

## РАЗРАБОТКА КОМПЬЮТЕРНОЙ ПРОГРАММЫ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ СПЕКАНИЯ ИНТЕРМЕТАЛЛИДНЫХ СИСТЕМ В УСЛОВИЯХ РАВНОМЕРНОГО НАГРЕВА.

*Н.Н. Сороков, студент гр.121-1,  
Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники,  
634050, г. Томск, пр. Ленина, 40,  
sorokov105@gmail.com  
С.Н. Сорокова, к.ф-м.н., доц.,  
Томский политехнический университет, 634050, г.Томск, пр.Ленина,30,  
E-mail: [s\\_sorokova@tpu.ru](mailto:s_sorokova@tpu.ru)*

В современных технологиях обработки материалов реализуются существенно неравновесные процессы, которые требуют принципиально иного подхода, учитывающего взаимовлияние разных явлений [1-2]. Новые модели даже в простейшем приближении оказываются связанными и нелинейными, содержат дифференциальные уравнения переменного типа и требуют специального исследования. В свою очередь имеющиеся на сегодняшний день экспериментальные результаты в области модификации поверхностей не находят объяснения с традиционной точки зрения. Технологии сложны и дорогостоящи. В учебной и научной литературе в области обработки материалов связанные модели подменяются расчетом полей одной физической природы по известным другим, что для неравновесных условий не оправдано.

С математической точки зрения, связанные модели отличаются от традиционно используемых наличием нелинейных слагаемых, приводящих при смене параметров моделей к смене типов уравнений и систем, и требуют специального математического исследования. Имеющиеся к настоящему времени связанные модели физико-химических превращений, в том числе модели превращений в твердой фазе, имеют отношение либо к лабораторным ситуациям, либо к гипотетическим условиям распространения реакции в бесконечной среде. Отдельные работы, посвященные моделированию превращений (фазовых, химических, структурных) в конкретных системах (детонация азидов тяжелых металлов, низкотемпературные радикальные реакции и др.) не решают проблемы в целом.

Основные проблемы при построении моделей сопряженных и связанных моделей технологических процессов связаны со сложностью численной реализации моделей, включающих разномасштабные процессы, взаимодействующие между собой.

Известно множество пакетов программ (ANSYS, NASTRAN, COMSOL Multiphysics, CFD-ACE+ V2014.0 и т.п.) по моделированию процессов управляемого синтеза новых материалов. Но в них не учитывается сопряженный теплообмен, эволюция фазового состава, тем более для детальной схемы реакций, практически не реализуются связанные модели. Расчеты в известных пакетах сводятся к расчету одних физических полей по известным другим

Поэтому исследование взаимодействия процессов разной природы с учетом подробных схем химических превращений в синтезируемых материалах, и разработка компьютерной программы является актуальной задачей.

Рассмотрим пористую прессовку порошков (*Ti-Ni*, *Ti-Cu*, *Ti-Si*) в виде параллелепипеда с заданными размерами [3]. Нагрев осуществляется излучением при заданном законе изменения температуры стенок вакуумной печи, а сам образец свободен от внешних нагрузок. Математическая модель включает [3] уравнение баланса тепла:

$$V_0 c \rho \frac{dT}{dt} = -\varepsilon_T \sigma_T (T^4 - T_e^4) S_n - 3KT \alpha_l V_0 \frac{d\varepsilon_{kk}}{dt} + V_0 W ;$$

с граничными условиями

$$-\lambda \nabla T|_S = -\varepsilon \sigma (T^4 - T_e^4)$$

где  $\sigma$  – постоянная Стефана–Больцмана;  $\varepsilon$  – степень черноты. Закон изменения температуры стенок вакуумной камеры задан в виде:

$$T_e = \begin{cases} \nu_1 t + T_0, & T \leq T_{c1} \\ \nu_2 t + T_0, & T_{c1} < T \leq T_{c2} \\ T_{c2}, & T_{c2} < T \end{cases}$$

где  $\nu_1, \nu_2$  – скорости нагрева, известные из эксперимента;  $T_0$  – начальная температура;  $T_{c1}, T_{c2}$  – заданные температуры спекания.

И кинетические уравнения, которые записаны на основе закона действующих масс и с учетом того, что химические реакции тормозятся слоем продукта, т.е.

$$\varphi_i = \Phi(y_k) k_i \exp\left(-\frac{E_{ai}}{RT}\right) \exp(-m_i y) y^{-n_i}, \text{ где } \Phi_i(y_l) = \prod_k y_l^{y_{ik}},$$

где  $k_i$  – константы скорости реакций;  $R$  – универсальная газовая постоянная;  $E_{ai}$  – энергии активации реакций;  $i$  – количество реакций;  $m_i, n_i$  – параметры торможения химических реакций, их значения являются либо экспериментально определяемыми, либо находятся из рассмотрения специальных «микро-задач», в которых учитывается диффузия через слой продукта, реакции на границе раздела между отдельными частицами различных размеров и т.п.

Изменение плотности образца в процессе спекания оценивается по формуле

$$\delta\rho/\rho_0 = \varepsilon_{kk}/(1 + \varepsilon_{kk}).$$

Изменение объема в приближении вязкоупругой модели определяем через решение обыкновенного дифференциального уравнения []:

$$\frac{d\varepsilon_{kk}}{dt} = -\frac{dw}{dt} + \frac{\mu}{\kappa} (\varepsilon_{kk} - w)$$

Численное решение на каждом шаге по времени реализуется в несколько этапов:

- 1 этап - решение уравнения теплового баланса методом Рунге–Кутты–Мерсона,
- 2 этап заключается в решении кинетической задачи неявным методом Эйлера,
- 3 этап – определяем объемные деформации и относительное изменение объема.

Математическая модель содержит большое количество численные параметров, которые можно оценить по известным термодинамическим формулам [4].

### Список литературы:

1. Солоненко О.П., Головин А.А. Нестационарный сопряженный теплообмен и фазовые превращения при высокоэнергетической обработке поверхности. Ч. 2. Моделирование технологических процессов // Теплофизика и аэромеханика. - 2007. - Т. 14. - № 4. - С. 623-638.
2. Князева А.Г., Крюкова О.Н., Букрина Н.В., Сорокова С.Н. Проблемы моделирования технологических процессов поверхностной обработки материалов и нанесения покрытий с использованием высокоэнергетических источников// Известия Томского политехнического университета. 2010. Т. 316. № 2. С. 93-101.
3. Сорокова С.Н., Князева А.Г. Математическое моделирование объемных изменений в процессе спекания порошков системы Ti-AL// Физическая мезомеханика. 2008. Т. 11. № 6. С. 95-101.
4. Карапетянц М.Х., Химическая термодинамика. Изд. 3–е, перераб. И доп. М., «Химия», 1975 г.