

УДК 532.135, 532.5, 541.54, 621.772

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РЕОДИНАМИКИ И ТЕПЛООБМЕНА В СВС-ТЕХНОЛОГИИ

Л.С. Стельмах¹, А.М. Столин²

¹*Институт проблем химической физики РАН*

²*Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения РАН, г. Черноголовка,
Россия*

[e-mail: stelm@ism.ac.ru](mailto:stelm@ism.ac.ru)

Введение. Около 20 лет назад, по предложению А.Г. Мержанова и при его непосредственном участии были начаты исследования, связанные с разработкой новых технологических процессов СВС, основанных на сочетании горения и сдвигового деформирования горячих продуктов синтеза: прессование, экструзия, наплавка и измельчение. Уже первые эксперименты по отработке экспериментальных схем процессов выявили необходимость попадания технологических параметров в оптимальную область. Весьма эффективным здесь оказался метод математического моделирования. На основе имеющегося у нас опыта по математическому моделированию СВС-технологий у нас сформировался определенный подход к этой проблеме. Наш опыт состоит в моделировании следующих процессов:

- СВС-экструзия (получение длинномерных изделий путем выдавливания их через профилирующую матрицу), СВС-компактирование (получение изделий путем компактирования их в прессформе), СВС-измельчение (получение мелкодисперсных порошковых материалов, использующее давление со сдвигом), СВС-наплавка (растекание материала по подложке). [1-26]
- тепловые модели, позволяющие рассчитывать температурные поля, возникающие как в материале образца, так и в элементах пресс-оснастки ; [1-5, 8]
- неізотермические реодинамические модели, которые учитывают реологическое поведение материалов и позволяют изучать не только температурный режим, но и кинетику уплотнения и напряженно-деформированное состояние материала; [6-23]
- пресс-оснастка для СВС-процессов, неізотермические методы расчета, учитывающие существенную нестационарность и неізотермичность процессов, а также термическую градиентность по толщине стенок пресс-формы [24-26].

Этот опыт позволил выработать методологию моделирования СВС - технологий.

Математическое моделирование конкретных технологических процессов должно включать в себя следующие этапы:

- Формулировка математической схемы, соответствующей реальным условиям протекания производства (оборудование, материалы, процесс). Важную часть этого этапа составляет физический анализ процесса и выбор основных параметров модели.
- Расчет конкретных данных (физических и химических свойств материала - технологического объекта) и реальных условий протекания процесса (граничные и начальные условия) и конкретные данные о технологическом режиме и оборудовании (технологические и геометрические параметры).
- Сопоставление модели и эксперимента. Здесь важно выявить рамки применимости модели и ее возможности для конкретных практических рекомендаций и прогноза возникновения проблемных ситуаций в технологической практике.
- Использование результатов математического моделирования в инженерной практике для получения конкретных изделий.

Анализ технологических процессов с позиций основных стадий. Особенностью предлагаемого нами подхода к моделированию технологических процессов является выделение самостоятельных последовательно протекающих физических стадий, каждая из

которых подробно анализируется с учетом их специфических особенностей и задач. Теоретический анализ каждой последующей стадии учитывает результаты анализа предыдущей стадии в виде начальных условий. Каждый технологический процесс предполагает сумму ряда технологических операций, соответствующих основным стадиям процесса. Эти стадии можно выделить на временных диаграммах процесса. Например, СВС-экструзия порошковых материалов предполагает следующие три главные стадии: горение и задержка, прессование, выдавливание.

Основная задача стадии горения и задержки - добиться получения тугоплавкого материала за счет протекания химической реакции. Однако специфическая особенность процесса на этой стадии - необходимость отвода примесных газов - обуславливает задержку подачи давления. В конечном итоге на первой стадии происходит синтез тугоплавкого соединения из исходных компонент.

На стадии прессования происходит уплотнение продуктов экзотермической реакции за счет уменьшения объемов воздушных включений в материале и закрытия макропор. Наличие этой стадии обусловлено свойством сжимаемости порошкового материала.

На стадии выдавливания решаются две важные проблемы: формование изделия и его охлаждение. Многообразие различных конфигураций изделия обеспечивается формой матрицы, через которую продавливается материал. Таким образом, на третьей стадии происходит течение материала, закономерности которого в значительной степени определяются его реологическими свойствами. При отверждении материала за счет охлаждения важно не допустить больших термических напряжений в образце и в стенках прессформы.

Указанные особенности обуславливают специфику автономного теоретического анализа тепловых режимов на каждой из стадий, которую необходимо учитывать при формулировке математических моделей. На стадии горения-задержки важно учитывать наличие подвижной границы - фронта горения, перемещающегося по объему материала. Для стадии прессования характерно изменение высоты образца и зависимость теплофизических параметров материала от его плотности. На стадии выдавливания необходимо учитывать конвективный перенос тепла за счет макроперемещения материала и наличие двух подвижных границ: крышки плунжера пресса и нижней границы выдавливаемого образца.

Важно отметить следующее преимущество использованного подхода к анализу результатов по отдельным стадиям: анализ каждой из них имеет и самостоятельное значение. Например, первая стадия соответствует процессу получения порошковых материалов методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза. Объединение первой и второй стадий соответствует существующей СТИМ-технологии получения изделий.

Анализ параметров модели и эффективные характеристики процессов. Развитие технологического процесса зависит от разнообразных режимных факторов, внешних условий, собственных свойств материала, геометрии прессоснастки и ее характеристик. Влияние этих факторов должны быть отражено через параметры модели. Выделим следующие четыре основных группы параметров: технологические параметры, физические свойства образца, характеристики прессоснастки, параметры определяющие обстановку на поверхности взаимодействия образца с окружающей средой (граничные условия). При выборе оптимальных условий проведения процесса нужно последовательно определить значение каждого параметра из этих четырех групп. Например, для СВС-компактирования к числу технологических параметров следует отнести: давление P на плунжере пресса, скорость U_n плунжера пресса, время задержки t_z , время выдержки t_v (выдержка материала под давлением для СВС-прессования). Эти параметры довольно просто регулируются в эксперименте. Ряд осложнений, возникающих при экструзии, удастся устранить, меняя характеристики прессоснастки. Среди этих характеристик выделим следующие: геометрические размеры прессформы (высота и толщина стенок, внутренний диаметр пуансона); физические свойства материала, из которого изготовлена прессформа; геометрические размеры матрицы (угол конической распушки, диаметр ее отверстия, толщина стенок); физические свойства материала матрицы.

