

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования «Алтайский государственный университет»

УДК 519.876.5, 004.942  
№ госрегистрации  
АААА-А18-118070590037-5  
Инв. №

УТВЕРЖДАЮ  
Ректор  
Д.э.н.

---

С.Н. Бочаров  
« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2020 г.

ОТЧЕТ  
О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

по теме:  
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СВ-СИНТЕЗА  
АЛЮМИНИДОВ НИКЕЛЯ И ТИТАНА И КОМПЬЮТЕРНОЕ  
ПРОЕКТИРОВАНИЕ ПЛАЗМЕННЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ПОКРЫТИЙ НА  
ИХ ОСНОВЕ  
(промежуточный этап № 2)

Проект № 18-41-220004

Научный руководитель  
проекта

В.И. Иордан

---

подпись, дата

Барнаул 2020

## СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

Руководитель темы:

канд. физ.-мат. наук, доцент  
каф. ВТиЭ АлтГУ

\_\_\_\_\_  
(подпись, дата)

В.И. Иордан (введение,  
разделы 1-4)

Исполнители темы:

в.н.с., докт. техн. наук,  
профессор ЮГУ

\_\_\_\_\_  
(подпись, дата)

П.Ю. Гуляев (разделы 1-3)

канд. техн. наук, м.н.с. ИТПМ  
СО РАН

\_\_\_\_\_  
(подпись, дата)

В.А. Бледнов (разделы 1,4)

старший преподаватель каф.  
ВТиЭ АлтГУ, аспирант

\_\_\_\_\_  
(подпись, дата)

И.А. Шмаков (разделы 2,3)

старший преподаватель каф.  
ВТиЭ АлтГУ, аспирант

\_\_\_\_\_  
(подпись, дата)

Ю.А. Панченко (разделы 2,3)

## РЕФЕРАТ

Отчет 109 с., 101 источников цитируемой литературы и 23 публикации участников проекта по теме проекта (в ходе выполнения промежуточного этапа № 2).

Объектами исследования являются процессы СВ-синтеза алюминидов никеля и титана, а также процессы напыления функциональных порошковых покрытий на их основе.

**Ключевые слова:** самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС), алюминиды никеля и титана, фронт волны горения СВС, локальная неустойчивость горения, макро- и микрокинетика СВС, молекулярно-динамическое моделирование, пакеты LAMMPS и OVITO, Trase-преобразование, карты дифференциальной хроноскопии (ДХС) процесса СВС, гистограммные признаки, газотермическое напыление покрытий, морфология сплэтов, пористость и шероховатость покрытий.

**Цель всего проекта** — уточнение физико-математических модельных представлений, разработка и совершенствование методов компьютерного моделирования и создание программных средств для исследования динамики тепловых полей волны горения в процессе СВ-синтеза, распознавания ее локальной неустойчивости, макро- и микрокинетики горения и динамики фазо- и структурообразования алюминидов никеля и титана, определения условий их стабильного формирования, и дополнительному исследованию процессов формирования слоистой структуры и предсказания эксплуатационных свойств плазменных порошковых покрытий, напыляемых из синтезированных алюминидов никеля и титана, на основе которого будет развиваться и совершенствоваться программный пакет для оптимального проектирования плазменных порошковых покрытий с заданными программируемыми свойствами.

На 2-ом этапе проекта (в 2019 году), используя результаты выполнения 1-го этапа проекта (2018 года), авторами было выполнено и достигнуто следующее:

1. На основе разработанного комплекса алгоритмов численного сеточного 3D-решения уравнений теплопроводности и диффузионной кинетики с использованием сеточных схем двуциклического расщепления Кранка-Николсона с учетом дискретно-континуальных представлений о структуре исходной смеси и структуре образования интерметаллических фаз в реагирующей среде создана «первая версия» программного комплекса на языке C/C++ с использованием компилятора GCC-8, а также с использованием систем параллельного программирования OpenMP и MPICH 3.1.3. под управлением ОС GNU/Linux. На следующем заключительном этапе выполнения проекта будет осуществлена доработка и совершенствование созданного программного комплекса при проведении вычислительных

экспериментов для того, чтобы обеспечить наиболее высокую степень адекватного соответствия расчетных характеристик СВС экспериментальным данным. Выполнены тестовые вычислительные эксперименты.

2. С использованием программных пакетов LAMMPS и OVITO и на основе продолжения дополнительных вычислительных экспериментов по исследованию микрокинетики СВ-синтеза алюминидов титана в наноразмерных слоистых системах в различных режимах и с различной стехиометрией состава выявлены особенности микрокинетики СВ-синтеза на нано- и микроуровнях масштаба гетерогенности и ее отличия от кинетики СВ-синтеза на макроуровне (обнаружено возникновение гетероструктуры с резкими границами в процессе фазообразования алюминидов титана).

3. По набору карт ДХС, с разрешением не хуже  $512 \times 512$ , получен набор изображений Trase-спектров (более 60) движения фронта горения СВС в переходных режимах от невозмущенного до распавшегося на тепловые микроструктуры, на основании чего выделены области матрицы Trase-спектра, которые наиболее чувствительны к возникновению тепловой неустойчивости. На этой основе сформулированы дополнительные характерные признаки распознавания критического режима горения. Усовершенствована программа Trase-анализа.

4. Создан программный пакет, реализованный на языке C/C++ с использованием кроссплатформенной библиотеки QT и возможностей MPI-интерфейса для параллельных вычислений, позволяющий сократить временные затраты на вычислительные эксперименты по моделированию покрытий и расчету их функциональных характеристик. Создание программного пакета на языке C/C++ с использованием кроссплатформенной библиотеки QT реализовано посредством «переложения» программного кода из среды Delphi на язык C/C++. Проведены вычислительные эксперименты по моделированию покрытий на основе алюминидов титана в различных режимах напыления (плазменное, ДГН и высокоскоростное HVOF). Определены оптимальные режимы напыления покрытий на основе титан-алюминиевых интерметаллидных сплавов (на основе  $Ti_3Al$ ,  $TiAl$  и  $TiAl_3$ ), легированных элементами, например, из Hf, Mo, Nb, Ta, V, W, Cr, Zr.

Полученные результаты могут быть непосредственно использованы для контроля стабильности режимов горения при СВ-синтезе алюминидов никеля и титана и применения технологии СВС для разработки 3D-принтеров готовых изделий из металла и металлокерамики в области аддитивных технологий, а также и для оптимизации технологии газотермического напыления функциональных порошковых покрытий, в т.ч. покрытий на основе алюминидов никеля и титана.

## СОДЕРЖАНИЕ

	С.
РЕФЕРАТ	3
ВВЕДЕНИЕ	8
1 ПОДХОДЫ, МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ, ПРОГРАММНОЕ И МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЯ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ПРОЕКТА	14
1.1 Анализ современного состояния исследований в области СВ-синтеза интерметаллидов и газотермического напыления порошковых покрытий. Обзор научных публикаций.	14
1.2 Теоретико-методологические подходы и методы исследования для решения задач проекта	18
1.3 Вычислительные средства и ПО, доступные для выполнения работ по проекту	20
1.4 Материально-техническое обеспечение и экспериментальное оборудование для решения задач проекта	21
1.5 Список наиболее важных публикаций к разделу 1	22
2 РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ МАКРОКИНЕТИКИ СВ-СИНТЕЗА ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ В БИНАРНЫХ СИСТЕМАХ NI-AL И TI-AL С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАЗРАБОТАННОГО КОМПЛЕКСА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ АЛГОРИТМОВ. МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОКИНЕТИКИ СВ-СИНТЕЗА АЛЮМИНИДОВ ТИТАНА	26
2.1 Разработка программного комплекса для исследования макрокинетики СВ-синтеза интерметаллических соединений в бинарных системах Ni-Al и Ti-Al	26
2.1.1 Разработка и создание программных модулей на языке C/C++, предназначенных для генерации структуры плотнейшей упаковки сферических частиц и для формирования из нее 3-х мерной сеточной структуры точек расчетной области уравнений теплопроводности и диффузионной кинетики СВС	27
2.1.1.1 Алгоритм и программная реализация для генерации структуры	27

	плотнейшей упаковки сферических частиц (мезоячеек)	
	Алгоритм и программная реализация для генерации 3-х мерной сеточной	
2.1.1.2	структуры точек «расчетной области» уравнений теплопроводности и диффузионной кинетики СВС	30
	Разработка и создание основного программного модуля на языке C/C++,	
2.1.2	предназначенного для 3D сеточных вычислений с использованием 3-х мерной сеточной структуры точек расчетной области уравнений теплопроводности и диффузионной кинетики СВС	32
2.1.3	Список цитируемых публикаций к подразделу 2.1	43
	Молекулярно-динамическое исследование микрокинетики СВ-синтеза	
2.2	интерметаллидов в нано- и микроразмерных слоистых бинарных системах Ti-Al	43
	Влияние условий воспламенения СВ-синтеза интерметаллидов на	
2.2.1	параметры горения состава Ti-15,82мас.%Al: компьютерное моделирование микрокинетики СВ-синтеза алюминида титана в наноразмерной слоистой системе и вычислительные эксперименты	44
	Воспроизводимость эффекта возникновения гетерофазной структуры	
2.2.2	при изменении температуры зажигания СВС в слоистой наноразмерной нестехиометрической системе Ti-Al	53
2.2.3	Список цитируемых публикаций к подразделу 2.2	60
	СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ МЕТОДИКИ TRACE-АНАЛИЗА И РАСШИФРОВКИ КАРТ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ХРОНОСКОПИИ	
3	ТЕПЛОВЫХ ПОЛЕЙ ВОЛНЫ ГОРЕНИЯ В БИНАРНЫХ СИСТЕМАХ ДЛЯ РАСПОЗНАВАНИЯ ПЕРЕХОДА СВС В НЕУСТОЙЧИВЫЙ РЕЖИМ	62
	Алгоритм вычисления карт дифференциальной хроноскопии (ДХС)	
3.1	тепловых полей волны горения	62
3.2	Список цитируемых публикаций к разделу 3	69
	СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ ПРОГРАММНЫХ СРЕДСТВ КОМПЬЮТЕРНОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ГАЗОТЕРМИЧЕСКИХ	
4	ПОКРЫТИЙ И ПРЕДСКАЗАНИЯ ИХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТИТАН-АЛЮМИНИЕВЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДНЫХ ПОКРЫТИЙ	72
4.1	Реализация программного пакета на языке C/C++ в	

	полнофункциональной среде разработки MS Visual Studio,	72
	предназначенного для компьютерного моделирования (проектирования) газотермических покрытий и предсказания их функциональных характеристик	
4.1.1	Краткая характеристика программного комплекса для моделирования сплэтов и покрытий	72
4.1.2	Описание структуры и основных программных единиц программного комплекса, реализованного на языке C/C++ с использованием библиотеки QT	75
4.1.3	Список цитируемых публикаций к подразделу 4.1	83
4.2	Определение оптимальных режимов напыления покрытий на основе титан-алюминиевых интерметаллидных сплавов и предсказание их функциональных характеристик методом компьютерного моделирования	83
4.2.1.	Методические особенности моделирования покрытий и параметрические условия для вычислительных экспериментов (ВЭ)	85
4.2.2.	Результаты вычислительных экспериментов	86
4.2.3.	Список цитируемых публикаций к подразделу 4.2	92
4.3.	Список цитируемых публикаций к подразделу 4.2	92
4.3.1.	Теоретические аспекты метода измерения распределенного параметра температуры по потоку частиц	93
4.3.2.	Модельные температурные распределения частиц и их интегральные спектры теплового излучения	96
4.3.3.	Результаты вычислительных экспериментов	100
4.3.4.	Список цитируемых публикаций к подразделу 4.3.	101
	<b>ЗАКЛЮЧЕНИЕ</b>	103
	<b>СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ УЧАСТНИКОВ ПО ТЕМЕ ПРОЕКТА</b>	106

## ВВЕДЕНИЕ

**Описание фундаментальной научной задачи, на решение которой направлено исследование.** Проект направлен на решение фундаментальной научной междисциплинарной задачи по теоретическому исследованию динамики тепловых полей волны горения и распознавания ее локальной неустойчивости в процессе СВ-синтеза алюминидов никеля и титана, макро- и микрокинетики горения и динамики фазо- и структурообразования продуктов синтеза, определения условий их стабильного формирования, и дополнительному исследованию процессов формирования слоистой структуры и предсказания эксплуатационных свойств плазменных порошковых покрытий, напыляемых из синтезированных алюминидов никеля и титана, с помощью уточнения физико-математических модельных представлений и разработки методов компьютерного моделирования, адекватных исследуемым процессам и явлениям.

Более конкретно, для исследования процессов СВ-синтеза алюминидов никеля и титана предлагаются два взаимодополняющих подхода. В первом подходе предполагается дальнейшее уточнение математической 3D-модели макрокинетики СВ-синтеза в виде уравнений теплопроводности и диффузионной кинетики, программная реализация соответствующих вычислительных 3D-сеточных схем с использованием параллельных вычислений. Особое внимание при этом обращено на реализацию дискретно-континуальных представлений структуры упаковки частиц в исходной смеси и структуры образования интерметаллических фаз в реагирующей среде, как на этапе уточнения моделей, так и на этапе алгоритмической и программной реализации моделирования процесса СВС. Кроме того, с помощью молекулярно-динамического моделирования с использованием программного пакета LAMMPS предлагается исследование микрокинетики СВ-синтеза алюминидов никеля и титана в нано- и микроразмерных образцах бинарных систем Ni-Al и Ti-Al. Исследование микрокинетики СВ-синтеза в микрообъемах (в отдельных частицах порошкового материала) позволяет уточнить модельные представления математической модели макрокинетики СВС и обосновать ее адекватность, определить условия перехода из режима стабильного движения волны горения в нестабильный режим (гашение СВС).

Во втором подходе, на основе результатов тепловизионной регистрации динамики тепловой волны горения в виде термохронограмм с высоким пространственно-временным разрешением (карт «дифференциальной хроноскопии (ДХС)» процесса распространения волны горения СВС), позволяющим распознавать ее локальную неустойчивость, получать новые экспериментальные данные больших объемов (до ста гигабайт) о дискретной структуре и механизмах горения на уровне микрогетерогенных эффектов, предлагается



усовершенствование методики анализа и расшифровки высокоскоростных термохронограмм СВС (карт ДХС), а также для автоматизации вычисления и видеообработки карт ДХС созданы необходимые программные средства с высоким коэффициентом сжатия «больших данных».

Для исследования процессов формирования слоистой структуры и предсказания функциональных характеристик плазменных порошковых покрытий, использующих при напылении частицы алюминидов никеля и титана, предлагается дальнейшее совершенствование методики моделирования покрытий, и при этом особое внимание обращено на уточнение морфологии сплэтов (затвердевших в результате соударения с напыляемой поверхностью капель расплава частиц), которое позволяет повысить точность оценок пористости, когезионной прочности слоев и других характеристик, как для металлических, так и для керамических и металлокерамических покрытий. Проведено большое количество вычислительных экспериментов по моделированию покрытий, в которых варьированием «ключевых физических параметров (КФП)» частиц исходного порошка (скорость, температура, диаметр частиц, температура подложки, различные виды материалов частиц и подложки и т.п.) с помощью программного пакета рассчитываются пористая слоистая структура покрытий и ее функциональные характеристики (пористость, адгезионная и когезионная прочность и др.), что позволяет определять оптимальные режимы напыления (оптимальные наборы КФП частиц) с наилучшими функциональными эксплуатационными характеристиками покрытий, т.е. позволяет решать задачу оптимального проектирования покрытий с заданными программируемыми свойствами.

**Актуальность исследования.** Сформулированная выше фундаментальная научная междисциплинарная задача проекта относится к классу задач предсказательного многомасштабного моделирования свойств и структуры функциональных материалов, востребованных в высокотехнологических отраслях индустрии и фундаментальной науке, и служит доказательной базой для принятия эффективных научно-технических решений о структуре и параметрах проектируемых систем и для прогнозирования их поведения при различных управлениях и условиях окружающей среды. Создаваемые теоретические основы и практические рекомендации нацелены на оптимизацию как СВС-технологии стабильного формирования алюминидов никеля и титана, так и технологии плазменного напыления функциональных покрытий, в т.ч. теплозащитных покрытий, которые можно использовать для энергосбережения в теплоэнергетических установках и теплосетях, как в Алтайском крае, так и в других регионах страны. Полученные результаты предполагается использовать в системах автоматического управления высокопроизводительными устройствами синтеза керамики и металлокерамики для аддитивных технологий на основе СВС, содействующих целям

импортозамещения, обновления производств, внедрения инновационных технологий и повышения производительности труда.

Актуальность теоретических исследований, разработки методик и программных средств предсказания эксплуатационных свойств синтезируемых материалов и покрытий не вызывает сомнений.

**Цель и задачи Проекта.** Целью проекта является уточнение физико-математических модельных представлений, разработка и совершенствование методов компьютерного моделирования и создание программных средств для исследования динамики тепловых полей волны горения в процессе СВ-синтеза, распознавания ее локальной неустойчивости, макро- и микрокинетики горения и динамики фазо- и структурообразования алюминидов никеля и титана, определения условий их стабильного формирования, и дополнительному исследованию процессов формирования слоистой структуры и предсказания эксплуатационных свойств плазменных порошковых покрытий, напыляемых из синтезированных алюминидов никеля и титана, на основе которого будет создан и совершенствоваться программный пакет для оптимального проектирования плазменных порошковых покрытий с заданными программируемыми свойствами.

Результатами выполнения 1-го этапа проекта (2018 года) являются:

В плане *первой задачи проекта* разработана и предложена физико-математическая 3D-модель макрокинетики СВС в виде уравнений теплопроводности и диффузионной кинетики с учетом дискретно-континуальных представлений о структуре порошковой смеси, разработаны алгоритмические основы для решения основных уравнений макрокинетики СВС (для расчета семейства температурных профилей в последовательные моменты времени, скорости движения фронта горения и т.д.), а также проведена часть исследований микрокинетики СВ-синтеза алюминидов никеля и титана методом молекулярно-динамического моделирования в пакете LAMMPS.

В плане *второй задачи проекта* разработана методика (алгоритм) вычисления карт «дифференциальной хроноскопии» (ДХС) процесса СВС, соответствующих горению бинарной смеси Ni-Al с различной степенью разбавления смеси готовым «размельченным» продуктом СВ-синтеза (алюминидом никеля NiAl – инертной добавки). Как для модельных (идеализированных) таких карт ДХС, так и для карт ДХС, рассчитанных на основе реальных физических экспериментов по СВ-синтезу алюминидов никеля рассчитаны их Trase-образы. Кроме того, разработаны и программно реализованы два вида «разностного» анализа последовательности Trase-образов, которые в вычислительных экспериментах позволили определить «характеристические» признаки (инварианты) для некоторых функционалов Trase-преобразования в виде гистограммных признаков. Как для модельных

(идеализированных), так и для реальных карт ДХС обнаружен эффект «смещения» гистограммы при значениях процента разбавления смеси свыше 20%, когда процесс горения СВС в бинарных системах Ni-Al переходит в неустойчивый режим.

В плане *третьей задачи проекта* уточнены модельные представления морфологии сплэтов в виде «сглаженного» сплэта, произведена программная реализация этой модельной морфологии в составе ранее разработанного авторами программного комплекса, произведены вычислительные эксперименты по компьютерному моделированию термобарьерных двуслойных покрытий (первый слой – алюминид никеля NiAl) для двух морфологий (цилиндрический и сглаженный сплэты) с последующим сравнением результатов моделирования между собой. Сравнение показало, что предложенная морфология сглаженного сплэта в сравнении с цилиндрической морфологией является более адекватной моделью (функциональные свойства моделируемых покрытий с использованием сглаженного сплэта лучше согласуются с экспериментальными данными, чем при использовании общепринятой цилиндрической морфологии сплэта). Кроме того, апробирована и программно реализована в составе программного комплекса методика моделирования шероховатой поверхности подложки при пескоструйной ее обработке. Дополнительно предложена модельная морфология сглаженного сплэта с «валиком» на периферии для металлического сплэта в качестве более адекватной модели по сравнению с общепринятой «цилиндрической» моделью.

Опубликованы 4 статьи в научных журналах, цитируемых в базах Scopus и WoS (по плану – не менее 3-х работ), 2 статьи в журналах из списка ВАК, а в итоге за первый год выполнения проекта опубликовано 22 научных работ (по плану – 14 работ). Кроме того, авторы участвовали с докладами в 5-и международных научных конференциях (по плану - не менее, чем в 3-х).

В соответствии с первоначально поставленными задачами и достигнутыми результатами на 1-ом этапе (за 1-ый год) выполнения проекта, целью следующего этапа исследования (2-ой год выполнения проекта) является совершенствование математических методов и разработка программных средств для моделирования СВ-синтеза алюминидов никеля и титана и критериев определения режимов локально неустойчивого микрогетерогенного горения (включая и Trace-анализ карт ДХС), а также совершенствование и отладка программного пакета для моделирования порошковых покрытий (переложение пакета из программной среды Delphi (язык Pascal) в среду Visual Studio (на языке C/C++) для обеспечения возможности использования библиотеки MPI – для обеспечения возможности проведения параллельных вычислений). Для достижения цели предполагается решить следующие задачи.

## **План работ на 2-ой этап (2-ой год) реализации Проекта.**

Произвести обзор и анализ научной литературы и научных публикаций по теме проекта.

