

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА

На правах рукописи

Хоменко Максим Дмитриевич

**Сопряженные процессы теплопереноса, конвекции и
формирования микроструктуры при лазерной наплавке с
коаксиальной подачей металлических порошков**

05.27.03 – «Квантовая электроника»

АВТОРЕФЕРАТ

**диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук**

Москва – 2019

Работа выполнена в Институте проблем лазерных и информационных технологий РАН – филиале Федерального государственного учреждения «Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук»

Научный руководитель – Мирзаде Фикрет Хансуварович,
доктор физико-математических наук

Официальные оппоненты – Гусаров Андрей Владимирович
д. ф.-м. н., Московский
государственный технологический
университет “СТАНКИН”, г.н.с.
Харанжевский Евгений Викторович
д. т. н., доцент, Удмуртский
государственный университет, зав. лаб.
физики и химии материалов
Кучерик Алексей Олегович,
к. ф.-м. н., доцент, Владимирский
государственный университет, в. н. с.

Защита диссертации состоится «___» _____ 2019 г. в _____ на заседании диссертационного совета МГУ.01.13 Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова по адресу: 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 62, корпус нелинейной оптики, аудитория им. С.А. Ахманова.

E-mail: diss.sov.31@physics.msu.ru

С диссертацией можно ознакомиться в отделе диссертаций научной библиотеки МГУ имени М.В. Ломоносова (Ломоносовский просп., д. 27) и на сайте ИАС «ИСТИНА»:

<https://istina.msu.ru/dissertations/194417254/>

Автореферат разослан «___» _____ 2019 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук

А.А. Коновко

Общая характеристика работы

Актуальность темы

Лазерная наплавка (ЛН) с коаксиальной подачей металлических порошков - это перспективная аддитивная технология, позволяющая производить готовые металлические изделия и покрытия произвольной формы методом послойного нанесения материала. Процесс является многофакторным: большое значение имеют, как характеристики лазерного излучения (мощность излучения, размер пятна фокусировки, поляризация, длительность импульса, скорость сканирования), так и параметры потока подаваемых частиц порошка (скорость потока, концентрация и размеры частиц, их физические и химические свойства). Задача поиска оптимальных режимов проведения процесса для достижения целевых параметров материала и изделия требует глубокого понимания происходящих физических процессов и явлений, разработки физико-математических моделей и применения численных методов.

Численное моделирование позволяет описать сложные сопряженные процессы, происходящие при ЛН, и может служить как эффективный и экономичный инструмент исследования и оптимизации процесса наплавки. Для широкого спектра аддитивных технологий и материалов существует множество моделей, но они, как правило, носят фрагментарный характер. Сложность заключается в необходимости описания взаимодействия лазерного излучения (ЛИ) с частицами порошка и сопряженные процессы тепломассопереноса и кинетики фазовых превращений.

В последнее время применительно к аддитивным лазерным технологиям большое внимание уделяется конвективному переносу тепла в ванне расплава. Гидродинамический перенос является основным механизмом теплоотвода энергии ЛИ в ванне расплава и определяет форму синтезированного валика, поэтому его учет важен в контексте решения задач лазерных аддитивных технологий прямого нанесения. На сегодняшний день существует достаточно много исследований, посвященных наплавлению единичных дорожек на массивную подложку, т.к. это позволяет понять фундаментальные закономерности ЛН. Другие геометрии подложек (край, угол массивной детали и тонкие стенки) описаны в значительно меньшем количестве работ. Расширение представлений о влиянии геометрии теплоотвода подложки на оптимальные параметры ЛН все еще является актуальной задачей.

В опубликованных работах недостаточное внимание уделено исследованию фазовых переходов (плавление и кристаллизация) и микроструктуры синтезируемого материала. В моделях ЛН фазовый переход (ФП), как правило, считается равновесным, что не оправдано при лазерном воздействии. В более сложных многомасштабных моделях фазовые превращения рассчитываются несогласованно с температурным полем и профилем наплавленного слоя.

Таким образом, адекватное описание согласованных физических процессов и явлений имеет принципиальное значение для целей предсказательного моделирования ЛН на основе новых теоретических подходов, а также

дальнейшего развития лазерных аддитивных технологий. Полученные при этом представления о механизмах происходящих процессов открывают возможность управления ЛН и создания нового перспективного оборудования.

Целью диссертационной работы

является исследование сопряженных лазерно-индуцированных явлений теплопереноса, конвекции и кинетики затвердевания в лазерном аддитивном процессе наплавки с коаксиальной подачей металлических порошков для модернизации лазерной технологии и оборудования. В работе поставлены и решены следующие конкретные задачи:

- Исследование процессов взаимодействия (поглощение и рассеяние) лазерного излучения с частицами порошка при их транспортировке к подложке; оценка коэффициента поглощения для микрочастиц;
- Изучение влияния основных параметров лазерного излучения, потока частиц и подложки на геометрические характеристики наплавленного слоя.
- Исследование влияния геометрии теплоотвода на оптимальные параметры процесса для наплавления одинаковых валиков.
- Расчет характерных переохлаждений необходимых для кристаллизации в зависимости от различных механизмов роста кристаллитов (гетерогенный, поверхностный и объемный).
- Проведение исследований микроструктуры наплавленного слоя с учетом влияния сопряженных процессов тепломассопереноса и кинетики кристаллизации.

Научная новизна:

1. Впервые разработана самосогласованная модель процесса ЛН, учитывающая взаимное влияние явлений переноса тепла и кинетики фазовых превращений, а так же позволяющая изучать эволюцию микроструктурных свойств наплавленного валика без использования многомасштабного подхода.
2. При проведении численного моделирования процесса лазерного наплавления одиночного валика отмечена неоднородность среднего размера кристаллитов в наплавленном валике с отношением высоты и ширины большем единицы (убывание с ростом глубины), обусловленная различием скорости охлаждения на поверхности валика и в его глубине.
3. Разработана гидродинамическая модель лазерной наплавки на основе открытого пакета вычислительной гидродинамики OpenFoam. Она позволяет планировать процесс, учитывая специфику лазерного воздействия при создании трехмерных деталей. Также разработанная модель, в отличие от известных из литературы, позволяет учитывать эффективность улавливания порошка и экспериментально измеренный контактный угол валика и подложки.

