

Суходоева Т.С., Каменских А.А., Максимов П.В. Модель процесса кристаллизации с учетом смены фаз при формировании металлического материала методом лазерного сплавления // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2018. – № 1. – С. 83–92. DOI: 10.15593/perm.mech/2018.1.07

Suhodoeva T.S., Kamenskikh A.A., Maksimov P.V. A model of crystallization process taking into account phase changes in formation of a metallic material by laser fusion method. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2018, no. 1, pp. 83-92. DOI: 10.15593/perm.mech/2018.1.07



ВЕСТНИК ПНИПУ. МЕХАНИКА

№ 1, 2018

PNRPU MECHANICS BULLETIN

<http://vestnik.pstu.ru/mechanics/about/inf/>



DOI: 10.15593/perm.mech/2018.1.07

УДК 539.3: 539.388.2

МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ С УЧЕТОМ СМЕНЫ ФАЗ ПРИ ФОРМИРОВАНИИ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛА МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОГО СПЛАВЛЕНИЯ

Т.С. Суходоева, А.А. Каменских, П.В. Максимов

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия

О СТАТЬЕ

Получена: 25 декабря 2017 г.
Принята: 26 февраля 2018 г.
Опубликована: 30 марта 2018 г.

Ключевые слова:

кристаллизация, фазовые переходы, определяющие соотношения, численное решение, метод конечных элементов, расплав, механика кристаллизующегося тела, степень кристаллизации.

АННОТАЦИЯ

Разрабатываемые теоретические основы моделей кристаллизующихся тел применяются в настоящий момент для моделирования технологического процесса селективного лазерного сплавления в части описания взаимодействия расплав–твёрдое тело и определения коробления тела вследствие появления остаточных напряжений в остывающей заготовке. При этом одной из актуальных задач области исследования является построение определяющих соотношений, позволяющих описывать взаимодействие расплав–твёрдое тело. В данной работе рассмотрено применение известных определяющих соотношений вязкоупругого растущего тела для затвердевающего металлического сплава. При этом процесс кристаллизации протекает в широком температурном диапазоне и сопровождается структурными изменениями. Под процессом кристаллизации понимается переход металлического материала из жидкого состояния в твёрдое. В рамках исследования рассмотрена общая постановка краевой задачи механики кристаллизующегося тела. Реализация определяющих соотношений, описывающих процесс кристаллизации, выполнена на двух задачах: задаче о неравномерном управляемом остывании стержня и задаче об остывании пластины, начиная с температуры выше точки плавления исследуемого материала. Таким образом, для одномерной и плоской постановок получены численные модели кристаллизации изотропных тел с учетом фазовых переходов на основе метода конечных элементов. Результаты применения метода конечных элементов на основе полученных новых определяющих соотношений не противоречат физике процесса кристаллизации и могут быть применены при моделировании процесса селективного лазерного сплавления металлических материалов с учетом смены фаз. Для каждой модельной задачи получены картины напряженно-деформированного состояния конструкции в целом: поля распределения перемещений, деформаций и напряжений. Также в рамках исследования выполнен анализ сходимости численного решения, проанализировано выполнение естественных граничных условий, получены поля температур и степени кристаллизации.

© ПНИПУ

© Суходоева Татьяна Сергеевна – магистрант, e-mail: vmm@pstu.ru
Каменских Анна Александровна – кандидат технических наук, доцент, e-mail: anna_kamenskikh@mail.ru
Максимов Пётр Викторович – кандидат технических наук, доцент, e-mail: pvmpperm@mail.ru

Tatiana S. Suhodoeva – Postgraduate Student, e-mail: vmm@pstu.ru
Anna A. Kamenskikh – CSc in Technical Sciences, Associate Professor, e-mail: mbartolomey@mail.ru
Petr V. Maksimov – CSc in Technical Sciences, Associate Professor, e-mail: pvmpperm@mail.ru



Эта статья доступна в соответствии с условиями лицензии Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

A MODEL OF CRYSTALLIZATION PROCESS TAKING INTO ACCOUNT PHASE CHANGES IN FORMATION OF A METALLIC MATERIAL BY LASER FUSION METHOD

T.S. Suhodoeva, A.A. Kamenskikh, P.V. Maksimov

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

ARTICLE INFO

Received: 25 December 2017
Accepted: 26 February 2018
Published: 30 March 2018

Keywords:

crystallization, phase transfer, constitutive relations, numerical solution, finite element method, melt, mechanics of the crystallizing body, crystallization ratio.

ABSTRACT

Theoretical principles of models of crystallizing bodies being developed are now applied to model the technological process of selective laser welding regarding the description of interaction between "melt – solid body" and determining a body's buckling owing to emergence of residual stresses in a cooling down work piece. At the same time one of the relevant problems of the research is creating the defining relations which make it possible to describe the interaction between "melt – solid body". This work considers the application of the known defining relations of the viscoelastic growing body for the hardening metal alloy. The crystallization process takes place in a wide temperature range and is followed by structural changes. A crystallization process is a transition of metal material from a liquid state into the hard one. Within the research, the general statement of the boundary problem of mechanics of the crystallizing body is considered. Realization of the defining relations describing the crystallization process is executed using two problems, i.e. the problem related to the nonuniform controllable cooling of the rod and plate's cooling from the temperature that is higher than the melting point of the studied material. Thus, numerical models of crystallization of isotropic bodies taking into account phase transfers for linear and two-dimensional statements based on the finite element method have been obtained. The results of applying the finite element method based on the new defining relations do not contradict the physics of the crystallization process and can be applied, when modeling the selective laser welding of metal materials taking into account phase transfer. Images of stress-strain states of the structure have been obtained for each model problem: fields of distribution, stresses and strains. Also, the analysis of the numerical solution convergence is performed, the fulfillment of the natural boundary conditions is analyzed, the temperature fields and the degree of crystallization are obtained within the framework of the study.

