructures in multi-component alloys // *Acta Mater.* — 2002. — V. 50. — P. 1909–1926.
196. Hyers R. W. Fluid flow effects in levitated droplets // *Meas. Sci. Technol.* — 2005. — V. 16. — P. 394–401.
197. Fransaer J., Wagner A. V., Spaepen F. Solidification of Ga-Mg-Zn in a gas-filled drop tube: experiments and modeling // *J. Appl. Phys.* — 2000. — V. 87. — N 4. — P. 1801–1818.
198. Tournet D., Gandin Ch.-A., Volkman T., Herlach D. M. Multiple non-equilibrium phase transformations: Modeling versus electro-magnetic levitation experiment // *Acta Mater.* — 2011. — V. 59. — P. 4665–4677.
199. Loser W., Hermann R., Woodcock T. G., Fransaer J., **Krivilyov M.**, Granasy L., Pusztal T., Toth G., Herlach D. M., Holland-Moritz D. et al. Nucleation and Phase Selection in Undercooled Melts: Magnetic Alloys of Industrial Relevance (MAGNEPHAS) // *Journal of the Japan Society of Microgravity Application.* — 2008. — V. 25. — N 3. — P. 495–500.
200. Скрипов В. П., Коверда В. П. Спонтанная кристаллизация переохлажденных жидкостей: зарождение кристаллов в жидкостях и аморфных твердых телах. — М.: Наука, 1984. — 232 с.
201. Schenk T., Holland-Moritz D., Herlach D. M. Observation of magnetically induced crystallization of undercooled Co-Pd alloys // *Europhys. Lett.* — 2000. — V. 50. — N 3. — P. 402–408.

202. **Кривилев М. Д.**, Галенко П. К. Программный комплекс для моделирования кристаллического структурообразования в переохлажденных бинарных сплавах. — Удмуртский университет, 1999. — 59 с.
203. **Krivilyov M. D.**, Galenko P. K. Effect of stochastic noise on dendritic structure in solidifying alloys // Глава в книге: *Fractals, Applied Synergetics and Structure Design*. Ed. V. S. Ivanova, V. U. Novikov, A. A. Oksogoev. — Nova Science Publishers, 2005. — P. 201–210.
204. Galenko P. K., **Krivilyov M. D.** Model for isothermal pattern formation of growing crystals in undercooled binary alloys // *Modelling and Simulation in Material Science and Engineering*. — 2000. — V. 8. — P. 67–79.
205. **Кривилев М. Д.**, Галенко П. К. Моделирование перехода к бездиффузионному затвердеванию при высокоскоростной кристаллизации бинарных сплавов // *Вестник УдГУ. Сер. Физика*. — 2008. — N 1. — С. 129–140.
206. Galenko P., Sobolev S. Local nonequilibrium effect on undercooling in rapid solidification of alloys // *Phys. Rev. E*. — 1997. — V. 55. — N 1. — P. 343–352.
207. Rider W. J., Kothe D. B. Reconstructing volume tracking // *J. Comp. Physics*. — 1998. — V. 141. — N 2. — P. 112–152.
208. Cahn J. W. Free energy of a nonuniform system // *J. Chem. Phys.* — 1959. — V. 31. — P. 688–699.
209. **Кривилев М. Д.**, Ломаев С. Л., Афлятунова Д. Д. Программа для ЭВМ “Моделирование теплофизических процессов при безконтейнерной кристаллизации металлических расплавов”. — Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № RU 2017662176. Официальный бюллетень “Программы

для ЭВМ. Базы данных. Топологии интегральных микросхем”. — ФИПС. — № 11-2017.

210. Buschow K. H. New developments in hard magnetic materials // Rep. Prog. Phys. — 1991. — V. 54. — N 9. — P. 1123–1213.
211. Schneider G., Henig E. T., Petzow G., Stadelmaier H. H. Phase relations in the system Fe-Nd-B // Zeitschrift Fur Metallkunde. — 1986. — V. 77. — N 11. — P. 755–761.
212. Gao J., Volkmann T., Herlach D. M. Metastable solidification of NdFeB by drop tube processing // J. Mater. Res. — 2001. — V. 16. — P. 2562–2567.
213. Gao J., Volkmann T., Roth S., Löser W., Herlach D. M. Phase formation in undercooled NdFeB alloy droplets // J. Magn. Magn. Mater. — 2001. — V. 234. — P. 313–319.
214. Gao J., Volkmann T., Herlach D. M. Undercooling-dependent solidification behavior of levitated $\text{Nd}_{14}\text{Fe}_{79}\text{B}_7$ alloy droplets // Acta Mater. — 2002. — V. 50. — P. 3003–3012.
215. Strohmenger J., Volkmann T., Gao J., Herlach D. M. The formation of a metastable peritectic phase in Nd-Fe-B alloys investigated by in situ X-ray diffraction during solidification // Mater. Sci. Eng. A. — 2005. — V. 413–414. — P. 263–266.
216. Volkmann T., Gao J., Strohmenger J., Herlach D. M. Direct crystallization of the peritectic $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}_1$ phase by undercooling of the melt // Mater. Sci. Eng. A. — 2004. — V. 375–377. — P. 1153–1156.
217. Volkmann T., Strohmenger J., Herlach D. M. Investigation of phase selection in undercooled melts of Nd-Fe-B alloys using synchrotron radiation // In: Phase Transformations in Multicomponent melts. Ed. D. M. Herlach. — Wiley-VCH, 2008. — P. 227–244.

218. Hillert M. A solid-solution model for inhomogeneous systems // *Acta Metall.* — 1961. — V. 9. — P. 525–535.
219. Cahn J. W. Phase separation by spinodal decomposition in isotropic systems // *J. Chem. Phys.* — 1965. — V. 42. — P. 93–99.
220. Скрипов В. П., Скрипов А. В. Спинодальный распад (фазовый переход с участием неустойчивых состояний) // *УФН.* — 1979. — V. 128. — N 6. — P. 193–231.
221. Хачатурян А. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов. — М.: Наука, 1974. — 384 с.
222. Устиновщиков Ю. И. Выделение второй фазы в твердых растворах. — М.: Наука, 1988. — 172 с.
223. Binder K., Fratzl P. Spinodal Decomposition // In: *Phase transformations in materials.* — Weinheim: Wiley, 2001. — P. 409–480.
224. Miller M. K., Hyde J. M., Hetherington M.G., Cerezo A., Smith G. D. W., Elliott C. M. Spinodal decomposition in Fe-Cr alloys: experimental study at the atomic level and comparison with computer models. Part I. Introduction and methodology // *Acta Metall. Mater.* — 1995. — V. 43. — N 9. — P. 3385–3401.
225. Cao C. D., Görler G. P., Herlach D. M., Wei B. Liquid-liquid phase separation in undercooled Co-Cu alloys // *Mater. Sci. Eng. A.* — 2002. — V. 325. — P. 503–510.
226. Davidoff E., Galenko P. K., Herlach D. M., Kolbe M., Wanderka N. Spinodally decomposed patterns in rapidly quenched Co-Cu melts // *Acta Mater.* — 2013. — V. 61. — N 4. — P. 1078–1092.
227. Langer J. S., Bar-on M., Miller H. D. New computational method in the theory of spinodal decomposition // *Phys. Rev. A.* — 1975. — V. 11. — N 4. — P. 1417–1429.