По первой задаче проекта: а) разработать программный комплекс для моделирования макрокинетики СВ-синтеза алюминидов никеля и титана с использованием разработанного комплекса вычислительных алгоритмов численного решения уравнений теплопроводности и диффузионной кинетики с учетом дискретно-континуальных представлений о структуре исходной смеси и структуре образования интерметаллических фаз в реагирующей среде. Разработку программного комплекса произвести на языке C/C++ в полнофункциональной среде разработки MS Visual Studio с использованием возможностей MPI-интерфейса для параллельных вычислений; б) с использованием программных пакетов LAMMPS и OVITO продолжить вычислительные эксперименты по исследованию микрокинетики СВ-синтеза алюминидов никеля и титана в наноразмерных слоистых системах в различных режимах и с различной стехиометрией состава (не менее 6 вычислительных экспериментов).

По второй задаче проекта: а) с целью снижения риска неудачного синтеза СВС (обычно оценивается на уровне 25-30%) планируется продолжить накопление экспериментальной базы данных видеорегистрации распространения волны горения в процессе СВ-синтеза алюминидов никеля и титана (не менее 60 экспериментов с разбавлением реагирующей смеси инертном от 2.5 до 30%); б) кроме апробированного на 1-ом этапе проекта «гистограммного» признака Tрасе-образов, чувствительного к изменениям карт ДХС, разработать дополнительные характерные признаки и критерии распознавания неустойчивых режимов распространения волны горения на основе специально подобранных для СВС функционалов Tрасе-преобразования, чувствительных к изменению карты ДХС в неустойчивых режимах, а также усовершенствовать в связи с этим программный комплекс для автоматизации видеообработки карт ДХС и их Tрасе-образов (на языке C/C++ в полнофункциональной среде разработки MS Visual Studio с использованием возможностей MPI-интерфейса для параллельных вычислений).

По третьей задаче проекта: а) в процедуре моделирования слоистой структуры и расчета функциональных характеристик порошковых покрытий осуществить модификацию тех основных алгоритмов, которые допускают их распараллеливание, а также осуществить их программную реализацию на языке C/C++ в полнофункциональной среде разработки MS Visual Studio с использованием возможностей MPI-интерфейса для параллельных вычислений, отладку программного пакета на «тестовых» примерах моделирования покрытий; б) выполнить вычислительные эксперименты (не менее 50-и) по моделированию покрытий на основе алюминидов титана в различных режимах напыления (плазменное, ДГН и высокоскоростное HVOF).

Дополнительно: в течении 2-го этапа выполнения работ опубликовать 4 статьи в научных журналах, цитируемых в базах Scopus и WoS, а в итоге за второй год выполнения проекта опубликовать 15 научных работ. Принять участие с докладами не менее, чем в 3-х международных научных конференциях. Подготовить результаты исследований к их опубликованию и составить отчет по гранту 2-го промежуточного этапа выполнения проекта. (Исполнители: В.И. Иордан, П.Ю. Гуляев, В.А. Бледнов, Ю.А. Панченко, И.А. Шмаков).

Распределение исполнителей по задачам проекта на 2019 год:

Иордан Владимир Иванович - задачи 1, 2, 3.

Бледнов Виталий Александрович - задача 3.

Гуляев Павел Юрьевич - задачи 1, 2.

Панченко Юлия Александровна - задачи 1, 2.

Шмаков Игорь Александрович - задача 1, 2.

# **1. ПОДХОДЫ, МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ, ПРОГРАММНОЕ И МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЯ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ПРОЕКТА**

## **1.1. Анализ современного состояния исследований в области СВ-синтеза интерметаллидов и газотермического напыления порошковых покрытий. Обзор научных публикаций**

В настоящее время современные технологии создания материалов с программируемыми свойствами позволяют производить готовые изделия на основе их модельных прототипов путем послойного наращивания без традиционных методов механической обработки. К таким технологиям относятся и самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС) материалов и газотермическое напыление (ГТН) покрытий. Материал и изделие из него в технологии СВС производятся в результате твердопламенного горения смеси порошков, помещенной в форму-прототип. Технологии газотермического напыления позволяют формировать поверхности изделия с заданными свойствами с помощью послойного нанесения покрытия. Эти технологии позволяют создавать широкий спектр продукции, востребованной в экономике страны. Например, пористая проницаемая металлокерамика (размер пор порядка 5-150 мкм), производимая методом СВС, используется в качестве фильтров для очистки воды и нефтепродуктов, а высокая жаростойкость проницаемой металлокерамики позволяет производить ее восстановление простым прокаливанием. Электропроводность и развитая открытая поверхность, а также каталитические свойства делают ее пригодной для крекинга нефти и дожигания выхлопных газов. Традиционные на основе благородных металлов фильтры-катализаторы дороже аналогичных фильтров из металлокерамики в 5-7 раз. Традиционные горелки имеют коэффициент использования топлива (КИТ) около 40%, а из пористой металлокерамики фильтрационные горелки достигают значения КИТ порядка 95% за счет высокой теплопроводности. Эти материалы с высокой теплоемкостью используются в виде аккумуляторов теплоты в машинах, работающих по регенеративному циклу. Высокая излучательная способность пористой металлокерамики и эффект повышения температуры при фильтрационном горении (когда наибольшая доля теплоотдачи приходится на излучение) открывают перспективу прямого преобразования теплоты в фотоэлектричество. Только за счет нанесения жаростойких, теплозащитных, износостойких, фрикционных, электрозащитных, проводящих, коррозионностойких и декоративных покрытий толщиной от 100 мкм до 10 мм технологии ГТН позволяют значительно повышать качество низкокачественных заготовок изделий, формируемых несложными средствами производства.

Кроме того, ГТН применяется для восстановления широкого спектра деталей, существенно продлевая срок их службы. В настоящее время в этой области рождаются технологии послойного производства объемных изделий из керамики и металлов.

Фундаментальной задачей в технологиях СВС материалов и газотермического напыления покрытий является изучение механизмов фазо- и структурообразования в процессе синтеза конечного продукта из отдельных частиц под действием теплового и динамического напора или теплового эффекта реакции. Агрессивная среда, высокая температура (1000-4000 К) и дисперсность исходных порошков (1-50 мкм), характерные этим технологиям, ограничивают спектр методов исследования бесконтактными средствами измерения, а неравновесная термодинамика процессов создания материалов требует локализации в пространстве и во времени. Первые работы по теории распространения волны горения в конденсированных средах с тугоплавкими продуктами реакции, опубликованные вскоре после открытия СВС А.Г. Мержановым в начале 70-х годов, связаны с именами А.Г. Мержанова, И.П. Боровинской, В.М. Шкиро, А.П. Алдушина, Б.И. Хайкина, Э.Н. Руманова, К.Г. Шкадинского и других ученых, и выполнены в гомогенном приближении с использованием макроскопического описания реагирующей системы. Затем заметный вклад в теорию горения внесли Б.С. Сеплярский, В.М. Маслов, А.П. Амосов, А.М. Столин, Ю.М. Максимов, А.С. Рогачев, А.С. Мукасян, Е.А. Левашов, В.И. Итин, Ю.С. Найбороденко, В.Е. Овчаренко, О.В. Лапшин, П.М. Кришеник и другие отечественные ученые. Среди зарубежных ученых можно выделить J. Holt, Z. Munir, V. Matkowsky, L. Murr, A. Varma, M. Koizumi, Y. Miyamoto, O. Odawara и др.

Опубликовано большое количество теоретических и экспериментальных работ, анализ которых позволяет выделить два направления работ по изучению механизма горения СВС-систем. К первому направлению относятся исследования по инициированию волны горения, определению характеристик, структуры и режимов волны горения, а ко второму — исследования по морфологии, фазовому составу и микроструктуре продуктов синтеза. Также можно выделить три режима высокотемпературного синтеза: фронтально-волновой, объемный (тепловой взрыв) и ударно-волновой. В последнее десятилетие проведены многочисленные исследования различных аспектов распространения волны горения в неоднородных порошковых средах с образованием конденсированного продукта реакции.

Поиск условий проведения экспериментов, при которых свойства и структура конечных продуктов и материалов становятся оптимальными, требует значительных материальных, финансовых и временных затрат. Поэтому в данной области исследований значительный интерес и важную роль играют теоретические междисциплинарные исследования с

использованием методов физико-математического и компьютерного моделирования, и количество связанных с ними научных публикаций постоянно возрастает.

Среди немногочисленных публикаций, посвященных компьютерному моделированию процесса СВС в трехмерной постановке, можно выделить работы Ивлевой Т.П. с Мержановым А.Г., в которых исследуется твердопламенное нестационарное горение однородного цилиндрического образца в трехмерной постановке (с цилиндрической и плоской симметрией). Авторами показано многообразие спиновых трехмерных режимов горения, как в адиабатических, так и в неадиабатических условиях, классифицированы и найдены границы режимов. За рамками исследований осталось влияние фазовых переходов на спиновые режимы горения. Трехмерное моделирование твердопламенного горения в термически и химически неоднородных средах (ТХНС) теми же авторами рассмотрено в работах.

Более подробный обзор работ и список публикаций содержится в аналогичном подразделе 1.1 Отчета за 1-ый промежуточный этап проекта (за 2018 год: [http://phys.asu.ru/wp-content/uploads/2019/03/Report\\_2018.pdf](http://phys.asu.ru/wp-content/uploads/2019/03/Report_2018.pdf)). Несмотря на существенный прогресс в теоретических исследованиях с использованием методов физико-математического и компьютерного моделирования процесса СВС, тем не менее, практически во всех публикациях такого направления (в т.ч. и в выше упомянутых публикациях) многокомпонентная гетерогенная среда, в которой моделируется и с помощью численных сеточных схем рассчитывается процесс СВС, определяется как сплошная (континуальная) многофазная среда. Т.е., не учитывается в реальности дискретный характер пористости смесей и дискретность «микроочагов горения», которые подтверждаются результатами тепловизионной регистрации тепловой волны горения с высоким пространственно-временным разрешением. Поэтому изучение закономерностей горения неоднородных многофазных гетерогенных систем в двумерной и трехмерной математической постановках с учетом дискретно-континуального подхода может представлять интерес, как для фундаментальной теории горения, так и для практических нужд, в связи с резко возрастающим производством композиционных материалов. Причем, вопрос создания эффективных наукоемких технологий получения этих материалов не может быть решен без дальнейшего развития теории СВС - процессов, совершенствования математических моделей горения безгазовых и малогазовых систем, численного и аналитического их исследования.

В области компьютерного моделирования структуры и предсказания свойств порошковых покрытий, получаемых методами газотермического напыления (в т.ч. и плазменным напылением), публикации немногочисленны, а большинство публикаций было посвящено и до сих пор не ослаблен интерес к моделированию отдельных сплэтов –



затвердевших в результате соударения капель расплава частиц порошка с напыляемой поверхностью (в основном с гладкой горизонтальной плоской подложкой). К моделированию формирования сплэтов применяется подход, основанный на трехмерных нестационарных уравнениях Навье-Стокса, дополненных уравнениями тепломассопереноса и фазовых превращений, а также много других упрощенных методов моделирования. Также для моделирования формирования сплэтов многими авторами используются широко известные стандартные пакеты, например, пакеты CFD FLUENT (в его составе метод МКЭ), FLOW-3D, DYNA и ABAQUS. По моделированию покрытий имеются достаточно большое количество публикаций. Список публикаций на эту тему содержится в аналогичном подразделе 1.1 Отчета за 1-ый промежуточный этап проекта (за 2018 год: [http://phys.asu.ru/wp-content/uploads/2019/03/Report\\_2018.pdf](http://phys.asu.ru/wp-content/uploads/2019/03/Report_2018.pdf)). Отправной точкой развития данного направления можно считать использование метода Монте-Карло для моделирования слоистой структуры покрытий. Суть метода заключается в генерации случайных значений по определенным законам распределений «ключевых физических параметров (КФП)» частиц и подложки (таких как температура, скорость, диаметр и координаты частиц), характеризующих капли расплава перед соударением с основой (преградой), в результате растекания и затвердевания которых на поверхности основы формируются сплэты. Сплэты последовательно укладываются друг на друга (splat by splat), образуя слои покрытия. Причем X и Y-координаты центров сплэтов, уложенных на напыляемую поверхность, генерируются программным датчиком «псевдослучайных чисел» по равномерному закону, а Z-координаты сплэтов соответствуют Z-координатам точек соударения с напыляемой поверхностью. Для получения достоверных количественных оценок, характеризующих свойства покрытия, в процессе моделирования его слоистой структуры необходимо учитывать достаточно большое количество слоев (порядка сотни и более). Практически во всех этих публикациях рассматривается модель морфологии сплэтов в виде диска (цилиндра малой высоты), что является существенным недостатком этих моделей, так как структура микропористости, образуемой в результате укладки сплэта на другие сплэты, существенно искажается. Поэтому при расчете общей пористости, а также открытой и закрытой пористости покрытий, чаще всего получаются очень грубые оценки. Также не во всех работах правильно учитываются текущие состояния рельефа (топологии) напыляемой поверхности в процессе укладки на нее сплэтов.

В большинстве случаев неверно и необоснованно определяется угол и траектория затекания жидкости расплава частиц в углубления шероховатой напыляемой поверхности, что также искажает структуру покрытий и их функциональные (эксплуатационные) характеристики. В работах авторов проекта большинство указанных недостатков в используемых моделях устранены, однако требуются дальнейшее совершенствование

модельных представлений и программных средств по моделированию газотермических порошковых покрытий.

## **1.2. Теоретико-методологические подходы и методы исследования для решения задач проекта**

Реализация проекта *при решении первой задачи* по уточнению математической 3D-модели процесса СВС в виде уравнений теплопроводности и диффузионной кинетики с учетом дискретно-континуальных представлений о структуре упаковки частиц в исходной смеси и структуре образования интерметаллических фаз в реагирующей среде и ее программной реализации базируется на применении следующих подходов и методов.

1. Стохастическая генерация дискретной структуры упаковки частиц в исходной смеси с учетом заданных массовых содержаний компонентов смеси, статистического (нормального) распределения частиц по размерам и распределения координат частиц в объеме смеси (с возможной подпрессовкой) осуществлялась согласно методу молекулярной динамики (его разновидности – методу «крупных частиц»), например, с помощью пакетов *Dynamo*, *Lammps* и программы, разработанной авторами проекта

2. На основе сгенерированной дискретной структуры упаковки частиц смеси определяется ее пористость и средний радиус реакционноактивных «мезоячеек» смеси (микрообъемов очагов горения), в центре которой находится частица большего радиуса (условно говоря, реагент 1-го сорта, например, никель) с известными координатами и вокруг ее расположены частицы 2-го сорта (например, алюминий). Затем по определенным алгоритмам осуществляется разбиение объема смеси на реакционноактивные мезоячейки и «пассивные» мезоячейки (мезоячейки с частицами одного сорта), а информация о разбиении объема смеси на активные и пассивные мезоячейки сохраняется в виде специальных структур данных (записей) для подготовки расчетной 3D-области уравнений теплопроводности и диффузионной кинетики.

3. В специальных структурах данных (в записях) расчетной области уравнений процесса СВС для «узловых точек» 3D-сетки разбиения расчетной области сохраняются наборы справочных данных по теплофизическим параметрам (теплопроводность, теплоемкость, плотность и др.) и кинетическим параметрам химического реагирования (тепловые эффекты, диффузионные константы, энергии активации и т.п.), входящим в уравнения теплопроводности и диффузии.

4. Различный характер протекания процессов теплопроводности и диффузии в реакционноактивных и пассивных ячейках моделируется с учетом известного «метода фиктивных областей (МФО)» [12], учитывающего «разрывность» 1-го рода коэффициентов в

сеточных 3D-схемах и условия «сопряжения на границах контакта между частицами (и между частицей и порой)», изложенные в книге: Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Вычислительная теплопередача. – М.: Едиториал УРСС, 2003. – 784 с.

Решение *второй задачи проекта* по совершенствованию на основе Фурье-анализа и Грассе-преобразований методики анализа и расшифровки высокоскоростных термохронограмм (карт ДХС) тепловых полей волны горения СВС, регистрируемых экспериментальными методами дифференциальной хроноскопии с помощью микропирометрического комплекса (основной разработчик комплекса – участник проекта д.т.н., профессор П.Ю. Гуляев), базируется на применении следующих подходов и методов:

1. Методы высокоскоростной тепловизионной хроноскопии наносекундного разрешения волны горения СВС используют стрик-камеры на основе: фотоэлектронного умножителя на микроканальных пластинах, электронно-оптического затвора с быстродействием 30 нс, фотодиодных матриц большого разрешения с «глобальным затвором» и параллельным считыванием видеосигнала в режиме программно управляемой мультиэкспозиции.

2. Анализ и расшифровка высокоскоростных термохронограмм (карт ДХС) тепловых полей волны горения СВС (двумерных образов – изображений) базируется на использовании «быстрого преобразования Фурье (БПФ)» и Грассе-преобразования, результатами которых являются также двумерные образы в фазовой плоскости, на основе которых строится достаточно информативный гистограммный признак распределения яркостей. Установлена прямая корреляция между изменением степени разбавления смеси реагентов инертном (переходом реакции СВС в критический режим) и параметрами гистограммного признака, например, амплитуда, сдвиг пика гистограммы и «полуширина (дисперсионный признак гистограммы)».

3. Для обработки достаточно больших объемов видеоданных (в общем объеме порядка ста гигабайт) и автоматизации процесса видеообработки карт ДХС применяются разработанные авторами проекта программные средства с высоким коэффициентом сжатия «больших данных» до 1000 раз за счет применения межкадровой обработки видеосигнала телевизионной стрик-камеры.

Решение *третьей задачи проекта* по уточнению модельных представлений морфологии сплэтов (в особенности металлических сплэтов с наличием на их периферии так называемого «валика»), совершенствованию методики проектирования (моделирования) покрытий и программного пакета для исследования процессов формирования слоистой структуры и предсказания функциональных характеристик базируется на применении следующих подходов и методов:

1. Процесс имитационного математического моделирования последовательной стохастической укладки сплэтов (splat by splat) с образованием слоистой структуры покрытия опирается на известный метод Монте-Карло. В алгоритмах и программной реализации методики моделирования авторы проекта в отличие от многих других авторов при определении рельефа нижней поверхности сплэта используют сплайн-аппроксимацию «составными рациональными В-сплайновыми поверхностями» с учетом постоянно изменяющегося рельефа напыляемой поверхности.

2. Оценки основных параметров сплэтов (их толщина и диаметр) опираются на экспериментально апробированные модельные теоретические решения, полученные авторами проекта.

3. Процесс формирования структуры пор в объеме напыляемого покрытия связан с корректно обоснованной оценкой угла и траектории затекания жидкого расплава частицы в углубления на напыляемой поверхности.

4. В отличие от традиционного подхода других авторов вместо модели морфологии сплэта в виде тонкого диска (цилиндра) используется модель морфологии «сглаженного сплэта» (сглаживание на периферии сплэта), более адекватной реальной форме сплэтов.

### **1.3. Вычислительные средства и ПО, доступные для выполнения работ по проекту на 2-ом промежуточном этапе (в 2019 году)**

Для выполнения теоретических исследований, связанных с компьютерным моделированием СВ-синтеза алюминидов никеля и титана и компьютерным проектированием покрытий на их основе, коллектив авторов проекта имеет в распоряжении:

1. Вычислительный кластер центра коллективного пользования (ЦКП) ФГБОУ «Алтайский государственный университет» – вычислительный кластер “RAMEC” производства Китай (32 вычислительных узла). Характеристика вычислительного узла: 4-х ядерный процессор Intel i7-3820 (8 потоков), 8 Гб ОЗУ, 3 GPU типа AMD Radeon R7370;

ПО свободного распространения, установленное на кластере «RAMEC»:

- Lammmps - свободный пакет для классической молекулярной динамики, разработанный группой из Сандийских национальных лабораторий <http://lammmps.sandia.gov/> - MPI - набор библиотек MPICH и OpenMPI для обмена сообщениями между вычислительными процессами - <http://www.mpich.org/> , <https://www.open-mpi.org/>

- nwchem - пакет для квантово-химических расчётов и расчётов с использованием молекулярной динамики, разработанные Environmental Molecular Sciences Laboratory из Pacific Northwest National Laboratory - [http://www.nwchem-sw.org/index.php/Main\\_Page](http://www.nwchem-sw.org/index.php/Main_Page)

- cp2k - свободно распространяемая программа для выполнения моделирования атомистических и молекулярных систем - <https://www.cp2k.org/>

- quantum-espresso - свободно распространяемая программа для ab initio методов квантовой химии расчетов электронной структуры и моделирования материалов - <http://www.quantum-espresso.org/>

2. Компьютер с параллельным вычислительным процессором (монитор АОС i2252Vwh) с 6-ю ядерным процессором Intel-i7-3930K (12 потоков), 32 Гб ОЗУ, 2 видеокарты: NVidia Tesla C2050 и Nvidia Quadro 600;

3. Кластер рабочих станций (15 ПК) – локальная вычислительная сеть. Каждый ПК имеет 4-ядерный процессор Intel i5-7400, 4 Гб ОЗУ.

