

К модели формирования микроструктуры в процессе лазерного спекания металлического порошкового компакта

Ф.Х. Мирзаде^а, А.В. Дубров^а

^а *Институт проблем лазерных и информационных технологий РАН - филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук, 140700, ул. Святоозерская, 1, Шатура, Россия*

Аннотация

Развита модель фазового поля для изучения кристаллизации и эволюции микроструктуры твердой фазы при селективном лазерном спекании/плавлении (СЛС/СЛП) порошкового компакта. Использован двухкомпонентный параметр порядка (степень упорядоченности, ориентационное поле), для которого выведены разрешающие соотношения, исходя из принципа положительности производства энтропии. Применение этого принципа позволило получить термодинамически согласованные эволюционные уравнения для компонент параметра порядка, сопряженные с полями температуры, концентрации примеси и упругих деформаций для неизотермических условий протекания процесса кристаллизации расплавов чистых металлов и многокомпонентных сплавов. Модель микроструктуры сопряжена с макроскопической термодинамической моделью СЛС, учитывающей процессы теплопереноса, термокапиллярной конвекции и эволюцию свободной поверхности расплава.

Ключевые слова: метод фазового поля; многомасштабная модель; лазерное спекание металлических порошков; микроструктура; упругие напряжения

1. Введение

Селективное лазерное спекание/плавление (СЛС/СЛП) является одним из наиболее перспективных аддитивных методов синтеза трехмерных (3D) изделий со сложными внутренними структурами [1-4]. СЛС представляет собой послойное изготовление функциональных изделий из металлических порошков (или их смесей) за счет плавления (полного или частичного) и кристаллизации, индуцируемые прямым лазерным воздействием. Данная технология является практически безотходной и наиболее универсальной, так как имеет достаточно большой выбор исходных порошков с широким спектром размеров частиц (от 10 нм до 100 мкм) [1,2]. Аддитивный процесс СЛС определяется большим количеством факторов, таких как мощность источника энергии, скорость сканирования, физико-химическими свойствами исходного материала и т.д. Следует отметить взаимосвязь факторов, влияющих на процесс, наличие множества взаимодействующих между собой процессов: поглощение и рассеяние энергии лазерного излучения (ЛИ) веществом подложки и частицами порошка, распространение тепла и конвекция, эволюция свободной поверхности расплава за счет капиллярных (в том числе термокапиллярных) сил, испарение, усадка, кристаллизация, формирование микроструктуры и напряженного состояния синтезируемого объекта [4].

Из экспериментов хорошо известно, что разнообразные микроструктуры (ячеистые, дендритные, ячеисто-дендритные структуры), возникающие на этапе кристаллизации расплава, во многом определяют физико-механические характеристики синтезируемого изделия, поэтому необходимо контролировать процесс формирования микроструктуры. Наиболее подходящей основой для этого является применение математического моделирования, позволяющего связать технологические параметры СЛС и качество полученного изделия.

Единое моделирование кристаллизации при СЛС представляет серьезные трудности. Основные проблемы здесь связаны с описанием сложного взаимодействия нелинейных процессов, протекающих на разных масштабных уровнях, начиная с уровня взаимодействия одиночного растущего кристаллита с метастабильным расплавом, заканчивая макроуровнем (описание тепломассопереноса на уровне системы в целом). Существующие модели процесса кристаллизации, построенные в рамках одного масштабного уровня, способны описывать достаточно сложные явления (формирование дендритов, рост кристаллического зерна, пористость и т.д.) на своих уровнях. Однако, несмотря на это, в последнее время возникают новые направления исследований, касающиеся совместных моделей микро- и макроуровней [5].

В нашей предыдущей работе [6] была предложена многомасштабная модель процессов кристаллизации и эволюции микроструктуры при лазерной наплавке с коаксиальной инъекцией порошков металлов и сплавов. В [7] численно рассматривалась макро модель процессов, которая является составной частью многоуровневой модели кристаллизации при лазерной наплавке. Многомасштабная численная модель плавления металлического слоя порошка для условий воздействия постоянных тепловых потоков разработана в [8].

Целью настоящей работы является развитие модели формирования микроструктуры твердой фазы при СЛС порошкового компакта с использованием двухмасштабного приближения. Суть модели состоит в том, что, при физико-математическом описании задачи кристаллизации, физические процессы представляются в виде связанной группы процессов, протекающих на различных пространственных масштабах, и обладающих взаимным влиянием. На каждом масштабном уровне осуществляется построение модели процесса кристаллизации, которая учитывает основные особенности поведения расплава на данном уровне. Это обстоятельство определяет и круг задач для субмоделей.

Эволюция микроструктуры описывается с помощью уравнения для двухкомпонентного параметра порядка (степень упорядоченности, ориентационное поле) сопряженного с уравнениями теплопроводности и диффузии примеси, а также

упругим напряжением/деформацией, сопровождающим фазовое превращение (ФП). Модель микроструктуры сопряжена с макроскопической термодинамической моделью СЛС, учитывающей процессы теплопереноса, термокапиллярной конвекции и эволюцию свободной поверхности расплава (границы раздела фаз жидкость-газ). В макромоделе самосогласованно учитывается распределения температуры и скоростей течений расплава в зависимости от технологических параметров (мощность луча, скорость сканирование) процесса СЛС. Моделирование эволюции свободной поверхности проводится с использованием метода объема жидкости (*volume of fluid-VOF*).

2. Модель фазового поля.

Исследование микроструктур при кристаллизации расплава на основе классической модели (Стефановского типа), является весьма непростой задачей, поскольку требует разработки специальных алгоритмов для явного определения формы межфазной поверхности. Наиболее подходящей основой для этого является использование континуальной модели фазового поля (МФП), опирающейся на принципах слабо-неравновесной термодинамики и формализме ФП Ландау-Гинзбурга.

В континуальных моделях, в отличие от классической модели, использующей понятие резкой границы, используется концепция диффузионного интерфейса между жидкой и твердой фазами. В этом подходе форма и взаимное расположение фаз, которые составляют микроструктуру, описываются переменными фазового поля (или параметра порядка), которые подчиняются множеству нелинейных дифференциальных уравнений, сопряженных с уравнениями теплопроводности и концентрации. Параметр порядка плавно меняется по ширине узкой переходной области, описывая внутреннюю структуру ФП. Вдали от границы раздела фаз он имеет постоянную величину, соответствующую структуре, ориентации и их составу. Поэтому МФП является удобным инструментом для численного исследования кристаллизации без явного отслеживания интерфейса в процессе эволюции микроструктуры; при этом положение фазовой границы определяется как изолиния фазового поля.