4. Впервые показана возможность управления микроструктурными свойствами валиков с одинаковой геометрией, при котором средний размер кристаллитов идентичных валиков может целенаправленно изменяться на 10%-20%.

Научная и практическая значимость. Научные результаты могут быть использованы для исследования, оптимизации и планирования процесса ЛН с коаксиальной подачей металлических порошков. Результаты могут быть также использованы для прогнозирования свойств градиентных материалов в лазерных технологиях создания высококачественных покрытий и готовых изделий методом ЛН для нужд машиностроения и медицины и других отраслей промышленности. Разработанная модель является удобным инструментом как для планирования и оптимизации самого процесса ЛН, так и для настройки систем обратной связи. Применение разработанного подхода для тестирования проблемных участков детали, которые могут быть определены и устранены на этапе подготовки модели к выращиванию, позволит повысить качество и автоматизацию технологии и оборудования лазерной наплавки.

На защиту выносятся положения:

1. Единый термо-кинетический подход к моделированию лазерной наплавки металлических порошков, опирающийся на согласованное решение уравнений теплопереноса и кинетики Колмогорова-Авраами, предсказывает немонотонное поведение температуры и конверсионных полей, позволяет получить микроструктурные свойства наплавленного валика с учетом реальной его геометрии при сканирующем воздействии непрерывного лазерного излучения со скоростями 1-50 мм/с и интенсивностями 10-100 кВт/см².
2. Существует оптимальная для устойчивости процесса наплавки скорость сканирования, которая определяется равенством ширины ванны расплава диаметру пучка излучения. При этом наплавка на массивную подложку требует наибольшей лазерной мощности, при отсутствии теплоотвода в одну из сторон (в случае края массива) требуемая мощность снижается на 10-15%, а при отсутствии теплоотвода в обе стороны (в случае тонкой стенки) еще на 10-15%. Для поддержания ширины и высоты валика при прохождении радиусов ниже критического значения на пониженной скорости необходимо снижать как мощность излучения, так и расход порошка.
3. Наблюдаемое неоднородное распределение кристаллитов в наплавленных валиках с отношением высоты и ширины больше единицы, определяется динамикой самосогласованного температурного поля в процессе лазерной наплавки порошков. Распределение среднего размера кристаллитов в наплавленном валике (крупно- и мелко- зернистая структура в верхней и нижней частях, соответственно) обусловлено различными скоростями охлаждения валика.

4. Правильный выбор параметров процесса лазерной наплавки позволяет создавать из одного и того же порошка валики с одинаковой геометрией (шириной и высотой), но обладающие различным средним размером кристаллитов. Увеличение скорости сканирования приводит к более мелкозернистой микроструктуре таких валиков.

Достоверность подходов к численному моделированию процессов ЛН подтверждается использованием современного верифицированного программного обеспечения и проверкой его применимости. В полученных результатах отсутствуют нефизические значения. Сравнение рассчитанных параметров с экспериментом показало хорошее соответствие. Последовательное измельчение сеток и шага по времени приводит к сходимости использованных численных методов, что также подтверждает достоверность подходов. Полученные результаты непротиворечивы, дополняют друг друга и соответствуют имеющимся аналитическим оценкам.

Личный вклад автора является определяющим: все результаты работы получены либо лично автором, либо при его непосредственном участии.

Апробация работы и публикации по теме диссертации. Результаты работы опубликованы в российских и зарубежных журналах, таких как Квантовая Электроника, Кристаллография, Известия РАН: Серия Физическая, Перспективные материалы, Optical and Quantum Electronics, Physica B: Condensed Matter и др. Апробация работы проводилась на международных и российских конференциях, результаты диссертации докладывались автором на: международных конференциях «Лазерные технологии в сварке и обработке материалов», Кацивелли, Украина, 2011; «Математические модели и моделирование в: лазерно-плазменных процессах и передовых научных технологиях» пос. Петровац (Черногория) 2011г; «Физико-химические процессы при селекции атомов и молекул» Звенигород 2012 год; HPLSA, Стамбул, Турция, 2012, ILLA 2014, г. Шатура, Россия, 2014 год; "Аддитивные технологии: настоящее и будущее", ФГУП ВИАМ, 2015, 2018; BTLA-2015, 2018, Санкт-Петербург. НСКФ-2015 Россия, Переславль-Залесский, 2015 год; Advanced Laser Technologies Фаро, Португалия - 2015, Голуэй, Ирландия - 2016; International Conference on Coherent and Nonlinear Optics / Lasers Applications and Technologies 2016 года Минск Беларусь; Первом Российском кристаллографическом конгрессе, 2016 Москва, Россия; Информационные технологии и нанотехнологии г. Самара 2017, 2018; ISPRAS-17, ISPRAS-18 Москва Россия; научных семинарах ИПЛИТ РАН под председательством академика В.Я. Панченко и профессора В.С. Голубева, Шатура, 2011-2019.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы из 122 наименований и приложения. Объем работы составляет 123 страниц, в том числе 83 рисунка и 13 таблиц.

По материалам диссертационной работы опубликовано 13 печатных работ: из них 9 статей в рецензируемых научных журналах, включенных в Scopus, WoS, RSCI а также в Перечне изданий МГУ.

Краткое содержание работы

Первая глава содержит обзор литературы по теме диссертации и состоит из пяти разделов. Первый раздел представляет собой обзор актуальных работ по моделированию процессов мезоуровня при ЛН. Отмечена проблема соответствия созданных моделей реальной ситуации. Показано, что в литературе недостаточно внимания уделено моделированию кинетики фазового перехода, определяющей поведение температуры и эволюцию микроструктуры. Некоторые гидродинамические эффекты (например, капиллярные) при совместном действии лазерного излучения и добавления частиц порошка в зону наплавки при контакте с подложками освещены в литературе слабо. Чаще всего численные исследования ЛН ограничиваются моделированием наплавления единичных дорожек на массивную подложку и выращиванию тонких стенок, а исследование других подложек встречается реже.

В разделе 1.2 описаны подходы к моделированию кинетики ФП. Отмечено, что использование уравнения Колмогорова-Джонсона-Мейла-Аврами (КЖМА) позволяющего получить явное выражение для объемной доли превратившейся фазы удобно в случае, когда необходимо решать сопряженную задачу о теплопереносе и кинетике фазового превращения.