Существенно влияют на качество изделий теплофизические свойства материала порошковой заготовки в температурном интервале процесса: удельная теплоемкость (c); зависимость температуропроводности (a) от температуры (T) и плотности (ρ); зависимость теплопроводности (λ) от температуры (T) и плотности (ρ); температура плавления связки ($T_{пл}$).

Обратим внимание на возможность использования в моделях так называемых эффективных параметров. В моделях приняты эффективные характеристики горения образца: скорость горения (U_r) и температура горения (T_r) и $T_{ж}$ - температуру живучести материала. На самом деле, количественное описание процесса горения требует знания кинетических параметров химической реакции, прямое экспериментальное определение которых является сложной задачей. Эффективные характеристики горения, напротив, надежно определяются экспериментально в реальных технологических условиях эксперимента.

Во время продавливания материала через матрицу он должен обладать способностью к пластическому деформированию. Поведение материала при деформировании определяется комплексом реологических свойств, и, прежде всего, вязкостью и ее зависимостью от скорости сдвига. Например, в тепловой модели, влияние реологических свойств на процесс отражено опосредованно - через эффективную характеристику $T_{ж}$ - температуру живучести. При некоторой условности этой характеристики, можно считать, что выше этой температуры материал проявляет способность к течению, ниже - затвердевает. Упрощенность такого подхода состоит в том, что рассматривается не зависимость температуры живучести от комплекса реологических свойств, а считается, что $T_{ж} = \text{const}$ и определяется из эксперимента.

Такой подход, с одной стороны, существенно упростил математические сложности моделирования технологических процессов, а с другой стороны, позволил применять модели для изучения различных экспериментальных ситуаций, проводить сопоставление теории и эксперимента.

Чтобы правильно сформулировать тепловые граничные условия, необходимо учитывать следующую группу факторов: теплоизоляция образца; наличие направляющих калибров; наличие заглушки в отверстии матрицы; теплоизоляция стенок матрицы или наличие смазки. Таким образом, перечисленные параметры тепловой модели находятся либо расчетным способом, либо надежно определяются из эксперимента. Это позволяет применять модель для изучения различных экспериментальных ситуаций, проводить количественное описание процесса, проводить прямое сопоставление теории и эксперимента.

Формулировка модели. СВС-технология осложняется многими процессами: тепловыделением, гидродинамикой, теплообменом, спеканием и т.д. Важную роль играют реологические факторы, поскольку объектом деформирования является тугоплавкий сжимаемый материал. При формулировке математической модели вместо попытки создания "универсальной теории", учитывающей все факторы, влияющие на процесс, целесообразно ограничиться возможно более простой математической схемой, учитывающей лишь отдельные факторы, которые в тот или иной отрезок времени управляют процессом.

В тепловых моделях в качестве основного параметра процесса выделена температура, которая является функцией трех координат и времени $T = T(r, z, \phi, t)$ (r -радиальная, z -осевая, ϕ - угловая координаты). Ведущая роль этого параметра подсказывается большим характерным температурным интервалом порядка 2000–3000⁰К. Тепловые модели формулируются на основе многих допущений на которых мы не будем останавливаться. Здесь приведена постановка задачи.

Система дифференциальных уравнений для оболочки (асбест, песок, датолит) (1):

$$\frac{\partial T_1}{\partial t} = a_1 \nabla^2 T_1 = a_1 \left(\frac{\partial^2 T_1}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T_1}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_1}{\partial z^2} \right),$$

образца (2):

$$c \left(\frac{\partial(\rho T_2)}{\partial t} + f(\rho, z) \frac{\partial T_2}{\partial z} \right) = \lambda_2(\rho) \nabla^2 T_2, ,$$

и прессформы (3):

$$\frac{\partial T_3}{\partial t} = a_3 \nabla^2 T_3 = a_3 \left(\frac{\partial^2 T_3}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T_3}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_3}{\partial z^2} \right).$$

В зависимости от стадии процесса функции $f(\rho, z)$, $\lambda_2(\rho)$, входящие в дифференциальные уравнения имеют следующие значения:

$$f(\rho, z) = \begin{cases} 0 (\text{горение} - \text{выдержка}) \\ \frac{\rho U_n z}{H_0} (\text{прессование}) \\ \frac{Q}{\pi R^2(z)} (\text{выдавливание}) \end{cases},$$

$$\lambda_2(\rho) = \begin{cases} \lambda_0 (\text{горение} - \text{выдержка}) \\ \lambda_0 \left(\frac{\rho_0 (1 - U_n t / H_0)}{\rho_0} \right)^k (\text{прессование}). \\ \lambda_k (\text{выдавливание}) \end{cases}.$$

В результате численного решения, находилось температурное поле в образце, теплоизоляторе, прессформе, выдавливаемой части материала и прогнозировалась длина изделия. Когда часть материала, находящаяся в профилирующей матрице и расположенная непосредственно над ее отверстием, теряла «живучесть», т.е. способность к пластическому деформированию, и закупоривала выходное отверстие, выдавливание прекращалось. Полученная длина-ордината нижней границы образца – и являлась искомой длиной изделия.

