МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫЕ ПРОБЛЕМЫ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

INTERDISCIPLINARY PROBLEMS IN ADDITIVE TECHNOLOGIES

Материалы
IV Всероссийского научного семинара
с международным участием

29–31 октября 2018 г.

Томск 2019

УДК 621.00:004.925.84(063)
ББК 34.4:32.973л0
М43

Междисциплинарные проблемы аддитивных технологий : материалы IV
М43 Всероссийского научного семинара с международным участием [Электрон. текстовые дан.] ; Томский политехнический университет. – Томск : Изд-во Томского политехнического университета, 2019. – 101 с.

ISBN 978-5-4387-0873-5

Additive manufacturing, или аддитивные технологии (АТ), включают большое разнообразие различных методов, использующих лазерное и электронно-лучевое сплавление порошков, проволочное и электродуговое аддитивное производство, селективное лазерное спекание, непосредственное лазерное формование, прямое лазерное осаждение, аддитивные процессы, типичные для пластмасс (пластиков) и керамик, такие как ламинирование (послойное) и стереолитографию, а также множество комбинированных методов, сочетающих различные виды воздействий в присутствии разных физических полей. Общая основа всех методов заключается в том, что они представляют собой производственные процессы, претерпевшие быструю эволюцию от сварочных процессов и быстрого прототипирования к производственным процессам особого типа, подходящим для мелкосерийного производства деталей в различных приложениях в области космоса, самолетостроения, машиностроения и медицины. В целом АТ – постоянно изменяющиеся технологии, предоставляющие свободу для дизайнерского творчества, связанного с компьютерным конструированием (Computer Aided Designs (CAD)), формированием конечного продукта (изделия) и созданием материалов и изделий с уникальными свойствами.

Additive technology is layer-by-layer construction or synthesis of a product by means of step-by-step binding of layers of different materials. Additive Manufacturing is the process of making objects from a 3D-model through layer-by-layer binding of materials, as opposed to subtractive manufacturing methods such as traditional machining. These are high technologies developing fast in various sectors, from space to medicine. Tomsk is the most suitable place for the seminar devoted to interdisciplinary problems of additive manufacturing due to various causes. The universities (Tomsk Polytechnic University and Tomsk State University) and the research institutes of Tomsk Scientific Center are the major enterprises in Tomsk. Basic scientific directions include materials science, physics of strength and plasticity of new materials, engineering design of laser and electron beam equipment, development of technologies for materials synthesis and treatment, etc. The activities of Scientific and Educational Center “Modern Manufacturing Technologies” vary from modeling of materials and products to their control and fatigue testing. Special Economic Zone of Technical and Innovation Type was defined by Federal Law of the RF No. 116-FZ as of July 22, 2005 as a part of the Russian Federation territory, where the special business regime is implemented. Therefore, Tomsk provides all necessary conditions for a fruitful discussion in different scientific fields related to additive manufacturing.

УДК 621.00:004.925.84(063)
ББК 34.4:32.973л0

ISBN 978-5-4387-0873-5
© ФГАОУ ВО НИ ТПУ, 2019

О СТРОЕНИИ СТРОЕНИИ МЕЖЗЕРЕННЫХ И МЕЖФАЗНЫХ БОЛЬШЕУГЛОВЫХ ГРАНИЦ И ИХ ВКЛАДЕ В ВЫСОКУЮ ДЕФОРМАЦИОННУЮ СПОСОБНОСТЬ ГЕТЕРОФАЗНЫХ ВЫСОКОЛЕГИРОВАННЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ (КРАТКИЙ ОБЗОР)

Гвоздев А.Е. [a], Сергеев А.Н., Малий Д.В., Кутепов С.Н.

[1] *Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого*
Россия, г. Тула, пр. Ленина, 125, 300026
[a] E-mail: gwozdew.alexandr2013@yandex.ru

Введение

В настоящее время существует ряд гипотез, связывающих строение большеугловых границ с процессами, происходящими на отдельных их участках при взаимодействии с внутризеренными дефектами и их скоплениями. Учитывая важность данного вопроса в процессах пластического формоизменения и нестационарного термомеханического деформирования сложнолегированных гетерофазных металлических систем (чистых металлов, сталей, цветных сплавов и др.), рассмотрим эти гипотезы более подробно на примере сверхпластической деформации – типичном случае высокой деформационной способности металлических систем различной природы.

Основная часть

Наиболее распространена гипотеза, развиваемая в работах [1-4]. Она предполагает строение большеугловой границы как границы Мотта, состоящей из чередующихся участков с дислокационным строением в местах с невысокой разориентировкой решеток соседних зерен и участков с аморфной структурой там, где разориентировка велика.

Аморфные участки легко обеспечивают аннигиляцию дислокаций в голове скоплений, служащих стопорами для ЗГП (рернограничное проскальзывание), которая осуществляется только при скольжении зернограничных дислокаций вдоль относительно прямолинейных участков границ зерен, ориентированных в направлении вектора максимальных касательных напряжений. Если скопления упираются в участки границ с дислокационным строением, возможны два варианта снятия стопоров – либо путем переползания головной дислокации в соседнюю экстраплоскость, или перехода ее в границу в зависимости от угла разориентировки, избыточной концентрации вакансий и величины напряжения в голове скопления, либо путем образования кластеров с аморфной структурой, формирующихся из скоплений частичных дислокаций с избыточными вакансиями или вакансионными петлями, которые с избытком образуются при СПД (сверхпластическая деформация). На участках с аморфной структурой ЗГП происходит по механизму вязкого ньютоновского течения [2, 3]. Указанные процессы особенно интенсивно развиваются в местах углового схода границ соседних зерен и приводят к постепенному повороту зерен в направлении, благоприятном по ориентации к вектору действия максимального касательного напряжения и увеличению числа таких зерен. Такова последовательность общего процесса аккомодации зерен при СПД.

Другая гипотеза отводит основную роль в аккомодации зерен при СПД развитию процессов микромиграции границ зерен, к постепенному повороту зерен и распространению ЗГП на весь объем растягиваемого образца. Поэтому они справедливо называют ЗГП кооперационным процессом. Однако известно, что микромиграция границ возможна только при относительно высоких температурах, которые находятся только в части диапазона проявления эффекта сверхпластичности, и, наоборот, может даже препятствовать ЗГП, как это наблюдается при росте зерен. Кроме того, вторая гипотеза не учитывает также аномально высокую диффузионную подвижность атомов за счет пресыщения неравновесной кристаллической решетки дефектами и ее нестабильности вблизи фазовых границ, что особенно ярко проявляется в условиях фазовой сверхпластичности. Она так же пренебрегает

вкладом в ЗГП фазовых границ, который весьма существенен при различии механических свойств фазовых составляющих.

Обычно из экспериментов при СПД легко определяются параметры σ_T, ε, m и оптимальная температура Т по выведенным соотношениям авторов [1]

$$\varepsilon = \sigma^n \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right).$$

Если же величины Q, определяемые по этим уравнениям отличаются, следует уточнять величину m. Итак, в первом приближении в рамках высказанной нами гипотезы об особенностях ЗГП механизм возврата будет подобен таковому, как-либо при дислокационной, либо диффузионной ползучести, в уравнениях для которых показатель степени при σ больше 1, но различен (Рисунок 1).

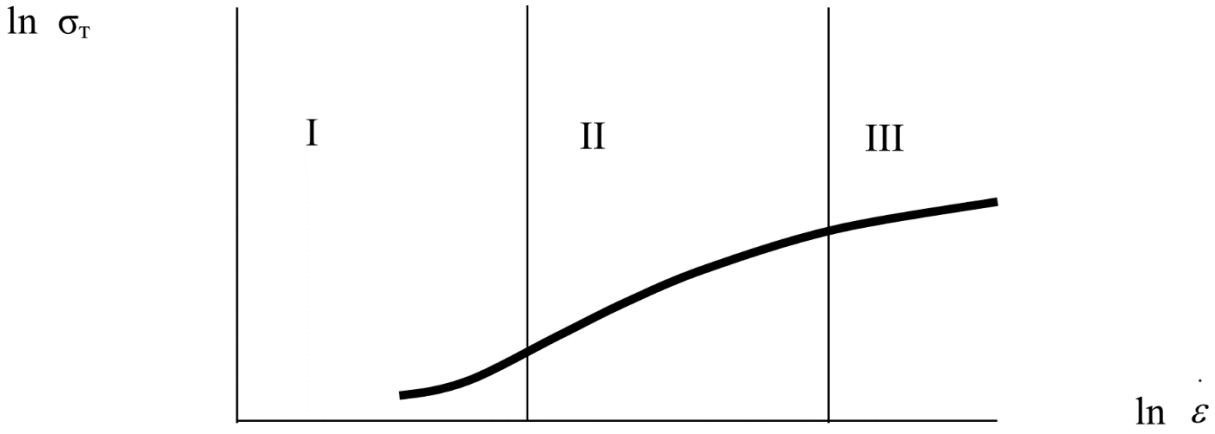


Рисунок 1. Зависимость напряжения течения при одноосном растяжении от скорости деформации: I – диффузионная ползучесть (n=2–5); II – сверхпластическая деформация (m=0,35–1,0); III – дислокационная ползучесть (n=3-4); m – коэффициент чувствительности напряжения течения σ_T к относительной скорости деформации ε; n – показатель степени при напряжении в уравнениях ползучести

При СПД, характерной для сплавов, либо вообще не подверженных фазовым превращениям, либо с небольшой разницей сопротивления деформации фазовых составляющих, когда основным механизмом деформации является ЗГП, контролируемое по типу диффузионной ползучести, отношение оптимальной температуры СПД к температуре солидуса (T/T_C) может составлять: в случае ползучести по Кобле 0,3 – 0,5, а в случае ползучести по Набарро-Херингу 0,6 – 0,9. В сплавах с полиморфным превращением при существенной разнице в сопротивлении деформации исходных и возникающих новых фаз, когда механизм СПД осуществляется за счет проскальзывания как по межзеренным, так и по межфазовым границам и контролируется механизмами по типу диффузионной ползучести (преобладает объемная диффузия), отношение оптимальной температуры СПД к температуре полиморфного превращения составляет T/T_C = 0,85 – 0,95. Следует заметить, что размер исходного зерна влияет существенно на параметры СПД только при структурной СПД и ограниченно – при фазовой СПД [5].

В таблице 1 представлены параметры СПД для стали Р6М6 и наиболее характерных промышленных марок металлических сплавов с кристаллической структурой по данным, собранным и систематизированным в работах [5-8].

Заключение

Таким образом, для сплавов с кристаллической структурой энергия активации СПД при структурной сверхпластичности немного превышает энергию активации самодиффузии атомов основы по большеугловым границам, но значительно меньше энергии активации

объемной самодиффузии, а при фазовой сверхпластичности она имеет еще более низкие значения и зависит от дисперсности структурных и фазовых составляющих, что указывает на существенный вклад в ЗГП границ между поверхностями раздела фаз. В аморфных сплавах энергия активации СПД соответствует значениям энергии активации ньютоновского вязкого течения, и она тем выше, чем больше величина отношения температуры стеклования к температуре плавления сплавов.

Полученные результаты могут быть использованы при создании ресурсосберегающих технологий обработки материалов в различных условиях и состояниях с использованием новых нанокомпозиционных смазок и покрытий [9-22].

Работа выполнена по федеральной целевой программе «Исследование и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014 – 2020 годы» (уникальный идентификатор проекта RFMEF 157717X0271).

Таблица 1. Параметры СПД металлических высоколегированных систем

Марка стали	Исходное состояние, структура и размер зерна d, мкм	Параметры СПД					
		Температура t, ^{o}C	Скорость деформации ε, c^{-1}	Напряжение σ_t, МПА	Удлинение δ, %	Коэффициент, m	Энергия активации Q, кДж/моль
Fe-армко	Лист горячекатанный	850	$1{,}2x10^{-3}$	> 200	> 200	0,5	161
Ст.40Х	Зернистый П+Ф, 25	725	$1{,}78x10^{-3}$	69	97	0,5	136
Ст.50	То же, 40	720	$1{,}65x10^{-3}$	72	93	0,5	130
У8А	Зернистый П+Ц, 27	730	$2{,}13x10^{-3}$	79	99	0,5	136
Р9	Сорбитообразное	800	$1{,}33x10^{-3}$	65,3	120	0,5	146
Р18	То же	810	$1{,}33x10^{-3}$	54,7	110	0,5	160
Р6М5	-//-	830	$1{,}0x10^{-3}$	56,5	125	0,3	160
Р9Ф5	-//-	810	$1{,}66x10^{-3}$	62	130	0,5	147

Список литературы

1. Макаров Э.С., Ульченкова В.Э., Гвоздев А.Е., Сергеев Н.Н., Сергеев А.Н. Сопряженные поля в упругих, пластических, сыпучих средах и металлических труднодеформируемых системах: монография / под ред. проф. А.Е. Гвоздева. Тула: Изд-во ТулГУ, – 2016. – 526 с.

2. Шоршоров М. Х. К определению энергии активации сверхпластической деформации при одноосном растяжении / М. Х. Шоршоров, А.Е. Гвоздев, И.В. Тихонова, А.В. Афанаскин // Труды X-ой международной конференции «Взаимодействие дефектов и неупругие явления в твердых телах. – ТулГУ. Тула, 2002. – 226 с.

3. Шоршоров М.Х. Расчет кластерной структуры расплава, ее влияние на образование наноаморфных твердых фаз и их структурную релаксацию при последующем нагреве / М.Х. Шоршоров, А.Е. Гвоздев, А.В. Афанаскин, Е.А. Гвоздев // Металловедение и термическая обработка металлов. – 2002. – № 6. – С.12–16.

4. Шоршоров М. Х. Сверхпластичность металлических сплавов // Материаловедение. – 2001. – №5. – С. 15–21.

5. Шоршоров М. Х. Сверхпластичность металлических материалов / М. Х. Шоршоров, А.С. Тихонов и др. – М.: Наука, 1973. – 220 с.

6. Гвоздев А.Е. Термомеханика упруговязкопластического конечного деформирования / А.Е. Гвоздев, А.А. Маркин // Известия Академии наук «Механика твердого тела». – 1998. – № 6. – С.115–121.

7. Гуляев А.П. Сверхпластичность стали / А.П. Гуляев. – М.: Металлургия, 1982. – 56 с.

8. Кайбышев О.А. Сверхпластичность промышленных сплавов / О.А. Кайбышев. – М.: Металлургия, 1984. – 264 с.

9. Бреки А.Д., Александров С.Е., Тюриков К.С., Колмаков А.Г., Гвоздев А.Е., Калинин А.А. Антифрикционные свойства плазмохимических покрытий на основе SIO2 с наночастицами MOS2 в условиях трения верчения по стали ШХ15 // Материаловедение. – 2018. – № 1. – С. 31-35.

10. Бреки А.Д., Гвоздев А.Е., Колмаков А.Г. Использование обобщенного треугольника паскаля для описания колебаний силы трения материалов // Материаловедение. – 2016. – № 11. – С. 3-8.

11. Бреки А.Д., Диденко А.Л., Кудрявцев В.В., Васильева Е.С., Толочко О.В., Гвоздев А.Е., Сергеев Н.Н., Провоторов Д.А., Стариков Н.Е., Фадин Ю.А., Колмаков А.Г. Композиционные покрытия на основе полиимида А-ООО и наночастиц WS2 с повышенными триботехническими характеристиками в условиях сухого трения скольжения // Материаловедение. – 2016. – № 5. – С. 41-44.

12. Бреки А.Д., Диденко А.Л., Кудрявцев В.В., Васильева Е.С., Толочко О.В., Колмаков А.Г., Гвоздев А.Е., Провоторов Д.А., Стариков Н.Е., Фадин Ю.А. Синтез и триботехнические свойства композиционного покрытия с матрицей из полиимида (Р-ООО) ФТ и наполнителем из наночастиц дисульфида вольфрама при сухом трении скольжения // Материаловедение. – 2016. – № 4. – С. 44-48.

13. Бреки А.Д., Кольцова Т.С., Скворцова А.Н., Толочко О.В., Александров С.Е., Колмаков А.Г., Лисенков А.А., Гвоздев А.Е., Фадин Ю.А., Провоторов Д.А. Триботехнические свойства композиционного материала «Алюминий-углеродные нановолокна» при трении по сталям 12Х1 и ШХ15 // Материаловедение. – 2017. – № 11. – С. 37-42.

14. Бреки А.Д., Медведева В.В., Крылов Н.А., Колмаков А.Г., Фадин Ю.А., Гвоздев А.Е., Сергеев Н.Н., Александров С.Е., Провоторов Д.А. Противоизносные свойства пластичных смазочных композиционных материалов «Литол24-частицы гидросиликатов магния» // Материаловедение. – 2017. – № 3. – С. 38-42.

15. Гвоздев А.Е., Голышев И.В., Минаев И.В., Сергеев А.Н., Сергеев Н.Н., Тихонова И.В., Хонелидзе Д.М., Колмаков А.Г. Многопараметрическая оптимизация параметров лазерной резки стальных листов // Материаловедение. – 2015. – № 2. – С. 31-36.

16. Гвоздев А.Е., Журавлев Г.М., Колмаков А.Г. Формирование механических свойств углеродистых сталей в процессах вытяжки с утонением // Технология металлов. – 2015. – № 11. – С. 17-29.

17. Гвоздев А.Е., Колмаков А.Г., Провоторов Д.А., Сергеев Н.Н., Боголюбова Д.Н. Зависимость показателей сверхпластичности труднодеформируемых сталей Р6М5 и 10Р6М5-МП от схемы напряженного состояния // Деформация и разрушение материалов. – 2015. – № 11. – С. 42-46.

18. Гвоздев А.Е., Сергеев Н.Н., Минаев И.В., Колмаков А.Г., Тихонова И.В., Сергеев А.Н., Провоторов Д.А., Хонелидзе Д.М., Малий Д.В., Голышев И.В. Распределение температур и структура в зоне термического влияния для стальных листов после лазерной резки // Материаловедение. – 2016. – № 9. – С. 3-7.

19. Гвоздев А.Е., Сергеев Н.Н., Минаев И.В., Тихонова И.В., Колмаков А.Г. Роль процесса зародышеобразования в развитии некоторых фазовых переходов первого рода // Материаловедение. – 2015. – № 1. – С. 15-21.

20. Журавлев Г.М., Гвоздев А.Е., Сергеев Н.Н., Провоторов Д.А. Вариант расчета максимального упрочнения малоуглеродистых сталей в процессах пластической деформации // Производство проката. – 2016. – № 7. – С. 9-13.

21. Журавлев Г.М., Гвоздев А.Е., Сергеев Н.Н., Провоторов Д.А. Влияние деформационной повреждаемости на формирование механических свойств малоуглеродистых сталей // Производство проката. – 2015. – № 12. – С. 9-13.

22. Сергеев Н.Н., Сергеев А.Н., Кутепов С.Н., Колмаков А.Г., Гвоздев А.Е. Механизмы водородного растрескивания металлов и сплавов. Ч.I (ОБЗОР) // Материаловедение. – 2018. – № 3. – С. 27-33.

ON THE STRUCTURE OF INTERGRANULAR AND INTERPHASE LARGE-ANGLE BOUNDARIES AND THEIR CONTRIBUTION TO THE HIGH DEFORMATION ABILITY OF HIGH-ALLOY METAL HETEROPHASE SYSTEMS (SHORT REVIEW)

A.E. Gvozdev [a], A.N. Sergeev, D.V. Maliy, S.N. Kutepov
Tula State Lev Tolstoy Pedagogical University
Prospect Lenina, 125, 300026 Tula, Russia
[a] E-mail: gwozdew.alexandr2013@yandex.ru

At the present time, there are a number of hypotheses linking the structure of the large-angle boundaries with the processes occurring in their individual sections when interacting with intragranular defects and their clusters. Considering the importance of this issue in the processes of plastic form changing and non-stationary thermomechanical deformation of complex alloyed heterophase metal systems (pure metals, steels, non-ferrous alloys, etc.), let us consider these hypotheses in more detail.

The hypothesis developed in the works is the most common. It assumes the structure of the large-angle boundary as the Mott boundary, consisting of alternating sections with a dislocation structure in places with a low disorientation of the lattices of neighboring grains and areas with an amorphous structure where the disorientation is large.

Amorphous regions easily provide annihilation of dislocations in the head of the aggregates serving as stoppers for grain boundary sliding (GBS), which occurs only when the grain boundary dislocations slip along relatively straight sections of the grain boundaries oriented in the direction of the vector of the maximum tangential strains. If the clusters abut the sections of the boundaries with a dislocation structure, there are two possible options for removing the stoppers either by climbing of the head dislocation into the neighboring extraplane or passing it to the boundary, depending on the misorientation angle, the excessive concentration of vacancies and the magnitude of the strain in the head of the cluster, or by forming clusters with an amorphous structure formed from clusters of partial dislocations with excess vacancies or vacancy loops that are excessively formed in superplastic deformation (SD). On sections with an amorphous structure, GBS occurs by the mechanism of viscous Newtonian flow. These processes develop especially intensively in places where the boundaries of adjacent grains converge and lead to a gradual rotation of grains in the direction favorable in orientation to the action vector of the maximum tangential strain and an increase in the number of such grains. This is the sequence of the general process of grains accommodation under SD.

Another hypothesis assigns the main role in the accommodation of grains under SD to the development of micromigration processes of grain boundaries to the gradual rotation of grains and the propagation of GBS to the entire volume of the tensile sample.

It has been calculated that, for alloys with a crystal structure, the activation SD energy under structural superplasticity slightly exceeds the activation energy of self-diffusion of the base atoms over the large-angle boundaries, but it is considerably less than the activation energy of bulk self-diffusion, and in phase superplasticity it has even lower values and depends on the dispersion of structural and phase components, which indicates a significant contribution to GBS of boundaries between the phases. The SD activation energy in amorphous alloys corresponds to the activation energy values of the Newtonian viscous flow, and the larger the value of the glass transition temperature ratio to the alloys melting temperature, the higher it is. This determines the high resource of deformation ability of alloys.

The work was carried out according to the federal target program "Research and development in priority areas of development of Russia's scientific and technological complex for 2014–2020" (unique identifier of project – RFMEF 157717X0271).

ПРИМЕНЕНИЕ ГРУНТОБЕТОНА В 3D ПЕЧАТИ

Губанов А.В. [1,a], Кутугин В.А. [2,b], Новикова Е.А.

[1] *Национальный исследовательский Томский государственный университет, Россия, г.Томск, пр. Ленина, 36, 634050*

[2] *Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050*

E-mail: [a] derzhiarbuz@gmail.com, [b] kutugin@gmail.com

Введение

3D печать зданий и малых архитектурных форм является одним из развивающихся направлений в аддитивных технологиях. Ключевыми отличиями строительной 3D печати от прочих видов печати являются большая величина печатаемого объекта, его прочность и длительность эксплуатации в изменяющихся климатических условиях, а также менее высокие требования к точности печати.

Основной подход, используемый в строительной 3D печати сегодня, заключается в послойном нанесении заранее приготовленной бетонной смеси по заданной траектории. Широкую известность подобный подход получил под названием Contour Crafting. В данной технологии, как правило, используются достаточно жидкие бетонные смеси с большим сроком схватывания. Они промышленно выпускаются в виде сухих смесей и доступны, однако ими сложно печатать объекты с гранями, сильно отклоняющимися от вертикали. Печать арочных и сводчатых конструкций такими материалами затруднена.

Объекты произвольной формы из бетона позволяет получать технология D-shape, вариант binder-jetting технологии для крупногабаритных изделий. Объект выращивается послойно в объёме, полностью заполненном сухим порошком, затем лишний порошок удаляется. Минусом данной технологии является то, что изделие должно целиком размещаться внутри ёмкости, заполненной сухой смесью, причём основная масса смеси не используется.

Другим радикально отличающимся способом строительной печати является печать полимер-бетонами, в которых неорганический заполнитель находится в матрице из термопластичного или фото- полимера. Данный подход позволяет печатать геометрию любой сложности, доступной 3D печати пластиками (в том числе сводов и перекрытий), однако использование пластиков в качестве строительного материала имеет известные минусы (высокая стоимость пластика в сравнении с неорганическими материалами, меньшая огнестойкость, меньший срок службы). Помимо этого существуют технологии печати серобетонами, вспенивающимися композициями, торкрет-бетонами и пр..

Данная работа посвящена применению в 3D печати такого материала, как грунтобетон. Рассматриваются некоторые особенности работы с этим материалом, его отличительные свойства и их влияние на процесс 3D печати, а также полученные результаты.

Главной целью данной работы являлось выяснение принципиальной возможности 3D печати объектов с сильно отклоняющейся от вертикали геометрией (своды, арки) используя материал, изготовленный из доступного минерального сырья (грунтобетон).

Для решения поставленной цели требовалось решить следующие задачи. (1) Исследовать свойств смеси для 3D печати (определить минимальное напряжение сдвига свежезатворенной смеси; определить способности смеси к пластической деформации без разрывов; определить прочностных характеристик затвердевших композитов (сопротивление сжатию, разрыву) в зависимости от влажности. (2) Осуществить 3D печать (разработать ЧПУ роутера достаточного размера и несущей способности; разработать прототип печатающей головки для печати модельной смесью и печать тестовых образцов; разработать прототипа печатающей головки для печати целевой смесью и печать тестовых образцов).

Грунтобетон и его свойства

Грунтобетон - строительный материал, получаемый из связных грунтов (глин, суглинков, супесей), минеральных вяжущих, воды и различных добавок. Как правило, грунтобетон получают полусухим способом и используют для формования строительных блоков, фундаментов зданий [2], стен зданий целиком.

Использование грунта в качестве строительного материала имеет долгую историю [1]. В регионах с сухим климатом возводят постройки из армированных органическими волокнами несвязанных грунтов (саман, глинобит). Итальянская компания WASP предложила использовать 3D печать саманом как способ решить проблему доступного жилья в засушливых регионах и создала принтер Big Delta [7].

В регионах с влажным климатом модификация грунта минеральными вяжущими позволяет возводить глинобитные постройки, устойчивые к воздействию влаги.

Несмотря на доступность сырья для изготовления грунтобетона, он не получил широкого распространения. Грунтобетон пластичен и формуется давлением, его нельзя заливать в формы или эффективно уплотнять вибрацией, а прочность грунтобетона [2] уступает прочности бетонов на основе песчано-цементных смесей и не позволяет возводить здания высокой этажности. В итоге использовать грунтобетон в массовом строительстве экономически не целесообразно. Однако свойство пластичности становится крайне полезным, когда речь заходит о применении материала в 3D печати.

Основным компонентом грунтобетона является глина или суглинок, поэтому его реологические свойства близки к реологическим свойствам глин и суглинков. Введение цемента, который является электролитом, несколько ухудшает пластичность, но в целом поведение свежей грунтобетонной смеси аналогично поведению глины или суглинка, на основе которого она сделана.

В определённом диапазоне влажности реология глин и суглинков хорошо описывается моделью бингамовской жидкости [8]. Бингамовская жидкость ведёт себя как твёрдое тело до тех пор, пока напряжение сдвига между слоями не достигнет некоторой величины $\boldsymbol{\tau}_{min}$, называющийся минимальным напряжением сдвига. При превышении этого напряжения бингамовская жидкость течёт как ньютоновская жидкость. Таким образом, бингамовская жидкость является пластичной - она меняет форму при приложении усилий и сохраняет её после их снятия.

Технология 3D печати, использующая свойство пластичности чернил для формирования пространственных объектов, называется DIW (direct ink writing), и её применение для печати изделий из керамики широко распространено. Данная технология позволяет печатать довольно сложную геометрию с большими углами отклонения от вертикали (45 градусов и выше).

Экспериментально полученное значение $\boldsymbol{\tau}_{min}$, подходящее для 3D печати крупногабаритных изделий, лежит в диапазоне от 0,2 до 0,25 МПа. Значение было получено с использованием модифицированного вискозиметра Лотова [9] для грунтобетона на основе глины Корниловского месторождения Томской области.

Данное значение позволяет конструировать экструдер, который должен создавать на выходе давление, не меньшее, чем $\boldsymbol{\tau}_{min}$.

В отличие от грунта, грунтобетон, будучи затворённым водой, довольно быстро меняет свои пластические свойства. Грунтобетон на основе глины, содержащий 20% цемента становится не пригоден для печати через 20 минут после затворения водой, а грунтобетон, содержащий 50% цемента теряет пластичность через 5 минут.

Для того, чтобы грунтобетон получился прочным, необходимо обеспечить влажные условия твердения в течении довольно длительного срока. По информации авторов [2], грунтобетон первые 2 недели должен находиться во влажной среде. При нормальных условиях твердения через неделю он наберет 2/3 своей расчетной прочности. Вероятнее

всего, длительные сроки твердения обусловлены тем, что основной компонент грунтобетона, грунт, испытывает усадку при потере влаги.

Марка по прочности на сжатие для грунтобетона, используемого для 3D печати, лежит в пределах М50 - М100, что достаточно для возведения малоэтажных строений при условии, что грунтобетон будет испытывать только сжимающие нагрузки. Прочность грунтобетона на растяжение крайне мала по сравнению с железобетоном.

Учитывая эти свойства, а также то, что грунтобетон позволяет печатать относительно сложную геометрию, предполагается использовать этот материал не для печати несущих конструкций, а для печати несъёмной опалубки, в которую затем мог бы заливаться микроармированный бетон на основе песчано-цементной смеси. Печать тонкостенных конструкций, прочности и жёсткости которых хватает на то, чтобы выдержать самих себя и заполнитель, позволит использовать сильные стороны грунтобетона и свести на нет его недостатки, а также уменьшить время 3D печати и строительства объекта в целом.

Из-за того, что грунтобетон быстро теряет пластические свойства после затворения водой, использовать распространённые в технологии DIW технические решения доставки материала к точке печати не представляется возможным. Необходимо иметь печатающую головку специального устройства, в которую сухая смесь и жидкость затворения транспортируются по отдельности и смешиваются в непрерывном режиме непосредственно перед экструзией.

Особенность 3D печати по технологии DIW заключается в том, что количество материала, находящегося в состоянии, пригодном для экструзии, в единицу времени очень невелико. Это отличительная черта любого способа 3D печати, основанного на нанесении материала вдоль заданной траектории, в сравнении с традиционными способами производства. Благодаря этому, механизмы, осуществляющие некоторый технологический процесс с материалом для печати, могут быть существенно меньше и конструктивно проще, чем механизмы для осуществления тех же процессов в промышленных объёмах.

Когда затворение сухой смеси жидкостью происходит непрерывно в малом объёме, существенным фактором, влияющим на скорость затворения, становится капиллярный подсос. Так, сухой, свободно насыпанный порошок грунтобетона, вступающий в контакт с жидкостью, пропитывается ей на глубину 15 мм, причём на глубину 10 мм жидкость проникает за несколько секунд. Если поперечное сечение канала, в котором происходит перемешивание, в своём наибольшем измерении не превышает 10 мм, необходимость в интенсивном механическом перемещении частиц смеси друг относительно друга фактически отпадает. Экспериментально было установлено, что для того, чтобы получить из сухой смеси и жидкости затворения гомогенный жгут диаметром 10 мм, экструдируемый под давлением 0,25 МПа, длина области смешивания и экструзии может быть не больше 250 мм. При этом время от момента затворения смеси жидкостью до момента экструзии в разработанном устройстве не превышает 30 с.

Результаты

Чтобы убедиться в том, что указанные свойства грунтобетона позволяют осуществлять печать объектов с гранями, сильно отклоняющимися от вертикали, были разработаны ЧПУ роутер с рабочей областью 1500х1500х1300 мм., печатающая головка, осуществляющая замешивание и экструзию грунтобетона в непрерывном режиме и ПО управления.

Итогом проделанной работы стала печать грунтобетонного купола высотой 350 мм., с максимальным углом отклонения стенки от вертикали 45 градусов и толщиной стенки 20 мм (Рис.1). Состав грунтобетона: 50% глины, 50% цемента без каких-либо дополнительных добавок (кроме воды). Таким образом, продемонстрирована принципиальная возможность использования простого по составу, доступного неорганического материала, для печати сводчатых тонкостенных конструкций по технологии DIW.

Рисунок 1. Грунтобетонный купол

Рисунок 2. Напечатанная стенка в разрезе

Рисунок 3. Попытка печати с отклонением 60 градусов от вертикали

Список литературы

1. Минке Г. Глинобетон и его применение / Г. Минке. – Калининград: Янтарный сказ, 2004. – 232 с.
2. Рамазанов А.А., Бадаева А.Д., Ланин Е.Б., Алнашаш Т.А. Грунтобетон в закладке фундамента / Строительство уникальных зданий и сооружений. – 2015. – № 3(30). – С. 111-128.
3. Комохов А.П. Высокоэффективная технология грунтобетона как современного композиционного материала / Строительство и реконструкция. – 2002. – № 2. – С. 25-28.
4. Zakrevskaya L.V., Lubin P.A., Avdeev S.N., Gandelsman I.A., Filippov S.V. Dome houses made of soil - concrete based on local raw materials / Инженерно-строительный журнал. – 2017. № 7. – С. 123-128.
5. Bos F.P., Wolfs R.J.M., Ahmed Z.Y., Salet T.A.M. Additive manufacturing of concrete in construction: potentials and challenges of 3D concrete printing / Virtual and Physical Prototyping. – 2016. – Vol. 11, Iss. 3, P. 209-225.
6. THE SHARING KNOWLEDGE The DELTA WASP 4-metres-high printer for an important architectural project. [Электронный ресурс] : [офиц. сайт.] / WASP c/o CSP S.r.l.. – Режим доступа: http://www.wasproject.it/w/en/the-delta-wasp-4-metres-high-printer-for-an-important-architectural-project/ – Заглавие с экрана (дата обращения 1.05.2019).
7. Extrusion in Ceramics / Edited by Handle F. – Switzerland: Springer Nature, 2007. – 413 p.
8. Устройство для измерения вязкости : пат. 667866 Рос. Федерация / Лотов В.А.; опубл. 15.06.79.

CONCRETE IN 3D PRINTING

A.V. Gubanov[1,a], V.A. Kutugin[2,b], E.A. Novikova
[1] *National Research Tomsk State University, Lenin avenue, 36, 634050, Tomsk, Russia*
[2] *National Research Tomsk Polytechnic University, Lenina avenue, 30, 634050, Tomsk, Russia*
E-mail: [a] derzhiarbuz@gmail.com, [b] kutugin@gmail.com

Construction 3D printing (3DCP) is one of the developing branches of additive technology. Main differences from other 3D printing technologies are a large size of printed object, it's solidity, durability in different climate conditions, relatively low accuracy requirements.

Cement based soil concrete is known, but rarely used construction material for buildings. It has serious disadvantages that make it impracticable for classical building technologies, but also it has some useful properties that make it suitable for 3D printing process. The objective of the research is to show a possibility to print arches and domes with at least 45 degrees overhang (which is hardly achievable for Contour Crafting) using cement based soil concrete as material. To reach this goal several concrete composition was tested, then suitable 3D printer and printhead was made and printing process implemented.

The main useful property of a soil concrete is it's plasticity (rheological model of Bingham fluid can be used) during first several minutes it was mixed with a water. Fortunately the plasticity allows to implement DIW (direct ink writing) printing method and reach whole specter of a geometry could be printed with clay. Unfortunately it is impossible to use common DIW extruder types because of short lifetime of a fresh mixed printing media, so the special hardware have to be designed.

To implement a soil concrete 3D printing process there should be an extruder, that is a mixer also, so we could mix a dry component powder with a water (or another fluid) continuously, following right proportions, and extrude it as soon as possible before rheological properties of mixture gone unsatisfactory. The possibility to make relatively small and lightweight suitable hardware caused by the fact, that a mixing of fluid and powder in small volume is significantly affected by capillary suction, so there is no lengthy and intensive mechanical mixing needed.

The article contains several qualitative statements about using a soil concrete as a material for 3DCP and it's experimental approvement, also it contains some quantitative characteristics of print media that is suitable for 3D printing.

The result of research is a 3D printed dome with 45 degrees overhang, that means it's possible to use a cement based soil concrete to print such kind of geometry.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОГО РАЗДЕЛЕНИЯ В ВИХРЕВОЙ ТРУБЕ РАНКА-ХИЛША

Зейналова Н.Р. [a], Миньков Л.Л.

Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Россия, г.Томск, пр. Ленина, 36, 634050
[a] E-mail: natalizejnalova97@gmail.com

Введение

В настоящее время преобразование тепловой энергии на основе вихревого эффекта становится актуальным. Эффект Ранка-Хилша или вихревой эффект впервые был обнаружен в конце 20-х годов французским инженером Жозефом Ранком при измерении температуры в промышленном циклоне, исследованиями вихревого аппарата занимался Роберт Хилш. Данный эффект характеризуется разделением жидкости или газа при закручивании в цилиндрической или конической камере на две части. В центральном закрученном потоке наблюдается снижение температуры, тогда как на периферии повышение температуры. Актуальность исследования данного эффекта заключается в том, что вихревая труба Ранка-Хилша, при сравнительно технической простоте изготовления, позволяет достичь большой степени температурного разделения потока. Также, рассматриваемое устройство является экономным, безопасным, компактным и надёжным в промышленной эксплуатации.

В настоящее время в связи с повышением внимания к экологии и энергосбережению вопрос о создании крупномасштабных холодильно-нагревательных систем на базе вихревой трубы становится все более актуальным. Единственным ограничивающим фактором здесь является недостаточно высокая энергетическая эффективность данных устройств.

Физическая постановка задачи

Процесс энергоразделения в вихревой трубе, показанной на рисунке 1, рассматривается при следующих допущениях: течение газа является стационарным, турбулентным, закрученным и осесимметричным; среда представляет собой идеальный вязкий сжимаемый газ.

Газ поступает в трубу через завихритель. В процессе закрутки потока газ разделяется на холодный, вытекающий из вихревой трубы через сопло 2, и горячий, вытекающий через сопло 3.

Геометрические параметры вихревой трубы приведены на рисунке 1.

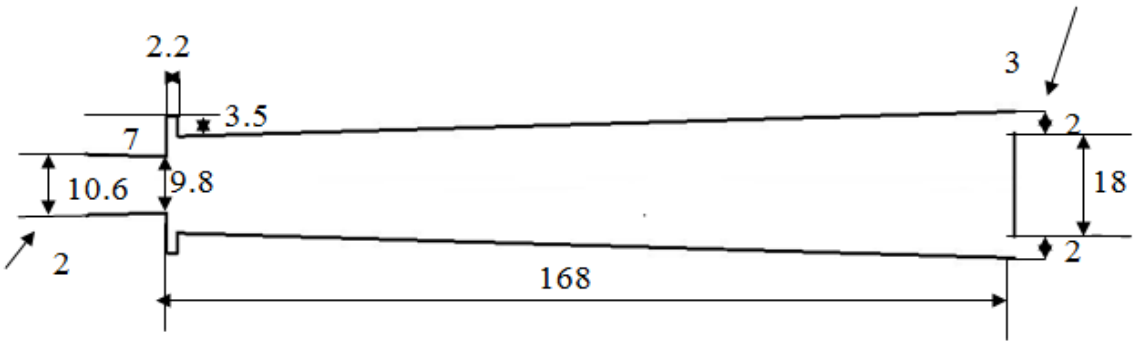


Рисунок 1. Схема вихревой трубы.

Математическая постановка задачи

Для математического описания двумерного течения газового потока в вихревой трубе используются следующие уравнения:

1) уравнение неразрывности

$$\frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{1}{r}\frac{\partial \rho v r}{\partial r} = 0$$

2) уравнение баланса импульса в продольном направлении

$$\frac{\partial \rho u^2}{\partial x}+\frac{1}{r}\frac{\partial \rho uvr}{\partial r}=-\frac{\partial p}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial x}\left[\left(\mu+\mu_t\right)\left(2\frac{\partial u}{\partial x}-\frac{2}{3}\left(\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{1}{r}\frac{\partial vr}{\partial r}\right)\right)\right]+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[\left(\mu+\mu_t\right)r\left(\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{\partial v}{\partial x}\right)\right]$$

3) уравнение баланса импульса в радиальном направлении

$$\frac{\partial \rho uv}{\partial x}+\frac{1}{r}\frac{\partial \rho v^2 r}{\partial r}=-\frac{\partial p}{\partial r}+\frac{\partial}{\partial x}\left[\left(\mu+\mu_t\right)\left(\frac{\partial v}{\partial x}+\frac{\partial u}{\partial r}\right)\right]+$$
$$+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[\left(\mu+\mu_t\right)r\left(2\frac{\partial v}{\partial r}-\frac{2}{3}\left(\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{1}{r}\frac{\partial vr}{\partial r}\right)\right)\right]-2\left(\frac{\left(\mu+\mu_t\right)v}{r^2}\right)+\frac{\rho w^2}{r}$$

4) уравнение баланса импульса в окружном направлении

$$\frac{\partial \rho uw}{\partial x}+\frac{1}{r}\frac{\partial \rho vwr}{\partial r}=\frac{\partial}{\partial x}\left[\left(\left(\mu+\mu_t\right)\right)\frac{\partial w}{\partial x}\right]+\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left[\left(\mu+\mu_t\right)r^3\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{w}{r}\right)\right]-\frac{\rho vw}{r}$$

5) уравнение баланса энергии

$$\frac{\partial \rho hu}{\partial x}+\frac{1}{r}\left(\frac{\partial \rho hvr}{\partial r}\right)=\frac{\partial}{\partial x}\left(\left(\lambda+\lambda_t\right)\frac{\partial T}{\partial x}\right)+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\left(\lambda+\lambda_t\right)r\frac{\partial T}{\partial r}\right)+$$
$$+\left(\mu+\mu_t\right)\left\{2\left[\left(\frac{\partial v}{\partial r}\right)^2+\left(\frac{v}{r}\right)^2+\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2\right]+\left[r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{w}{r}\right)\right]^2+\left(\frac{\partial w}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial u}{\partial r}\right)^2-\right.$$
$$\left.-\frac{2}{3}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rv)+\frac{\partial u}{\partial x}\right]^2\right\}$$

6) уравнение баланса кинетической энергии турбулентных пульсаций

$$\frac{\partial \rho uk}{\partial x}+\frac{1}{r}\frac{\partial \rho vkr}{\partial r}=\frac{\partial}{\partial x}\left[\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial k}{\partial x}\right]+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)r\frac{\partial k}{\partial r}\right]+G_k+G_b-\rho\varepsilon-\mathrm{Y}_m$$

7) уравнение баланса скорости диссипации турбулентной энергии

$$\frac{\partial \rho u\varepsilon}{\partial x}+\frac{1}{r}\frac{\partial \rho v\varepsilon r}{\partial r}=\frac{\partial}{\partial x}\left[\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial \varepsilon}{\partial x}\right]+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial \varepsilon}{\partial r}\right]+\rho C_1 S_\varepsilon-\rho C_2\frac{\varepsilon^2}{k+\sqrt{\nu\varepsilon}}+C_{1\varepsilon}\frac{\varepsilon}{k}C_{3\varepsilon}C_b,$$

где $h=C_pT+\left(u^2+v^2\right)/2;\quad C_1=\max\left[0.43,\frac{\eta}{\eta+5}\right];\quad \eta=S\frac{k}{\varepsilon};\quad S=\sqrt{2S_{ij}S_{ij}}\,;$

$$s=\begin{pmatrix}\frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{\partial v}{\partial x}\right) & \frac{1}{2}\frac{\partial w}{\partial x}\\ \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{\partial u}{\partial x}\right) & \frac{\partial v}{\partial r} & \frac{1}{2}r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{w}{r}\right)\\ \frac{1}{2}\frac{\partial w}{\partial x} & \frac{1}{2}r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{w}{r}\right) & \frac{v}{r}\end{pmatrix};$$

$$G_k=\mu_t\left\{2\left[\left(\frac{\partial u}{\partial r}\right)^2+\left(\frac{\partial v}{\partial r}\right)^2+\left(\frac{v}{r}\right)^2\right]+\left(\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{\partial v}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial w}{\partial x}\right)^2+\left(r\frac{\partial w/r}{\partial r}\right)^2\right\};$$

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}; \quad \lambda_t = \lambda + \frac{c_p \mu_t}{\mathrm{Pr}_t}; \quad Y_m = 2\rho\varepsilon M_t^2; \quad M_t = \sqrt{\frac{k}{a^2}}.$$

Математическая постановка двумерной модели замыкается следующими граничными условиями. На оси симметрии ставятся условие симметрии.

$$\frac{\partial \varphi}{\partial r} = 0, \; v = 0,$$

где φ=(ρ, *p*, *u*, *w*, ε, *k*).

