

激光加工中传热相变问题的焓解法*

虞 钢 安永强 胡幼娟

(中国科学院力学所 北京 100080)

提要 基于焓方法发展的二维轴对称数学模型, 考虑了激光束能量的时间和空间分布以及材料的变热物性影响, 模拟了激光加工中材料的传热和相变过程, 并分别计算了高斯光束及平面圆形光束作用于纯铁时材料内部的气液及固液界面随时间的发展及非稳态温度场演化.

关键词 激光加工, 相变, 数学模型, 焓法

1 引 言

激光加工过程表现出快速、复杂、多维和多参数影响等特点, 传统的实验手段难以确定靶材中的瞬态温度变化和相转变, 理想的数学模型无疑对此问题的研究具有指导意义. 早期的模型工作主要研究向半无限大基体内部的传热, 相继发展的数学模型考虑激光参量、材料参数、熔池流场及等离子体等的影响. 利用显式插分法求解的数学模型^[1]没有考虑液态的再凝固. 考虑激光传输特性的数学模型^[2]认为激光烧蚀过程中不存在熔化层. 焓方法^[3,4]为解决传热相变问题提供了简易途径, 使得相前沿条件纳入其积分形式的弱解公式中, 无需连续跟踪相前沿, 而是在完成温度场的计算后由差值方法确定. 我们利用焓法发展的数学模型考虑了材料的变热物性(包括吸收率、导热系数和热容)以及激光束的传输特性影响, 以 YAG 圆形激光束(高斯光束和平面圆光束)与纯铁作用为例, 计算模拟了材料中发生的从传热到熔化的全过程.

2 数学模型

为了明确数学模型的可适用性和局限性, 我们作了下述的主要简化与假设: (1) 经典的传热理论适用于激光与材料相互作用过程; (2) 材料各向同性并且忽略由于温度引起的密度变化; (3) 材料的相变分熔化与气化两个步骤, 且分别发生在特定的温度条件下; (4) 不考虑熔池内液体流动对温度场的影响; (5) 气化物质包括等离子体对入射激光的传输不产生影响.

取柱坐标系分析问题, 认为基材半无限大, 图 1 为模型示意图. 激光垂直入射在材料表面, 能量吸收导致传热, 表面熔化产生熔池出现固液界面 S_1 , 进一步发生气化使材料去除产生气液界面 S_2 . 焓定义为显热 $C_p T$ 与潜热 L 之和. 这里 C_p 为定压热容, T 为温度. 采用热焓和温度一起作为待求函数, 在整个区域建立一个统一的能量方程. 多维相变问题的控制方程为

* 国家自然科学基金(项目号 69678007)资助项目.

收稿日期: 1999-05-04; 收到修改稿日期: 1999-06-29

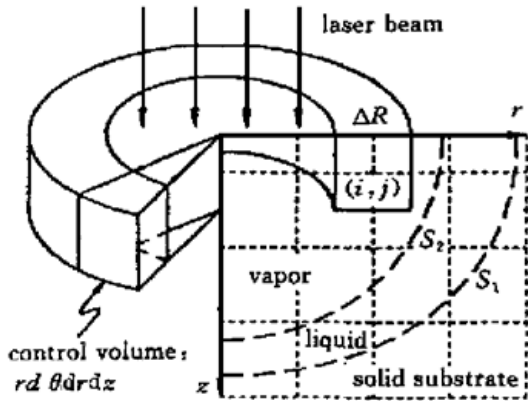


图1 计算模型的坐标与网格系统示意图

Fig. 1 Schematic diagram illustrating the coordinates and grid system for the model

$t = 0$ 时, 整个计算区域内的温度为室温 T_a .

焓与温度的关系式为

$$T = \begin{cases} h/C_{(h)} & h < h_m \\ T_m & h_m \leq h \leq h_m + L_m \\ (h - L_m)/C_{(h)} & h_m + L_m < h < h_v \\ T_v & h_v \leq h \leq h_v + L_v \end{cases} \quad (3)$$

式中 h_m 和 h_v 分别为固态和液态饱和焓, L_m 为熔化潜热, $C_{(h)}$ 为热容. 显然, 由控制方程、边界条件和初始条件构成了一组非线性方程.

