

*В. Н. Лейцин, А. О. Товтинец,
Е. В. Жуков, М. А. Дмитриева*

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ УПЛОТНЕНИЯ РЕАГИРУЮЩЕЙ ПОРОШКОВОЙ СМЕСИ Zr-B

Рассмотрено моделирование физико-химических процессов при уплотнении реагирующих порошковых материалов типа Zr-B. Для проведения исследований многопараметрических связанных физико-химических процессов разработан алгоритм распределенных вычислений на многопроцессорном вычислительном кластере.

A simulation of physical and chemical processes in reactive powder compacting materials such as Zr-B is considered. For many parametric studies related to physical and chemical processes an algorithm for distributed computations on a multiprocessor computer cluster is elaborated.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, ударный синтез, механическая активация, химическая кинетика, порошковая металлургия, распределенные вычисления.

Key words: computer simulation, shock synthesis, mechanical activation, chemical kinetics, powder metallurgy, distributed computing.

Исследование физико-химических механизмов взаимодействия реагирующих порошковых компонентов в процессе синтеза тугоплавких соединений необходимо для получения закономерностей динамического деформирования реагирующих порошковых материалов со структурой и разработки технологических режимов ударного синтеза соединений с заданными параметрами структуры. Использование вычислительных кластеров (многопроцессорных вычислительных систем) позволяет численно смоделировать процесс для всего диапазона значений исходных параметров за обозримое время [1]. Сокращение временных затрат связано с тем, что задача исследования условий синтеза микро- и наноструктурных композитов и определяющих факторов ударного запуска сверхбыстрых твердофазных химических превращений в многокомпонентных реагирующих порошковых системах является многопараметрической и к ней применимы методы распределенных вычислений, хорошо реализуемые на вычислительных кластерах.

Для эффективной реализации вычислительных экспериментов, подобных задаче, описанной здесь, была разработана вычислительная платформа UNIDIC, которая обеспечивает проведение вычислительных многофакторных объектно-ориентированных исследований [2]. Платформа позволяет автоматизировать первичную обработку результатов вычислительных экспериментов, построение зависимостей результатов от исходных данных, корреляционных кривых, функциональных зависимостей. Программная реализация вычислительного эксперимента решаемой задачи подключается к платформе в виде внешнего модуля, делая возможным одновременное решение всего комплекса задач с широким спектром изменения исходных параметров, тем самым предоставляя возможность исследования явления в целом.

Для проведения вычислительных экспериментов использована многоуровневая модель реагирующей порошковой смеси [3], описывающая физико-химические процессы ударного синтеза на микро- и макроуровнях, учитывающая параметры исходной структуры, пористости, начальной температуры, возможности фазовых переходов всех компонентов реагирующей среды, образования жидкой фазы реагирующих компонентов, изменения их реакционной способности в процессе механического нагружения и другие технологические факторы.

При горении возможно достижение температуры испарения одного из компонентов порошкового компакта [4], в связи с этим модель модифицирована для учета образования газовой фазы. Показано, что неучет испарения бора приводит к прогнозу температур смеси, существенно превышающих экспериментально наблюдаемые.

Особенность поведения реагирующих порошковых материалов, не образующих прочного тугоплавкого каркаса в процессе физико-химических превращений, может проявиться в их специфической реакции на увеличение интенсивности механического воздействия. С ростом интенсивности ударного воздействия выход продукта реакции сначала растет, а затем может уменьшиться до нуля [5]. Для объяснения этого явления вводится дополнительный структурный уровень физического моделирования – уровень порошковой частицы [6].