На стенках вихревой трубы задается условие прилипания

$$\vec{V} = 0.$$

На выходе из вихревой трубы задается статическое давление равное атмосферному

$$P = P_{атм} = 101325 \text{ Па}.$$

и дополнительно задается условие радиального распределения давления

$$\frac{\partial P}{\partial r} = \frac{\rho w^2}{r}.$$

На входе в вихревую трубу задается полное давление $P = P_{in}$ и задается направление потока через направляющие косинусы. Также задаются интенсивность турбулентных пульсаций и гидравлический диаметр.

Решение системы уравнений осуществлено методов конечных объемов. Для аппроксимации конвективных потоков использовалась неявная схема 2-го порядка точности с применением метода Роу для нахождения основных газодинамических потоков на гранях ячеек.

Результаты численного моделирования

В работе исследовано поведение разделения вихревого потока при следующих полных давлениях на входе в вихревую трубу: p = 4 бар, p = 5 бар и p = 7.5 бар при разных углах закрутки потока.

Из рисунка 2 видно, что разделение температуры не зависит от полного давления на входе в ВТ, а только от угла закрутки α. При увеличении угла закрутки возрастает перепад температур. При слишком больших α наблюдается тенденция к обратному эффекту: температура на периферии понижается, а к центру увеличивается. Не при всех углах закрутки и давлениях на входе численное решение сходится.

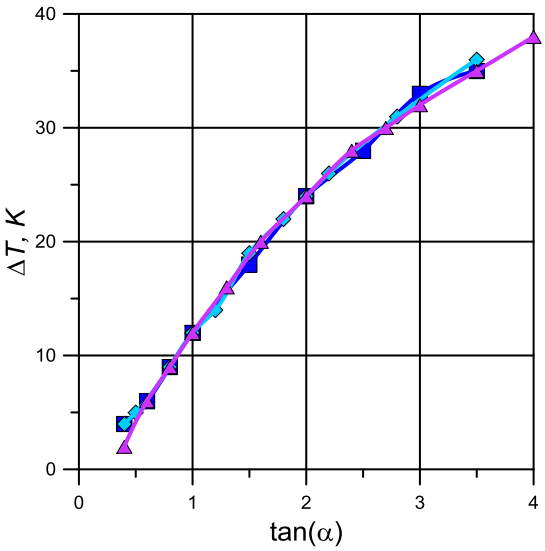


Рисунок 2. Зависимость температурного разделения от тангенса угла закрутки

Ниже на рисунках 3–5 представлены поля абсолютного давления, полной температуры и числа Маха в вихревой трубе при p=4бар, tan(α)=3.5.

При давлении газа на входе в ВТ 4 бар, можно наблюдать, что на первом выходе из ВТ давление уменьшается, тогда как при движении потока к выходу горячего потока давление постепенно растет. Так же можно отметить, что давление на стенках трубы возрастает и плавно уменьшается к центру трубы (Рис. 3).

На рисунке 4. показано распределение полной температуры. Из рисунка видно, что в пристеночной области наблюдается повышение температуры, температура на выходе для горячего потока достигает 308 K. Тогда как в центральной части наблюдается заметное охлаждение, температура на выходе для холодного потока равняется 285 K.

На рисунке 5. видно, что на левом выходе из ВТ число Маха превышает единицу, что означает при введении газа в ВТ при давлении в 4 бар охлажденный газ истекает со сверхзвуковой скоростью, в то время как нагретый газ истекает с дозвуковой скоростью.

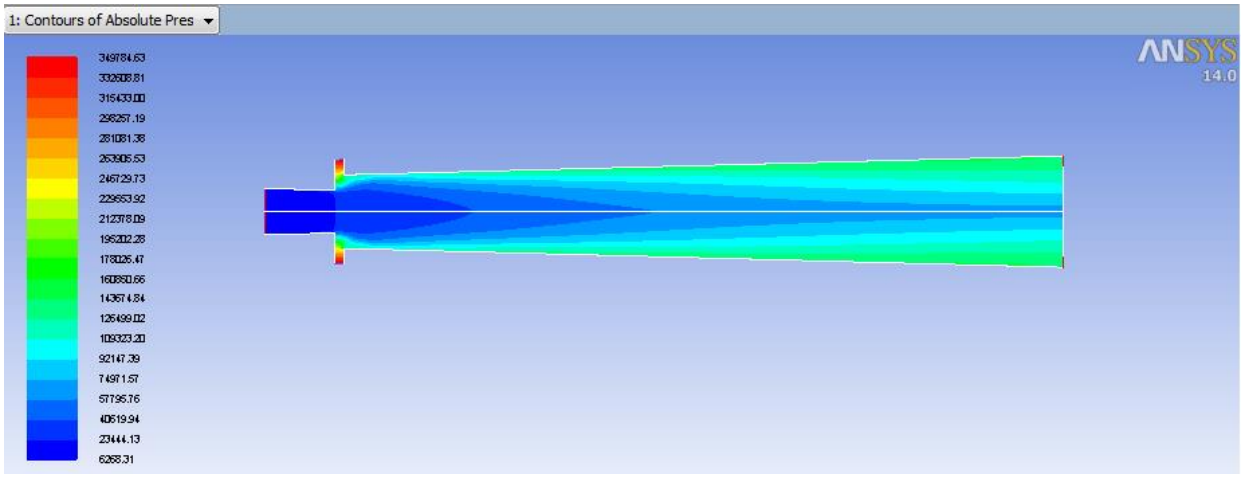


Рисунок 3. Поле абсолютного давления

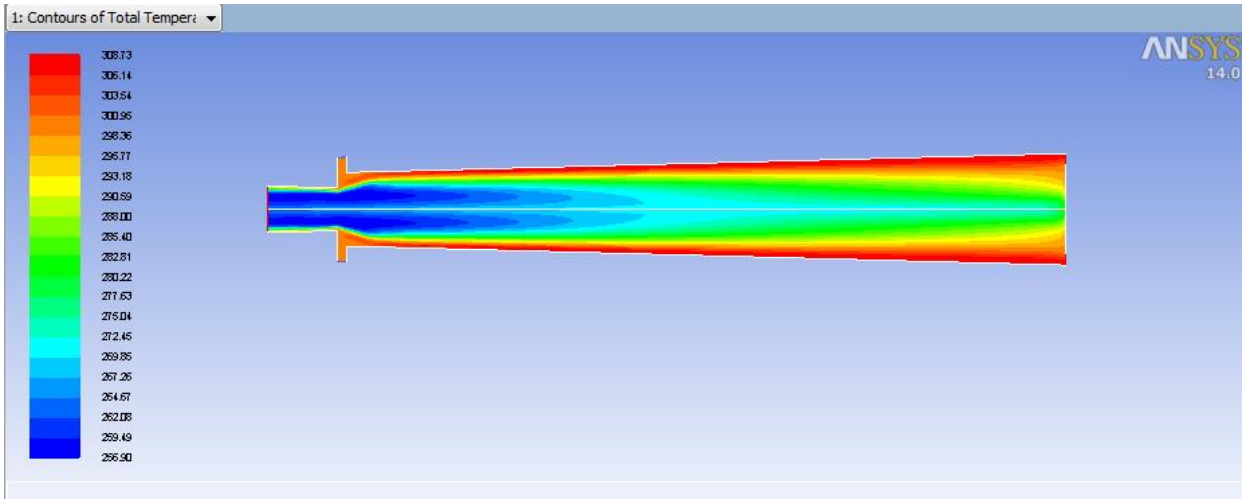


Рисунок 4. Поле полной температуры

Влияние моделей турбулентности на результаты моделирования температурного разделение газа

Параметры потока: на входе задавалось давление p=10 Мпа, T=300 К и угол закрутки равен α = 1. Таблица 1 показывает, что при использовании моделей турбулентности $k-\varepsilon$ – Realizable, $k-\omega$ – Standard, мы получаем одинаковые доли для охлажденного и горячего потоков. Температурный перепад при использовании модели $k-\varepsilon$ – Standard составляет 35.7 К, то есть не намного превышает перепад температур (на 3.1 К), полученный при

использовании $k-\omega$ – Standard, существенной разницы не наблюдается. Максимальный перепад температур был получен с использованием модели $k-\omega$ – SST. Но так как, интегральные значения для доли горячего и холодного потоков при включении разных моделей турбулентности изменялись незначительно, несмотря на значительные различия в микроструктуре течений, описываемых на основе различных двухпараметрических моделей турбулентности, в дальнейших расчетах в связи с простотой и с целью минимизации вычислительных затрат целесообразно использовать стандартную ($k-\varepsilon$) модель турбулентности.

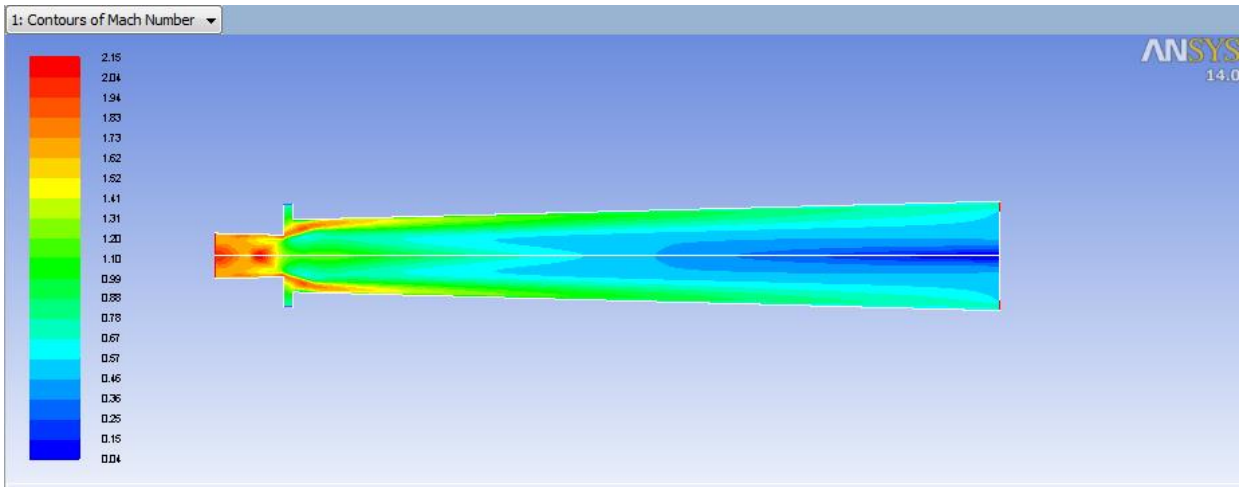


Рисунок 5. Поле числа Маха

Таблица 1.Результаты расчетов с использованием различных моделей турбулентности.

Модель турбулентности	Доля холодного потока	Доля горячего потока	Понижение температуры потока, К	Повышение температуры потока, К	Кол-во ячеек
$k-\varepsilon$ Realizable	0.35	0.65	20.82	9.93	10682
$k-\varepsilon$ Standard	0.37	0.63	22.83	12.87	
$k-\varepsilon$ RNG	0.31	0.69	18.52	8.58	
$k-\omega$ Standard	0.35	0.65	23.69	10.41	
$k-\omega$ SST	0.37	0.63	22.23	13.92	
Spalart-Allmaras	0.39	0.61	23.79	11.1	

Список литературы

1. Гуцол А.Ф. Эффект Ранка / Успехи физических наук: Методические заметки. – 1997. – Т. 167, №6. – С. 665–687.

2. Антипина Н.А., Тарунин Е.Л. Расчет турбулентного режима гидродинамики и теплообмена в вихревой трубе Ранка-Хилша / Вестник Пермского университета. – 2008. – Вып.№4(20). –С. 70–76.

3. Коркодинов Я.А. Хурматуллин О.Г. Применение эффекта Ранка-Хилша / Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Машиностроение, материаловедение. – 2012. – Т. 14. – С.42–54.

4. Орлов А.Ю. Суворова Ю.А. Энергосбережение в процессах сушки с вихревой трубой / Вестник ТГТУ. – 2013. – Т. 19, №4. – С. 832–836.

5. Белявский Я.Д. Влияние звука на теплоперенос в газах / Электронный журнал «Техническая акустика». – 2014. №2014(6).

6. Власенко В.С. Слесаренко В.В. Трехпоточная вихревая труба как инструмент подготовки паров нефтепродуктов к рекуперации / Современные наукоемкие технологии.– 2014. –Вып.№5 (часть 1).– С. 130–134.

NUMERICAL MODELING OF TEMPERATURE SEPARATION IN THE RANQUE-HILSH VORTEX PIPE

N.R. Zeynalova [a], L.L. Minkov

National Research Tomsk State University, Lenin Ave., 36, 634050, Tomsk, Russia

[a] E-mail: natalizejnalova97@gmail.com

Introduction

The Ranque-Hilsch effect or the vortex effect was first discovered in the late 1920s by the French engineer Joseph Rank when measuring temperature in an industrial cyclone. Later, Robert Hilsch continued the study of the vortex effect. This effect is characterized by the separation of a liquid or gas into two parts when twisting in a cylindrical or conical chamber. In the central swirling flow there is a decrease in temperature, while on the periphery there is a temperature increase. The relevance of the study of this effect lies in the fact that the Ranque-Hilsh vortex tube, with a relatively technical simplicity of manufacture, allows to reach a large degree of temperature separation of the flow. Also, the device under consideration is economical, safe, compact and reliable in industrial operation.

The aim of this paper is to study the Ranque-Hilsch effect on the basis of a numerical modeling of the temperature separation of a flow in a vortex tube.

The energy separation process in the vortex tube is considered under the following assumptions: the gas flow is stationary, turbulent, swirling; The medium is an ideal viscous compressible gas.

The numerical solution of the system of determining equations is based on difference schemes of the second order of accuracy . It is realized in the Ansys-Fluent software package. Geometry and the construction of the mesh of the vortex device were carried out using the Gambit package.

The influence of the width of the throttle gap (1 mm, 1.5 mm and 2 mm) was investigated for the outlet of the heated flow by the value of the temperature separation. It is shown that as the width of the gap decreases, the temperature separation increases.

As a result of the calculations, the temperatures of the cooled and heated gas were obtained, depending on the pressure drop. The calculations demonstrated the presence of vortices which are formed due to the existence of two oppositely directed flows. There is shown the effect of turbulent viscosity on the flow region near the wall.

It is shown that the laminar viscous compressible gas model does not adequately describe the effect of temperature separation in the Ranque-Hilsch tube, whereas the turbulent flow model of a compressible gas as a whole correctly describes this effect, which confirms the hypothesis of interaction of turbulent vortices as the primary cause of temperature separation.

References

1. Guzol A.F. The Ranque Effect .Uspekhi fizicheskih nauk:Metodicheskie zametki [Advances in physical sciences : Methodological Notes]. 1997. v. 167, no. 6.pp. 665-687.

2. Antipina N.A., Tarunin E.L. Calculation of the turbulent regime of hydrodynamics and heat transfer in the Ranque-Hilsh vortex tube. Vestnik Permskogo universiteta [Bulletin of Perm University]. 2008. Vl. 4 (20). pp. 70-76.

3. Korkodinov Y.A., Khurmatullin O.G. Application of the Ranque-Hilsch effect .Perm National Research Polytechnic University. 2012. pp.42-53.

4. Orlov A.U., Suvorova U.A. Energy saving in drying processes with a vortex tube . Vestnik TGTU [Bulletin of TSTU]. 2013. v. 19, i. 4. pp. 832-836.

5. Belyavsky Y.D. Influence of sound on heat transfer in gases. Electronic journal "Technical Acoustics". 2014. Vol.14. pp. 1-14.

СИНТЕЗ ПОВЕРХНОСТНОГО СПЛАВА НА ОСНОВЕ АЛЮМИНИЯ В СОВМЕЩЕННЫХ ЭЛЕКТРОННО-ИОННО-ПЛАЗМЕННЫХ ТЕХНОЛОГИЯХ

Иванов Ю.Ф., Ахмадеев Ю.Х., Лопатин И.В., Петрикова Е.А., Тересов А.Д., Толкачев О.С.

Институт сильноточной электроники Сибирского отделения Российской академии наук, Россия, г. Томск, ул. проспект Академический, 2/3, 634055

E-mail: yufi55@mail.ru

Введение

Алюминий и его сплавы характеризуются сравнительно низкой износостойкостью, что существенно ограничивает область их применения [1]. Для улучшения этих качеств материала используются различные методы модификации его поверхности, включающие нанесение твердых и износостойких покрытий, ионную имплантацию, азотирование и т.д. [2−5]. При этом большое внимание уделяется формированию переходного слоя между деталью и поверхностью с повышенными твердостью и износостойкостью. Исследования, выполненные в [2], показали, что для достижения этой цели перспективным является метод диффузионного насыщения поверхности алюминия азотом (азотирование), однако для его проведения желательно использование ионной очистки обрабатываемых поверхностей, как перед азотированием, так и в его процессе, то есть целесообразно проводить азотирование при давлениях порядка 1 Па. Показана [2] принципиальная возможность проведения азотирования алюминия при температурах до 400 °С, однако для получения слоев нитрида толщиной более 1 мкм необходимо предпринимать меры по ускорению диффузии азота вглубь материала. С этой целью рекомендовано [5] увеличивать температуру обрабатываемых изделий и содержание дефектов, как на обрабатываемой поверхности, так и в приповерхностном слое. Увеличение содержания дефектов материала, например, измельчение структуры, позволяет существенно увеличить эффективность азотирования. Кроме того, введение небольшого количества нитридообразующих элементов на поверхность и в объем обрабатываемого алюминия позволяет, как было показано в [2], не только увеличить скорость его азотирования, но и облегчить поступление атомов азота в алюминий, облегчая, тем самым, решение вопроса ионной очистки поверхности и увеличивая скорость роста переходного слоя.

Целью настоящих исследований является разработка научных принципов комбинированного электронно-ионно-плазменного метода формирования поверхностного сплава на основе алюминия в условиях совмещенных электронно-ионно-плазменных технологий.

Материал, методики обработки и исследования

В качестве материала основы использован алюминий технической чистоты марки А7 (0.15Si, 0.16Fe, 0.01Cu, 0.03Mn, 0.02Mg, 0.04Zn, 0.03Ga, 0.01Ti, остальное Al, вес. %) [6]. Формирование поверхностного сплава осуществляли в едином вакуумном цикле на установке «КОМПЛЕКС» путем напыления пленки титана толщиной 0,5 мкм и последующего облучения интенсивным импульсным электронным пучком при следующих параметрах пучка электронов: энергия ускоренных электронов 17 кэВ, длительность импульса 50 мкс, количество импульсов 1-100, частота следования импульсов 0,3 $с^{-1}$, плотность энергии пучка электронов (10-20) Дж/$см^2$. Количество циклов напыления/облучения 20. На заключительной стадии проводили процесс азотирования сформированного поверхностного сплава в плазме несамостоятельного дугового разряда с использованием плазмогенератора «ПИНК». Азотирование проводили при температуре 540 ^{0}С в течение 8 часов. Исследования элементного и фазового состава, состояния дефектной субструктуры проводили методами сканирующей электронной микроскопии (прибор Philips SEM-515 с микроанализатором EDAX ECON IV) и просвечивающей дифракционной

электронной микроскопии (прибор JEOL JEM-2100 F), рентгеноструктурного анализа (рентгеновский дифрактометр Shimadzu XRD 6000). Свойства материала характеризовали твердостью (прибор ПМТ 3, нагрузка на индентор 0,2 Н.). Трибологические исследования (определение износостойкости и коэффициента трения) проводили на трибометре Pin on Disc and Oscillating TRIBOtester (TRIBOtechnic, Франция) при следующих параметрах: шарик из стали ШХ15 диаметром 6 мм, радиус трека – 2 мм, нагрузка на индентор и длина трека варьировались в зависимости от уровня износостойкости исследуемого материала.

Результаты исследования и их обсуждение

Установлено, что азотирование поверхностного сплава Al-Ti позволяет сформировать поверхностный слой, износостойкость которого превышает износостойкость исходных образцов алюминия более чем в 450 раз, коэффициент трения модифицированных образцов меньше коэффициента трения исходного материала более чем в 3,5 раза. Режим обработки, показавший максимальную износостойкость (минимальное значение параметра износа): 20 циклов «напыления/облучения электронным пучком» при параметрах обработки 10 Дж/см^2; 50 мкс; 10 имп. При этом твердость образцов превышает твердость исходного алюминия в 13 раз. Очевидно, что изменение износостойкости и микротвердости модифицированных образцов обусловлено преобразованием элементного и фазового состава, дефектной субструктуры поверхностного слоя образцов алюминия.

Состояние структуры и элементный состав поверхности модифицирования изучали методами сканирующей электронной микроскопии. Электронно-микроскопические изображения структуры поверхности модифицирования, приведенные на рисунке 1, свидетельствуют о том, что состояние материала существенным образом зависит от параметров облучения электронным пучком. При облучении электронным пучком с плотностью энергии пучка электронов 10 Дж/см^2 и последующем азотировании формируется островковая структура с ярко выраженным рельефом (Рис. 1*а*). Облучение поверхности сплава Al-Ti интенсивным импульсным электронным пучком с плотностью энергии пучка электронов 20 Дж/см^2 и последующее азотирование приводят к формированию существенно более сглаженного рельефа (Рис. 1*б*).

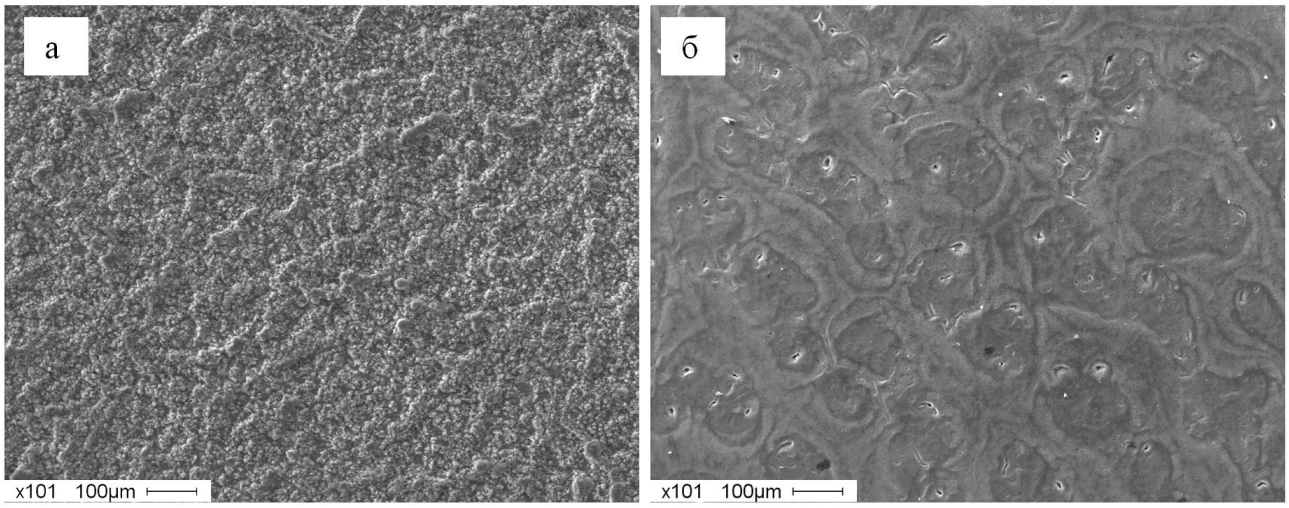


Рисунок 1. Структура поверхности азотирования поверхностного сплава системы Al-Ti, сформированного при 20 циклах «напыления/облучения»; в каждом цикле толщина пленки титана 0,5 мкм, облучение электронным пучком с параметрами 10 Дж/см^2; 50 мкс; 10 имп.; (а) и 20 Дж/см^2; 50 мкс; 10 имп. (б).

Результаты исследования элементного состава поверхностного слоя модифицированных образцов, выполненные методами микрорентгеноспектрального анализа, приведены на рисунке 2. Отчетливо видно, что в поверхностном слое обоих материалов

присутствуют атомы алюминия, титана и азота, однако концентрация их различна. А именно, увеличение плотности энергии пучка электронов приводит к существенному снижению в поверхностном слое алюминия атомов титана, что может свидетельствовать о более интенсивном растворении пленки титана и диффузии его в объем образцов. Последующее азотирование также протекает в данных образцах по-разному: в образцах с большей концентрацией титана обнаруживается большее содержание азота.

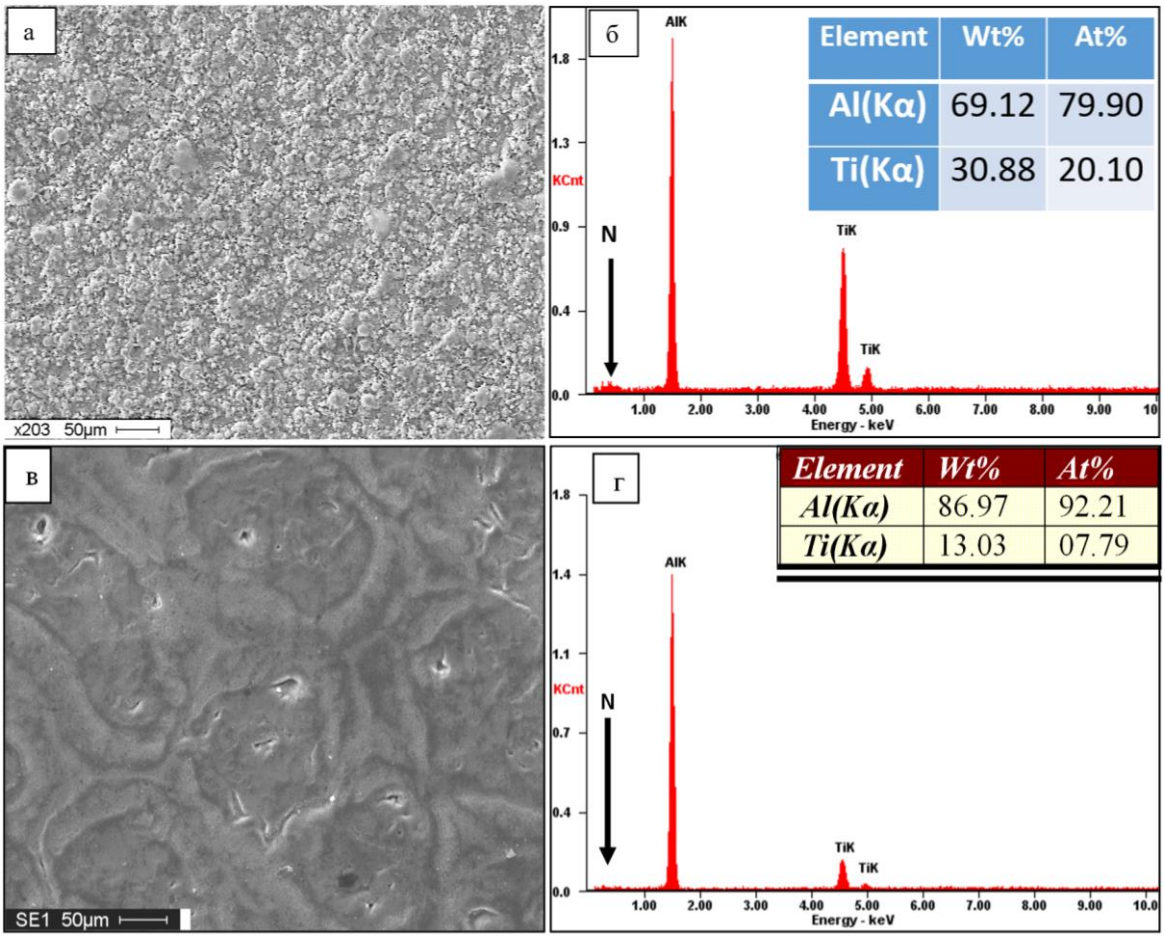


Рисунок 2. Структура (а, в) поверхности азотирования поверхностного сплава системы Al-Ti, сформированного при 20 циклах «напыления/облучения»; в каждом цикле толщина пленки титана 0,5 мкм, облучение электронным пучком с параметрами 10 Дж/см^2; 50 мкс; 10 имп. (а) и 20 Дж/см^2; 50 мкс; 10 имп. (в); б, г – энергетические спектры, полученные с участка поверхности, изображенной на (а) и (в), соответственно.

Исследование фазового состава поверхностного слоя осуществляли методами рентгеноструктурного анализа. Установлено, что комбинированная обработка образцов алюминия сопровождается формированием многофазного поверхностного слоя, состав которого зависит от режима облучения материала интенсивным импульсным электронным пучком. При облучении системы «пленка (Ti) / (A_7) подложка» электронным пучком с плотностью энергии пучка электронов 10 Дж/см^2 поверхностно легированный слой алюминия, подвергнутый последующему азотированию, содержит α-Ti (5,3 mass. %), Al_3Ti (58,4 mass. %), AlN (24,2 mass. %) и Al (12,1 mass. %). При формировании поверхностного сплава путем облучения системы «пленка (Ti) / (A_7) подложка» электронным пучком с плотностью энергии пучка электронов 20 Дж/см^2 поверхностно легированный слой алюминия, подвергнутый последующему азотированию, содержит 57 mass. % Al, 37 mass. % Al_3Ti и 6 mass. % AlN. Отметим, что результаты, полученные методами

микрорентгеноспектрального анализа и рентгенофазового анализа, хорошо согласуются между собой, что указывает на высокий уровень их достоверности.

Проведены исследования поперечного шлифа образцов сплава системы Al-Ti, сформированных при 20 циклах «напыления/облучения»; в каждом цикле толщина пленки титана 0,5 мкм, облучение электронным пучком с параметрами 10 Дж/см2; 50 мкс; 10 имп. Установлено, что толщина модифицированного слоя изменяется в пределах от 10 до 18 мкм (Рис. 3, а).

Состояние дефектной субструктуры, элементного и фазового состава модифицированных образцов алюминия анализировали методами просвечивающей электронной дифракционной микроскопии. Установлено, что в результате выполненной многоцикловой обработки и последующего азотирования формируется модифицированный слой, имеющий субмикро- нанокристаллическую структуру, характерное изображение которой представлено на Рис. 3, б.

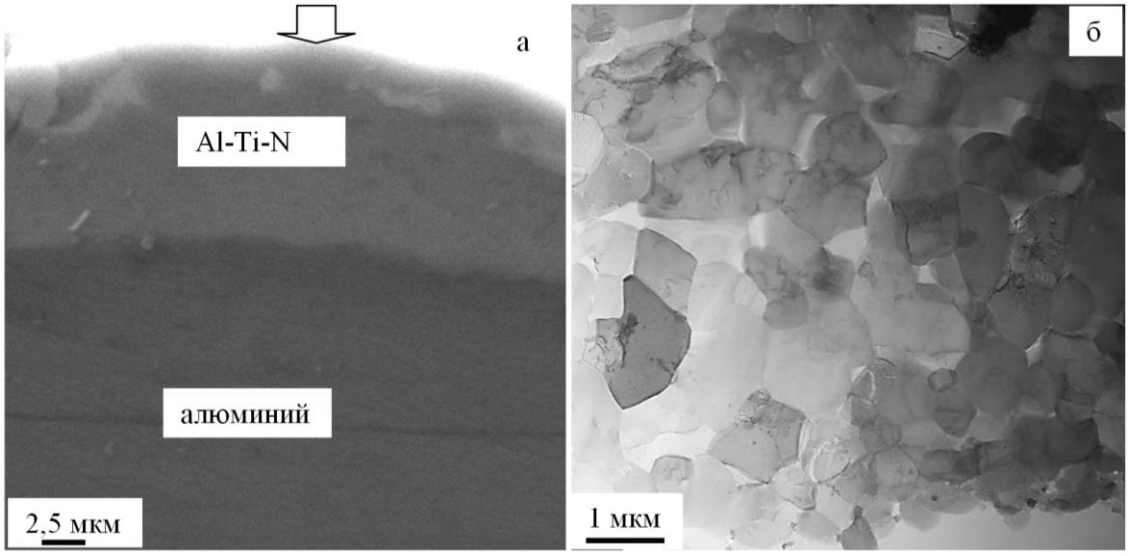


Рисунок 3. Электронно-микроскопическое изображение структуры сплава, сформированного при азотировании (540 ^{0}C, 8 час.) системы Al-Ti (20 циклов «напыления/облучения» электронным пучком с параметрами 10 Дж/см^2; 50 мкс; 10 имп.); а – поперечный шлиф (сканирующая электронная микроскопия); б – «поперечная фольга» (просвечивающая электронная микроскопия в режиме сканирования).

Размеры кристаллитов изменяются в пределах до 1 мкм и практически не зависят от расстояния от поверхности модифицированного слоя. Столбчатая структура модифицированного слоя, образующаяся на стадии формирования поверхностного сплава, после азотирования не выявляется.

В объеме кристаллитов наблюдается дислокационная субструктура (Рис. 4, а).

Дислокационная субструктура выявляется также и в объеме алюминия, прилегающем к модифицированному слою. Модифицированный слой характеризуется высоким уровнем кривизны кручения кристаллической решетки, о чем свидетельствуют многочисленные изгибные экстинкционные контуры (Рис. 4, б, изгибные контуры указаны стрелками). На высокий уровень упругих напряжений указывает также присутствие микротрещин, формирующихся в модифицированном слое в процессе изготовления фольги.

Методами микродифракционного анализа с привлечением темнопольной методики был выполнен анализ фазового состава модифицированного слоя (Рис. 5).

Результаты исследований позволили показать, что кристаллиты, содержащие изгибные экстинкционные контуры (Рис. 4, б) в большинстве случаев являются фазой состава Al3Ti. Темнопольное изображение данных кристаллитов приведено на Рис. 5, в. Существенно реже

в объеме кристаллитов обнаруживаются наноразмерные (10-20 нм) выделения округлой формы (Рис. 5, г).

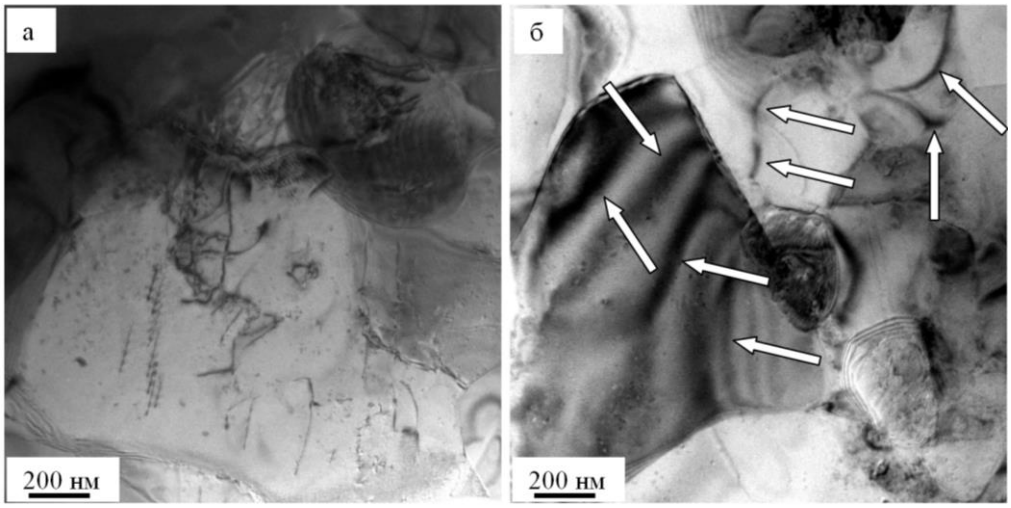


Рисунок 4. Электронно-микроскопическое изображение структуры модифицированного слоя алюминия марки А7.

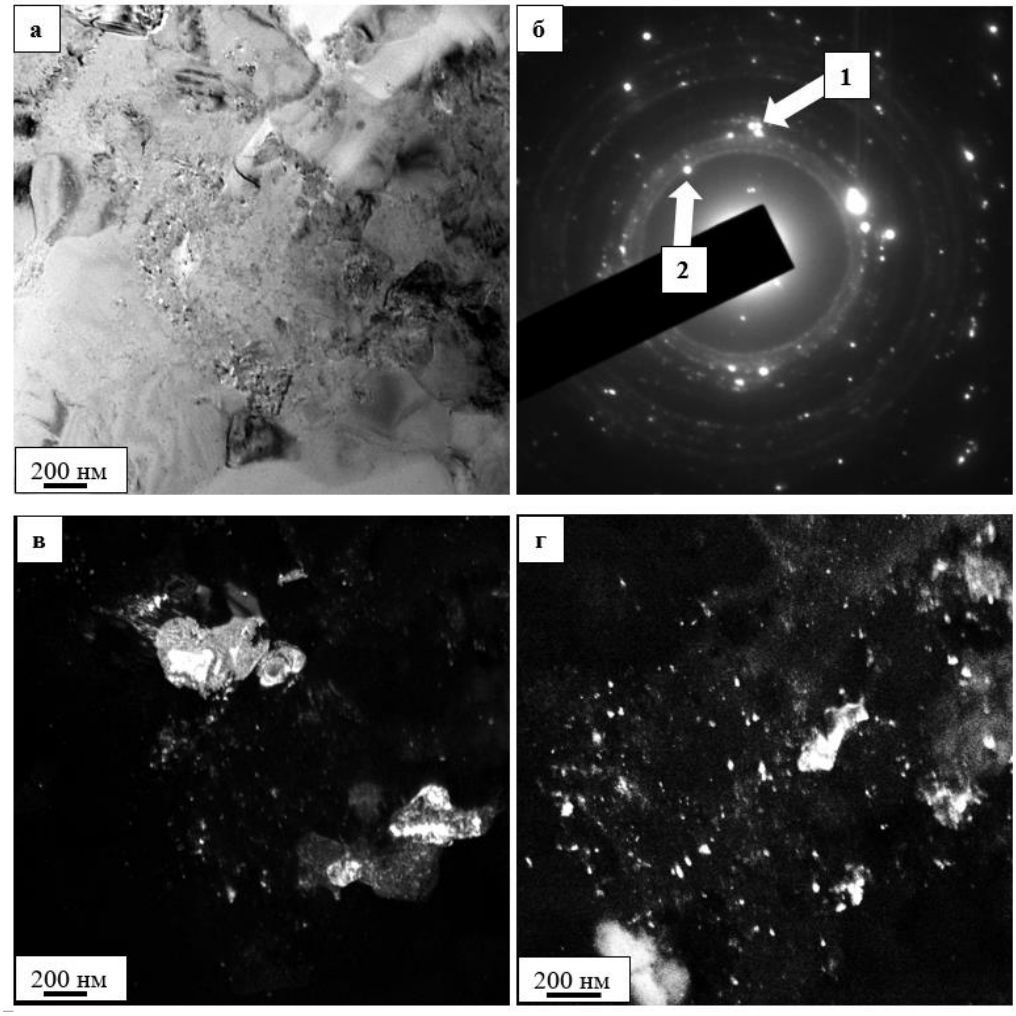


Рисунок 5. Электронно-микроскопическое изображение структуры модифицированного слоя алюминия марки А7; а – светлопольное изображение; б - микроэлектронограмма; в, г – темные поля, полученные в рефлексе фазы Al_3Ti (в) и AlN (г). Стрелками на (б) указаны рефлексы, в которых были получены темнопольные изображения 1 – (в), 2 – (г).

Микродифракционный анализ показал, что данные выделения являются нитридами алюминия, имеющими гексагональную кристаллическую решетку с параметрами а = 0,3114 нм, с = 0,4986 нм.

Прилегающий к модифицированному слою объем алюминия также содержит частицы второй фазы. Частицы имеют округлую форму, размеры частиц изменяются в пределах (10-15) нм. Микродифракционный анализ показал, что данные частицы могут быть как нитридами алюминия, так и нитридами титана. Обе фазы имеют гранецентрированную кубическую кристаллическую решетку (как и у алюминия) с параметрами, близкими к параметрам кристаллической решетки алюминия.

Элементный состав, а также распределение элементов модифицированного слоя изучали методами микрорентгеноспектрального анализа тонких фольг (метод картирования). Выполненные исследования выявили существенно неоднородное распределение алюминия, титана и азота в исследуемом слое материала. Показано, что в объеме модифицированного слоя присутствуют островки размерами от 0,3 мкм до 1,5 мкм, обогащенные атомами алюминия и атомами титана. При этом в объеме островков титана выявлены атомы азота, в объеме островков алюминия атомы азота не выявляются.

Выводы

Разработан метод электронно-ионно-плазменного формирования в едином вакуумном цикле многофазного сплава системы Al-Ti-N, механические и трибологические свойства которого многократно превосходят свойства исходного технически чистого алюминия марки А7. Установлено, что толщина модифицированного слоя изменяется в пределах от 10 мкм до 18 мкм. Показано, что модифицированный слой имеет субмикро- нанокристаллическую структуру, характеризуется высоким уровнем кривизны кручения кристаллической решетки, о чем свидетельствуют многочисленные изгибные экстинкционные контуры и микротрещины, формирующиеся в модифицированном слое в процессе изготовления фольги. Установлено, что кристаллиты, содержащие изгибные экстинкционные контуры, в большинстве случаев являются фазой состава Al3Ti. Существенно реже в объеме кристаллитов обнаруживаются наноразмерные (10-20 нм) выделения округлой формы. Микродифракционный анализ показал, что данные выделения являются нитридами алюминия, имеющими гексагональную кристаллическую решетку с параметрами а = 0,3114 нм, с = 0,4986 нм. Показано, что прилегающий к модифицированному слою объем алюминия содержит частицы нитридов алюминия и титана размерами (10-15) нм, имеющие гранецентрированную кубическую кристаллическую решетку (как и у алюминия).

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ (проект № 19-08-00248).

Список литературы

1. Золоторевский В.С., Белов Н.А. Металловедение литейных алюминиевых сплавов. М.: МИСИС, 2005. – 376 с.

