

УДК 621.793:669.056.9:535.233.52

НЕСТАЦИОНАРНЫЙ СОПРЯЖЕННЫЙ ТЕПЛООБМЕН И ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ПРИ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКЕ ПОВЕРХНОСТИ. ЧАСТЬ 1. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ МЕТОД И ЕГО РЕАЛИЗАЦИЯ*

А.А. ГОЛОВИН, О.П. СОЛОНЕНКО

*Институт теоретической и прикладной механики
им. С.А. Христиановича СО РАН, Новосибирск*

Разработаны физико-математические модели, вычислительная процедура на основе метода конечных элементов, а также программное обеспечение для численного исследования процессов нестационарного сопряженного теплообмена и фазовых превращений при обработке поверхности высококонцентрированными потоками энергии со стационарным, импульсным и подвижным источниками нагрева (оплавление покрытий, закалка поверхностных слоев, очистка поверхности и др.). Предложенный и реализованный подход позволяет исследовать процессы в широком диапазоне плотности мощности внешних тепловых потоков $q \in [10^7, 10^{14}]$ Вт/м², имеющих существенно различающиеся пространственные и временные масштабы.

Представленные результаты имеют интерес для понимания и моделирования процессов, происходящих при поверхностной обработке покрытий и материалов высококонцентрированными потоками энергии.

ВВЕДЕНИЕ

Для оптимизации многих высокотемпературных технологий (плазменное напыление, плазменно-механическая обработка, процессы резки, сварки и модификации поверхности, электронная, ионная и лазерная обработка материалов и т. д.) являются принципиальными исследования нестационарного сопряженного теплопереноса и фазовых превращений в твердых телах, нагреваемых неоднородными по пятну воздействия концентрированными потоками энергии (КПЭ) [1, 2] и др.

КПЭ могут воздействовать на подложку как путем теплопередачи через поверхность (электрическая дуга, плазменная струя, лазерный луч, ионный пучок), так и путем прямого ввода энергии в приповерхностный слой на глубину в десятки и сотни микрон (электронный пучок, высокочастотная импульсная закалка). При этом КПЭ могут быть стационарными или импульсными, с неподвижным или движущимся пятном воздействия, а также могут различаться характерным размером зоны термического воздействия (ЗТВ) — от 10^{-3} м и менее до размеров изделия.

Несмотря на значительное различие в реализациях устройств для генерации КПЭ и физических принципов, лежащих в их основе, математическое моделирование их воздействия на покрытие или подложку в общем случае связано с исследованием нестационарных сопряженных задач нелинейной теплопроводности

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 07-08-00209).

для анизотропной гетерогенной среды при наличии поверхностного или объемного источника теплоты, которые решаются совместно с уравнениями, контролирующими динамику зоны плавления (затвердевания), а также возможного поверхностного испарения материала. Задача также может быть дополнена уравнениями межфазного тепло- и массопереноса между расплавом и взвешенными в нем тугоплавкими нано- и микрочастицами (процессы растворения и легирования, модифицирования приповерхностного слоя расплава с целью измельчения зерна при последующем затвердевании и т. п.).

Исследование перечисленных задач с помощью вычислительного эксперимента представляется актуальным, поскольку проведение физического эксперимента крайне затруднено вследствие малости зон, интенсивного нагрева и последующего охлаждения, а также времени протекания процессов плавления и кристаллизации; весьма проблематично также использование контактных методов измерения температуры в системе покрытие–подложка. Протекающие при этом теплофизические процессы в значительной мере определяют динамику физико-химических процессов и структурных изменений в обрабатываемом материале. Следовательно, прогнозирование особенностей их протекания способствует более достоверной интерпретации данных материаловедческого анализа обработанных образцов и изделий.

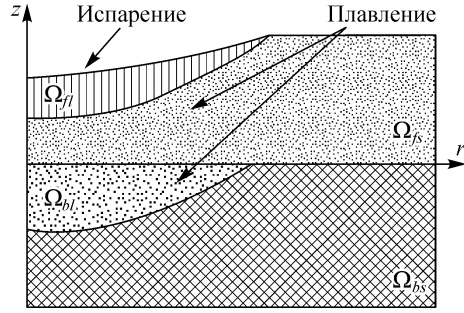
Практически интересным процессом является очистка поверхности металла от оксидного слоя с помощью катодной вакуумной дуги [3]. Катодные пятна воздействуют селективно на оксидный слой и удаляют его путем испарения. Наблюдаемая скорость удаления оксидного слоя обратно пропорциональна его толщине и прямо пропорциональна току дуги. Для понимания закономерностей, определяющих данный процесс, были предложены упрощенные модели [3, 4], основанные на балансе энергии в прикатодной области. Для более точного управления процессом поверхностной очистки и уменьшения остаточной шероховатости, возникающей на очищенной металлической поверхности из-за ее подплавления при испарении слоя оксида, необходимо развить более адекватную модель, учитывающую нестационарный сопряженный теплоперенос и фазовые превращения в оксидном слое и металлической подложке при плотностях мощности теплового потока 10^{10} – 10^{14} Вт/м², характерных для данного процесса.

1. ОБОБЩЕННАЯ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ИССЛЕДУЕМЫХ ПРОЦЕССОВ

Сформулируем краевую задачу в осесимметричной постановке, описывающую процессы теплопереноса и фазовых превращений, на примере взаимодействия пятна вакуумной дуги с поверхностью оксидного слоя, расположенного на внешней поверхности полубесконечной металлической подложки. На рис. 1 схематически представлена расчетная область (ось r совмещена с границей раздела слоев, ось z направлена к внешней поверхности оксидного слоя, начало координат находится под центром пятна привязки дуги).

В общем случае расчетная область Ω является объединением следующих под областей $\Omega = \Omega_{fs} \cup \Omega_{fl} \cup \Omega_{bs} \cup \Omega_{bl}$ (см. рис. 1), а ее внешняя граница $\Gamma = \Gamma_q \cup \Gamma_{eq} \cup \Gamma_0$. Внутренние границы между подобластями — Γ_{fb} , Γ_{fsl} , Γ_{bst} . Очевидно, что в процессе решения краевой задачи перечисленные подобласти и границы претерпевают изменения. Здесь и далее индексы s и l отвечают твердому и жидкому состоянию материала, а индексы f и b — материалу поверхностного слоя и подложки (основы), m и e — дополнительные индексы, характеризующие

Рис. 1. Схематическое представление расчетной области.