228. **Krivilyov M. D.**, Galenko P. K., Sekulic D. P. Modelling of Al-Si alpha-phase crystal pattern formation during aluminium brazing // In: *Brazing, High Temperature Brazing and Diffusion Welding*. Ed. D. Von Hofe, E. Lugscheider. — DVS, 2004. — P. 126–129.
229. Jacqmin D. Contact-line dynamics of a diffuse fluid interface // *Journal of fluid mechanics*. — 2000. — V. 402. — P. 57–88.
230. Saiz E., Tomsia A. P., Cannon R. M. Ridging effects on wetting and spreading liquids on solids // *Acta Mater.* — 1998. — V. 46. — N 7. — P. 2349–2361.
231. **Кривилев М. Д.**, Галенко П. К. Программа для ЭВМ “Компьютерное моделирование технологии пайки твердым припоем”. — Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № RU 2017662403. Официальный бюллетень “Программы для ЭВМ. Базы данных. Топологии интегральных микросхем”. — ФИПС. — № 11–2017.
232. Диаграммы состояния двойных металлических систем. Под ред. Н. П. Лякишева. — М.: Машиностроение, 1996. — Т. 2. — 1023 с.
233. *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. Ed. Lide D. R. — CRC Press, London, 2008. — 2620 p.
234. Touloukian Y. S., Saxena S. C., Hestermans P. *Thermophysical properties of matter*. — Plenum, New York, 1975. — V. 11. — 776 p.
235. *Aluminum: properties and physical metallurgy*. — American Society for Metals, 1984. — 397 p.
236. Ligenza J. R., Bernstein R. B. The rate of rise of liquids in fine vertical capillaries // *J. Am. Chem. Soc.* — 1951. — V. 73. — N 10. — P. 4636–4638.
237. De Gennes P.-G., Brochard-Wyart F., Quere D. *Capillarity and wetting phenomena*. — Springer, 2003. — 291 p.

238. Fu H., Dong F., Sekulic D. P., Mesarovic S. Dj., **Krivilyov M.** Surface tension driven kinetics of the triple line of a liquid metal free surface // In: Proceedings of ASME 2013 International Mechanical Engineering Congress and Exposition. V. 7A. Paper No. IMECE2013-62945. — 2013. — P. 8 p.
239. Desai P. D. Thermodynamic Properties of Iron and Silicon // Journal of Physical and Chemical Reference Data. — 1986. — V. 15. — N 3. — P. 967–983.
240. Зиновьев В. Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. — М.: Металлургия, 1989. — 384 с.
241. Chemistry WEBbook Database. URL://www.nist.gov. — National Institute of Standards and Technology, USA, Дата обращения: 13.04.2016.
242. Kharanzhevskiy E. V., Kostenkov S. N. Modeling of laser radiation transport in powder beds with high-dispersive metal particles // J. Alloy Compd. — 2014. — V. 45. — N 21. — P. 246–249.
243. Concept Laser. Material data. — Hoffman innovation group, 2016. — 2 p.
244. Марочник нержавеющей сталей. — Outokumpu, исследовательский центр Авеста, 2010. — 12 с.
245. Tang N.-K., Chen J.-K., Hung H.-Y. The Effect of Silicon on the Thermal Conductivity of Al–Si Alloys // In: Materials Science & Technology 2013, Symposium Light Metals for Transportation. — 2013. — V. 1. — P. 3.
246. Nikanorov S. P., Volkov M. P., Gurin V. N., Burenkov Yu. A., Derkachenko L. I., Kardashev B. K., Regel L. L., Wilcox W. R. Structural and mechanical properties of Al–Si alloys obtained by fast

- cooling of a levitated melt // *Mater. Sci. Eng. A.* — 2005. — V. 390. — P. 63–69.
247. Костенков С. Н., Харанжевский Е. В. Рассеяние лазерного излучения на полидисперсных сферических частицах // *Вестник УдГУ. Сер. Физика. Химия.* — 2012. — Т. 1. — С. 31–38.
248. Костенков С. Н., Харанжевский Е. В. Рассеяние и поглощение лазерного излучения при его прохождении через ультрадисперсные порошковые среды // *Вестник УдГУ. Сер. Физика. Химия.* — 2011. — Т. 1. — С. 13–23.
249. Yap C. Y., Chua C. K., Dong Z. L., Liu Z. H., Zhang D. Q., Loh L. E., Sing S. L. Review of selective laser melting: Materials and applications // *Appl. Phys. Rev.* — 2015. — V. 2. — N 4. — P. 041101.
250. Shutov I. V., Gordeev G. A., Kharanzhevskiy E. V., **Krivilyov M. D.** Analysis of morphology and residual porosity in selective laser melting of Fe powders using single track experiments // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering.* — 2017. — V. 192. — N 012023.
251. Rodriguez J. E., Matson D. M. Thermodynamic modeling of the solidification path of levitated Fe–Co alloys // *Calphad.* — 2015. — V. 49. — P. 87–100.
252. Lee J., Matson D. M., Binder S., Kolbe M., Herlach D., Hyers R. W. Magnetohydrodynamic modeling and experimental validation of convection inside electromagnetically levitated Co–Cu droplets // *Metall. Mater. Trans. B.* — 2014. — V. 45. — N 3. — P. 1018–1023.
253. Brillo J., Egry I., Matsushita T. Density and excess volumes of liquid copper, cobalt, iron and their binary and ternary alloys // *Int. J. Mater. Res.* — 2006. — V. 97. — P. 11.