2. Электронно-ионно-плазменная модификация поверхности цветных металлов и сплавов / под общ. ред. Н.Н. Коваля и Ю.Ф. Иванова. Томск: Изд-во НТЛ, 2016. – 312 с.

3. Musil J. Hard and superhard nanocomposite coatings / Surface and Coatings Technology. – 2000. – V. 125. – З. 322−330.

4. Shim Yu.-K., Kim Yo.-K., Lee K.H., Han S. The properties of AlN prepared by plasma nitriding and plasma source ion implantation techniques / Surface and Coatings Technology. – 2000. – Vol. 131. – P. 345–349.

5. Лахтин Ю.М., Коган Я.Д. Теория и технология азотирования / М.: Металлургия, 1991. – 320 с..

6. ГОСТ 11069-2001 Алюминий первичный. Марки = Primary aluminium. Grades : межгосударственный совет по стандартизации, метрологии и сертификации : издание официальное : утвержден и введен в действие Постановлением Государственного комитета Российской Федерации по стандартизации и метрологии от 17 мая 2002 г. № 195-ст : введен впервые : дата введения 2003-01-01 / разработан Межгосударственным техническим комитетом по стандартизации МТК 99 «Алюминий», Всероссийским алюминиево-магниевым институтом (АО «ВАМИ»). – Минск : Межгосударственный совет по стандартизации, метрологии и сертификации, 2001.

SYNTHESIS OF SURFACE ALLOY ON THE BASIS OF ALUMINUM IN COMBINED ELECTRON-ION PLASMA TECHNOLOGIES

Yu.F. Ivanov, Yu.H. Akhmadeev, I.V. Lopatin, E.A. Petrikova,
A.D. Teresov, O.A. Tolkachev
Institute of High Current Electronics Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences
pr. Akademicheskii, 2/3, 634055, Tomsk, Russia
E-mail: yufi55@mail.ru

The scientific principles development of the combined electron-ion-plasma method of forming surface alloys in a single vacuum cycle under combined electron-ion-plasma technologies conditions is the purpose of this research. Technology includes the formation of a “film / substrate” system, its subsequent treatment by an intense pulsed electron beam and, on the final stage, the introduction atoms saturation of the modified surface layer (the nitrogen atoms in the present work).

Aluminum of technical grade A7 (0.15 Si, 0.16 Fe, 0.01 Cu, 0.03 Mn, 0.02 Mg, 0.04 Zn, 0.03 Ga, 0.01 Ti, based - Al, wt.%) was used. The surface alloy was formed in a single vacuum cycle at the «KOMPLEX» setup by titanium film 0.5 μm thick sputtering and then irradiating with an intense pulsed electron beam. Treatment were carried out with the following electron beam parameters: accelerated electron energy 17 keV, pulse duration 50 μs, pulse number 1- 100, the pulse repetition rate is 0.3 s-1, the electron beam energy density is (10-20) J / cm2. The number of deposition / irradiation cycles is 20. At the final stage, the process of the formed surface alloy nitriding in the plasma of a non-self-sustained arc discharge was carried out using the PINK plasma generator. Nitriding was carried out at a temperature of 540 ° C during 8 hours. Studies of the elemental and phase composition, the state of the defective substructure were carried out by using scanning electron microscopy (Philips SEM-515 with EDAX ECON IV microanalyzer) and transmission diffraction electron microscopy (JEOL JEM-2100 F), X-ray diffraction analysis (Shimadzu XRD 6000). Material properties were characterized by hardness (PMT 3 device, indenter load 0.2 N.). Tribological studies (determination of wear resistance and friction coefficient) were carried out on a Pin-on-Disc and Oscillating TRIBOtester tribometer (TRIBOtechnic, France) with the following parameters: a ball made of 100Cr6 steel with a diameter of 6 mm, a track radius of 2 mm, the load on the indenter and the track length varied depending on the level of wear resistance of the material under study.

A method of multi-phase Al-Ti-N system alloy electron-ion-plasma formation in a single vacuum cycle has been developed as a result of the research, the mechanical and tribological properties of which many times exceed those of the original commercially pure A7 aluminum. It is established that the thickness of the modified layer varies from 10 to 18 microns. It is shown that the modified layer has a submicro-nanocrystalline multiphase structure (crystallites α-Ti, Al, Al3Ti, and AlN were detected), characterized by a high level of torsion - curvature of the crystal lattice, as evidenced by the numerous bending extinction contours and microcracks formed in the modified layer during the process of making foil. It has been established that crystallites containing bending extinction contours are, in most cases, titanium aluminides of composition Al3Ti.

Significantly less nano-sized (10–20 nm) roundish precipitates are found in the crystallite volume. Microdiffraction analysis showed that these precipitates are aluminum nitrides having a hexagonal crystal lattice with parameters a = 0.3114 nm, c = 0.4986 nm. It is shown that the volume of aluminum adjacent to the modified layer contains particles of aluminum nitrides and titanium nitrides, which have a face-centered cubic crystal lattice (as in aluminum). Particles are rounded; particle size varies within (10-15) nm.

The work is supported by a grant from the Russian Foundation for Basic Research (grant number 19-08-00248).

ОСОБЕННОСТИ ПОВЕДЕНИЯ ПОРОШКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ TI-SI ПРИ СПЕКАНИИ

Коростелева Е.Н. [a], Коржова В.В.
Институт физики прочности и материаловедения СО РАН
Россия, г. Томск, просп. Академический, 2/4, 634055
E-mail: elenak@ispms.tsc.ru

Введение

В последнее десятилетие интенсивное развитие получили технологии, связанные с формированием сложных многоуровневых гетерогенных и гетерофазных структур в материалах и конструкциях. Исследования показывают, что такие структуры обеспечивают наиболее предпочтительные функциональные свойства [1-3]. Многокомпонентные металломатричные композиты (ММК), в составе которых присутствуют тугоплавкие соединения типа карбидов, силицидов, боридов и т.п. вызывают наибольший интерес. Их использование обеспечивает высокие физико-механические, химические и триботехнические свойства [4]. Используя разные способы получения ММК из одних и тех же элементов, можно формировать различную по своим характеристикам структуру композиционного материала. Как правило, в качестве прекурсоров металломатричного композита используют порошковые смеси титана, кремния, бора, углерода. Это может быть как смесь элементарных (монокомпонентных) порошков, так и смеси с порошками уже готовых тугоплавких соединений [5-7]. Среди технологических процессов порошковой металлургии наиболее широкое использование получил самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС) в многокомпонентных порошковых смесях [8]. В результате СВС можно сформировать металломатричную структуру с тугоплавкими твердыми фазами, образованными непосредственно в процессе синтеза. Основным условием в данном случае является концентрация компонентов, которая обеспечивает экзотермические реакции образования простых или сложных соединений (карбидов, боридов, силицидов, интерметаллидов) в зависимости от выбранного элементного состава порошковой смеси [9-10]. Получение металломатричных композитов на основе системы «титан – кремний» традиционным спеканием из смесей элементарных порошков наталкивается на трудности, связанные с большим объемным ростом из-за образования жесткого каркаса из их соединений при сопровождении значительного тепловыделения [11]. Для того чтобы уменьшить объемный рост и получить приемлемую пористость спеченного материала, можно заменить порошок второго компонента на порошок его тугоплавкого соединения Ti_mSi_n что позволит перейти от неконтролируемого жидкофазного спекания к твердофазному [12-13]. Дополнительный интерес к представленным материалам вызывает перспектива использования их в аддитивных технологиях. В этом случае возникает целый ряд научных вопросов, связанных с особенностями поведения металломатричных композиций в условиях дополнительных термических процессов (различные виды наплавок, спекания и т.п.), включая вопрос стабильности или степени трансформации гетерогенной структуры при таком внешнем воздействии. Использование упрочняющих добавок в смесях порошков или синтезирование металломатричной структуры непосредственно в процессе формирования изделий сталкиваются с дополнительными проблемами [14-15], которые могут быть связаны с рядом физико-химических характеристик материалов (смачиваемость включений расплавами металлов, разные температуры плавления и коэффициенты теплового расширения и т.д.). Применение синтезированных композиционных порошков с уже сформированной структурой вместо механических смесей позволяет исключить сегрегацию (разделение) порошковых компонентов. При этом микроструктура и фазовый состав композиционного порошка при термическом воздействии в процессе наплавления могут значительно измениться. С точки зрения аддитивного производства изделий и деталей важную роль играет процесс послойного сплавления или «припекания» композиционных порошковых материалов. В этом случае актуальна оценка спекаемости с определением

возможных доминирующих механизмов структурообразования. В связи с этим представляет интерес исследование поведения металломатричных порошковых композитов в условиях вакуумного спекания при разных способах сочетания компонентов. С целью анализа поведения ММК в условиях спекания при различных способах введения силицида Ti_5Si_3 были проведены исследования изменения пористости и структуры спеченных порошковых компактов системы Ti - Si, где кремний присутствует в виде отдельного порошка, его соединения с титаном Ti_5Si_3 или синтезированного порошкового материала Ti + (Ti_5Si_3). Структура компактов была сформирована различными способами синтезирования силицида Ti_5Si_3, в том числе непосредственно в процессе самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС).

Эксперимент

Для исследований металломатричных материалов Ti - Si были выбраны три группы порошковых смесей. Для приготовления порошковых смесей использовали порошки титана и кремния. Порошок силицида Ti_5Si_3 получали реакционным спеканием прессовок из смеси элементарных порошков титана и кремния в пропорциях, соответствующих стехиометрическому составу силицида Ti_5Si_3. Соотношение титана и кремния было выбрано таким образом, чтобы гарантировать синтез соединения в композите не менее 50 об.%. Для последующего спекания образцы прессовали в цилиндрической пресс-форме с диаметром и высотой 10 мм. Исходная пористость составляла от 25-30 %. Прессовки спекали в вакууме при температуре 1200-1350°С с выдержкой до 180 минут. Композиционный металломатричный материал получали в процессе вакуумного спекания прессовок, полученных тремя способами: а) из смесей элементарных порошков титана и кремния; б) из смесей порошков титана и силицида Ti_5Si_3; в) из синтезированных в режиме послойного горения композиционных порошков композиции Ti + (Ti_5Si_3). Для последнего варианта порошковые смеси получали путем дробления СВС-прессовок, содержащих расчетную объемную долю тугоплавкого соединения. Остаточную пористость, уплотнение, размер зерен и фазовый состав до и после спекания оценивали в качестве основных параметров изменения структуры металломатричного композита. Была рассчитана пористость спеченных композитов из предположения о соответствии состава расчетному объемному соотношению сформированных в результате синтеза тугоплавких фаз и непрореагировавшего (свободного) титана. При расчете пористости спеченных композиций Ti + (Ti_5Si_3) в качестве теоретической плотности использовали справочные значения плотности титана (4,51 г/см^3) и силицида Ti_5Si_3 (4,32 г/см^3). Дополнительно был проведен металлографический анализ пористости спеченных компактов. Структурные исследования проводили с использованием оборудования Центра коллективного пользования ИФПМ СО РАН (микроскоп AXIOVERT-200MAT и рентгеновский дифрактометр ДРОН-7). Для определения фазового состава использовали рентгеноструктурный анализ в Со K_α – излучении.

Результаты и обсуждение

На рисунке 1 представлены сравнительные результаты изменения пористости спеченных композитов из порошковых составов Ti + (Ti_5Si_3), полученных разными технологическими способами. Спекание простой смеси элементарных порошков титана и кремния приводит к значительному объемному росту прессовок и увеличению остаточной пористости. Основной причиной объемных изменений в этом случае является препятствование сплавлению смежных частиц титана в результате образования между ними прослоек силицида Ti_5Si_3 путем реакционной диффузии кремния в титан. При замене в порошковой смеси элементарного кремния его соединением Ti_5Si_3 процесс спекания происходит более интенсивно, так как силицидные частицы уже не образуют барьерную зону для смежных частиц титана. Это приводит к заметному снижению пористости [12]. Наиболее интенсивное уплотнение и снижение пористости происходило при третьем варианте использования этого состава, когда сначала были получены металломатричные

порошки с аналогичным объемным содержанием силицида методом СВС, а затем были спечены из них компакты.

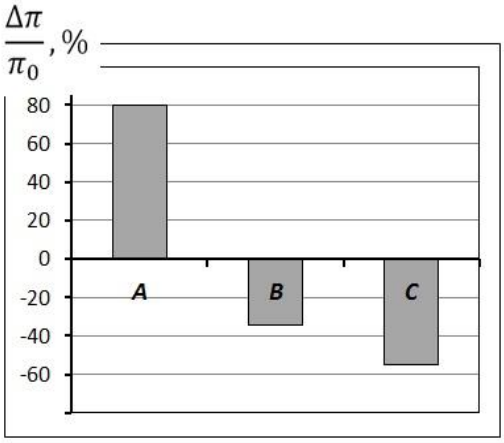
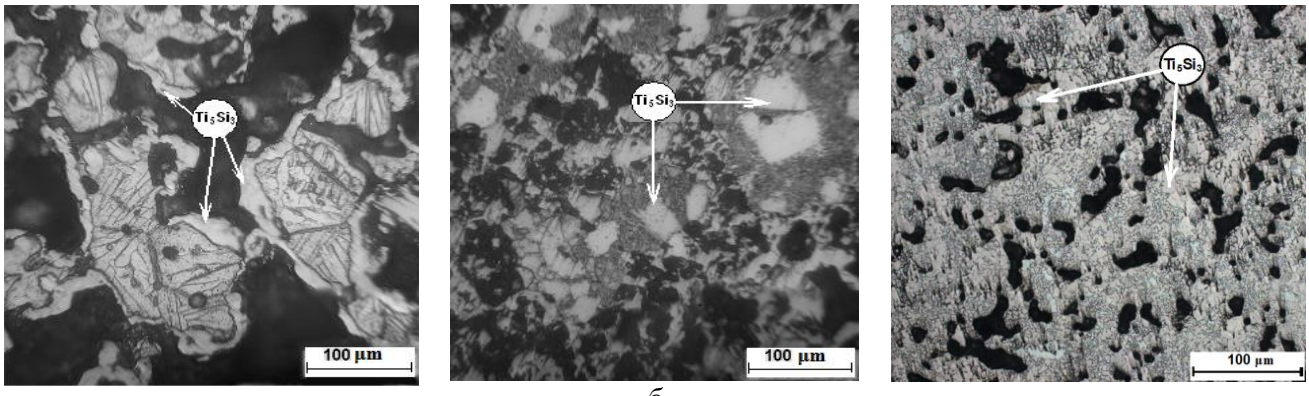


Рисунок 1. Изменение пористости спеченных при 1250 °С прессовок из порошковых материалов состава Ti + 60 об.% (Ti_5Si_3): (А) – смесь порошков титана и кремния; (В) – смесь порошков титана и силицида Ti_5Si_3; (С) – порошковый металломатричный материал, синтезированный в процессе СВС (режим послойного горения заготовки из смеси титана и кремния)

Микроструктура, представленная на рисунке 2 показывает, что наиболее неравновесное состояние с незавершенностью процессов гомогенизации проявляется при реакционном спекании чистых компонентов титана и кремния. При спекании простой смеси кремния и титана наблюдаются протяженные обособленные участки сформированного силицида, окружающие, в основном, частицы непрореагировавшего титана (рис.2, а). Микроструктура композитов, спеченных из порошковых смесей $Ti+Ti_5Si_3$ (рис. 2, б), радикально отличается от вышеописанной микроструктуры спеченных композиций титан-кремний. В этом случае силицид присутствует в виде включений различной формы и размеров в титановой матрице, микроструктура которой значительно более дисперсная, чем микроструктура частиц титана в спеченных композитах (рис. 2, а). Более дисперсная и плотная структура формируется при спекании синтезированных порошков этого же состава. Дополнительная предварительная операция СВС позволила сформировать мелкодисперсную структуру с практически однородным распределением фаз при пониженном содержании пор (рис.2,в).



а *б* *в*

Рисунок 2. Микроструктура спеченных композитов составов Ti + 60 об% Ti_5Si_3 из порошковых смесей титан – кремний (а); из смеси титан – силицид Ti_5Si_3 (б); из СВС композиционных порошков. Температура спекания 1250 °С.

Рентгеноструктурный анализ спеченных композиций из смеси элементарных порошков титана и кремния в соотношении, гарантирующем образование не менее 50 об. % силицида Ti_5Si_3, показал его преимущественное формирование в процессе спекания при незначительной доли свободного титана (не более 3-6 %). Использование смеси с порошком готового силицида Ti + Ti_5Si_3 показало, что при спекании прессовок из нее каких-либо изменений фазового состава компакта не происходит [12]. На рентгенограммах исходной порошковой смеси, так же как и на рентгенограммах всех спеченных образцов вне

зависимости от содержания силицида и температуры спекания, присутствуют только отражения α-Ti и Ti_5Si_3. Синтез в режиме волнового горения порошковой смеси с исследуемым расчетным соотношением компонентов также приводит к образованию силицида Ti_5Si_3 и непрореагировавшего титана. Этот фазовый состав сохраняется и после спекания синтезированных композиционных порошков с тем же интегральным содержанием кремния в составе силицида (см. Таблицу 1).

Таблица 1. Фазовый состав (масс.%) порошковых материалов Ti + 60 об.% Ti_5Si_3 *после синтеза и спекания.*

Материал	$T_{спекания}$	Ti_5Si_3	Ti	TiO
СВС-порошок до спекания	-	61.7	30.7	7.6
СВС-порошок после спекания	1200 ^oC	66.1	14.7	11.7
	1350 ^oC	81.4-75.7	7.6-13.3	10.9

Рисунок 3 показывает изменение плотности порошкового компакта из синтезированного порошка Ti + Ti_5Si_3 в зависимости от температуры спекания. Когда порошковую композицию предварительно подвергают СВ синтезу, а затем измельчают до получения порошкового продукта, который снова подвергается прессованию и спеканию, то в результате получается более плотный материал со значительной степенью усадки (рис. 3).

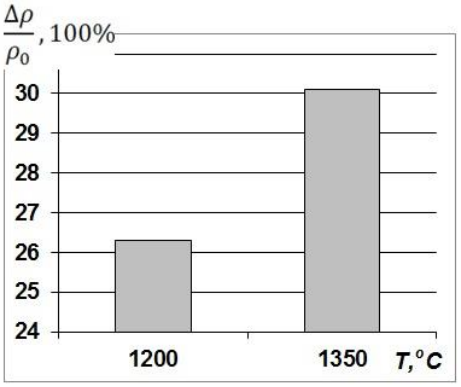
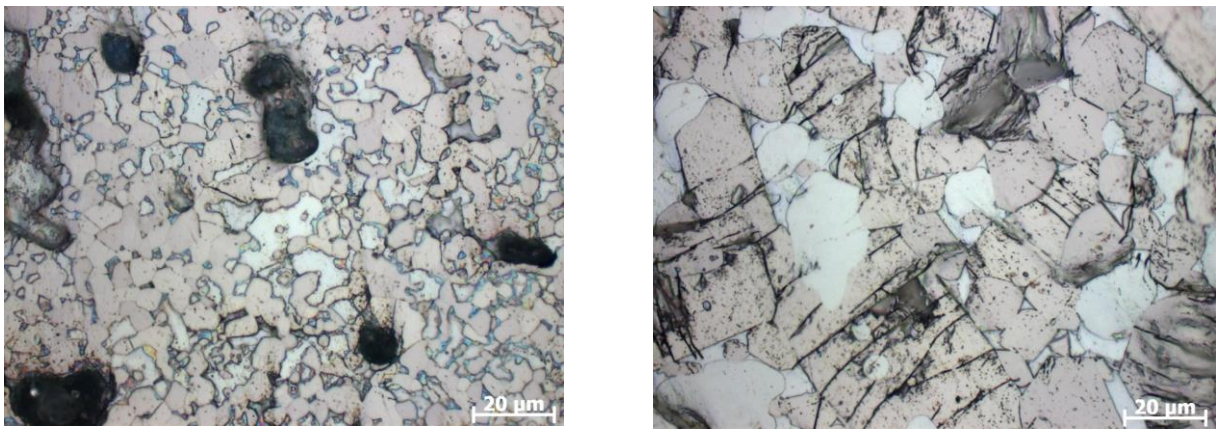


Рисунок 3. Изменение плотности прессовок из СВС порошков расчетного состава Ti + 60 об.% Ti_5Si_3, спеченных при разных температурах.

При этом температура спекания оказывает заметное влияние на уплотняемость композита и морфологию зерен. Особенность спекания титан-кремниевого композита состоит в том, что при достижении 1350°C порошковый компакт испытывает существенное уплотнение не только за счет основных твердофазных процессов спекания, но и появления в ограниченный период времени жидкой фазы в локальных микрообъмах с соответствующим соотношением атомов титана и кремния. Согласно известным равновесным диаграммам состояния системы Ti – Si, эта температура превышает значения эвтектической температуры исследуемой системы (1330°C). Появление жидкой фазы стимулирует уплотнение порошкового материала и снижает пористость. В результате появления жидкости происходит более интенсивный массоперенос и перекристаллизация или вторичная кристаллизация силицидов с заметным ростом зерен (рис.4).

Заключение

Анализ поведения порошковых материалов системы Ti – Si при вакуумном спекании показал, что способ сочетания компонентов в порошковых смесях имеет существенное влияние на объемные дилатации и формирование зеренной и поровой структуры. При этом качественный фазовый состав практически остается идентичным не зависимо от того каким образом были введены компоненты в смесь. Таким образом, можно оптимизировать плотность и остаточную пористость порошковых компактов за счет использования синтезированных порошков с уже сформированным фазовым составом.



а *б*

Рисунок 4. Микроструктура спеченных прессовок из синтезированных порошков Ti + 60 об.% Ti_5Si_3: а) - 1200°С; б) - 1350°С.

Список литературы

1. Gu D., Meng G., Li C., Meiners W., Poprawe R. Selective laser melting of TiC/Ti bulk nanocomposites: Influence of nanoscale reinforcement / Scripta Materialia. 2012. – Vol. 67, – P.185-188.

2. Zhang K., Zou J., Li J., Yu Z., Wang H. Surface modification of TC4 Ti alloy by laser cladding with TiC+Ti powders / Transactions of Nonferrous Metals Society of China. 2010. – Vol. 20, P. 2192-2197.

3. Langelier B.C., Esmaeili S. In-situ laser fabrication and characterization of TiC-containing TiC-Co composite in pure Ti substrate / Journal of Alloys and Compounds. 2009. – Vol. 482, P. 246-252.

4. Ranganath S. A Review on Particulate-Reinforced Titanium Matrix Composites / Journal of Materials Science. 1997. – Vol. 32, Iss. 1. – P. 1-16.

5. Byun Ch.S., Bopark S., Kim D.K., at al. Formation mechanism of titanium silicide by mechanical alloying / Journal of materials science. 2001. – Vol. 36. – P.363– 369.

6. Jimoh A., Sigalas I., Hermann M. In Situ Synthesis of Titanium Matrix Composite (Ti-TiB-TiC) through Sintering of TiH_2-B_4C / Materials Sciences and Applications. 2012. – Vol. 3, P. 30-35.

7. Fu Zh., Koc R. Sintering and mechanical properties of TiB_2-TiC-Ni using submicron borides and carbides / Materials Science & Engineering A. 2016. – Vol. 676. – P. 278–288.

8. Мержанов А.Г., Барзыкин В.В., Абрамов В.Г. Теория теплового взрыва: от Семенова до наших дней / Химическая физика. 1996. – Т.15, №6. – С.3–44.

9. Самсонов Г.В., Виницкий И.М. Тугоплавкие соединения / М.: Металлургия, 1976. – 556 с.

10. , Handbook of Refractory Materials: Design, Properties, Testings / Edited by G. Routschka, H. Wuthnow. – UK: Vulkan-Verlag, 2012. – 355 p.

11. Савицкий А.П. Жидкофазное спекание систем с взаимодействующими компонентами / Новосибирск: Наука. 1991. – 183с.

12. Prybitkov G.A., Vagner M.I., Korzhova V.V., Korosteleva E.N., Gurskikh A.V., Firsina I.A. Sintering of titanium, silicon, and titanium silicide powder mixtures / Powder Metallurgy and Metal Ceramics. 2014. – Vol. 52, Iss. 11-12. – P. 613-619.

13. Rammo N.N., Al-Amery H.R., Abdul-Jabbar T., Jaffer H.I. Adhesion, hardness and structure of thermal sprayed Al/SiC composite coat on graphite / Surface and Coatings Technology. 2009. – Vol. 203. – P. 2891–2895.

14. Батаев В.А., Батаев А.А. Композиционные материалы. Строение. Получение. Применение: учеб. пособие. / М.: Логос. Университетская книга. 2006. – 400 с.

15. Hamedy M.J., Torkamany M.J., Sabbaghzadeh J. Effect of pulsed laser parameters on in-situ TiC synthesis in laser surface treatment / Optics and Lasers in Engineering. 2011. – Vol. 49, P. 557-563.

FEATURES OF THE BEHAVIOR OF Ti-Si POWDER MATERIALS DURING SINTERING

E.N. Korosteleva [a], V.V. Korzhova

Institute of Strength Physics and Materials Scienc SB RAS,

pr. Akademicheskii, 2/1, 634055, Tomsk, Russia

[a] E-mail: elenak@ispms.tsc.ru

In the last decade, technologies associated with the formation of complex multilevel heterogeneous and heterophase structures in materials and structures have received intensive development. Studies show that such structures provide the most preferred functional properties. Multicomponent metal-matrix composites (MMC), which include refractory compounds such as carbides, silicides, borides, etc., cause the greatest interest. Their use provides high physico-mechanical, chemical and tribological properties. Using different methods of obtaining the MMC from the same elements, it is possible to form a structure of a composite material with different characteristics. As a rule, powder mixtures of titanium, silicon, boron, and carbon are used as precursors of the metal-matrix composite. This can be either a mixture of elemental (monocomponent) powders, or a mixture with powders of ready-made refractory compounds. Among the technological processes of powder metallurgy, the self-propagating high-temperature synthesis (SHS) of multicomponent powder mixtures has received the widest use. As a result of SHS, a metal matrix structure can be formed with refractory solid phases formed directly in the synthesis process. The main condition in this case is the concentration of components, which provides exothermic reactions for the formation of simple or complex compounds (carbides, borides, silicides, intermetallic compounds) depending on the selected elemental composition of the powder mixture.

Production of metal-matrix composites based on titanium-refractory element systems from among Si, C or B by traditional sintering from mixtures of elemental powders comes up against difficulties associated with large volume growth due to the formation of a rigid framework from their compounds accompanied by significant heat generation. In order to reduce volumetric growth and obtain an acceptable porosity of the sintered material, the powder of the second component can be replaced by the powder of its refractory compound TimAn, which will make it possible to go from uncontrolled liquid-phase sintering to solid-phase sintering.

Additional interest in the presented materials is caused by the prospect of using them in additive technologies. In this case, a number of questions arise related to the behavior of metal matrix compositions under conditions of additional thermal processes (various types of surfacing, sintering, etc.), including the question of the stability or degree of transformation of a heterogeneous structure under such external influence.

The use of hardening additives in mixtures of powders or the synthesis of metal matrix structure directly in the process of product formation face additional problems that can be associated with a number of physicochemical characteristics of materials (wettability, different melting points and coefficients of thermal expansion, etc.). The use of synthesized composite powders with an already formed structure instead of mechanical mixtures makes it possible to eliminate segregation (separation) of powder components. At the same time, the microstructure and phase composition of the composite powder upon thermal exposure during the fusion process may change significantly. From the point of view of the additive production of products and parts, the process of layer-by-layer melting or “sintering” of composite powder materials plays an important role. In connection with this, it is of interest to study the behavior of metal-matrix powder composites under vacuum sintering conditions for various combinations of components.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ВОЛНЫ БЕЗГАЗОВОГО ГОРЕНИЯ В КОНИЧЕСКОМ ОБРАЗЦЕ С УЧЕТОМ ГЕТЕРОГЕННОСТИ ЕГО СТРУКТУРЫ

Крайнов А.Ю. [1,a], Шульц Д.С. [2,b]

[1] Национальный исследовательский Томский государственный университет

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 36, 634050

[2] Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 40, 634050

E-mail: [a] akrainov@ftf.tsu.ru, [b] d_schulz@mail.ru

Введение

В математической теории горения [1] дана обобщенная математическая постановка задачи определения скорости горения, состоящая из уравнения переноса тепла с учётом скорости тепловыделения от химической реакции и выгорания реагентов. Система уравнений, описывающая распространение пламени в горючей среде, записывается в безразмерных переменных и параметрах [1]. В зависимости от определяющих параметров задачи, граничных условий, условий теплообмена могут возникать различные режимы горения: устойчивые, автоколебательные, неустойчивые; наблюдается также срыв распространения пламени, который происходит при сильном теплоотводе из зоны химической реакции [2-4]. При распространении пламени в безгазовых конденсированных системах важную роль играет гетерогенная структура вещества. В работах [3, 4] для описания гетерогенной структуры СВС составов была предложена модель реакционной ячейки. Задачи [3, 4] решены в стационарной постановке. В работе [5] приведено численное моделирование процесса горения конического образца при теплоотводе в квазиодномерной постановке задачи.

Целью настоящей работы является проведение численного исследования нестационарного безгазового горения в коническом образце при наличии теплоотвода на внешних границах в двухмерной осесимметричной постановке. Моделирование горения конического образца проводится с учетом гетерогенности его структуры с использованием модели сферических реакционных ячеек.

Постановка задачи

Реакционная ячейка представляется в форме шарика, состоящего из вещества А, окруженного веществом В (Рис. 1).

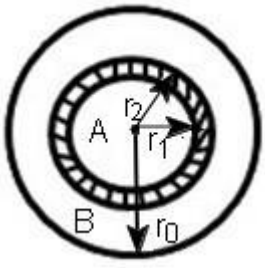


Рис.1 Сферическая реакционная ячейка

Вещества находятся в заданном стехиометрическом соотношении. На границе контакта веществ А и В будет образовываться продукт реакции АВ. Для моделирования распространения волны безгазового горения в однородной смеси порошков реакционные ячейки располагаются непрерывным образом по длине образца. При распространении волны горения по образцу по мере прогрева реакционных ячеек в них активируется диффузия, происходит реакция и нарастание слоя продуктов реакции в каждой реакционной ячейке.

Размеры реакционных ячеек предполагаются одинаковыми, плотности веществ A, B и продукта AB также одинаковы. Скорость химического реагирования в каждой точке по длине образца СВС определяется из решения задачи диффузии и химического реагирования в реакционных ячейках, учитывается диффузия через образующийся слой продукта и зависимость коэффициента диффузии от температуры. Предполагается, что пространственное распределение температуры в реакционной ячейке отсутствует. Обоснование такого предположения проведено в [4] на основе сравнения характерных масштабов диффузии и теплопроводности. Также предполагается, что коэффициент диффузии зависит от температуры по экспоненциальному закону.

Для анализа структуры фронта горения СВС систем проводятся экспериментальные исследования, заключающиеся в том, что смесь порошков, запрессованную в коническую проточку в медной массивной подложке, зажигают. При зажигании СВС состава фронт горения распространяется по образцу, после чего затормаживается за счет теплоотдачи в массивную медную подложку. После остывания образца его разрезают для анализа структуры волны горения. Математическое моделирование данного процесса необходимо, так как может показать степень изменения глубины превращения исходных компонентов после «затормаживания» фронта горения в процессе его остывания.

В данной работе приведено решение задачи безгазового горения конического образца с использованием модели сферической реакционной ячейки [6]. Математическая постановка в двухмерном осесимметричном варианте в безразмерной форме имеет вид:

$$\frac{\partial\theta}{\partial\tau}=\frac{1}{\bar r}\frac{\partial}{\partial\bar r}\left(\bar r\frac{\partial\theta}{\partial\bar r}\right)+\frac{\partial^2\theta}{\partial\bar y^2}+\frac{\partial\bar V}{\partial\tau}\frac{1}{\gamma}. \tag{1}$$

Начальные и граничные условия:

$$\theta(\bar r,\bar y,0)=-1/\gamma,\ V(\bar r,\bar y,0)=1 \tag{2}$$

$$\theta(\bar r,0,\tau)=0,\ \ \tau<\tau_f,\ \frac{\partial\theta(\bar r,0,\tau)}{\partial\bar y}=0,\ \ \tau\ge\tau_f,$$

$$\frac{\partial\theta(\bar r,\bar L,\tau)}{\partial\bar y}=-Bi\left(\theta(\bar r,\bar L,\tau)+1/\gamma\right),\frac{\partial\theta(0,\bar y,\tau)}{\partial\bar r}=0,$$

$$\frac{\partial\theta\left(R_K(\bar y),\bar y,\tau\right)}{\partial n}=-Bi\left(\theta(R_K(\bar y),\bar y,\tau)+1/\gamma\right) \tag{3}$$

Величина тепловыделения от химической реакции в уравнении (1) определяется из решения задач диффузии и реагирования на микроуровне в реакционной ячейке:

$$\frac{\partial c}{\partial\tau}=\gamma\cdot e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}}\frac{1}{z^2}\frac{\partial}{\partial z}\left(z^2\frac{\partial c}{\partial z}\right), \tag{4}$$

$$c\left(z_1(\tau),\tau\right)=c_1,\ c\left(z_2(\tau),\tau\right)=c_2,\ c\left(z,0\right)=c_2,\ z_1\left(0\right)\le z\le z_2\left(0\right). \tag{5}$$

В уравнении (1):

$$\frac{\partial\bar V}{\partial\tau}=z_2^2\frac{\partial z}{\partial\tau}-z_1^2\frac{\partial z}{\partial\tau}=z_2^2\left|\overline{U_2}\right|+z_1^2\left|\overline{U}_1\right| \tag{6}$$

Значения $\overline{U}_1$ и $\overline{U}_2$ определяются из соотношений:

$$\gamma\ e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}}\left.\frac{\partial c}{\partial z}\right|_{z_1(\tau)}=c_1\overline{U}_1,\ \ -\gamma e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}}\left.\frac{\partial c}{\partial z}\right|_{z_2(\tau)}=\left(1-c_2\right)\overline{U_2} \tag{7}$$

Система уравнений записана в традиционных для теории горения безразмерных переменных и параметрах [1]. В качестве масштабов выбрано: масштаб времени $t_* = c_k \rho R T_a^2 r_0^2 / \left(q E_d D_0 e^{-E_d / R T_a} \right)$; масштаб координаты на макроуровне $x_* = \sqrt{t_* \lambda / c_k \rho}$; масштаб температуры $T_* = R T_a^2 / E$; масштаб координаты для реакционной ячейки $r_* = r_0$. Обозначения: c – удельная теплоемкость; ρ – плотность; T – температура; t – время; λ – коэффициент теплопроводности; r, y – радиальная и осевая координаты цилиндрической системы координат; b – концентрация реагента; $R_K(y)$ – внешний радиус конической части образца; L – высота конической части образца; E – энергия активации; Q – тепловой эффект реакции; k_0 – предэкспоненциальный множитель; T_a – адиабатическая температура горения; R – универсальная газовая постоянная; t_f – момент времени, когда граничное условие первого рода переключается на граничное условие, соответствующее адиабатической границе; α – коэффициент теплоотдачи; n – направление нормали к боковой поверхности конической части образца. Безразмерные переменные: координата $\xi = x / x_*$; время: $\tau = t / t_*$; температура $\theta = \frac{E_d}{R T_a^2}\left(T - T_a\right)$; объём $\overline{V} = V / V_0$, $z = r / r_*$, где r - радиальная координата гетерогенной структуры, $r_* = r_0$ - масштаб координаты для реакционной ячейки $r_* = r_0$ - ее радиус. Также в задаче введены безразмерные параметры γ, β, определяемые следующим образом:

$$\gamma = \frac{c_k \rho}{q} \frac{R T_a^2}{E_d}, \ \beta = \frac{R T_a}{E_d}.$$

Для решения системы уравнений (1) – (3) проводилось преобразование координат, связанное с формой образца. Полученное в преобразованных координатах уравнение решалось по явной схеме. Для определения величины источников уравнения (1), определяемых в виде (4), в каждой точке пространства (в каждой точке разностной сетки) решалась задача (4) – (7).

Численные расчёты задачи (1) – (7) проводились при $0 \le Bi \le \infty$, $\beta = 0.05$ и $\gamma = 0.14$, параметр $R_K(0)$ принимал значения $R_K(0) = 100 \div 200$.

Анализ результатов

На рисунке 2 показаны зависимости скорости горения СВС состава от координаты ξ при различных значениях числа Bi при $R_K(0) = 200$. На графике показано три режима распространения фронта горения: 1) увеличение скорости фронта горения с пройденным расстоянием вдоль оси конуса (кривая 1). Наблюдается при значении $Bi = 0$; 2) срыв (погасание) горения (кривая 2). Наблюдается при значениях $0.05 \le Bi \le \infty$. Из графика видно, что при $Bi = \infty$ происходит срыв горения на расстоянии $\Delta\overline{L} = 135$ от правой границы (меньшего основания) конуса; 3) срыва горения не наблюдается (кривая 3). Данная кривая была получена в результате проведения вычислительных экспериментов по определению значения числа Bi, при котором срыва горения в коническом образце не происходит, сгорание конического образца происходит с почти стационарной скоростью. Кривая 3 соответствует числу $Bi = 0.033$.

Для случая, когда происходит срыв горения, поля температуры и концентрации представлены на рисунке 3. Подобные вычислительные эксперименты были проведены и для $R_K(0) = 150$, $R_K(0) = 100$. Результаты расчетов при $R_K(0) = 100$ представлены на рисунках 4, 5.

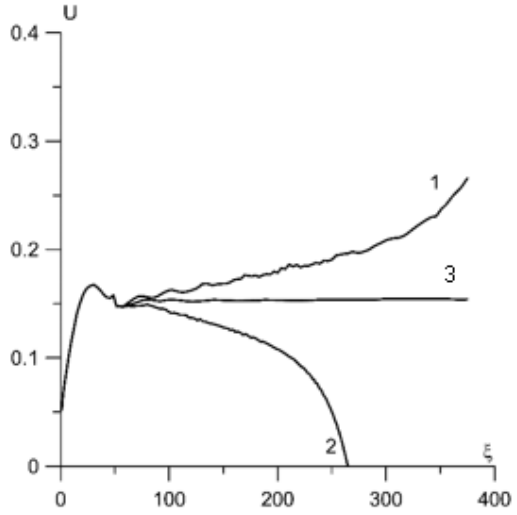
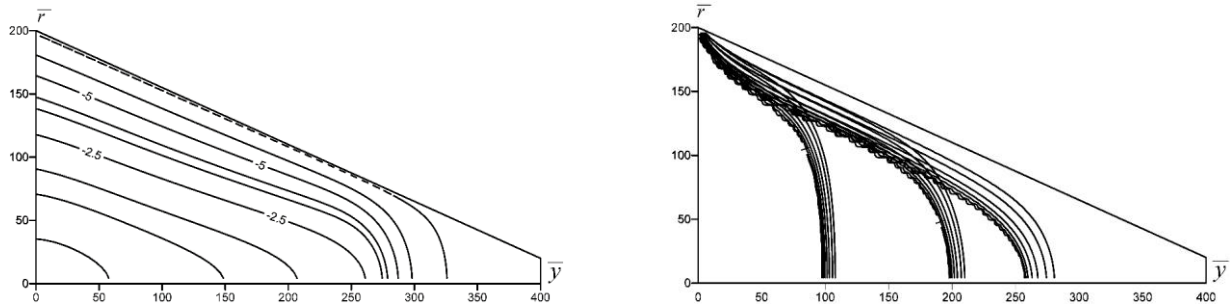


Рис. 2 Зависимость скорости горения от координаты ξ при значениях числа Bi: 1 – $Bi = 0$, 2 – $Bi = \infty$, 3 – $Bi = 0.033$. $R_K(0) = 200$, $R_K(\overline{L}) = 20$



а) *б)*

Рис. 3 Поле температуры (а) в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 260$ и концентрации (б) в моменты времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 100, 200$ и 260. $Bi = \infty$, $R_K(0) = 200$

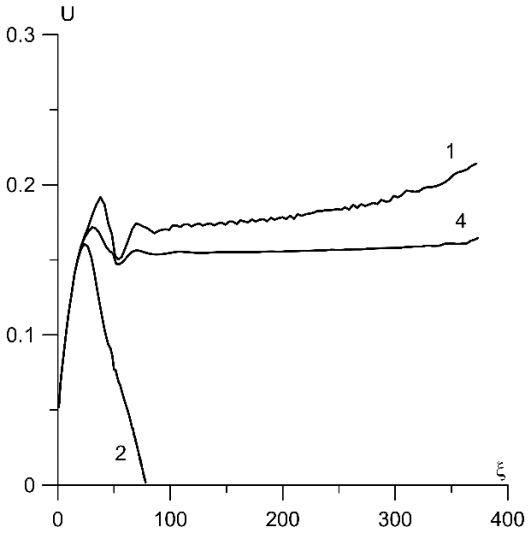
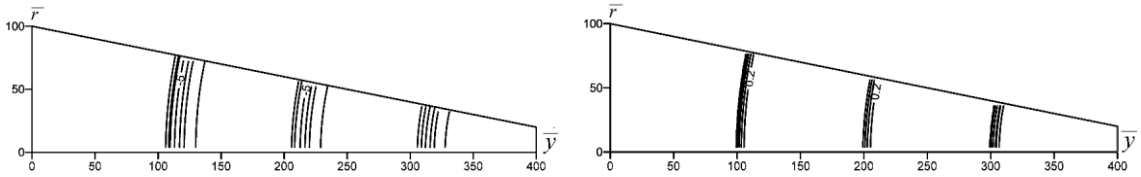


Рис. 4 Зависимость скорости пламени от координаты ξ при значениях числа Bi: 1 – $Bi = 0$, 2 – $Bi = \infty$, 4 – $Bi = 0.013$, $R_K(0) = 100$, $R_K(\overline{L}) = 20$

Для случая, когда происходит полное сгорание конуса, поля температуры и концентрации представлены на рисунке 5.



а) *б)*

Рис. 5 Поле температуры (а) и концентрации (б) в моменты времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100, 200$ и 300. $Bi = 0$, $R_K(0) = 100$

Из вычислительных экспериментов следует, что критическое значение параметра Bi, при котором срыва горения конического образца не происходит, принимает разные значения для различных $R_K(0)$. Для $R_K(0) = 200$ было определено $Bi = 0.035$, для $R_K(0) = 150$ – $Bi = 0.025$, для $R_K(0) = 100$ – $Bi = 0.015$. Таким образом, определены посредством вычислительного эксперимента критические величины теплоотвода, приводящие к срыву горения.

Заключение

Таким образом, проведено численное исследование распространения волны горения в коническом образце СВС состава при наличии теплоотвода на внешних границах в двухмерной осесимметричной постановке. Определены посредством вычислительного эксперимента критические величины теплоотвода, приводящие к срыву горения. Определены величины недогоревшего слоя в зависимости от интенсивности теплоотдачи и геометрических величин конического образца СВС состава. Проведен сравнительный анализ результатов расчетов скорости для двух моделей безгазового горения с учетом и без учета гетерогенности структуры СВС состава конического образца. Анализ показал, что зависимости скорости распространения волны безгазового горения качественно совпадают.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №17-79-20011).

