Онищук О. Розрахунок температури запалювання композиційних матеріалів при високотемпературному синтезі / О. Онищук // Вісник ТНТУ — Тернопіль : ТНТУ, 2015. — Том 78. — № 2. — С. 207-215. — (Математичне моделювання. Математика. Фізика).

УДК 620.1:621.762

### О. Онищук, канд. техн. наук

Луцький національний технічний університет

## РОЗРАХУНОК ТЕМПЕРАТУРИ ЗАПАЛЮВАННЯ КОМПОЗИЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ ПРИ ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНОМУ СИНТЕЗІ

Резюме. Розраховано температури запалювання композиційного матеріалу TiFe-20C-2B при високотемпературному процесі. Для цього аналітично розв'язано крайову задачу непрямим методом (методом Лапласа) для циліндричної заготовки. Наведено результати змодельованого температурного інтервалу всього високотемпературного процесу й температури запалювання. Отримані графічні результати розподілу діапазону температур запалювання та максимальної температури високотемпературного синтезу підтверджують математичні обчислення методом Лапласа. Для детального аналізу температури початку горіння та максимальної температури високотемпературного синтезу циліндричних заготовок використано процедури числового моделювання Steaty-State Thermal, метод скінченних елементів у програмному забезпеченні ANSYS. Застосування чисельних та аналітичних методів надає можливість комплексно проаналізувати теплотехнічні, фізико-хімічні процеси в циліндричній заготовці після високотемпературного синтезу.

**Ключові слова:** CBC-матеріали, система TiFe-20C-2B, математичні моделі, самопоширюючий високотемпературний синтез (CBC), температура запалювання, композиційні матеріали.

## **O.** Onyshchuk

# CALCULATION OF THE IGNITION TEMPERATURE OF COMPOSITE MATERIALS UNDER HIGH-TEMPERATURE SYNTHESIS

**Summary.** Energy saving technology of the high-temperature synthesis is one of the competitive processes of modern production. The high-temperature synthesis is the kind of combustion, which produced valuable solids by moving wave chemical reaction in a mixture of reagents to form a solid end products. The high temperature process is characterized by the absence of external energy, simple process, using powders obtained after utilization. Analysis of the papers dealing with the properties of the composite materials showed, that materials such as titanium, carbon, iron, boron received the most industrial applications for use in high temperature regimes.

In the article we calculated the ignition temperature of the composite material TiFe-20C-2B, which was received under the high temperature synthesis. Analytically we solved boundary value problem according to the indirect method (Laplace method) for the cylindrical blank of the composite material.

We modeled heat process in the combustion stage for schematic model of the movement of the flame with speed u in cylindrical blank. We got the ignition temperature  $(161^{\circ}C = 434,5K)$  of the high-temperature process for the composite material TiFe-20C-2B. This result is the basis for further research to determine the maximum temperature.

In the article we presented the results of the simulated temperature range of all high-temperature processes, as well as the distribution of temperature range plugs for the composite material TiFe-20C-2B using software ANSYS. Graphic results distribution range of the ignition temperature and maximum temperature of the high-temperature synthesis confirmed mathematical calculations by Laplace (or indirect method).

We used numerical modeling procedures Steaty-State Thermal, finite element method in software package ANSYS for a detailed analysis of the temperature of the start combustion and maximum temperature of the high-temperature synthesis of the cylindrical blank and thin bushings. The resulting solution of the Laplace

transform method and an alternative solution using software package ANSYS makes it possible to compare the convergence of computing.

The use of numerical and analytical methods enables to complex analyze thermal, physical and chemical processes in a cylindrical detail of the composite material, which we received during the high-temperature synthesis.

*Key words:* SHS-material system TiFe-20C-2B, synthesis (SHS), mathematic models, initiation temperature, composite materials.

Вступ. На сучасному етапі розвитку техніки висувають підвищені вимоги до якості, надійності та довговічності деталей і машин. Значно ускладнились умови експлуатації техніки, де ряд вузлів працюють під впливом одночасно кількох факторів: великих питомих навантажень, підвищених температур, впливу різноманітних хімічноактивних газових середовищ та ін. Тому на сьогодні гостро стоїть проблема підвищення якості існуючих і створення нових матеріалів та покриттів, які б відповідали підвищеним вимогам до зносостійкості, конструкційної міцності, корозійної стійкості і т.п.

