

Министерство образования и науки Российской Федерации
ФГБОУ ВПО «Удмуртский государственный университет»
Физико-энергетический факультет
Кафедра общей физики

Анкудинов В. Е., Афлятунова Д. Д., Кривилев М. Д., Гордеев Г. А.

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ
ПЕРЕНОСА И ДЕФОРМАЦИЙ В СПЛОШНЫХ СРЕДАХ**

Учебное пособие



Ижевск
2014

ББК 22.36я73

УДК 538.9:519.67(075.8)

К637

Рекомендовано к изданию учебно-методическим советом УдГУ.

Рецензент: к.т.н., доцент Харанжевский Е. В.

Анкудинов В. Е., Афлятунова Д. Д., Кривилев М. Д., Гордеев Г. А.

Компьютерное моделирование процессов переноса и деформаций в сплошных средах: Учебное пособие. 1-е издание. — Ижевск: Изд-во «Удмуртский университет», 2014. — 108 с.

ISBN 978-5-4312-0312-1

Учебное пособие «Компьютерное моделирование процессов переноса и деформаций в сплошных средах» содержит опорные конспекты лекций, читаемых студентам бакалавриата и магистратуры направлений «Физика», «Химия, физика и механика новых материалов», «Физика конденсированного состояния вещества». Пособие также включает практикум по компьютерному моделированию процессов переноса, происходящих в зоне лазерного воздействия на вещество с применением пакета для инженерно-физических вычислений COMSOL Multiphysics. Пособие посвящено описанию физических основ процессов переноса в различных средах, механики деформации твердых тел, а также базовой теории математического моделирования современных материалов.

© Анкудинов В. Е., Афлятунова Д. Д., Кривилев М. Д., Гордеев Г. А., 2014

© ФГБОУ ВПО «Удмуртский государственный университет», 2014

Оглавление

1	Предисловие от авторов	6
2	Математические и физические основы математического моделирования процессов переноса	7
2.1	Определение модели. Свойства моделей. Классификация моделей. Мультифизичные сопряженные модели. Многомасштабные модели.	7
2.2	Вычислительный эксперимент. Этапы построения математических моделей. Проверка адекватности моделей. Анализ результатов моделирования.	9
2.3	Система единиц СИ. Дифференциальный оператор. Градиент скалярной функции. Поток величины. Дивергенция векторного поля. Ротор векторного поля.	12
2.4	Полная производная. Частная производная. Субстанциональная (материальная) производная. Физический смысл.	16
2.5	Явления переноса. Диффузионный и конвективный механизмы переноса. Классификация механизмов переноса.	19
2.6	Диффузия, теплопроводность, вязкость. Законы Фика, Фурье, Ньютона.	21
2.6.1	Закон Фика и диффузия	22
2.6.2	Закон Фурье и теплопроводность	24
2.6.3	Закон Ньютона и вязкое трение	25
2.7	Уравнения баланса, неразрывности, их физический смысл.	27
2.7.1	Уравнение неразрывности	27

2.7.2	Уравнение движения вязкой ньютоновской жидкости (баланс импульса)	29
2.7.3	Уравнение баланса внутренней энергии	30
2.7.4	Уравнение баланса вещества	30
2.8	Уравнения баланса в безразмерном виде. Предварительный анализ системы на основе безразмерных характеристических чисел.	31
2.8.1	Уравнения баланса в безразмерной форме	34
2.8.2	Уравнение баланса импульса в безразмерной форме (вывод безразмерного уравнения)	35
2.8.3	Уравнение баланса внутренней энергии в безразмер- ной форме	36
2.9	Элементы механики твердого деформируемого тела. Относи- тельные деформации. Напряжения, закон Гука. Деформац- онная кривая. Пластические деформации.	36
2.10	Многофазные среды. Фазовые переходы. Кристаллизация. Метод двухфазной зоны для расчета кристаллизации спла- вов.	41
3	Построение вычислительных моделей в среде COMSOL MultiPhysics	45
3.1	Дискретизация расчетной области. Методы дискретизации уравнений математической модели. Методы конечных раз- ностей, конечных элементов и конечного объема. Сравнение методов.	45

3.2	Основы метода конечных элементов. Интерполяционные функции, дискретизация дифференциальных уравнений. Переход от непрерывного решения к кусочно-непрерывному. Матрица жесткости и переход к системе дифференциальных уравнений.	50
3.3	Пакет COMSOL MultiPhysics. Основные навыки работы. .	54
3.3.1	Глоссарий	56
3.4	Выбор шаблона, уравнений модели, граничных условий. Генерация вычислительной сетки. Проведение расчетов, визуализация результатов.	60
3.5	Программирование произвольных задач в коэффициентной и общей форме. Граничные условия Дирихле и Неймана. Слабая форма. Принципы выбора метода программирования.	69
4	Расчет поля температур и процессов переноса при лазерном спекании порошков	73
4.1	Численное моделирование фазовых переходов в пакете COMSOL MultiPhysics	74
4.2	Расчет тепловых полей при лазерной обработке сплошных и пористых сред	75
4.2.1	Физико-математическая модель теплопереноса в пористых системах	75
4.2.2	Принципы построения компьютерной модели	82
4.2.3	Параметры управления лазерным спеканием	84
4.2.4	Анализ градиентов температуры и скоростей охлаждения в зоне лазерного воздействия	86
4.3	Самостоятельные работы по расчету лазерной обработки . .	91
	Литература	103

1. Предисловие от авторов

Настоящее учебное пособие для студентов бакалавриата и магистратуры проводит обзор методов компьютерного моделирования сложных физических процессов в материалах. Рассматриваются такие процессы как перенос массы, энергии, импульса и механические деформации. Пособие дает представление о математических основах моделирования и является сборником качественных примеров, выполненных в современном пакете моделирования COMSOL Multiphysics компании COMSOL Inc.

В учебном пособии рассматриваются базовые математические приёмы, использующиеся при описании физико-математических моделей, основы моделирования, принципы построения моделей и критерии выбора физических допущений. В пособие включена фундаментальная теория по процессам переноса, позволяющая студентам легче ориентироваться в задачах по моделированию. В книге рассматривается теория построения численных моделей, которая включает в себя принципы работы конечно-элементных и конечно-разностных численных схем на примере пакета COMSOL Multiphysics.

Пособие позволяет получить ясное представление о физике процессов переноса и о методе проведения расчетов процессов обработки материалов в практических задачах. Книга позволяет студентам на высоком уровне освоить курсы «Математическое моделирование», «Компьютерные технологии в науках о материалах», «Пакеты прикладных программ», также может использоваться студентами в практике самостоятельно.

Книга подготовлена в сотрудничестве с группой теоретического моделирования фазовых переходов: <http://lnsm.school.udsu.ru/>.

2. Математические и физические основы математического моделирования процессов переноса

2.1. Определение модели. Свойства моделей. Классификация моделей. Мультифизические сопряженные модели. Многомасштабные модели.

Широкое использование компьютерной техники для решения физико-химических и инженерных задач привело к развитию множества специализированных программ для ЭВМ, способных эффективно решать сложные задачи. В первую очередь, такие программы незаменимы при исследовании каких-либо систем, когда требуется изучить поведение системы при различных наборах управляющих параметров, чтобы выбрать устойчивые или оптимальные режимы работы системы. Область физики и химии материалов как нельзя лучше подходит для развития компьютерных методов исследования, позволяя сочетать развитие теоретических моделей с их надежной проверкой на эксперименте. В силу этого моделирование уже нельзя отнести к чисто теоретическому способу изучения систем. Моделирование приобрело качества комбинированного метода, сочетающего надежность экспериментального метода с изяществом теоретического метода.

Под математической моделью понимают такой абстрактный объект, который в процессе изучения способен заменить объект-оригинал, сохраняя важные для данного исследования типичные черты [1]. В результате любую модель можно характеризовать набором свойств, включающих полноту, адекватность, простоту и потенциальность [1]. Полнота показывает, насколько точно модель воспроизводит основные свойства изучаемого объ-

екта на уровне математической модели. Адекватность соответствует малому расхождению между результатами моделирования и экспериментом, что гарантирует применимость модели для прогнозирования. Потенциальность характеризует способность модели генерировать, предсказывать новые результаты, которые не были известны до этого, на основании установленных законов и результатов, заложенных в модель.

Хорошая модель не обязательно должна быть сложной, зачастую простые модели хорошо прогнозируют свойства исследуемой системы. Примером может служить эмпирическая модель Холла-Петча, предсказывающая увеличение предела текучести поликристаллического материала с уменьшением размера зерна. Таким образом, расчет характеристик материала не требует от нас применения первопринципных моделей молекулярной динамики, когда пластичность изучается на уровне атомов и дефектов кристаллической решетки. Достаточно использовать простую, хорошо проверенную модель. Данный пример показывает, что характеристика любой модели должна осуществляться, в первую очередь, с точки зрения ее надежности. Вторым критерием являются границы применимости. Упомянутый закон Холла-Петча перестает выполняться при малых размерах зерен ниже 1 мкм. Физически это связано с тем, что размер зерен приближается к размерам дислокационных источников Франка-Рида.

Каждый реальный процесс, наблюдаемый в окружающей среде или реализуемый в производстве при технологическом процессе, всегда включает несколько взаимосвязанных физико-химических явлений. Например, рассмотрим работу электронной аппаратуры в агрессивных средах. Протекание электрического тока в элементах электрической цепи сопровождается выделением тепла. Нагрев элементов цепи, в свою очередь, приводит к изменению их электрического сопротивления. Дополнительно происходят процессы окисления/коррозии материала, что также меняет свойства и ха-

рактеристики электронных компонентов. Очевидно, что учет какого-то одного фактора не даст правильной адекватной оценки объекта. В данном случае нам необходимо прибегнуть к построению *мультифизической* модели, которая будет учитывать одновременно электрические потенциалы, температуру и химические реакции. Фактически, мультифизичные модели составляют основу всех специализированных систем автоматического проектирования (САПР).

В некоторых областях знаний, например, в области материаловедения, объекты характеризуются не только наличием разных процессов, но также очень сложной внутренней структурой, формой, морфологией, когда свойства композитного материала изменяются. Локальный объем материала, обладающий одинаковыми теплофизическими, кристаллографическими и химическими свойствами, в материаловедении называется фазой. В этом случае моделирование становится многомасштабным, когда объект изучается сразу на нескольких пространственно-временных уровнях. Примером такого процесса, изучаемого в 3 главе данного пособия, является математическое моделирование спекания композитных металлических порошков. Наличие частиц порошка с существенно различными размерами и химическим составом приводит к формированию структур различного размера — от нанометрового до микрометрового.

2.2. Вычислительный эксперимент. Этапы построения математических моделей. Проверка адекватности моделей. Анализ результатов моделирования.

Ключевым элементом в моделировании является вычислительный эксперимент, воспроизводящий поведение любой системы на основе математической модели. Метод проведения вычислительного эксперимента в современном виде был сформулирован в работах известного ученого ака-

демика Самарского. На этапе становления компьютерных методов исследования все этапы вычислительного эксперимента выполнялись исследователем или инженером, что требовало нескольких месяцев или лет напряженной работы. Современные компьютерные системы большую часть этой работы выполняют самостоятельно, тем не менее даже пользователь ЭВМ должен знать и понимать эти этапы для эффективного использования компьютерного инструментария. Последовательность проведения вычислительного эксперимента описывается следующей схемой:

1. Концептуальная постановка задачи, включающая определение объекта исследования, его известных свойств и неизвестных характеристик, требующих уточнения в процессе численного моделирования.
2. Математическая постановка задачи, включающая определение основных физических и химических законов, уравнений, описывающих изменение состояния объекта. Здесь же проводится выбор независимых переменных (например, координат и времени), зависимых переменных (например, температуры, деформаций или скоростей течения) и свободных параметров модели (теплопроводность, удельное электрическое сопротивление). Если поведение системы описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) или дифференциальных уравнений в частных производных (УРЧП), то математическая постановка должна включать задание начальных и граничных условий.
3. Выбор алгоритма решения и построение блок-схемы. Решение любой задачи должно быть сформулировано в виде последовательных действий для получения решения. Блок-схема является графическим представлением алгоритма и рисуется с помощью установленных графических элементов и линий, устанавливающих связи между опера-

циями.

4. Выбор метода дискретизации и конечно-разностная аппроксимация модели. На этом этапе алгебраические уравнения преобразуются к виду, который позволит их эффективно решить на ЭВМ.
5. Программирование и создание исполняемого кода программы. С использованием средств программирования высокого уровня (Matlab, COMSOL MultiPhysics, ANSYS) или низкого уровня (C, Pascal, Fortran) создается приложение для ЭВМ.
6. Проведение тестовых расчетов и сопоставление с известными аналитическими решениями. Данный этап абсолютно необходим для проверки адекватности модели. Особо отметим, что пренебрежение этим этапом приводит к неправильным результатам и большой потере времени при разработке модели.
7. Выполнение расчетов для исследуемого объекта. Осуществляется серия расчетов при разных значениях параметров, соответствующих условиям наблюдаемым в реальной системе.
8. Сопоставление результатов расчетов и уточнение модели. Сравнение с экспериментальными данными позволяет учесть ошибки и неполноту модели.
9. Выполнение окончательных расчетов и анализ новых закономерностей и/или свойств. На этом этапе происходит генерация новых знаний об объекте. Фактически это связано с выполнением целей эксперимента.

Как отмечалось ранее, современные средства избавили от необходимости построения конечно-разностной аппроксимации математической модели, программирования и отладки кода программы. Однако концептуаль-

ная и математическая постановка задачи по прежнему остаются в зоне ответственности человека. Грамотная постановка задачи значительно сокращает время разработки компьютерных моделей и позволяет отсеять заведомо неправильные решения задач.

2.3. Система единиц СИ. Дифференциальный оператор. Градиент скалярной функции. Поток величины. Дивергенция векторного поля. Ротор векторного поля.

Международная система единиц, СИ (фр. Le Systeme International d'Unites, SI) — система единиц физических величин, современный вариант метрической системы. СИ — система единиц, основанная на Международной системе величин, вместе с наименованиями и обозначениями, а также набором приставок и их наименованиями и обозначениями вместе с правилами их применения, принятая Генеральной конференцией по мерам и весам (CGPM). Далее по тексту будем использовать единицы измерения физических величин в системе СИ, либо безразмерные величины.

Список основных единиц величин:

- Метр (м) — длина пути, проходимого светом в вакууме за интервал времени $\frac{1}{299792458}$ секунды.
- Килограмм (кг) — масса, равная массе международного прототипа, хранимого в Международной палате мер и весов.
- Секунда (с) — время, равное 9 192 631 770 периодам излучения, соответствующего переходу между двумя сверхтонкими уровнями основного состояния атома цезия-133.
- Ампер (А) — сила неизменяющегося тока, который при прохождении по двум параллельным прямолинейным проводникам бесконечной длины и ничтожно малой площади кругового поперечного сечения,

расположенным в вакууме на расстоянии 1 м один от другого, вызвал бы на каждом участке проводника длиной 1 м силу взаимодействия, равную $2 \cdot 10^{-7}$ Н.

- Кельвин (К) — $\frac{1}{273,16}$ часть термодинамической температуры тройной точки воды.
- Моль (моль) — количество вещества системы, содержащей столько же структурных элементов, сколько содержится атомов в углероде-12 массой 0,012 кг.
- Кандела (кд) — сила света в заданном направлении источника, испускающего монохроматическое излучение частотой $540 \cdot 10^{12}$ герц, энергетическая сила света которого в этом направлении составляет $\frac{1}{683}$ Вт/ср¹.

Список дополнительных величин:

- Радиан — острый угол, под которым из центра окружности видна дуга, длина которой равна радиусу.
- Стерadian — единица измерения телесных углов; равен телесному углу с вершиной в центре сферы радиусом r , вырезающему из сферы поверхность площадью r^2 .

Все прочие величины относятся к производным и могут быть получены при помощи формул, как например скорость $V = S/t$, [м/с].

Ниже проведём краткий экскурс по математическим инструментам и обозначениям, которые будут использоваться в данном пособии. При описании уравнений будем использовать дифференциальные операторы, которые представляют собой обобщение операции дифференцирования [14].

¹Стерadian

Простейший дифференциальный оператор \mathfrak{D} , действуя на функцию y , возвращает первую производную этой функции:

$$\mathfrak{D}y(x) = y'(x). \quad (2.1)$$

Двукратное применение операции \mathfrak{D} позволяет получить вторую производную функции $y(x)$:

$$\mathfrak{D}^2y(x) = \mathfrak{D}(\mathfrak{D}y(x)) = \mathfrak{D}y'(x) = y''(x). \quad (2.2)$$

Аналогично, n -ая степень оператора \mathfrak{D} соответствует n -ой производной:

$$\mathfrak{D}^ny(x) = y^{(n)}(x). \quad (2.3)$$

Здесь мы предполагаем, что функция $y(x)$ является n раз дифференцируемой и определенной на множестве действительных чисел. Сама функция $y(x)$ может принимать комплексные значения. Дифференциальные операторы могут иметь и более сложный вид — в зависимости от образующих их дифференциальных выражений.

В векторном анализе часто встречается дифференциальный оператор «набла», определяемый в декартовой системе координат (x, y, z) как

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right). \quad (2.4)$$

В результате действия оператора ∇ на скалярное поле $F(x, y, z)$ мы получаем градиент поля F :

$$\nabla F = \left(\frac{\partial F}{\partial x}, \frac{\partial F}{\partial y}, \frac{\partial F}{\partial z} \right) = \frac{\partial F}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial F}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial F}{\partial z} \vec{k}, \quad (2.5)$$

где $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ — единичные векторы вдоль координатных осей Ox, Oy, Oz . Век-

тор градиента указывает направление наибольшего возрастания функции F , а его длина показывает скорость возрастания функции в данном направлении.

Скалярное произведение вектора ∇ и векторного поля \vec{V} известно как дивергенция вектора $\text{div}\vec{V}$

$$\nabla \cdot \vec{V} = \text{div}\vec{V} = \frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} + \frac{\partial V_z}{\partial z}. \quad (2.6)$$

С точки зрения физики дивергенция векторного поля является показателем того, в какой степени локальный объем пространства является источником или стоком векторного поля \vec{V} :

$\text{div}\vec{V} > 0$ — точка поля является источником;

$\text{div}\vec{V} < 0$ — точка поля является стоком;

$\text{div}\vec{V} = 0$ — стоков и источников нет, либо они компенсируют друг друга.

В результате векторного произведения векторов ∇ и \vec{V} мы получаем ротор вектора $\text{rot}\vec{V}$:

$$\nabla \times \vec{V} = \text{rot}\vec{V} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ V_x & V_y & V_z \end{vmatrix}. \quad (2.7)$$

Когда речь идет о векторном поле, являющемся полем скоростей некоторой среды, ротор этого векторного поля в заданной точке равен удвоенному вектору углового вращения элемента среды с центром в этой точке. Грубо говоря, можно использовать представление о вращении брошенной в поток маленькой пылинки, увлекаемой потоком с собой, без его заметного возмущения, или о вращении помещённого в поток с закреплённой осью маленького (без инерции, вращаемого потоком, заметно не искажая его) колеса с прямыми (не винтовыми) лопастями. Если то или другое при взгляде на него

вращается против часовой стрелки, то это означает, что вектор ротора поля скорости потока в данной точке имеет положительную проекцию в направлении «на нас».

Скалярное произведение $\nabla \cdot \nabla = \nabla^2$ соответствует скалярному дифференциальному оператору, называемому оператором Лапласа или лапласианом Δ :

$$\nabla^2 = \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (2.8)$$

Введение дифференциальных операторов позволяет исследовать дифференциальные уравнения в терминах теории операторов и функционального анализа. Такой обобщенный подход оказывается мощным и эффективным. В частности, в приложении к линейным дифференциальным уравнениям n -го порядка, мы получаем компактный способ записи уравнений, а в некоторых случаях — возможность их быстрого решения.

2.4. Полная производная. Частная производная. Субстанциональная (материальная) производная. Физический смысл.

Математическое определение производной y'_x некоторой функции одной переменной $y(x)$ сводится к вычислению математического предела:

$$y'_x = \frac{dy}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta y}{\Delta x}.$$

Такое определение с использованием полного дифференциала d справедливо только для функций, зависящих от одной переменной, в данном случае x . В задачах переноса и деформации материалов какая-либо изучаемая величина g зависит, как правило, сразу от нескольких независимых переменных, например, от координат и времени $g = f(t, x, y, z)$. В этом случае изменение величины определяется изменением уже всех параметров. Тогда производные g по каждому из параметров определяются как частные производные

по соответствующей переменной:

$$g'_t = \dot{g} = \frac{\partial g}{\partial t}, \quad g'_x = \frac{\partial g}{\partial x}, \quad g'_y = \frac{\partial g}{\partial y}, \quad g'_z = \frac{\partial g}{\partial z}, \quad (2.9)$$

где обозначение частной производной в уравнениях производится символом ∂ . В литературе частная производная по времени обычно обозначается точкой над переменной, например \dot{x} ; частные производные по другим переменным обозначаются штрихом y'_x . Если теперь принять во внимание, что координаты объекта x , y и z могут в свою очередь зависеть от времени t , то полная производная функции g будет определяться выражением

$$\frac{dg}{dt} = \frac{\partial g}{\partial t} + \frac{\partial g}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial g}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial g}{\partial z} \frac{dz}{dt}. \quad (2.10)$$

Наряду с полной (уравнение (2.10)) и частными (уравнение (2.9)) производными, характерными для математического анализа функций многих переменных, в физике существует еще одна производная, называемая субстанциональной (материальной) производной. Определение субстанциональной лучше всего продемонстрировать на практическом примере [22].

Предположим, что мы отправились на рыбалку на Каму. Перед тем как начинать рыбалку важно провести разведку с помощью эхолота, который позволяет найти места с большим количеством рыбы. Пусть количество рыбы в разных местах реки описывается с помощью функции концентрации $c(t, x, y, z)$ ². Для удачной рыбалки необходимо найти место, где концентрация рыбы увеличивается во времени, т.е. скорость Ω изменения функции c положительна и максимальна. Измерения можно провести несколькими способами.

Способ первый. Рыбак с эхолотом стоит на мосту и измеряет скорость изменения концентрации рыбы в воде. Поскольку положение рыбака

²Здесь концентрация имеет простой смысл количества рыб в единице объема воды

не меняется, то скорость изменения концентрации рыбы будет равна частной производной по времени t при постоянных координатах x, y, z :

$$\Omega = \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) \Big|_{x,y,z}$$

Способ второй. Если рыбак достаточно энергичен, то он сядет в моторную лодку вместе с эхолотом и будет плавать по поверхности реки в разных направлениях: по течению, против течения, а иногда поперек течения. В этом случае в любой момент времени скорость равна полной производной

$$\Omega = \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) \Big|_{x,y,z} + \frac{dx}{dt} \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right) \Big|_{y,z,t} + \frac{dy}{dt} \left(\frac{\partial c}{\partial y} \right) \Big|_{z,x,t} + \frac{dz}{dt} \left(\frac{\partial c}{\partial z} \right) \Big|_{x,y,t}.$$

В данном случае производные координат рыбака dx/dt , dy/dt и dz/dt — это компоненты скорости лодки V_x, V_y, V_z .