© PNRPU

Введение

Описание процесса кристаллизации в рамках решения прикладных задач, а также численная реализация новых определяющих соотношений является одной из актуальных проблем механики кристаллизующегося тела [1, 2 и др.]. При этом на настоящий момент актуальными остаются вопросы математического описания процесса кристаллизации, а именно перехода материала из жидкого состояния в твердое, а также численная реализация данных моделей. Развитие теорий описания поведения расплав–твердое тело позволит эффективно моделировать технологический процесс селективного лазерного сплавления [3–7], в том числе и построение определяющих соотношений, позволяющих учесть появление остаточных напряжений [8] в остывающей заготовке. Многие работы в данной области научных исследований базируются на выводе определяющих соотношений и численно-экспериментальных исследованиях возможностей разработанных математических моделей. Например, в [1, 9] подробно рассмотрена проблема описания термомеханического поведения полимерных материалов в условиях релаксационных переходов. Стоит отметить, что моделирование определяющих соотношений для описания процесса кристаллизации с релаксационными переходами имеет широкое практическое применение: машиностроение [10], механика полимерных

материалов [11], авиапромышленность [7, 12], металлургия [13–15], формирование заданной микроструктуры [16–18], изготовление функциональных материалов [19–22] и др. Часто формирование материала сопровождается затвердеванием расплава, когда в жидкой среде зарождаются зерна с кристаллической структурой, а фазовые переходы приводят к изменению многих механических, теплофизических характеристик, что, в свою очередь, сказывается на напряженно-деформированном состоянии детали, как общем, так и локальном. При этом данная работа посвящена построению математической модели, позволяющей описать термомеханические процессы, протекающие в конструкции, в широком температурном диапазоне. На основе методологии ряда работ [8, 23–25] об исследовании поведения характеристик полимерных материалов в условиях релаксационных переходов была получена аналогия для поведения металлов с учетом смены фаз. Таким образом, в рамках научного исследования рассмотрено применение известных определяющих соотношений вязкоупругого растущего тела [26] для затвердевающего металлического сплава. Рассматривается модельная задача кристаллизации изотропного металлического материала при неравномерном охлаждении тела. Исходное состояние – расплав, описывается как вязкая жидкость. При фазовом переходе часть материала кристаллизуется, новая структура описывается моделью линейно-упругого тела. Исследуемая система представ-

ляют собой двухкомпонентную смесь твердой и жидкой доли, объемное содержание каждой определяется степенью кристаллизации.

1. Математическая постановка задачи кристаллизации

Общая математическая постановка задачи включает в себя уравнения равновесия, физические и геометрические соотношения, уравнения теплопроводности и степени кристаллизации, а также дополняется начальными и граничными условиями.

Одной из важных проблем математического моделирования процессов кристаллизации материалов является вывод определяющих соотношений и постановка краевой задачи механики. Рассмотрим, как меняется упругий потенциал при постепенном затвердевании расплава. Пусть в момент времени $t = t_1$ произошло последующее изменение степени кристаллизации на величину $\Delta\alpha_1$. Таким образом, суммарная степень приращения будет равна $\Delta\alpha_0 + \Delta\alpha_1$. Объемная часть незакристаллизовавшейся доли материала, пропорциональная $\Delta\alpha_1$, перешла в твердое состояние и с момента времени t_1 будет совместно деформироваться с ранее затвердевшей долей материала, пропорциональной $\Delta\alpha_0$. Аналогичные рассуждения проводятся для каждого временного шага. Данный подход подробно описан в работе [26]. Авторами [26] предложен вариант построения феноменологических определяющих соотношений для полимерных материалов, который отражает связь между тензором напряжений и деформаций в широком диапазоне изменения температур непрерывным образом. При этом среда исследования представляется в виде композиции расплавленного и полностью закристаллизованного материала в интервале температур фазовых превращений. В данной работе аналогичные рассуждения применяются к металлическим материалам, которые представляют собой двухкомпонентную смесь твердой и жидкой доли. Осуществляя предельный переход, потенциальная энергия системы $F(t)$ принимает вид

$$F[\varepsilon(t)] = \int_0^{\alpha(t)} F_{kr}[\varepsilon(t) - \varepsilon(\tau)] d\alpha(\tau) + F_r[\varepsilon(t)] \cdot (1 - \alpha(t)), \quad (1)$$

где F_r – потенциал расплава; F_{kr} – потенциал кристаллической доли; $\alpha(t)$ – степень кристаллизации материала, характеризующая текущее объемное содержание каждого компонента на данный момент времени; $\varepsilon(t)$ – тензор полной деформации до момента следующего изменения степени приращения кристаллизации; $\varepsilon(\tau)$ – тензор полной деформации на предыдущем временном шаге; t, τ – время. Предполагается малость деформаций, поэтому можно записать определяющие физические соотношения в виде:

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial F[\varepsilon(t)]}{\partial \varepsilon_{ij}},$$

где σ_{ij} и ε_{ij} – компоненты тензора напряжений и деформаций соответственно. Дифференцируя выражение (1), получим связь напряжений с деформациями в системе. Для изотропного тела упругий потенциал может зависеть только от инвариантов тензора деформаций и скоростей деформаций [27]. Приведем покомпонентное представление определяющих соотношений.

Физические соотношения для закристаллизовавшейся доли

$$\sigma_{ij}^{kr} = \lambda\theta\delta_{ij} + 2\mu\varepsilon_{ij}, \quad (2)$$

где θ – первый инвариант тензора деформаций; δ_{ij} – символ Кронекера.

Физические соотношения для расплава

$$\sigma_{ij}^r = -p\delta_{ij} + \lambda_1\dot{\theta}\delta_{ij} + 2\mu_1\dot{\varepsilon}_{ij}, \quad (3)$$

где p – гидростатическое давление; λ_1 и μ_1 – коэффициенты вязкости.

Подставим зависимости напряжений от деформаций (2)–(3) в продифференцированное соотношение (1) и получим определяющие соотношения системы из двухкомпонентной смеси твердой и жидкой долей в виде

$$\sigma_{ij}(t) = \int_0^{\alpha(t)} [\lambda(\theta(t) - \theta(\tau))\delta_{ij} + 2\mu(\varepsilon_{ij}(t) - \varepsilon_{ij}(\tau))] d\alpha(\tau) + (1 - \alpha(t)) \times (-p\delta_{ij} + \lambda_1\dot{\theta}(t)\delta_{ij} + 2\mu_1\dot{\varepsilon}_{ij}(t)). \quad (4)$$

Процесс кристаллизации протекает в широком температурном диапазоне и сопровождается структурными изменениями. Стоит заметить, что силовые деформации в выражении (4) не равны полным, а имеют вид

$$\varepsilon(t) = \varepsilon^n(t) - \varepsilon^T(t) + \varepsilon^{vc}(t), \quad (5)$$

где ε^n – полная деформация, ε^T – температурная деформация, ε^{vc} – деформация, вызванная усадкой.

Температурные деформации имеют вид

$$\varepsilon_{ij}^T = \int_{T_n}^{T(t)} a_{ij}(\tau) d\tau = \delta_{ij} \int_{T_n}^{T(t)} a(\tau) d\tau,$$

где a – коэффициент теплового линейного расширения; $T(t)$ – температура в текущий момент времени; T_n – начальная температура. Второе равенство выполняется благодаря тому, что воздействие температур ведет к изменению объема и не меняет формы.

Структурная усадка материала вносит вклад в общую деформацию только начиная со времени своего зарождения и остается постоянной: $\varepsilon^{vc}(t) = k$.

С учетом выражения (5) соотношения (4) представляют собой интегриродифференциальные уравнения связи

напряжений, деформаций и скоростей деформаций с учетом истории деформирования для твердой доли.