3 离散方法及解的步骤

计算区域的 r 方向和 z 方向尺度范围都取为 R . 将计算区域离散为 $\Delta R \times \Delta R$ 的网格, 如图 1. 在整个计算过程中时间步长 $\Delta \tau$ 保持不变. 部分无量纲量的定义为: $\theta = (h - h_m)/C_0(T_m - T_a)$; $\phi = (T - T_m)/(T_m - T_a)$; $\Delta F_0 = k_0(\Delta \tau)/\rho C_0 R^2$; $\delta = \Delta R/R$; $B_i = \alpha R P_s/k_0(T_m - T_a)$. 这里 θ , ϕ , ΔF_0 , B_i , δ 分别为无量纲化的焓、温度、时间步长、空间步长、比特数. C_0 和 k_0 分别表示室温时的热容和导热系数. 若空间变量用中心差分, 时间变量用后差; 上标 m 表示时间步, 下标对 (i, j) 表示格点位置. 计算区域内部的离散化控制方程为

$$\frac{\theta_{i,j}^m - \theta_{i,j}^{m-1}}{\Delta F_0} = \frac{1}{\delta^2} \left[\left(1 + \frac{1}{2i}\right) \phi_{i+1,j} + \left(1 - \frac{1}{2i}\right) \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1} - 4\phi_{i,j} \right] \quad (4)$$

外部边界上的格点, 由于控制单元具有不同的形状导致具有不同的差分方程. 圆柱中心格点上有差分方程

$$\frac{\theta_{0,j}^m - \theta_{0,j}^{m-1}}{\Delta F_0} = \frac{1}{\delta^2} \cdot (4\phi_{1,j} + \phi_{2,j} + \phi_{j-1} - 6\phi_{j,j}) \quad (5)$$

激光作用的边界格点还需引入激光源项, 发生气化前的差分方程为

$$\frac{\theta_{i,0}^m - \theta_{i,0}^{m-1}}{\Delta F_0} = \frac{1}{\delta^2} \cdot \left[\left(1 + \frac{1}{2i}\right) \phi_{i+1,0} + \left(1 - \frac{1}{2i}\right) \phi_{i-1,0} + 2\phi_{i,1} - 4\phi_{i,0} \right] + 2 \frac{B_i^m}{\delta} \quad (6)$$

边界拐角格点上差分方程稍有不同. 发生气化后的气液界面所在格点的差分方程只是在上式的基础上稍作改动. 焓与温度的关系式 $T-h$ 在无量纲后成为 $\phi\theta$ 关系式.

$$\rho \frac{\partial h}{\partial \tau} = \nabla [k(\nabla T)] \quad (1)$$

其中 ρ 为材料密度, h 为焓, τ 为时间, k 为导热系数.

在气液界面上的温度为沸点 T_v , 并且吸收的激光能量由热传导和相变潜热两部分来平衡

$$\alpha P_s + \kappa_l \left[\frac{\partial T_l}{\partial n} \right]_w = L_v \rho v_w \quad (2)$$

式中 α 为材料对激光的吸收率, P_s 为激光源的功率密度, n 为界面法线方向单位长度, L_v 为气化潜热, v_w 为界面迁移速率, 下标 w 表示气液界面, 下标 l 表示液态相.

固液界面上的温度保持为熔点 T_m . 在自由边界上没有热量交换并且温度保持为室温 T_a . 初始状态 t

在用迭代法求解非线性方程组时,用 $m - 1$ 时刻的 θ^{m-1} 作为 m 时刻 θ 的试探解 θ' ,由 $\Phi\theta$ 关系式决定 Φ 的取值 Φ' ,将它代入离散后的控制方程同时利用边界条件即可求出新的 θ'' ,然后再由 $\Phi\theta$ 关系式计算 Φ 的新取值 Φ'' ,再代入离散后的非线性方程求出改进的 θ''' .重复进行直到求得最终的收敛解.导热系数、热容和吸收率都是温度的强关联函数,在每次计算中都代入它们的新迭代值.

采用一种光源跳跃的算法来确定移动光源的位置,基于能量守恒原理把激光源等效为材料内部的移动热源.定义 $h_g = h_v + L_v$ 为气态初始焓.当某一控制单元的焓 $h_{(i,j)} > h_g$ 时,表明该单元已经完全转变为气态.计算中我们没有考虑气态内部的温度场.对体积为 ΔV 的单元,假设 n 时刻该单元的焓 $h_{(i,j)}^n < h_g$;在 $n + 1$ 时刻进入该单元的静能量为 Δq .首先根据方程计算出 $h_{(i,j)}^{n+1}$,如果 $h_{(i,j)}^{n+1} < h_g$,表明该单元没有完全转变为气态,则该单元的计算结束并转移到下一单元.否则 $h_{(i,j)}^{n+1} \geq h_g$,则该单元已经完全转变为气态,并且激光源迁移到下近邻单元上.此时激光源能量的降低部分 $\Delta q'$ 为激光源迁移过的单元的焓增加.激光源连续迁移直到计算区内的所有网格单元的焓 $h_{(i,j)}^{n+1} < h_g$.

