
УДК: 519.6

Л. Ф. Головко, С. А. Лукьяненко, доктора техн. наук,
Д. С. Смаковский, аспирант,
В. А. Агеенко, И. Ю. Михайлова, студентки
Национальный технический ун-т Украины «КПИ»
(Украина, 03056, Киев, пр-т Победы, 37, корп.5,
тел.: (044) 2417590, E-mail:lukian@aprodos.ntu-kpi.kiev.ua)

Моделирование адаптивным сеточным методом температурного поля при лазерной наплавке порошковых материалов

(Статью представил д-р техн. наук А. Ф. Верлань)

Рассмотрены результаты применения адаптивного алгоритма к решению нестационарного нелинейного трехмерного уравнения теплопроводности, моделирующего температурное поле при нанесении на деталь защитного покрытия с помощью лазерного излучения.

Розглянуто результати застосування адаптивного алгоритму до розв'язання нестационарного неелінійного тривимірного рівняння теплопровідності, що моделює температурне поле при нанесенні на деталь захисного покриття за допомогою лазерного випромінювання.

Ключевые слова: дифференциальное уравнение, лазер, сетка, адаптивный метод.

В настоящее время для сварки, резки, изменения свойств материалов широко используют концентрированные потоки тепла, излучаемые лазерами. Лазеры применяют для улучшения технических характеристик деталей машин и механизмов, работающих в экстремальных условиях, лазерной наплавкой порошковых материалов. Это позволяет улучшить износостойкость, коррозионностойкость и другие свойства поверхностей. Локальность воздействия лазерного излучения и высокая скорость протекания процессов затрудняют проведение их экспериментального исследования и обусловливают необходимость применения методов математического моделирования.

Методы компьютерного моделирования позволяют получать информацию о температурных полях и выполнять поиск оптимальных параметров лазерного излучения и режимов обработки. Однако такая особенность процессов лазерного воздействия, как высокие градиенты температурного поля, приводит к неэффективности традиционных методов моделирования, при использовании которых резко увеличиваются затраты машинного времени.

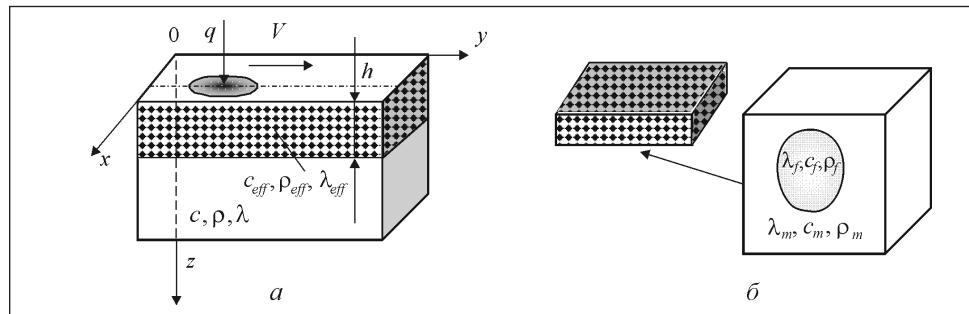


Рис. 1. Схема действия лазерного луча (а) и элементарное кубическое звено материала покрытия (б)

Это затрудняет проведение многовариантного анализа и процедур оптимизации.

Рассмотрим результаты использования аддитивных методов для моделирования высокоградиентных процессов лазерной наплавки.

Постановка задачи. В данном технологическом процессе порошковый материал непрерывно подается в зону расплавления с помощью потока газа. Для упрощения анализа можно считать, что материал покрытия в виде идеально спрессованного порошка сложного состава предварительно наносится на подложку, после чего расплавляется под действием лазерного излучения [1].

В этом случае расчетная область представляет собой прямоугольный параллелепипед со сторонами L_x, L_y, L_z . Деталь состоит из подложки и двухфазного покрытия, на поверхность которого действует луч, движущийся с постоянной скоростью параллельно оси Oy (рис. 1, а). Покрытие толщиной h состоит из стальной матрицы и бронзовых включений (рис. 1, б). Все поверхности детали находятся в процессе теплообмена с окружающей средой, температура которой U_c . Распределение мощности луча по сечению соответствует функции Гаусса, а его действие вызывает на поверхности обработки тепловой поток плотностью $q(x, y, t)$.