В разделе 1.3 описана суть подхода КЖМА к моделированию кинетики ФП и его основные постулаты. Также обсуждаются возможные виды нуклеации и размерности роста зародышей новой фазы.

В разделе 1.4 описываются способы анализа микроструктуры наплавленного слоя.

Вторая глава посвящена исследованию связанных процессов теплопереноса и кинетики затвердевания при лазерной наплавке. Для этого разработаны термокинетическая модель и вычислительный алгоритм этого процесса.

Таблица 1. Некоторые рассчитанные коэффициенты поглощения излучения сферическими частицами различных металлов.				
Метал	λ, μ	$\bar{n}=n(1-im)$		$k_F, \%$
		n	$n \cdot m$	
Алюминий	10.6	31	100	1.5
	1.06	1.1	10	5
Железо	10.6	7	28	4.1
	1.06	3.3	4.4	36.6
	2.5	4.1	8.0	20.5
Никель	10.6	8.9	22.5	7.2
	1.06	3	5.2	29.8

Первая часть раздела 2.1 посвящена исследованию взаимодействия ЛИ с порошком в процессе подачи. При помощи формул Френеля рассчитан усредненный по частице порошка коэффициент поглощения излучения. Его значения для ряда металлических частиц и длин волн ЛИ, приведены в таблице 1. Видно, что в некоторых случаях частицы могут поглощать значительную часть

энергии ЛИ, в других же - поглощение незначительно. Далее при помощи закона Бугера рассчитаны доли излучения, поглощенной частицами порошка I_a , рассеянной ими I_s и прошедшей до подложки. Показано, что поток энергии в зону наплавки может поступать по двум каналам: проходя через дисперсную среду до подложки, и с энергией, переносимой частицами, нагретыми излучением в процессе их транспортировки от сопла до мишени.

В продолжение раздела 2.1 представлена термокинетическая модель, которая включает в себя сопряженные нелинейные уравнения теплопроводности и кинетики фазового превращения. Для расчета объемной доли жидкой фазы f_l согласовано с температурным полем ванны расплава используется статистическая теория КЖМА:

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda_{eff} \nabla T) + q\delta(\phi) + \rho(1 - f_l)\Delta c \frac{\partial T}{\partial t} - \rho L \frac{\partial f_l}{\partial t}, \quad (1)$$

$$f_l(r, t) = 1 - \exp \left\{ -\sigma \int_0^t \tilde{J}(\Delta T(r, \varepsilon)) \left(r^* + \int_\varepsilon^t G[\Delta T(r, \tau)] d\tau \right)^n d\varepsilon \right\} \quad (2)$$

$$\tilde{J}(T) = N_0 \frac{k_B T}{h} \exp \left\{ -\frac{E_a}{k_B T} \right\} \exp \left\{ -\frac{E_G(T)}{k_B T} \right\}, \quad (3)$$

$$G(T) = d_0 \frac{k_B T}{h} \exp \left\{ -\frac{E_a}{k_B T} \right\} \exp \left\{ -\frac{L_m}{k_B N_a T_m} \cdot \frac{\Delta T}{T} \right\} \quad (4)$$

где T – температура, c , λ_{eff} и ρ – теплоемкость, теплопроводность и плотность многофазной среды соответственно, $\tilde{J}$ – скорость зародышеобразования, G – скорость роста, σ – константа формы, n – константа Авраами, k_B – постоянная Больцмана, h – постоянная Планка, E_a – энергия активации перехода атома через границу раздела фаз, $E_G(T)$ – энергия Гиббса, L – теплота плавления, $\Delta T = T - T_m$ перегрев в случае плавления, $\Delta T = T_m - T$ – переохлаждение в случае кристаллизации, d_0 – параметр решетки. Вид формулы для Энергии Гиббса для конкретного порошка и остальные использованные обозначения приведены в таблице 2. Граничное условие на свободной поверхности ванны расплава включено в уравнение теплопроводности, как источниковый член при помощи дельта функции, а влияние конвективного переноса тепла учитывается введением эффективной теплопроводности.

В уравнении для температуры (1) первое слагаемое в правой части характеризует перенос тепла за счет теплопроводности, последние два – мощность тепловых источников при ФП.

Для моделирования движущихся границ применяется метод функций уровня (“level-set method”), граница изначально не задается, а отслеживается при помощи функции уровня ϕ . Уравнение для свободной поверхности можно представить в виде:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \phi) = F_p |\nabla \phi| \quad (5)$$

где $\mathbf{u}$ - локальное гидродинамическое движение жидкого металла, F_p - скорость движения свободной границы за счет инжекции частиц порошка, которая имеет вид:

$$F_p = \frac{2\alpha_p \dot{m}}{\pi \rho_p R_{jet}^2} \exp\left(-\frac{2r^2}{R_{jet}^2}\right), \quad (6)$$

где α_p - коэффициент эффективности улавливания, $\dot{m}$ - скорость подачи порошка, R_{jet} - это радиус потока порошка на подложке, а r радиус вектор точки пространства. В случае если гидродинамическим течением можно пренебречь второе слагаемое в правой части (5) равно нулю.

Для источникового члена q , учитывающего тепловое воздействие ЛИ и добавляемого порошка, а также конвективное охлаждение потоком газа можно записать:

$$q = \alpha_{beam} q_{laser} + c\rho(T - T_{powder})F_p + k_c(T - T_0) \quad (7)$$

где α_{beam} - это коэффициент поглощения ЛИ, q_{laser} - интенсивность ЛИ, T_{powder} и T_0 - температуры добавляемого порошка и окружающего газа соответственно, k_c - коэффициент конвективного теплообмена. В случае равномерного пучка интенсивность равна $q_{las} = \frac{P_{las}}{\pi R_b^2}$. Для Гауссова пучка используется:

$$q_{las} = \frac{2P_{las}}{\pi R_b^2} \exp\left(-\frac{2r^2}{R_b^2}\right), \quad (8)$$

Действие лазерного пучка ограничивается его радиусом.

В разделе 2.2 приводятся аппроксимированное на трехмерной дискретной сетке уравнение теплопроводности, для решения которого используется хорошо описанный в литературе метод стабилизирующей поправки (СП), который имеет второй порядок точности по времени и первый по пространству. Система уравнений решались для расчетной области, которая содержит три фазы: твердую, жидкую и газ. Коэффициенты для уравнения теплопроводности рассчитываются по значениям функции уровня и объемной доли новой фазы. Для согласования уравнения теплопроводности и КЖМА использовался метод простой итерации.