В тепловых моделях роль реологического фактора учитывалась через эффективную характеристику – температуру живучести. Однако эти модели не позволяют рассчитывать процессы высокотемпературного деформирования и уплотнения, основными параметрами которых являются макроскопическая плотность, скорость и напряжения в материале. В процессе синтеза материала, его уплотнении и остывании, резко меняется его способность к макроскопическому течению, которая определяется реологическими свойствами горячей пористой массы. Однако переведенный в высокотемпературное состояние пористый материал является в реологическом отношении объектом малоизученным. Его специфика заключается в наличии большого объема пор (до 50 %) и изменении пористости в процессе уплотнения, а также образовании в области предплавления температур непрерывного каркаса из частиц тугоплавкой составляющей, который оказывает сопротивление деформированию. Для качественного и количественного анализа неизотермического течения сжимаемых материалов в различных зонах оборудования СВС-процессов уже необходимо использовать неизотермические реодинамические модели, которые являются усложнением тепловых моделей.

Теоретическое описание основано на рассмотрении уравнений неразрывности, движения, реологических соотношений и теплообмена:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho V)}{\partial z} = 0$$

$$\rho \rho_1 \left(\frac{\partial V}{\partial t} + V \frac{\partial V}{\partial z} \right) = \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z}$$

$$\sigma_{zz} = \left(\frac{4}{3} \mu + \xi \right) \frac{\partial V}{\partial z}$$

$$\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = \left(-\frac{2}{3}\mu + \xi \right) \frac{\partial V}{\partial z}$$

$$c\rho_1 \left(\frac{\partial(\rho T_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho V T_i)}{\partial z} \right) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda(\rho) \frac{\partial T_i}{\partial z} \right) - \frac{2\alpha_i}{r_i} (T_i - T_0)$$

индекс $i=1, 2$ соответственно для температуры образца, находящегося внутри прессформы и выдавливаемой части образца (при экструзии).

Граничные условия:

$$-\lambda(\rho) \frac{\partial T_1}{\partial z} = \begin{cases} \alpha_3(T_1 - T_0), z = 0 \\ \alpha_4(T_1 - T_0), z = H(t) \end{cases}, \quad -\lambda(\rho) \frac{\partial T_2}{\partial z} = \begin{cases} -\lambda(\rho) \frac{\partial T_1}{\partial z}, z = 0, \\ \alpha_5(T_2 - T_0), T_1 = T_2, z = -L(t) \end{cases},$$

$$\sigma_{zz} = \begin{cases} -P, z = H(t) \\ 0, z = 0 \end{cases}, \quad V = \begin{cases} 0, z = 0 \text{ (прессование)} \\ -\frac{kP^n S_2}{\rho_1 \rho(0,t) S_1}, z = 0 \text{ (экструзия)} \\ V_n, z = H(t) \end{cases}.$$

Уравнения движения верхней $H(t)$ (плунжера пресса) и нижней $L(t)$ (при экструзии) границ образца:

$$\frac{dH(t)}{dt} = V_n(t), \quad \frac{d(-L(t))}{dt} = -\frac{kP^n S_2}{\rho_1 \rho(0,t) S_1}.$$

Начальные условия:

$$T(z,0) = T_*(z), \quad \rho(z,0) = \rho_0(z).$$

Следует отметить, что для сдвиговой μ и объемной ξ вязкостей учитывается не только их зависимость от плотности, но и от температуры:

$$\mu(\rho, T) = \mu_1(T) \mu_2(\rho) = \mu_1 \exp\left(\frac{U}{RT}\right) \rho^m$$

$$\xi(\rho, T) = \frac{4}{3} \mu(\rho, T) \frac{\rho}{1-\rho} = \mu_1 \exp\left(\frac{U}{RT}\right) \frac{\rho^{m+1}}{1-\rho}$$

Основная задача теоретического рассмотрения в рамках реодинамических моделей является анализ плотности, температуры и напряженно-деформированного состояния материала в процессе его прессования и экструзии в зависимости от давления, а также от начального распределения температуры и плотности по объему образца. В результате численного решения находятся неизвестные относительная плотность (ρ), скорость (V), температура (T) и напряжения ($\sigma_{zz}, \sigma_{rr}, \sigma_{\theta\theta}$), которые являются функциями только координаты (q) и времени (t).

Сопоставление модели и эксперимента.

Модель не должна содержать так называемых свободных параметров, которые зачастую используются для подгонки модели и эксперимента. Это позволяет применять модель для различных экспериментальных ситуаций и проводить прямое сопоставление теории и эксперимента.

Нами приводились сопоставления теории и эксперимента: на стадии горения-выдержки и прессования (СВС-прессование, СВС-экструзия) сопоставление проводилось по температурам в различных точках образца, теплоизолятора и пресс-оснастки, на стадии выдавливания (для СВС-экструзии) – по длине выдавленной части образца, при СВС-измельчении такое сопоставление проводилось по количеству полученного порошка, при растекании материала по поверхности - по величине радиуса и т.д. На рисунке 1 представлены зависимости длины изделия от времени задержки (рис.1, а) и от угла конической распушки профилирующей матрицы (Рис.1, б).