Способ третий. Если рыбак ленивый, то он сядет в простую лодку, возьмет эхолот и будет измерять скорость Ω , сплавляясь вместе с лодкой по течению. В этом случае скорость рыбака в точности соответствует скорости \vec{v} течения, которое имеет компоненты v_x, v_y и v_z . Тогда Ω будет определяться выражением

$$\Omega = \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) + v_x \frac{\partial c}{\partial x} + v_y \frac{\partial c}{\partial y} + v_z \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial c}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla c) = \frac{Dc}{Dt}.$$

Новый оператор

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla)$$

называется субстанциональной (материальной) производной, что означает скорость изменения при движении вместе с окружающей вязкой средой. Субстанциональная производная имеет большое значение в процессах переноса, поскольку она описывает один из двух возможных механизмов пе-

реноса и соответствует конвективному переносу. Подробнее классификацию механизмов переноса в вязких сплошных средах рассмотрим ниже.

2.5. Явления переноса. Диффузионный и конвективный механизмы переноса. Классификация механизмов переноса.

Явлениями переноса называются необратимые процессы в термодинамически неравновесных системах, в которых происходит пространственный перенос **внутренней энергии** (теплопроводность), **химических компонентов вещества** (диффузия), **импульса** (внутреннее трение в жидкости и т. п.). Проведем небольшой обзор и классификацию механизмов переноса.

В литературе выделяют [22] два механизма переноса — макроскопический (конвективный) и молекулярный (диффузионный). Для описания этих процессов справедлива диаграмма, приведенная на рис. 2.1:

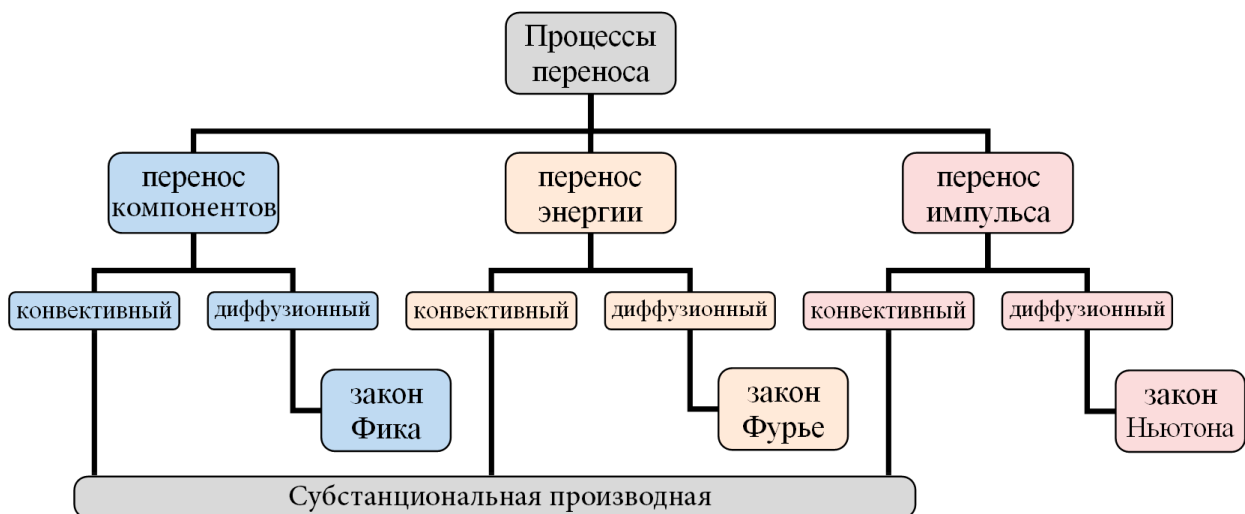


Рис. 2.1. Классификация механизмов переноса и описывающих их законов.

Каждое явление переноса обусловлено неоднородностью распределения в пространстве некоторой величины, например, концентрации и температуры. Изменение этой величины f в пространстве описывается функцией градиента (см. раздел 2.3, уравнение (2.5)). Функция градиента в общем случае — векторная функция, т.е. имеет несколько компонент. В упрощен-

ных или одномерных задачах обычно рассматривают только одну компоненту, а значит функция градиента является скалярной функцией, например $\partial f/\partial z$.

Рассмотрим более подробно такое важное понятие как поток величины. Поток — это количество какой-либо величины, проходящее в единицу времени через единичную поверхность. Физическая величина не обязательно связана с физическим переносом вещества или энергии и может быть связана с напряженностью (силовыми характеристиками) какого-либо поля. Поверхность может быть произвольной формы и, в частности, может быть замкнутой. Примерами могут быть поток жидкости в трубе, поток света через стеклянную колбу лампы и т. д. На рис. 2.2 показано, как через поверхность dS проходит поток некоторой величины под некоторым углом.

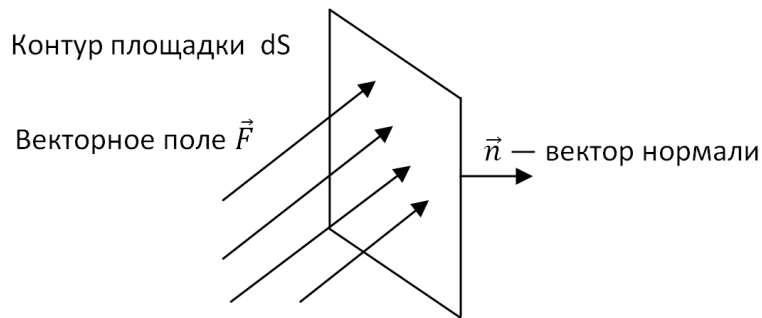


Рис. 2.2. Поток векторного поля, пересекающего площадку единичной площади на рассматриваемой поверхности.

В качестве примера рассмотрим простую гидродинамическую задачу. Пусть течение несжимаемой жидкости единичной плотности $\rho = 1 \text{ кг/м}^3$ в пространстве задано векторным полем скорости течения $\vec{V} = \vec{V}(x, y, z)$. Тогда масса жидкости, которая протечёт за единицу времени через поверхность S , будет равна потоку векторного поля \vec{V} через поверхность S (рис. 2.2). Поток является скалярной алгебраической величиной и подчиняется правилу знаков. Знак потока определяется выбором положительного направления, например, положительного направления осей координат (об этом чуть ниже).

В общем случае поток векторного поля через поверхность — поверхностный интеграл по поверхности S . По определению

$$\Phi_F = \iint_S \vec{F} \cdot \vec{n} dS, \quad (2.11)$$

где $\vec{F} = \vec{F}(x, y, z)$ — векторное поле, \vec{n} — единичный вектор положительной нормали к поверхности (положительное направление выбирается для ориентируемой поверхности условно, но одинаково для всех точек), dS — площадь элемента поверхности. Иногда, особенно в физике, применяется обозначение

$$d\vec{S} = \vec{n} dS, \quad (2.12)$$

тогда запись уравнения (2.11) упрощается. Также векторные переменные могут выглядеть следующим образом:

$$d\vec{S} = d\mathbf{S} = \mathbf{n} dS,$$

эти обозначения абсолютно эквивалентны.

2.6. Диффузия, теплопроводность, вязкость. Законы Фика, Фурье, Ньютона.

Классификация процессов переноса, данная на рис. 2.1 позволяет разделить их на три больших подгруппы. Перенос вещества, энергии и импульса удобно описывать в терминах концентрации, температуры и скорости. Для каждого вида процесса переноса выполняется локальный закон сохранения какой-либо величины в микроскопическом выделенном для рассмотрения объеме. Часто эти законы называют балансами вещества, энергии и импульса.

2.6.1. Закон Фика и диффузия

Опираясь на рис. 2.1 рассмотрим диффузионный механизм переноса. Вообще говоря, диффузия — самопроизвольное выравнивание концентрации в смеси нескольких различных веществ, обусловленное тепловым движением молекул. Примером диффузии может служить перемешивание газов (например, распространение запахов) или жидкостей (если в воду капнуть чернил, то жидкость через некоторое время станет равномерно окрашенной). Другой пример связан с твёрдым телом: атомы соприкасающихся металлов перемешиваются на границе соприкосновения. Это явление хорошо известно в технике, когда в зоне болтового соединения за несколько лет происходит «сваривание» деталей. Скорость диффузии пропорциональна площади поперечного сечения образца, а также разности концентраций, температур или зарядов в случае относительно небольших величин этих параметров. Таким образом понятие диффузии тесно связано с понятием потока (см. раздел 2.5). Диффузия представляет собой процесс переноса частиц вещества на молекулярном уровне и определяется случайным характером движения отдельных молекул. Скорость диффузии в связи с этим пропорциональна средней скорости молекул. В случае газов средняя скорость малых молекул больше, а именно она обратно пропорциональна квадратному корню из массы молекулы и растёт с повышением температуры.

Рассмотрим понятие относительной концентрации молекул. Предположим, что дан некоторый набор веществ, тогда для относительной концентрации молекул i -го вида можно записать соотношение $c_i = \frac{n_i}{n}$, где n_i — число молекул i -го вида и $n = \sum n_i$ — полное число молекул всех видов в единице объема (рис. 2.3). Для двухкомпонентной смеси предположим, что в направлении оси z создаются градиенты концентраций dc_1/dz и dc_2/dz ,

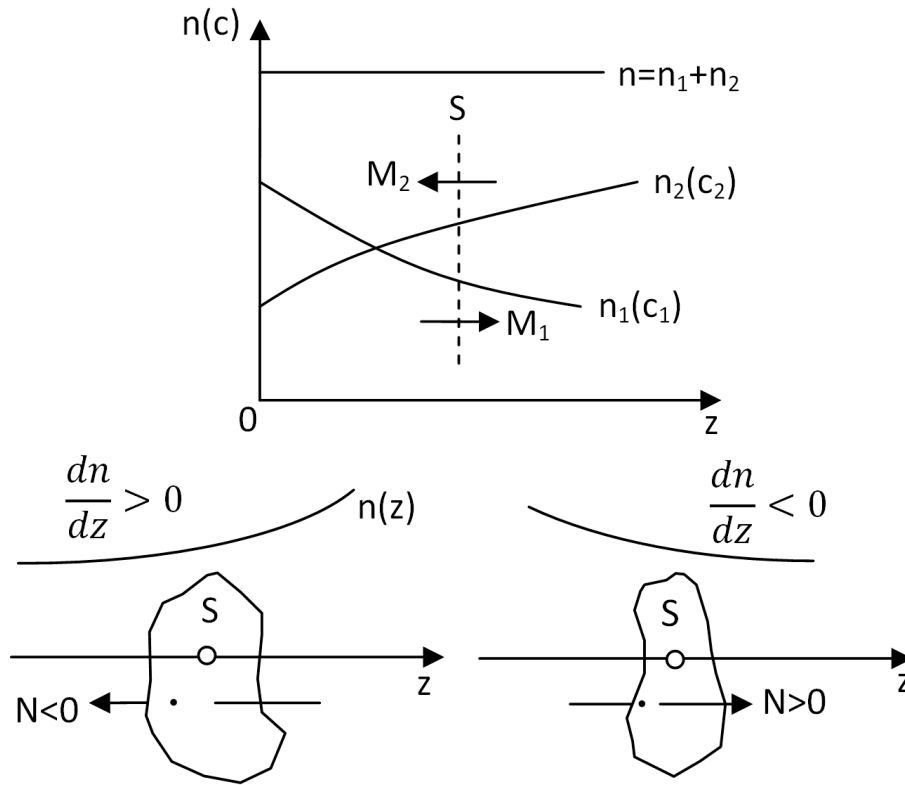


Рис. 2.3. Иллюстрация закона Фика: диффузия компонентов в газовой смеси. Поток \vec{N} вещества направлен в противоположном к градиенту концентрации ∇n направлении.

причем $dc_1/dz = -dc_2/dz$. Тогда

$$\frac{d}{dz}(c_1 + c_2) = \frac{1}{n} \frac{d}{dz}(n_1 + n_2) = 0, \quad (2.13)$$

следовательно $n = \text{const}$ и $p = \text{const}$ ($p = nkT$), т.е. отсутствуют газодинамические потоки, что говорит об отсутствии конвекции.

Поток молекул i -го вида через перпендикулярную к оси z поверхность S определяется выражением

$$N_i = -D \frac{dn_i}{dz} S, \quad (2.14)$$

где коэффициент диффузии $D = \frac{1}{3} \langle v \rangle \langle l \rangle$, $\frac{dn_i}{dz}$ — градиент плотности, равный скорости изменения плотности на единицу длины z в направ-

лении нормали к поверхности S . Это выражение называется законом Фика. Интерпретация правила знаков в законе Фика: поток молекул направлен в сторону убывания концентрации. Размерность коэффициента диффузии выводится из закона Фика следующим образом:

$$[N_i] = [D] \left[\frac{dn_i}{dz} \right] [S] \Rightarrow \frac{1}{s} = [D] \frac{1}{m^3} \frac{1}{m} m^2 \Rightarrow [D] = \frac{m^2}{s}, \quad (2.15)$$

где n — число частиц в единице объема. Вообще, количество молекул n является безразмерной величиной, тем не менее в (2.15) рассматривается удельное количество молекул на единицу объёма, поэтому размерность dn_i будет $1/m^3$; размерность оператора производной $1/m$. Умножив обе части закона Фика на массу молекулы i -вида, получим выражение для потока массы i -го компонента:

$$M_i = -D \frac{d\rho_i}{dz} S, \quad (2.16)$$

где $\rho_i = n_i m_i$ — парциальная плотность i -го компонента смеси или *абсолютная концентрация*.

2.6.2. Закон Фурье и теплопроводность

Процесс переноса энергии от более нагретого тела к менее нагретому за счет взаимодействия молекул называется теплопроводностью. Поток

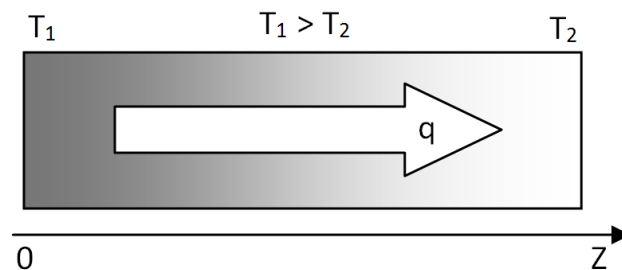


Рис. 2.4. Поток тепла в неоднородно нагретом стержне.

тепла в термически неоднородной среде, в которой происходит теплопере-

нос, описывается законом Фурье:

$$q = -k \frac{dT}{dz} S, \quad (2.17)$$

где q — поток тепла через поверхность S , расположенную перпендикулярно к оси z , dT/dz — градиент температуры, k — коэффициент теплопроводности. Вычислим размерность коэффициента:

$$[q] = [k] \left[\frac{dT}{dz} \right] [S] \Rightarrow \frac{J}{s} = [k] \frac{K}{m} m^2 \Rightarrow [k] = \frac{J}{sKm} = \frac{W}{Km}. \quad (2.18)$$

2.6.3. Закон Ньютона и вязкое трение

Большинство жидких и газообразных тел являются вязкими. Это означает, что при течении жидкости или газа между различными слоями жидкости возникает вязкое трение. Вследствие хаотического движения молекул происходит обмен молекулами между слоями газа, движущимися с различными скоростями, в результате чего импульс слоя, движущегося быстрее, уменьшается, а движущегося медленнее — увеличивается (происходит перенос импульса от одного слоя к другому), что хорошо продемонстрировано на рис. 2.5. Это приводит к торможению слоя, движущегося быстрее, и ускорению слоя, движущегося медленнее. Внутреннее трение описывается законом Ньютона:

$$F = \mu \left| \frac{du}{dz} \right| S, \quad (2.19)$$

где μ — коэффициент вязкости, du/dz — величина, показывающая, как быстро изменяется скорость жидкости или газа в направлении z , перпендикулярном к направлению движения слоев жидкости, S — площадь поверхности, вдоль которого действует сила F .

Согласно второму закону Ньютона ($Fdt = m dv/dt = dp/dt$) взаимо-

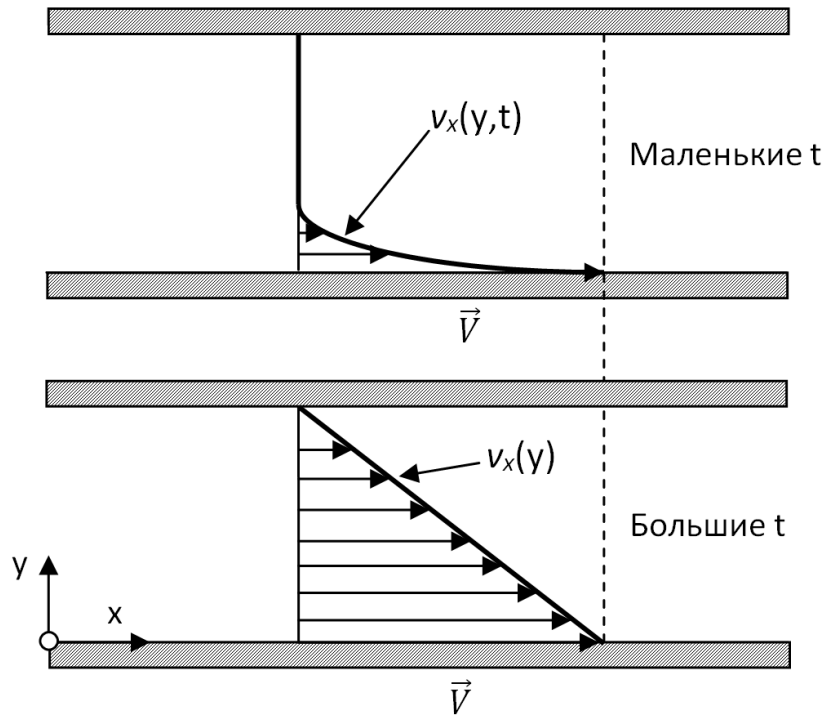


Рис. 2.5. Течение жидкости между двумя пластинками, верхняя из которых в покое, а нижняя движется со скоростью \vec{V} . Начало движения показано при маленьких временах, а установившееся течение в условиях равновесия, при больших временах.

действие двух слоев с силой F можно рассматривать как процесс передачи импульса в единицу времени от одного слоя жидкости к другому. Тогда закон Ньютона для вязкого течения формулируется как

$$K = \eta \left| \frac{du}{dz} \right| S, \quad (2.20)$$

где K — импульс, передаваемый за секунду от слоя к слою через поверхность S , или поток импульса через S . Часто закон Ньютона формулируют в терминах тензора вязкого давления π_{ij} и тензора сдвиговых напряжений τ_{ij} :

$$\tau_{yx} = -\mu \frac{dv_x}{dy}, \quad \pi_{ij} = p\delta_{ij} + \tau_{ij}. \quad (2.21)$$

2.7. Уравнения баланса, неразрывности, их физический смысл.

Процессы переноса (массоперенос, теплоперенос, гидродинамика) обладают гораздо большей общностью, чем это может показаться с первого взгляда. Мы уже установили, что диффузионные механизмы переноса описываются законами Фика, Фурье и Ньютона. Конвективные механизмы переноса величин описываются субстанциональной производной. Такое сходство законов, безусловно, связано с общностью процессов переноса по целому набору свойств. Во-первых, это одновременность протекания процессов. Во-вторых, это близкие на молекулярном уровне механизмы переноса. Рассмотрим основные законы, описывающие процессы переноса в виде эволюционных (зависящих от времени) уравнений.

2.7.1. Уравнение неразрывности

Уравнение непрерывности (в гидродинамике — уравнение неразрывности) формулируется для плотности следующим образом:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -(\nabla \cdot \rho \vec{u}). \quad (2.22)$$

В случае несжимаемой жидкости плотность среды является постоянной, что значительно упрощает уравнение до вида:

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0. \quad (2.23)$$

Проанализируем, каким образом получено это уравнение. Запишем баланс вещества в кубическом элементе пространства $\Delta x \Delta y \Delta z$, через который

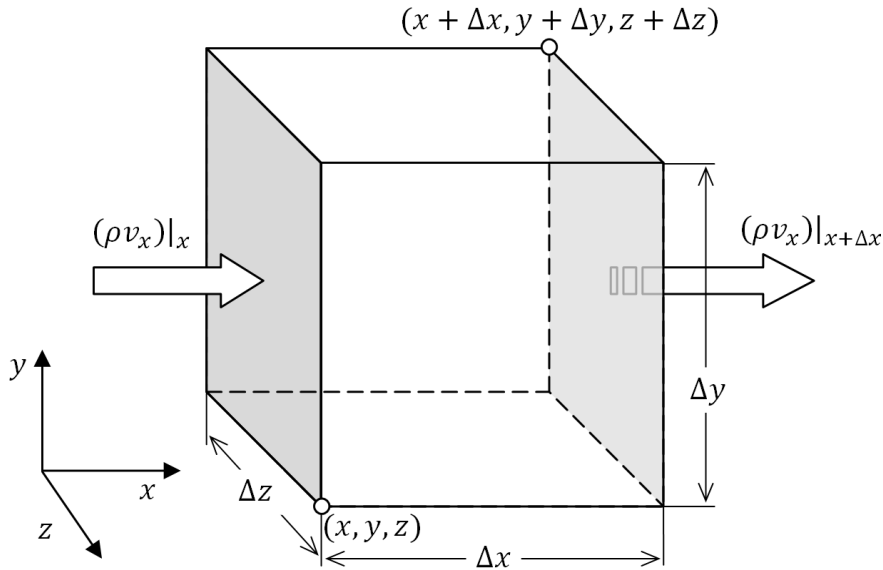


Рис. 2.6. Кубический элемент пространства $\Delta x \Delta y \Delta z$, через который протекает жидкость. Стрелками отмечен входящий и исходящий поток жидкости через закрашенные серым плоскости x и $x + \Delta x$.

протекает некая жидкость (см. рис. 2.6):

$$\left| \begin{array}{c} \text{скорость} \\ \text{изменения} \\ \text{массы в объёме} \end{array} \right| = \left| \begin{array}{c} \text{скорость} \\ \text{втекающей} \\ \text{жидкости} \end{array} \right| - \left| \begin{array}{c} \text{скорость} \\ \text{вытекающей} \\ \text{жидкости} \end{array} \right|$$

Теперь проведём преобразование простого физического утверждения в математический язык.

Начнём с того, что рассмотрим две параллельные плоскости, перпендикулярные оси x (на рис. 2.6 показаны серым). Поток массы, втекающий через плоскость в точке x можно записать как $(\rho v_x)|_x \Delta y \Delta z$, а вытекающий поток через плоскость $x + \Delta x$ как $(\rho v_x)|_{x+\Delta x} \Delta y \Delta z$. Аналогичные уравнения могут быть записаны для любой другой пары граней рассмотренного кубического элемента объема. Запишем скорость увеличения массы в объеме

как $\Delta x \Delta y \Delta z (\partial \rho / \partial t)$, тогда баланс массы для всего объема:

$$\begin{aligned} \Delta x \Delta y \Delta z \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \Delta y \Delta z [(\rho v_x)|_x - (\rho v_x)|_{x+\Delta x}] \\ &+ \Delta z \Delta x [(\rho v_y)|_y - (\rho v_y)|_{y+\Delta y}] \\ &+ \Delta x \Delta y [(\rho v_z)|_z - (\rho v_z)|_{z+\Delta z}]. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Разделим уравнение на $\Delta x \Delta y \Delta z$ и устремим к нулю приращения Δx , Δy , Δz , рассмотрев уравнение в пределе заменим приращения на частные производные:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \left(\frac{\partial}{\partial x} \rho v_x + \frac{\partial}{\partial y} \rho v_y + \frac{\partial}{\partial z} \rho v_z \right) = -\nabla \cdot \rho \vec{v}. \quad (2.25)$$

Это уравнение неразрывности [2.22](#), описывающее скорость изменения плотности жидкости в данной точке пространства.