Одним з найдешевших, найпродуктивніших та технологічно найпростіших технологій отримання композиційних матеріалів є самопоширюючий високотемпературний синтез (СВС). СВС-процес інтерметалідів досліджувався в багатьох роботах (Комаров 1993, Авакаян 1994, Бовене і Дербі 1997). Він має низькі енергозатрати, короткий час синтезу, просте устаткування й високу якість продуктів. Проте теплофізичні властивості інтерметалідів, отриманих СВС-процесом, недостатньо вивчені [1–5].

Застосування порошкових композиційних матеріалів з високими зносостійкими властивостями обмежене у можливостях їх експлуатації зі значними питомими навантаженнями при підвищених температурах [1]. Формування якісного й надійного композиційного матеріалу залежить від процесів, які відбуваються при формуванні цих матеріалів. Експлуатаційні властивості композиційних матеріалів, особливо їх термостійкість, суттєво залежить від процесів взаємодії компонентів, фазового складу і температури. У результаті взаємодії компонентів композиційного матеріалу при високих температурах виникають нові фази і сполуки.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Температура нагрівання та запалювання суттєво впливає на властивості матеріалу [3]. Розглянемо двовимірну модель теплообміну при горінні плоского шару одиничної товщини циліндричної заготовки. Шар вирізується таким чином, щоб його довжина дорівнює максимально можливому шляху горіння. Відповідно площини перерізу проходять через точку запалювання і найвіддаленшу від неї точку. Така модель дозволяє описати поле температур у найбільш холодній (початок горіння) і гарячій (закінчення горіння) зонах заготовки (рис. 1).



Рисунок 1. Схематична модель руху полум'я зі швидкістю и в циліндричній заготовці

Figure 1. The scheme-model of the flame movement with speed *u* in the cylindrical blank

У початковий момент часу на торці шару починається реакція горіння з відомою температурою горіння  $T_c$  і швидкістю горіння  $S_c$ . [1,2]. Горіння шару починається з верхньої торцевої площини ( $x_0 = 0$ ); плоский фронт горіння рухається з постійною швидкістю  $S_c$  у напрямку осі симетрії. В силу осьової симетрії розглядається половина висоти шару в декартових координатах x і y [2,4].

Математична модель теплообміну на стадії горіння вміщує [4]:

1) систему трьох диференціальних рівнянь нестаціонарної теплопровідності в декартових координатах:

$$C_{i}\rho_{i}\frac{\partial T_{i}(x,y,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda_{i}\frac{\partial T_{i}(x,y,t)}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\lambda_{i}\frac{\partial T_{i}(x,y,t)}{\partial y}\right);$$
(1)

2) граничні умови

$$\lambda_{1} \frac{\partial T_{1}(0, y, t)}{\partial x} = \lambda_{2} \frac{\partial T_{2}(0, y, t)}{\partial x}; T_{1}(0, y, t) = T_{2}(0, y, t); \lambda_{1} \frac{\partial T_{1}(x, h_{1}, t)}{\partial y} = \lambda_{2} \frac{\partial T_{2}(x, h_{1}, t)}{\partial y}; T_{1}(x, h_{1}, t) = T_{2}(x, h_{1}, t);$$
(2)

$$x = 0$$
,  $y = h_1$ 

3) початкові умови

$$T_1(0, y_1, 0) = T_r; T_2(x, y, 0) = T_0;$$
(3)

4) рівняння руху фронту горіння

$$\mathbf{X}_{\Gamma} = \mathbf{S}_{\Gamma} \cdot \mathbf{t}; \tag{4}$$

5) температура рухомої границі І роду (фронт горіння) при  $h_I = y_I$ 

$$T(x_{r}, y_{l}, t) = T_{r};$$
(5)