#### **1.4. Материально-техническое обеспечение и экспериментальное оборудование для решения задач проекта**

Для проведения работ по Проекту, в распоряжении коллектива имеются все необходимые материалы и информационные ресурсы, а также уникальное экспериментальное оборудование: программно-аппаратный комплекс по спектрофотометрии для диагностики температурного распределения частиц в газотермическом потоке напыления покрытий (ФГБОУ ВО «Алтайский государственный университет (АлтГУ)», лаборатория «высокопроизводительных вычислительных и информационно-измерительных систем и технологий», зав. лабораторией, доц. В.И. Иордан), автоматизированный измерительный приборный комплекс тепловизионной регистрации быстропротекающих процессов с высоким пространственно-временным разрешением и температурные эталоны для оперативной поверки (ФГБОУ ВО «Югорский государственный университет (ЮГУ)», лаборатория «Физико-химии наноструктурных материалов», зав. лабораторией, проф. П.Ю. Гуляев), электродуговой плазмотрон с межэлектродной вставкой номинальной мощностью 20-60 кВт с сопутствующим оборудованием (источник электропитания, газовый пульт, дозаторы порошковых материалов) - лаборатория «Физика многофазных сред» ИТПМ СО РАН, г. Новосибирск (зав. лабораторией, д.ф.-м.н. В.Ф. Косарев).

Опыт научного коллектива проекта сосредоточен на границе структурной макрокинетики процессов формирования материалов методом СВС, газотермического напыления и приборов оптического контроля температуры конденсированной фазы в быстропротекающих процессах. В течение последних пяти лет участники коллектива руководили и принимали участие в научных проектах. Квалификация коллектива подтверждается сведениями из РИНЦ, а опыт участием в различных проектах и грантах, например:

1. Грант РФФИ № 14-08-90428 Укр\_А "Методы контроля температуры и скорости частиц конденсированной фазы в процессе плазменно-дугового напыления";

2. Грант РФФИ № 18-08-01475 «Разработка оптических методов наносекундного разрешения для определения неустойчивых режимов волны горения в процессах самораспространяющегося высокотемпературного синтеза материалов»;

3. Грант РФФИ № № 15-42-00106 «Лазерная активация регенерационных процессов в вязкоупругих биологических тканях после импрегнирования наночастицами с аномально высоким фототермическим эффектом»;

Для выполнения экспериментальных исследований коллектив авторов имеет в распоряжении широкий спектр порошковых материалов, современного оборудования, вычислительную технику, уникальные измерительные и технологические комплексы собственной разработки:

1. Атомно-силовые сканирующие микроскопы Nanoeducator и Solver-Pro NT MDT(Россия)

2. Лазерный анализатор размеров частиц LA-300 (Horiba, Япония)

3. Металлографический и стерео-микроскопы Axiovert, Stemi (Zeiss, Германия)

4. Высокоскоростная TV камера VideoSprint с наносекундным затвором Nanogate (Videoscan, Россия)

5. Автоматический микротвердомер DM-8 (Affri, Италия)

6. Высокотемпературный микропирометр Пирометр С-500.7 (Техно-Ас, Россия)

7. Тепловизор – TH9100 (NEC, Япония).

8. Автоматизированный диагностический комплекс для измерения ключевых физических параметров одиночных частиц (скорость, температура, размер) перед их соударением с подложкой на основе 4-х цветовой времяпролетной пирометрии собственного излучения нагретых частиц (ИТПМ СО РАН)

9. Система теневой визуализации плазменного потока с применением адаптивного визуализирующего транспаранта (производство ИТПМ СО РАН). Съемка производится с помощью камеры Видеоскан 285-USB (НПК «Видеоскан»).

### **1.5. Список наиболее важных публикаций к разделу 1 (использованных для анализа современного состояния исследований в области СВ-синтеза интерметаллидов и газотермического напыления порошковых покрытий)**

1. Мержанов А.Г. Твердопламенное горение. - Черноголовка: ИСМАН. - 2000. - 224 с.

2. Амосов А.П., Боровинская И.П., Мержанов А.Г. Порошковая технология самораспространяющегося высокотемпературного синтеза материалов / Под научной редакцией В.Н. Анциферова. - Москва. - 2007. - 471 с.

3. Газотермическое напыление: учебное пособие / под ред. Л.Х. Балдаева. - М.: Маркет ДС, 2007. - 344 с.
4. Pawlowski L., Science and Engineering of Thermal Spray Coatings, 2nd ed., John Wiley & Sons, Ltd, 2008, 656 p.
5. Самораспространяющийся высокотемпературный синтез: материалы и технологии. - Новосибирск: Наука. - 2001. - 284 с.
6. Handbook of thermal spray technology. Ed. J.R. Davis. ASM int. 2004. 338 p.
7. Ивлева Т.П., Мержанов А.Г. Трехмерное моделирование твердопламенного хаоса // Докл. АН. - 2001. - Т.381, № 2. - С.210-213.
8. Ивлева Т.П., Мержанов А.Г. Математическое моделирование трехмерных спиновых режимов безгазового горения // Физика горения и взрыва. - 2002. - Т. 38, № 1. - С.47-54.
9. Ивлева Т.П., Мержанов А.Г. Трехмерные нестационарные режимы твердопламенного горения в неадиабатических условиях // Физика горения и взрыва. - 2003. - Т. 39, № 3. - С.67-76.
10. Ивлева Т.П., Мержанов А.Г. Твердопламенное горение в термически и химически неоднородных средах // Докл. АН. - 2006. - Т. 411. - № 2. - С. 206-210.
11. Ивлева Т.П., Мержанов А.Г. Моделирование твердопламенного горения в термически и химически неоднородных средах // Физика горения и взрыва. - 2007. - Т. 43, № 6. - С.21-30.
12. Ковалев О.Б., Фомин В.М. К теории межфазного взаимодействия в смеси реагирующих металлических порошков // Физика горения и взрыва, 2002. – Т. 38. - № 6. – С. 55-65.
13. Нигматулин Р.И. Основы механики гетерогенных сред. - М.: Наука, 1978.-338 с.
14. Алдушин А.П. "Масштабный эффект при распространении "твердого пламени". — В кн. Концепция развития горения и взрыва как области научно-технического прогресса, Черноголовка. Издательство "Территория", 2001. - С. 35-37.
15. Прокофьев В.Г. Нестационарное фильтрационное горение пористого слоя // Доклады Всероссийской научной конференции «Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики» - Томск Изд-во Том ун-та, 1998. – С. 82-83.
16. Прокофьев В.Г., Смоляков В.К. Влияние структурных факторов на нестационарные режимы горения безгазовых систем//Физика горения и взрыва -2003. -Т 39. - № 2.-С 56-66.
17. Прокофьев В.Г., Смоляков В.К. Нестационарные режимы горения бинарной безгазовой смеси при зажигании накаливаемой стенкой // Физика горения и взрыва -2005. -Т 41. -№2. – С. 45-50.

18. Смоляков В.К., Прокофьев В.Г. Динамика макроскопического структурирования продукта в автоколебательном режиме горения // Тяжелое машиностроение – 2005. - №9. - С 35-37.
19. Prokofiev V.G., Pisklov A.V., Smolyakov V.K. Nonstationary Combustion Conditions of Layered Composition II Eurasian Physical Technical Journal. – 2006. – V. 3. –No. 1. –P. 51-53.
20. Смоляков В.К., Максимов Ю.М., Прокофьев В.Г. Динамика формирования макроструктуры продукта при горении безгазовых систем // Математическое моделирование горения и взрыва высокоэнергетических систем / Под ред. И.М. Васенина - Томск Изд-воТом ун-та, 2006. – С. 221-315.
21. Шульц Д.С., Крайнов А.Ю. Математическое моделирование СВС процесса в гетерогенных реагирующих порошковых смесях // Компьютерные исследования и моделирование. - 2011. - Т. 3. - № 2. - С. 147-153.
22. Ковалев О.Б., Беляев В.В. Математическое моделирование металлохимических реакций в двухкомпонентной реагирующей дисперсной смеси // Физика горения и взрыва, 2013. – Т. 49. - № 5. – С. 64-76.
23. Rogachev A.S., Mukas'yan A.S. Experimental verification of discrete models for combustion of microheterogeneous compositions forming condensed combustion products (Review)// Combustion, Explosion, and Shock Waves. - 2015. - Т. 51. - № 1. - С. 53-62.
24. Кришеник П.М. Математическое моделирование горения структурированных гетерогенных систем // диссертация ... доктора физико-математических наук: 01.04.17; [Место защиты: ИСМАН] – Черноголовка, 2006.
25. Cherukara M.J., Weihs P., Strachan A. Molecular dynamics simulations of the reaction mechanism in Ni/Al reactive intermetallics // Acta Materiala. - 2015. - № 96. – P. 1-9.
26. Politano O., Baras F. Molecular dynamics simulations of self-propagating reactions mechanism in Ni-Al multilayer nanofoils // J. of Alloys and Compaunds. - 2015. - № 652. – P. 25-29.
27. Rogachev A.S., Vadchenko S.G., Baras F., Politano O., Rouvimov S., Sachkova N.V., Grapes M.D., Weihs T.P., Mukasyan A.S. Combustion in reactive multilayer Ni/Al nanofoils: Experiments and molecular dynamic simulation // Combustion and Flame. - 2016. - № 000. – P. 1-12.
28. Knotek O., Elsing R. Monte Carlo simulation of the lamellar structure of thermally sprayed coatings / Surf. Coat. Technol.. - 1987. - Vol 32. - P. 261-272.
29. Клименов В.А., Негрескул С.И., Солоненко О.П., Остапенко С.А. Компьютерное моделирование укладки частиц при газотермическом напылении. // Томск: Инст. физ. прочн. и материаловедения СО РАН. - 1993. - 23 с.



30. Кундас С.П., Достанко А.П., Ильющенко А.Ф., Кузьменков А.Н., Lugscheider E., Eritt U. Компьютерное моделирование процессов плазменного напыления покрытий. Мн.: Бестпринт, 1998. - 212 с.
31. Liu H., Krishnan S., Marella S., Udaykumar H.S. Sharp interface Cartesian grid method II: A technique for simulating droplet interactions with surfaces of arbitrary shape / J. of Computational Phys. – Vol. 210. - 2005. -P. 32-54.
32. Bussmann M., Mostaghimi J., Chandra S. On a three-dimensional volume tracking model of droplet impact // Phys. of Fluids. - 1999. Vol. 11(6). - P. 1406-1417.
33. Pasandideh-Fard M., Bhole R., Chandra S., Mostaghimi J. Deposition of tin droplets on a steel plate: simulations and experiments // Int. J. of Heat and Mass Transfer. - 1998. - Vol. 41, №19. - P. 2929-2945.
34. Ghafouri-Azar R., Mostaghimi J., Chandra S., Charmchi M. A Stochastic Model to Simulate the Formation of a Thermal Spray Coating / J. of Thermal Spray Technology. - 2003. - Vol. 12(1). - P. 53-69.
35. Bobzin K., Bagcivan N., Parkot D., Schafer M., Petkovic I. Modeling and Simulation of Microstructure Formation for Porosity Prediction in Thermal Barrier Coatings Under Air Plasma Spraying Condition / J. of Thermal Spray Technology. - 2009. - Vol. 18(5-6). -P. 975-980.

## **2. РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ МАКРОКИНЕТИКИ СВ-СИНТЕЗА ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ В БИНАРНЫХ СИСТЕМАХ Ni-AL И Ti-AL С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАЗРАБОТАННОГО КОМПЛЕКСА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ АЛГОРИТМОВ. МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОКИНЕТИКИ СВ- СИНТЕЗА АЛЮМИНИДОВ ТИТАНА**

### **2.1. Разработка программного комплекса для исследования макрокинетики СВ-синтеза интерметаллических соединений в бинарных системах Ni-Al и Ti-Al**

На 1-ом этапе выполнения проекта (см. Отчет за 1-ый промежуточный этап проекта: [http://phys.asu.ru/wp-content/uploads/2019/03/Report\\_2018.pdf](http://phys.asu.ru/wp-content/uploads/2019/03/Report_2018.pdf) ) был разработан основной комплекс вычислительных алгоритмов численного решения уравнений теплопроводности и диффузионной кинетики с учетом дискретно-континуальных представлений о структуре исходной смеси и структуре образования интерметаллических фаз в реагирующей среде.

На втором промежуточном этапе выполнения проекта была поставлена задача осуществления некоторых уточнений и доработки вычислительных алгоритмов, и в большей степени, основной задачей планировалась разработка, отладка и «первичное» тестирование программного комплекса, предназначенного для исследования макрокинетики СВ-синтеза интерметаллических соединений в таких бинарных системах, как Ni-Al и Ti-Al (с учетом дискретно-континуальных представлений о структуре исходной смеси и структуре образования интерметаллических фаз в реагирующей среде).

Как уже отмечалось в предыдущем отчете 1-го этапа проекта, в распоряжении авторов проекта имеется программа, генерирующая структуру упаковки частиц из различных материалов (например, тех же частиц Ni, Al и др.) с различными размерами и координатами заполнения объема СВС-образца смеси (с заданными статистическими распределениями). Как показали вычислительные эксперименты по генерации структур упаковок с помощью этой программы, среднее значение пористости таких структур (со сферическими частицами) практически не оказывается менее 40% (пористость от 40 до 70%). Такие значения пористости структуры упаковок соответствуют в большей степени так называемой «насыпной плотности» смеси частиц. Смеси с «подпрессовкой» достигают меньшего уровня пористости – 30% и менее. Поэтому для получения более плотной структуры упаковки в качестве «тестовой» структуры упаковки частиц для тестирования разрабатываемого программного комплекса исследования макрокинетики СВ-синтеза было решено реализовать «тестовую» структуру плотной упаковки с высокой «симметрией» расположения частиц и обладающей

относительной плотностью заполнения объема СВС-образца на уровне 70% (пористость порядка 30%).

**2.1.1. Разработка и создание программных модулей на языке C/C++, предназначенных для генерации структуры плотнейшей упаковки сферических частиц и для формирования из нее 3-х мерной сеточной структуры точек расчетной области уравнений теплопроводности и диффузионной кинетики СВС**

**2.1.1.1. Алгоритм и программная реализация для генерации структуры плотнейшей упаковки сферических частиц (мезоячеек)**

В качестве тестовой структуры упаковки реализована «эталонная» модельная структура плотнейшей упаковки (чередующиеся плоские слои с квадратной симметрией, рис. 1) так называемых мезоячеек в виде шариков одинакового радиуса ( $R_s=50$  мкм), образующих регулярную структуру в виде параллелепипеда с определенными свойствами симметрии расположения частиц.

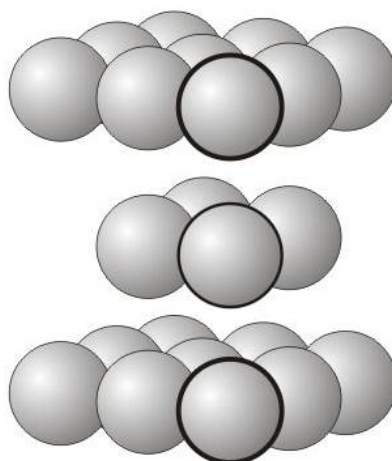


Рис. 1. Плотнейшая кубическая упаковка - плоские слои с квадратной симметрией [1]

На рисунке 1 для удобства показан фрагмент структуры из трех слоев, разделенных между собой по координате  $Z$ , а на самом деле эти слои плотно друг к другу прилегают, т.е. слой с четным номером наложен в лунки нижележащего слоя с нечетным номером (коэффициент заполнения пространства 74,05%). В нечетных слоях  $X$ - и  $Y$ -координаты центров соответствующих друг другу шариков совпадают, а в четных слоях  $X$ - и  $Y$ -координаты центров шариков смещены по обеим координатам относительно шариков нечетных слоев на радиус шарика  $R_s$ .

При тестировании разрабатываемого авторами программного комплекса моделирования СВС в «эталонной» модельной структуре плотнейшей упаковки в нечетных слоях вместо 9 шаров ( $3 \times 3$ ) содержатся по 36 шаров ( $6 \times 6$ ), а в четных слоях вместо 4-х шаров ( $2 \times 2$ )

содержатся по 25 шаров (5x5). Вдоль Z-координаты в этой структуре содержатся 18 пар слоев (по 18 чередующихся слоев с нечетными и четными номерами, соответственно). В итоге, эталонная модельная структура (в виде параллелепипеда) содержит 1098 мезоячеек. Во всех слоях в центральных пустотах каждого квадрата 4-х шаров размещены кубические структуры из 8 шариков алюминия меньшего радиуса  $R_{Al}=10$  мкм (два слоя в виде квадратов из 4-х шариков друг над другом). Кроме того, структура из 1098 мезоячеек дополнительно «усечена» нижней горизонтальной и 4 боковыми гранями-плоскостями, проходящими через центры нижних 4-х угловых шаров-мезоячеек, и верхней горизонтальной плоскостью, касающейся шаров-мезоячеек последнего 18-го четного слоя. Таким образом, размеры эталонной структуры по осям X и Y оказываются равны по 500 мкм (от центра 1-го до центра 6-го шаров), а по оси Z – приблизительно 2500 мкм.

Структура заполнения мезоячейки показана на рисунке 2(a): вокруг центральной частицы Ni (радиусом 30 мкм) заполнен слой частицами Al (радиусом 10 мкм) также в виде плотнейшей упаковки. Алгоритм заполнения мезоячейками СВС-образца в виде параллелепипеда и алгоритм заполнения мезоячейки частицами Al практически один и тот же. Разница лишь в том, что для частиц Al, попадающих за пределы сферы мезоячейки, координаты не сохраняются (сохраняются координаты попавших внутрь сферы) и в конце процедуры заполнения в центральной сферической части мезоячейки радиуса, равного радиусу Ni, координаты предварительно попавших частиц Al отбрасываются (частицы Al отбрасываются и замещаются частицей Ni). Поэтому ниже приведена часть программного кода, выполняющего заполнение параллелепипеда (СВС-образца) мезоячейками, а также часть кода для заполнения пустот в каждом квадрате 4-х мезоячеек каждого слоя (как нечетного, так и четного слоев).

```
enum:unsigned char
{Ni=1, // код материала Ni
Al=6,}; // код материала Al. Код воздуха=0, код Ni=1, код Al=6; коды 2, 3, 4, 5
//зарезервированы для интерметаллических фаз

int ms=0; // ms - номер мезоячейки
int mc=0; // mc – номер кубика, вставленного между мезоячейками
int mp=0; // mp – номер частицы (Ni или Al) в выходном файле
double Rs=50; // Rs – радиус мезоячейки
double Ds=100; // Ds – диаметр мезоячейки
double Rni=30; //Dni=60; // Rni – радиус Ni, Dni – диаметр Ni
double Ral=10, Dal=20; // Ral – радиус Al, Dal – диаметр Al
double RalL=Rs*0.205; // RalL – радиус частиц Al в кубиках
double h; // расстояние между центрами слоев (вдоль Z) в параллелепипеде (СВС-образце)
h=sqrt(2.0)*Rs;
double hc,sh; // параметры кубика относительно его центра: hc – вдоль Z, sh – вдоль X и Y
hc=(sqrt(2.0)-1)*Rs/2; sh=(2-sqrt(2.0))*Rs/2;
```

```

int Np_mes; // Np_mes – число частиц в одной мезоячейке (Ni – последняя по номеру)
int L=18, Lmes=4; // комментарий см. ниже
int I=5, J=5;
double hms; // расстояние между центрами слоев (вдоль Z) в мезоячейке
hms=sqrt(2.0)*Ral;
double xp, yp, zp;
int i, j, k, l; // «рабочие» переменные
double Xp_cub[8], Yp_cub[8], Zp_cub[8];
unsigned char Types=6;

// Xp_cub[k], Yp_cub[k], Zp_cub[k] – относительные координаты 8-и частиц A1 в кубике
Xp_cub[0]=-sh; Yp_cub[0]=0; Zp_cub[0]=-hc; Xp_cub[1]=0; Yp_cub[1]=-sh; Zp_cub[1]=-hc;
Xp_cub[2]=0; Yp_cub[2]=sh; Zp_cub[2]=-hc; Xp_cub[3]=sh; Yp_cub[3]=0; Zp_cub[3]=-hc;
Xp_cub[4]=-sh; Yp_cub[4]=0; Zp_cub[4]=hc; Xp_cub[5]=0; Yp_cub[5]=-sh; Zp_cub[5]=hc;
Xp_cub[6]=0; Yp_cub[6]=sh; Zp_cub[6]=hc; Xp_cub[7]=sh; Yp_cub[7]=0; Zp_cub[7]=hc;
vector<double> Xp_mes, Yp_mes, Zp_mes;

// заполнение мезоячейками и кубиками параллелепипеда (СВС-образца)
vector<double> X, Y, Z, Rp;
vector<unsigned char> Tp;

mp=0;
for (l=1; l<=L; l++) // количество пар слоев по оси Z, L=18 пар слоев (высота~2500 мкм)
{ // сначала тройной вложенный цикл заполнения «абсолютных» координат частиц, входящих
в очередную мезоячейку для нижнего (нечетного) слоя в паре слоев
    for (j=0; j<=J; j++) // переменная j связана с осью Y, J=5 (~500 мкм)
        for (i=0; i<=I; i++) { // переменная i связана с осью X, I=5 (~500 мкм)
            ms+=1;
            // i*Ds; j*Ds; 2*(l-1)*h;   x, y, z-координаты центра мезоячейки
            for (k=0; k<Np_mes; k++)
            { // заполнение «абсолютных» координат частиц, входящих в очередную
                мезоячейку
                // Xp_mes[k], Yp_mes[k], Zp_mes[k] – относительные координаты частиц
                в мезоячейке, по которым ниже определяются «абсолютные»
                координаты
                X.push_back(Xp_mes[k] + i*Ds);
                Y.push_back(Yp_mes[k] + j*Ds);
                Z.push_back(Zp_mes[k] + 2*(l-1)*h);
                Rp.push_back(Ral); // радиус частицы в мезоячейке
                Tp.push_back(A1); // 6 – код (тип) материала A1
                mp+=1;
            }
            Rp[mp-1]=Rni; // коррекция радиуса последней частицы (Ni) в мезоячейке
            // коррекция кода (типа) материала последней частицы в мезоячейке (Ni);
            Tp[mp-1]=Ni;
        }
}
// далее заполнение «абсолютных» координат частиц, входящих в кубики нижнего слоя
for (j=1; j<=J; j++) // переменная j связана с осью Y, J=5 (~500 мкм)
    for (i=1; i<=I; i++) { // переменная i связана с осью X, I=5 (~500 мкм)
        mc+=1;
        // (2*i-1)*Rs; (2*j-1)*Rs; 2*(l-1)*h;   x, y, z-координаты центра кубика,
        соответственно

```

```

for (k=0; k<8; k++)
  { // Xp_cub[k], Yp_cub[k], Zp_cub[k] – относительные координаты частиц
    Al в кубике
    X.push_back(Xp_cub[k] + (2*i-1)*Rs);
    Y.push_back(Yp_cub[k] + (2*j-1)*Rs);
    Z.push_back(Zp_cub[k] + 2*(l-1)*h);
    Rp.push_back(RalL); // радиус частицы Al в кубике
    Tr.push_back(Al); // 6 – код (тип) материала Al
    mp+=1;
  }
}

```

Замечание 1: Далее идут два блока операторов, аналогичных приведенным выше. А именно: сначала идет тройной вложенный цикл заполнения «абсолютных» координат частиц, входящих в очередную мезоячейку для верхнего (четного) слоя в паре слоев, затем идет тройной вложенный цикл заполнения «абсолютных» координат частиц Al, входящих в кубики верхнего (четного) слоя.

