

Н.К. Евстигнеев

Томский государственный университет (г. Томск),

А.Г. Князева

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН (г. Томск)

ВЫБОР РЕОЛОГИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ ОПИСАНИЯ СИНТЕЗА ИНТЕРМЕТАЛЛИДА, СОВМЕЩЕННОГО С ЭКСТРУЗИЕЙ ЧЕРЕЗ КОНИЧЕСКУЮ ПРЕСС-ФОРМУ

Mathematical model of self-propagating high-temperature synthesis of intermetallic compound combined with extrusion through a tapered die is suggested. Various rheological models of squeezing-out media are used: viscoelastic, viscous, hypoelastic. Qualitative difference of the models is shown. All models take into account coupling effect between the fields of temperature, deformations and conversion degree. Model features are described.

В настоящее время композиционные материалы на основе алюминидов никеля находят широкое применение в различных отраслях машиностроения. Прежде всего они используются в качестве защитных покрытий поверхностей деталей и узлов машин, подверженных разного рода деструктивным воздействиям. В частности, интерметаллическое соединение Ni_3Al применяется в качестве термостойкого и жаропрочного покрытия лопаток турбин авиационных двигателей. Получение этого соединения традиционными методами порошковой металлургии требует много времени и больших энергозатрат. Для решения этих задач применяют самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС) в режиме теплового взрыва.

В ходе реакции в некотором локальном объеме вещества выделяется тепло, которое прогревает соседние слои вещества и вызывает в них быструю химическую реакцию, таким образом обеспечивая перемещение реакционной зоны. Такое распространение зоны химической реакции используется для синтеза тугоплавких соединений, в том числе интерметаллидов, и получило название СВС в режиме горения. Повышение температуры во всем объеме системы вследствие тепловыделения в реакции приводит к картине, качественно подобной тепловому взрыву. Такой ход развития событий (СВС в режиме теплового взрыва) также пригоден для получения интерметаллидов [1].

Экспериментально установлено, что при использовании конической пресс-формы возможно получение субмикроструктурной структуры в синтезированном интерметаллическом сплаве [2]. Проведенные эксперименты выявили необходимость оптимизации технологических процессов. Методы математического моделирования оказываются здесь весьма эффективными [3, 4], поскольку они позволяют не только более глубоко понять сущность процессов, но и существенно сократить число экспериментов.

Как правило, при описании реологии систем, подобных рассматриваемой, используются различные модели поведения среды – линейно вязкая [5, 6], нелинейно вязкая [7], пластическая [7]. Существуют также вероятностно-статистические модели, описывающие макроструктуру порошка на этапе прессования [8]. Вопрос о применимости моделей в каждом конкретном случае остается открытым. В настоящей работе исследовано влияние реологических соотношений, соответствующих материалам с разными реологическими свойствами, на распределение температуры, степени превращения, компонент тензоров напряжений, деформаций и скоростей при варьировании геометрических размеров камеры, условий нагрева и нагружения.

1. Физическая постановка задачи

Считается, что процесс синтеза осуществляется в цилиндрической камере (I) с конической выходной частью (II), материал выдавливается в цилиндрический насадок (III). Радиусы отверстий и половина угла конической распушки матрицы γ заданы (рис. 1). В качестве реакционной смеси выбран порошок $3\text{Ni}+\text{Al}$. За счет нагрева стенок камеры в течение заданного времени t_h . В камере в некоторый момент времени t_i инициируется экзотермическая химическая реакция. При благоприятном стечении обстоятельств через время t_c реакция полностью завершается. В момент времени $t_{\text{ext}} > t_i$ начинается выдавливание смеси веществ, содержащихся в камере, прессом со скоростью $V_{\text{пр}}$, много меньшей скоростей распространения механических возмущений в системе. После прекращения химической реакции система остывает, что описывается в соответствии с законом теплообмена Ньютона. Химическую реакцию опишем суммарной реакционной схемой

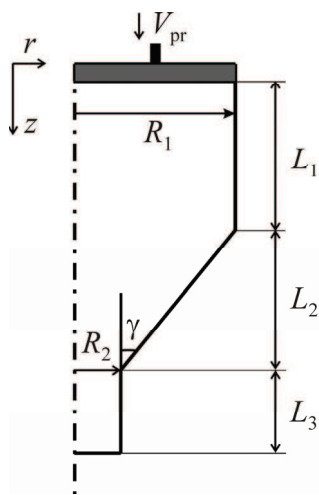


Рис. 1. Иллюстрация к постановке задачи

$A \rightarrow B.$

В ходе нагрева и реакции в системе возникают внутренние напряжения (термические и химические), которые оказывают влияние на скорость химической реакции дополнительно к внешней нагрузке, а также при ее отсутствии. Свойства веществ в первом приближении считаются независимыми от температуры и степени превращения.