6) умови симетрії температурного поля відносно осі х

$$\frac{\partial T_1(x,0,t)}{\partial y} = 0; \qquad (6)$$

7) умови адіабатичності перед фронтом горіння ( $x = x_r + 0$ )

$$\frac{\partial T_1(x_r + 0, y_1, t)}{\partial x} = 0.$$
(7)

При розрахунку температурного поля горіння всього шару системи рівнянь (1)–(2) виключаються рівняння (6)–(7) і додаються граничні умови першого роду на верхній торцевій поверхні шару при x = 1

$$\lambda_1 \frac{\partial T_1(h, y, t)}{\partial x} = \lambda_2 \frac{\partial T_2(h, y, t)}{\partial x}; T_1(h, y, t) = T_2(h, y, t).$$
(8)

У рівняннях (1)–(8) позначено:  $T_i$  – температура шихти,  $T_l$ ,  $T_2$  – температура заготовки до та після синтезу відповідно;  $C_i$ ,  $\rho_i$ ,  $\lambda_i$  – питома теплоємність, густина і коефіцієнт теплопровідності шихти;  $h_i$  – характерні розміри зразка; i – індекс системи: t – час;  $x_{\rm r}$  – текуча координата фронту горіння;  $\alpha_{\rm r}$  – коефіцієнт тепловіддачі;  $T_e$ ,  $T_0$  – температура горіння та середовища відповідно;  $s_e$  – швидкість горіння.

Температура горіння процесу високотемпературного синтезу залежно від певної системи складає 1590 – 2773 К. Швидкість розповсюдження зазвичай знаходиться у межах 0,1 – 15 м/с. Після проходження фронту горіння зразок продовжує світитися певний час. Це пов'язано з наявністю двох макрокінетичних стадій протікання хімічної реакції: реакції у вузькій зоні в процесі розповсюдження фронту горіння і реакції по всьому об'єму зразка, розігрітого хвилею горіння [5,6].

**Мета роботи.** Полягає в аналітичному дослідженні розрахунку температури запалювання при високотемпературному синтезі за допомогою математичних рівнянь процесів теплопровідності. Проведений аналіз вказує на необхідність подальшого вдосконалення методів розрахунку розподілу температури в циліндричній заготовці в перерізі при високотемпературному синтезі.

Завданням роботи є розрахувати температуру запалювання композиційного матеріалу TiFe-20C-2B, який бере участь у цьому процесі. Доцільно також детально розглянути розв'язок методом перетворення Лапласа та отримати альтернативне рішення з допомогою пакета ANSYS й порівняти збіжність обчислень.

Методи розрахунку досліджень. До зразка висотою h=0,2 *м*, r=0,026 *м* підводиться полум'я, яке просувається в напрямку осі *x*, та має вихідну температуру  $T_{in}$ . Коли досягається температура спалахування  $T_{e}$ , розпочинається екзотермічна реакція; коли вона закінчується, температура дорівнює температурі горіння суміші  $T_{r}$ .

Визначаємо температуру запалювання CBC-процесу. Прогнозування температури запалювання базується на основі моделі напівбезмежного тіла. Використовуємо замість рівняння теплопровідності спрощене одновимірне рівняння теплопровідності

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \alpha_T \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x},\tag{9}$$

де  $\alpha_{T}$  – коефіцієнт тепловіддачі.

Розрахунок температури запалювання непрямим методом (методом Лапласа). Інтенсивність теплового потоку або питомий тепловий потік q (густина теплового потоку) – це потужність теплової іскри, поділена на площу поверхні фронту зразка. Тобто кількість теплоти, яка проходить 1 м<sup>2</sup> площі поверхні за одиницю часу.

Значення теплофізичних властивостей сумішей, що беруть участь у високотемпературному процесі (СВС), необхідні для цього рівняння, встановлюють як середні значення властивостей реагуючих компонентів.

Знаючи час запалювання й температуру запалювання, розраховують тепловий потік.

