

На правах рукописи

Кривилев Михаил Дмитриевич

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

05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Пермь – 2018

Работа выполнена в ФГБОУ ВО «Удмуртский государственный университет»

Официальные оппоненты: **Мышлянцева Марта Доржукаевна**,
доктор физико-математических наук, доцент,
заведующая кафедрой «Высшая математика»
Омского государственного технического
университета

Рудяк Валерий Яковлевич,
доктор физико-математических наук, профессор,
профессор кафедры теоретической механики
Новосибирского государственного архитектурно-
строительного университета (Сибстрин)

Сморodin Борис Леонидович,
доктор физико-математических наук, профессор,
профессор кафедры физики фазовых переходов
Пермского государственного национального
исследовательского университета

Ведущая организация: Федеральное государственное учреждение
**“Федеральный исследовательский центр
Институт прикладной математики
им. М.В. Келдыша Российской академии наук”**,
г. Москва

Защита состоится «20» марта 2018 г. в 14:00 на заседании диссертационного
совета Д 212.188.08 на базе ФГБОУ ВО «Пермский национальный
исследовательский политехнический университет» по адресу: 614990, г. Пермь,
Комсомольский пр., д. 29, ауд. 423б.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на официальном сайте
ФГБОУ ВО «Пермский национальный исследовательский политехнический
университет» (<http://pstu.ru>).

Автореферат разослан «15» января 2018 г.

Ученый секретарь диссертационного совета
Д 212.188.08, канд. физ.-мат. наук, доцент

А.И. Швейкин

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

В диссертационной работе развиты математические модели сопряженных процессов переноса и структурообразования при кристаллизации расплавов для решения комплексных задач в области металлургии, металлофизики и теплофизики. Использован двухуровневый подход с разбиением задачи на макро– и мезоскопический пространственные уровни, что позволяет повысить точность математических моделей при использовании доступных вычислительных мощностей. Объектами исследования выступают металлические расплавы двойных и тройных сплавов, претерпевающие фазовое превращение в условиях диффузионного и конвективного переноса в мезоскопических (с объемом $V < 1 \text{ см}^3$) объемах расплавов. Обоснованы этапы концептуальной, математической и алгоритмической постановок двухуровневого подхода и применяемые при программной реализации численные методы. На основании разработанного подхода осуществлено решение актуальных технических задач, имеющих важное практическое значение: лазерного плавления металлических порошков, получения порошковых материалов при бесконтейнерной кристаллизации и пайки алюминиевых сплавов твердым припоем. Практическая значимость работы заключается в создании трех проблемно-ориентированных программ для ЭВМ, предназначенных для использования в качестве компонентов систем инженерного анализа и цифрового производства.

Актуальность темы и степень ее разработанности. Методология многоуровневого описания материалов успешно применяется в современной науке для решения комплексных задач в области теории разрушения и механики композитов (В.Е. Панин, В.А. Лихачев, С.Д. Волков, Б.Е. Победря, С.Г. Псахье, Р.З. Валиев, П.В. Макаров, А.А. Чекалкин), математического моделирования процессов деформации поликристаллических (П.В. Трусов, D. Roose) и композиционных материалов (Ю.В. Соколкин, А.А. Паньков, С.В. Ломов, M.G. Geers), формирования микроструктуры материалов (D. Raabe, N. Provatas, K. Elder, П.К. Галенко). Важной особенностью этой методологии является то, что она определяет общую концепцию согласования математических моделей физических явлений, протекающих на различных пространственно-временных масштабах, не ограничивая при этом выбор алгоритмов описания конкретных систем. Таким образом, в каждой предметной

области разбиение исходной задачи на подзадачи и определение алгоритмов согласования решений на различных уровнях является отдельной научной проблемой.

Для анализа процессов кристаллизации на практике используются два основных класса моделей. В первом случае расчет объемной кристаллизации слитков производится при решении континуальных сопряженных уравнений баланса внутренней энергии, количества вещества, импульса и энтропии. Этот подход основан на теории двухфазной зоны (ТДЗ), наиболее эффективен для прогнозирования макроструктуры слитков и позволяет делать оценки степени сегрегации компонентов на макроскопическом (уровня представительного макрообъема) масштабе (В.Т. Борисов, М.С. Flemings, В.А. Журавлев, Ф.В. Недопекин). Второй подход базируется на применении метода фазового поля (МФП) для многокомпонентных сплавов, основанного на записи вариационных уравнений для термодинамических потенциалов и функции параметра порядка. МФП физически точен, однако в практических задачах эффективно описывает процессы структуро- и фазообразования только на атомном и мезоскопическом (т.е. отдельных кристаллитов) масштабах. Таким образом, разработка двухуровневой макроскопической-мезоскопической модели для анализа систем, претерпевающих фазовые превращения “расплав–кристаллическая фаза”, является важной актуальной задачей. Решение такой задачи позволяет значительно улучшить точность макроскопических математических моделей при сохранении их вычислительной эффективности, что имеет практическое значение. Следует отметить, что за рубежом проводятся активные исследования в этой области (Ch.-A. Gandin, G.J. Schmitz, D. Raabe, N. Zabaras), результаты которых недоступны для российских инженеров и технологов.

Объектами исследования диссертационной работы выступают металлические расплавы двойных и тройных сплавов, претерпевающие фазовые превращения в условиях диффузионного и конвективного переноса при кристаллизации мезоскопических (с $V < 1 \text{ см}^3$) объемов расплава. Такие условия реализуются при производстве функциональных покрытий и материалов, где высокие скорости изменения термодинамических параметров требуют разработки многоуровневого подхода для адекватного описания движения фазовых границ. **Предметом исследования** является кинетика процессов переноса и структурообразования в системах, претерпевающих фазовые переходы “расплав – твердая фаза”. Поставленная задача актуальна

для оптимизации аддитивных технологий, получения металлических порошков, режимов пайки твердым припоем, на примере которых показаны применимость и прикладная значимость развитого в диссертации подхода.

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

1. Анализ предложенных в литературе методов осреднения и согласования решений на различных уровнях. Определение характеристических чисел процессов переноса в многофазных системах и принципов их использования при концептуальной постановке задач с фазовыми превращениями.
2. Анализ основных физических механизмов на различных масштабах и установление соответствующих представительных объемов. Особенности концептуальной постановки задач по кристаллизации на основе данных лабораторного эксперимента.
3. Разработка двухуровневого подхода к описанию процессов переноса и структурообразования при кристаллизации мезоскопических объемов расплава в широком диапазоне скоростей охлаждения. Постановка краевых задач и алгоритмов согласования моделей на различных уровнях. Оценка точности и границ применимости метода.
4. Алгоритмическая компоновка и программная реализация комплексов программ для моделирования селективного лазерного плавления, бесконтейнерной кристаллизации и пайки твердым припоем с целью математического моделирования указанных технологических процессов.
5. Моделирование, анализ процессов теплопереноса, компактирования, кристаллизации, структуро- и фазообразования в методе селективного лазерного плавления (СЛП) для оптимизации 3D печати металлических изделий.
6. Определение методом вычислительного эксперимента рациональных режимов теплопереноса, компактирования порошка, химической сегрегации компонентов при высокоскоростном лазерном плавлении (ВЛП) функциональных композитных покрытий.

7. Расчет механизмов многофазного зарождения и отбора кристаллических фаз в бесконтейнерных методах высокоскоростной кристаллизации, включая распыление расплава в инертной атмосфере и электромагнитную левитацию.
8. Математическое моделирование кинетики вязкого течения, диффузии кремния, дендритного роста и формирования микроструктуры в зоне пайки твердым припоем сплавов Al–Si промышленного значения.

Научная новизна:

- обоснован алгоритм реализации двухуровневой модели, который производит представительную выборку макроточек для решения задач на мезоуровне и осуществляет динамическое согласование решений на различных уровнях в зависимости от скорости изменения термодинамических параметров;
- реализована модель многофазного течения в формализме фазового поля, в которой на линии контакта фаз вводится граничное условие диффузионного типа и обосновывается выбор интерполяционной функции для фазового поля, обеспечивающей численную устойчивость;
- проведен выбор численных схем, эффективных для решения задач в области металлургии мезоскопических объемов, исследована область их устойчивости, определены границы применимости;
- разработаны 3 программы для ЭВМ, использующие двухуровневый подход для моделирования процессов переноса при кристаллизации;
- методом вычислительного эксперимента изучены сопряженные теплофизические процессы, протекающие при короткоимпульсном лазерном плавлении в композитных металлических порошках, при бесконтейнерной кристаллизации металлических расплавов и пайке твердым припоем алюминиевых сплавов.

Научно-практическая значимость и использование результатов работы.

Разработанная модель имеет практическую значимость в области производства функциональных материалов с улучшенными магнитными, механическими и электрохимическими свойствами. Такие материалы часто получают кристаллизацией из многокомпонентных металлических расплавов, когда затвердевание происходит с большими скоростями охлаждения, достигаемыми

за счет закалки поверхностных слоев или частиц малого объема. Определим данный класс задач как область металлургии мезоскопических объемов. В работе предложены комплексные математические модели и решены три актуальные технические задачи на основе результатов вычислительного эксперимента. Показаны пути управления структурно-фазовыми характеристиками магнитных материалов на основе железа за счет расчета скоростей охлаждения, гидродинамического течения и многофазного зарождения в методах бесконтейнерной кристаллизации, включая получение порошковых материалов. Изучены тепловые режимы и многофазное течение в зоне оплавления при селективном лазерном плавлении металлических порошков в методе 3D печати. Установлены основные лимитирующие факторы при формировании мениска расплава и кристаллической субструктуры в зоне пайки твердым припоем. Практическое внедрение заключается в создании трех проблемно-ориентированных комплексов программ для ЭВМ, предназначенных для оптимизации технологических процессов. Результаты математического моделирования использованы для разработки метода высокоскоростного лазерного плавления, на который в соавторстве получено 7 патентов.

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

При построении двухуровневых моделей и решении уравнений переноса использованы методы математической физики и вычислительной математики. Дискретизация моделей выполнена методами конечных разностей и конечных элементов. Реализация комплексов программ проведена с помощью языков программирования C++, Pascal и метаязыка для аналитического программирования вариационных задач на вычислительной платформе ComsolMultiPhysics. Разработанные комплексы программ поддерживают

портируемость на различные операционные системы за счет функционального разделения программного кода на расчетные модули и модули интерфейса. При этом выбор операционной системы производится на этапе компиляции. Для ускорения расчетов на этапе вычислительного эксперимента реализована многопоточная обработка данных за счет программирования и исполнения скриптов на языке командного интерпретатора операционной среды.

Положения, выносимые на защиту:

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

Достоверность результатов, полученных в диссертации, обеспечивается удовлетворительным соответствием между результатами расчета и экспериментальными данными, полученными при исследовании трех комплексных процессов в области металлургии малых объемов.