- 254. Schlick M., Brillo J., Egry I. Thermophysical properties of liquid Co-Cu-Ni alloys // *Int. J. Cast Metal. Res.* — 2009. — V. 22. — P. 82.
- 255. Kolbe M., Cao C. D., Galenko P. K., Fransaer J., Herlach D. M. Dynamics of solidification and microstructure evolution in undercooled Co-Cu alloys with metastable miscability gap // *Proc. of the EPD Congress 2002 and Fundamentals of Advanced Materials for Energy Conversion*. Ed. P. R. Taylor, et al. — 2002. — P. 539–553.
- 256. Rappaz M., Boettinger W. J. On dendritic solidification of multicomponent alloys with unequal liquid diffusion coefficients // *Acta Mater.* — 1999. — V. 47. — N 11. — P. 3205–3219.
- 257. *Binary Alloy Phase Diagrams*, 2nd edition. — ASM International, USA, 1996. — 3589 p.
- 258. Siquieri R., Emmerich H. Phase-field investigation of the nucleation kinetics and of the influence of convection on growth in peritectic systems // *Philos. Mag. Lett.* — 2007. — V. 87. — N 11. — P. 829–837.
- 259. Atkinson H. V., Shi G. Characterization of inclusions in clean steels: a review including the statistics of extremes methods // *Prog. Mater. Sci.* — 2003. — V. 48. — P. 457–520.
- 260. Loginova I., Amberg G., Agren J. Phase-field simulations of non-isothermal binary alloy solidification // *Acta. Mater.* — 2001. — T. 49. — C. 573–581.

Приложения

А. Результаты интеллектуальной деятельности

Свидетельства о регистрации программы для ЭВМ:

1. **Кривилев М.Д.**, Данилов Д.А., Лебедев В.Г., Галенко П.К. Программный комплекс “Компьютерная оптимизация процессов лазерной обработки порошков”. Свидетельство № 2010614748 о государственной регистрации программы для ЭВМ. Зарегистрирована в Государственном реестре 21.07.2010.
2. **Кривилев М.Д.**, Ломаев С.Л., Афлятунова Д.Д. Моделирование теплофизических процессов при бесконтейнерной кристаллизации металлических расплавов. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № RU 2017662176. Опубликовано ФИПС 01.11.2017.
3. **Кривилев М.Д.**, Галенко П.К. Компьютерное моделирование технологии пайки твердым припоем. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № RU 2017662403. Опубликовано ФИПС 07.11.2017.

Патенты РФ на изобретение, при получении которых использованы разработанные в диссертации программы для ЭВМ:

1. Харанжевский Е.В., Ипатов А.Г., Галенко П.К., **Кривилев М.Д.**, Данилов Д.А. Способ изготовления покрытия на изделии методом послойного лазерного синтеза. Патент РФ на изобретение № 2443506. Приоритет изобретения 05.04.2010. Дата регистрации 27.02.2012.
2. Решетников С.М., Харанжевский Е.В., **Кривилев М.Д.**, Садионов Э.Е., Гильмутдинов Ф.З. Материал электрода на основе железа

для электрохимического получения водорода и способ его изготовления. Патент РФ на изобретение № 2518466. Приоритет изобретения 01.03.2013. Дата регистрации 09.04.2014.

3. Решетников С.М., Харанжевский Е.В., **Кривилев М.Д.**, Садионов Э.Е., Гильмутдинов Ф.З., Писарева Т.А., Анкудинов В.Е. Способ обработки поверхности стали. Патент РФ на изобретение № 2514233. Приоритет изобретения 10.07.2012. Дата регистрации 27.02.2014.
4. Решетников С.М., Харанжевский Е.В., **Кривилев М.Д.**, Садионов Э.Е., Гильмутдинов Ф.З., Писарева Т.А., Гордеев Г.А. Способ повышения коррозионной стойкости нелегированной стали. Патент РФ на изобретение № 2513670. Приоритет изобретения 10.07.2012. Дата регистрации 19.02.2014.
5. Решетников С.М., Харанжевский Е.В., **Кривилев М.Д.**, Садионов Э.Е., Гильмутдинов Ф.З. Катод для электрохимического получения водорода и способ его изготовления. Патент РФ на изобретение № 2553737. Приоритет изобретения 01.03.2013. Дата регистрации 22.05.2015.
6. Решетников С.М., Харанжевский Е.В., **Кривилев М.Д.**, Садионов Э.Е., Гильмутдинов Ф.З. Способ нанесения окисно-металлических покрытий на поверхность нелегированной стали. Патент РФ на изобретение № 2588962. Приоритет изобретения 17.09.2014. Дата регистрации 07.06.2016.
7. Решетников С.М., Башкова И.О., Харанжевский Е.В., Гильмутдинов Ф.З., Кривилев М.Д. Способ обработки поверхности пластины из циркониевого сплава. Патент РФ на изобретение № RU 2633688 С1. Дата приоритета 21.09.2016. Дата публикации 16.10.2017, бюллетень № 29.



Рис. А.1. Свидетельства № 2010614748, № RU 2017662176, № RU 2017662403 о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Б. Теплофизические свойства порошков и режимы лазерной обработки

Таблица Б.1

Теплофизические свойства порошка железа

параметр	обоз.	значение	источн.
удельная теплоемкость, Дж/(кг К)	C_p	450,16	[135, 239, 240]
теплота плавления, Дж/кг	L	$2,97 \times 10^5$	[239, 240]
теплопроводность, Вт/(м К)	k	80,30	[233, 241]
плотность, кг/м ³	ρ	7874	[233, 241]
температура плавления, К	T_m	1808	[232, 239]
температуропроводность, м ² /с	α	$2,26 \times 10^{-5}$	
температура кипения, К	$T_{\text{кип.}}$	3023	[233, 241]
теплота испарения, Дж/моль	$Q_{\text{кип.}}$	$354,3 \times 10^3$	[233]
коэффициент затухания ЛИ в порошке, мкм ⁻¹	$\gamma_{\text{погл.}}$	0,2	[242]
начальная пористость, –	ε_0	0,62	[135]

Таблица Б.2

Теплофизические свойства порошка нержавеющей стали марки
 03X17H14M2 (AISI 316L, CL20ES) с химическим составом
 Fe, < 0,03 вес.% С, 16 ÷ 18 вес.% Cr, 10 ÷ 14 вес.% Ni,
 2 ÷ 3 вес.% Mo [243, 244]