Замечание 2: рассчитанные координаты всех частиц Al (плюс радиус и тип материала), входящих в мезоячейки и не входящие в них (находящиеся между мезоячейками в пустотах), и частиц Ni (находящихся в центрах мезоячеек) сохраняются в виде файла на диске.

### 2.1.1.2. Алгоритм и программная реализация для генерации 3-х мерной сеточной структуры точек «расчетной области» уравнений теплопроводности и диффузионной кинетики СВС

Идея алгоритма и программной реализации проста. Считывая с диска из файла сохраненные параметры (3 координаты центра частицы, радиус и тип материала) по каждой частице (их количество обозначено в программе как NT), определяются целочисленные (как результат нормировки на шаг h) значения этих параметров (кроме типа материала). Затем в тройном вложенном цикле для каждой частицы определяются точки 3-х мерной сетки, попадающие внутрь сферы частицы и для которых в 3-мерном динамическом массиве запоминается тип материала этой частицы (в программе оператор:  $g[izlk][iylj][ixli] = nl$ ). Ниже приведена основная часть кода, соответствующая алгоритму заполнения массива  $g[izlk][iylj][ixli]$ , который затем сохраняется на диске.

```

struct Particle {double X, Y, Z;};
double A = 500, B = 500, C = 2500, h=1.0, Temp, RNi, Rs; // A,B,C – размеры параллелепипеда
int i, j, k, l, iR, ixl, iy1, izl, ixli, iylj, izlk, NT, iX=(int) A/h, iY=(int) B/h, iZ=(int) C/h,
OccupiedNumber=0, Ni, m=0;
char Buffer[128];
unsigned char nl, Types, NiType;
Particle *Nis;
FILE **File=new FILE*[7];
File[0]=fopen("Particles.txt", "rb");

```

```

if (!File[0]) return 0;
//создание динамического 3-х мерного массива типа char (выделение памяти): для каждой 3-х
мерной сеточной точки в массиве будет записываться тип материала (код воздуха=0, либо код
Ni=1, либо код Al=6; коды 2, 3, 4, 5 зарезервированы для интерметаллических фаз)

char ***g = (char***)malloc((iZ+1)*sizeof(char**));
for(i=0; i<=iZ; i++)
{
    g[i] = (char**)malloc((iY+1)*sizeof(char*));
    for(j=0; j<=iY; j++)
        g[i][j] = (char*)calloc(iX+1, sizeof(char));
}
//чтение из файла значений параметров: NT – количество всех частиц в структуре упаковки;
Types – количество типов материала; Rs – радиус мезоэчейки; NiType – тип (код) материала Ni
fread(&NT, sizeof(unsigned int), 1, File[0]);
fread(&Types, sizeof(unsigned char), 1, File[0]);
fread(&Ni, sizeof(unsigned int), 1, File[0]);
fread(&NiType, sizeof(unsigned char), 1, File[0]); //считывание типа (кода) материала Ni
fread(&Rs, sizeof(double), 1, File[0]);

Nis=new Particle[Ni+1];
// основной расчетный блок (вложенные циклы)
for (l=0; l<NT; l++) { // NT – количество всех частиц
    fread(&Nis[m], sizeof(Particle), 1, File[0]); // считывание координат центра частицы
    ixl=(int)(Nis[m].X/h); // ixl – целочисленная X-координата, равная количеству шагов h
    iyl=(int)(Nis[m].Y/h); // iyl - целочисленная Y-координата, равная количеству шагов h
    izl=(int)(Nis[m].Z/h); // izl - целочисленная Z-координата, равная количеству шагов h
    fread(&Temp, sizeof(double), 1, File[0]); // считывание радиуса частицы (Temp)
    iR=(int)(Temp/h); // iR – целочисленный радиус частицы, равный количеству шагов h
    fread(&n1, sizeof(unsigned char), 1, File[0]); // считывание n1 – тип материала частицы
    if (n1==NiType) {RNi=Temp; printf("x=%g y=%g z=%g\n", Nis[m].X, Nis[m].Y, Nis[m].Z);
        ++m;}
    for (k=-iR; k<=iR; k++) {
        izlk=izl+k;
        if (izlk<0 || izlk>iZ) continue;
        for (j=-iR; j<=iR; j++) {
            iylj=iyl+j;
            if (iylj<0 || iylj>iY) continue;
            for (i=-iR; i<=iR; i++) {
                ixli=ixl+i;
                if (ixli<0 || ixli>iX) continue;
                if (i*i+j*j+k*k<=iR*iR)
                    g[izlk][iylj][ixli] = n1; // n1 – тип материала частицы
            }
        }
    }
}
}
}

```

**Замечание:** после выполнения основного расчетного блока 3-х мерный массив g[izlk][iylj][ixli] сохраняется в виде файла на диске.

### 2.1.2. Разработка и создание основного программного модуля на языке C/C++, предназначенного для 3D сеточных вычислений с использованием 3-х мерной сеточной структуры точек расчетной области уравнений теплопроводности и диффузионной кинетики СВС

Для разработки основного программного модуля осуществлены некоторые уточнения и доработка вычислительных алгоритмов. Основной задачей планировалась разработка, отладка и «первичное» тестирование программного комплекса, предназначенного для исследования макрокинетики СВ-синтеза интерметаллических соединений в таких бинарных системах, как Ni-Al и Ti-Al (с учетом дискретно-континуальных представлений о структуре исходной смеси и структуре образования интерметаллических фаз в реагирующей среде). Тестирование программного модуля планировалось на примере системы Ni-Al.

Система уравнений процесса СВС состоит из уравнения теплопроводности (1) с функцией экзотермического тепловыделения (2) и уравнения кинетики (3) с кинетической функцией гомогенной кинетики (4) для однофазных областей ( $Ni_3Al$ ,  $NiAl$  и др.)

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\alpha \cdot \text{grad}(T)) + f(T, \eta), \quad (1)$$

$$f(T, \eta) = (Q/C_{yd}) \cdot k(T) \cdot \varphi(\eta) + \beta \cdot (T - T_0), \quad (2)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = k(T) \cdot \varphi(\eta) = G(T, \eta), \quad (3)$$

$$\varphi(\eta) = (1 - \eta)^n, \quad (4)$$

где  $T=T(x,y,z,t)$  – температура в текущей расчетной пространственной точке смеси в момент времени  $t$ ;  $\alpha=\lambda/(C_{yd} \cdot \rho)=\alpha(x,y,z,T)$  и  $\lambda=\lambda(x,y,z,T)$  – соответственно, температуропроводность и теплопроводность компонента смеси;  $T_0$  – температура внешней среды;  $T_{ign}$  – температура зажигания (самовоспламенения) СВС-образца;  $C_{y\delta}=c(x,y,z,T)$  и  $\rho=\rho(x,y,z,T)$  – соответственно, удельная теплоемкость и плотность в окрестности расчетной точки;  $Q=Q(x,y,z,T)$  – тепловой эффект реакции на единицу массы продукта с учетом стехиометрии состава компонентов в окрестности расчетной точки;  $\eta=\eta(x,y,z,t)$  – глубина химического превращения (массовая доля продукта по отношению к массе реакционной смеси и продукта);  $\beta$  – коэффициент, учитывающий теплотери во внешнюю среду. Следует отметить, что часто «в первом приближении» зависимостью параметров  $\alpha$ ,  $\lambda$ ,  $c$  и  $\rho$  от температуры пренебрегают. Однако при большом диапазоне изменения температуры  $T(x,y,z,t)$  такое пренебрежение не оправдано и в предлагаемом авторами подходе учитывается неоднородность теплофизических параметров и дискретность пористой среды.

Начальные условия (кроме границы  $z=0$ ):  $T(x,y,z,0) = T_0$ , на границе  $z=0$  вначале  $T(x,y,0,0) = T_{ign}$ , а через некоторое время устанавливаются «свободные» краевые условия 1-го рода.



Температурно-активационная функция Аррениуса имеет вид:  $k(T)=k_0\exp(-E/(R\cdot T))$  где  $k_0$  – предэкспонент и  $E=E(x,y,z,T(x,y,z,t))$  – энергия активации реакции, соответствующая фазе продукта.

Для решения уравнений (1)-(4) с помощью «сеточных» вычислительных схем (в данной работе на основе схем Кранка-Николсона) предварительно была реализована процедура подготовки «расчетной области» в виде трехмерной сетки узловых точек с одинаковым шагом  $h=1$  мкм по координатам  $x, y, z$  (количество точек равно  $625000000=500\times 500\times 2500$ ). Эта процедура описана выше в подпунктах 2.1.1.1 и 2.1.1.2. Реализация основного программного модуля осуществлялась на языке C++ с использованием компилятора GCC-8, а также с использованием систем параллельного программирования OpenMP и MPICH 3.1.3. под управлением ОС GNU/Linux. В этом модуле создана структура данных  $\text{Points}[i][k][l]$  с тремя полями:  $\text{Points}[i][k][l].\text{type}$ ;  $\text{Points}[i][k][l].t$ ;  $\text{Points}[i][k][l].\text{eta}$ , где  $\text{type}$  - тип материала,  $t$  - температура,  $\text{eta}$  - глубина превращения. Эти поля в каждой точке структуры  $\text{Points}[i][k][l]$  используются в текущих расчетах и в каждом последующем временном слое (на каждой  $(j+1)$ -ой итерации), по крайней мере, поля температуры и глубины поглощения изменяются в результате пересчета (тип материала на некоторых итерациях также может изменяться).

До начала реакции СВС в центре каждой мезоячейки радиуса  $R_s=50$  мкм находится сферическая частица никеля Ni радиуса  $R_{Ni}=30$  мкм, вокруг которой в сферической прослойке содержатся частицы алюминия Al радиуса  $R_{Al}=10$  мкм (рис. 2(а)). В процессе реакции СВС с увеличением температуры в мезоячейках на поверхностях центральных частиц Ni образуются диффузионные слои интерметаллидов (рис. 2(б)), разделяющие частицу Ni и слой частиц Al. Частицы Al при температуре свыше точки плавления 933 К образуют монолитный слой расплава, как показано на рисунке 2(б).

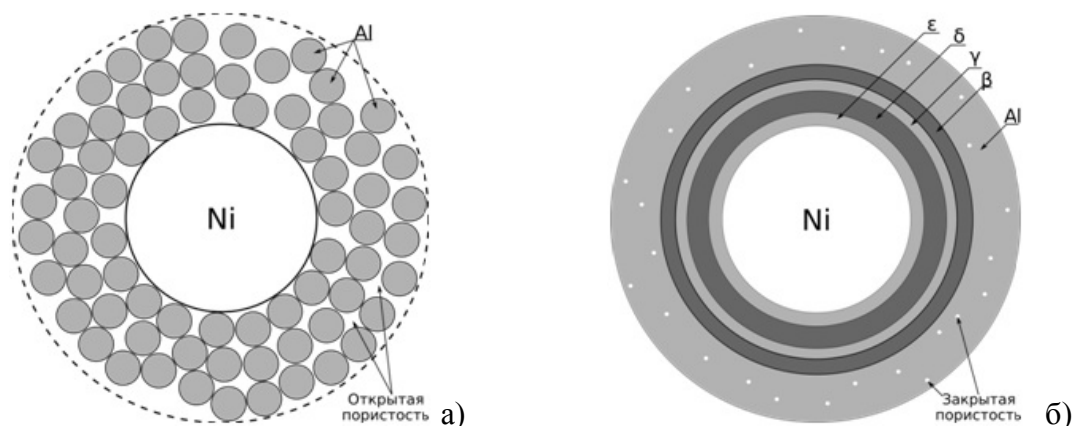


Рис. 2. Схема мезоячейки: а) до иницирования СВС ( $T < 933$  К); б) в процессе СВС ( $T > 933$  К);

фазы:  $\varepsilon$  —  $\text{Ni}_3\text{Al}$ ,  $\delta$  —  $\text{NiAl}$ ,  $\gamma$  —  $\text{Ni}_2\text{Al}_3$ ,  $\beta$  —  $\text{NiAl}_3$

На каждой итерации по времени (на  $(j+1)$ -ой итерации) в пределах каждой сферической мезоячейки решается задача диффузионной кинетики [2], в результате которой фиксируются

измененные радиусы интерметаллических прослоек ( $\text{Ni}_3\text{Al}$ ,  $\text{NiAl}$  и др.), которые определяют реакционные объемы тепловыделения и которые используются при численном решении уравнения теплопроводности с использованием неявной схемы двуциклического расщепления на основе симметричной схемы Кранка-Николсона (см. ниже). Численное решение задач реакционной диффузии в каждой мезоячейке производится независимо друг от друга и поэтому легко распараллеливается по независимым вычислительным процессам (параллелизм задач). Ниже приведено краткое изложение методических особенностей решения диффузионной задачи в мезоячейке.

В каждой мезоячейке решается задача диффузионной кинетики на основе численного решения уравнений диффузии и балансовых соотношений на подвижных межфазных границах [2, 3]:

$$\frac{1}{D_i} \frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{\partial^2 C_i}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial C_i}{\partial r}, \quad i=1,2,\dots, \quad (5)$$

$$r_i(t) \leq r \leq r_{i+1}(t),$$

$$r = r_i(t): \quad (C_{i-1}^+(T) - C_i^-(T)) \frac{\partial r_i}{\partial t} = -D_{i-1}(T) \frac{\partial C_{i-1}}{\partial r} \Big|_{r=r_i-0} + D_i(T) \frac{\partial C_i}{\partial r} \Big|_{r=r_i+0}, \quad (6)$$

где  $C_i$  – массовая концентрация никеля в  $i$ -ой фазе,  $D_i(T) = k_i \exp(-E_i/(RT))$  – коэффициент взаимной диффузии в  $i$ -м слое,  $C_{i-1}^+(T)$ ,  $C_i^-(T)$  — зависимости равновесных концентраций от температуры, задаваемые из диаграммы состояния (границы областей концентраций фаз). Количество слоев (промежуточных фаз) зависит от типа рассматриваемой системы, поэтому индекс  $i$  в уравнениях может принимать значения  $i = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ , что соответствует фазам: 1 –  $\text{Ni}$ , 2 –  $\epsilon$  ( $\text{Ni}_3\text{Al}$ ), 3 –  $\delta$  ( $\text{NiAl}$ ), 4 –  $\gamma$  ( $\text{Ni}_2\text{Al}_3$ ), 5 –  $\beta$  ( $\text{NiAl}_3$ ), 6 –  $\text{Al}$ . Радиусы фазовых прослоек обозначены как  $r_i(t)$ . Следовательно, радиус  $r_6 = R_s$ .

Подставляя в (6) стационарные решения уравнения (5):  $C_i = A_i/r + B_i$ , получаем систему обыкновенных дифференциальных уравнений [2].

$$d_i \frac{dr_i}{dt} = -\theta_{i-1} \frac{r_{i-1}}{r_i \cdot (r_i - r_{i-1})} + \theta_i \frac{r_{i+1}}{r_i \cdot (r_{i+1} - r_{i-1})} \quad (7)$$

где

$$d_i = C_{i-1}^+(T) - C_i^-(T), \quad \theta_i = D_i(T) \cdot (C_i^+(T) - C_i^-(T)), \quad i = 2, 3, 4, 5.$$

Решая уравнения (7), например, методом Рунге-Кутты, определяются радиусы гомогенных фазовых прослоек  $r_i(t)$  (рис. 2(б)), изменяющиеся во времени.

При решении уравнения теплопроводности в фазовых прослойках используется кинетическая функция (4) гомогенной кинетики. Тогда в температурно-активационной функции Аррениуса  $k(T) = k_0 \exp(-E/(R \cdot T))$  в каждой фазовой прослойке (с известными

ограничениями по радиусам  $r_{i-1}$  и  $r_i$ ) можно учитывать соответствующие ей константу  $k_0$ , энергию активации  $E_i$  и т.п. Кроме того, в каждой фазовой прослойке учитывается соответствующее ей значение температуры, рассчитываемое при решении уравнения теплопроводности. Для каждого  $(j+1)$ -го момента времени  $t_{j+1}$  (для каждого  $(j+1)$ -го временного слоя) вслед за рассчитанными значениями радиусов  $r_i(t_{j+1})$  рассчитывается температурный профиль  $T(x, y, z, t_{j+1})$  во всем объеме СВС-образца. Ниже изложена методика сеточного решения уравнений теплопроводности (1) и кинетики (3), в которой получены сеточные схемы, корректно использующие свойство разрывности 1-го рода теплофизических и иных параметров на границах раздела сред (различных частиц).

В работе [4] выведена неявная схема двуциклического расщепления на основе симметричной схемы Кранка-Николсона, которая использует разделение (“расщепление”) временного слоя на 7 промежуточных временных слоев и на основе которой ниже получены 8 уравнений. Первые три уравнения (8) – (10), соответствующие направлениям  $x$ ,  $y$ ,  $z$  и одновременно индексам  $i$ ,  $k$ ,  $l$ , а также и последние три уравнения (14) – (16), соответствующие в обратном порядке направлениям  $z$ ,  $y$ ,  $x$  и одновременно индексам  $l$ ,  $k$ ,  $i$ , решаются последовательно каждый раз по одному из трех указанных индексов одномерной «прогонкой», вложенной в 2-мерные циклы по оставшимся индексам. Эти 2-мерные вложенные циклы достаточно просто распараллеливаются.

$$A_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i-1,k,l}^{j+\frac{1}{8}} - C_{i+1,k,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k,l}^{j+\frac{1}{8}} + B_{i+1,k,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i+1,k,l}^{j+\frac{1}{8}} = -F_{i+1,k,l}^j, \quad (8)$$

где  $A_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} = \frac{\tau}{4h^2} \alpha_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}}$ ;  $C_{i+1,k,l}^{j+\frac{1}{2}} = \left[ 1 + \left( \alpha_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} + \alpha_{i+1,k,l}^{j+\frac{1}{2}} \right) \frac{\tau}{4h^2} \right]$ ;  $B_{i+1,k,l}^{j+\frac{1}{2}} = \frac{\tau}{4h^2} \alpha_{i+1,k,l}^{j+\frac{1}{2}}$ ;

$$F_{i+1,k,l}^j = A_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i-1,k,l}^j + D_{i+1,k,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k,l}^j + B_{i+1,k,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i+1,k,l}^j; \quad D_{i+1,k,l}^{j+\frac{1}{2}} = \left[ 1 - \left( \alpha_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} + \alpha_{i+1,k,l}^{j+\frac{1}{2}} \right) \frac{\tau}{4h^2} \right].$$

$$A_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k,l-1}^{j+\frac{2}{8}} - C_{i,k+1,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k,l}^{j+\frac{2}{8}} + B_{i,k+1,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k+1,l}^{j+\frac{2}{8}} = -F_{i,k+1,l}^{j+\frac{1}{8}}, \quad (9)$$

где  $A_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} = \frac{\tau}{4h^2} \alpha_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}}$ ;  $C_{i,k+1,l}^{j+\frac{1}{2}} = \left[ 1 + \left( \alpha_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} + \alpha_{i,k+1,l}^{j+\frac{1}{2}} \right) \frac{\tau}{4h^2} \right]$ ;  $B_{i,k+1,l}^{j+\frac{1}{2}} = \frac{\tau}{4h^2} \alpha_{i,k+1,l}^{j+\frac{1}{2}}$ ;

$$F_{i,k+1,l}^{j+\frac{1}{8}} = A_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k,l-1}^{j+\frac{1}{8}} + D_{i,k+1,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k,l}^{j+\frac{1}{8}} + B_{i,k+1,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k+1,l}^{j+\frac{1}{8}}; \quad D_{i,k+1,l}^{j+\frac{1}{2}} = \left[ 1 - \left( \alpha_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} + \alpha_{i,k+1,l}^{j+\frac{1}{2}} \right) \frac{\tau}{4h^2} \right].$$

$$A_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k,l-1}^{j+\frac{3}{8}} - C_{i,k,l+1}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k,l}^{j+\frac{3}{8}} + B_{i,k,l+1}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k,l+1}^{j+\frac{3}{8}} = -F_{i,k,l+1}^{j+\frac{2}{8}}, \quad (10)$$

где  $A_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} = \frac{\tau}{4h^2} \alpha_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}}$ ;  $C_{i,k,l+1}^{j+\frac{1}{2}} = \left[ 1 + \left( \alpha_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} + \alpha_{i,k,l+1}^{j+\frac{1}{2}} \right) \frac{\tau}{4h^2} \right]$ ;  $B_{i,k,l+1}^{j+\frac{1}{2}} = \frac{\tau}{4h^2} \alpha_{i,k,l+1}^{j+\frac{1}{2}}$ ;

$$F_{i,k,l+1}^{j+\frac{2}{8}} = A_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k,l-1}^{j+\frac{2}{8}} + D_{i,k,l+1}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k,l}^{j+\frac{2}{8}} + B_{i,k,l+1}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k,l+1}^{j+\frac{2}{8}}; \quad D_{i,k,l+1}^{j+\frac{1}{2}} = \left[ 1 - \left( \alpha_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} + \alpha_{i,k,l+1}^{j+\frac{1}{2}} \right) \frac{\tau}{4h^2} \right].$$

Уравнение четвертого промежуточного временного слоя схемы требует получения оценок  $\hat{\eta}_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}}$  и  $\hat{T}_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}}$ , которые можно получить самосогласованным циклическим процессом следующим образом.