Апробация работы проведена на российских и международных конференциях: X Национальной конференции по росту кристаллов, 2002, Москва; Всероссийской конференции «Высокопроизводительные вычисления и технологии», 2003, Ижевск; 7th International Conference on Brazing, High Temperature Brazing and Diffusion Welding, 2004, Aachen, Germany; EUROMAT-2007, Nurnberg, Germany; 13th International Conference on Rapidly Quenched & Metastable Materials (RQ13), 2008, Dresden, Germany; Первой и Второй международных конференциях «Трехмерная визуализация научной, технической и социальной реальности. Кластерные технологии моделирования», 2009, 2010, Ижевск; III Всероссийской конференции по наноматериалам НАНО-2009, Екатеринбург; Material Research Society (MRS) Fall Meeting, 2010, Boston, USA; IX Всероссийской конференции «Физикохимия ультрадисперсных (нано-) систем» (ФХУДС-2010), 2010, Ижевск; 3rd International Conference on Advances in Solidification Processes (ICASP-3), 2011, Rolduc Abbey/Aachen, Germany; V-ой Всероссийской конференции по наноматериалам, 2013, Звенигород; XVIII Зимней школы по механике сплошных сред, 2013, Пермь; Frontiers in Solidification Research, International Workshop, 2014, DLR Cologne, Germany; Russian Conference on Magneto Hydrodynamics, 2015, Perm, Russia; II и III Международных конференциях «Аддитивные технологии: настоящее и будущее», 2016, 2017, Москва; XV International Conference on Intergranular and Interphase Boundaries in Materials (ИВ-2016), 2016, Moscow; VII Всероссийской конференции с международным участием «Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии», 2016, Ижевск; XX Международном Менделеевском съезде по общей и прикладной химии, 2016 г., Екатеринбург; VI ежегодном Форуме «Информационные технологии в оборонно-промышленном комплексе», 2017, Ижевск; Международной конференций «Структурно-фазовые превращения в материалах: теория, компьютерное моделирование, эксперимент», 2017, Екатеринбург; Международном симпозиуме «Неравновесные процессы в сплошных средах», Пермь, 2017 и других.

Диссертационная работа докладывалась полностью на семинарах в ПНИПУ, г. Пермь на кафедрах ММСИ (рук. д.ф.-м.н., проф. П.В. Трусов) и МКМК (рук. д.т.н., проф. А.Н. Аношкин); ИМСС УрО РАН, г. Пермь (рук. акад. РАН, д.т.н., проф. В.П. Матвеевко); ИПМ им. Келдыша, г. Москва (рук. д.ф.-м.н., проф. М.П. Галанин); МИСИС, г. Москва (рук. д.т.н., проф. Е.А. Левашов); ОИВТ, г. Москва (рук. акад. РАН, д.ф.-м.н., проф. Э.Е. Сон);

ОмГТУ, г. Омск (рук. д.х.н., проф. А.В. Мышлявцев); ИТ СО РАН (рук. член-корр. РАН, д.ф.-м.н. Д.М. Маркович); ИТПМ СО РАН, г. Новосибирск (рук. д.ф.-м.н. В.Н. Попов); ИМ УрО РАН, г. Ижевск (рук. д.ф.-м.н., проф. А.В. Вахрушев).

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

Личный вклад автора. Диссертация является научно-квалификационной работой, включающей результаты, полученные лично автором и в соавторстве. Личное участие автора заключается в следующем:

– проведен аналитический обзор моделей, используемых для описания динамики изменения структурно-сложных сплошных сред, на основании которого отмечена актуальность расширения развитых в литературе подходов для моделирования металлургических процессов;

– предложен двухуровневый макроскопический-мезоскопический подход для описания динамики движения фазовых границ и прогнозирования микроструктуры в металлургических процессах мезоскопических объемов;

– разработаны математические модели, предназначенные для анализа физико-химических процессов при лазерном плавлении порошков, бесконтейнерной кристаллизации металлических расплавов, пайке твердым припоем;

– разработаны программы для ЭВМ, реализующие алгоритм двухуровневого моделирования при решении трех проблемно-ориентированных задач из области металлургии (свидетельства на программы для ЭВМ № 2010614748, 2017662176 и 2017662403);

– предложена процедура идентификации параметров разработанных моделей, выполнены вычислительные эксперименты, проведена интерпретация полученных данных;

– соискатель являлся руководителем или ответственным исполнителем проектов при поддержке РФФИ (грант № 09-02-12110 офи_м), международных научных программ Erasmus Mundus (грант № 2012663) и Fulbright (грант № 68435018), Роскосмоса (космический эксперимент «Перитектика», ГК № 47702388027160000510);

– участвовал в качестве исполнителя в 7 проектах: Минобрнауки РФ (№ 2.947.2011, госзадание № 2049, № 11.6513.2017/БЧ), ФЦП «Кадры»

(№ 2009-1.5-507-007-002), РФФИ (08-02-91957 ННИО_а, 14-29-10282), IWT (Фландрия, Бельгия, проект MUTESCH).

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

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении приводится обоснование актуальности выбранной темы, представлена общая характеристика рассматриваемой задачи, описана структура диссертационной работы.

Первая глава содержит обзор существующих подходов в математическом моделировании сопряженных физико-химических процессов в системах с фазовыми переходами. Показано, что при анализе нестационарных процессов в физических системах со сложной структурой использование метода многоуровневого моделирования повышает точность расчетов. В качестве успешных примеров рассмотрены подходы механики композиционных и поликристаллических материалов. Отмечено, что многоуровневый подход является методологическим приемом, пригодным для математического моделирования различных классов объектов, особенно гетерогенных (многофазных) систем, механика движения которых описана в литературе (Р.И. Нигматулин, В.Я. Рудяк).

Проанализирована проблема осреднения и согласования решений на различных пространственно-временных масштабах. В соответствии с целью работы анализ сконцентрирован на разработанных методах осреднения термодинамических переменных и их потоков на макроскопическом и мезоскопическом масштабных уровнях (далее – макроуровень и мезоуровень соответственно). Рассмотрены основные математические модели, относящиеся

к кристаллизации металлических расплавов, включая уравнения баланса, теорию двухфазной зоны, метод фазового поля, модели физико-химических процессов, подходы к многоуровневому моделированию кристаллизации.

Вторая глава посвящена формулировке разработанного двухуровневого макроскопического-мезоскопического подхода к моделированию кристаллизации из жидкого состояния. Подробно рассмотрены стадии концептуальной, математической и алгоритмической постановок задачи. На стадии концептуальной постановки в разделе 2.1 проведена систематизация характеристических чисел процессов переноса в системах с движущимися фазовыми границами. Проведена классификация известных в литературе безразмерных комплексов с точки зрения их применения для многофазных систем. Проведен анализ пространственно-временных масштабов процессов переноса для многофазных систем. Подробно рассмотрены масштабы, связанные с фазовой границей, поскольку их корректная оценка необходима в последующем как для правильного определения представительного объема на мезоуровне, так и для использования в модели фазового поля.

Математическая постановка задачи выполнена для проблемы кристаллизации мезоскопических объемов многокомпонентных расплавов в разделе 2.2. Сформулированы уравнения баланса для сопряженных физико-химических процессов и на их основе записана обобщенная система уравнений. Проанализировано термодинамическое описание фазовой границы в терминах свободной энергии Гиббса. Показано, что введение внутренних переменных и решение задач на мезоскопическом масштабе позволяет корректно описывать источник-слагаемые в макроскопических уравнениях баланса.

Далее обсуждена постановка краевых задач и их согласование для разномасштабных процессов. Проанализирована взаимосвязь термодинамических параметров системы и их градиентов на макро- и мезоуровнях. После этого использован метод расщепления модели сложного физико-химического процесса с фазовыми переходами на два пространственно-временных масштаба. Для этого вначале формулируется полная модель, учитывающая все сопряженные процессы, в виде наборов:

- 1) независимых переменных $\{X_i\}$, зависимых переменных $\{Y_i\}$,
- 2) уравнений баланса $\{A_i\}$, краевых условий $\{G_i\}$,
- 3) замыкающих уравнений $\{F_i\}$,
- 4) зависимостей $\{G_i\}$ теплофизических характеристик от структуры среды.

Полная модель характеризуется большим числом степеней свободы и трудноразрешима в общем виде. В практических задачах часто осуществляется анализ характеристических чисел и запись сокращенной системы, включающей только значимые уравнения баланса и/или слагаемые в уравнениях.

В работе используется метод редукции числа степеней свободы при сохранении числа уравнений и, соответственно, числа зависимых переменных. Все уравнения баланса разбиваются на два уровня и решаются на различных масштабах с выполнением процедуры согласования, рис. 1. Для этого на основе оценки характеристических чисел процессов переноса, характеристических пространственных масштабов и времен производится расщепление полной модели на задачи, оперирующие на макро– и мезоуровнях. Каждая задача описывает только одно физическое явление (например, диффузию компонентов, теплоперенос и т.д.), используя поля зависимых переменных, рассчитанные в других задачах. Задание краевых условий $\{G_i\}$ для мезоскопических моделей, т.е. согласование «макро \rightarrow мезо», производится на основе решения для макроскопических переменных. Согласование задач «мезо \rightarrow макро» производится путем уточнения зависимостей $\{F_i\}$ и $\{G_i\}$ на основе решения мезоскопических моделей.

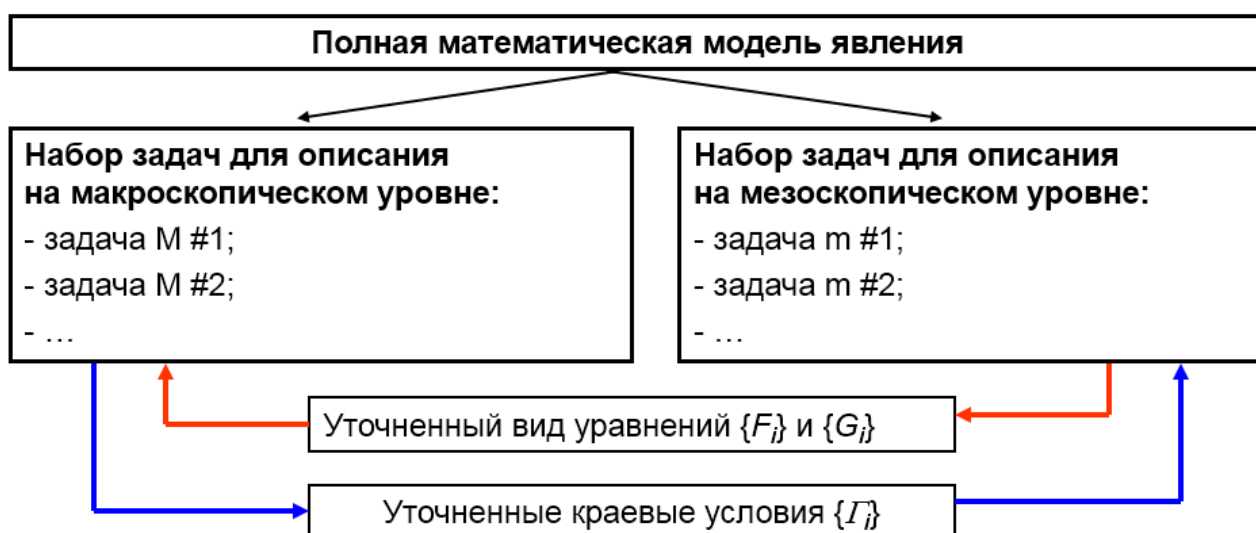


Рисунок 1 – Метод расщепления модели на различные масштабные уровни

На рис. 2 показана схема взаимодействия задач, обобщающая алгоритм реализации двухуровневой модели для кристаллизации мезоскопических объемов и выполнения вычислительного эксперимента. Схема управления процессом решения задач состоит во временной передаче управления (Т-типа, см. схему) из модуля управления (символ № 2) на мезоуровень (символ № 8), где интегрируются несопряженные нестационарные задачи (символы № 9–11) на всем представительном интервале времени мезоуровня. После этого осуществляется возврат управления в модуль управления, где осуществляется проверка адекватности рассчитанных замыкающих уравнений $\{F_i\}$ и зависимостей $\{G_i\}$ на макроуровне (символ № 3).

