Институт проблем лазерных и информационных технологий РАН – филиал Федерального государственного учреждения «Федеральный научноисследовательский центр «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук»

На правах рукописи

Хоменко Максим Дмитриевич

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

Специальность 05.27.03 – «Квантовая электроника»

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:

д. ф.-м. н. Мирзаде Фикрет Хансуварович

Шатура – 2019

Введение			
Актуальность темы 5			
Целью диссертационной работы 6			
Научная новизна:7			
На защиту выносятся положения: 8			
Глава 1. Основные модели лазерной наплавки и сопутствующих			
физических процессов (литературный обзор) 12			
1.1. Моделирование процессов мезоуровня при ЛН 16			
1.2. Основные модели кинетики нуклеации			
1.3. Уравнение Колмогорова-Джонсона-Мейла-Аврами 25			
1.3.1. Гомогенная и гетерогенная, объемная и поверхностная			
нуклеация			
1.4. Анализ микроструктуры наплавленного слоя			
1.5. Выводы			
Глава 2. Связанные процессы теплопереноса и фазовых превращений			
при лазерной наплавке			
2.1. Термо-кинетическая модель ЛН с подачей порошка			
2.1.1. Коэффициент поглощения излучения микрочастицей			
2.1.2. Потери энергии излучения связанные с взаимодействием с			
частицами при коаксиальной подаче порошка 39			
2.1.3. Описание свободной границы 41			
2.1.4. Балансное уравнение для температуры			
2.1.5. Кинетическое уравнение для объемной доли превратившейся			
фазы 45			

2.2.	Численная реализация термической модели
2.3.	Результаты расчетов 51
2.3.1.	Температурные профили и поля закристаллизованной фазы 53
2.3.2.	Влияние механизма кристаллизации на температурный
интервал ф	азового перехода
2.3.3.	Влияние скорости сканирования, мощности лазерного
излучения	и величины подачи порошка на геометрические характеристики
наплавленн	юго слоя
2.4.	Сравнение результатов расчетов с экспериментальными
данными	
2.5.	Выводы к главе 2 64
Глава 3.	Роль теплопроводности, капиллярных и термокапиллярных
явлений в прог	цессе лазерной наплавки
3.1.	Гидродинамическая модель лазерной наплавки с учетом
эффективнос	ти улавливания порошка
3.2.	Численная реализация гидродинамической модели 70
3.1.	Влияние геометрии теплоотвода на параметры наплавляемых
валиков	
3.2.	Влияние контактного угла на геометрические параметры
валиков	
3.3.	Валидация гидродинамической модели ЛН
3.4.	Выводы к главе 3
Глава 4.	Характеристики микроструктуры наплавленных валиков при
ЛН	
4.1.	Алгоритм расчета микроструктуры 91

4.2. Согласование алгоритма расчета микроструктуры с				
гидродинамическим движением				
4.3. Динамика и пространственное распределение кристаллитов по				
размерам в наплавленном валике				
431 Оценка характерного размера кристацитов 96				
4.3.2. Влияние температурного режима на конечную микроструктуру				
и сравнение с экспериментальными данными 99				
4.4. Зависимость среднего размера кристаллитов наплавленного				
валика от параметров процесса 100				
4.4.1. Зависимость среднего размера кристаллитов от скорости				
охлаждения 100				
4.4.1. Зависимость среднего размера кристаллитов от величины				
контактного угла валика и подложки				
4.5. Выволы к главе 4104				
200000000000000000000000000000000000000				
заключение и выводы 105				
Список литературы 108				
Приложение. Публикации автора, в которых опубликованы основные				
результаты диссертации Публикации по теме диссертации в журналах Scopus,				
WoS, RSCI а также в Перечне изданий МГУ 121				
Иные научные труды по теме диссертации 122				

Введение

Актуальность темы.

Лазерная наплавка (ЛН) с коаксиальной подачей металлических порошков это перспективная аддитивная технология, позволяющая производить готовые металлические изделия и покрытия произвольной формы [1, 2, 3, 4] методом послойного нанесения. Для того чтобы конкурировать с традиционными технологиями и оправдать высокую цену установок, к ЛН предъявляют высокие требования по качеству наплавленного слоя, эффективности процесса и порошка. безотходностью использования дорогостоящего Для получения высококачественного конечного изделия необходим оптимальный выбор условий проведения технологического процесса. 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). Моделированию процесса ЛН уделяется повышенное внимание [5, 6, 7] как эффективной и относительно недорогой помощи при определении параметров воздействия, которые в итоге позволят получить требуемые и жестко заданные целевые характеристики наплавляемого слоя (геометрию, микроструктуру и т.п.). Задача поиска оптимальных режимов проведения процесса для достижения целевых параметров материала и изделия требует глубокого понимания происходящих физических процессов и явлений и разработки физикоматематических моделей с применением численных методов.

Математические модели процессов в зоне наплавки развиваются уже много лет [5, 6, 7] от простых аналитических оценок [8], до трехмерных численных моделей [9, 10], учитывающих практически каждый из процессов, происходящих в расплаве. Несмотря на существование множества моделей, их надежность до сих пор остается под вопросом для широкого спектра аддитивных технологий и материалов. До сих пор недостаточное внимание уделено исследованию фазовых

5

переходов (плавлению и кристаллизации) и микроструктуры синтезируемого материала. В согласованных моделях ЛН, фазовый переход (ФП) считается равновесным [11], что, в общем, не оправдано при лазерном воздействии. В более сложных многомасштабных моделях фазовые превращения рассчитываются не согласованно с температурным полем и профилем наплавленного слоя [12].

Как правило, изучение эволюции микроструктуры и параметрические [13, 14, 15. 16]. исследования проводятся экспериментально Однако, эмпирический подбор оптимальных параметров процесса крайне затруднителен и трудоёмок. Численное моделирование позволяет описать сложные сопряженные процессы, происходящие при ЛН с подачей порошков, и является экономичным способом снижения количества дорогостоящих экспериментов. Гидродинамический перенос является основным механизмом теплоотвода энергии ЛИ внутри ванны расплава и определяет форму наплавленного валика, поэтому его учет важен в контексте задач в лазерных аддитивных технологиях прямого нанесения. Однако теплоотвод твердой подложки, внешний по отношению к ванне расплава, также имеет большое значение. В этой связи, описание согласованных физических процессов наплавки адекватное на подложке, имеет принципиальное значение для целей предсказательного ЛН. Ha моделирования основе правильных физических представлений открываются перспективы управления процессами ЛН.

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:

6

- 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).
- Проведено численное исследование микроструктуры наплавленного слоя с учетом влияния сопряженных процессов тепломассопереноса и кинетики кристаллизации.

Научная новизна:

- 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.
- 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. Проведено исследование влияния гидродинамических явлений на микроструктуру наплавленного слоя при лазерной наплавке. 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. Также результаты могут быть 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 ЛН металлических порошков, опирающийся на согласованное решение уравнений Колмогорова-Авраами, теплопереноса И кинетики предсказывает немонотонное поведение температуры и конверсионных полей, позволяет получить микроструктурные свойства наплавленного валика с учетом реальной его геометрии при непрерывном сканирующем воздействии ЛИ 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) дополнительно 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 большем единицы, определяется динамикой самосогласованного температурного поля в процессе ЛН 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 ЛН 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 приведённых в приложении 1. Апробация работы проводилась на международных и российских конференциях, результаты диссертации докладывались автором на:

V Международной конференции «Лазерные технологии в сварке и обработке материалов», Кацивелли, Украина, 24-27 мая 2011;

IX международном научном семинаре «Математические модели и моделирование в: лазерно-плазменных процессах и передовых научных технологиях» пос. Петровац (Черногория) с 28 мая - 4 июня 2011г.

XIII Межвузовской научной школе молодых специалистов "Концентрированные потоки энергии в космической технике, электронике, экологии и медицине" 23-24 ноября, 2012 г., Москва;

XV Международной научной конференции "Физико-химические процессы при селекции атомов и молекул" (1-5 октября 2012, Звенигород)

XIX Международном симпозиуме по мощным лазерным системам и применениям, Стамбул, Турция, 10-14 Сентября, 2012

XI конференции ILLA 2014 "Лазеры и лазерно-информационные технологии: Фундаментальные проблемы и применения", г. Шатура, Россия, 29 сентября – 3 октября 2014 года

Международной научной конференции "Аддитивные технологии: настоящее и будущее". ФГУП ВИАМ. 2015, 2018.

8th, 9th международной конференции "Beam Technologies and Laser Applications", 21 - 24 сентября 2015, 17 - 19 сентября 2018, Санкт-Петербург.

Всероссийской Конференции "IV Национальный Суперкомпьютерный Форум (НСКФ-2015)" Россия, Переславль-Залесский, ИПС РАН, 24-27 ноября 2015 года

23ой международной конференции Advanced Laser Technologies (ALT-2015) 7–11 Сентября 2015 Фаро, Португалия

24ой международной конференции Advanced Laser Technologies (ALT-2016), 12-16 Сентября 2016 Голуэй, Ирландия

Международной конференции International Conference on Coherent and Nonlinear Optics / Lasers Applications and Technologies (ICONO/LAT-2016) 26 - 30 сентября 2016 года Минск Беларусь,

Первом Российском кристаллографическом конгрессе, 21 - 26 ноября 2016г Москва, Россия,

V, IV международной конференции «Информационные технологии и нанотехнологии» г. Самара - 25-27 Апреля 2017, 2018

Открытой конференции ИСП РАН им. В.П. Иванникова 30 ноября по 1 Декабря 2017 и 22-23 Ноября 2018 г. Москва Россия (ISPRAS-17, ISPRAS-18)

Научных семинарах ИПЛИТ РАН под председательством академика В.Я. Панченко и профессора В.С. Голубева, Шатуре, 2011-2018.

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.

Глава 1. Основные модели лазерной наплавки и сопутствующих физических процессов (литературный обзор).

Аддитивное производство (АП) - это комплекс технологий позволяющих создавать готовые детали путем их послойного синтеза. Одним из перспективных видов АП являются технологии с применением лазеров. Важными атрибутами лазерного АП являются лазерные технологии, системы автоматизированного производства, робототехника, проектирования И а также порошковая металлургия. Согласно базе данных Web of Science [17] число работ по лазерным аддитивным технологиям (ЛАТ) начало увеличиваться в середине 70-х годов, т.е. только через 15 лет после изобретения первого лазера в начале 60-х годов. В начале 80-х мощные газовые лазеры были адаптированы для нанесения покрытий, однако это не привело к широкому распространению этой технологии. Только выход на рынок мощных твердотельных лазеров с меньшей длинной волны (~1.06мкм) в середине 90-х, привел к резкому росту числа статей и патентов по АП, что коррелирует с резким ростом широкого распространения ЛАТ [18]. Это связано, прежде всего, с тем, что дорогие СО₂ лазеры, работающие на длине волны со сравнительно слабой поглощательной способностью на металлах, нашли только ограниченные применения в этой сфере. Только более эффективные твердотельные [19] и более дешевые диодные лазеры [20] смогли значительно расширить область применения лазеров для АП.

Особое место в АП имеют лазерные аддитивные порошковые технологии (ЛАПТ), использующие металлические порошки в качестве базового материала. Это сравнительно новые технологии, позволяющие создавать готовые детали с уникальными свойствами. Преимуществами таких технологий для практического применения по сравнению с традиционными (субтрактивными) технологиями считаются:

- Возможность создавать готовые детали сложной геометрии
- Уникальные, слоистые и функционально-градиентные изделия

- Безотходное производство
- Универсальность станков. Высокая степень автоматизации
- Короткий срок вывода продукции на рынок

Существуют две принципиально разные схемы реализации ЛАПТ. В первом случае оплавляется, предварительно нанесенный на подложку порошок, а во втором – порошок подается непосредственно в зону расплава.

Например, селективное лазерное спекание (СЛС) является двухступенчатым процессом: на подготовительном этапе разравнивающий ролик наносит на подложку слой порошка, а на втором этапе сканирующая система оплавляет порошок, создавая очередной слой детали. Использование двухступенчатого процесса имеет свои преимущества, такие как, например, высокая эффективность использования порошка. Однако вследствие низкой теплопроводности нанесенного порошка, такой способ ЛАПТ имеет узкое «окно» оптимальных параметров, что наряду с небольшими размерами зоны обработки, ограничивает область его применения.

Прямая лазерная наплавка (ЛН) производится в один этап путем подачи порошка в ванну расплава раздельно, либо совместно с ЛИ. ЛН имеет более широкое «окно» оптимальных параметров относительно двухступенчатого процесса. Раздельная подача (сбоку) применяется для повышения эффективности использования порошка, потому что его поток можно направить в нужную зону расплавленного слоя. Недостатком такого вида подачи можно считать низкую воспроизводимость геометрии слоя за счет небольших смещений потока порошка относительно лазерного пучка и зависимость от направления наплавки (условия подачи резко меняются при изменении направления движения лазерного пучка). Прямая подача порошка совместно с лазерным излучением является более универсальным способом реализации ЛН. Условия наплавки не зависят от направления движения, и процесс может проводиться даже на вертикальных поверхностях. Недостатком метода можно считать сравнительно низкую эффективность использования порошка, которую все же можно увеличить различными способами [21, 22]. В рамках данной диссертации исследуются в основном процессы при ЛН с соосной подачей металлического порошка и ЛИ на подложку, как технологии, имеющей большие перспективы, однако большинство выводов справедливы и для ЛН в целом.

Несмотря на промышленное применение ЛН, процесс до настоящего времени изучен недостаточно. Являясь сложным и многофакторным, ЛН физических явлений сопровождается множеством взаимосвязанных происходящих в потоке порошка до подложки и в ванне расплава на подложке. Для нахождения оптимальных, для конкретной задачи, параметров процесса проводятся пробные наплавки [23]. Это весьма долгий и дорогостоящий процесс, результаты которого, чаще всего, защищены коммерческой тайной. Аналитические оценки не учитывают всех факторов и дают возможность ограничить только экстремальные параметры процесса [7, р. 439, 24]. Для того что бы минимизировать количество пробных экспериментов, понять физику процесса и приблизиться к нахождению оптимальных параметров широко применяется численное моделирование ЛН. Оно предполагает совокупное рассмотрение максимального количества физических процессов и явлений, происходящих при ЛН.

Помимо многофакторности моделирование ЛН осложняется И разномасштабностью протекающих процессов. Масштаб готовой синтезированной детали - это макроуровень. Явления, происходящие на макроуровне (коробление, деформации, напряжения и т.п.), определяются, в основном, суммарным вкладом тепла, но также зависят от температурной истории. Спецификой этого уровня является циклическое воздействие лазера при послойном создании детали.

Динамика температуры определяется на мезоуровне в размерах одной дорожки (валика). Лазерный пучок оплавляет порошок и подложку и в процессе

14

сканирования создается ванна расплава. Время жизни ванны расплава измеряется долями секунды, а выращивание одной детали может длиться часами. Такое различие чрезвычайно сложно учесть в рамках одной согласованной модели. Гидродинамическое перемешивание, выделение скрытой теплоты плавления металла, сканирующее воздействие и множественные проходы - определяют специфику тепловой истории аддитивного процесса.

Качество создаваемого материала (наличие пор, микротрещин, непроплава и т.п.) определяется на микроуровне. Скоростная кристаллизация наплавляемого металла при ЛН приводит к созданию материалов отличных от полученных по обычной технологии [25]. Процессы разного уровня сильно зависят друг от друга, но в моделях, представленных в литературе, задача чаще всего решается на каждом уровне раздельно [26, 12], либо согласование имеет односторонний характер [27]. Несмотря на существование множества моделей, их надежность до сих пор остается под вопросом для широкого спектра аддитивных технологий и материалов.

Проблема повышения надежности численного моделирования (т.е. соответствия созданных расчетных моделей реальной ситуации) до сих пор является актуальной задачей. Для эффективного применения моделей требуется проведение тщательной верификации и валидации (V&V). Верификация в данном контексте - это проверка правильности реализации модели (т.е. ответ на вопрос правильно ли работает модель). Валидация - это оценка точности модели относительной системы. V&V – это итерационный процесс, который неотъемлемо сопровождает разработку надежных моделей.

Часто верификация численных моделей проводится путем сравнения численных решений с аналитическими результатами. Однако получить аналитическое решение сложной многофакторной задачи затруднительно. В таких случаях проводится сравнение моделей отдельных явлений (плавления, конвекции и т.п.) с их аналитическим описанием [28]. Такое согласование не дает гарантии работы модели для процесса в целом, однако позволяет быстро найти ошибки реализации.

Для валидации моделей ЛН проводится сравнение результатов расчетов с экспериментально измеренными параметрами валиков. В литературе встречается сравнение как отдельных (например, ширины наплавки) [29] так и совокупности выходных параметров с экспериментальными данными [11] для единичного набора входных параметров. Однако такой подход подтверждает правильность работы модели только в узком диапазоне входных параметров. Только сравнение всей совокупности выходных параметров процесса с экспериментальными данными для широкого диапазона параметров процесса позволяет говорить об универсальности разработанной модели и ее применимости для исследования процесса.

1.1. Моделирование процессов мезоуровня при ЛН

Многофакторность процесса ЛН затрудняет использование технологии и стимулирует развитие численных моделей. Качество полученного изделия сильно зависит от химического состава и микроструктуры наплавленного слоя. Химический состав в свою очередь определяется не только выбором материала порошка и подложки, но и степенью их перемешивания D и временем воздействия лазерного излучения. Высота h и ширина w валика – за один проход определяет скорость процесса создания готовой детали или покрытия требуемой высоты.

На рисунке 1 показано типичное поперечное сечение наплавленного валика и геометрические параметры, которые чаще всего используют для его описания. Помимо уже перечисленных параметров, показаны: α_c – контактный угол, глубина проплавления d, а также площади наплавки A_c и проплавления A_m .



Рисунок 1. Типичное поперечное сечение наплавленного валика и его геометрические параметры

Согласно [15] степень перемешивания можно определить как отношение площади проплавления подложки A_m к общей площади наплавленного слоя $A_c + A_m$:

$$D = A_m / (A_c + A_m) \tag{1}$$

Если ширина валика много больше глубины проплавления и высоты наплавки, а проплавление равномерно можно использовать более простую формулу:

$$D = d/(h+d) \tag{2}$$

Степень перемешивания, высота наплавленного слоя и средний размер кристаллитов, характеризующий микроструктуру, являются основными результирующими параметрами ЛН с подачей порошков и зависят от выбора входных параметров процесса, как показано на рисунке 2.

Первые работы по моделированию ЛН учитывали только основные процессы, происходящие в зоне взаимодействия лазерного излучения с подложкой. Например, в работе [8] приведена двумерная аналитическая оценка формы ванны расплава при помощи модели, учитывающей только тепловые процессы. Хоадли и Раппаз в [30] предложили модель учитывающую добавление частиц порошка, как составную часть общего процесса ЛН. Ванна расплава, представлялась в виде дуг окружности. Их модель позволила рассчитать ее форму продольном сечении по направлению сканирования и ее положение В Каплан и Гробоф [31] предложили относительно лазерного пучка. В аналитическую модель определения формы ванны расплава в поперечном сечении относительно сканирования для последовательно смещенных дорожек.

Входные параметры процесса					
Параметры	Параметры	Параметры	Параметры		
лазерного	подложки	подачи порошка	используемых		
излучения			газов		
Распределение и	Теплопроводность,	Угол подачи,	Скорость потока,		
интенсивность	плотность, теплота	соосность,	вязкость		
пучка, длина	плавления,	диаметр струи			
волны,	поглощательная	порошка, размеры			
поляризация,	способность,	И			
скорость	шероховатость	материал частиц			
сканирования и					
т.д.					



Физические процессы

Теплопроводность Гидродинамика Скоростная кристаллизация Термонапряжени



Выходные параметры Высота наплавки, параметры ванны расплава, ЗТВ Микроструктура, наличие трещин и пор Остаточные напряжения Шероховатость поверхности Функциональные качества Эффективность использования порошка

Рисунок 2. Основные параметры ЛН с коаксиальной подачей порошка.

Транспорт энергии и частиц до мишени является важным этапом ЛН с коаксиальной подачей порошка. Энергия поступает на подложку по двум каналам: через лазерное излучение, прошедшее сквозь поток порошка до подложки и через нагретые лазерным излучением частицы. В работе [32] показано, что влияние облака порошка на прошедшее до подложки лазерное излучение можно учесть по экспоненциальному закону Бугера-Ламберта-Бера. Распределение частиц в потоке газа в фокусе хорошо описывается функцией Гаусса [33]. В работе [34] подробно исследована газодинамика движения частиц порошка в потоке для коаксиального сопла и показана возможность получать требуемую геометрию наплавленного слоя, управляя расстоянием от сопла до подложки и параметрами излучения.

Ключевым вопросом при моделировании процессов на подложке при ЛН является эволюция свободной поверхности наплавленного слоя. В первых работах по наплавке задача решалась не согласовано, а граница задавалась [8, 30]. Сравнительно недавно стали применяться методы сквозного счета (например, метод функции уровня - level set method) для этих целей [9, 10, 11, 35, 29]. Метод позволяет не задавать границу поверхности, а отслеживать ее при помощи специальной функции [36, 37]. Также метод позволяет легко учитывать кривизну поверхности, для зависимых от нее функций и поверхностное поглощение излучения. Этот метод получил широкое распространение благодаря тому, что он преобразует сложную проблему отслеживания свободной поверхности в сравнительно простую задачу решения дифференциального уравнения в частных производных.

Последнее время значительное внимание уделяется (применительно к аддитивным технологиям) конвективному переносу тепла в ванне расплава. Исследования гидродинамического теплопереноса широко представлены в литературе для лазерной сварки [1, 38, 39, 40, 41, 42], СЛС [43, 44, 45], плазменной [29] и лазерной наплавки [9, 10, 11, 35, 46]. Самым простым способом конвективного учета переноса тепла является введение эффективной эффективный коэффициент теплопроводности. Эмпирическим путем теплопроводности определялся, например, при моделировании лазерной сварки аустенитной стали при помощи СО₂ лазера [47].