Инициализируем  $\hat{T}_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} = T_{i,k,l}^{j+\frac{3}{8}}$ . Затем выполняется цикл самосогласования с определенным «порогом» точности сходимости оценок величин  $\hat{\eta}_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}}$  и  $\hat{T}_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}}$  к своим предельным значениям:

$$\begin{cases} \hat{\eta}_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} = \eta_{i,k,l}^j + \frac{\tau}{2} G \left( \hat{T}_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}}, \eta_{i,k,l}^j \right) \\ \hat{T}_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} = T_{i,k,l}^{j+\frac{3}{8}} + \frac{\tau}{2} f \left( \hat{T}_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}}, \hat{\eta}_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} \right). \end{cases} \quad (11)$$

В результате определенного числа итераций с необходимой точностью будут достигнуты оценки величин  $\hat{\eta}_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}}$  и  $\hat{T}_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}}$ .

Уравнение пятого промежуточного временного слоя схемы имеет вид:

$$T_{i,k,l}^{j+\frac{5}{8}} = T_{i,k,l}^{j+\frac{3}{8}} + \tau f \left( \hat{T}_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}}, \hat{\eta}_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} \right). \quad (12)$$

Вычислительная схема для расчета «глубины превращения» имеет вид:

$$\eta_{i,k,l}^{j+1} = \eta_{i,k,l}^j + \tau G \left( \hat{T}_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}}, \hat{\eta}_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} \right). \quad (13)$$

Далее приведены схемы для 6-го, 7-го промежуточных слоев по времени и для «финального»  $(j+1)$ -го временного слоя.

$$A_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k,l-1}^{j+\frac{6}{8}} - C_{i,k,l+1}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k,l}^{j+\frac{6}{8}} + B_{i,k,l+1}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k,l+1}^{j+\frac{6}{8}} = -F_{i,k,l+1}^{j+\frac{5}{8}}, \quad (14)$$

где  $A_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} = \frac{\tau}{4h^2} \alpha_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}}$ ;  $C_{i,k,l+1}^{j+\frac{1}{2}} = \left[ 1 + \left( \alpha_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} + \alpha_{i,k,l+1}^{j+\frac{1}{2}} \right) \frac{\tau}{4h^2} \right]$ ;  $B_{i,k,l+1}^{j+\frac{1}{2}} = \frac{\tau}{4h^2} \alpha_{i,k,l+1}^{j+\frac{1}{2}}$ ;

$$F_{i,k,l+1}^{j+\frac{5}{8}} = A_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k,l-1}^{j+\frac{5}{8}} + D_{i,k,l+1}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k,l}^{j+\frac{5}{8}} + B_{i,k,l+1}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k,l+1}^{j+\frac{5}{8}}; \quad D_{i,k,l+1}^{j+\frac{1}{2}} = \left[ 1 - \left( \alpha_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} + \alpha_{i,k,l+1}^{j+\frac{1}{2}} \right) \frac{\tau}{4h^2} \right].$$

$$A_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k-1,l}^{j+\frac{7}{8}} - C_{i,k+1,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k,l}^{j+\frac{7}{8}} + B_{i,k+1,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k+1,l}^{j+\frac{7}{8}} = -F_{i,k+1,l}^{j+\frac{6}{8}}, \quad (15)$$

где  $A_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} = \frac{\tau}{4h^2} \alpha_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}}$ ;  $C_{i,k+1,l}^{j+\frac{1}{2}} = \left[ 1 + \left( \alpha_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} + \alpha_{i,k+1,l}^{j+\frac{1}{2}} \right) \frac{\tau}{4h^2} \right]$ ;  $B_{i,k+1,l}^{j+\frac{1}{2}} = \frac{\tau}{4h^2} \alpha_{i,k+1,l}^{j+\frac{1}{2}}$ ;

$$F_{i,k+1,l}^{j+\frac{6}{8}} = A_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k-1,l}^{j+\frac{6}{8}} + D_{i,k+1,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k,l}^{j+\frac{6}{8}} + B_{i,k+1,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k+1,l}^{j+\frac{6}{8}}; \quad D_{i,k+1,l}^{j+\frac{1}{2}} = \left[ 1 - \left( \alpha_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} + \alpha_{i,k+1,l}^{j+\frac{1}{2}} \right) \frac{\tau}{4h^2} \right].$$

$$A_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i-1,k,l}^{j+1} - C_{i+1,k,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k,l}^{j+1} + B_{i+1,k,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i+1,k,l}^{j+1} = -F_{i+1,k,l}^{j+\frac{7}{8}}, \quad (16)$$

где  $A_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} = \frac{\tau}{4h^2} \alpha_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}}$ ;  $C_{i+1,k,l}^{j+\frac{1}{2}} = \left[ 1 + \left( \alpha_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} + \alpha_{i+1,k,l}^{j+\frac{1}{2}} \right) \frac{\tau}{4h^2} \right]$ ;  $B_{i+1,k,l}^{j+\frac{1}{2}} = \frac{\tau}{4h^2} \alpha_{i+1,k,l}^{j+\frac{1}{2}}$ ;

$$F_{i+1,k,l}^{j+\frac{7}{8}} = A_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i-1,k,l}^{j+\frac{7}{8}} + D_{i+1,k,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i,k,l}^{j+\frac{7}{8}} + B_{i+1,k,l}^{j+\frac{1}{2}} T_{i+1,k,l}^{j+\frac{7}{8}}; \quad D_{i+1,k,l}^{j+\frac{1}{2}} = \left[ 1 - \left( \alpha_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} + \alpha_{i+1,k,l}^{j+\frac{1}{2}} \right) \frac{\tau}{4h^2} \right].$$

Условие устойчивости сеточных схем (8) – (16) определяется положительностью коэффициентов  $D_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}}$ , т.е.

$$\alpha_{i,k,l}^{j+\frac{1}{2}} \frac{\tau}{2h^2} < 1. \quad (17)$$

Ниже приведена структура основного программного модуля с вызовом основных функций в сокращенном виде.

```
#include "Constant.h"
#include "PArgser.h"

int main(int argc, char *argv[]) {
    setlocale(LC_ALL, "");
    //Инициализация параллельных MPI-процессов
    MPI_Init(&argc, &argv);
    MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &NumProcs);
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &MyId);
    InitializeArguments(argc, argv);
    int sp, wp; //Периоды сохранения промежуточных результатов и вывода в файл на диск,
    соответственно
    char buff[512], *SavePath;
    Point *TempPoints;
    double *Y, *U;
    if (GetArgument("l", Path)) {
        if (!MyId)
            LOAD(Path);
    } else {
        if (!MyId) {
            GetArgument("t", TimeIters, 50000); //кол-во итераций по времени (по j)
            GetVariableValueDefault(k0, 1000000000.0); // k0 – предэкспонент
            GetVariableValueDefault(tau, 0.0000000001); // tau – шаг по времени
            GetArgument("ti", Tignition, 1500.0, "tignition"); // Tignition – температура
            //зажигания СВС
            GetArgument("ts", TStart, 300.0, "tstart"); // TStart – начальная температура
            //СВС-образца
            GetArgument("o", Path, "Area.txt"); // Area.txt – имя входного файла
            READ(Path);
        }
    }
    // TempPoints - заполнение начальной структуры типа Point
    MPI_SetVariables(TempPoints, Y, U);

    for (j=0; j<=TimeIters;++j) // основной внешний цикл по временным слоям
    {
        // блок объявления переменных для диффузионной задачи и их инициализация
```

//Далее в цикле для каждой мезоячейки с номером m (их количество= Ncell) решается задача //диффузионной кинетики (выше записанные уравнения (7)) стандартной программой по //методу Рунге-Кутты и в результате для каждой мезоячейки пересчитываются значения //радиусов интерметаллических прослоек

```
for (m = 0; m < Ncell; ++m)
```

```
{
```

```
    // Обновление рабочего массива x из массива xcell.
```

```
    PhaseSet();//вычисление диффузионных коэффициентов в  
                интерметаллических фазах мезоячейки
```

```
    Runge();// пересчет радиусов интерметаллических фаз
```

```
    Merge();//обработка и анализ изменения состава фаз в мезоячейке
```

```
    // Обновление рабочего массива xcell из массива x.
```

```
    for (ph = Air; ph<PhaseCount; ++ph) { // Запись радиусов после  
                                        диффузионной задачи.
```

```
        MesoCells[m].R[ph] = Vars1[ph]; // Radiusy[j + 1][m][ph]
```

```
        xcell[ph][m][2] = x[ph][2];
```

```
        xcell[ph][m][3] = x[ph][3];
```

```
        xcell[ph][m][4] = x[ph][4];
```

```
    }
```

// Блок корректировки точек 3-х мерной сеточной структуры Points в пределах текущей // мезоячейки после решения диффузионной задачи

// Далее идут параллельные вычисления по схемам 2-циклического расщепления

// Кранка-Николсона согласно формулам (8) – (16)

```
if (!MyId) printf("Первое уравнение\n");
```

```
Crank_Nicolson_Equation1(TempPoints, U, Y);// уравнение (8)
```

```
if (!MyId) printf("Второе уравнение\n");
```

```
Crank_Nicolson_Equation2(TempPoints, U, Y); // уравнение (9)
```

```
if (!MyId) printf("Третье уравнение\n");
```

```
Crank_Nicolson_Equation3(TempPoints, U, Y); // уравнение (10)
```

```
if (!MyId) printf("Четвёртое уравнение\n");
```

```
for (l=MyId?0:1; l<PartSize; ++l) {
```

```
    for (k=0; k<=YCoord; ++k) {
```

```
        for (i=0; i<=XCoord; ++i) {
```

```
            TempT=Points[l][k][i].t;
```

```
            TempEta=Points[l][k][i].eta;
```

```
            do { //Цикл самосогласования, соответствующий формулам (11)
```

```
                DiffEta=TempEta;
```

```
                TempEta=Points[l][k][i].eta+tau*0.5*k0*
```

```
                    exp(-E_MIX/(TempT*R))*(1.0-Points[l][k][i].eta);
```

```
                DiffEta-=TempEta;
```

```
                DiffT=TempT;
```

```
                TempT=Points[l][k][i].t+tau*0.5*Specific_Heat_Capacity(TempT,
```

```
Points[l][k][i].Type)*
```

```
                    k0*exp(-E_MIX/(TempT*R))*(1.0-TempEta);//Аналогично
```

```
                DiffT-=TempT;
```

```

    } while (DiffEta>0.01 || DiffT>0.01);
    //if (i==0) exit(1);

    DiffEta=Points[l][k][i].eta;
    Points[l][k][i].eta+=tau*k0*exp(-E_MIX/(TempT*R))*
        (1.0-TempEta);//Аналогично
    DiffT=Points[l][k][i].t;
    Points[l][k][i].t+=tau*k0*Specific_Heat_Capacity(TempT, Points[l][k][i].Type)*
        exp(-E_MIX/(TempT*R))*(1.0-TempEta);//Аналогично
    }
    }
    }
}

if (!MyId) printf("Третье уравнение после 4-го\n");
Crank_Nicolson_Equation3(TempPoints, U, Y); // уравнение (14)
if (!MyId) printf("Второе уравнение после 4-го\n");
Crank_Nicolson_Equation2(TempPoints, U, Y); // уравнение (15)
if (!MyId) printf("Первое уравнение после 4-го\n");
Crank_Nicolson_Equation1(TempPoints, U, Y); // уравнение (16)
// блок операторов, выполняющий сохранение промежуточных (и конечных) результатов на
// диске
    if (j%wp==0) {
        i=XCoord/2;
        k=YCoord/2;
        if (MyId) {
            for (l=0; l<PartSize; ++l)
                TempPoints[l]=Points[l][k][i];
            MPI_Send(TempPoints, PartSize*sizeof(Point), MPI_BYTE, 0, 0,
MPI_COMM_WORLD);
        } else {
            if (NumProcs>1) {
                const int to=NumProcs-1;
                for (m=1; m<to; ++m)
                    MPI_Recv(&TempPoints[PartSize*m],
PartSize*sizeof(Point), MPI_BYTE, m, 0, MPI_COMM_WORLD, &Status);
                    MPI_Recv(&TempPoints[PartSize*m],
(PartSize+(ZCoord+1)%NumProcs)*sizeof(Point), MPI_BYTE, m, 0, MPI_COMM_WORLD,
&Status);

                for (l=PartSize; l<=ZCoord; ++l)
                    Points[l][k][i]=TempPoints[l];
            }
            for (l=0; l<=ZCoord; ++l) {
                sprintf(buff, "%sPointsZ[%i].txt", Path, j);
                WritePoint(buff, l, k, i);
            }
        }
    }
}
if (SavePath && j%sp==sp-1) {
    if (MyId) {
        for (k=0; k<=YCoord; ++k)
            for (i=0; i<=XCoord; ++i) {
                for (l=0; l<PartSize; ++l)

```

```

        TempPoints[l]=Points[l][k][i];
        MPI_Send(TempPoints,          PartSize*sizeof(Point),
MPI_BYTE, 0, 0, MPI_COMM_WORLD);
    }
    } else {
        if (NumProcs>1) {
            const int to=NumProcs-1;
            for (k=0; k<=YCoord; ++k)
                for (i=0; i<=XCoord; ++i) {
                    for (m=1; m<to; ++m)
                        MPI_Recv(&TempPoints[PartSize*m],
PartSize*sizeof(Point), MPI_BYTE, m, 0, MPI_COMM_WORLD, &Status);
                        MPI_Recv(&TempPoints[PartSize*m],
(PartSize+(ZCoord+1)%NumProcs)*sizeof(Point), MPI_BYTE, m, 0, MPI_COMM_WORLD,
&Status);
                    for (l=PartSize; l<=ZCoord; ++l)
                        Points[l][k][i]=TempPoints[l];
                }
            }
        } SAVE(SavePath);
    }
}
}
/*
    l=ZCoord/2;
    for (i=0; i<=XCoord; ++i) {
        sprintf(buff, "%sPointsX[%i].txt", Path, j);
        WritePoint(buff, l, k, i);
    }
    i=XCoord/2;
    for (k=0; k<=YCoord; ++k) {
        sprintf(buff, "%sPointsY[%i].txt", Path, j);
        WritePoint(buff, l, k, i);
    }
*/

    if (!MyId) printf("%i итерация была завершена за %ld с\n", j+1, (clock()-
First)/CLOCKS_PER_SEC);
}
delete [] TempPoints;
delete [] Y;
delete [] U;
for (i=0; i<PartSize; ++i) {
    for (j=0; j<=YCoord; ++j) {
        delete [] Points[i][j];
    }
    delete [] Points[i];
}
delete [] Points;

for (unsigned char i = 0; i < PhaseCount; ++i) {
    for (j = 0; j < Ncell; ++j) {
        delete [] xcell[i][j];
    }
    delete [] xcell[i];
}

```



```

}
delete [] xcell;
delete [] MesoCells;
if (!MyId) delete [] Path;
MPI_Finalize();
return 0;

```

Ниже приведены примеры тестовых расчетов - наборы температурных профилей в различные моменты времени (указаны на рисунках) для двух режимов инициирования (зажигания) СВС. для плотно упакованной смеси частиц (размер пор менее 1 мкм): размер частиц Ni и Al одинаковый и равен 1 мкм. Заданный вариант СВС-смеси частиц можно считать практически моделью «квази-сплошной» среды с большим значением «удельной» поверхности контакта Ni и Al. Режимы инициирования (зажигания) СВС: начальная температура всего СВС-смеси равна 300 К; температура зажигания СВС-смеси равна 1500 К (рис. 3); начальная температура всего СВС-смеси равна 600 К; температура зажигания СВС-смеси равна 1200 К. В качественном смысле температурные профили соответствуют теоретическим представлениям, а во фронте горения наблюдаются сверхадиабатические пики температуры.

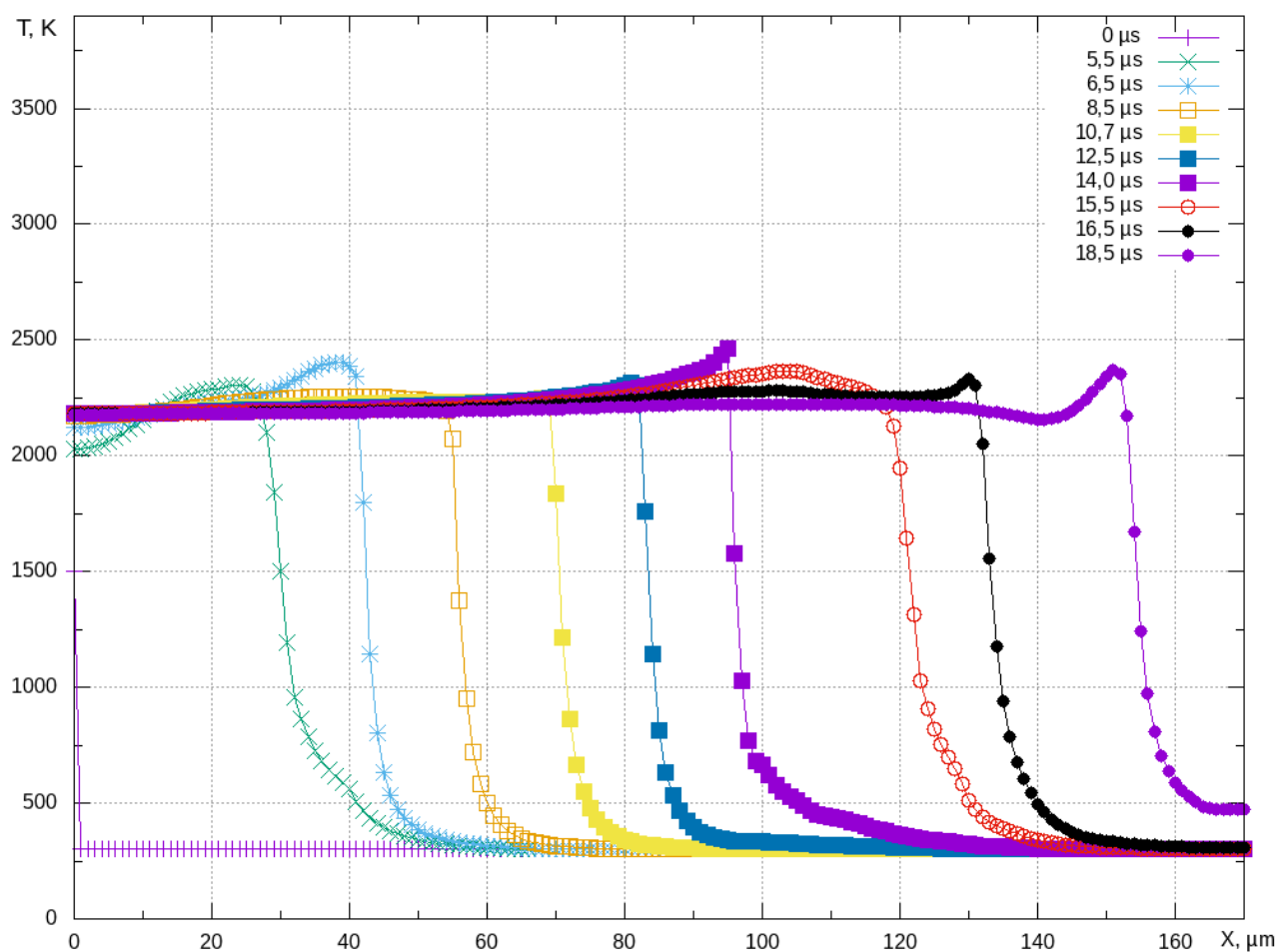


Рис. 3. Набор температурных профилей (распределение температуры вдоль центрального направления СВС-образца) в различные моменты времени: начальная температура всего СВС-образца равна 300 К; температура зажигания СВС-образца равна 1500 К