Отличительной особенностью предложенного алгоритма является способ согласования решений на различных масштабах, рис. 3. На мезоуровне проводится отбор мезообъемов, где переменные макроуровня демонстрируют различный характер изменения во времени или по пространственным координатам. Поскольку задачи мезоуровня обладают слабым сопряжением, то сделанная выборка из 10–15 мезообъемов позволяет характеризовать поведение системы в целом. Таким образом, предложенные схемы управления и согласования, рис. 2 и 3, исключают необходимость синхронного расчета задач на обоих пространственно-временных масштабных уровнях на каждом временном шаге расчета на макроуровне, поэтому являются экономичными и хорошо зарекомендовали себя при решении рассматриваемых проблем кристаллизации мезоскопических объемов. Данный подход условно можно назвать итерационным на уровне разных масштабов, и он только ограниченно применим для проблем деформации поликристаллических материалов, где требуется постоянное согласование решений на разных масштабах в силу сильной зависимости решений на разных уровнях.

В главе 2 также отражены вопросы выбора представительного объема для макро- и мезоуровней для изучаемых систем и процессов, описана процедура дискретизации уравнений и реализация математической модели в виде программы для ЭВМ. Дополнительно проведена оценка точности и границ применимости предложенного метода связывания. Предметно-ориентированные программные комплексы и программы для ЭВМ «Компьютерная оптимизация процессов лазерной обработки порошков», «Моделирование теплофизических процессов при безконтейнерной кристаллизации металлических расплавов», «Компьютерное моделирование технологии пайки твердым припоем» реализованы на модульной основе.

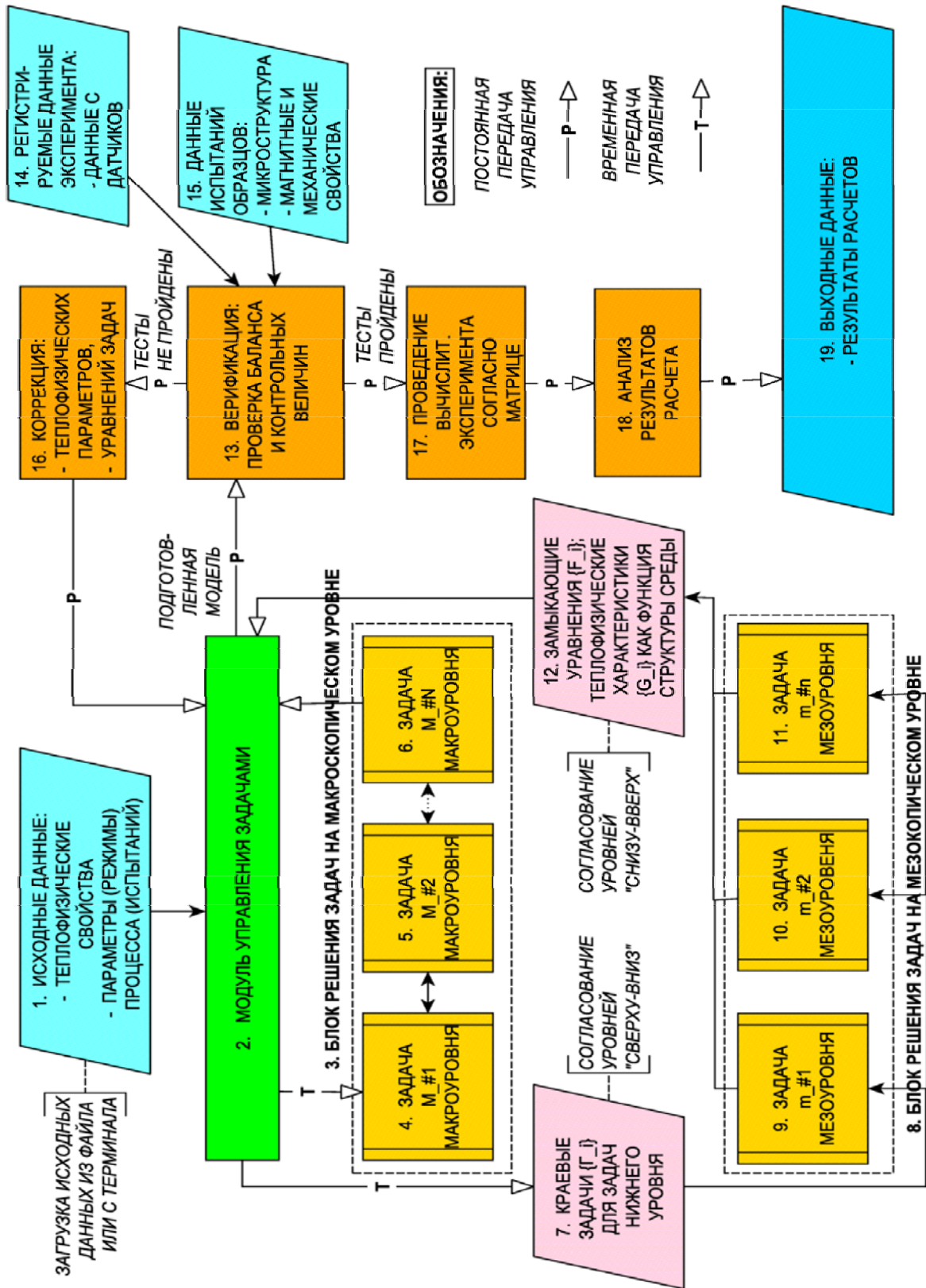


Рисунок 2 – Схема взаимодействия задач (ГОСТ 19.701-90) при проведении двухуровневого вычислительного эксперимента в области металлургии мезоскопических объемов

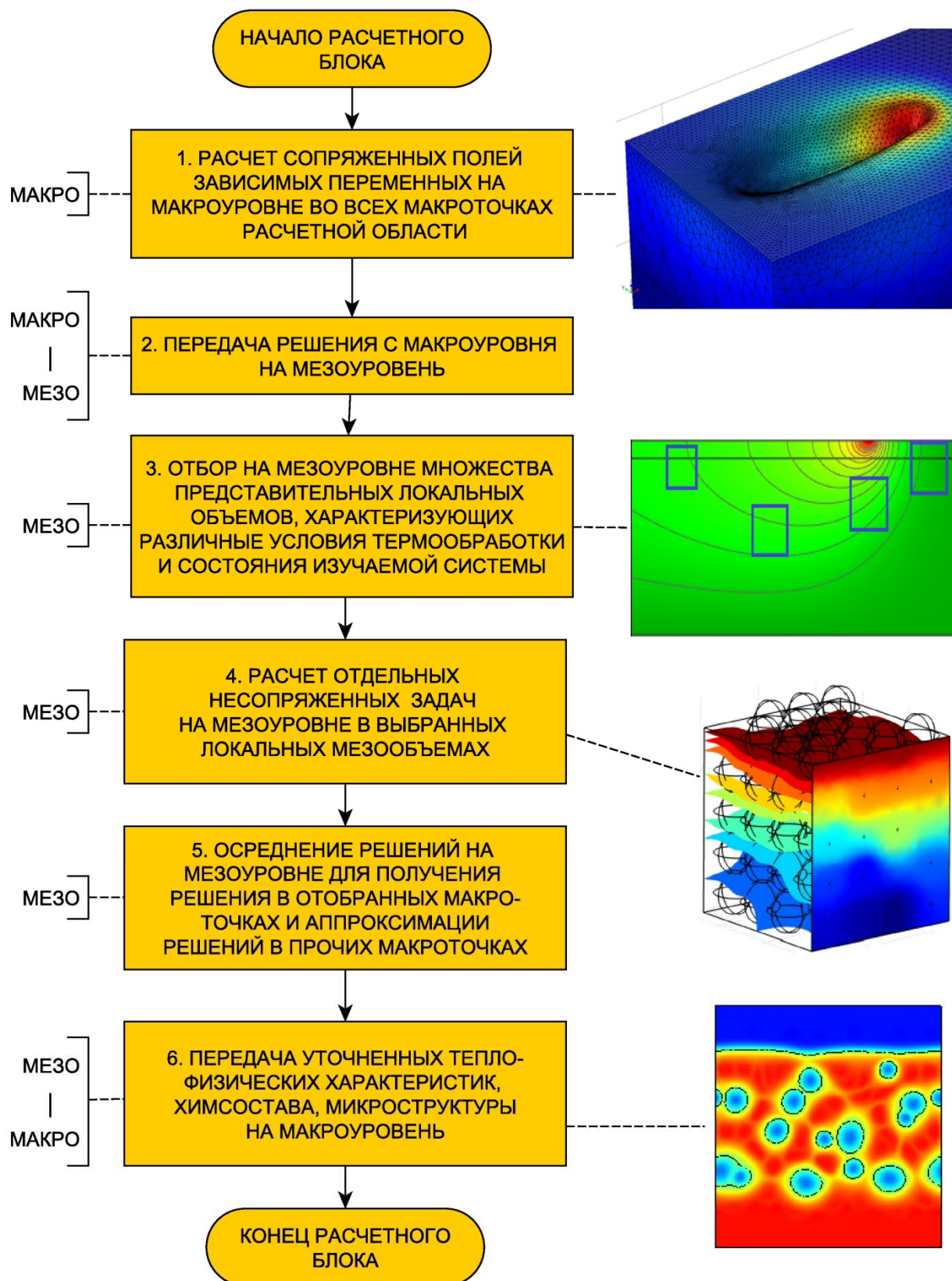


Рисунок 3 – Схема согласования решений на макро– и мезоскопическом уровнях при интегрировании нестационарных краевых задач по времени. В правой колонке приведены поясняющие рисунки для задачи двухуровневого моделирования лазерного плавления металлических порошков

В двухуровневой модели решение каждой задачи реализуется в отдельном программном модуле. Общее управление модулями осуществлялось посредством программного скрипта, запускаемого из командной строки и написанного на языке командного интерпретатора в системах Windows или Unix. За счет этого обеспечивалось портирование программ между платформами. Входные данные (символ № 1 на рис. 2) задач загружались из файлов считываемых исходных данных и библиотек теплофизических параметров. Выходные данные № 19 сохранялись в виде смешанных символьных и бинарных данных для удобства их последующей идентификации и совместимости различных версий. Визуализация проводилась при сохранении результатов расчета в графических файлах в форматах gif и postscript за счет использования подключаемых внешних библиотек.

В последующих главах на основе разработанных комплексов программ приведены результаты решения и анализа трех научных задач, имеющих важное практическое значение. **В главах 3 и 4** представлено описание физических основ методов селективного лазерного плавления (СЛП) и высокоскоростного лазерного плавления (ВЛП) с помощью двухуровневого подхода. На макроскопическом масштабе описаны тепловые поля, поля локальной газовой пористости и движение поверхности зоны оплавления при импульсном лазерном нагреве. На мезоскопическом масштабе рассчитана эффективная теплопроводность порошковых сред, изучены механизмы консолидации порошка и сегрегации химических компонентов. Результаты математического моделирования использованы для разработки и внедрения нового метода ВЛП функциональных покрытий в соавторстве с д.т.н. Е.В. Харанжевским, д.х.н. С.М. Решетниковым и д.ф.-м.н. П.К. Галенко, на который получено 5 актов внедрения технологии ВЛП на промышленных предприятиях.

При лазерном плавлении порошков методом ВЛП происходит кардинальное изменение структуры материала, рис. 4, когда частицы порошка подвергаются плавлению, консолидации и высокоскоростному затвердеванию. В результате характерные размеры структурных элементов – частиц порошка – изменяются, следовательно, предложенный в работе двухуровневый подход оказывается эффективным по сравнению с макроскопическим описанием.