МФП был применен к широкому кругу проблем, включая рост дендритов в чистых металлах; дендритный, эвтектический и перитектический рост в сплавах; микросегрегация примеси при быстром затвердевании и т.д. Термодинамически согласованные МФП рассмотрены в ряде работ [9-13]. Вывод эволюционных уравнений в этих работах основывается на основных принципах необратимой термодинамики. Здесь для описания кристаллизации расплава (задачи микроуровня) при СЛС, мы представляем вывод динамических уравнений МФП с учетом упругих (термических, концентрационных, фазовых) напряжений, сопровождающих процесс неизотермического ФП.

Для получения управляющих уравнений МФП воспользуемся формализмом, предложенным в [9]. Рассмотрим область V , в которой бинарный металл ($a-b$), претерпевает ФП жидкость-кристалл ($L-S$). Ограничимся 2D вариантом задачи и введем характеристику фазового состояния материала - параметр порядка, состоящий из двух переменных: $\{\varphi(\mathbf{r}, t), \phi(\mathbf{r}, t)\}$ [14]. Переменную $\varphi(\mathbf{r}, t)$ можно интерпретировать как степень упорядоченности материала в микрообъеме с радиус-вектором \mathbf{r} в момент времени t ; $\phi = 0$ соответствует жидкому состоянию, а $\phi = 1$ - кристаллическому. Узкая область, в которой $0 < \phi < 1$, соответствует межфазной поверхности. Переменная ϕ характеризует ориентацию кристаллической фазы (кристаллизационное ориентационное поле). Она определяется как $\phi = N_0 \tilde{\phi}$, где $\tilde{\phi}$ угол между одним из главных кристаллографических направлений и осью абсцисс в выбранной системе координат, N_0 порядок оси симметрии рассматриваемого типа решетки. Очевидно, что $\phi \in (0, 2\pi/N_0)$.

Для произвольного подобъема рассматриваемой области $\Omega \in V$ функционал полной энтропии запишем в виде

$$E(\Omega) = \int_{\Omega} \left[\eta(\varphi, c, u) - \frac{1}{2} \varepsilon^2 |\nabla \varphi|^2 - \frac{1}{2} \nu^2 |\nabla \phi|^2 \right] dv, \quad (1)$$

где $\eta(\varphi, c, u)$ - плотность энтропии; $u(\mathbf{r}, t)$ - плотность внутренней энергии; c - концентрация растворенного вещества (примеси); ε и ν - положительные параметры, которые могут быть функциями параметра порядка. Градиентные члены в (1) учитывают вклады в энтропию за счет межфазных границ. В использованном функционале учитываются только градиенты параметров порядка, а градиент температуры и концентрации в явном виде не включены (предполагается, что градиенты этих величин невелики).

Анизотропию поверхностной энергии можно учесть, полагая, что коэффициент ε является функцией θ : $\varepsilon = \varepsilon_0 \tilde{\varepsilon}(\theta)$, где $\varepsilon_0 > 0$, $\theta = \theta_0 - \phi/N_0$. Переменная θ_0 есть угол между осью абсцисс и вектором нормали $\mathbf{n} = \nabla \varphi$ границе раздела фаз. Таким образом, θ характеризует ориентацию вектора нормали интерфейса относительно соседнего растущего кристаллита. Третье слагаемое в (1) учитывает влияние разориентации соседних кристаллов. Предполагается, что это влияние зависит от упорядоченности материала, так что для ν имеем: $\nu = \nu_0 \tilde{\nu}(\varphi)$, $\nu_0 > 0$.

Применяя локальные законы сохранения для концентрации и энергии, а также второй закон термодинамики, получаем

$$\dot{u} + \nabla \cdot \mathbf{q} - \sigma_{ij} \dot{e}_{ij} = 0, \quad (2)$$

$$\dot{c} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0, \quad (3)$$

$\mathbf{j} = M_c \nabla (\delta E / \delta c)$ и $\mathbf{q} = M_u \nabla (\delta E / \delta u)$ - потоки концентрации и энергии, соответственно; $M_{c,u} > 0$ - константы, характеризующие диффузию растворенного вещества и теплопроводность; σ_{ij} и e_{ij} тензоры напряжений и деформаций, соответственно. Третий член в (2) характеризует изменение внутренней энергии за счет упругой деформации.

Производство энтропии в объеме $\Omega \in V$ можно найти, если вычесть из скорости изменения энтропии \dot{E} в $\Omega \in V$, поток энтропии через поверхность

$$G_{prod} = \dot{E} + \int_A \left(\frac{\mathbf{q}}{T} + \mathbf{p} \right) \cdot \mathbf{n} da, \quad (4)$$

где A поверхность Ω с внешней нормалью \mathbf{n} ,

$$\mathbf{p} = \dot{\phi} \left[\varepsilon^2 \nabla \varphi + \varepsilon \varepsilon' I \cdot \nabla \varphi \right] + \dot{\phi} \nu \nabla \phi$$

(I – единичный тензор, $\varepsilon' = d\varepsilon(\theta)/d\theta$). В подынтегральном выражении в (4), \mathbf{q}/T – поток энтропии, обусловленный теплопроводностью, \mathbf{p} – поток энтропии, связанный с изменением фазовых переменных (степени упорядоченности, ориентации растущего кристалла) на границе объема Ω .

Подставляя выражение (1) в уравнение (4), и используя теорему о дивергенции, для второго закона термодинамики ($G_{prod} \geq 0$) находим

$$\int_{\Omega} \left[\dot{\eta} + \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{q}}{T} \right) + h_{\varphi} \dot{\phi} + h_{\phi} \dot{\phi} \right] dv \geq 0, \quad (5)$$

где введены обозначения

$$h_{\varphi} = \nabla \cdot \left[\varepsilon (\varepsilon I + \varepsilon' J) \nabla \varphi \right] - \nu \nu' |\nabla \phi|^2,$$

$$h_{\phi} = \varepsilon \varepsilon' |\nabla \varphi|^2 + \nabla \cdot (\nu \nabla \phi)$$

(I – единичный тензор; $J = \mathbf{i}\mathbf{i} + \mathbf{j}\mathbf{j}$ – тензор с ортонормированным базисом (\mathbf{i}, \mathbf{j}) в декартовой системе координат, $\nu' = d\nu(\phi)/d\phi$). Отсюда имеем следующее локальное выражение

$$\dot{\eta} + \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{q}}{T} \right) + h_{\varphi} \dot{\phi} + h_{\phi} \dot{\phi} \geq 0. \quad (6)$$

Далее применяя закон сохранения энергии (2) и используя выражение для свободной энергии Гиббса $g = u - T\eta - \sigma_{ij} e_{ij}$, неравенство (6) запишем в виде

$$-\dot{g} - \eta \dot{T} - \left(\frac{\mathbf{q}}{T} \cdot \nabla T \right) + h_{\varphi} \dot{\phi} + h_{\phi} \dot{\phi} - e_{ij} \dot{\sigma}_{ij} \geq 0. \quad (7)$$