2.7.2. Уравнение движения вязкой ньютоновской жидкости (баланс импульса)

Рассмотрим вязкое течение несжимаемой жидкости, где выполняются условия несжимаемости ([2.23](#)) и закон Ньютона ([2.21](#)), который в общем виде записывается как:

$$\tau_{ij} = -\mu \frac{dv_i}{dx_j} \quad (2.26)$$

Уравнение, описывающее динамику изменения поля скоростей, сводится к закону сохранения импульса:

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} = \nu \Delta \vec{u} - \frac{1}{\rho} \nabla p + \vec{g}, \quad (2.27)$$

где ∇ — оператор набла, Δ — оператор Лапласа, ρ — плотность, $\vec{u} = (u^1, \dots, u^n)$ — векторное поле скоростей, t — время, p — давление, ν — коэф-

коэффициент кинематической вязкости, \vec{g} – ускорение, характеризующее воздействие внешней среды.

2.7.3. Уравнение баланса внутренней энергии

Внутренняя энергия системы описывается уравнением теплового баланса

$$\rho C_p \left[\frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{u} \nabla) T \right] = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \mu \text{Diss } \vec{u}, \quad (2.28)$$

где ρ – плотность, C_p – удельная теплоемкость при $p = \text{const}$, T – температура, t – время, \mathbf{u} – скорость потока, λ – коэффициент теплопроводности, коэффициент динамической вязкости $\mu = \nu \rho$, ν – кинематическая вязкость. Последнее слагаемое в предыдущем уравнении соответствует диссипации (рассеиванию) тепловой энергии в результате сил вязкого трения. Для большинства систем оно пренебрежимо мало и требует учета только для очень вязких сред. Определение оператора Diss следующее

$$\mu \text{Diss } \vec{u} = \frac{1}{2} \mu \sum_{i,k=1}^3 \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right)^2 = \frac{1}{2} \mu \sum_{i,k=1}^3 \left[\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right)^2 + 2 \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right)^2 \right]. \quad (2.29)$$

2.7.4. Уравнение баланса вещества

Содержание компонентов в многокомпонентной смеси описывается концентрацией c , для изменения которой справедливо уравнение

$$\frac{\partial c}{\partial t} + (\mathbf{u} \nabla) c = \nabla \cdot (D \nabla c), \quad (2.30)$$

где c – концентрация, \mathbf{u} – скорость потока, D – коэффициент диффузии.

2.8. Уравнения баланса в безразмерном виде. Предварительный анализ системы на основе безразмерных характеристических чисел.

Моделирование физических явлений основано на теории подобия, которая изучает свойства подобных процессов. Подобие двух явлений обеспечивается, если они протекают в геометрически подобных условиях, и если безразмерные уравнения, описывающие их, тождественно одинаковы. Это позволяет путем простого пересчета определить параметры одного явления на основании параметров другого. Основное свойство подобия явлений состоит в существовании и равенстве безразмерных комплексов, составленных из величин, характеризующих явление и называемых безразмерными числами. Существует целый ряд безразмерных чисел, позволяющих анализировать систему ещё на этапе записи уравнений и первого анализа. Рассмотрим наиболее широко используемые характеристические числа.

Число Пекле

Число Пекле Pe — безразмерное число, которое характеризует соотношение между конвективным и молекулярным процессами переноса тепла в потоке жидкости, а также является критерием подобия для процессов конвективного теплообмена.

$$Pe = \frac{C_p \rho U L}{k}, \quad (2.31)$$

где L — характерный линейный размер поверхности теплообмена; U — характерная скорость потока жидкости относительно поверхности теплообмена; C_p — теплоёмкость при постоянном давлении; ρ — плотность жидкости; k — коэффициент теплопроводности жидкости. При малых значениях Pe преобладает молекулярная теплопроводность, а при больших — конвек-

тивный перенос теплоты.

Число Прандтля

Число Прандтля Pr — один из критериев подобия тепловых процессов в жидкостях и газах, который учитывает влияние физических свойств теплоносителя на теплоотдачу:

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} = \frac{\mu C_p}{\lambda}, \quad (2.32)$$

где $\nu = \frac{\mu}{\rho}$ — кинематическая вязкость; μ — динамическая вязкость; ρ — плотность; λ — коэффициент теплопроводности; $\alpha = \frac{\lambda}{\rho \times C_p}$ — коэффициент температуропроводности; C_p — удельная теплоёмкость среды при постоянном давлении.

Число Прандтля — физическая характеристика среды и зависит только от её термодинамического состояния. У газов число Прандтля с изменением температуры практически не изменяется (для двухатомных газов $Pr \geq 0,72$, для трёх- и многоатомных газов $0,75 \leq Pr \leq 1$). У неметаллических жидкостей число Прандтля изменяется с изменением температуры тем значительнее, чем больше вязкость жидкости (например, для воды при 0°C $Pr = 13,5$, а при 100°C $Pr = 1,74$; для трансформаторного масла при 0°C $Pr = 866$, при 100°C $Pr = 43,9$ и т. д.). У жидких металлов $Pr \leq 1$ и не так сильно изменяется с температурой (например, для натрия при 100°C $Pr = 0,0115$, при 700°C $Pr = 0,0039$).

Число Нуссельта

Число Нуссельта Nu — один из основных критериев подобия тепловых процессов, характеризующий соотношение между интенсивностью теплообмена за счёт конвекции и интенсивностью теплообмена за счёт тепло-

проводности (в условиях неподвижной среды). Названо в честь немецкого инженера Вильгельма Нуссельта.

$$Nu = \frac{aL}{\lambda} = \frac{q_c}{q_\lambda}, \quad (2.33)$$

где L — характерный размер, λ — коэффициент теплопроводности среды, a — коэффициент теплоотдачи, q_c — тепловой поток за счёт конвекции, q_λ — тепловой поток за счёт теплопроводности.

Число Фурье

Число Фурье или критерий Фурье Fo — один из критериев подобия нестационарных тепловых процессов. Характеризует соотношение между скоростью изменения тепловых условий в окружающей среде и скоростью перестройки поля температуры внутри рассматриваемой системы (тела) и зависит от размеров тела и коэффициента его температуропроводности, т.е. времени существенного изменения температурного поля:

$$Fo = \frac{\alpha t}{d^2}, \quad (2.34)$$

где $\alpha = \lambda/(\rho c)$ — коэффициент температуропроводности, t — характерное время изменения внешних условий, d — характерный размер тела.

Число Био

Число Био Bi — один из критериев подобия стационарного теплообмена между нагретым или охлажденным телом и окружающей средой.

$$Bi = \frac{\alpha L}{\lambda}, \quad (2.35)$$

где α — коэффициент теплоотдачи от поверхности тела к окружающей среде, λ — коэффициент теплопроводности материала тела, L — характерный размер.

Критерий Фурье вместе с критерием Био являются определяющими при решении задач нестационарной теплопроводности, описываемых уравнением теплопроводности. Определяемым критерием в таких задачах является безразмерная температура:

$$\theta = \frac{T - T_f}{T_0 - T_f}, \quad (2.36)$$

где T — текущая температура тела, T_f — температура среды, T_0 — начальная температура тела. Тогда безразмерная температура в точке выражается как функция от чисел Био и Фурье и безразмерной координаты точки:

$$\theta = f(\text{Bi}, \text{Fo}, \vec{r}/L).$$

2.8.1. Уравнения баланса в безразмерной форме

Анализ характеристических чисел позволяет провести предварительный анализ системы и оценить ее поведение без решения уравнений баланса. Приведем уравнения баланса к безразмерной форме, содержащей характеристические числа. Для этого проведем процедуру обезразмеривания, т.е. перехода к безразмерным переменным.

В уравнении баланса вещества определим следующие безразмерные переменные величины: $s = c/c_0$ — безразмерная концентрация, c_0 — масштаб концентрации, $\text{Fo}_D = tD/x_0^2$ — безразмерное время или диффузионное число Фурье, D — коэффициент диффузии. Тогда

$$\frac{\partial s}{\partial \text{Fo}} + \text{Pe}_D(\vec{v} \hat{\nabla})s = \hat{\Delta}s, \quad (2.37)$$

где $Re_D = u_0 x_0 / D$ – диффузионное число Пекле. Следует отметить, что обезразмеривать подлежит не только переменные, но и операторы. В настоящем примере операторы ∇ и Δ были обезразмерены согласно соотношениям:

$$\nabla = \frac{1}{x_0} \hat{\nabla}, \quad \Delta = \frac{1}{x_0^2} \hat{\Delta}. \quad (2.38)$$

2.8.2. Уравнение баланса импульса в безразмерной форме (вывод безразмерного уравнения)

Введем следующие безразмерные переменные величины: скорость $\vec{v} = \vec{u}/u_0$, координаты $x = X/x_0$, $y = Y/x_0$, $z = Z/x_0$, давление $\Pi = p/p_0$, время или динамическое число Фурье $Fo_\nu = t\nu/x_0^2$, где v_0 , x_0 , p_0 – соответствующие масштабы скорости, координаты, давления. Введем также безразмерные операторы: $\hat{\nabla}$, $\hat{\Delta}$ (2.38). Подставляя принятые безразмерные величины и операторы в уравнение баланса:

$$\frac{\nu u_0}{x_0^2} \frac{\partial \vec{v}}{\partial Fo_\nu} = - \left(u_0 \vec{v} \cdot \frac{\hat{\nabla}}{x_0} \right) u_0 \vec{v} + \nu \frac{1}{x_0^2} \hat{\Delta} u_0 \vec{v} - \frac{1}{\rho} \frac{1}{x_0} \hat{\nabla} p_0 \Pi + \vec{g},$$

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial Fo_\nu} = - \frac{x_0^2}{\nu u_0} \frac{u_0^2}{x_0} \left(\vec{v} \cdot \hat{\nabla} \right) \vec{v} + \frac{x_0^2}{\nu u_0} \frac{1}{x_0^2} \hat{\Delta} \vec{v} - \frac{x_0^2}{\nu u_0} \frac{p_0}{\rho x_0} \hat{\nabla} \Pi + \vec{g},$$

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial Fo_\nu} = - \frac{x_0}{\nu u_0} \left(\vec{v} \cdot \hat{\nabla} \right) \vec{v} + \hat{\Delta} \vec{v} - \frac{u_0 x_0}{\nu} \frac{p_0}{\rho u_0^2} \hat{\nabla} \Pi + \frac{u_0 x_0 g x_0}{\nu u_0^2} \vec{g},$$

получаем уравнение баланса в безразмерном виде:

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial Fo_\nu} = -Re(\vec{v} \cdot \hat{\nabla})\vec{v} + \hat{\Delta}\vec{v} - Eu Re \hat{\nabla} \Pi + \frac{Re}{Fr} \vec{e}_g, \quad (2.39)$$

где $Re = u_0 x_0 / \nu$ – число Рейнольдса, $Eu = p_0 / \rho u_0^2$ – число Эйлера, $Fr = u_0^2 / g x_0$ – число Фруда, \vec{e}_g – единичный вектор в направлении ускорения.

Для каждого вида течения существует критическое число Рейнольдса Re_{cr} , которое, как принято считать, определяет переход от ламинарного те-

чения к турбулентному. При $Re < Re_{cr}$ течение происходит в ламинарном режиме, при $Re > Re_{cr}$ возможно возникновение турбулентности.

2.8.3. Уравнение баланса внутренней энергии в безразмерной форме

Введем следующие безразмерные переменные величины: безразмерная температура (аналогично (2.36)) $\theta = (T - T_c)/(T_0 - T_c)$, время или тепловое число Фурье $Fo = at/x_0^2$, коэффициент теплопроводности $l = \lambda/\lambda_0$, где T_0 и T_c — начальная температура и температура солидуса расплавленного металла, λ_0 — масштаб коэффициента теплопроводности. Подставляя принятые безразмерные величины и операторы в уравнение баланса, получаем уравнение баланса в безразмерном виде:

$$\frac{\partial \theta}{\partial Fo} + Pe(v\hat{\nabla})\theta = \hat{\nabla}(\hat{\nabla}\theta) + Pr Ek \hat{Diss} \vec{v}, \quad (2.40)$$

где оператор \hat{Diss} — безразмерный оператор (2.29).

2.9. Элементы механики твердого деформируемого тела. Относительные деформации. Напряжения, закон Гука. Деформационная кривая. Пластические деформации.

Под действием приложенных к нему сил всякое реальное тело деформируется, то есть изменяет свои размеры и форму. Если после прекращения действия сил тело принимает свои первоначальные размеры и форму, деформация называется упругой. Упругие деформации наблюдаются в том случае, если сила, обусловившая деформацию, не превосходит некоторый, определенный для каждого конкретного тела предел упругости.

Рассмотрим тело, имеющее в недеформированном состоянии длину u_1 ; приложим к телу силу (рис. 2.7) \vec{F} , в равновесии по модулю равную, соглас-

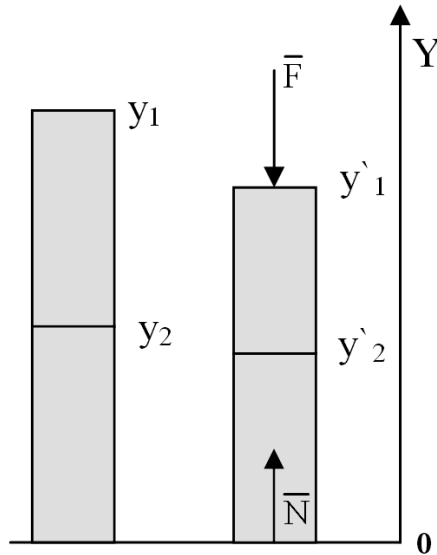


Рис. 2.7. Смещение координат контрольных точек упругого тела под действием сжимающего воздействия. Слева показано тело, не подверженное деформации и действию силы, справа — деформированное под воздействием внешней силы тело.

но следствия из третьего закона Ньютона, силе реакции опоры \vec{N} . Под воздействием этих двух сил тело сожмется на некоторую величину $-\Delta y$, после чего наступит равновесие. В состоянии равновесия внешние силы \vec{F} и \vec{N} будут уравновешены упругими силами, возникшими в теле в результате деформации. Опыт показывает, что при небольших деформациях удлинение пружины Δy оказывается пропорциональным растягивающей силе: $\Delta y \sim F$ ($F = |\vec{F}| = |\vec{N}|$). Соответственно упругая сила оказывается пропорциональной удлинению пружины:

$$F = -k\Delta y. \quad (2.41)$$

Коэффициент пропорциональности называется коэффициентом жесткости тела. Все вышесказанное также справедливо для растяжения, однако стоит обратить внимание на противоположный знак перед абсолютным удлинением тела. Кроме того вместо тела воздействию может подвергаться упругая пружина, тогда коэффициент k называется коэффициентом жесткости пружины.

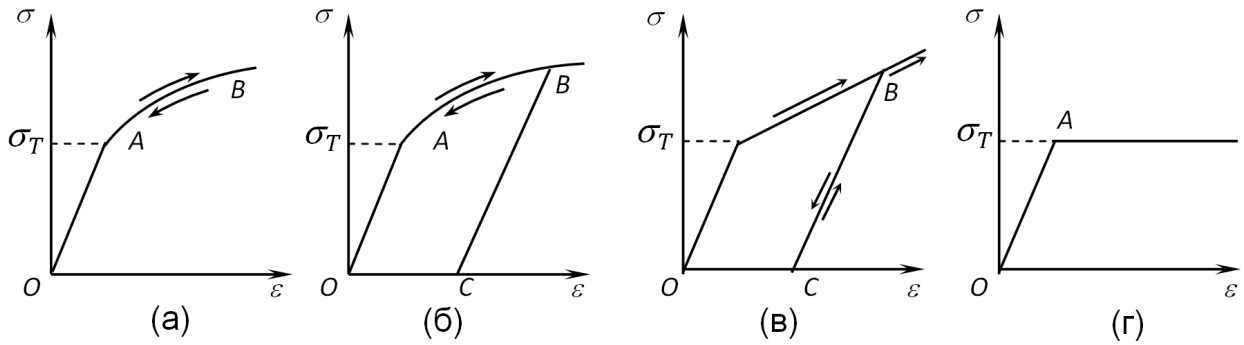


Рис. 2.8. Основные виды диаграмм нагружения упруго-пластических материалов

жины. Данное утверждение о пропорциональности между упругой силой и деформацией носит название закона Гука.

Упругие напряжения возникают во всем теле. Любая его часть действует на другую часть с силой, определяемой формулой (2.41), поэтому если разрезать тело пополам, такая же по величине упругая сила будет возникать в каждой из половин при меньшем в два раза удлинении. Следовательно, для любого материала величина упругой силы определяется не абсолютным удлинением тела Δy , а относительным $\Delta y/y_1$ удлинением.

Относительное изменение длины или относительная деформация обозначается:

$$\varepsilon = \frac{\Delta y}{y_1}, \quad (2.42)$$

где y_1 — начальный размер тела.

Для большинства материалов закон Гука справедлив лишь в области малых деформаций. Диаграмма отношения напряжения к деформации при растяжении часто имеет вид, показанный на рис. 2.8, (а) и (б). Выше точки А линейное соотношение между напряжением и деформацией нарушается. Соответствующее напряжение называется пределом пропорциональности (пределом текучести). Если диаграмма разгрузки совпадает с диаграммой нагружения OAB (рис. 2.8, (а)), то такие материалы называют нелинейно-упругими. Если диаграмма разгрузки совпадает с прямой BC (рис. 2.8, (б)),

почти параллельной участку ОА, то после удаления нагрузки в образце появляются остаточные деформации (отрезок ОС). Такие материалы называются упруго-пластическими. Теория пластичности решает главным образом те же задачи, что и теория упругости, но с учетом упругопластического деформирования материала. Полученные ранее уравнения равновесия и зависимости между деформациями и перемещениями сохраняются, только вместо закона Гука в теории пластичности применяются другие зависимости.

В теории пластичности рассматривается также задача определения несущей способности, исследующая лишь предельное состояние тела, без изучения предшествующего деформирования. При решении задач теории пластичности необходимо знать, при каких условиях материал переходит из упругого состояния в пластическое. При одноосном растяжении пластические деформации возникают, когда

$$\sigma_1 \geq \sigma_T. \quad (2.43)$$

При чистом сдвиге условие пластичности

$$\tau \geq \tau_T. \quad (2.44)$$

Для простейших материалов с симметричным тензором деформации в этих формулах будет справедливо соотношение $\sigma_T = \tau_T$. Величины пределов текучести при сдвиге и растяжении постоянны для каждого материала и устанавливаются экспериментальным путем.

В случае трехосного напряженного состояния для множества вариантов соотношений между напряжениями и деформациями, экспериментальное определение условий пластичности невозможно. Логично выразить условия пластичности через главные напряжения, либо через максимальные касательные напряжения.

Сен-Венан, основываясь на опытах Треска высказал предположение [4], что в случае трехосного напряженного состояния, при достижении пластичности, максимальные касательные напряжения имеют для данного материала одно и то же постоянное значение

$$\tau_{max} = \tau_T. \quad (2.45)$$

Если $\sigma_1 > \sigma_2 > \sigma_3$, то справедливо

$$2|\tau_{max}| = |\sigma_1 - \sigma_3| = \sigma_T, \quad (2.46)$$

где $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ — тензорные компоненты напряжений, соответствующих трём направлениям трёхосного напряженного состояния. Формула (2.46) выражает условие пластичности Треска–Сен-Венана. Экспериментальные данные свидетельствуют о том, что при всестороннем растяжении или сжатии материал деформируется упруго. Поэтому можно принять, что условие пластичности зависит от второго инварианта девиатора напряжений.

$$\sigma_i = \sigma_T. \quad (2.47)$$

Здесь σ_i — интенсивность напряжений

$$\sigma_i = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\sigma_x - \sigma_y)^2 + (\sigma_y - \sigma_z)^2 + (\sigma_z - \sigma_x)^2 + 6(\tau_{xy}^2 + \tau_{yz}^2 + \tau_{xz}^2)}. \quad (2.48)$$

Формула (2.47) выражает условие пластичности Губера–Мизеса. Критерий получен ими, исходя из условия постоянства энергии формоизменения. При чистом сдвиге из (2.46) имеем $|\tau_{max}| = 0.5\sigma_T$, а из (2.48) — $|\tau_{max}| = 0.58\sigma_T$. Результаты не различаются существенно, причем последний ближе к опытным данным. Приведенные критерии позволяют зафик-

сировать момент появления первых пластических деформаций. Они достаточны для решения задач пластичности, если деформирование материала описывается диаграммой Прандтля (рис. 2.8, (г)). Если материал описывается диаграммой с линейным упрочнением, состоящей из двух наклонных прямолинейных участков (рис. 2.8, (в)), то после разгрузки при повторном нагружении, материал деформируется упруго до тех пор, пока напряжения не окажутся равными σ_T .

Более подробно систему уравнений в проекциях, используемую для решения в пакете COMSOL Multiphysics можно найти на страницах 205-209 руководства [20].

2.10. Многофазные среды. Фазовые переходы. Кристаллизация. Метод двухфазной зоны для расчета кристаллизации сплавов.

Фазой называется термодинамически равновесное состояние вещества, отличающееся по физическим свойствам от других возможных равновесных состояний того же вещества. Переход вещества из одной фазы в другую — *фазовый переход* — всегда связан с качественными изменениями свойств веществ. Фазовый переход первого рода — это переход, сопровождающийся поглощением или выделением теплоты (например, плавление, кристаллизация). Он характеризуется постоянством температуры, изменениями энтропии и объема.

Кристаллизация — процесс фазового перехода вещества из жидкого состояния в твёрдое кристаллическое с образованием кристаллов. Является фазовым переходом первого рода. Кристаллизация начинается при достижении некоторого предельного условия, например, переохлаждения жидкости или пересыщения пара, когда практически мгновенно возникает множество мелких кристалликов — центров кристаллизации. Кристаллы растут, присоединяя атомы или молекулы из жидкости или пара. Рост гра-

ней кристалла происходит послойно, края незавершённых атомных слоев (ступени) при росте движутся вдоль грани. Зависимость скорости роста от условий кристаллизации приводит к разнообразию форм роста и структуры кристаллов (многогранные, пластинчатые, игольчатые, скелетные, дендритные и другие формы). В процессе кристаллизации неизбежно возникают различные дефекты. На число центров кристаллизации и скорость роста значительно влияет степень переохлаждения. Более подробно о фазовых переходах первого и второго рода можно прочитать в [11].

Рассмотрим некоторые важные для нас моменты из теории двухфазной зоны [12], [3], которая хорошо описывает кристаллизацию широкого класса металлических двухкомпонентных сплавов. Как следует из названия, основной концепцией является введение зоны³, в которой существуют одновременно твердая и жидкая фазы. В произвольной системе пространственных координат состояние двухфазной зоны описывается системой уравнений:

$$T_L = \varphi(C), \quad (2.49)$$

$$a\Delta T - \Theta \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (2.50)$$

$$\nabla(DS\nabla C) + k(C)C \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial(SC)}{\partial t}, \quad (2.51)$$

где T — температура, C — концентрация примесного компонента, S — доля жидкой фазы, D — коэффициент диффузии, a — коэффициент температуропроводности и t — время. Уравнение (2.49) является уравнением линии ликвидуса и означает устойчивое равновесное состояние кристаллизующейся жидкости внутри зоны. В уравнениях теплопроводности (2.50) и массопереноса (2.51), имеющих близкий к уравнению теплопроводности с

³чистые однокомпонентные расплавы затвердевают при температуре T_k , однако, бинарные и многокомпонентные сплавы кристаллизуются когда температура расплава падает от температуры ликвидуса T_L до температуры солидуса T_S . Этот интервал температур может достигать 50-80°.