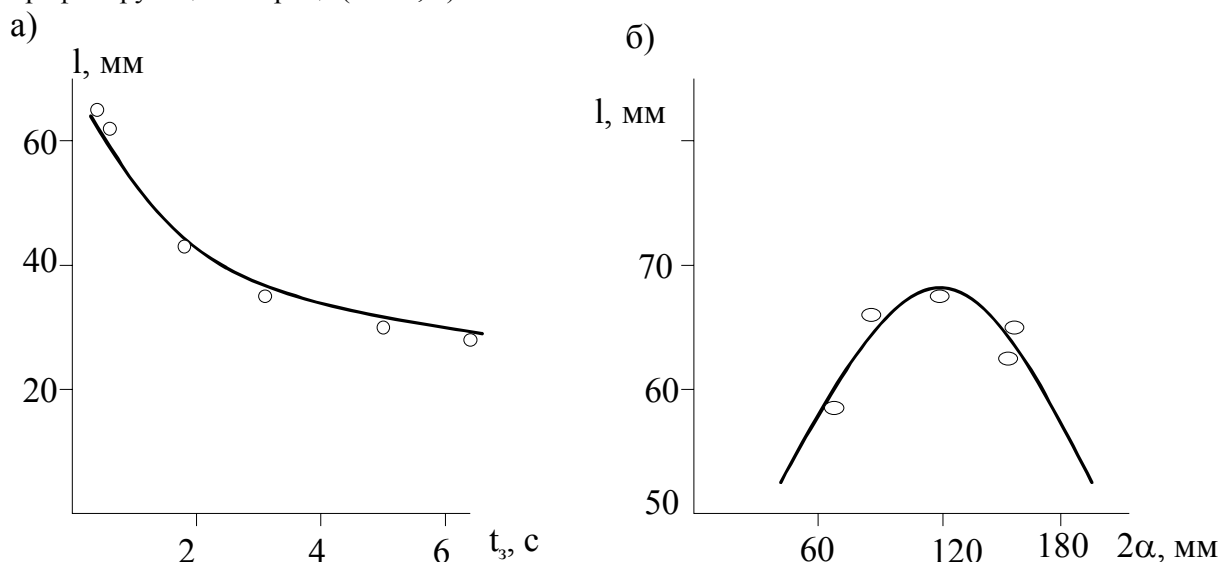


Рис.1. Зависимость длины (l) выдавленного стержня:
а) от времени задержки (t_3) - кривая -теория, точки - эксперимент;
б) от угла конической распушки матрицы (2α).

Полученные результаты находятся в хорошем количественном согласии с экспериментальными данными. Экспериментальные данные были предоставлены различными авторами (Подлесовым В.В., Веденевым С.В., Епишиным К., Л., Харатяном С., Борисовым Е.Н. и др.) и для различных материалов образца и прессоснастки. Предпринятое сопоставление проводилось по характеристикам, имеющим комплексный характер, и хорошее согласие теории и эксперимента послужило основанием для многовариантных численных исследований тепловых режимов и подтверждает вывод о ведущей роли теплопроводности в СВС процессах.

Вычислительный эксперимент и оптимизация СВС -процессов. Практическое использование результатов математического моделирования.

Следующим этапом математического моделирования является исследование применимости моделей для конкретных практических рекомендаций и прогноза возникновения проблемных ситуаций в технологической практике

В целях нахождения эффективных способов управления процессом важно исследовать ряд практических проблем:

- влияние основных параметров процесса на тепловой режим и напряженно-деформированное состояние материала;
- сопоставление различных схем эксперимента (одностороннее – двустороннее прессование, поджиг сверху или снизу, наличие или отсутствие теплоизоляции образца, роль направляющих калибров в экструзии и, применение смазок и т.п.);
- разрешение проблемных ситуаций, связанных с частичным или полным отверждением материала, высокой градиентностью по температуре, влияющей на качество изделия.

Необходимо подробно исследовать роль основных параметров процесса, таких как давление на плунжере пресса, время задержки и выдержки, геометрических размеров образца и профилирующей матрицы, степени деформации образца и т.д. Зависимости характеристик процесса от некоторых параметров оказываются немонокотными например, зависимость длины

(1) выдавленной части образца при экструзии от угла конической распушки матрицы (2α), что позволяет выделить оптимальный диапазон изменения этих параметров. Для других параметров (например, скорость плунжера прессы), влияние которых на характеристики процесса оказалось монотонным, можно выделить предельное значение, начиная с которого ее дальнейшее увеличение не влияет на характеристики процесса.

Применение модели для прогноза и объяснения экспериментальных фактов. В настоящее время в СВС-прессовании обычно используется прием дополнительной теплоизоляции заготовки. В качестве теплоизолятора чаще всего применяют песок, датолит и другие материалы. Основным назначением дополнительной теплоизоляции является предотвращение перегрева прессформы. Но для слабоэкзотермических соединений в экспериментах не только вводится дополнительная теплоизоляция, но и подогрев прессформы и материала. Из анализа температурных полей, сформировавшихся к моменту окончания прессования (рис.2) в случаях (а) без предварительного подогрева материала и (б) с подогревом следует вывод о существенном влиянии подогрева как на абсолютное значение температуры материала, так и на уровень градиентности. И можно расчетным путем подобрать наиболее приемлемые условия подогрева и температуры. Это должно благоприятно сказаться на качестве образца, понижается возможность возникновения трещин.