Таблица 2. Основные кинетические параметры материалов использованных в расчетах

Величина	Обозначение и размерность	Сплав Al (Si-11.5%) AlSi40	Fe	Сплав на основе Ni
Число узлов в единице пространства	N_0	-	$8.5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$	$2.105 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$
Концентрация примеси 2D	$n_0, \text{ cm}^{-2}$	$3.967 \cdot 10^5$	-	-
Энергия активации	$E_a, 10^{-12} \text{ эрг}$	1.28	1.68	2
Поверхностная энергия раздела фаз	$\gamma, \text{ эрг/см}^2$	400	204	70
Критический радиус	$r^*, 10^{-6} \text{ см}$	10	10	1
Энергия Гиббса	$E_G(T)$	$\Psi(\phi) \frac{\pi d_0 \gamma^2 T_m}{\rho L \Delta T}$	$\frac{16\pi \gamma^3 \Omega^2}{3(\Delta S \Delta T)^2}$	$\frac{\pi d_0 \gamma^2 T_m}{\rho L \Delta T}$

В разделе 2.3 описаны проведенные расчеты теплопереноса при одновременном протекании фазовых превращений (плавления и кристаллизации) в процессе наплавки частиц порошка нержавеющей стали в нескольких режимах. Режимы отличались между собой потоками энергии излучения и скорости подачи порошка. Расчеты проводились в 2D и 3D постановке. Предполагался гомогенный объемный механизм роста. Моделировалась одиночная дорожка до выхода высоты наплавленного слоя на стационар. Порошок подается коаксиально с лазерным излучением. Подложка из того же материала, что и частицы порошка. Фокус лазерного пучка находится на подложке, а диаметр пучка ЛИ равен 0,35 мм. Мощность пучка варьировалась в пределах 0,4-1,5 кВт, а скорость сканирования - 1,2-2,6 см/с. Расход порошка при моделировании изменялся в пределах 1-6 г/мин, диаметр потока порошка на подложке был равен 0,8 мм. Для нержавеющей стали использовались теплофизические и кинетические характеристики железа.

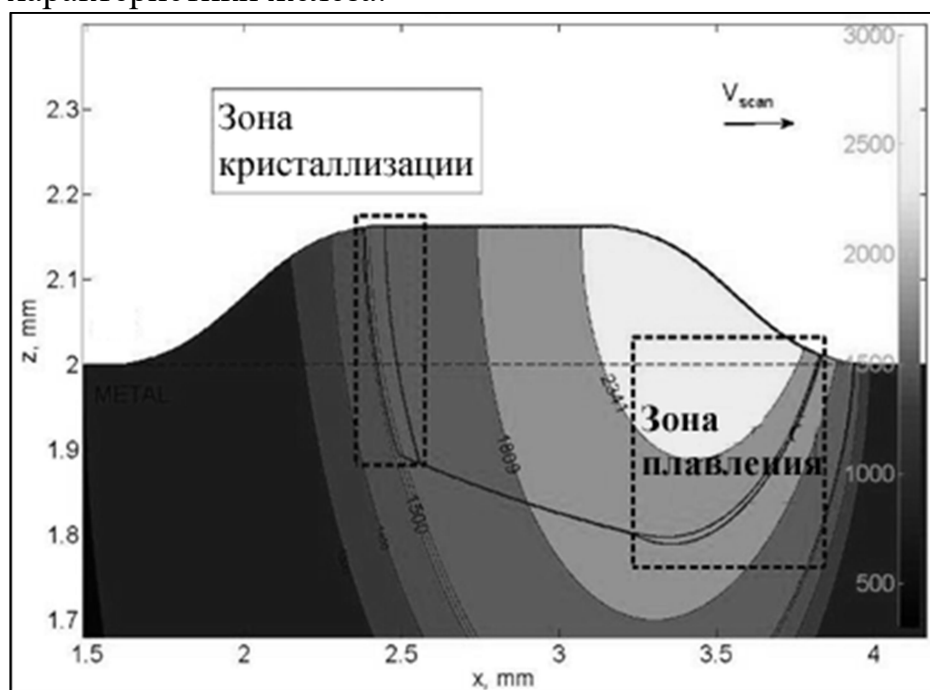


Рисунок 1. Профили распределения полей температуры и объемных долей новой фазы в различные моменты времени $t=130\text{мс}$, $P=0.6\text{кВт}$, $V=12\text{мм/с}$, $m=1\text{г/мин}$.

На рисунках 1а-в приведено рассчитанное 2D распределение температуры и профили объемных долей жидкой фазы в плоскости x - z , черным показаны границы области расплава, а оттенками серого - температурные поля. Наблюдается расхождение профилей полей температуры и объемных долей новой фазы. Изотерма температуры плавления 1809 К показана на рисунке 1, а плавление происходит при значительном перегреве. Это происходит вследствие того, что скорость нуклеации при температуре плавления равна нулю и возрастает только с ростом перегрева. Кристаллизация так же инициируется после достижения определенных значений переохлаждения.

В разделе 2.4 описывается постановка эксперимента по наплавке одиночных валиков и сравнение термической модели ЛН с его результатами. Показано, что численные результаты показывают удовлетворительное согласование с экспериментальными данными. Ширина ванны расплава согласуется с

экспериментом хуже, чем глубина, это связано с тем, что для учета гидродинамики использовался изотропный эффективный коэффициент теплопроводности. Тогда как действие конвективного переноса тепла анизотропно поперек течения и вдоль него.

В разделе 2.5 приведены выводы к главе 3.

В главе 3 исследуется роль теплопроводности, капиллярных и термокапиллярных явлений в процессе лазерной наплавки.