2. Математическая постановка задачи

Математическая постановка задачи включает уравнение теплопроводности

$$c\rho\rho_s \frac{dT}{dt} = \nabla \cdot \lambda_T \nabla T + Q \frac{d\eta}{dt} - 3K\alpha_T T \frac{d\varepsilon_{kk}}{dt} + \sigma^V \cdot \frac{d\varepsilon}{dt}, \quad (1)$$

уравнение химической кинетики

$$\frac{d\eta}{dt} = k_0 \varphi(\eta) \exp\left(-\frac{E_a \pm k_\sigma \Pi}{RT}\right), \quad (2)$$

уравнение неразрывности

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (3)$$

и уравнение движения

$$\rho\rho_s \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (4)$$

где $\Pi = -\sum_{i,j} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}$, $\frac{d...}{dt} = \frac{\partial...}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla \dots$, $\varphi(\eta)$ – кинетическая функция, c – теплоемкость при постоянных деформациях; ρ_s – плотность несжимаемой основы; ρ – относительная плотность, или величина, равная $1-\pi$, где π – пористость; T – температура, t – время, λ_T – коэффициент теплопроводности, Q – тепловой эффект химической реакции, η – степень превращения, K – изотермический модуль всестороннего сжатия, α_T – коэффициент линейного теплового расширения, σ_{ij} и ε_{ij} – компоненты тензоров напряжений $\boldsymbol{\sigma}$ и деформаций $\boldsymbol{\varepsilon}$, k_0 – предэкспонент, E_a – энергия активации химической реакции, k_σ – коэффициент чувствительности скорости химической реакции к работе напряжений, R – универсальная газовая постоянная, v_r и v_z – радиальная и осевая компоненты вектора скорости.

Уравнение теплопроводности (1) отличается от уравнения, используемого в классической теории термоупругости [9], наличием в правой части последнего слагаемого, учитывающего работу вязких напряжений [10].

Уравнение химической кинетики записано в виде (2) в соответствии с представлениями Эйринга–Козмана [11] о влиянии механических напряжений на скорость реакционного взаимодействия. Запись этого уравнения подразумевает, что действие напряжений облегчает либо затрудняет переход через энергетический барьер, но не влияет на его высоту.

Поскольку задача является осесимметричной, запишем все необходимые уравнения в цилиндрической системе координат. Будем полагать, что искомые величины зависят только от координат r , z и времени, тогда $\varepsilon_{\varphi\varphi} = \varepsilon_{r\varphi} = \varepsilon_{z\varphi} = \sigma_{\varphi\varphi} = \sigma_{r\varphi} = \sigma_{z\varphi} = 0$. В двумерной постановке уравнение теплопроводности, связанное с деформациями, примет вид

$$c\rho\rho_s \frac{dT}{dt} = \lambda_T \left[\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] + Q \frac{d\eta}{dt} - 3K\alpha_T T \frac{d\varepsilon_{kk}}{dt} + \sigma_{ij}^V \frac{d\varepsilon_{ij}}{dt}, \quad (5)$$

где

$$\varepsilon_{kk} = \varepsilon_{rr} + \varepsilon_{zz}.$$

Уравнения химической кинетики и неразрывности останутся прежними, а уравнения движения трансформируются следующим образом:

$$\begin{cases} \rho\rho_s \dot{v}_r = \frac{\partial \sigma_{rr}}{\partial r} + \frac{1}{r} \cdot \sigma_{rr} + \frac{\partial \sigma_{rz}}{\partial z}, \\ \rho\rho_s \dot{v}_z = \frac{\partial \sigma_{rz}}{\partial r} + \frac{1}{r} \cdot \sigma_{rz} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z}. \end{cases} \quad (6)$$

Начальные и граничные условия для уравнений (2), (3), (5) примут вид:

$$\begin{aligned} t = 0: \quad & T = T_0, \quad \eta = 0, \quad \rho = \rho_0, \\ r = 0: \quad & \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \quad r = \tilde{R}_1: \begin{cases} T = T_e, \quad t \leq t_h, \\ \lambda_T \left(\cos(\gamma) \cdot \frac{\partial T}{\partial r} + \sin(\gamma) \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \alpha_h (T - T_0), \quad t > t_h, \end{cases} \\ z = 0: \quad & \begin{cases} T = T_e, \quad t \leq t_h, \\ \lambda_T \frac{\partial T}{\partial z} = \alpha_h (T - T_0), \quad t > t_h, \end{cases} \quad z = L: \quad \left\{ -\lambda_T \frac{\partial T}{\partial z} = \sigma_{st} (T^4 - T_0^4) \right\}. \end{aligned}$$

Здесь \tilde{R}_1 – это наружная граница камеры и пресс-формы, $B = -\frac{R_1 - R_2}{L_2}$,

$C = R_1 + \frac{L_1}{L_2}(R_1 - R_2)$, σ_{st} – постоянная Стефана-Больцмана, T_e – температура

стенок и прессы; степень черноты тела принята равной единице, α_h – коэффициент теплоотдачи.

3. Выбор реологических соотношений

В работе использованы реологические соотношения трех типов.