Список литературы

1. Зельдович Я.Б., Баренблатт Г.И., Либрович В.Б. и Махвиладзе Г.М. Математическая теория горения и взрыва / М: Наука. 1980. – 478 с..

2. Мержанов А.Г., Мукасьян А.С. Твердопламенное горение / М.: ТОРУС ПРЕСС. 2007. – 336 с.

3. Алдушин А.П., Мержанов А.Г., Хайкин Б.И. О некоторых особенностях горения конденсированных систем с тугоплавкими продуктами реакции / Докл. АН СССР. 1972. – Т. 204, № 5. – С. 1139-1142.

4. Хайкин Б.И. К теории процесса горения в гетерогенных конденсированных средах, Процессы горения в химической технологии и металлургии / Черноголовка: Изд-во ОИХФ АН СССР. 1975. – С. 227-244.

5. Stepanov B.V., Rogachev A.S. Quenching of solid-phase combustion front of a symmetric sample by supercritical heat loss / International Journal of Self-Propagating High-Temperature Synthesis. 1992. – Vol. 1, Iss. 3. – P. 409-416.

6. Крайнов А.Ю., Шульц Д.С. Математическое моделирование СВС процесса в гетерогенных реагирующих порошковых смесях / Компьютерные исследования и моделирование. 2011. – Т. 3, № 2. – С. 147-153.

GAS FREE COMBUSTION WAVE SPREADING AT TAPERED-BAR CONTROLLING FOR ITS STRUCTURE HETEROGENITY

A.Yu. Krainov [1,a], D.S. Shults [2,b]

[1] National Research Tomsk State University, Lenin Ave., 36, 634050, Tomsk, Russia

[2] Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics, Lenin Ave., 40, 634050, Tomsk, Russia

E-mail: [a] akrainov@ftf.tsu.ru, [b] d_schulz@mail.ru

The aim of the research is to simulate the unsteady gas-free combustion of a tapered SHS sample with due consideration of the heat dissipation from the external boundaries under axisymmetric conditions. The heterogeneous structure of the sample is described by a model of the reaction vessels. The chemical reaction rate at each point along the SHS sample is defined by solving the diffusion and chemical reaction problems in the reaction vessels. Here, the diffusion coefficient depends on the temperature, and the diffusion occurs in the newly formed layer of the reaction product. The spatial temperature distribution in each reaction vessel is negligible.

The mathematical model consists of the heat-transfer equation for the tapered SHS sample and the reagent diffusion equation describing the diffusion through the refractory reaction product in the reaction vessels.

The coordinate system was reformed according to the shape of the sample to solve the equation system of the mathematical model. The system in the reformed coordinates was solved using explicit scheme. We have solved the diffusion problem of the reagents in each reaction vessel to define the value of heat source at each point of the calculation field.

We have numerically investigated the problem of the combustion wave propagation in a tapered SHS sample taking into account the heat dissipation from external boundaries in a two-dimensional axisymmetric formulation. The critical values of the heat dissipation leading to the combustion extinction are determined. The quantity of the unburned layer is defined depending on the intensity of heat transfer and the SHS sample configuration parameters. We have made a comparative analysis of the gas-free combustion rates obtained by two models. The first model has been taken into account the heterogeneity of the SHS structure, the second one has not. The obtained rates of the combustion propagation using the models coincide qualitatively.

This work is supported by the Russian Science Foundation under grant number №17-79-20011.

ДВУХУРОВНЕВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СЕЛЕКТИВНОГО ЛАЗЕРНОГО ПЛАВЛЕНИЯ ИМПУЛЬСНЫМ ЛАЗЕРОМ

Кривилев М.Д., Гордеев Г.А., Анкудинов В.Е., Харанжевский Е.В.
Удмуртский государственный университет,
Россия, Удмуртия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1, 426034
E-mail: mk@udsu.ru

Введение

Селективное лазерное плавление (СЛП) [1] металлических порошков реализуемо с помощью непрерывного или импульсного лазера. В большинстве промышленных машин для 3D печати применяются непрерывные лазеры, так как при таком методе плавления достигаются квазистационарные тепловые условия в зоне расплава. Это способствует достижению стационарных условий кристаллизации и теплоотвода, что, в конечном счете, улучшает механические свойства изготавливаемых изделий и обеспечивает приемлемую скорость послойного изготовления компактов.

При решении ряда практических задач методом СЛП удобнее использовать импульсные лазеры (ИЛ). Например, импульсная лазерная оснастка необходима для изготовления изделий с высоким коэффициентом отражения. В этом случае традиционная конфигурация с непрерывным лазером не обеспечивает температур, достаточно высоких для плавления таких порошков. Другим применением является изготовление градиентных функциональных покрытий, образованных в виде композиционных неравновесных фаз и структур. Это привело к созданию разновидности СЛП – метода высокоскоростного лазерного плавления (ВЛП) [2]. Отметим, что импульсное СЛП металлов относится к сложному физико-химическому процессу, в котором плавление, процессы переноса и кристаллизация протекают в малом локальном объеме за короткий период времени. В таких условиях прямое экспериментальное изучение протекающих процессов практически невозможно, так как удается измерить только температуру и форму ванны расплава. Дополнительно после лазерного плавления может быть получена информация о микроструктуре и распределении пор в компакте.

Таким образом, формирование цельного теоретического описания процессов СЛП/ВЛП с помощью ИЛ может быть получено только за счет комбинирования экспериментальных исследований и вычислительного эксперимента [3–6]. В настоящей работе развит двухуровневый подход [7] к моделированию процессов переноса при импульсном селективном лазерном плавлении порошков. Предложен метод разбиения задач на макроскопический и мезоскопический уровни, выполнена алгоритмическая компоновка двухуровневой модели. С использованием двухуровневого подхода описан процесс СЛП порошка карбонильного железа, проведена верификация расчетной модели на доступных экспериментальных данных.

Двухуровневый подход к моделированию СЛП процессов

Метод двухуровневого моделирования основан на известном в литературе подходе расщепления сложной задачи на задачи различных уровней, решения которых согласуются по специально установленной процедуре. Расщепление исходной задачи, как правило, осуществляется на основе анализа пространственно-временных масштабов процессов и их характеристических безразмерных чисел. Такой подход перспективен для анализа процессов СЛП, поскольку изучаемая система обладает несколькими структурными уровнями: всего изделия, слоя порошка, одиночных частиц и элементов первичной кристаллической структуры. По этой причине реализация двухуровневой модели позволяет улучшить прогностическую точность моделей СЛП.

Математически двухуровневый подход основывается на методе редукции числа степеней свободы при сохранении числа уравнений и, соответственно, числа зависимых

переменных. Для этого уравнения баланса разбиваются на группы МАКРО и МЕЗО и далее решаются на различных масштабах с выполнением процедуры согласования, рисунок 1. Для этого на основе оценки характеристических чисел процессов переноса, характеристических пространственных масштабов и времен осуществляется декомпозиция полной модели на задачи для макро- и мезоуровней. Каждая задача описывает только одно физическое явление (например, диффузию компонентов, теплоперенос и т.д.), используя в качестве исходных данных поля зависимых переменных, рассчитанные в других задачах, но при этом сохраняется связность модели. Другими словами, в каждое отдельное уравнение входят скалярные или векторные поля, рассчитываемые другими уравнениями. Уточнение краевых условий $\{\Gamma_i\}$ для мезоскопических моделей, т.е. согласование «сверху-вниз», проводится на основе решения макроскопических моделей. Согласование задач «снизу-вверх» проводится по уточнению зависимостей $\{F_i\}$ и $\{G_i\}$ на основе данных мезоскопических моделей.

Алгоритмическая компоновка модели

Схема алгоритмической компоновки двухуровневой модели СЛП приведена на рисунке 2. На макроуровне решаются сопряжённые уравнения баланса для температуры T, энтальпии H, пористости ε и положения Z границы порошкового слоя соответственно. На мезоуровне осуществляется описание физических эффектов, которые имеют локальный характер. Это анализ эффективной теплопроводности, консолидации порошка и сегрегации химических компонентов. Поскольку все процессы мезоуровня обладают малой корреляционной длиной, задачи мезоуровня допустимо решать как локальные и несопряжённые.

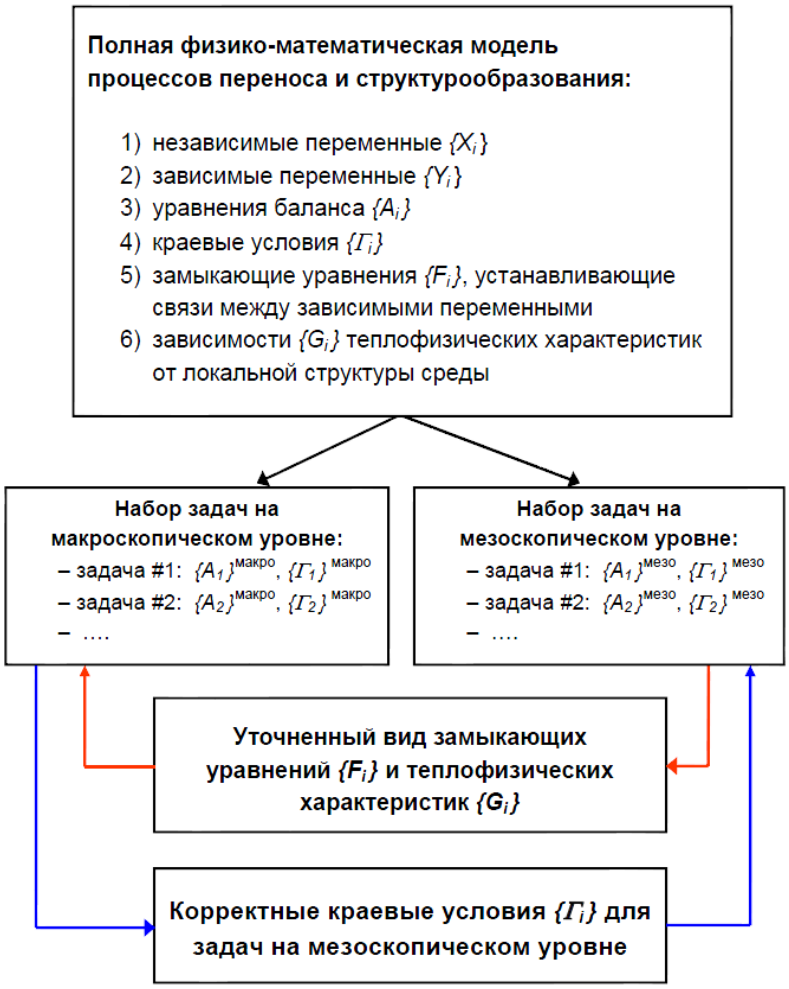


Рисунок 1. Метод разбиения полной модели на задачи макроскопического и мезоскопического уровней

На схеме на рисунке 2 также приведены данные макроуровня, передаваемые с макроуровня на мезоуровень и используемые для постановки краевых задач мезоуровня. К ним относятся поля переменных макроуровня: нестационарное температурное поле $T(t,\boldsymbol{r})$ и мгновенное распределение $\varepsilon(\boldsymbol{r})$ пористости. С мезоскопического уровня на макроуровень передаются замыкающие уравнения, кинетические и термодинамические параметры для уточнения уравнений макроуровня. К ним относятся функция эффективной теплопроводности $k_{эфф.}(\varepsilon)$, параметр A кинетической модели усадки и степень сегрегации c_{max}–c_{min} компонентов для определения производной $\partial T/\partial H$ в уравнении для энтальпии H. Поскольку задачи мезоуровня решаются только в отобранном множестве мезообъёмов, характеризующем все мезообъёмы, то требуется процедура аппроксимации решений в других мезообъёмах. На основании переданных с мезоуровня данных конструируется карта микроструктурных состояний, которая далее интерполируется на всю расчётную область макроуровня. Подробное описание разработанных математических моделей и численных алгоритмов дано в [6, 7].

Рисунок 2. Схема согласования решений на макроскопическом и мезоскопическом уровнях в задаче расчета селективного лазерного плавления

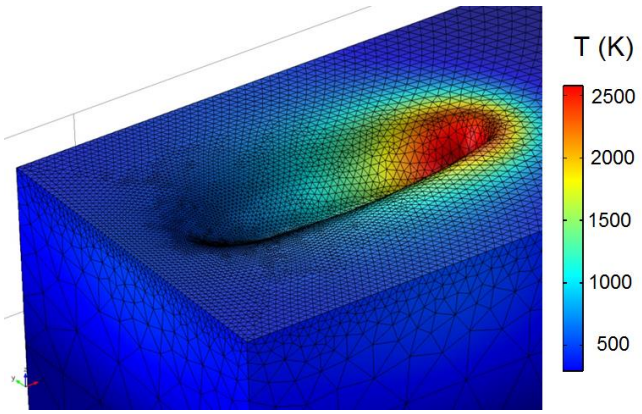


Рисунок 3. Результаты расчёта поля температуры и формы поверхности для слоя порошка железа при прямолинейном движении лазерного луча. Цветной шкалой обозначена температура на поверхности порошкового слоя. В результате плавления и действия капиллярных сил происходит консолидация частиц, что приводит к усадке материала. Показана конечно-элементная расчётная сетка, деформируемая в численной модели в зависимости от степени усадки

Результаты моделирования на макроуровне

Рассмотрим основные результаты анализа тепловых полей и кинетики усадки в порошковом слое. На рисунке 3 приведены результаты расчёта температуры и формы зоны оплавления при лазерной обработке порошка железа. В области воздействия лазерного луча происходит плавление порошка и консолидация частиц. При этом за счет гауссова распределения энергии в луче происходит плавная усадка по краям, и профиль поперечного сечения имеет чашеобразную форму. Из анализа характерных пространственно-временных масштабов следует, что во время импульса осуществляется интенсивный разогрев поверхностного слоя. Действительно, тепловой поток в подложку на 0,5–1 порядка величины меньше, чем тепловой поток со стороны поверхности, из-за высокой плотности мощности импульсного ЛИ. Охлаждение вследствие радиационного теплопереноса в начале импульса на 2 порядка меньше теплового потока ЛИ и достигает значимых значений от 1 до 5% только при температурах $T \sim 2000$ К. Конвективное охлаждение в атмосферу на начальных этапах незначительно при $T \leq T_m$, где T_m – температура плавления. В процессе нагрева выше T_m и достижения температур $T_{кип.}$ кипения (интенсивного испарения) происходит выравнивание потоков подвода тепла и охлаждения. Таким образом, температура поверхности согласно выполненным расчётам никогда не превышала $T_{кип}$. После окончания импульса происходит достаточно быстрое остывание за счёт высокой теплопроводности металла, хорошего теплового контакта с подложкой и малого объёма зоны оплавления.

Результаты на рисунке 4 раскрывают кинетику усадки при импульсной обработке. Начальная пористость порошка составляет ε_0=0,62. Перед началом импульса, рисунок 4(а), имеется сформированная предыдущими импульсами дорожка, в которой вдоль траектории движения луча произошла полная усадка до ε=0. После начала импульса происходит быстрый нагрев выше T_m и формирование зоны оплавления, рисунок 4(б). Как обсуждалось выше, максимальная температура ограничена $T<T_{кип.}$, но интенсивное испарение стабилизирует температуру в диапазоне $2300 \leq T \leq 2700$ К при $T_{кип.}$=3050 К, рисунок 4(б)–(д). Отметим, что площадь зоны оплавления в течение импульса меняется незначительно. Вместе с тем происходит движение фронта плавления в подложку. На рисунок 4(г) и (д) заметно, что фронт плавления продвинулся дальше границы порошкового слоя и затронул подложку: область оплавления подложки показана серым цветом в нижней части зоны оплавления. Этот механизм оплавления подложки исключительно важен с технологической точки зрения, поскольку обеспечивает формирование трехмерного изделия послойным способом. Площадь зоны оплавления подложки значительно меньше зоны оплавления на поверхности. По этой причине применяется схема сканирования с перекрытием до 80%, что позволяет гарантировать равномерность оплавления подложки. В титановых изделиях ответственного назначения достигается глубина зоны оплавление до $h_{оплав.}$=6 h_0, где h_0 – толщина порошкового слоя. После окончания импульса, рисунок 4(е), зона оплавления быстро затвердевает. Это приводит к возникновению значительных температурных градиентов внутри сплавляемого слоя. Оценки, следующие из расчетных термограмм, рисунок 5,

показывают, что температурный градиента в зоне облучения лазерным лучом достигает значений до 10^5–10^6 К/м.

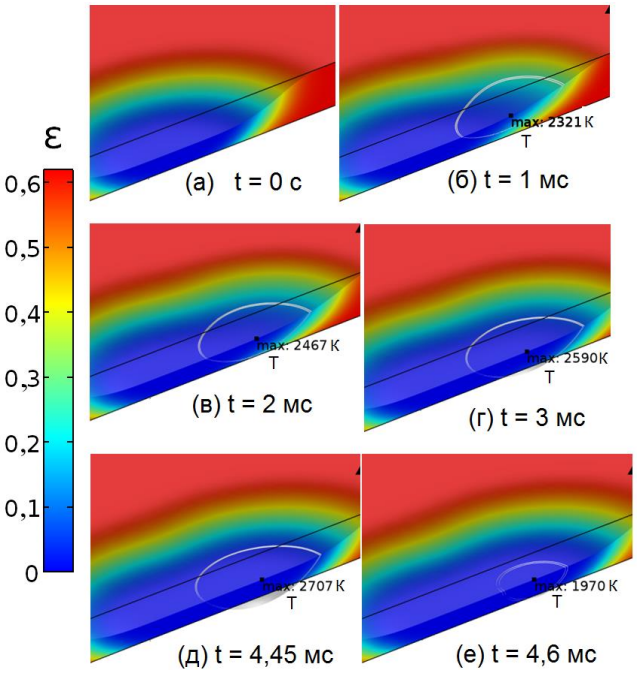


Рисунок 4. Результаты расчета кинетики плавления и усадки высокодисперсного порошка железа во время импульсного лазерного воздействия. Длительность импульса τ=4,5 мс, мощность лазера $P_{ИЛ}$=50 Вт, частота импульсов ν=100 Гц, радиус луча $R_{луча}$=400 мкм. Цветовой шкалой показано распределение локальной пористости ε. Насыпная (начальная) пористость – ε_0=0,62. Белой линией обозначены изменяющиеся границы зоны оплавления, соответствующие изотерме $T=T_m$. Время t=0 с соответствует началу второго импульса

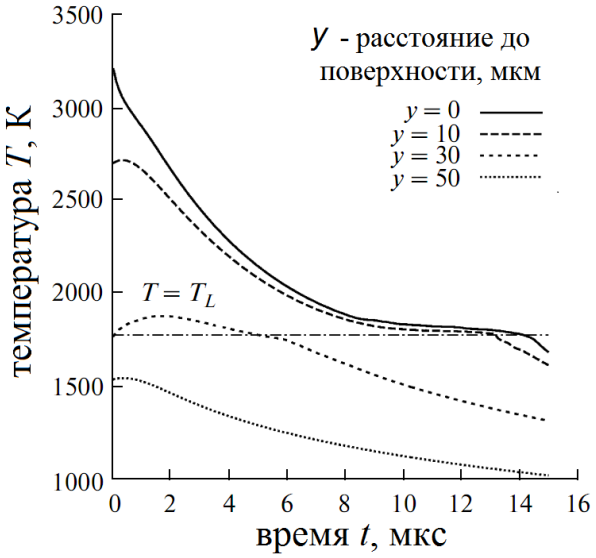


Рисунок 5. Расчетные термограммы T (t) как функции расстояния контрольной точки до поверхности порошкового слой

Результаты моделирования на мезоуровне

Эффективная теплопроводность порошков зависит от площади теплового контакта частиц, что в конечном итоге определяет термическое сопротивление порошковых сред. Таким образом, важно понимать, как меняется структура порошкового слоя в процессе лазерного нагрева. Было выполнено [8] моделирование консолидации частиц порошка железа методом фазового поля. Гранулометрический анализ показал, что средний размер частиц равен ⟨d⟩ = 3 мкм при очень малой дисперсии σ < 1,0 мкм, что связано с технологией его производства термохимическим способом. Таким образом, расчеты для одномодального – с одним размером частиц – порошка могли быть сопоставлены напрямую с результатами лабораторного эксперимента.

В проведенной серии расчётов исследовалась кинетика консолидации для регулярного массива частиц, рисунок 6. В этом случае каждая частица взаимодействует с несколькими ближайшими соседями в объёме порошкового слоя. На внешней поверхности порошкового

слоя число соседей меньше, поэтому происходит быстрое формирование слоя расплава на границе с атмосферой. Анализ изменения структуры фазовых границ на рисунке 6 показывает, что выделяются три стадии консолидации. На первой стадии происходит образование шеек и формирование связного металлического каркаса. На второй стадии реализуется слияние газовых включений и уменьшение удельной поверхности под действием капиллярных сил. На третьей стадии происходит выход газовых включений на поверхность под действием архимедовой силы. Последняя стадия занимает продолжительное время от 50 до 500 мкс, что было объяснено сочетанием двух эффектов: (1) малым объёмом газовых включений и их слабой подъёмной силой, (2) значительным гидродинамическим сопротивлением для сферических включений такого объёма. Этот вывод согласуется с оценкой отношения подъёмной силы и сил вязкого трения, поскольку число Архимеда составляет $Ar \sim 10^{-6}$.

Дальнейший анализ был направлен на изучение кинетики консолидации. На рисунке 7 приведено сравнение результатов фазополевого (ФП) моделирования с кинетической моделью аррениусовского типа, используемой на макроуровне. На графике нанесены данные моделирования как для двух частиц, так и для представительного массива частиц. Кинетическая модель прогнозирует плавное увеличение относительной плотности порошка в интервале времени $0{,}1 < t < 10$ мс после начала консолидации. Результаты ФП моделирования показывают двухступенчатую кинетику. Образование шеек заканчивается после 2 мс, и начинается увеличение плотности с 38% до 60% за счёт объединения и выхода на поверхность газовых включений, расположенных близко к внешней поверхности расплава. Отметим, что газовые включения на этой стадии объединены микроканалами, способствующими отводу газа. Как только первая стадия закончена, плотность перестаёт увеличиваться, газовые включения находятся в расплаве, и наблюдается их слияние. Как только достигается достаточный размер для подъёма на поверхность за счёт архимедовой силы, включения выходят на поверхность, и жидкофазная консолидация порошка заканчивается.

Таким образом, на основании данных вычислительного эксперимента можно заключить, что кинетика консолидации является многоступенчатым процессом, и это обусловлено затруднённым выходом газовых включений на поверхность. Данный вывод был нами подтвержден [6] в лабораторном эксперименте для высокодисперсного порошка железа. Таким образом, при импульсной обработке малая длительность импульса способствует формированию структуры с высокой пористостью, что востребовано при производстве каталитически активных функциональных материалов.

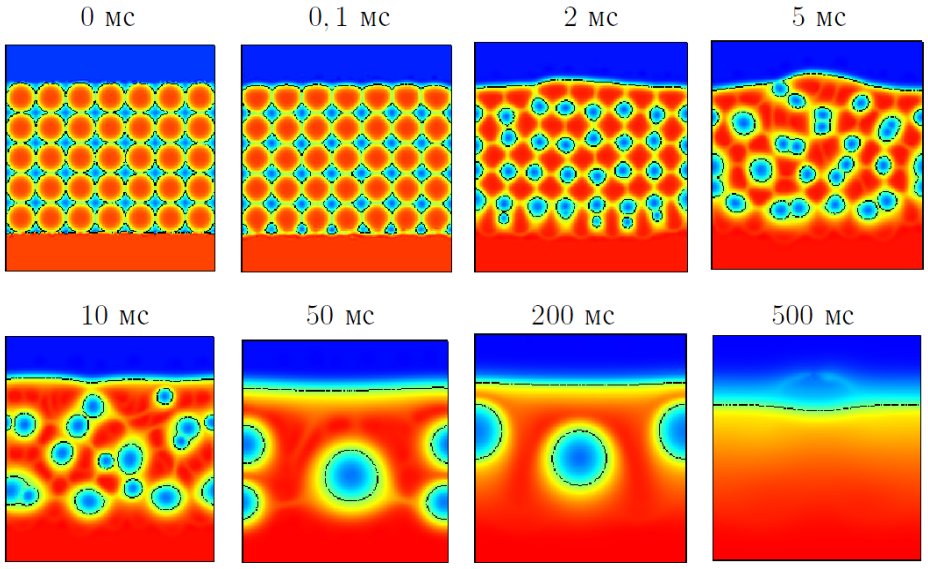


Рисунок 6. Моделирование консолидации расплавленных частиц железа с размером ⟨d⟩ = 3 мкм методом фазового поля

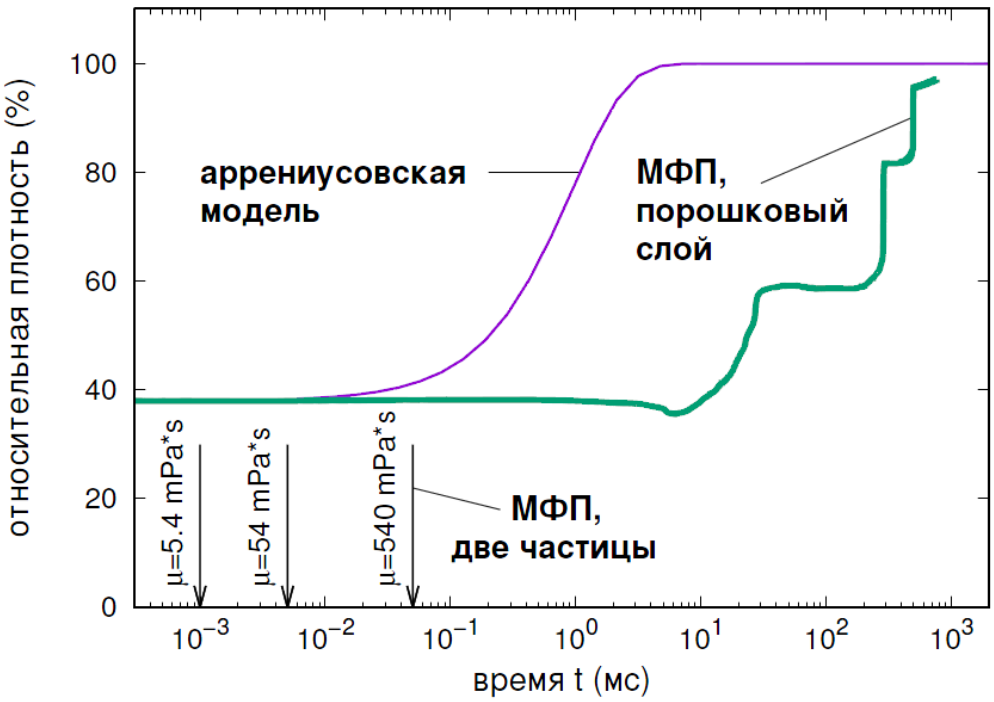


Рисунок 7. Кинетика консолидации порошка железа на диаграмме относительной плотности как функции времени. Толстая линия показывает результаты фазополевого моделирования (МФП). Тонкая линия соответствует полуэмпирической модели аррениусовского типа. Стрелками указаны характеристические времена консолидации для двух частиц, где μ – абсолютная вязкость

Заключение

Основные особенности лазерного плавления металлических порошков были изучены на основе вычислительного эксперимента с использованием развитой в работе двухуровневой модели СЛП / ВЛП процессов. Выполнена серия расчетов для порошка железа, которая показала хорошее соответствие расчетных результатов данным лабораторного эксперимента. Получено хорошее согласие для плотности поровых дефектов и удовлетворительное согласие для формы одиночной дорожки после кристаллизации.

Установлено, что консолидация частиц порошка и усадка порошкового слоя происходят по двухэтапной схеме, когда на первом этапе реализуется формирование связного пористого каркаса и консолидация газовых включения, на втором этапе происходит вывод газовых включений на поверхность. Прогнозирование второго этапа исключительно важно для контроля остаточной пористости в СЛП / ВЛП процессах.

Показано, что подбор параметров лазерного излучения для ИЛ позволяет варьировать в широком диапазоне режимы кристаллизации ванны расплава и, соответственно, формируемые механические и физико-химические свойства компактов. Достижимы режимы сплавления с малым временем кристаллизации, когда ванна расплава полностью затвердевает между импульсами. В итоге это позволяет обеспечить высокие температуры и высокие скорости кристаллизации в зоне лазерного облучения, что необходимо для формирования высоконеравновесных фазовых состояний и микроструктур.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект р_мол_а № 18-47-183002.

Список литературы

1. Шишковский И.В. Основы аддитивных технологий высокого разрешения / СПб.: Питер. 2016. – 400 с..

2. Харанжевский Е.В. Высокоскоростное лазерное спекание металлических высокодисперсных порошков и композиционных материалов с металлической матрицей / дисс. д-ра техн. наук, Ижевск, УдГУ. 2016. – 379 с.

3. King W.E., Anderson A.T., Ferencz R.M., Hodge N.E., Kamath C., Khairallah S.A., Rubenchik A.M. Laser powder bed fusion additive manufacturing of metals; physics, computational, and materials challenges / Applied Physics Reviews. 2015. – Vol. 2, No. 4. – P. 041304.

4. Knyazeva A., Kryukova O. Coating combustion synthesis controlled by moving electron beam / IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series. 2018. – Vol. 1115, P. 042028.

5. Кривилев М.Д., Харанжевский Е.В., Гордеев Г.А., Анкудинов В.Е., Управление лазерным спеканием металлических порошковых смесей / Управление большими системами. 2010. – № 31, С. 299-322.

6. Гордеев Г.А., Кривилев М.Д., Анкудинов В.Е. Компьютерное моделирование селективного лазерного плавления высокодисперсных металлических порошков / Вычислительная механика сплошных сред. 2017. – Т. 10, № 3. – С. 293-312.

7. Кривилев М.Д. Двухуровневое математическое моделирование процессов переноса и структурообразования в металлургии мезоскопических объемов / дисс. д-ра физ.-мат. наук, Ижевск, УдГУ. 2018. – 316 с.

8. Krivilyov M.D., Mesarovic S.Dj., Sekulic D.P. Phase-field model of interface migration and powder consolidation in additive manufacturing of metals / J. Mater. Sci. 2017. – Vol. 52, Iss. 8. – P. 4155-4163.

TWO-SCALE SIMULATION OF PULSE SELECTIVE LASER MELTING

M.D. Krivilyov, G.A. Gordeev, V.E. Ankudinov, E.V. Kharanzhevskiy
Udmurt State University, Universitetskaya St., 1, 426034, Izhevsk, Russia
E-mail: mk@udsu.ru

Pulse selective laser melting of metals belongs to a complex phenomenon where melting, transport processes, and solidification proceed in a local volume over a very short period of time. Practically speaking, direct in situ experimental observation is limited by measurements of the pool temperature and shape. Phase analysis of the samples provides the additional information about microstructure and pore distribution. Therefore, study of correlation between processing parameters can be efficiently done only in combination of experimental and simulation tests.

A two-scale approach to simulation of transport phenomena in pulse selective laser melting of metals has been developed. It relays on the classical idea of splitting based on the characteristic time and spatial scales of transport phenomena. Although laser resolidification or ablation of the metal surface was analyzed in literature before, the novelty of this work is due to its application to the state-of-art technical problems in additive manufacturing. The developed two-scale method allows improving the accuracy of simulations to get better agreement with experimental data.

The following algorithm is suggested. At the macroscopic level, the coupled equations for temperature, enthalpy, porosity and coordinate of the layer surface are solved. Then these data are transferred to the mesoscale level. At the mesoscale level, study of local effects is performed. It includes determination of the effective thermophysical properties, powder consolidation, and solute redistribution. Since the mesoscopic processes are local and have a small correlation length at the macroscale, they can be solved as uncoupled problems. From the mesoscale to macroscale levels the constraint equations, kinetic and thermodynamic parameters are transferred back for accurate definition of the macroscopic equations. There are the effective thermal conductivity, parameters of the consolidation model, and chemical segregation factor. Since the mesoscale problems are solved only in a limited set of volumes selected in different parts of the layer, it is required to conjugate and extrapolate the mesoscopic solutions at the macroscopic scale.

Main features of pulse selective melting have been studied in a series of computational and laboratory experiments. The comparison yields fair agreement in the porosity distribution. The differences are found in the shape and size of the solidified track. The obtained results and critically evaluated and explained.

The work was supported by Russian Science Foundation, grunt number 18-47-183002.

ВЫЧИСЛЕНИЕ ПОЛЕЙ НАПРЯЖЕНИЙ БЛИЗКО РАСПОЛОЖЕННЫХ ТРЕЩИН

Мартынюк М.В.

Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева,

Россия, г. Нижний Новгород, ул. Минина, 24, 603950

E-mail: m_mart@mail.ru

Введение

Разработан программный комплекс, позволяющий проводить расчёты для произвольно нагруженной плоскости с непересекающимися прямолинейными трещинами, а также плоскости с цепочкой прямолинейных трещин при малом расстоянии между кончиками. Отношение расстояния между кончиками трещин к длине самой короткой трещины может достигать при расчётах 10^{-45}.

Программный комплекс позволяет вычислять: напряжения на берегах трещин, значения коэффициентов интенсивности напряжений (КИН), поля напряжений, распределение скачка перемещений вдоль линий трещин и значения коэффициентов тензора модулей податливости.

Составление системы линейных уравнений

Расчёты проводятся следующим образом: вдоль линий трещин распределяются узловые точки и составляется система линейных уравнений на основании коэффициентов взаимного влияния узловых точек друг на друга. Коэффициенты вычисляются на основании формул для напряжений вызванных парой точечных сил, приложенных к берегам трещины [2].

Для системы из N произвольно ориентированных линейных трещин вдоль линий трещин распределяется некоторое количество узловых точек. Ориентация трещин задаётся единичными векторами нормалей к трещинам – $\boldsymbol{n}_i$ ($i = 1 \div N$). Известны формулы для вычисления в любой точке плоскости компонентов $\{\sigma_{xx}, \sigma_{xy}, \sigma_{yy}\}$ тензора напряжений, вызванных парой точечных нормальных и сдвиговых сил, приложенных к берегам трещины.

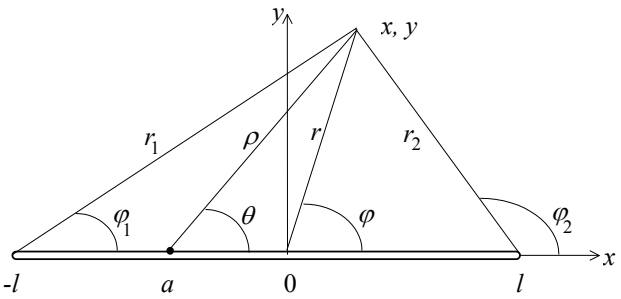


Рисунок 1. Иллюстрация к формулам (2) *и* (3)

Компоненты тензоров напряжений $\boldsymbol{\sigma}^n$ и $\boldsymbol{\sigma}^\tau$ (1) в точке с координатами (x,y) (см. рисунок 1)

$$\boldsymbol{\sigma}^n = \begin{bmatrix} \sigma^n_{xx} & \sigma^n_{xy} \\ \sigma^n_{xy} & \sigma^n_{yy} \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{\sigma}^\tau = \begin{bmatrix} \sigma^\tau_{xx} & \sigma^\tau_{xy} \\ \sigma^\tau_{xy} & \sigma^\tau_{yy} \end{bmatrix}, \tag{1}$$

вызванных в точке a парой точечных сил $t^n(a)$ действующих нормально к линии трещины и парой точечных сдвиговых сил $t^\tau(a)$ действующих вдоль линии трещины вычисляются по формулам (2) и (3) из [2] (принятые обозначения проиллюстрированы на рисунке 1):

$$\sigma^n_{xx} = t^n(a)\frac{1}{\pi\rho}\left(\frac{l^2-a^2}{r_1 r_2}\right)^{1/2}\left\{\cos\left(\theta+\left(\varphi_1+\varphi_2\right)/2\right)-\frac{y}{\rho}\left[\sin\left(2\theta+\left(\varphi_1+\varphi_2\right)/2\right)\right.\right. \tag{2}$$

$$+\frac{r\rho}{r_1 r_2}\sin\left(\theta-\varphi+3\left(\varphi_1+\varphi_2\right)/2\right)\Big]\Big\},$$

$$\sigma^n_{yy}=t^n(a)\frac{1}{\pi\rho}\left(\frac{l^2-a^2}{r_1 r_2}\right)^{1/2}\left\{\cos\left(\theta+\left(\varphi_1+\varphi_2\right)/2\right)+\frac{y}{\rho}\Big[\sin\left(2\theta+\left(\varphi_1+\varphi_2\right)/2\right)+\right.$$

$$+\frac{r\rho}{r_1 r_2}\sin\left(\theta-\varphi+3\left(\varphi_1+\varphi_2\right)/2\right)\Big]\Big\},$$

$$\sigma^n_{xy}=t^n(a)\frac{y}{\pi\rho^2}\left(\frac{l^2-a^2}{r_1 r_2}\right)^{1/2}\left\{\cos\left(2\theta+\left(\varphi_1+\varphi_2\right)/2\right)+\frac{r\rho}{r_1 r_2}\cos\left(\theta-\varphi+3\left(\varphi_1+\varphi_2\right)/2\right)\right\},$$

$$\sigma^\tau_{xx}=-t^\tau(a)\frac{1}{\pi\rho}\left(\frac{l^2-a^2}{r_1 r_2}\right)^{1/2}\left\{2\sin\left(\theta+\left(\varphi_1+\varphi_2\right)/2\right)+\frac{y}{\rho}\Big[\cos\left(2\theta+\left(\varphi_1+\varphi_2\right)/2\right)+\right.$$

$$+\frac{r\rho}{r_1 r_2}\cos\left(\theta-\varphi+3\left(\varphi_1+\varphi_2\right)/2\right)\Big]\Big\},$$

$$\sigma^\tau_{yy}=t^\tau(a)\frac{y}{\pi\rho^2}\left(\frac{l^2-a^2}{r_1 r_2}\right)^{1/2}\left\{\cos\left(2\theta+\left(\varphi_1+\varphi_2\right)/2\right)+\frac{r\rho}{r_1 r_2}\cos\left(\theta-\varphi+3\left(\varphi_1+\varphi_2\right)/2\right)\right\}, \qquad (3)$$

$$\sigma^\tau_{xy}=t^\tau(a)\frac{1}{\pi\rho}\left(\frac{l^2-a^2}{r_1 r_2}\right)^{1/2}\left\{\cos\left(\theta+\left(\varphi_1+\varphi_2\right)/2\right)-\frac{y}{\rho}\Big[\sin\left(2\theta+\left(\varphi_1+\varphi_2\right)/2\right)+\right.$$

$$+\frac{r\rho}{r_1 r_2}\sin\left(\theta-\varphi+3\left(\varphi_1+\varphi_2\right)/2\right)\Big]\Big\},$$

Для произвольной точки линейной трещины, на основании формул (2) и (3), можно вычислить коэффициенты её влияния (λ) на любую точку другой линейной трещины, как

$$\lambda^{nn}_{ij}(\chi,\xi)=\boldsymbol{n}_i\boldsymbol{\sigma}^n_{ij}(\chi,\xi)\boldsymbol{n}_i^T$$

$$\lambda^{m}_{ij}(\chi,\xi)=\boldsymbol{\tau}_i\boldsymbol{\sigma}^n_{ij}(\chi,\xi)\boldsymbol{n}_i^T$$

$$\lambda^{n\tau}_{ij}(\chi,\xi)=\boldsymbol{n}_i\boldsymbol{\sigma}^\tau_{ij}(\chi,\xi)\boldsymbol{n}_i^T$$

$$\lambda^{\tau\tau}_{ij}(\chi,\xi)=\boldsymbol{\tau}_i\boldsymbol{\sigma}^\tau_{ij}(\chi,\xi)\boldsymbol{n}_i^T$$

где $\lambda^{nn}{}_{ij}(\chi,\xi)$, $\lambda^{m}{}_{ij}(\chi,\xi)$ – удельные коэффициенты влияния точки ξ *j*-й трещины на точку χ *i*-й трещины, численно равные нормальному и сдвиговому напряжениям вызванным в точке χ *i*-й трещины, точечными единичными нормальными силами, приложенными к ξ точке *j*-й трещины;

$\lambda^{n\tau}{}_{ij}(\chi,\xi)$, $\lambda^{\tau\tau}{}_{ij}(\chi,\xi)$ – удельные коэффициенты влияния точки ξ *j*-й трещины на точку χ *i*-й трещины, численно равные нормальному и сдвиговому напряжениям вызванным в точке χ *i*-й трещины, точечными единичными сдвиговыми силами, приложенными к ξ точке *j*-й трещины;

$\boldsymbol{n}_i$ – единичный вектор нормали к *i*-й трещине;

$\boldsymbol{\tau}_i$ – единичный вектор направленный вдоль *i*-й трещины, полученный поворотом $\mathbf{n}_i$ на 90° по часовой стрелке;

$\boldsymbol{\sigma}^{n}_{ij}(\chi,\xi)$ – тензор удельных напряжений в точке χ *i*-й трещины, вызванных точечными единичными силами действующими нормально к линии трещины в точке ξ *j*-й трещины;

$\boldsymbol{\sigma}^{\tau}_{ij}(\chi,\xi)$ – тензор удельных напряжений в точке χ *i*-й трещины, вызванных точечными сдвиговыми силами действующими вдоль линии трещины в точке ξ *j*-й трещины;

Далее, для выбранных узловых точек составляется система линейных уравнений относительно нормальных и сдвиговых напряжений вида (4), отдельная пара строк которой (составленная для точки χ *i*-й трещины) содержит:

– в левой части – разность общего напряжения в узловой точке χ *i*-й трещины и напряжений, вызванных в данной точке остальными трещинами,

– в правой части значение напряжения, вызванного в узловой точке χ *i*-й трещины внешней нагрузкой

$$\begin{aligned} t_i^n(\chi) - \sum_{j=1, j\neq i}^{N} \int_{-l_j}^{+l_j} \lambda_{ij}^{nn}(\chi,\xi)\cdot t_j^n(\xi)d\xi - \sum_{j=1, j\neq i}^{N} \int_{-l_j}^{+l_j} \lambda_{ij}^{m}(\chi,\xi)\cdot t_j^n(\xi)d\xi = p_i^n(\chi),\ \forall i = 1\div N \\ t_i^\tau(\chi) - \sum_{j=1, j\neq i}^{N} \int_{-l_j}^{+l_j} \lambda_{ij}^{n\tau}(\chi,\xi)\cdot t_j^\tau(\xi)d\xi - \sum_{j=1, j\neq i}^{N} \int_{-l_j}^{+l_j} \lambda_{ij}^{\tau\tau}(\chi,\xi)\cdot t_j^\tau(\xi)d\xi = p_i^\tau(\chi),\ \forall i = 1\div N \end{aligned} \quad (4)$$

где

l_j – полуширина *j*-й трещины;

$-l_i \le \chi \le +l_i$ – параметр задающий расстояние от центра *i*-й трещины до некоторой точки *i*-й трещины;

$-l_j \le \xi \le +l_j$ – параметр задающий расстояние от центра *j*-й трещины до некоторой точки *j*-й трещины;

$t^n_i(\chi)$ и $t^\tau_i(\chi)$ – результирующие напряжения (нормальные и сдвиговые) в точке χ *i*-й трещины;

$p^n_i(\chi)$ и $p^\tau_i(\chi)$ – нормальное и сдвиговое напряжения вызванных внешней нагрузкой в точке χ *i*-й трещины.