Необходимо найти распределение температуры для двухслойной детали, на которую действует движущийся луч лазера.

Математическая модель. Распределение температуры $U(x, y, z, t)$ в рабочей области описывается трехмерным нелинейным нестационарным уравнением теплопроводности

$$c\rho \frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial U}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial U}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial U}{\partial z} \right), \quad (1)$$

где $c(z, U)$ — удельная теплоемкость материала с учетом фазовых переходов и композитной структуры покрытия; $\rho(z, U)$ — плотность; $\lambda(z, U)$ — коэффициент теплопроводности. Зависимость теплофизических коэффициентов от координаты z определяет наличие подложки и двухфазового покрытия на ее поверхности.

Краевое условие на поверхности обработки в зоне действия лазерного луча имеет вид

$$\lambda \frac{\partial U(x, y, 0, t)}{\partial z} + q(x, y, t) - \alpha(U - U_c) = 0.$$

Краевое условие на поверхности обработки вне зоны действия лазерного излучения и краевые условия на других гранях расчетной области моделируют теплообмен со средой по закону Ньютона:

$$\lambda \frac{\partial U}{\partial n} = -\alpha(U - U_c).$$

Начальная температура детали равна температуре окружающей среды:

$$U(x, y, z, 0) = U_c.$$

Материал наплавляемого покрытия представляет собой двухфазную среду. Ее можно считать зернистым композитным материалом с регулярной структурой, основу которой составляет элементарное звено в виде куба (см. рис. 1, б). Звено состоит из матрицы (материал которой имеет плотность ρ_m , коэффициенты теплоемкости c_m и теплопроводности λ_m) и включения сферической формы с параметрами ρ_f , c_f , λ_f . Задача расчета температурного поля в композите формулируется относительно температуры, усредненной по объему элементарного звена, которая зависит от эффективных (макроскопических) характеристик композита ρ_{eff} , c_{eff} , λ_{eff} .

Эффективное значение теплопроводности покрытия при условии, что включения сферические и имеют малую объемную концентрацию $V_f < 0,3$, можно вычислить по формуле Максвелла [1]:

$$\lambda_{eff} = \lambda_m \frac{1 + 2V_f \left(1 - \frac{\lambda_m}{\lambda_f}\right) / \left(1 + 2\frac{\lambda_m}{\lambda_f}\right)}{1 - V_f \left(1 - \frac{\lambda_m}{\lambda_f}\right) / \left(1 + 2\frac{\lambda_m}{\lambda_f}\right)} = \text{const.}$$

Эффективное значение объемной теплоемкости покрытия в предположении, что распределение температуры в объеме элементарного звена

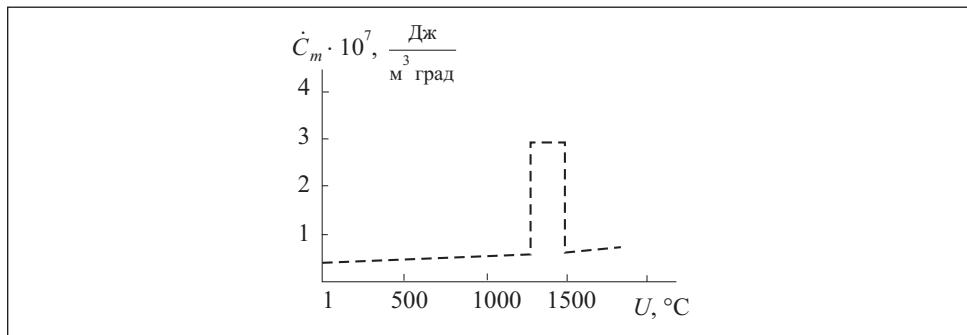


Рис. 2. Зависимость объемной теплоемкости \dot{C}_m матрицы покрытия от температуры

близко к однородному, можно вычислить по формуле

$$C_{eff} = (c\rho)_{eff} = \dot{C}_m(1-V_f) + \dot{C}_f V_f,$$

где \dot{C}_m , \dot{C}_f — значения объемной теплоемкости материалов матрицы и включения, учитывающие скрытую теплоту плавления (кристаллизации) (рис. 2).