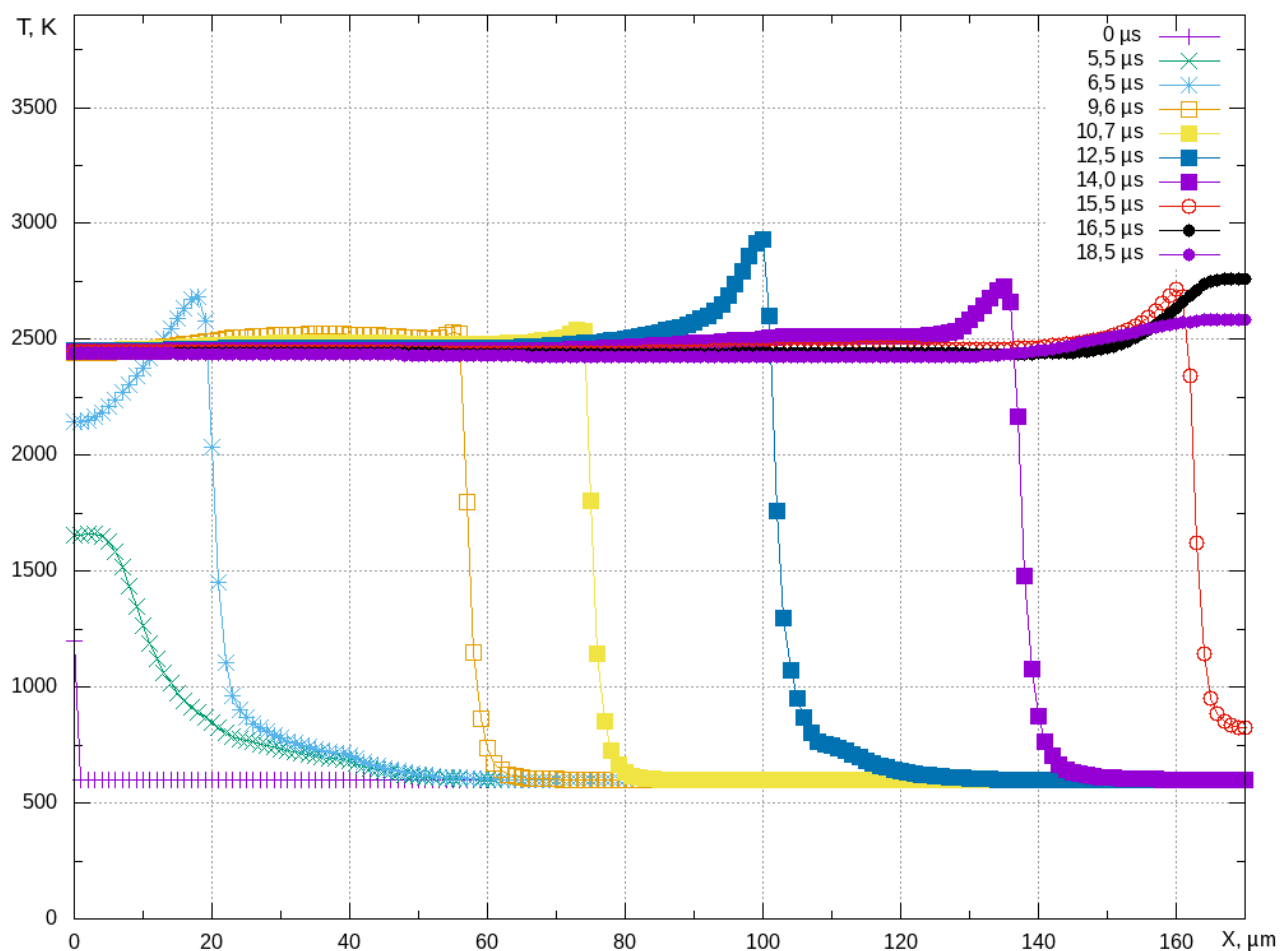


Рис. 4. Набор температурных профилей (распределение температуры вдоль центрального направления СВС-образца) в различные моменты времени: начальная температура всего СВС-образца равна 600 К; температура зажигания СВС-образца равна 1200 К

Как видно из рисунков 3 и 4, температура горения выше в случае более высокой начальной температуры прогрева СВС-образца, что соответствует экспериментальным данным. Кроме того, во фронте горения наблюдается сверхадиабатический перепад температуры, который имеет различную амплитуду в силу неоднородности и дискретности среды (порошковой смеси),

#### **Выводы:**

В настоящее время осуществлена основная сборка программного комплекса, определены условия устойчивости вычислительных сеточных схем (формула (17)) и проведены тестовые расчеты для «эталонной» модельной структуры плотнейшей упаковки (чередующиеся плоские слои с квадратной симметрией, рис. 1). При дальнейшем тестировании будут уточняться различные параметры математической модели процесса СВС для обеспечения более высокого адекватного соответствия между расчетными данными и экспериментальными данными из различных литературных источников.

Замечание: материал, изложенный выше в подразделе 2.1, опубликован в источнике под номером [1] списка публикаций авторов проекта, расположенного в конце отчета.

### **2.1.3. Список цитируемых публикаций к подразделу 2.1**

1. Упаковки плотнейшие [Интернет ресурс] // URL: <https://dic.academic.ru/dic.nsf/bse/143014/>
2. Ковалев О.Б., Беляев В.В. Математическое моделирование металлохимических реакций в двухкомпонентной реагирующей дисперсной смеси // Физика горения и взрыва. - 2013. – Т. 49. - № 5. С. 64-76.
3. Иордан В.И., Шмаков И.А., Кургумбаев М.Е Математическое моделирование СВ-синтеза интерметаллических фаз с учетом стационарного режима диффузионной кинетики в «мезоячейках» периодической структуры порошковой смеси // Математика и ее приложения: фундаментальные проблемы науки и техники: сборник трудов всероссийской конференции, Барнаул, 24-26 ноября, 2015. - Барнаул: Изд-во Алт. ун-та, 2015. – 446 с. – С. 264-272.
4. Панченко Ю.А., Иордан В.И. Алгоритмические основы и схемы распараллеливания расчетов макрокинетики СВС с учетом дискретно-континуальных представлений о 3D-структуре порошковой смеси // Высокопроизводительные вычислительные системы и технологии. – 2018. - № 2(9). С. 54-62.

### **2.2. Молекулярно-динамическое исследование микрокинетики СВ-синтеза интерметаллидов в нано- и микроразмерных слоистых бинарных системах Ti-Al**

Задача анализа микрогетерогенной структуры волны горения (с наличием в структуре «микроочагов» горения) получила название «проблемы дискретности» СВС, и в большинстве случаев она решается экспериментальным путем потому, что выводы различных теоретических моделей о поведении волны горения на макроскопическом и/или микроскопическом уровне противоречат друг другу. Для исследования кинетики горения дисперснофазных систем и эволюции дискретного распада тепловой структуры волны СВС в локально неустойчивых режимах микрогетерогенного горения необходимо детальное изучение и уточнение физико-химических и математических модельных представлений о различных структурных и фазовых превращениях в процессе СВ-синтеза, что играет важную роль для оптимизации технологических режимов СВ-синтеза материалов с заданными функциональными и эксплуатационными свойствами.

На первом промежуточном этапе проекта уже проводилось исследование микрокинетики СВ-синтеза алюминидов титана для некоторых стехиометрических соотношений компонентов системы Ti-Al в модельных «слоистых» нано- и микроразмерных структурах бинарной системы Ti-Al. Рассматриваемые слоистые нано- и микроразмерные бинарные системы можно

принять в качестве «аналога» тонкого диффузионного слоя интерметаллидов, образующегося на границе раздела в «мезоячейке» при изучении макрокинетики СВ-синтеза в бинарных порошковых смесях (см. подраздел 2.1). Исследование режима микрогетерогенного горения при протекании процесса СВС в модельных «слоистых» структурах бинарных систем было произведено с помощью компьютерного моделирования методом «молекулярной динамики (МД)» в пакете LAMMPS с использованием его возможности применения параллельных вычислений [1].

На втором промежуточном этапе были исследованы дополнительные температурные режимы иницирования (зажигания) СВ-синтеза алюминидов титана для Ti-15,82мас.%Al со стехиометрическим соотношением  $N_{Ti}/N_{Al} = 3$ .

### 2.2.1. Влияние условий воспламенения СВ-синтеза интерметаллидов на параметры горения состава Ti-15,82мас.%Al: компьютерное моделирование микрокинетики СВ-синтеза алюминида титана в наноразмерной слоистой системе и вычислительные эксперименты

В исходной слоистой структуре системы Ti-Al (рис. 8) каждый «большой» слой структуры состоит из нескольких атомных плоскостей (англ., layers), образующих кристаллическую структуру (решетку) элементарных кристаллических ячеек.

Ячейки Ti имеют тип hcp с параметрами: параметр  $a = 0,29508$  нм и  $c = 0,46855$  нм [2]. Ячейки Al имеют тип ГЦК с параметром  $a = 0,405$  нм [3, 4]. Состав Ti-15,82 мас.% Al соответствует Ti-25об.% Al. Отношение числа атомов  $N_{Ti} / N_{Al} = 3$ , т.е. доля атомов Ti равна  $n = 0.75$  (75%), а доля атомов Al равна 0.25 (25%).

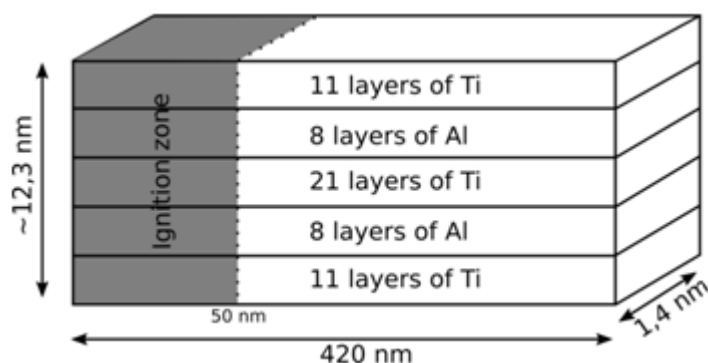


Рис. 1. Схематическое представление исходной слоистой структуры системы Ti-Al

Первоначальная температура образца (рис. 1) равна 700 К, и при этой температуре для всей структуры производилась «релаксация» в течении 0,4 нс с фиксированными термодинамическими параметрами: число атомов  $N = 414956$ , внешнее давление  $P = 1$  бар, а температура  $T = 700$  К (NPT-ансамбль). На этом этапе моделирования были установлены

периодические граничные условия для всех трех измерений. Периодические граничные условия сохраняются для всего образца и на следующем этапе.

На этом этапе в течение 0,1 нс структура нагревалась в начальной области образца ( $50 \times 1,4 \times 12,3$  нм) в условиях ансамбля NVT, где  $V$  - объем области нагрева. В первом случае структура нагревается от 700 до 1200 К, а во втором - от 700 до 1400 К. В течении этого же периода времени для системы атомов в оставшейся области образца с размерами ( $370 \times 1,4 \times 12,3$  нм) установлены условия ансамбля NVE (E-полная энергия атомов). Затем начинается моделирование распространения волны SH-синтеза с сохранением условий ансамбля NVE для всего образца. В то же время на границах расчетной области вдоль оси X накладываются «свободные» граничные условия, а по осям Y и Z остаются периодические граничные условия.

В вычислительных экспериментах (ВЭ) по моделированию СВС в системе Ti-Al использовался потенциал взаимодействия (рис. 2) в «модели погруженного атома (EAM)» [2].

Используя данный EAM-потенциал 2003-го года (потенциал EAM\_2003), корректные результаты были получены в [2] не только для синтеза интерметаллического соединения  $\gamma$ -TiAl, но и для интерметаллических соединений  $Ti_3Al$  и  $TiAl_3$ .

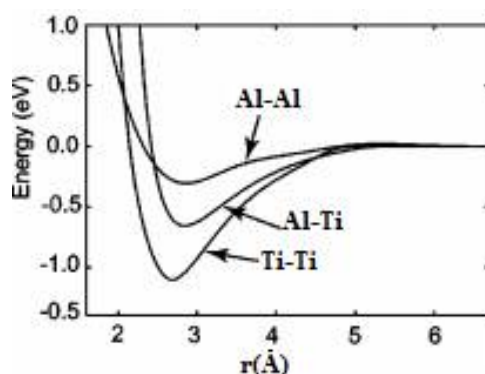
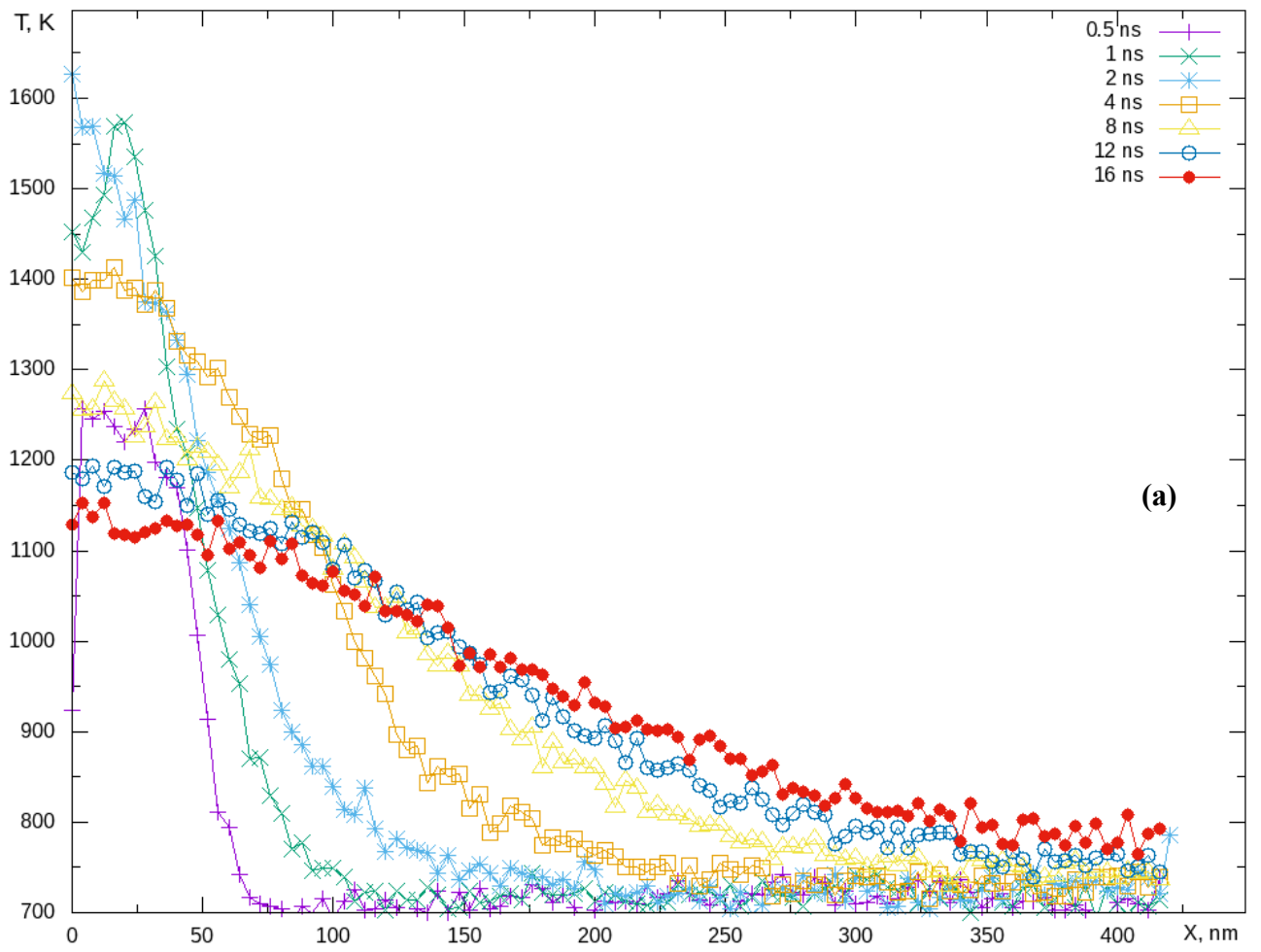
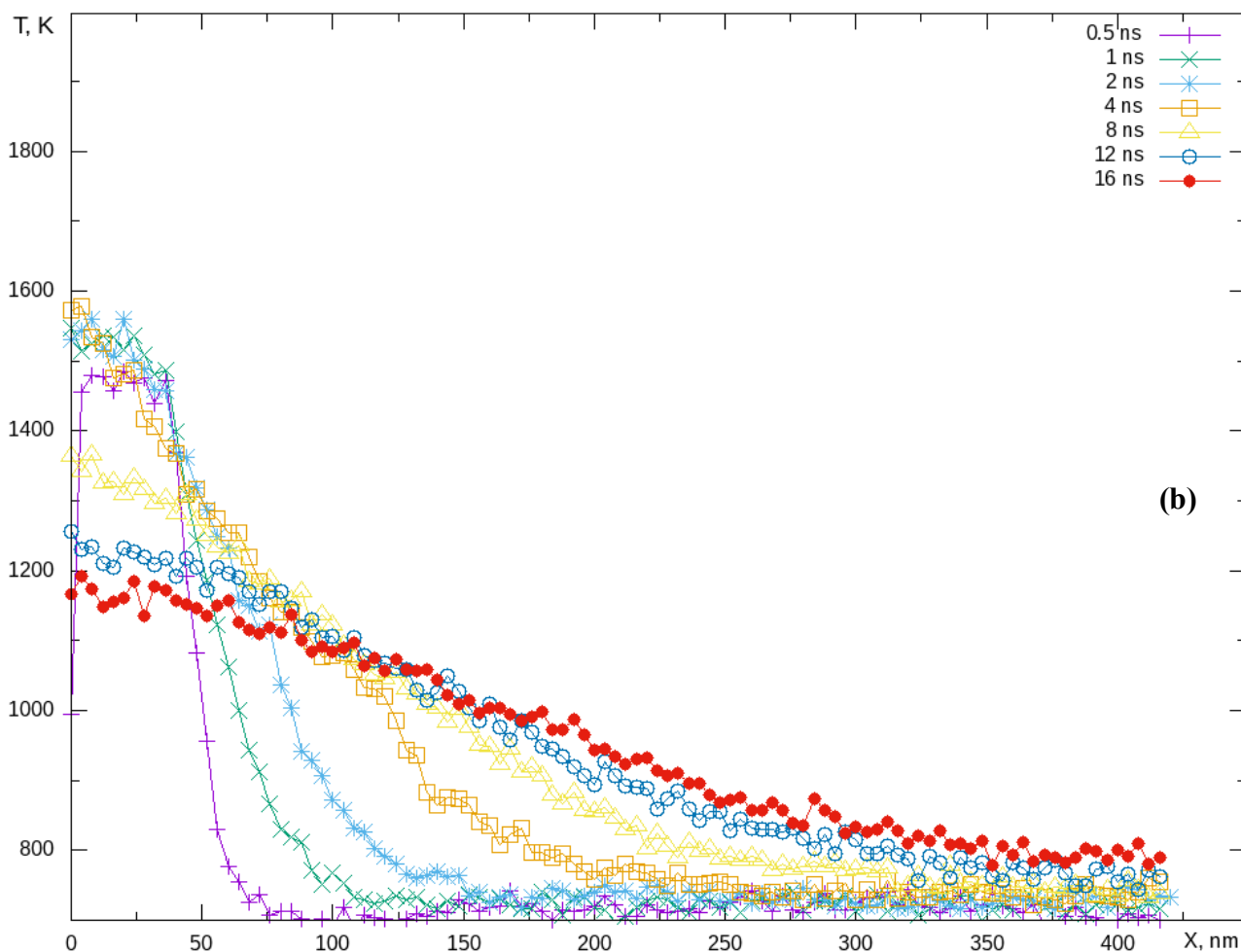


Рис. 2. Потенциал парного взаимодействия для системы Ti-Al в формате эффективной пары [2]

Наблюдаемое согласие с экспериментальными данными [2] демонстрирует хорошую переносимость этого потенциала EAM\_2003, корректно предсказывающего постоянные решетки, когезионную энергию и упругие постоянные.

Рассмотрим результаты ВЭ для двух режимов разогрева системы (рис. 3(a), (b)): в первом случае, СВС-структура разогревалась (поджигалась) в диапазоне температур от 700 до 1200 К, и во втором случае – от 700 до 1400 К.