Тепловий потік пропорційний градієнту температури (закон Фур'є) [4]

$$q = -\lambda \frac{\partial T(x,t)}{\partial x}.$$
 (10)

Початкові умови

$$0 \le x \le \infty, t \ge 0, T(x, 0) = T_i.$$
 (11)

Крайові умови

$$-\lambda \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} = \alpha_T \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x} \bigg|_{x=0} = q_0.$$
(12)

Скористаємося перетворенням Лапласа. Трансформанту позначаємо «тильдою « $\widetilde{T}$ »

$$\frac{\partial T}{\partial t} \to \widetilde{T}(x,s) - T(x,0), \text{ оскільки } T(x,0) = T_i, \text{ то } \frac{\partial T}{\partial t} \to \widetilde{T}(x,s) - T_i, \text{ то } \frac{\partial^2 T}{\partial x} \to \frac{\partial^2 \widetilde{T}(x,s)}{\partial x^2},$$

де x – текуча координата фронту горіння;  $\alpha_T$  – коефіцієнт тепловіддачі; s – швидкість поширення фронту горіння;  $T_i$  – температура запалювання.

Таким чином, отримуємо T(x,t) — рівняння в трансформантах

$$\frac{\partial^2 T(x,s)}{\partial x^2} - \frac{s\tilde{T}(x,s)}{\alpha_T} = \frac{T_i}{\alpha_T}.$$
(13)

Характеристичне рівняння

$$x^{2} - \frac{s}{\alpha_{T}} = 0, x = \pm \sqrt{\frac{s}{\alpha_{T}}} .$$
(14)

Частинний розв'язок

$$-\frac{s}{\alpha_T}A = -\frac{T_i}{\alpha_T} \to A = \frac{T_i}{S}, T_{vac} = \frac{T_i}{S}.$$
(15)

Повний розв'язок:

$$T = C_1 e^{-\sqrt{\frac{s}{a_T}}} + C_2 e^{-\sqrt{\frac{s}{a_T}}} + \frac{T_i}{s}.$$
 (16)

З умови обмеженості  $\tilde{T}$  при х $\rightarrow \infty$  випливає, що  $C_2=0$ . Крайова умова в трансформантах має вигляд

$$\frac{\partial \tilde{T}(x,s)}{\partial x}\Big|_{x=0} = -\frac{q_0}{\lambda \cdot s},$$
(17)

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial x}\Big|_{x=0} = -(C_1 e^{-\sqrt{\frac{s}{\alpha_T}x}})\Big|_{x=0} = -C_1 \sqrt{\frac{s}{2}} \to C_1 = \frac{q_{0\sqrt{\alpha_T}}}{\lambda \cdot s^{3/2}},$$
(18)

$$\tilde{T} = \frac{q_{0\sqrt{\alpha_T}}}{\lambda \cdot s^{3/2}} e^{-\sqrt{\frac{s}{\alpha_T}}x} + \frac{T_i}{s}.$$
(19)

Отже, температура запалювання для зразка ТМ системи Ti-C-Fe, що бере участь у високотемпературному синтезі, визначається

$$T(x,t) = T_i + \frac{q_0}{\lambda\sqrt{\pi}} \left( -\sqrt{\pi} x^{\frac{e^{2\lambda} \frac{x}{2\sqrt{\alpha_T t}}}} + 2\sqrt{\alpha_T t} e^{-\frac{x^2}{4\alpha_T t}} \right).$$
(20)

Вважаючи сталим інтенсивність теплового потоку  $q''_0$  та припускаючи, що початкова температура T<sub>i</sub> стала (T<sub>i</sub>=const), розподіл температури можна виразити так:

$$T(x,t) - T_i = \frac{2q_0'(\alpha_T t / \pi)}{\lambda} \exp\left(\frac{-x^2}{4\alpha_T t}\right) - \frac{q_0'' x}{\lambda} \operatorname{erfc}(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_T t}}), \qquad (21)$$

де  $a_T$  – коефіцієнт тепловіддачі (теплової дифузії) суміші, добуток температуропровідності (*a*) на густину ( $\rho$ ) і визначається

$$\alpha = \frac{\lambda}{c_{\rho}} \text{ afo } \alpha = a\rho , \qquad (22)$$

де  $\rho$  – густина зразка ТМ системи Ті-С-Fe, яка бере участь у CBC-процесі;

C – питома теплоємність зразка ТМ системи Ті-С-Fe, яка бере участь у СВСсинтезі й визначається

$$c_{\rho} = \frac{\lambda}{a\rho},\tag{23}$$

де *λ* – теплопровідність зразка ТМ системи Ті-С-Fe, яка бере участь у CBC-синтезі.