Производную свободной энергии по времени (\dot{g}) представим в виде

$$\dot{g} = \frac{\partial g}{\partial T} \dot{T} + \frac{\partial g}{\partial \sigma_{ij}} \dot{\sigma}_{ij} + \frac{\partial g}{\partial \varphi} \dot{\varphi}.$$

Тогда неравенство (7) принимает вид

$$\left(h_{\varphi} T - \frac{\partial g}{\partial \varphi} \right) \dot{\phi} + h_{\phi} \dot{\phi} T - \left(\eta + \frac{\partial g}{\partial T} \right) \dot{T} - \left(\frac{\mathbf{q}}{T} \cdot \nabla T \right) + \left(e_{ij} + \frac{\partial g}{\partial \sigma_{ij}} \right) \dot{\sigma}_{ij} \geq 0.$$

Локально положительность производства энтропии можно гарантировать, выбрав следующие соотношения для теплового потока и производных переменных параметра порядка по времени

$$\mathbf{q} = M_e \nabla \frac{1}{T}, \quad (8)$$

$$\tau \dot{\phi} = \nabla \cdot \left[\varepsilon (\varepsilon \tilde{I} + \varepsilon' \tilde{J}) \nabla \varphi \right] - \frac{\nu'}{2} |\nabla \phi|^2 - \frac{1}{T} \frac{\partial g}{\partial \varphi}, \quad (9)$$

$$\tau \dot{\phi} = \varepsilon \varepsilon' |\nabla \varphi|^2 + \nabla \cdot (\nu \nabla \phi), \quad (10)$$

$$\eta = -\frac{\partial g}{\partial T}, \quad e_{ij} = -\frac{\partial g}{\partial \sigma_{ij}},$$

где $\tau = \tau_0 \tilde{\tau}(\theta)$ функция, характеризующая подвижность.

Уравнения (2), (3) и (8)–(10) представляют собой систему управляющих уравнений для фазового поля, ориентационного поля, концентрации примеси и энергии.

Для плотностей свободной энергии Гиббса ($g(\varphi, c, T)$) и внутренней энергии ($u(\varphi, c, T)$), в случае регулярных бинарных сплавов, имеем выражение [10]

$$g(\varphi, c, T) = (1-c)g_a(\varphi, T, e_{ij}) + cg_b(\varphi, T, e_{ij}) + \lambda(\varphi)c(1-c) + \frac{RT}{v_m} [c \ln c + (1-c) \ln(1-c)], \quad (11)$$

$$u(\varphi, c, T) = (1-c)u_a(\varphi, T) + cu_b(\varphi, T), \quad (12)$$

где $g_{a,b}$ и $u_{a,b}$ – классические плотности свободной энергии и внутренней энергии веществ a и b , соответственно; R – газовая постоянная; v_m – молярный объем; $\lambda(\varphi)$ – параметр неидеальности сплава. Плотности внутренних энергий веществ a и b запишем в виде

$$u_{a,b}(\varphi, T) = p(\varphi)u_{a,b}^S(T) + u_{a,b}^L(T)(1-p(\varphi)),$$

где $u_{a,b}^{S,L}(T)$ – внутренние энергии твердой и жидкой фаз веществ a и b при температуре T ; интерполяционная функция $p(\varphi)$ определяет зависимость внутренней энергии от упорядоченности среды. Она выбирается таким образом, чтобы обеспечить описание интерфейса L - S конечной ширины, где $0 < \varphi < 1$ (потенциал свободной энергии имеет минимумы при $\varphi = 0$ и $\varphi = 1$). Согласно [9]: $p(\varphi) = \varphi^3(10 - 15\varphi + 6\varphi^2)$, $p(0) = 0$ и $p(1) = 1$.

Далее представляя $u_{a,b}^{S,L}(T)$ в виде линейных зависимостей от температуры $u_{a,b}^{S,L}(T) = u_{a,b}^{S,L}(T_m^{a,b}) + C_{a,b}^{S,L}(T - T_m^{a,b})$, где $u_{a,b}^S(T_m^{a,b})$ – внутренние энергии твердой и жидкой фаз при температуре плавления $T = T_m^{a,b}$; $C_{a,b}^{S,L}$ – их теплоемкости), имеем

$$u_{a,b}(\varphi, T) = u_{a,b}^S(T_m^{a,b}) + C_{a,b}(T - T_m^{a,b}) + p(\varphi)L_{a,b}$$

($L_{a,b} = u_{a,b}^S(T_m^{a,b}) - u_{a,b}^L(T_m^{a,b}) = T_m^{a,b}\eta_{a,b}^S - \eta_{a,b}^L$ – скрытая теплота компонентов, $C_{a,b}^S = C_{a,b}^L = C_{a,b}$). Тогда, используя термодинамическое соотношение $dg = -sdT + \sigma_{ij}de_{ij}$, для плотностей свободных энергий компонентов $g_{a,b}$ после интегрирования, имеем

$$g_{a,b} = \omega_g^{a,b}Td(\varphi) + [L_{a,b}(1 - T/T_m^{a,b}) + \mathcal{G}_{a,b}(e_{ij})]p(\varphi). \quad (13)$$

Здесь $\omega_g^{a,b} = 3\bar{\sigma}_{a,b}/\sqrt{2}T_m^{a,b}\delta_{a,b}$ ($\bar{\sigma}_{a,b}$ – поверхностная энергия границы L - S , $\delta_{a,b}$ – ширина фронта ФП (является характерным масштабом длины фазового поля) есть высота энергетического барьера, связанного с межфазной границей (L - S), $d(\varphi)$ – потенциал двойной стенки. Слагаемое с $\mathcal{G}_{a,b}(e_{ij})$ в правой части (13) описывает влияние упругих полей деформаций на потенциал, обусловленное ФП:

$$\mathcal{G}_{a,b}(e_{ij}) = \int_0^{e_{ij}} (\sigma_{ij}^S - \sigma_{ij}^L) d\tilde{e}_{ij}.$$

Тогда воспользовавшись термодинамическим соотношением $(\partial\eta/\partial\varphi)_{u,c} = -T^{-1}(\partial g/\partial\varphi)_{T,c}$, находим, что градиент плотности энтропии составляет

$$\partial\eta/\partial\varphi = -(1-c)\Gamma_a - c\Gamma_b - T^{-1}\lambda'c(1-c), \quad (14)$$

где

$$\Gamma_{a,b} = \omega_g^{a,b}d'(\varphi) + 30d(\varphi)T^{-1} [L_{a,b}(1 - T/T_m^{a,b}) + \mathcal{G}_{a,b}(e_{ij})],$$

$$\lambda' = d\lambda(\varphi)/d\varphi = 30(\lambda_L - \lambda_S)d(\varphi).$$

При выводе (14), мы учли, что $\lambda(\varphi) = \lambda_S + (\lambda_L - \lambda_S)p(\varphi)$ и $p'(\varphi) = 30d(\varphi)$.