Двумерные модели лазерной наплавки, учитывающие конвекцию, предложены в работах [35, 46]. Показано, что основной движущей силой в ванне обусловленные расплава являются силы. зависимостью поверхностного натяжения от температуры (термокапиллярный эффект Марангони). В [46] изучено влияние размера, скорости и массового расхода частиц на параметры ванны расплава при наплавке порошка Н13 инструментальной стали при помощи СО₂ лазера. В работе [35] авторы показали, что инжектируемые частицы порошка нержавеющей стали 304 оказывают ощутимое воздействие на движение

19

свободной границы и скорость переноса тепла внутри ванны расплава для DMDсистемы UMR-LAMP. Скорость гидродинамического течения, в их расчете составляла 0.08 м/с без учета падения частиц и возрастала до 0.3 м/с с их учетом. В случае повышенного расхода порошка (более 40 г/мин) конвективным течением вследствие термокапиллярного эффекта можно пренебречь [48]. Повышенный расход порошка может вносить в процесс ряд негативных эффектов (таких как плазмообразование, снижение эффективности улавливания и т.д.), поэтому при ЛН чаще используется разреженные потоки частиц. В [29] представлена двумерная модель порошкового наплавления покрытий с использованием плазменной струи. Авторы моделируют нанесение нескольких последовательных слоев один на другой, глубина ванны расплава при этом порядка нескольких миллиметров. Показано наличие ярко выраженного вихревого движения потоков в ванне расплава.

Капиллярные эффекты являются определяющими для появления такого негативного эффекта как каплеобразование («balling-effect») при СЛС [49]. Не смотря на то, что гидродинамические процессы при лазерном воздействии исследуются довольно давно [11], отдельные эффекты при совместном действии лазерного излучения и добавления частиц порошка при контакте с подложками Проблема представлены В литературе слабо. учета контактного угла применительно к методам сквозного счета исследована достаточно хорошо [50], но в моделях ЛН он чаще всего не учитывается [51]. В общем, это не оправдано потому как контактный угол определяет ширину растекания расплава, которая имеет определяющее значение для основных параметров валика и качество полученного слоя. Большое значение контактного угла, например, приводит к образованию пор между последующими дорожками [52], а специфическая форма наплавленного валика и зоны проплавления определяет качество сцепления с подложкой [53].

Гидродинамический перенос является основным механизмом теплоотвода энергии ЛИ внутри ванны расплава и определяет форму наплавленного валика,

поэтому его учет важен в контексте задач в лазерных аддитивных технологиях прямого нанесения. Однако теплоотвод твердой подложки, внешний по отношению к ванне расплава, также имеет большое значение. В частности при ЛН валиков с низкой степенью перемешивания этот механизм диссипации лазерной энергии может быть доминирующим, а гидродинамическим переносом в ванне расплава часто пренебрегают [48].

При аддитивном выращивании деталей сложных геометрий можно выделить ряд «типовых» элементов, существенно отличающихся условиями теплоотвода из зоны обработки. Чаще всего встречаются исследования лазерной наплавки единичных дорожек на массивную подложку [10]. Есть, также, работы по выращиванию тонких стенок, например, в работе [51] показано, что дно ванны расплава в случае наплавления тонкой стенки меняет форму. Расширение представлений о влиянии геометрии теплоотвода на оптимальные параметры процесса является актуальной задачей.

Численное моделирование ФП широко применяется для исследования таких процессов как лазерная сварка [38, 42], лазерное термоупрочнение [54] и СЛС [55, 49]. При моделировании ФП сопровождающих ЛН металлов чаще всего считается, что процесс происходит при постоянной температуре плавления. Для получения простых оценок скрытой теплотой плавления чаше всего пренебрегают. В работе [56] по моделированию лазерной наплавки с раздельной подачей порошка показано, что скрытая теплота фазовых переходов оказывает значительное воздействие на поведение температуры. В особенности это заметно, когда пучок движется, потому что процессы плавления и кристаллизации происходят одновременно на небольшом объеме. При использовании сплавов температуру плавления определяют по фазовым диаграммам в зависимости от концентрации компонентов. Фазовая граница между жидкостью и твердым веществом часто может иметь сложную структуру и переходную зону, которая содержит как одну, так и другую фазу. Метод функций уровня в этом случае не подходит, так как четко выраженная граница ФП отсутствует. Выделение любой границы и задание на ней граничных условий является не тривиальной математической задачей, поэтому, чаще всего, применяются методы сквозного счета [57] с фиксированной сеткой.

В согласованных моделях ЛН, фазовый переход (ФП) считается равновесным [11], что, в общем, не оправдано при лазерном воздействии. В более сложных многомасштабных моделях фазовые превращения рассчитываются не согласованно с температурным полем и профилем наплавленного слоя [12]. Согласованные модели роста дендритов появились только недавно для процесса селективного лазерного плавления [58], а для ЛН модели сформулированы, но до сих пор не нашли решения [59].

Популярным является подход, представленный Бенноном в [60, 61], когда фазовый переход представляется через введение пористого промежуточного слоя. Все коэффициенты определяются в зависимости от количества той или иной фазы, а температура ФП определяется по равновесной фазовой диаграмме. В работе [62] Беннон подробно описывает математическую реализацию своего подхода. В [63] Пракаш развивает данный подход, увеличивая его численную стабильность. И наконец, Воллер [64] показал, что учет влияния скрытой теплоты фазового перехода может проводиться введением в уравнение теплопроводности обобщенного источникового члена.

Не смотря на то, что подход был разработан Бенноном для исследования сравнительно медленной кристаллизации водного раствора хлорида аммиака, он применяется для моделирования быстрого плавления и кристаллизации при лазерном воздействии в процессе сварки [38] и ЛН [9, 10, 11, 35, 46]. Авторы подхода указывали [60, р. 2168], что при моделировании быстрых процессов, температура фазового перехода может значительно отличаться от равновесной. В неравновесном случае также следует разделять плавление и кристаллизацию. Известно, что при быстром нагревании температура плавления может отличаться

на 10-50% от равновесной [65]. Однако чаще всего это игнорируется, что при лазерном воздействии, в общем, не оправдано.

Для ЛН имеет смысл использовать преимущества лазеров с радиальной поляризацией. Например, в работе [21] показано, что использование конических пучков может повысить эффективность процесса ЛН с коаксиальной подачей порошка на порядок. При использовании селективных зеркал существенного снижения выходной мощности по сравнению с резонатором с обычными зеркалами [66] не было обнаружено, что также является.

1.2. Основные модели кинетики нуклеации

Кинетика спекания при лазерном воздействии играет важную роль, а ее учет позволяет определять механизмы повышения устойчивости технологического процесса лазерного спекания [67]. В перечисленных выше моделях ЛН, кинетика фазовых превращений игнорируется и, как следствие, вызванные ими нелинейные эффекты, что позволяет однозначную не получить трактовку связи (профиль) геометрических И кинетических (скорость фронта фазового превращения) параметров фазового превращения с параметрами лазерного пучка (мощность, интенсивность, геометрические параметры) и порошковых смесей (размер, скорость и концентрация частиц). Также это не позволяет связать макроскопические параметры воздействия с результирующей микроструктурой наплавленного слоя.

Можно выделить два основных подхода к моделированию кинетики фазового превращения. Первый подход базируется на описании нестационарной эволюции ансамбля частиц новой фазы (центров) за счет элементарных актов присоединения и отрыва атомов (молекул). Количественной характеристикой превращения при этом является функция распределения кластеров по размерам, подчиняющаяся диффузионно-кинетическому уравнению типа Фоккера-Планка. Некоторые приближенные решения этого уравнения при различных упрощающих предположениях были получены многими авторами [68, 69].

Второй, более простой подход состоит в использовании геометриковероятностной модели Колмогорова [70]-Джонсона-Мейла [71]-Аврами [72] позволяющей получить явное выражение для объемной (KJMA), доли превратившейся фазы в зависимости от времени при известных скоростях зарождения и роста центров новой фазы. Этот приближенный подход удобен в случае, когда необходимо решать сопряженную задачу о теплопереносе и кинетике фазового превращения в расплаве. Ранее такой подход применялся, например, для исследования процесса затвердевания микроскопических капель расплава при интенсивном охлаждении [73]. Показана возможность аморфизации металлов при быстром охлаждении [74]. Такая возможность связывается с увеличением вязкости и как следствие уменьшение или полная остановка зародышеобразования при достижении больших переохлаждений. Некоторые аспекты кинетики кристаллизации были рассмотрены в работе [75] для процесса СЛС.

Модель КЈМА может применяться в широком диапазоне скоростей изменения температуры. В случае медленного охлаждения диффузионное перемешивание материала может служить ограничивающим фактором, тогда частота зародышеобразования зависит не только от температуры, а еще и от размера кристаллитов [76]. В работе [77] модель применялась для описания рекалесценции переохлажденной воды в системах хранения энергии. Для высоких скоростей охлаждения модель применялась, например, для расчета воздействия компрессионных плазменных и лазерных потоков на кремний [78, 79]. В работе [79] авторы сравнивают три модели для кристаллизации кремния, расплавленного импульсным лазерным излучением: модель Стефана, нелинейную модель с заданным переохлаждением на фазовой границе и кинетическую КЈМА. Показано, что кинетическая модель лучше всего соответствует кристаллизации кремния под действием экспериментальным данным по импульсного лазерного излучения из работы [80].

24

1.3. Уравнение Колмогорова-Джонсона-Мейла-Аврами

Модель КЈМА хорошо описана в литературе [81, 82]. Она базируется на четырех первоначальных допущениях [81, р. 13]. Цитируя автора можно заключить, что первым постулатом теории является неограниченность объема материнской фазы. Это означает, что влиянием стенок реального физического объема можно пренебречь; иначе говоря, средний объем образующихся зерен бесконечно мал в сравнении с объемом сосуда. Вторая предпосылка - это пуассоновский закон нуклеации. Центры кристаллизации, в этом случае, возникают в материнской среде случайно и равномерно с некоторой скоростью зародышеобразования J(t), на единицу маточного объема в единицу времени, зависящей в общем случае от времени. Третья предпосылка заключается в геометрическом подобии всех зародышей. Каждый кристаллит растет независимо от места и «даты рождения» в виде кристаллита единой для всех выпуклой формы и ориентации, сохраняющихся во времени. Четвертая предпосылка это единство скорости роста, т.е. в каждый момент времени скорости роста одинаковы для всех имеющихся в этот момент зародышей.

Уравнение КЈМА, устанавливает связь между объемными долями новой фазы и известными кинетическими характеристиками процесса кристаллизации (скорости зарождения и роста кристаллитов). Согласно теории КЈМА объемная доля закристаллизованной области подчиняется уравнению:

$$b = 1 - exp(-b_{ext}). \tag{3}$$

Здесь b_{ext} - это расширенная доля новой фазы, которая является отношением, так называемого, расширенного объема к полному объему кристаллизующейся ячейки. Расширенный объем получается из суммы объемов всех виртуальных частиц появившихся в материнской фазе. Виртуальные частицы появляются как вне, так и внутри закристаллизованной массы. Они растут свободно, как взаимопроникающие сферы, т.е. без учета пересечений друг с другом (Рисунок 3). На рисунке 3 видно, что b_{ext} дважды учитывает пересеченные области. Также в расширенный объем входят, так называемые

фантомные частицы (показаны серым цветом) - это частицы, которые появляются и растут внутри закристаллизованной области.



3. Расширенный Рисунок объем дважды учитывает заштрихованные области. Фантомные частицы показаны серым цветом. Только что зарожденные частицы показаны Только что зарожденные частицы показаны маленькими кругами.



Рисунок 4. Расширенный объем дважды учитывает заштрихованные области. Фантомные частицы показаны серым цветом. маленькими кругами.

Реальные частицы (Рисунок 4) останавливают свой рост на границе с другими частицами, но продолжают расти в свободную область. Здесь серым цветом показаны частицы, полностью остановившие свой рост из-за блокировки другими частицами. Колмогоровым, при помощи геометрико-вероятностного подхода, строго математически была выведена связь реальной и расширенной объемных долей, описываемая уравнением (3). При расчете расширенной доли фантомные частицы. Формула (3) новой фазы учитываются проверена многочисленными численными экспериментами [83, 84] по методу Монте-Карло.

Для расширенной доли новой фазы можно записать:

$$b_{ext} = \sigma \int_0^{t_1} \tilde{J}(t) v(t) \, dt, \tag{4}$$

где v(t) - объем расширенной зоны, $\tilde{I}(t)$ - скорость зародышеобразования, а σ – коэффициент формы. Если считать, что частицы появляются в течение всего процесса кристаллизации с начальным радиусом r^* , а затем растут со скоростью $G(\tau, t)$ для реальной доли получаем формулу:

$$b(t) = 1 - \exp\left\{-\sigma \int_0^t \tilde{f}(t) \, (r^* + \int_\tau^t G(\tau, t) d\tau)^n dt\right\}.$$
(5)

Здесь *n* – константа Аврами которая зависит от механизма нуклеации. Случай зародышеоразования происходящего в течение всего процесса кристаллизации соответствует α-модели Колмогова [81, p. 22].

Если, при наличие примеси, каждая примесная частица является активным центром зарождения, тогда рост новой фазы происходит безбарьерно на уже существующих ядрах и уравнение (3) модифицируется к виду:

$$b(t) = 1 - exp\left\{-\sigma n_0 \left(r_0 + \int_{\tau}^{t} G(\tau, t) d\tau\right)^n dt\right\},\tag{6}$$

где n_0 и r_0 – концентрация и радиус активных примесных частиц.



Рисунок 5. Разбиение плоскости на многогранники Вороного

Этот случай соответствует, так называемой, β - модели Колмогорова [81, р. 21] или «pre-existed nuclei» в зарубежной литературе. В этом случае окончательное распределение частиц можно представить в виде многогранников Вороного (Рисунок 5). Применение β - модели оправдано, когда в роли примесных частиц выступают активные наночастицы [85]. В этой работе Черепанов и

Попов показали что, при наличии таких активных центров кристаллизацией на материнской фазе можно пренебрегать.

Возможность применения теории КЈМА в случае отступления от изначальных посылов теории описана в литературе. Например, для неоднородного поля температуры, можно предположить, что система состоит из областей с одинаковой температурой [86].

1.3.1. Гомогенная и гетерогенная, объемная и поверхностная нуклеация

Теория КЈМА предполагает, что известны скорость роста и скорость зародышеобразования. При быстрых лазерных процессах роль диффузионного

перемешивания материала не значительна. Кристаллизация определяется только температурной историей и переохлаждением, а диффузия не является ограничивающим фактором. Важным также является форма зародышей, которая определяет значение константы Аврами *n* и константы формы *o*.

Зародыши новой фазы могут расти в различной мерности, как показано на рисунке 6. В зависимости от мерности роста фазы и вида зародышей изменяется n = 1, 2, 3 и σ . В работе [87] Шур с соавторами показали, что в случае фазовых переходов в ограниченном объеме может происходить «геометрическая катастрофа» и меняться мерность роста зародышей.



Рисунок 6. Схема, из работы [87] показывающая размерность роста. (а) рост ламелей в ограниченной среде (n=1), (b) рост цилиндрических доменов в конечной среде (n=2), (c) рост сферических частиц в объеме (n=3).

С точки зрения классической теории нуклеации (КТН) выражение для скорости зародышеобразования имеет вид [88]:

$$\tilde{J}(T) = N_0 \frac{k_B T}{h} exp\left\{-\frac{E_a}{k_B T}\right\} exp\left\{-\frac{E_G(T)}{k_B T}\right\},\tag{7}$$

где k_B – постоянная Больцмана, h - постоянная Планка, E_a – энергия активации перехода атома через границу раздела фаз, $E_G(T)$ – энергия Гиббса, T – температура, N_0 – число мест зарождения в чистом металле. В случае объемного гомогенного зародышеобразования $N_0 = N_0^V$. Энергия Гиббса - это энергия

необходимая для создания кластера критического размера. Для сферических частиц ($n = 3, \sigma = 4\pi/3$) эта энергия равна:

$$E_G(T) = \frac{16\pi\gamma^3\Omega^2}{3(\Delta S\Delta T)^2} \tag{8}$$

здесь γ – поверхностное натяжение, Ω – объем решетки, ΔS - изменение энтропии, ΔT – переохлаждение.

Основной трудностью применения КТН является определение поверхностного натяжения, которое не может быть получено напрямую из экспериментов. Также трудность представляет сильная зависимость скорости нуклеации от значений γ при заданном переохлаждении. Однако согласованный характер решения уравнений кинетики и теплопроводности приводит к тому, что с изменением γ процесс происходит при практически той же скорости нуклеации, однако, на другом переохлаждении. Это повышает стабильность модели относительно входных данных.

Гомогенное образование зародышей в объеме может происходить при больших переохлаждениях, только при отсутствии примесей и если граница ванны расплава не влияет на процесс кристаллизации. В случае же поверхностного ($n = 2, \sigma = \pi$) роста зародышей на подложке $N_0 = N_0^S$, а энергия Гиббса равна [88]:

$$E_G(T) = \frac{\pi d_0 \gamma^2 T_m}{\rho L \Delta T}.$$
(9)

здесь d_0 – параметр решетки, ρ – плотность расплава, L – теплота плавления, T_m – температура плавления, ΔT – переохлаждение.

Часто материнская фаза имеет различные примеси, которые могут инициировать фазовый переход. Если кристаллизация происходит на крупных нерастворимых примесях, то вместо N_0 в уравнение (7) используется число мест зарождения вокруг примесных частиц [89]:

$$N_{get} = 4\pi r_p^2 n_p \Omega^{-2/3},$$
 (10)

где r_p – радиус примесных частиц, а n_p их концентрация.

В случае такого гетерогенного зародышеобразования изменяется энергия Гиббса в зависимости от смачивания примеси [88, р. 97]:

$$E_{c}^{get}(T) = \Psi(\varphi) E_{c}(T), \tag{11}$$

$$\Psi(\varphi) = 1/4 * (1 - \cos(\varphi))^2 (2 + \cos(\varphi))$$
(12)

где φ – угол смачиваемости нерастворимой примеси. Гетерогенная кристаллизация может происходить как на поверхности ($n = 2, \sigma = \pi$), так и во всем объеме ($n = 3, \sigma = 4\pi/3$). В случае объемного роста для расчета $E_G(T)$ используется уравнение (8), в случае же поверхностного - уравнение (9).

Часто встречающиеся примеси - это оксиды металов. Смачиваемость таких примесей в чистом металле является величиной порядка 120 – 160 [90, 91]. Формула (12) показывает уменьшение энергии Гиббса на величину порядка 20% при таких значениях смачиваемости. Это означает, что фазовый переход при наличие таких примесей, будет происходить уже при степени метастабильности (перегреве/переохлаждении) на 20% меньшей, чем при их отсутствии.

Чистота материала является определяющим фактором для выбора механизма кристаллизации. При наличии активных примесей кристаллизация поисходит без барьерно, а влиянием других примесей и гомогенного зародышебразования можно пренебречь [85]. Микроструктура при этом будет определяться в первую очередь распределением примеси, а не условиями кристаллизации.

В теории КЈМА предполагается, что все виртуальные частицы, находящиеся материнской фазе, растут с одинаковой скоростью в каждый момент времени. Скорость роста G(T) определяется выражением:

$$G(T) = d_0 \frac{k_B T}{h} exp\left\{-\frac{E_a}{k_B T}\right\} exp\left\{-\frac{\Delta S \Delta T}{k_B T}\right\},\tag{13}$$

где $\Delta S = \frac{L_m}{N_a T_m}$ – энтропия кристаллизации. Чаще всего температура при которой происходит процесс меняется, что приводит и к изменению скорости роста зародышей. Отметим, что изменяющееся во времени скорость роста не противоречит посылам теории КЈМА описанных выше.

1.4. Анализ микроструктуры наплавленного слоя

Большинство исследований развития микроструктуры это экспериментальные работы [13, 14, 92, 93], однако эмпирический подбор параметров крайне затруднителен и трудоёмок. Поиск оптимальных режимов проведения процесса для достижения целевых параметров материала и изделия требует более глубокого понимания физических процессов и разработки адекватных физико-математических моделей с применением численных методов.

С одной стороны применение уравнения КЈМА удобно в случае, когда необходимо решать самосогласованные уравнения теплопереноса и кинетики фазового превращения в расплаве. С другой - уравнение КЈМА дает интегральное изменение доли новой фазы и такой макроскопический подход не позволяет отследить изменение микроструктуры в процессе кристаллизации. Для расширения теории, Креспо и соавторы [94, 95] предложили модель расчета уравнения КЈМА в приближении среднего поля. Метод, названный ими, *популяционное уравнение КЈМА (РКЈМА)* [95] позволяет проследить динамику размеров кристаллитов, а также дает возможность оценить их средний размер. Под популяцией в модели понимаются частицы, родившиеся за один промежуток времени dt, т.е. одновременно. Если известна скорость зародышеобразования реальных частиц J(T), то их число в единице объема будет равно:

 $n = J(T)dt, \tag{14}$

Процесс представляется, как изменение размеров частиц в популяциях, которое подчиняется уравнению КЈМА. Считается, что только доля реальных частиц от всей популяции *n* изменяет свой размер, остальная же часть остается блокированной другими частицами и размер не меняет (рисунок 4). Более

подробно модель PKJMA использованная в работе для расчета динамики микроструктуры при СЛН будет описана в п. 4.1.

Модель зависимого от радиуса механизма роста (RDTP) [94] используется, если процесс кристаллизации происходит на активных мелких примесных частицах, который описывается уравнением (6). В этой модели считается, размер частиц определяется изначальным распределением примеси. В таком случае то, что кристаллит меньше других означает, что у него было больше соседних кристаллитов, которые ограничивали его рост, соответственно его скорость роста и в дальнейшем будет ниже. Средний же радиус кристаллитов в этом случае зависит от концентрации активных примесей.

В работе [76] представлено аналитическое решение уравнения КЈМА в асимптотическом приближении для заданной скорости охлаждения. Исследованы диффузионный и граничный режимы роста. Первый предполагает зависимость скорости зародышеобразования и роста частиц только от температуры, а второй также и от радиуса частиц (причем скорость убывает при увеличении радиуса). Показано, что не зависимо от режима роста средний размер кристаллитов убывает с увеличением скорости охлаждения. Отличие составляет только величина изменения: в случае диффузионного роста размер зависит от скорости охлаждения как $r \sim \dot{T}^{-1/2}$, а в случае поверхностного как $r \sim \dot{T}^{-1}$. Такое поведение верифицировано только для низкой скорости охлаждения и больших размеров кристаллитов.

В работах [96, 97] предложены простые с точки зрения математической реализации модель с использованием метода Монте-Карло, для случаев постоянной [96] и монотонно изменяющейся температуры [97]. Цель метода отследить взаимодействие каждого кристаллита с окружающими частицами, которое должно соответствовать уравнению КЈМА. Эти модели позволяют наглядно представить итоговое распределение кристаллитов.