физические параметры при температуре плавления и кипения. Γ_{fsl} — граница плавления в оксидной пленке, Γ_{bsl} — граница плавления в подложке, Γ_{fb} — граница раздела оксидной пленки и подложки, Γ_0 — часть границы, на которой отсутствует теплообмен с внешней средой, в том числе ось симметрии, Γ_q — часть внешней границы, отвечающая пятну воздействия внешнего теплового потока, Γ_{eq} — участок границы, на котором одновременно имеет место воздействие теплового потока и испарение.

В начальный момент $\Omega = \Omega_{fs} \cup \Omega_{bs}$, $\Gamma = \Gamma_q \cup \Gamma_0$, а температура в области Ω равна T_0 .

Теплообмен в области Ω контролируется уравнением теплопроводности

$$\rho_i c_i \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\lambda_i \text{grad } T) \text{ при } i = fl, fs, bl, bs, \quad (1)$$

где ρ_i , c_i , λ_i — плотность, теплоемкость и теплопроводность, зависящие от материала i -й подобласти и его агрегатного состояния. Далее индексы материалов будем указывать только в том случае, если принадлежность свойств(а) какому-либо из материалов не очевидна.

На текущих границах области Ω учитываем:

– воздействие внешнего теплового потока

$$\lambda \partial T / \partial n |_{\Gamma_q} = q, \quad (2)$$

где n — внешняя нормаль к границе области Ω ;

– испарение материала при одновременном воздействии внешнего теплового потока

$$T |_{\Gamma_{eq}} = T_e, \quad \lambda \partial T / \partial n |_{\Gamma_{eq}} = L_e \rho_l (d\zeta / dt) + q; \quad (3)$$

– плавление в оксидном слое и подложке:

$$T |_{\Gamma_{sl}} = T_m, \quad \lambda \partial T / \partial n |_{\Gamma_{sl+0}} - \lambda \partial T / \partial n |_{\Gamma_{sl-0}} = L_m \rho_{sm} (d\xi / dt), \quad (4)$$

где n — внешняя нормаль к фронту плавления (затвердевания), нижний индекс m отвечает свойствам материала при температуре плавления;

– условие отсутствия теплообмена с внешней средой на границе Γ_0 , в том числе условие на оси симметрии

$$\lambda \partial T / \partial n |_{\Gamma_0} = 0, \quad (5)$$

– условия сопряжения на границе раздела “оксидная пленка (покрытие)–подложка”:

$$\lambda \partial T / \partial n |_{\Gamma_{fb-0}} = \lambda \partial T / \partial n |_{\Gamma_{fb+0}}, \quad T |_{\Gamma_{fb-0}} = T |_{\Gamma_{fb+0}}. \quad (6)$$

Начальные условия:

$$t=0: T(r, z) = T_0, (r, z) \in \Omega. \quad (7)$$

Для решения системы (1–7) используется метод конечных элементов [5], причем используется неявная аппроксимация задачи. Пространственная дискретизация выполняется в виде разбиения расчетной области на треугольные конечные элементы [6]. Важно, что на границах Γ_q , Γ_{eq} , Γ_{fsl} , Γ_{bsl} заданы одновременно краевые условия первого и второго рода.

Важными преимуществами разработанного вычислительного метода являются динамическая адаптивная триангуляция, а также динамическое масштабирование расчетной области. Данные процедуры непосредственно связаны с временными и пространственными масштабами процессов нагрева (охлаждения) и фазовых превращений.

2. СКВОЗНЫЕ ОДНОМЕРНЫЕ ОЦЕНКИ ВРЕМЕННЫХ И ПРОСТРАНСТВЕННЫХ МАСШТАБОВ

Предположим, что в момент времени $t = 0$ к поверхности полубесконечной основы с начальной температурой T_{b0} приложен постоянный тепловой поток с плотностью мощности q (см. рис. 1). Введем характерный внутренний линейный масштаб задачи $L = \lambda_m^{(s)}(T_m - T_{b0})/q$, где $\lambda_m^{(s)}$ — теплопроводность материала основы в твердом состоянии при температуре плавления.

Получение достаточно точных аналитических оценок, характеризующих процессы, протекающие в цепочке нагрев–плавление–перегрев–испарение–затвердевание–охлаждение при обработке поверхности КПЭ представляется важным, поскольку они используются в качестве начальных асимптотик, при оценке шага интегрирования по времени, а также при построении адаптивных симплициальных триангуляций расчетной области. Особенностью используемых нами приближенных решений и оценок является то, что при их выводе учитывается предыстория протекания процессов как в прямом, так и в обратном направлениях указанной выше цепочки, что выгодно отличает их от обычно используемых оценок по порядку величины, когда каждая оценка получается независимо от других, что существенно снижает их точность.

Анализ теплофизических процессов в металлической подложке при воздействии КПЭ различной плотности мощности $q = 10^7 \div 10^{14}$ Вт/м² будет ограничен рассмотрением моментов времени, отвечающих следующей последовательности этапов:

- 1) нагреву поверхности подложки до температуры плавления — t_1 ;
- 2) подплавлению подложки на заданную глубину h — $t_2 > t_1$.

Данный этап может состоять из двух стадий: а) момента времени $t_{21} > t_1$ достижения поверхностью основы температуры T_e испарения материала, при условии, что слой требуемой толщины h еще не полностью расплавлен; б) t_{22} — момента времени $t_{22} > t_{21}$ завершения полного плавления слоя, когда одновременно происходит плавление подложки и испарение с ее поверхности; очевидно, что фронт испарения не может догнать фронт плавления, поскольку теплота испарения материала существенно превосходит теплоту его плавления; считаем, что после завершения плавления слоя, т. е. в момент времени $t_2 \equiv \max\{t_{21}, t_{22}\}$, действие поверхностного теплового источника прекращается;

3) моменту $t_3 > t_2$ затвердевания слоя расплава, образовавшегося на поверхности основы.

Вообще говоря, одновременно с затвердеванием происходит охлаждение перегретого слоя расплава, поскольку непосредственно в момент времени t_2 температура поверхности образовавшегося слоя расплава выше температуры плавления, а в момент времени t_3 температура поверхности основы равна $T_s(t_3) = T_m$;

4) охлаждению поверхности основы от температуры $T_s(t_3)$ до заданной температуры $T_{b,\text{end}} > T_{b0}$; t_4 — момент окончания данного этапа.