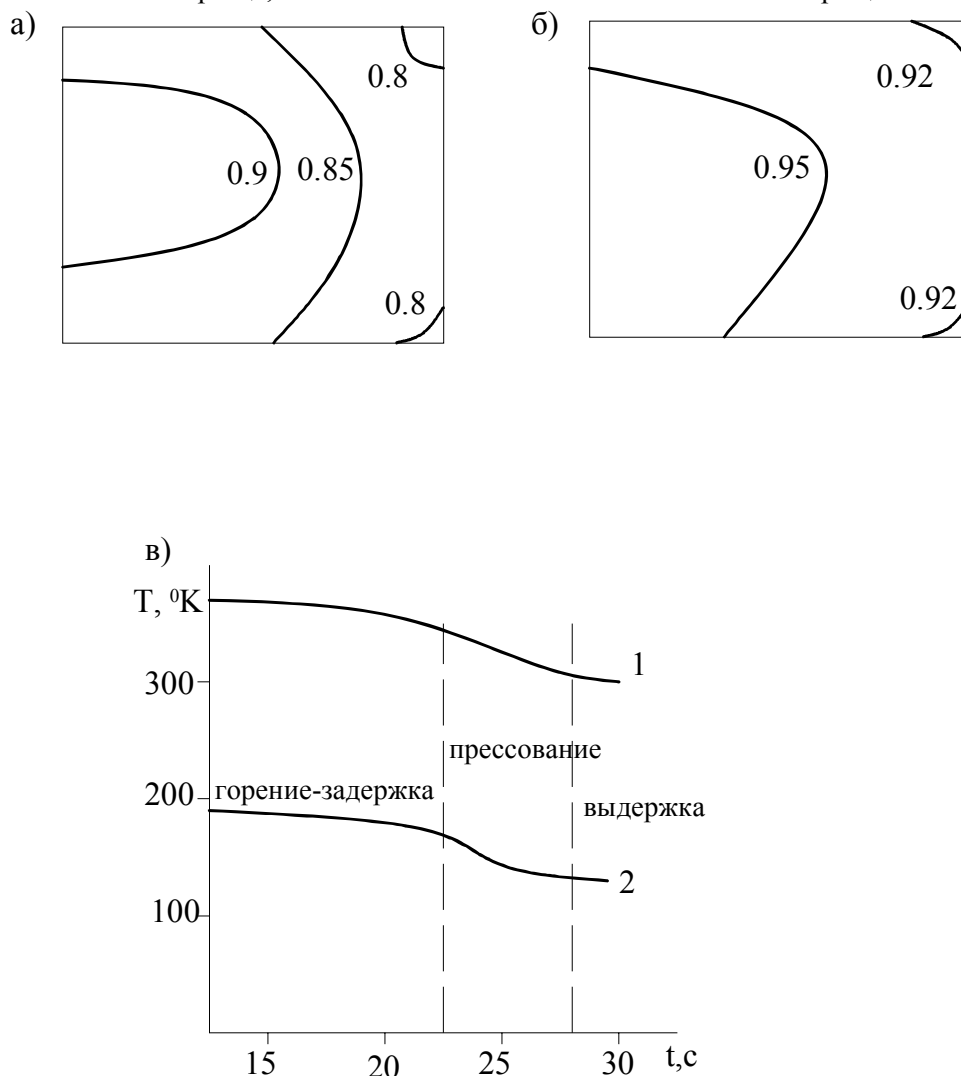


Рис.2. Распределение температурных полей в образце (а) без подогрева, б) с подогревом) и (в) температурного перепада (ΔT) от времени (t) (кривые 1 и 2 соответственно без подогрева и с подогревом).

Результаты математического моделирования оказались весьма полезными для решения проблемы воспроизводимости технологического процесса, которая является центральной для

каждого метода. Так, например, оказалось, что воспроизводимость процесса получения нагревательных элементов на основе дисилицида молибдена методом СВС-экструзии гораздо ниже, чем воспроизводимость процесса получения электродных элементов на основе карбида титана этим же методом. В ходе анализа динамики температурных изменений была выявлена причина этого экспериментального факта. Оказалось, что температурный диапазон живучести материала (интервал переработки), определяемый как разность между температурой в конце стадии прессования и температурой живучести для нагревательных материалов составляет 200-300 °С, а для карбидотитановых твердых сплавов этот диапазон равен 900°С. Таким образом, формование материала при получении нагревательных элементов ведется вблизи критических условий, когда материал теряет способность к пластическому деформированию. Выяснилось, что весьма существенным фактором является теплоотвод в отверстия матрицы. На рассматриваемой границе теплообмен происходит за счет естественной конвекции воздуха от нагретого образца и излучения энергии разогретым до температуры горения образцом. Приближение условий теплообмена на этой границе к адиабатическим резко снижает темп остывания образца.

Для снижения теплопотерь из образца было предложено использовать в отверстиях матрицы заглушку из материала, обладающего низкой теплопроводностью и не реагирующего с составом. В частности, если использовать в качестве заглушки сажу толщиной 10 мм, то по результатам численного счета это должно привести к увеличению полноты выдавливания до 60% от максимально возможной. Экспериментально этот прием реализован использованием в отверстиях матрицы графитовой запрессовки. Подбиралась и оптимальная в тепловом отношении толщина заглушки. Экспериментальное исследование показало, что при использовании заглушек толщиной 6-10 мм полнота выдавливания увеличивается на 10% и уменьшается дефектность нижней части образующегося стержня. Такой результат находится в соответствии с тепловыми расчетами (рис.3,а). Запрессовки сажи меньшей толщины не влияют на конечный результат, заглушки большей толщины оказывали отрицательное влияние, как на полноту выдавливания, так и на качество изделий, происходила перепрессовка материала, разрушался направляющий калибр. С тепловой точки зрения это можно объяснить тем, что начиная с некоторой толщины, заглушка сама увеличивает теплоотвод и начинает отрицательно влиять на полноту выдавливания материала. Изучение температурных полей в образцах на стадии горения- выдержки показало, что с определенного момента времени выдавливание невозможно, т.к. отверстие матрицы закупорено массами материала, потерявшего живучесть. Вследствие быстрого остывания материала в приматричной области, воспроизводимость процесса находится на низком уровне и имеют место такие вредные явления, как полная и частичная закупорка, перепрессовка материала в калибре. Одна из причин остывания - теплоотвод в стенки матрицы. Было исследовано влияние подогрева направляющего калибра и матрицы на полноту выдавливания. Расчеты показали, что подогрев калибра и стенок матрицы в пределах допустимого интервала температур увеличивает длину изделия в 1.3 раза при нагреве до 300 °С (рис.3,б) и в 1.7 раза при нагреве до 500 °С и в 2.3 раза при подогреве до 800°С. Проведенные эксперименты показали, что нагрев до температур, меньших 200°С, малоэффективен и визуального улучшения качества не наблюдалось. При нагреве до 250-300°С происходит увеличение полноты выдавливания в 1.2 раза, повышается плотность стержней от 4.7-4.8 г/см до 5.1-5.3 г/см, частично уменьшается трещиноватость и чешуйчатость, полностью исчезает закупорка матрицы .