1.5. Выводы

ЛН является сложной и многофакторной технологией создания готовых деталей. Показано, что задача адекватного контроля и управления ЛН требует экспериментальной трудоемкой дорогостоящей работы. Численное И моделирование может служить как эффективный И экономичный вспомогательный способ исследования и оптимизации процесса наплавки. Для того что бы понять взаимосвязь происходящих явлений требуется учет всей совокупности параметров процесса (характеристики излучения и потока порошка). При математической формализации задачи необходимо решение сложной системы самосогласованных уравнений для трехмерного пространства. Проблема соответствия созданных моделей реальной ситуации также является актуальной задачей. Требуется проведение тщательной верификации и валидации модели. 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. Расширение представлений о влиянии геометрии теплоотвода на оптимальные параметры процесса является актуальной задачей.

Глава 2. Связанные процессы теплопереноса и фазовых превращений при лазерной наплавке

Для применения технологии ЛН необходимо определить параметры процесса, при которых обеспечиваются требования к качеству наплавленного валика, к форме его поперечного сечения и другим выходным параметрам. Точное аналитическое решение этой задачи не существует, и, поэтому, чаще всего ее решают экспериментально. В целях снижения необходимого количества работы наиболее эффективным экспериментальной является создание компьютерной модели, воспроизводящей физические процессы, которые оказывают влияние на формирование ванны расплава и наплавляемого валика.

Фазовые термоупругие (в И TOM числе остаточные) напряжения, возникающие при затвердевании наплавленного слоя, определяют его качество (пористость, образование трещин) и долговечность. Вследствие локальности лазерного воздействия могут возникать большие термонапряжения, которые приводят к отслаиванию наплавленных покрытий, поэтому температурное поле в предсказательного зоне наплавки является важным параметром ДЛЯ ЛН. Большое значение также имеет моделирования динамика фазовых превращений в процессе охлаждения расплава т.к. она оказывает значительное окончательную микроструктуру свойства влияние на И механические наплавленных слоев.

Рассмотрим процесс наплавления одиночного валика при ЛН с коаксиальной подачей металлического порошка. В начале процесса под действием лазерного излучения формируется небольшая ванна расплава, которая захватывает падающие частицы порошка, тем самым формируя наплавленный валик. Частично поглощаясь и рассеиваясь в потоке порошка, только часть энергии лазерного излучения достигает поверхности напрямую. Поглощенная в потоке энергия излучения тратится на нагревание и плавление частиц, которые в зависимости от температуры могут либо добавлять, либо забирать тепло ванны

расплава в зоне наплавки. Форма ванны расплава на подложке зависит не только от общего баланса энергии, а также от профилей лазерного пучка и пространственного распределения частиц в потоке порошка.

B данной развита главе методика численного моделирования температурного поля с учетом кинетики формирования новой фазы, возникающей под действием сканирующего лазерного пучка на поверхности подложки. Формирование температурного поля в зоне наплавки происходит за счет поглощения энергии излучения, отвода тепла, а также выделения (или поглощения) скрытой теплоты фазового перехода. Процесс формирования твердой фазы трактуется как фазовый переход первого рода, происходящий за счет образования зародышей с последующим распространением их границ в метастабильной неоднородной среде. Математическая модель, включает в себя сопряженные нелинейные уравнения теплопроводности и кинетики фазового превращения [98]. Для описания кинетики фазового превращения используется статистическая теория КЈМА.

Численное исследование наплавленных слоев при ЛН требует решения дифференциальной системы уравнений для трехмерного пространства совместно с интегралом по температурной истории для расчета доли превращенного вещества [99]. Решение такой системы занимает значительное время и невозможно (в разумное время) без применения параллельных алгоритмов. Для этого требуется создание программы расчета, оптимально масштабируемой на имеющееся число расчетных узлов [100].

2.1. Термо-кинетическая модель ЛН с подачей порошка

Процесс послойного нанесения ультрадисперсных частиц порошка при лазерной наплавке технически реализуется при помощи дозаторов, подавая (коаксиально) частицы порошка газовым потоком в зону действия излучения непрерывного лазера. Процесс ЛН с подачей порошка схематически показан на Рис. 7.



Рисунок 7. Схема СЛН с коаксиальной подачей порошка.

В начальный момент времени на твердую поверхность мишени падает лазерный пучок, движущийся от некоторой точки x₀ в положительном направлении оси x со скоростью V_{scan}. Считаем, что твердая фаза металла контактирует с газом. Одновременно, в область воздействия лазерного излучения (ЛИ) газовым потоком вносятся монодисперсные частицы (для простоты, сферической формы) однокомпонентного порошка с радиусом r_p и температурой Лазерное излучение, проходящее сквозь поток T_0 . частиц, селективно поглощается и рассеивается движущимися частицами порошка, а также поглощается И рассеивается на поверхности металлической подложки. Поглощенная частицами энергия тратится на их нагревание и расплавление. Часть энергии теряется на теплоотвод в газ и радиационное охлаждение. Энергия, поглощенная поверхностью и перенесенная на поверхность частицами, расходуется на нагревание поверхностного слоя мишени.

Те участки поверхности, которые поглотили достаточное количество энергии, расплавляются на ту или иную глубину, образуя ванну расплава. В дальнейшем, когда лазерный пучок покидает эти участки, происходит их остывание за счет теплопередачи в непрогретые части образца, последующая кристаллизация и формирование наплавленного слоя. Распределение интенсивности в лазерном пучке и профили концентрации порошка в струе
считаются гауссовыми. Время плавления частиц порошка, попадающих в ванну расплава, порядка 10⁻⁴ сек. [11], поэтому считаем, что они мгновенно расплавляются. Ограничимся значениями интенсивности излучения, при которых практически отсутствует испарение частиц порошка и поверхностного слоя подложки.

Математическая постановка задачи включает в себя сопряженную систему уравнений для эволюции свободной поверхности границы раздела фаз жидкость - газ (Ж - Г), переноса энергии для газовой, жидкой и твердой фаз и кинетики фазовых превращений (плавления и кристаллизации).

2.1.1. Коэффициент поглощения излучения микрочастицей

Общую энергию ЛИ, поглощенную микрочастицей сферической формы нужно вычислять с учетом неравномерного поглощения по поверхности частицы, угла падения излучения на частицу и поляризации излучения (закон Френеля), через двойной интеграл по азимутальному и полярному углам

Пусть для сферической частицы K(θ, φ) - коэффициент поглощения излучения (по закону Френеля) в данной точке поверхности частицы, где θ - угол падения излучения на поверхность, φ - азимутальный. Зависимость от азимутального угла обусловлена направлением вектора поля. Для K(θ, φ) имеем:

$$K(\theta, \varphi) = (1 - R_s(\theta)) \sin^2 \varphi + (1 - R_p(\theta)) \cos^2 \varphi$$
(15)

Здесь R_s и R_p коэффициенты отражения *S* и *P*-волн, соответственно. Они определяются как отношение интенсивностей отраженной и падающей волн [101, pp. 593-595]:

$$R_{s} = \frac{\left(A - \cos\theta\right)^{2} + B^{2}}{\left(A + \cos\theta\right)^{2} + B^{2}}$$
(16)

$$R_{P} = R_{S} \frac{\left(A - \sin \theta \cdot tg\theta\right)^{2} + B^{2}}{\left(A + \sin \theta \cdot tg\theta\right)^{2} + B^{2}}$$
(17)

$$R(\theta = 0) = \frac{(n-1)^{2} + n^{2}m^{2}}{(n+1)^{2} + n^{2}m^{2}}$$

$$A^{2} = \frac{1}{2} \bigg[\left(n^{2} \left(1 - m^{2} \right) - \sin \theta^{2} \right) + \sqrt{\left(n^{2} \left(1 - m^{2} \right) - \sin \theta^{2} \right)^{2} + 4n^{4}m^{2}} \bigg],$$

$$B^{2} = \frac{1}{2} \bigg[- \left(n^{2} \left(1 - m^{2} \right) - \sin \theta^{2} \right) + \sqrt{\left(n^{2} \left(1 - m^{2} \right) - \sin \theta^{2} \right)^{2} + 4n^{4}m^{2}} \bigg].$$
(18)
$$(19)$$

где *n* и *m* - действительная и мнимая части комплексного показателя преломления в представлении $\overline{n} = n(1-im)$. Распределение плотности поглощенной мощности I_a на поверхности микрочастицы имеет вид:

$$I_a = I_0 \cdot K(\theta, \phi) \cdot \cos \theta \tag{20}$$

Мощность, поглощенная всей частицей, вычисляется интегрированием распределения поглощенной мощности I_a / I₀ по поверхности частицы:

$$W_{a} = I_{0} \iint K(\theta, \phi) \, dS_{\perp}$$
⁽²¹⁾

Элемент поверхности в сечении перпендикулярном пучку $dS_{\perp} = R^2 \sin \theta \cos \theta \, d\theta \, d\phi$. Пределы интегрирования $0 \le \theta < \pi/2$, $0 \le \phi < 2\pi$.

$$W_{a} = I_{0}R^{2}\int_{0}^{\pi/2}\int_{0}^{2\pi}K(\theta,\phi)\cos\theta\sin\theta\,d\phi\,d\theta \qquad (22)$$

Воспользовавшись (15), для W_a имеем окончательно:

$$W_{a} = k_{F} \pi R^{2} I_{0},$$

$$k_{F} = \int_{0}^{\pi/2} sin(2\theta) \left\{ 1 - \frac{R_{S}(\theta) + R_{P}(\theta)}{2} \right\} d\theta$$
(23)

где k_F – усредненный по частице коэффициент поглощения излучения ($k_F \in (0,1)$), равный отношению мощности, поглощенной частицей, к падающей на нее мощности излучения и является функцией комплексного показателя преломления частицы. Значения k_F , рассчитанные по формуле (23), для ряда металлических частиц, приведены в таблице 1.

Таблица 1. Рассчитанные коэффициенты поглощения				
излучения сфе	ерическим	и микроча	стицами ра	азличных
металлов.		_		
Метал	λ, μ	$\overline{n} = n(1 - im)$		kr %
Wierdan		n	n∙m	K F, 70
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
Золото	10	9.4	60.5	1.3
Медь	10.6	13	64	1.6
	1.06	0.3	6.4	3.2
	0.4	1.5	2	55.7
Никель	10.6	8.9	22.5	7.2
	1.06	3	5.2	29.8
Серебро	10	13	54	2.2
Титан	10.6	8.2	19.3	8.7
	1.06	3.5	4	40.1
Хром	10	8.2	31.3	3.9

Видно, что в некоторых случаях частицы могут поглощать значительную часть энергии ЛИ, в других же - поглощение незначительно.

2.1.2. Потери энергии излучения связанные с взаимодействием с частицами при коаксиальной подаче порошка

Рассмотрим теперь ослабление ЛИ за счет поглощения и рассеяния частицами порошка. Если $\sigma_a = \pi r_p^2$ - эффективное сечение поглощения, а N - концентрация частиц порошка, для коэффициента ослабления ЛИ имеем $\gamma = \pi r_p^2 N$. Тогда, используя закон Бугера - Ламберта, для плотности мощности, дошедшей до мишени I_t можно записать:

$$I_{t} = I_{0} \exp(-\xi),$$

$$\xi = \pi r_{p}^{2} NL,$$
(24)

где *L* - расстояние от сопла до мишени.

Доли мощности, поглощенной частицами порошка *I*_a и рассеянной ими *I*_s вычисляются по формулам:

$$I_{a}/I_{0} = k_{F} [1 - \exp(-\xi)], \qquad (25)$$

$$I_{s}/I_{0} = (1 - k_{F})[1 - \exp(-\xi)]$$
(26)

На рисунке 8 приведены распределения падающего излучения (плотность мощности I_0 , BT/см²) как функция параметра ξ по разным каналам: а) излучение, достигшее мишени I_t ; б) доля излучения, поглощенная микрочастицами I_a ; в) доля излучения, рассеянная микрочастицами I_s . Записанные в безразмерном виде все рассчитанные величины зависят только от двух аргументов: ξ и k_F. Зависимости, приведенные на рисунке 8 для трех величин k_F дают представление обо всем спектре возможных ситуаций по различным материалам и длинам волн излучения (см. таблицу 1).



Рисунок 8. Распределение мощности падающего излучения по разным каналам, как функция параметра $\xi = \pi r_p^2 N L$

В практике лазерной наплавки порошков часто используют такой параметр, как массовый расход порошка

$$\dot{m} = \rho_{p} \frac{4}{3} \pi r_{p}^{3} NVS.$$
 (27)

Здесь ρ_p - плотность вещества частиц порошка, V - скорость инжекции порошка, определяемая скоростью сопутствующего газа, S - площадь сечения

струи порошка. Однако, как видно из формул (24) и (25), физические параметры процесса на подложке определяются не ṁ, a ξ причем

$$\xi \sim \left(\frac{L}{S}\right) \frac{\dot{m}}{\rho_{\rm p} r_{\rm p} V_{\rm p}},\tag{28}$$

где величины в скобках характеризуют чисто геометрические параметры установки. Проведем мысленные сравнительные эксперименты на одной установке (L и S одинаковы). Оказывается, что, при прочих одинаковых значениях параметров (\dot{m} и ρ_p), условия проведения ЛН для различных радиусов (r_p) и скоростей (V_p) частиц могут заметно отличаться (согласно формулам (24) и (25)). Это прямо указывает на возможность управления параметрами процесса на подложке, путем, например, согласованного изменения размеров частиц и скорости подачи порошка в зону наплавки.

2.1.3. Описание свободной границы

Для моделирования движущихся границ применяется метод функций уровня (level-set method) [36, 37], граница изначально не задается, а отслеживается при помощи функции уровня (Рисунок 9).

$$\phi(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{t}) = \pm \text{dist}$$
⁽²⁹⁾

где dist – наименьшее расстояние до границы металла, а знак зависит от положения точки внутри, либо снаружи металла. Значения задаются для всей расчетной области, и движение границы металла прослеживается, как изменение функции уровня определенным уравнением. Задача нахождения границы сводится к решению уравнения в частных производных. В общем случае, когда эволюция функции уровня определяется подачей металлических частиц и гидродинамическим течением жидкости, уравнение для функции уровня имеет вид:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{F} \cdot \nabla \phi = 0, \tag{30}$$

где **F** - скорость движения свободной границы (Рисунок 9), которая имеет вид:

$$\mathbf{F} = \mathbf{u} + \vec{n} \cdot F_p(x, y, z, t),$$

$$F_p = \alpha \frac{8\dot{m}}{\pi \rho_p d_j^2} exp(-\frac{8 \cdot r^2}{d_j^2})$$
(31)

где F_p - движение границы металла за счет инжекции частиц порошка, \vec{n} нормаль к поверхности, **u** - локальное гидродинамическое движение жидкого металла, α_p - эффективность захвата частиц порошка поверхностью, \dot{m} - расход порошка, ρ_p - плотность порошка, d_j - диаметр струи порошка.



Рисунок 9. Схематичное представление функция уровня

2.1.4. Балансное уравнение для температуры

Для бинарной (двухфазной) системы уравнение теплопереноса с ФП может быть записано в виде [64]:

$$c\rho(\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}T)) = \nabla \cdot (\lambda divT) + \rho(1 - f_1)\Delta c \frac{\partial T}{\partial t} - \rho L \frac{\partial f_1}{\partial t}$$
(32)

В уравнении энергии (32) первое слагаемое в правой части характеризует перенос тепла за счет теплопроводности (c , λ и ρ - теплоемкость, теплопроводность и плотность среды соответственно), следующие два - мощность тепловых источников при ФП, (L – теплота плавления). $f_l(x, y, z, t) = M_l / M_0$ массовая доля жидкой фазы, образовавшейся/исчезнувшей в точке к моменту времени t (M_0 и M_l – соответственно масса всего расплава и жидкой фазы. $f_l = 0$ для твердой фазы, $f_l = 1$ для полностью превратившей фазы и для двухфазной зоны может изменяться от нуля до единицы). В ванне расплава присутствуют значительные градиенты температуры и как следствие конвективные потоки неоднородны. В этом случае число Пекле является функцией координаты:

$$Pe(V(x, y, z)) = \frac{c\rho V(x, y, z)L_T}{\lambda}$$
(33)

где *L*_{*T*} - характерный размер.

Согласно работам по моделированию лазерной наплавки стальных порошков [10, 35, 46], максимальная скорость течения в ванне расплава равна 0.03м/с и направлена вдоль поверхности валика. Основной движущей силой являются силы Марангони определяющиеся градиентом поверхностного натяжения, которое является функцией температуры. Поэтому наиболее сильные течения находится на границе лазерного пучка, где градиент температуры максимален. В этом случае можно оценить число Пекле:

$$Pe(V_{max}) = \frac{c\rho V_{max}l}{\lambda} = \frac{800\frac{J}{kgK} \cdot 7800\frac{kg}{m^3} \cdot 0.03\frac{m}{c} \cdot 0.5 \cdot 10^{-3}m}{33\frac{W}{mK}} = 2.836,$$
 (34)

здесь в качестве характерной длины *L*_{*T*}, мы используем длину ванны расплава *l*.

Видно, что гидродинамический перенос на поверхности валика играет значительную роль, сравнимую С влиянием теплопроводности. Роль гидродинамических течений в ванне расплава в переходном слое между жидкостью и твердым веществом значительно снижается. Это происходит за счет резкого снижения скорости течения в данной зоне. На границе ванны расплава выполняется условие непротекания и скорость равна нулю. Согласно этим же работам [10, 35, 46] скорость течения в переходной зоне кристаллизации между жидкостью и твердым телом значительно меньше максимальной (~0.003м/с) и направленна вниз. В этом случае характерная длина равна глубине ванны расплава $L_T = d$, а число Пекле будет значительно меньше:

$$Pe(V_{side}) = \frac{c\rho V_{side}d}{\lambda} = \frac{800\frac{J}{kgK} \cdot 7800\frac{kg}{m^3} \cdot 0.003\frac{m}{c} \cdot 100 \cdot 10^{-6}m}{33\frac{W}{mK}} = 0.057,$$
(35)

Это означает, что гидродинамические потоки в зоне кристаллизации оказывают незначительное влияние, а теплопроводность преобладает, для

умеренных условий СЛН, с низкой скоростью движения жидкости и без выплескивания [9, 11].

В общем случае для учета гидродинамического теплопереноса при лазерной наплавке необходимо сопряженно решать уравнения сохранения энергии, массы и моментов, однако в данной главе основное внимание уделено исследованию фазового перехода, а влияние гидродинамических течений учтено при помощи введения эффективной теплопроводности.

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\lambda_{eff} \nabla T\right) + \rho (1 - f_1) \Delta c \frac{\partial T}{\partial t} - \rho L \frac{\partial f_1}{\partial t}$$
(36)

Такой подход не позволит в точности отследить движение свободной границы за счет гидродинамических сил, однако, может оценить скорости нагрева и охлаждения кристаллизующего слоя, которые определяют результирующую микроструктуру.

На границе жидкость – газ (Ж-Г) поглощается лазерное излучение (q_{las}) и нагретые частицы вносят тепловой вклад (q_p) . С другой стороны, происходит ее охлаждение за счет испарения металла (q_{ev}) и излучения Стефана (q_{st}) . Также происходит конвективное охлаждение поверхности металла за счет газа (q_{con}) . Для потока энергии с учетом отсутствия испарения $(q_{ev}=0)$ на границе Ж-Г, можно записать:

$$q = q_{las} + q_{p} - q_{con} - q_{st} = q_{las} + q_{p} - h(T - T_{0}) - \sigma \varepsilon (T^{4} - T_{0}^{4})$$
(37)

$$q_{las} = \alpha \frac{2P}{\pi R_b^2} exp\left(-\frac{2r^2}{R_b^2}\right) exp\left(-\frac{3Q_{ext}\dot{m}h}{\pi \rho r_p d_j^2 v_p}\right),$$
(38)

$$q_{p} = \begin{cases} F_{p}\rho_{s}[c_{s}(T_{particle} - T_{melting}) + c_{1}(T_{melting} - T_{surface}) - L], & T_{particle} < T_{melting} \\ F_{p}\rho_{1}c_{1}(T_{particle} - T_{surface}), & T_{particle} > T_{surface} \end{cases}$$
(39)

здесь P - мощность лазерного пучка, $r = \sqrt{(x-V_{scan}t)^2 - y^2}$, V_{scan} - скорость сканирования, в формуле (38), вторая экспонента учитывает затухание лазерного излучения при прохождении коаксиального потока частиц порошка [32], r_p и v_p радиус и скорость частиц соответственно, d_{jet} - диаметр потока частиц на

подложке, Q_{ext} - коэффициент перекрытия потока порошка лазерным излучением. Предполагается, что диаметр лазерного пучка сравним с диаметром потока порошка, поэтому $Q_{ext} \approx 1. q_p$ – поток энергии, который вносят/забирают частицы порошка в ванну расплава.

Граничное условие на границе Ж-Г может быть включено в уравнение теплопроводности, как источниковый член при помощи дельта функции δ(φ) [36]:

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\lambda_{eff} \nabla T\right) + q\delta(\phi) + \rho(1 - f_1)\Delta c \frac{\partial T}{\partial t} - \rho L \frac{\partial f_1}{\partial t}, \tag{40}$$

где ф - функции уровня.

2.1.5. Кинетическое уравнение для объемной доли превратившейся фазы

Механизм изменения массовой доли превратившейся фазы в уравнении (40) может быть различным. В данной главе фазовое превращение, рассматривается как неравновесный кинетический процесс, связанный с появлением и ростом центров новой фазы (жидкой и кристаллической) в метастабильной конденсированной среде. Применительно к распределению температуры в ванне расплава уравнение (5) для объемной доли новой фазы преобразуется к виду:

$$b(r,t) = 1 - \exp\left\{-\int_0^t \tilde{J}(r,\varepsilon)v(r,t-\varepsilon)\,d\varepsilon\right\}$$
(41)

где $v(r,t-\varepsilon) = \int_{\varepsilon}^{t} G[\Delta T(r,\tau)] d\tau$ - объем свободно растущего (виртуального) центра, образовавшегося в момент времени ε , а $\vec{r} = (x, y, z)$. То есть в этом случае скорость зародышеобразования и объем растущего центра зависят от координаты. В результате уравнение (41) можно представить в виде:

$$b(r,t) = 1 - \exp\left\{-\sigma \int_0^t \tilde{J}(\Delta T(r,\varepsilon)) \left(r^* + \int_\varepsilon^t G[\Delta T(r,\tau)]d\tau\right)^n d\varepsilon\right\}$$
(42)

где $\Delta T = T - T_m$ перегрев в случае плавления, $\Delta T = T_m - T$ - переохлаждение в случае кристаллизации.