Решением данной системы уравнений является вектор полных напряжений в каждой из узловых точек.

Использование метода Ньютона-Котеса

Для вычисления интегралов в левой части (4) был применён метод Ньютона-Котеса [4]. Интеграл от произведения $\lambda ij(\chi,\xi)$ и $tj(\xi)$ интерполировался на каждом отрезке интегрирования (между двух соседних узловых точек ξq и $\xi q+1$), по равноотстоящим промежуточным точкам, многочленом Лагранжа, для которого значение интеграла вычисляется аналитически:

$$\int_{\xi_q}^{\xi_{q+1}} \lambda_{ij}(\chi,\xi)\cdot t_j(\xi)d\xi \approx K\cdot h_q \cdot \sum_{k=0}^{K}\left[c_k \cdot \lambda_{ij}(\chi,\xi_q + k\cdot h_q)\cdot t_j(\xi_q + k\cdot h_q)\right], \quad (5)$$

где

$h_q = \left(\xi_{q+1} - \xi_q\right)/K$ - интервал между соседними промежуточными точками;

K – порядок интерполяционного многочлена;
ξ_q – положение q-й узловой точки j-й трещины относительно центра j-й трещины.

Сами коэффициенты c_k вычислялись по формуле:

$$c_k = \frac{(-1)^{K-k}}{k!(K-k)!K}\int_0^K \left[x\cdot(x-1)\cdot\ldots\cdot(x-k-1)\cdot(x-k+1)\cdot\ldots\cdot(x-K)\right]dx.$$

Интеграл от произведения $\lambda_{ij}(\chi,\xi)$ и $t_j(\xi)$ вдоль линии j-й трещины от $-l_j$ до $+l_j$ в соответствии с формулой (5) может быть представлен, как:

$$\int_{-l_j}^{+l_j}\lambda_{ij}(\chi,\xi)\cdot t_j(\xi)d\xi = \sum_{q=1}^{Q_j-1}\left[\int_{\xi_q}^{\xi_{q+1}}\lambda_{ij}(\chi,\xi)\cdot t_j(\xi)d\xi\right]\approx$$

$$\approx \sum_{q=1}^{Q_j-1}\left[\left(\xi_{q+1}-\xi_q\right)\cdot\sum_{k=0}^{K}\left[c_k\cdot\lambda_{ij}\left(\chi,\xi_q+k\cdot h_q\right)\cdot t_j\left(\xi_q+k\cdot h_q\right)\right]\right]$$

где Q_j – количество узловых точек j-й трещины.

Обозначим множество узловых и промежуточных точек j-й трещины, как $\nu_{jr} = \xi_q + kh_q$, а множество весовых коэффициентов при произведении $\lambda_{ij}(\chi,\xi)\cdot t_j(\xi)$, как w_{jr} (просуммировав весовые коэффициенты w_{jr} для повторяющихся значений r):

$$w_{jr} = \begin{cases}\left(\xi_{q+1}-\xi_q\right)\cdot c_k, & \mathrm{mod}\left(r,K\right)\neq 1\\ \left(\xi_{q+1}-\xi_q\right)\cdot c_K+\left(\xi_{q+2}-\xi_{q+1}\right)\cdot c_0, & \mathrm{mod}\left(r,K\right)=1,\ 1<q<\left(Q_j-1\right)\end{cases}$$

где $j = 1 \div N$, $q = 1 \div (Q_j - 1)$, $k = 0 \div K$, а $r = 1 + k + (q-1)\cdot K$ и запишем окончательное выражение в виде:

$$\int_{-l_j}^{+l_j}\lambda_{ij}(\chi,\xi)\cdot t_j(\xi)d\xi \approx \sum_{r=1}^{K\left(Q_j-1\right)+1} w_{jr}\cdot\lambda_{ij}\left(\chi,\nu_{jr}\right)\cdot t_j\left(\nu_{jr}\right)$$

Поскольку для вычисления отдельной строки в (4) необходимо иметь значения нормальных и сдвиговых напряжений в для узловых и промежуточных точек каждой из трещин, то есть $t^n_j(\nu_{jr})$ и $t^\tau_j(\nu_{jr})$ для $j = 1 \div N$ и $r = 1 \div [1 + (Q_j - 1)\cdot K]$, система линейных уравнений (4) будет составляться и решаться относительно этих узловых и промежуточных точек, её отдельная пара строк будет иметь вид:

$$t^n_i\left(\nu_{ir}\right) - \sum_{j=1,\,j\neq i}^{N}\left[\sum_{r=1}^{K\left(Q_j-1\right)+1} w_{jr}\cdot\lambda^{nn}_{ij}\left(\nu_{ir},\nu_{jr}\right)\cdot t^n_j\left(\nu_{jr}\right)\right] -$$

$$- \sum_{j=1,\,j\neq i}^{N}\left[\sum_{r=1}^{K\left(Q_j-1\right)+1} w_{jr}\cdot\lambda^{m}_{ij}\left(\nu_{ir},\nu_{jr}\right)\cdot t^n_j\left(\nu_{jr}\right)\right] = p^n_i\left(\nu_{ir}\right),$$

$$t^\tau_i\left(\nu_{ir}\right) - \sum_{j=1,\,j\neq i}^{N}\left[\sum_{r=1}^{K\left(Q_j-1\right)+1} w_{jr}\cdot\lambda^{n\tau}_{ij}\left(\nu_{ir},\nu_{jr}\right)\cdot t^\tau_j\left(\nu_{jr}\right)\right] -$$

$$- \sum_{j=1,\,j\neq i}^{N}\left[\sum_{r=1}^{K\left(Q_j-1\right)+1} w_{jr}\cdot\lambda^{\tau\tau}_{ij}\left(\nu_{ir},\nu_{jr}\right)\cdot t^\tau_j\left(\nu_{jr}\right)\right] = p^\tau_i\left(\nu_{ir}\right).$$

Значения коэффициентов влияния трещины на узловые точки других трещин обратно пропорциональны расстоянию до этих точек. Напряжения также обратно пропорциональны расстоянию до соседних трещин, что приводит к возникновению больших значений напряжений и КИН (см. таблицу 1). Всё это при малых расстояниях между трещинами затрудняет получение точного решения. В связи с этим при составлении системы линейных

уравнений применялся метод Ньютона-Котеса 45-го порядка, а вычисления производились с использование пакета Multiprecision Computing Toolbox [1] с разрядностью до 55 десятичных значащих цифр.

Проверка

Для нагруженной плоскости с цепочками из двух коллинеарных трещин равной длины (см. рисунок 2) существуют точные аналитические решения для КИН (K_I), которые приводятся в справочнике [3]. Эти решения использовались для оценки точности программного комплекса. Для двух трещин (см. рисунок 2) при длинах трещин 2a = 1 и расстоянии между кончиками трещин $2k = 10^{-45}$ относительная ошибка программного комплекса, не превышала: $K_{IA} < 0.003\%$ и $K_{IB} < 0.019\%$.

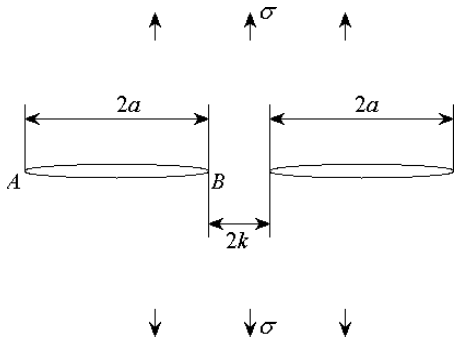


Рисунок 2. Бесконечная равномерно нагруженная плоскость с двумя коллинеарными трещинами

На рисунке 3 сравниваются раскрытие одной трещины (жирная чёрная линия) и цепочки из нескольких трещин имеющей ту же длину (далее, эквивалентной цепочки трещин) при вертикально приложенной растягивающей нагрузке. Из рисунка видно, что при уменьшении расстояния между кончиками трещин $2k$, раскрытие цепочки трещин асимптотически приближается к раскрытию одной трещины, а относительная разность $\delta_{\langle b\rangle}$ среднего раскрытия $\langle b\rangle$ цепочки трещин и одной трещины приблизительно пропорциональна $[\lg(2k)]^{-1}$. Аналогичная зависимость наблюдается для коэффициентов интенсивностей напряжений на концах цепочки коллинеарных трещин K_{IA} и одной прямолинейной трещины (см. Таблицу 1).

Таблица 1. Сравнение прямолинейной трещины с эквивалентной цепочкой коллинеарных трещин (см. рисунок 2) при вертикально приложенной растягивающей нагрузке ($\sigma = 1$)

	Две трещины: $2a + k = 1$		
$2k$	**K_{IA}**	**K_{IB}**	**$\sigma_{\sqrt{\pi}}$, %**
$\mathbf{10^{-5}}$	1.64205	5.8317	-7.36
$\mathbf{10^{-10}}$	1.70185	$9.9845\cdot10^{3}$	-3.98
$\mathbf{10^{-20}}$	1.73563	$5.2079\cdot10^{8}$	-2.08
$\mathbf{10^{-30}}$	1.74754	$3.5227\cdot10^{13}$	-1.41
$\mathbf{10^{-40}}$	1.75363	$2.6614\cdot10^{18}$	-1.06
$\mathbf{10^{-50}}$	1.75733	$2.1386\cdot10^{23}$	-0.85
$\mathbf{10^{-100}}$	1.76483	$1.0789\cdot10^{48}$	-0.43
$\mathbf{10^{-150}}$	1.76735	$7.2140\cdot10^{72}$	-0.29
$\mathbf{10^{-200}}$	1.76862	$5.4186\cdot10^{97}$	-0.22
$\mathbf{10^{-250}}$	1.76939	$4.3388\cdot10^{122}$	-0.17

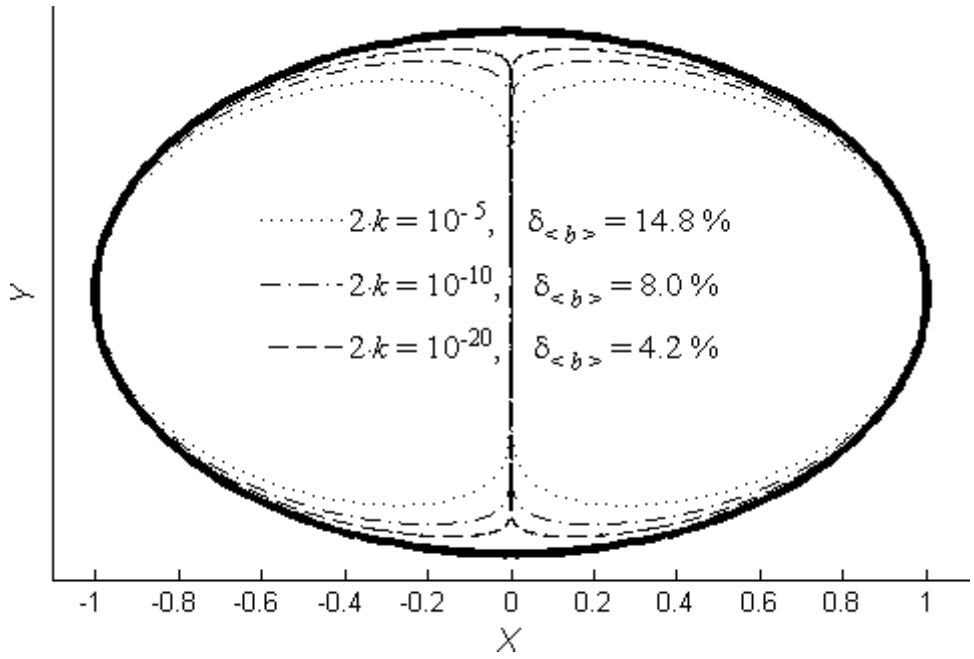


Рисунок 3. Раскрытие цепочек из нескольких коллинеарных трещин при вертикальной растягивающей нагрузке

Выводы

На основании сказанного выше, можно сделать вывод, что одна прямолинейная трещина, при оценке её вклада в эффективные свойства и при вычислении КИН, с некоторой погрешностью может быть заменена эквивалентной цепочкой коллинеарных трещин. Эквивалентная цепочка трещин делает меньший вклад в эффективные свойства и имеет меньшие абсолютные значения КИН на концах цепочки чем прямолинейная трещина, но это отличие уменьшается обратно пропорционально логарифму расстояния между кончиками трещин в цепочке.

Благодарности

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева (НГТУ), при финансовой поддержке государства в лице министерства образования и науки Российской Федерации в рамках договора №14.Z50.31.0036. Направление научного исследования: «Создание научной лаборатории композиционных и керамических материалов с применением к Арктическим транспортным средствам (LCCM)».

Список литературы

1. ADVANPIX Multiprecision Computing Toolbox for MATLAB : official site. – Yokohama. – URL: https://www.advanpix.com (access date: 14.01.19).

2. Kachanov M.L. Elastic Solids with Many Cracks and Related Problems / Advances in Applied Mechanics – Massachusetts: Academic Press, 1994. – P. 256-426.

3. Murakami Y. Stress Intensity Factors Handbook / In 2 Volumes. Y. Murakami, (Editor in Chief), M.T. Hasebe, Y. Itoh, K. Kishimoto, H. Miyata, N. Miyazaki, H. Terada, K. Tohgo and R. Yuuki,(Co-editor), Oxford etc.: Pergamon press, 1987.

4. Whittaker E. T., Robinson G. The Newton-Cotes Formulae of Integration. § 76 The Calculus of Observations: A Treatise on Numerical Mathematics / 4th ed. New York: Dover, 1967. – P. 152-156.

CALCULATION OF STRESS FIELDS CLOSELY LOCATED CRACKS

M.V. Martynyuk
Nizhny Novgorod State Technical University n.a. R.E. Alekseev
Minin St., 24, 603950, Nizhny Novgorod, Russia
E-mail: m_mart@mail.ru

A set of software tools has been developed in the language of Matlab, for calculation of the stress field for a system of arbitrarily oriented non-intersecting rectilinear cracks in a loaded infinite elastic plane. The calculation is carried out numerically and reduces to solving a system of singular integral equations. The main feature of the complex is the possibility of calculation for closely spaced cracks. The ratio of the distance between the tips of the cracks to the length of the shortest crack can reach 10^{-45} at calculations.

The software package allows to calculate: stresses on the shores of the cracks, the values of the stress intensity factors (SIF), the stress field, the distribution of the discontinuity along the lines of cracks, and the values of the tensors of the compliance modulus.

Along the fissure lines, node points are distributed and a system of linear equations (SLE) is formed on the base of the coefficients of mutual influence of node points on each other. The coefficients are calculated on the base of formulas for the stresses caused by a pair of point forces applied to the shores of the crack.

The values of the coefficients of the influence of a crack on the nodal points of other cracks are inversely proportional to the distance to these points. The stresses are also inversely proportional to the distance to neighboring cracks, which leads to the appearance of large stresses and SIF. All this at small distances between cracks makes it difficult to obtain an exact solution of a system of linear equations. In connection with this, in the formation of a system of linear equations, the Newton-Cotes method of the 45th order, and calculations were made using the Multiprecision Computing Toolbox package with a bit capacity of up to 55 decimal digits.

For a loaded plane with chains of two collinear cracks of equal length, there are exact analytical solutions for SIFs. These solutions were used to assess the accuracy of the software package. For two cracks with crack lengths $2a = 1$ and the distance between the tips of cracks $2k = 10^{-45}$, the relative error of the software complex did not exceed: $SIF_{IA} < 0.003\%$ and $SIF_{IB} < 0.019\%$. As the distance between the ends of cracks $2k$ decreases, the opening of the chain of cracks asymptotically approaches the opening of one crack, and the relative difference of the average displacement discontinuity of the chain of cracks and one crack is approximately proportional to $[\lg(2k)]^{-1}$. A similar dependence is observed for the stress intensity factor at the ends of the chain of collinear cracks (SIF) and one rectilinear crack.

This work was supported by the Russian Government Grant No14.Z50.31.0036 "Measures to Attract Leading Scientists to Russian Educational Institutions" awarded to Nizhny Novgorod State Technical University n.a. R.E. Alekseev by Department of Education and Science of the Russian Federation. Theme: "Creation of a scientific laboratory of composite and ceramic materials with application to Arctic vehicles (LCCM)".

РАСЧЁТ ЭФФЕКТИВНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ИЗДЕЛИЙ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ С ПРИМЕНЕНИЕМ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ СТАТЬЯ-РАССУЖДЕНИЕ

Привалов А.Н. [a], Богатырева Ю.И.

Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого,
Россия, г.Тула, пр. Ленина, 125, 300026
[a]E-mail: iprivalov.61@mail.ru

Введение

В ТГПУ им. Л.Н. Толстого выполняется прикладная научно-исследовательская работа по теме «Разработка прототипа инженерного программного обеспечения (ИПО) на основе высокопроизводительных вычислений для оценки механических характеристик изделия, изготовленного с использованием аддитивных технологий (методом селективного лазерного спекания) с учетом стратегии изготовления изделия», в рамках которой исследуются возможности и технологии применения параллельных вычислений. Показано, что учет особенностей моделирования процессов селективного лазерного спекания может быть осуществлён с применением сетей Петри-Маркова, в которых сочетаются аспекты, релевантные случайным процессам в модулях параллельной вычислительной системы, и аспекты, описывающие логику их взаимодействия. Актуальность темы определяется тем фактором, что в условиях перехода к цифровой экономике процессы анализа прочностных характеристик материалов можно осуществлять на основе компьютерного моделирования.

Основная часть

Особую роль в последнее время играют материалы, получаемые при использовании аддитивных технологий. В свою очередь, это порождает проблему разработки математического, алгоритмического и программного аппарата моделирования характеристик изделий, изготовленных из таких материалов. Указанная проблема во всех индустриально развитых странах мира решается путем замены реального объекта его математической моделью, воспроизводящей основные функции оригинала и подобной ему в заданных релевантных аспектах. Одним из ключевых препятствий, сдерживающих массовое внедрение аддитивных технологий в машиностроительное производство, является отсутствие однозначного прогнозирования прочностных характеристик изготавливаемых металлических деталей на этапе их проектирования, что ограничивает сферу промышленного применения аддитивных технологий по сути лишь изготовлением макетов.

Предпосылки научной проблемы заключаются в том, что свойства материала изделия, изготовленного с помощью метода селективного лазерного спекания, могут существенно отличаться от исходных свойств этого материала. В наибольшей степени это относится к изделиям из металлов. При их изготовлении с помощью аддитивных технологий в качестве сырья используется металлический порошок, частицы которого спекаются в процессе изготовления.

Кроме того, при изготовлении таких изделий их части подвергаются локальным воздействиям высоких температур, что приводит к значительным температурным деформациям. В результате материал изделия может оказаться пористым, т.е. структурно-неоднородным, и при этом в нем возникают остаточные микронапряжения, которые могут быть конечными (не малыми). Как следствие, большие локальные температурные деформации могут привести к потере устойчивости изделия в процессе его изготовления. Поэтому прочностные свойства изделий, изготовленных с помощью метода селективного лазерного спекания, существенно зависят от особенностей технологии их изготовления. Оценка прочностных свойств таких изделий, в особенности металлических изделий, представляет собой нетривиальную научную задачу. При том, что существующие модели не

в полной мере учитывают явления и процессы, происходящие в гетерогенных структурах изделий, и нуждаются в уточнении и совершенствовании.

В настоящее время не существует отечественных программных продуктов, позволяющих моделировать тепловое и напряженно-деформированное состояние изделия в процессе его создания методом селективного лазерного спекания с учетом стратегии изготовления изделия. Указанные обстоятельства определяют актуальность выполнения ПНИЭР.

Целью и научно-технической проблемой проекта является разработка научно-технических решений в области создания программного обеспечения для предсказательного многомасштабного физического моделирования теплового и напряженно-деформированного состояния изделия в процессе его создания методом селективного лазерного спекания с учетом стратегии изготовления изделия с использованием метода конечных элементов, метода спектральных элементов.

Таким образом, исходя из сложившейся ситуации на рынке ИПО, характеризующейся преобладанием импортных программных продуктов, разработка отечественного инженерного программного обеспечения является весьма актуальной задачей, в том числе, инженерного программного обеспечения для анализа прочности изделий, получаемых с использованием аддитивных технологий

Основной задачей программного обеспечения является расчёт прочностных характеристик изготавливаемых металлических деталей на этапе их проектирования. В основе расчёта лежат современные математические методы расчета, использующие параллельные вычисления для существенного увеличения скорости и точности расчета, что будет являться уникальным конкурентным преимуществом по сравнению с конкурентными аналогами. Инструментом распараллеливания решения задач методом конечных элементов является технология MPI. В случае технологии MPI необходимо разрабатывать алгоритм распараллеливания вычислительных процессов для программирования метода конечных элементов таким образом, чтобы представить решение задачи в виде совместного действия нескольких независимых процессов с независимыми данными.

Необходимость оптимального разбиения алгоритма на параллельно выполняемые фрагменты делает актуальной задачу оценки вычислительной сложности фрагментов алгоритмов, реализуемых в компонентах вычислительных систем, а также вычислительной сложности алгоритма, реализуемого в параллельной вычислительной системе, в целом.

В настоящее время параллелизм является доминирующей парадигмой в организации вычислительного процесса. Если в области проектирования специализированных ЭВМ идеи параллелизма используются на практике более пятидесяти лет (CDC-6600 1964 года [1] включает десять независимых функциональных устройств, работающих одновременно), то в современных условиях параллельные вычисления практикуются, кроме собственно многопроцессорных ЭВМ, в многоядерных процессорах и сетях ЭВМ [2]. При организации вычислительного процесса в подобных структурах разработчики сталкиваются с проблемой неоптимального использования аппаратных средств параллельных структур, что связано с низким коэффициентом загрузки процессоров, конфликтами при доступе к совместно используемым ресурсам и т.п. [3]. Решение проблемы разрешения конфликтов и повышения коэффициента загрузки приводит к необходимости такой организации программной обработки данных, которая сокращала бы вычислительную сложность до некоторого минимального уровня. Интуитивно можно предположить, что время решения задачи в параллельной вычислительной системе может изменяться от величины, получающейся в случае, когда все операторы алгоритма последовательно интерпретируются одним процессором (верхний предел), до величины, получающейся, когда все компоненты начинают и заканчивают интерпретацию своих частей алгоритма одновременно, и при решении задачи исключены случаи их простоя (нижний предел). Необходимость оптимального разбиения алгоритма на параллельно выполняемые фрагменты делает актуальной задачу оценки вычислительной сложности фрагментов алгоритмов, реализуемых

в компонентах вычислительных систем, а также вычислительной сложности алгоритма, реализуемого в параллельной вычислительной системе, в целом.

В [1] на основе исследования процесса выполнения команды процессором фон-Неймановской ЭВМ было показано, что для внешнего наблюдателя количество машинных тактов, затрачиваемое процессором на ее выполнение, является случайной величиной, распределение которой зависит как от особенностей аппаратных средств, так и от распределения обрабатываемых командой данных. Кроме того, в [2] был исследован характер переходов между операторами алгоритма для внешнего наблюдателя и показана его квазистохастичность. Поэтому при оценке временной сложности требуется привлечение теории случайных, в частности Марковских (а в более общем случае, полумаровских) процессов, крупный вклад в развитие которых внесли Ю.К. Беляев, Б.В. Гнеденко, Д.Р. Кокс, Д. Ллойд, В.Л. Смит, В. Харрис, А.М. Широков. Результаты их научных трудов легли в основу математического аппарата оценки временной сложности алгоритмов, однако особенности параллельной обработки выдвигают задачу дальнейшего развития существующей теории.

Методология моделирования собственно параллельных процессов заложена в трудах К. Петри, В. Рейзига, Дж. Питерсона, В.Е. Котова [4-8], где для исследования параллелизма применен аппарат сетей Петри. Ситуационный (причинно-следственный) характер связей между позициями и переходами сетей Петри [4] является предпосылкой для моделирования, во-первых, структур алгоритмов, а во-вторых - логики событий, происходящих в параллельных системах. Однако, являясь асинхронными по определению, модели указанного типа позволяют лишь ответить на вопросы о принципиальной достижимости состояний системы, соответствующих заданным требованиям, но спрогнозировать моменты наступления тех или иных состояний в физическом времени с помощью сетей Петри, в их классической интерпретации, невозможно.

Помимо РСП широкое распространение получило другое расширение классической теории сетей Петри – временные сети Петри. В указанную модель введены счетчики для контроля локального или глобального времени. В ней также определены временные характеристики пребывания фишек в позициях, генерации/умирания фишек по истечении заданного времени и т.п. Наиболее популярными стали модели, в которых временные характеристики связаны с переходами, а именно дискретно-временная модель Рамхандани-Штарке и непрерывно-временная модель Мерлина. Попытки приспособить сети Петри для определения временных интервалов (time-extended Petri nets) предпринимались и рядом других авторов [9]. Однако даже в модифицированном варианте временные сети Петри не позволяют учитывать все многообразие взаимодействий в системах, что связано, в частности с ограниченностью логических условий продолжения процессов элементарной конъюнкцией.

В целом методология формирования моделей, ориентированных на оценку вычислительной сложности алгоритмов, реализуемых в параллельных вычислительных системах, должна учитывать следующие их особенности: определенную и специфичную для каждой параллельной системы стратегию использования ресурсов для обработки информации; динамический характер высвобождения/задействования вычислительных ресурсов в процессе решения конкретных задач; необходимость обмена данными (промежуточными результатами) между вычислительными модулями и связанная с этим явлением необходимостью синхронизации функционирования процессоров; наличие эффекта "соревнования" между параллельно функционирующими компонентами.

Наиболее полно учет названных особенностей может быть осуществлен в моделях, называемых сетями Петри-Маркова (СПМ), в которых сочетаются аспекты, релевантные случайным процессам в модулях параллельной вычислительной системы, и аспекты, описывающие логику их взаимодействия. В моделях исследуемого типа на структуры, учитывающие параллелизм, накладываются стохастико-временные параметры полумарковских процессов в отдельных вычислительных модулях и логические условия взаимодействия.

Самый общий подход к заданию СПМ основан на построении системы множеств, их описывающих. Сетью Петри-Маркова называется структурно-параметрическая модель, заданная множеством:

$$\Psi = \{\Pi, M\}, \tag{1}$$

где $\Pi = \{A, Z, \tilde{\boldsymbol{R}}, \hat{\boldsymbol{R}}\}$ – множество, описывающее структуру двудольного ориентированного графа, представляющего собой сеть Петри; $A = \{a_{1(a)}, ..., a_{j(a)}, ..., a_{J(a)}\}$ – конечное множество позиций; $Z = \{z_{1(z)}, ..., z_{j(z)}, ..., z_{J(z)}\}$ – конечное множество переходов; $J(a)$ - мощность множества позиций; $J(z)$ – мощность множества переходов; $\tilde{\boldsymbol{R}} = \left(\tilde{r}_{j(a)j(z)}\right)$ – матрица смежности размером $J(a) \times J(z)$, отображающая множество позиций в множество переходов; $\hat{\boldsymbol{R}} = \left(\hat{r}_{j(z)j(a)}\right)$ – матрица смежности размером $J(z) \times J(a)$, отображающая множество переходов в множество позиций; $M = \{\boldsymbol{q}, \boldsymbol{h}(t), \boldsymbol{\Lambda}\}$ – параметры, накладываемые на структуру Π, и определяющие временные, вероятностные и логические характеристики СПМ; $\boldsymbol{q} = (q_{1(z)}, ..., q_{j(z)}, ..., q_{J(z)})$ – вектор, определяющий вероятность начала процесса в одном из переходов множества Z; $\boldsymbol{h}(t) – [h_{j(a)j(z)}(t)]$ – полумарковская матрица размером $J(a) \times J(z)$; t – время; $\boldsymbol{\Lambda} = [\lambda_{i(z)i(a)}]$ – матрица логических условий размером $J(a) \times J(z)$; $I_A(Z) = \{I_A(z_{1(z)}), ..., I_A(z_{j(z)}), ..., I_A(z_{J(z)})\}$ и $O_A(Z) = \{O_A(z_{1(z)}), ..., O_A(z_{j(z)}), ..., O_A(z_{J(z)})\}$ – соответственно входная и выходная функции переходов;

$$\tilde{r}_{j(a)\,j(z)} = \begin{cases} 1, \text{ если } a_{j(a)} \in I_A\left(z_{j(z)}\right); \\ 0, \text{ если } a_{j(a)} \notin I_A\left(z_{j(z)}\right); \end{cases}$$

$$\hat{r}_{j(z)\,j(a)} = \begin{cases} 1, \text{ если } a_{j(a)} \in O_A\left(z_{j(z)}\right); \\ 0, \text{ если } a_{j(a)} \notin O_A\left(z_{j(z)}\right); \end{cases}$$

$$\boldsymbol{h}(t) = \boldsymbol{p} \otimes \boldsymbol{f}(t) = [p_{j(a)j(z)}, f_{j(a)j(z)}(t)] = [h_{j(a)j(z)}(t)]; \tag{2}$$

$$\lambda_{j(z)j(a)} = \begin{cases} \lambda[I_A(z_{j(z)})], \text{ если } a_{j(a)} \in O_A(z_{j(z)}); \\ 0, \text{ если } a_{j(a)} \notin O_A(z_{j(z)}); \end{cases} \tag{3}$$

$\boldsymbol{p} = [p_{j(a)j(z)}]$ – матрица вероятностей переключений полумарковского процесса из позиции $a_{j(a)}$ в смежный переход $z_{j(z)}$; $\boldsymbol{f}(t) = [f_{j(a)j(z)}(t)]$ – матрица плотностей распределения времени пребывания полумарковского процесса в позиции $a_{j(a)}$ с последующим переключением в переход $z_{j(z)}$; $\otimes$ - знак прямого произведения матриц.

На вероятности и плотности распределения накладываются ограничения:

$$\sum_{j(z)=1(z)}^{J(z)} q_{j(z)} = 1;$$

$$\sum_{j(z)=1(z)}^{J(z)} p_{j(a)\,j(z)} = 1;$$

$$\int_0^{\infty} f_{j(a),\,j(z)}(t)dt = 1.$$

При численном анализе процессов параллельных вычислительных системах могут быть заданы: $\boldsymbol{p} = (p_{j(a)j(z)})$ – матрица вероятностей; $\boldsymbol{T} = (T_{j(a)j(z)})$ – матрица математических ожиданий, определяемая в виде

$$\boldsymbol{T} = \int_0^{\infty} t\boldsymbol{f}(t)dt\,, \tag{4}$$

$\boldsymbol{D} = (D_{j(a)j(z)})$ – матрица дисперсий, определяемая в виде

$$\boldsymbol{D} = \int_0^{\infty} t^2 \boldsymbol{f}(t)dt - \boldsymbol{T} \otimes \boldsymbol{T}\,. \tag{5}$$

Таким образом, разработан эффективный и достаточно несложный математический аппарат для моделирования параллельных вычислительных систем, ориентированный на оценку временной сложности алгоритмов, реализуемых в них. В моделях наряду со структурными и временными аспектами их функционирования отражается логика взаимодействия компонентов параллельных вычислительных систем.

Работа выполнена в рамках Федеральной программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014-2020 годы» в ТГПУ им. Л.Н. (проект №14.577.21.0271, уникальный идентификатор проекта RFMEFI57717X0271).

Список литературы

1. Bell G.C. Multis: A new class of multiprocessor computers // Science. – 1985. – Vol. 228, Iss. 4698. – P. 462–467.

2. Culler D., Singh J., Gupta A. Parallel computer architecture: a hardware/software approach / San Francisco: Morgan Kaufmann Publishers Inc., 1999.

3. Lewis T.G. Foundations of Parallel Programming: a Machine-Independent Approach / Los Alamitos, CA : IEEE Computer Society Press. – 1997.

4. Petri C.A. Nets, time and space // Theoretical Computer Science. – 1996. – Vol. 153, Iss. 1-2. – P. 3–48.

5. Reisig W. Elements Of Distributed Algorithms: Modeling and Analysis with Petri Nets / Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 1998.

6. Reisig W. Correctness proofs of distributed algorithms // Selected Papers of International Workshop “Theory and Practice in Distributed Systems”. – Germany. Dagstuhl Castle, 1994. – P. 164–177.

7. Peterson J.L. Petri Net Theory and the Modeling of Systems / Prentice Hall. – 1981.

8. Котов В.Е. Сети Петри / М.: Наука. – 1984.

9. Привалов А.Н. Моделирование информационных процессов в вычислительной подсистеме тренажерных систем специального назначения / Тула : Тульский государственный университет. – 2009, 215 с.

CALCULATION OF THE EFFECTIVE CHARACTERISTICS OF PRODUCTS OF ADDITIVE TECHNOLOGIES USING PARALLEL COMPUTATIONS

A.N. Privalov [a], Ju.I. Bogatireva
Tula State Lev Tolstoy Pedagogical University, Prospect Lenina, 125, 300026 Tula, Russia
[a] E-mail: iprivalov.61@mail.ru

In Tula State Lev Tolstoy Pedagogical University carried out applied research work on the topic "Development of a software engineering prototype on the basis of high-performance computing to evaluate the mechanical characteristics of a product manufactured using additive technologies (selective laser sintering method) taking into account the product manufacturing strategy", within which a special software.

The main problem of the software is to calculate the strength characteristics of the manufactured metal parts at the stage of their design. The calculation is based on modern mathematical calculation methods that use parallel calculations to significantly increase the speed and accuracy of the calculation, which will be a unique competitive advantage compared to competitive counterparts. The parallelization method for solving problems using the finite element method is MPI technology. In the case of MPI technology, it is necessary to develop an algorithm for parallelizing computational processes for programming the finite element method in such a way as to represent the solution of the problem in the form of a joint action of several independent processes with independent data.

When organizing the computational process in such structures, developers are faced with the problem of non-optimal use of parallel hardware, which is associated with a low CPU utilization rate, conflicts in accessing shared resources, and so on. Solving the problem of resolving conflicts and increasing the load factor leads to the need for such organization of software data processing, which would reduce the computational complexity to some minimum level. It can be intuitively assumed that the time of solving a problem in a parallel computing system can vary from the value obtained in the case when all the operators of the algorithm are sequentially interpreted by one processor (the upper limit) to the value obtained if all components begin and finish interpreting their parts of the algorithm simultaneously , and when solving the problem, cases of their idle time (the lower limit) are excluded. The necessity of the optimal partitioning of the algorithm into concurrently executing fragments makes the problem of estimating the computational complexity of fragments of algorithms realized in computational system components and the computational complexity of the algorithm realized in a parallel computing system as a whole actual.

The methodology of modeling the parallel processes proper is laid down in the works of K. Petri, V. Reisig, J. Peterson, V.E. Kotova, where the apparatus of Petri nets was used to study parallelism. The situational (causal) nature of the links between positions and transitions of Petri nets is a prerequisite for modeling, firstly, the structures of algorithms, and secondly - the logics of events occurring in parallel systems. However, being asynchronous by definition, the models of this type allow only answering questions about the principle of attainable states of the system corresponding to the specified requirements, but it is impossible to predict the moments of the onset of certain states in physical time with the help of Petri nets in their classical interpretation.

However, even in a modified version, the temporary Petri nets do not allow to take into account the whole variety of interactions in systems, which is connected, in particular, with the limited logical conditions for continuation of processes by an elementary conjuncture.

The most complete consideration of the above features can be realized in models, hereinafter referred to as Petri-Markov networks (SPM), in which the aspects relevant to random processes in modules of a parallel computing system are combined and aspects describing the logic of their interaction. In the models of the type under investigation, structures that take into account parallelism are superimposed on the stochastic-temporal parameters of the semi-Markov processes in separate computational modules and the logical conditions of interaction.

The work was performed by the L.N. Tolstoy Tula State Pedagogical University with financial support from the Ministry of Education and Science of the Russian Federation (Project 14.577.21.0271, project ID he unique identifier of the project RFMEF I57717X0271).

ВЛИЯНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ НА ПРОЦЕССЫ СТРУКТУРИРОВАНИЯ В АДГЕЗИОННОМ СЛОЕ ПРИ СОЗДАНИИ ЛАМИНИРОВАННЫХ КОМПОЗИТОВ

Сайфуллин Э.Р. [1,a], Князева А.Г. [2]

[1] *Национальный исследовательский Томский государственный университет, Россия, г.Томск, пр. Ленина, 36, 634050*

[2] *Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Россия, г. Томск, просп. Академический, 2/4, 634055*

[a] E-mail: elmir.saifullin@mail.ru

Введение

Процесс создания трехмерных объектов в технологии laminated object manufacturing (LOM) заключается в последовательном, послойном соединении листовых материалов. Технологический процесс включает в себя несколько стадий: предварительное создание в CAD-системе модели определенной геометрической формы; придание листовому материалу заданной формы при помощи лазера; соединение листовых материалов путем применения адгезионного слоя и прокатывании нагретого ролла по поверхности верхнего слоя материала. Благодаря данному технологическому процессу технологию LOM относят как к аддитивным, так и к субтрактивным способам создания материалов. Однако к последнему относится только придание лазером нужной формы листовому материалу.

Первоначально метод LOM применялся для производства изделий из бумаги и дерева. Преимущества технологии, такие как высокая скорость производства, низкий температурный порог, незначительное деформирование и низкие остаточные напряжения в готовом изделии, повлияли на быстрое развитие LOM. Например, в работах [1] исследуется возможность соединения металлических фольг. Результаты исследования возможности соединения керамических материалов представлены в [2]. Возможность использования в технологии низких температур позволяет применять метод для соединения полимерных материалов, также метод LOM применяется в сфере строительства и микроэлектроники.

При этом расширяется не только разновидность применяемых материалов, но и совершенствуется сам технологический процесс. В работе [3], используя метод LOM, комбинируют соединение целлюлозного волокна с полимерными добавками для получения прекерамической бумаги, а в методе, названном The Composite Metal Foil Manufacturing (CMFM) металлические фольги совместно соединяют с другими финальными соединительными материалами [4].

Несмотря на существование множества исследований, малоизученными остаются процессы, происходящие непосредственно в адгезионном слое. Данные физические процессы приводят к протеканию химических реакций, формированию новых структур, выделению или поглощению тепла в слое клея. В работе [5] предложена и подробно изучена теплофизическая модель с химически активным адгезионным слоем.

В данной статье исследуется влияние технологических параметров (температура и скорость движения ролла, давление прижатия) на эволюцию степени структурных превращений в слое клея. За основу взята модель [5], однако вместо химических реакций анализируются структурные превращения.

Постановка задачи

Исследуется модель соединения двух инертных слоев материала с использованием адгезионного слоя. Как показано на рисунке 1, по поверхности инертного слоя A движется нагретый ролл радиуса (R_0) с заданной линейной скоростью.

При движении ролла в области контакта ролла и инертного слоя A возникает максимальное напряжение, определяющееся по формуле [6]:

$$\sigma_{\max} = \sqrt{\frac{P}{2R_0(\alpha_1 + \alpha_2)}}. \quad (1)$$

Полуширину площадки контакта определяют из выражения (2):

$$s = 0{,}789\sqrt{2PR_0(\alpha_1 + \alpha_2)}. \quad (2)$$

Здесь $\alpha_1 = (1 - \nu_k^2)/E_k$, P – давление прижатия, E_k, ν_k^2 – модули упругости и коэффициенты Пуассона контактирующих материалов.

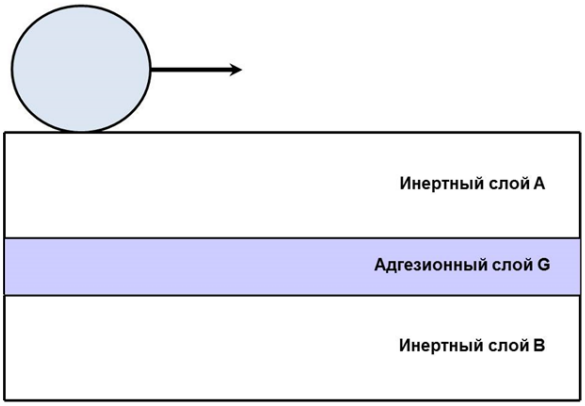


Рисунок 1. Иллюстрация к постановке задачи

Поле температуры находится из решения сопряженной задачи теплопроводности, включающей уравнения

$$c_k \rho_k \frac{\partial T_k}{\partial t} = \lambda_k \left[\frac{\partial^2 T_k}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_k}{\partial y^2} \right]. \quad (3)$$

для инертных слоев $k = A,\ B$,

$$c_G \rho_G \frac{\partial T_G}{\partial t} = \lambda_2 \frac{\partial}{\partial x}\left(\left(1 + a\left\{ \frac{\lambda_1}{\lambda_2} - 1 \right\} \right) \frac{\partial T_G}{\partial x} \right) + \lambda_2 \frac{\partial}{\partial y}\left(\left(1 + a\left\{ \frac{\lambda_1}{\lambda_2} - 1 \right\} \right) \frac{\partial T_G}{\partial y} \right) + W. \quad (4)$$

для адгезионного слоя G. Здесь c_k, ρ_k λ_k – теплоемкость, плотность и коэффициенты теплопроводности соответствующих слоев; x, y – пространственные координаты; t – время; W – объемный источник тепла вследствие химических реакций, Y – степень превращения в реакции; a – степень структурных превращений.

Структурные превращения в адгезионном слое описываются уравнением:

$$\frac{da}{dt} = Y\left[k_2(1 - a) - k_1 a \right]. \quad (5)$$

где $\varphi(Y)$ – кинетическая функция, отражающая механизм химической реакции на микроуровне, E – энергия активации, R – универсальная газовая постоянная, k_1, k_2 – константы скорости обратной и прямой реакции структуризации. На границах раздела зададим условия идеального контакта (на границах раздела равны температуры слоев и их потоки тепла):

$$y = H_B: \qquad \lambda_B \frac{\partial T_B}{\partial y} = (\lambda_2(1 - a) + \lambda_1 a)\frac{\partial T_G}{\partial y}, \qquad T_B = T_G, \quad (6)$$

$y = H_B + H_G$: $\left(\lambda_2(1-a)+\lambda_1 a\right)\dfrac{\partial T_G}{\partial y} = \lambda_A \dfrac{\partial T_A}{\partial y}$, $T_G = T_A$. (7)

На нижней и боковых поверхностях имеем условие адиабатичности. При $y = H_B + H_G + H_A$ в зоне соприкосновения нагретого ролла с поверхностью инертного слоя А имеем:

$$T_A = T_S, \quad \text{если} \quad vt + x_0 - s(P) \le x \le vt + x_0 + s(P), \tag{8}$$

вне зоны соприкосновения ролла

$$\partial T_A / \partial y = 0, \quad \text{если} \quad x \le vt + x_0 - s(P) \text{ и } x \ge vt + x_0 + s(P).$$

Система (1)-(8) замыкается начальными условиями $t = 0$: $T = T_0$, $a = 0$.