источником (см. уравнения теплопроводности в [14]) вид, учитываются тепловыделение и поглощение примеси, связанные с кристаллизацией расплава, относительное количество которого в каждом элементе объема выражается функцией $S(x, y, z, t)$ — сечением жидкой фазы. Таким образом, эти уравнения пригодны для описания как чисто жидкой области слитка, в которой, очевидно, $S \equiv 1$, так и твердой фазы, где $S \equiv 0$. Таким образом, возможно однотипное описание всего затвердевающего слитка в целом, без специального выделения границ твердой и двухфазной, и жидкой зон. Состояние слитка в каждый момент времени и весь ход процесса однозначно определяются тремя функциями T , C и S пространственных координат и времени.

Приведенные уравнения выражают равновесие между расплавом состава C и выделяющимися из него кристаллами состава $k(C)C$ при температуре $T = \varphi(C)$, где k — коэффициент распределения, получаемый из кинетической фазовой диаграммы. Однако из-за малой диффузионной подвижности компонент в твердом состоянии распределение вещества в твердой фазе неоднородно и полного термодинамического равновесия в системе нет. По этой причине теория, выражаемая приведенными уравнениями, получила название теории квазиравновесной зоны [12].

Используя упрощенное уравнение (2.51) в виде $k(C)C \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial(SC)}{\partial t}$, справедливом при незначительной ликвации примесного компонента, и линейную диаграмму состояний сплава [2], путем математических преобразований получаем известную зависимость доли жидкой фазы от концентрации:

$$S = \left(\frac{C_0}{C} \right)^{\frac{1}{1-k}}, \quad (2.52)$$

где C_0 — исходный состав сплава. Далее, имея связь между тремя функциями T , C , S , получаем замкнутое тепловое уравнение (2.50), т.е. уравнение более

не содержит каких либо иных функций, кроме температуры:

$$a\Delta T = \psi(T) \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (2.53)$$

где $\psi(T)$ — функция эффективной теплоемкости внутри двухфазной зоны, имеющая вид:

$$\psi(T) = \begin{cases} 1, & (T > T_L), \\ 1, & (T < T_S), \\ 1 + \left(\frac{\Theta}{(1-k)(T_a - T_L)} \right) \left(\frac{T_a - T_L}{T_a - T} \right)^{\frac{2-k}{1-k}}, & (T_S < T < T_L), \end{cases} \quad (2.54)$$

где T_L — температура ликвидуса исходного сплава, T_S — температура окончания затвердевания (солидуса), T_a — температура кристаллизации основного компонента. Записанная таким образом эффективная теплоемкость позже (в разделе 4.2) будет использоваться в модельной задаче по лазерному спеканию порошка. Температура во всем объеме кристаллизующегося слитка описывается замкнутым квазилинейным уравнением теплопереноса с эффективным коэффициентом температуропроводности, зависящим от температуры и имеющим разрывы непрерывности при некоторых температурах [12].

3. Построение вычислительных моделей в среде COMSOL MultiPhysics

3.1. Дискретизация расчетной области. Методы дискретизации уравнений математической модели. Методы конечных разностей, конечных элементов и конечного объема. Сравнение методов.

В общем дискретизацию можно охарактеризовать как преобразование произвольной непрерывной функции в дискретную. Дискретизация расчетной области — разбиение расчетной области с помощью сетки на множество простых геометрических объёмов, в каждом из которых может быть решено уравнение, описывающее состояние объема.

Существуют три метода дискретизации математической модели при численном решении поставленной краевой задачи. В роли краевой задачи выступает система дифференциальных уравнений с заданными условиями на границе расчетной области и с заданными начальными значениями зависимых переменных. Этими методами являются следующие:

1. МКР — метод конечных разностей (метод сеток).
2. МКО — метод конечных объемов.
3. МКЭ — метод конечных элементов.

Иногда при использовании МКР и МКЭ дополнительно используют спектральный и псевдоспектральный метод. Эти методы ищут решение путем разложения решения в ряд Фурье по некоторой системе базисных функций. Использование такого метода приводит к наиболее точному решению

с использованием небольших ресурсов вычислительной мощности. Отметим, что данные методы применяются только к небольшому классу задач, поскольку необходимой особенностью для них является наличие в задаче периодических граничных условий [1].

Метод конечных разностей (метод сеток)

Теория конечных разностей была разработана еще Эйлером в XVII веке. Метод конечных разностей был исторически первым методом численного моделирования и до 70–80-х годов XX века пользовался наибольшим предпочтением. В наше время метод конечных разностей благодаря своей простоте все еще используется при численном решении дифференциальных уравнений, но особенно активно данный метод используется в гидродинамике, аэродинамике и акустике.

Область непрерывного изменения аргументов (для одномерной задачи это переменные x и t) заменяется конечным (дискретным) множеством точек (узлов) $\{x_i\}$, $\{t_i\}$, называемых сеткой. Вместо функций непрерывного аргумента рассматриваются функции дискретного аргумента, определенные в узлах сетки и называемые сеточными функциями. Производные, входящие в дифференциальное уравнение, заменяются (аппроксимируются) при помощи соответствующих разностных отношений. Дифференциальное уравнение при этом заменяется системой алгебраических уравнений (разностными уравнениями). Начальные и краевые условия тоже заменяются разностными начальными и краевыми условиями для сеточной функции [14].

Преимущества метода конечных разностей:

1. Простота самого метода позволяет легко реализовать его в среде ЭВМ.
2. Простота вычисления методом конечных разностей позволяет решать задачи быстрее других вычислительных методов.

Метод конечных разностей обладает рядом существенных недостатков, к которым можно отнести следующие:

1. В общем случае невозможно наложить разностную сетку на расчетную область со сложной геометрией.
2. Разностную сетку нельзя измельчать в определенных местах расчетной области, когда это требуется для точности решения.
3. Невозможно задание граничных условий второго рода на границах любой протяженности, а также смешанных граничных условий.
4. Нет достаточной точности решения по всему пространству исследуемой области, поскольку решение ищется только в узловых точках.

Метод конечных объемов

Метод конечных объемов может применяться для решения задач сохранения массы, количества движения и энергии для замкнутых областей. С 1970-х годов по настоящее время метод конечных объемов активно используют для решения задач динамики жидкостей и газа [6]. Первый шаг метода состоит в том, что расчетная область полностью разбивается на определенное количество непересекающихся конечных объемов. В каждом конечном объеме содержится одна узловая точка. Конечные объемы могут быть произвольного размера и располагаться нерегулярно. Значение вычисляемой величины в каждой узловой точке далее становится переменной, которая должна быть определена. Дифференциальное уравнение исследуемого процесса интегрируется по каждому конечному объему. При этом происходит интегральное сохранение исследуемой величины. Численные решения ищутся только для самих узловых точек. Также используются вспомогательные кусочно-непрерывные интерполяционные профили необходимые

для расчета интегралов. Данные профили после получения дискретной задачи не учитываются. Полученная дискретная задача выражает закон сохранения исследуемой величины, перенося свойство консервативности бесконечно малого объема, для которого составлено дифференциальное уравнение, на конечные объемы расчетной области [17].

Преимущества метода конечных объемов:

1. Конечные области сложной геометрии можно разбивать на конечные объемы.
2. Размеры конечных объемов могут быть переменными. Это позволяет укрупнить или измельчить сеть разбиения области на элементы, если в этом есть необходимость.
3. Даже при грубой математической сетке выполняется условие точного интегрального баланса исследуемой величины, что позволяет обходиться меньшими по мощности вычислительными устройствами.

К недостаткам метода конечных объемов можно отнести его малую универсальность. Метод используется для решения только определенных классов задач. Кроме этого, поскольку решение ищется только в узловых точках, нет достаточной точности решения по всему пространству исследуемой области.

Метод конечных элементов

Ключевые моменты метода конечных элементов были разработаны рядом ученых в первой половине XX века, но настоящее развитие данный метод получил после появления ЭВМ. Впервые метод конечных элементов был применен на ЭВМ И. Агирисом в 1944 году. В дальнейшем, с развитием ЭВМ шло интенсивное развитие и метода конечных элементов. Метод широко используется благодаря следующим ниже преимуществам (табл. 3.1).

критерии	метод конечных разностей	метод конечных элементов	метод конечных объемов
точность геометрической модели	★	★★★	★★★
скорость вычисления	★★★	★	★★
решение нелинейных моделей	★	★★	★★★
возможность использования различных конечных элементов	★	★★	★★

Таблица 3.1. Сравнение вычислительных методов по различным критериям, где количество звездочек отражает качество метода по выбранному критерию.

1. Свойства материалов смежных элементов не должны быть обязательно одинаковыми. Это позволяет применять метод к телам, составленным из нескольких материалов.
2. Использование триангуляции позволяет разбивать на конечные элементы области со сложной геометрией.
3. Размеры элементов могут быть переменными. Это позволяет укрупнить или измельчить сеть разбиения области на элементы, если в этом есть необходимость.

Ранее главный недостаток метода конечных элементов заключался в отсутствии в 70-х и 80-х годах XX века необходимых ЭВМ, обладающих такой вычислительной мощностью, которая бы позволяла эффективно использовать метод конечных элементов [9]. В настоящее время мощность ЭВМ выросла многократно. Проблемы разбиения и последующего вычисления, возникающие при использовании метода конечных элементов, были решены с помощью специально разработанных для этого программ ЭВМ в

совокупности с вычислительно мощными ЭВМ. В тоже время способность решения методом конечных элементов наиболее сложных задач со слишком большим числом степеней свободы N ограничивается вычислительной мощностью используемой ЭВМ. Более подробно о методе конечных элементов написано в следующем разделе [3.2](#)

В табл. [3.1](#) представлено сравнение вышеприведенных вычислительных методов по некоторым критериям.

3.2. Основы метода конечных элементов. Интерполяционные функции, дискретизация дифференциальных уравнений. Переход от непрерывного решения к кусочно-непрерывному. Матрица жесткости и переход к системе дифференциальных уравнений.

Метод конечных элементов является мощным методом для численного решения сложных систем. Основная идея метода состоит в том, что любую непрерывную величину можно аппроксимировать дискретной моделью, являющейся множеством кусочно-непрерывных функций, определенных на конечном числе подобластей [1]. В общем случае непрерывная величина заранее неизвестна и нужно определить значения этой величины на исследуемой области. Закон изменения непрерывной величины чаще всего задается дифференциальным уравнением.

Построение дискретной модели можно разбить на несколько этапов:

1. В рассматриваемой области определяется конечное число точек. Эти точки называются узловыми точками или просто узлами. Узловые точки могут располагаться на разном, нефиксированном расстоянии друг от друга.
2. Значение непрерывной величины в каждом узле далее становится переменной, которая должна быть определена.

3. Область определения непрерывной величины разбивается на конечное число подобластей, называемых элементами. Эти элементы неразрывны, пересекаются только на границах, а значит имеют общие узловые точки и в совокупности охватывают всю исследуемую область. Одномерными конечными элементами являются отрезки, в качестве двумерных конечных элементов чаще выступают треугольники и четырехугольники, в качестве трехмерных конечных элементов чаще используют тетраэдры и параллелепипеды.
4. Непрерывная величина аппроксимируется на каждом элементе базисными (интерполяционными) функциями, которые задаются с помощью узловых значений этой величины. Для каждого i -го элемента определяется своя интерполяционная функция $h_i(\vec{r}_i)$, где \vec{r}_i — радиус вектор, описывающий геометрическое положение i -го элемента. Базисные функции задаются таким образом, чтобы сохранялась непрерывность величины на границах элементов. В зависимости от интерполяционной функции различают наиболее часто используемые симплекс- и комплекс-элементы.

Симплекс-элементами являются элементы с аппроксимирующей функцией-полиномом первой степени, а комплекс-элементами являются элементы с аппроксимирующей функцией-полиномом 2-го или более высоких порядков. Использование комплекс-элементов позволяет аппроксимировать область более точно, но при этом возрастает количество узловых точек, необходимых для аппроксимации конечного элемента такой функцией. При этом число узлов в элементе зависит от степени интерполяционного полинома и размерности пространства расчетной области. Для одномерного элемента i выполняется следующее соответствие:

$$n_k = k_i + 1, \quad (3.1)$$

где n_k — количество узлов необходимое для построения полинома k_i степени. Для двумерного элемента i выполняется следующее соответствие:

$$n_k = \frac{(k_i + 1)(k_i + 2)}{2}, \quad (3.2)$$

для трехмерного элемента i выполняется соответствие:

$$n_k = \frac{(k_i + 1)(k_i + 2)(k_i + 3)}{6}. \quad (3.3)$$

Таким образом симплекс-элементами в одномерном пространстве являются отрезки, в двумерном пространстве — треугольники, в трехмерном пространстве — тетраэдры. Комплекс-элементы могут быть той же формы, что и симплекс-элементы, но имеют при этом дополнительные узлы. Дополнительные узлы в двумерных и трехмерных комплекс-элементах располагаются таким образом, чтобы, с одной стороны, равномерно распределить их по пространству. С другой стороны, чтобы поставить наибольшее количество узлов на границы между элементами, тем самым уменьшая N_u общее количество узлов в конечно-элементной сетке.

Наиболее важной характеристикой конечно-элементной сетки выступает количество степеней свободы. Количество степеней свободы N — это количество вычисляемых переменных в дискретной модели, находящееся как произведение количества неизвестных величин (для задачи с несколькими неизвестными или векторными величинами) на число узлов N_u в конечно-элементной сетке после построения дискретной модели.

После построения дискретной модели значения в узлах должны быть подобраны таким образом, чтобы получить наилучшее приближение к истинному распределению значений искомой величины в узлах. Такой подбор может быть проверен нахождением невязки ε , где ε должна стремиться к нулю. Под невязкой ε понимают ошибку вычисления, равную различию между

значениями исходного дифференциального уравнения, описывающего изучаемый процесс, и результатом, полученным подстановкой значений вычисления в дифференциальное уравнение. Другими словами, на множестве элементов осуществляется минимизация функционала вариационной задачи. Чтобы исключить необходимость вариационной формулировки задачи, в 1915 г. Галёркиным был предложен метод приближенного решения краевой задачи. Метод Галёркина заключается в том, что должно выполняться следующее условие: невязка должна быть ортогональна функциям, используемым при аппроксимации. Проиллюстрируем это утверждение математически.

Рассмотрим нестационарную задачу. Если взять дифференциальное уравнение в общем виде:

$$Lu - f = 0, \quad (3.4)$$

где L — дифференциальный оператор, а приближенное решение в виде:

$$\bar{u} = \sum h_i(r)U_i, \quad (3.5)$$

где U_i — значения в узлах i -ого элемента, то невязка будет иметь следующий вид:

$$\varepsilon = L\bar{u} - f. \quad (3.6)$$

Используя метод Галёркина, чтобы уменьшить невязку ε , нам понадобится решить следующий интеграл:

$$\int_r h_i(r)\varepsilon dr = 0 \quad (3.7)$$

для каждой из базисных функций $h_i(r)$. Уравнение (3.7) как раз является условием ортогональности функций $h_i(r)$ и ε . Таким образом процесс минимизации сводится к решению интегрального уравнения, а после преоб-

разования, к решению системы линейных алгебраических уравнений относительно узловых значений переменной. Тогда систему линейных уравнений можно привести к матричному виду:

$$[K]\{U\} = \{F\}, \quad (3.8)$$

где $[K]$ — глобальная матрица жесткости, которая является квадратной матрицей с длиной, равной количеству степеней свободы N . Такое решение легко осуществляется с помощью ЭВМ, причем требуемое количество вычислительных ресурсов напрямую зависит от количества степеней свободы N . Метод Галёркина имеет также усовершенствованный вариант — метод Галёркина-Петрова, при котором разложение решения производится по одному базису, а ортогональность невязки требуется к другому [16].

Долгое время широкому распространению МКЭ мешало отсутствие алгоритмов автоматического разбиения области на почти равносторонние треугольники, поскольку погрешность, в зависимости от вариации метода, обратно пропорциональна синусу или самого острого, или самого тупого угла в разбиении. Впрочем, эту задачу удалось успешно решить (алгоритмы основаны на триангуляции Делоне), что дало возможность создавать полностью автоматические конечноэлементные САПР.

3.3. Пакет COMSOL MultiPhysics. Основные навыки работы.

Пакет COMSOL Multiphysics [19, 20] — это мощная интерактивная среда для моделирования и решения широкого класса научных и инженерных задач, которые можно сформулировать в виде системы дифференциальных уравнений. В программный пакет встроены шаблоны физических процессов, которые содержат в себе комплекс уравнений, разбитых на удобные подразделы, для быстрого построения сложных моделей. Шабло-

ны позволяют вводить значения различных физических величин, например потока, нагрузок, источников излучения и пр., помогая в разработке модели, избавляя пользователя от необходимости ручного программирования граничных и начальных условий. Однако шаблоны не являются ограничением, так как работа с дифференциальными уравнениями в COMSOL возможна в трёх формах:

- Коэффициентная форма — подходит для работы с линейными моделями, а также для простых систем, является частным случаем сильной формы.
- Сильная форма — позволяет работать с нелинейными, комплексными моделями.
- Слабая форма — для моделей, включающих сложные граничные условия с зависимостями от переменных, системы отсчёта, времени.

Решение уравнений в COMSOL MultiPhysics осуществляется с помощью метода конечных элементов. Программный пакет может осуществлять многопроцессорные вычисления, содержит средства для геометрических построений моделей, генераторы сетки (в том числе возможно построение адаптивных сеток), различные способы решения и инструменты визуализации. COMSOL MultiPhysics применяется для решения задач во многих областях научной деятельности. Здесь представлены некоторые из них:

- | | |
|-----------------------|--------------------------------------|
| ● акустика, | ● гидродинамика, |
| ● биотехнологии, | ● топливные элементы и электрохимия, |
| ● химические реакции, | ● геофизика, |
| ● диффузия, | ● теплоперенос, |
| ● электромагнетизм, | |

- микроэлектромеханические системы (MEMS),
- оптика,
- фотоника,
- теплоперенос в пористых средах,
- квантовая механика,
- радиочастотный анализ,
- полупроводниковые устройства,
- структурная механика,
- транспортные явления,
- распространение волн.

Кроме того возможно объединение нескольких моделей в одну, то есть реализация принципа мультифизического моделирования (одновременного использования в расчётах множества физических законов и уравнений связи между ними).

3.3.1. Глоссарий

Поскольку работа в вычислительной среде происходит с использованием англоязычного интерфейса, то логично привести русские эквиваленты используемых терминов:

- adaptive mesh coarsening/refinement — огрубление/уточнение адаптивной сетки
- analyzed geometry — анализируемая геометрия
- arc — дуга
- aspect ratio — соотношение сторон
- assemble — соединение (сборка)
- basis (interpolation) function — базисная функция
- boundary — граница
- constant — постоянная/константа
- convergence — сходимость
- coupling variable — переменная

- связи
- curve — кривая
 - degrees of freedoms — степени свободы
 - dependent variable — зависимая переменная
 - Dirichlet boundary condition — граничное условие Дирихле
 - discretization — дискретизация
 - domain — область
 - edge (i.e. edge element) — ребро
 - embed (i.e. embedded object) — встраивание
 - error — ошибка
 - face — грань
 - FEM — конечно-элементный метод
 - finite element — конечный элемент
 - flux — поток
 - grid — координатная сетка
 - independent variable — независимая переменная
 - initial condition — начальное условие
 - iteration — итерация
 - iterative solver — итерационный решатель
 - mesh — конечно-элементная сетка
 - multiphysics — многофизичность
 - Neumann boundary condition — граничное условие Неймана
 - node — узел
 - ODE — обыкновенные дифференциальные уравнения
 - pair — пара (переменных)
 - parameter — параметр (переменная)
 - PDE — уравнения в частных производных
 - point — точка
 - scalar and vector variables — скалярные и векторные переменные
 - solution — решение

- solver – решатель
- stability – устойчивость
- steady model – стационарная модель (решение не зависит от времени)
- surface – поверхность
- symmetry – симметрия
- tensor – тензор
- time-dependent model – нестационарная модель

Работа в COMSOL Multiphysics начинается с выбора шаблона модели. Описанию работы с навигатором моделей посвящена следующая глава **3.4**. Мы рассмотрим базовые концепции построения интерфейса программы на рис. **3.1**.

Интерфейс программы

В рабочем окне программы размещено несколько динамических блоков (рис. **3.1**), с которыми взаимодействует пользователь. Помимо типичных для современных программ разделов меню (таких как File, Edit, Options, ...) имеется панель инструментов для быстрого вызова окна создания новой модели, открытия модели, сохранения файла (Работа с моделью). Наиболее важным элементом рабочего окна является белое поле, на котором строятся геометрические примитивы и выводится решение модели. Его настройка производится с помощью кнопки (Настройки отображения), поле также меняется во время динамического переключения режимов работы приложения.

Режимы работы COMSOL

Ключевой идеей интерфейса COMSOL 3.5 является поэтапное формирование, а потом и расчет физико-математической модели. В блоке «Режимы работы приложения» первая кнопка выводит на экран панели ин-

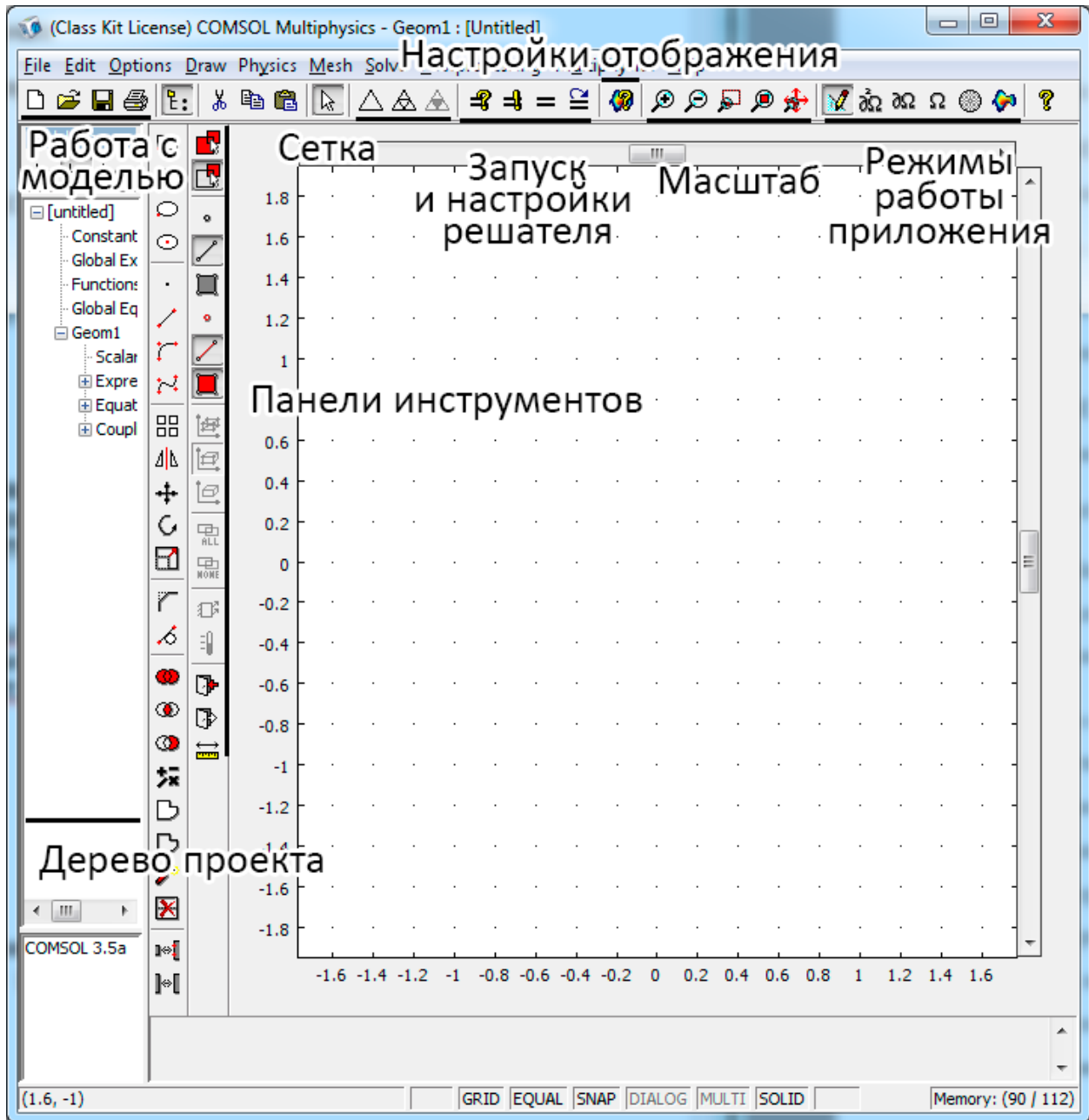


Рис. 3.1. Внешний вид рабочего окна программы COMSOL

струментов для рисования геометрии расчетной области; вторая кнопка переводит COMSOL в режим работы с узлами для задания граничных условий в точках; третья — в режим работы с линиями; четвертая — в режим работы с подобластями, либо поверхностями (для трёхмерного режима редактирования). Пятая кнопка, с изображением сетки строит для выбранных подобластей сетку и переводит рабочее поле в режим построения сетки. Последняя кнопка выводит решение, где настройка отображения вывода решения проводится с помощью кнопки «настроек отображения».