Если величины \dot{C}_m и \dot{C}_f аппроксимировать кусочно-линейными функциями от U ,

$$\dot{C}_m = k_m U + b_m, \quad \dot{C}_f = k_f U + b_f,$$

то и эффективное значение объемной теплоемкости будет кусочно-линейной функцией:

$$C_{eff} = (c\rho)_{eff} = (k_m U + b_m)(1 - V_f) + (k_f U + b_f)V_f = kU + b.$$

Из этого следует, что уравнение теплопроводности (1) для композитного слоя является нелинейным. При постоянных характеристиках ρ , c , λ нижнего слоя (подложки) уравнение теплопроводности для него является линейным.

Методы решения задач, описываемых дифференциальными уравнениями в частных производных (ДУЧП), состоят из трех этапов: дискретизация расчетной области, замена ДУЧП системами алгебраических уравнений, решение этих систем. Особенности данной задачи, а именно наличие зон с большими градиентами решения (рис. 3), требуют новых алгоритмов реализации этих этапов.

Эффективность решения задачи в значительной степени зависит от первого этапа — построения сетки. При увеличении числа узлов повышается точность, но возрастают затраты машинного времени в результате

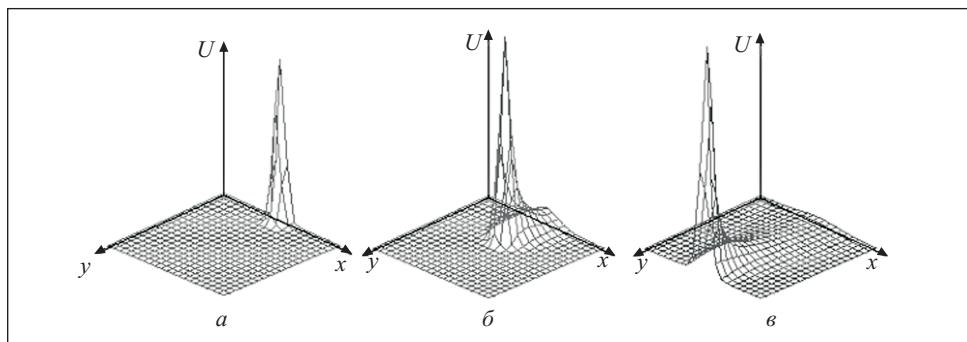


Рис. 3. Температурное поле на поверхности детали при временном шаге $t = 0,02$ с (а), $t = 0,3$ с (б), $t = 0,8$ с (в)

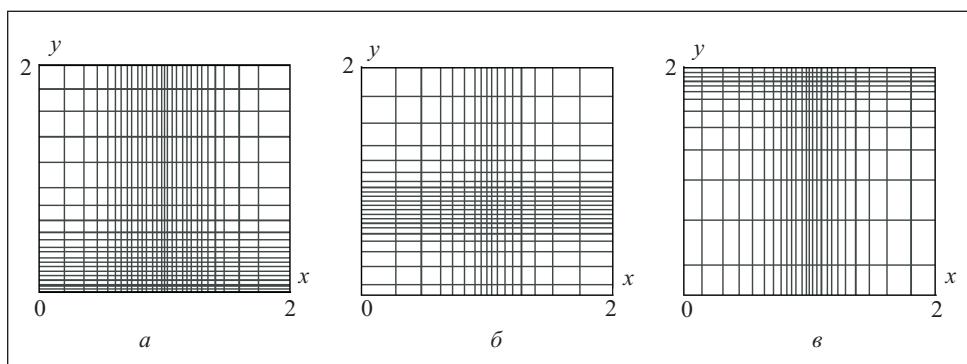


Рис. 4. Адаптивная разностная сетка в моменты времени $t = 0,02$ с (а), $t = 0,3$ с (б), $t = 0,8$ с (в)

увеличения размерности системы алгебраических уравнений. Поскольку в данной задаче нагрев поверхности является локальным и очень интенсивным, узлы разностной сетки в зоне нагрева необходимо расположить очень плотно. Однако такое резкое изменение температуры будет наблюдаться лишь в незначительной части расчетной области. На участках, более удаленных от луча, изменения температуры незначительны, поэтому на них сетка может быть разреженной, что сократит общее число узлов и, следовательно, уравнений.