Как показано в п. 1.3.1 вид функции J̃(∆Т) зависит от механизма ФП. Частота зародышеобразования (нуклеации) резко возрастает вблизи гетерогенных

центров и границ металла. Однако с ростом скорости изменения температуры влияние гетерогенной нуклеации уменьшается, и главную роль начинает играть гомогенное зародышеобразование, то есть флуктуационное возникновение новой фазы в местах, свободных от примесей [88]

Если плавление/кристаллизация происходит путем флуктуационного образования сферических зародышей в объеме метастабильной (перегретой или переохлажденной) фазы, выражение для скорости гомогенной нуклеации (7) совместно с (8) принимает вид:

$$\tilde{J}(T) = N_0^V \frac{k_B T}{h} \exp\left\{-\frac{E_a}{k_B T}\right\} \exp\left\{-\frac{16\pi\gamma^3 \Omega^2}{3k_B T (\Delta S \Delta T)^2}\right\},\tag{43}$$

Число мест зарождения в единице объема металла равно:

$$\mathbf{N}_0^V = K/\Omega \tag{44}$$

где K – кратность элементарной ячейки, то есть число атомов, приходящихся на одну ячейку, в случае объемно-центрированного куба K = 2.

В случае если рост происходит с поверхности, для скорости гомогенной нуклеации (7) совместно с (9) получим:

$$\tilde{J}(T) = N_0^S \frac{k_B T}{h} \exp\left\{-\frac{E_a}{k_B T}\right\} \exp\left\{-\frac{\pi d_0 \gamma^2 T_m}{k_B T \rho L \Delta T}\right\},\tag{45}$$

Число мест зарождения в двумерном случае равно:

$$N_0^S = K \Omega^{-2/3} \tag{46}$$

В случае наличия примесей механизм роста определяется степенью смачиваемости примеси и числом мест зарождения, подставляя (11) в (7) получим:

$$\tilde{J}(T) = N_{get} \frac{k_B T}{h} \exp\left\{-\frac{E_a}{k_B T}\right\} \exp\{-\Psi(\varphi) E_G(T)\},$$
(47)

Гетерогенное зародышеобразование может происходить как на поверхности, так и во всем объеме. В зависимости от этого концентрация примеси n_p в уравнении (10) для расчета числа мест зарождения $N_{get} = 4\pi r_p^2 n_p \Omega^{-2/3}$ имеет размерность [cm^{-2}] в случае гетерогенного поверхностного роста и [cm^{-3}]

в случае объемного, а для расчета $E_G(T)$ - используются формулы (9) и (8) соответственно. Минимальная энергия необходимая для создания кластера критического размера совместно с числом мест для зарождения будут определять, какой механизм фазового перехода реализуется (рисунок 10). В уравнении для скорости зародышеобразования часто выделяют сравнительно слабо убывающий, с ростом переохлаждения, множитель перед второй экспонентой включающий энергию активации. Он начинает играть доминирующую роль при больших переохлаждениях, что может приводить к стеклованию металлов [74]. Также можно выделить энергию Гиббса входящую во вторую экспоненту, которая приводит к пороговому росту скорости зародышеобразования. Энергии Гиббса убывает с возрастанием переохлаждения. Переохлаждением начала кристаллизации можно считать такую температуру, когда энергия Гиббса опускается ниже $80k_{B}T$. На рисунке 10 видно, что хорошо смачиваемые примеси резко снижают энергию Гиббса и соответственно необходимое для начала кристаллизации переохлаждение.



Рисунок 10. Значение энергии Гиббса (нормированной на k_B*T) в зависимости от смачиваемости примеси при гетерогенной поверхностной кристаллизации

Скорость зарождения реальных частиц связана со скоростью нуклеации виртуальных частиц:

$$J(T) = (1 - b)\tilde{J}(T)$$
(48)

Поэтому совместно с (7) для скорости зародышеобразования реальных частиц получим:

$$J(T) = (1-b)N_0 \frac{k_B T}{h} \exp\left\{-\frac{E_a}{k_B T}\right\} \exp\left\{-\frac{E_G(T)}{k_B T}\right\},$$
(49)

Зависимость скорости роста от температуры имеет следующий вид (13):

$$G(T) = d_0 \frac{k_B T}{h} exp\left\{-\frac{E_a}{k_B T}\right\} exp\left\{-\frac{L_m}{k_B N_a T_m} \cdot \frac{\Delta T}{T}\right\}$$
(50)

В случае наличия высокоактивных частиц ФП происходит безбарьерно, а для расчета новой фазы используется уравнение (6).

2.2. Численная реализация термической модели

Уравнения (30), (40) и (42) решались для расчетной области, которая содержит три фазы: твердую, жидкую и газ. Для отслеживания границы L-V используется метод функций уровня. Сетка не равномерна по всем координатам - сгущается в области ванны расплава и лазерного пятна для увеличения точности определения границ ванны расплава и расчета фазовых переходов, а также поглощения лазерного излучения на свободной поверхности. Использовались различные размеры расчетной области от 6мм*4мм*2мм до 34мм*8мм*16мм в зависимости от входных параметров. Главным правилом выбора промежутка времени расчета было то, что бы все процессы выходили на квазистационарное состояние. Расчетная область моделирует половину реальной области за счет симметрии. Густоту сетки видно на рисунке 11.



Рисунок 11. Пример используемой нелинейной сетки, показывающий ее густоту.

В трехмерном случае использовалась сетка порядка *nxp*nyp*nzp*=576*100*180 точек. Для пробного исследования кинетики фазового перехода использовался двумерный расчет области х-z (12мм*4мм) с сеткой 1000*500 точек. Положение лазерного источника в начале процесса соответствует одной четверти расчетной области по координате х. Шаг по времени подбирается таким образом, чтобы граница металла не сдвигалась за шаг больше, чем минимальный шаг пространственной сетки, и в среднем составляет 0,1-0,4 мс в зависимости от использованной сетки.

Для решения уравнения теплопроводности используется хорошо описанный в литературе метод стабилизирующей поправки (СП), который имеет второй порядок точности по времени и первый по пространству [102, 103, 104]. Влияние фазовых переходов на температурные поля учитывается в уравнении [64]. теплопроводности источниковым Аппроксимированное членом на трехмерной дискретной сетке уравнение теплопроводности имеет вид:

$$\rho(c_1 - \Delta c(1 - f_1)) \frac{T^{+1/3} - T^-}{dt} = \Lambda_1 T^{+1/3} + \Lambda_2 T^- + \Lambda_3 T^- + S_{las} - \rho L \frac{f_1 - f_1^-}{dt},$$
(51)

$$\rho(c_l - \Delta c(1 - f_l)) \frac{T^{+1} - T^{+2/3}}{dt} = \Lambda_3(T^{+1} - T^{-}),$$
(52)

$$\rho(c_l - \Delta c(1 - f_l)) \frac{T^{+2/3} - T^{+1/3}}{dt} = \Lambda_2 (T^{+2/3} - T^{-}),$$
(53)

$$\Lambda_{i} = \frac{k}{di_{-i} + di_{+i}} \left(\frac{k_{+i}}{k_{+i} + k} \frac{T_{+i} - T}{di_{+i}} - \frac{k_{-i}}{k_{-i} + k} \frac{T - T_{-i}}{di_{-i}}\right), i = x, y, z$$
(54)

где верхние дробные индексы соответствуют промежуточным временным слоям, индекс "+1" следующему временному слою, а "-" предыдущему. Нижние индексы относятся к пространственной сетке. Использовался метод замороженных коэффициентов для расчета температуры, т.е. они брались с предыдущего временного слоя. Также для поверки использовался метод расщепления по координатам [105]. Оба метода давали схожие результаты.

Для фазовых переходов рассчитывался интеграл по температурной истории в каждой точке. Фазовый переход занимает от 10 до 50 шагов по времени. Уравнение для функции уровня решались явно в каждой точке расчетной области. Для согласования уравнений использовался метод простой итерации. Чтобы добиться сходимости уравнений для температуры использовалась нижняя релаксация с коэффициентом *n*. Значение *n*=0.7 дает оптимальное соотношение

$$\sigma = \max(T^i - T^{i-1}) \tag{55}$$

Как правило, требовалось 4-5 итераций для того, чтобы выполнялось условие σ < 0.1. Коэффициенты для уравнения теплопроводности рассчитываются по следующей схеме:

Области, содержащие газ и металл, различаются по функции Хэвисайда
 (Н) от функции уровня *ф*, описанной в п.2.1.3:

$$\rho = (1 - H(\phi))\rho_{m} + H(\phi)\rho_{g},
c = (1 - H(\phi))c_{m} + H(\phi)c_{g},
k = (1 - H(\phi))k_{m} + H(\phi)k_{g}$$
(56)

величины с индексом m относятся к металлу, а с g - к газу. Используется сглаженная функция Хэвисайда заданная уравнением [36]:

$$H(\phi) = \begin{cases} 0, & \phi < -\varepsilon, \\ 0.5[1 + \frac{\phi}{\varepsilon} + \frac{1}{\pi} \sin(\frac{\pi\phi}{\varepsilon})], & |\phi| < \varepsilon, \\ 1, & \phi > \varepsilon. \end{cases}$$
(57)

где *є* - толщина переходной зоны. Она обычно выбирается равной 1.5 шага пространственной сетки. Дельта функция рассчитывается, как производная сглаженной функции Хэвисайда.

$$dH(\phi) = \begin{cases} 0, & |\phi| > \varepsilon \\ \frac{1 + \cos(\frac{\pi\phi}{\varepsilon})}{2\varepsilon}, |\phi| < \varepsilon, \end{cases}$$
(58)

2. В области, содержащей металл, можно выделить три зоны: твердая, жидкая и переходная зона. В работе плотность металла считается постоянной поэтому $f_s = b$. Коэффициенты уравнения теплопроводности (теплоемкость, плотность и теплопроводность) в каждой зоне рассчитываются по значениям массовой доли в каждой точке.

$$c_m = (1 - f_l)\Delta c + c_L, \Delta c = c_s - c_l,$$

$$\rho_m = \rho_s f_s + \rho_l f_l$$
(59)

$$k_m = \left(\frac{(1-f_l)k_s}{\rho_s} + \frac{f_lk_l}{\rho_l}\right)\rho_m$$

Расчет выполнялся по следующему алгоритму:

- Рассчитываются коэффициенты по температурному полю из предыдущего слоя по времени.
- Рассчитывается температурное поле
- По новому значению температуры рассчитывается поле фазы по уравнению КЈМА
- Проверяется условие σ < 0.1, если условие сходимости выполняется, продолжаем, нет - возвращаемся на первый шаг
- Решается уравнение для функции уровня

2.3. Результаты расчетов

В рамках рассматриваемой модели (30), (40) и (42) было проведено численное моделирование теплопереноса при одновременном протекании фазовых превращений (плавления/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 пучка порошка на подложке был равен 0,8 мм. Для нержавеющей стали использовались теплофизические и кинетические характеристики железа, которые приведены в таблице 2.

Величина	Обозначение и	Сплав Al (Si-	Fe	Сплав на
	размерность	11.5%) AISI40		OCHOBE INI
Удельная теплоемкость твердой фазы	^с _s , Дж/(кг*К)	920	659	435 [106]
Удельная теплоемкость расплавленной фазы	^С 1, Дж/(кг*К)	1176 [107, p. 108]	804	720 [106]
Теплопроводность твердой компоненты	λ _s , <i>Βτ/(M*K</i>)	142 [106, p. 1416]	41	11.4 [106]
Теплопроводность жидкой компоненты	^λ ι, Вт/(м*К)	100 [108]	44	24 [106]
Плотность твердого	^р ₅ , кг/м3	2650 [106, p. 1416]	7870	8190 [106]
Плотность жидкого	$ ho_{l}$, кг/м3	2405	6519	7130 [106]
Температура плавления	Тт, К	857, [106, p. 1151]	1809 [109]	1678 [106]
Удельная теплота плавления	L , Дж/кг	372900	271960	227000
Число узлов в единице пространства	N ₀ ,	-	8.5*10 ²² cm ⁻³	2.105*10 ¹⁴ cm ⁻²
Концентрация примеси 2D	П ₀ , СМ ⁻²	<i>3.967*10</i> 5	-	-
Энергия активации	Е _а , 10 ^{-12 эрг}	1.28 [110]	1.68 [109]	1.25
Поверхностная энергия раздела фаз	<i>ү, эрг/см</i> ²	400	204 [111]	70
Энтропия	ΔS , 10-16 эрг/К	1.913	1.37 [109]	1.287
Параметр решетки	d ₀ , 10 ⁻⁸ см	4,045	2.86	3,524
Критический радиус зародыша	r*, 10 ⁻⁶ см	10	10	1

Таблица 2. Теплофизические и кинетические параметры для силумина

Также проводилось моделирование наплавки порошка силумина AlSi40 теплофизические и кинетические параметры представлены в таблице 2. Порошок силумина представляет собой смесь алюминия и растворенного в нем кремния, в которой распределены кремниевые частицы размером 5 мкм [13]. Считалось, что кристаллизация происходит гетерогенно на микрометровых частицах кремния. В случае наплавки никелевого сплава считалось, что кристаллизация протекает по гетерогенному 2D механизму от подложки. Для наплавки этого порошка используют другие параметры процесса, потому что его тепловые характеристики заметно отличаются от железного порошка. Параметры процесса наплавки силумина соответствуют экспериментальной работе [13].



2.3.1. Температурные профили и поля закристаллизованной фазы

Рисунок 12. Профили распределения полей температуры и объемных долей новой фазы в различные моменты времени. a)t=6,5мс, б)t=75мс, в) t=130мс, P=0.6кВт, V=12мм/с, m=1г/мин.

На рисунках 12а-в приведено рассчитанное 2D распределение температуры и профили объемных долей жидкой фазы в плоскости х-z, черным показаны границы области расплава, а оттенками серого - температурные поля. Видно, что на начальной стадии профили температурных полей и области занятой расплавом практически совпадают (Рис. 12а). По мере продолжения процесса лазерной наплавки температурные поля и профили распределения фаз становятся более вытянутыми (Рис. 12б), что связано со сканированием лазерного пучка. Кроме того наблюдается расхождение профилей полей температуры и объемных долей новой фазы. Изотерма температуры плавления 1809К показана на рисунке 12в, а плавление происходит при значительном перегреве. Это происходит вследствие того, что скорость нуклеации при температуре плавления равна нулю, как будет показано ниже, и возрастает только с ростом перегрева. Кристаллизация также инициируется после достижения определенных значений переохлаждения.



Рисунок 14. Пространственное распределение скорости нуклеации по x-z (a), температурная зависимость скорости нуклеации (синий, левая шкала) и скорости роста кристаллов (зеленый, правая шкала) (б).

На рисунке 13 оттенками серого показано распределение абсолютных значений скорости охлаждения в зоне кристаллизации в координатах х-z. Заметим, что скорость охлаждения по мере уменьшения температуры и удаления от источника лазерного излучения уменьшается. В зоне плавления поглощается скрытая теплота плавления, а в зоне кристаллизации тепло выделяется. Поэтому зона кристаллизации прогревается сильнее, чем остальные участки образца. В случае не высоких величин наплавки нижняя часть зоны кристаллизации теплее, чем приповерхностная, где имеет место потери тепла из-за интенсивного теплообмена с воздухом (Рис. 13). Более прогретая зона после кристаллизации резко начинает остывать (скорость охлаждения увеличивается). Численные расчеты показали, что характерная скорость охлаждения зависит от мощности излучения и является величиной порядка 10^3 - 10^4 K/c. Также расчеты показывают,

что скорость охлаждения падает со временем, до выхода максимальной температуры на стационар.

На рисунке 14а оттенками серого показана скорость нуклеации реальных частиц в зоне кристаллизации (шкала соответствует значениям скорости) в момент времени, когда высота наплавленного слоя выходит на стационарное значение. Здесь черным пунктиром показан уровень подложки, а черными линиями обозначены три контура жидкой фазы соответствующие трем различным значениям объемных долей: g₁=0.01, g₁ =0.95 и g₁ =0.99. Видно, что скорость нуклеации достигает заметных значений для ФП в переходной зоне жидкость твердое тело. На рис. 146 показаны температурные зависимости скорости нуклеации реальных частиц и скорости роста в сечение А-А на рис. 14а. Отметим, что интенсивный процесс кристаллообразования происходит, когда достигается температура 0.85T_{molt}. Скорость нуклеации с ростом переохлаждения резко порядка 10^5 см⁻³ с⁻¹. Дальнейший значений возрастает, достигая рост переохлаждения приводит к ее падению, что обусловлено ростом объемной доли новой фазы. Расчеты показывают, что характерные для железа переохлаждения [88] достигаются на скоростях охлаждения наблюдаемых в процессе ЛН при условии отсутствия примесей и без учета влияния границы. Можно отметить, что при таких переохлаждениях первая экспонента в уравнении (42), связанная с энергией активации, является слабо убывающей функцией, а ее затухание происходит из-за предэкспоненциального множителя (1-b), зависящего от переохлаждения. Также можно заметить, что скорость роста кристаллов имеет максимум в зоне, где кристаллизации еще не происходит, а в зоне нуклеации она является убывающей функцией. Как видно из (42) новая фаза может зародышеобразования, увеличиваться вследствие а также роста уже образовавшихся центров новой фазы.

Обнаружено качественное различие динамики температуры поверхности и объемной доли твердой фазы в ходе процесса кристаллизации для разных скоростей охлаждения (Рис. 15). При больших скоростях охлаждения изменение

температуры имеет монотонный характер. При малых - падение температуры не монотонно. Такое поведение температуры обусловлено тепловыделением при кристаллизации: несущественным в первом случае и значительным во втором.



Рисунок 15. Динамика температуры поверхности (черный) и объемной доли твердой фазы (серый) для разных скоростей охлаждения 4500К/с (сплошные) и 2400К/с (пунктир) 1200К/с (точка-пунктир).

На рис. 16 приведена динамика 3D распределения температуры в зоне моделирования. В начале процесса образуется валик, затем его высота выходит на стационар (рис 16б). Далее температурное поле также выходит на стационар и движется вместе с ЛИ (рис 16в) Видно, что при 3D моделировании достигаются меньшие значения максимальной температуры зоны расплава, что связано с более эффективным теплопереносом вглубь среды в этом случае.





Рисунок 16. 3D динамика распределения температуры

На рисунке 17 показано 3D распределение теплового поля для наплавки силумина на подложку из Al. Черная кривая ограничивает ванну расплава. Тепловое поле принципиально не отличается от случая наплавления стали, однако процесс проходит в другом интервале температур.



Рисунок 17. Распределение полей температуры (цветом) и жидкой фазы (черная кривая) в наплавленном валике силумина. $P = 3 \text{ кВт}, V_{scan} = 26.7 \text{ мм/с}, \dot{m} = 30 \text{г/мин}$

2.3.2. Влияние механизма кристаллизации на температурный интервал фазового перехода

При исследовании закономерностей протекания процессов, связанных с гетерогенным характером зарождения на активных примесных наночастицах (с применением уравнения (6)) кристаллической фазы, прослежены характерные особенности пространственно-временной динамики скорости роста новой фазы и полей температуры в зоне наплавки. В таблице 3 приведены параметры расчета для активной примеси.

Таблица 3. Кинетические параметры для наночастиц

Размер нано частиц	50nm
Массовая доля наночастиц, %	0.01%
Концентрация наночастиц, см ⁻²	3.658*10 ⁷ cm ⁻²
Скрытая теплота плавления алюминия	Lm=10.6 kJ/mol,

Численные расчеты показали, что величина переохлаждения расплава, скорость кристаллизации зависят от концентрации наночастиц и локальной скорости охлаждения. Учет гомогенного возникновения кристаллов при наличии в переохлажденном расплаве наночастиц никак не сказывается на кинетике кристаллизации расплава при ЛН. Это связано с тем, что переохлаждения, необходимые для возникновения такого вида зародышеобразования не достигаются при реальных скоростях охлаждения и толщинах образующихся слоев расплавов. В случае наличия высокоактивных наночастиц плавление и кристаллизация происходят на одной температуре рисунок 18а, в случае небольшим кристаллизации на крупных примесных центрах с пререгревом/переохлаждением рисунок 18б. Проведенное исследование позволило изучить динамику роста кристаллитов и развитие микроструктуры в переохлажденном расплаве во взаимосвязи с режимом проведения ЛН. Результирующая микроструктура наплавленного слоя будет различной для разных механизмов кристаллизации (см. глава 4). Другим будет и качество материала. Объемная доля новой фазы, полученного в этом случае, рассчитывается комбинацией уравнений (5) и (6):



$$b(r,t) = 1 - \exp\left\{-\int_0^t (n_0 + \tilde{J}(r,\varepsilon))v(r,t-\varepsilon)\,d\varepsilon\right\}$$
(60)



Рисунок 18. Ванна расплава для двух разный механизмов ФП. Черная кривая показывает контур начала кристаллизации и окончания плавления.

Структура полученного слоя кристаллизация, которого происходит на активных примесях, часто незначительно зависит от режима температурного воздействия и определяется в основном начальным распределением примеси.

2.3.3. Влияние скорости сканирования, мощности лазерного излучения и величины подачи порошка на геометрические характеристики наплавленного слоя

Заметим, что основными входными параметрами ЛН являются мощность ЛИ, скорость сканирования и расход порошка. Максимальная температура системы, глубина проплавления и высота наплавки - это наиболее важные выходные параметры, по которым можно определить поведение расплава в процессе СЛН. Было проведено параметрическое исследование основных выходных параметров процесса на трехмерной модели, в которой качестве параметров задачи использовались значения, приведенные в таблице 4.

Р, кВт	Мощность излучения лазера	0,6-1,5
Vscan, MM/C	Скорость сканирования	12-25
т, г/мин	Расход порошка	1-6
R _{beam} , MM	Радиус лазерного пучка	0,35
<i>d</i> ј, мм	Диаметр потока порошка	0,7-0,8
Г _р , МКМ	Размер частиц порошка	50

Таблица 4. Параметры процесса для ЛН стали

Высота наплавки (Н) и глубина ванны расплава (D), как функции скорости сканирования приведены на рис. 19. Расчеты проводились для постоянного расхода (*m* = 1 г/мин) и для двух значений мощности лазерного излучения P=0,6 кВт и P=0,75 кВт. Наблюдаются аналогичные тенденции снижения, как для высоты наплавки, так и глубины ванны расплава с увеличением скорости сканирования. При увеличении мощности лазера влияние скорости сканирования на глубину проплавления усиливается и снижение ее значений в этом случае более заметно. Результаты термической модели показывают, что высота наплавки не зависит от мощности лазера. Это связано с тем, что модель не учитывает активизацию растекания валика при увеличении мощности.