параметр	обоз.	значение	источн.
удельная теплоемкость, Дж/(кг К)	C_p	500	[243, 244]
теплота плавления, Дж/кг	L	$2,85 \times 10^5$	[233, 241]
теплопроводность, Вт/(м К)	k	15	[243, 244]
плотность, кг/м ³	ρ	8000	[163, 233, 244]
температура плавления, К	T_m	1713	[241, 243, 244]
температуропроводность, м ² /с	α	$3,75 \times 10^{-6}$	
температура кипения, К	$T_{\text{кип.}}$	3007	[233, 241]
теплота испарения, Дж/моль	$Q_{\text{кип.}}$	$354,3 \times 10^3$	как для Fe
начальная пористость, –	ε_0	0,6	[163]

Таблица Б.3

Теплофизические свойства порошка алюминиевого сплава Al-12Si с
 химическим составом Al, 10,5 ÷ 13,5 вес.% Si, < 0,55 вес.% Fe,
 < 0,35 вес.% Mn [243]

параметр	обоз.	значение	источн.
удельная теплоемкость, Дж/(К кг)	C_p	947,00	[97, 233]
теплота плавления, Дж/кг	L	$3,6 \cdot 10^5$	
теплопроводность, Вт/(м К)	k	155	[243, 245]
плотность, кг/м ³	ρ	2640	[246]
температура плавления Al, К	T_m	933	[233]
температуропроводность, м ² /с	α	4×10^{-5}	
угол наклона линии ликвидуса, К/ат.%	m_e	–6,6	[97, 233]
температура кипения, К	$T_{\text{кип.}}$	2790	[233], как для Al
теплота испарения, Дж/моль	$Q_{\text{кип.}}$	$284,3 \times 10^3$	[233], как для Al
начальная пористость, –	ε_0	0,55	[163]

Таблица Б.4

Теплофизические свойства порошка тантала

параметр	обоз.	значение	источн.
удельная теплоемкость при 300 К, Дж/(К кг)	C_p	139,88	[241]
удельная теплоемкость при 3200 К, Дж/(К кг)	C_p	237,26	[241]
теплота плавления, Дж/кг	L	$1,93 \times 10^5$	[241]
теплопроводность при 300 К, Вт/(м К)	k	57	[233]
плотность при 300 К, кг/м ³	ρ	16650	[233]
температура плавления, К	T_m	3290	[233]
температуропроводность при 300 К, м ² /с	a	$2,43 \times 10^{-5}$	
температура кипения, К	T_{boil}	5731	[233]
молярный объем, м ³ /моль	V_m	$1,1 \times 10^{-5}$	[233]

Таблица Б.5

Теплофизические параметры композитного порошка Fe–Ni

наименование параметра	обозн.	велич.
удельная теплоемкость, Дж/(моль К)	C_p	25,19
скрытая теплота кристаллизации, Дж/моль	L	$1,66 \times 10^4$
теплопроводность металлической фазы, Вт/(м К)	k	80,83
плотность металлической фазы, кг/м ³	ρ	7925
температура кристаллизации основного элемента, К	T_m	1811
концентрация никеля, вес.%	c_0	3–25
тангенс угла наклона равновесной линии ликвидуса, К/вес.%	m_e	–2,4
равновесный коэффициент распределения, –	k_e	0,9
адиабатическая температура, К	T_Q	660,81
температуропроводность, м ² /с	a	$2,27 \times 10^{-5}$
температура кипения, К	$T_{\text{кип.}}$	3023
начальная пористость, –	ε_0	0,62
температура матрицы, К	$T_{\text{матр.}}$	293
поверхностная излучательность, –	ϵ	0,4
эффективный коэффициент теплообмена, Вт/(м ² К)	$h_{\text{эфф.}}$	50
коэффициент теплообмена при кипении, Вт/(м ² К)	$h_{\text{кип.}}$	5×10^5
коэффициент поглощения лазерного излучения при кипении, –	κ	0,01
коэффициент поглощения светового излучения, 1/м	η	$1,1 \times 10^5$
объемная доля жидкой фазы при частичном плавлении, –	$S_{\text{плав.}}$	0,4

Таблица Б.6

Теплофизические свойства инертных газов

параметр	обоз.	знач.	источ.
воздух			
удельная теплоемкость, Дж/(К кг)	$C_{p, \text{возд.}}$	1005	[233, 241]
плотность, кг/м ³	$\rho_{\text{возд.}}$	1,29	[233, 241]
коэффициент теплопроводности, Вт/(м К)	$k_{\text{возд.}}$	$2,42 \times 10^{-2}$	[233, 241]
аргон			
удельная теплоемкость, Дж/(К кг)	$C_{p, \text{Ar}}$	519	[233, 241]
плотность, кг/м ³	ρ_{Ar}	1,633	[233, 241]
коэффициент теплопроводности, Вт/(м К)	k_{Ar}	$1,78 \times 10^{-2}$	[233, 241]

Таблица Б.7

Технологические параметры обработки импульсным лазером
твёрдотельным иттербиевым инфракрасным ОКВ BULAT LRS-300

параметр	обоз.	знач.	источ.
длина волны лазера, нм	$\lambda_{\text{ли}}$	1064	[135, 247]
мощность лазера, Вт	$P_{\text{ли}}$	25 – 100	[135]
частота генерации лазерного излучения, Гц	$\nu_{\text{имп.}}$	30–100	
эффективный радиус пятна лазера, мкм	$R_{\text{луча}}$	200–400	[247, 248]
скорость движения луча, мм/с	$V_{\text{луча}}$	50–150	[135]
продолжительность импульса, мс	$\tau_{\text{имп.}}$	5–800	[247, 248]
излучательность, –	σ	0,40	[125, 135, 249]
эффективный коэффициент теплоотдачи на поверхности при вынужденной конвекции, Вт/(м ² К)	$h_{\text{конв.}}$	50	[125, 135, 249]
эффективный коэффициент теплоотдачи на поверхности при кипении, Вт/(м ² К)	$h_{\text{кип.}}$	5×10^5	[125, 135, 249]
коэффициент поглощения светового потока, –	$\sigma_{\text{погл.}}$	0,3 – 0,8	[135, 247]
толщина порошкового слоя, мкм	h_0	100 – 150	[135, 250]

В. Теплофизические свойства металлических расплавов, изученных методами бесконтейнерной кристаллизации

Таблица В.1

Теплофизические параметры для ϕ ($\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}_1$), χ ($\text{Nd}_2\text{Fe}_{17}\text{B}_x$, $x \sim 1$)
и γ -Fe фаз сплава $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}_1$