В *гипоупругой модели* приращения компонент тензора напряжений линейно связаны с приращениями компонент тензора деформаций, приращениями температуры и степени превращения:

$$d\sigma_{ij}^e = 2\mu \cdot d\varepsilon_{ij} + \delta_{ij} \left[\lambda d\varepsilon_{kk} - 3K(\alpha_T dT + (\alpha_B - \alpha_A) d\eta) \right], \quad (7)$$

где λ , μ – коэффициенты Ламэ, K – коэффициент, учитывающий изменение объема вследствие несоответствия между конечной и начальной фазами,

$$K = \lambda + \frac{2}{3}\mu, \quad \alpha_B - \alpha_A.$$

Соотношения (7) несложно переписать в виде

$$d\varepsilon_{ij} = \frac{d\sigma_{ij}^e}{2\mu} + \delta_{ij} \left[-\frac{\lambda}{3K} \cdot \frac{\sigma_{kk}}{2\mu} + \alpha_T dT + (\alpha_p - \alpha_r) d\eta \right] = d\varepsilon_{ij}^e + d\varepsilon_{ij}^T + d\varepsilon_{ij}^Y,$$

где первое слагаемое в правой части – это приращения обратимых деформации, вызванных упругими напряжениями, второе – приращения термических деформации; третье – приращения необратимых деформации, связанных с химической реакцией или фазовым переходом.

Модель *вязкой среды* (часто используемая для описания поведения порошковых сред в процессах прессования) [5, 6] основана на известной аналогии между инвариантами тензоров напряжений и деформаций [12]. Действительно, для упругой и вязкой сред имеют место соотношения:

$$\sigma_{ij}^e = 2\mu \cdot \varepsilon_{ij} + \delta_{ij} \lambda \varepsilon_{kk}, \quad (8)$$

$$\sigma_{ij}^V = 2\mu_V \cdot \dot{\varepsilon}_{ij} + \delta_{ij} \left(\zeta - \frac{2}{3}\mu_V \right) \dot{\varepsilon}_{kk}, \quad (9)$$

где ζ – модуль объемной вязкости, μ_V – коэффициент динамической вязкости.

Очевидно, что

$$\sigma_{kk}^e = 3K\varepsilon_{kk}, \quad \sigma_{kk}^V = 3\zeta\dot{\varepsilon}_{kk}. \quad (10)$$

Поскольку для термоупругого тела имеет место соотношение

$$\sigma_{ij}^e = 2\mu \cdot \varepsilon_{ij} + \delta_{ij} \left[\lambda \varepsilon_{kk} - 3K\alpha_T (T - T_0) \right],$$

то, пользуясь аналогией (10), запишем для вязкого тела соотношения

$$\sigma_{ij}^V = 2\mu_V \cdot \dot{\varepsilon}_{ij} + \delta_{ij} \left[\left(\zeta - \frac{2}{3}\mu_V \right) \dot{\varepsilon}_{kk} - 3K\alpha_T \dot{T} \right]. \quad (11)$$

Вязкоупругая модель учитывает все названные эффекты. Разделим тензор напряжений на две составляющие: упругую и вязкую, $\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^e + \sigma_{ij}^V$. Поскольку состав среды в ходе химической реакции изменяется, то для упругих напряжений используем обобщенные соотношения Дюамеля–Неймана:

$$\sigma_{ij}^e = 2\mu \cdot \varepsilon_{ij} + \delta_{ij} [\lambda \varepsilon_{kk} - K \omega], \quad (12)$$

где

$$\omega = 3 \left[\alpha_T (T - T_0) + \sum_{k=1}^n \alpha_k \eta_k \right],$$

n – число компонентов, участвующих в реакциях; η_k – их концентрации, α_k – коэффициенты концентрационного расширения. По аналогии с предыдущим для вязких напряжений имеем

$$\sigma_{ij}^V = 2\mu_V \cdot \dot{\varepsilon}_{ij} + \delta_{ij} \left[\left(\zeta - \frac{2}{3} \mu_V \right) \dot{\varepsilon}_{kk} - 3K \left(\alpha_T \dot{T} + \sum_{k=1}^n \alpha_k \dot{\eta}_k \right) \right].$$

где ζ – это аналог K , $\zeta - 2\mu_V/3$ – аналог λ .

В результате придем к следующим соотношениям:

$$\sigma_{ij} = 2\mu \varepsilon_{ij} + 2\mu_V \cdot \dot{\varepsilon}_{ij} + \delta_{ij} \left[\lambda \varepsilon_{kk} + \left(\zeta - \frac{2}{3} \mu_V \right) \dot{\varepsilon}_{kk} - K \omega - \zeta \dot{\omega} \right]$$

или для суммарной реакции

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} = & 2\mu \varepsilon_{ij} + 2\mu_V \cdot \dot{\varepsilon}_{ij} + \\ & + \delta_{ij} \left[\lambda \varepsilon_{kk} + \left(\zeta - \frac{2}{3} \mu_V \right) \dot{\varepsilon}_{kk} - 3K (\alpha_p - \alpha_r) \eta - 3\zeta (\alpha_p - \alpha_r) \dot{\eta} \right]. \end{aligned} \quad (13)$$

Поведение материала в процессе экструзии с химической реакцией в настоящей работе исследовалось на основе всех выписанных моделей (7), (11) и (13). Заметим, что в работах [6, 13], посвященных анализу режимов синтеза в условиях экструзии, исследование напряженно-деформированного состояния не проводилось.