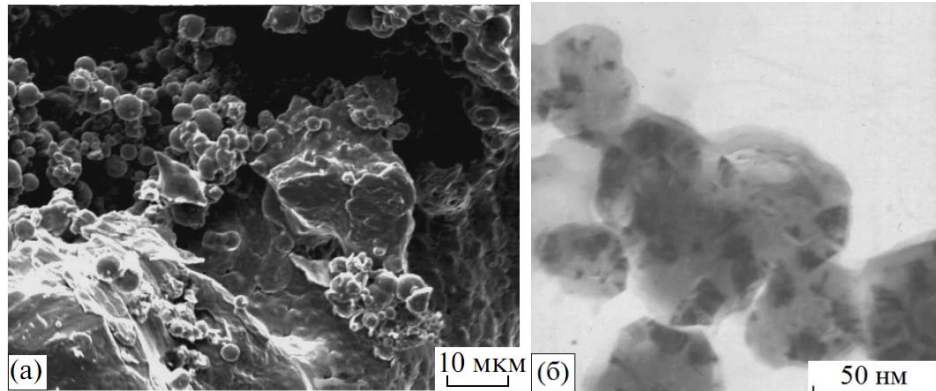


Рисунок 4 – ВЛП обработка композитного порошка Fe-3,2 вес. % Ni. (а) СЭМ поверхности, подвергнутой обработке в режиме неполного плавления. (б) ПЭМ, показывающее сохранение композитной структуры. Темные участки соответствуют частицам Ni

Содержательная постановка задачи. Слой металлического порошка, нанесенный на стальную подложку, подвергается лазерному плавлению импульсным лазером. Известны толщина порошкового слоя и его насыпная плотность; теплофизические свойства и дисперсионный состав порошка и подложки; режимы обработки, включая мощность, скорость, частоту и эффективный диаметр луча. Модель должна позволять прогнозировать температурные градиенты в зоне оплавления, скорости нагрева и охлаждения, определять усадку порошка, остаточную газовую пористость, степень адгезии покрытия с подложкой, сегрегацию компонентов для последующей оптимизации режимов обработки в процессе вычислительного эксперимента.

Концептуальная постановка задачи. Принимается, что толщина подложки много больше толщины слоя порошка, поэтому не учитывается нагрев на нижней границе подложки. Размер частиц (3-5 мкм) много меньше толщины слоя (80-100 мкм). Испарение материала, изменение коэффициента поглощения не учитываются. Учитывается зависимость теплофизических свойств от температуры и локальной пористости. Температура на поверхности не превышает температуру кипения. Процессы ликвации компонентов не учитываются на макроуровне. Усадка порошка происходит по вязкопластичному механизму, что соответствует малым числам Рейнольдса и описывается кинетической моделью аррениусовского типа.

Математическая постановка задачи. На макроуровне решаются сопряженные уравнения (1) для температуры T , баланса (2) энтальпии H , кинетическое уравнение (3) для пористости ε , смещения dZ границы (4),

теплового потока q_H (5) на границе с атмосферой и плотности F (6) лазерного излучения:

$$(1) \quad \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial T}{\partial H} \frac{\partial H}{\partial t}; \quad \frac{\partial T}{\partial H} = f(c_i); \quad (2) \quad \frac{\partial H}{\partial t}(1 - \varepsilon) = \nabla \cdot k(\varepsilon) \nabla T;$$

$$(3) \quad \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} \right|_{\Omega_P} = -\varepsilon A \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right); \quad (4) \quad dZ|_{\partial\Omega_{TOP}} = \frac{1 - \varepsilon_0}{1 - (1/h_0) \int \varepsilon(z) dz} h_0;$$

$$(5) \quad \vec{n} \cdot \vec{q}_H|_{\partial\Omega_{TOP}} = F + h(T_{OKP} - T) + \sigma\sigma_{SB}(T_{OKP}^4 - T^4);$$

$$(6) \quad F = J_0 F_t \frac{1}{2\pi\sigma_{ЛУЧА}^2 R_{ЛУЧА}^2} \exp\left(\frac{(x_{ЛУЧА} - x)^2 + (y_{ЛУЧА} - y)^2}{2\sigma_{ЛУЧА}^2 R_{ЛУЧА}^2}\right),$$

где c_i – концентрация химических элементов. Начальная температура равна комнатной. Тепловые потоки на других границах приняты нулевыми в силу удаленности от зоны оплавления. Тепловой поток и температура на границе порошка и подложки непрерывны.

На мезоуровне решается уравнение (7) теплопроводности в многофазной среде для расчета эффективного коэффициента теплопроводности $k_{\varepsilon\phi\phi}(\varepsilon)$:

$$(7) \quad \rho(\varepsilon) C_p(\varepsilon) \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot k_{\varepsilon\phi\phi}(\varepsilon) \nabla T.$$

Расчет течения многофазной среды при консолидации частиц порошка выполнен с помощью модели (8) фазового поля ϕ , где поле течения \mathbf{u} описывается уравнениями Навье-Стокса (9,10) для несжимаемой среды:

$$(8a) \quad \frac{\partial \phi}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \phi = \nabla \cdot (B \nabla M);$$

$$(8b) \quad M = \frac{\partial f}{\partial \phi} - \kappa \nabla^2 \phi; \quad (8c) \quad f = -p_0 + \Delta f(\phi); \quad \Delta f(\phi) = 0,25W \phi^2 (1 - \phi)^2;$$

$$(9) \quad \rho(\phi) \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \mu(\phi) (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) + \rho(\phi) \mathbf{g} + M \nabla \phi;$$

$$(10) \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0,$$

где M – мобильность фазового поля. Сегрегация компонентов определяется в модели фазового поля для доли ϕ_α (12) фазы α и концентрации c_i (13) компонента i и свободной энергии Гиббса G (11):

$$(11) \quad G(T, c, \varphi) = \sum_{\alpha=1}^n G^{\alpha}(T, c) p(\varphi_{\alpha}) + \sum_{\alpha < \beta} W_{\alpha\beta} \varphi_{\alpha}^2 \varphi_{\beta}^2;$$

$$(12) \quad \frac{\partial \varphi_{\alpha}}{\partial t} = M_{\alpha} \sum_{\beta} \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{M_{\beta}}{M} \right) \left(T \nabla \left[\frac{1}{T} \varepsilon_{\beta}^2 \nabla \varphi_{\beta} \right] - G_{\beta} - \frac{(T G_{\beta T} - G_{\beta})}{2 C_p T} \sum_{\gamma} \varepsilon_{\gamma}^2 (\nabla \varphi_{\gamma})^2 \right);$$

$$(13) \quad \frac{\partial c_i}{\partial t} = \nabla \left(\frac{D_i T}{G_{ii}} \nabla \left[\frac{1}{T} G_i - \frac{(T G_{iT} - G_i)}{2 C_p T^2} \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha}^2 (\nabla \varphi_{\alpha})^2 \right] \right).$$

Определение представительного объема (ПО) и дискретизации расчетной области. На макроуровне размер макроточки принимается как 1/10–1/7 толщины порошкового слоя, что содержит от 3^3 до 5^3 частиц порошка и равно ПО макроуровня. При расчете эффективной теплопроводности, консолидации и сегрегации на мезоуровне пространственный шаг интегрирования выбирается меньше ширины фазовой границы h_{ϕ} (ПО мезоуровня) и много меньше размера частиц. Отметим, что h_{ϕ} увеличен в расчетах до $h_{\phi} \sim 0,1 \div 1$ мкм, поскольку было доказано (А. Karma & W. Rappel), что МФП сводится к пределу резкой границы и позволяет в расчетах искусственно увеличивать h_{ϕ} с учетом контролируемой потери точности.

Согласование решений между уровнями. Согласование «макро → мезо» включает передачу нестационарных полей $T(t, \mathbf{r})$ температуры и мгновенного на текущем временном слое распределения $\varepsilon(\mathbf{r})$ пористости для постановки краевых задач мезоуровня. Согласование «мезо → макро» состоит в передаче эффективной теплопроводности $k_{\text{эфф.}}(\varepsilon)$, предэкспоненциального множителя A в кинетической модели усадки и степени $\max(c_i)$ - $\min(c_i)$ микросегрегации компонентов для вычисления $\partial H / \partial T$ для замыкания уравнений макроуровня.

Решение задачи и ее численная реализация. Уравнения в частных производных записывались в вариационной форме методом взвешенных невязок в постановке Галеркина для дискретизации методом конечных элементов. Интегрирование по времени проводилось с помощью схемы Эйлера с адаптивным шагом. Расчетная область разбивалась на две подобласти, соответствующие порошковому слою и подложке, рис. 5(а). Для учета усадки использовалась адаптивная расчетная сетка.

Апробация модели. Апробация выполнена путем сравнения результатов расчетов с данными металлографии, РЭМ, ПФЭМ и РФЭС для систем

карбонильного железа, композитных порошков Fe-Ni и Fe-Cr₂O₃. В работе получено хорошее соответствие результатов расчетов данным лабораторного эксперимента.

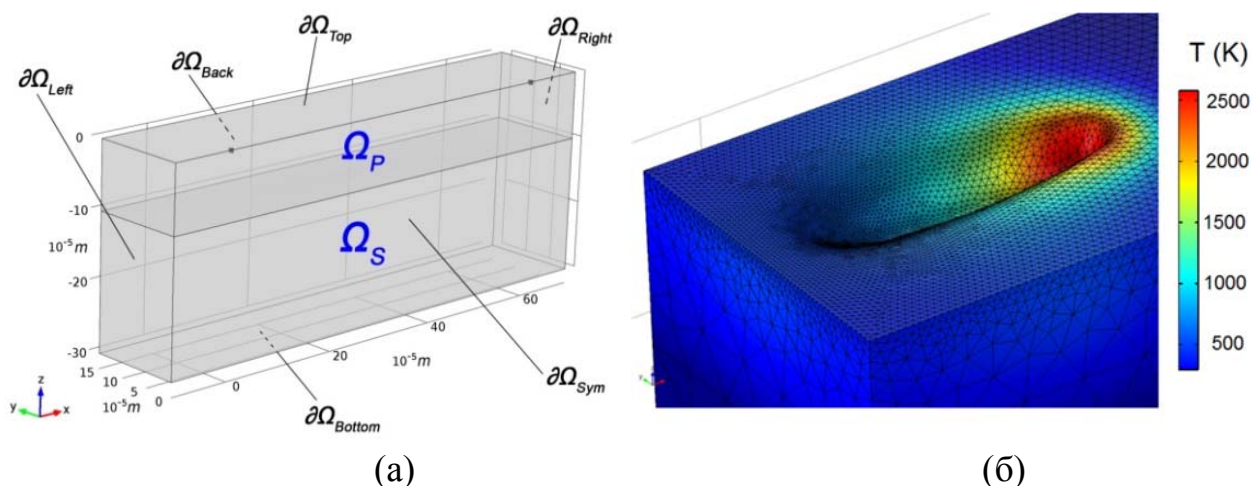


Рисунок 5 – Лазерное плавление порошков, анализ на макроуровне.

(а) Расчетная область, где подобласти Ω_P и Ω_S соответствуют порошковому слою и подложке соответственно, границы обозначены как $\partial\Omega$.