Оскільки запалювання відбувається на фронтальній частині зразка, де x=0, то (20) можна спростити до (24)

$$T(x,t) = T_i + \frac{2q_0^{"}(\alpha_T t / \pi)^{1/2}}{\lambda}.$$
 (24)

Отриманий розв'язок непрямим методом є повним розв'язком задачі (10).

Результати розрахунку. Приймаємо для даної системи ТіFe-20С-2В тепловий потік

$$q_o = P/S, \tag{25}$$

де P – потужність джерела запалювання дорівнює 1,5 кВ*m*; S – площа поверхні зразка заданої системи. Для зразка висотою h=0,2 м, r=0,026 м маємо загальну площу  $S=0,33\cdot10^{-6}$  м<sup>2</sup>, V=0,43  $10^{-9}$  м<sup>3</sup>. Коефіцієнт теплопровідності  $\lambda_2$ , і питома теплоємність C<sub>2</sub> отримані з [7].

Отже,  $q_o = 0.046 \cdot 10^4 Bm/m^2$ . Час запалювання t = 20 c. Початкову температуру зразка приймаємо  $T_n = 293K (20^{\circ}C)$ .

Таким чином, скориставшись отриманою формулою (24), розраховані температури запалювання для систем ТіFe та ТіFe-20C-2В (табл.1).

#### Таблиця 1

Теплофізичні властивості композиційних матеріалів ТіFe-20C-2В та ТіFe

Шихта	$\alpha_T$ , кг $\cdot$ с/м	$\lambda_2, \operatorname{Bt/M} \cdot \operatorname{K}$	С2, Дж/кг∙К	<i>Т</i> <sub><i>i</i></sub> , К	$T_{max} K$
TiFe	0,02	18,00	773	411,2	1557
TiFe-20C-2B	0,03	23,59	789	434,4	1609

Розрахунок діапазону температур методом скінченних елементів. Для розрахунку температури запалювання та інших теплофізичних показників для циліндричної деталі з композиційного матеріалу ТіFe-20C-2B після високотемпературного синтезу ми застосували процедури числового моделювання Steaty-State Thermal та метод скінченних елементів з допомогою програмного забезпечення ANSYS (рис.2).

Застосування чисельних методів дозволило провести комплексний аналіз теплотехнічних, механічних процесів у циліндричній заготовці, яка отримана високотемпературним синтезом. З допомогою модуля State-Thermal показано моделювання діапазону температур запалювання (в °С) для циліндричної заготовки матеріалу TiFe-20C-2B, виходячи з потужності джерела запалювання та фізикомеханічних властивостей матеріалу (рис.3).



Рисунок 2. Застосування методу скінченних елементів для циліндричної деталі з композитного матеріалу TiFe-20C-2B після високотемпературного синтезу





Рисунок 3. Розподіл діапазону температури запалювання високотемпературного синтезу циліндричної заготовки композиційного матеріалу TiFe-20C-2B

Figure 3. The distribution of the temperatures ignition range of the cylindrical blank made of composite material TiFe-20C-2B after high-temperature synthesis

Крім того, отримана температура запалювання (161°С=434,5К) високотемпературного процесу для ТіFe-20С-2В, яка є основою для подальших досліджень визначення максимальної температури (рис.4).

Тепловий потік даної циліндричної заготовки отримують з розрахунку потужності джерела запалювання та всієї її площі, вздовж якої рухається він рухається, скориставшись рівнянням (25).

Результати розрахунку тривимірного розподілу діапазону температур запалювання та максимальної температури високотемпературного синтезу показані на рис.2 та 3 підтверджують математичні обчислення методом Лапласа.