Энергия, внесенная в ванну расплава, возрастает с увеличением мощности лазера, что приводит к росту глубины проплавления. Исследование глубины проплавления было проведено при фиксированной высоте наплавки, так как она может влиять на размеры ванны расплава. Высота фиксировалась подбором

величины подачи порошка и скорости сканирования. Зависимости глубины проплавления от мощности лазерного излучения при фиксированных высотах наплавленного слоя представлены на рисунке 20. Результаты для высоты наплавки h=60 мкм ($\dot{m} = 1$ г/мин, $V_{scan} = 16$ мм/сек) представлены серыми линиями, а для h=182 мкм ($\dot{m} = 3\Gamma$ /мин, $V_{scan} = 16$ мм/сек) показаны белым цветом. Глубина проплавления возрастает с увеличением мощности лазера роста. Также на рисунке видно влияние скорости подачи порошка на глубину проплавления. Более плотный поток порошка сильнее ослабляет лазерное излучение, поэтому глубина проплавления уменьшается. Проведенное сравнение выходных параметров лазерного излучения показывает, что использованная модель хорошо описывает процесс лазерной наплавки металлических порошков.



Рисунок 19. Глубина проплавления (синий) и величина наплавленного слоя (красный) в зависимости от скорости сканирования для разных мощностей (пунктир - 0.6кВт сплошная - 0.75кВт)

На рисунке 20 приведены зависимости глубины проплавления от мощности ЛИ при фиксированной высоте наплавленного слоя. Черным цветом показаны результаты для h = 60 мкм (\dot{m} = 1 г/мин V_{scan} =16 мм/с), а серым - h=182 мкм (\dot{m} = 3 г/мин V_{scan} =16 мм/с). Глубина проплавления растет с увеличением мощности ЛИ. Также на рисунке 20 можно проследить влияние скорости подачи порошка на рассеивание ЛИ. Лазерное излучение больше затухает в более плотном потоке порошка, поэтому глубина проплавления уменьшается с увеличением расхода порошка.



Рисунок 20. Зависимость глубины проплавления от мощности ЛИ при постоянной высоте наплавки m=1 г/мин, Vscan=16 мм/с (серый), m=3 г/мин, Vscan=16 мм/с (белый)

2.4. Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными

Для верификации разработанных вычислительных алгоритмов и программ решена серия тестовых задач по изучению теплопереноса при одновременном протекании ФП при синтезе трехмерных изделий и покрытий методом инжекции металлических порошков в зону воздействия лазерного пучка.

Р, кВт	Мощность излучения лазера	1,5-4,4
V _{scan} , мм/с	Скорость сканирования	20-40
т, г/мин	Расход порошка	4.5-21
R _{beam} , MM	Радиус лазерного пучка	2-4
d _{jet} , MM	Диаметр потока порошка	2
<i>Г_р, МКМ</i>	Размер частиц порошка	70-90

Таблица 5. Параметры процесса наплавки стали

Экспериментальные исследования проводились в национальном лазерном центре CSIR (г. Претория, ЮАР). Лазерная наплавка мартенситной стали 413 поводилась на 10 мм плоскую подложку из углеродистой стали. Использовался 4.4 киловатный Rofin DY044 Nd:YAG лазер с диодной накачкой подсоединенный к роботу Kuka KR60L30 со сварочной головкой Precitec YW50 (фокусное расстояние 300 мм). Лазерная наплавка проводилась порошком Metco 42C и коаксиальным соплом диаметром струи порошка в фокусе равным 2.0 мм. Чтобы определить влияние мощности лазерного излучения, скорости наплавки и скорости подачи порошка на степень перемешивания и высоты наплавки были использованы лазерные пятна размером 2,0 мм и 4,0 мм. Для сравнения результатов поддерживалась постоянная величина расхода порошка на единицу длины, которая равнялась 3,8 г/м для размера пятна 2 мм, а для размера пятна в 4 мм - 3,8 г/м и 9.2 г/м. Параметры процесса приведены в таблице 5. Расход порошка был преобразован из об./мин в г/мин путем измерения веса использованного порошка в единицу времени.

P = 2.781 kBt



 $P = 3.707 \,\mathrm{\kappa Bt}$



Рисунок 21. Разрез наплавленного валика поперек движения пучка. ($d_B = 4$ мм, $V_{scan} =$ **40**мм/с, *т* = **8**.**9186**г/мин)

 $P = 3.244 \kappa B \tau$



На рисунке 21 показаны типичные шлифы наплавленных валиков С указанием параметров ванны расплава. Значения высоты наплавленного слоя в зависимости от мощности лазера по экспериментальным данным, показаны на рис. 22 и 23. Видно, что численные результаты (сплошная линия) 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.



Рисунок 22. Зависимость глубины проплавления от мощности ЛИ пунктир - эксперимент сплошная линия - расчет (m=8.9 г/мин, V=40мм/мин)

Рисунок 23. Зависимость ширины ванны расплава от мощности лазерного излучения ($\dot{m} = 8.9$ г/мин, V=40мм/мин) экспериментальные данные (пунктир) и результаты расчетов (сплошная линия)

Также было проведено сравнение результатов численного моделирования профиля наплавленного слоя с литературными экспериментальными данными [35] для стали. Для численных оценок были использованы параметры процесса и характеристики вещества, приведенные в [35]. На рис 24а показан профиль наплавленного слоя, полученный экспериментально [35], а на рис. 24б полученный при моделировании. Видно, что профили практически совпадают, однако моделирование дает немного завышенные результаты, что, по-видимому, свободную связано с игнорированием влияния на поверхность гидродинамического течения расплава.



Рисунок 24. Сравнение профиля наплавки с экспериментом [35]. P = 0.75 кВт, $V_{scan} = 12.7$ мм/с $\dot{m} = 3$ г/мин.

2.5. Выводы к главе 2

- Разработаны термо-кинетическая модель и вычислительный алгоритм переходного процесса лазерной наплавки коаксиальной подачей С порошков. Численная 3D модель, основанная на решении сопряженных энергии фазовых уравнений переноса И кинетики превращений, прогнозирует динамику неоднородных полей температуры и объемных долей новой фазы в зоне наплавки в зависимости от режимов проведения процесса (мощность пучка, скорость сканирования, плотность потока массы) и особенностей нуклеации.
- Обнаружено качественное различие пространственно-временного поведения процесса объемной кристаллизации расплава при низкой и высокой скорости охлаждения. При больших скоростях охлаждения изменение температуры имеет монотонный характер, а при малых - падение температуры замедляется. Это связано с выделением скрытой теплоты при кристаллизации: несущественным в первом случае и вполне заметным во втором.
- Показано, что основными параметрами, характеризующими динамику формирования ванны расплава и максимальную температуру системы, являются расход порошка, мощность лазерного излучения и скорость сканирования. Прослеживаются особенности поведения степени перегрева кристалла (или переохлаждения жидкой фазы), связанные с учетом

кинетики фазовых превращений. Сравнение результатов моделирования с известными моделями, основанными на эмпирических формулах для фазового перехода и экспериментальными данными, продемонстрировало хорошее соответствие, что говорит об адекватности предложенной численной модели. Однако следует заметить, что эмпирический учет фазового перехода, не позволяет анализировать микроструктуру наплавленного слоя, поэтому наша модель имеет преимущество по сравнению с моделями ЛН из литературы.

Глава 3. Роль теплопроводности, капиллярных и термокапиллярных явлений в процессе лазерной наплавки

Целью данной главы является развитие гидродинамических моделей ЛН на основе открытого пакета OpenFoam, а также планирование и оптимизация процесса наплавки с учетом изменения геометрии теплоотвода. Исследовано несколько типичных условий теплоотвода: массивная подложка, ее край и тонкая стенка. Рассмотрено натекание расплавленного порошка на подложку с различным контактным углом. Для проверки адекватности проведена валидация разработанной гидродинамической модели в широком диапазоне параметров процесса.

3.1. Гидродинамическая модель лазерной наплавки с учетом эффективности улавливания порошка

Рассматривается тепло-массоперенос в многофазной системе: газ - жидкий металл - твердая подложка. Поскольку в ванне расплава имеет место ряд взаимосвязанных процессов тепломассопереноса, решалась самосогласованная система уравнений теплопроводности с фазовыми превращениями И гидродинамики, а также уравнение для эволюции свободной границы. В данной главе мы ограничиваемся режимами лазерного воздействия, где не происходит стекания материала с основы. Для слежения за свободной границей раздела металл - газ используется VOF-подобный метод, опубликованный в [112]. В работе [28] показано, что он хорошо работает для многофазных сред с термокапиллярными силами на достаточно мелких сетках. Для согласования уравнения моментов и давления используется PISO алгоритм [113]. Систему уравнений развитой самосогласованной модели ЛН можно представить в виде:

Уравнение неразрывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{u}) = 0 \tag{61}$$

Уравнение теплопроводности:

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} + c\rho \nabla \cdot (\mathbf{u}T) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + q\delta(\alpha) + \rho(1 - f_l)\Delta c \frac{\partial T}{\partial t} - \rho L \frac{\partial f_l}{\partial t}$$
(62)

Уравнение количества движения:

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} u_i) = \nabla \cdot (\mu \nabla u_i) - \frac{C_{big} (1 - f_l)^2}{f_l^3 + C_{small}} u_i - \frac{\partial p}{\partial i} + \sigma \kappa \nabla \alpha + (\nabla T - n_a (n_a \cdot \nabla T)) \frac{\partial \sigma}{\partial T} \delta(\alpha)$$
(63)

Уравнение для свободной поверхности:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\,\alpha) = F_p \left| \nabla \,\alpha \right| \tag{64}$$

где p – давление, T – температура, c, ρ и λ – соответственно теплоемкость, плотность и теплопроводность многофазной среды, f_i - объемная доля жидкой фазы (линейно растет от нуля до единицы между температурами солидус и ликвидус [57]), u_i – скорость жидкости по соответствующей координате $i = x, y, z; \mu$ – вязкость, α – VOF функция для свободной поверхности, n_a - нормаль к свободной поверхности, σ - поверхностное натяжение металла, C_{big} и C_{small} это константы с большим (10¹⁰ кг/(м³с)) и маленьким (10⁻¹⁰) значениями, соответственно.

В уравнении (62) два последних слагаемых в правой части связаны с фазовыми превращениями, а для источникового члена *q*, учитывающего воздействие ЛИ и добавляемого порошка, а также конвективное охлаждение потоком газа можно записать:

$$q = \alpha_{beam} q_{las} + c\rho (T - T_{powder}) F_p + k_c (T - T_0)$$
(65)

где α_{beam} – это коэффициент поглощения ЛИ, q_{las} – интенсивность ЛИ, T_{powder} и T_0 – температуры добавляемого порошка и окружающего газа соответственно, k_c - коэффициент конвективного теплообмена.

В лазерном пучке с равномерным распределением (*tophat*) интенсивность рассчитывалась как $q_{las} = \frac{P_{las}}{\pi R_b^2}$, а в случае Гауссова распределения используется:

$$q_{las} = \frac{2P_{las}}{\pi R_b^2} exp\left(-\frac{2r^2}{R_b^2}\right),\tag{66}$$

Действие лазерного пучка ограничивается его радиусом.

Второе слагаемое в правой части уравнения (62) учитывает торможение движения жидкости на твердой границе, которая моделируется как пористая среда [57]. Последнее слагаемое в этом уравнении – это источники, связанные с действием капиллярной и термокапиллярной сил [114]. Из уравнения (64) видно, что свободная поверхность движется за счет локального гидродинамического течения и по нормали со скоростью *q*_{powder}, связанной с добавлением порошка. В рамках настоящей модели захват порошка происходил только в жидкой ванне расплава:

$$F_{p} = F_{l}(x, y, z) \frac{2\alpha_{p} \dot{m}}{\pi \rho R_{iet}^{2}} \exp(-\frac{2r(x, y)^{2}}{R_{iet}^{2}})$$
(67)

здесь F_i - это флаг состояния подложки (F_i равно 1 на жидкой подложке и 0 в противном случае), α_p - коэффициент эффективности улавливания, $\dot{\mathbf{m}}$ - расход порошка, R_{jet} - это радиус потока порошка на подложке, а r радиус вектор точки пространства. Для моделирования различной геометрии теплоотвода используются начальные условия взаимного расположения фаз при начальной температуре $T_0 = 300K$. 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.

Основными движущими силами являются поверхностные термокапилярные и капиллярные силы [11]. Их конкуренция с капиллярными силами определяет форму ванны расплава. Эти поверхностные силы в трехфазную модель среды вводятся, как объемные источники [115]:

 $S_{surface} = (f_{capillary} + f_{marangoni})\delta$ (68) где б - дельта функция, которая может рассчитываться через функцию для слежения за свободной границей ϕ . Капиллярные силы рассчитываются по формуле:

$$f_{capillary} = \sigma \kappa \tag{69}$$

где σ - поверхностное натяжение, а κ - кривизна поверхности.

Если n - нормальный вектор поверхности направленный из металла в воздух, который рассчитывается как:

$$\mathbf{n} = \{n_x, n_y, n_z\} = \frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|} \tag{70}$$

то для кривизны поверхности получаем формулу:

$$\kappa = -\nabla \cdot \mathbf{n} = -\nabla \cdot \frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|} \tag{71}$$

Такая постановка задачи не учитывает реальный контактный угол жидкого металла и подложки зависящий, в том числе от свойств подложки. Для его учета, на гранях подложки, компоненты нормали свободной поверхности не рассчитывается по формуле (70), а задаются в соответствии с известным значением контактного угла α_c :

$$n_z = -cos(\alpha_c)$$
 (72)
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.

3.2. Численная реализация гидродинамической модели

Физико-математическая модель лазерной наплавки была реализована в открытом свободном пакете OpenFoam [116]. OpenFoam - это высокоуровневое средство разработки программ вычислительной гидродинамики, реализованное на поддерживающее языке C++ И парадигму объектно-ориентированного программирования. Классы и функции пакета OpenFoam являются полями, сетками, граничными условиями численными операторами и т.п. Таким образом, пакет позволяет записывать разностные аналоги дифференциальных уравнений и граничных условий в таком же виде, как они существуют в модели. Пакет позволяет использовать верифицированные реализации известных методов конечно-разностные решения СЛАУ, которым приводят к аналоги дифференциальные уравнений.

Большая часть решателей в приложениях OpenFoam используют либо неявное по давлению разбиение задачи (pressure-implicit split-operator - PISO), либо полу-неявный метод для уравнений, зависящих от давления (semi-implicit method for pressure-linked equations (SIMPLE), либо их комбинацию - PIMPLE алгоритм. Эти алгоритмы являются итерационными процедурами для согласования уравнений для моментов, давления и сохранения массы. PISO и PIMPLE используются для нестационарных задач, а SIMPLE для стационарных [117]. Оба алгоритма предназначены для гарантии выполнения закона сохранения массы в динамических задачах. С их помощью решается уравнение для давления, а затем проводится явная коррекция скорости. Для решения уравнения свободной поверхности используется метод Multidimensional Universal Limiter for Explicit Solutions [117] – процедура решения, обеспечивающая ограниченность объемной доли, основанная на расчете коррекции потока как разности между ограниченным потоком более высокого порядка, полученным с использованием, например, Gamma схемы, и восходящим потоком первого порядка.

70



Рисунок 25. Алгоритм расчета ЛН с учетом конвекции

Версия OpenFoam использованная для расчетов 2.3.х, а алгоритм программы приведен на рисунке 25. Разработанный код основан на программе S-CLSVOF [112] и встроенном в Openfoam решателе interFoam [118], которые предназначены для моделирования гидродинамических процессов в двух несжимаемых несмешиваемых изотермических жидкостях. В interFoam для моделирования адвекции используется только VOF уравнение, а в S-CLSVOF добавлена поправка, основанная на LS функции. Добавка позволяет более точно определять нормаль и кривизну поверхности, требования к которым повышаются для случаев, где доминирующую роль играют поверхностные силы.

У разработанной программы есть несколько важных особенностей, которые в итоге позволили применить ее для исследования ЛН. В первую очередь ЛН характеризует наличие движущихся источников тепла и массы, связанных с поглощением подложкой лазерного излучения и добавлением порошка. Разработанный код позволяет учитывать влияние произвольных сканирующих источников с различным распределением, движущимся по произвольной траектории. Свободная поверхность ванны расплава также является характерной и важной чертой ЛН. Она поглощает ЛИ, а поверхностные силы, действующие на ней, определяют картину гидродинамического движения всей ванны расплава, что в итоге задает геометрические, микроструктурные и другие характеристики наплавленного слоя. Программа моделирует трехфазную зону: жидкость - твердое вещество – газ, и позволяет через объемные источники учитывать граничные условия на свободной поверхности расплава.

Для решения дифференциальных уравнений используется метод конечного объема и встроенные схемы дискретизации в Openfoam [117]. Принцип, лежащий в основе этого метода, заключается в интегрировании уравнений сохранения по конечному числу вычислительных ячеек и решении уравнений в интегральной форме [104]. Для дискретизации производной по времени используется схема Эйлера (*Euler*), для конвективных членов - схема против потока второго порядка (*Gauss linearUpwind*), для ограниченной переменной α - схема *vanLeer*, а для

72
моделирования лапласиана используется центральная схема и линейная интерполяция (Gauss linear orthogonal), при наличии углов детали используется Gauss harmonic corrected, которые более подробно описаны В [113]. Использованные методы имеют второй порядок точности по пространству и первый по времени. Полученные алгебраические уравнения решаются хорошо векторизуемыми явными итерационными методами. Для уравнения энергии используется метод предварительно бисопряженных градиентов (PBiCG) с неполным диагональным LU предобуславливателем (DILU). Симметричные уравнения преобразуются при матрицы давления помоши неполного диагонального предобуславливателя Холецкого (DIC) и решаются при помощи метода предварительно сопряженных градиентов (*PCG*). Эти алгоритмы общеизвестны и более подробно описаны в [119]. В отличие от прямых методов, итерационные методы имеют меньшее количество связей вне расчетной ячейки и поэтому более пригодны для параллельного счета.

Для равномерного распределения на 128 ядер кластера ИПЛИТ РАН 128 (Шатура, Россия) используются сетки С кратным числом ячеек (1048576=64*64*256). В симметричном случае используемая параметризованная сетка состоит из ортогональной густой зоны с размером 6.75 мм * 5.7 мм * 2.5 мм с шагом 50 мкм по всем координатам и разреженных областей, окружающих ее со всех сторон с суммарным размером 25 мм * 10 мм * 7 мм. В несимметричных случаях (т.е. в случае моделирования маневров) общая зона моделирования удваивается, т.е. моделируется 20 мм по Y, но густая зона не изменяется. Размер густой зоны по Х подстраивается под использованную скорость сканирования (6.75 мм, 11.5 мм, 23 мм) так что бы параметры валика достигали стационара, а по У подстраивается под Х для того что бы шаг сетки оставался 50 мкм. По координате Z шаг сетки составлял порядка 20-50 мкм в зависимости от высоты наплавки. В расчетах ванна расплава в среднем укладывается в 100 ячеек (l=5мм/dx=50мкм), что позволяет рассчитывать течения с числом Рейнольдса до 10⁴ при помощи схем второго порядка.

3.1. Влияние геометрии теплоотвода на параметры наплавляемых валиков

При помощи разработанной программы были проведены исследования коаксиальной ЛН жаропрочного сплава на основе Ni на различные детали. Параметры материалов, использованные в расчетах, представлены в таблице 6. Таблица 6. Основные теплофизические параметры расчета.

Параметр, размерность	Обозначение	Величина
Теплопроводность твердого металла, Вт/(м·К°)	λ_s	11
Теплопроводность жидкой фазы Вт/(м·К°)	λ_l	24
Теплопроводность газа, Вт/(м·К°)	λ_g	0.03
Плотность металла, кг/м ³	$ ho_m$	7130
Плотность газа, кг/м ³	$ ho_g$	1
Удельная теплоемкость твердой фазы, Дж/(кг·К°)	C _s	419
Удельная теплоемкость жидкой фазы, Дж/(кг·К°)	Cl	754
Удельная теплоемкость газа, Дж/(кг·К°)	C _g	1008
Динамическая вязкость металла, м ² /с	$\eta_{\rm m}, 10^{-7}$	6.872 [106]
Динамическая вязкость газа, м ² /с	$\eta_{g}, 10^{-5}$	1.48
Поверхностное натяжение металла, N/m	σ	1.778 [106]
Градиент поверхностного натяжения металла, mN/m·K°	$\frac{\partial \sigma}{\partial T}$	-0.38 [106]
Коэффициент поглощения	α_{beam}	0.45
Температура солидус, К°	T_s	1483
Температура ликвидус, К°	T_l	1583
Скрытая теплота ФП, кДж/кг	L	227

Таблица 7. Исследованные параметры процесса

Р, Вт	Мощность излучения лазера	70 - 150			
<i>V_{scan}</i> , мм/с	Скорость сканирования	10, 20			
^m , г/мин	Расход порошка	1-5			
R _{beam} , мм	Радиус лазерного пучка	0,4			
R _{jet} , мм	Радиус потока порошка	0,5			
CASE1	Наплавка на массивную деталь				
CASE1a	Поворот на массивной детали				
CASE2	Наплавка на край массивной детали высотой 2мм				
CASE2a	Угол массивной детали				
САSE3 Наплавка на тонкую стенку высотой 2мм и шириной 1мм					
CASE3a	Поворот на тонкой стенке				
CASE36	Поворот критического радиуса на тонкой стенке				

Параметры в стационарных условиях	CA	CASE1 CASE2		SE2	CASE3	
V _{scan} , мм/с,	20	10	20	10	20	10
<i>т,</i> г/мин	2	1	2	1	2	1
Р, Вт	120	95	110	85	100	75
Ширина валика, мм	0.83	0.82	0.81	0.82	0.8	0.89
Длина ванны расплава, мм	1.7	1.52	1.5	1.53	2.1	1.99
Высота валика, мкм	200	199	166	195	188	190
Глубина проплавления, мкм	80	94	76	89	110	165
Коэффициент улавливания	69%	74%	68%	74%	64%	70%

Таблица 8. Карта процесса лазерной наплавки для наплавлени одинаковых валиков на различных подложках



Рисунок. 26. Вид сверху на распределение высоты наплавленного валика для различных условий теплоотвода CASE1 (слева) и CASE2 (справа) V_{scan}=10mm/s m=1g/min, t=400 ms (значения мощности см. таблицу 3)

Диапазоны исследованных технологических параметров, а также использованные схемы наплавки приведены в таблице 7. Порошок подается при температуре $T_{powder} = 1000K$, соосно с ЛИ, которое имеет *tophat* распределение. В начальный момент времени лазерный пучок движется в положительную сторону оси X, а после установления стационарных значений параметров наплавки производится маневр (разворот или поворот движения пучка).