В цилиндрической системе координат в рассматриваемых условиях имеем дополнительные соотношения:

$$\dot{\varepsilon}_{zz} = \frac{dv_z}{dz}, \quad \dot{\varepsilon}_{rr} = \frac{dv_r}{dr}, \quad \dot{\varepsilon}_{rz} = \frac{1}{2} \left(\frac{dv_r}{dz} + \frac{dv_z}{dr} \right). \quad (14)$$

Используя (13) и (14), вместо (6) запишем

$$\begin{aligned}
 \rho\rho_s \frac{dv_r}{dt} &= \left(\zeta + \frac{4}{3}\mu_v \right) \left(\frac{\partial^2 v_r}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial r \partial z} \right) + \\
 &+ \mu_v \frac{\partial^2 v_r}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \left[\left(\zeta + \frac{4}{3}\mu_v \right) \frac{\partial v_r}{\partial r} + \left(\zeta - \frac{2}{3}\mu_v \right) \frac{\partial v_z}{\partial z} \right] + \\
 &+ (\lambda + 2\mu) \frac{\partial \varepsilon_{rr}}{\partial r} + \lambda \frac{\partial \varepsilon_{zz}}{\partial r} + 2\mu \frac{\partial \varepsilon_{rz}}{\partial z} - K \frac{\partial \omega}{\partial r} - \zeta \frac{\partial \dot{\omega}}{\partial r} + \\
 &+ \frac{1}{r} [(\lambda + 2\mu)\varepsilon_{rr} + \lambda\varepsilon_{zz} - K\omega - \zeta\dot{\omega}].
 \end{aligned} \tag{15}$$

$$\begin{aligned}
 \rho\rho_s \frac{dv_z}{dt} &= \left(\zeta + \frac{4}{3}\mu_v \right) \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} + \mu_v \frac{\partial^2 v_z}{\partial r^2} + \left(\zeta + \frac{\mu_v}{3} \right) \frac{\partial^2 v_r}{\partial r \partial z} + \frac{\mu_v}{r} \left[\frac{\partial v_r}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial r} \right] + \\
 &+ 2\mu \frac{\partial \varepsilon_{rz}}{\partial r} + 2\mu \frac{\varepsilon_{rz}}{r} + (\lambda + 2\mu) \frac{\partial \varepsilon_{zz}}{\partial z} + \lambda \frac{\partial \varepsilon_{rr}}{\partial z} - K \frac{\partial \omega}{\partial z} - \zeta \frac{\partial \dot{\omega}}{\partial z}.
 \end{aligned} \tag{16}$$

Условиями к «механической» части задачи будут:

$$t = 0: \quad v_r = v_z = 0,$$

$$r = 0: \quad \frac{\partial v_r}{\partial r} = \frac{\partial v_z}{\partial r} = 0, \quad r = \tilde{R}_1: \quad v_r = v_z = 0,$$

$$z = 0: \quad v_r = 0, \quad v_z = V_{pr}, \quad z = L: \quad v_r = 0, \quad v_z = V_{ex} (R_1^2 - r^2).$$

4. Замена переменных

Для численного исследования удобно сделать замену переменных. В области конуса, $z \in [L_1, L_1 + L_2]$ была сделана замена: $x_2 = \frac{R_1}{Bz + C} r$. В области выходного цилиндра – $x_3 = \frac{R_1}{R_2} r$. Такое преобразование координат позволяет работать с прямоугольной областью $x \in [0, R_1]$ для любых z . Это учтено и при записи определяющих соотношений. В пределах цилиндрической камеры $x = r$, в области конуса $x = \frac{R_1}{Bz + C} r$, а в области выходного цилиндра $x = \frac{R_1}{R_2} r$.

В безразмерных переменных

$$\bar{v}_r = \frac{v_r}{v_*}, \quad \bar{v}_z = \frac{v_z}{v_*}, \quad \bar{r} = \frac{r}{r_*}, \quad \bar{z} = \frac{z}{z_*}, \quad \bar{\omega} = \frac{\omega}{\omega_*},$$

$$\theta = \frac{T - T_0}{T_* - T_0}, \quad \tau = \frac{t}{t_*}, \quad e_{ij} = \frac{\varepsilon_{ij}}{\varepsilon_*}, \quad s_{ij} = \frac{\sigma_{ij}}{\sigma_*},$$

где

$$v_* = \frac{x_*}{t_*}, \quad x_* = \sqrt{\kappa_T t_*}, \quad \kappa_T = \frac{\lambda_T}{c\rho_s}, \quad t_* = \frac{c\rho_s RT_*^2}{EQk_0} \exp\left(\frac{E}{RT_*}\right), \quad T_* = T_0 + \frac{Q}{c\rho_s},$$

$$\omega_* = \varepsilon_* = 3\alpha_T(T_* - T_0), \quad \sigma_* = 3K\alpha_T(T_* - T_0),$$