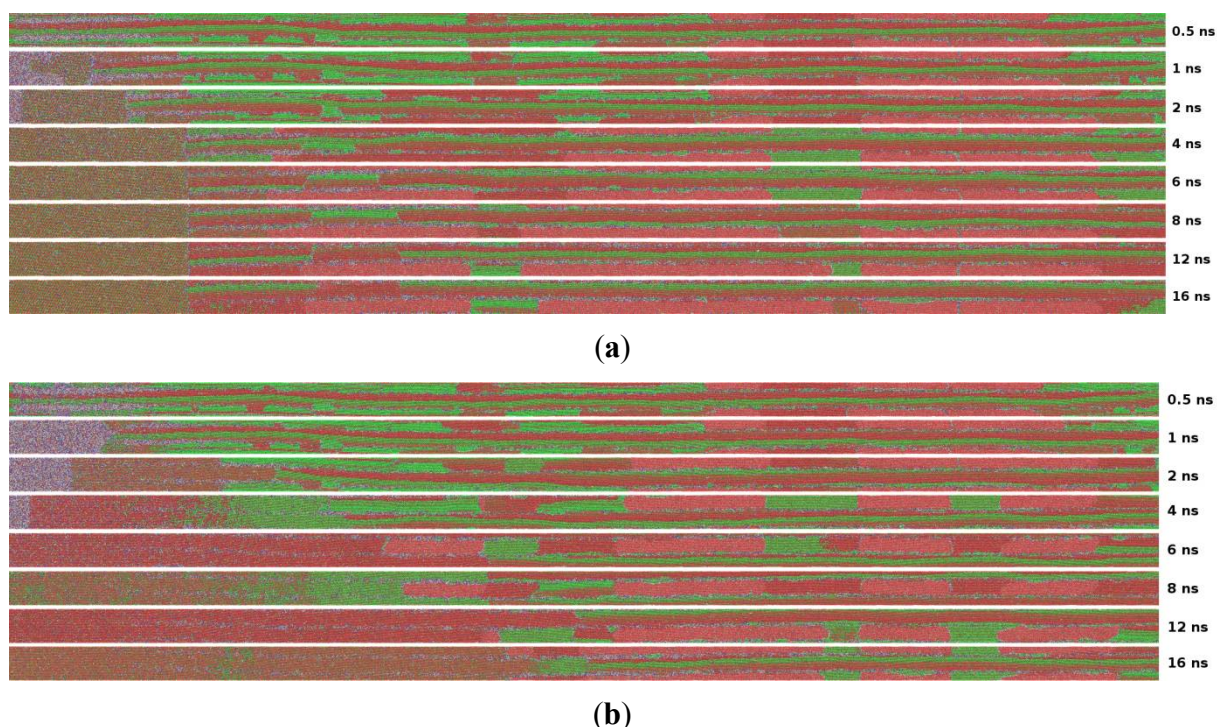
**Рис. 3.** Наборы температурных профилей как зависимостей температуры горения СВС от координаты  $X$  для последовательных моментов времени: (а) нагрев в начальной области образца ( $50 \times 1,4 \times 12,3$  нм) от 700 до 1200 К; (b) нагрев в начальной области образца от 700 до 1400 К

Посредством границ «плато» каждого профиля температуры (рис. 3(а), (b)) с использованием потенциала EAM\_2003 была оценена скорость фронта волны горения, которая уменьшается приблизительно от 6 м/с (диапазон времени 4-8 нс) до 2 м/с (диапазон времени 12-16 нс). Таким образом, кинетика горения для наноразмерных образцов слоистых структур развивается на два порядка быстрее, чем в макро-образцах. Однако значения скорости для СВ-синтеза в системе Ni-Al в аналогичных условиях значительно выше (около 30 м/с, [5-8]).

Для двух режимов нагрева исходной зоны образца наблюдается разница в температурах горения в интервале времени от 2 нс до 8 нс, но затем температурные профили быстро сближаются друг к другу (реакция СВС имеет тенденцию угасать). Температура горения в обоих случаях уменьшается до температуры плавления Al. При таких начальных условиях для инициирования СВ-синтеза интерметаллических соединений системы Ti-Al в реальных экспериментах с учетом наличия пористости смеси реакция синтеза скоротечно прекращается.

Поэтому в последующих ВЭ значения начальной температуры воспламенения СВС увеличены до 800 К.

Используя программный пакет OVITO [9], предназначенный для распознавания и визуализации структур элементарных ячеек (fcc, bcc, hcp, ico и др.) в моделируемых атомных и молекулярных системах, был проведен анализ количества и процентного содержания различных типов элементарных ячеек в структуре образца в последовательные времена СВ-синтеза (рис. 4(a) и рис. 4(b)). Нагрев начальной зоны образца от 700 до 1200 К соответствует рисунку 4(a), а нагрев начальной зоны образца от 700 до 1400 К соответствует рисунку 4(b).



**Рис. 4.** Наборы шлифов (снимков) структуры распределения различных типов элементарных ячеек вдоль СВС-образца в последовательные моменты времени: ГЦК (fcc) – зеленые точки; ОЦК (bcc) - синие точки в начале снимков (0.5 – 4 нс, слева); ГПУ (hcp) – красные точки на снимках: **(a)** – нагрев в начальной зоне СВС-образца от 700 до 1200 К; **(b)** - нагрев в начальной зоне СВС-образца от 700 до 1400 К

Для распознавания типов элементарных ячеек (рис. 4(a) и 4(b)) использовался метод угловой связи Ackland-Jones (модификатор пакета OVITO, [10]). Рисунки 4(a) и 4(b), учитывая длину образца 420 нм, позволяет получить те же оценки скорости движения фронта горения, которые приведены выше, и были получены с использованием температурных профилей (рис. 3(a), (b)).

В интервале времени до 2 нс температура горения (рис. 3(a) и 3(b)) возрастает примерно до 1550 К (выше точки плавления соединения  $Ti_3Al$ ), поэтому могут образовываться соединения  $TiAl_3$  и  $TiAl$ , за исключением соединения  $Ti_3Al$ .

Однородная зона, отраженная на рисунке 4(a) в начале второго снимка (1 нс, слева) и на рисунке 4(b) на снимках (1, 2 и 4 нс, слева) с синими точками, соответствует ОЦК-bcc-

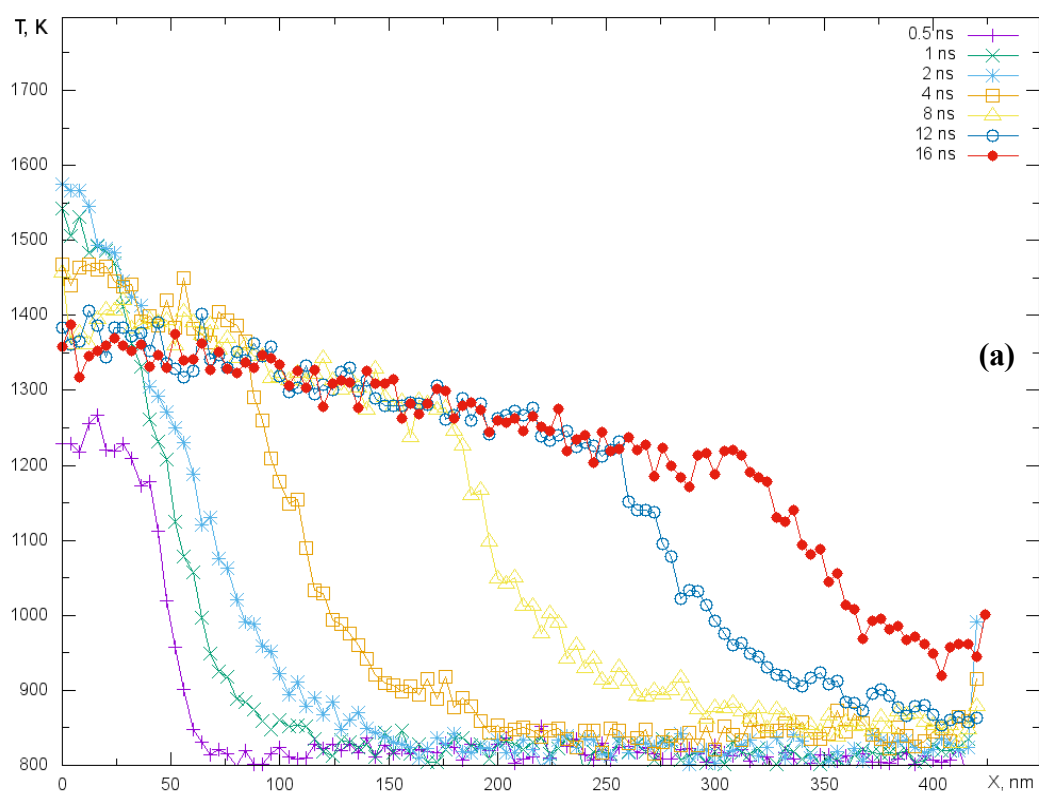


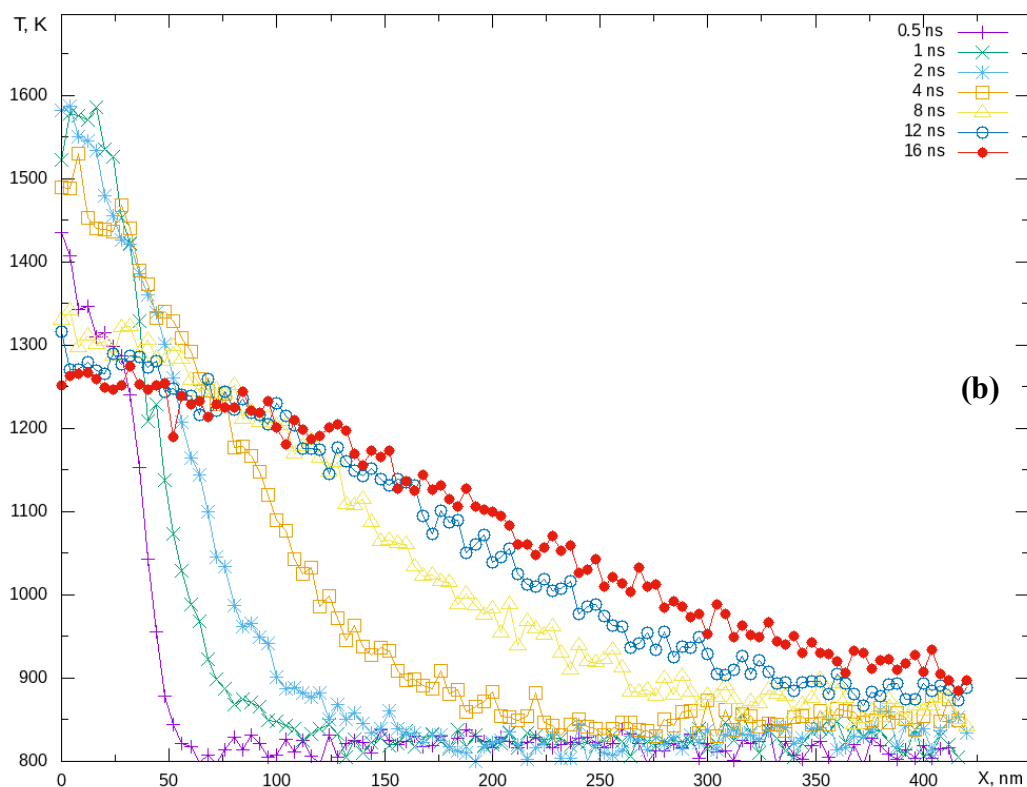
структурам. Из двух интерметаллических соединений, упомянутых выше, объемно-центрированная тетрагональная (ОЦТ-bct) структура соединения  $TiAl_3$  близка к ОЦК-bcc-структуре (на рисунках - синие точки), а грани-центрированная тетрагональная (ГЦТ-fct) структура соединения  $TiAl$  близка к ГЦК-fcc-структуре (на рисунках - зеленые точки). В последующие моменты времени синий цвет в начале следующих снимков на рисунках 4(a) и 4(b) заметно уменьшился (процентное содержание  $TiAl_3$  заметно уменьшилось), но появился красный оттенок, соответствующий hcp-структурам, т.е. соединению  $Ti_3Al$ .

Это объясняется реакцией фазы  $TiAl_3$  с атомами  $Ti$  (после периода времени сверхadiaбатического разогрева) и образованием соединения  $Ti_3Al$ , сопровождающимся снижением температуры горения ниже температуры плавления  $Ti_3Al$  (рис. 3(a) и 3(b)), тем самым обеспечивая фазообразование соединения  $Ti_3Al$ .

Для начальной температуры образца 700 К и двух режимов нагрева начальной зоны образца (от 700 до 1200 К и от 700 до 1400 К) реакция СВС имеет тенденцию угасать (рис. 3(a) и 3(b)). Температура горения в обоих случаях уменьшается до температуры плавления  $Al$ . Поэтому в следующих ВЭ значения начальной температуры воспламенения СВС были увеличены: начальная температура релаксации всего образца была принята равной 800 К и два режима нагрева начальной зоны образца: а) от 800 до 1200 К (рис. 5(a)); б) от 800 до 1300 К (рис. 5(b)).

Рисунки 5(a) и 5(b) показывают, что сверхadiaбатический разогрев для второго случая (разогрев от 800 до 1300 К) больше и максимум сверхadiaбатической температуры выше, чем для первого случая (разогрев от 800 до 1200 К).





**Рис. 5.** Наборы температурных профилей как зависимостей температуры горения СВС от координаты  $X$  для последовательных моментов времени: **(а)** нагрев в начальной области образца ( $50 \times 1,4 \times 12,3$  нм) от 800 до 1200 К; **(б)** нагрев в начальной области образца от 800 до 1300 К

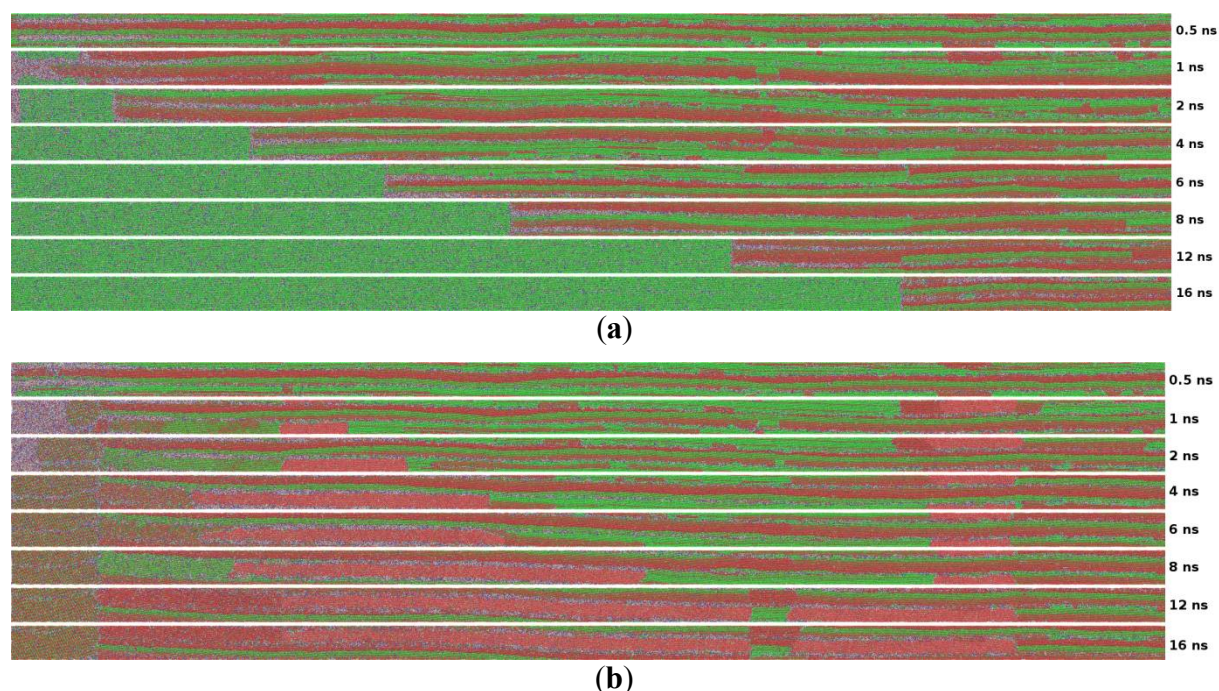
Однако температура горения для 1-го случая на 100 К выше температуры горения 2-го случая и для 1-го случая в практическом смысле наблюдается тенденция к установлению «температурного плато» (рис. 5(а)).

К тому же, скорость движения фронта волны горения для 1-го случая стабильна и приблизительно равна 18-19 м/с. Для 2-го случая зажигания СВС (разогрев от 800 до 1300 К) скорость движения фронта волны горения плавно уменьшается (от 18 до 12 м/с) и говорить об установлении «температурного плато» затруднительно (рис. 5(б)).

Анализ наборов шлифов (снимков) структур распределения различных типов элементарных ячеек (рис. 6(а) и 6(б)) показывает, что перед появлением интерметаллических фаз  $TiAl$  (зеленые точки) и  $Ti_3Al$  (красные точки) сначала появляется фаза  $TiAl_3$  (синие точки) на границах контактирующих слоев  $Ti$  и  $Al$  в зонах, достигаемых фронтом горения. Заметно явное преобладание фазы  $TiAl$  в продуктах реакции СВС в 1-ом случае воспламенения СВС (рис. 6 (а) - нагрев от 800 до 1200 К). И, наоборот, во 2-ом случае наблюдается явное преобладание фазы  $Ti_3Al$  в продуктах реакции СВС (рис. 6 (б) - нагрев от 800 до 1300 К).

Процентное содержание интерметаллических соединений, указанное ниже в таблицах 1 и 2, подтверждает преобладание соединения  $TiAl$  в продуктах СВС в 1-ом случае и  $Ti_3Al$  - во

втором случае. Согласно таблице 1, процентное содержание соединения TiAl (структура fct, близкая к ГЦК-fcc-структуре) увеличивается с 42,6 до 64,2% (процентное содержание соединения Ti<sub>3</sub>Al с ГПУ-hcp-структурой уменьшается с 44,5 до 17,3%). Согласно таблице 2, процентное содержание соединения Ti<sub>3</sub>Al (тип структуры ГПУ-hcp) увеличивается с 43,7 до 60,2% (и наоборот, процентное содержание соединения TiAl уменьшается с 43,0 до 24,5%).



**Рис. 6.** Наборы шлифов (снимков) структуры распределения различных типов элементарных ячеек вдоль СВС-образца в последовательные моменты времени: ГЦК (fcc) – зеленые точки; ОЦК (bcc) - синие точки в начале снимков (0.5 – 4 нс, слева); ГПУ (hcp) – красные точки на снимках: **(а)** – нагрев в начальной зоне СВС-образца от 800 до 1200 К; **(б)** - нагрев в начальной зоне СВС-образца от 800 до 1300 К

**Таблица 1.** Количество и процентное содержание различных типов элементарных ячеек в структуре СВС-образца в последовательные моменты времени (разогрев от 800 до 1200 К).

Time, ns	FCC	HCP	BCC	ICO	Other
0.5	176650 (42.6 %)	184845 (44.5 %)	19292 (4.6 %)	235 (0.1 %)	33934 (8.2 %)
1	175355 (42.3 %)	180711 (43.5 %)	22055 (5.3 %)	435 (0.1 %)	36400 (8.8 %)
2	179703 (43.3%)	176552 (42.5 %)	23204 (5.6 %)	322 (0.1 %)	35175 (8.5 %)
4	185815 (44.8 %)	168447 (40.6 %)	25786 (6.2 %)	267 (0.1 %)	34641 (8.3 %)
6	195586 (47.1 %)	155456 (37.5 %)	28010 (6.8 %)	269 (0.1 %)	35635 (8.6 %)

8	203848 (49.1 %)	142653 (34.4 %)	30538 (7.4 %)	275 (0.1 %)	37642 (9.1 %)
12	238638 (57.5 %)	102564 (24.7 %)	34572 (8.3 %)	258 (0.1 %)	38924 (9.4 %)
16	266494 (64.2 %)	71766 (17.3 %)	36275 (8.7 %)	191 (<0.1 %)	40230 (9.7 %)

**Таблица 2.** Количество и процентное содержание различных типов элементарных ячеек в структуре СВС-образца в последовательные моменты времени (разогрев от 800 to 1300 К).

Time, ns	FCC	HCP	BCC	ICO	Other
0.5	178442 (43.0 %)	181251 (43.7 %)	19847 (4.8 %)	321 (0.1 %)	35095 (8.5 %)
1	158646 (38.2 %)	195170 (47.0 %)	22033 (5.3 %)	430 (0.1 %)	38677 (9.3 %)
2	147772 (35.6%)	205551 (49.5 %)	23335 (5.6 %)	449 (0.1 %)	37849 (9.1 %)
4	128049 (30.9 %)	227892 (54.9 %)	23538 (5.7 %)	446 (0.1 %)	35031 (8.4 %)
6	121343 (29.2 %)	234656 (56.5 %)	24271 (5.8 %)	397 (0.1 %)	34289 (8.3 %)
8	109710 (26.4 %)	242865 (58.5 %)	25307 (6.1 %)	500 (0.1 %)	36574 (8.8 %)
12	99262 (23.9 %)	251047 (60.5 %)	26096 (6.3 %)	514 (0.1 %)	38037 (9.2 %)
16	101533 (24.5 %)	249672 (60.2 %)	26658 (6.4 %)	397 (0.1 %)	36696 (8.8 %)

**Вывод:** Выполнено компьютерное прогнозирующее моделирование микрокинетики СВС состава Ti-15,82 мас.%Al (стехиометрическое соотношение числа атомов  $N_{Ti}/N_{Al}=3$ ) методом «молекулярной динамики (МД)» в пакете LAMMPS с использованием параллельных вычислений. Параллельные вычисления значительно сократили общее время вычислений.

Определены условия зажигания СВС, обеспечивающие устойчивое движение волны горения в образце СВС. Также были определены условия воспламенения СВС с преобладанием образования фазы TiAl или  $Ti_3Al$  в продуктах СВС. Распознавание локальной неустойчивости волны горения позволяет своевременно контролировать процесс СВС по всему объему.