(б) Результаты расчета поля температуры и формы поверхности верхней границы при прямолинейном движении лазерного луча в режиме импульсной обработки

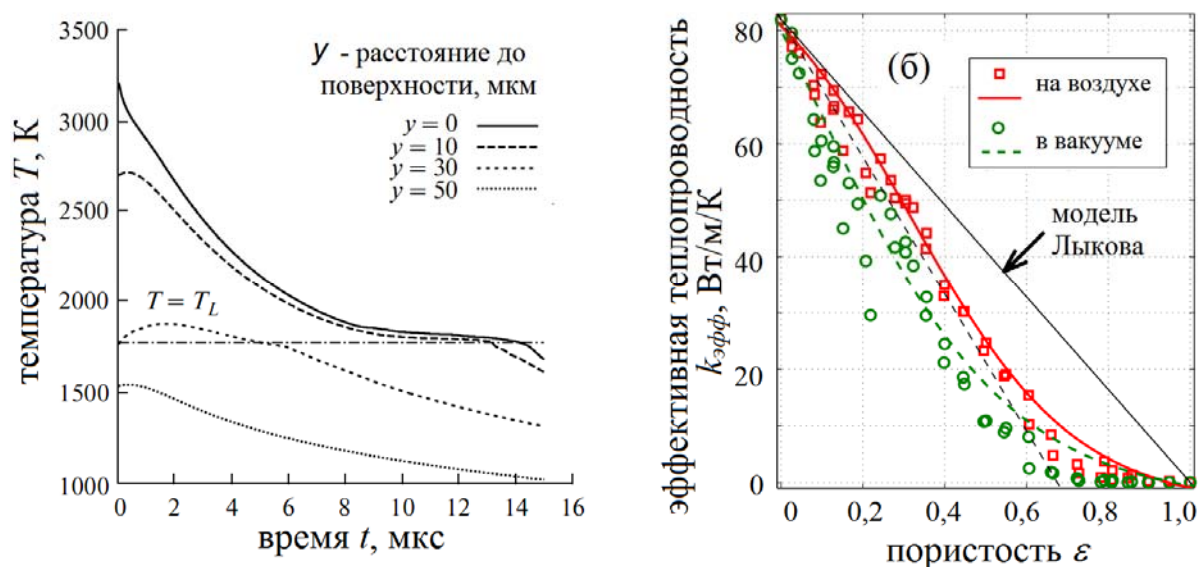


Рисунок 6 – Моделирование ВЛП системы Fe–3.2 вес. %Ni. (а) Макроуровень. Зависимость температуры T от времени t и расстояния y до поверхности порошкового слоя. (б) Мезоуровень. Зависимость эффективного коэффициента $k_{\text{эфф}}$ от удельной пористости ε в сравнении с линейной моделью Лыкова

Анализ результатов. Моделирование на макроуровне прогнозирует распределение температуры на поверхности и в порошковом слое, рис. 5(б), что используется для расчета рациональных режимов плавления порошка, когда достигается полное компактирование слоя. На мезоуровне расчеты эффективной теплопроводности, рис. 6(б), корректируют расчеты на макроуровне, рис. 6(а), за счет учета изменения теплофизических свойств в процессе усадки. Моделирование консолидации частиц во второй задаче, рис. 7, необходимо для определения параметра A кинетической модели (3) усадки. Моделирование сегрегации компонентов при плавлении и затвердевании с учетом температурных полей, рассчитанных на макроуровне (результат согласования «макро → мезо»), позволяет прогнозировать химический состав композитных покрытий, рис. 8. Показано, что при высоких скоростях нагрева и охлаждения возможно сохранение исходного композиционного состава порошка после его переплавления лазерным лучом.

Таким образом, применение двухуровневого моделирования процессов СЛП и ВЛП позволило повысить вычислительную точность модели, подтвержденную путем ее верификации после сравнения с данными лабораторных экспериментов, рис. 9. На основании результатов серии вычислительных экспериментов, выполненных с использованием программного комплекса «Компьютерная оптимизация процессов лазерной обработки порошков», описаны механизмы формирования микроструктуры при ВЛП композитных функциональных покрытий и предложены пути оптимизации режимов обработки путем построения диаграмм микроструктуры в зависимости от режимов обработки.

В главе 5 представлены методика и результаты теоретического изучения многофазного зарождения, кристаллического роста и отбора фаз при высокоскоростной кристаллизации металлических расплавов бесконтейнерными методами распыления в капельных трубах (РКТ) и электромагнитной левитации (ЭМЛ) для систем $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}_1$ и $\text{Fe}_{50}\text{Co}_{50}$. Экспериментальные данные получены в рамках проекта MAGNEPHAS Европейского космического агентства (2004–2008 гг.) и космического эксперимента «Перитектика» на борту МКС (Роскосмос, ЕКА, НАСА, 2012–2017 гг.) На макроскопическом масштабе изучены теплоперенос и течения, сопряженные с движением фронта кристаллизации в образцах. На мезоскопическом масштабе оценены механизмы формирования

микроструктуры при дендритном росте, описаны интенсивность и времена задержки при многофазном зарождении на гетерогенных примесных центрах.

Согласование решений между уровнями. Согласование «макро → мезо» включало передачу полей $T(\mathbf{r})$ температур и $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ течения, скорости $V_{\text{охл.}}$ охлаждения, концентрации $C_{\text{ГЦЗ}}$ и распределения $P(\mathbf{r}_{\text{ГЦЗ}})$ по размерам гетерогенных центров зарождения. Согласование «мезо → макро» включало передачу интенсивности I фаз, скорости $\partial G/\partial t$ прироста твердой фазы при росте дендритов для учета в тепловом балансе; скорости $V_{\text{РОСТА}}$ дендритов.

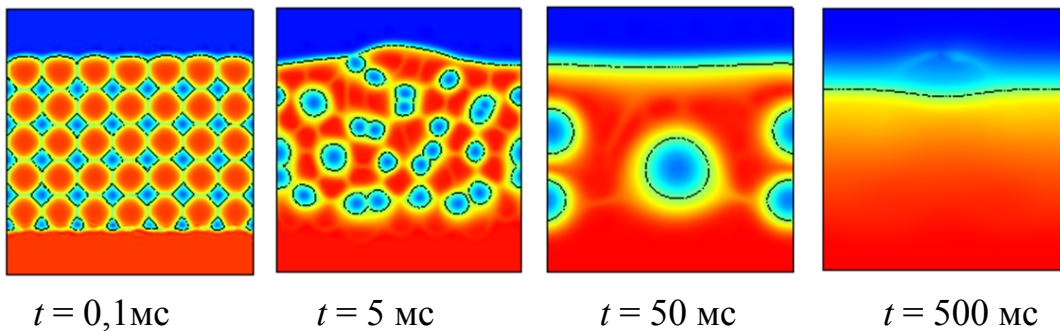


Рисунок 7 – Расчеты ВЛП на мезоуровне. Кинетика консолидации порошка после плавления. Красный и синий цвета соответствуют расплаву и газовой фазе соответственно. На заключительном этапе газовые включения всплывают и выводятся в атмосферу. Механизм растворения газа в расплаве не учитывался

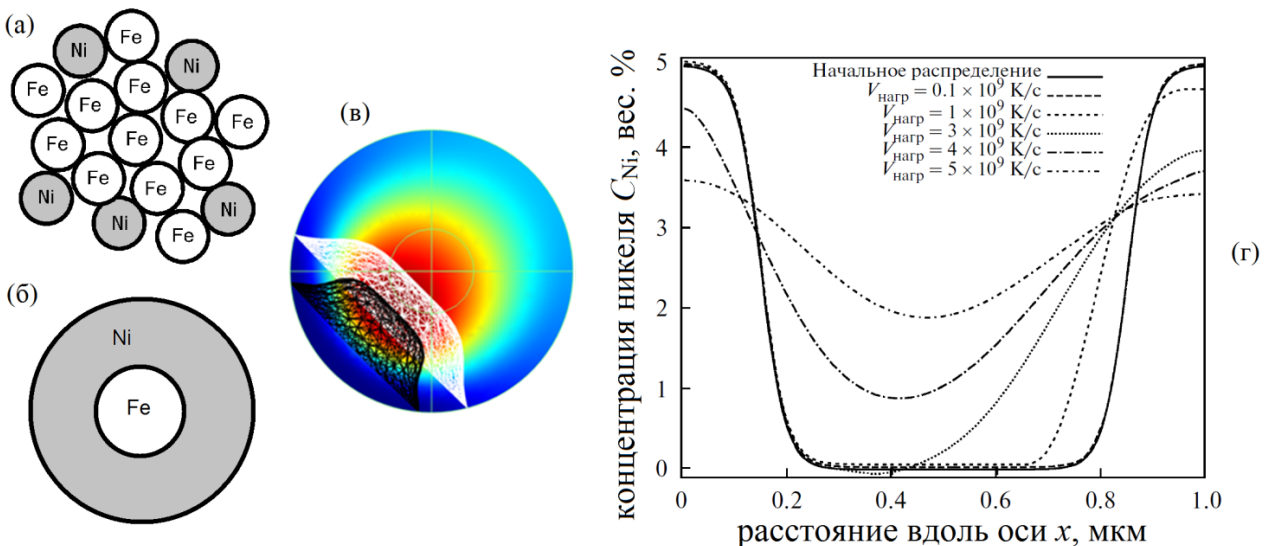


Рисунок 8 – Расчеты на мезоуровне сегрегации компонентов при плавлении и затвердевании композитной частицы Fe – Ni. (а) Исходная смесь частиц Fe и Ni. (б) Аппроксимация локального объема как композитной частицы с Fe ядром и Ni оболочкой. (в) Стадия плавления. Изоповерхности соответствуют межфазной границе, красный цвет – концентрации 100 % Fe. (г) Профили концентрации вдоль сечения частицы как функций скорости нагрева

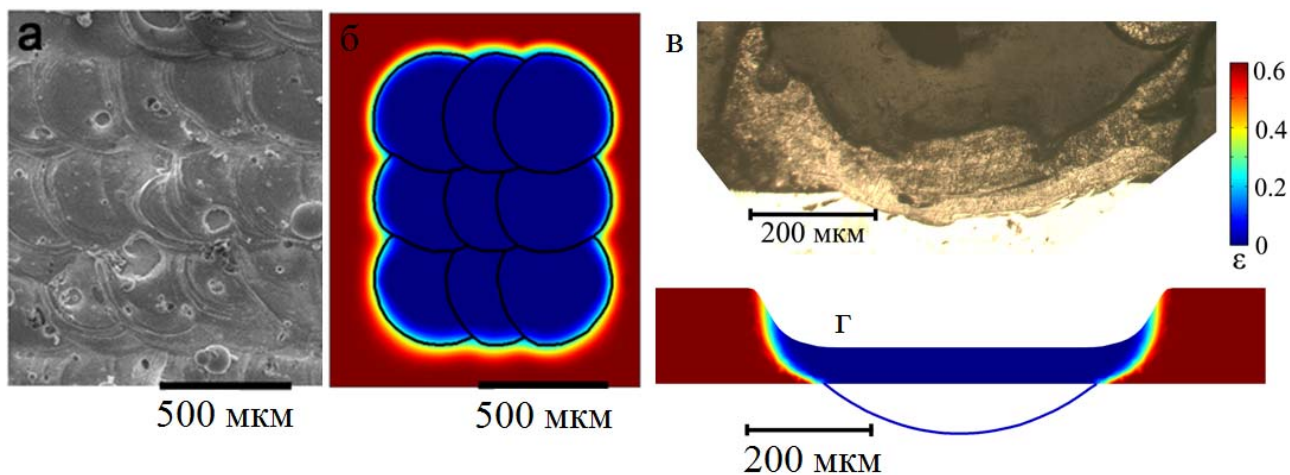


Рисунок 9 – Сравнение результатов расчетов ВЛП порошка карбонильного железа с лабораторным экспериментом при идентичных режимах обработки. Вид поверхности в (а) эксперименте и (б) в расчете. Профиль поперечного сечения дорожки (в) в эксперименте и (г) расчетах