задача принимает вид:

$$\frac{d\theta}{d\tau} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \bar{x}^2} + \frac{1}{\bar{x}} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial \bar{x}} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial \bar{z}^2} + \frac{d\eta}{d\tau} - \delta(\theta + \sigma_T) \frac{de_{kk}}{d\tau} + \delta s_{ij}^v \frac{de_{ij}}{d\tau}, \quad (17)$$

$$\frac{d\eta}{d\tau} = \frac{1 - \eta}{\theta_0} \exp\left(\frac{\theta - 1 - \delta A(\sigma_T + 1) \sum_{i,j} s_{ij} e_{ij}}{\beta(\theta + \sigma_T)}\right), \quad (18)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \nabla \cdot \rho \bar{v} = 0. \quad (19)$$

$$\bar{\rho} N \frac{d\bar{v}_r}{d\tau} = \frac{2}{H_1} \left[\frac{\partial^2 \bar{v}_r}{\partial \bar{r}^2} + \frac{H_1}{2} \frac{\partial^2 \bar{v}_r}{\partial \bar{z}^2} + \left(1 - \frac{H_1}{2}\right) \frac{\partial^2 \bar{v}_z}{\partial \bar{r} \partial \bar{z}} + \frac{1}{\bar{r}} \left[\left(1 - \frac{H_1}{2}\right) \frac{\partial \bar{v}_r}{\partial \bar{r}} + (1 - H_1) \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial \bar{z}} \right] \right] + \quad (20)$$

$$+ \varphi \left[\frac{1}{1 - h_1} \cdot \frac{\partial e_{rr}}{\partial \bar{r}} + \frac{\partial e_{zz}}{\partial \bar{r}} + \frac{h_1}{1 - h_1} \cdot \frac{\partial e_{rz}}{\partial \bar{z}} - \frac{3 - 2h_1}{3 - 3h_1} \cdot \frac{\partial \bar{\omega}}{\partial \bar{r}} + \frac{1}{\bar{r}} \left(\frac{1}{1 - h_1} e_{rr} + e_{zz} - \frac{3 - 2h_1}{3 - 3h_1} \bar{\omega} \right) \right] - \omega_* H_1 \left(\frac{\partial \bar{\omega}}{\partial \bar{r}} + \frac{\dot{\bar{\omega}}}{\bar{r}} \right),$$

$$\bar{\rho} N \frac{d\bar{v}_z}{d\tau} = \frac{2}{H_1} \frac{\partial^2 \bar{v}_z}{\partial \bar{z}^2} + \frac{\partial^2 \bar{v}_z}{\partial \bar{r}^2} + \frac{2 - H_1}{H_1} \frac{\partial^2 \bar{v}_r}{\partial \bar{r} \partial \bar{z}} + \frac{1}{\bar{r}} \cdot \left[\frac{\partial \bar{v}_r}{\partial \bar{z}} + \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial \bar{r}} \right] + \quad (21)$$

$$+ \varphi \left[\frac{h_1}{1 - h_1} \cdot \left(\frac{\partial e_{rz}}{\partial \bar{r}} + \frac{e_{rz}}{\bar{r}} + \frac{1}{h_1} \frac{\partial e_{zz}}{\partial \bar{z}} \right) + \frac{\partial e_{rr}}{\partial \bar{z}} - \frac{3 - 2h_1}{3 - 3h_1} \cdot \frac{\partial \bar{\omega}}{\partial \bar{z}} \right] - \omega_* H_1 \frac{\partial \bar{\omega}}{\partial \bar{z}},$$

$$\bar{\omega} = \theta + g \cdot \eta.$$

Граничные и начальные условия запишутся так:

$$\tau = 0: \quad \theta = 0, \eta = 0, \quad \bar{v}_r = 0, \bar{v}_z = 0,$$

$$\bar{x} = 0: \quad \frac{\partial \theta}{\partial \bar{x}} = 0, \quad \bar{x} = \bar{R}_1: \begin{cases} \theta = \theta_e, \quad \tau \leq \tau_h \\ \frac{\bar{R}_1 \cos(\gamma)}{B\bar{z} + \bar{C}} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial \bar{x}} + \sin(\gamma) \frac{\partial \theta}{\partial \bar{z}} = \text{Nu} \cdot \theta, \quad \tau > \tau_h, \end{cases}$$

$$\bar{z} = 0: \quad \begin{cases} \theta = \theta_e, \quad \tau \leq \tau_h \\ \frac{\partial \theta}{\partial \bar{z}} = \text{Nu} \cdot \theta, \quad \tau > \tau_h, \end{cases} \quad \bar{z} = \bar{L}: \quad -\frac{\partial \theta}{\partial \bar{z}} = P \left[(\theta + \sigma_T)^4 - \sigma_T^4 \right],$$

$$\bar{x} = 0: \quad \frac{\partial \bar{v}_r}{\partial \bar{x}} = 0, \quad \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial \bar{x}} = 0, \quad \bar{x} = \bar{R}_1: \quad \bar{v}_r = 0, \quad \bar{v}_z = 0,$$

$$\bar{z} = 0: \quad \bar{v}_r = 0, \quad \bar{v}_z = \bar{V}_{pr}, \quad \bar{z} = \bar{L}: \quad \bar{v}_r = 0, \quad \bar{v}_z = \bar{V}_{ex} (\bar{R}_1^2 - \bar{x}^2),$$