Дерево проекта отображает все объекты, граничные условия, уравнения, константы, переменные и мультифизические подмодели в виде иерархического дерева и позволяет переходить от одного объекта к другому с помощью мыши. Не стоит забывать, что для отображения каждого объекта рабочее поле переходит в соответствующий режим работы приложения.

Выход из COMSOL производится с помощью пункта Exit в меню File, либо пиктограммы креста в углу экрана. Не забывайте перед выходом из программы сохранять изменения в ваших моделях!

3.4. Выбор шаблона, уравнений модели, граничных условий. Генерация вычислительной сетки. Проведение расчетов, визуализация результатов.

Основные этапы составления модели, выполнения вычислений и анализа результата в пакете Comsol MultiPhysics можно представить схемой:

- 1. Анализ физических и химических явлений в задаче.** Большинство задач сводятся к законам сохранения/изменения набора зависимых переменных $\{u_i\}$, где под зависимыми переменными понимаются функции, например, температуры, давления, скорости течения от независимых переменных. Здесь и далее в тексте под независимыми переменными понимаются пространственные координаты $\{x_i\}$

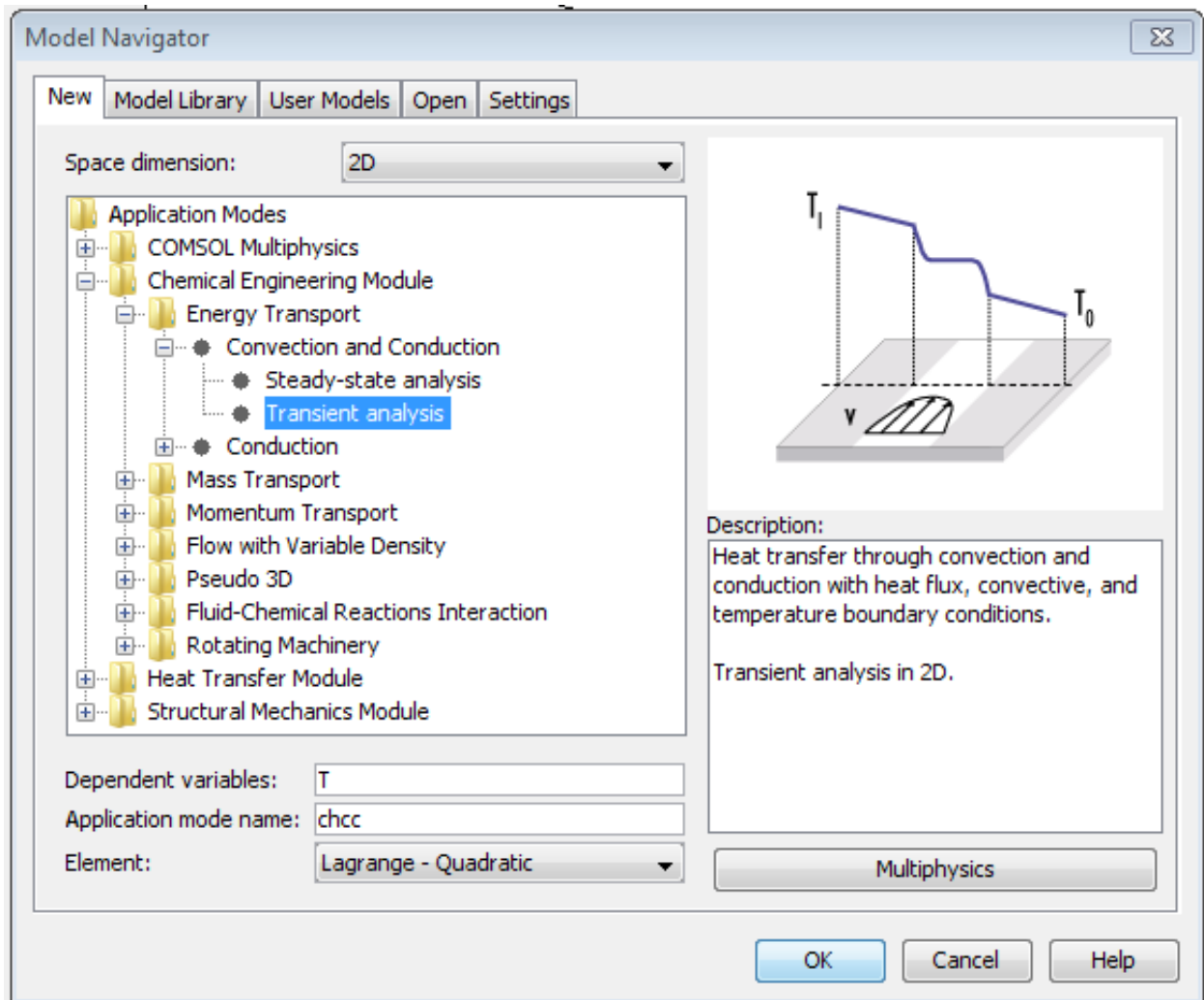


Рис. 3.2. Экранная форма «Выбор геометрии расчетной области и шаблона физической модели».

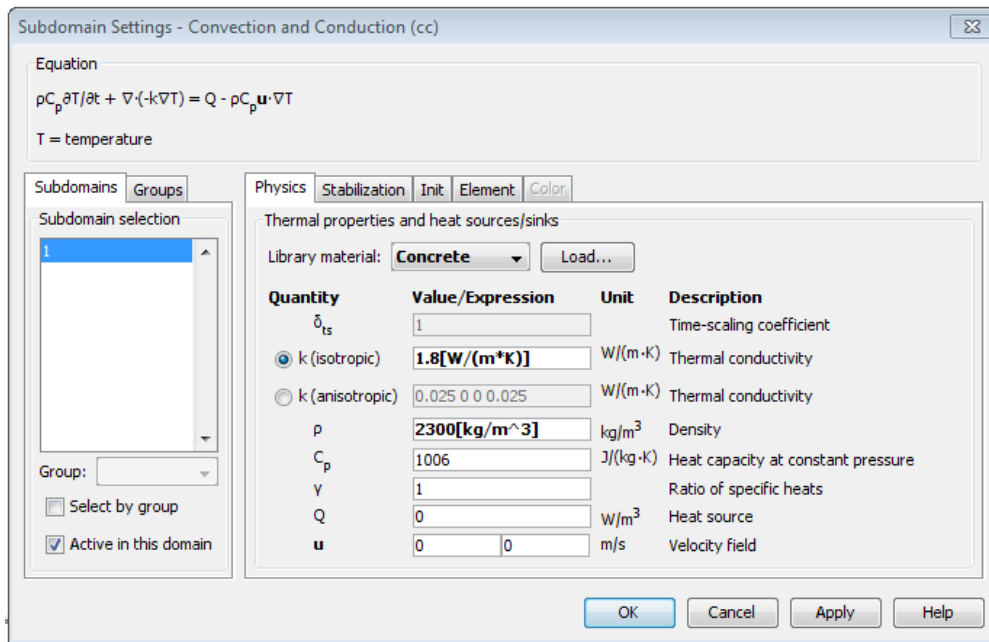


Рис. 3.3. Экранная форма «Выбор уравнений модели в расчетной области».

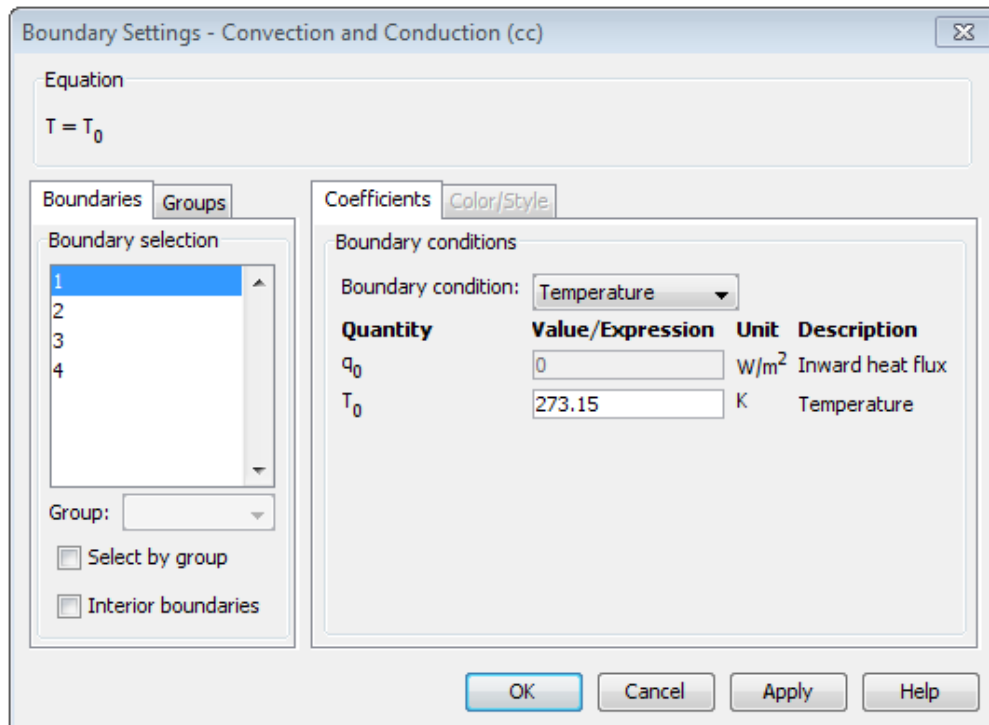


Рис. 3.4. Экранная форма «Выбор уравнений модели на границах».

и время t . При анализе важно установить общие закономерности явления, взаимосвязь зависимых переменных между собой. Если какая-то из величин сохраняется, то это накладывает на получаемое решение ограничение, упрощающее в конечном итоге решение задачи.

- 2. Выбор геометрической размерности задачи.** При создании новой модели в навигаторе моделей требуется выбрать размерность задачи среди вариантов $1D$, $2D$, $3D$, $1D\ axial$ и $2D\ axial$, рис. 3.2. Три первых опции соответствуют одно-, дву- и трехмерным задачам. Следует отметить, что эта размерность определяет только симметрию задачи, но ни в коем случае не размерность пространства, в котором наблюдается явление. Поясним это на примере расчета температуры в стене, на одной поверхности которой поддерживается постоянная (комнатная) температура, а на другой поверхности — уличная температура. Если толщина стены много меньше ее поперечных размеров, то можно утверждать, что профиль распределения температуры внутри стенки не будет зависеть от координат исследуемых точек вдоль стены. Температура будет зависеть от расстояния до внутренней и внешней поверхностей, т.е. от координаты вдоль направления, перпендикулярного поверхности стены. Во всех плоскостях, параллельных плоскости стены, температура будет одинакова между внутренней и внешней стенками. Такая ситуация характеризуется наличием трансляционной симметрии решения в двух направлениях. Следовательно, достаточно решить уравнение, зависящее только от одной пространственной переменной, т.е. в $1D$ геометрии. Аналогично задачи с трансляционной симметрией в одном направлении могут решаться в $2D$ геометрии. Если задача не обнаруживает ни одного из видов трансляционной симметрии, то ее следует решать в $3D$ геометрии. Другой тип симметрии задачи и решения определяется вращательной симметрией. Напри-

мер, распределение тепла в однородном цилиндрическом проводнике не зависит от полярного угла и положения точки вдоль оси, а зависит только от расстояния до оси проводника. В этом случае требуется использовать режим *1D axial*. Наконец, если решение не зависит от полярного угла, но меняется при смещении вдоль оси, то этот случай моделируется с использованием *2D axial* геометрии.

3. **Выбор физической модели/моделей.** Физическая модель определяет зависимую переменную и тип дифференциального уравнения. Физические модели (application modes) сгруппированы по модулям, рис. 3.2. Модуль «COMSOL MultiPhysics» содержит набор базовых физических моделей во всех областях. Модули теплопередачи «Heat Transfer Module», химических технологий «Chemical Engineering Module», механики материалов «Structural Mechanics Module» содержат специализированные шаблоны, сгруппированные для каждой предметной области. Внутри каждого модуля модели разбиты по группам, нацеленным на решение определенного класса задач, например, по тепло- и массопереносу, гидродинамике, механике материалов и т.д. Последним этапом является выбор стационарной (не зависящей от времени) или нестационарной (зависящей от времени) модели. Если на этом этапе известны дополнительные физико-химические процессы, присутствующие в исследуемой проблеме, то они могут быть сразу добавлены для получения мультифизической модели. Если эта информация отсутствует, то расширение модели может быть произведено позже. Выбор модели автоматически определяет набор u_i зависимых переменных, которые входят в уравнения модели. Для расчета трехмерных течений вязких сред это будут u, v, w, p — три компоненты вектора скорости течения и давление соответственно.
4. **Геометрическое моделирование расчетной области.** При реше-

нии любой задачи всегда ставится цель поиска решения в некоторой расчетной области. Как правило, размер и форма расчетной области естественным образом определяются исследуемой проблемой. Например, если исследуется течение жидкости в некотором сегменте гидравлической системы, то стенки системы ограничивают расчетную область только внутренней полостью системы, где изучается поле скоростей течения. Другие задачи, напротив, предполагают поиск решения в бесконечных или полубесконечных областях. В данном случае выбирается расчетная область конечного размера, но на границах этой области задаются граничные условия, имитирующие решение для (полу)бесконечной геометрии. Геометрическое моделирование расчетной области осуществляется с помощью набора примитивов, таких как прямоугольник, эллипс, точка, ломаная, кривые Безье 2 и 3 порядков в 2D расчетной области. В 3D области имеются трехмерные аналоги этих примитивов. Комбинируя использование различных примитивов, удается построить сложные объекты с многочисленными гранями и поверхностями. После построения геометрии расчета требуется произвести генерацию конечно-элементной сетки, которая разбивает расчетную область на множество небольших конечных элементов, описывающих решение задачи в выбранных точках, называемых узлами. Эта операция в литературе часто определяется как операция дискретизации, когда происходит переход от поиска решения в непрерывно изменяющейся области независимых переменных к решению задачи только в выбранном множестве точек — узлах. При визуализации вычислительная сетка «покрывает» расчетную область неравномерно, образуя сгущение углов вблизи границ или углов, где решение меняется быстрее, чем это происходит вдали от границ. Генерация эффективной сетки является большим искусством, но используемые в

COMSOL алгоритмы достаточно универсальны и дают хороший для первого приближения результат.

5. **Определение физических параметров процессов и граничных условий.** Выбор физической модели или моделей в п. 3 определяет уравнения и соответственно физико-химические законы, используемые при решении задачи. Тем не менее, следует задать физико-химические параметры, такие как плотность ρ , вязкость η , силу давления p , чтобы решение соответствовало именно той системе/процессу, которые изучаются в работе. Часто теплофизические параметры зависят от температуры и давления. Учет этих зависимостей производится автоматически, если использовать библиотеку материалов. Для этого во вкладке *Subdomain Settings* производится загрузка параметров для выбранного материала, рис. 3.3. Следует отметить, что расчетная область может содержать несколько подобластей (subdomains), представленных разными материалами. В этом случае осуществляется выбор соответствующих параметров для каждой подобласти. Вторым принципиально важным шагом является определение граничных условий на каждой из границ расчетной области, рис. 3.4. Как известно из теории задач в частных дифференциальных производных [14], единственное решение дифференциального уравнения существует только при выборе граничных условий I, II или III рода. В пакете COMSOL они обозначены как граничные условия Дирихле, условия Неймана и обобщенные условия Неймана соответственно. Выбор граничного условия производится на основе анализа физических условий, возникающих на каждой из границ расчетной области. Граничные условия Дирихле (I рода) $u = f(\vec{r}, t)$ определяют значение зависимой переменной u как функцию независимых переменных (координат и времени). Граничные условия Неймана (II рода) $\nabla u = g(\vec{r}, t)$

задают плотность потока изучаемой величины, например, потока заряда, массы и тепловой энергии, как функцию независимых переменных. Из физических законов плотность потока часто пропорциональна градиенту зависимой переменной, поэтому в модели может задаваться как сама плотность потока, так и производная вдоль направления, перпендикулярного границе. Условия III рода $h(u, \nabla u) = s(\vec{r}, t)$ содержат как саму зависимую переменную, так и ее градиент, что определяет распространенный механизм обмена, когда поток зависит от разности значений переменной на границе и вне расчетной области.

6. **Численное решение задачи.** После выполнения предыдущих пунктов реализуется этап вычислений, который позволяет получить решение задачи в зависимости от независимых переменных. Для стационарных задач такое решение не меняется во времени, и поэтому оно одно. Для нестационарных задач рассчитывается набор решений, каждое из которых соответствует определенному моменту времени. Процесс решения нередко сопровождается ситуацией отсутствия сходимости решения, когда решение не может быть получено или его точность ниже ожидаемого предела. В таком случае требуется критически проанализировать уравнения модели, выбор параметров и граничных условий. Если такая проверка не устраняет проблемы, то следует дискретизировать расчетную область сеткой с меньшими конечными элементами или повысить порядок интерполяционных функций.
7. **Визуализация и анализ результатов.** Результатом решения, как правило, являются скалярные или векторные поля, определяемые значениями зависимых переменных в узлах сетки. За счет использования метода интерполяции удастся определять значения исследуемой функции не только в узлах, но также в произвольной точке расчетной области. Визуальное представление результатов с помощью цветовой

шкалы позволяет быстро проанализировать значения функции в различных точках исследуемой области (см. пример расчета тепловых полей при лазерной обработке на рис. 4.3). Изолинии/изоповерхности графически представляют скорость изменения функции, когда линии расположены вблизи точек с высоким значением градиента. Критическое или циклическое поведение системы нередко наблюдается вблизи точек минимума и/или максимума. Этап анализа результатов является наиболее важным с точки зрения практической ценности результатов: последующего сопоставления с экспериментальными данными, объяснения закономерностей процесса, изменения параметров или геометрии устройства.

8. **Уточнение модели.** Получение искомого решения проблемы может произойти не с первой попытки. Иногда требуются серии расчетов при различных значениях параметров. Такие расчеты и сравнение с имеющимися экспериментальными и аналитическими моделями позволяет проверить степень адекватности модели, т.е. выяснить, насколько точно модель описывает исследуемое явление и его физические характеристики. Проверку модели при условиях/параметрах, соответствующих экспериментальным или теоретическим данным, необходимо рассматривать как необходимый элемент процесса математического моделирования.

Описание приемов работы с пакетом COMSOL MultiPhysics содержится в технической документации данного программного продукта [20]. Руководство «Quick Start and Quick Reference» описывает основные навыки работы с пакетом и позволяет понять принципы построения моделей. Руководство «User's Guide» [19] подробно раскрывает все этапы разработки моделей, описанные выше.

3.5. Программирование произвольных задач в коэффициентной и общей форме. Граничные условия Дирихле и Неймана. Слабая форма. Принципы выбора метода программирования.

Как указано выше, COMSOL позволяет программировать задачи и задавать граничные условия не только в коэффициентной форме (см. раздел 3.3), как описано в также в разделе 3.4. Помимо этого, для каждой задачи в коэффициентной форме можно задавать граничные условия.

В теории дифференциальных уравнений начальные и граничные условия — дополнение к основному дифференциальному уравнению (обыкновенному или в частных производных), задающее его поведение в начальный момент времени или на границе рассматриваемой области соответственно. Обычно система дифференциальных уравнений имеет не одно решение, а целое их семейство. Начальные и граничные условия позволяют выбрать из него одно, соответствующее реальному физическому процессу или явлению. Также выбор граничных условий влияет на способ дискретизации и на окончательный вид решаемой матричной системы уравнений.

Граничные условия 1 рода: задача Дирихле

Задача Дирихле, первая краевая задача — краевая задача с заданными граничными условиями для значения искомой функции u на границе области G .

$$u|_{\partial G} = u_0(x), \quad (3.9)$$

где ∂G — граница области, на которой существуют данные граничные условия, u_0 — граничное условие, значение функции на границе области как функция координаты x в 1D геометрии.

Граничные условия 2 рода: задача Неймана

Задача Неймана, вторая краевая задача — краевая задача с заданными граничными условиями для производной искомой функции на границе области — так называемые граничные условия второго рода. По типу области задачи Неймана можно разделить на два типа: внутренние и внешние.

$$\left. \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} \right|_{\partial G} = u_1(x), \quad (3.10)$$

где \vec{n} — внешняя единичная нормаль к границе области G , u_1 — граничное условие, значение производной функции на границе области.

COMSOL Multiphysics позволяет выбирать любой тип граничных условий в применении к плоскостям, ребрам или точкам (любым границам геометрии), для каждого из мультифизических режимов по-отдельности. В левом верхнем углу окна выбора граничных условий (см. рис. 3.5) отображено уравнение, для которого записываются граничные условия. Следует помнить, что формулировка уравнения имеет значение, так же как и направление координатных осей.

Слабая форма

COMSOL позволяет создавать очень сложные модели СДУ на границах, ребрах, а также использовать смешанные граничные условия и производные по времени. Для таких задач предусмотрен режим под названием «слабая форма» (см. раздел 3.3).

Название «слабая форма» может ввести в заблуждение, тем не менее именно слабая форма является самой универсальной в пакете COMSOL. Этот термин заимствован из математики, хотя в данном контексте подразумевается ослабление условий, предъявляемых к решению при переходе к интегральному виду уравнения. Режим слабой формы включает:

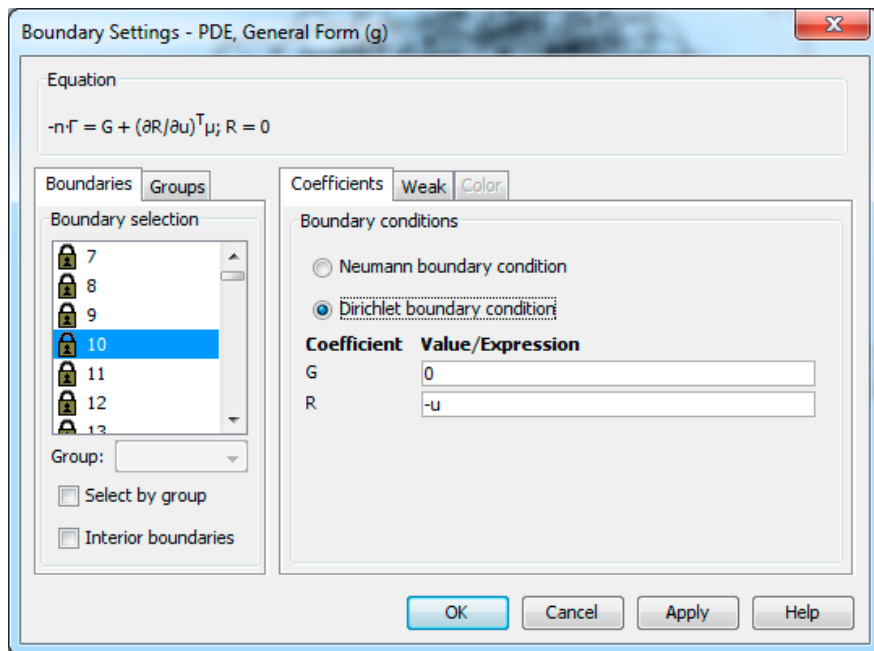


Рис. 3.5. Экранная форма «Выбор типа граничных условий». Кроме выбора самих граничных условий есть возможность выбрать режим отсутствия потока, либо задать симметричные граничные условия.