Таким образом, для задач моделирования лазерного воздействия необходимо применять адаптивные методы построения сеток, которые в процессе решения задачи позволяют анализировать поведение функции и перестраивать сетку, адаптируя ее к текущему состоянию: сгущать узлы в зонах высоких градиентов и разреживать их в зонах малых градиентов (рис. 4).

Для построения адаптивной сетки на каждом временном шаге для каждой точки (x_i, y_j, z_m) оцениваем точность полученных результатов, т. е. сравниваем реальную погрешность e_{ijm} с допустимой e_d . На основании этого изменяем величины шагов $h_{1,i}, h_{2,j}, h_{3,m}$ в окрестности данной точки, а также величину шага по времени τ . Реальную погрешность e_{ijm} можно определить методом вложенных сеток. Если хотя бы для одного узла $e_{ijm} > e_d$, результаты последнего временного шага аннулируются, уменьшается шаг по времени τ и строится новая сетка с уплотнением узлов в точках отказа. Если выполняются условия точности $e_{ijm} < e_d$, результаты данного шага принимаются и уточняются. На основе реальных погрешностей e_{ijm} строим новую сетку, в которой учтены особенности поведения функции, и определяем новое значение τ [2].

Для перехода от ДУЧП к системам алгебраических уравнений применим схему расщепления по координатам [3], которая трансформирует трехмерную задачу в последовательность одномерных. В свою очередь, одномерные задачи целесообразно решать с помощью неявных схем, которые устойчивы при любых значениях шагов.

Пусть приближенное решение найдено на $(k-1)$ -м слое на неравномерной сетке в узлах (x_i, y_j, z_m) , где $i = 0, 1, \dots, n_1; j = 0, 1, \dots, n_2; m = 0, 1, \dots, n_3$. Обозначим величину шагов сетки в направлении Ox через $h_{1,i} = x_i - x_{i-1}$, в направлении Oy — через $h_{2,j} = y_j - y_{j-1}$, в направлении Oz — через $h_{3,m} = z_m - z_{m-1}$. Обозначим также среднее арифметическое двух соседних шагов для узла (x_i, y_j, z_m) в каждом из координатных направлений через $h_{1,c}, h_{2,c}, h_{3,c}$; шаг по времени — через $\tau = \tau_k = t_k - t_{k-1}$; значение приближенного решения в точке (x_i, y_j, z_m, t_k) — через u_{ijm}^k .

Каждый шаг схемы расщепления по координатам, имеющей второй порядок точности по времени и пространственным переменным, реализует на неравномерной сетке переход с $(k-1)$ -го временного слоя на $(k+1)$ -й и заключается в выполнении шести этапов:

$$\begin{aligned} c\rho \frac{u^{k-\frac{2}{3}} - u^{k-1}}{\tau} &= \lambda \Lambda_3 \frac{u^{k-\frac{2}{3}} + u^{k-1}}{2}, \quad c\rho \frac{u^{k-\frac{1}{3}} - u^{-\frac{2}{3}}}{\tau} = \lambda \Lambda_2 \frac{u^{k-\frac{1}{3}} + u^{-\frac{2}{3}}}{2}, \\ c\rho \frac{u^k - u^{-\frac{1}{3}}}{\tau} &= \lambda \Lambda_1 \frac{u^k + u^{-\frac{1}{3}}}{2}, \quad c\rho \frac{u^{\frac{k+1}{3}} - u^k}{\tau} = \lambda \Lambda_1 \frac{u^{\frac{k+1}{3}} + u^k}{2}, \\ c\rho \frac{u^{\frac{k+2}{3}} - u^{\frac{k+1}{3}}}{\tau} &= \lambda \Lambda_2 \frac{u^{\frac{k+2}{3}} + u^{\frac{k+1}{3}}}{2}, \quad c\rho \frac{u^{k+1} - u^{\frac{k+2}{3}}}{\tau} = \lambda \Lambda_3 \frac{u^{k+1} + u^{\frac{k+2}{3}}}{2}, \end{aligned}$$