где $\bar{V}_{pr} = \frac{V_{pr}}{v_*}, \quad \bar{L} = \frac{L}{x_*}, \quad N = \frac{\kappa_T}{\mu_v / \rho_s}, \quad H_1 = \frac{2\mu_v}{\zeta + \frac{4}{3}\mu_v}, \quad \varphi = \frac{\lambda T_* \varepsilon_*}{\mu_v}, \quad h_1 = \frac{2\mu}{\lambda + 2\mu},$

$$\text{Nu} = \frac{\alpha_h x_*}{\lambda_T}, \quad \delta = \frac{K \alpha_T \omega_*}{c\rho}, \quad \sigma_T = \frac{T_0}{T_* - T_0}, \quad \theta_0 = \frac{1}{\beta(\theta + \sigma_T)}, \quad A = \frac{k_\sigma Q}{E}, \quad \beta = \frac{RT_*}{E},$$

$$g = \frac{\alpha_p - \alpha_r}{\alpha_T (T_* - T_0)}, \quad P = \frac{\sigma_{st} x_* (T_* - T_0)^3}{\lambda_T}.$$

Все безразмерные параметры имеют четкий физический смысл.

5. Алгоритм численного исследования задачи

Задача решалась численно. Поскольку уравнения (17), (20), (21) относятся к параболическому типу, для их решения использована схема переменных направлений, которая для уравнения

$$\frac{\partial F}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 F}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 F}{\partial \bar{z}^2} + \Psi(\bar{x}, \bar{z})$$

принимает следующий вид [14]:

$$\frac{F_{i,j}^{n+1/2} - F_{i,j}^n}{\Delta\tau/2} = \frac{F_{i+1,j}^{n+1/2} - 2F_{i,j}^{n+1/2} + F_{i-1,j}^{n+1/2}}{\Delta\bar{x}^2} + \frac{F_{i,j+1}^n - 2F_{i,j}^n + F_{i,j-1}^n}{\Delta\bar{z}^2} + \Psi_{i,j}^n,$$

$$\frac{F_{i,j}^{n+1} - F_{i,j}^{n+1/2}}{\Delta\tau/2} = \frac{F_{i+1,j}^{n+1/2} - 2F_{i,j}^{n+1/2} + F_{i-1,j}^{n+1/2}}{\Delta\bar{x}^2} + \frac{F_{i,j+1}^{n+1} - 2F_{i,j}^{n+1} + F_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta\bar{z}^2} + \Psi_{i,j}^n,$$

где n – номер временного слоя, все первые производные вошли в функцию ψ . Для решения полученной системы конечно-разностных уравнений используется метод прогонки вдоль осей \bar{x} и \bar{z} .

Для решения уравнения (18) использована явно-неявная разностная схема. По переменной η схема неявная, а значения температуры и компонент тензоров напряжений и деформаций вычисляются предварительно в процессе решения уравнений (17), (20), (21) и считаются «замороженными».

$$\frac{\eta_{i,j}^{n+1} - \eta_{i,j}^n}{\Delta\tau} = \frac{(1 - \eta_{i,j}^{n+1})}{\theta_0} \exp \left(\frac{\theta_{i,j}^n - 1 - \delta A (\sigma_T + 1) (s_{xx} e_{xx} + s_{yy} e_{yy})_{i,j}^n}{\beta (\theta_{i,j}^n + \sigma_T)} \right).$$

Время сгорания смеси t_c отслеживалось по выполнению условия

$$\frac{1}{R_1 L} \cdot \int_0^{L/R_1} \int_0^R \eta(x, z) dx dz > 0,999.$$

Для проверки правильности работы программы проведено сравнение результатов расчетов с данными программного комплекса Elcut для следующего случая: камера (цилиндр и конус) заполнены порошковым реагентом, насадок отсутствует, при $z = \bar{L}$ поставлено условие адиабатичности: $\frac{\partial \theta}{\partial \bar{z}} = 0$,

осуществляется инертный прогрев смеси. В расчетах принято, что $T_0 = 0$ °С, $T_c \in [500, 800]$ °С. Для проведения расчетов использовались данные для смеси 86 % Ni+14 % Al [2, 15]: $\rho_s = 6685$ кг/м³, $c = 660$ Дж/(кг·К), $\lambda_T = 123$ Вт/(м·К), $k_0 = 10^5$ с⁻¹, $E = 10^5$ Дж/моль, $Q = 8 \cdot 10^9$ Дж/м³, $T_* = 1723$ К, $T_0 = 300$ К, $R_1 = 2$ см, $R_2 = 1$ см, $L_1 = 10$ см, $L_2 = 10$ см, $\mu_v = 6,5 \cdot 10^{-3}$ Па·с, $\zeta = 5,2 \cdot 10^{-3}$ Па·с, $\alpha_h = 400$ Вт/м²/К, $\rho_0 = 0,5$. При переходе к безразмерным параметрам это соответствует следующим значениям: $\beta = 0,1$, $\sigma_T = 0,21$, $\varphi = 1,8$, $H_1 = 0,8$, $N = 31$, $P = 0,002 \dots 0,004$, $Nu = 6,5 \cdot 10^{-4}$, $\bar{R}_1 = 100$, $\bar{L}_1 = \bar{L}_2 = 500$.