Соответственно, для потоков энергии (\mathbf{q}) и концентрации примеси (\mathbf{j}) имеем следующие выражения:

$$\mathbf{q} = -\frac{M_c}{T^2} \nabla T, \quad (15)$$

$$\mathbf{j} = D(\varphi) \frac{c(1-c)v_m}{R} \left[(\Gamma_a - \Gamma_b - T^{-1}\lambda'(1-2c)) \nabla\varphi - p(\varphi)(\mathcal{G}'_a - \mathcal{G}'_b) \nabla e_{ij} \right] - D(\varphi) \left[1 - \frac{2c(1-c)v_m}{RT} \lambda(\varphi) \right] \nabla c, \quad (16)$$

где $\mathcal{G}'_{a,b} = d\mathcal{G}_{a,b}/de_{ij}$, $D(\varphi) = D_S + p(\varphi)(D_L - D_S)$ – коэффициент диффузии, который связан с параметром M_c соотношением: $M_c = D(\varphi)v_m c(1-c)R^{-1}$.

Подставляя (11), (12) и (13)-(16) в (2), (3) и (9) получаем окончательные виды управляющих уравнений для фазового поля

$$\tau\dot{\varphi} = \varepsilon_0^2 \nabla \cdot \left[\tilde{\varepsilon}(\theta) (\tilde{\varepsilon}(\theta) I + \tilde{\varepsilon}'(\theta) J) \cdot \nabla\varphi \right] - \nu_0 \tilde{\nu}(\varphi) \tilde{\nu}'(\varphi) |\nabla\varphi|^2 - (1-c)\Gamma_a(\varphi, T, e_{ij}) - c\Gamma_b(\varphi, T, e_{ij}) - T^{-1}\lambda'c(1-c), \quad (17)$$

ориентационного поля

$$\tau\dot{\phi} = \varepsilon_0^2 \varepsilon(\theta) \varepsilon'(\theta) |\nabla\varphi|^2 + \nu_0 \nabla \cdot (\nu(\varphi) \nabla\phi), \quad (18)$$

энергии

$$C\dot{T} = \chi \nabla^2 T - [p'(\varphi)L + \omega_e d'(\varphi)] + 3\kappa T \alpha_T \delta_{ij} \dot{e}_{ij}, \quad (19)$$

и концентрации

$$\begin{aligned} \dot{c} = & \nabla \cdot D \left[1 - \frac{2c(1-c)v_m}{RT} \lambda(\varphi) \right] \nabla c + \\ & + \nabla \cdot \left[M_c (\Gamma_b - \Gamma_a + T^{-1} \lambda'(1-2c)) \nabla \varphi + p(\varphi) (\mathcal{G}'_a - \mathcal{G}'_b) \nabla e_{ij} \right], \end{aligned} \quad (20)$$

где $\chi = M_c T^{-2} = (1-c)\chi_a + c\chi_b$ – теплопроводность, $C = (1-c)C_a + cC_b$, $L = (1-c)L_a + cL_b$.

Если толщины межфазных границ компонентов бинарного сплава $\delta_a = \delta_b = \delta$, то уравнение фазового поля (17) значительно упрощается и принимает вид:

$$\begin{aligned} \tau \dot{\varphi} = & \varepsilon_0^2 \nabla \cdot \left[\tilde{\varepsilon}(\theta) (\tilde{\varepsilon}(\theta) I + \tilde{\varepsilon}'(\theta) J) \cdot \nabla \varphi \right] - v_0^2 \tilde{v}(\varphi) \tilde{v}'(\varphi) |\nabla \varphi|^2 \\ & - \varepsilon_0^2 \left[\frac{1}{\delta^2} \xi_1(c) p'(\varphi) + \xi_2(c, T, e_{ij}) d'(\varphi) \right] - T^{-1} \lambda' c (1-c), \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \xi_1(c) = & (1-c)\xi_1^a + c\xi_1^b, \quad \xi_2(c, T) = (1-c)\xi_2^a(T) + c\xi_2^b(T), \\ \xi_1^{a,b} = & \frac{2\bar{\sigma}_{a,b}}{\bar{\sigma}_a + \bar{\sigma}_b} (1 + T_m^{b,a} / T_m^{a,b}), \quad \xi_2^{a,b}(T, e_{ij}) = \frac{1}{\varepsilon_0^2 T} \left[L_{a,b} (1 - T / T_m^{a,b}) + \mathcal{G}_{a,b}(e_{ij}) \right], \\ \varepsilon_0^2 = & 6\sqrt{2}\delta (\bar{\sigma}_a + \bar{\sigma}_b) (T_m^a + T_m^b)^{-1}. \end{aligned}$$

В этом случае уравнение (20) для концентрации редуцируется к следующему виду

$$\begin{aligned} \dot{c} = & \nabla \cdot D \left[1 - \frac{2c(1-c)v_m}{RT} \lambda(\varphi) \right] \nabla c + \nabla \cdot \left[m_0 \left(\frac{1}{\delta} \xi_1'(c) p'(\varphi) + 30\delta \xi_2'(c, T, e_{ij}) p(\varphi) \right) \right. \\ & \left. + T^{-1} \lambda'(1-2c) \nabla \varphi + p(\varphi) (\mathcal{G}'_a - \mathcal{G}'_b) \nabla e_{ij} \right], \end{aligned}$$

где

$$m_0 = \frac{6\sqrt{2}v_m (\bar{\sigma}_a + \bar{\sigma}_b)}{R(T_m^a + T_m^b)}, \quad \xi_1'(c) = d\xi_1(c)/dc, \quad \xi_2'(c) = d\xi_2(c)/dc.$$

Поля упругих напряжений можно выразить через фазовое поле используя условие механического равновесия:

$$\nabla_j \sigma_{ij} = 0, \quad \sigma_{ij} = \sigma_{ij}^S p(\varphi) + \sigma_{ij}^L (1 - p(\varphi)). \quad (21)$$

Тензоры напряжений монофаз представляются в виде

$$\sigma_{ij}^{S,L} = \lambda^{S,L} \delta_{ij} \nabla \cdot \mathbf{u} + 2\mu^{S,L} e_{ij} - 3\kappa \delta_{ij} \left[\alpha_c^{S,L} (c - c_0) + \alpha_T^{S,L} (T - T_0) + \gamma_v \right], \quad (22)$$

где $\lambda^{S,L}$ и $\mu^{S,L}$ – упругие модули Ламэ, $\kappa^{S,L} = \lambda^{S,L} + 2\mu^{S,L}/3$ – изотермический объемный модуль упругости, $\alpha_c^{S,L}$ и $\alpha_T^{S,L}$ – коэффициенты объемного концентрационного и термического расширений, соответственно. В (22) последнее слагаемое с γ_{vol} учитывает напряжения, генерирующиеся из-за различия объемов фаз L и S . $\nabla \cdot \mathbf{u} = e_{ii} = \partial u_i / \partial x_i$ (\mathbf{u} – вектор упругих смещений).