2.1. Нагрев подложки

Начало системы координат совместим с поверхностью основы, а ось z направим навстречу падающему потоку. Рассмотрим следующую краевую задачу в безразмерном виде:

– начальные условия

$$\tau = 0: \vartheta(\tau, \bar{z}) = 0, \quad -\infty < \bar{z} \leq 0, \quad \vartheta = (T - T_{b0}) / (T_m - T_{b0}), \quad \bar{z} = z / L, \quad \tau = a_m^{(s)} t / L^2, \\ a^{(s)} = \lambda^{(s)} / \rho^{(s)} c^{(s)}, \quad (8)$$

– уравнение переноса тепла в основе

$$\tau > 0, \quad -\infty < \bar{z} \leq 0: \frac{\partial \vartheta}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \bar{a}^{(s)} \frac{\partial \vartheta}{\partial \bar{z}}, \quad (9)$$

– граничные условия ($q = \text{const}$)

$$\tau > 0: \bar{\lambda}^{(s)} \left(\frac{\partial \vartheta}{\partial \bar{z}} \right)_{\bar{z}=+0} = 1, \quad \left(\frac{\partial \vartheta}{\partial \bar{z}} \right)_{\bar{z}=-\infty} = 0, \quad \bar{\lambda}^{(s)} = \lambda^{(s)} / \lambda_m^{(s)}, \quad \bar{a}^{(s)} = a^{(s)} / a_m^{(s)}. \quad (10)$$

Учитывая постоянство плотности мощности q теплового потока, воспользуемся приближенным аналитическим решением краевой задачи (8)–(10), согласно которому безразмерная температура поверхности $\vartheta_s(\tau)$ имеет вид

$$\vartheta_s(\tau) = [\sqrt{\bar{a}^{(s)} / \bar{\lambda}^{(s)}}] \sqrt{4\tau/3}, \quad (11)$$

а текущая безразмерная толщина теплового пограничного слоя определяется как

$$\bar{H}(\tau) = \sqrt{12\tau}. \quad (12)$$

Из выражения (11) находим безразмерное τ_1 и размерное t_1 время, необходимое для нагрева поверхности основы до температуры плавления T_m :

$$\tau_1 = 3 / 4\bar{a}^{(s)}, \quad t_1 = \frac{3}{4a^{(s)}} \left(\frac{\lambda^{(s)}(T_m - T_{b0})}{q} \right)^2. \quad (13)$$

Подставляя найденное значение времени τ_1 в (12), определяем соответствующую эффективную толщину теплового пограничного слоя

$$\bar{H}(\tau_1) = 3\bar{\lambda}^{(s)}, \quad H(t_1) = 3\lambda^{(s)}(T_m - T_{b0}) / q. \quad (14)$$

Так, например, для алюминия при плотности мощности теплового потока $q = 10^9$ Вт/м², $T_{b0} = 293$ К будем иметь $t_1 = 1,5 \cdot 10^{-4}$ с, $H(t_1) = 4,2 \cdot 10^{-4}$ м.

2.2. Плавление слоя заданной толщины с учетом возможного испарения

Для получения решения, характеризующего подплавление приповерхностного слоя, рассмотрим уравнение Стефана, предполагая квазистационарность распределения температуры в переменном по толщине слое расплава,

$$\frac{d\bar{\zeta}}{d\tau} = \frac{1}{\text{Ku}_m^{(s)}} \left[\left(\frac{\partial \vartheta}{\partial \bar{z}} \right)_{\bar{\zeta}=0} - 1 \right], \quad (15)$$

где $\text{Ku}_m^{(s)} = L_m / [c_m^{(s)}(T_m - T_{b0})]$ — критерий фазового перехода Стефана–Кутеладзе.

Оценка теплового потока от фронта плавления в подложку, без учета движения фронта, имеет вид

$$\left(\frac{\partial \vartheta}{\partial \bar{z}} \right)_{\bar{\zeta}=0} \approx \frac{3}{4\sqrt{2\tau}}. \quad (16)$$

Следовательно, динамика фронта плавления в основе при $\tau > \tau_1$ определяется из задачи Коши

$$\frac{d\bar{\zeta}}{d\tau} = \frac{1}{\text{Ku}_m^{(s)}} \left[\frac{3}{4\sqrt{2\tau}} - 1 \right], \quad \bar{\zeta}(\tau_1) = 0, \quad (17)$$

решая которую, определим момент времени τ_2 , в котором будет подплавлен слой заданной толщины $\bar{h} = h/L$, $h > 0$

$$\tau_2 = \frac{9}{32} \left[1 + \sqrt{1 + \frac{32}{9} \left(\bar{h} \text{Ku}_m^{(s)} + \tau_1 - \frac{3}{2\sqrt{2}} \sqrt{\tau_1} \right)} \right]^2, \quad (18)$$

а длительность этапа плавления слоя определится как $\Delta\tau_2 = \tau_2 - \tau_1$.

Для алюминия при плотности мощности теплового потока $q = 10^9$ Вт/м² время нагрева поверхности подложки до температуры плавления составит $t_1 = 1,5 \cdot 10^{-4}$ с, $\text{Ku}_m^{(s)} = L_m / [c_m^{(s)}(T_m - T_{b0})] = 0,7$, $h = 10^{-4}$ м. Положим $\lambda^{(s)} = \lambda_m^{(s)} = 220$ Вт/(м·К), тогда $a_m^{(s)} = 9,89 \cdot 10^{-5}$ м²/с, $L = \lambda_m^{(s)}(T_m - T_{b0})/q = 1,408 \cdot 10^{-4}$ м, $\bar{h} = 0,71$, $\tau_1 = a_m^{(s)} t / L^2 = 0,75$, $\tau_2 = 1,719$, $t_2 = 3,45 \cdot 10^{-4}$ с. Поскольку $\vartheta_e = 3,79$, $\tau_{21} = 3,87$, то процесс подплавления на заданную глубину проходит без испарения с поверхности, а длительность процесса $\Delta\tau_2 = \tau_2 - \tau_1 = 1,719 - 0,75 = 0,969$ или $\Delta t_2 = 1,94 \cdot 10^{-4}$ с.

В процессе плавления слоя заданной толщины может происходить перегрев расплава. Поэтому необходимо контролировать температуру его поверхности с целью определения момента времени, когда она станет равной T_e кипения материала. Для этого будем использовать допущение, что для достаточно тонкого слоя расплава распределение температуры в нем квазистационарно, т. е. справедливо соотношение $\vartheta_s(\tau) = 1 - \bar{\zeta}(\tau)$.