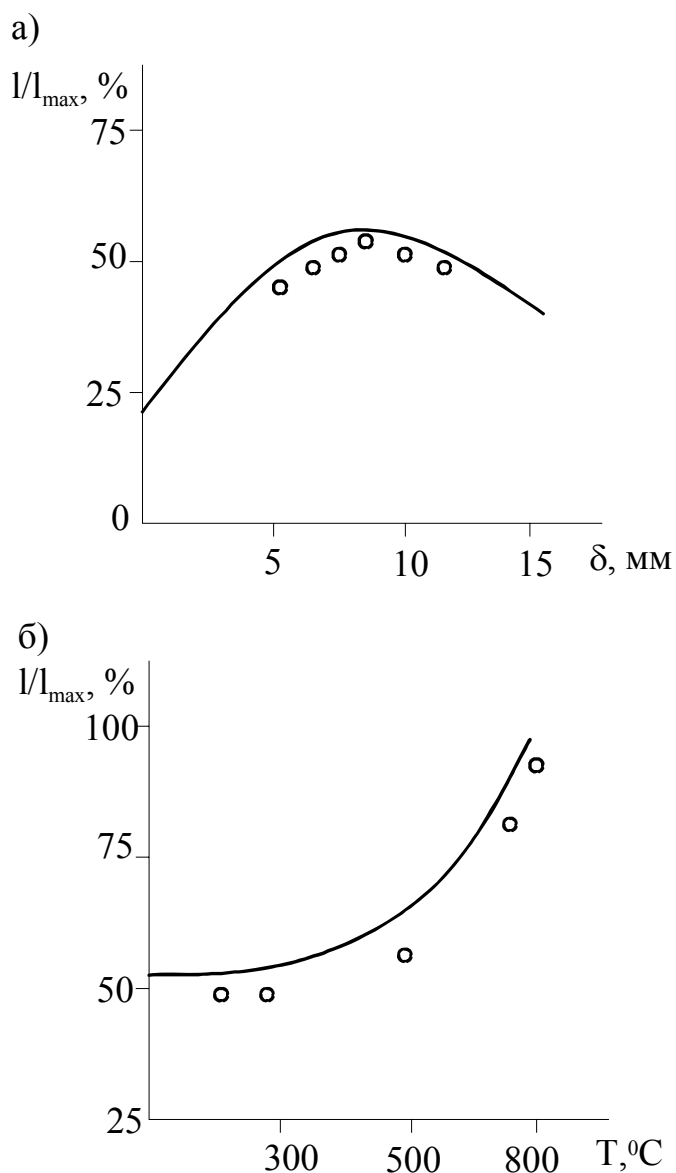


рис.3. Зависимость относительной длины (l/l_{\max} , %) выдавленной части от:

- а) толщины заглушки в отверстии матрицы (δ).
 б) температуры (T) подогрева матрицы и калибра.
 кривая - теория, точки - эксперимент.

В эксперименте получают различные распределения плотности по массовой заготовке. Например, было непонятно почему иногда экспериментальная зависимость плотности от времени имеет S-образный вид. Оказалось, что в зависимости от соотношения характерных времен (гидродинамической стабилизации $t_h = \rho_1 q_0^2 / \mu_0$, уплотнения $t_c = 4\mu_0 / 3P$, тепловой релаксации $t_T = c\rho_1 q_0^2 / \lambda_0$, $t_{cb} = q_0 / \rho V_{cb}$ –горения) возможны различные режимы деформирования: регулярный (рис.4,а), волновой (рис.4,в), и переходной (рис.4,б). В регулярном режиме уплотнение происходит одновременно по всему объему. В волновом режиме возмущение от поршня распространяется не мгновенно, как в регулярном режиме, а послойно и волна уплотнения движется по материалу со скоростью, большей, чем скорость поршня. Для переходных режимов волна уплотнения вырождается, а ширина фронта увеличивается. Этому способствует выравнивание плотности концов образца. Таким образом, модель может ответить на вопрос когда реализуется более благоприятный технологический режим.

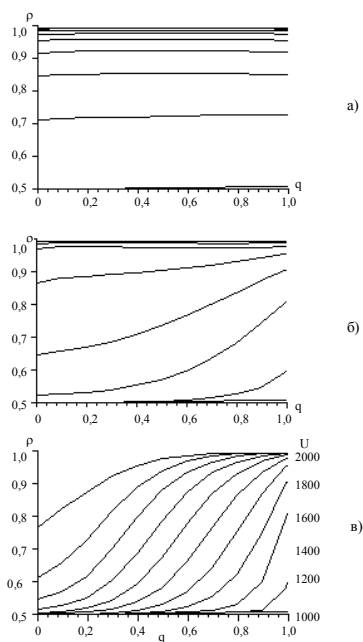


Рис.4. Распределение плотности по высоте заготовки в различные моменты времени для трех различных случаев уплотнения: а) регулярный, б) переходной и в) волновой режимы уплотнения.

На рис. 5 приведена типичная зависимость (предельной плотности $\rho_{\text{пред}}$ от значений $\lg(\kappa^{-1})$, где κ - отношение характерных времен уплотнения и тепловой релаксации: $\kappa = t_c/t_r$. На кривой $\rho_{\text{пред}}(\lg \kappa^{-1})$ можно выделить ветвь I режимов без уплотнения, для которых характерно быстрое падение температуры (сильное остывание), и ветвь III режимов предельного уплотнения, характеризующихся малыми изменениями температуры (квазиизотермическое прессование) вплоть до достижения беспористого состояния. Между этими предельными случаями реализуются промежуточные режимы неполного уплотнения (ветвь II), когда изменения температуры и пористости не являются малыми.