由计算出的焓场和温度场确定移动气液和固液界面的位置.设某一单元的焓为 $h_{(i,j)}$,当 $h_m \leq h_{(i,j)} \leq h_m + L_m$ 时,则此单元的温度为熔点 T_m ,固液界面落在该单元内,其中液化部分的体积 ΔV_x 由线性插值关系式 $h_m - \Delta V_x L_m / \Delta V = h_{(i,j)}$ 来确定,如果在 z 方向的第 i 列没有满足上述条件的单元,则总有 $h_m + L_m \leq h_{(i,j-1)}$ 且 $h_{(i,j)} \leq h_m$,表明固液界面存在于这两个单元的其中之一,并且 z 方向需要进一步细化网格,直到出现温度为 T_m 的单元.确定气液界面的位置只需将上述 h_m, L_m, T_m 参数替换为 h_v, L_v, T_v 即可得.

4 数值算例与结果讨论

以 IQL-10 型 YAG 脉冲激光器作为计算光源,其特点是脉宽、重复率和脉冲能量都可在一定范围内调节.光束能量的时间分布也可作一定的改变,空间分布通过衍射光学元件变换获得,如圆斑、方斑和可控强度分布等.以高斯光束(束腰半径 R_s) 和平面圆光束(均匀光斑半径 R_s) 作为计算实例,并取 $R_s = 1.5 \text{ mm}$,功率密度空间分布函数与文献[5]中相同.

表 1 纯铁的材料参数

Table 1 Material parameters of iron

$\rho / \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	T_m / K	T_v / K	$L_m / \text{J/kg}$	$L_v / \text{J/kg}$
7870	1810	3273	2.66×10^5	60.95×10^5

表 2 纯铁特性参数随温度的变化

Table 2 Temperature-dependent parameters of iron

T / K	293	1060	1600	> 1810
$\alpha / \%$	9.71	37.0	39.6	43.0
$K / \text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$	73.6	29.4	30.3	30.3
$C / \text{Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$	439	665	544	544

由于材料的多样性和材料物性参数实验数据的短缺,难以确定具体材料的准确参数.计算中取纯铁作为靶材,其材料参数^[6,7]在表 1 中列出.采用阶跃函数与线性近似相结合的方法得

出参数随温度的变化关系. 随温度变化的材料特性参数^[7,8](吸收率 α , 导热系数 K 和热容 C) 见表 2.

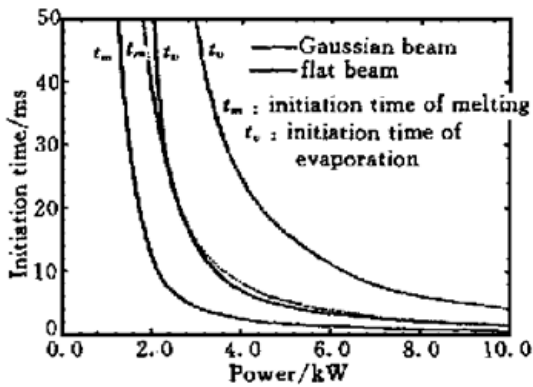


图 2 熔化和气化的起始时间与入射激光功率的关系

Fig. 2 Initial time of melting/evaporation vs beam power

计算预测的熔化起始时间 t_m 和 气化起始时间 t_v 与入射激光功率的关系如图 2. 对于每一个关系都存在一个临界激光功率值 P_c . 在 P_c 以上, 熔化和气化的开始几乎是瞬态的, 即相对于激光的起始作用时间很短. 气化相对于熔化的滞后起始时间 $t_v - t_m$ 随着激光功率的增强而减小. 这是由于熔化以后吸收率提高但导热系数却降低. 不同光束作用结果的比较可知平面圆光束的熔化临界功率提高到了 3 kW, 而高斯光束只有 2 kW.

发生气化以后, 金属表面将出现烧蚀. 在 50 ms 时不同的连续激光功率(5 kW 和 10 kW) 作用下的材料内部的气液和固液界面位置如图 3. 不同功率的激光作用结果可知: 高功率下气液界面更靠近于固液界面, 即液化层相对薄一些.