Если при $\tau = \tau_2$ выполняется неравенство $\vartheta_s(\tau_2) - 1 \leq \bar{h}$, то на этапе плавления слоя заданной толщины не происходит испарения материала, в то время как при $\vartheta_s(\tau_2) - 1 > \bar{h}$ плавление подложки на заданную глубину протекает в две стадии. Для этого рассмотрим текущую температуру поверхности

$$\vartheta_s(\tau) = 1 - \frac{1}{\text{Ku}_m^{(s)}} \left[\frac{3}{2\sqrt{2}} (\sqrt{\tau} - \sqrt{\tau_1}) - (\tau - \tau_1) \right], \quad \tau \geq \tau_1,$$

и определим момент времени τ_{21} достижения ею температуры кипения T_e

$$\tau_{21} = \frac{9}{32} \left[1 + \sqrt{1 + \frac{32}{9} \left((\vartheta_e - 1) \text{Ku}_m^{(s)} + \tau_1 - \frac{3}{2\sqrt{2}} \sqrt{\tau_1} \right)} \right]^2. \quad (19)$$

Длительность первой стадии равна $\Delta\tau_{21} = \tau_{21} - \tau_1$, а соответствующая координата фронта плавления

$$\bar{\zeta}_0 \equiv \bar{\zeta}(\tau_{21}) = \frac{1}{\text{Ku}_m^{(s)}} \left[\frac{3}{2\sqrt{2}} (\sqrt{\tau_{21}} - \sqrt{\tau_1}) - (\tau_{21} - \tau_1) \right].$$

Для анализа второй стадии, в течение которой происходит дальнейшее плавление основы и одновременно испарение материала с ее поверхности, необходимо рассмотреть следующую задачу:

– уравнение плавления

$$\rho_m^{(s)} L_m \frac{d\zeta}{dt} = \left(\lambda_m^{(s)} \frac{\partial T}{\partial z} \right)_{\zeta=0} - \left(\lambda_m^{(l)} \frac{\partial T}{\partial z} \right)_{\zeta=+0}, \quad \zeta(t_{21}) = \zeta_0 < 0; \quad (20)$$

– уравнение испарения

$$\rho_m^{(l)} L_e \frac{d\xi}{dt} = \left(\lambda_e^{(l)} \frac{\partial T}{\partial z} \right)_{\xi=0} - q, \quad \xi(t_{21}) = 0. \quad (21)$$

Предположим, что распределение температуры в текущем жидком слое квазистационарно, тогда в первом приближении можно допустить, что $\zeta(t) - \xi(t) = \zeta_0$, $t > t_{21}$, т. е. тепловой поток перераспределяется таким образом, что в процессе испарения толщина жидкого слоя остается постоянной и равной его толщине в момент достижения поверхностью подложки температуры T_e . Единственным физически реализуемым решением краевой задачи (20), (21) является

$$\tau_{22} = \frac{9}{32} \left\{ 1 + \sqrt{1 + \frac{32}{9} \left[(\bar{h} + \bar{\zeta}_0)(1 + F_{e,m}) \text{Ku}_m^{(s)} + \tau_{21} - \frac{3}{2\sqrt{2}} \sqrt{\tau_{21}} \right]} \right\}^2, \quad (22)$$

где $F_{e,m} = \rho_m^{(l)} L_e / \rho_m^{(s)} L_m$ — параметр, характеризующий относительную энергоемкость процессов испарения и плавления. Длительность второй стадии определится как $\Delta\tau_{22} = \tau_{22} - \tau_{21}$.

2.3. Испарение слоя заданной толщины

В ряде случаев, при обработке поверхности с помощью КПЭ в условиях низкого давления, например, при очистке поверхности пятном вакуумной дуги, твердый материал может испаряться, минуя стадию плавления и непосредственно переходя в газовую фазу. В этой связи, этап плавления должен быть исключен из рассмотрения, а представляет интерес оценка времени испарения слоя заданной толщины h . Для этого, воспользовавшись решением (13), (14) и безразмерными

переменными $\tau = a_e^{(s)} t / L^2$, $L = \lambda_e^{(s)} (T_e - T_{b0}) / q$, $\bar{a}^{(s)} = a^{(s)} / a_e^{(s)}$, $\bar{\lambda}^{(s)} = \lambda^{(s)} / \lambda_e^{(s)}$, будем иметь:

$$\tau_1 = 3 / 4 \bar{a}^{(s)}, \quad t_1 = \frac{3}{4 a^{(s)}} \left[\frac{\lambda^{(s)} (T_e - T_{b0})}{q} \right]^2, \quad \bar{H}(\tau_1) = 3 \bar{\lambda}^{(s)},$$

$$H(t_1) = 3 \lambda^{(s)} (T_e - T_{b0}) / q. \quad (23)$$

Для получения оценки для времени испарения поверхностного слоя заданной толщины, пренебрегая влиянием оттока массы с поверхности подложки на тепловой поток, найдем приближенное решение задачи Коши, определяющее динамику испарения, воспользовавшись аппроксимацией (16)

$$\frac{d\bar{\xi}}{d\tau} = \frac{1}{\text{Ku}_e^{(s)}} \left[\left(\frac{\partial \vartheta}{\partial \bar{z}} \right)_{\bar{\xi}=0} - 1 \right], \quad \bar{\xi}(\tau_1) = 0, \quad (24)$$

где $\text{Ku}_e^{(s)} = L_e / [c_e^{(s)} (T_e - T_{b0})]$ — критерий испарения. Искомое решение имеет вид

$$\bar{\xi}(\tau) = \frac{1}{\text{Ku}_e^{(s)}} \left[\frac{3}{2\sqrt{2}} (\sqrt{\tau} - \sqrt{\tau_1}) - (\tau - \tau_1) \right], \quad \tau \geq \tau_1, \quad (25)$$

тогда момент времени испарения слоя заданной толщины h определится как

$$\tau_2 = \frac{9}{32} \left[1 + \sqrt{1 + \frac{32}{9} \left(\bar{h} \text{Ku}_e^{(s)} + \tau_1 - \frac{3}{2\sqrt{2}} \sqrt{\tau_1} \right)} \right]^2, \quad (26)$$

а длительность данного этапа $\Delta\tau_2 = \tau_2 - \tau_1$.