- Решение сильно нелинейных задач и локально неравновесных систем, в которых нужен контроль точных значений Якобианов в конечноэлементной сетке.
- Ввод уравнений, полученных из принципов сохранения энергии в компактной форме (такие уравнения возникают при решении задач по структурной механике).
- Изменение стандартных ограничений коэффициентной формы на границах, добавление трения и решение контактных задач.
- Создание моделей с ДУ на границах.
- Использование тестовых операторов для вариационных задач и решения задач оптимизации.

Включение слабой формы производится на этапе создания мультифизической подзадачи или всей модели, но отдельные элементы, так называемые «Weak contributions», можно использовать и при работе в коэффициентной форме.

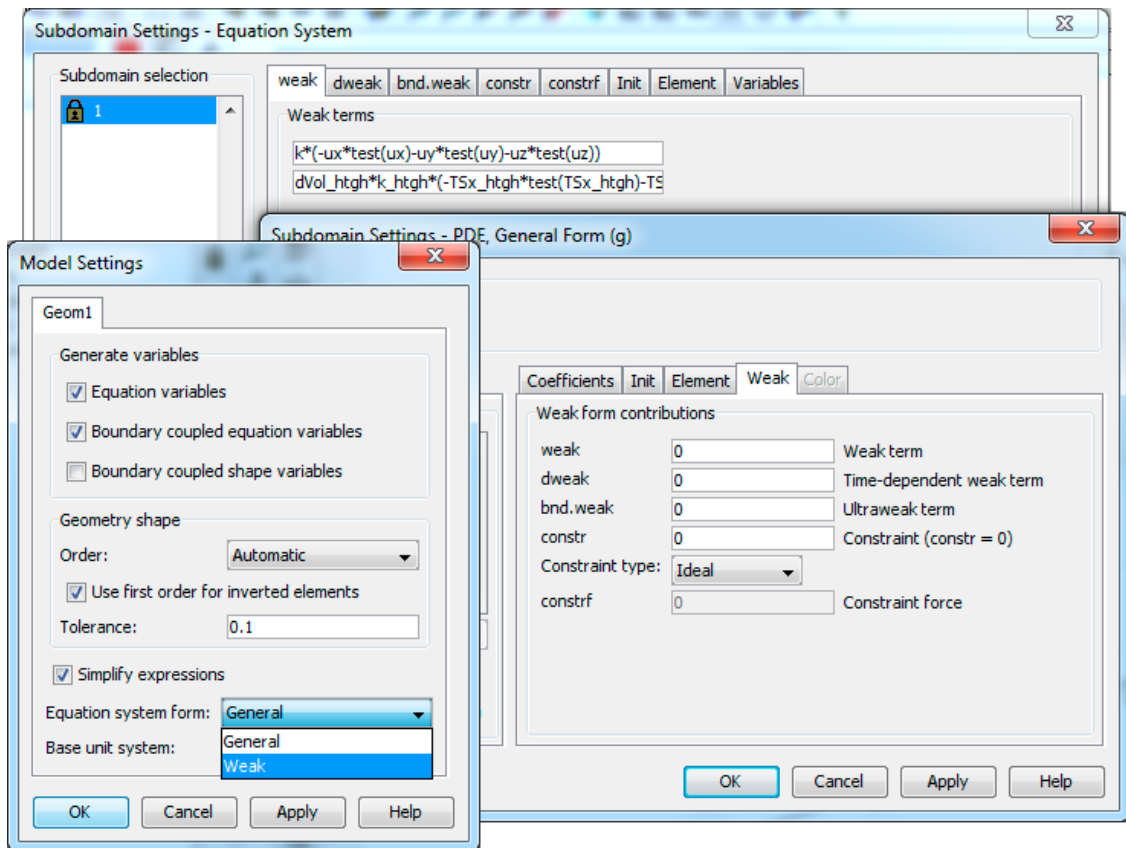


Рис. 3.6. Несколько форм в режиме «слабой формы».

Кроме того, слабая форма также позволяет менять уравнения самой модели (см. рис. 3.6), а также использовать режим «решения в слабой форме» для сильно нелинейных задач.

4. Расчет поля температур и процессов переноса при лазерном спекании порошков

Современный подход к разработке новых технологий основан на комбинировании различных методов, когда высокоточные экспериментальные измерения сочетаются с многосторонним теоретическим анализом. В связи с этим для достижения поставленных целей, в любой работе важно уметь использовать средства компьютерного моделирования. В этой главе дано теоретическое описание процесса лазерной закалки, как примера сложной комплексной численной модели. Как и в случае с экспериментальными данными, сочетание нескольких методов позволяет повысить точность анализа и подтвердить достоверность полученных результатов, сопоставляя результаты моделирования, полученные с применением моделей, основанных на разных принципах.

Большинство разработанных в научных и технических областях моделей строится на использовании уравнений баланса (сохранения) некоей физической величины, когда исследуется значение механической или внутренней энергии, импульса или количества вещества в некоторой области, выделенной для рассмотрения. Тогда полное значение этой величины в области сохраняется, если система замкнута, или изменяется пропорционально потоку указанной величины через границы области. В этом смысле II закон Ньютона для поступательного движения, уравнение диффузии, I начало термодинамики и многие другие относятся к уравнениям рассматриваемого типа. Часто в некоторых областях знаний, например, теоретической механике, говорят о применении уравнений движения, что является синонимом понятия уравнения баланса.

4.1. Численное моделирование фазовых переходов в пакете COMSOL MultiPhysics

В практической работе специалист нередко сталкивается со сложными физико-химическими явлениями, когда реализуются несколько взаимосвязанных процессов. Примером такого рода может служить задача протекания электрического тока в проводнике, когда, как известно, наблюдается нагрев проводника благодаря выделению джоулева тепла. Изменение температуры влияет на электрическое сопротивление, что, в свою очередь, приводит к другому значению электрического тока в системе. Таким образом, температура и величина электрического тока оказываются взаимозависимыми параметрами. В данной ситуации вместо одного уравнения требуется решать систему уравнений, где уравнения для температуры и плотности тока связаны зависимостью электрического сопротивления от температуры. Если далее применять разные зависимости для проводников и полупроводников, то характер всего процесса будет сильно зависеть от природы материала.

Развитие данного компьютерного инструмента сделало метод математического моделирования доступным для широкого круга инженеров и исследователей, когда не требуется досконального знания языков программирования и методов построения физико-математических моделей. Эта доступность достигнута за счет использования *шаблонов* физических моделей, что более подробно рассмотрено в разделе 3.4. Хотя такой подход значительно облегчает разработку модели, на пользователе всегда остается ответственность за правильный выбор параметров внутри расчетной области, а также на ее границах.

После выполнения расчета пакет предоставляет возможность проанализировать результаты путем визуализации полей значений зависимых переменных, изолиний/изоповерхностей, линий тока в гидродинамике и т.д.

Для получения расширенных данных могут применяться операции интегрирования вдоль поверхности или контура. Данная возможность важна для расчета разнообразных интегральных характеристик объектов, как, например, коэффициент сопротивления тела при движении в вязких средах, сила нагрузки, оказываемой на элемент упругой конструкции или тепловой поток через заданную стенку теплообменника. Универсальность в определении уравнений и методах представления результатов позволяет исследовать мультифизические (содержащие несколько взаимосвязанных процессов) задачи в областях акустики, проектирования био- и химического производств, электромагнетизма, геофизики, микроэлектроники, квантовой механики, механики материалов, процессов переноса и многих других. Таким образом, освоение метода мультифизического моделирования на примере лазерной обработки материалов позволяет использовать этот подход для анализа и других проблем.

Более подробно о работе в математическом пакете COMSOL вы можете прочитать в разделе [3.4](#).

4.2. Расчет тепловых полей при лазерной обработке сплошных и пористых сред

4.2.1. Физико-математическая модель теплопереноса в пористых системах

Математическая модель теплопереноса в пористых средах с фазовыми переходами сформулирована для описания процессов высокоскоростного оплавления порошкового слоя бинарных металлических сплавов с перитектическим превращением [15]. Моделирование нестационарных тепловых полей выполнено с помощью модели двухфазной зоны [12, 3, 8], расширенной на случай высоких скоростей нагрева среды и переноса тепла по меха-

низмам теплопроводности и радиации. При формулировке системы уравнений были использованы следующие физические допущения:

- скорости охлаждения сплава $V_c > 10^3$ К/с, поэтому при описании кинетики затвердевания на макроскопическом масштабе пренебрегается зональной ликвацией компонентов. Следовательно, обосновано использование теплового уравнения квазиравновесной зоны;
- при наблюдаемых скоростях охлаждения перитектическая реакция подавлена, поэтому при $T < T_P$, где T_P — температура перитектической кристаллизации, перитектическая фаза образуется непосредственно из жидкости;
- механизмы теплопереноса учитывают: (а) теплопередачу по диффузионному механизму, (б) проникновение в пористую среду лазерного излучения на стадии нагрева, (в) испарение металла с поверхности образца, (г) радиационное охлаждение поверхности, (д) выделение скрытой теплоты фазового перехода.

С учетом принятых допущений уравнение теплопроводности может быть сведено к тепловому уравнению модели двухфазной зоны [12, 8]:

$$\Psi(T) \frac{\partial T}{\partial t} = a(\varepsilon_V, \varepsilon_\sigma) \nabla^2 T + F(q_L), \quad (4.1)$$

где Ψ — безразмерная эффективная теплоемкость, учитывающая выделение скрытой теплоты фазового перехода; T — абсолютная температура; t — время; a — коэффициент температуропроводности; ε_V и ε_σ — характеристики пористости порошкового слоя, определяемые как объемная доля пор и доля пор в плоском сечении соответственно; $F = \alpha q_L$ — интенсивность объемного источника тепла, связанная с мощностью лазерного воздействия на различной глубине y порошкового слоя. Здесь q_L и α — плотность потока

энергии лазерного излучения и коэффициент поглощения светового излучения в локальном объеме порошкового слоя соответственно. Коэффициент α зависит как от температуры, так и фазового состава локального объема, определяя в модели изменение глубины проникновения лазерного излучения при оплавлении частиц и изменении морфологии пористого тела. Поскольку в работе не удалось измерить эту зависимость экспериментально, было выбрано оценочное значение $\alpha = \text{const}$ на основании данных о глубине спеченного слоя при различных режимах обработки. Геометрия расчетной области Ω представлена на рис. 4.1, где порошковый слой и подложка представлены подобластями Ω_P и Ω_S . Поглощение при проникновении лазерного излучения в вещество характеризуется законом, функционально близким к закону Бугера для оптически однородных сред, записанным для выбранной системы координат (рис. 4.1) в виде:

$$q_L(t, x, y) = q_{L0}(t, x)|_{y=0} \exp(-\alpha y), \quad (4.2)$$

где $q_{L0}(t, x)|_{y=0}$ — плотность потока энергии облучения на поверхности образца. Зависимость температуропроводности от пористости вычислялась уравнением, сходным с подходом [18]:

$$a = a_0 \frac{1 - \varepsilon_\sigma}{1 - \varepsilon_V}, \quad (4.3)$$

где a_0 — температуропроводность сплошной среды.

Функция Ψ безразмерной теплоемкости в общем виде определяется выражением $\Psi(T) = 1 + \theta (dS/dT)$, где θ — адиабатическая температура, S — объемная доля жидкой фазы в локальном объеме, теплоемкость которого вычисляется (2.54). В работе использовалось выражение для Ψ , полученное авторами [8] в приближении малой зональной ликвации примесных компо-

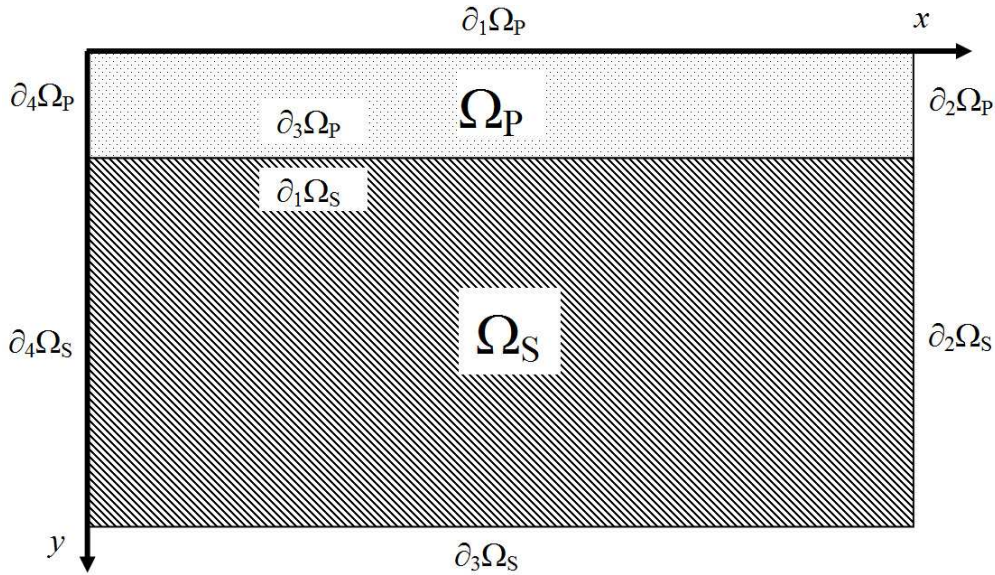


Рис. 4.1. Расчетная область Ω разбита на две подобласти Ω_P и Ω_S , соответствующие порошковому слою и подложке. Граничные условия определяются уравнениями (4.5)–(4.12).

нентов:

$$\Psi = 1 - \frac{\theta}{(1-k)C\varphi'(C)} \exp \left\{ - \int_{C_0}^C \frac{dC}{(1-k)C} \right\}. \quad (4.4)$$

где C – концентрация примесного (неосновного) компонента, $k = C_S/C_L$ – коэффициент распределения, получаемый из фазовой диаграммы и равный отношению концентраций C_S и C_L на границе раздела «твердая фаза» – «расплав», $T_L = \varphi(C)$ – уравнение, описывающее зависимость температуры ликвидуса T_L (линии фазового равновесия, определяемой диаграммой состояния сплава) от концентрации. Для линейной фазовой диаграммы температура ликвидуса задается $T_L = T_A + mC$, где T_A – температура кристаллизации основного компонента, m – тангенс угла наклона линии ликвидуса. При больших скоростях движения фронта затвердевания, наблюдаемых в экспериментах по лазерному оплавлению, необходимо учитывать релаксационные процессы в диффузионном переносе примеси и зависимости k и m от степени отклонения от термодинамического равновесия как на поверхности раздела, так и в объеме расплава [21]. В данной работе использовались

равновесные значения параметров k и m , полученные из равновесных фазовых диаграмм [2]. Расширение модели с учетом локально-неравновесной диффузии является предметом дальнейших исследований.

Учет теплового воздействия лазерного излучения в уравнении (4.1) производится объемным источником F , зависящим от потока $q_L(t, x, y)$, определяемого, в свою очередь, потоком $q_{L0}(t, x)$ тепла на поверхности образца в уравнении (4.2). Функция $q_{L0}(t, x)|_{y=0}$ задается периодической по времени и зависящей от пространственных координат функцией, отражающей как импульсный характер лазерного излучения, так и распределение плотности излучения внутри лазерного луча:

$$q_{L0}(t, x)|_{y=0} = \frac{P_{act}}{R_b} g(x) \xi(t), \quad g(x) = g_u(x) \text{ или } g_n(x), \quad (4.5)$$

$$g_u(x) = (1/2)H(|x - X_b| - R_b), \quad (4.6)$$

$$g_n(x) = \frac{R_b^2}{(2\pi\sigma_b^2)^{1/2}} \exp\left(-\frac{(x - X_b)^2}{2\sigma_b^2}\right), \quad (4.7)$$

$$\xi = H(\tau_2 - t \bmod \tau_1). \quad (4.8)$$

где P_{act} – фактическая мощность облучения поверхности, $g(x)$ – функция распределения плотности потока в лазерном луче, ξ – функция П-образной модуляции лазерного излучения, R_b , V_b , X_0 и $X_b = X_0 + V_b t$ – радиус, скорость, начальное положение и текущая координата центра лазерного пучка соответственно, σ_b – стандартное отклонение, τ_1 и τ_2 – время (период) между импульсами и продолжительность одного импульса, H – функция Хэвисайда. Функция g задается в виде однородного или Гауссова распределения выбором функций g_u или g_n соответственно в зависимости от характеристик системы фокусировки. Нормировка функции g осуществляется из условия, что 90% мощности лазерного излучения приходится на элемент поверхности, ограниченный эффективным радиусом R_b лазерного луча. На рисунке

4.2 представлены графики функций ξ , g_u и g_n , модулирующих тепловой поток относительно временной и пространственных координат.

На поверхности $\partial_1\Omega_P$ образца происходит конвективное и радиационное охлаждение в соответствии с [22]

$$\vec{n} \cdot \vec{q}|_{\partial_1\Omega_P} = h_{\text{эфф}}(T - T_{\text{окр}}) + \epsilon\epsilon_{SB}(T^4 - T_{\text{окр}}^4), \quad (4.9)$$

где ϵ – коэффициент поверхностной эмиссии, $\epsilon_{SB} = 5.67 \times 10^{-8}$ Вт м⁻² К⁻⁴ – константа Стефана-Больцмана, $T_{\text{окр}}$ – температура окружающей среды, а вектор нормали \vec{n} направлен от порошкового слоя в газовую среду. Испарение металла с поверхности учтено в модели посредством эффективного коэффициента $h_{\text{эфф}}$ теплообмена:

$$h_{\text{эфф}}(T) = h_{\text{конв}} + (1/2)(h_{\text{кип}} - h_{\text{конв}}) \tanh((T - T_{\text{кип}})/\Delta T_h), \quad (4.10)$$

где переход от конвективного охлаждения поверхности, определяемого коэффициентом $h_{\text{конв}}$ теплообмена за счет конвекции в газовой среде, к охлаждению за счет испарения, определяемого $h_{\text{кип}}$, происходит вблизи температуры кипения $T_{\text{кип}}$ в интервале температур ΔT_h . Учет $h_{\text{конв}}$ от скорости продувки камеры в дальнейшем может быть уточнен теплообмен при лазерной обработке в инертной среде. Граничные условия на нижней поверхности подложки задаются

$$\vec{n} \cdot \vec{q}|_{\partial_3\Omega_S} = h_{\text{конв}}(T - T_{\text{окр}}). \quad (4.11)$$

Граница раздела порошкового слоя и подложки характеризуется непрерывностью температуры и теплового потока:

$$T|_{\partial_3\Omega_P} = T|_{\partial_1\Omega_S}, \quad k(\partial T/\partial n)|_{\partial_3\Omega_P} = k(\partial T/\partial n)|_{\partial_1\Omega_S}. \quad (4.12)$$

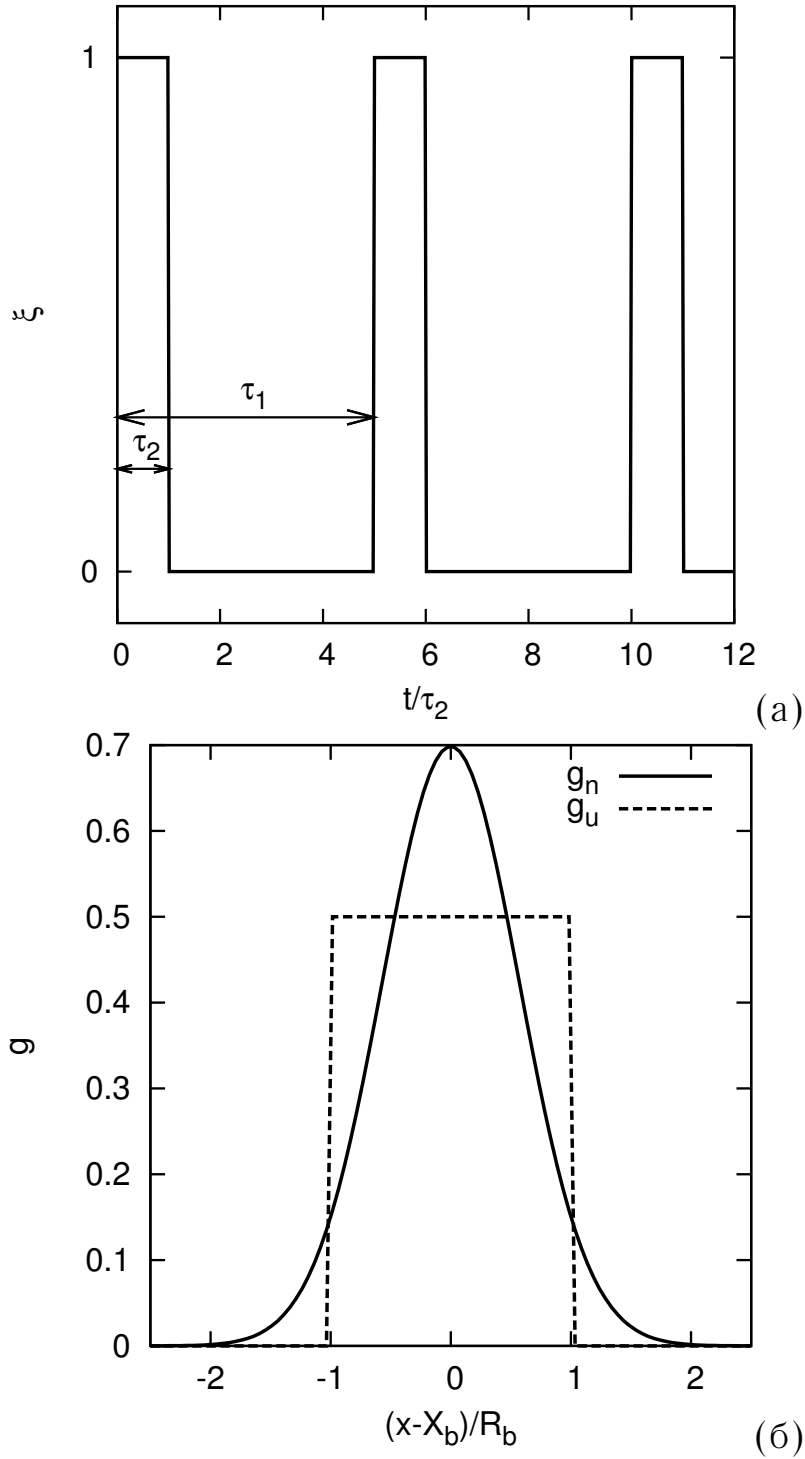


Рис. 4.2. (а) Модулирование потока лазерного луча при импульсной обработке функцией ξ , зависящей от безразмерного времени t/τ_2 , где τ_1 и τ_2 — время (период) между импульсами и продолжительность одного импульса соответственно. (б) Распределение g плотности теплового потока как функция безразмерного расстояния $(x - X_b)/R_b$ от центра лазерного луча. Функция g может задаваться в виде однородного g_u или нормального g_n распределения.