Для сравнения результаты расчетов температурного поля к моменту времени $t = 9,5$ с приведены в таблице.

Сравнение с результатами программного комплекса Elcut. $T_c = 600$ °С

R, z	Температура ($\Delta t = 150$ мс), °С		Температура ($\Delta t = 15$ мс), °С	
	Elcut	Численный счет	Elcut	Численный счет
$R_1/2, L_1/2$	585,29	585,76	586,48	585,77
$R_1/2, L_1$	586,60	587,18	587,97	587,17
$R_1/2, 3L_1/4$	583,97	584,58	585,24	584,59

Видно, что результаты отличаются не более чем на 0,1–0,2 %.

Исследована сеточная сходимость. Выяснено, что при достижении шагами по пространству значений $\Delta\bar{x} = 2$, $\Delta\bar{z} = 4$, шагом по времени – $\Delta\tau = 1$ и дальнейшем их уменьшении значения расчетных величин отличаются менее чем на 1 %. Поэтому при численном исследовании использовались указанные значения шагов. Таким образом, расчетная область представляет собой прямоугольник 50·875 точек.

6. Пример расчетов

В процессе численного счета определялись и анализировались поля температуры, степени превращения, компонент скоростей и тензоров напряжений и деформаций.

Модель позволяет проводить исследования времени нагрева, при котором произойдет устойчивое воспламенение смеси τ_h , и его зависимости от параметров задачи. В результате расчетов получаем двумерные поля всех исследуемых величин, анализ которых позволяет делать выводы о динамике процесса. Для практических приложений представляет интерес оптимизация технологических параметров (таких как скорость плунжера, геометрическая форма и размеры камеры и матрицы, время начала экструзии и т.д.). В рамках модели возможно исследование влияния теплофизических параметров и эффекта связанности на эволюцию напряженно-деформированного состояния смеси.

Большой интерес представляет сравнение реологических моделей. Наиболее отчетливо различие между ними проявляется на примере компоненты скорости v_z . На рис. 2 приведено распределение скорости в момент, когда пресс полностью прошел цилиндрическую камеру.

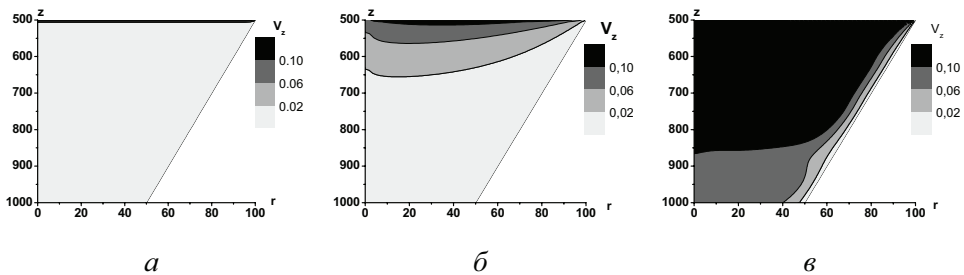


Рис. 2. Поле компоненты скорости: v_z , *a* – вязкая модель, *б* – гипопругая модель, *в* – вязкоупругая модель; $\beta = 0,1$, $\delta = 0,03$, $A = 10$, $\rho_0 = 0,5$, $v_{pr} = 0,16$, $\varphi = 1,8$, $H_1 = 0,8$, $N = 31$, $P = 0,003$, $Nu = 6,5 \cdot 10^{-4}$, $\bar{R}_1 = 100$, $\tau = 3450$

Как видно, вязкая модель (рис. 2, *а*) хуже всего описывает передачу возмущения от пресса к выдавливаемой среде. В случае гипопругой модели (рис. 2, *б*), несмотря на отсутствие возмущений в большей части объема, занимаемого смесью, в выходной части насадка скорости достигает значительных величин. Это объясняется тем, что на каждом временном шаге на верхней подвижной границе задается профиль Пуазейля. По-видимому, требуются дополнительные соображения, чтобы задать корректное условие на верхней границе в гипопругой модели. Наибольшее изменение осевой компоненты скорости наблюдается в рамках обобщенной вязкоупругой модели среды (рис. 2, *в*).