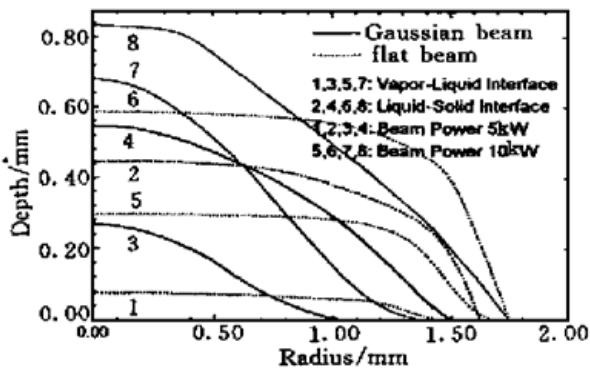


图 3 在 50 ms 时不同光束作用下界面形状的计算结果

Fig. 3 Calculated interface profiles at 50 ms for different laser beams and powers

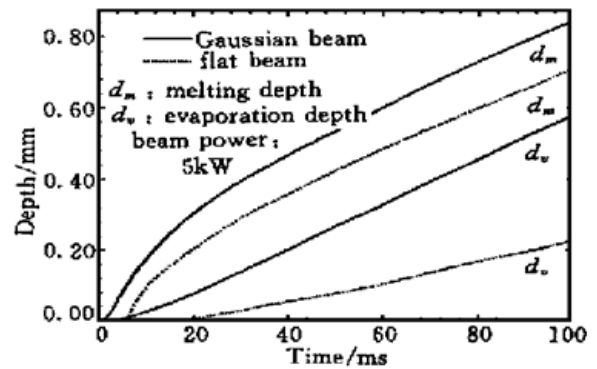


图 4 不同光束作用下熔化和气化深度与时间的关系

Fig. 4 Depth of melting/evaporation vs time for different laser beams

取连续输出的激光功率为 5 kW, 不同激光束作用下的烧蚀池与熔池深度(沿光束轴线 $r = 0$) 随时间的关系曲线如图 4 所示. 在计算时间内, 对于高斯光束, 发生气化以后液态薄层的深度近似地保持为 0.24 mm. 但对于平面圆光束, 液态层的深度随时间逐渐变大.

脉冲激光作用下材料内部沿光束轴线方向 ($r = 0$) 距表面下不同深度处的温度场演化历史的计算结果如图 5 (a) 和 (b). 其中激光参数为: 脉冲能量 50 J, 脉宽 10 ms, 脉冲重复率 20 Hz. 不同深度 d 处所达到的最高温度 T_{max} 和达到最高温度所需的时间 t_{max} 不同. 随 d 的增大, 温度梯度和温度变化率急剧变小, 同时 t_{max} 变大. 对同一深度位置, 温度上升阶段的变化率大于下降阶段. 对于高斯光束, 在 $d = 0.125$ mm 处, 温度上升阶段和下降阶段都出现平台, 这对应于在该时间段内发生固液相变. 相变使其周围近邻的温度变化率减小.

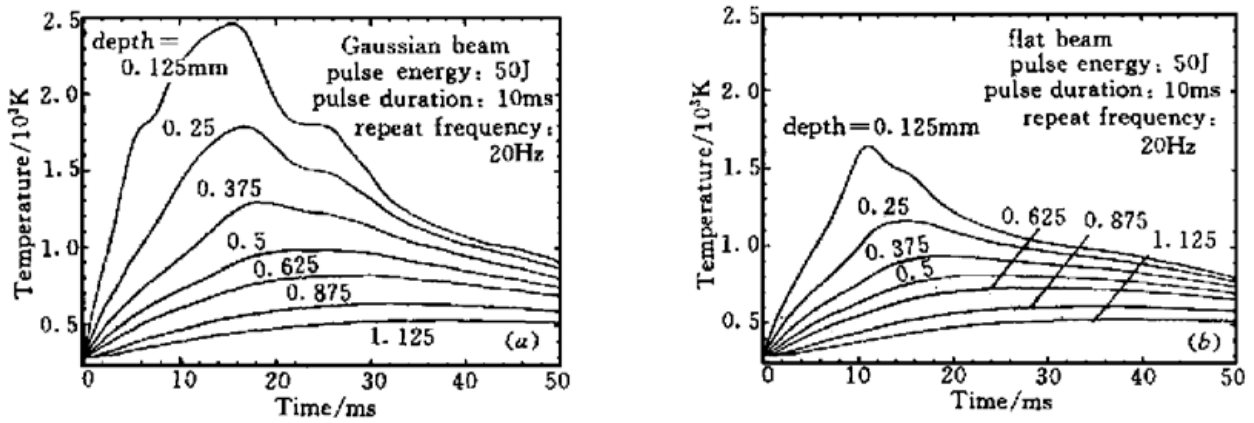


图 5 高斯光束 (a) 和平面圆光束(b) 作用下材料内的温度随时间的发展

Fig.5 Development of temperature at different depths along beam axis during pulsed Gaussian (a) and flat-top (b) laser processing