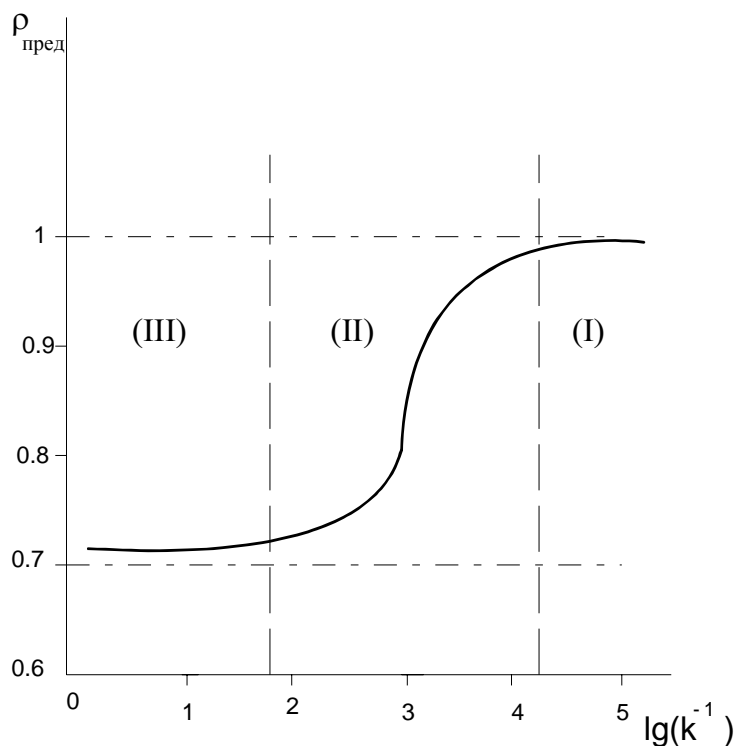


Рис.5. Зависимость предельной плотности ($\rho_{\text{пред}}$) от соотношения характерных времен

($\kappa = t_c/t_T$): I – режим без уплотнения, II – режим неполного уплотнения, III – режим предельного уплотнения.

Одним из важнейших технологических режимных параметров является время задержки t_3 - время от начала инициирования химической реакции до начала подачи давления. В работе в качестве возможных причин влияния времени задержки на кинетику уплотнения назывались изменение температуры и пластичности материала и образование прочных межзеренных мостиков (структурного каркаса). Численные исследования показали, что с увеличением времени задержки может резко снижаться температура материала, в особенности на торцах, а поэтому увеличивается и градиентность температуры. Интересно проследить влияние времени задержки на распределение напряжений в материале (поскольку осевые напряжения практически постоянны, а тангенциальные равны радиальным, ограничимся рассмотрением только радиальных напряжений). При малых временах задержки сжимающие напряжения максимальны по величине и равномерно распределены по высоте образца. Это способствует разрушению наименее прочных перешейков между зёрнами и дальнейшему, но уже медленному уплотнению системы. С увеличением времени задержки сжимающие напряжения падают, температура понижается, что препятствует дальнейшему уплотнению системы. Таким образом, приведенные результаты иллюстрируют ранее высказанные в общих физических соображениях. Отметим, что на практике на выбор оптимальной величины времени задержки влияет примесное газовыделение, однако это влияние с позиций данной теории не описывается.

Применение модели для оптимизации и прогноза новых процессов. Модель была использована для оптимизации нового процесса СВС-измельчения в зависимости от набора основных параметров процесса: режимных, плотностных и реодинамических свойств материала.

Суть СВС-измельчения состоит в механической обработке остывающих продуктов горения. При измельчении продукт горения подвергается уплотнению под действием внешнего давления. Помимо этого продукты горения остывают, изменяя свои реомеханические свойства. Остывание и потеря пластических свойств препятствуют полному измельчению материала.

В результате проведенного математического моделирования было изучено совместное влияние тепловых и реодинамических факторов на состояние материала при уплотнении и измельчении. Реодинамический аспект процесса измельчения рассматривается как транспорт массы через выходное сечение, при этом сопротивление головки принимается эмпирически "степенным" соотношением. При таком подходе возможно проследить влияние основных технологических параметров (давления, скорости вращения ротора, времени задержки), а также реологических характеристик на кинетику измельчения $m(t)$ и предельный выход продукта M . Например, была рассчитана зависимость предельного выхода продукта от значения внешнего давления P . Кривая зависимости имеет максимум, т.е. существует некоторое оптимальное давление, при котором происходит наибольший выход продукта. С одной стороны рост давления увеличивает гидродинамический транспорт материала. В то же время рост давления, приложенного извне к пористой среде, приводит к сильному уплотнению, вследствие чего растет вязкость материала, и течение затрудняется. Экспериментальная и теоретическая зависимости хорошо согласуются между собой (отклонение составляет не более 10%).

Заключение.

Подчеркнем некоторые различия между общим теоретическим исследованием и математическим моделированием явлений и процессов. Цель теории заключается в получении общих сведений об изучаемом объекте, здесь не так существенны конкретные данные и конкретные условия протекания процессов, которые зачастую в математическом описании могут задаваться в самом общем виде. Для математического моделирования весьма существенной стороной является использование конкретных данных в реальных технологических условиях.

Математическое моделирование конкретных технологических процессов должно включать в себя следующие этапы:

- Формулировка математической схемы, соответствующей реальным условиям протекания производства (оборудование, материалы, процесс). Важную часть этого

этапа составляет физический анализ процесса и выбор основных параметров модели.