Разработана карта процесса (таблица 8), показывающая, какие параметры воздействия требуются для случаев различной геометрии теплоотвода при условии наплавления одинаковых валиков (Н=200мкм, W=0.81мм). На рисунке 26а цветом показан вид сверху на распределение высоты наплавленного слоя (CASE1), а на рисунке 26б - наплавление заключительного валика по контуру массивной детали (CASE2). На рисунках здесь и далее черной линией обозначена

граница ванны расплава, белая окружность – граница лазерного пучка, а белым контуром показан край детали. В случае наплавления на массивную подложку (CASE1) теплоотвод в полубесконечное пространство металла подложки наиболее эффективен, поэтому, для поддержания температуры плавления, требуется максимальная мощность лазерного излучения. При движении лазерного пучка по краю массивной детали эффективность теплоотвода хуже (CASE2) из-за низкой теплопроводности воздуха.



Рисунок 27. Температурное поле (сверху) и интенсивность течения (внизу) для одинаковых параметров процесса при наплавке на массивную подложку (слева) и тонкую стенку (справа). Белая линия это граница раздела металла и газа, черная – граница ванны расплава. Тонкими линиями показана граница лазерного пучка (а,б) и линии течения (в,г). P=100W, V_{scan}=20mm/s, m=2g/min, t=200ms

На рисунках 27 а б показано сравнение температурного поля в продольном сечении по центру пучка для двух случаев теплоотвода, а на рисунках 27 в г приведены линии тока и интенсивность течения в тех же условиях. Видно, что основной источник течения расплава находится сразу за лучом (показан тонкой линией). Это связано с большим градиентом температуры в этом месте для пучка с *tophat* распределением излучения. Ванна расплава ощутимо вытянута в случае наплавки на тонкую стенку при одинаковых параметрах процесса. Линии тока развиты, интенсивность течения высока в этом случае, что говорит о

преобладающем влиянии поверхностного гидродинамического переноса тепла в случае CASE3.



Рисунок 28. Вид сверху на распределение температуры наплавленного валика для исследуемых условий теплоотвода: а – на массивной подложке, б – на краю массивной детали, в – на тонкой стенке. (t=400ms. V_{scan}=10mm/s m=1g/min)

В случае наплавления на тонкую стенку (CASE3) эффективность внешнего теплоотвода снижается относительно случая CASE1; он становится двумерным, вдоль стенки (градиента температуры по ширине практически нет). Оптимальная мощность излучения для наплавки сравнимых валиков исследуемого материала ниже на 30% относительно наплавки на массивную подложку. На рисунках 28 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 29. Динамика основных параметров ванны расплава (CASE2a, *P*=85Bт, *V*_{scan}=10мм/с, *m*=1*г*/*мин*)

Количество захваченного порошка определяется временем жизни ванны расплава в данной точке и распределением плотности потока порошка. Интегральным критерием захвата порошка, является отношение количества захваченного порошка к суммарной величине подачи порошка - эффективность улавливания порошка. На рисунке 29 показана динамика основных параметров валиков при маневрах (CASE2a, P=85 BT, $V_{scan}=10$ мм/с, m=1 г/мин). Разрыв на графике для ширины ванны расплава соответствует повороту, когда она имеет не определенное значение. Эффективность улавливания порошка довольно высокая ~0.8. Для ее повышения важна как ширина ванны расплава, так и ее пересечение с потоком порошка. Можно отметить, что при маневре эффективность улавливания порошка увеличивается благодаря двум этим факторам.

Маневры с увеличением плотности поглощенной мощности при торможении, приводят к росту геометрических размеров валика и необходимости изменения параметров для исправления дефектов. Этот эффект еще более ощутим в случае маневров с остановкой, такие схемы наплавки тем более требуют адаптации остальных параметров. Если замедление по одной координате компенсируется ускорением по другой и поддерживается постоянная линейная скорость, тогда плотность поглощенной мощности не увеличивается, и параметры валика сохраняются (см. Рисунок 30 а,б). При большой скорости сканирования, температурное влияние в направлении движения пучка практически не выходит за границу пучка, поэтому можно отметить слабое изменение параметров ванны расплава при приближении к углу детали. Во время маневра с малым радиусом поворота по углу детали, внутренние области поглощают большую долю ЛИ и порошка, что приводит к локальному увеличению поглощенной мощности и Соответственное коэффициента ширины ванны расплава. увеличение улавливания может приводить к увеличению высоты, однако гидродинамическое перемешивание приводит к компенсации «лишней» высоты за счет ширины (Рисунок 29). Видно, что ширина даже после поворота несколько больше, а высота сохраняется на всем протяжении дорожки.



Рисунок 30. Маневр при постоянной скорости по углу массивной детали CASE2a (слева) и на тонкой стенке CASE3a (справа).

Для увеличения эффективности процесса часто используется максимально возможная скорость, однако при выборе параметров следует учитывать ограничение на максимальное ускорение ($a=V_{scan}^2/R_{man}$) при маневрах. Поворот на постоянной скорости $V_{scan}=20$ мм/с по радиусу $R_{man}=1$ мм требует от приводов ускорения a=400 мм/с², что многие отечественные и зарубежные приводы отработать не могут. Фактически существует критический радиус окружности, которую можно обработать на текущей скорости сканирования. В случае если требуется произвести манёвр с радиусом поворота меньше критического, скорость сканирования приходится снижать до начала маневра. Это ведет, при сохранении прочих условий наплавки, к изменению параметров валика. Этот эффект еще более ощутим в случае маневров с остановкой (при радиусе разворота, стремящемся к нулю). На рисунке 31а показаны схемы изменения скорости сканирования при маневре по радиусу ниже (сплошными линиями) и выше (пунктир) критического.



Рисунок 31. Изменение компонентов скорости сканирования (слева, V_x – черный, V_y - серый) при прохождении поворота по радиусу выше (пунктир) и ниже (сплошная) критического радиуса ($V_{scan} = 20$ мм/с,). Дефект при изготовлении лопатки турбины на американской установке Орtomec (справа). Продольный размер лопатки 5см.



Рисунок 32. 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)

При снижении скорости поглощенная мощность на единицу поверхности увеличивается и приводит к нежелательным последствиям (см. Рисунок 31б). На заднем плане радиус поворота выше критического и отрабатывается успешно, а на ближнем острый угол с радиусом поворота $\rightarrow 0$ и виден дефект. На рисунке 32а-в представлены результаты расчетов наплавки с адаптацией технологических параметров. При прохождении маневра на пониженной скорости без изменения излучения, массового расхода И мощности 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 32б), что для исправления ситуации недостаточно одного лишь снижения мощности лазерного излучения в соответствии с определенными оптимальными значениями (Таблица 8). 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 расход порошка (Рисунок 32в). 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 (см. таблица 8).

Оптимизация параметров процесса может осуществляться путем использования как устройств с обратной связью, так и при помощи упреждающей стратегии управления. Получив динамику параметров валика из модели можно заранее корректировать параметры процесса, так что бы отклонения от заданных параметров валика были минимальными.

3.2. Влияние контактного угла на геометрические параметры валиков

	Условное обозначение набора	highSpeed	lowSpeed
	параметров		
Р, Вт	Мощность излучения лазера	640	400
V _{scan} , MM/c	Скорость сканирования	50	20
ṁ,г/мин	Расход порошка	10	4
R _{beam} , мм	Радиус лазерного пучка	1	1
R _{jet} , мм	Радиус потока порошка	0.5, 1	0.5, 1
$\alpha_{c,}$ \circ	Угол контакта наплавляемого	10 - 30	10 - 30
	материала с подложкой		

Таблица 9. Параметры процесса для исследования контактного угла

Далее исследовалось влияние контактного угла на геометрические параметры одиночного наплавленного валика. Для этого проводились численные расчеты лазерной наплавки на массивную подложку с различными параметрами потока порошка для двух скоростей сканирования. Параметры процесса приведены в таблице 9. Для простоты считается, что поток порошка имеет равномерное распределение. Порошок подается при температуре $T_{powder} = 1000K$, соосно с ЛИ, которое имеет *tophat* распределение. Использованные наборы имеют одинаковую массу порошка на единицу поверхности, но различную плотность мощности подобранную таким образом, что бы получать валики одинаковых геометрических размеров на разных скоростях.

Набор параметров		lowS	peed		highSpeed			
Ширина потока порошка, мм	1 (широкий)		0.5(узкий)		1		0.5	
Контактный угол	10°	30°	10°	30°	10°	30°	10°	30°
Половина ширины валика, мм	0.99	0.87	1.02	0.89	1.017	0.907	1.03	0.922
Высота валика, мм	0.271	0.288	0.293	0.334	0.248	0.247	0.297	0.331
Эффективность улавливания	0.91	0.8	1	1	0.88	0.79	1	1
Максимальная скорость течения в ванне расплава, м/с	0.54	0.63	0.61	0.609	0.564	0.67	0.702	0.69
Максимальная температура, К	1908	1959	1932	1931	2020	2062	2071	2069

Таблица 10. Результаты расчетов

В таблице 10 показаны выходные параметры наплавленных валиков для исследуемых режимов воздействия. На высокой скорости сканирования эффективность улавливания ниже, что приводит к различному поведению некоторых выходных параметров по сравнению с низкой скоростью. Результаты для узкого и широкого потока порошка отличаются принципиально.





Рисунок 33. Профиль наплавленного валика при высокой скорости сканирования (а, в) и низкой (б, г) для широкого (а, б) и узкого (в, г) потока порошка. $\alpha_c = 30^\circ$ (сплошная линия) and $\alpha_c = 10^\circ$ (пунктир).

На рисунке 33 а, б показано сравнение поперечного сечения валиков в случае широкого потока порошка для двух значений скорости сканирования. Высокая скорость сканирования (рисунок 33 а) соответствует большому рассогласованию ванны расплава и потока порошка, которое приводит к низкой эффективности улавливания. Полное перекрытие все еще не достигается на низкой скорости сканирования. Отставание потока порошка снижается при снижении скорости сканирования, поэтому высота несколько повышается на низкой скорости (рисунок 33 б). Валик растекается поперек направления сканирования на более смачиваемой подложке, захватывая дополнительное количество порошка, высота при этом остается постоянной. Результаты практически идентичны на высокой и низкой скоростях.

На рисунке 33 в, г показано сравнение профилей валиков в случае узкого потока порошка, когда весь подаваемый порошок захватывается ванной расплава. В этом случае снижение контактного угла, вследствие которого увеличивается ширина валика, сопровождается заметным снижением высоты валика. Результаты показывают возможность управления геометрическими параметрами валиков через контактный угол и параметрами подложки/слоев, которые влияют на него независимо от скорости сканирования.

3.3. Валидация гидродинамической модели ЛН

При помощи разработанной программы были проведены параметрические исследования одиночных дорожек порошка AISI 431 наплавленных на стальную подложку. Для сравнения было проведено экспериментальное исследование

подробности, которого описаны в разделе 2.4. Параметры материалов, использованные в расчетах, представлены в таблице 11. Все расчеты проведены для скорости сканирования равной 40 мм/с, диаметра потока порошка - 3 мм и диаметра лазерного пучка 4 мм. Результаты расчетов сравниваются с численными результатами термической модели.

Величина, размерность	Значение	Величина, размерность	Значение
Удельная теплоемкость твердого	659	Поверхностное натяжение	1.778 [106]
металла, Дж/(кг*К)		металла, Н/м	
Удельная теплоемкость	804	Градиент поверхностного	-0.49 [106]
расплавленного металла,		натяжения металла, мН/(м*К)	
Дж/(кг*K)			
Теплопроводность твердого	44	Динамическая вязкость металла,	6.989 [106]
металла, Вт/(м*К)		$m^2/c, 10^{-7}$	
Теплопроводность жидкого	40	Удельная теплота плавления,	247100
металла, Вт/(м*К)		Дж/кг	
Теплопроводность газа, Вт/(м*К)	0,03	Коэффициент поглощения ЛИ	0.45
Плотность металла, кг/м ³	7870 [106]	Коэффициент улавливания	1
		частиц	
Плотность газа, кг/м ³	1	Динамическая вязкость газа, м ² /с,	1.48
		10 ⁻⁵	
Температура плавления металла,	1809 [106]	Температура окружающего газа,	300
K		K	

Таблица 11. Основные теплофизические параметры расчета.

Таблица 12. Параметры процесса, соответствующие численные и экспериментальные результаты

P. V_{scan} m,		Термическая модель		Эксперимент		Гидродинамическая модель						
кВт	мм/с	Г/МИ Н	w, mm	$d,$ μm	<i>h,</i> µm	w, mm	<i>d</i> , μm	<i>h,</i> µm	w, mm	$d, \mu m$	<i>h</i> , μm	улавли вание
2.7						1975	604	233	1832	449	288	0.99
3.2	30	6		-		2084	298	233	1730	347	279	0.98
3.7						2024	217	250	1632	254	231	0.9
2.7			1445	327	245	2028	306	274	1762	350	287	0.94
3.2		9	1309	218	245	1657	209	274	1651	248	248	0.84
3.7	40		1036	136	245	1540	129	258	1426	172	154	0.58
2.7	40					1971	241	443	1783	252	529	0.95
3.2		22		-		1633	112	435	1612	148	531	0.83
3.7						1326	48	419	1402	80	415	0.56

Параметры процесса и соответствующие численные и экспериментальные приведены в таблице 12



Рисунок 34. Зависимость ширины (а) и высоты (б) валика от мощности ЛИ для скорости сканирования V=40mm/s и двух значений расхода порошка.



Рисунок 35. Зависимость глубины проплавления от мощности ЛИ для скорости сканирования V=40mm/s и двух значений расхода порошка.

34-35 Ha рисунках показано сравнение численных результатов с экспериментальными и численными данными. Видно, что гидродинамическая модель позволяет точнее определять основные параметры наплавки. На рисунке 34а показана зависимость ширины ванны расплава от мощности лазерного излучения. На высокой и низкой мощности ЛИ модель дает заниженные результаты. Погрешность выше на высокой мощности, что связано, по-видимому, с нелинейностью коэффициентов, не учтенных в расчетах. В целом ширина ванны расплава оценивается лучше, чем в термической модели это связано с тем, что растекание расплава происходит именно за счет гидродинамических сил.

На рисунке 346 показана зависимость высоты наплавки от мощности лазерного излучения. На высокой и средней мощности модель хорошо определяется в гидродинамической модели. При этих двух значениях мощности коэффициент улавливания максимален, а высота наплавки не изменяется с увеличением мощности. На низкой мощности расчеты показывают, уменьшение ширины и отставание ванны расплава от переднего края пучка, что приводит к уменьшению степени перекрытия с потоком порошка. Разработанная модель

85

показывает снижение эффективности улавливания и как следствие снижение высоты наплавки на низкой мощности ЛИ. В эксперименте это снижение не столь значительное, что, по-видимому, связано с неверным расчетом степени пересечения ванны расплава и потока порошка. В модели использовался единый коэффициент улавливания для двух расходов порошка. Видно, что в случае большого расхода порошка модель дает завышенные значения высоты наплавки, что связано, по-видимому, различным значением этого коэффициента для высокого и низкого расхода порошка в реальной ситуации. Что в принципе оправдано, поскольку в более плотном потоке порошка взаимные соударения могут приводить к потере большего количества порошка.

На рисунке 35 показана зависимость глубины проплавления от мощности лазерного излучения. Модель дает несколько завышенные результаты для исследованных значений расхода порошка. Глубина проплавления практически линейно растет с увеличением мощности ЛИ. Некоторая нелинейность видна в случае большого значения расхода порошка.



Рисунок 36. Продольное (а) и поперечное (б) сечение рассчитанных температурных полей. Поперечный разрез наплавленного валика, эксперимент (в). (V=30mm/s, m=6.76g/min, P=3707W, стрелками показан вектор скорости течения)



Рисунок 37. Сравнение экпериментальной и рассчитанной зависимости степени перемешивания от мощности ЛИ для двух наборов параметров.

Основной источник конвекции находится на границе *tophat* пучка [120]. Поэтому основное течение на поверхности ванны расплава будет возникать в зависимости от ее положения относительно пучка. На рисунке 36 а, b показаны продольный и поперечный разрез ванны расплава. Черными линиями показана ванна расплава, а красный контур – 90% поглощенной лазерной мощности, стрелками показано направление движение жидкости. В нашем случае ванна расплава длиннее и «уже» пучка, а течение на поверхности направлено назад. Модель показывает проседание поверхности ванны расплава из-за гидродинамического течения на высокой мощности ЛИ. Такое проседание приводит к большим значениям степени перемешивания и большой глубине проплавления по центру валика. Можно предположить, что для широкого валика (по отношению к лазерному лучу) глубина будет максимальной на периферии ванны расплава.

На рисунке 37 показаны значения степени перемешивания для наборов параметров с ее высокими и низкими значениями. Видно хорошее соответствие гидродинамической модели для наборов параметров с низкой степенью перемешивания. Согласование хуже для набора параметров с высокой степенью перемешивания, но модель показывает не здоровое увеличение степени перемешивания на высокой мощности ЛИ, что говорит о ее применимости для нахождения границ окна оптимальных параметров процесса.



Рисунок 38. Сравнение профиля экспериментального валика (на фоне) с численными результатами показанными белыми линиями (а). Фотография поперечного разреза валика с оптического микроскопа (б).

На рисунке 38 показано сравнение профиля с численными результатами. Практически идеальное соответствие получено для показанного набора параметров. Численные результаты дают несколько вогнутую форму валика, чего не наблюдается в эксперименте. Течение поперек движения пучка приводит к образованию широкого и низкого края валика, чего не удается верифицировать экспериментальными данными. Это возможно связано с распределением пучка ЛИ не соответствующему реальному, приводящему к большим градиентам температуры и как следствие сильному поперечному течению.

С практической точки зрения важным является не только соответствие расчетов экспериментальным результатам, но также время счета [121]. Его можно уменьшить путем декомпозиции области расчета и использования параллельных вычислений. Типичные гидродинамические задачи мезоуровня в ЛАПТ масштабируются до сотни ядер [100], что делает оптимальным использование больших кластеров для параллельных расчетов диапазона входных параметров. Время счета окна оптимальных параметров процесса снижается, при этом требуется использование значительных вычислительных ресурсов.

3.4. Выводы к главе 3

Развита гидродинамическая модель лазерной наплавки с учетом эффективности улавливания порошка и контактного угла валика и подложки. Модель основана на базе открытого пакета вычислительной гидродинамики OpenFoam. Она позволяет планировать процесс, учитывая геометрию теплоотвода при создании трехмерных деталей. Гидродинамика движения расплава, включенная в численную модель наплавки, оказывает существенное влияние на соотношение высоты и ширины валика при разных режимах обработки.

- Рассмотрены типичные ситуации теплоотвода: 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.
- Показан различный отклик геометрии валика на изменение контактного угла в зависимости от сравнения ширины пучка порошка с ванной расплава. В случае широкого потока порошка увеличение контактного угла уменьшает ширину валика и эффективность улавливания, но высота валика остается прежней. Снижение ширины валика сопровождается повышением его высоты при таком же изменении контактного угла в случае узкого потока порошка.
- \geq Проведено сравнение макроскопических параметров наплавленного валика ЛН гидродинамической модели учитывающей эффективность для 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 экспериментом. удовлетворительным согласованием с Рассчитанные профили валиков хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Глава 4. Характеристики микроструктуры наплавленных валиков при ЛН

Микроструктура определяет многие физико-механические характеристики наплавленного материала. Такие свойства как твердость и прочность являются функциональными параметрами важными наплавленного материала, синтезируемого ЛН. Их значения обычно определяют исходя из значений площади поверхности кристаллических зерен и расстояния между ними, которые в свою очередь зависят от их среднего размера [122]. Поэтому исследование микроструктуры наплавленных слоев формирующихся после кристаллизации является актуальной задачей оптимизации режимов СЛН, а средний размер кристаллитов – важным выходным параметром. На рисунке 39 показана типичная микроструктура наплавленных валиков сплава на основе Ni (ВЖЛ12У-ВИ) Р=1.8 кВт 8 г/мин для различных скоростей сканирования. Видно, что структура зерен ячеистая, и хорошо описывается средним размером. С увеличением скорости наплавки происходит измельчение размера зерен.





Рисунок 39. Микроструктура литого металла валика, наплавленного порошком на основе Ni на различных скоростях сканирования (а – 2 мм/с; б – 4 мм/с; в – 6 мм/с)

Целью настоящей главы является численное исследование микроструктуры наплавленного валика 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 КЈМА, для условий неоднородного распределения температуры расплава в зоне спекания. Расчет микроструктуры проводится в приближении среднего поля (*PKJMA*).

В качестве объектов для исследования микроструктуры были выбраны легкоплавкий силумин и тугоплавкий сплав на основе никеля (ВЖЛ12У-ВИ). Силумин содержит нерастворенные частицы кремния с размером порядка 5 мкм. Считается, что кристаллизация кремния происходит на этих частицах по гетерогенному поверхностному механизму (по формуле (11)), а смачиваемость частиц считается высокой ($\varphi = 60^{\circ}$). В случае со сплавом на основе никеля предполагается гомогенная поверхностная нуклеация (уравнение (9)). Получена динамика распределения кристаллитов по размерам. Окончательное распределение позволяет оценить средний размер кристаллитов необходимый для оценки прочностных характеристик наплавленных слоев.

Данная модель позволяет путем оптимизации режимов обработки получать наплавленные слои с однородным распределением кристаллитов, либо с требуемым градиентом размеров. Оптимальные режимы обработки можно отображать с помощью карты процесса.