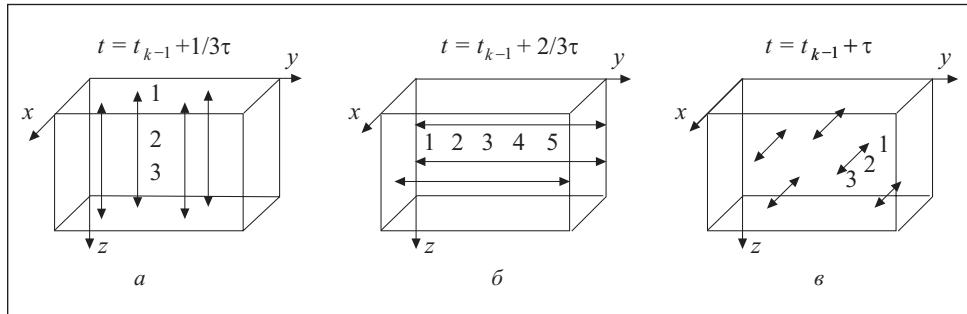


Рис. 5. Порядок записи уравнений на первом (а), втором (б) и третьем (в) этапах метода расщепления

где $\Lambda_1, \Lambda_2, \Lambda_3$ — разностные операторы аппроксимации вторых производных на неравномерной сетке,

$$\begin{aligned}\Lambda_1 u_{ijm}^k &= \frac{h_{1,i+1} u_{i-1,j,m}^k - 2h_{1,c} u_{ijm}^k + h_{1,i} u_{i+1,j,m}^k}{h_{1,c} h_{1,i} h_{1,i+1}}, \\ \Lambda_2 u_{ijm}^k &= \frac{h_{2,j+1} u_{i,j-1,m}^k - 2h_{2,c} u_{ijm}^k + h_{2,j} u_{i,j+1,m}^k}{h_{2,c} h_{2,j} h_{2,j+1}}, \\ \Lambda_3 u_{ijm}^k &= \frac{h_{3,m+1} u_{i,j,m-1}^k - 2h_{3,c} u_{ijm}^k + h_{3,m} u_{i,j,m+1}^k}{h_{3,c} h_{3,m} h_{3,m+1}}.\end{aligned}$$

Например, на первом этапе, когда моделируется распространение тепла только в направлении Oz , разностные уравнения для фиксированного узла (x_i, y_j) , где $i = 0, 1, \dots, n_1, j = 0, 1, \dots, n_2$, имеют вид

$$\begin{aligned}C \frac{u_{ijm}^{k-2} - u_{ijm}^{k-1}}{\tau} &= \lambda \left(\frac{h_{3,m+1}^{k-2} u_{i,j,m-1}^{k-2} - 2h_{3,c} u_{ijm}^{k-2} + h_{3,m} u_{i,j,m+1}^{k-2}}{h_{3,c} h_{3,m} h_{3,m+1}} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{h_{3,m+1}^{k-1} u_{i,j,m-1}^{k-1} - 2h_{3,c} u_{ijm}^{k-1} + h_{3,m} u_{i,j,m+1}^{k-1}}{h_{3,c} h_{3,m} h_{3,m+1}} \right), \quad m = 1, 2, \dots, n_3 - 1, \quad (2)\end{aligned}$$

т. е. для каждого узла (x_i, y_j) верхней поверхности параллелепипеда (см. рис. 1, а) формируется система из $(n_3 - 1)$ алгебраических уравнений. Вектор неизвестных в такой системе образован значениями температур в узлах, расположенных на одной прямой, параллельной оси Oz (рис. 5, а).