2.4. Затвердевание подплавленного слоя

Получим оценку снизу для момента времени $\tau = \tau_3$ полного затвердевания слоя расплава толщиной h , образовавшегося к моменту $\tau = \tau_2$ на поверхности металлической основы. Предположим, что слой равномерно прогрет и имеет температуру плавления T_m . Начало системы координат совместим с нижней границей слоя. Пренебрегая излучением с его поверхности, а также движением фронта затвердевания $\bar{\xi}(\tau) = \xi(\tau) / h$ при учете теплоотвода в основу, будем иметь следующую задачу Коши ($\tau \geq \tau_2$):

$$\frac{d\bar{\xi}}{d\tau} = \frac{3\bar{c}^{(s)} \sqrt{\bar{a}^{(s)}}}{4\sqrt{2} \text{Ku}_m^{(s)}} \frac{1}{\sqrt{\tau}}, \quad \bar{\xi}(\tau_2) = 0, \quad (27)$$

решение которой имеет вид

$$\bar{\xi}(\tau) = \frac{3\bar{c}^{(s)} \sqrt{\bar{a}^{(s)}}}{2\sqrt{2} \text{Ku}_m^{(s)}} (\sqrt{\tau} - \sqrt{\tau_2}), \quad \tau \geq \tau_2. \quad (28)$$

Для получения искомой оценки для τ_3 требуется решить уравнение $\bar{\xi}(\tau) = 1$. В результате будем иметь

$$\tau_3 = \left[\frac{2\sqrt{2} \text{Ku}_m^{(s)}}{3\bar{e}^{(s)} \sqrt{\bar{a}^{(s)}}} + \sqrt{\tau_2} \right]^2, \quad (29)$$

а длительность этапа $\Delta_3 = \tau_3 - \tau_2$.

3. ОСОБЕННОСТИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО МЕТОДА

3.1. Определение границ фазовых превращений

Существует несколько подходов для моделирования фазового перехода. В ряде работ используются аналитические модели, основанные на решении задачи Стефана [9, 10]. Для более точного моделирования затвердевания расплава часто используется решение уравнения сохранения энергии относительно энтальпии [11]. Для численного моделирования такой подход очень привлекателен, поскольку позволяет определять смену фаз без явного моделирования границы фазового перехода. Применение эффективной теплоемкости также позволяет избежать явного моделирования границы фазового перехода. Для этого уравнение сохранения энергии записывается в виде

$$\rho C_{eff} \left(\frac{dT}{dt} + U \nabla T \right) = \nabla (\lambda \nabla T),$$

$$\text{где } \rho C_{eff} = \begin{cases} \rho C_l, & T > T_m + e_1, \\ (\rho C_l + \rho C_s)/2 + \rho L_m / (e_1 + e_2), & T_m - e_2 \leq T \leq T_m + e_1, \\ \rho C_s, & T < T_m - e_2, \end{cases}$$

e_1, e_2 — положительные параметры, определяющие температурный интервал, в пределах которого “размазывается” граница фазового перехода [12]. В общем случае этот подход требует очень детальной сетки в окрестности фазового перехода для получения приемлемой точности решения и является очень чувствительным к выбору температурного интервала e_1, e_2 [13].

Точное определение границы фазового перехода возможно при решении уравнения сохранения энергии относительно температуры с учетом условий Стефана на границах фазовых переходов. Но этот подход сопряжен с трудностями, связанными с тем, что приходится иметь дело с разрывом градиента температуры на фронте затвердевания.

При использовании такой постановки в конечно-разностных методах [14] первое краевое условие в уравнениях (3) и (4) применяется для определения поля температур, а выполнение второго условия с требуемой точностью (заданный поток в уравнении (3) или разность потоков в уравнении (4), определяющие динамику перемещения фронта фазового перехода) используется в качестве критерия завершения итерационного процесса.

Применение же метода конечных элементов позволяет естественным образом учесть второе условие, а первое использовать в качестве критерия завершения итерационного процесса при нахождении координат фронта [15]. Это позволяет избавиться от необходимости численного дифференцирования решения и автоматически обеспечивает консервативность алгоритма.

Основные принципы, положенные в основу метода, изложим на примере расчета фронта испарения. Для определения точного положения фронта воспользуемся тем фактом, что если в процессе итераций скорость испарения будет завышена, то количество тепла, затраченного на испарение, будет больше и, следовательно,

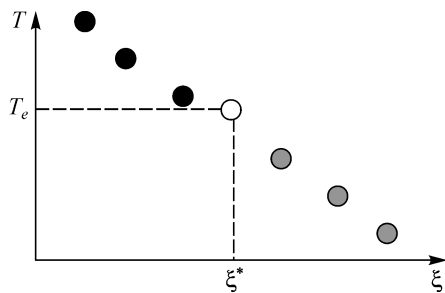


Рис. 2. Взаимосвязь текущего локального положения фронта и температуры.

температура на границе окажется ниже T_e . Если же скорость испарения будет занижена, то часть тепла не израсходуется на испарение, и произойдет перегрев границы выше температуры кипения T_e . При этом отклонение на текущем фронте температуры испарения от T_e пропорционально отклонению ζ от точного положения фронта ζ^* (рис. 2). Для организации вычислений нет необходимости в определении точного вида данной зависимости, а достаточно лишь качественных представлений о ее поведении, чтобы организовать итерационную процедуру нахождения точного положения фронта.

Поскольку при использовании метода конечных элементов границы расчетной области аппроксимируются полигонами, поверхность фронта испарения представляется в виде ломаной линии (рис. 3). Таким образом, естественно предположить, что мы удовлетворяем второму условию на искомой поверхности фронта испарения, если оно выполняется с заданной точностью во всех узлах ломаной, аппроксимирующей этот участок, границы.

При расчете очередного временного слоя, для каждой точки фронта, положение которой требует уточнения, используется следующая итерационная процедура:

$$z^{(i+1)} = z^{(i)} - f^{(i)}(z^{(i)} - z^{(i-1)}) / (f^{(i)} - f^{(i-1)}). \quad (30)$$

Здесь функция $f^{(i)} = T(z^{(i)}) - T_e$ характеризует локальную невязку для температуры фронта в процессе итераций. В качестве нулевого приближения $z^{(0)}$ используются положение фронта на предыдущем временном слое. Для определения первого приближения ($i = 1$) можно воспользоваться одной из трех оценок:

- использующей скорость перемещения фронта на предыдущем шаге по времени $z^{(1)} = z^{(0)} + \Delta t (d\zeta/dt)^0$,
- полученной путем решения уравнения $z^{(1)} = z^{(0)} + (\Delta t / \rho_l L_e)(\lambda \partial T / \partial n|_{\Gamma_e} - q)^{(0)}$,
- пробным возмущением $z^{(1)} = z^{(0)} - \Delta h$.