параметр	ϕ	χ	γ -Fe
температура T_L ликвидуса, К	–	–	1527
перитектическая температура T_P , К	1465	1415	–
теплота плавления L , Дж/м ³	$2,35 \times 10^9$	$2,12 \times 10^9$	$1,56 \times 10^9$
поверхностная энергия σ_0 , Дж/м ²	0,209	0,104	0,352
коэффициент распределения k_e , –	1	1	0,002
кинетичес. коэффициент μ , м/(с К)	0,01	0,05	0,5
контактный угол θ , рад.	$\pi/9$	$\pi/9$	$\pi/9$

Таблица В.2

Теплофизические параметры [251, 252] и параметры фазового поля для моделирования $\text{Fe}_{50}\text{Co}_{50}$

параметр	расплав	стаб. ГЦК	метас. ОЦК
плотность ρ , кг/м ³	7423,5		
наклон m_e линии ликвидуса, К/ат.%	1,92		
молярный объем V_m , м ³ /моль	$7,73 \times 10^{-6}$		
абсолютная вязкость μ , мПа с	5,94		
электрич. проводимость $\sigma_{\text{эл.}}$, См/м	$7,5 \times 10^5$		
теплопроводность k , Вт/(К м)	38,1		
удельная теплоемкость C_p , Дж/(кг К)	662		
коэффициент черноты ε , –	0,2		
температура T_L ликвидуса, К		1754	1713
теплота L плавления, МДж/м ³		0,78	1,88
поверхностная энергия σ , Дж/м ²		0,154	0,127
структурный фактор α , –		0,85	0,7
коэффициент k_e распределения, –		1,0	0,96

Таблица В.3

Теплофизические параметры и параметры фазового поля для расплава
 $\text{Co}_{50}\text{Cu}_{50}$, переохлажденного на $\Delta T = 200$ К ниже T_L

параметр	обоз.	значение	источ.
температура ликвидуса, К	T_L	1652	[253]
критическая температура, К	$T_{\text{крит.}}$	1547	[225]
плотность, кг/м ³	ρ	7662	[253]
абсолютная вязкость, мПа с	μ	4,7	[254]
кинематическая вязкость, м ² /с	ν	$6,1 \times 10^{-7}$	[253, 254]
коэффициент диффузии, м ² /с	D	10^{-8}	[255]
вторая производная f по концентрации, Дж/м ³	f''_{cc}	-4×10^8	
вторая производная $(\partial^2 f / \partial (\nabla c)^2)_{\nabla c=0}$ по градиенту концентрации, Дж/м	ε_c^2	10^{-8}	
мобильность, м ⁵ /(Дж с)	M	$5,8 \times 10^{-19}$	
высота потенциального барьера при $\Delta T=100$ К, Дж/м ³	f_0	$7,52 \times 10^6$	
скорость диффузии примеси, м/с	V_D	20	
время диффузионной релаксации, с	τ_D	$4,2 \times 10^{-7}$	

Г. Теплофизические свойства систем, исследовавшихся в задачах смачивания

Таблица Г.1

Реологические свойства воды, силиконового масла и припоя
Al – (9÷11) вес.% Si

параметр	вода	масло	Al-Si
плотность, кг/м ³	997	960	2444
поверхностное натяжение, Н/м	0,07197	0,02089	0,849
абсолютная вязкость, мПа с	0,8937	9,6	1,0

Таблица Г.2

Теплофизические свойства сплава Al-6,93 ат.%Si для расчета
микроструктуры

параметр	обоз.	значение	источ.
температура плавления Al,K	T_m	933	[256, 257]
температуропроводность, м ² /с	a	4×10^{-5}	[87]
теплота плавления, Дж/м ³	L	9×10^8	[256]
удельная теплоемкость, Дж/(м ³ K)	C_p	$2,5 \times 10^6$	[256]
наклон линии ликвидуса, к/ат.%	m_e	-6,6	[257]
кинетический коэффициент, м/(с K)	μ	0,14	
поверхностная энергия, Дж/м ²	γ	0,106	[256]
концентрация кремния, ат.%	c_0	5,5 – 8,5	
коэффициент диффузии, м ² /с	D	$5,25 \times 10^{-9}$	
скорость диффузии, м/с	V_D	28	
коэффициент распределения, –	k_e	0,144	[256]
температура адиабатической кристаллизации, K	T_Q	360	

Д. Верификация модели СЛП в экспериментах с одной дорожкой

Для верификации математической модели ВЛП/СЛП сравнивались результаты лабораторного и численного экспериментов. Серия лабораторных экспериментов заключалась в лазерном плавлении порошка карбонильного железа на стальной подложке толщиной 150 мкм при единичном прямолинейном сканировании. Верификация проводилась для различных сочетаний управляющих параметров лазерной обработки. Начальная плотность насыпки порошка железа устанавливалась с использованием метода воронки и составила $\varepsilon = 0,62$. Порошок железа для экспериментов получен химическим способом, характерные размеры частиц составляли 3 – 6 мкм. Применялся твердотельный иттербиевый инфракрасный лазер в составе лазерной установки БУЛАТ АКУ-300М с длиной волны 1064 нм. Эксперимент выполнялся при различных значениях эффективного радиуса лазерного луча: $R_{\text{луча}} = 200, 300$ и 400 мкм. Для каждого значения $R_{\text{луча}}$ варьировались параметры длительности $\tau_{\text{имп.}}$ импульса от 1 до 4,5 мс и энергии $E_{\text{имп.}}$ одного импульса от 0,4 до 4,7 Дж. Погрешность толщины насыпки порошкового слоя принималась равной 10 мкм, что соответствовало толщине фольги в системе подачи и подготовки порошка. Погрешность измерения $E_{\text{имп.}}$ в лабораторном эксперименте составляла 0,1 Дж.

При прямолинейном сканировании формировалась продолговатая зона оплавления. После лазерной обработки с различными режимами обработки и удаления с подложки неиспользованного порошка исследовались структура и форма получившейся дорожки, рис. Д.1. Для каждой серии лабораторных экспериментов с разными значениями $R_{\text{луча}}$ было подготовлено и изучено по 5–7 микрошлифов при их общем количе-

стве 83. В случае, если изучаемый параметр имел несколько значений, рассматривались его максимальная и минимальная величины. Матрицы проведения лабораторного и вычислительного экспериментов совпадали.