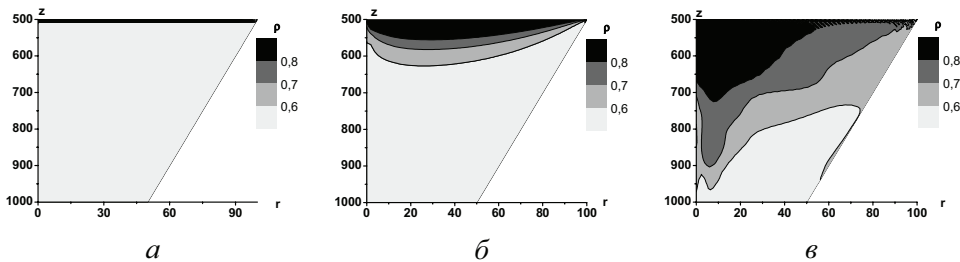


Рис. 3. Поле плотности: *а* – вязкая модель, *б* – гипопругая модель, *в* – вязкоупругая модель; $\beta = 0,1$, $\delta = 0,03$, $A = 10$, $\rho_0 = 0,5$, $\nu_{pr} = 0,16$, $\varphi = 1,8$, $H_1 = 0,8$, $N = 31$, $P = 0,003$, $Nu = 6,5 \cdot 10^{-4}$, $\bar{R}_1 = 100$, $\tau = 3450$

На рис. 3. представлены результаты расчетов поля плотности. Ситуация аналогична предыдущей: вязкая модель плохо отражает воздействие пресса на экструдруемый материал, в гипопругой модели область с высокой плотностью насадка никак не соединяется с областью камеры, поскольку профиль Пуазейля задается только при $z \geq 1000$. Вязкоупругая модель позволяет увидеть неоднородное распределение плотности по образцу, что чаще всего и имеет место на практике [16]. Дальнейшие расчеты предполагается проводить в рамках этой модели.

Библиографический список

1. Найбороденко Ю.С., Итин В.И., Савицкий К.В. Экзотермические эффекты при спекании смеси порошков никеля и алюминия // Известия вузов. Сер. Физика. – 1968. – № 10. – С. 27–35.
2. Эволюция зеренной структуры интерметаллического соединения Ni_3Al при экструзии интерметаллида в процессе его высокотемпературного синтеза под давлением / В.Е. Овчаренко, О.В. Лапшин, В.А. Чудинов, Е.Г. Колобова // Физическая мезомеханика. – 2005. – Т. 8. – Спец. вып. – С. 65–68.

3. Смоляков В.К., Лапшин О.В. Формирование макроскопической структуры продукта в режиме силового СВС-компактирования // Физика горения и взрыва. – 2002. – Т. 38, № 2. – С. 26–35.
4. Стельмах Л.С., Жилиева Н.Н., Столин А.М. Математическое моделирование тепловых режимов СВС-компактирования // Инженерно-физический журнал. – 1992. – Т. 63, № 5. – С. 623–629.
5. Стельмах Л.С., Жилиева Н.Н., Столин А.М. О неизотермической реодинамике при СВС-прессовании порошковых материалов // Инженерно-физический журнал. – 1991. – Т. 61, № 1. – С. 33–40.
6. Стельмах Л.С., Столин А.М., Хусид Б.Л. Реодинамика выдавливания вязких сжимаемых материалов // Инженерно-физический журнал. – 1991. – Т. 61, № 2. – С. 268–276.
7. Скороход В.В. Теория нелинейно-вязкого и пластического поведения пористых материалов // Порошковая металлургия. – 1987. – № 8. – С. 23–30.
8. Винокуров Г.Г., Попов О.Н., Бурнашева Л.Н. Разработка двумерной модели Монте-Карло для описания макроструктуры порошковых материалов при прессовании // Физическая мезомеханика. – 2006. – Т. 9, № 4. – С. 79–85.
9. Коваленко А.Д. Основы термоупругости. – Киев.: Наукова думка, 1970. – 303 с.
10. Боли Б., Уэйнер Дж. Теория температурных напряжений. – М.: Мир, 1964. – 517 с.
11. Бутягин П.Ю. Проблемы и перспективы механохимии // Успехи химии. – 1994. – Т. 63. – № 12. – С. 1031–1043.
12. Седов Л.И. Механика сплошной среды. – М.: Наука, 1970. – 568 с.
13. Математическое моделирование процессов реодинамики при плунжерной экструзии полимерных материалов / К.В. Шапкин, Л.С. Стельмах, А.М. Столин, Г.С. Баронин // Вестник ТГТУ. – 2007. – Т. 13, № 3. – С. 747–754.
14. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. – М.: Наука, 1971. – 552 с.
15. Найбороденко Ю.С., Лавренчук Г.В., Филатов Ю.М. Самораспространяющийся высокотемпературный синтез алюминидов. I: Термодинамический анализ // Порошковая металлургия. – 1982. – №12. – С. 4–9.
16. Овчаренко В.Е., Первалова О.Б., Лапшин О.В. Влияние пластической деформации продукта высокотемпературного синтеза на микроструктуру синтезированного под давлением интерметаллического соединения Ni_3Al // Физика и химия обработки материалов. – 2008. – № 4. – С. 18–25.

Получено 12.07.2010