В разделе 3.2 описана разработанная численная модель ЛН, учитывающая конвективное течение жидкости, эффективность улавливания порошка и контактный угол валика. Для этого правая часть уравнения теплопроводности (1) дополняется конвективным членом $c\rho\nabla(\mathbf{u}T)$, а в систему уравнений самосогласованной модели ЛН добавляются следующие уравнения:

Уравнение неразрывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (9)$$

Уравнение количества движения:

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} u_i) = \nabla \cdot (\mu \nabla u_i) - \frac{C_{big}(1-f_l)^2}{f_l^3 + C_{small}} u_i - \frac{\partial p}{\partial i} + \sigma \kappa \nabla \alpha + (\nabla T - \mathbf{n}_a (\mathbf{n}_a \cdot \nabla T)) \frac{\partial \sigma}{\partial T} \delta(\alpha) \quad (10)$$

где μ – вязкость u_i – скорость жидкости по соответствующей координате $i = x, y, z$; μ – вязкость, p – давление, σ – поверхностное натяжение металла, α – VOF функция для свободной поверхности, C_{big} и C_{small} это константы с большим (10^{10} кг/(м³с)) и маленьким (10^{-10}) значениями, соответственно, $\mathbf{n}_a$ – нормаль к свободной поверхности, κ – кривизна свободной поверхности. В рамках гидродинамической модели захват порошка происходил только в жидкой ванне расплава.

Второе слагаемое в правой части уравнения (10) учитывает торможение движения жидкости на твердой границе, которая моделируется как пористая среда. Последние два слагаемых в этом уравнении – это источники, связанные с действием капиллярной и термокапиллярной силы соответственно.

Для учета свойств поверхности подложки, на ее гранях, Z компонента нормали свободной поверхности не рассчитывается, а задается в соответствии с известным значением контактного угла α_c :

$$n_{a,z} = -\cos(\alpha_c) \quad (11)$$

Кривизна свободной поверхности κ рассчитывается через модифицированную нормаль и имеет повышенные значения в случае контактного угла отличного от заданного. Капиллярные силы, стремящиеся кривизну уменьшить, подстраивают свободную поверхность под требуемый контактный угол.

Граничные условия в трехфазной модели, содержащей воздух, жидкий и твердый металл, задаются на бесконечности. Расчетная сетка имеет конечную длину, однако выбирается таким образом, что бы граничные условия имели

наименьшее влияние на процессы в ванне расплава. Для уравнения теплопроводности и давления используются условие равенства потока нулю, а в уравнении моментов, на границе задается скорость равная нулю. В расчетах без маневров, только половина реальной ванны расплава входит в расчетную область за счет симметрии вдоль движения луча, на границе симметрии используется граничное условие.

Для моделирования различной геометрии теплоотвода используются начальные условия взаимного расположения VOF функции при начальной температуре $T_0 = 300\text{K}$. Такая постановка задачи не учитывает нагрев детали от наплавки предыдущих слоев и оправдана при достаточной длине детали, которая успевает остывать за время обхода одного слоя. Учет влияния нагрева предыдущих слоев может осуществляться изменением начальной температуры для детали.

В разделе 3.3 описывается численная реализация гидродинамической модели. Физико-математическая модель ЛН была реализована в открытом свободном пакете OpenFoam (версия 2.3.x). Классы и функции пакета OpenFoam являются полями, сетками, граничными условиями численными операторами и т.п. Таким образом, он позволяет записывать разностные аналоги дифференциальных уравнений и граничных условий в таком же виде, как они существуют в модели. В расчетах использовались верифицированные реализации известных методов решения СЛАУ, к которым приводят конечно-разностные аналоги дифференциальных уравнений.

В разделе 3.4 исследуется влияние геометрии теплоотвода на параметры наплавляемых валиков. При помощи разработанной программы были проведены исследования коаксиальной ЛН порошка жаропрочного сплава на основе Ni на различные детали с использованием Nd:YAG лазера с равномерным распределением излучения. Термические параметры материалов, использованные в расчетах, представлены в таблице 2. Динамическая вязкость равна $6.872 \cdot 10^{-7}$ и $1.48 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$ для металла и газа соответственно. ($\sigma = 1.778 \text{ Н/м}$, $\partial\sigma/\partial T = -0.38 \text{ мН/(м}^{\circ}\text{К)}$)

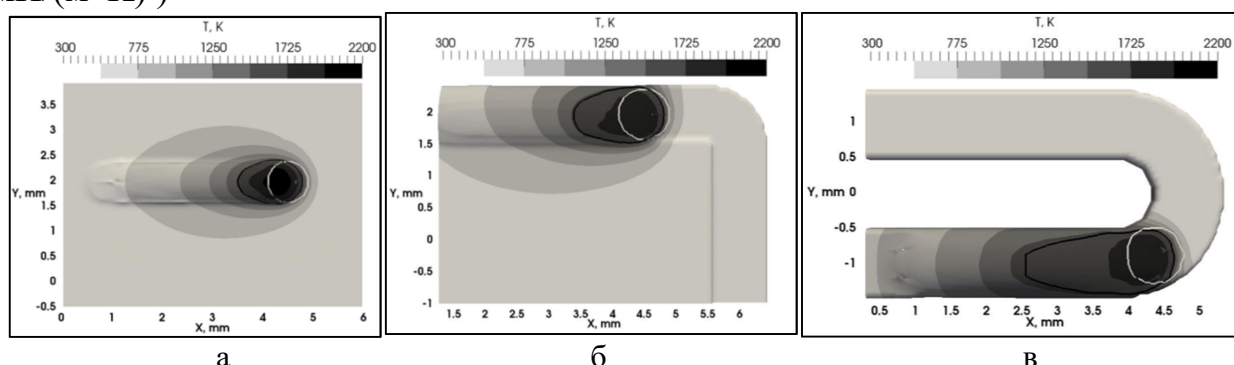


Рисунок 2. Вид сверху на распределение температуры наплавленного валика для исследуемых условий теплоотвода: а – на массивной подложке $P_{las} = 95 \text{ Вт}$, б – на краю массивной детали $P_{las} = 85 \text{ Вт}$, в – на тонкой стенке $P_{las} = 75 \text{ Вт}$. ($t=400 \text{ мс}$. $V_{scan}=10\text{мм/с}$ $m=1\text{г/мин}$)

На рисунках 2 а-в показан вид сверху на температурное поле для случаев различной геометрии теплоотвода. Скорость сканирования достаточно высокая, поэтому поперечный размер зоны нагрева сравнительно мал, а ширина ванны расплава фактически совпадает с шириной пучка ЛИ. Поэтому при отсутствии теплоотвода в одну из сторон (в случае края массива) требуемая мощность снижается на 10-15%, а при отсутствии теплоотвода в обе стороны (тонкая стенка) еще на 10-15%. На меньшей скорости сканирования, когда теплоотвод по сторонам больше - эффект усиливается, а в случае когда ширина ванны расплава сильно превышает ширину ЛИ, близость края подложки будет кардинально менять оптимальные параметры ЛИ.