С учетом (22), тензор напряжений двухфазной системы можно представить в виде

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} = & \kappa(\varphi) (\nabla \cdot \mathbf{u}) \delta_{ij} + 2\mu(\varphi) \left(u_{ij} - \frac{1}{d} \delta_{ij} \nabla \cdot \mathbf{u} \right) - 3\kappa' \delta_{ij} \left[\alpha_c(\varphi) (c - c_0) \right. \\ & \left. + \alpha_T(\varphi) (T - T_0) + \gamma_v(\varphi) \kappa_0 \right], \end{aligned} \quad (22a)$$

где

$$\begin{aligned} \kappa(\varphi) = & \kappa^L + p(\varphi) \Delta \kappa, \quad \mu(\varphi) = \mu^L + p(\varphi) \Delta \mu, \quad \alpha_{c,T}(\varphi) = \alpha_{c,T}^L + p(\varphi) \Delta \alpha_{c,T}, \quad \gamma_v(\varphi) = \gamma_0 p(\varphi) \\ \Delta \kappa = & \kappa^S - \kappa^L, \quad \Delta \mu = \mu^S - \mu^L, \quad \Delta \alpha_{c,T} = \kappa_0 \alpha_{c,T}^S - \alpha_{c,T}^L, \quad \kappa_0 = \kappa^S / \kappa^L. \end{aligned}$$

При определенных предположениях, из полученной микромодели, можно получить несколько существующих ранее моделей фазового поля. Например, модель кристаллизации чистого вещества Ван и соавторов [9] может быть получена при удалении из модели (17) – (21) уравнений для ориентационного поля, диффузии и напряжений, полагая, $\phi = 0$, $c = 0$ и $\sigma_{ij} = 0$. Если же, $T = const$, $\phi = 0$, $\sigma_{ij} = 0$, а также $\lambda(\varphi) = 0$ (идеальный сплав), то, получаем модель Уоррен (Warren) и Боттингера (Boettinger) из работы [10] для изотермической кристаллизации бинарного сплава.

В случае, когда упругие свойства жидкой и твердой фаз при ФП идентичны ($\Delta \kappa = \Delta \mu = 0$), а изменения температуры и концентрации примеси незначительны ($T = T_0$, $c = c_0$), модель фазового поля значительно упрощается и для 2D систем принимает вид

$$\tau\dot{\phi} = \varepsilon_0^2 \nabla \cdot \left[\tilde{\varepsilon}(\theta) (\tilde{\varepsilon}(\theta) I + \tilde{\varepsilon}'(\theta) J) \cdot \nabla \phi \right] - \nu_0 \tilde{v}(\phi) \tilde{v}'(\phi) |\nabla \phi|^2 - \omega_g d'(\phi) + p'(\phi) T_0^{-1} \kappa \gamma_{vol} (\nabla \cdot \mathbf{u}), \quad (23)$$

$$\kappa \nabla_i (\nabla \cdot \mathbf{u} - \gamma_{vol} p(\phi)) + \mu \nabla_j \nabla_j u_i = 0. \quad (24)$$

Уравнение для ориентационного поля (ϕ) остается без изменений. Используя Фурье-преобразование, уравнение (24) можно переписать как

$$\kappa k_i k_j \hat{u}_j - i \gamma_{vol} k_i \hat{p} + \mu k_j k_j \hat{u}_i = 0.$$

Далее просуммируем (\sum_i) обе части этого уравнения предварительно умножив на k_i . В результате для Фурье-компонент упругих смещений находим следующее выражение

$$-i k_j \hat{u}_j = \frac{\gamma_{vol}}{\kappa} \frac{\sum_i (k_i^2 \hat{p} / \mu k_i k_i)}{\sum_i (k_i^2 / \mu k_i k_i) + 1}.$$

Это решение позволяет исключить поле смещений из уравнения фазового поля (23).

Рассмотрим теперь 1D изотропную постановку задачи (23) и (24) при условиях $\dot{\phi} = 0$, $c = c_0$. Предположим также, что ориентационное поле всего объема одинаково ($\phi = \phi_0$) и неизменно, а ориентация границы раздела $\theta = \theta_0$. В этом случае фазовое поле $\phi = \phi(z)$ характеризует 1D двухфазную область, где расплав ($\phi \approx 0$) соответствует $z \rightarrow \infty$, а кристалл ($\phi \approx 1$) соответствует $z \rightarrow -\infty$. Предполагается, межфазная область, где ϕ варьируется между 0 и 1, локализуется вблизи $z = 0$.

Для условий приложенной двухосной деформации ($e_{xx} = e_{yy} = e_0$), из (22a) для компонент тензора напряжений (σ_{xx}, σ_{yy}) имеем

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \frac{18\kappa\mu}{3\kappa + 4\mu} (e_0 - \gamma).$$

Соответственно, для потенциала упругой энергии можно записать выражение

$$f_{el} = \frac{18\kappa\mu}{3\kappa + 4\mu} (e_0 - \gamma)^2.$$

Тогда из (17)-(20) получаем следующую модификацию МФП

$$\varepsilon_0^2(\theta_0) \frac{d^2 \phi}{dx^2} = \frac{df}{d\phi}, \quad (25)$$

где

$$f = \omega T d(\phi) + \left[L(1 - T/T_m) + \frac{18\kappa\mu}{3\kappa + 4\mu} (e_0 - \gamma)^2 \right] p(\phi).$$

Далее, умножая обе части (25) на $d\phi/dx$ и интегрируя один раз, имеем

$$\frac{1}{2} \varepsilon_0^2 \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 - f(\phi, T) = f(0, T) = f(1, T). \quad (26)$$

Из (26) следует следующее выражение для равновесной температуры

$$\frac{L(T - T_0)}{T_0} = - \frac{2\mu^s (3\lambda^s + 2\mu^L)}{\lambda^s + 2\mu^L} (e_0 - \gamma)^2. \quad (27)$$

Уравнение (27) характеризует влияние упругих полей на температуру равновесия. Решение (26) с граничным условием $f(0, T) = 0$ имеет вид

$$x - x_0 = \sqrt{\varepsilon_0} \int_{1/2}^{\phi} \frac{d\phi'}{\sqrt{2f(\phi', T)}}.$$

3. Макромодель

Макромодель СЛС описывает динамику изменения макроскопических полей температуры, скоростей, давления, а также эволюцию свободной поверхности расплава. Знание этих полей необходимо для решения микрозадачи по определению фазовых полей при кристаллизации. Схематически процесс СЛС представлен на рис. 1. Физические допущения, использованные при формулировке макромасштабной модели, следующие: рассматриваются гауссово и «top-hat» распределения интенсивности в лазерном пучке; ЛИ, поглощаясь в порошковом слое на подложке, создает микроскопическую область расплава определенной глубины и ширины; оно индуцирует также возникновение поверхностных сил, вызывающих движение расплава, благодаря термокапиллярному эффекту за счет градиента температуры; рассматриваются интенсивности излучения (I_0), при которых практически отсутствует испарение частиц порошка. Поскольку испарение металлов интенсивно происходит при температурах $T > T_v$, где T_v – температура испарения металла (при атмосферном давлении), то в широком интервале температур $T_m < T < T_v$ всегда можно реализовать режимы без испарения; рассматриваются ньютоновские жидкости; все физические свойства жидкости, кроме поверхностного натяжения, от температуры не зависят.