Считается, что гипотеза о гомогенности состояния микрообъема порошковой среды не выполняется по объему отдельной частицы. Интенсивность химических превращений, инициированных ударным импульсом, объясняется механической активацией компонентов смеси, определяемой, в свою очередь, пластическим деформированием кристаллической структуры и разрушением поверхностных слоев частиц в процессе схлопывания пор действием ударного импульса. В процессе пластического деформирования и запуска экзотермических химических превращений частицы нагреваются неравномерно, и если температура поверхностного слоя материала приближается к температуре плавления, то материал перестает уплотняться как пористое деформируемое твердое тело. Это определяет возможность смены механизма внутреннего трения порошковой среды вследствие плавления поверхностного слоя хотя бы одного из реагирующих компонентов. При интенсивном механическом воздействии этот эффект может реализоваться уже в первые моменты ударного перехода и привести к уплотнению порошкового компакта, обеспеченному переупаковкой порошковых частиц без значительного искажения кристаллической структуры материала. Это уплотнение вызывает уменьшение степени механической активации реагирующей порошковой смеси и обуславливает невозможность ударного инициирования химических превращений во всем объеме реагирующих компонентов. Исследование этого явления возможно на модели вязкопластического поведения порошковой реагирующей среды.

Этот подход применен для исследования порошковой смеси Zr-B в связи с твердофазным каркасом сопротивляющимся нагрузкам из-за близких компонентов.

Проводилось моделирование синтеза порошкового нагруженного макроскопически плоской Порошковая структура

ной степенью концентрационной рисунке 1 представлены начальные концентрации компонентов соответствующие модельным поразличными параметрами макротуры концентрационной неоднородности

Динамическое воздействие единичным макроскопически амплитудой 10–20 ГПа, распространяющимся с лицевой начальной температурой $T_0 = 500$ К, средняя пористость $P_0 = 0,4$. Все

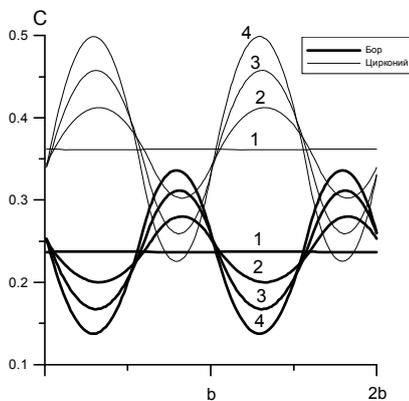


Рис. 1. Начальные распределения концентраций компонентов порошковой смеси по длине реакционной ячейки для различных значений параметра концентрационной неоднородности:
 1 – $b/a = 1,1$; 2 – $b/a = 1,2$;
 3 – $b/a = 1,3$; 4 – $b/a = 1,4$

следования уплотнения неспособностью ляться большим температур плавления численное го смесового компакта, ским импульсом. характеризует различие неоднородности. На распределения нентов смеси Zr-B, рошковым смесям с роскопической структуры.

моделировалось плоским импульсом длительностью 0,1 мкс, стороны смеси, относительная исходная константы и функции,

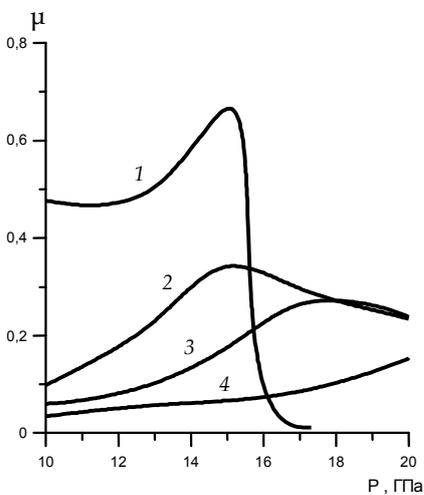


Рис. 2. Зависимость массовой доли прореагировавших компонентов смеси от амплитуды импульса:

1 – $b/a = 1,1$; 2 – $b/a = 1,2$;
 3 – $b/a = 1,3$; 4 – $b/a = 1,4$

отражающие физические, теплофизические и механические свойства компонентов порошковой смеси, взяты из работ [7; 8].

Ниже представлены результаты исследования влияния смены механизма внутреннего трения порошковой среды на особенности протекания синтеза. На рисунке 2 показаны зависимости массовой доли прореагировавших компонентов смеси, достигаемой к моменту окончания действия ударного импульса, от амплитуды динамического импульса для различных значений степени концентрационной неоднородности моделируемой смеси. Линии 1–4 отвечают распределениям концентраций компонентов модельных образцов, приведенных на рисунке 1. Реализация режима смены механизмов внутреннего трения проявляется в падении выхода продукта реакции при росте амплитуды ударного импульса.