Поскольку принято, что эффективное значение теплоемкости $C = c\rho$ для композитного слоя покрытия линейно зависит от температуры, а для однофазной среды нижнего слоя является постоянным, уравнения (2) первого этапа в каждой системе могут быть трех типов: для узлов покрытия, узла на границе двух сред и узлов нижнего слоя.

Обозначим номер граничного узла через ζ . Тогда при $m < \zeta$ разностные уравнения являются нелинейными алгебраическими уравнениями (НАУ). При $m = \zeta$ узел находится на границе и соответствующее нелинейное разностное уравнение для обеспечения консервативности метода целесообразно формировать на основе метода баланса [3]. При $m > \zeta$ узел принадлежит нижнему слою и соответствующее разностное уравнение является линейным алгебраическим уравнением (ЛАУ).

Систему НАУ (2) целесообразно решать методом Ньютона, на каждой итерации которого формируется и решается система ЛАУ. В каждом уравнении (2) фигурируют лишь три неизвестных, которые соответствуют трем соседним узлам, поэтому матрица является трехдиагональной и решается модифицированным методом Гаусса.

На втором этапе схемы расщепления, когда моделируется распространение тепла только в направлении Oy , для фиксированного узла (x_i, z_m) , где $i = 0, 1, \dots, n_1$, $m = 0, 1, \dots, n_3$, разностные уравнения имеют вид

$$C \frac{u_{ijm}^{k-\frac{1}{3}} - u_{ijm}^{k-\frac{2}{3}}}{\tau} = \frac{\lambda}{2} \left(\frac{h_{2,j+1} u_{i,j-1,m}^{k-\frac{1}{3}} - 2h_{2,c} u_{ijm}^{k-\frac{1}{3}} + h_{2,j} u_{i,j+1,m}^{k-\frac{1}{3}}}{h_{2,c} h_{2,j} h_{2,j+1}} + \right. \\ \left. + \frac{h_{2,j+1} u_{i,j-1,m}^{k-\frac{2}{3}} - 2h_{2,c} u_{ijm}^{k-\frac{2}{3}} + h_{2,j} u_{i,j+1,m}^{k-\frac{2}{3}}}{h_{2,c} h_{2,j} h_{2,j+1}} \right), \quad j = 1, 2, \dots, n_2 - 1, \quad (3)$$

т. е. для каждого узла (x_i, z_m) левой боковой поверхности параллелепипеда (см. рис. 1, а) формируется система из $(n_2 - 1)$ алгебраических уравнений. Вектор неизвестных в такой системе образован значениями температур в узлах, расположенных на одной прямой, параллельной оси Oy (рис. 5, б). Поскольку точки (x_i, z_m) боковой поверхности, для каждой из которых строится отдельная система разностных уравнений (3), могут принадлежать верхнему или нижнему слоям (см. рис. 1, а), эти системы в первом случае являются нелинейными, во втором – линейными.

Аналогично формируются и решаются системы разностных уравнений на других этапах схемы расщепления.

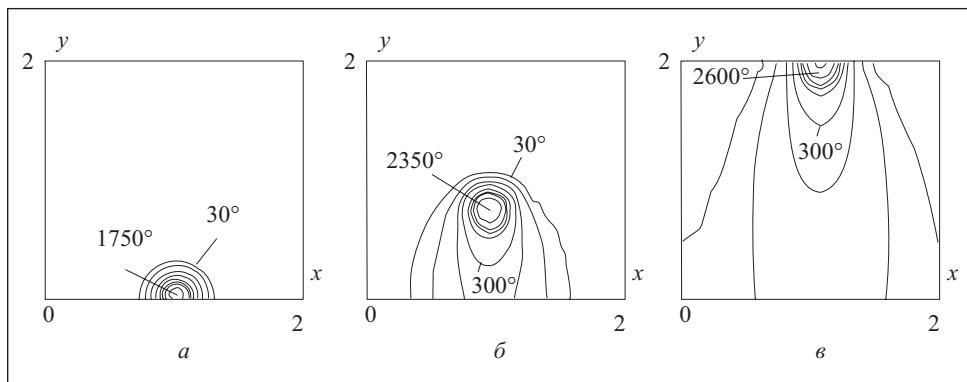


Рис. 6. Изолинии температурного поля на обрабатываемой поверхности при $t = 0,02$ с (а), $t = 0,3$ с (б), $t = 0,8$ с (в)