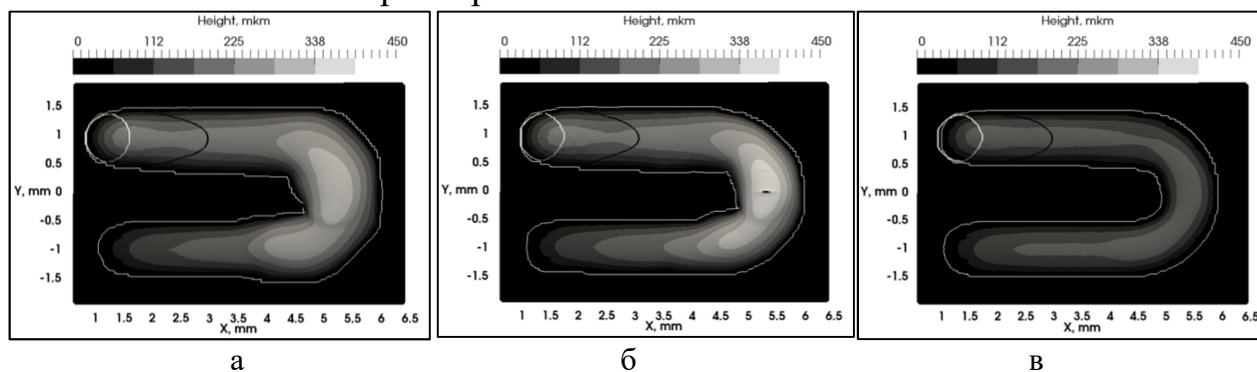


Рисунок 3. Поворот по радиусу ниже критического со снижением скорости сканирования по массивной подложке (а - без адаптации, б - со снижением мощности, в – со снижением мощности и расхода)

На рисунке 3а-в представлены результаты расчетов наплавки при маневрах с торможением. При прохождении маневра на пониженной скорости без изменения массового расхода и мощности излучения, ширина и высота валика увеличиваются относительно стационарного движения. Увеличенный расход порошка на единицу поверхности приводит к увеличению высоты валика, а повышенная поглощенная плотность мощности приводит к растеканию расплава на большую ширину. Расчеты показали (Рисунок 3б), что для исправления ситуации недостаточно одного лишь снижения мощности лазерного излучения в соответствии с определенными оптимальными значениями. В этом случае ширина валика несколько снижается, а высота увеличивается. Степень растекания снижается, а поглощённое количество порошка сохраняется, что и приводит к еще большему увеличению высоты. Для наплавки бездефектных дорожек необходимо снижать как мощность излучения, так и скорость подачи порошка (Рисунок 3в). Алгоритм такого управления зависит от радиуса поворота, скорости сканирования и геометрии теплоотвода, а при его планировании требуется опираться на карту параметров процесса, выбирая оптимальные для текущей скорости

В разделе 3.4 исследуется влияние контактного угла на геометрические параметры валиков. Показано, что валик растекается поперек направления сканирования на более смачиваемой подложке, захватывая дополнительное количество порошка в случае потока порошка, который шире ванны расплава, высота при этом остается постоянной. В случае узкого потока порошка, когда весь подаваемый порошок захватывается ванной расплава, снижение контактного

угла, вследствие которого увеличивается ширина валика, сопровождается заметным снижением высоты валика. Результаты показывают возможность управления геометрическими параметрами валиков через параметры поверхности подложки/слоев, которые влияют на контактный угол независимо от скорости сканирования.

В разделе 3.5 описывается сравнение гидродинамической модели ЛН с экспериментальными данными по наплавке порошка Metco 42С. Сравниваются макроскопические параметры наплавленного валика для гидродинамической модели ЛН учитывающей эффективность улавливания порошка. В целом удалось получить хорошее соответствие рассчитанных и экспериментальных данных в широком диапазоне технологических параметров. Погрешность определения ширины ванны расплава в среднем для исследованных параметров составила 6%, а высоты наплавки – 16%. Хуже всего модель определяет глубину проплавления, здесь погрешность составила 33% однако это все же можно считать удовлетворительным согласованием с экспериментом. Рассчитанные профили валиков хорошо согласуются с экспериментальными данными.

В разделе 3.6 приведены выводы к главе 3.

В главе 4 исследуются характеристики микроструктуры наплавленных валиков при ЛН. Разработанный подход основан на предположении, что формирование микроструктуры валика происходит за счет возникновения и роста кристаллитов в переохлажденном расплаве. Процесс кристаллизации описывается на основе кинетической модели КЖМА, для условий неоднородного распределения температуры расплава в зоне наплавки. В качестве объектов для исследования микроструктуры были выбраны легкоплавкий силумин и тугоплавкий никелевый сплав.

В разделе 4.1 описан алгоритм расчета микроструктуры. Используется известный способ решения уравнения КЖМА при помощи популяций (populational КЖМА), описанный в литературе для однородной температуры кристаллизующейся системы. Такой алгоритм был применен для неоднородного поля температуры в ванне расплава и позволил получить распределение частиц по размерам для каждой термической истории.

В разделе 4.2 описывается согласование алгоритма расчета микроструктуры с гидродинамическим движением. В случае если уравнение КЖМА решается совместно с уравнениями теплопроводности, гидродинамики и движения свободной поверхности шаг по времени определяется числом куранта и конвективным течением жидкости. На этапе анализа полученной температурной истории для использования алгоритма РКЖМА фактический шаг разделяется на целое число шагов, зависящее от размера нормирования.

В разделе 4.3 исследуется динамика и пространственное распределение кристаллитов по размерам в наплавленном валике. Сопряженный характер процессов приводит к возможности появления бимодального распределения частиц по размерам. Ввиду многомодального распределения частиц по размерам, важно знать какой объем занимают частицы в среднем. Показано неоднородное

распределение среднего размера кристаллитов в наплавленном слое (крупно- и мелко- масштабная микроструктура в верхней и нижней частях, соответственно). При этом уменьшение размера кристаллитов составляет более чем в два раза. Полученные результаты качественно согласуются с экспериментальными данными по синтезу градиентного материала методом наплавки порошка AlSi40.