4.1. Алгоритм расчета микроструктуры

Моделирование температурных и фазовых полей проводилось в рамках модели (30), (40), (42). Для определения микроструктуры расчетная область разбивается на изотермические участки в которых расчитывается объемная доля новой фазы. Скорость зародышеобразования и роста внутри каждой ячейки постоянна и зависит только от времени. При этом для расчета новой фазы используется концентрация кристаллитов, а не конкретный объем ячейки. Способ

91

решения уравнения (3), в приближении среднего поля описан в [95] для однородной температуры кристаллизующеся системы. Концентрация виртульных частиц появляющихся в расширенном объеме с размером $R_1 = r_*$ в момент времени t равна:

$$\tilde{n}_{1,t} = J(t)dt \tag{73}$$

В каждый момент времени все частицы, находящиеся в объеме, увеличивают свой радиус на $\Delta r = G(T)dt$, т.е. частицы популяции *s* переходят в популяцию *s* + 1:

$$\tilde{n}_{s,t} = \tilde{n}_{s-1,t-1},\tag{74}$$

где s = 1 соответствует критическому размеру r_* , а $s = 2 \dots i$ размеру $R_s = r_* + s\Delta r$. В итоге, суммируя доли которые занимают виртуальные частицы с размером R_s , можно расчитать полную долю расширенного объема:

$$\tilde{b}(t_i) = \sigma \sum_{s=1}^{i} n_{ext}(t_i) R_s^{\ n}.$$
(75)

При этом реальные частицы появляются только в не закристаллизованной области:

$$n_{1,t} = [1 - b(t)]J(t)dt$$
(76)

Согласно [95] считается, что на каждом этапе только часть α_t реальных частиц свободно увеличивает свой размер на Δr . Остальная же часть $1 - \alpha_t$ реальных частиц вследствии столкновения с другими частицами размер не меняет.

$$n(1,t+1) = [1 - \alpha_t]n(1,t) + [1 - b(t)]J(t)dt$$
(77)

$$n(s,t) = [1 - \alpha_t]n(s,t-1) + \alpha_t n(s-1,t-1)$$
(78)

Доля α_t итерационно выводится из условия выполнения уравнения (3) при помощи метода Ньютона-Рафсона. Такой алгоритм позволяет получить распределение частиц по размерам для каждой термической истории, что и было проделано для всех кристаллизующихся областей ванны расплава.

4.2. Согласование алгоритма расчета микроструктуры с гидродинамическим движением

В главе Глава 2 гидродинамическое движение жидкости учитывается введением эффективной теплопроводности. Такой подход позволяет лишь примерно оценить геометрические параметры ванны расплава и соответственно теплоотвод зоны кристаллизации, который определяет микроструктурные свойства получаемых валиков. В разделе 4.4 данной главы уравнение КЈМА (42) решается совместно с уравнениями теплопроводности (62), гидродинамики (61), (63) и движения свободной поверхности (64), а шаг по времени определяется числом куранта и конвективным течением жидкости.

На этапе анализа полученной температурной истории для расчета микроструктуры следует учитывать важную особенность используемого метода РКЈМА, которой является требование нормировки [95]. Для нормировки требуется, что бы шаг по времени определялся скоростью роста зародышей новой фазы в каждый момент времени. Нормировать шаг по времени для всего поля температуры зоны кристаллизации затруднительно и связано с многочисленными вычислениями и пересылками данных. Поэтому создан алгоритм нормирования имеющейся температурной истории и согласования шага со скоростью роста зародышей, как этого требует метод РКЈМА. Пусть на і шаге по времени температура равна T_i , и фактический временной шаг, полученный при решении системы уравнений (61) - (64) равен dt_i^{fact} , а согласованный со скоростью роста шаг по времени равен:

$$dt_i^{kjma} = \frac{R_0}{G(T_i)} \tag{79}$$

где R_0 – размер нормирования, а $G(T_i)$ – скорость роста кристаллитов. В этом случае фактический шаг разбивается некоторое целое число шагов с температурой T_i равное отношению $\frac{dt_i^{fact}}{dt_i^{kjma}}$. Следует выбирать R_0 хотя бы на порядок меньше предполагаемого среднего размера кристаллитов, и так что бы

шаг dt_i^{kjma} был меньше dt_i^{fac} . На рис. 40 показана динамика изменения новой фазы для нормированной и фактической температурной истории. Видно, что нормировка не вносит значительного изменения в динамику изменения новой фазы.



Рис. 40. Динамика объемной доли новой фазы для фактической и нормированной температурной истории.

Особо требуется отметить метод определения начальных условий кристаллизации. Если J(T) - локальная скорость зародышеобразования, зависящая от времени t через температуру, то число частиц, появившееся в объеме V зоны кристаллизации за это время равно:

$$N = \int J(T)Vdt \tag{80}$$

Считается, что кристаллизация инициируется после появления заданного числа зародышей. Слишком большое число начальных зародышей задерживает начало кристаллизации и влияет на средний размер кристаллитов. Чрезмерно малые значения N приводят к большему объему термической истории (и требованиям к памяти для ее хранения), но не влияет на результат. Поэтому следует находить баланс, когда N не влияет на результат, но термическая история не слишком большая. В данной работе используется значение N=1

4.3. Динамика и пространственное распределение кристаллитов по размерам в наплавленном валике

Для исследования микроструктуры одиночного валика силумина используется термическая модель, описанная в главе 2. Параметры процесса соответствуют экспериментальной работе [13]. Параметры материалов наплавки, использованные в расчете, приведены в таблице 2 и взяты из [88, 107, 106]. Можно особо отметить размер примеси $r_p = 5$ мкм и ее смачиваемость $\varphi = 60^{\circ}$



Рисунок 41. Положение исследуемых точек в наплавленном валике.

На рисунке 41 показано 3D распределение температуры в наплавленном валике силумина в момент времени t=232 мс от начала процесса ($P = 3 \text{ кВт}, V_{scan} = 26.7 \frac{\text{мм}}{\text{с}}, \dot{m} = \frac{30 \text{г}}{\text{мин}}$). Температурное поле и высота валика вышли на стационар. Линиями показана ванна расплава, а уровень подложки соответствует z=0. Для исследования микроструктуры рассмотрим динамику температуры в нескольких точках (см. рисунок 41) по глубине наплавленного слоя.



Рисунок 42. Динамика температуры (правая шкала) и доли жидкой фазы (левая шкала) на различных расстояниях от поверхности валика.

На рисунке 42 показана такая динамика для температуры и доли новой фазы в точках 1-4, сдвинутая так, чтобы начало фазового перехода (зеленые кривые) совпадали по времени. По рисунку видно, что области на поверхности валика (точка 1) до кристаллизации охлаждаются медленней, чем те которые находятся в глубине. Это происходит за счет более сильного теплоотвода (за счет теплопроводности) в подложку по сравнению с воздушным и радиационным охлаждением валика на поверхности. Такое поведение температуры в валике показано в экспериментах по синтезу градиентных материалов [13, 14] методом ЛН.



Рисунок 43. Динамика скорости роста (правая шкала, зеленый) и зародышеобразования (левая шкала, синий) в различных точках по глубине валика.

43 Ha рисунке показана динамика скорости роста И скорости зародышеобразования в различных точках. В начале процесса кристаллизации появляется определенное число частиц. Это сопровождается выделением скрытой теплоты плавления, приводящей к повышению температуры. При этом скорость зародышеобразования снижается, и появление новых частиц приостанавливается. Далее кристаллизация происходит только за счет роста появившихся частиц. К концу процесса кристаллизации, когда выделение скрытой теплоты плавления уже не компенсирует теплоотвод, температура резко снижается, а скорость зародышеобразования вновь принимает значительные значения, достаточные для образования второй группы частиц.

4.3.1. Оценка характерного размера кристаллитов

Как правило, для нормировки размеров частиц при неизотермической кристаллизации используется характерный радиус, связанный с пиковой температурой [97]. Так как, в нашем случае, для разных пространственных точек

пиковая температура меняется, такая нормировка не позволяет сравнить радиусы между собой. Поскольку кристаллизация начинается при одной и той же температуре, в наших расчетах для нормировки размеров частиц будем использовать λ:

$$\lambda = \sqrt[3]{\frac{G(T_0)}{J(T_0)}},\tag{81}$$

где *T*₀ – температура начала кристаллизации.

На рисунках 44-45 показаны распределения концентрации и объема частиц по размерам для всех четырех исследуемых точек. Синий соответствует начальной стадии, зеленый – промежуточной стадии, а красный - окончательному распределению частиц. На графиках виден бимодальный характер распределения частиц по размерам.



Рисунок 44. Динамика распределения концентрации частиц по размерам для исследуемых областей 1-4 по глубине валика (Синий начальная стадия, зеленый продолжение, а красный окончательное распределение частиц)



Рисунок 45. Динамика распределения занимаемого объема частиц по размерам для исследуемых областей 1-4 по глубине валика (Синий начальная стадия, зеленый продолжение, а красный окончательное распределение частиц)

Из распределения концентрации и объема частиц по размерам можно рассчитать средний радиус кристаллитов. Самым простым подходом здесь является использование суммарной концентрации частиц n_{Σ} всех размеров. В случае поверхностного роста:

$$\hat{R}_N = \sqrt[2]{\frac{1}{\pi n_{\Sigma}}}.$$
(82)

Такой подход оправдан при мономодальном распределении частиц по размерам. Когда размеры частиц распределены не равномерно, такая оценка не точно описывает реальную ситуацию.



Рисунок 46. Средний размер (а) и число частиц (с) в зависимости от расстояния от дна ванны расплава согласно работе [13]

99

Ввиду многомодального распределения частиц по размерам, важно знать какой объем занимают частицы в среднем. Средневзвешенный по объему радиус можно рассчитать, зная, какую долю занимают частицы определенных размеров:

$$\hat{R}_{V} = \frac{\sum_{1}^{N} r_{i} b_{i}}{\sum_{1}^{N} b_{i}} = \sum_{1}^{N} \pi r_{i}^{3} n_{i}.$$
(83)

Заметим, что частицы субмикронного размера занимают объемную долю равную $\pi r^2 n \approx 0$ и не могут быть обнаружены в условиях реального эксперимента, так что их следует исключить из расчета среднего размера частиц.

4.3.2. Влияние температурного режима на конечную микроструктуру и сравнение с экспериментальными данными

Результаты расчетов среднего радиуса по формулам (82) и (83), а также суммарное число частиц приведены в таблице 13.

			n	n ,	
Точ	Глубина от	Средний	Средневзвешенный	Эксперимент,	Суммарная
ка	поверхности	радиус по	радиус по объему,	МКМ	концентрация
	валика, мкм	числу частиц,	МКМ		частиц расчет,
		МКМ			n_{Σ} , cm^{-2}
1	~0	27	47	55	42703
2	~1000	19	28	30	88577
3	~1500	18	25	20	99648
4	~2500	16	22	10	116193

Таблица 13. Средние радиусы по глубине валика для силумина

Видно, что средний радиус кристаллитов по мере удаления от поверхности вглубь наплавленного валика убывает, а их суммарное число, наоборот, возрастает. Это связано с различной динамикой температурного поля на поверхности и в глубине: с низкой скоростью охлаждения в первом случае и высокой во втором.

На рисунке 46 показаны экспериментальные результаты из работы [13] для наплавки порошка AlSi40 на подложку из алюминия. По рисунку 46 видно, что при изменении глубины на 2500 мкм, средний размер частиц уменьшается с 50мкм до 10мкм. Эти результаты согласуются с результатами моделирования для расплава AlSi40 (Рисунок 47). Поэтому можно говорить об адекватности использованной численной модели ЛН.



Рисунок 47. Сравнение среднего размера зерен с экспериментом. Показаны результаты численного расчета (точками), линия тренда и достоверность аппроксимации, а также экспериментальные результаты.

4.4. Зависимость среднего размера кристаллитов наплавленного валика от параметров процесса

4.4.1. Зависимость среднего размера кристаллитов от скорости охлаждения

Качественная лазерная наплавка может проходить в различных режимах лазерного воздействия. Причем у процесса может быть несколько окон оптимальных параметров, на высоких скоростях сканирования и на низких. Мощность лазерного излучения требуется подбирать соответственно скорости сканирования. На рисунках 48 а, б показана ванна расплава для различных скоростей сканирования и мощности лазерного излучения. Использовались два набора параметров: Мощность P = 400 Вт (640 Вт), коэффициент поглощения 0.45, радиус пучка $R_{beam} = 1$ мм, расход порошка $\dot{m} = 4$ г/мин (10 г/мин), коэффициент улавливания 0.9, диаметр потока порошка $d_{jet} = 1$ мм, скорость сканирования $V_{scan} = 20$ мм/с (50 мм/с). В скобках указан высокоскоростной набор параметров. В качестве материала наплавки используется супер сплав на основе Ni Inconel 718, который состоит 52.5% Ni, 19.0% Cr, 18.8% Fe, 5.2% Nb, 3.1% Мо, 0.9% Ti, 0.5% Al. Параметры сплава, использованные в расчетах, приведены в таблице 2.



Рисунок 48. Продольный разрез наплавленного валика на уровне подложки для низкоскоростного (верхний) и высокоскоростного (нижний) набора параметров процесса.

В случае высокоскоростной наплавки профиль наплавленного валика имеет ярко выраженный вытянутый характер. Зона по краям лазерного пятна имеет резкий градиент температуры, а периферийная область ванны расплава практически не имеет его. Высокий градиент температуры связан с лазерным источником конечных размеров, а слабое изменение температуры – с выделением скрытой теплоты кристаллизации там, где действие источника прекращено. В случае низкой скорости сканирования распределение температуры ванны расплава аналогично, однако сама ванна расплава имеет менее выраженный вытянутый характер.



Рисунок 49. Распределение среднего размера кристаллитов в поперечном разрезе наплавленного валика для высокоскоростного (а) и низкоскоростного (б) набора параметров. (E_a =1.25 эВ)

На рисунках 49 показано распределение среднего радиуса кристаллитов в наплавленном валике для низко- и высокоскоростного набора параметров. Белая кривая показывает контур наплавленного валика и уровень металлической

101

подложки, а черная - зону рекристаллизации. Параметры подбирались таким образом, что бы геометрия валиков была схожей на разных скоростях сканирования. Видно, что в случае низкой скорости наплавки средний радиус кристаллитов выше. Близкие значения скоростей сканирования практически не влияют на средний размер кристаллитов, однако сильное различие в параметрах процесса дает видимую разницу получаемой микроструктуры наплавленного слоя. Более высокие скорости охлаждения приводят к более мелкой структуре зерен. Для верификации полученных результатов требуется только несколько референсных экспериментальных значений среднего размера зерен при заданных параметрах. Это позволяет эффективно строить карты процесса с точки зрения получения требуемой микроструктуры.



Рисунок 50. Динамика температуры (а) и объемной доли новой фазы (б) в контрольной точке для двух наборов параметров: низкоскоростного (сплошная) и высокоскоростного (пунктир).

Процесс кристаллизации инициируется только после переохлаждения с определенной скоростью. На рис. 50 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 (рис. 50а). 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 интенсивного переохлаждения наступает сталия 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 обусловливает 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 (рис. 50б) и, как следствие, к новым микроструктурным характеристикам и напряжениям в наплавленном валике.

4.4.1. Зависимость среднего размера кристаллитов от величины контактного угла валика и подложки.

На рисунке 51 показано распределение среднего размера кристаллитов в поперечном разрезе наплавленного валика для двух значений контактного угла. Также как и в случае наплавленной капли, средний размер кристаллитов больше при увеличении контактного угла. Это связано с тем, что ванна расплава более развита в случае низкого контактного угла. Небольшое увеличение ширины валика выше ширины пучка ЛИ приводит к тому, что активизируются поперечные течения. Повышение контактного угла делает ванну расплава зажатой, такой, что течение не успевает развиться. Большие значения среднего размера кристаллитов связаны с использованием неоправданно низкого значения энергии активации.



Рисунок 51. Распределение размеров кристаллитов в поперечном сечении наплавленного валика для двух значений контактного угла. (P=640Bt, Vscan=50мм/c, $\dot{m} = 10r/$ мин, $E_a = 0.8$ эВ), а $-\alpha_c = 10^\circ$, б $-\alpha_c = 30^\circ$

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. Показано, что увеличение контактного угла расплава приводит к увеличению среднего размера кристаллитов в наплавленном слое. Результаты могут быть использованы для оптимизации и планирования ЛН.

4.5. Выводы к главе 4

- \geq Исследовано влияние сопряженных процессов кристаллизации И теплопереноса на конечную микроструктуру наплавленного валика при ЛН с коаксиальной подачей порошков. Сопряженный характер процессов приводит к возможности появления бимодального распределения частиц по размерам. Рассчитано неоднородное распределение размерам ПО кристаллитов и средний размер кристаллитов в наплавленных валиках с отношением высоты и ширины большем единицы (крупно- и мелкомасштабная микроструктура в верхней и нижней частях, соответственно). При этом уменьшение размера кристаллитов составляет более чем в два Полученные раза. результаты качественно согласуются С экспериментальными данными по синтезу градиентного материала методом наплавления порошка AlSi40 на подложку из алюминия.
- Развитая с учетом гидродинамики кинетическая модель эволюции микроструктуры наплавленного валика при ЛН не требует задавать форму наплавленного валика и использовать разномасштабный подход для изучения процессов эволюции микроструктуры, позволила напрямую оценить размер зерен закристаллизованного слоя и исследовать влияние управляющих параметров процесса.
- Разработанная модель позволяет оценить микроструктуру наплавленного слоя, учитывая экспериментально измеренный контактный угол между валиком и подложкой. Это позволяет учитывать параметры подложки, определяющие контактный угол, расширяя представления о капиллярных

явлениях наплавляемого валика. Показано, что увеличение контактного угла валика приводит к увеличению среднего размера кристаллитов.

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.

Заключение и выводы

Разработаны термо-кинетическая модель и вычислительный алгоритм динамического процесса лазерной наплавки с коаксиальной подачей порошков. Развитая 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.

Рассмотрены типичные ситуации теплоотвода: 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.

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

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.

Рассчитана динамика распределения температурных и фазовых полей в ванне расплава, а также движение свободной поверхности под действием И гидродинамических сил 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.

В заключении я хотел бы выразить глубокую благодарность моему научному руководителю д.ф.-м.н. Мирзаде Ф.Х. за его идеи, требовательность и знания, без которых моя научная работа бы не появилась. Я благодарен д.ф.-м.н. Майорову В.С. без которого были бы невозможными мои первые шаги в науке, к.ф.-м.н. Гришаеву Р.В. за регулярное оппонирование, д.ф.-м.н., профессору Лебедеву Ф.В. за полезные замечания при подготовке и оформлении диссертации, д.ф.-м.н., профессору Низьеву В.Г. и всем другим сотрудникам ИПЛИТ РАН за то внимание к моей научной работе, которое было оказано. И, наконец, я хочу выразить признательность своим родителям, жене и детям за мотивацию и поддержку.

Список литературы

- Панченко В.Я., Голубев В.С. Современные лазерно-информационные технологии. Сборник трудов ИПЛИТ РАН. – Москва: Интерконтакт Наука, 2005.
- Toyserkani E., Khajepour A., Corbin S.F. Laser Cladding. Florida: CRC Press, 2005.
- 3. Kruth J.P., Wang X., Laoui T., Froyen L. Lasers and materials in selective laser sintering // Assembly Automation. 2003 Vol. 23, №4. P. 357–371.
- Kumar S. Selective laser sintering: a qualitative and objective approach // J. Miner. Met. Mater. Soc. – 2003. – Vol. 55. – P. 43-47.
- 5. Gladush G.G., Smurov I. Physics of Laser Materials Processing. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2011.
- Шишковский И.В. Лазерный синтез функциональных мезоструктур и объемных изделий. – Москва: Физматлит, 2009.
- Панченко В.Я. Лазерные технологии обработки материалов: современные проблемы фундаментальных исследований и прикладных разработок. – Москва: Физматлит, 2009.
- 8. Picasso M., Rappaz M. Laser-powder-material interactions in the laser cladding process // Journal de Physique IV. 1994. Vol. 4. P. 27-33.
- 9. He X., Mazumder J. Transport phenomena during direct metal deposition // J. Appl. Phys. 2007. Vol. 101. P. 053113.
- Wen S., Shin Y.C. Modeling of transport phenomena during the coaxial laser direct deposition process // Journal of Applied Physics. – 2010.– Vol. 108. – P. 044908.
- Qi H., Mazumder J., Ki H. Numerical simulation of heat transfer and fluid flow in coaxial laser cladding process for direct metal deposition // Journal of Applied Physics. – 2006. – Vol. 100. – P. 024903.
- 12. Cao Y., Choi J. Multiscale modeling of solidification during laser cladding process
// J. Laser Appl. – 2006. – Vol. 18, No. 3. – P. 245.

- Pei Y.T., De Hosson J.T.M. Functionally graded materials produced by laser cladding // Acta mater. – 2000. – Vol. 48. – P. 2617-2624.
- Dinda G.P., Dasgupta A.K., Mazumder J. // Surface & Coatings Technology. –
 2012. Vol. 206. P. 2152–2160.
- Oliveira U.D., Ocelık V., De Hosson J.T.M. Analysis of coaxial laser cladding processing conditions // Surface & Coatings Technology. – 2005. – Vol. 197. – P. 127–136.
- Lee H.K. Effects of the cladding parameters on the deposition efficiency in pulsed Nd:YAG laser cladding // Journal of Materials Processing Technology. – 2008. – Vol. 202. – P. 321–327.
- 17. Thomson Reuters's Web of Knowledge database: [site]. URL: http://webofknowledge.com
- Wohler T.T. Executive summary: Wohlers Report 2013 Rapid Prototyping & Tooling State of the Industry. – Wohlers Associates, Inc., 2013.
- 19. Туричин Г.А., Земляков Е.В., Поздеева Е.Ю., Туоминен Я., Вуористо П. Технологические возможности лазерной наплавки с использованием мощных волоконных лазеров // Металловедение и термическая обработка металлов. – 2012. – Т. 3. – С. 35-40.
- 20. Bachmann F.G. Chances and Limitations of High Power Diode Lasers // Proceedings of SPIE. 2004. Vol. 5336. P. 95-106.
- Chivel Y.A. Cone-shaped beams in selective laser cladding // Technical Physics Letters. – 2005. – Vol. 31, No. 1. – P. 1-3.
- Becker R., Sepold G. Micro-coating by a laser powder feed process // Advanced Powder Technology. – 1991. – Vol. 2, No. 3. – P. 181-189.
- Yadroitsev I., Gusarov A., Yadroitsava I., Smurov I. Single track formation in selective laser melting of metal powders // Journal of Materials Processing Technology. – 2010. – Vol. 210, No. 12. – P. 1624-1631.