На вертикальных границах $\partial_2\Omega_P$ и $\partial_4\Omega_P$ порошкового слоя и границах $\partial_2\Omega_S$ и $\partial_4\Omega_S$ подложки задаются периодические граничные условия, аналогичные уравнениям (4.12), когда температура и потоки на противоположных границах приравниваются для уменьшения расчетного времени. Начальные условия принимаются в виде

$$T|_{\Omega_P, \Omega_S} = T_{\text{нач}}, \quad (4.13)$$

где $T_{\text{нач}}$ — температура, до которой предварительно нагрет образец.

Таким образом, система уравнений (4.1)–(4.13) описывает процесс импульсной лазерной обработки порошкового слоя и является замкнутой. Численная модель была реализована в коммерческом вычислительном пакете COMSOL MultiPhysics, предназначенном для решения физических и инженерных задач. Нестационарное уравнение теплопроводности для поставленной краевой задачи рассчитывалось методом конечных элементов.

4.2.2. Принципы построения компьютерной модели

Как отмечено выше, в расчетах мы переходим от рассмотрения явления в неограниченном пространстве к его изучению в пределах некоторой расчетной области с конечными размерами, характеризуемой наличием объемной части и границ, являющихся поверхностями в 3D, кривыми в 2D и точками в 1D задачах. Размеры расчетной области должны выбираться таким образом, чтобы по возможности максимально полно описать явление, выбирая расчетную область значительно больше масштабов изучаемого явления. Если это невозможно, то следует уделить внимание точности задаваемых граничных условий, так как это, в конечном итоге, определяет погрешность получаемого решения.

При моделировании лазерной обработки характерным простран-

ственным масштабом L является наибольшая протяженность области материала, подвергаемой нагреву в процессе облучения. Этот масштаб может быть определен на основании теоретических оценок, включающих мощность излучения, скорость сканирования и теплофизические свойства материала. Часто параметр L не меняется со временем, что позволяет исследовать такую проблему очень эффективно, переходя в движущуюся систему координат, связанную с центром лазерного пятна. Тем не менее, в ряде случаев может происходить увеличение параметра L в результате постепенного нагревания образца.

Вторая особенность построения компьютерной модели заключается в необходимости предварительной оценки временных масштабов процесса. Временной масштаб в модели лазерной обработки будет определяться двумя параметрами. Первый параметр — это время τ_2 воздействия излучения на вещество, которое значительно отличается для непрерывного и импульсного лазеров. В первом случае это период порядка сотен наносекунд, во втором случае — период бесконечно большой. Следовательно, при импульсной обработке модель должна выполнять расчеты с очень малым интервалом по времени во время действия лазерного излучения и с гораздо большим интервалом между лазерными импульсами. Такой гибкий алгоритм расчета достигается при использовании адаптивного шага по времени, уменьшающегося при возникновении «быстрых» и увеличивающегося при протекании «медленных» процессов. Вторым параметром, определяющим шаг по времени, это характерное время $\tau_{\text{тп}}$ распространения теплового поля в пределах пространственного масштаба L . Этот параметр зависит от коэффициента температуропроводности, если теплоперенос осуществляется по механизму диффузии (т.е. теплопроводности), как это происходит в твердых телах. При рассмотрении теплопереноса в жидких и газообразных системах часто более существенное влияние оказывает конвекция, определяемая скоростью

течения среды.

4.2.3. Параметры управления лазерным спеканием

Управление лазерным спеканием осуществляется с помощью параметров, приведенных в табл. 4.1 [13]. В списке управляющих параметров приведены как варьируемые параметры процесса, определяемые режимами обработки и способом подготовки порошка, так и теплофизические параметры, зависящие от свойств конкретной порошковой смеси или характеристик установки. Далее проанализируем влияние первой группы параметров, состоящей из: 1) фактической мощности излучения P_{act} , 2) частоты генерации f , 3) радиуса пятна R_b , 4) скорости движения луча V_b , 5) коэффициента поглощения α .

Мощность P_{act} подбирается в зависимости от температуры кипения материала порошка, коэффициента температуропроводности, формы и среднего размера частиц, чтобы предотвратить горение образца. Мощность излучения оказывает определяющее значение на динамику плавления частиц. Количественно это характеризуется количеством жидкой фазы, образовавшейся в результате действия импульса. Оптимальное значение мощности эмперически подбирать крайне сложно, т.к. необходимо достигать состояния, при котором количество жидкой фазы в порошковом слое составляет около 15%, но при этом недопустим перегрев расплава, приводящий к образованию кипящего слоя.

Расчеты не выявили существенного эффекта частоты f на процесс сплавления частиц, поскольку период импульсов много меньше характерного времени релаксации теплового поля. Фактически частота определяет количество импульсов излучения, приходящихся на одну точку порошкового слоя при заданной скорости движения луча лазера, т.е. определяет количество подведенной энергии в порошковый слой. Однако следует учиты-

вать специфические особенности генерации лазерного излучения. Частота следования импульсов оказывает влияние на распределение генерируемой мощности в течение импульса: с уменьшением частоты резко растет пиковое значение мощности. Заниженное значение частоты приведет к резкому перегреву области и интенсивному кипению поверхности порошка, при котором наблюдается существенное снижение доли образовавшейся жидкой фазы. Увеличение частоты приводит к более равномерному прогреву порошкового слоя, при этом резко сокращаются скорости нагрева и охлаждения образцов. Поверхность частиц уже не оплавляется, так как тепловая энергия эффективно отводится в объем образца. При этом также наблюдается сокращение доли образовавшейся жидкой фазы.

Скорость движения луча V_b в совокупности с частотой импульсов влияет на количество импульсов, приходящихся в одну точку. Фактически скорость сканирования выбирается, исходя из температуры плавления компонентов: для более тугоплавких материалов необходимо уменьшать скорость сканирования и, наоборот, для легкоплавких материалов — увеличивать. Расчеты показали интересную зависимость глубины l спеченного слоя от величины V_b . Изменение скорости в диапазоне от 50 до 150 мм/с приводит к уменьшению l с 95 до 50 микрон. При этом продольный размер зоны оплавления на поверхности порошкового слоя снижается с 225 до 150 мкм. Таким образом, скорость сканирования является эффективным методом управления параметрами процесса, поскольку позволяет изменять условия спекания порошка и, соответственно, скорости кристаллизации, что оказывает влияние на окончательную микроструктуру образца.

Коэффициент α характеризует глубину проникновения излучения в порошковый слой и зависит от гранулометрического состава частиц и плотности насыпки. Этот параметр в конечном счете определяет окончательную пористость образовавшегося слоя. Коэффициент α проникновения позво-

Таблица 4.1. Управляющие параметры лазерной обработки

№	параметр, размерность	обозн.	значение
1	мощность лазерного излучения, Вт	P_{act}	10
2	частота генерации импульсов, кГц	f	32
3	эффективный радиус зоны лазерного воздействия, мкм	R_b	10
4	скорость движения луча, см/с	V_b	10
5	продолжительность одиночного импульса, нс	τ_2	100
6	максимальная плотность потока энергии во время импульса, Вт/м ²	J_0	$1,5 \times 10^{13}$
7	температура окружающей среды, К	$T_{окр}$	293
8	коэффициент поверхностной эмиссии	ϵ	0,4
9	коэффициент поглощения излучения в объеме порошка, 1/м	α	5×10^4
10	конвективный коэффициент теплопередачи на внешней поверхности порошкового слоя, Вт/(м ² К)	$h_{конв}$	50
11	эффективный коэффициент теплоотдачи на поверхности при кипении расплава, Вт/(м ² К)	$h_{кип}$	10000

ляет изменять глубину l в диапазоне от 80 до 140 мкм при $V_b = 50$ мм/с. Тем не менее, этот параметр зависит от пористости подготовленной смеси и коэффициента поглощения излучения поверхностью частиц порошка, т.е. от параметров, плохо регулируемых экспериментально. По этой причине оптимальным является использование V_b в качестве основного управляющего параметра, а величина α должна обязательно включаться в модель управления в качестве свободного параметра, оцениваемого из экспериментальных данных.

4.2.4. Анализ градиентов температуры и скоростей охлаждения в зоне лазерного воздействия

Расчеты были выполнены для сплава с химическим составом Fe-5 вес.%Ni. Отличительной особенностью системы Fe-Ni является крайне

малая разница температур ликвидуса и солидуса во всем интервале концентраций. Это приводит к значительным трудностям при математическом описании процесса лазерной закалки, характеризуемого высокими градиентами температур в пористой среде. Рисунок 4.3 показывает положение изотерм при облучении поверхности образца одиночным импульсом. Во время облучения (рис. 4.3а) происходит нагревание слоя порошка благодаря высокому, по сравнению с непрерывной средой, проникновению излучения. Это связано с эффектом дифракции лазерного излучения с длиной волны ~ 1 мкм на квазипериодической структуре с характерным размером структурных элементов в диапазоне 1-10 мкм. В результате формируется зона с высокими температурными градиентами вблизи границы лазерного луча. В течение второй половины лазерного импульса (рис. 4.3б) модель предсказывает нагрев до температуры плавления $T_L=1784$ К с образованием зоны плавления. Высокая мощность излучения приводит к нагреванию поверхностного слоя до температуры кипения $T_{\text{кип}}=3100$ К, при которой резкое увеличение теплоотвода на поверхности за счет испарения вещества препятствует дальнейшему росту температуры. Так как достигается значительный перегрев приповерхностной области выше температуры плавления (рис. 4.3б), то теплоотвод в подложку приводит к подплавлению частиц порошка в объеме порошкового слоя и формированию связного каркаса. Дальнейшее остывание области реализуется медленно, так как время релаксации температурного поля $\tau_{\text{релак}}$ сопоставимо с временем следования импульсов τ_1 . Это создает условия для осуществления непрерывного плавления слоя порошка импульсным лазерным излучением, если скорость сканирования $V_b \sim R_b/\tau_1$.

Результат расчета положения фронта затвердевания вдоль оси лазерного луча после одиночного импульса показан на рис. 4.4. При $t < \tau_2$ облучения наблюдается скорость движения фазовой границы $V > 1$ м/с. Дан-

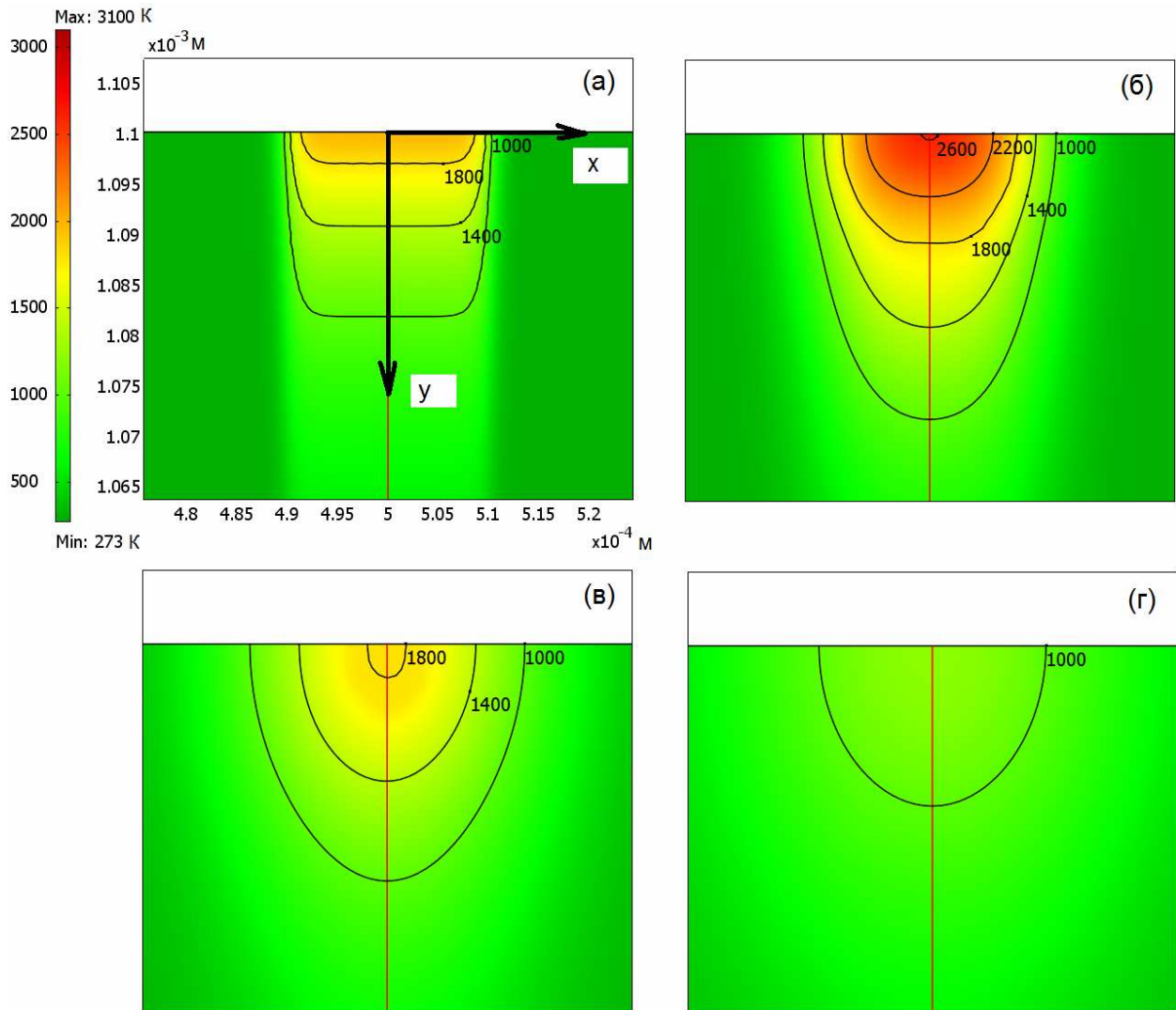


Рис. 4.3. Динамика изменения изотерм при облучении поверхности образца одиночным импульсом длительностью $\tau_2 = 100$ нс при однородном распределении плотности излучения в лазерном пучке. Безразмерное время t/τ_2 , отнесенное к длительности импульса, равно: а) 0, б) 5, в) 20, г) 50.

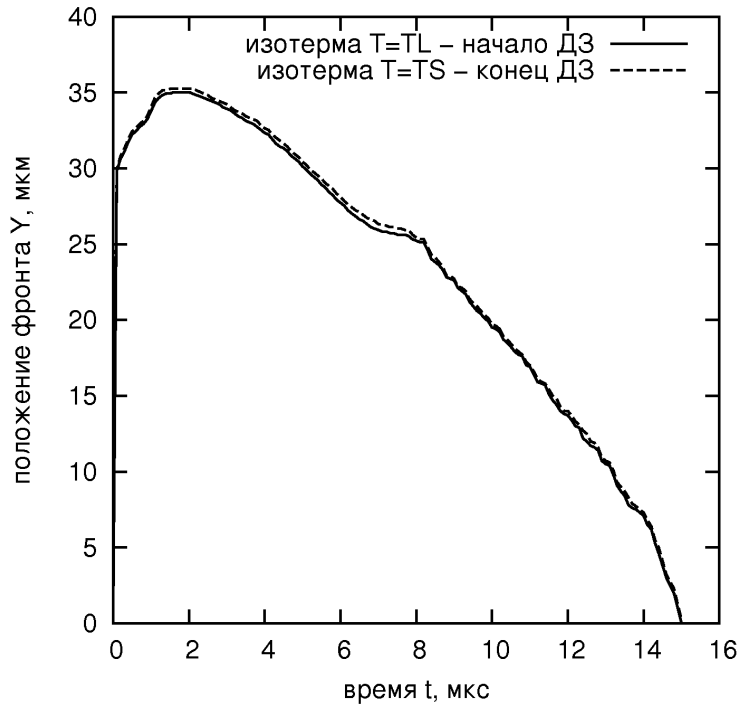
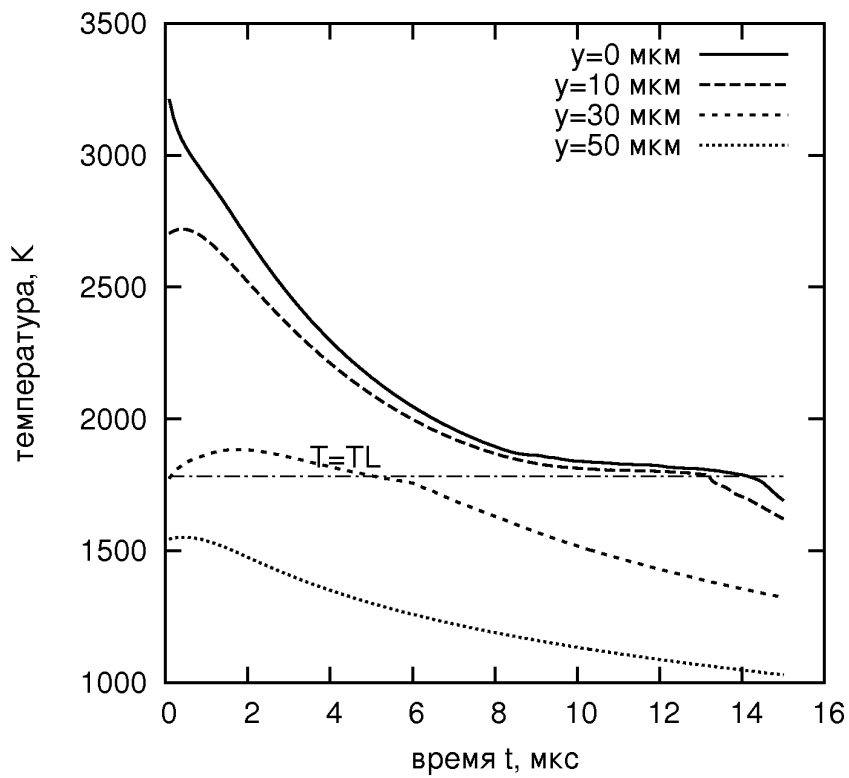


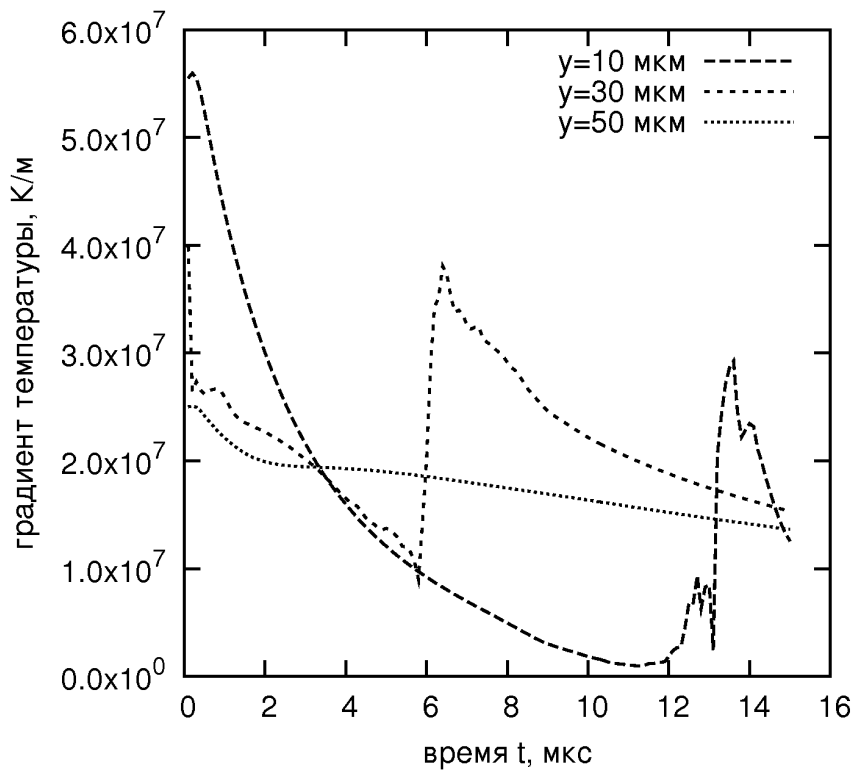
Рис. 4.4. Положение фронта затвердевания вдоль оси лазерного луча в зависимости от времени. Изотермы соответствуют температурам ликвидуса T_L и солидуса T_S .

ное высокое значение скорости объясняется не только большой мощностью облучения, но и эффективным проникновением лазерного излучения в пористую среду. Благодаря этому происходит предварительный разогрев порошкового слоя, и движение изотермы $T=T_L$ в дальнейшем реализуется со значительными скоростями. После достижения фронтом оплавления глубины $Y_{\max} = 35$ мкм фронт затвердевания начинает двигаться в обратном направлении к поверхности образца с ускорением, и его положение описывается $Y \sim Y_{\max} - \lambda\sqrt{t}$. Ускорение обусловлено интенсивным отводом тепла как в объем порошкового слоя, так и в газовую среду.

Изменение температуры во времени показывает на рис. 4.5а скачок T на поверхности $y = 0$ мкм до температуры кипения $T_{boil} = 3190$ К. Остывание до температуры плавления происходит за 14 мкс, что соответствует времени τ_1 следования импульсов. Перегиб температурной кривой при $T = T_L$ свидетельствует о достаточно протяженном времени кристаллизации. С удалением от поверхности образца продолжительность нахождения



(а)



(б)

Рис. 4.5. Температура (а) и градиент температуры (б) как функции времени t и расстояния y от поверхности образца.

точки в двухфазной зоне уменьшается. При $y \sim Y_{\max} = 30$ мкм точка находится на плато $T \sim T_L$ до 5 мкс.

Анализ изменения градиентов в контрольных точках (рис. 4.5б) показывает скачок градиента при приближении температуры к температуре плавления. Данный эффект связан с конечным временем нахождения контрольной точки в двухфазной зоне, где градиент температуры всегда значительно ниже, чем в точках перед фронтом кристаллизации. На основании анализа рис. 4.5 и 4.4 можно оценить характерные величины температурных градиентов и скоростей охлаждения в различных точках образца: градиент $|\text{grad}T|$ варьируется в интервале $10^7 - 5 \times 10^7$ К/м, а скорости V_c охлаждения достигают значений до 10^7 К/с.

4.3. Самостоятельные работы по расчету лазерной обработки

№1. Анализ динамики движения фронта затвердевания (задача Стефана)

Цель работы: Изучение фазовых переходов I рода на примере задачи плавления полубесконечной среды.

Описание: К большому классу важных с практической точки зрения проблем относятся задачи, связанные с описанием фазовых переходов (превращений) I рода, когда среда испытывает переход от одного фазового состояния к другому с одновременным выделением или поглощением тепла. Такие явления зачастую наблюдаются в процессах плавления или кристаллизации, поэтому будем их рассматривать как распространенный пример фазовых переходов I рода. Хотя анализ проводится на примере проблемы лазерной обработки, это не ограничивает применения результатов и выводов, которые будут получены, к более широкому кругу задач.

Первая попытка решения этой задачи связана в научной литературе

с работами Стефана конца XIX века, где исследовалась скорость образования полярного льда при поддержании на внешней поверхности льда постоянной температуры, равной температуре замерзания. В дальнейшем эта проблема получила название классической задачи Стефана. Важная особенность таких явлений кроется в наличии движущейся границы раздела фаз. Закон, описывающий движение границы, должен определяться из условия баланса тепловых потоков на границе и полной внутренней энергии материала образца. Поскольку на границе раздела происходит выделение или поглощение тепла, а теплофизические свойства фаз могут отличаться, то задача относится к нетривиальным проблемам. По этой причине существует ограниченный набор краевых задач, где найдены явные аналитические решения. В подавляющем большинстве случаев задача решается численно, а полученные решения сравниваются с экспериментальными данными.