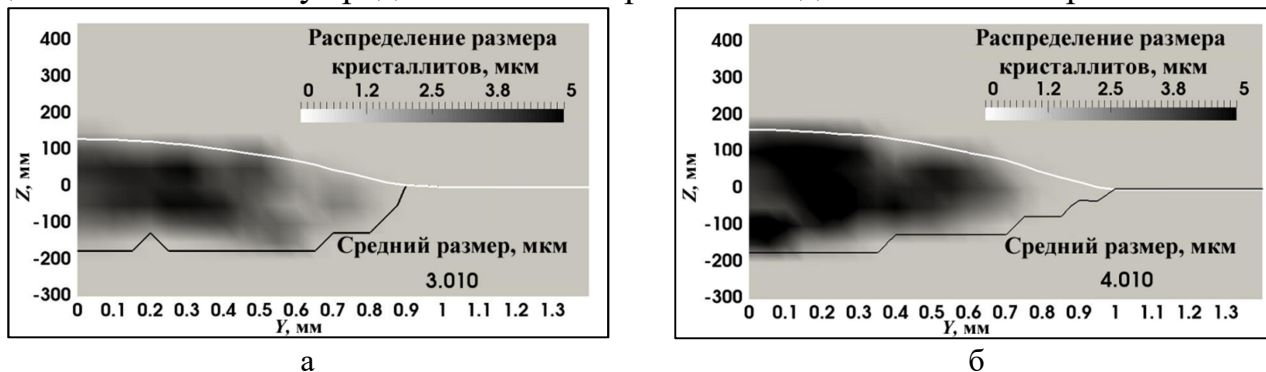


Рисунок 4. Распределение среднего размера кристаллитов в поперечном разрезе наплавленного валика для высокоскоростного (а) и низкоскоростного набора (б) параметров.

В параграфе 4.4.1 исследуется зависимость среднего размера кристаллитов наплавленного валика порошка ВЖЛ12У от параметров процесса. Показано, что в случае низкой скорости наплавки средний радиус кристаллитов выше (рисунок 4). Параметры численно подобраны таким образом, что бы геометрия валиков была схожей на разных скоростях сканирования. Более высокие скорости сканирования приводят к более мелкой структуре зерен, при этом адаптация остальных параметров позволяет наплавлять идентичные валики.

Процесс кристаллизации инициируется только после переохлаждения относительно температуры плавления $T_m = 1533$ К. На рисунок 5 представлена динамика изменения температуры и объемной доли твердой фазы в контрольной точке ($Y = 0.375$ мм, $Z = -0.025$ мм) для двух наборов параметров процесса наплавки. Видна разная скорость охлаждения на начальной стадии, когда действие скрытой теплоты кристаллизации мало (рисунок 5а). На этой стадии большей скорости сканирования соответствует скорость охлаждения порядка 15000 К/с, а для низкоскоростного набора параметров – в 3 раза меньшая (~5000 К/с). По достижении необходимого переохлаждения наступает стадия интенсивного появления зародышей кристаллической фазы и их рост. В случае большой скорости охлаждения максимальное переохлаждение на начальной стадии составляет 8.2 К, при меньшей скорости только 7.7 К. Далее за счет выделения скрытой теплоты кристаллизации переохлаждение снимается. При большем переохлаждении рождается большее число кристаллитов, быстрый рост которых обуславливает большее снятие переохлаждения (до 2 К). В случае низкой скорости охлаждения переохлаждение снимается меньше (до ~4 К). Такая разница в температурной динамике приводит к различной динамике объемной доли закристаллизованной фазы (рисунок 5б) и, как следствие, к новым микроструктурным характеристикам и напряжениям в наплавленном валике.

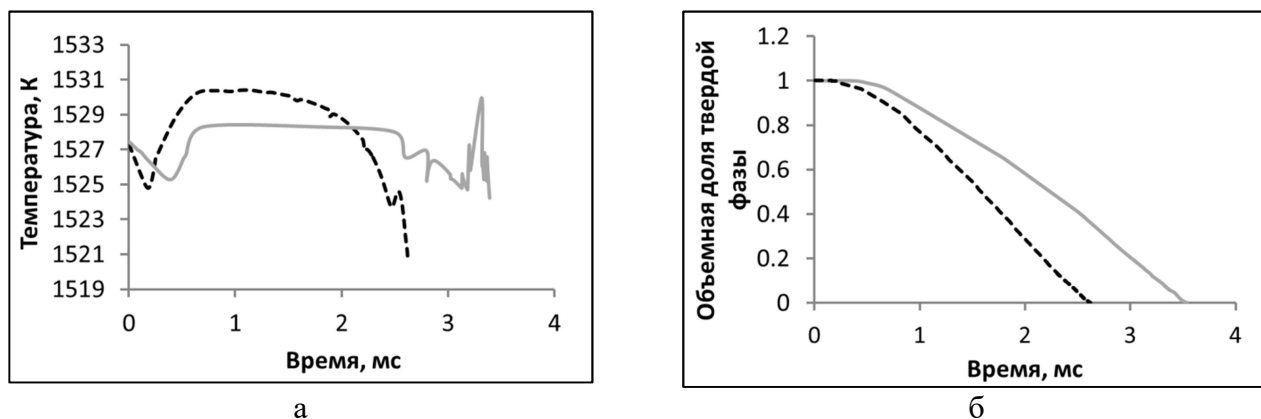


Рисунок 5. Динамика температуры (а) и объемной доли новой фазы (б) в контрольной точке для двух наборов параметров: низкоскоростного (сплошная) и высокоскоростного (пунктир).

В параграфе 4.3.2 показано, что разработанная модель позволяет оценить микроструктуру наплавленного слоя с учетом контактного угла расплава и подложки. Определена возможность наплавления валиков с одинаковыми геометрическими параметрами и в тоже время, различной микроструктурой используя свойства поверхности подложки. Показано, что увеличение контактного угла валика приводит к увеличению среднего размера кристаллитов в наплавленном слое.

В разделе 4.5 приведены выводы к главе 4.