Для полной постановки задачи необходимо выбрать функцию, определяющую приращение степени кристаллизации на протяжении всего фазового перехода. В ходе исследования рассматривается интервал времени, за который изделие из расплава полностью кристаллизуется и станет представлять собой упругое тело. Начальную температуру выбираем выше температуры плавления. В дальнейшем время, при котором начинается фазовый переход, будем называть временем плавления t_l , а при котором завершается – временем кристаллизации t_s . Функция, определяющая приращение степени кристаллизации, находится экспериментально, но ввиду нехватки входных данных для модельной задачи зададим значения этой функции приблизительно, исходя из физического смысла. Производная изменения степени кристаллизации по температуре при фазовом переходе выбирается в форме нормального закона распределения Гаусса:

$$\frac{d\alpha(t)}{dT(t)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\gamma} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{T(t)-T_0}{\gamma}\right)^2}, \quad (6)$$

где $\gamma = \frac{T_l - T_s}{6}$, T_l и T_s – температуры плавления и кристаллизации соответственно; $T_0 = \frac{T_l + T_s}{2}$ – температура пика приращения степени кристаллизации.

Проинтегрировав (6), получим выражение для определения объемной доли затвердевшего материала через функцию Лапласа $\Phi(z)$:

$$\alpha(t) = \int_a^b \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{z^2}{2}} dz = \Phi(b) - \Phi(a), \quad (7)$$

где $z = \frac{T(t) - T_0}{\gamma}$, пределы интегрирования $a = \frac{T(t) - T_0}{\gamma}$,

$b = \frac{T_l - T_0}{\gamma}$. Степень кристаллизации меняется от нуля до единицы в интервале от времени плавления до времени кристаллизации.

Рассматриваемая задача термомеханики кристаллизующегося материала относится к классу квазистатических задач. Численное решение получается в два этапа: определение поля температур и получение напряженно-деформируемого состояния на его основе. Не учитывается влияние напряженно-деформированного состояния на поле температур в процессе фазового перехода. Температурная задача включает в себя нестационарное уравнение теплопроводности

$$c_v \rho \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\lambda \text{grad}(T)) + Q_\alpha \frac{d\alpha}{dt}, \quad (8)$$

где c_v – удельная теплоемкость среды; ρ – плотность среды; λ – коэффициент теплопроводности; $Q_\alpha \frac{d\alpha}{dt}$ – плотность внутренних источников в процессе кристаллизации.

2. Результаты численного моделирования одномерной задачи кристаллизации

Для демонстрации полученных определяющих соотношений рассматривается задача о неравномерном управляемом остывании стержня с температуры выше точки плавления [28]. Материал стержня – нержавеющая сталь 12X18H10T. Материал первоначально находится в расплавленном состоянии, подвергается фазовому переходу и в конечном состоянии представляет собой полностью закристаллизовавшееся тело. Охлаждение стержня происходит с правой границы. Реализуется одноосное напряженное состояние (рис. 1).

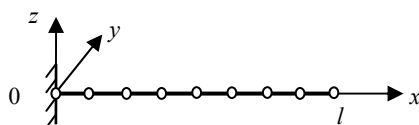


Рис. 1. Расчетная область одномерной задачи кристаллизации
Fig. 1. Calculated area of the linear crystallization problem

Математическая постановка одноосной краевой задачи термомеханики дополняется начальными и граничными условиями

$$\begin{cases} \bar{u}(t=0, x) = 0, \\ T(t=0, x) = T_n, \end{cases} \quad (9)$$

$$\begin{cases} u_x(t, x=0) = 0, \\ \sigma_{xx}(t, x=l) = 0, \\ T_{,x}(t, x=0) = 0, \\ T(t, x=l) = f(t), \end{cases} \quad (10)$$

где T_n – начальная температура; $f(t)$ – заданная функция охлаждения.

Задача решается с применением численных методов в пакете MatLab. Ввиду нетривиального представления определяющих соотношений сравниваются реализации по методу конечных разностей (МКР) и методу конечных элементов (МКЭ). Поставленная задача термомеханики предполагает определение поля температур, одинаковое для обоих методов. Учтена зависимость теплофизических и механических свойств материала от температуры как следствие от координаты и времени.

Для реализации МКР сформировано уравнение относительно перемещения вдоль оси x :

$$\begin{aligned} & \left[\alpha(t) E(u_{x,x} - \varepsilon^T + k) \right]_{,x} - \\ & - \int_0^{\alpha(t)} \left[E(u_{x,x}(\tau) - \varepsilon^T(\tau) + k) \right]_{,x} d\alpha(\tau) + \\ & + \left[(1 - \alpha(t)) \left(-p \frac{\mu_1}{\lambda_1 + \mu_1} + E_1(\dot{u}_{x,x} - \dot{\varepsilon}^T) \right) \right]_{,x} = 0. \quad (11) \end{aligned}$$

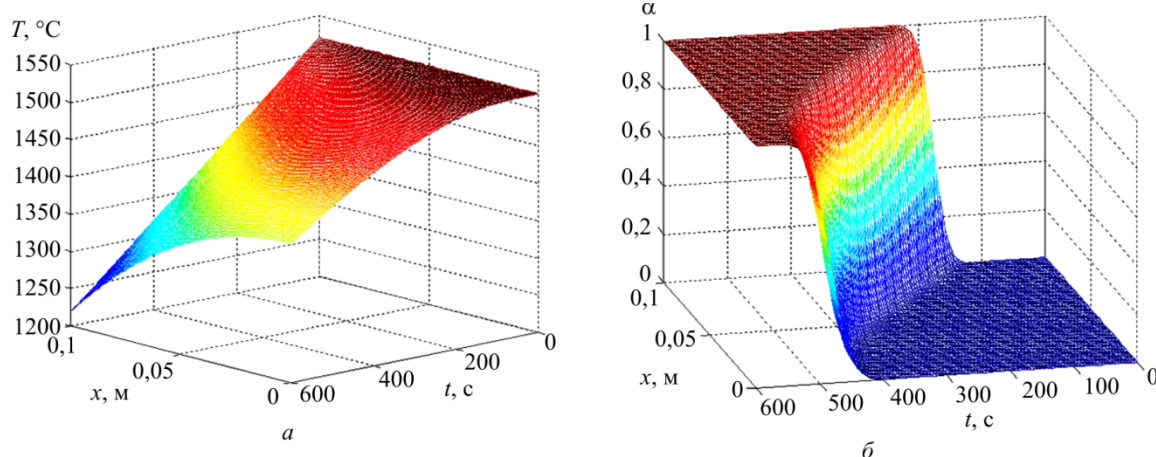


Рис. 2. Поле температур (а) и изменение степени кристаллизации (б) в стержне
 Fig. 2. Temperature field (a) and change of the crystallization degree (b) in the rod