- Расчет конкретных данных (физических и химических свойств материала - технологического объекта) и реальных условий протекания процесса (граничные и начальные условия) и конкретные данные о технологическом режиме и оборудовании (технологические и геометрические параметры).
- Сопоставление модели и эксперимента. Здесь важно выявить рамки применимости модели и ее возможности для конкретных практических рекомендаций и прогноза возникновения проблемных ситуаций в технологической практике.
- Использование результатов математического моделирования в инженерной практике для получения конкретных изделий.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Стельмах Л.С. Тепловые режимы экструзии реологически сложных тугоплавких соединений. //Материалы Межд. школы-семинара. "Тепло- и массообмен в химически реагирующих системах: - Минск: ИТМО им. А.В.Лыкова АН БССР, 1989, ч.2, с.21-30.
- [2] Жилиева Н.Н., Стельмах Л.С., Тепловые режимы СВС-прессования. //Тепло- и массообмен в химически реагирующих системах: Материалы Межд. школы-семинара.- Минск: ИТМО им. А.В.Лыкова АН БССР, 1989, ч.2, с.44-53.
- [3] Стельмах Л.С., Столин А.М., Мержанов А.Г. Математическое моделирование СВС-экструзии. Ч.1. Тепловые модели. // Инж.-физ.Ж., 1993. Т.64, №3. С.83-89.
- [4] Стельмах Л.С., Жилиева Н.Н., Столин А.М. Математическое моделирование тепловых режимов силового СВС-компактирования // Инж.-физ.ж., 1992. Т.63, №5. С. 623-629.
- [5] Стельмах Л.С., Жилиева Н.Н., Саркисян А.Р., Харатян С.П. Столин А.М., Мержанов А.Г. Разработка моделей и комплекса программ для компьютеризации технологии силового СВС- компактирования.- Ереван: Препринт ИЖР АН Армении, 1992, 13 с.
- [6] Стельмах Л.С., Столин А.М., Хусид Б.М. Реодинамика выдавливания вязких сжимаемых материалов.// Инж.-физ. Ж., 1991, т.61, №2, С. 268-276.
- [7] Стельмах Л.С., Жилиева Н.Н., Столин А.М. Неизотермическая реодинамика при СВС-прессовании порошковых материалов. // ИФЖ, 1991, т. 61, №1, с. 33-40.
- [8] Столин А.М., Стельмах Л.С. Математические модели СВС-технологий. Самораспространяющийся высокотемпературный синтез: теория и практика. Черноголовка, «Территория», 2001, с.122-156.
- [9] Стельмах Л.С., Столин А.М. О квазистационарном режиме и предельных случаях горячей экструзии порошковых материалов.// Доклады Академии Наук России, 1992. Т.322, №4. С.732-736.
- [10] Стельмах Л.С., Жилиева Н.Н., Столин А.М. Реодинамика и теплообмен горячего компактирования порошковых материалов. // Инж.-физ.ж., 1992. Т.63, №5. С.612-622.
- [11] Стельмах Л.С., Столин А.М. Математическое моделирование СВС-экструзии. Ч.2. Реодинамические модели. /ИФЖ, 1993. Т.64, №3. С. 90-94.
- [12] Стельмах Л.С. , Столин А.М., Мержанов А.Г. Макрореологическая теория СВС- компактирования.//Докл. РАН, 1995, №1, т.344, р.р.72-77.

- [13] Stelmakh L.S. and Stolin A.M. Macrorheological theory of hot compaction of composites // *Mechanics of Composite Materials*, 1995, Vol.31, No.6, P.840-845.
- [14] Stolin A.M., Stelmakh L.S., Zhilyaeva N.N. and Khusid B.M. The phenomenological theory of high-temperature deformation of self-propagating high-temperature synthesis (SHS) products.//*J. of Materials Synthesis and Processing*, v.3, No.1, 1995, pp.19-23.
- [15] Stelmakh L.S, Zinenko Zh.A., Stolin A.M., Merzhanov A.G. Specific features of SHS material compacting hydrodynamic and thermal action.//*Int. J. of SHS*, 1995, vol.4, No.1, pp.263-273.
- [16] Stelmakh L.S. and Stolin A. Macrorheological theory of high-temperature deformation of powder materials under SHS-compacting.//*J. of the European ceramic society*. 17(1997), p.453-456.
- [17] Alexander M. Stolin; Lyubov' S. Stel'makh "Features of Compaction Kinetics for Powder Materials under Nonisothermal Conditions. Part 1. Compaction Kinetics in Regular and Fiber Regimes ". *Powder Metallurgy and Metal Ceramics* 40(11): 556-561; Nov 2001.
- [18] Alexander M. Stolin; Lyubov' S. Stel'makh "Features of Compaction Kinetics for Powder Materials under Nonisothermal Conditions. Part 2. Existence of Critical Specimen Dimensions during the Preparation of Highly Compacted Materials". *Powder Metallurgy and Metal Ceramics* 41(1): 13-16; Jan 2002
- [19] A.M. Stolin and L.S. Stelmakh "Deformation of porous materials during combustion processes". *Intl. J. SHS*, vol.13, no. 1, p.71-78, 2004.
- [20] Maizelia A.V., Stolin A.M., and Stelmakh L.S. Hydrodynamic analysis of the process of SHS- disintegration.//*Intl. J. SHS*, 1996, Vol.5, No.2. P.145-151.
- [21] Стельмах Л.С., Майзелия А.В., Столин А.М. "Реодинамика и теплообмен при СВС-измельчении."//*Докл. РАН*, 1997, т.353, N3, с.358-361.
- [22] A.V. Maizelia, A.M. Stolin, and L.S. Stelmakh "Rheodynamic and Thermal Effects on the Process of SHS Disintegration."//*Intl. J. SHS*, 1997, V.6, No.1, p.103-111.
- [23] A.M. Stolin and A.V. Maizeliya, Technological parameters of SHS disintegration of carbide materials, *Intl. J. SHS*, vol.5, pp.57-67, 1996.
- [24] Жилиева Н.Н., Стельмах Л.С., Борисов Е.Н., Столин А.М. Роль тепловых процессов при конструировании оснастки для СВС-прессования. Черногловка, Препринт ОИХФ АН СССР, 1986, 45 с.
- [25] Столин А.М., Стельмах Л.С., Жилиева Н.Н. Аналитическая модель напряженно-деформированного состояния осесим-метричного упругого тела в условиях двумерного поля температур. // *Инж.-физ.ж.*, 1989, т.56, №4, с. 650-657.
- [26] Стельмах Л.С., Столин А.М. Термоупругие напряжения в конечном цилиндре в случае двумерного поля температур. // *Инж.-физ.ж.*, 1989, т.56, №4, с. 695 - 696. Статья депонирована ВИНТИ И4.Ю.88, рег. №7437-В 88.