Отметим, что в исследуемых нами задачах, при определении точного положения фронтов фазовых переходов, учитывается перемещение положения граничных узлов лишь в одном координатном направлении. Это несколько сужает область применимости предлагаемого алгоритма, но не является его принципиальным ограничением. На рис. 4 приводятся примеры геометрии фронтов, которые

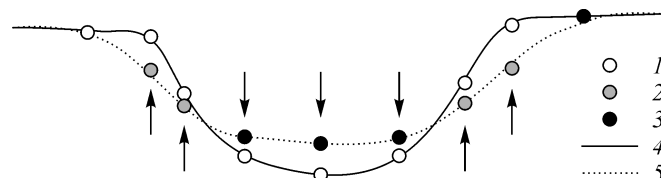
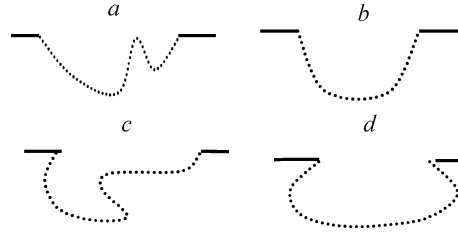


Рис. 3. Представление поверхности фронта испарения.

Рис. 4. Примеры возможных геометрических конфигураций фронтов фазовых переходов.



могут быть точно рассчитаны с помощью предложенного алгоритма (рис. 4, *a, b*) и тех, для которых в процессе итераций необходимо учитывать одновременное перемещение по двум координатным направлениям (рис. 4, *c, d*).

Итерационная процедура при определении координат фронта плавления (затвердевания) аналогична описанной выше, с той лишь разницей, что в отличие от фронта поверхностного испарения, на котором имеет место унос материала, точки фронта плавления (затвердевания) могут перемещаться в процессе итераций в любом координатном направлении.

3.2. Динамическая адаптивная триангуляция расчетной области

Толщина теплового пограничного слоя на стадии нагрева поверхности до температуры плавления может быть оценена как $H = 3\lambda_{f0}(T_{fm} - T_{f0})/q$. Очевидно, что при существенном изменении мощности теплового потока (от $5 \cdot 10^8$ до 10^{14} Вт/м²) характерная толщина теплового пограничного слоя претерпевает значительные изменения. В этой связи, нами развит подход, позволяющий автоматически сгущать сетку в областях сильного изменения решения. В основе данного подхода лежит предположение о том, что сетка является достаточно детальной, если изменение градиентов решения на соседних треугольниках превышает заранее заданную величину.

Разработанный фронтальный алгоритм триангуляции позволяет измельчать текущую сетку путем разбиения ребер каждого треугольника на два. В результате каждый треугольник оказывается разбит на четыре более мелких. Эта более детальная сетка и используется нами при решении (рис. 5).

Такой прием позволяет легко группировать треугольники для проверки критерия сгущения. Решение ищется в классе кусочно-линейных базисных функций, носителями которых являются треугольники мелкой сетки. Первые производные от решения являются постоянными на каждом из треугольников. Для каждого большого треугольника, содержащего четыре вложенных, можно определить величины:

$$M = \max_{k=1+4} \sqrt{(\partial T / \partial x)^2 + (\partial T / \partial y)^2},$$

$$N = \min_{k=1+4} \sqrt{(\partial T / \partial x)^2 + (\partial T / \partial y)^2},$$

где k — номер вложенного треугольника.

В качестве критерия сгущения сетки используется условие $(M - N)/M_{\Omega} > k_e$, где k_e — заданная

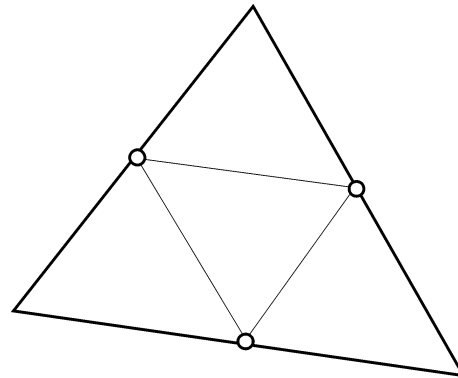


Рис. 5. Разбиение треугольника на четыре части.

величина, M_Ω — нормирующая величина, определяемая как

$$M_\Omega = [\max_\Omega \sqrt{(\partial T / \partial x)^2 + (\partial T / \partial y)^2} + \min_\Omega \sqrt{(\partial T / \partial x)^2 + (\partial T / \partial y)^2}] / 2.$$

Для рассматриваемого класса задач мы ограничивались анализом треугольников, прилегающих к поверхностям приложения теплового потока и фазового перехода (испарение, плавление, затвердевание), поскольку максимальные градиенты решения реализуются в слоях, прилегающих именно к этим поверхностям. Если треугольник удовлетворяет критерию сгущения, то отрезок, представляющий границу и одновременно являющийся ребром треугольника, делится пополам, тем самым порождая два уменьшенных треугольника. Таким образом, сгущение сетки происходит за счет измельчения соответствующих граничных ребер треугольников.

3.3. Динамическое масштабирование расчетной области

Для повышения эффективности вычислительного метода нами использовалась динамически изменяемая расчетная область, которая расширялась в продольном и поперечном направлениях по мере распространения теплового возмущения внутри тела. При определении начального шага по времени и размера расчетной области применялись оценки характерного времени нагрева поверхности до температуры плавления $t_1 = 3[\lambda_{f0}(T_{fm} - T_{f0})/q]^2 / 4a_{f0}$ и глубины теплового возмущения $H(t_1) = \sqrt{12a_{f0}t_1}$. В процессе дальнейших вычислений контролировалась температура $T_{Z \max}$ на глубине $0,9Z_{\max}$. При выполнении условия $(T_{Z \max} - T_0) / T_0 > k_T$ область расширялась на 20 %.