Требуется рассчитать поле температуры и степень структурных превращений в слое G при варьировании технологических параметров установки.

Безразмерные переменные

Для качественного исследования переменных необходимо перейти к безразмерным переменным:

$$\theta_k = \frac{T_k - T_S}{RT_S^2} E; \ \xi = \frac{x}{H_G}; \ \eta = \frac{y}{H_G},$$

где T_S – температура ролла, E – энергия активации прямой реакции структуризации: H_G – высота адгезионного слоя,

$$t_a = (z_0)^{-1} \exp\left(\frac{E}{RT_s}\right) -$$

время, в течение которого полностью завершается прямая реакция в адиабатических условиях.

Тогда система (1)-(8) примет вид

$$K_{Ck}\frac{\partial \theta_k}{\partial \tau} = \frac{K_{\lambda k}}{\delta}\left[\frac{\partial^2 \theta_k}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 \theta_k}{\partial \eta^2}\right], \ k = A, B, \tag{9}$$

$$\frac{\partial \theta_G}{\partial \tau} = \frac{1}{\delta}\left[\frac{\partial}{\partial \xi}\left[\left((1-a)+\kappa a\right)\frac{\partial \theta_G}{\partial \xi}\right] + \frac{\partial}{\partial \eta}\left[\left((1-a)+\kappa a\right)\frac{\partial \theta_G}{\partial \eta}\right]\right] + \overline{W}, \tag{10}$$

$$\frac{da}{d\tau} = Y\left[\gamma_2(1-a)\varphi_2(\theta,\sigma) - \gamma_1 a \varphi_1(\theta,\sigma)\right]. \tag{11}$$

Здесь

$$\phi_1(\theta,\sigma) = \exp\left(\pi_1\sigma + \frac{1+\beta\theta-\varepsilon_{12}}{\beta(1+\beta\theta)}\right): \qquad \phi_2(\theta,\sigma) = \exp\left(\pi_2\sigma + \frac{\theta}{1+\beta\theta}\right).$$

Граничные условия вдоль оси $O\xi$:

$\xi = 0, \quad \xi = \overline{L}$: $\dfrac{\partial \theta_k}{\partial \xi} = 0$; $k = B, G, A$

на границах соединяемых слоев B, A, G:

$\eta = 0$: $\dfrac{\partial \theta_B}{\partial \eta} = 0$;

$$\eta = \Delta_B: \qquad K_{\lambda B}\frac{\partial \theta_B}{\partial \eta} = \big((1-a)+\kappa a\big)\frac{\partial \theta_G}{\partial \eta}, \qquad \theta_B = \theta_G;$$

$$\eta = 1+\Delta_B: \qquad \big((1-a)+\kappa a\big)\frac{\partial \theta_G}{\partial \eta} = K_{\lambda A}\frac{\partial \theta_A}{\partial \eta}; \qquad \theta_G = \theta_A.$$

В зоне контакта ролла с поверхность слоя А:

$$\eta = 1+\Delta_B+\Delta_A: \qquad \theta = 0 \quad \text{если} \quad \omega\tau+\xi_0-\xi_A \le \xi \le \omega\tau+\xi_0+\xi_A;$$

$$\frac{\partial \theta_A}{\partial \eta} = 0 \quad \text{если} \quad \xi \le \omega\tau+\xi_0-\xi_A \quad \text{и} \quad \xi \ge \omega\tau+\xi_0+\xi_A.$$

Задача включает безразмерные параметры:

$$\bar{L} = \frac{L}{H_G}, \qquad \xi_0 = \frac{x_0}{H_G}, \qquad \xi_A = \frac{s(P)}{H_G}, \qquad \omega = \frac{vt_a}{H_G},$$

$$K_{CB} = \frac{c_B\rho_B}{c_G\rho_G}, \quad K_{CA} = \frac{c_A\rho_A}{c_G\rho_G}, \quad K_{\lambda B} = \frac{\lambda_B}{\lambda_2}, \quad K_{\lambda A} = \frac{\lambda_A}{\lambda_2}, \quad \kappa = \frac{\lambda_1}{\lambda_2}, \quad \delta = \frac{c_G\rho_G H_G^2}{\lambda_2 t_a},$$

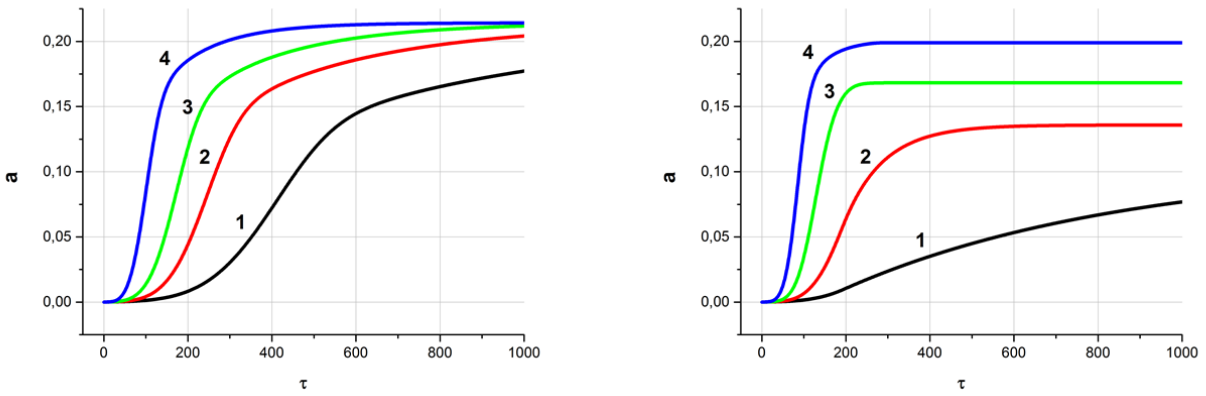
$$\varepsilon_{12} = \frac{E_1}{E_2}, \qquad \gamma_1 = \frac{k_{10}}{z_0}, \qquad \gamma_2 = \frac{k_{20}}{z_0}, \qquad \beta = \frac{RT_S}{E_2}, \qquad \pi_1 = p_1 p_*, \qquad \pi_2 = p_2 p_*.$$

Начальные условия:

$$\tau = 0: \ \theta_k = \theta_0, \ Y = 0, \ a = 0.$$

Исследование

Исследуем влияние технологических параметров процесса на величину степени структурных превращений. Примем, что ролл неподвижен. При увеличении давления прижатия ролла, увеличивается степень структурных превращений, как показано на рисунке 2. Для давления прижатия ролла, равном 0,5, значение степени структурных превращений, равное 0.20, достигалось за время $\tau = 1000$. Аналогичное значение степени структурных превращений было достигнуто за $\tau = 500$ при давлении ролла, равном 5 (см. рисунок 2*а*). Интересным является влияние скорости движения ролла на процессы структуризации в слое клея. Зафиксируем, величину давления прижатия ролла, равной 0,5. При заданной скорости движения ролла $\omega = 0{,}0125$ степень структурных превращений достигает максимального значения 0.1625 (рисунок 2*б*, кривая 3) за $\tau = 200$. Однако при неподвижном ролле за $\tau = 200$ величина степени структурных превращений равна всего 0.125 (рисунок 2*а*, кривая 3). Причем степень структурных превращений продолжает расти до 0,20.



а) Ролл неподвижен *б) Ролл движется со скоростью* $\omega = 0{,}0125$

Рисунок 2. Эволюция по времени величины степени структурных превращений при различных значения давления прижатия: 1 – $\pi = 0{,}005$*; 2 –* $\pi = 0{,}05$*; 3 –* $\pi = 0{,}5$*; 4 –* $\pi = 5$

Полученные результаты наталкивают на необходимость более подробного изучения влияния скорости движения ролла на процесс структуризации. Для этого зафиксируем величину давления прижатия равной 0,05, варьируя скорость линейного движения ролла как показано на рисунке 3. С увеличением скорости движения ролла степень структурных превращений уменьшается. Например, величина степени структурных превращений падает с $a = 0,2$ при $\omega = 0,0025$ до $a = 0,11$ при $\omega = 0,025$.

Сравнение распределения значения степени структурных превращений при скорости ролла равной 0 и 0,007 показывает, что при заданной скорости движения ролла наблюдается более быстрое протекание прямой реакции структуризации (Рис. 4, 5); обратная реакция может и не наблюдаться. Это зависит от соотношения параметров. Скорость движения ролла влияет как на скорость протекания реакции структуризации, так и на значение максимальной степени структурных превращений.

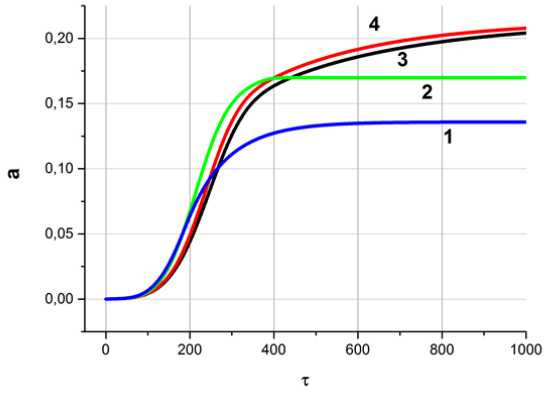
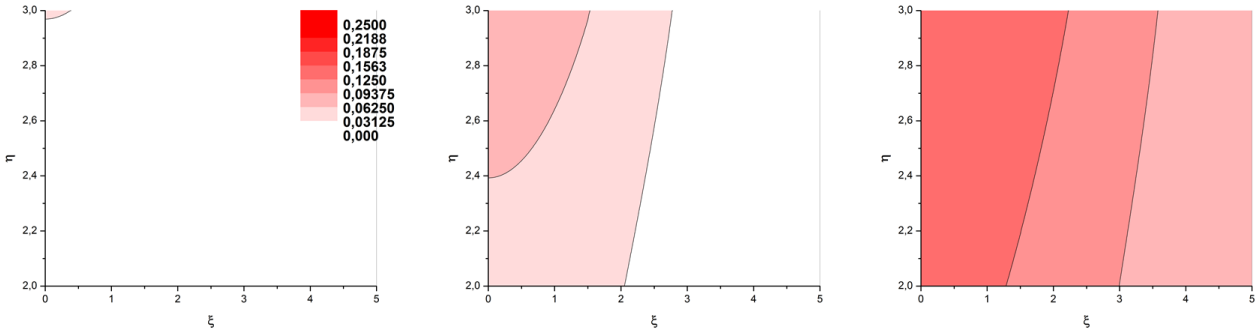
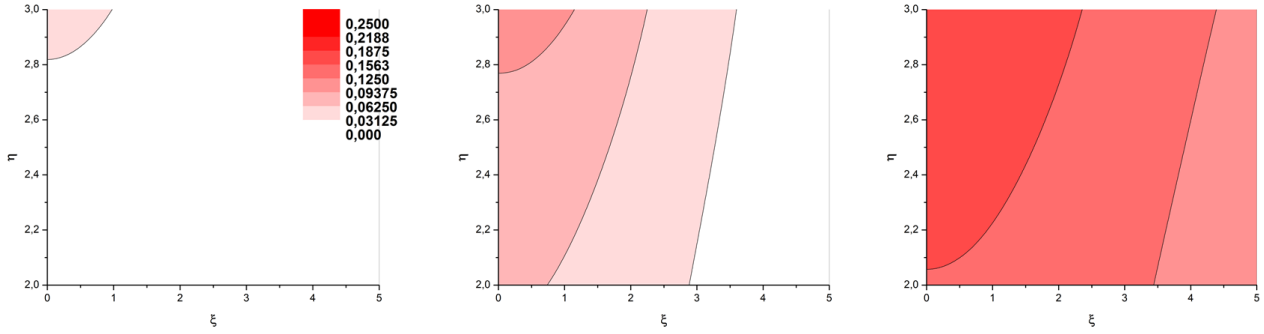


Рисунок 3. Эволюция величины степени структурных превращений при разных значениях скорости движения ролла:
1 – $\omega = 0,025$; *2* – $\omega = 0,0125$;
3 – $\omega = 0,0025$; *4* – $\omega = 0$



$\tau = 70$ $\tau = 110$ $\tau = 170$

Рисунок 5. Распределение величины степени структурных превращений при неподвижном ролле



$\tau = 70$ $\tau = 110$ $\tau = 170$

Рисунок 6. Распределение величины степени структурных превращений при скорости движения ролла $\omega = 0,007$

Заключение

Таким образом, в работе построена математическая модель структурных превращений в адгезионном слое, учитывающая прямую и обратную стадии. Модель реализована численно. Выделены наиболее важные технологические параметры, такие как давление прижатия и скорость движения ролла, влияющие на протекание реакции структуризации в слое клея. В ходе численных экспериментов выявлено, что увеличение давления прижатия ролла приводит к увеличению степени структурных превращений в слое клея, поскольку обратная реакция либо не успевает начаться, либо быстро прекращается. Однако влияние скорости линейного движения не столь однозначно, поскольку скорость движения ролла приводит к ускорению протекания реакции структуризации, но одновременно может ограничить максимальное ее значение.

Список литературы

1. Precht M., Otto A., Geiger M. Rapid Tooling by Laminated Object Manufacturing of Metal Foil / Adv. Mater. Res. – 2015. – Vol. 6-8., P. 303-311.

2. Weisensel L., Travitzky N., Greil P. Advanced Laminated Object Manufacturing (LOM) of SiSiC Ceramics / Proceedings of the 15th Solid Freedom Fabrication Symposium. – 2014. – P. 1-15.

3. Travitzky N., Windsheimrer H., Fey T., and Greil P. Preceramic Paper-Derived Ceramics / J. Am. Ceram. Soc. – 2008. – P. 3477-3492.

4. Butt J., Mebrahtu H., Shirvani H. A novel rapid prototyping process for the production of metal parts / Proceedings of the Second International Conference on Advances in Civil. – 2014. – P. 26-29.

5. Knyazeva A.G. Model of chemical conversion initiation in the adhesive bonding layer during roll motion in the process of laminated object creation / Nanoscience and Technology: An International Journal. – 2018. – Vol. 9, Iss. 1. – P.77-89.

6. Бигер И.А., Шорр Б.Ф., Иосилевич Г.Б. Расчет на прочность деталей машин. / Справочник. – М: Машиностроение. – 1993, 640 с.

INFLUENCE OF PROCESS-DEPENDENT PARAMETERS ON STRUCTURAL TRANSFORMATION IN THE ADHESIVE LAYER

E.R. Saifullin [1,a], A.G. Knyazeva [2]

[1] *National Research Tomsk State University, Lenin Ave., 36, 634050, Tomsk, Russia*

[2] *Institute of Strength Physics and Materials Scienc SB RAS*

pr. Akademicheskii, 2/1, 634055, Tomsk, Russia

[a] E-mail: elmir.saifullin@mail.ru

Laminated object manufacturing (LOM) is a process of creating three-dimensional objects from sheets of different materials. The technological process of creation objects roughly can be divided on three main stages. The first, development 3D-model of the object with certain geometric shape in CAD-system. The second, clipping waste material using a laser. The third, bonding finished sheets with adhesive layer by LOM machine. Initially, the LOM method was used for manufacturing paper and wooden products. The advantages of technique (such as high fabrication speed, low warping and internal stresses, variety of organic and inorganic materials) have influenced to rapid development of LOM. The possibility of combining metal foil was investigated by Precht et al [1]. Moreover, Weisensel et al (2014) tried to adopt LOM technology for ceramic materials [2]. The possibility of using low-temperature in technology allows joining polymeric materials; also LOM method is used in construction and microelectronics. At the same time researches work on improvement of technological process itself. For example, the principles of creating preceramic paper were investigated in [3]. Furthermore, mixing metal foil with other final joining operation was described in paper [4], and named Composite Metal Foil Manufacturing (CMFM). In spite of numerous studies, the process occurring in adhesive layer was not explored enough, but it leads to heat adsorption or release, and structural transformation.

This article examines the effect of process-dependent parameters (temperature, speed, and nip-force of the roll) on the evolution of structural transformation in the adhesive layer. The mathematical model from [5] was taken as a basis model.

The model was implemented numerically. In the course of numerical experiments, it was revealed that an increase of nip-force of the roll leads to an increase in the magnitude of the degree of structural transformations in the adhesive layer. However, the influence of the linear motion speed is not so unambiguous, since the speed of the roll movement accelerates the structuration reaction, but at the same time can limit its maximum value.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТОВ ЗАПЕКАНИЯ ПОРОШКА В ТОНКИХ КАНАЛАХ В ПРОЦЕССЕ ЛАЗЕРНОГО СИНТЕЗА

Рабинский Л.Н. [1], Токмаков Д.И. [1,2], Соляев Ю.О. [1,3,a]

[1] *Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), Россия, г. Москва, Волоколамское шоссе, д. 4, 125993*

[2] *ПАО «Радиофизика», Россия, г. Москва, ул. Героев Панфиловцев, 10, 125363*

[3] *Институт прикладной механики Российской академии наук Россия, г. Москва, Ленинградский проспект д.7, 125040*

[a] E-mail: dimatok87@gmail.com

Введение

Одной из важных проблем, возникающих в процессе синтеза металлических изделий со встроенными малоразмерными каналами охлаждения, является запекание порошка в каналах в процессе синтеза. Запекание может быть связано, во-первых, с переплавлением порошка на участках синтеза верхних поверхностей каналов (down-skin областей), где печать проводится без поддержек и происходит перегрев зоны печати, и, во-вторых, вследствие общего перегрева изделия в процессе синтеза из-за больших размеров печатаемых сечений или особенностей геометрии [1]. Особенно опасными, с точки зрения переплавления и запекания порошка, являются участки каналов, расположенные горизонтально, относительно поверхности построения. Такое расположение каналов желательно избегать, подбирая ориентацию изделий в рабочей камере 3д принтера. Однако для сложных систем каналов в любом случае некоторые участки оказываются в горизонтальном положении и качество их печати существенно зависит от правильности выбранных параметров синтеза и подобранной геометрии модели [2-4].

Анализ результатов

В данной работе была проведена оценка возможности прогноза изменения формы поперечных сечений каналов, которая реализуется при печати горизонтальных каналов в изделиях из порошков на основе сплавов AlSi10Mg. Оценивалось частичное закрытие каналов, связанное с переплавлением порошка. Результаты сопоставлены с экспериментом. В расчетах применяется модель, представленная ранее в работе [5] и реализованная в системе Comsol с использованием пользовательских скриптов в системе Matlab. В расчетах были использованы параметры синтеза и свойств материалов, использованных в эксперименте, а также учитывались процессы фазового перехода при расплавлении порошка, его перегреве до жидкого состояния и дальнейшего остывания до твердого состояния. Исследование проводилось для партий образцов, содержащих горизонтальные каналы диаметром 0.2-2 мм (Рис. 1). Для образцов было выполнено томографическое исследование для оценки реализующейся формы каналов. Рассмотренная модель образцов и примеры результатов расчетов, демонстрирующие процесс заплавления каналов при печати, показаны на рис. 2, 3.

Сопоставление результатов расчетов с обработкой экспериментальных данных по томографии образцов показано на рис. 4. Здесь для различных диаметров каналов наложены прогнозируемые формы поперечных сечений каналов и контуры, реализовавшиеся в экспериментальных образцах. Видно, что получаемые результаты расчетов достаточно хорошо согласуются с экспериментом. В горизонтальных каналах происходит переплавление, как в горизонтальном направлении (проявляющееся преимущественно в виде повышенной шероховатости боковых стенок каналов), так и в вертикальном направлении на верхней поверхности канала (при этом образуются наплывы, частично перекрывающие сечение канала). Особенно существенными эти эффекты оказываются для каналов диаметром менее 1 мм, которые могут иметь место при изготовлении различных ответственных изделий со встроенными системами охлаждающих каналов, таких как, охлаждаемые пресс-формы,

лопатки турбин, режущие инструменты, охлаждаемые корпуса для мощных радиоэлектронных систем и т.д.

Для исключения искажения формы каналов рекомендуется использовать «компенсированную» геометрию поперечных сечений с заданием запасов на зоны переплавления, например, с использованием «каплевидной формы каналов (Рис. 5*а*), либо с использованием более сложных оптимальных форм, которые могут быть подобраны на основе предварительных расчетов (Рис. 5*б*).

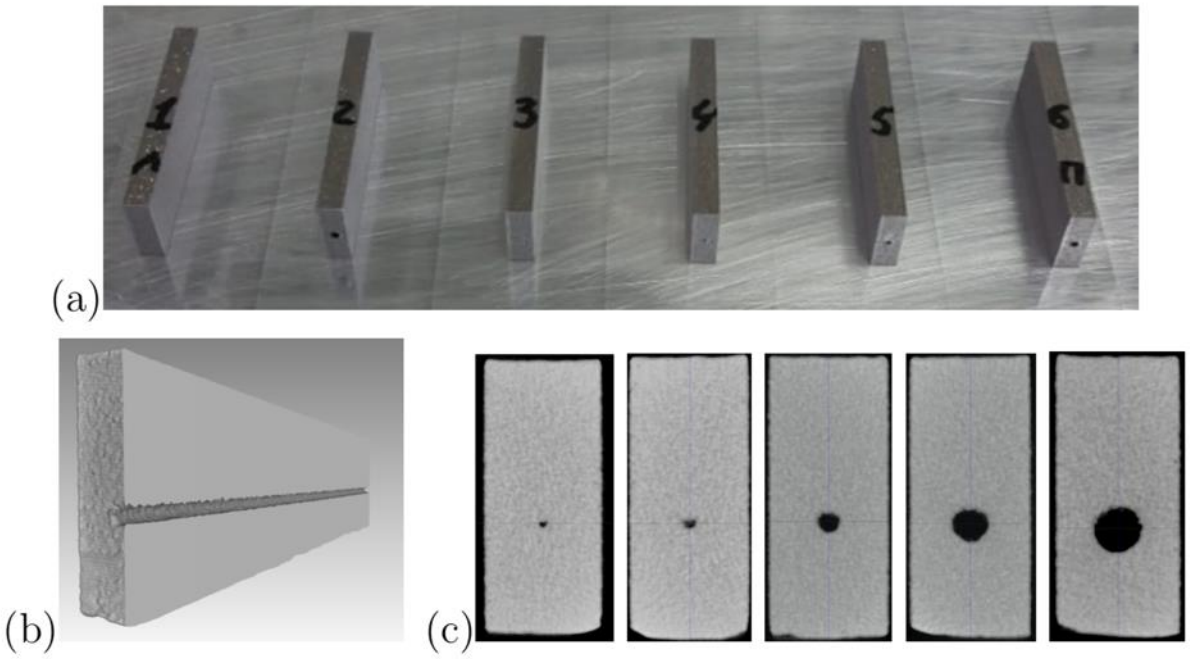


Рисунок 1. Образцы с каналами диаметром 0.2-2 мм, изготовленные для проверки результатов моделирования и оценки искажения формы поперечных сечений при 3д печати. В нижнем ряду – примеры результатов томографии образцов

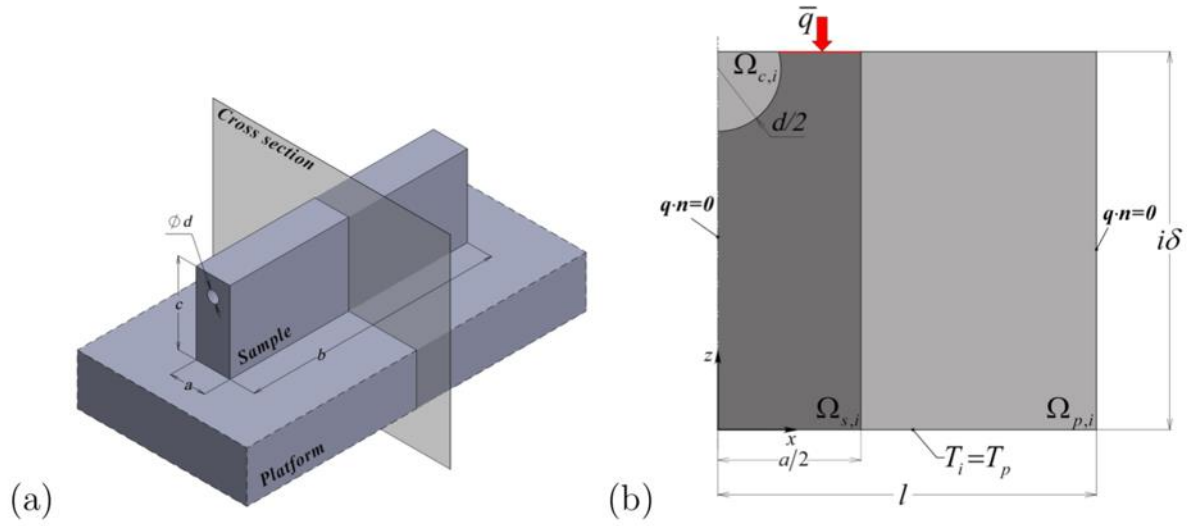


Рисунок 2. Модель образца с горизонтальным каналом, использованная в расчетах [5]. Модель учитывает наличие спекаемой области, занятой образцом (темно серый цвет), и присутствие порошка вокруг детали и внутри канала (светло серый цвет). Стрелкой показана область, где происходит сплавление

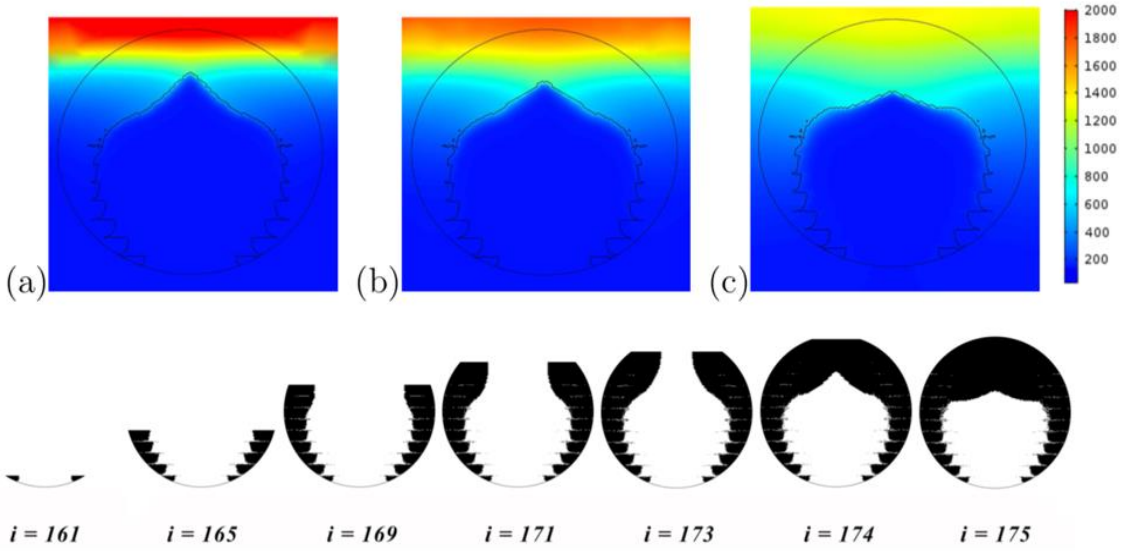


Рисунок 3. Примеры результатов расчета процесса синтеза образца с каналом. Вверху: показано движения фронта расплавленного металла в течение нескольких миллисекунд после воздействия лазерного источника на металл вокруг канала. Из-за перегрева происходит переплавление и запекание порошка не только в области синтеза, но и внутри канала, что приводит к его частичному перекрытию. Внизу: процесс нарастания зон переплавления в канале в процессе синтеза окружающих слоев металла (номера слоев указаны под рисунками)

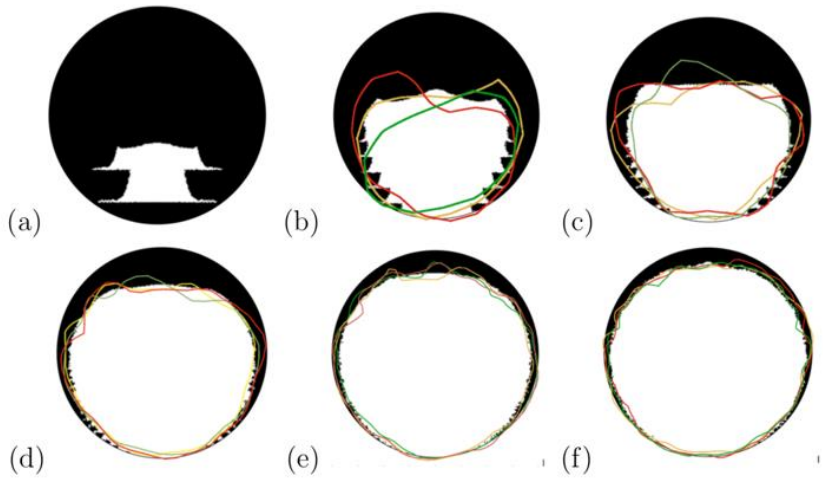


Рисунок 4. Сопоставление прогнозируемых форм поперечных сечений каналов (черный цвет) с данными томографии экспериментальных образцов (цветные контуры) для каналов диаметром {0.2, 0.4, 0.6, 1, 1.6, 2} мм

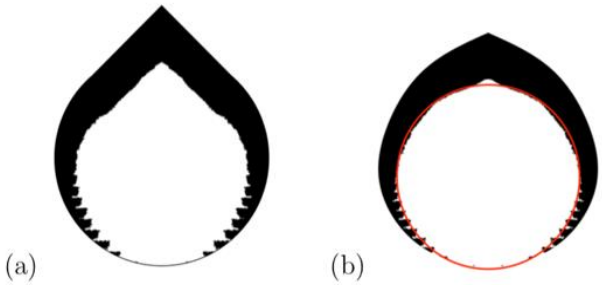


Рисунок 5. Компенсированная форма поперечных каналов, позволяющая исключить переплавленние и закрытие сечений каналов в процессе синтеза

Выводы

Таким образом, в результате проведенных расчетов показана возможность прогнозирования возникновения дефектов, появляющихся при синтезе изделий с тонкими горизонтальными каналами. Для реализации этих расчетов использована модель, предложенная в [5]. Предложен вариант использования сложной каплевидной формы канала, для компенсации возникающих искажений геометрии изделия, связанной с переплавлением в области боковых и верхних стенок каналов.

Работа выполнена при частичной поддержке проекта РФФИ № 17-01-00837.

Список литературы

1. Olakanmi E.O., Cochrane R.F., Dalgarno K.W. A review on selective laser sintering/melting (SLS/SLM) of aluminium alloy powders: Pro- cessing, microstructure, and properties / Progress in Materials Science. – 2015. – Vol. 74. – P. 401–477. doi:10.1016/j.pmatsci.2015.03.002.

2. Snyder J.C., Stimpson C.K., Thole K.A., Mongillo D., Build direction effects on additively manufactured channels / Journal of Turbomachinery. – 2016. – Vol. 138, Iss. 5. – P. 051006.

3. Snyder J.C., Stimpson C.K., Thole K.A., Mongillo D.J. Build direction effects on microchannel tolerance and surface roughness / Journal of Mechanical Design. – 2015. – Vol. 137, Iss. 11. – P. 111411.

4. Pakkanen J., Calignano F., Trevisan F., Lorusso M., Ambrosio E.P., Manfredi D., Fino P. Study of Internal Channel Surface Roughnesses Manufactured by Selective Laser Melting in Aluminum and Titanium Alloys / Metallurgical and Materials Transactions. – 2016. – Vol. A 47, Iss. 8. – P. 3837– 3844. doi:10.1007/s11661-016-3478-7.

5. Kakhramanov R., Knyazeva A., Rabinskiy L., Solyaev Y.O. On the possibility of steady-state solutions application to describe a thermal state of parts fabricated by selective laser sintering / High Temperature. – 2017. – Vol. 55, Iss. 5. – P. 731–736.

АДДИТИВНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ДЛЯ ВИБРОАКУСТИЧЕСКИХ МЕТАМАТЕРИАЛОВ: СООТВЕТСТВИЕ МОДЕЛИ И ЭКСПЕРИМЕНТА

Томилина Т.М.
Институт машиноведения им.А.А.Благонравова РАН
Россия, г. Москва, ул.М.Харитоньевский, 4, 101990
E-mail: : tatiana@imash.ac.ru

Введение

Аддитивные технологии, которые позволяют воспроизводить различные объекты по их компьютерным 3D моделям, стали активно развиваться как новые эффективные технологии для разработки и изготовления промышленных изделий. Развитие пошло, в первую очередь, по пути создания технических устройств – 3D принтеров и соответствующих порошковых материалов (или фотополимеров) со свойствами, аналогичными свойствам известных материалов. Применение аддитивных технологий (АТ) для изготовления функциональных изделий также пока ограничивается изготовлением аналогов по прототипам, полученным традиционным способом. В то же время большой интерес представляет потенциальное использование этих технологий для создания принципиально новых материалов и изделий, изготовление которых в рамках традиционных технологий невозможно, например, для создания искусственных материалов и сред с необычными свойствами, так называемых метаматериалов («сверхматериалов»). Это новое направление сейчас развивается так же стремительно, как и аддитивные технологии, что иллюстрируют графики на рисунке 1: слева показано как изменился первоначальный прогноз вложений в развитие АТ до 2020 года (светлые столбики) по сравнению с текущим (темные столбики), в миллиардах долларов; справа приведен график роста ежегодного количества публикаций по метаматериалам от единиц в 2003 году до тысяч в 2013 году.

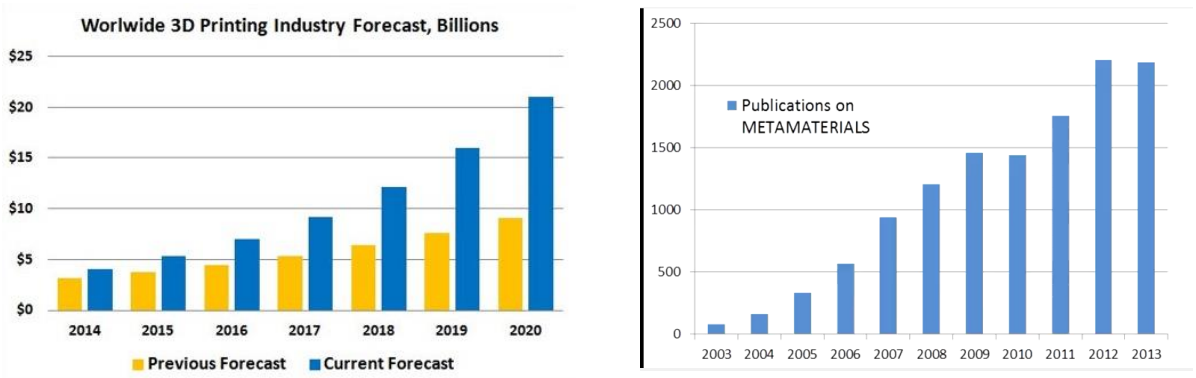
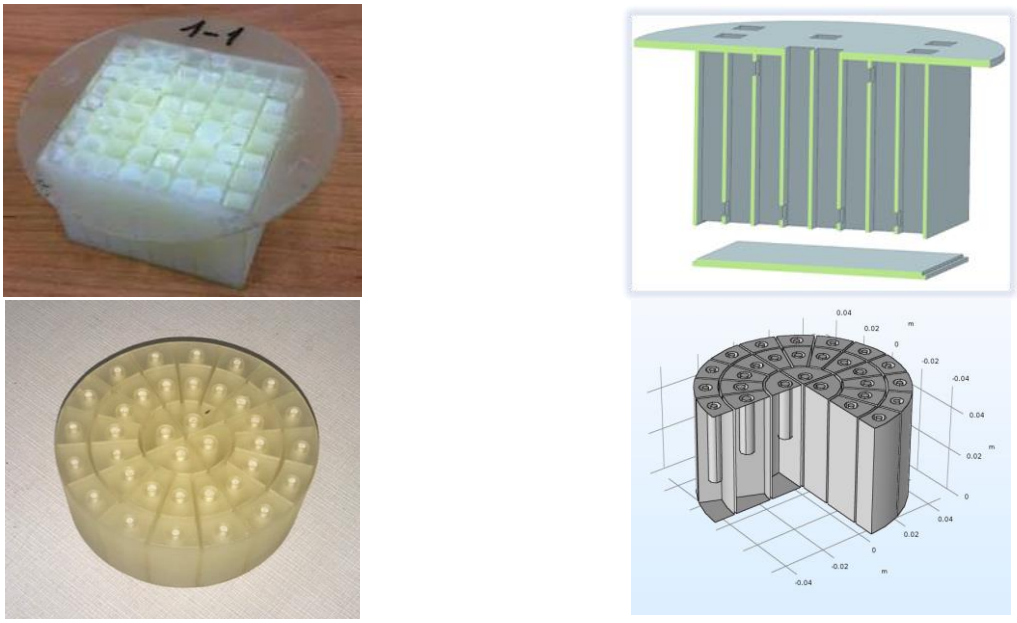


Рисунок 1. Прогноз затрат на аддитивные технологии (слева) и динамика количества публикаций по метаматериалам 2003-2013 гг. (справа)

Однако реализация АТ для решения таких задач требует изучения самих технологических процессов (все еще очень затратных), чтобы можно было прогнозировать требуемые свойства готового изделия. В отличие от традиционных методов, которые при разработке изделия с заданными свойствами используют материалы с хорошо известными характеристиками (например, механическими), в аддитивных технологиях материал и изделие создаются одновременно. Тем не менее, они находят применение на стадии разработки и моделирования структур сложной геометрии при условии проведения научных исследований для адаптации АТ для каждой конкретной задачи. Ниже приводится пример применения АТ для разработки и изготовления тестовых образцов-прототипов акустического метаматериала – высокоэффективного звукопоглотителя из фотополимера.

Акустические метаматериалы

Термин мета («сверх») материалы появился в задачах электромагнитного излучения и распространился в других областях науки для описания волновых процессов в упругих средах, в том числе в акустике. Акустические метаматериалы (АММ) – это искусственно создаваемые периодические структуры (материалы-конструкции) ячеистого типа со сложной внутренней геометрией каждой ячейки, которые для длин волн, больших характерного размера ячейки могут проявлять экстремальные волновые свойствах. Конструктивно ячейка представляет собой лабиринтообразную структуру из полостей и каналов, содержащих перфорированные перегородки. Такие структуры практически не реализуемы в рамках традиционных технологий. На рисунке 2*а, б* показаны простейшие структуры образцов АММ звукопоглотителей (ЗП) из фотополимера, напечатанных по технологии PolyJet для акустических испытаний.



а *б*

Рисунок 2. Структуры тестовых образцов АММ ЗП, напечатанных по технологии PolyJet из фотополимера FullCure 720: общий вид (слева) и 3D цифровая модель (справа)

На рисунке 2*а* показан АММ образец резонансного типа с лабиринтной структурой, образованной двумя типами тонкостенных «свёрнутых» трубок (четвертьволновых резонаторов); на рисунке 2*б* – АММ поглотитель с секционной радиальной структурой, образованной тремя типами изолированных ячеек с трубочками разной длины (резонаторов Гельмгольца). Габаритные размеры образцов: высота 50 мм, диаметр 90 мм, диаметр внутренних трубочек 10 мм и длина от 25 до 30 мм – выбраны из условия максимальной эффективности поглощения для рабочего диапазона частот 200-500Гц, вес образцов 80 и 100 г. Цифровая модель образца на рисунке 2*а* состоит из двух частей, так как технология не позволила осуществить печать цельного образца с ячеистой внутренней структурой и замкнутой внешней поверхностью.

Особенности печати образцов акустических метаматериалов

С точки зрения технологии печати АММ образцы представляют собой тонкостенные многопрофильные изделия, а их акустические свойства существенно зависят от точности воспроизведения их формы. Опыт использования 3D печати для изготовления образцов АММ звукопоглотителей в ИМАШ совместно с Центром аддитивных технологий Самарского университета показал, что для корректного воспроизведения внутренней структуры образцов необходимы специализированные методики, как в части моделирования

заданной геометрии образца в цифровой среде принтера, его размещения на платформе построения, так и в части задания параметров технологического процесса. Задача состоит в том, чтобы выработать взаимно согласованные требования к структуре АММ и к процессу 3D печати на доступном оборудовании. На рисунке 3 показано как могут меняться свойства АММ образцов резонансного типа, напечатанных по одной и той же цифровой модели, визуально идентичных, но демонстрирующих существенно разные акустические свойства в эксперименте. Приведен график зависимости коэффициента звукопоглощения α от частоты для двух экземпляров образца со структурой как на рисунке 2*а*. Для одного экземпляра экспериментальный результат (кривая с точками) соответствует теоретическому расчету (см. fig. 2 в [1]), для другого существенно отличается - образец ведет себя как нерезонансный поглотитель (прямая линия).

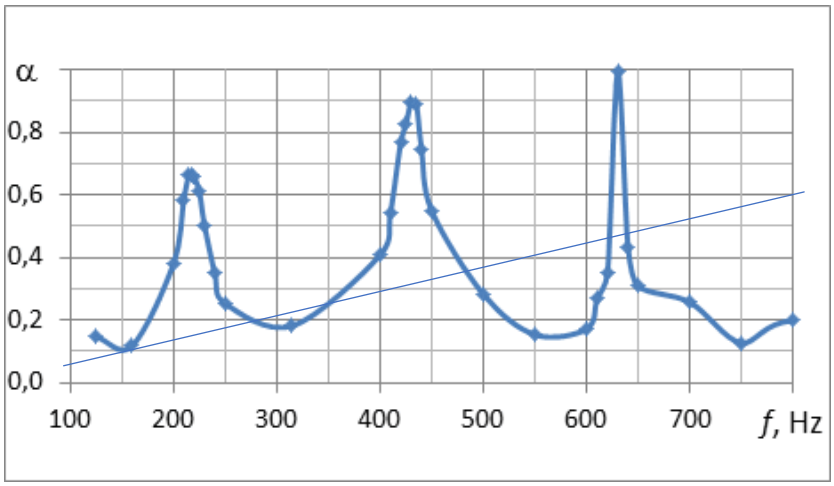


Рисунок 3. Экспериментальная зависимость коэффициента звукопоглощения от частоты для резонансного АММ образца, соответствующая теоретической модели (кривая с точками) и результат неточного воспроизведения внутренней структуры образца при изготовлении (прямая линия)

Возможная причина – проникновение воздуха через незаметные щели в соединениях, была подтверждена при испытаниях образца из металлопорошка, изготовленного по технологии СЛС (см. рисунок 5). Для устранения такой ситуации была откорректирована составная модель образца и использован другой материал для склейки готовых элементов.
На рисунке 4 показан эффект коробления АММ образца панели звукопоглотителя, состоящего из 16 ячеек с внутренними трубочками, соединенных также через цилиндрические трубки (габариты 200×200×50 мм и толщина стенок 1 мм).