Обобщая результаты лабораторного эксперимента, можно качественно разделить все приведенные на рис. Д.1 профили дорожек плавления на три группы:

- Группа № 1, рис. Д.1(а). Наблюдается хорошее сплавление трека с подложкой, выпуклая симметричная форма верхней границы сплавленного трека, структура и цвет поверхности после травления оплавленного порошка и подложки похожи между собой. Для этой группы характерна высокая мощность лазерной обработки. В образцах произошло полное компактирование порошка, локальная пористость после обработки незначительна.
- Группа № 2, рис. Д.1(б). Наблюдается как спекание, так и сплавление порошка с подложкой. Присутствуют крупные и небольшие поры по краям дорожки. Форма верхней границы дорожки имеет симметричную вогнутую форму. Для этой группы характерны высокие значения энергии импульса, но меньшие, чем в группе № 1. В таких образцах присутствует зона оплавления и зона твердофазного спекания. Если мощность лазера недостаточна, остаточная пористость повышается.
- Группа № 3, рис. Д.1(в, г). В третьей группе в сечении дорожки присутствуют крупные или мелкие поры. Наблюдается неоднородная форма верхней границы дорожки, либо она является переходной к выпуклому (как в группе № 1) или вогнутому (как в группе № 2) профилю. Для этой группы профилей характерны меньшие, чем для групп № 1 и № 2, значения средней мощности лазера и энергии импульса. Происходит неполное компактирование порошка, поэтому форма дорожки неровная и несимметричная.

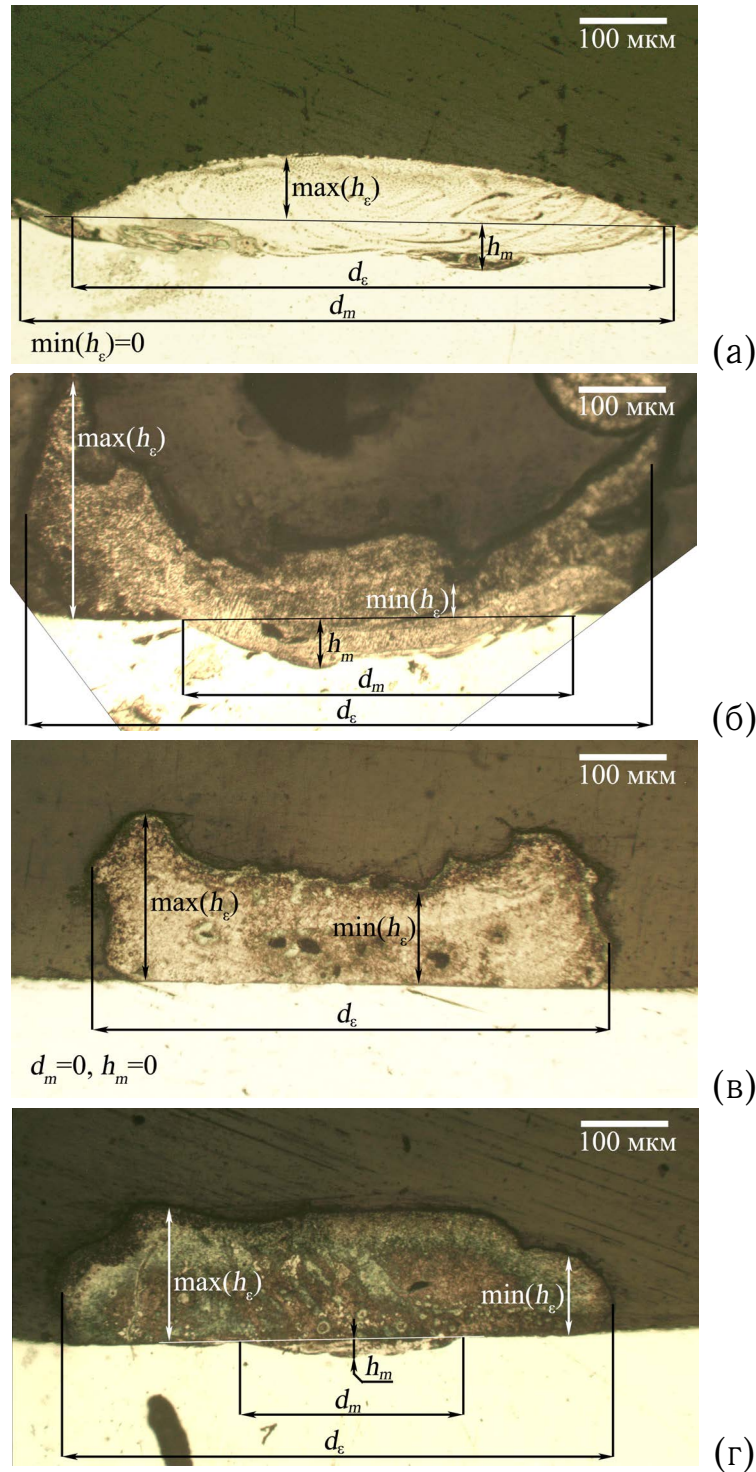


Рис. Д.1. Шлифы поперечного сечения одиночной дорожки в образцах, полученные при следующих параметрах лазерной обработки $E_{\text{имп.}}$, $R_{\text{луча}}$, $\tau_{\text{имп.}}$, $V_{\text{луча}}$: (а) 2, 2 Дж, 200 мкм, 4 мс, 10 мм/с; (б) 1, 1 Дж, 200 мкм, 4 мс, 10 мм/с; (в) 1, 6 Дж, 200 мкм, 4 мс, 10 мм/с; (г) 3, 4 Дж, 400 мкм, 1, 5 мс, 20 мм/с. Шлиф характеризуется: h_m — глубиной проплавления; d_m — шириной (полушириной $r_m = d_m/2$) зоны сплавления порошкового слоя и подложки; h_ϵ и d_ϵ — толщиной и шириной дорожки ($r_\epsilon = d_\epsilon/2$ — полуширина). Частота $\nu_{\text{имп.}}$ ЛИ во всех опытах составляла 50 Гц.