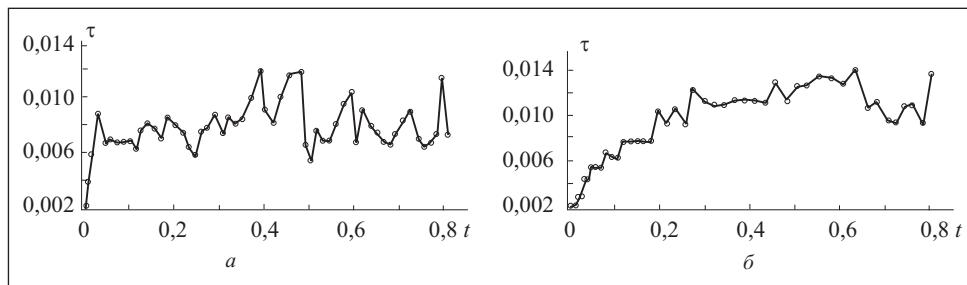


Рис. 7. Изменение временного шага τ без прогноза (а) и с прогнозом (б) начального приближения

Программный комплекс, разработанный на основе изложенных выше методов, реализован на языке Паскаль в среде программирования Delphi7. Исходные данные для моделирования задаются пользователем и включают следующее:

размеры детали;
характеристики материала покрытия и подложки;
параметры лазерного излучения;
параметры численного метода (допустимая погрешность, диапазоны изменения шагов).

Результатами моделирования являются:
таблица значений температур для всех точек расчетной области в любой момент времени;
трехмерные графики температурного поля для любого сечения xOy (см. рис. 3);

изолинии температур в любой плоскости (рис. 6);

двухмерные графики, отображающие работу адаптивного метода: распределение узлов сетки по всем координатам (см. рис. 4), изменение временного шага τ (рис. 7) и погрешности $\max |e_{ijm}|$ в процессе вычислений.

Результаты моделирования. Расчеты проводились при таких значениях параметров: $L_x = 2$ см, $L_y = 2$ см, $L_z = 1$ см, $h = 0,1$ см, $q_{\max} = 1E8$ кг/с³, $U_c = 20^\circ\text{C}$, радиус пятна луча $r = 0,2$ см, его скорость 2,5 см/с, $t_{\text{кон}} = 0,8$ с.

Сложно найти точное аналитическое решение данной задачи, поэтому при исследовании эффективности адаптивного метода в качестве эталон-

Таблица 1. Результаты расчетов с фиксированной и адаптивной сетками

Сетка	τ	n	Максимальная абсолютная погрешность	Допустимая локальная относительная погрешность	Время расчета, с
Фиксированная	0,05	10	3191	—	10
		40	466	—	12
		80	554	—	21
	0,01	10	3188	—	56
		40	403	—	62
		80	176	—	111
	0,002	10	4192	—	165
		40	499	—	180
		80	70	—	435
	Адаптивная	—	234	0,1	165
		—	278	0,15	131
		—	295	0,2	128
		—	345	0,3	74

Таблица 2. Влияние прогноза начального приближения на эффективность расчетов

Вариант расчета	Максимальная абсолютная погрешность	Время расчета, с
Без учета скорости сходимости метода Ньютона		
	365,72	216
С учетом скорости сходимости метода Ньютона	373,77	208
без прогноза	317,23	176
	303,73	165

ного использовано решение, полученное на равномерной фиксированной сетке с малым шагом (число пространственных шагов $n=90$, временной шаг $\tau=0,002$). Для получения нормы абсолютной погрешности его сравнивали с решениями, полученными при расчетах с различными фиксированными и адаптивными сетками (табл. 1).