3.4. Конфигурация теплового потока

В ряде расчетов использовалась нормально распределенная плотность теплового потока вида

$$q(r) = q_0 \exp(-kr^2), \quad (31)$$

где q_0 — максимальный удельный тепловой поток в центре пятна воздействия, k — коэффициент сосредоточенности теплового потока, характеризующий форму кривой нормального распределения, r — радиальная координата точки, отсчитываемая от центра пятна. По мере удаления от его центра $q(r)$ быстро падает. Будем считать удельный тепловой поток пренебрежимо малым при $r \geq r_s$, если при $r = r_s$ реализуется условие

$$q(r_s) = q_0 / 100. \quad (32)$$

В этом случае r_s — радиус эффективного пятна нагрева. Легко установить связь между осредненной плотностью мощности теплового потока \bar{q} и параметрами q_0 и k , интегрируя зависимость (32) по r в пределах эффективного пятна нагрева

$$\bar{q} = \left(2\pi \int_0^{r_s} q(r)r \, dr \right) / \pi r_s^2 = \left(2\pi q_0 \int_0^{r_s} \exp(-kr^2)r \, dr \right) / \pi r_s^2 = \frac{\pi q_0}{k} (1 - e^{-kr_s^2}). \quad (33)$$

В результате получаем соотношения, характеризующие связь между определяющими параметрами:

$$q_0 \cong 1,01 \bar{q} \frac{\bar{k}}{\pi}, \quad r_s = \frac{1}{\sqrt{\bar{k}}} \ln 100, \quad (34)$$

$Q = \pi r_s^2 \bar{q}$ — тепловая мощность вкладываемая в поверхность основы.

$$q(r) = q_0 \exp(-kr^2), \text{ если } 0 \leq r \leq r_s; \quad q(r) = 0, \text{ если } r > r_s. \quad (35)$$

В такой постановке необходимо задать две величины, чтобы однозначно определить параметры распределения. В качестве последних были выбраны радиус эффективного пятна нагрева r_s и осредненная плотность мощности \bar{q} .

3.5. Краткое описание алгоритма расчета

Разработанный нами программный комплекс для моделирования нестационарного сопряженного теплообмена и фазовых превращений при обработке поверхности КПЭ состоит из совокупности модулей, каждый из которых ориентирован на решение своей логически завершенной задачи. Наиболее важные из этих задач были нами описаны в настоящей работе. В достаточно общем виде алгоритм взаимодействия отдельных модулей можно представить следующим образом:

- 1) определение характерных пространственно-временных масштабов для начального этапа решения задачи (раздел 2);
- 2) расчет очередного шага по времени;
- 3) построение триангуляции области решения задачи;
- 4) решение температурной задачи на текущем шаге по времени;
- 5) проверка необходимости сгущения сетки на фронтах для последующих итераций (раздел 3.2);
- 6) проверка выполнения с заданной точностью краевых условий на границах фазовых переходов, если таковые имеются. При их выполнении осуществляется переход к пункту 8, иначе — переходим к пункту 7;
- 7) корректировка координат фронтов фазовых переходов, переход к пункту 3 (раздел 3.1);
- 8) завершение процедуры решения задачи для текущего шага по времени;
- 9) проверка условий окончания счета, выход при их выполнении;
- 10) проверка условий необходимости расширения расчетной области, ее расширение, если это необходимо (раздел 3.3);
- 11) проверка необходимости включения новой (выключения старой) границы фазового перехода (выхода), с последующим переходом на качественно новый этап развития процесса, корректировка шага по времени (раздел 2).
- 12) переход к шагу 2.

4. ТЕСТИРОВАНИЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО МЕТОДА

Для тестирования правильности построения вычислительных схем использовалась задача о затвердевании полубесконечного слоя расплава в следующей постановке: неподвижный цилиндрический столб жидкости высотой H и радиусом R в начальный момент времени имеет температуру T_{p0} , при $t > 0$ поверхность подложки ($z = 0$) поддерживается при нулевой температуре. В такой постановке для задачи существует аналитическое решение [8].

Для определения точности расчетов были выбраны следующие критерии: $Erh = (h_*^{(s)} - h^{(s)})/h_*^{(s)}$, где $h_*^{(s)}$ — точное значение текущей высоты затвердевшего

слоя, $ErT = \|T_* - T\|_2 / \|T_*\|_2$, где T_* — точное значение температуры, $ErQ = Q_e(\tau) / Q_0$, где

$$Q_e(\tau) = Q_\tau - Q_0 + (\rho_{pm}^{(l)} C_{pm}^{(l)} - \rho_{pm}^{(s)} C_{pm}^{(s)} - L_{pm} \rho_{pm}^{(l)}) T_{pm} h^{(s)}(\tau) \frac{R^2}{2} + \frac{\lambda_{pm}^{(s)} T_{pm} R^2 \sqrt{\tau}}{G(\beta) \sqrt{\pi} a_{pm}^{(s)}},$$

$$Q_0 = \int_{\Omega} \rho CT d\Omega \Big|_{t=0}, \quad Q_\tau = \int_{\Omega} \rho CT d\Omega \Big|_{t=\tau}.$$

Выражение для $Q_e(\tau)$ получено в результате интегрирования уравнения (1) с учетом краевых условий тестовой задачи [6]. Очевидно, что для точного решения $ErQ = 0$, а для приближенного величина отклонения от нуля будет характеризовать степень соблюдения законов сохранения.

При расчетах в качестве материалов частицы и подложки использовался алюминий, а его плотность задавалась равной $\rho_{pm}^{(l)}$. Начальная температура расплава $T_{p0} = 1033$ К. На рис. 6, *a* представлены графики зависимости высоты фронта затвердевания для численного и аналитического решений. Видно, что результаты расчетов не имеют существенных отклонений от точного решения. Исключение составляет начальный промежуток времени, который более подробно представлен на рис. 6, *b*.

Видно, что погрешность вычислений в начальные моменты времени максимальна и достаточно быстро убывает. Обоснование этому можно найти в рис. 6, *c*. Здесь ошибки в расчете высоты фронта затвердевания и температур имеют сходный характер, а величина ErQ , характеризующая соблюдение законов сохранения, на всем протяжении счета остается практически постоянной, близкой к нулю величиной.

При дискретном представлении области решения нельзя получить бесконечно тонкий слой материала, что происходит, например, в начале плавления. В нашем случае минимально допустимый размер треугольника является ограничением для размеров той или иной расчетной области. При расчетах это может приводить к перегреву поверхности выше температуры плавления материала, если реальная толщина расплавленного слоя на каком-то шаге по времени оказывается меньше чем допустимая точность дискретизации.