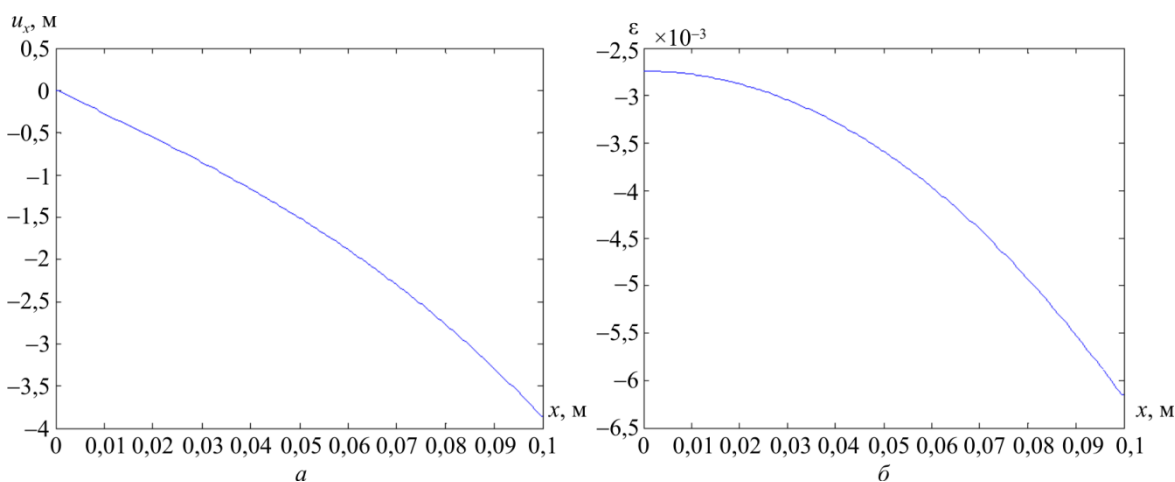


Рис. 3. Перемещения (а) и полные деформации (б) стержня
 Fig. 3. Displacements (a) and total strains (b) of the rod

Разностная схема, применяемая для аппроксимации выражения (11), является неявной по пространственной координате. Для решения задачи в перемещениях МКЭ [29] удалось представить определяющие соотношения в форме закона Гука:

$$\sigma_{xx} = \left[\alpha(t) E + (1 - \alpha(t)) \frac{E_1}{h_t} \right] \varepsilon_{xx}(t) - \sigma_0 - \sigma_p - \sigma_k.$$

Введенные замены $\sigma_0 = \int_0^{\alpha(t)} E \varepsilon_{xx}(\tau) d\alpha(\tau)$, $\sigma_p = (1 - \alpha(t)) p \frac{\mu_1}{\lambda_1 + \mu_1}$, $\sigma_k = (1 - \alpha(t)) \frac{E_1}{h_t} \varepsilon_{xx}^{k-1}(t)$ будут выполнять роль начальных напряжений, а выражение в квадратных скобках является матрицей констант.

Оценка модели проводится при сравнении численных решений по МКР и МКЭ для задачи остывания стержня начиная с температуры выше точки плавления. Распределение температуры и степень кристаллизации в стержне на каждом временном слое для двух вариантов численной реализации исследования одинаковые и представлены на рис. 2, а, б соответственно.

Результаты по перемещениям и деформациям оказались качественно одинаковыми, наблюдалось сжатие

стержня при выполнении граничных условий. В рамках работы проведена оценка сходимости численного решения задачи, ранее описанная в [30]. Расхождение между методами несущественны; на рис. 3 представлены результаты по перемещениям и деформациям на последнем временном слое МКЭ.

Следует отметить, что при численной реализации модели МКР возникли сложности в аппроксимации интегро-дифференциального уравнения, выведенного для решения краевой задачи в перемещениях [30]. Картина напряжений оказалась нефизичной. Погрешность вычислений привела к потере устойчивости метода. Поэтому дальнейшие исследования проводятся при использовании только МКЭ.

3. Результаты численной реализации плоской задачи кристаллизации

Далее в рамках апробации определяющих соотношений процесса кристаллизации функциональных материалов рассмотрена задача о неравномерном управляемом остывании пластины из нержавеющей стали 12Х18Н10Т начиная с температуры выше точки плавления. Сталь первоначально находится в расплавленном

состоянии, подвергается фазовому переходу и в конечном состоянии представляет собой полностью закристаллизовавшееся тело. Реализуется плоское напряженное состояние (рис. 4).

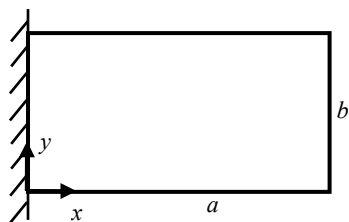


Рис. 4. Расчетная область двумерной задачи кристаллизации

Fig. 4. Calculated area of the two-dimensional crystallization problem

Математическая постановка двумерной краевой задачи термомеханики дополняется начальными и граничными условиями

$$\begin{cases} \bar{u}(t=0, x, y) = 0, \\ T(t=0, x, y) = T_n. \end{cases} \quad (12)$$

$$\begin{cases} u_x(t, x=0, y) = 0, \\ u_y(t, x=0, y) = 0, \\ T_{,x}(t, x=0, y) = 0, \\ T_{,x}(t, x, y=0) = 0, \\ T_{,x}(t, x, y=b) = 0, \\ T(t, x=a, y) = f(t, y). \end{cases} \quad (13)$$

Остальные наружные поверхности являются свободными: $\hat{\sigma} \cdot \vec{n} = 0$.

Двумерная задача решается по аналогии с одномерной, определяющие соотношения приводим к форме закона Гука, только теперь они представляются в матричной форме:

$$\{\sigma\} = (\alpha(t)[D]^{kr} + (1-\alpha(t))[D]^r) \{\varepsilon\} - \{\sigma_0\} - \{\sigma_p\} - \{\sigma_k\}.$$

Охлаждение пластины происходит с правого края. При этом рассматривается промежуток времени, за который

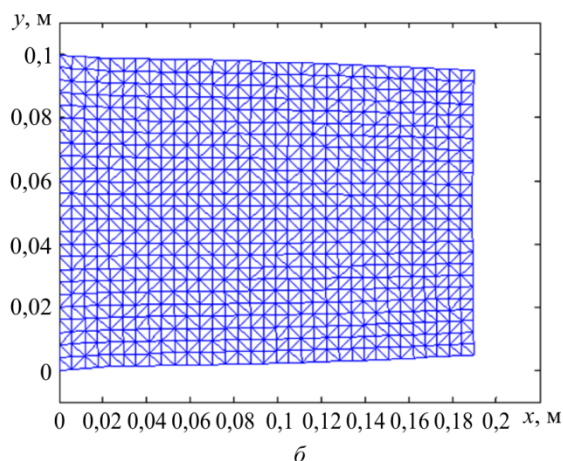
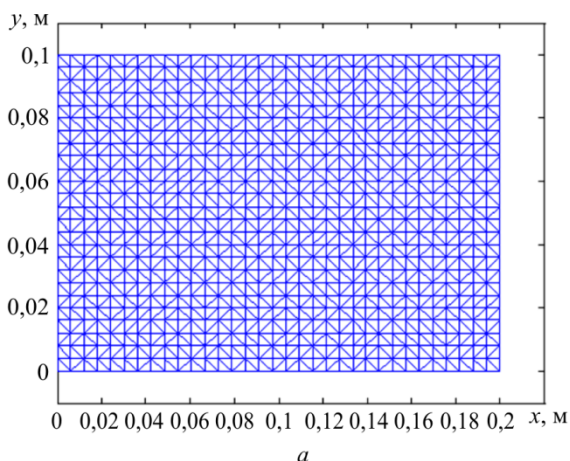