由数值计算曲线可以定量分析材料在激光淬火过程中的温度及相变历史, 为确定强化组织和硬化范围提供了理论依据. 由熔化和气化的起始曲线能够进行激光硬化的参数选择. 利用模型还可以进行与表面熔化-凝固有关的合金化方面的传热学分析. 由预测的相界面随时间的发展容易确定激光打孔和焊接过程中光束传输特性对孔形和熔池的瞬态位置和形状的影响. 为了验证模拟的正确性, 我们以碳钢为靶材进行了大量的激光热处理的硬化层深以及激光打孔孔形的实验研究, 比较实验与模拟的结果表明模拟计算的误差在允许范围以内.

隐式有限差分方法的离散结果为一组非线性方程, 考察稳定性问题的常规方法在这里不适用. 计算中只要选择合适的时间和空间步长总能得到稳定的收敛解. 模型建立忽略了激光与材料作用界面的对流和辐射热损耗^[2] $h_c(T - T_a) - \epsilon\sigma(T^4 - T_a^4)$ 以及气化物质对入射激光束的屏蔽作用, 这些都使预测的温度场比实际情况偏大. 这里 h_c 为对流系数, ϵ 为热辐射系数, σ 为 Stefan-Boltzman 常数.

5 结 论

有限差分焓模型在解决激光加工过程中的传热相变问题中使相变界面位置的确定简化. 利用模型分别计算了高斯光束和平面圆光束与纯铁作用过程中材料从传热到熔化再到气化全过程中固液及气液界面随时间的发展及材料内部的非稳态温度场演化, 并由此得到了气化和熔化的起始时间等. 本文的数学模型有助于理解激光加工过程和优化工艺参数.

参 考 文 献

- 1 M. Qiu, J. Watson, D. S. Thompson *et al.*. Modelling the interaction between laser and target material in laser microspectral analysis. *Optics & Laser Technology*, 1994, **26**(3): 157~ 166
- 2 Michael F. Modest. Laser through-cutting and drilling models for ablating/ decomposing materials. *J. Laser Appl.*, 1997, **9**: 137~ 145
- 3 N. Shamsundar, E. M. Sparrow. Analysis of multidimensional phase change via the enthalpy model. *J. Heat Transfer*, 1975, **97**: 333~ 340
- 4 Zeng Xin, Xin Mingdao. An implicit enthalpy solution of conduction-controlled phase change problems. *J. Chongqing University* (重庆大学学报), 1991, **14**(6): 8~ 14 (in Chinese)
- 5 Chen Min, Chen Jianwen, Xu Zhizhan. Propagation of a finite-diameter light beam in biological tissues.

Chinese J. Lasers (中国激光), 1999, **A26**(2): 153~ 158 (in Chinese)

- 6 T. Iida, R. I. L. Guthrie. *The Physical Properties of Liquid Metals*. Oxford: Clarendon Press, 1988
- 7 J. Xie, A. Kar, J. A. Rothenflue *et al.*. Temperature-dependent absorptivity and cutting capability of CO₂, Nd-YAG and chemical oxygen-iodine lasers. *J. Laser Appl.*, 1997, **9**: 77~ 85
- 8 A. Goldsmith, T. E. Waterman, H. J. Hirschhorn. *Handbook of Thermophysical Properties of Solid Materials*. New York: The Macmillan Company, 1961. Vol. 1, 353~ 360

Enthalpy Solution of Conduction Phase Change During Laser Processing

Yu Gang An Yongqiang Hu Youjuan

(*Institute of Mechanics, The Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080*)

Abstract An axisymmetric model has been developed to simulate conduction phase change during laser processing based on enthalpy method. The spatial and temporal profile of the laser beam and the temperature dependent properties of the material have been taken into account in the model. A Gaussian beam and a flat beam are used, respectively, to simulate the interaction with iron as target and the results for vapor-liquid and liquid-solid interface evolutions and temperature field development in the material are obtained.

Key words laser processing, phase change, model, enthalpy method