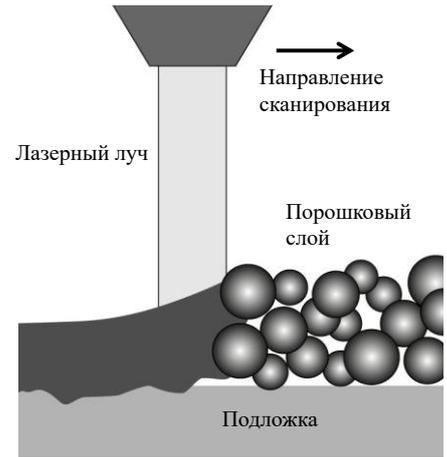


Рис. 1. СЛС порошкового слоя (схема).

Макромодель включает в себя связанную систему уравнений: непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (28)$$

Навье-Стокса

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) - \text{div} (\mu \nabla \mathbf{v}) = -\nabla P - \frac{\mu}{K} \mathbf{v}, \quad (29)$$

переноса энергии

$$\frac{\partial (\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} h) = \nabla \cdot (k \nabla T) - \nabla \cdot (\rho f_s (h_L - h_s) \mathbf{v}) + Q_{las}, \quad (30)$$

где $\mathbf{v} = (u, v, w)$ – вектор скорости жидкости; P – давление жидкости, $\mu = \mu_L \rho / \rho_L$ – вязкость. h , k и ρ – энтальпия, теплопроводность и плотность среды, соответственно; $Q_{las} = \beta_{las} J$ – интенсивность объемного источника тепла, связанная с лазерным воздействием на различной глубине порошкового слоя (J и β_{las} – плотность потока энергии ЛИ и коэффициент поглощения излучения в локальном объеме порошкового слоя, соответственно). $f_s(\mathbf{r}, t) = 1 - f_L(\mathbf{r}, t)$, $f_L(\mathbf{r}, t) = M_L / M_0$ – массовая доля жидкой фазы, образовавшейся в точке $\mathbf{r} = (x, y, z)$ к моменту времени t (M_0 и M_L – полные массы металла и жидкой фазы соответственно). $f_L = 0$ для твердой фазы, $f_L = 1$ для полностью превратившейся фазы и для двухфазной зоны $0 < f_L < 1$). В рассматриваемой двухфазной зоне (*mushy zone*) массовые доли жидкой (f_L) и твердой (f_s) фаз определяются формулами

$$f_L = \left(1 + \frac{\rho_s g_s}{\rho_L g_L} \right)^{-1}, \quad f_s = 1 - f_L,$$

здесь g_L, ρ_L и g_s, ρ_s – объемные доли и плотности жидкой и твердой фаз.

Второе слагаемое в правой части (29) учитывает изменение моментов импульса за счет фильтрации жидкости через пористую среду (закон Дарси) где K – проницаемость среды, $K = K_0 f_L^3 (1 - f_L)^{-2}$ (K_0 – эмпирическая постоянная, определяемая морфологией межфазной зоны). $K \rightarrow 0$ ($f_L = 0$) соответствует чисто твердой фазе. В этом случае слагаемое Дарси становится огромным и скорость жидкости обращается в нуль. $K \rightarrow \infty$ соответствует чисто жидкой фазе ($f_L = 1$), когда слагаемое Дарси исчезает.

Второе слагаемое в левой части (30) учитывает конвективный теплоперенос. Первое слагаемое в правой части (30) характеризует перенос тепла за счет теплопроводности, второе – поток энергии, связанный с относительным движением жидкой и твердой фаз. Учет потока тепла от ЛИ внесен в модель в виде объемного источника (Q_{las}), пропорционального объемному коэффициенту поглощения. Поглощение при проникновении ЛИ в порошковый слой характеризуется законом, близким к закону Бугера для оптически однородных сред в виде: $J = J_0 \exp(-\beta_{Las} z)$, где J_0 – плотность потока энергии на поверхности слоя.

Учитывая, что энтальпии твердой и жидкой фаз, соответственно, $h_s = c_s T$ и $h_L = c_L T + (c_s - c_L) T_s + L_m$, а массовая доля жидкой фазы линейно зависит от температуры

$$f_L = \begin{cases} 0, & T > T_L, \\ \frac{T-T_S}{T_L-T_S}, & T_S \leq T \leq T_L, \\ 1, & T < T_S \end{cases}$$

(T_S и T_L – температуры солидус и ликвидус, соответственно), уравнение энергии запишем в виде

$$\frac{\partial(\rho c_L T)}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla \cdot (\rho c_L T) - \nabla \cdot (k \nabla T) = - \frac{\partial(\rho f_L L)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho f_S \Delta c_p T)}{\partial t}, \quad (30a)$$

где источниковое слагаемое в правой части представляет изменение энтальпии, связанные ФП.

В двухфазной зоне плотность, вектор скорости, энтальпия и теплопроводность определяются по значениям объемной и массовой долей [15]

$$\rho_m = \rho_S g_S + \rho_L g_L, \quad \mathbf{v} = \mathbf{v}_S f_S + \mathbf{v}_L f_L, \\ k_m = g_S k_S + g_L k_L, \quad h_m = h_S f_S + h_L f_L.$$

Граничные условия на свободной поверхности (на границе жидкость-газ) учитывают конвективные (q_H) и радиационные потери (q_T):

$$-k \nabla T = q_H + q_T, \quad q_H = -h_c (T - T_0), \quad q_T = -\sigma_E \sigma_{SB} (T^4 - T_0^4),$$

где h_c – коэффициент конвективной теплопередачи; T_0 – температура воздуха; σ_E – коэффициент поверхностной эмиссии, σ_{SB} – постоянная Стефана-Больцмана.