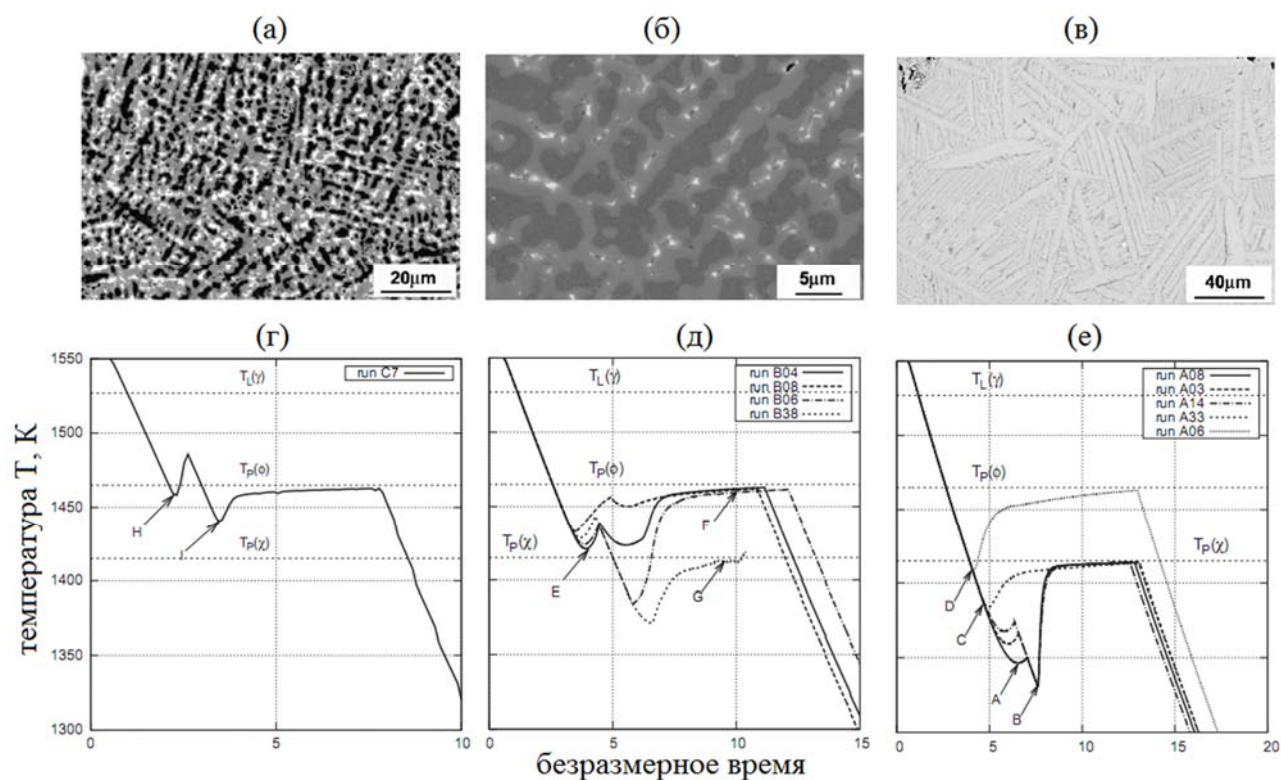


Рисунок 10 – Двухуровневое моделирование кристаллизации порошка $Nd_2Fe_{14}B_1$ при распылении. (а, б, в) Микроструктура, полученная в образцах диаметром 2000, 750 и 250 мкм соответственно. (г, д, е) Рассчитанные термограммы процесса для образцов аналогичных размеров. Скорости охлаждения оценены как 10^2 , 10^3 и 10^4 К/с соответственно для каждого размера

Проведенное двухуровневое моделирование позволило объяснить ряд наблюдаемых в эксперименте явлений и предсказать эффекты, трудно регистрируемые при испытаниях. На рис. 10 показаны микроструктуры в образцах сплава $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}_1$, широко используемого для производства магнитов с высокой остаточной намагниченностью. Расчетные термограммы показывают, что в больших частицах порошка (диаметром 2000 мкм) не удастся достигнуть высоких переохлаждений, рис. 10(а). В результате образуется большое содержание фазы $\alpha\text{-Fe}$, снижающей магнитные свойства. В образцах среднего диаметра, рис. 10(б), достигаются переохлаждения с формированием доперитектической χ -фазы $\text{Nd}_2\text{Fe}_{17}\text{B}_{x=0.1}$, которая распадается на перитектическую ϕ фазу $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}_1$ и $\alpha\text{-Fe}$. В малых образцах, рис. 10(в) преобладает ϕ фаза. Важно отметить, что модель прогнозирует различные сценарии отбора микроструктуры при одном наборе входных параметров. Это достигнуто путем корректного учета стохастичности зарождения фаз как пуассоновского процесса и учетом концентрации и размеров гетерогенных центров, присутствующих в расплаве в виде оксидов, карбидов и боридов.

Разработанная на основе двухуровневой модели программа для ЭВМ «Моделирование теплофизических процессов при безконтейнерной кристаллизации металлических расплавов» позволяет проводить расчет режимов получения порошков для производства редкоземельных постоянных магнитов. Комплекс использован для анализа двухступенчатой кристаллизации в сплаве Fe-Co при проведении космического эксперимента «Перитектика», рис. 11. Методами высокоскоростной видеосъемки поверхности образца обнаружено, что затвердевание происходит по двухступенчатому механизму с зарождением метастабильной фазы ОЦК железа и последующим зарождением стабильной ГЦК фазы еще до окончания кристаллизации, вкладка на рис. 11(а). Двухуровневое моделирование позволило корректно описать зависимость времени задержки между образованием первичной и вторичной фаз от переохлаждения, рис. 11(б).

В главе 6 проведено моделирование кинетики вязкого течения припоя в зоне сопряжения поверхностей и механизмов формирования микроструктуры при пайке твердым припоем Al-Si алюминиевых сплавов, рис. 12(а, б). На макроскопическом масштабе рассчитано положение фазовой границы «расплавленный припой – газовая фаза». На мезоскопическом масштабе описано влияние смачиваемости поверхности на кинетику движения линии

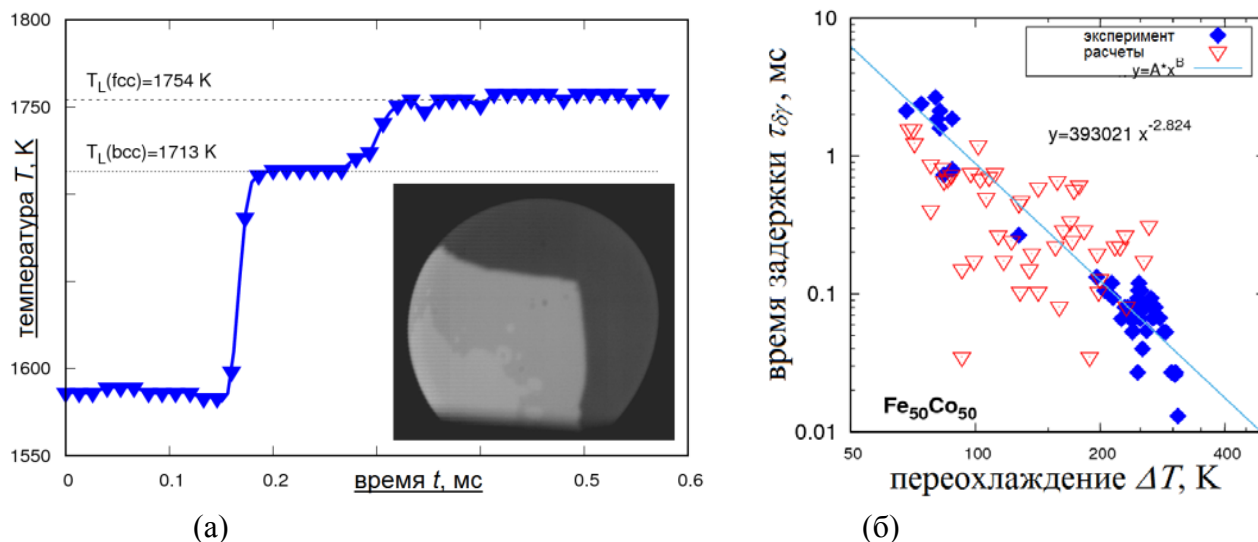


Рисунок 11 – Изучение бесконтейнерной кристаллизации образцов Fe-Co методом ЭМЛ в КЭ «Перитектика». (а) Двухступенчатый механизм зарождения фаз. (б) Расчет времени задержки между фазами в сравнении с экспериментом

раздела «расплав – газовая фаза – твердая фаза». Впервые развита модель вязкого мультифазного течения припоя на основе МФП с граничным условием диффузионного типа: $D\varphi/Dt = -b(\kappa\mathbf{n} \cdot \nabla\varphi + \gamma'(\varphi))$, где κ – коэффициент при градиентном слагаемом в разложении свободной энергии, $\gamma(\varphi)$ – поверхностная энергия вдоль смачиваемой поверхности (D. Jacqmin, 2000). Предложен критерий отбора интерполяционных функции, численно устойчивых для такого граничного условия.

Получено удовлетворительное соответствие с экспериментальными данными для кинетики движения мениска для систем: вода-воздух, силиконовое масло-воздух, припой Al-Si-азот. Впервые предложен согласованный метод оценки подвижности точки контакта для систем с химическим взаимодействием. Разработанный программный комплекс «Компьютерное моделирование технологии пайки твердым припоем» использован для моделирования и оптимизации режимов пайки с композитными припоями нового поколения класса.

Согласование решений между уровнями. Согласование «макро → мезо» включало передачу: концентрации CSi кремния и динамический контактный угол $\theta_{ДИНАМ}$ в контактной точке. Согласование «мезо → макро» включало передачу мобильности b фазового поля в контактной точке.

Использование двухуровневого подхода позволило корректно описать механизм вязкого течения и кинетики движения линии смачивания для трех различных систем, включая плакированный алюминий Al+Al-Si, рис. 12(в). Отличие на три порядка в скорости движения линии смачивания между водой и Al-Si при сопоставимой вязкости не имело ранее адекватного объяснения. В работе показано, что основным лимитирующим фактором является поверхностная диффузия припоя вдоль стенки, которая зависит как от сегрегации кремния в подложку, так и от сил межмолекулярного взаимодействия на линии смачивания. Это процесс осложняется формированием в зоне пайки дендритов α -Al, рис. 13, что значительно изменяет механику вязкого течения.