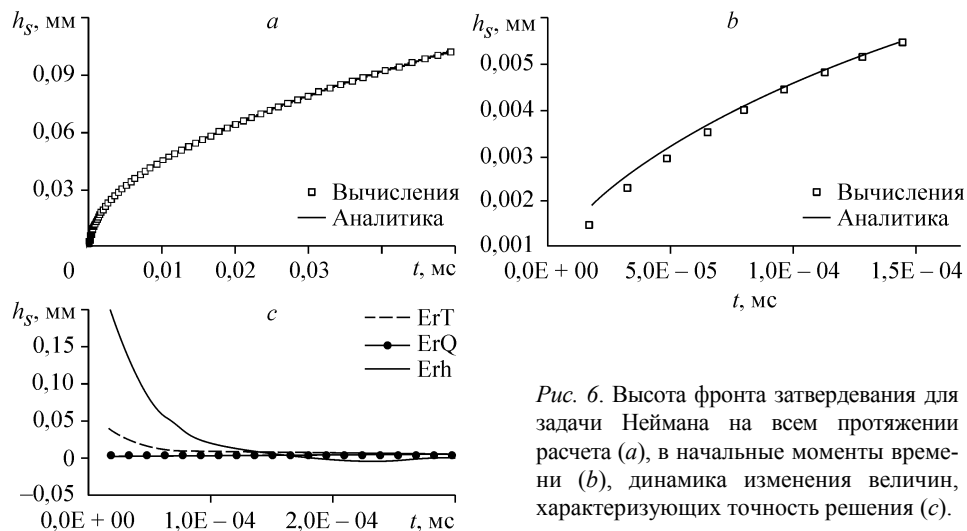
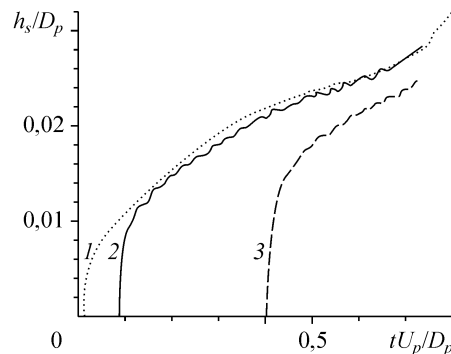


Рис. 6. Высота фронта затвердевания для задачи Неймана на всем протяжении расчета (*a*), в начальные моменты времени (*b*), динамика изменения величин, характеризующих точность решения (*c*).

Рис. 7. Зависимость безразмерной толщины затвердевшего слоя в лобовой точке от времени для расчетов, проведенных на сетках с характерным размером треугольника, составляющим: 0,01, 0,03 и 0,05 от диаметра капли. Соответствующие кривые на рисунке помечены цифрами 1, 2 и 3.



Поскольку вычислительная схема консервативна, и формально баланс энергии в системе сохраняется, то при дальнейшем счете эта ошибка нивелируется. Тем не менее, если неправильно оценить временные и пространственные масштабы задачи, то задержка старта фронта затвердевания (плавления) может привести к существенным ошибкам в рамках всей задачи.

Для иллюстрации мы приводим результаты моделирования взаимодействия капли расплавленного никеля (Ni) диаметром $D_p = 0,05$ мм с медной подложкой (Cu) рис. 7. Скорость капли $u_p = 100$ м/с, температура $T_p = 2500$ К. При моделировании гидродинамических процессов использовалась модель эквивалентного цилиндра [6]. В данном примере задержка старта для расчетов 2 и 3 (см. раздел 3.5) оказалась соизмеримой с временным интервалом самого взаимодействия капли с подложкой, что привело к существенно разным конечным результатам.

ВЫВОДЫ

По представленным в настоящей работе материалам можно сделать следующие выводы:

- разработана вычислительная процедура на основе метода конечных элементов и соответствующее программное обеспечение для моделирования процессов нестационарного сопряженного кондуктивного теплообмена и фазовых превращений (поверхностное испарение, плавление и затвердевание) при обработке поверхностных слоев высококонцентрированными стационарными и импульсными потоками энергии;
- выполнено тестирование разработанных вычислительных средств, подтвердившее их работоспособность;
- проанализированы ограничения разработанной вычислительной схемы;
- показана важность учета априорных аналитических оценок временных и пространственных масштабов задачи при численном моделировании.

Приведенные в настоящей работе результаты могут представлять интерес для понимания и моделирования процессов, происходящих при поверхностной обработке покрытий и материалов высококонцентрированными потоками энергии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кудинов В.В. Плазменные покрытия. — М.: Наука, 1977. — 184 с.
2. Солоненко О.П., Алхимов А.П., Марусин В.В. и др. Высокоэнергетические процессы обработки материалов. — Новосибирск: Наука, 2000. — 425 с.
3. Takeda K., Takeuchi S. Removal of oxide layer on metal surface by vacuum arc // Materials Transactions, JIM. — 1997. — Vol. 38, No. 7. — P. 636–642.
4. Takeda K., Takeuchi S. Effects of pressure on the cleaning action of cathode spot in low vacuum // Thin Solid Films. — 2002. — No. 407. — P. 85–90.
5. Солоненко О.П., Шурина Э.П., Головин А.А. Конечно-элементное моделирование соударения капли расплава с подложкой при плазменном напылении // Физическая мезомеханика. — 2001. — Т. 4, № 1. — С. 29–42.

6. Солоненко О.П., Шурина Э.П., Головин А.А. Моделирование динамики и фазовых превращений при соударении капли расплава с твердой подложкой. — Новосибирск, 2000. — 43 с. // (Препр. / Ин-т теор. и прикл. механики СО РАН; № 5-2000).
7. Takeda K., Solonenko O.P., Golovin A.A. Theoretical analysis and computer simulation of thermophysical processes under removal of oxide layer on metal surface by a vacuum arc // Proc. of the 16th Symp. on Plasma Chemistry, Taormina, Italy (2003) (Electronic publication).
8. Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел / Пер. с англ. — М.: Наука, 1964. — 487 с.
9. Madejski J. Solidification of droplets on cold surface // Inter. J. of Heat Mass Transfer. — 1976. — Vol. 19. — P. 1009–1013.
10. Delplanque J.-P., Lavernia E.G., Rangel R.H. // Numer. Heat Transfer. A: Applications. — 1996. — Vol. 30. — P. 1–18.
11. Trapaga G., Szekely J. Mathematical modeling of the isothermal impingement of liquid droplet in spraying process // Met. Transaction. — 1991. — Vol. 22B. — P. 701–718.
12. Самарский А.А., Монсенко Б.Д. Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 1965. — Т. 5, № 5. — С. 816–827.
13. Civan F., Sliepcevich C.M. Limitation in the apparent heat capacity formulation for heat transfer with phase change // Proc. Okla. Acad. Sci. — 1987. — Vol. 67. — P. 83–88.
14. Rangel R.H., Bian X. Metal — droplet deposition model including liquid deformation and substrate remelting // Inter. J. Heat Mass Transfer. — 1997. — Vol. 40, No. 11. — P. 2549–2564.
15. Lin J.-Y., Chen H.-T. Hybrid numerical scheme for nonlinear two-dimensional phase-change problems with the irregular geometry // Heat and Mass Transfer. — 1997. — Vol. 33. — P. 51–58.

Статья поступила в редакцию 27 апреля 2007 г.