На границе жидкой и твердой фаз $\mathbf{v} = 0$, что соответствует условиям непротекания (равенство нулю нормальной к поверхности компоненты скорости) и прилипания (равенство нулю тангенциальной компоненты скорости). На свободной поверхности жидкости действуют капиллярные силы (\mathbf{F}_c) и силы Марангони (\mathbf{F}_M), обусловленные градиентом поверхностного натяжения, связанным с неоднородностью температурного поля вдоль интерфейса (термокапиллярные силы):

$$\mathbf{F}_{S/L} = \mathbf{F}_c + \mathbf{F}_M = \gamma \kappa \mathbf{n} + \nabla_\tau \gamma,$$

где $\kappa = -(\nabla \cdot \mathbf{n})$ – кривизна свободной поверхности, \mathbf{n} – вектор нормали свободной поверхности, ∇_τ – поверхностный градиентный оператор. Для большинства конденсированных сред: $\gamma(T) = \gamma_0(T_m) - \gamma_T(T - T_m)$ (γ_0 – поверхностное натяжение металла при температуре плавления, $\gamma_T = -\partial \gamma_0 / \partial T_m$ – термический коэффициент поверхностного натяжения). Соответственно, для суммарной поверхностной силы имеем

$$\mathbf{F}_{S/L} = \gamma \kappa \mathbf{n} + \gamma_T (\nabla T - \mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \nabla T)).$$

Свободная поверхность (граница раздела фаз газ-жидкость/твердое тело) в процессе СЛС изменяет свою форму в результате конвективных течений жидкости на поверхности. Для определения эволюции свободной границы используется транспортное уравнение для объемной доли (α) металлической фазы в микрообласти (VOF модель), которое имеет вид [16]

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \alpha = 0. \quad (31)$$

Если $\alpha = 1$, то микрообласть полностью заполнена металлом, если $\alpha = 0$ – газом. Если $0 < \alpha < 1$, то микрообласть содержит свободную поверхность. Очевидно, что $\alpha + \beta = 1$, где β – объемная доля газовой фазы.

Физические свойства среды в переходной зоне (газ-жидкость/твердое тело) определяются по функции VOF

$$\rho = \rho_g + \alpha(\rho_m - \rho_g), \\ c_p = c_{pg} + \alpha(c_{pm} - c_{pg}), \quad \lambda = \lambda_g + \alpha(\lambda_m - \lambda_g), \\ h = h_g + \alpha(h_m - h_g), \quad \mu = \mu_g + \alpha(\mu_m - \mu_g),$$

величины с индексом m относятся к металлу, а с g – к газу.

Поверхностные силы ($\mathbf{F}_{S/L}$), действующие на единицу площади свободной поверхности, могут быть преобразованы в объемные силы с помощью дельта-функции Дирака $\delta(\alpha)$, т.е.

$$\mathbf{F}_{S/L}^{vol} = \mathbf{F}_{S/L} \delta(\alpha) = [\gamma \kappa \mathbf{n} + \gamma_T (\nabla T - \mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \nabla T))] \delta(\alpha) \\ = \gamma \kappa(\alpha) \nabla \alpha + \gamma_T (\nabla T - \mathbf{n}(\alpha)(\mathbf{n}(\alpha) \cdot \nabla T)) |\nabla \alpha|.$$

Соответственно, для объемных источников в уравнении энергии, имеем

$$q^{vol} = (q_H + q_L) \delta(\alpha).$$

По градиенту функции VOF определяется нормаль к свободной поверхности: $\mathbf{n} = \nabla \alpha / |\nabla \alpha|$, а с помощью самой функции VOF – ее положение.

Таким образом, управляющие уравнения теплопереноса и гидродинамики макрозадачи окончательно имеют следующий вид

$$\frac{\partial(\rho c_L T)}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla \cdot (\rho c_L T) - \nabla \cdot (k \nabla T) = q^{vol} \delta(\alpha) + Q_{las} - \frac{\partial(\rho f_L L_m)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho f_S \Delta c_p T)}{\partial t}, \quad (32)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) - \text{div}(\mu \nabla \mathbf{v}) = -\nabla p - \frac{\mu}{K} \mathbf{v} + \gamma \kappa(\alpha) \delta(\alpha) \nabla \alpha \\ + \gamma_T [\nabla T - \mathbf{n}(\alpha)(\mathbf{n}(\alpha) \cdot \nabla T)] \delta(\alpha). \end{aligned} \quad (33)$$

Система уравнений (28), (31) - (33) составляют макроскопическую термодинамическую модель СЛС. Она совместно с соответствующими граничными условиями позволяет определять распределение температуры, поля скоростей термокапиллярных течений и профиль свободной поверхности расплава в зависимости от режимов проведения (мощность луча, скорость сканирование) процесса СЛС.

Для численного расчета по изложенной макромоделю было разработано программное обеспечение. При его реализации применялась библиотека классов С++ численного моделирования OpenFOAM 2.4. Использовался метод конечных объемов на неструктурированной гексаэдрической сетке [17].

Первоначальная укладка порошкового слоя осуществлялась путём задания неоднородной начальной структуры поля объёмной доли металлической фазы (α). Частицы порошка задавались в виде распределённых сферических областей. Для решения уравнений неразрывности и Навье-Стокса для динамики жидкости используется алгоритм PISO. Транспортное уравнение для объёмной доли вычисляется по методу MULES [18]. Уравнение энергии решается по неявной схеме методом «энтальпия – пористость» [19].

Были получены 3D распределения полей температуры, скоростей и объёмной доли металлической фазы в зоне обработки. На рис. 2 приведены примеры расчета эволюции структуры поля металлической фазы при сканирующем воздействии ЛИ мощностью 360 Вт на преднасыпанный слой из частиц порошка Inconel 718 (размер частиц 45 мкм). Поля температуры и скоростей в зависимости от режимов обработки будут приведены в отдельной работе.

Из рис.2 видны характерные эффекты, сопровождающие процесс СЛС – плавление металлических частиц, смачивание твердого металла расплавом, коалесценция жидких капель. полученные расчетные распределения также демонстрируют развитие распространённых дефектов в технологии СЛС, например, появление остаточной пористости в виде газовых пузырьков внутри затвердевшего металла, неполное проплавление и объединение металла подложки и частиц. Результаты показывают, что капиллярные эффекты вносят определяющий вклад в динамику жидкой фазы и, соответственно, в итоговые профиль и структуру нанесенного слоя.

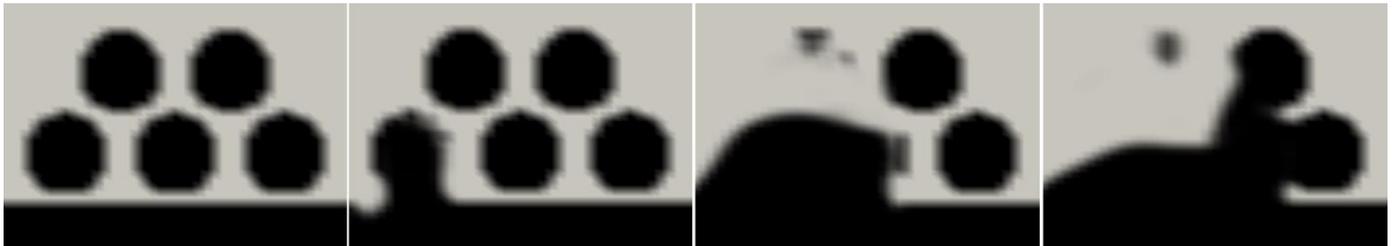


Рис. 2. Распределение металлической фазы в моменты времени (слева-направо): 0; 40; 90; 100 мкс.