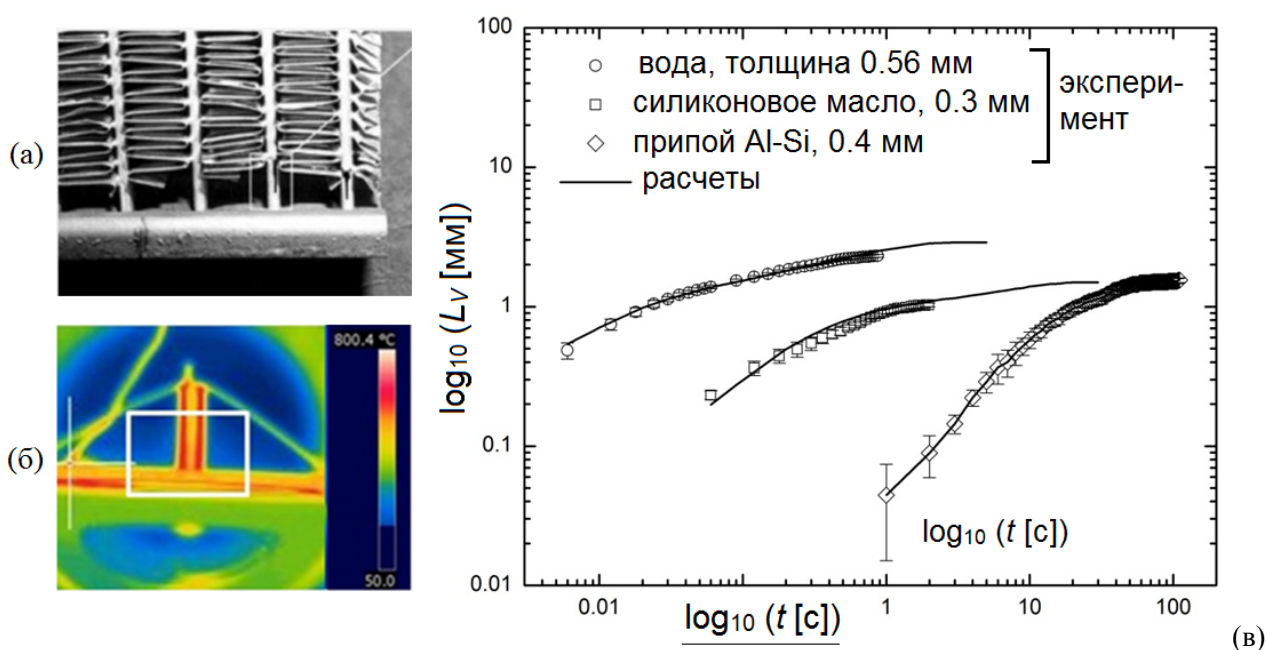


Рисунок 12 – (а) Вид теплового радиатора, полученного пайкой листового алюминия с плакированным припоем Al-Si. (б) Тепловизионное изображение сборки Т-образного соединения в установке для изучения кинетики смачивания. (в) Сравнение кинетики смачивания, полученной в расчетах и эксперименте, для систем «вода-стекло», «силиконовое масло-стекло» и сборки плакированного алюминия Al+Al–10 вес. % Si

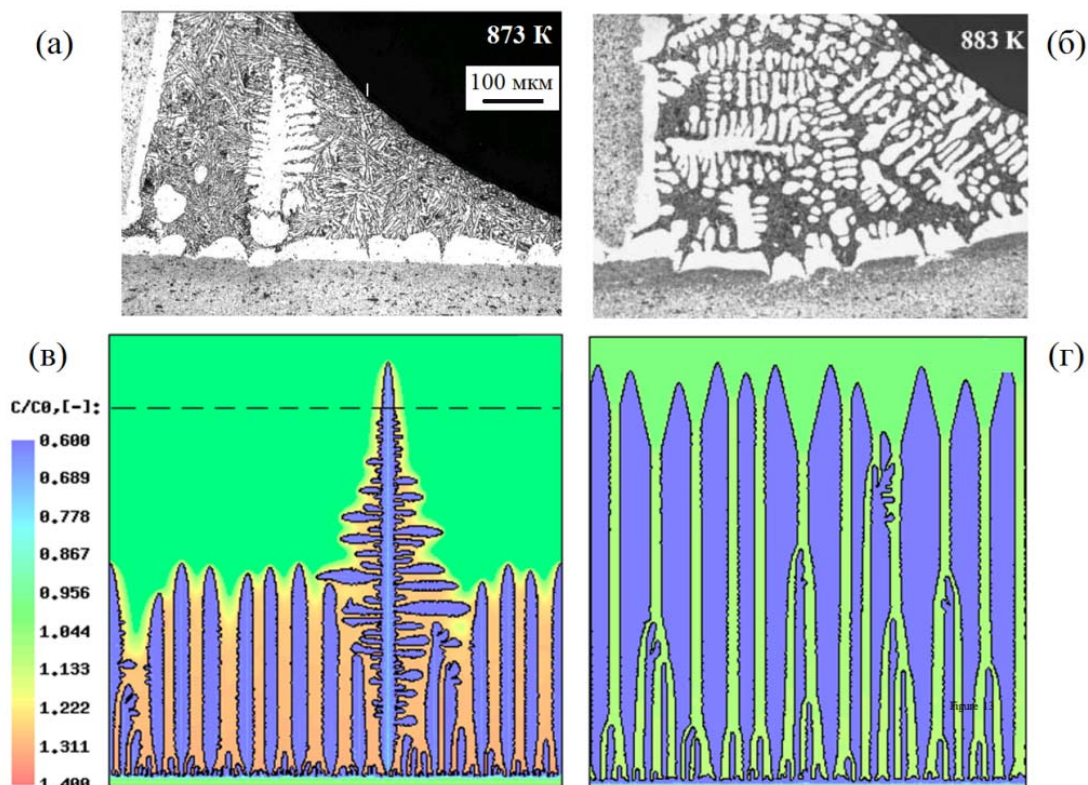


Рисунок 13 – Сравнение микроструктуры, полученной в эксперименте и расчетах, при разных температурах выдержки $\Delta T_{\text{выдерж.}} = 14$ и 4 °C ниже равновесного ликвидуса. Шкала показывает относительную концентрацию C/C_0 , где C_0 – начальная концентрация кремния в сплаве Al-Si

В заключении формулируются основные научные результаты и выводы диссертационной работы.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Разработан двухуровневый подход для описания процессов переноса и структурообразования в металлических расплавах, претерпевающих фазовые превращения, который позволил при сохранении вычислительной эффективности улучшить соответствие результатов макроскопических моделей кристаллизации с экспериментальными данными.
2. Предложена формулировка модели многофазного течения в формализме фазового поля, в которой на линии контакта фаз вводится граничное условие диффузионного типа и обосновывается выбор интерполяционной функции для фазового поля, обеспечивающий численную устойчивость.

3. Обоснован алгоритм реализации двухуровневой модели, который производит представительную выборку макроточек для решения задач на мезоуровне и осуществляет динамическое согласование решений на различных уровнях в зависимости от скорости изменения термодинамических параметров. Указанный подход применим для описания систем со слабой корреляцией по пространственным координатам или времени, где допускается расщепление задач на уровни и параллелизация их численного решения.
4. Проведен выбор численных схем, эффективных для решения задач в области металлургии мезоскопических объемов, исследована область их устойчивости, определены границы применимости.
5. Реализованы и верифицированы три проблемно-ориентированные программы для ЭВМ для моделирования теплофизических процессов в металлургии мезоскопических объемов.
6. Впервые методом двухуровневого моделирования изучены сопряженные теплофизические процессы, протекающие при короткоимпульсном лазерном плавлении (ЛП) в композитных металлических порошках. Показано, что достижимы режимы ЛП порошка, его компактирования и последующей высокоскоростной кристаллизации, способствующие формированию композитных функциональных покрытий, которые наследуют неоднородность химического состава порошковой смеси.
7. Двухуровневое моделирование бесконтейнерной кристаллизации расплавов позволило получить новые данные по механизмам структурообразования в сплавах на основе железа. Теоретически рассчитаны и обоснованы скорости охлаждения и фазовый отбор при кристаллизации расплава $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}_1$, позволяющие достичь высокой остаточной намагниченности при производстве редкоземельных постоянных магнитов.
8. Результаты моделирования пайки твердым припоем показали, что кинетика смачивания и формирования мениска в зоне соединения лимитируется, в первую очередь, протеканием физико-химической реакции на линии смачивания, скорость протекания которой определяется потенциалами взаимодействия молекул в высокотемпературной области и химическим составом.

Таким образом, в процессе разработки двухуровневого подхода к математическому моделированию задач из области металлургии мезоскопических объемов расплава были взаимно увязаны и дополнены различные алгоритмы и подходы, существовавшие ранее. Это позволило достигнуть максимальной эффективности как с точки зрения точности результатов моделирования и их согласия с экспериментальными данными, так и с точки зрения оптимального использования вычислительных ресурсов. На основе данных двухуровневого вычислительного эксперимента решены комплексные задачи в области теплофизики и современного материаловедения.

ПУБЛИКАЦИИ

Основные результаты диссертации представлены в работах, входящих в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций, или опубликованных в зарубежных изданиях, индексируемых в международных базах цитирования Web of Science, Scopus и Springer:

Метод двухуровневого моделирования процессов кристаллизации, анализ пространственно-временных масштабов, схема согласования решений, алгоритм построения двухуровневых макро-мезоскопических моделей:

- 1) **Кривилев М.Д.** Многомасштабное теоретическое описание структурообразования в ультрадисперсных системах / М.Д. Кривилев, Д.Д. Афлятунова, В.Е. Анкудинов, Г.А. Гордеев // *Материаловедение*. – 2012. – № 1. – С. 2–6. URL: http://www.nait.ru/journals/number.php?p_number_id=1583.
- 2) **Krivilyov M.** Multiscale analysis of the effect of competitive nucleation on phase selection in rapid solidification of rare–earth ternary magnetic materials / M. Krivilyov, T. Volkman, J. Gao, J. Fransaer // *Acta Materialia*, 60 (2012), 112–122. DOI: [10.1016/j.actamat.2011.09.009](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2011.09.009).
- 3) **Кривилев М.Д.** Синтез композитных покрытий при высокоскоростном лазерном спекании металлических порошковых смесей / М.Д. Кривилев, Е.В. Харанжевский, В.Г. Лебедев, Д.А. Данилов, Е.В. Данилова, П.К. Галенко // *Физика металлов и материаловедение*. – 2013. – Т. 114. – № 10. – С. 871–893.

Разработка математических моделей, алгоритмов, выбор численных схем:

- 4) Галенко П.К. Конечно-разностная схема для моделирования кристаллического структурообразования в переохлажденных бинарных сплавах / П.К. Галенко, **М.Д. Кривилев** // Математическое моделирование. – 2000. – Т. 12. – № 12. – С. 11–23.
- 5) Galenko P.K. Model for isothermal pattern formation of growing crystals in undercooled binary alloys / P.K. Galenko, **M.D. Krivilyov** // Modelling and Simulation in Material Science and Engineering, 8 (2000), 67–79. DOI: [10.1088/0965-0393/8/1/306](https://doi.org/10.1088/0965-0393/8/1/306).
- 6) **Кривилев М.Д.** Управление лазерным спеканием металлических порошковых смесей / М.Д. Кривилев, Е.В. Харанжевский, Г.А. Гордеев, В.Е. Анкудинов // Управление большими системами. – 2010. – Т. 31. – С. 299–322.
- 7) Анкудинов В.Е. Функционал атомной плотности и диаграмма структур в модели кристаллического фазового поля / В.Е. Анкудинов, П.К. Галенко, Н.В. Кропотин, **М.Д. Кривилев** // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2016. – Т. 149. – № 2. – С. 343–356.
- 8) Lomaev S. Exact analytical solution based on the vector potential technique for a conjugated hydrodynamic and Joule heating problem in an electromagnetically levitated drop / S. Lomaev, **M. Krivilyov**, J. Fransaer // Magnetohydrodynamics, 52 (1/2) (2016), 105–116. URL: http://mhd.sal.lv/authors/Krivilyov_M.html.
- 9) Dehsara M. (In)Compressibility and parameter identification in phase field models for capillary flows / M. Dehsara, H. Fu, S.Dj. Mesarovic, D.P. Sekulic, **M. Krivilyov** // Theoretical and Applied Mechanics, 44 (2) (2017). On Line-First. DOI: [10.2298/TAM170803009D](https://doi.org/10.2298/TAM170803009D).
- 10) **Krivilyov M.D.** Phase-field model of interface migration and powder consolidation in additive manufacturing of metals / M.D. Krivilyov, S.Dj. Mesarovic, D.P. Sekulic // Journal of Materials Science, 52 (8) (2017), 4155–4163. DOI: [10.1007/s10853-016-0311-z](https://doi.org/10.1007/s10853-016-0311-z).
- 11) Гордеев Г.А. Компьютерное моделирование селективного лазерного плавления высокодисперсных металлических порошков / Г.А. Гордеев, **М.Д. Кривилев**, В.Е. Анкудинов // Вычислительная механика сплошных сред. – 2017. – Т. 10. – № 3. – С. 293–312.