Рис. 6. Конечно-элементная сетка до деформирования (а) и на последнем временном шаге (б)

Fig. 6. The finite element mesh of the plate before deformation (a) and at the last time step (b)

температура в каждой точке пластины не будет превышать температуры кристаллизации. Задача теплопроводности решается по методу переменных направлений, все физические константы зависят от температуры и как следствие от координат и времени. Поле температур на последнем временном шаге представлено на рис. 5.

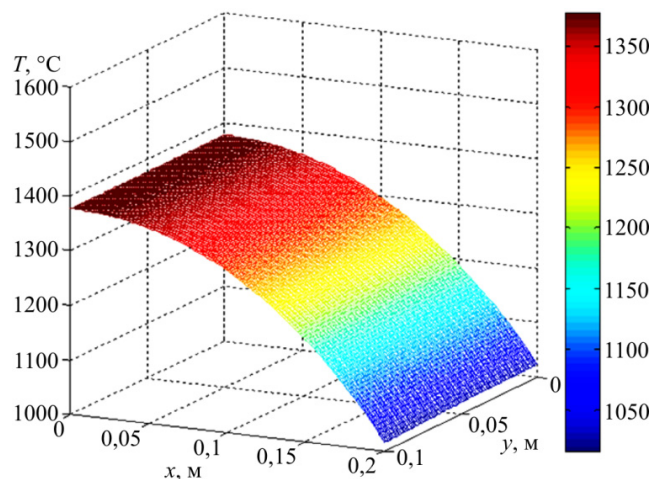


Рис. 5. Поле температур в пластине на последнем временном шаге

Fig. 5. Temperature field in the plate at the last time step

В процессе кристаллизации пластина меняла форму, происходило сжатие в обоих направлениях. Перемещения узлов пространственной области тела в начальный и конечный (в десятикратном увеличении) моменты времени представлены на рис. 6.

На рис. 7 представлены деформации в пластине, полученные в рамках решения задачи. Наибольшие по модулю значения нормальных деформаций наблюдаются на охлаждаемом крае пластины. Характер деформирования во многом определяется температурным полем. Картины напряжений на последнем временном слое представлены на рис. 8.

Значения напряжений не превышают предел пропорциональности для исследуемой стали 12Х18Н10Т. Максимальные значения, как и ожидалось, наблюдаются в заделке.

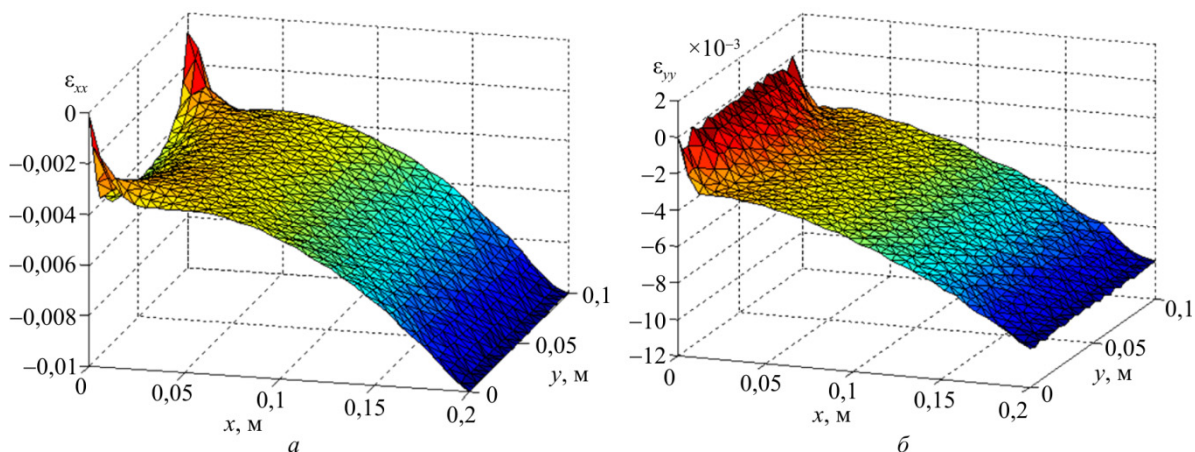


Рис. 7. Деформации в пластине ϵ_{xx} (а) и ϵ_{yy} (б)

Fig. 7. Strains in the plate ϵ_{xx} (a) and ϵ_{yy} (b)

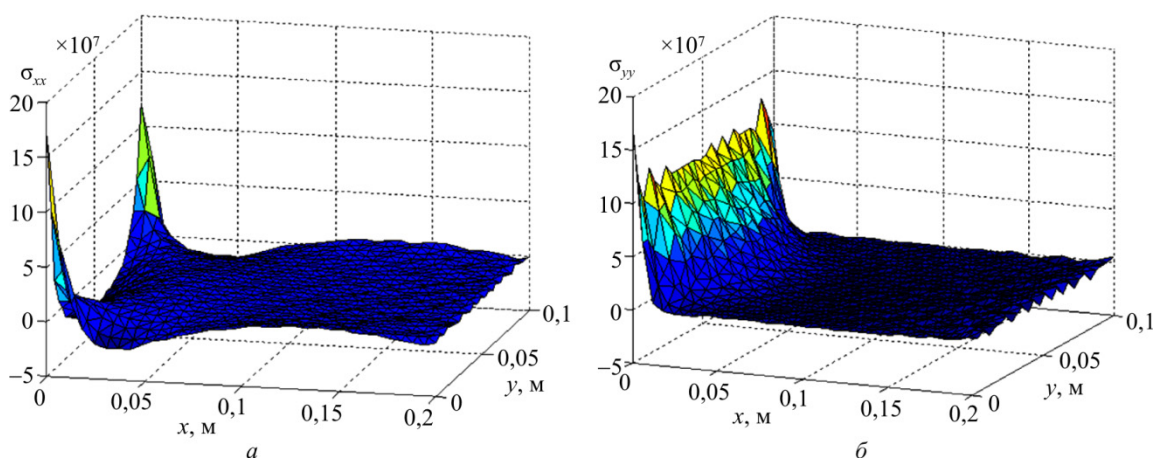


Рис. 8. Напряжения в пластине σ_{xx} (а) и σ_{yy} (б)

Fig. 8. Stresses in the plate σ_{xx} (a) and σ_{yy} (b)

Анализ результатов численного моделирования процесса кристаллизации с учетом смены фаз металла в одномерной и двумерной постановках позволяет судить о возможности применения полученных математических моделей для описания процесса лазерного сплавления с учетом явлений коробления, усадки, остаточных деформаций и напряжений. Полученные результаты решения модельных задач кристаллизации описывают процесс формирования свойств затвердевшего материала в упрощенной постановке. В дальнейшем планируется усложнение модели за счет многоуровневого моделирования формируемых термомеханических свойств кристаллизующегося материала, что позволит управлять получаемой микроструктурой материала и в конечном счете его эксплуатационными характеристиками.