Адаптирована методика компьютерного моделирования процессов ударного синтеза композиционных материалов на базе боридов переходных металлов для многопроцессорного вычислительного кластера. Построен алгоритм распределенных вычислений для проведения вычислительного

эксперимента по верификации векторизованной модели реагирующей порошковой смеси и исследования определяющих факторов ударного синтеза микро- и наноструктурных композитов типа Zr-B во всем практически значимом диапазоне значений структурных характеристик исходной порошковой смеси и параметров температурно-силового нагружения.

Представленные результаты свидетельствуют, что переупаковка твердых частиц за счет расплава одного или обоих компонентов смеси является одним из определяющих факторов ударного запуска химических превращений наряду с параметрами структуры и интенсивности механического воздействия. Эффект смены механизма внутреннего трения происходит на разных этапах ударного уплотнения пористой порошковой среды, определяя тем самым ударное инициирование различной доли реагирующих компонентов смеси. Переупаковка твердых частиц за счет расплава поверхностного слоя частиц одного или обоих реагирующих компонентов смеси – один из определяющих факторов ударного запуска химических превращений наряду с параметрами структуры и интенсивности механического воздействия.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ по проекту моб_ст_2010 № 10-01-90704.

Список литературы

1. Крюков В. А. Разработка параллельных программ для вычислительных кластеров и сетей. URL: <http://www.parallel.ru/tech/articles/krukov-cldvm2002f.pdf>
2. Жуков Е. В., Плисов М. Ю., Чуриков А. Ю. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2010612392 Платформа «UNIDIC». 02.04.10.
3. Лейцин В. Н., Дмитриева М. А., Колмакова Т. В., Кобраль И. В. Моделирование физико-химических процессов в реагирующих порошковых материалах // Изв. вузов. Физика. 2006. Т. 49, №11. С. 43–48.
4. Дмитриева М. А., Колмакова Т. В., Лейцин В. Н. Исследование условий автоколебательного режима физико-химических превращений // Там же. 2008. Т. 51, №8/2. С. 148–154
5. Гордолов Ю. А. Действие ударных волн на процессы и продукты самораспространяющегося высокотемпературного синтеза // Самораспространяющийся высокотемпературный синтез: теория и практика. Черногловка, 2001. С. 294–312.
6. Лейцин В. Н., Кобраль И. В., Дмитриева М. А. Исследование процессов динамического уплотнения реагирующих порошковых смесей типа Ti-C // Вестник Томского гос. ун-та: общенаучный периодический журнал: бюллетень оперативной научной информации. 2003. Июль. №13. С. 23–27.
7. Боровинская И. П., Мержанов А. Г., Новиков Н. П., Филоненко А. К. Безгазовое горение смесей порошков переходных металлов с бором // Физика горения и взрыва. 1974. Т. 15, №1. С. 4–115.
8. Чиркин В. С. Теплофизические свойства материалов ядерной техники: справочник. М., 1968.

Об авторах

Владимир Нояхович Лейцин – д-р физ.-мат. наук, проф., РГУ им. И. Канта, e-mail: leitsin@mail.ru

Александр Олегович Товпинец – студ., ТГУ, Томск, e-mail: tovpinets_a@mail.ru

Евгений Валерьевич Жуков – заместитель начальника управления по связям с общественностью, РГУ им. И. Канта, e-mail: vw@kantiana.ru

Мария Александровна Дмитриева – д-р. физ.-мат. наук, доцент, РГУ им. И. Канта, e-mail: Dmitrieva_m@inbox.ru

Authors

Professor Vladimir Leitsin – IKSUR, e-mail: leitsin@mail.ru

Aleksandr Tovpinets – student, TSU, Tomsk, e-mail: tovpinets_a@mail.ru

Evgeniy Zhukov – deputy head of public relations department, IKSUR, e-mail: vw@kantiana.ru

Dr Sc Mariya Dmitrieva – assistant professor, IKSUR, e-mail: Dmitrieva_m@inbox.ru