Реализация проблемно-ориентированных программ для ЭВМ:

- 12) **Кривилев М.Д.** Программный комплекс «Компьютерная оптимизация процессов лазерной обработки порошков» / М.Д. Кривилев, Д.А. Данилов, В.Г. Лебедев, П.К. Галенко // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2010614748 от 21.07.2010 г.
- 13) **Кривилев М.Д.** Программа для ЭВМ «Моделирование теплофизических процессов при безконтейнерной кристаллизации металлических расплавов» / М.Д. Кривилев, С.Л. Ломаев, Д.Д. Афлятунова // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № RU 2017662176. Официальный бюллетень «Программы для ЭВМ. Базы данных. Топологии интегральных микросхем». – ФИПС. – 2017. – № 11.
- 14) **Кривилев М.Д.** Программа для ЭВМ «Компьютерное моделирование технологии пайки твердым припоем» / М.Д. Кривилев, П.К. Галенко // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № RU 2017662403. Официальный бюллетень «Программы для ЭВМ. Базы данных. Топологии интегральных микросхем». – ФИПС. – 2017. – № 11.

Верификация моделей, проведение вычислительных экспериментов, интерпретация результатов расчетов, анализ процессов переноса, структурообразования и физико-химических процессов:

- 15) Галенко П.К. Изотермический рост кристаллов в переохлажденных бинарных сплавах / П.К. Галенко, **М.Д. Кривилев** // Математическое моделирование. – 2000. – Т. 12. – № 11. – С. 17–37.
- 16) Galenko P.K. Modelling of crystal pattern formation in isothermal undercooled alloys / P.K. Galenko, **M.D. Krivilyov** // Modelling and Simulation in Material Science and Engineering, 8 (2000), P. 81–94. DOI: [10.1088/0965-0393/8/1/307](https://doi.org/10.1088/0965-0393/8/1/307).
- 17) Галенко П.К. Применение модели локально неравновесного затвердевания к процессу кристаллического структурообразования при высокоскоростной закалке расплавов спиннингованием / П.К. Галенко, **М.Д. Кривилев**, В.И. Ладьянов, М.В. Осетров // Кристаллография. – 2001. – Т. 46. – № 2. – С. 354–355.

- 18) **Кривилев М.Д.** Моделирование дендритной кристаллизации в Al–Si сплавах при скоростной пайке / М.Д. Кривилев, П.К. Галенко // *Материаловедение*. – 2004. – № 5. – С. 11–14.
- 19) Sekulic D.P. Dendritic growth in Al–Si alloys during brazing. Part 2: Computational modeling / D.P. Sekulic, P.K. Galenko, **M.D. Krivilyov**, L. Walker, F. Gao // *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 48 (12) (2005), 2385–2396. DOI: [10.1016/j.ijheatmasstransfer.2005.01.036](https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2005.01.036).
- 20) Galenko P.K. Modeling of a transition to diffusionless dendritic growth in rapid solidification of a binary alloy / P.K. Galenko, **M.D. Krivilyov** // *Computational Materials Science*, 45 (4) (2009), 972–980. DOI: [10.1016/j.commatsci.2008.12.021](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2008.12.021).
- 21) Gordeev G.A. Optimization of processing parameters in laser sintering of metallic powders / G.A. Gordeev, V.E. Ankudinov, **M.D. Krivilyov**, E.V. Kharanzhevskiy // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 27 (2012), 012079. DOI: [10.1088/1757-899X/27/1/012079](https://doi.org/10.1088/1757-899X/27/1/012079).
- 22) **Krivilyov M.** Effects of transient heat and mass transfer on competitive nucleation and phase selection in drop tube processing of multicomponent alloys / M. Krivilyov, J. Fransaer // In: *Solidification of Containerless Undercooled Melts*. Ed. D.M. Herlach, D.M. Matson, Wiley VCH (2012), 139–160. DOI: [10.1002/9783527647903.ch7](https://doi.org/10.1002/9783527647903.ch7).
- 23) **Krivilyov M.** Direct numerical simulation of near-wall turbulent flow and ionic mass transport in electrochemical reactors using a hybrid finite element/spectral method / M. Krivilyov, M. Rasquin, L. Stappers, G. Gordeev, J. Fransaer, G. Degrez // *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 91 (2015), 922–935. DOI: [10.1016/j.ijheatmasstransfer.2015.07.053](https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2015.07.053).
- 24) **Krivilyov M.** Thermodynamic assessment of chrome–spinel formation in laser–sintered coatings with Cr₂O₃ particles / M. Krivilyov, E. Kharanzhevskiy, S. Reshetnikov, L.J. Beyers // *Metallurgical and Materials Transactions B*, 47 (3) (2016), 1573–1582. DOI: [10.1007/s11663-016-0616-y](https://doi.org/10.1007/s11663-016-0616-y).
- 25) Fu H. Kinetics of the molten Al–Si triple line movement during a brazed joint formation / H. Fu, M. Dehsara, **M. Krivilyov**, S.Dj. Mesarovic, D.P. Sekulic // *Journal of Materials Science*, 51 (4) 2016, 1798–1812. DOI: [10.1007/s10853-015-9550-7](https://doi.org/10.1007/s10853-015-9550-7).

26) Ankudinov V. Numerical simulation of heat transfer and melting of Fe-based powders in SLM processing / V. Ankudinov, G.A. Gordeev, **M.D. Krivilyov** // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 192 (2017), 012026. DOI: [10.1088/1757-899X/192/1/012026](https://doi.org/10.1088/1757-899X/192/1/012026).

Статьи, в которых результаты математического моделирования использованы для изучения физико-химических процессов:

27) Galenko P.K. Bifurcations in a sidebranch surface of a free-growing dendrite / P.K. Galenko, **M.D. Krivilyov**, S.V. Buzilov // Physical Review E, 55 (1) (1997), 611–619. DOI: [10.1103/PhysRevE.55.611](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.55.611).

28) Галенко П.К. Бифуркации в структуре свободно растущего дендрита при затвердевании бинарной системы / П.К. Галенко, **М.Д. Кривилев**, К.В. Емельянов // Известия вузов: Прикладная нелинейная динамика. – 1999. – Т. 7. – № 2,3. – С. 122–136.

29) Haranzhevskiy E.V. Structure and mechanical properties of structural steel in laser resolidification processing / E.V. Haranzhevskiy, D.A. Danilov, **M.D. Krivilyov**, P.K. Galenko // Materials Science and Engineering A, 375–377 (2004) 502–506. DOI: [10.1016/j.msea.2003.10.040](https://doi.org/10.1016/j.msea.2003.10.040).

30) Sekulic D.P. Dendritic growth in Al–Si alloys during brazing. Part 1: Experimental evidence and kinetics / D.P. Sekulic, P.K. Galenko, **M.D. Krivilyov**, L. Walker, F. Gao // International Journal of Heat and Mass Transfer, 48 (12) (2005), 2372–2384. DOI: [10.1016/j.ijheatmasstransfer.2005.01.034](https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2005.01.034).

31) Харанжевский Е.В. Структура и механические свойства конструкционной стали при лазерной обработке поверхности / Е.В. Харанжевский, **М.Д. Кривилев**, Д.А. Данилов, П.К. Галенко // Материаловедение. – 2004. – № 6. – С. 21–26.

32) Решетников С.М. Коррозионно–электрохимическое поведение композитных слоев на основе железа, полученных лазерным спеканием / С.М. Решетников, Е.В. Харанжевский, **М.Д. Кривилев**, Э.Е. Садиоков // Коррозия: материалы, защита. – 2010. – № 9. – С. 33–37.

33) Харанжевский Е.В. Лазерное спекание нанокompозитов Fe–Ni / Е.В. Харанжевский, **М.Д. Кривилев** // Физика металлов и материаловедение. – 2011. – Т. 111. – № 1. – С. 54–63.

- 34) Решетников С.М. Коррозионно–электрохимическое поведение стали 40Х, подвергнутой лазерной обработке / С.М. Решетников, Е.В. Харанжевский, **М.Д. Кривилев**, Э.Е. Садиоков, Н.С. Матвеева // Химическая физика и мезоскопия. – 2011. – Т. 13. – № 2. – С. 255–261.
- 35) Решетников С.М. Катодное выделение водорода на поверхности нанокompозитных слоев, полученных лазерным спеканием порошков железо–никель / С.М. Решетников, Е.В. Харанжевский, **М.Д. Кривилев** // Химическая физика и мезоскопия. – 2011. – Т. 13. – № 3. – С. 419–424.
- 36) Решетников С.М. Коррозионно-электрохимическое поведение композитных слоев, полученных лазерным спеканием наноразмерных порошков железо-никель / С.М. Решетников, Е.В. Харанжевский, **М.Д. Кривилев** // Коррозия: материалы, защита. – 2011. – № 5. – С. 18–24.
- 37) Костенков С.Н. Метод определения характеристик взаимодействия лазерного излучения с нанокompозитными порошковыми материалами / С.Н. Костенков, Е.В. Харанжевский, **М.Д. Кривилев** // Физика металлов и металловедение. – 2012. – Т. 113. – № 1. – С. 98–103.
- 38) Решетников С.М. Наноразмерные композиты, полученные лазерным спеканием порошков железо-никель-углерод как эффективные катоды для электрохимического получения водорода / С.М. Решетников, Е.В. Харанжевский, **М.Д. Кривилев**, Э.Е. Садиоков, Ф.З. Гильмутдинов // Химическая физика и мезоскопия. – 2012. – Т. 14. – № 4. – С. 617–625.
- 39) Харанжевский Е.В. Коррозионно–электрохимические свойства лазерно–индуцированных наноструктур на поверхности сталей / Е.В. Харанжевский, С.М. Решетников, **М.Д. Кривилев** // Ядерная физика и инжиниринг. – 2013. – Т. 4. – № 6. – С. 543–548.
- 40) Садиоков Э.Е. Исследование коррозионно-электрохимических свойств композитных слоев, полученных лазерным спеканием ультрадисперсных порошков железо-никель-углерод / Э.Е. Садиоков, С.М. Решетников, Е.В. Харанжевский, **М.Д. Кривилев** // Вестник Тамбовского ГУ. Сер. Естественные и технические науки. – 2013. – Т. 18. – № 5. – С. 2374–2377.
- 41) Харанжевский Е.В. Коррозионно-электрохимическое поведение наноструктурных оксидно–хромовых слоев, полученных лазерным облучением нелегированной стали короткими импульсами / Е.В. Харанжевский, **М.Д. Кривилев**, С.М. Решетников, Э.Е. Садиоков, Ф.З. Гильмутдинов //

Физико–химия поверхности и защита материалов. – 2014. – Т. 50. – № 6. – С. 649–656.

42) Харанжевский Е.В. Коррозионно-электрохимические свойства карбидовольфрамовых покрытий, полученных короткоимпульсным лазерным облучением. Ч.1. Получение и аттестация покрытий / Е.В. Харанжевский, **М.Д. Кривилев**, С.М. Решетников, И.С. Николаева, Е.М. Борисова // Коррозия: материалы, защита. – 2015. – № 8. – С. 42–47.

43) Shutov I.V. Analysis of morphology and residual porosity in selective laser melting of Fe powders using single track experiments / I.V. Shutov, G.A. Gordeev, E.V. Kharanzhevskiy, **M.D. Krivilyov** // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 192 (2017), № 012023. DOI: [10.1088/1757-899X/192/1/012023](https://doi.org/10.1088/1757-899X/192/1/012023).