Выполнение работы:

1. Запустите пакет COMSOL MultiPhysics. Загрузите с диска (или из интернета) модель «ЛР 1 - Изучение фазовых переходов I рода.mph».
2. Откройте вкладку «Константы» («Constants»), рис. 4.6. Проанализируйте названия переменных, их значения и описание физических величин, которым они соответствуют.
3. Откройте вкладку «Уравнения в области» («Subdomain settings»). Внимательно изучите дифференциальные уравнения для переменных температуры T и энтальпии H . Как определяется вклад теплоты фазового перехода в общий тепловой баланс?
4. Откройте вкладку «Уравнения на границах» («Boundary settings»). Внимательно изучите условия, задаваемые на обеих границах. Какой

Name	Expression	Value	Description
a_p	k_p/Cp_m3_p	$(2.266995e-5)[m^2/s]$	Thermal diffusivity
Ts_p	$Tl_p-DeltaT_LS$	$1775.666667[K]$	Solidus temperature
Tl_p	$1784[K]$	$1784[K]$	Liquidus temperature
Cp_m3_p	$\rho_p * Cp_kg_p$	$3.565513e6[J/(m^3 \cdot K)]$	Heat capacity per m ³
L_m3_p	$2.35e9[J/m^3]$	$2.35e9[Pa]$	Latent heat
DeltaT_LS	$m_e_p * C0_p * (k_e_p - 1) / k_e_p$	$8.333333[K]$	Equilibrium temperature interval of solidification
Tbound	$Tl_p + 200$	$1984[K]$	Temperature at the left boundary at t>0
k_p	$80.83[W/(m \cdot K)]$	$80.83[W/(m \cdot K)]$	Thermal conductivity
m_e_p	$-5.00[K]$	$-5[K]$	Tangent of the equilibrium liquidus line
k_e_p	0.75	0.75	Equilibrium partition coefficient
C0_p	5	5	Nominal concentration
Cp_kg_p	$449.89[J/(K \cdot kg)]$	$449.89[J/(kg \cdot K)]$	Heat capacity per kg
rho_p	$7925.30[kg/m^3]$	$7925.3[kg/m^3]$	Density
Tamb_bc	$Tl_p - 200$	$1584[K]$	Ambient temperature

Рис. 4.6. лабораторной работы №1. Экранная форма секции «Константы».

тип граничных условий задается на левой и правой границах? Объясните физический смысл записанных уравнений.

5. Выполните расчет, сделайте анимацию движения профиля температуры с течением времени. Зарисуйте профиль на миллиметровке. Какая особенность присутствует в температурном профиле, рис. 4.7? С чем связано появление этой особенности?
6. Поменяйте значение скрытой теплоты кристаллизации (latent heat), увеличив его в 2 раза. Повторите расчет. Проанализируйте изменение решения при увеличении исследуемого параметра.
7. Задайте исходное значение скрытой теплоты кристаллизации. Поменяйте значение коэффициента температуропроводности (thermal diffusivity), увеличив его в 2 раза. Повторите расчет. Проанализируйте изменение решения при увеличении температуропроводности.

Вопросы для самоподготовки:

1. Чем характеризуются фазовые переходы I рода?
2. Дайте описание классической задачи Стефана.

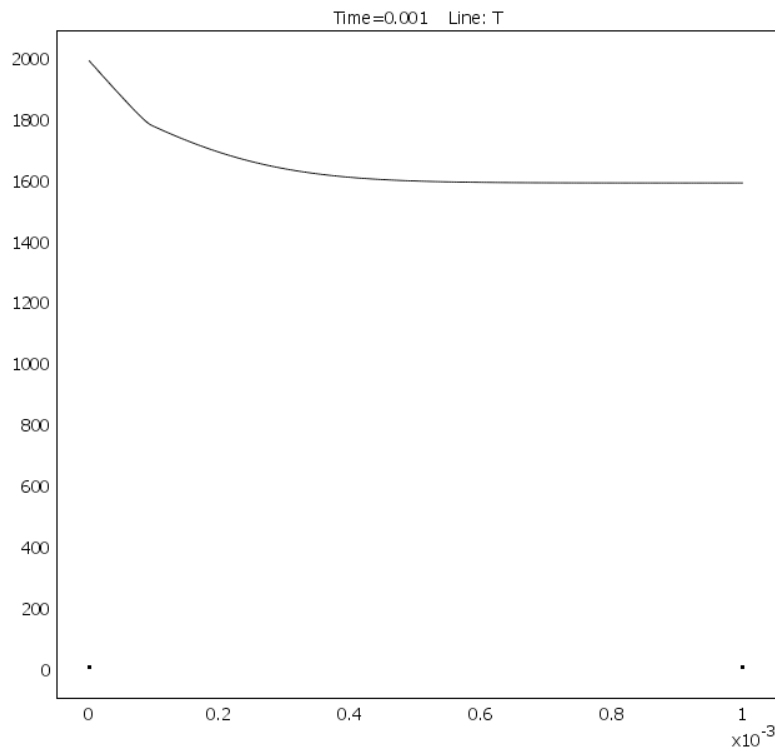


Рис. 4.7. Лабораторной работы №1. Профиль температуры в момент времени $t = 0.001$ с.

3. Как формулируется закон Фурье?
4. Что такое скрытая теплота фазового перехода?

№2. Расчет тепловых полей при непрерывной обработке

Цель работы: Изучить тепловые режимы обработки и поле температур при обработке поверхности стального образца непрерывным CO_2 лазером.

Описание: Режим генерации импульсов в значительной мере определяет характер теплового воздействия на вещество, приводя к различным типам морфологии обработанного материала. Если источник лазерного излучения представляет собой непрерывный лазер, как правило, имеющий в качестве рабочего тела газовую среду (например, CO_2), то такой режим облучения дает постоянный во времени тепловой поток, поступающий к образцу. При мощности лазера 10 Вт характерная плотность мощности излучения составляет порядка 10^{10} Вт/(м² с), что достигается за счет малого,

до 100 мкм, диаметра лазерного пятна. После начала обработки происходит нагрев поверхностного слоя образца до температуры выше температуры плавления. Поскольку плавление всегда сопровождается значительным поглощением тепла, то зона оплавления имеет размеры порядка нескольких десятков микрометров. На рис. 4.8 показана динамика изменения температуры в поверхностном слое образца с течением времени. Сразу после начала обработки температура в зоне обработки меньше температуры плавления, но температурный градиент вблизи центра пятна значителен. По мере роста зоны термического воздействия, обозначенного на рисунке изотермой с наименьшим из представленных значением 400 К, происходит формирование зоны оплавления, показанной на цветовой шкале красным цветом. После выхода на стационарный режим движение лазерного луча с постоянной скоростью приводит к перемещению зоны оплавления вдоль поверхности образца. При этом форма зоны оплавления несимметрична относительно центра луча и вытянута в направлении, противоположном скорости движения луча, рис. 4.9.

Выполнение работы:

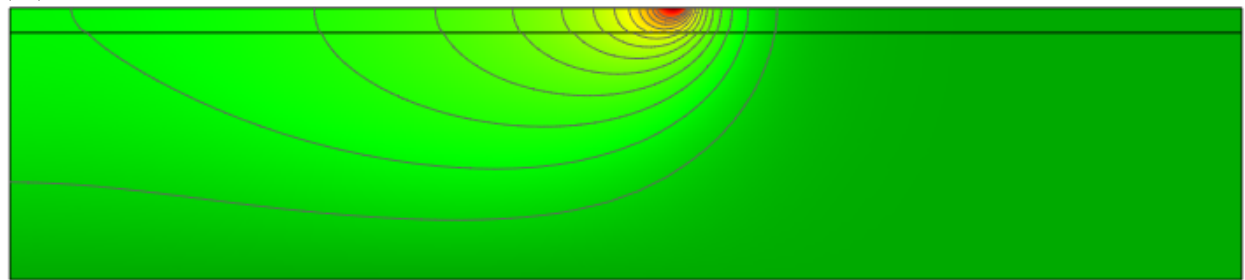
1. Запустите пакет COMSOL MultiPhysics. Загрузите с диска модель «ЛР 2 - Обработка поверхности стали непрерывным лазером.mph».
2. Откройте вкладку «Константы» («Constants»), рис. 4.6. Проанализируйте названия переменных, их значения и описание физических величин, которым они соответствуют.
3. Обратите внимание на параметры лазерной обработки, задаваемые в модели. Проанализируйте метод определения мощности лазерного излучения, радиуса и скорости лазерного луча, способ задания теплофизических параметров среды. Какому закону подчиняется распределение мощности внутри лазерного пучка?



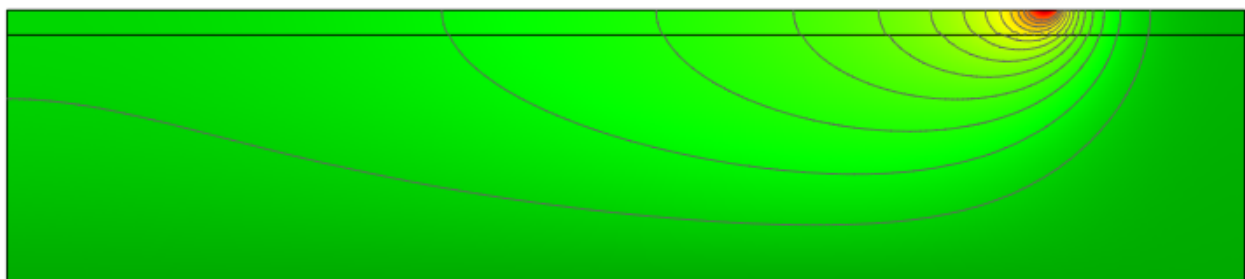
(a)



(б)



(в)



(г)

Рис. 4.8. Распределение температуры в поверхностном слое образца среднеуглеродистой стали при обработке непрерывным CO_2 лазером с номинальной мощностью 10 Вт при скорости сканирования 100 мм/с. Результаты приведены для моментов времени t : (а) 1 мс, (б) 10 мс, (в) 25 мс, (г) 40 мс. Время отсчитывается с момента начала обработки. Размер расчетной области $5 \times 1,1$ мм; изотермы соответствуют температурам от 400 до 1600 К с интервалом 100 К.

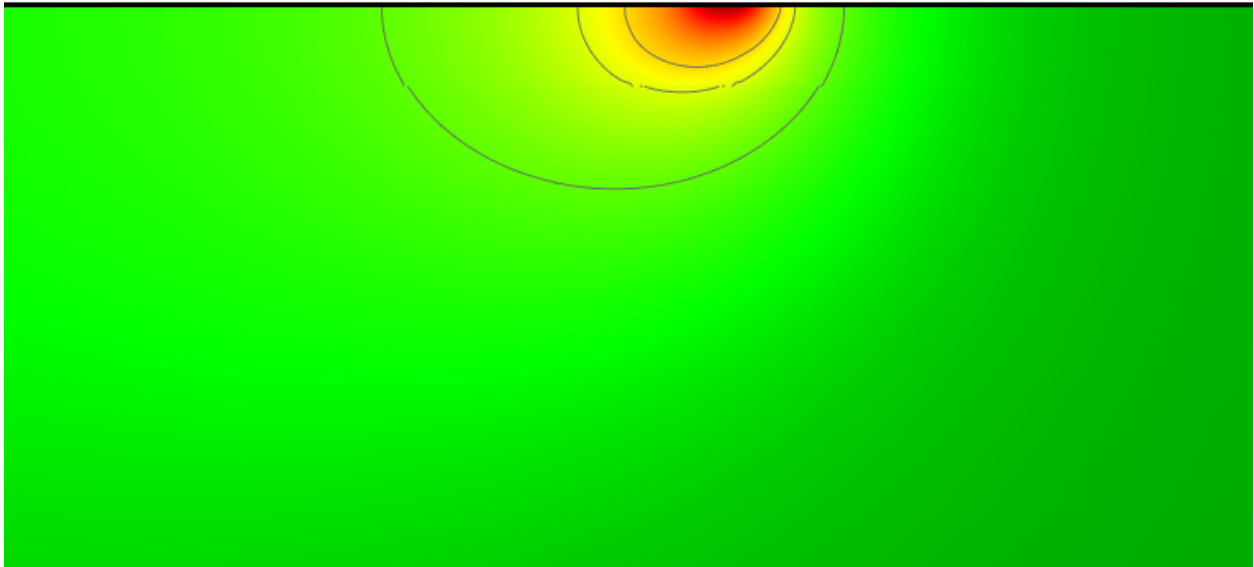


Рис. 4.9. Форма зоны оплавления при обработке непрерывным CO_2 лазером.

4. Откройте вкладку «Уравнения на границах» («Boundary settings»). Внимательно изучите условия, задаваемые на всех границах. Как реализуются периодические граничные условия на левой и правой границах?
5. Выполните расчет, сделайте анимацию движения профиля температуры с течением времени. Схематически зарисуйте динамику изменения изотерм с течением времени в расчетной области.
6. Поменяйте значение скорости сканирования лазерного луча в два раза. Повторите расчет. Как изменилась глубина зоны оплавления в результате увеличения исследуемого параметра?

Вопросы для самоподготовки:

1. Что такое непрерывный режим лазерной обработки?
2. Какова форма зоны оплавления?
3. Что происходит с поверхностным слоем, когда достигается температура плавления?

4. Может ли на поверхности достигаться температура больше, чем температура кипения?

№3. Расчет тепловых полей при импульсной обработке

Цель работы: Исследовать динамику изменения теплового поля после воздействия одиночного импульса на поверхность образца.

Описание: При импульсном режиме генерации лазерного излучения высокие скорости движения лазерного луча приводят к локальному тепловому воздействию с управляемой в эксперименте периодичностью. В результате формирование зоны оплавления происходит только в момент действия импульса, имеющего продолжительность до 100 нс. После окончания импульса наблюдается релаксация теплового поля и охлаждение зоны воздействия за счет переноса тепла в объем образца диффузией, а также охлаждения на поверхности по конвективному и радиационному механизмам. После релаксации теплового поля происходит кристаллизация зоны оплавления, заканчивающаяся до начала следующего импульса. В силу высоких скоростей охлаждения реализуется высокоскоростная кристаллизация, закалка поверхностного слоя. Закаленный слой обладает модифицированными механическими и электро-химическими свойствами, что может быть связано как с изменением структуры кристаллической решетки, размера зерен, так и с блокированием перераспределения (сегрегации) примесных компонентов. Следует отметить, что данное описание справедливо для импульсной обработки с периодом обработки на несколько порядков большим периода одиночного лазерного импульса. Распределение температуры, ее градиентов и скоростей охлаждения были уже рассмотрены выше в разд.

4.2.4.

Выполнение работы:

1. Запустите пакет COMSOL MultiPhysics. Загрузите с диска модель

«ЛР 3 - Анализ тепловых полей при воздействии одиночного импульса.mph».

2. Откройте вкладку «Константы» («Constants»), рис. 4.6. Проанализируйте названия переменных, их значения и описание физических величин, которым они соответствуют.
3. Обратите внимание на параметры лазерной обработки, задаваемые в модели. Проанализируйте значения таких параметров лазерного излучения, как продолжительность импульса, частота генерации импульсов, максимальная плотность мощности лазерного излучения. Как отличаются значения плотности мощности при импульсном и непрерывном способах обработки?
4. Выполните расчет, сделайте анимацию движения профиля температуры с течением времени. Схематически зарисуйте динамику изменения изотерм с течением времени в расчетной области.
5. Сравните время, требуемое для оплавления и последующей кристаллизации поверхности, с периодом генерации импульсов. Будет ли происходить полная кристаллизация до начала следующего импульса?
6. Поменяйте значение мощности лазерного луча в 5 раз. Повторите расчет. Как изменилась глубина зоны оплавления в результате увеличения исследуемого параметра? Оцените это значение.
7. Какое время требуется для кристаллизации зоны оплавления? Повторите сравнение этого времени с периодом генерации импульсов. Как изменится характер тепловой обработки в этом случае? Дайте развернутый ответ.

Вопросы для самоподготовки:

1. Что такое импульсный режим лазерной обработки?
2. Какова форма зоны оплавления при импульсной обработке?
3. Какие характерные пространственные и временные масштабы могут быть введены для импульсной обработки?

№4. Оптимизация нанесения функциональных покрытий методом напекания порошковых материалов

Цель работы: Проанализировать процесс спекания слоя металлического порошка при лазерной обработке.

Описание: Теплоперенос в пористых средах с одновременным протеканием фазовых переходов относится к сложным задачам в силу одновременного протекания нескольких физических процессов. Помимо выделения/поглощения тепла на фазовых границах, реализующихся при фазовых превращениях, пористая структура обладает сложной внутренней структурой, что значительно изменяет механизмы переноса энергии и вещества. Кроме этого, подплавление поверхности отдельных частиц порошка меняет саму структуру межфазных поверхностей, удельную плотность и другие теплофизические параметры среды. В результате происходит сложный многостадийный процесс, характеризующийся наличием множества взаимосвязанных параметров. Математическое описание такой системы невозможно, поэтому требуется рассматривать некоторые параметры как эффективные величины, усредненные на мезоскопическом, т.е. промежуточном между макроскопическим и микроскопическим, масштабе. С этой целью в модель вводятся два параметра пористости: ε_V и ε_σ , характеризующие пористость в объеме и в плоском сечении образца. Под пористостью понимается относительная доля газовой фазы по отношению ко всему объему.

Тогда выражения для ε_V и ε_σ определяются уравнениями:

$$\varepsilon_V = V_{г.ф.}/V_{обр}, \quad (4.14)$$

$$\varepsilon_\sigma = S_{г.ф.}/S_{обр}, \quad (4.15)$$

где V и S – объем и площадь плоского сечения соответственно. Варьируя величину пористости и оцениваемую на ее основе характерную глубину поглощения теплового потока в скин-слое, определяемого законом, близким по форме к закону Бугера для оптически однородных сред, можно исследовать тепловые поля и зону оплавления в пористом слое металлического порошка, нанесенного на сплошную подложку.

Выполнение работы:

1. Запустите пакет COMSOL MultiPhysics. Загрузите с диска модель «ЛР 4 - Изучение напекания металлического порошка при получении покрытий методом лазерной обработки.mph».
2. Откройте вкладку «Константы» («Constants»), рис. 4.6. Проанализируйте названия переменных, их значения и описание физических величин, которым они соответствуют.
3. Обратите внимание на определения пористости и связанные с ними другие параметры, задаваемые в модели. Проанализируйте значения таких параметров, как пористость в объеме, пористость в сечении, коэффициент поглощения лазерного излучения, объемная доля оплавления частиц.
4. Выполните расчет, сделайте анимацию движения профиля температуры с течением времени. Схематически зарисуйте динамику изменения изотерм с течением времени в расчетной области.

5. Увеличьте значение пористости в 1.5 раза. Повторите расчет. Как изменилась глубина зоны оплавления в результате увеличения исследуемого параметра? Оцените это значение.
6. Задайте исходное значение пористости. Увеличьте значение коэффициента поглощения α на 50%. Повторите расчет. Как изменилась глубина зоны оплавления в результате увеличения исследуемого параметра? Оцените это значение.

Литература

1. П. В. Трусов. Введение в математическое моделирование: Учебное пособие. - М.: Университетская книга, Логос, 2007. — 440 с.
2. Диаграммы состояния двойных металлических систем. — М.: Машиностроение, 1997. — V. 2.
3. Журавлев В. А. Затвердевание и кристаллизация с гетеропереходами. — РХД, 2006.
4. А. Ф. Яременко, П. Г. Балдук. Механика материалов и конструкций. — Кафедра "Сопротивление материалов" Одесской Государственной Академии Строительства и Архитектуры, 2004.
5. И. В. Савельев. Курс общей физики: Учебное пособие. В 3-х тт. Механика. Молекулярная физика. 4-е издание., стер. — Спб.: Издательство «Лань», 2005. — 432 с.
6. Смирнов Е. М., Зайцев Д. К. Метод конечных объемов в приложении к задачам гидрогазодинамики и теплообмена в областях сложной геометрии — // Научно-технические ведомости N 2 (36). — С-Пб.: Изд-во Политехнического университета — 2004. — С. 70-81
7. В. М. Вержбицкий. Основы численных методов: Учебник для вузов. — М.: Высш. шк., 2002. — 840 с.: ил.
8. Виноградов В.В., Тяжелникова И.Л. О теоретических аспектах формирования макро- и микроструктуры в затвердевающем металлическом слитке // Вестник УдГУ. Физика. Химия. — 2008. — Р. 37–57.

9. Сегерлинд Л. Применение метода конечных элементов — М.: Изд-во «Мир», 1979. — 392 с.
10. Г. А. Гордеев. Дипломная работа: Разномасштабное моделирование лазерного спекания порошков. Удмуртский Государственный университет, факультет информационных технологий и вычислительной техники, 2010. — 49 с.
11. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Теоретическая физика: Учеб. пособ.: Для вузов. В 10 т. Т. V. Статистическая физика. Ч. I. — 5-е изд., стереот. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. — 616 с.
12. Борисов В.Т. Теория двухфазной зоны металлического слитка. — М.: Metallurgia, 1987. — 224 с.
13. Кривилёв М.Д., Харанжевский Е.В., Гордеев Г.А., Анкудинов В.Е., Управление лазерным спеканием металлических порошковых смесей // Управление большими системами, Выпуск 29. М.: ИПУ РАН, 2011.
14. А. Н. Тихонов, А. А. Самарский. Уравнения математической физики. — М.: Наука, 1977. — с. 552–592.
15. Харанжевский Е. В., Кривилёв М. Д.
Физика лазеров, лазерные технологии и методы математического моделирования лазерного воздействия на вещество. Учебное пособие. Под общей редакцией П. К. Галенко. Ижевск: Изд-во “Удмуртский университет”, 2011.—188 с.
16. Флетчер К. Численные методы на основе метода Галёркина — М.: Изд-во «Мир», 1988. — 353 с.
17. Патанкар С. В. Численные методы решения задач теплообмена и динамика жидкости — М.: Изд-во ЭНЕРГОАТОМИЗДАТ. — 1984. — 152 с.

18. Лыков А.В. Явления переноса в капиллярно-пористых телах. — М.: Гос. издательство технико-теоретической литературы, 1954.
19. COMSOL Multiphysics user's guide. Руководство пользователя Comsol MultiPhysics, версия 3.5a. Comsol Inc., 2009. — 624 с.
20. COMSOL Multiphysics modelling guide. Руководство пользователя по моделированию в Comsol MultiPhysics, версия 3.5a. Comsol Inc., 2009. — 505 с.
21. Galenko P. Extended thermodynamical analysis of a motion of the solid-liquid interface in a rapidly solidifying alloy // Physical Review B, **65** (2002) 144103-1-11.
22. Bird R., Stewart W.E., Lightfoot E.N. Transport phenomena. — Wiley, 2002.

Учебное издание

Анкудинов Владимир Евгеньевич

Афлятунова Далия Дамировна

Кривилев Михаил Дмитриевич

Гордеев Георгий Андреевич

**Компьютерное моделирование процессов переноса и деформаций в
сплошных средах**

Учебное пособие

Авторская редакция

1-е издание

ISBN 978-5-4312-0312-1



Издательство «Удмуртский университет»

426034, г. Ижевск, ул. Университетская, 1, корп. 4

Тел./факс: +7 (3412) 50-02-95, E-mail: editorial@udsu.ru