Заключение

В ходе работы удалось получить новые физические соотношения и построить математическую модель на их основе, которая позволяет описать процесс фазового

перехода при кристаллизации изотропного металлического материала с учетом температурных деформаций и структурной усадки. Теоретические исследования были проведены на одномерных и двумерных численных моделях. Численная реализация моделируемых процессов осуществлялась МКР и МКЭ в MatLab без использования стандартных функций математического пакета. Все математические операции и методы прописаны программным кодом, который прошел тестирование и отладку. В работе представлены картины напряженно-деформированного состояния для каждого случая.

Как итог приведем некоторые результаты решения задачи численного моделирования процесса кристаллизации при неравномерном охлаждении.

1. Построены новые определяющие соотношения, описывающие возникновение и изменение полей напряжений в изотропном металлическом материале при кристаллизации с учетом температурных деформаций и структурной усадки.

2. На основе новых физических соотношений построены математические модели, позволяющие описать процесс фазового перехода в изотропном материале.

3. Осуществлена полная постановка краевой задачи кристаллизации стержня из изотропного металлического материала.

4. Выполнена численная реализация процесса кристаллизации стержня из изотропного материала при неравномерном охлаждении двумя численными методами в пакете MatLab: МКР и МКЭ.

5. Произведена оценка сходимости численного решения задачи о кристаллизации стержня из изотропного материала при неравномерном охлаждении:

– выявлена тенденция накопления погрешности численного решения МКР, связанная с упрощенной схемой аппроксимации: при замене дифференциальных операторов конечно-разностными аналогами не учитывалась зависимость физических переменных и степени кристаллизации от координаты. Установлено, что при устранении ошибки решение МКР расходится;

– установлено, что численное решение задачи кристаллизации стержня МКЭ сходится и удовлетворяет всем граничным условиям.

6. Реализовано численное моделирование задачи о неравномерном управляемом остывании пластины начиная с температуры выше точки плавления МКЭ: сделана оценка сходимости численного решения, проанализировано деформационное поведение конструкции в процессе усадки, получена конечная геометрия пластины при кристаллизации, сделана оценка полей напряжений и деформаций, установлено выполнение

граничных условий во время всего процесса кристаллизации.

Разрабатываемые теоретические основы моделей кристаллизующихся тел показали хорошую степень применимости в рамках моделирования технологического процесса селективного лазерного сплавления в части описания процессов взаимодействия расплав–твердое тело и определения коробления тела вследствие появления остаточных напряжений в остывающей заготовке.

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (соглашение № 14.586.21.0055 от 17.07.2017 г., проект RFMEF1586117X0055 в составе реализации международного проекта «Fracture across Scales and Materials, Processes and Disciplines (FRAMED)» в рамках программы «Горизонт-2020»).

Acknowledgments

The work has been carried out with the financial support of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation (Agreement No. 14.586.21.0055 of July 17, 2017, Project ID RFMEF1586117X0055, as part of the international project implementation titled "Fracture across Scales and Materials, Processes and Disciplines (FRAMED)" within the framework of the "Horizon-2020" Program).

Библиографический список

1. Термомеханика полимерных материалов в условиях релаксационного перехода / В.П. Матвеевко, О.Ю. Сметанников, Н.А. Труфанов, И.Н. Шардаков // Физическая мезомеханика. – 1999. – Т. 2, № 4. – С. 23–29.

2. Мишустин И.В., Мовчан А.А. Моделирование фазовых и структурных превращений в сплавах с памятью формы, происходящих под действием немонотонно меняющихся напряжений // Изв. РАН. Механика твердого тела. – 2014. – № 1. – С. 37–53.

3. Sedlaka J., Rican D. Study of Materials Produced by Powder Metallurgy Using Classical and Modern Additive Laser Technology // Procedia Engineering. – 2015. – No. 100. – P. 1232–1241.

4. Оптимизация технологических параметров и определение режимов селективного лазерного сплавления порошка на основе стали 316L / Б.К. Барактин, В.В. Бобырь, А.В. Вознюк, А.А. Деев, А.С. Жуков, П.А. Кузнецов // Вопросы материаловедения. – 2017. – Т. 90, № 2. – С. 146–152.

5. Назаркин Р.М., Петрушин Н.В., Рогалев А.М. Структурно-фазовые характеристики сплава жс32-ви, полученного методами направленной кристаллизации, гранульной металлургии и селективного лазерного сплавления // Тр. ВИАМ. – 2017. – № 2 (50). – С. 2.

6. Структура и механические свойства аустенитной стали 316L, полученной методом селективного лазерного сплавления / П.А. Кузнецов, А.А. Зисман, С.Н. Петров, И.С. Гончаров // Деформация и разрушение материалов. – 2016. – № 4. – С. 9–13.

7. Формирование сложнопрофильных деталей космических аппаратов методом селективного лазерного сплавления / А.И. Ананьев, Ю.П. Боршев, М.Ю. Квардаков, С.Э. Куркин, А.А. Курков, А.С. Севастьянов, М.В. Шибалов // Вестн. НПО им. С.А. Лавочкина. – 2017. – № 1 (35). – С. 87–92.

8. Тихомирова К.А. Изотермическое деформирование сплава с памятью формы в разных температурных интервалах. Случай одноосного растяжения // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2017. – Т. 23, № 2. – С. 263–282.

9. Термомеханика полимерных материалов в условиях релаксационного перехода / В.П. Матвеевко, О.Ю. Сметанников, Н.А. Труфанов, И.Н. Шардаков. – М.: Физматлит, 2009. – 176 с.

10. Труфанов Н.А., Шаяхметова Л.Р. Численно-экспериментальный анализ процесса кристаллизации слитка // Научно-технический вестник Поволжья. – 2015. – № 5. – С. 291–294.

11. Kulikov R.G., Kulikova T.G., Trufanov N.A. Numerical method for solving the problem of thermomechanics of polymeric environment in conditions of phase transition // Solid State Phenomena. – 2016. – Т. 243. – С. 139–145.

12. Максимов П.В. Определение оптимальной скорости заливки стали для рационализации существующего технологического режима // Современные проблемы науки и образования. – 2015. – № 1-1. – С. 3.