Е. Расширенная модель гетерогенного зарождения кристаллических фаз

Математическое моделирование зародышеобразования, как правило, основывается на использовании классической теории зарождения (КТЗ), которая предсказывает интенсивность $I_{\text{зарожд.}}$ зарождения как функцию поверхностной энергии и переохлаждения. Хотя этот подход применим, в его основе лежит использование гипотезы квазистационарности системы, когда термодинамические параметры изменяются медленно. Для нестационарных условий, например, быстрого охлаждения капель в бесконтейнерных методах, КТЗ дает неправильные результаты [258]. Первое противоречие состоит в детерминированном характере модели, которая предсказывает регистрацию первого события зарождения при достижении критического переохлаждения. Однако эксперименты [200, 201] показывают, что зарождение кристаллической фазы всегда происходит в интервале переохлаждения, если повторять опыт с одной системой при идентичных условиях несколько раз [200]. Таким образом, в КТЗ необходимо внести дополнительное уравнение, которое описывает вероятность спонтанного зарождения. В [197] было предложено использовать случайную переменную пуассоновского типа. В настоящей работе использован аналогичный подход, в котором случайная переменная определяет вероятность $P_{\text{жид.}}(t)$ нахождения капли в жидком состоянии и эта вероятность уменьшается с течением времени t :

$$P_{\text{жид.}}(t) = \frac{(np)^0}{0!} \exp(-np) = \exp(-VI_{\text{зарожд.}}(T, \sigma, \theta)t), \quad (\text{Е.1})$$

где n — число испытаний, p — вероятность положительного исхода, V — объем капли, T — температура, σ — поверхностное натяжение “кристалл–расплав”, θ — контактный угол смачивания ГЦЗ расплавом.

При этом (Е.1) определяет вероятность нулевого числа положительных (капля затвердела) результатов испытаний в n тестах. Распределение $P_{\text{жид.}}(t)$ определяется локальной интенсивностью зарождения, которая зависит от переохлаждения расплава, концентрации и размеров ГЦЗ. Далее генерируется случайная переменная с распределением (Е.1), которая определяет агрегатное (жидкое или двухфазное) состояние капли. Такой подход позволяет корректно описать спонтанное зарождение в соответствии с эмпирической моделью Скрипова [200].

Вторая особенность гетерогенного зарождения связана с тем, что размеры, форма и смачиваемость ГЦЗ оказывают сильное влияние на интенсивность зарождения. В КТЗ эти эффекты сведены к каталитическому фактору $f(\theta)$, определяющему критический размер зародыша. Поскольку эту величину трудно определить экспериментально, контактный угол используется при моделировании как свободный параметр для согласования расчетов с лабораторными данными. Недавно было предложено [187] оценивать критическую энергию Гиббса для стабильного зародыша с учетом размеров ГЦЗ.

В расширенной модели зарождения, предлагаемой в настоящей работе, все вышеуказанные факторы согласованы. Пусть число n_i кластеров, состоящих из i атомов, определяется распределением Гиббса $n_i = n \exp(-\Delta G_i/k_B T)$ [179], где ΔG_i зависит от каталитического фактора $f(\theta)$ и геометрии зародыша на поверхности ГЦЗ. Кластеры с радиусом r больше критического радиуса r^* стабильны и могут стать зародышем. Логично, что только ГЦЗ с размером $r \geq r^*$ могут разместить на поверхности кристаллический зародыш. Интенсивность зарождения полагаем как сумму интенсивностей по гомогенному и гетерогенному механизмам:

$$I = I^{\text{гомог.}} + I^{\text{гетер.}}. \quad (\text{Е.2})$$

Далее интенсивность зарождения дается выражением, где верхний индекс определяет механизм зарождения:

$$I^{\text{тип}} = I_0 \xi^{\text{тип}}(n_{\text{ГЦЗ}}, P(r_{\text{ГЦЗ}})) \exp\left(-\frac{\Delta G^* f^{\text{тип}}(\theta)}{k_B T}\right) [D^{\text{тип}}(P(r_{\text{ГЦЗ}}), r > r^*)], \quad (\text{E.3})$$

$$\text{тип} = \text{гомог. или гетер.}, \quad (\text{E.4})$$

где $I_0 = 10^{41} \text{ м}^{-3} \text{ с}^{-1}$ — кинетический фактор [185], $n_{\text{ГЦЗ}}$ — фактическое число ГЦЗ в единице объема, $P(r_{\text{ГЦЗ}})$ — распределение ГЦЗ как функция радиуса $r_{\text{ГЦЗ}}$, $D(P(r_{\text{ГЦЗ}}), r > r^*)$ — интегральная функция распределения активных ГЦЗ с $r_{\text{ГЦЗ}} > r^*$.

Гомогенное зарождение соответствует параметрам $\xi^{\text{гомог.}} = 1$, $f^{\text{гомог.}}(\theta) = 1$ и $D(P^{\text{гомог.}}(r_{\text{ГЦЗ}}), r > r^*) = 1$. Это означает, что все атомы потенциально могут стать центром зарождения кристаллической фазы. Для гетерогенного зарождения зададим дополнительные уравнения на $\xi^{\text{гетер.}}$, $f^{\text{гетер.}}(\theta)$ и $D(P^{\text{гетер.}}(r_{\text{ГЦЗ}}), r > r^*)$. Коэффициент ξ пропорционален числу $N_{\text{поверх.}}$ атомов на поверхности ГЦЗ, которое выразим через среднюю площадь $\bar{A}_{\text{ГЦЗ}}$ поверхности ГЦЗ и число $n_{\text{ГЦЗ}}$ ГЦЗ в капле:

$$\xi^{\text{het}} = \frac{N_{\text{поверх.ГЦЗ}}}{N_{\text{все атомы}}} = \frac{n_{\text{ГЦЗ}}(t) \bar{A}_{\text{ГЦЗ}}}{V_{\text{капли}}} \left(\frac{V_m}{N_A}\right)^{1/3}, \quad (\text{E.5})$$

где V_m — молярный объем. Из-за окисления расплава в камере остаточным кислородом число $n_{\text{ГЦЗ}}$ ГЦЗ в капле является функцией времени:

$$n_{\text{ГЦЗ}}(t) = c_{\text{ГЦЗ}}^0 V_{\text{капли}} + A_{\text{капли}} \int_0^t J_{\text{ГЦЗ}} dt, \quad (\text{E.6})$$