Как видно из табл. 1, сложно подобрать фиксированную сетку с минимальным значением n , которая давала бы достаточно точные результаты. Так, при $n=10$ максимальная температура в центре луча составляла 5418°C вместо 2600°C в эталонном решении. При использовании адаптивной сетки допустимую погрешность задаем априори и программа автоматически определяет такое расположение узлов, при котором их число будет минимальным, а погрешность не будет превышать заданную.

Результаты исследований свидетельствуют о том, что при одинаковой точности адаптивный метод требует в полтора-два раза меньше машинного времени.

В процессе численных экспериментов подтверждено влияние выбора начального приближения на процесс решения НАУ методом Ньютона. Если в качестве начального приближения для метода Ньютона использовать значения температуры на предыдущем временном слое, то в силу больших градиентов эти значения будут далеки от окончательного решения и процесс не сойдется за допустимое число итераций m_{\max} , принятое равным шести. В этом случае происходит отказ от результатов последнего временного шага и возврат на предыдущий временной слой, причем шаг по времени уменьшается вдвое (см. рис. 7, *a*). Практически это обуславливает увеличение общего числа временных шагов и времени решения, так как хотя метод интегрирования допускает увеличение временного шага τ , метод Ньютона реализует отказы по мере его увеличения.

Если в качестве начального приближения принять прогнозируемое, которое вычисляется по формуле $U_0(x, y, z, t+\tau)=U(x, y-V\tau, z, t)$ и соответствует температуре в точках предыдущего положения луча, число требуемых итераций существенно сокращается и допускается гораздо большее значение τ (см. рис. 7, *b*). Это приводит к сокращению времени расчета на 20—30 % (табл. 2).

Особенностью данной задачи является одновременное использование метода интегрирования ДУЧП и метода решения НАУ. Это потребовало модификации метода построения адаптивной сетки, в котором следует учитывать не только погрешность решения дифференциального уравнения, но и скорость сходимости метода Ньютона. Если последний сходится за число итераций, близкое к максимально допустимому m_{\max} , то следует уменьшить временной шаг τ , чтобы избежать отказов. Учет этого фактора сокращает время расчета на 10—15 % (см. табл. 2).

Выводы. Моделирование высокоградиентных температурных полей значительно ускоряется при использовании адаптивных методов решения краевых задач. Эффективный выбор начального приближения при решении систем НАУ и учет взаимного влияния метода интегрирования и метода Ньютона существенно сокращают общие затраты машинного времени.

The results of application of adaptive algorithm are considered to the decision of nonstationary nonlinear three-dimensional of heat conduction equation simulating the temperature field when applying a coating on some part using laser radiation.

1. *Перелома В. А., Щерба А. А., Подольцев А. Ди др. Исследование тепловых процессов и структуры поверхностного слоя при лазерной наплавке порошковых материалов.* — Киев : Изд. Ин-та электродинамики НАН Украины, 1998. — 47 с.
2. *Лук'яненко С. О. Адаптивні обчислювальні методи моделювання об'єктів з розподіленими параметрами.* — Київ : Вид-во «Політехніка», 2004. — 236 с.
3. *Калиткин Н. Н. Численные методы.* — М. : Наука, 1978. — 512 с.

Поступила 27.06.08

ГОЛОВКО Леонид Федорович, д-р техн. наук, профессор Национального технического университета Украины «КПИ». В 1971 году окончил Киевский госуниверситет им. Т.Г. Шевченко. Область научных исследований — технология использования лазерного излучения.

ЛУКЬЯНЕНКО Святослав Алексеевич, д-р техн. наук, профессор Национального технического университета Украины «КПИ». В 1971 году окончил Киевский госуниверситет им. Т.Г. Шевченко. Область научных исследований — численные методы при моделировании непрерывных систем.

СМАКОВСКИЙ Денис Сергеевич, аспирант Национального технического университета Украины «КПИ», который окончил в 2006 г. Область научных исследований — математическое моделирование объектов с распределенными параметрами.

АГЕЕНКО Валерия Анатольевна, студентка Национального технического университета Украины «КПИ». Область научных исследований — методы проектирования программных систем.

МИХАЙЛОВА Ирина Юрьевна, студентка Национального технического университета Украины «КПИ». Область научных исследований — инженерия программных систем.