13. Об учете нелинейных и связанных эффектов тепловой задачи и фазовых переходов при моделировании технологии контактного термосилового поверхностного упрочнения металлических сплавов / В.П. Багмутов, Д.С. Денисевич, И.Н. Захаров, А.Ю. Иванников // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2017. – № 1. – С. 233–250.

14. Багмутов В.П., Захаров И.Н., Денисевич Д.С. Особенности решения технологических задач механики неоднородных металлических тел со структурой, трансформирующейся в ходе термосилового нагружения // Вестник Пермско-

го национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2016. – № 1. – С. 5–25.

15. Литье методом направленной кристаллизации с управляемым градиентом температуры на фронте кристаллизации / Е.В. Колядов, В.В. Герасимов, Е.М. Висик, Ю.А. Межин // Литейное производство. – 2016. – № 8. – С. 24–26.

16. Клюев А.В., Столбов В.Ю., Шарыбин С.И. Визуализация сложных зёрновых структур металлов и сплавов при идентификации их параметров // Научная визуализация. – 2016. – Т. 8, № 3. – С. 95–101.

17. Каменева А.Л. Роль структуры и фазового состава в формировании физико-механических и трибологических свойств пленок на основе TiN // Вопросы материаловедения. – 2012. – № 1(69). – С. 58–67.

18. Исследование процесса механотермической обработки арматуры из высокоуглеродистых сталей / М.П. Барышников, Д.К. Долгий, К.Ю. Куранов, М.В. Зайцева // Сталь. – 2012. – № 2. – С. 89–97.

19. Functional Materials: Preparation, Processing and Applications. Eds. S. Banerjee, A.K. Tyagi. – Elsevier, 2011. – 730 p.

20. Малахов В.В. Проблемы диагностики функциональных материалов (обзор) // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2011. – Т. 77, № 2. – С. 310–318.

21. Materials become insensitive to flaws at nanoscale: Lessons from nature / H. Gao, B. Ji, I.L. Jäger [et al.] // Proceedings of the National Academy of Sciences. – 2003. – Vol. 100. – No. 10. – P. 5597–5600.

22. Stolbov V.Y., Gitman M.B., Sharybin S.I. Application of intelligent technology in functional materials quality control // Materials Science Forum. – 2016. – Vol. 870. – P. 717–724.

References

1. Matveenko V.P., Smetannikov O.Ju., Trufanov N.A., Shardakov I.N. Termomehanika polimernih materialov v uslovijah relaksacionnogo perehoda [Thermomechanics of polymeric materials under conditions of a relaxation transition]. *Fizicheskaja mezomehanika*, 1999, vol. 2, no. 4, pp. 23-29.

2. Mishustin I.V., Movchan A.A. Modelirovanie fazovyh i strukturnyh prevrashhenij v splavah s pamjat'ju formy, proishodjashhij pod dejstviem nemonotonno menjajushhihsja naprijazhenij [Modeling of phase and structure transformations occurring in shape memory alloys under nonmonotonically varying stresses]. *Mechanics of Solids*, 2014, no. 1, pp. 27-39.

3. Sedlaka J., Rican D. Study of Materials Produced by Powder Metallurgy Using Classical and Modern Additive Laser Technology. *Procedia Engineering*, 2015, no. 100, pp. 1232-1241.

4. Barahntin B.K., Bobyr' V.V., Voznjuk A.V., Deev A.A., Zhukov A.S., Kuznecov P.A. Optimizacija tehnologicheskijh parametrov i opredelenie rezhimov selektivnogo lazernogo splavljenija poroshka na osnove stali 316L [Optimization of the technological parameters and determination of selective laser melting modes of 316L-based composition powder]. *Inorganic Materials: Applied Research*, 2017, vol. 90, no. 2, pp. 146-152.

5. Nazarkin R.M., Petrushin N.V., Rogalev A.M. Strukturno-fazovye karakteristiki splava zhs32-vi, poluchennogo metodami napravlennoj kristallizacii, granul'noj metallurgii i selektivnogo lazernogo splavljenija [The structure and phase characteristics of ZhS32-VI alloy manufactured by directional solidification, granular metallurgy and selective laser melting]. *Trudy VILAM*, 2017, no. 2 (50), pp. 2.

6. Kuznecov P.A., Zisman A.A., Petrov S.N., Goncharov I.S. Struktura i mehanicheskie svojstva austenitnoj stali 316L,

23. Шадрин О.А. Остаточные напряжения в затвердевающих полимерных изделиях: дис. ... канд. техн. наук. – Пермь, 1986.

24. Моделирование термомеханики кристаллизующихся полимеров / И.Н. Шардаков, Н.А. Труфанов, Л.А. Голотина, В.А. Богоявленская // Изв. Тул. гос. ун-та. Естественные науки. – 2008. – № 2. – С. 117–123.

25. Влияние пористости и температуры термообработки на релаксационные и механические свойства полимерных и углеродных композиционных материалов / И.Д. Симонов-Емельянов, В.А. Ломовской, Н.Л. Шембель, Н.А. Тупицын, З.И. Фомкина // Конструкции из композиционных материалов. – 2009. – № 1. – С. 33–39.

26. Завьялова Т.Г., Труфанов Н.А. Определяющие соотношения для вязкоупругого тела в условиях кристаллизации // Прикладная механика и техническая физика. – 2005. – Т. 46, № 4 (272). – С. 78–87.

27. Седов Л.И. Механика сплошной среды. Т. 1. – М.: Наука, 1970.

28. А.А. Каменских, Т.С. Суходоева Численное моделирование процесса кристаллизации при неравномерном охлаждении в одномерной постановке // Математическое моделирование в естественных науках: сб. ст. XXVI Всерос. школы-конф. молодых ученых и студентов. – 2017. – Т. 1. – С. 26–30.

29. Зенкевич О. Метод конечных элементов в технике. – М.: Мир, 1975. – 541 с.

30. Suhodoeva T.A., Kamenskikh A.A., Bartolomey M.L. Numerical investigation of isotropic beam crystallization process under nonuniform cooling // Actual Issues of Mechanical Engineering (AIME 2017) proceedings of the Intern. Conf., Tomsk, 27-29 July, 2017 / Tomsk Polytechnic University. – Paris, Amsterdam, Hong Kong: Atlantis Press, 2017. – P. 298–304.

poluchennoj metodom selektivnogo lazernogo splavljenija [Structure and mechanical properties of standard samples made of 316L austenitic steel powder by selective laser alloying method]. *Russian metallurgy (Metally)*, 2016, no. 4, pp. 9-13.

7. Tihomirova K.A. Izotermicheskoe deformirovanie splava s pamjat'ju formy v raznyh temperaturnyh intervalah. Sluchaj odnoosnogo rastjazhenija [Isothermal deformation of shape memory alloy in different temperature ranges. Uniaxial case]. *Journal on Composite Mechanics and Design*, 2017, vol. 23, no. 2, pp. 263-282.