где $c_{\text{ГЦЗ}}^0$ — начальная концентрация ГЦЗ в расплаве при $t = 0$, $J_{\text{ГЦЗ}}$ — скорость ($\text{м}^{-2} \text{ с}^{-1}$) производства ГЦЗ за единицу времени на единицу площади и $A_{\text{капли}}$ — площадь поверхности капли. Уравнение (E.6) дает число ГЦЗ, которое со временем увеличивается. Каталитический фактор соответствует КТЗ:

$$f(\theta) = \frac{1}{4}(2 - 3 \cos \theta). \quad (\text{E.7})$$

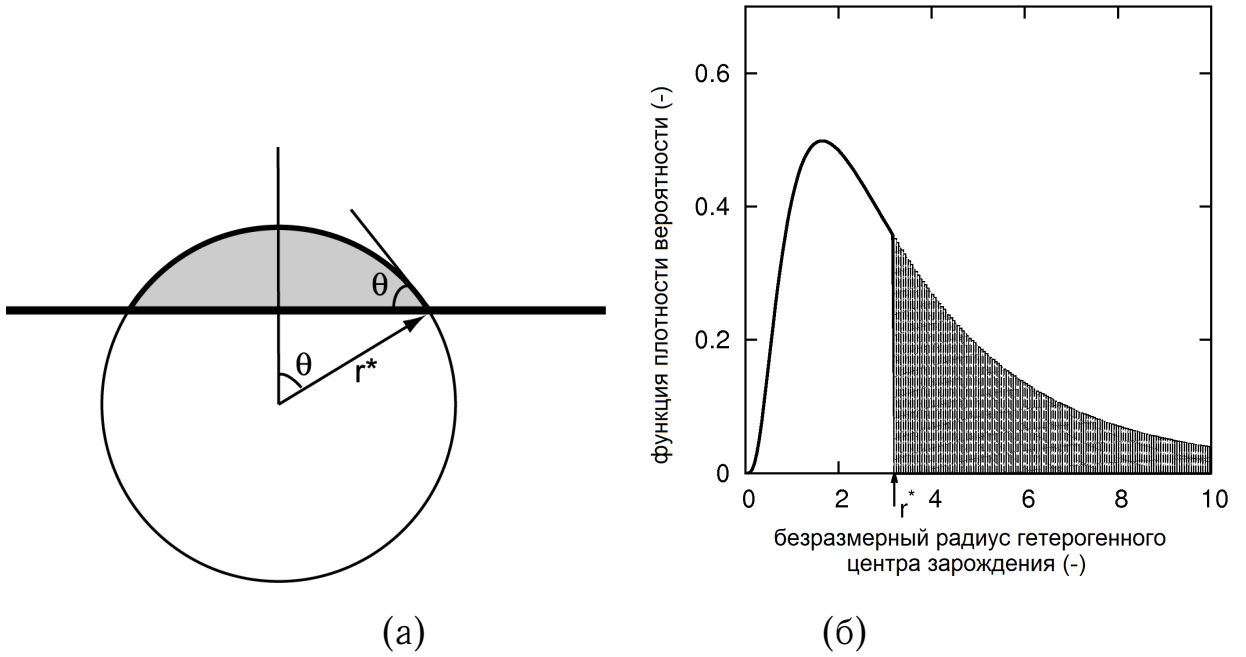


Рис. Е.1. (а) Стабильный зародыш критического радиуса r^* , растущий на плоской поверхности гетерогенного центра зарождения (ГЦЗ) с линейным размером $l \geq 2r^* \sin \theta$. Все ГЦЗ с $l_{\text{ГЦЗ}} < 2r^* \sin \theta$ являются неактивными для зарождения. (б) Логарифмически нормальное распределение $P(r_{\text{ГЦЗ}})$ размеров ГЦЗ, уравнение (Е.13) [259]. Площадь заштрихованной фигуры равна интегральной функции распределения $D(P^{\text{гетер.}}(r_{\text{ГЦЗ}}), r > r^*)$, уравнение (Е.8), показывающей долю активных ГЦЗ.

Геометрическая интерпретация модели приведена на рис. Е.1(а), где ГЦЗ являются неактивными центрами зарождения, если их размер $r_{\text{ГЦЗ}}$ меньше критического радиуса r^* стабильного зародыша. Некоторые авторы рассматривают эффект не только размера, но и формы ГЦЗ [187, 188], которым в настоящей модели пренебрегается. Тогда интегральная функция распределения $D(P^{\text{гетер.}}(r_{\text{ГЦЗ}}), r > r^*)$ активных ГЦЗ определяется выражением:

$$D(P^{\text{гетер.}}(r_{\text{ГЦЗ}}), r > r^*) = \int_{r^* \sin \theta}^{\infty} P(r_{\text{ГЦЗ}}) dr, \quad (\text{Е.8})$$

где ГЦЗ неактивен, если $r_{\text{ГЦЗ}} < r^* \sin \theta$ и

$$r^* = -\frac{2\sigma}{\Delta G}. \quad (\text{Е.9})$$

Дополнительные уравнения вводятся для замыкания системы уравнений (Е.2) — (Е.9)

$$\Delta G^* = b \frac{\sigma^3(T)}{[\Delta G(T)]^2}, \quad (\text{Е.10})$$

$$\sigma(T) = \sigma_0 \frac{T}{T_m}, \quad (\text{Е.11})$$

$$\Delta G = \Delta S \Delta T = (\Delta H / T_m) \Delta T, \quad (\text{Е.12})$$

где поверхностная энергия σ рассчитывается согласно структурной модели Спайепена [186]. Распределение $P(r_{\text{ГЦЗ}})$ по размерам описывается логарифмически нормальным распределением, широко используемым для описания оксидных включений [259]:

$$P(r_{\text{ГЦЗ}}) = \frac{1}{\sigma_{\text{ГЦЗ}} \sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{(\ln(r_{\text{ГЦЗ}}/r_{\text{ГЦЗ,хар.}}))^2}{\sigma_s} \right), \quad (\text{Е.13})$$

где $r_{\text{ГЦЗ,хар.}}$ — наиболее вероятное (характеристическое) значение и $\sigma_{\text{ГЦЗ}}$ — стандартное отклонение. Поскольку оба параметра $r_{\text{ГЦЗ,хар.}}$ и $\sigma_{\text{ГЦЗ}}$ связаны с геометрией ГЦЗ, в расчетах использовались значения 5×10^{-8} м и 2.5×10^{-8} м соответственно. Функции $P(r_{\text{ГЦЗ}})$ и $D(P^{\text{ГЦЗ}})$ для $r > r^*$ приведены на рис. Е.1(б).

Таким образом, модель (Е.2) – (Е.13), расширенная для учета стохастичности и характеристик ГЦЗ, позволяет корректно моделировать гетерогенное зарождение. Такая модель основывается на правильном подходе к описанию спонтанной кристаллизации, поэтому пригодна для анализа нестационарного зарождения и оценки времени задержки между фазами в многофазном зарождении. Модель применима для начальных стадий зародышеобразования и отбора фаз, поэтому поздние стадии описываются не так точно, как это позволяют делать [145, 260] модели фазового поля.