Основные результаты и выводы

1. Разработаны термо-кинетическая модель и вычислительный алгоритм динамического процесса лазерной наплавки с коаксиальной подачей порошков. Развита с учетом гидродинамики кинетическая модель эволюции микроструктуры наплавленного валика при ЛН не требует задания формы наплавленного валика и использования разномасштабного подхода для изучения процессов эволюции микроструктуры, позволила напрямую оценить размер зерен закристаллизованного валика и исследовать влияние управляющих параметров процесса при сканирующем воздействии непрерывного ЛИ со скоростями 1-50 мм/с и интенсивностями 10-100 кВт/см².
2. Рассмотрены типичные ситуации теплоотвода при ЛН: наплавление на массивную подложку, край массивной детали и тонкую стенку. Создана карта процесса для наплавления валиков одинакового размера. Численно найдены режимы изменения мощности лазерного излучения для поддержания постоянной высоты валика при различных маневрах. Подобраны параметры процесса для исправления негативных эффектов связанных с торможением на резких поворотах.
3. Исследовано влияние сопряженных процессов кристаллизации и теплопереноса на конечную микроструктуру наплавленного валика при ЛН с коаксиальной подачей металлических порошков. Рассчитано неоднородное распределение по размерам кристаллитов и средний размер кристаллитов в

наплавленных валиках с отношением высоты и ширины больше единицы (крупно- и мелко- масштабная микроструктура в верхней и нижней частях, соответственно). При этом уменьшение размера кристаллитов составляет более чем в два раза. Полученные результаты качественно согласуются с экспериментальными данными по синтезу градиентного материала методом наплавки порошка AlSi40 на подложку из алюминия.

4. Показан различный отклик геометрии валика на изменение контактного угла в зависимости от размера потока порошка относительно ванны расплава. В случае широкого потока порошка увеличение контактного угла приводит к уменьшению ширины валика и эффективности улавливания, но высота валика остается прежней. Снижение ширины валика сопровождается повышением его высоты при таком же изменении контактного угла в случае узкого потока порошка. Также показано, что увеличение контактного угла валика приводит к увеличению среднего размера кристаллитов.
5. Рассчитана динамика распределения температурных и фазовых полей в ванне расплава, а также движение свободной поверхности под действием гидродинамических сил и добавления порошка. Показана возможность управления микроструктурными свойствами валиков с одинаковой геометрией, при котором средний размер кристаллитов идентичных валиков может целенаправленно изменяться на 10%-20%. Небольшое изменение параметров процесса не влияет на микроструктуру, но большое различие в параметрах процесса дает ощутимую разницу получаемой микроструктуры наплавленного слоя.

Публикации автора, в которых опубликованы основные результаты

Публикации по теме диссертации в рецензируемых журналах Scopus, WoS, RSCI а также в Перечне изданий МГУ

1. **Хоменко М.Д.**, Мирзаде Ф.Х., Низьев В.Г. Параметрическое исследование микроструктурных свойств при лазерной наплавке // Кристаллография. – 2019. – Т. 64, №4 – С. 663-667. Импакт-фактор WOS 0,762
2. Niz'ev V.G., **Khomenko M.D.**, Mirzade F. Kh. "Planning and optimisation of laser cladding taking into account the influence of hydrodynamics and the geometry of the heat sink of parts // Quantum electron. – 2018. – Vol. 48, № 8. – P. 743–748. Импакт-фактор WOS: 1.151
3. Mirzade F.Kh., **Khomenko M.D.**, Niziey V.G. Numerical simulation of solute evolution during laser cladding with nickel superalloy powder injection // Optical and Quantum Electronics. – 2016. – Vol. 48. – P. 513. Impact Factor WOS 1.168
4. **Khomenko M.D.**, Panchenko V.Ya., Niziey V.G., Mirzade F.Kh., Grishaev R.V., Numerical investigation of the microstructure of a clad layer produced via laser cladding with coaxial metal powder injection // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. – 2016. – Vol. 80, No. 4. – P. 381–386.

5. **Khomenko M.D.**, Dubrov A.V., Mirzade F.Kh., Decomposition strategies in the problems of simulation of additive laser technology processes, *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*. – 2016. – Vol. 52, No. 6. – P. 621-629.
6. Niziev V.G., Mirzade F.Kh., **Khomenko M.D.** Effect of powder characteristics on the balance of radiation energy in coaxial laser sintering // *Quantum Electronics*. – 2014. – Vol. 44, № 9. – P. 845-851. Импакт-фактор WOS: 1.151
7. Mirzade F.Kh., Niziev V.G., Panchenko V.Ya., **Khomenko M.D.**, Grishaev R.V., Pityana S., van Rooyen C. Kinetic approach in numerical modeling of melting and crystallization at laser cladding with powder injection // *Physica B: Condensed Matter*. – 2013. – Vol. 423. – P. 69-76. Impact Factor WOS: 1.453
8. Гришаев Р.В., Мирзаде Ф.Х., **Хоменко М.Д.** Моделирование фазовых переходов при селективном лазерном спекании методом инъекции порошков // *Перспективные материалы*. – 2013. – Т. 14. – С. 241-248.
9. Гришаев Р.В., Мирзаде Ф.Х., Низьев В.Г., Панченко В.Я., **Хоменко М.Д.** Моделирование плавления и кристаллизации при селективном лазерном спекании с инъекцией металлических порошков // *Физика и химия обработки материалов*. – 2013. – Т. 2. – С. 12-23.

Научные статьи, опубликованные в сборниках трудов конференций, индексируемых Scopus, WOS, РИНЦ:

1. **Khomenko M.D.**, Mirzade F.Kh. On the role of capillary and thermo capillary phenomena on microstructure at laser cladding // *Journal of Physics: Conference series*. – 2019. – Vol. 1096, No. 1. – 012144.
2. **Khomenko M.D.**, Mirzade F.Kh., Pityana S. On verification of numerical hydrodynamic model of powder-based laser metal deposition process // *Journal of Physics: Conference series*. – 2018 – Vol. 1109, No. 1. – P. 012004.
3. **Khomenko M.D.**, Mirzade F.Kh. Parametric investigation of microstructure after laser melting of metal powder layer // *Procedia Engineering*. – 2017. – Vol. 201. – P. 645-654.
4. **Khomenko M.D.**, Mirzade F.Kh., Dubrov A.V. Influence of impurities on heat-mass transfer during laser cladding of metal powders // *Журнал прикладной спектроскопии*. – 2016. – Том. 83, No. 6-16. – P. 521-522.