8. Matveenko V.P., Smetannikov O.Ju., Trufanov N.A., Shardakov I.N. Termomehanika polimernih materialov v uslovijah relaksacionnogo perehoda [Thermomechanics of polymeric materials under conditions of a relaxation transition], *Moscow, Fizmatlit*, 2009, 176 p.

9. Trufanov N.A., Shajahmetova L.R. Chislennojeksperimental'nyj analiz processa kristallizacii slitka [Numerically-experimental analysis of the ingot crystallization process]. *Scientific and Technical Volga region Bulletin*, 2015, no. 5, pp. 291-294.

10. Kulikov R.G., Kulikova T.G., Trufanov N.A. Numerical method for solving the problem of thermomechanics of polymeric environment in conditions of phase transition. *Solid State Phenomena*, 2016, vol. 243, pp. 139-145.

11. Maksimov P.V. Opredelenie optimal'noj skorosti zalivki stali dlja racionalizacii sushhestvujushhego tehnologicheskogo rezhima [Determination of the optimal speed casting of steel for rationalization the existing technological regime]. *Modern problems of science and education*, 2015, no. 1-1, p. 3.

12. Anan'ev A.I., Borshhev Ju.P., Kvardakov M.Ju., Kurkin S.Je., Kurkov A.A., Sevast'janov A.S., Shibalov M.V. Formirovanie

slozhnoprofil'nyh detalej kosmicheskikh apparatov metodom selektivnogo lazernogo splavljenja [Development of sc geometrically complicated components by the selective laser melting method]. *Vestnik NPO im. S.A. Lavochkina*, 2017, no. 1 (35), pp. 87-92.

13. Bagmutov V.P., Denisevich D.S., Zaharov I.N., Ivannikov A.Ju. Nonlinear and coupled thermal effects during finite element simulation of contact thermo-force surface hardening. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2017, no. 1, pp. 233-250.

14. Bagmutov V.P., Zaharov I.N., Features of solving technological problems in mechanics of bodies with non-uniform metal structure transformed in thermo-force loading. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2016, no. 1, pp. 5-25.

15. Koljadov E.V., Gerasimov V.V., Visik E.M., Mezhin Ju.A. Lit'e metodom napravlennoj kristallizacii s upravljaemym gradientom temperatury na fronte kristallizacii [Casting by directional solidification with a controlled temperature gradient at the crystallization front]. *Foundry. Technologies and Equipment*, 2016, no. 8, pp. 24-26.

16. Kljuev A.V., Stolbov V.Ju., Sharybin S.I. Vizualizacija slozhnyh zjorenyh struktur metallov i splavov pri identifikacii ih parametrov [Visualization of a complex grain structure of metals and alloys in their parameters identification]. *Scientific Visualization*, 2016, vol. 8, no. 3, pp. 95-101.

17. Kameneva A.L. Rol' struktury i fazovogo sostava v formirovanii fiziko-mehaničeskikh i tribologičeskikh svojstv plenok na osnove TiN [Structure and phase composition of TiN-based films and its role in the formation of mechanical and tribological properties]. *Inorganic Materials: Applied Research*, 2012, no. 1(69), pp. 58-67.

18. Baryshnikov M.P., Dolgij D.K., Kuranov K.Ju., Zajceva M.V. Issledovanie processa mehanotermičeskoj obrabotki armatury iz vysokouglerodistyh stalej [Investigation mechano-thermal process of the reinforcement treatment from high-carbon steels]. *Stal'*, 2012, no. 2, pp. 89-97.

19. Banerjee S. & Tyagi A.K. Functional Materials: Preparation, Processing and Applications. *Elsevier*, 2011, 730 p.

20. Malahov V.V. Problemy diagnostiki funkcional'nyh materialov (obzor) [Problems in Diagnostics of Functional Materials (review)]. *Industrial Laboratory*, 2011, vol. 77, no. 2, pp. 310-318.

21. Gao H., Ji B., Jäger I.L. et al. Materials become insensitive to flaws at nanoscale: Lessons from nature. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2003, vol. 100, no. 10, pp. 5597-5600.

22. Stolbov V.Y., Gitman M.B., Sharybin S.I. Application of intelligent technology in functional materials quality control. *Materials Science Forum*, 2016, vol. 870, pp. 717-724.

23. Shadrin O.A. Ostatočnye naprjazhenija v zatverdevajushhih polimernyh izdelijah [Residual stresses in solidifying polymeric products]: diss. ... kand. tehn. nauk. Perm', 1986.

24. Shardakov I.N., Trufanov N.A., Golotina L.A., Bogojavlenskaja V.A. Modelirovanie termomehaniki kristallizujuščih polimerov [Modeling thermomechanics of crystallizable polymers]. *Izvestija Tul'skogo gosudarstvennogo universiteta. Estestvennye nauki*, 2008, no. 2, pp. 117-123.

25. Simonov-Emel'janov I.D., Lomovskoj V.A., Shembel' N.L., Tupicyn N.A., Fomkina Z.I. Vlijanie poristosti i temperatury termoobrabotki na relaksacionnye i mehaničeskie svojstva polimernyh i uglerodnyh kompozicionnyh materialov [Influence of porosity and temperature of heat treatment on the relaxation and mechanical properties of polymer and carbon composite materials]. *Composite materials constructions*, 2009, no. 1, pp. 33-39.

26. Zav'jalova T.G., Trufanov N.A. Opređel'jajushhie sootnoshenija dlja vjazkouprugogo tela v uslovijah kristallizacii [Constitutive relations for a viscoelastic body under crystallization conditions]. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 2005, vol. 46, no. 4 (272), pp. 523-530.

27. Sedov L.I. Mehanika splošnoj sredy [Continuum mechanics]. *Moscow, Nauka*, 1970. vol. 1

28. Kamenskikh A.A., Suhodoeva T.S. Chislennoe modelirovanie processa kristallizacii pri neravnomernom ohlazhdenii v odnomernoj postanovke [Numerical modeling of the crystallization process in the case of non-uniform cooling in a one-dimensional formulation] // *Matematičeskoe modelirovanie v estestvennyh naukah: sbornik statej XXVI Vserossijskoj shkoly-konferencii molodyh učennyh i studentov*, 2017, vol. 1, pp. 26-30.

29. Zenkevich O. The finite element method in engineering science, 1975, 541 p.

30. Suhodoeva T.A., Kamenskikh A.A., Bartolomey M.L. Numerical investigation of isotropic beam crystallization process under nonuniform cooling. *Actual Issues of Mechanical Engineering (AIME 2017)* [Electronic resource]: proceedings of the Intern. Conf., Tomsk, 27-29 July, 2017. / Tomsk Polytechnic University. – Paris, Amsterdam, Hong Kong : Atlantis Press, 2017, pp. 298-304, (Advances in Engineering Research, ISSN 2352-5401 ; vol. 133).