- 24. Панченко В.Я., Васильцов В.В., Галушкин М.Г., Ильичев И.Н., Мисюров А.И. Основные теплофизические процессы в технологии послойной лазерной наплавки металлических порошков // Физика и химия обработки материалов. – 2013. – Т. 2. – С. 5-10.
- 25. Haranzhevskiy E., Danilov D., Krivilyov M., Galenko P. Structure and mechanical properties of structural steel in laser resolidification processing // Materials science and engineering A. Sructural materials properties microstructure and processing. 2004. Vol. 375. P. 502-506.
- 26. Pinkerton A.J. Advances in the modeling of laser direct metal deposition // J. Laser Appl. 2015. Vol. 27, No. S1. P. S15001
- 27. Panwisawas C., Qiu C., Anderson M.J., Sovani Y., Turner R.P., Attallah M.M., Brooks J.W., Basoalto H.C. Mesoscale modelling of selective laser melting: Thermal fluid dynamics and microstructural evolution // Computational Materials Science. – 2017. – Vol. 126. – P. 479–490.
- 28. Yamamoto T., Okano Y., Dost S. Validation of the S-CLSVOF method with the density-scaled balanced continuum surface force model in multiphase systems coupled with thermocapillary flows // Int. J. Numer. Meth. Fluids. 2017. Vol. 83, No. 3. P. 223-244.
- 29. Zhang H.O., Kong F.R., Wang G.L., Zeng L.F. Numerical simulation of multiphase transient field during plasma deposition manufacturing // Journal of Applied Physics. – 2006. – Vol. 100. – P. 123522.
- 30. Hoadley A.F.A., Rappaz M. A thermal model of laser cladding by powder injection
 // Metall. Trans. B. 1992. Vol. 23, No. 5. P. 631-642.
- 31. Kaplan A.F.H., Groboth G. Process analysis of laser beam cladding // Trans. ASME: J. Manufacturing Sci. Eng. – 2001. – Vol. 123. – P. 609-614.
- 32. Frenk A., Vandyoussefi M., Wagniere J.D., Zryd A., Kurz W. Analysis of the Laser-Cladding Process for Stellite on Steel // Metallurgical and Materials Transactions B. – 1997. – Vol. 28B. – P. 501-508.

- Lin J. Concentration mode of the powder stream in coaxial laser // Optics & Laser Technology. – 1999. – Vol. 31. – P. 251-257.
- 34. Wen S.Y., Shin Y.C., Murthy J.Y., Sojka P.E. Modeling of coaxial powder flow for the laser direct deposition process // International Journal of Heat and Mass Transfer. – 2009. – Vol. 52. – P. 5867–5877.
- 35. Han L., Liou F.W., Phatak K.M. Modeling of Laser Cladding with Powder Injection // Metallurgical and materials transactions B. – 2004. – Vol. 35B. – P. 1139-1150.
- 36. Osher S., Fedkiw R. Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces. New York: Springer-Verlag, 2003.
- Sethian J.A. Level Set Methods and Fast Marching Methods. Cambridge: Cambridge University Press, 1999.
- 38. Ki H., Mohanty P.S., Mazumder J. Modeling of Laser Keyhole Welding: Part I. Mathematical Modeling, Numerical Methodology, Role of Recoil Pressure, Multiple Reflections, and Free Surface Evolution // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2002. – Vol. 33A. – P. 1817-1830.
- 39. Ki H., Mohanty P.S., Mazumder J. Modeling of Laser Keyhole Welding: Part II. Simulation of Keyhole Evolution, Velocity, Temperature Profile, and Experimental Verification // METALLURGICAL AND MATERIALS TRANSACTIONS A. – 2002. – Vol. 33A. – P. 1831-1842.
- 40. Голубев В. С. Анализ моделей динамики глубокого проплавления материалов лазерным излучением // Препринт ИПЛИТ РАН. 1999. №. 83. С. 161.
- Seidgazov R.D. Thermocapillary mechanism of melt displacement during keyhole formation by the laser beam // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2009. – Vol. 42. – P. 175501.
- 42. Rai R., Palmer T.A., Elmer J.W., Debroy T. Heat Transfer and Fluid Flow during Electron Beam Welding of 304L Stainless Steel Alloy // Welding journal. 2009.
 Vol. 88, No. 3. P. 54-61.

- 43. Низьев В.Г., Мирзаде Ф.Х., Панченко В.Я., Устюгова Г.В., Чечеткин В.М. Тепло-массоперенос при лазерном плавлении порошковой смеси // Математическое моделирование. 2011. Т. 23, № 8. С. 75-89.
- 44. Zhang Y., Faghri A., Buckley C.W., Bergman T.L. Three-Dimensional Sintering of Two-Component Metal Powders With Stationary and Moving Laser Beams // Journal of heat transfer. – 2000. – Vol. 122. – No. 1. – P. 150-158.
- 45. Xiao B., Zhang Y. Laser sintering of metal powders on top of sintered layers under multiple-line laser scanning // J. Phys. D: Appl. Phys. 2007. Vol. 40, No. 21. P. 6725–6734.
- 46. Choi J., Han L., Hua Y. Modeling and experiments of laser cladding with droplet injection // Journal of heat transfer. 2005. Vol. 127. P. 978-986.
- Lampa C., Kaplan A.F.H., Powell J., Magnusson C. An analytical thermodynamic model of laser welding // J. Phys. D: Appl. Phys. – 1997. – Vol. 30. – P. 1293– 1299.
- 48. Bedenko D.V., Kovalev O.B., Smurov I., Zaitsev A.V. Numerical simulation of transport phenomena, formation the bead and thermal behavior in application to industrial DMD technology // International Journal of Heat and Mass Transfer. – 2016. – Vol. 95. – P. 902–912.
- Gusarov A.V., Yadroitsev I., Bertrand P., Smurov I. Heat transfer modelling and stability analysis of selective laser melting // Applied Surface Science. – 2007. – Vol. 254, No. 4. – P. 975-979.
- 50. Dianat M., al E. Coupled Level-Set Volume of Fluid Simulations of Water Flowing Over a Simplified Drainage Channel With and Without Air Coflow // SAE Int. J. Passeng. Cars - Mech. Syst. – 2017. – Vol. 10, No. 1. – P. 369-377.
- Lee Y., Farson D.F. Simulation of transport phenomena and melt pool shape for multiple layer // Journal of Laser Application. – 2016. – Vol. 28. – P. 012006 doi: 10.2351/1.4935711.
- 52. Weerasinghe V., Steen W. Laser cladding with pneumatic powder delivery //

Applied Laser Tooling. – Springer - Netherlands, 1987. – P. 183-211.

- 53. de Oliveira U., Ocelik V., De Hosson J.T.M. Analysis of coaxial laser cladding processing conditions // Surface & Coatings Technology. – 2005. – Vol. 197. – P. 127–136.
- 54. Харанжевский Е.В. Исследование высокоскоростной перекристаллизации при лазерном упрочнении среднеуглеродистой стали: диссертация на соискание степени кандидата технических наук Ижевск: 2002.
- 55. Шишковский И.В. Селективное лазерное спекание и синтез функциональных структур: Дис. доктора физ.-мат. наук. Самара: 2005. http://diss.rsl.ru/diss/06/0219/060219018.pdf.
- 56. Cho C., Zhao G., Kwak S.Y., Kim C.B. Computational mechanics of laser cladding process // Journal of Materials Processing Technology. – 2004. – Vol. 153. – P. 494–500.
- 57. Voller V.R., Prakash C. A fixed grid numerical modelling methodology for convection-diffusion mushy region phase-change problems // Int. J. Heat Mass Transfer. – 1987. – Vol. 30, No. 8. – P. 1709-1719.
- 58. Acharya R., Sharon J.A., Staroselsky A. Prediction of microstructure in laser powder bed fusion process // Acta Materialia. – 2017. – Vol. 124. – P. 360-371.
- 59. Mirzade F.K. A coupled temperature-displacement phase field model for grain growth during laser-aided metal deposition // SPIE Proc. 3D Printed Optics and Additive Photonic Manufacturing. – 2018. – Vol. 10675. – P. 106750Y https://doi.org/10.1117/12.2306597.
- 60. Bennon W., Incropera F. A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems I. Model formulation // Int. J. Heat Mass Transfer. 1987. Vol. 30, No. 10. P. 2161-2170.
- 61. Bennon W., Incropera F. A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems - II. Application to solidification in a rectangular cavity // Int. J. Heat Mass Transfer, - 1987. - Vol.

30, No. 10. – P. 2171-2187.

- Bennon W.D., Incropera F.P. Numerical analysis of binary solid-liquid phase change using a continuum model // Numerical Heat Transfer. – 1988. – Vol. 13. – P. 277-296.
- 63. Prakash C., Voller V. On the numerical solution of continuum mixture model equations describing binary solid-liquid phase change // Num. Heat Transfer B. – 1989. – Vol. 15. – P. 171-189.
- 64. Voller V.R., Swaminathan C.R. General source-based method for solidification phase change // Numerical Heat Transfer B. 1991. Vol. 19. P. 175-189.
- 65. Chekhovskoi V.Y., Peletskii V.E. Nonequilibrium Metal Melting during Rapid Heating // Russian Metallurgy. 2008. Vol. 2008, No. 5. P. 377-385.
- 66. Dubrov V.D., Grishaev R.V., Homenko M., Zavalov Y.N. Estimation of output beam characteristics of laser with unstable resonator and turbulent active medium // Laser physics. – 2009. – Vol. 19, No. 5. – P. 1131-1135.
- 67. Гусаров А.В. Физические модели воздействия лазерного излучения на конденсированные вещества в лазерной технологии получения материалов: Автореферат диссертации на соискание ученой степени доктора физикоматематических наук. – Москва: ИМЕТ РАН, 2011. http://www.triniti.ru/Dissertations/GusarovAutoreferat.pdf
- 68. Любов Б.Я. Теория кристаллизации в больших объемах. Москва: Наука, 1975.
- 69. Мирзаде Ф.Х. Кинетика нуклеации кластеров и формирование наноструктур в конденсированных системах // Современные лазерно-информационные и лазерные технологии / Под ред. В.Я. Панченко и В.С. Голубева. – Москва: Интерконтакт Наука, 2005. – С.62-78.
- 70. Kolmogorov A.N. A statistical theory for the recrystallization of metals // Bull. Acad. Sci. USSR, Ser. Math. – 1937. – Vol. 1, №3. – P. 355–359.
- 71. Johnson W.A., Mehl R.F. // Trans. Am. Inst. Min. Metall. Eng. 1939. Vol. 135.

– P. 416.

- 72. Avrami M. Granulation, phase change, and microstructure kinetics of phase change. III // J. Chem. Phys. 1941. Vol. 9, №. 2. P. 177-184.
- 73. Ревизников Д.Л., Русаков В.В. Теплообмен и кинетика кристаллизации частиц расплава при интенсивном охлаждении // Математическое Моделирование. – 1999. – Т. 11, № 2. – С. 56-64.
- 74. Полежаев Ю.В., Михатулин Д.С., Ревизников Д.Л., Русаков В.В. Основные закономерности кинетики кристаллизации и возможности получения аморфных металлов // Теплофизика высоких температур. – 1995. – Т. 33, №. 26. – С. 971-976.
- 75. Niziev V.G., Mirzade F.K., Koldoba A.V. Numerical modeling of crystallization at selective laser sintering of fine-disperse metal powders // Proceedings of X Int. Conf. ILLA. – Smolyan, Bulgaria 2009. – P. 103-108.
- 76. Solomatov V.S. Batch crystallization under continuous cooling: analytical solution for diffusion limited crystal growth // Journal of Crystal Growth. – 1995. – Vol. 148. – P. 421-431.
- 77. Kousksou T., Jami A., Arid A., Jegadheeswaran S., Zeraouli Y. Crystallisation kinetics with nucleation phenomenon: Ice slurry system // International Journal of Refrigeration. – 2012. – Vol. 35, No. 7. – P. 1921–1930.
- 78. Ананин С.И., Асташинский В.М., Емельяненко А.С., Косткевич Е.А., Кузьмицкий А.М., Жвавый С.П., Анищик В.М., Углов В.В., Пунько А.В. Динамика плавления и кристаллизации монокристаллического кремния при воздействии компрессионных плазменных потоков // Журнал технической физики. – 2006. – Т. 76, № 7. – С. 34-40.
- 79. Gatskevich E., Prikryl P., Ivlev G. Modelling laser-induced phase transformations in semiconductors // Mathematics and Computers in Simulation. – 2007. – Vol. 76. – P. 65–72.
- 80. Ivlev G.D., Gatskevich E.I. Solidification temperature of silicon surface layer

melted by pulsed laser irradiation // Applied Surface Science. – 1999. – Vol. 143. – P. 265–271.

- Беленький В.З. Геометрико-вероятностные модели кристаллизации. Москва: Наука, 1980.
- 82. Christian J.W. The theory of transformations in metals and alloys, 3rd ed. Oxford: Elsevier Science, 2002.
- 83. Sessa V., Fanfoni M., Tomellini M. Validity of Avrami's kinetics for random and nonrandom distributions of germs // Physical Review B. 1996. Vol. 54, No. 2. P. 836-841.
- 84. Ramos R.A., Rikvold P.A., Novotny M.A. Test of the Kolmogorov-Johnson-Mehl-Avrami picture of metastable decay in a model with microscopic dynamics // Phys. Rev. B. – 1999. – Vol. 59, No 14. – P. 9053.
- 85. Черепанов А.Н., Попов В.Н. Моделирование термо- и гидродинамических процессов в модифицированной наночастицами металлической капле при ее соударении с подложкой // Вестник удмуртского университета. – 2008. – Т. 1. – С. 213-221.
- Weinberg M.C., Birnie III D.P., Shneidman V.A. Crystallization kinetics and the JMAK equation // Journal of Non-Crystalline Solids. – 1997. – Vol. 219. – P. 89-99.
- 87. Shur V., Rumyantsev E., Makarov S. Kinetics of phase transformations in real finite systems: Application to switching in ferroelectrics // J. Appl. Phys. 1998. Vol. 84, No. 1. P. 445-451.
- 88. Скрипов В.П., Коверда В.П. Спонтанная кристаллизация переохлажденных жидкостей. – Москва: Наука, 1984.
- Muller R., Zanotto E.D., Fokin V.M. Surface crystallization of silicate glasses: nucleation sites and kinetics // Journal of Non-Crystalline Solids. – 2000. – Vol. 274. – P. 208-231.
- 90. Nogi K., Oishi K., Ogino K. Wettabllity of solid oxides by liquid pure metals //

Materials Transactions, JIM. - 1989. - Vol. 30, No. 2. - P. 137-145.

- 91. Mukai K., Li Z., Zeze M. Surface tension and wettability of liquid Fe-16%mass Cr-O alloy with alumina // Materials Transactions. – 2002. – Vol. 43, No. 7. – P. 1724-1731.
- 92. Харанжевский Е.В., Ипатов А.Г. Микроструктура и свойства слоев при лазерной перекристаллизации порошковых материалов на основе железа // Вестник удмуртского университета. – 2007. – Т. 4. – С. 88-97.
- 93. Сафонов А.Н., Ильичев И.Н. Лазерная наплавка порошков из железоуглеродистых сталей // Сварочное производство. – 1990. – Т. 4. – С. 30-33.
- 94. Pineda E., Crespo D. Microstructure development in Kolmogorov, Johnson-Mehl, and Avrami nucleation and growth kinetics // Physical review B. – 1999. – Vol. 60, No. 5. – P. 3104-3112.
- 95. Crespo D., Pradell T. Evaluation of time-dependent grain-size populations for nucleation and growth kinetics // Physical Review B. – 1996. – Vol. 54, No. 5. – P. 3101-3109.
- 96. Farjas J., Roura P. Numerical model of solid phase transformations governed by nucleation and growth: Microstructure development during isothermal crystallization // Physical Review B. – 2007. – Vol. 75. – P. 184112.
- 97. Farjas J., Roura P. Solid-phase crystallization under continuous heating: Kinetic and microstructure scaling laws // J. Mater. Res. – 2008. – Vol. 23, No. 2. – P. 418-426.
- 98. Гришаев Р.В., Мирзаде Ф.Х., Хоменко М.Д. // Перспективные материалы. 2013. – Т. 14. – С. 241-248.
- 99. Mirzade F.K., Niziev V.G., Panchenko V.Y., Khomenko M.D., Grishaev R.V., Pityana S., van Rooyen C. Kinetic approach in numerical modeling of melting and crystallization // Physica B: Condensed Matter. – 2013. – Vol. 423. – P. 69–76.
- 100. Khomenko M.D., Dubrov A.V., Mirzade F.K. 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.

- 101. Яворский Б.М., Детлаф А.А. Справочник по физике. Москва: Наука, 1968.
- 102. Douglas J., Rachford H.H. On the numerical solution of heat conduction problems in two and three space variables // Trans. Amer. Math. Soc. – 1956. – Vol. 82. – P. 421-439.
- 103. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Вычислительная теплопередача. Москва: Едиториал УРСС, 2009.
- 104. Патанкар С.П. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости: Пер. с англ. Москва: Энергоатомиздат, 1984.
- 105. Яненко Н.Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск: Наука, 1967.
- 106. Gale W.F., Totemeier T.C. Smithell's Metals Reference Book, (8th ed.). London: Elsevier, 2004.
- 107. Зиновьев В.Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. Москва: Металлургия, 1989.
- 108. Guo L.F., Yue T.M., Man H.C. A finite element method approach for thermal analysis of laser cladding of magnesium alloy with preplaced Al–Si powder // J. Laser Appl. – 2004.– Vol. 16, No. 4. – P. 229-235.
- 109. Evteev A.V., Kosilov A.T., Levchenko E.V., Logachev O.B. Kinetics of isothermal nucleation in supercooled melt of iron // Fizika tvyordogo tela. – 2006. – Vol. 48, No. 5. – P. 557-582.
- 110. Kargl F., Weis H., Unruh T., Meyer A. // J. Phys.: Conf. Ser. 2012. Vol. 340. –
 P. 012077.
- 111. Skapski A.S. A theory of surface tension of solids I. Application to metals. // Acta metallurgica. 1956. Vol. 4, No. 6. P. 576-582.
- 112. Albadawi A., Donoghue D.B., Robinson A.J., Murray D.B., Delauré Y.M.C.

Influence of surface tension implementation in Volume of Fluid and coupled Volume of Fluid with Level Set methods for bubble growth and detachment // International Journal of Multiphase Flow. -2013. - Vol. 53. - P. 11–28.

- 113. Moukalled F., Mangani L., Darwish M. The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics An Advanced Introductionwith OpenFOAM and Matlab. – London: Springer International Publishing , 2016.
- 114. Yokoi K. A density-scaled continuum surface force model within a balanced force formulation // Journal of Computational Physics. 2014. Vol. 278. P. 221-228.
- 115. Brackbill J.U., Kothe D.B., Zemach C. A continuum method for modeling surface tension // Journal of Computational Physics. – 1992. – Vol. 100. – P. 335–354.
- 116. OpenFOAM [Электронный ресурс]: OpenFOAM Foundation, 2016 URL: www.openfoam.org (дата обращения: 27.11.2016).
- 117. The Open Source CFD Toolbox User Guide 2014. [Электронный ресурс]: OpenFOAM Foundation, 2014. URL: http://cfd.direct/openfoam/user-guide/
- 118. Marquez Damian S. An Extended Mixture Model for the Simultaneous Treatment of Short and Long Scale Interfaces: Doctor Thesis. – Santa Fe: 2013. http://bibliotecavirtual.unl.edu.ar/tesis/handle/11185/489
- 119. Saad Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. 2nd ed. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003.
- 120. Niziev V.G., Khomenko M.D., Mirzade F.K. Process planning and optimization of laser cladding considering hydrodynamics and heat dissipation geometry of parts. // Quantum Electronics. – 2018. – Vol. 48, No. 8. – P. 743–748.
- 121. Демезон О., Троянова К.И. Влияние расчетной сетки и объема нанесенного материала на точность прогнозирования остаточных напряжений и короблений при моделировании аддитивного производства. // Труды IV международной конференции "Аддитивные технологии: настоящее и будущее". – Москва, 2018. – Р. 125-138.
- 122. Özkan V., Sarpün I.H., Erol A., Yönetken A. Influence of mean grain size with

ultrasonic velocity on microhardness of B4C–Fe–Ni composite // Journal of Alloys and Compounds. – 2013. – Vol. 574. – P. 512–519.

Приложение. Публикации автора, в которых опубликованы основные результаты диссертации Публикации по теме диссертации в рецензируемых журналах Scopus, WoS, RSCI а также в Перечне изданий МГУ

- П1. Хоменко М.Д., Мирзаде Ф.Х., Низьев В.Г. Параметрическое исследование микроструктурных свойств при лазерной наплавке // Кристаллография. 2019. Т. 64, №4. С. 663-667 (https://doi.org/10.1134/S0023476119040301) Импакт-фактор WOS 0,762
- П2. 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. (https://doi.org/10.1070/QEL16708) Импакт-фактор WOS: 1.151
- Π3. Mirzade F.Kh., Khomenko M.D., Niziev V.G. Numerical simulation of solute evolution during laser cladding with nickel superalloy powder injection // Optical and Quantum Electronics. 2016. Vol. 48. P. 513. (https://doi.org/10.1007/s11082-016-0779-4) Impact Factor WOS 1.168
- П4. Khomenko M.D., Panchenko V.Ya., Niziev 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. (http://dx.doi.org/10.3103/S1062873816040201) Импакт-фактор РИНЦ 0,513
- П5. 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. Р. 621-629. (https://doi.org/10.3103/S8756699016060145) Импакт-фактор РИНЦ 0,732
- Info. 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.

(https://doi.org/10.1070/QE2014v044n09ABEH015478) Импакт-фактор WOS: 1.151

- П7. 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. (https://doi.org/10.1016/j.physb.2013.04.053) Impact Factor WOS: 1.453
- П8. Гришаев Р.В., Мирзаде Ф.Х., Хоменко М.Д. Моделирование фазовых переходов при селективном лазерном спекании методом инжекции порошков // Перспективные материалы. – 2013. – Т. 14. – С. 241-248. Импакт-фактор РИНЦ 0,359
- П9. Гришаев Р.В., Мирзаде Ф.Х., Низьев В.Г., Панченко В.Я., Хоменко М.Д. Моделирование плавления и кристаллизации при селективном лазерном спекании с инжекцией металлических порошков // Физика и химия обработки материалов. 2013. Т. 2. С. 12-23. Импакт-фактор РИНЦ 0,377

Иные научные труды по теме диссертации

- Π1. 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. (https://doi.org/10.1088/1742-6596/1096/1/012144)
- Π2. 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. (https://doi.org/10.1088/1742-6596/1109/1/012004)
- ПЗ. 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. (https://doi.org/10.1016/j.proeng.2017.09.679)