Рисунок 4. Розрахунок максимальної температури високотемпературного процесу циліндричної заготовки композиційного матеріалу TiFe-20C-2B

Figure 4. The calculation of the maximum temperature for the cylindrical blank made of composite material TiFe-20C-2B after high-temperature synthesis

Висновки. Представлено аналітичний розв'язок крайової задачі для визначення температури запалювання у циліндричній заготовці композиційного матеріалу TiFe-20C-2B для високотемпературного синтезу. При цьому використано непрямий метод для ефективного обчислення температури запалювання композиційних матеріалів систем TiFe та TiFe-20C-2B, що беруть участь у високотемпературному синтезі, оскільки прямі методи внаслідок інерційності обладнання не точно обчислюють цю величину. Виконано взаємну перевірку розв'язку, отриманого аналітичним методом Лапласа, чисельним моделюванням методом скінченних елементів.

Отриманий аналітичний розв'язок методом Лапласа має перевагу в тому випадку, коли задача розрахунку температури запалювання високотемпературного синтезу композиційних матеріалів не вимагає значних затрат часу.

Для детального аналізу температури початку горіння та максимальної температури високотемпературного синтезу як циліндричних заготовок, так і тонкостінних втулок використано процедури числового моделювання методом скінченного елемента з використанням програмного забезпечення ANSYS.

**Conclusions.** The analytical solution of the boundary value problem to determine the temperature of ignition in the cylindrical blank made of composite material TiFe-20C-2B for high-temperature synthesis has been presented. The indirect method to calculate the temperature of ignition of the composite materials TiFe and TiFe-20C-2B involved in high-

temperature synthesis was used as the direct methods does not calculate this value accurately due to the inertia of the equipment. Mutual verification solution with numerical modeling by finite element method, received the analytical method of Laplace was done.

The analytical solution of the Laplace method has an advantage in the care, when the problem of calculating the ignition temperature of high-temperature synthesis of the composite materials is not time consuming.

The procedures of numerical simulation by finite element method using the software ANSYS for a detailed analysis of the start temperature of the combustion and maximum temperature of high-temperature synthesis of a cylindrical blank and thin-walled bushers was used.

#### Список використаної літератури

1. Мержанов, А. Г. Твердопламенное горение [Текст] / А. Г. Мержанов, А. С. Мукасьян. – М. : Торус Пресс, 2007. – 336 с.

2. Мержанов, А. Г. Процессы горения и взрыва в физикохимии и технологии неорганических материалов [Текст] / А. Г. Мержанов // Успехи химии. – 2003. – Т. 72, №4. – С. 323–345.

3. Onyshchuk, O. O. Structure and tribological characteristics of TiFe-xC triboengineering materials obtained by self-propagating high-temperature synthesis [Text] / O. O. Onyshchuk // Materials Science. – November 2013. – V. 49, Issue 3. – Pp. 18–424.

4. Stelmakh, L. S. Mathematical modeling of termal regimes of SHS compaction [Text] / L. S. Stelmakh, N. N. Zhilyaeva, A. M. Stolin. – Inzh. -Fiz., 1992. – V.  $63. - N \odot 5$ .

5. Письменская, Е.Б. Высокотемпературный синтез интерметаллических соединений в режиме динамического теплового взрыва: автореферат на соискание научной степени физико-математических наук: спец. 01.04.17 «Химическая физика, в том числе физика горения и взрыва» [Text] / Е.Б. Письменская // Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения РАН. – Чорноголовка, 2000. – 20 с.

6. Щербаков, В. А. Макрокинетика самораспространяющегося высокотемпературного синтеза с участием жидкой фазы: дис. докт. физ. -мат. наук: 01. 04. 17 [Текст] / В. А. Щербаков. – Черноголовка, 1999. – 190 с.

7. Зиновьев, В. Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах [Текст] / В. Е. Зиновьев // Справочник. – М. : Металлургия, 1989. – 384 с.

8. Инженерный анализ в ANSYS Workbench: учеб. пособ. [Текст] /В. А. Бруяка, В. Г. Фокин, Е. А. Солдусова, Н. А. Глазунова, И. Е. Адеянов. – Самара:Самар. гос. техн. . ун-т, 2010. – 271 с.

Отримано 17.03.2015