Рисунок 4. Образец АММ структуры, состоящей из 16 ячеек, связанных через цилиндрические трубки с открытыми торцами, изготовленный по технологии PolyJet без искажения формы (слева) и эффект коробления (справа)

Слева показан образец, изготовленный при типовых технологических рекомендациях для параметров печати, справа - образец без искажения формы, напечатанный, с учетом взаимно согласованных требований к структуре АММ и к процессу печати. Для изготовления использовалась технология PolyJet на установке Object Eden 350 с областью построения 350x350x200 мм и допустимой толщиной слоя 0,016 мм (на практике точность в 5 раз ниже). Для временной поддержки частей модели в процессе выращивания использовался светочувствительный материал FullCure705 Support, легко удаляемый водой после печати. Результаты исследований технологии PolyJet для синтеза тонкостенных изделий [2], [3] показали, что синтезируемый образец на 90% полимеризуется в процессе выращивания и на 10% в процессе удаления материала поддержки. Остаточная полимеризация происходит в первые 24 – 30 часов в зависимости от сложности геометрии образца, рекомендуется дополнительная фотополимеризация сразу после печати. Для предотвращения возможных дефектов формы вследствие остаточных напряжений при выращивании изделия и постобработке необходимо проводить предварительные экспериментальные исследования на тестовых образцах в виде тонких пластинок для разного расположения на платформе построения и разных режимах постобработки.

Особенности печати образцов из металлического порошка

Структура АММ образца как на рис. 2*а* была также реализована по технологии СЛС (селективного лазерного сплавления). Модель тоже состояла из 2-х элементов для возможности удаления материала поддержки во внутренней полости. Для качественного соединения корпуса и крышки применялась технология высокоточной лазерной сварки. Акустические испытания подтвердили качественное изготовление. Однако, в отличие от пластика объем постобработки был значительно больше. Вес такого образца составил 460 г, вес образца из пластика – 80 г.

Рисунок 5 – АММ Образец из металла по технологии SLM (слева); лазерная сварка соединения 2-х элементов составной модели

На рисунке 6 представлена модель стального виброизолятора (ВИ) в виде тонких стальных «шайб», соединенных между собой массовыми элементами (рисунок 6*а*), для которых имеется прототип (рисунок 6*в*), успешно реализованный по традиционной технологии и используется для эффективной изоляции космических приборов от вибраций в заданном диапазоне частот. Модель прототипа была перепроектирована для изготовления по технологии СЛС в виде единого элемента, включая резьбовые соединительные элементы, так что вес ВИ уменьшился с 80г до 40г по сравнению с прототипом.

В качестве исходных были использованы металлические порошки нержавеющей стали российского 07Х18Н12М2 производства. Были синтезированы типовые образцы для стандартных механических тестов, которые показали, что предел прочности синтезированных образцов выше на 15…30% по отношению к пределу прочности литых образцов, предел текучести выше на 60…70%, и составили 726 МПа и 657 МПа соответственно [4]. Качество материала синтезируемых образцов проверялось на наличие в структуре пор и несплавлений с использованием электронного микроскопа Tescan Vega. На основе этих исследований определились параметры технологического процесса СЛС для

выращивании образцов ВИ в соответствии с новой (перепроектированной) моделью конструкции.

а *б* *в*

Рисунок 6. Трехмерная цифровая модель с материалом поддержки на платформе построения (а); общий вид перепроектированного виброизолятора, выращенного из порошка нержавеющей стали 07Н18N12М2 (б); прототип виброизолятора – составная конструкция, включающая основной пружинный элемент и элементы крепления (в).

Для определения механических и функциональных свойств выращенных образцов ВИ были проведены вибрационные испытания. Сравнивались две характеристики – жесткость конструкции образцов ВИ и их фильтрующие свойства. Амплитудно-частотные характеристики показали, что жесткость образца СЛС-ВИ выше, чем у оригинального прототипа. Значение собственной частоты выращенного образца, нагруженного массой 800 г, равнялось 170 Гц по сравнению с 101 Гц у прототипа (прототип менее жесткий из-за характеристик исходного материала и элементов сборки). В то же время при многократном нагружении образцов СЛС-ВИ (15 раз) у одного из образцов произошло смещение резонансной частоты со 170 Гц до 120 Гц, что свидетельствовало о структурных изменениях материала, при том, что визуально целостность конструкции сохранялась. Изучение характера внутренних дефектов конструкции показало, что образовалась усталостная трещина в области наличия микропор и локального несплавления по границе зерна в зоне, где сосредоточены большие термические напряжения. После корректировки режимов сплавления были изготовлены четыре образца с удовлетворительными механическими свойствами, которые использовались для проверки фильтрующих свойств выращенных виброизоляторов. Натурные виброиспытания СЛС образца ВИ показали приемлемое качество изделия и подтвердили его функциональные свойства в части фильтрации вибраций при меньшем по сравнению с оригинальным прототипом весе. В то же время дополнительные исследования циклической прочности СЛС образцов ВИ показали, что эти характеристики лучше у оригинального прототипа.

Заключение

Исследование особенностей технологии 3D печати применительно к созданию образцов вибро- акустических метаматериалов показало, что для обеспечения требуемых функциональных свойств готового изделия необходимо выполнить большой объем предварительных исследований и выработать взаимно согласованные требования к параметрам исходной конструкции и параметрам процесса 3D печати на конкретном оборудовании. Изготовленные образцы из фотополимера могут иметь ряд дефектов: искажение заданной формы из-за термической объемной усадки модельного материала и материала поддержки как в процессе выращивания, так и после; возможна локальная несплошность поверхности, которая визуально не определяется, но существенно влияет на акустические свойства. Для образцов из металлического порошка возможно изменение полученных механических свойств со временем из-за последующего образования

микротрещин, при том, что полученные в процессе выращивания параметры материала отвечают заданным требованиям.

Исследования технологии изготовления образцов вибро- акустических метаматериалов более сложных структур и из других модельных материалов будут продолжены.

Список литературы

1. Tomilina T., Bobrovnitskii Yu., Bakhtin B. Impedance design of efficient metamaterial sound absorber / Proceedings of the 24th International Congress on Sound and Vibration. London, UK. – 23–27 July 2017.

2. Vdovin R., Tomilina T., Smelov V. Implementation of the additive PolyJet technology to the development and fabricating the samples of the acoustic metamaterials / Procedia Engineering. – 2017. – P. 595–599.

3. Tomilina T., Afanasyev K. et al. Testing of 3D-printed experimental samples of the metamaterial acoustic absorbers / Proceedings of the 23rd International Congress on Sound and Vibration. – Athens, Greece, 10–14 July 2016.

4. Smelov V.G., Sotov A.V., Agapovichev A.V., et al. Implementation of the Additive Technology to the Design and Manufacturing of Vibroisolators with Required Filtering // Procedia Engineering. – 2017. – Vol. 176. – P. 540.

3 D PRINTING OF VIBRO-ACOUSTIC METAMATERIALS: THE PROBLEM OF MODEL AND EXPERIMENT COMPLIANCE

E.A. Sorokina, N.O. Kopanitsa

A.A. Blagonravov Mechanical Engineering Research Institute

M. Kharitonyevskiy Pereulok, 4, 101990, Moscow, Russia

E-mail: tatiana@imash.ac.ru

This paper is devoted to the metamaterial structures and their "super" wave properties in connection with additive technology of manufacturing. The models and 3D-printing samples of acoustic and vibro - metamaterials developed in IMASH are presented. The problem of possible discrepancy between the properties of acoustic metamaterials theoretically predicted and experimentally obtained on test 3D-printing samples is discussed. It is found that insufficient quality of 3D-printing strongly affects the acoustical (or strength) properties of the finished product and the test samples are inconsistent with the specified requirements. Two models were chosen for experimental study of the problem: the simplest design model of acoustic metamaterial with high sound absorption which is represented as a quasi-periodic cellular structure with the cell size corresponding to the operating frequency region, and vibration isolator model as a set of several thin washers of steel interconnected with each other on a chess-board order via small masses forming a grid-like structure which "super" wave properties are based on stopband effect.

Currently, the available 3D-printing technologies do not allow you to print a sample with a closed surface and a cellular thin-walled internal structure as a whole, and it is necessary to develop special models and use post-processing. In this case, the acoustic quality, that cannot be visually determined, may not be ensured.

The experimental study of test absorber samples of resonant type shows that two samples with the same geometry may have absolutely different acoustical properties. It was found out that one sample operates not as a resonant but as a mass type absorber. It may happen when part of the air passes through the sample. It means that this sample has insufficient quality despite the fact the peculiarities of the synthesized process were preliminary studied and optimal parameters for 3D printing were found.

Another example of the loss of the initial "super" wave properties of the 3D-printed metamaterials refers to samples of SLM-made vibration isolators (VI). After manufacturing, the mechanical test of VI- elements was performed and metallographic studies of the synthesized material were carried out to analyze their material properties. These tests showed that the strength properties are even higher than those of cast material. The vibration tests of SLM-made VIs have also been successfully passed and the perfect vibration isolation effect has been verified. However, over time, the tests for cyclic loads of small amplitude showed a significant decrease in the filtering properties of these samples due to the formation of surface microcracks.

Thus, insufficient quality of 3D-printing is responsible for the discrepancies between measurements and predictions. Unlike traditional technologies, which use materials with well-known characteristics (for example, mechanical), on the basis of which the product is designed with the specified properties, the material and the product are created simultaneously in the additive technology (AT). The practical use of AT to create samples of acoustic and vibro- metamaterials indicates the instability of the results of 3D-printing. It is necessary to study this effect in order to obtain stable results in the use of these technologies in practice.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ В БИОТКАНИ, НАГРЕВАЕМОЙ НАНОЧАСТИЦЕЙ

Ченцова С.К., Моисеева К.М.

Национальный исследовательский Томский государственный университет

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

E-mail: sofya.chencova@mail.ru

Введение

Одним из направлений в современной медицинской физике является разработка методов малоинвазивной микрохирургии. Эти методы подразумевают минимальное хирургическое вмешательство в организм человека и позволяют уменьшить степень травмирования тканей. Одним из методов малоинвазивной микрохирургии является внедрение наноразмерных частиц с последующим нагревом частиц импульсом лазера. В связи с распространением методов малоинвазивной микрохирургии возникает задача об исследовании тепловых и химических процессов, возникающих при их применении. Решение подобных задач возможно с позиций междисциплинарных подходов, что показано в работах [1 – 4].

В работе [1] представлены результаты исследований коллектива авторов, состоящего из биологов, физиков и специалистов в области вычислительной математики. Получены результаты по воздействию наночастиц золота и излучения лазера на клетки раковой опухоли. В [2] авторы исследовали воздействие лазерного излучения на биоткань, существенно упростив модель биологического процесса. Были определены лишь наиболее существенные для проводимых экспериментов оптические характеристики биоткани, подвергшейся лазерному воздействию. В [3] описан метод фототермической маркировки, используемый для метод фототермической маркировки. Метод основан на воздействии лазерного излучения на биологическую ткань, содержащую золотые наночастицы. Способность наночастиц поглощать большую часть излучения от лазера обеспечивает локальный нагрев пораженного участка ткани. Этот нагрев способствует омертвлению раковых клеток. Авторы статьи [3] отмечают зависимость гипертермии (перегрева ткани) от оптических свойств биоткани, размеров поглощающих наночастиц и времени облучения. Наночастицы больших размеров (более 100 нм) поступают в опухоль в малом количестве, не обеспечивая высокую эффективность гипертермии. Возникает необходимость решения задачи для макро и микрообъектов, что и реализовано в [3]. В работе выполнена оценка времени эффективного лазерного воздействия на биоткань в зависимости от оптических характеристик ткани. В работе [4] выполнено исследование воздействия импульсного излучения на сферическую металлическую наночастицу, помещенную в биоткань. При моделировании задачи учтены время лазерного воздействия, интенсивность, число и периодичность импульсов лазера. В качестве объекта исследований взята частица серебра, покрытая кварцем. Поскольку металлы имеют высокую теплопроводность, температура в центре частицы мало отличается от температуры на поверхности. Под воздействием лазерного излучения наночастица нагревается, при этом часть тепла отдается в окружающую среду. В работе показано, что при многоимпульсном воздействии температура частицы ниже, чем при воздействии одиночного импульса. При уменьшении длительности импульса температура частицы не успевает достигнуть своего максимального значения.

Таким образом, возникает вопрос о влиянии характеристик металлических частиц и характеристик лазерного излучения на скорость прогрева биоткани. В настоящей работе решена задача о тепловом взаимодействии между металлической двуслойной наночастицей и биологической тканью. Целью работы является определение характеристик прогрева биоткани от нагреваемой периодическим лазерным излучением двухслойной наночастицы.

Физико-математическая постановка задачи

Полагается, что частица представляет собой кварц, покрытый золотым слоем. Частица находится в биологической ткани и подвергается воздействию периодического лазерного излучения. Импульс лазера нагревает оболочку частицы и саму частицу. Прогрев среды осуществляется путем теплообмена на границе биоткань-нагретая оболочка частицы. Постановка задачи основана на работе [5] с учетом того, что частица является двуслойной, а все излучение, приходящее на частицу поглощается оболочкой частицы и самой частицей с характерными для данного материала коэффициентами поглощения. На границах между частицей и оболочкой частицы, оболочкой частицы и биотканью задается идеальный тепловой контакт (граничное условие четвертого рода). Схема расчетной области представлена на рисунке 1.

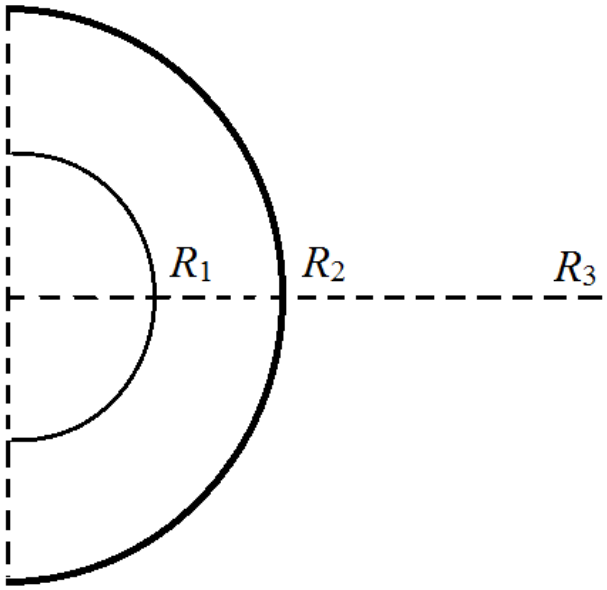


Рисунок 1. Схема расчетной области. R_1 – граница между частицей и оболочкой частицы, R_2 – граница между оболочкой частицы и биотканью, R_3 – граница расчетной области

Математическая постановка задачи при принятых допущениях имеет вид.
Уравнение энергии для частицы

$$c_k \rho_k \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_k \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right), \; 0 \le r < R_1. \tag{1}$$

Уравнение энергии для оболочки частицы.

$$c_{ob} \rho_{ob} \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_{ob} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \delta \alpha I_0, \; R_1 \le r < R_2. \tag{2}$$

Уравнение энергии для биоткани.

$$c_r \rho_r \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_r \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right), \; R_2 < r \le R_3. \tag{3}$$

Соответствующие краевые условия имеют вид:

$$r = 0: \; \frac{\partial T(0,t)}{\partial r} = 0. \tag{4}$$

$$r = R_1: \ \lambda_k \frac{\partial T_-(R_1,t)}{\partial r} = \lambda_{ob} \frac{\partial T_+(R_1,t)}{\partial r}, \quad T_-(R_1,t) = T_+(R_1,t). \tag{5}$$

$$r = R_2: \ \lambda_{ob} \frac{\partial T_+(R_2,t)}{\partial r} = \lambda_r \frac{\partial T_-(R_2,t)}{\partial r}, \quad T_-(R_2,t) = T_+(R_2,t). \tag{6}$$

$$r = R_3: \ \frac{\partial T(R_3,t)}{\partial r} = 0. \tag{7}$$

$$t = 0: \ T(r,0) = T_b. \tag{8}$$

Обозначения: c – удельная теплоемкость, ρ – плотность, T – температура, t – время, r – координата по радиусу, R_1 – радиус частицы, R_2 – граница между оболочкой частицы и биотканью, R_3 – граница расчетной области, λ – коэффициент теплопроводности, I – величина импульса лазера, α - коэффициент поглощения среды. Индексы: k – параметры частицы, ob – параметры оболочки частицы, r - параметры среды (вода), b – начальные значения параметров. Параметр δ в уравнении (2) задавался в виде:

$$\begin{cases} \delta = 1, \ t \in \left[n \cdot t_{all}, n \cdot t_{all} + t_{imp} \right], \\ \delta = 0, \ t \in \left[n \cdot t_{all} + t_{imp}, (n+1) t_{all} \right], \end{cases} \quad t_{all} = t_{imp} + t_p, \ n = 1, 2, 3...., \tag{9}$$

где t_{imp} – время работы лазера, t_p – время остановки лазера, t_{all} – общее время импульса. Согласно (9) импульс лазера задавался в виде периодической П-образной функцией.

С целью определения областей параметров, для которых возможен нагрев или перегрев биологической ткани задача (1) – (8) была приведена к безразмерному виду. В качестве масштаба времени была взята величина $t_* = R_r^2 / \chi_k$, за масштаб координаты взят размер границы расчетной области R_3, температура обезразмеривалась по начальному значению температуры T_b.

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right), \ 0 \le \xi < \xi_I. \tag{10}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = K_{21} \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right) + \delta K_{21} I_1, \ \xi_I \le \xi < \xi_{II}. \tag{11}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = K_{32} \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right), \ \xi_{II} < \xi \le 1. \tag{12}$$

$$\xi = 0: \ \frac{\partial \theta(0,\tau)}{\partial \xi} = 0. \tag{13}$$

$$\xi = \xi_I: \ \frac{\partial \theta(\xi_I,\tau)_-}{\partial \xi} = \Lambda_{21} \frac{\partial \theta(\xi_I,\tau)_+}{\partial \xi}, \ \theta(\xi_I,\tau)_- = \theta(\xi_I,\tau)_+. \tag{14}$$

$$\xi = \xi_{II}: \ \frac{\partial \theta(\xi_{II},\tau)_-}{\partial \xi} = \Lambda_{32} \frac{\partial \theta(\xi_{II},\tau)_+}{\partial \xi}, \ \theta(\xi_{II},\tau)_- = \theta(\xi_{II},\tau)_+. \tag{15}$$

$$\xi = 1: \ \frac{\partial \theta(1,\tau)}{\partial \xi} = 0. \tag{16}$$

$$\tau = 0: \ \theta(\xi,0) = 1. \tag{17}$$

В уравнениях (10)-(17) введены следующие безразмерные параметры и переменные: $\theta = T/T_b$ – безразмерная температура, $\xi = r/R_r$ – безразмерная координата, $\tau = t/t_*$ – безразмерное время, $\Lambda_{21} = \lambda_{ob}/\lambda_k$ – отношение коэффициентов теплопроводности частицы и оболочки частицы, $\Lambda_{32} = \lambda_r/\lambda_{ob}$ – отношение коэффициентов теплопроводности оболочки частицы и биоткани, $K_{21} = \chi_{ob}/\chi_k$ – отношение коэффициентов температуропроводности частицы и оболочки частицы, $K_{32} = \chi_r/\chi_{ob}$ – отношение коэффициентов температуропроводности оболочки частицы и биоткани, $I_1 = \alpha I_0 R_r^2/(T_b\lambda_2)$ – параметр, определяющий величину прихода тепла от импульса лазера, $\xi_I = R_1/R_3$ – безразмерная координата границы между частицей и оболочкой частицы, $\xi_{II} = R_2/R_3$ – безразмерная координата границы между оболочкой частицы и биотканью. Функция (9) принимала вид:

$$\begin{cases} \delta = 1,\ \tau \in \left[n\cdot\tau_{all}, n\cdot\tau_{all} + \tau_{imp} \right], \\ \delta = 0,\ \tau \in \left[n\cdot\tau_{all} + \tau_{imp}, (n+1)\tau_{all} \right], \end{cases} \quad \tau_{all} = \tau_{imp} + \tau_p,\ n = 1,2,3.... \qquad (18)$$

Здесь $\tau_{all} = \dfrac{t_{all}}{t_*}$, $\tau_p = \dfrac{t_p}{t_*}$, $\tau_{imp} = \dfrac{t_{imp}}{t_*}$.

Решение задачи (10)-(17) было выполнено по неявной разностной схеме методом прогонки [6]. Параметры расчета были выбраны следующими: $K_{21} = 200$, $\Lambda_{12} = 2$, $\xi_I = 0.2$, $\xi_{II} = 0.3$. В расчетах варьировались безразмерные параметры: Λ_{32}, K_{32}, I_1, а также соотношение между временем действия импульса лазера τ_{imp} и временем паузы τ_p. Целью расчетов являлось определение областей безразмерных параметров, для которых имеет место при нагреве биологической ткани. Перегрев биоткани определялся как нагрев всей области расчета до температуры, превышающей 44 С. Полагалось, что температура 44 С соответствует «тепловой смерти» биологической ткани. Из расчетов определялась граница значений параметров, для которой происходил переход от режима перегрева биоткани к режиму неполного разогрева рассматриваемой области. Результаты расчета представлены на рисунках 2, 3. Области под кривыми на рисунках 2, 3 соответствовали значениям параметров Λ_{32}, K_{32}, при которых биоткань в окрестностях наночастицы перегревалась (область под кривыми) за время $\tau = 1$. Области над кривой соответствовали режимам недогрева.

Сплошной кривой представлена область для параметров расчета $\tau_{imp} = 10^{-4}$, $I_1 = 1000$. Время паузы между импульсами задавалось пропорционально времени действия импульса лазера, τ_p=10 τ_{imp}. Увеличение времени действия импульса лазера в 10 раз (пунктирная кривая, рис. 2) приводит к расширению области параметров, соответствующих перегреву биоткани. Последующее уменьшение параметра, отвечающего за величину воздействия лазерного излучения до значения $I_1 = 10$ при $\tau_{imp} = 10^{-4}$ (штрихпунктирная кривая, рис. 2) приводит к уменьшению области значений параметров, для которой возможен перегрев биоткани.

На рисунке 3 представлены результаты расчета для $I_1 = 1000$, K_{21}=200, L_{21}=2, $\tau_{imp} = 10^{-4}$ при разных соотношениях между временем действия импульса и временем паузы между импульсами.

Согласно рисунку 3 наибольшая область прогрева (пунктирная кривая, рис. 3) реализуется при времени действия импульса равном времени паузы. При увеличении времени паузы область параметров, соответствующая перегреву биоткани, сужается и стремится к одному и тому же значению.

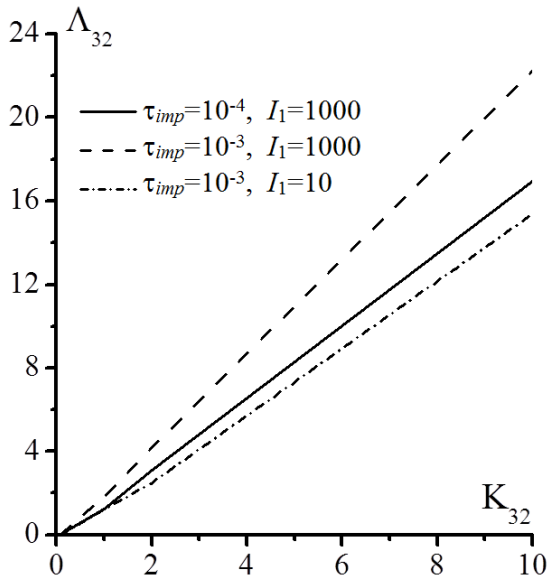


Рисунок 2. Область параметров перегрева биоткани: $\tau_p=10\ \tau_{imp}$, $K_{21}=200$, $L_{21}=2$

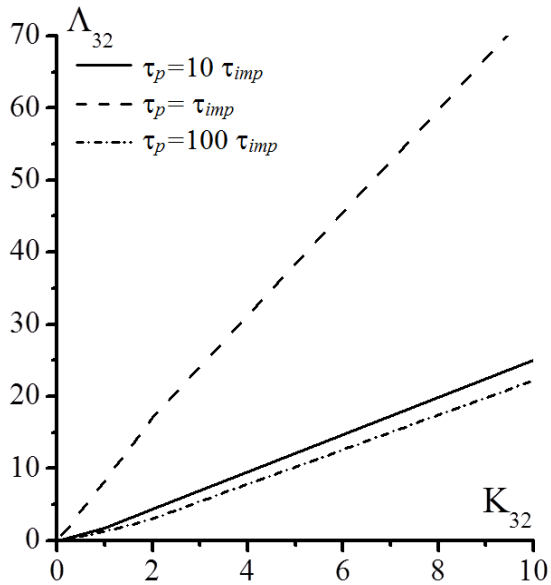


Рисунок 3. Область параметров перегрева биоткани: $\tau_{imp}=10^{-4}$, $I_1=1000$, $K_{21}=200$, $L_{21}=2$

Расчеты показали, что на границе между областью перегрева биоткани и областью частичного нагрева возможна реализация колебательного режима нагрева, когда изотерма, определяющая температуру $T = 44\ ^oC$ перемещается по среде колебательным образом.

Таким образом, в работе выполнено численное исследование задачи прогрева биологической ткани наночастицей, нагреваемой лазерным излучением. Построены области безразмерных параметров, определяющих области прогрева биоткани. Показано влияние безразмерных параметров на размер области прогрева биоткани.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект 17-79-20011).

Список литературы

1. Kolovskaya O.S., Zamay T.N., et al. Aptamer-Targeted Plasmonic Photothermal Therapy of Cancer / Molecular Therapy. Nucleic Acids. – 2017. – Vol. 9. – P. 12–21.

2. Chin L.C., Whelan W.M., Vitkin I.A Perturbative diffusion theory formalism for interpreting temporal light intensity changes during laser interstitial thermal therapy / Phys. Med. Biol. – 2007. – Vol. 52, Iss. 6. – P. 1659-1674.

3. Аветисян Ю.А., Якунин А.Н., Тучин В.В. К проблеме управления локальной гипертермией биоткани: многомасштабное моделирование воздействия импульсного лазерного излучения на среду с внедренными наноразмерными частицами / Квант. Электрон. – 2010. – Vol. 40, Iss. 12. – P. 1081-1088.

4. Сметанников А.С. Моделирование динамики нагрева и охлаждения наночастиц при многоимпульсном лазерном воздействии / Минск: Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси. – 2016.

5. Krainov A.Y., Shapovalov A.V., Moiseeva K.M. Thermal Action of the Nanoparticle Heated by Pulse-Periodic Laser Radiation on a Biotissue / Russian Physics Journal. – 2016. – Vol. 59, Iss.8, P. 1219-1224.

6. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем / М.: Наука. – 1971.

NUMERICAL MODELING OF THERMAL PROCESSES IN BIOKKANI, HEATING NANOPARTICLES

S.K. Chentsova [1a], K.M. Moiseeva [1]

National Research Tomsk State University, Lenin Ave., 36, 634050, Tomsk, Russia

[a] E-mail: sofya.chencova@mail.ru

One of the directions in modern medical physics is the development of methods of minimally invasive microsurgery. These methods involve minimal surgical intervention in the human body and allow to reduce the degree of tissue trauma. In connection with the spread of methods of minimally invasive microsurgery, the problem arises of investigating the thermal and chemical processes that arise when these methods are used. The solution of such problems is possible from the standpoint of interdisciplinary approaches. In particular, in [1] the problem of the action of a nanoparticle on biological tissue was solved. The paper presents the results of research by a team of authors consisting of biologists, physicists and specialists in the field of computational mathematics. Results are obtained on the effect of gold nanoparticles and laser radiation on cancer cell cells. In the present work, the problem of the thermal interaction between a metal two-layer nanoparticle and a biological tissue has been solved. The aim of the work is to determine the characteristics of heating the tissue from the bilayer nanoparticle heated by periodic laser radiation.

It is believed that the particle consist of the quartz covered with a gold layer. The particle is in biological tissue and is exposed to periodic laser radiation. The laser pulse heats the particle shell and the particle itself. The medium is heated by heat exchange on the border of the biological tissue -heated particle shell. The statement of the problem is based on [2], taking into account that the particle is a two-layer particle, and all the radiation that comes to the particle is absorbed by the particle shell and the particle itself with the absorption coefficients characteristic for a given material.

The mathematical model is based on the solution of the heat equation in spherical coordinates for the particle, the shell of the particle, and the biological tissue surrounding the particle. At the initial time, the temperature throughout the calculation area was constant and equal to the normal human temperature, T = 36.6 °C.

The solution of the problem was carried out numerically with an implicit difference scheme by the sweep method. The displacement of the isotherm T = 44 ° C was determined from the calculation using the biological tissue . It was believed that T = 44 ° C corresponds to the "thermal death" of the biological tissue . The laser action period was set as the sum of the time and laser stopping time. The calculation varied the duration of action and the relationship between the stopping times and the action of the laser. An analysis of the rate of heating of the tissue depending on the characteristics of the laser radiation showed that as the time of action and the time of the laser pause increase with the same ratio between these times, the warming up of the medium is uniformly and the faster the greater this increase.

The research was carried out by financial support the Russian Science Foundation (project No. 17-79-20011).

References

1. Kolovskaya O. S., Zamay T. N., et al. Aptamer-Targeted Plasmonic Photothermal Therapy of Cancer / Molecular Therapy. Nucleic Acids. – 2017. Vol. 9. – P. 12–21.

2. Krainov A.Y., Shapovalov A.V., Moiseeva K.M. Thermal Action of the Nanoparticle Heated by Pulse-Periodic Laser Radiation on a Biotissue / Russian Physics Journal. – 2016. – Vol. 59, Iss. 8. – P.1219-1224.

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СВ-СИНТЕЗА КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА ИЗ ТРЕХКОМПОНЕНТНОЙ ПОРОШКОВОЙ СМЕСИ

Чумаков Ю.А.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,
Россия, г. Томск, просп. Академический, 2/4, 634055
E-mail: chya@ispms.tsc.ru

Введение

Соединения, полученные на основе системы Ti-Al-C, относятся к MAX-фазам. MAX-фазы представляют собой тройную систему $M_{n+1}AX_n$, где M – переходный металл, A - элемент A-подгруппы таблицы Менделеева, X- углерод, кремний или азот [1]. Наиболее активное исследование тройных систем на основе MAX-фаз начались вначале 2000-х годов [2]. Из анализа экспериментальных работ по синтезу композитов методом СВС в системе Ti-Al-C следует, что если основной задачей синтеза является получение композиционных материалов, содержащих в продуктах реакции MAX-фазы заданного состава Ti_xAlC_y, то необходимо задать нужные условия эксперимента, подобрать необходимое процентное содержание компонент порошковой смеси, приготовить прессовку реагентов с целью минимизации нежелательных карбидов и алюминидов титана. В экспериментальных работах варьирования условий эксперимента (температуру и время инициирования, варианты инертной среды и т.д.) в широком диапазоне весьма затруднительно. Поэтому необходимо привлекать математическое моделирование. Работ по моделированию СВ-синтеза композиционных материалов в тройных системах в литературе не было найдено.

В связи с этим целью настоящей работы заключается в разработке и исследования модели синтеза горением композиционного материала, содержащего MAX-фазы, в системе Ti-Al-C.

Математическая постановка задачи

Математическую модель процесса инициирования реакции в порошковой смеси рассмотрим в следующей постановке. Образец представляет собой цилиндр радиуса *R,* состоящий из двух слоев порошковых насыпок, поставленных друг на друга. Полагаем что слой 1 (воспламенитель) представляет собой стехиометрическую смесь порошков титана *Ti* и кремния *Si*, толщина насыпки равна *l* (т.е. $\eta_{01}(Ti)$=73.9 масс.%, $\eta_{02}(Si)$ =26.1 масс. % или *Ti*/*Si*=5/3 в ат %), что соответствует реакции I. Второй слой толщиной *L* (поджигаемая смесь) – смесь порошков титана *Ti* и углерода *C* (сажи) и алюминия *Al*. Полагаем, что температура по диаметру образцов однородна; реакции в воспламенителе и поджигаемой смеси не сопровождаются выделением остаточных газов.

В уравнении энергии учитываем теплопотери в окружающую среду за счет конвекции (если синтез осуществляется в атмосфере инертного газа) и за счет теплового излучения. Таким образом, уравнения теплопроводности принимают вид

$$(c\rho)_{eff}\frac{\partial T_k}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda_{eff}\frac{\partial T_k}{\partial x}\right)+\sum_j Q_j\phi_j\left(\eta_j,T_k\right)-\frac{2\alpha}{R}\left(T_k-T_0\right)-\frac{2\varepsilon_0\sigma_0}{R}\left(T_k^4-T_0^4\right), \qquad (1)$$

где k=1,2, индекс «1» относится к воспламенителю, индекс «2» к поджигаемой смеси, T– температура, η_k – доля реагента, t – время, x – пространственная координата, λ, c, ρ – эффективные теплопроводность, теплоемкость и плотность составов, Q – тепловые эффекты суммарных реакций, α – коэффициент теплоотдачи в окружающую среду, σ_0 – постоянная Стефана-Больцмана, ε_0 - степень черноты, j=1 для воспламенителя, $j=\overline{2,9}$ для реакционной смеси.

Считаем, что химические превращения в первом реакционном слое описываются суммарной реакционной схемой:

$$\text{I } 5Ti+3Si=Ti_5Si_3.$$

Анализируя фазовые диаграммы систем Ti-C, Ti-Al, Al-C, Ti-Al-C [11], выпишем систему реакций для второго слоя, которая включает 8 реакции:

$$\text{II } Ti+C\rightarrow TiC,$$

$$\text{III } Ti+Al\rightarrow TiAl,$$

$$\text{IV } TiAl+TiC\rightarrow Ti_2AlC,$$

$$\text{V } 2Ti+Al+C\rightarrow Ti_2AlC,$$

$$\text{VI } Ti+3Al\rightarrow TiAl_3,$$

$$\text{VII } 3Ti+Al\rightarrow Ti_3Al,$$

$$\text{VIII } Ti+TiC\rightarrow Ti_2C,$$

$$\text{IX } 3Ti+Al+2C\rightarrow Ti_3AlC_2.$$

Для того чтобы определить термодинамическую вероятность протекания реакций системы, была проведена предварительная оценка величин энтальпии, энтропии и энергии Гиббса для каждой реакции [3,4]. Конечно, реальный процесс реакционного взаимодействия в трехкомпонентной смеси будет включать не один десяток реакций, но для учета этого в модели необходимо: во-первых, провести специальные эксперименты для исследования механизма химических реакций в системе Ti-Al-C; во-вторых, определить кинетические параметры для всех возможных реакций. В настоящее время экспериментов по определению механизма и кинетических параметров реакций для рассматриваемой в работе трехкомпонентной системы не найдено. Поэтому, в работе ограничимся 8 основными реакциями и будем исследовать модель синтеза композиционного материал в рамках принятых допущений.

Введем следующие обозначения для молярных концентрация компонент: m_1=[Ti], m_2=[Si], m_3=[C], m_4=[Al], m_5=[TiC], m_6=[TiAl], m_7=[Ti_2AlC], m_8=[$TiAl_3$], m_9=[Ti_3Al_2], m_{10}=[Ti_2C], m_{11}=[Ti_3AlC_2], m_{12}=[Ti_5Si_3]. Кинетические функции в уравнениях для воспламенителя и для реакционной смеси в соответствии с законом действующих масс имеют вид

$$\Phi_1(\eta,T)=k_{01}\eta_1^5\eta_2^3,\ \Phi_2(\eta,T)=k_{02}\eta_1\eta_3,\Phi_3(\eta,T)=k_{03}\eta_1\eta_4,\Phi_4(\eta,T)=k_{04}\eta_5\eta_6,\ \Phi_5(\eta,T)=k_{05}\eta_1^2\eta_3\eta_4,$$
$$\Phi_6(\eta,T)=k_{06}\eta_1\eta_4^3\ ,\ \Phi_7(\eta,T)=k_{07}\eta_1^3\eta_4,\ \Phi_8(\eta,T)=k_{08}\eta_1\eta_5\ ,$$

$$\Phi_9(\eta,T)=k_{09}\eta_1^3\eta_2\eta_3.$$

Дополнительно учитываем сильно торможение реакции всеми образующимся продуктами

$$\phi_j(\eta,T)=K\cdot\Phi_j(\eta,T)\exp\left(-\frac{E_{aj}}{R_gT_j}\right)\exp\left(-b\sum_{i=5}^{12}\eta_i\right)$$

В результате кинетические уравнения принимают вид

$x\le l$:

$$\frac{d\eta_1}{dt}=-5\cdot S_1\phi_1;\ \frac{d\eta_2}{dt}=-3\cdot S_2\phi_1;\ \frac{d\eta_{12}}{dt}=S_{12}\phi_1 \qquad (2)$$

$l<x\le l+L$:

$$\frac{d\eta_1}{dt}=S_1(-\phi_2-\phi_3-2\phi_5-\phi_6-3\phi_7-\phi_8-3\phi_9),\ \frac{d\eta_3}{dt}=S_3(-\phi_2-\phi_5-\phi_9),$$

$$\frac{d\eta_4}{dt} = S_4\left(-\phi_3 - \phi_5 - 3\phi_6 - \phi_7 - \phi_9\right), \frac{d\eta_5}{dt} = S_5\left(\phi_2 - \phi_3 - \phi_7\right), \frac{d\eta_6}{dt} = S_6\left(\phi_3 - \phi_4\right), \quad (3)$$

$$\frac{d\eta_7}{dt} = S_7\left(\phi_4 + \phi_5\right), \frac{d\eta_8}{dt} = S_8\phi_6, \frac{d\eta_9}{dt} = S_9\phi_7, \frac{d\eta_{10}}{dt} = S_{10}\phi_8, \frac{d\eta_{11}}{dt} = S_{11}\phi_9,$$

где

$$\eta_k = \frac{m_k}{\sum_{j=1}^{12} m_j}, k = \overline{1,12} ,$$

k_{0k} – предэкспоненты; E_{ak} – энергии активации реакций; R_g – универсальная газовая постоянная; b_k – параметры торможения, S_k –отношение молярной массы реагента к молярной массе продукта реакции, K – корректирующий множитель, $k = \overline{1,12}$. Подход, который предлагает использовать корректирующий множитель K для кинетических функций предложен, обоснован и апробирован в работах [6-8]. Значение K подбирается сопоставлением теоретических расчетов данным эксперимента для каждой системы отдельно (из сравнения максимальной температуры и (или) скорости распространения волны реакции).

Полагаем, что между слоями имеет место идеальный тепловой контакт:

$$x = l : \begin{cases} \lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial x} = \lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial x} \\ T_1 = T_2 \end{cases} \quad (4)$$

Инициирование реакции в воспламенителе осуществляется искрой

$$x = 0 : \lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial x} = q_0 \delta(t), \quad (5)$$

где q_0 – удельная мощность источника; $\delta(t)$ – дельта-функция Дирака.
На удалении от границы раздела слоев поток тепла отсутствует:

$$x = l + L : \frac{\partial T_2}{\partial x} = 0 . \quad (6)$$

В начальный момент времени имеем:

$$t = 0 : \quad T_1 = T_2 = T_0, \eta_1 = \eta_{10}, \eta_2 = \eta_{20}, \eta_3 = \eta_{30}, \eta_4 = \eta_{40}, \quad (7)$$

где T_0 – начальная температура, η_{01}, η_{02}, η_{03}, η_{04} – начальные концентрации компонент смеси.
В соответствии с представлениями термодинамики [9] при фазовых переходах первого рода физические свойства системы меняются скачкообразно, причем теплоемкость системы стремится к бесконечности при $T \to T_{ph}$. Поэтому, плавление реагентов учтем через изменение эффективных теплоёмкости и плотности в окрестности температуры плавления. Математически это можно записать следующим образом [10]

$$(c\rho)_i = \begin{cases} (c\rho)_s, & T < T_{ph,} \\ (c\rho)_L, & T \geq T_{ph}, \end{cases} + Q_{ph}\rho_s \delta\left(T - T_{ph}\right),$$

где индексы s и L – параметры твердой и жидкой фазы соответственно, Q_{ph}- теплота фазового перехода, δ – дельта-функция Дирака, T_{ph} - температура фазового перехода, $i = \overline{1,4}$.
В расчетах δ заменяется экспоненциальной функцией сглаживания [10] и принимает вид

$$\delta = \frac{1}{\sqrt{\pi}\gamma} \exp\left(-\left(\frac{T - T_{ph}}{\gamma}\right)^2\right),$$

где γ – параметр сглаживания, π – число Пи. Полагаем, что продукты реакции тугоплавкие. С физической точки зрения, это предположение соответствует быстрому отводу тепла из реакционной смеси после прохождения волны горения (обдув реакционной смеси), при этом не успевает произойти разложение продуктов реакции.

Поскольку в процессе СВС исходная прессовка реагентов пористая, структура порошковой системы изменяется и в произвольный момент времени неизвестна, то в расчетах используем эффективные свойства. Из термодинамики известно, что теплоемкость является аддитивной величиной [9], поэтому для оценки эффективной теплоемкости и плотности системы используем правило смеси. Расчет эффективной теплопроводности проводим по аналогии с определением теплового сопротивления параллельно расположенных слоев [11]. Используем зависимость эффективных свойств от пористости, предложенную в [12].

$$(c\rho)_{eff} = (1-\varepsilon_p)\sum_{i=1}^{n} c_i\rho_i\eta_i \ , \ \lambda_{eff} = \left(\frac{1-\varepsilon_p}{1+11\cdot\varepsilon_p^2}\right)\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\eta_i$$

где ε_p– пористость, n=12.

В модели учитывали влияние изменения пористости на свойства композита, для этого использовали соотношение, полученное в теории спекания [12]

$$\frac{d\varepsilon_p}{dt} = -\frac{9}{4}\frac{\varepsilon_p\gamma(1-\varepsilon_p)^2}{\mu r_0} \qquad (8)$$

где μ – вязкость, γ – коэффициент поверхностного натяжения, r_0 – радиус частиц. Полагаем, что компоненты смеси имеют одинаковый размер, r_0=100 мкм.

Задача была решена численно. Дифференциальные уравнения, входящие в систему (1)-(8), были аппроксимированы разностными. Полученная система линейных алгебраических уравнений была решена с использованием метода прогонки Кинетические уравнения решены методом Эйлера. Алгоритм решения задачи и нахождения скорости реакционного фронта описан в [13].

При решении задачи использованы данные [14-16]. Теплофизические свойства титана, кремния, углерода, алюминия и соединений на их основе представлены в таблице 1

Таблица.1. Теплофизические свойства

Вещество	ρ_s/ρ_L, кг/м^3	λ, Вт/(м^{2}К)	c_s/c_L, Дж/(кг·К)	T_{ph}, К	Q_{ph}, Дж/кг
Ti	4540/4120	22	498/687	1941	358
Si	2330/2520	150	690/979	1687	1802
C	2250	1.59	712	4620	2169
Al	2700/2550	203.5	920/1176.7	933	398
Ti_5Si_3	4320	26.8	430	2403	
TiC	4900	21.9	696	3533	
Ti_2C	4700	19	222	1921	
TiAl	3820	21	662	1753	
$TiAl_3$	3360	8.3	707	1313	
Ti_3Al	4220	7	734	1660	
Ti_2AlC	4110	36	385	1898	
Ti_3AlC_2	4240	25	711	1853	

Значения кинетических параметров суммарных реакций, с которыми проводились расчеты, представлены в таблице 2 [17-20]. В реакционной схеме I-IX (таблица 2) используется только одно значение k_{01} определенное экспериментально (реакция

$5Ti+3Si \rightarrow Ti_5Si_3$). Для остальных реакций экспериментальные работы по определению k_0 либо отсутствуют, либо полученные значения k_0 существенно зависят от исходных условий эксперимента и отличаются на порядки у разных авторов. Поэтому, k_{0i} для реакций II-IX рассчитываются теоретически, для этого используется подход, предложенный в [21].