4. Заключение

Сформулирована и обоснована физически математическая постановка задачи кристаллизации и эволюции микроструктуры твердой фазы в процессе СЛС порошкового компакта используя двухмасштабное приближение. Формирование микроструктуры описывается с помощью уравнения для двухкомпонентного параметра порядка (степень упорядоченности, ориентационное поле), сопряженного с уравнениями переноса энергии и диффузии примеси, а также упругими напряжениями, сопровождающими ФП. При формулировке уравнения упругости применялись конститутивные соотношения, связывающие упругие напряжения с полями деформации, температуры, концентрации, а также параметра порядка. Данная модель была построена на основе единого функционала энтропии и закона ее возрастания (положительность производства энтропии), справедливого и для неизотермических условий, что согласуется с принципами термодинамики необратимых процессов. Обсуждены частные случаи найденных эволюционных уравнений.

Модель микроструктуры сопряжена с макроскопической термодинамической моделью СЛС. На макроуровне основное внимание уделено учету процессов теплопереноса, термокапиллярной конвекции и эволюции свободной поверхности. Макромодель может использоваться для прогнозирования тепловых потоков и полей скоростей расплава в зависимости от технологических параметров (мощность луча, скорость сканирование) процесса СЛС. Моделирование эволюции свободной поверхности проведено с использованием VOF-функции. Данные с макроуровня (например, скорость отвода тепла) могут использоваться в качестве входных параметров и для формулировки граничных условий при решении микрозадачи. Осуществлена численная реализация макрозадачи, и проведены тестовые расчеты распределения металлической фазы.

Развитая модель может быть основой для предсказательного исследования формирования микроструктуры и напряженно-деформационных состояний, необходимого для контроля и оптимизации СЛС аддитивных технологий синтеза поликристаллических материалов.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 16-29-11743 офи_м).

Литература

- [1]. Gladush, G. G. *Physics of Laser Materials Processing: Theory and Experiment* / G. G. Gladush and I. Smurov – Berlin: Springer-Verlag, 2011. – 534 p.
- [2]. Xiao, B. Laser sintering of metal powders on top of sintered layers under multiple-line laser scanning / B. Xiao, Yu. Zhang // *J Phys. D: Appl. Phys.* – 2007. – Vol.40. – P.6725-6732.
- [3]. Gusarov, A.V. Heat transfer modelling and stability analysis of selective laser melting / A.V. Gusarov, I. Yadroitsev, Ph. Bertrand, I. Smurov // *Appl. Surf. Sci.* – 2007. – Vol. 254. – P. 975-983.
- [4]. *Современные лазерно-информационные технологии* / под редакцией академика В.Я. Панченко и профессора Ф.В. Лебедева. –М.: Интерконтакт Наука, 2014. –959 с.
- [5]. Markl, M. Multi-Scale modeling of powder-bed-based additive manufacturing / M. Markl and C. Korner // *Annual Review of Materials Research.* – 2016. – 46. – P.1–34.
- [6]. Mirzade, F.Kh. Phase field approach to solidification including stress effects at laser sintering of metal powders / F.Kh. Mirzade // *J. Applied Spectroscopy.* – 2016. –V. 83. – N8 (accepted)
- [7]. Дубров, А. В. Теплоперенос и термокапиллярная конвекция в лазерном аддитивном процессе создания изделий с инжекцией металлических порошков / А.В. Дубров, В.Д. Дубров, Ф.Х. Мирзаде, В.Я. Панченко // *Поверхность.* – 2017 (принята к печати)
- [8]. Wang, J. A multiscale nonequilibrium model for melting of metal powder bed subjected to constant heat flux / J. Wang, M. Yang, Yu. Zhang // *Int. J. Heat and Mass Transfer.* – 2015. –Vol.80. –P.309–318.
- [9]. Wang, S-L. Thermodynamically-consistent phase-field models for solidification / S-L. Wang, R.F. Sekerka, A.A. Wheeler, et al. // *Physica D.* – 1993. – Vol.69. – P. 189–200.
- [10]. Warren, J.A. Prediction of dendritic growth and microsegregation patterns in a binary alloy using the phase-field method / Warren J.A. and Boettinger W.J. // *Acta Metall. Mater.* – 1995. – Vol.43. – P. 689–703.
- [11]. Bi, Z. Phase-field model of solidification of a binary alloy / Z. Bi and R.F. Sekerka // *Physica A.* – 1998. – Vol. 261. – P. 95–106.
- [12]. Penrose, O. Thermodynamically consistent models of phase-field type for the kinetics of phase transitions / O.Penrose and P.C. Fife// *Physica D.* – 1990. – Vol.43. – P. 44–62.
- [13]. Karma, A. Quantitative phase-field modeling of dendritic growth in two and three dimensions / A. Karma and W-J. Rappel // *Phys. Rev. E.* – 1998. – Vol.57. – P. 4323–49.
- [14]. Kobayashi, R. Vector-valued phase field for crystallization and grain boundary formation / R. Kobayashi, J.A. Warren, W.C. Carter // *Phys. D.* – 1998. – Vol.119. – P.415-423.
- [15]. Bennon, W. D. A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems. I. Model formulation / W. D. Bennon and F. P. Incropera // *Int. J. Heat Mass Transfer.* – 1987. – Vol. 30. – P.2161-2169.
- [16]. Osher, S. Fronts propagation with curvature-dependent speed: algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations / S. Osher and J.A. Sethian // *J. Comput. Phys.* – 1988. – Vol.79. – P.12-49.
- [17]. Weller, H.G. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object orientated techniques / H.G. Weller, G. Tabor, H. Jasak, C. Fureby // *Comput. Phys.* – 1998. – Vol. 12. – P. 620–631.
- [18]. Marquez Damian S. An Extended Mixture Model for the Simultaneous Treatment of Short and Long Scale Interfaces: Doctor Thesis / S. Marquez Damian – Santa Fe: Universidad Nacional Del Litoral, 2013. – 231 p.
- [19]. Voller, V. R. A fixed grid numerical modelling methodology for convection-diffusion mushy region phase-change problems/ V. R. Voller, C. Prakash // *International Journal of Heat and Mass Transfer* – 1987. – Vol. 30(8). – P. 1709-1719.