Таблица 2. Кинетические параметры реакции

№	Реакция	k_0, 1/с	E_a, Дж/моль	Q, Дж/см^3
I	$5Ti+3Si \rightarrow Ti_5Si_3$	$5 \cdot 10^9$	193000	7685
II	$Ti+C \rightarrow TiC$	$0.157 \cdot 10^{14}$	117000	15188
III	$Ti+Al \rightarrow TiAl$	$0.112 \cdot 10^{15}$	180000	3889
IV	$TiAl+TiC \rightarrow Ti_2AlC$	$0.1325 \cdot 10^{15}$	71900	1452
V	$2Ti+Al+C \rightarrow Ti_2AlC$	$0.159 \cdot 10^{14}$	71900	7882
VI	$Ti+3Al \rightarrow TiAl_3$	$0.861 \cdot 10^{14}$	169000	3846
VII	$3Ti+Al \rightarrow Ti_3Al$	$0.13 \cdot 10^{13}$	200000	2432
VIII	$Ti+TiC \rightarrow Ti_2C$	$0.421 \cdot 10^{12}$	133000	-2644
IX	$3Ti+Al+2C \rightarrow Ti_3AlC_2$	$0.887 \cdot 10^{14}$	71900	2224

В расчетах фиксировали размеры и толщину слоев цилиндра: l=1см, L=4см, R_1=R_2=2.5 см и $\alpha=10^3$ Вт/(м^{2}К), $\sigma=5.67 \cdot 10^{-8}$ Вт/(К^{4}м^2), b_1=b_2=10, ε_p=0.4, μ= 0,012 кг/(м·с), γ= 1.65 Н/м, $K=10^{-7}$ остальные параметры варьировались.

Результаты и анализ

Для дальнейшего анализа фазового содержания реагентов и продуктов реакции определим среднее значение концентрации компонентов реакционной смеси следующим образом

$$\zeta_i = \frac{1}{L}\int_l^L \eta_i(x)dx,\ i = \overline{1,12},$$

На рисунке 1 представлены расчетные значение температуры и массовое процентное содержание компонент по фазам – реагентов Ti, C, Al и продуктов реакции TiC, Ti_2AlC, Ti_3AlC_2. Содержание остальных фаз составляет менее 0.5 % (не представлены на рисунке). Как видно из рисунка, после инициирования в воспламенители волна реакции распространяется в реакционной смеси с постоянной скоростью (рис. 1*а*). Концентрация титана в смеси падает до нуля после прохождение волны (рис. 1*б*). Остальные реагенты расходуются не полностью. Так, например доля непрореагировавшего алюминия составляет 2-3 % (рис. 1*в*), углерода около 10 %. Максимальной значение концентрации Ti_3AlC_2 и TiC достигается в реакционном фронте, затем наблюдается их уменьшение (рис. 1*г*,*е*). Максимальная концентрация Ti_2AlC достигается за реакционным фронтом (рис. 1*д*). По-видимому, к определенному моменту времени происходит накопление TiC и TiAl, что вызывает образование Ti_2AlC в двух реакциях: непосредственно из компонентов исходной реакционной смеси и через реакцию между карбидом и алюминидом титана, что подтверждает минимум на кривой концентрации TiC (рис. 1*г*).

Для оценки влияния значения исходной температуры реакционной смеси (T_0) на процесс фазообразования продуктов реакции были проведены расчеты среднего значения концентрации продуктов реакции и скорости распространения фронта для двух разных составов порошковой смеси (рис. 2).

Как видно из рисунка 2 повышение температуры реакционной смеси влияет на процесс твердофазного синтеза для обоих составом подобным образом. Во-первых, при повышении T_0 происходит ускорение реакции, увеличивается скорость распространения фронта реакции. Повышение T_0 от 300 до 500 К приводит к увеличению доли Ti_2AlC на 7%, и уменьшению Ti_3AlC_2 на 3% и TiC на 2 % для состава I. Для второго рассматриваемого состава (II) при

изменении T_0 от 300 до 500^0C концентрация Ti_2AlC увеличивается на 5%, а концентрация Ti_3AlC_2 и TiC падает на 2% на 1 %, соответственно. Также отметим, что для состава I доля карбида титана в полученном композите выше (составляет 13±2 %), чем для состава II (8±2 %). Экспериментальные исследования процесса СВ-синтеза в порошковых прессовках Ti-Al-C с аналогичным процентным содержанием компонент показали , что содержание карбида титана в полученном композите TiC варьируется от 10 до 20%.

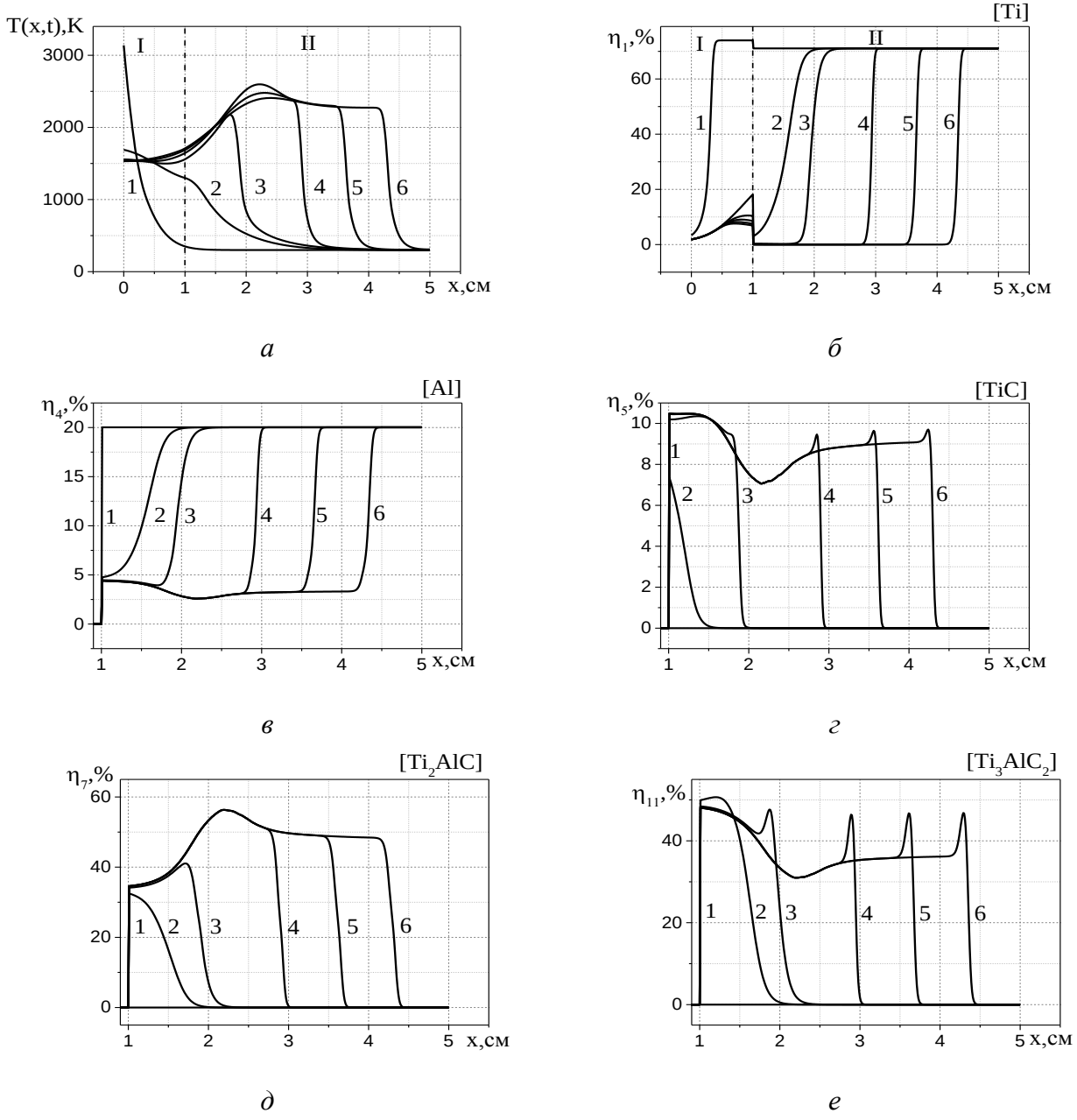


Рисунок 1. Температура (а) и массовое процентное содержание компонент (б-е) смеси. I- воспламенитель, II – реакционная смесь, q_0=1.5 кВт/см^2, 74% Ti+ 14% Al +12% C, t=1) 0.5; 2) 3; 3) 3.7;4) 4; 5) 4.3; 6) 4.6 с

Выводы

В работе предложена модель синтеза горением в трехкомпонентной системе Ti-Al-C с учетом стадийности превращений. Результаты исследования позволили изучить влияние состава исходных регентов и начального подогрева реакционной смеси на процесс фазообразования при твердофазном синтезе. В целом модель может дать полезные

рекомендации для экспериментального осуществления твердофазного синтеза композитов заданного состава из трехкомпонентной порошковой смеси.

Работа выполнена при поддержке РНФ, грант № 17-19-01425.

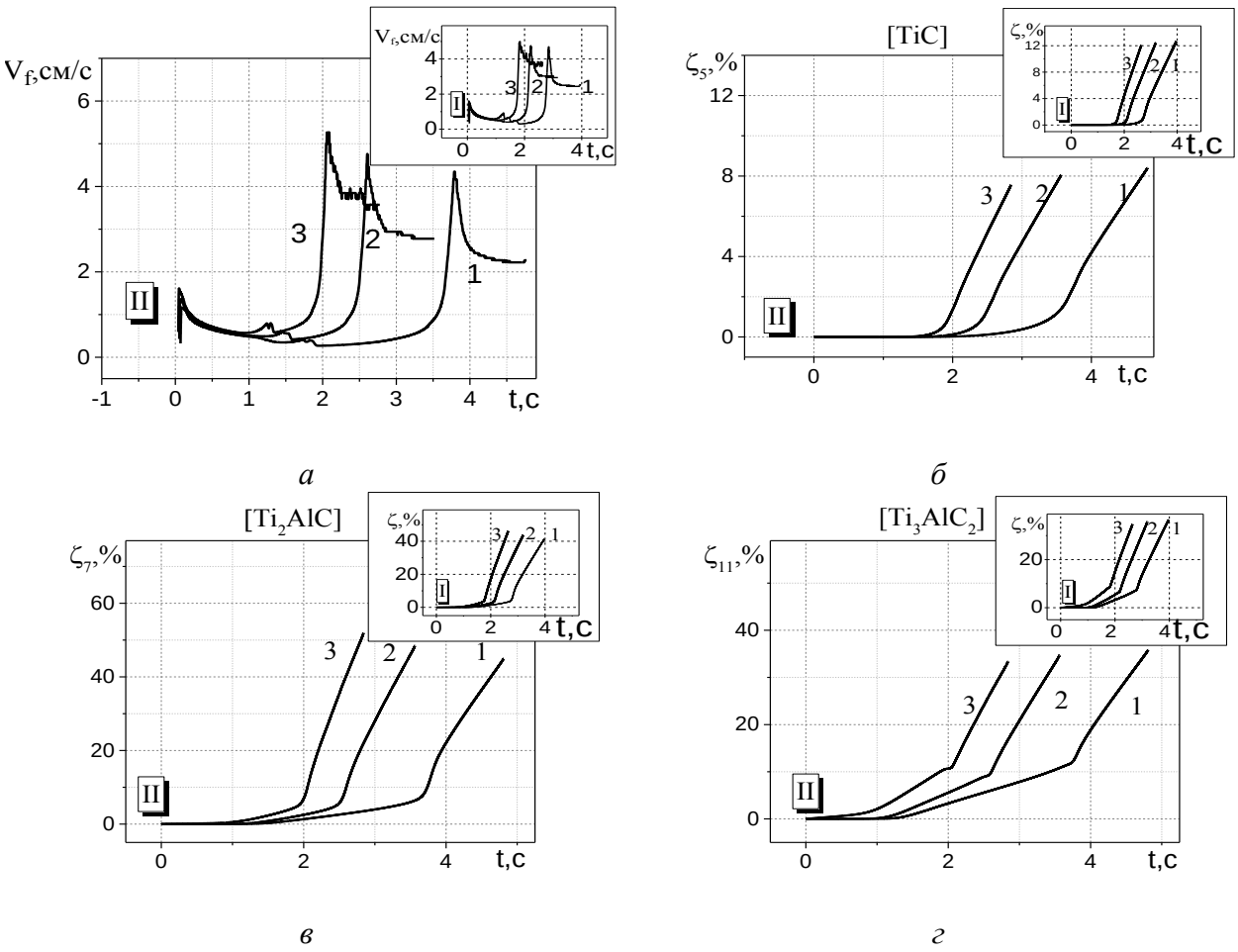


Рис.2. Зависимость скорости распространения фронта реакции (а) и среднего значения концентрации фаз (б) от начальной температуры смеси, q_0=1.5 кВт/см^2, I – Ti_3AlC_2, II – Ti_2AlC, 1. T_0=300; 2. T_0=400; 3. T_0=500 К.
Расчетный стехиометрический состав порошковой смеси: I Ti_3AlC_2: 74% Ti+ 14% Al +12% C, II Ti_2AlC: 71% Ti+ 20% Al +9% C.

Список литературы

1. Бажин П.М., Столин А.М. СВС-экструзия материалов на основе МАХ-фазы Ti-Al-C // Доклады Академии наук. – 2011.– Т. 439, № 5. – С. 630-632.

2. Barsoum M.W., El-Raghy T., Ali M. Processing and characterization of Ti2AlC, Ti0AlN, and Ti2AlC0.5N0.5 // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2000. – Vol. 31, № 7. – P. 1857–1865.

3. Al-C-Ti Ternary Phase Diagram Evaluation : official site. – Switzerland AG. – URL: https://materials.springer.com/msi/docs/sm_msi_r_10_014870_02.

4. Киреев В.А. Методы термодинамических расчетов / М.: Химия – 1976.

5. Карапетьянц М.Х., Карапетьянц М.Л. Основные термодинамические константы неорганических и органических веществ / М.: Химия. – 1968.

6. Knyazeva A.G., Kryukova O.N, Sorokova S.S., Shanin S.A. Coupling Models of New Material Synthesis in Modern Technologies. Handbook of Mechanics of Materials ed. by Hsueh CH. et al. / Singapore: Springer. – 2018, P. 1–42.

7. Knyazeva A.G, Sorokova S.N. Simulation of coating phase structure formation in solid phase synthesis assisted by electron-beam treatment // Theoretical foundations of chemical engineering. – 2008. – Vol. 42., Iss. 4. – P.457-465.

8. Knyazeva A.G., Sorokova S.N. Numerical study of the influence of the technological parameters on the composition and stressed-deformed state of a coating synthesized under electron-beam // Theoretical foundations of chemical engineering. – 2010. – Vol. 44, Iss 2. – P. 184–197.

9. Базаров И.П. Термодинамика / М.: Высшая школа. – 1991.

10. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Вычислительная теплопередача / М: Едиториал УРСС. – 2003.

11. Лыков А.В. Теория теплопроводности / М.: Высшая школа. – 1967.

12. Скороход В.В. Реологические основы теории спекания / Киев: Наукова Думка. – 1976.

13. Чумаков Ю.А., Князева А.Г., Прибытков Г.А Синтез композитов на основе титана в режиме горения // Химическая физика и мезоскопия. – 2017.– Т.19, № 4. – С.524-537.

14. Бабичев А.П., Бабушкина Н.А., Братковский А.М. и др. Физические величины: Справочник. / М.: Энергоатомиздат. – 1991.

15. Qian X., Li Y., He X., Chen Y., Yun S. Electrical and Thermal Properties of Ti3AlC2 at High Temperature // Journal of Ceramic Science and Technology. – 2011. – Vol. 2, Iss 3. – P. 155–158.

16. Yeh C.L., Chen, W.H. Hsu C.C. Formation of titanium silicides Ti5Si3 and TiSi2 by self-propagating combustion synthesis // Journal of Alloys and Compounds. – 2007.– Vol. 432. – P. 90–95.

17. Capaldi M. J.. Said A. Wood J. V. Reaction Synthesis of TiC and Fe-TiC composites // ISIJ International. – 1997. –Vol. 37, Iss 2. – P. 188–193.

18. Pang W.K., Low I.M. Diffraction Study of Thermal Dissociation of Ti3AlC2 in Vacuum // Ceramic materials. – 2010. – V 62, Iss 3.– P. 272–274.

19. Sadeghi E., Karimzadeh F., Abbas M.H. Thermodynamic analysis of Ti–Al–C intermetallics formation by mechanical alloying // Journal of Alloys and Compounds. – 2013. – Vol. 576. – P. 317–323.

20. Wang T., Liu R. Y., Zhu M. L., Zhang J. S. Activation energy of self-heating process studied by dsc Combustion synthesis mixture of Ti–75 at% Al // Journal of Thermal Analysis and Calorimetry. – 2002. – V. 70. – P. 507–519.

21. Daniels F., Alberty R.A. Physical Chemistry. / New York: Willey. – 1961.

NUMERICAL INVESTIGATION SHS COMPOSITE FROM A THREE-COMPONENT POWDER MIXTURE

Yu.A. Chumakov

Institute of Strength Physics and Materials Scienc SB RAS,

pr. Akademicheskii, 2/1, 634055, Tomsk, Russia

E-mail: chya@ispms.tsc.ru

Self-propagating high-temperature synthesis (SHS) is the simplest and low energy consumption method of materials production including triple composites based on titanium. However, this process is nonequilibrium one and the not always given stoichiometric composition of the powder mixture contribute to the production of the synthesized composite of the desired composition in the SHS process. Therefore, the purpose of this work is to develop and study a model for the synthesis of composite materials in a Ti-Al-C powder mixture by SHS mode.

The mathematical model of the process of initiation of the reaction in a powder mixture is considered. The sample is a cylinder of radius R consisting of two layers of pressing powders (figure). Let the temperature with respect to the diameter of the samples is uniform; the igniter and ignition mixture are gas-free. The layer 1 (igniter) is supposed to be a stoichiometric mixture of Ti and Si powders, the thickness of the fill is l (i.e., η_{01} (Ti) = 73.9 wt%, η_{02} (Si) = 26.1 wt% or Ti/Si = 5/3 in at%), which corresponds to the reaction

$$\text{I) } 5Ti + 3Si = Ti_5Si_3.$$

The second layer (reaction mixture) has thickness L and it consists of the mixture of titanium, carbon and aluminum powders. From the analysis of the experimental works devoted to investigation of the phase composition of materials obtained by SHS in the Ti-Al-C ternary systems and in accordance with the phase diagram of the Ti-C, Ti-Al, Al-C, Ti-Al-C systems, a system of chemical reactions for second layer includes 8 reactions:

$$\text{I) } Ti+C\rightarrow TiC,\ \text{III) } Ti+Al\rightarrow TiAl,\ \text{IV) } TiAl+TiC\rightarrow Ti_2AlC,\ \text{V) } 2Ti+Al+C\rightarrow Ti_2AlC,$$
$$\text{VI) } Ti+3Al\rightarrow TiAl_3,\ \text{VII) } 3Ti+Al\rightarrow Ti_3Al,\ \text{VIII) } Ti+TiC\rightarrow Ti_2C,\ \text{IX) } 3Ti+Al+2C\rightarrow Ti_3AlC_2.$$

In the energy equation, the heat losses to the environment due to convection and due to thermal radiation are assumed. The kinetic equation for concentration of phases corresponding to the reaction with strong retardation of layer reaction product is considered. The melting of the component (reactants) is taken into account by changing the effective heat capacity and density in the vicinity of the melting temperature.

Since the structure of the powder system is changing and unknown at any time, the rule of the mixture to calculate the effective properties of initial substance and synthesized composite is used. To evaluate the porosity change, the relation obtained in the sintering theory for the case of the action only capillary forces is used.

The suggested model made it possible to explain the phenomena observed in the experiment. The character of the influence of the composition of the initial regents and the initial heating of the reaction mixture on the phase formation during solid-phase synthesis was showed in work. The calculations shown that an increase in the initial temperature of the reaction mixture from 300 to 500 K leads to an increase in the concentration of the Ti_2AlC phase and a decrease in the mass fraction of the Ti_3AlC_2 and TiC phases, regardless of the composition of the initial powder mixture. A good agreement between the calculated and experimental data suggests that the model can provide useful recommendations for solid-phase synthesis of composites of a given composition from a three-component powder mixture.

The work is supported by Russian Science Foundation (RSF), grunt number 17-19-01425

3D ПЕЧАТЬ, КАК ПРИРОДОПОДОБНЫЙ МЕТОД ПОЛУЧЕНИЯ ОПТИМИЗИРОВАННЫХ ЭНДОПРОТЕЗОВ

Шилько С.В. [1], Рябченко Т.В. [1], Панин С.В. [2,a], Шалобаев Е.В. [3]

[1] *Институт механики металлополимерных систем им. В.А. Белого НАН Беларуси, Беларусь, г. Гомель, ул. Кирова 32а, 246050*

[2] *Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Россия, г. Томск, просп. Академический, 2/4, 634055*

[3] *Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, Россия, г. Санкт-Петербург, Кронверкский проспект, д.49, 197101*

E-mail: svp@ispms.tsc.ru

Введение

В настоящее время устойчивому развитию человечества препятствует глобальный цивилизационный кризис, обусловленный нехваткой ресурсов. При существующих способах производства до 90% энергетических и материальных затрат идет в «отвал», загрязняя окружающую среду, тогда как природа свои конструкции «выращивает» и весьма рационально утилизирует [1]. В этой связи ученые видят решение в создании природоподобной техносферы. Аддитивные технологии (АТ) являются природоподобным способом изготовления не только отдельных деталей, но и весьма сложных конструкций.

Так, аналогично клеточному росту биологических прототипов, путем управляемого массопереноса (послойного синтеза или наплавки биосовместимых материалов), т.е. практически безотходным и энергоэффективным способом, могут быть сформированы имплантаты (эндопротезы) для ортопедии суставов. Представляется возможным получение оптимального градиента деформационных свойств материала эндопротезов по глубине, что существенно улучшает их прочностные и антифрикционные характеристики. Прототипирование указанных имплантатов с рабочими поверхностями сложного профиля без использования дорогостоящей формообразующей оснастки, сокращая стадии технологической подготовки производства, наилучшим образом удовлетворяет требованию снижения материальных, временных и трудовых затрат при ортопедическом лечении конкретного пациента [2].

Вместе с тем, целью настоящей работы является анализ существующих трудностей 3D печати эндопротезов суставов, изготавливаемых из термопластичных дисперсно-наполненных композитов [3-6].

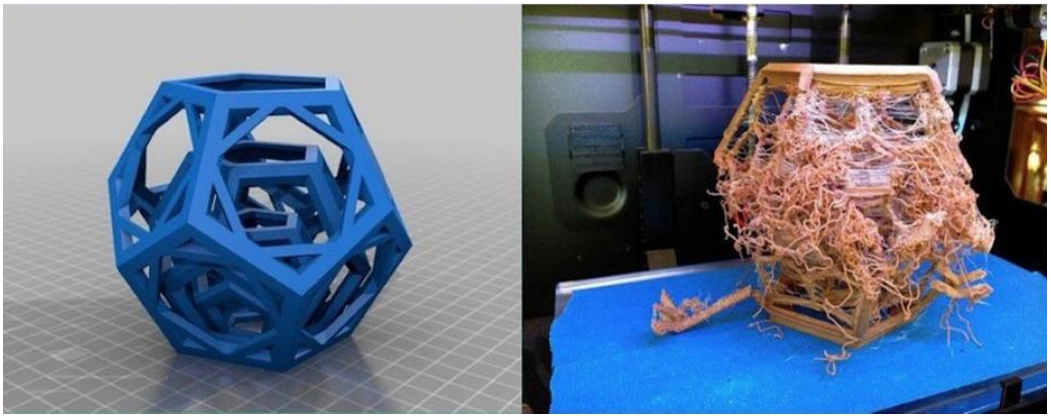
Проблематика аддитивных технологий изготовления эндопротезов

Прежде всего, отметим необходимость импортозамещения не только аппаратной базы, но и программного обеспечения, а также расходных материалов для 3D печати. Пока при проектировании, в основном, используются программные комплексы иностранных компаний USG, IBM, Autodesk, SolidWorks, Siemens PLM Software и др. Они охватывают всю цепочку управления технологическими процессами и жизненным циклом изделия, позволяя не только выполнять трехмерное моделирование, но и проводить анализ готовой модели с учетом особенностей производства и используемого расходного материала.

Но зарубежные программные продукты, как правило, слабо адаптированы к отечественным стандартам, что приводит к дополнительным затратам при их внедрении в производственный процесс. Использование закрытых форматов программного обеспечения затрудняет разработку дополнительного функционала, необходимого для создания систем автоматизированного проектирования. В ряде случаев зарубежные компании ограничивают доступ к новым версиям своих программ, основываясь на законодательных ограничениях. В этой связи можно рекомендовать альтернативное программное обеспечение российских

компаний «Аскон» и «Топ Системы», не уступающее по своим возможностям зарубежным программным комплексам.

В результате операций 3D-сканирования, некорректного 3D-моделирования, конвертирования или другого преобразования сетка модели становится непропорционально плотной, что значительно увеличивает объем STL-файла. Перекрытие ортогональных сеток может привести к ошибкам при чтении файла некоторыми слайсерами (рис. 1), поскольку пересекающиеся области можно интерпретировать, как внешний вид модели. Оптимально ориентированная модель печатается быстрее при уменьшении расхода материала и вероятности сбоев при печати.



а *б*

Рисунок 1. Реализация 3D-печати при корректной (а) и некорректной (б) подготовке 3D-моделей

Специфическими ограничениями 3D печати эндопротезов, как узлов трения, функционирующих в среде живого организма, являются:

1. невозможность экструдирования ряда антифрикционных биосовместимых полимерных материалов и получения заданной микропористости поверхности слоев;
2. существенное влияние температурных режимов на качество изделия;
3. проблема сборки деталей, полученных с использованием аддитивных технологий, из-за низкой размерной точности;
4. высокая шероховатость рабочей (контактной) поверхности, требующая дополнительной обработки;
5. сниженные механические характеристики и плотность материала в сравнении с изделиями, получаемыми по традиционным технологиям.

Рассмотрим перечисленные проблемы более подробно. Значительные усилия предпринимаются для повышения экструдируемости полимерных материалов. К примеру, сверхвысокомолекулярный полиэтилен (СВМПЭ), обладая достаточно высокими характеристиками прочности, а также низким коэффициентом трения, высокой износо- и химической стойкостью в агрессивных средах, находит применение в медицине для изготовления ортопедических имплантатов. Однако из-за большой длины полимерных цепей СВМПЭ имеет близкий к нулю показатель текучести расплава, равный 0,06 г/10 мин, что существенно ограничивает возможности его переработки традиционными для термопластичных полимеров методами шнековой экструзии, литья под давлением и др. В последнее время активно проводятся исследования по использованию аддитивных методов FDM (Fused Deposition Modelling и SLS (Selective Laser Sintering) для изготовления изделий сложной формы из материалов на полиолефиновой матрице, включая СВМПЭ, с различными наполнителями/пластификаторами. Так, показано [3-6], что СВМПЭ может быть пластифицирован добавлением полипропилена, полиэтиленгликоля, изотактического полипропилена, полиэтилена высокого давления и др.

Температура существенно влияет на равномерность формирования слоев и, тем самым, определяет воспроизводимость изделий при тиражировании. К примеру, в работе [7] показано, что 3D-печать прутком из ABS Terluran GP22 при температуре ≤ 230 °C экструдируется нестабильно, при 250 °C достигается хорошее качество отливки (рис. 2*а*), а при избыточной (выше 265°C) температуре образуются дефекты из-за растекания расходного материала (рис. 2*б*).

а *б*

Рисунок 2. Сопоставление результатов 3D-печати при температуре экструдирования 250 °C (а) и 275 °C (б).

Из-за поэтапного наплавления слоев пластика изделие неизбежно приобретает характерную волнистость поверхности, высота которой зависит от выбранной в слайсере толщины слоя. При толщине слоя менее 0,5 мм визуально различить волнистость обычно не удается, однако поверхность является не вполне гладкой (матовой).

Существуют два варианта решения данной проблемы. Наиболее простым является механическая обработка изделий после печати. Шлифованием можно добиться достаточно хороших результатов, однако имплантаты, отличающиеся сложной поверхностью, плохо поддаются механическому выравниванию. Другим способом является химическое выравнивание поверхности, посредством которого изделие обрабатывается растворителем, верхний слой оплавляется и получается гладкая поверхность. Однако многие растворители являются токсичными, что ограничивает их использование при изготовлении имплантатов.

Особое внимание следует уделить повышению механических и антифрикционных характеристик изделий, получаемых методом 3D печати. Износостойкость и прочность важны, но не обязательно нужно стремиться к увеличению плотности материала отливок, поскольку присутствующие в отливке пустоты играют положительную роль (они служат микрорезервуарами для природной смазки в виде синовиальной жидкости аналогично пористой структуре суставного хряща).

Значительные резервы в прочностном и трибологическом аспекте предоставляет формирование градиентной структуры и оптимального состава материала имплантатов. Как известно, эксплуатационные показатели узлов трения во многом определяются напряженно-деформированным состоянием контактной области и приповерхностных слоев; в свою очередь это состояние зависит от градиента деформационных характеристик в объеме материала пары трения [8,9]. Активно разрабатываемые в настоящее время градиентные материалы конструкционного и триботехнического назначения характеризуются дискретным или непрерывным изменением твердости, модуля упругости и т.д. по глубине, т. е. при удалении от поверхности трения.

В частности, при создании требуемого градиента указанных параметров формируют одно- или многослойные покрытия, что позволяет на 1–2 порядка повысить износостойкость контактирующих деталей. Использование 3D-печати для производства эндопротезов из градиентных конструкционных и одновременно антифрикционных материалов имеет существенное преимущество по сравнению с традиционными технологическими методами. Легкий, управляемый и относительно быстрый процесс 3D печати одновременно воспроизводит сложную форму изделий и при этом оптимальный градиент свойств по

глубине. Для получения градиента физико-механических свойств может быть использовано послойное регулирование пористости или печать композитным расходным материалом переменного состава.

Моделирование показало [9], что существенно влияющий на износостойкость имплантатов параметр максимального контактного давления p_{max} уменьшается почти в 2 раза при положительном градиенте модуля упругости $E'(z) > 0$ в сравнении с отрицательным градиентом $E'(z) < 0$ (для однородного материала максимальное контактное давление принимает промежуточное значение). При изучении влияния градиента коэффициента Пуассона $\nu'(z)$ установлено, что наибольшее значение расчетного контактного давления наблюдается при использовании однородного материала; при $\nu'(z) > 0$ этот параметр уменьшается более чем в два раза, а при $\nu'(z) < 0$ – более чем в три раза.

Применение смесевых и дисперсно-наполненных полимерных термопластов наряду с аддитивными методами переработки предоставляет большие возможности по регулированию деформационных, прочностных, термомеханических и триботехнических свойств изделий. Для быстрого выбора оптимального состава таких композиционных материалов предлагаются экспериментальные и расчетные методы, позволяющие сократить большие материальные и временные затраты на апробацию множества возможных вариантов. Так, сокращению продолжительности испытаний эндопротезов из вновь создаваемых полимерных материалов способствуют ускоренные методы определения реологических характеристик, основанные на кратковременных релаксационных тестах (вместо традиционных весьма длительных испытаний на ползучесть) и динамического механического анализа на малогабаритных образцах. Оптимизация состава наполненных термопластов обеспечивается на основе компьютерного дизайна материалов [10] с учетом заданных критериев качества.

Заключение

Наряду с прогрессивным природоподобным и ресурсосберегающим характером аддитивных технологий, имеют место специфические трудности их реализации при изготовлении изделий ответственного, в т.ч. медицинского назначения. Пути решения этих проблем связаны с использованием принципов бионики, методов микромеханики и компьютерного дизайна материалов.

Сделан вывод, что аддитивные технологии позволяют реализовать CAD модели для 3D-печати индивидуально адаптированных и оптимально сконструированных эндопротезов с градиентным распределением пористости и механических свойств материала в объеме изделия, оптимизированным по критериям прочности и износостойкости. Тем самым, применительно к имплантатам для ортопедии, реализуются инновационные концепции «материал под изделие» и «цифровое производство».

Благодарности

Работа выполнена при поддержке БРФФИ и РФФИ (проект Т18Р-286 «Разработка научных основ получения износостойких биосовместимых экструдируемых полимерных нанокомпозитов для 3D печати имплантатов сложной формы») и в соответствии с договорами о сотрудничестве между ИММС им. В.А. Белого НАН Беларуси с СПб НИУ ИТМО и МИП «Политех-Инжиниринг» СПб ПУ Петра Великого. Авторы доклада участвуют в создании российско-белорусского 3D-принтера с использованием отечественного программного обеспечения и расходных материалов.

Список литературы

1. Ковальчук М.В., Нарайкин О.С., Яцишина Е.Б. Конвергенция наук и технологий – новый этап научно-технического развития // Вопросы философии. – 2013. – № 3. – С. 3–11.

2. Гринин Е.П., Трубашевский Д.Е. Использование аддитивных технологий в современной медицине // Умное производство. – 2018. – № 3. – С. 17–77.

3. Song Changhui, Huang Aibing, Yang Yongqiang, Wang Di, Yu Jia-kuo. Customized UHMWPE Tibial Insert Directly Fabricated by Selective Laser Sintering // Int J. Adv. Manuf. Technol. – 2016. – Vol. 85. – P. 1217–1226.

4. Ramli M.S., Wahab M.S., Ahmad M., Bala A.S. FDM Preparation of Bio-Compatible UHMWPE Polymer for Artificial Implant // ARPN Journal of Engineering and Applied Sciences. – 2016. – Vol. 11, No. 8. – P. 5473–5480.

5. Panin S.V., Kornienko L.A., Aleksenko V.O., Ivanova L.R., Shil'ko S.V., Pleskachevsky Yu.M. Extrudable UHMWPE-Based Composites: Prospects of Application in Additive Technologies // Nanoscience and Technology: An International Journal. – 2017. – Vol. 8, No. 2. – P. 85–94.

6. Raissa Araujo Borges, Dipankar Choudhury, Min Zou. 3D Printed PCU/UHMWPE Polymeric Blend for Artificial Knee Meniscus // Tribology International. – 2018. – Vol. 122. – P. 1–7.

7. Давыденко Е.М., Иванов Н.А., Чижик С.А., Агабеков В.Е. Параметры 3D-печати прутками из композиционных полимерных материалов на основе ABS-пластиков // Полимерные материалы и технологии. – 2018. – Т.4., № 2. – С. 85–90.

8. Рябченко Т.В., Шилько С.В., Петроковец Е.М. Конечноэлементный анализ контактного взаимодействия в сопряжениях из градиентных материалов // Теоретическая и прикладная механика. – 2017. – Вып. 32. – С. 180–184.

9. Шилько С.В., Рябченко Т.В., Гавриленко С.Л., Шалобаев Е.В. Применение компьютерной механики при подготовке CAD моделей для 3D-печати градиентных материалов и изделий // Сб. докл. Междунар. н/п симп. Перспективы развития аддитивных технологий в Республике Беларусь. – Минск, 24 мая 2017 г. – С. 194–207.

10. Люкшин Б.А., Шилько С.В., Панин С.В. и др. Дисперсно-наполненные полимерные композиты технического и медицинского назначения / Новосибирск: Изд-во СО РАН Наука. – 2017.

3D PRINTING AS A “NATURE LIKE” METHOD OF OPTIMIZED ENDOPROSTHESES FABRICATION

S. Shil’ko [1,a], T. Ryabchenko [1], S. Panin[2,b], E. Shalobaev [3,c]

[1] V.A. Belyi Metal-Polymer Research Institute of NASB, *Kirov Street, 32A,246050, Gomel, Belarus*

[2] *Institute of Strength Physics and Materials Scienc SB RAS,*

pr. Akademicheskii, 2/1, 634055, Tomsk, Russia,

[3] *ITMO National Research University, Kronverksky Pr., 49, 197101, St. Petersburg, Russia*

E-mail: [a] shilko_mpri@mail.ru, [b] svp@ispms.tsc.ru, [c] shalobaev47@mail.ru

Introduction

At present time the mankind is experienced of difficulties of sustainable development caused the shortage of energetic and biological resources. The scientists see the solution in creating of **“**nature like” technosphere. In effect, additive technologies (AT) is a **“**nature like” method of «growing» not only any partial element and even complex issues, for example, endoprotheses of joints.

The aim of the work is to improve the tribomechanical properties of endoprotheses and overcome difficulties of AT manufacturing in respect to these implants making from thermoplastic disperse-reinforced UHWPE composites.

Methods and results

Finite element method has been applied for the creating of CAD-models of endoprotheses of joint with gradient of mechanical properties on depth *z*. We presume that for obtaining of corresponding structure the porosity of material may be currently varied during 3D printing.

The modeling shows that such important tribological parameter as maximal contact pressure p_{max} decreases almost 2 times for positive gradient of Young modulus $E'(z) < 0$ in comparison with negative gradient of $E'(z) > 0$. For homogeneous material the maximal contact pressure is characterized by intermediate value. When E = const, it was established that p_{max} corresponds to constant Poisson’s ratio of material $\nu'(z) = 0$; for positive gradient $\nu'(z) > 0$ this parameter decreases more than two times and for $\nu'(z) < 0$ – more than three times.

Some problems of 3D printing arising by manufacturing of endoprotheses have been discussed such as relatively low accuracy of sizes and repeatability layers geometry; high roughness and necessity of additional mechanical or chemical treatment of contact surfaces; obtaining of specified microporosity; comparability of strength and elastic modulus of materials fabricated by AT and traditional technologies. In order to develop dispensable materials for additive manufacturing technologies, the plastification of antifrictional polymer-polymer blends based on ultrahigh-molecular weight polyethylene have been assumed.

Conclusions

Along with progressive **“**nature like” and resource saving character of additive technologies, specific difficulties of their realization takes place in the process of manufacturing of responsible issues including medical ones. The combination of additive technologies, bionic principles, micromechanical methods and computer design of materials opens up wide possibilities for creating of individually adapted and optimal designed implants. Using of thermoplastic biocompatible and extrudable composites allow us to obtain the gradient of the porosity and elastic properties of endoprostheses, which ensures to minimize contact stresses in this **“**nature like” tribojoint of complex geometry.

Acknowledgments

This work was supported by a grant of the BRFFR and RFBR (project number T18P-286). and in accordance with the cooperation agreements between IMMSM. V.A. White NAS of Belarus with St. Petersburg NRU ITMO and MIP “Polytech-Engineering” St. Petersburg PU of Peter the Great.

СОДЕРЖАНИЕ

Гвоздев А.Е., Сергеев А.Н., Малий Д.В., Кутепов С.Н. О строении строении межзеренных и межфазных большеугловых границ и их вкладе в высокую деформационную способность гетерофазных высоколегированных металлических систем (Краткий обзор) (*On The structure of intergranular and interphase large-angle boundaries and their contribution to the high deformation ability of high-alloy metal heterophase systems (Short review)*) 3

Губанов А.В., Кутугин В.А., Новикова Е.А. *Применение грунтобетона в 3D печати (Concrete in 3D printing*) 8

Зейналова Н.Р., Миньков Л.Л. Численное моделирование температурного разделения в вихревой трубе Ранка-Хилша (*Numerical modeling of temperature separation in the Ranque-Hilsh vortex pipe*).....14

Иванов Ю.Ф., Ахмадеев Ю.Х., Лопатин И.В., Петрикова Е.А., Тересов А.Д., Толкачев О.С. Синтез поверхностного сплава на основе алюминия в совмещенных электронно-ионно-плазменных технологиях (*Synthesis of surface alloy on the basis of aluminum in combined electron-ion plasma technologies*).....20

Коростелева Е.Н., Коржова В.В. Особенности поведения порошковых материалов ti-si при спекании (*Features of the behavior of Ti-Si Powder materials during sintering*) 27

Крайнов А.Ю., Шульц Д.С. Численное моделирование распространения волны безгазового горения в коническом образце с учетом гетерогенности его структуры (*Gas free combustion wave spreading at tapered-bar controlling for its structure heterogenity*) 33

Кривилев М.Д., Гордеев Г.А., Анкудинов В.Е., Харанжевский Е.В. Двухуровневое моделирование селективного лазерного плавления импульсным лазером (*Two-scale simulation of pulse selective laser melting*) 39

Мартынюк М.В. Вычисление полей напряжений близко расположенных трещин (*Calculation of stress field closely located cracks*).....48

Привалов А.Н., Богатырева Ю.И. Расчёт эффективных характеристик изделий аддитивных технологий с применением параллельных вычислений Статья-Рассуждение (*Calculation of the effective characteristics of products of additive technologies using parallel computations*).....55

Сайфуллин Э.Р., Князева А.Г. Влияние технологических параметров на процессы структурирования в адгезионном слое при создании ламинированных композитов (*Influence of process-dependent parameters on structural transformation in the adhesive layer*).....61

Рабинский Л.Н., Токмаков Д.И., Соляев Ю.О. Исследование эффектов запекания порошка в тонких каналах в процессе лазерного синтеза 68

Томилина Т.М. Аддитивные технологии для виброакустических метаматериалов: соответствие модели и эксперимента (*3D printing of vibro-acoustic metamaterials: the problem of model and experiment compliance*) 72

Ченцова С.К., Моисеева К.М. Численное моделирование тепловых процессов в биоткани, нагреваемой наночастицей (*Numerical modeling of thermal processes in biokkani, heating nanoparticles*) 79

Чумаков Ю.А. Численное исследование СВ-синтеза композиционного материала из трехкомпонентной порошковой смеси (*Numerical investigations SHS composite from a three-component powder mixture*).....85

Шилько С.В., Рябченко Т.В., Панин С.В., Шалобаев Е.В. 3D печать, как природоподобный метод получения оптимизированных эндопротезов (*3D printing as a "nature like" method of optimized endoprostheses fabrication*) 94

Научное издание

МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫЕ ПРОБЛЕМЫ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Материалы
IV Всероссийского научного семинара
с международным участием

Издано в авторской редакции

Научный редактор
доктор физико-математических наук, профессор
А.Г. Князева

Компьютерная верстка *М.А. Анисимова, М.В. Чепак-Гизбрехт*

Зарегистрировано в Издательстве ТПУ
Размещено на корпоративном портале ТПУ
в полном соответствии с качеством предоставленного оригинал-макета

Издательство
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