Замечание: материал, изложенный выше в подразделе 2.2.1, опубликован в источниках под номерами [2-5] списка публикаций авторов проекта, расположенного в конце отчета.

## 2.2.2. Воспроизводимость эффекта возникновения гетерофазной структуры при изменении температуры зажигания СВС в слоистой наноразмерной нестехиометрической системе Ti-Al

В данном подразделе рассматриваются некоторые модельные представления о микрогетерогенном режиме горения в процессе «самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС)» в модельных «слоистых» структурах системы Ti-Al (рис. 1). Составы компонентов в этой системе Ti-Al соответствуют определенным нестехиометрическим соотношениям. Исследование микрогетерогенного режима горения в процессе СВ-синтеза в модельных «слоистых» структурах системы Ti-Al проводится компьютерным моделированием с использованием метода «молекулярной динамики (МД)» в пакете LAMMPS, поддерживающем параллельные вычисления [1]. Преимущества метода МД могут быть использованы для моделирования нанообъектов с целью изучения их свойств и поиска методов синтеза.

В системах Ti-Al (рис. 1) каждый «большой» слой структуры состоит из нескольких атомных слоев (атомных плоскостей – англ., layers of atoms), образующих кристаллическую структуру (решетку) элементарных кристаллических ячеек.

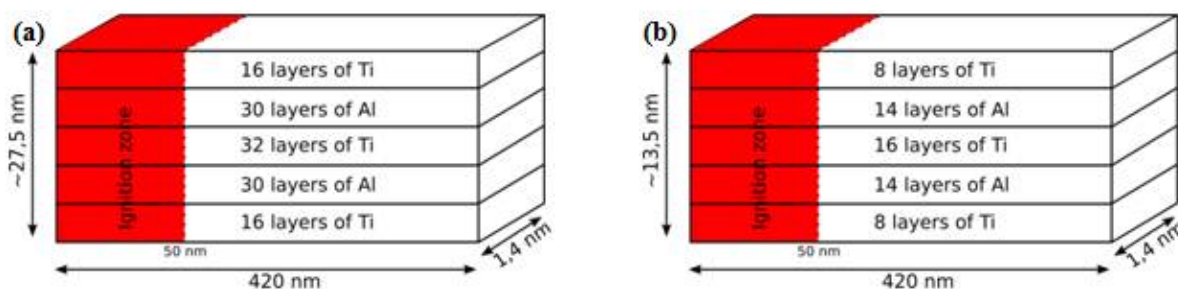


Рис. 1. Схематическое представление исходных слоистых структур двух систем Ti-Al: (а)  $N_{Ti}/N_{Al} = 1.15$ ,  $N = 936998$ ; (б)  $N_{Ti}/N_{Al} = 1.23$ ,  $N = 453974$

Ячейки Ti соответствуют ГПУ-типу с параметрами ячеек:  $a = 0.29508$  нм,  $c = 0.46855$  нм [2]. Ячейки Al соответствуют ГЦК-типу с параметром ячейки  $a = 0,405$  нм [3,4]. В первой системе с 936998 атомами (рис. 1 (а)) нестехиометрическое соотношение составляет  $N_{Ti}/N_{Al} = 1.15$ , т.е. доля атомов Ti равна  $n = 0.535$  (53.5%), а доля атомов Al равна 0.465 (46.5%). Во второй системе с 453974 атомами (рис. 1(б)) нестехиометрическое соотношение составляет  $N_{Ti}/N_{Al} = 1.23$ , т.е. доля атомов Ti равна  $n = 0.552$  (55.2%), а доля атомов Al равна 0.448 (44.8%). Начальная температура для обеих систем Ti-Al (рис. 1) принимается равной 800 К, и при этой температуре обе структуры «релаксировали» в течение 0.4 нс с фиксированными термодинамическими параметрами (NPT-ансамбль): а) количество атомов в каждой из обеих структур соответственно:  $N = 936998$  и  $N = 453974$ ; б) внешнее давление  $P = 1$  бар; в)

температура  $T = 800$  К. На этом этапе моделирования были установлены периодические граничные условия для всех трех измерений.

Периодические граничные условия также сохраняются для всего образца на следующем этапе: обе системы разогреваются («зажигаются») от 800 до 1400 К в течение 0.1 нс в начальных областях (50x1.4x27.5 нм и 50x1.4x13.5 нм соответственно) в условиях ансамбля NVT, где  $V$  - объем зоны разогрева. Условия ансамбля NVE (E-полная энергия атомов) устанавливаются в течение одного и того же периода времени для обеих систем в остальных областях с размерами 370x1.4x27.5 нм и 370x1.4x13.5 нм соответственно. Затем проводится моделирование распространения волны СВ-синтеза с сохранением условий ансамбля NVE для всего объема каждой системы Ti-Al. В то же время «свободные» граничные условия накладываются на границы расчетной области вдоль оси X, а периодические граничные условия сохраняются вдоль осей Y и Z. В качестве потенциала межатомного взаимодействия использована «модель погруженного атома (англ., "embedded atom model" - EAM)» 2003-го года [2].

С помощью границ «плато» каждого температурного профиля (рис. 2) с использованием потенциала EAM\_2003 была оценена скорость фронта волны горения для обеих систем Ti-Al при начальной температуре зажигания от 800 до 1400 К за время 0.1 нс. Для первой системы (количество атомов  $N = 936998$ ) скорость фронта волны горения приблизительно равна 18 м/с, а для второй ( $N = 453974$ ) в интервале времени 0.5–8 нс также приблизительно постоянна и равна 18 м/с и к концу 16 нс плавно увеличивается до 20 м/с. Однако значения скорости СВ-синтеза в системе Ni-Al в аналогичных условиях оказались значительно выше (около 30 м/с, [5-8]).

Таким образом, кинетика горения для микро- и наноразмерных систем со слоистыми структурами (нанопленки) развивается на два-три порядка быстрее, чем в макроразмерных системах, поскольку для наноразмерных структур удельная поверхность (более 20 м<sup>2</sup>/г) на два-три порядка больше удельной поверхности пористых макроструктур (от 0,1 до 2 м<sup>2</sup>/г). Температура горения для первой системы равна 1470-1490 К, а для второй – приблизительно 1490-1500 К (рис. 2).

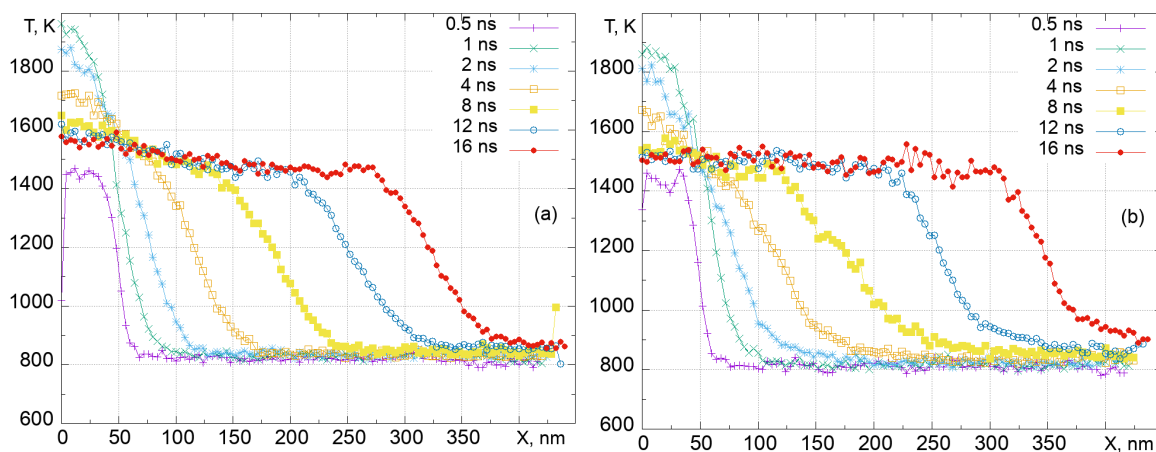


Рис. 2. Наборы температурных профилей как функциональных зависимостей температуры горения СВС от координаты  $X$  в последовательные моменты времени (зажигание разогревом от 800 до 1400 K): а) для первой системы; б) для второй системы

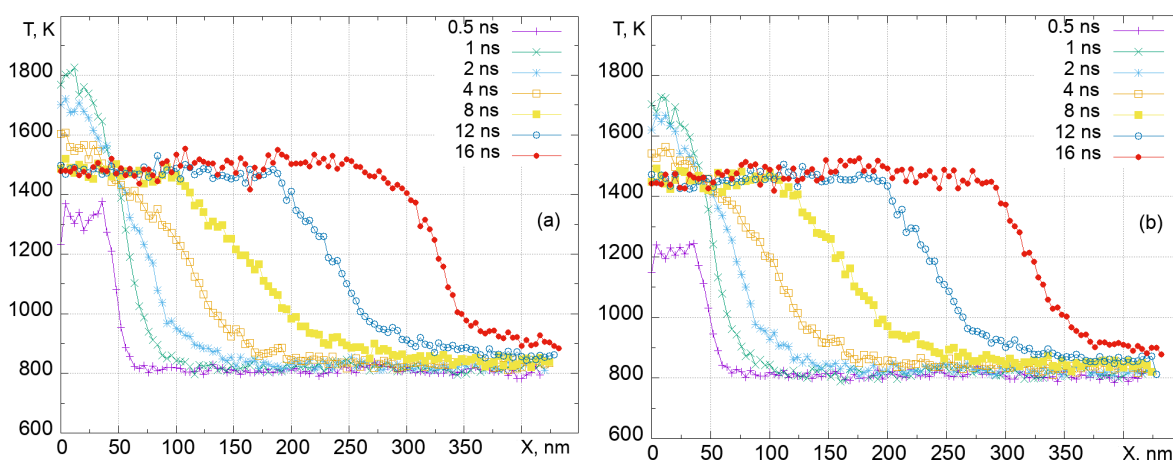


Рис. 3. Наборы температурных профилей как функциональных зависимостей температуры горения СВС от координаты  $X$  в последовательные моменты времени; зажигание начальной зоны второй системы разогревом: а) от 800 до 1300 K; б) от 800 до 1200 K

Используя программный пакет OVITO [9] и метод Ackland-Jones (модификатор пакета OVITO, [10]), предназначенный для распознавания и визуализации структур элементарных ячеек (ГЦК, ОЦК, ГПУ, ИКО и др.) в моделируемых атомных системах, был проведен анализ количества и процентного содержания различных типов элементарных ячеек в исследуемых системах в последовательные моменты времени СВ-синтеза (рис. 4 и 5). Рисунки 4 и 5, с учетом длины структуры 420 нм, были использованы для распознавания типов элементарных ячеек (рис. 5) и оценки скорости реакции СВС (приблизительно 18 м/с, полученной ранее с помощью температурных профилей, отображенных на рисунке 2).

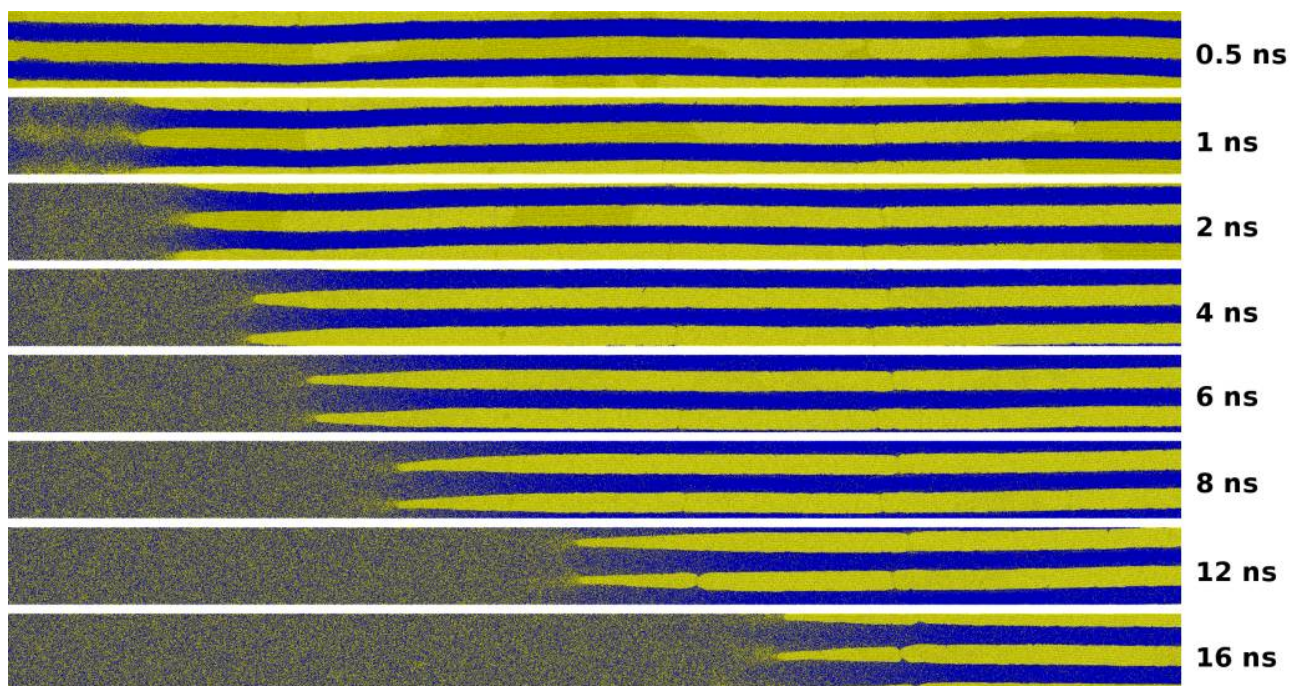


Рис. 4. Набор шлифов (снимков) структуры распределения атомов Ti (желтые точки) и атомов Al (синие точки) вдоль первой системы в последовательные моменты времени: однородная зона (слева) в начале первой системы ( $N_{Ti}/N_{Al} = 1.15$ ;  $N = 936998$ ) соответствует фазообразованию интерметаллических соединений

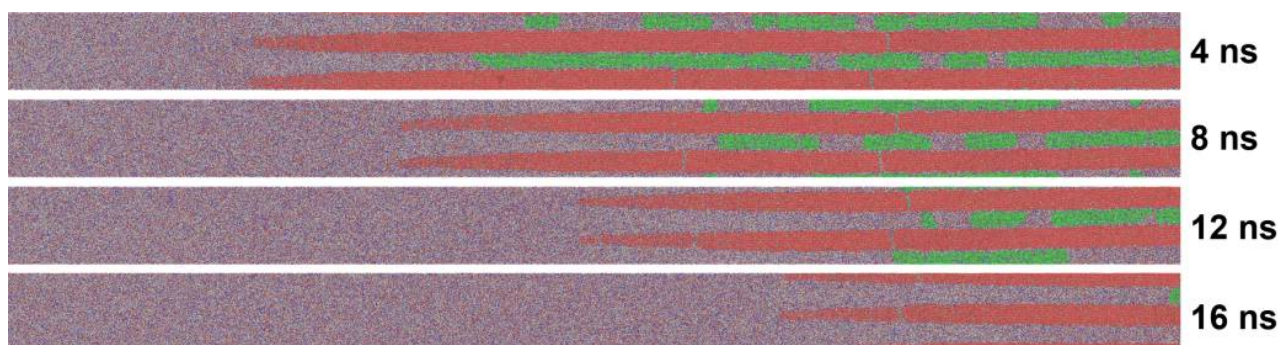


Рис. 5. Набор шлифов структуры распределения различных типов элементарных ячеек вдоль первой системы в последовательные моменты времени: красные точки (ячейки Ti), зеленые точки – fcc тип (ячейки Al), синие точки – bcc тип; зажигание начальной зоны первой системы ( $N_{Ti}/N_{Al} = 1.15$ ,  $N = 936998$ ) прогревом от 800 до 1400 К

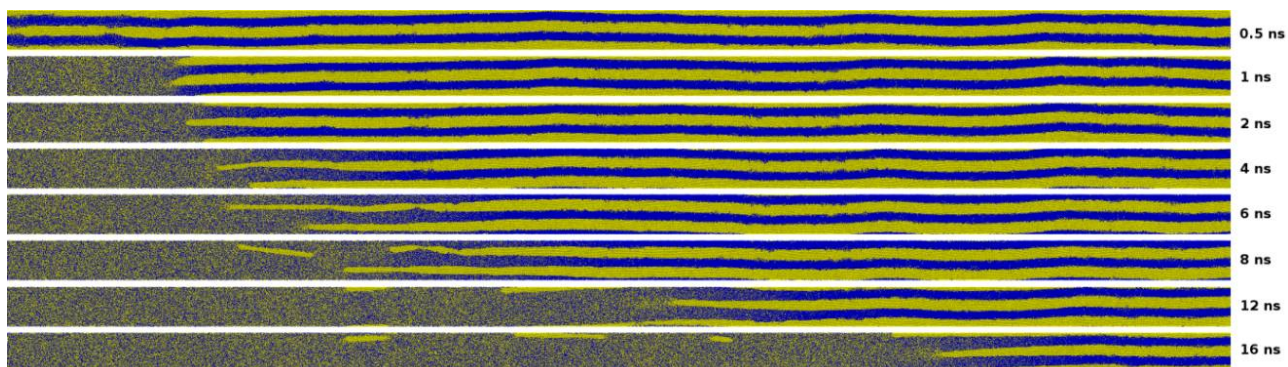




Рис. 6. Набор шлифов (снимков) структуры распределения атомов Ti (желтые точки) и атомов Al (синие точки) вдоль первой системы в последовательные моменты времени: однородная зона (слева) в начале второй системы ( $N_{Ti}/N_{Al} = 1.23$ ,  $N = 453974$ ) соответствует фазообразованию интерметаллических соединений

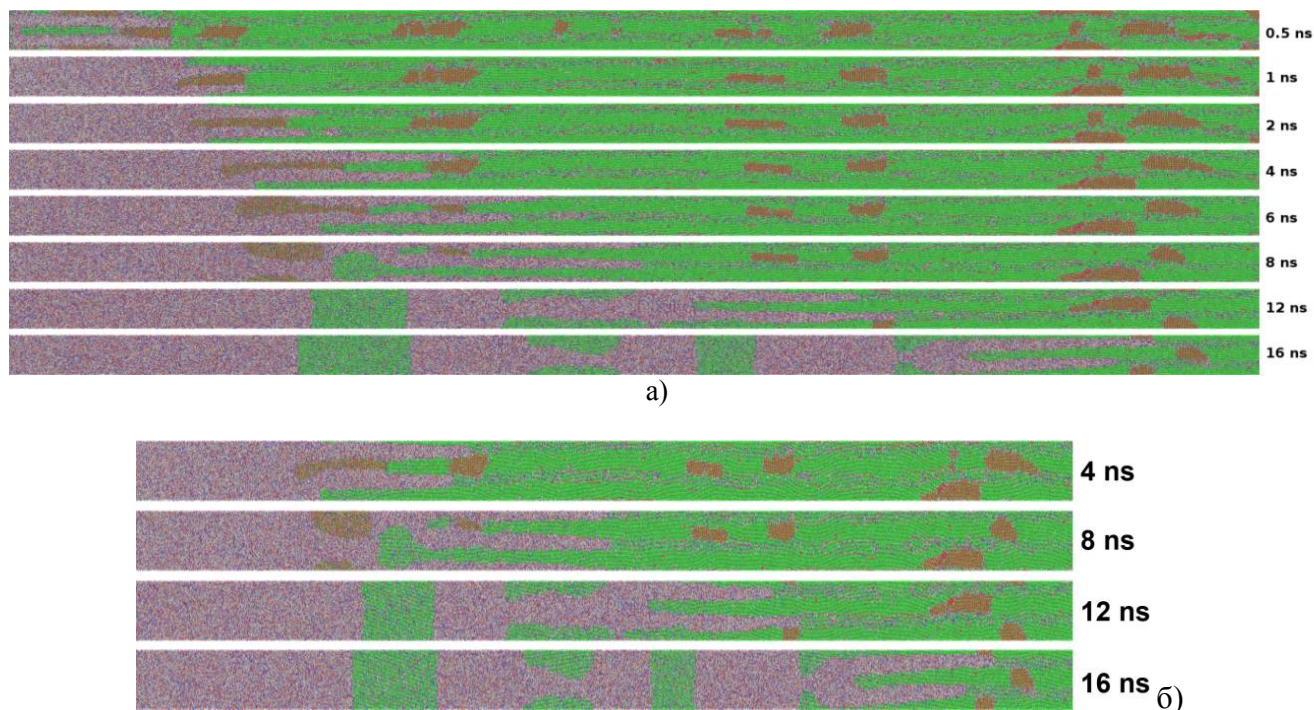


Рис. 7. Набор шлифов структуры распределения различных типов элементарных ячеек вдоль первой системы в последовательные моменты времени: красные точки – hcp тип (ячейки Ti), зеленые точки – fcc тип, синие точки – bcc тип; зажигание начальной зоны второй системы ( $N_{Ti}/N_{Al} = 1.23$ ,  $N = 453974$ ) прогревом от 800 до 1400 К: а) восемь временных сечений; б) четыре временных сечений в увеличенном масштабе

Температуры горения в диапазоне 1470-1500 К (рис. 2 и 3) оказываются выше температуры плавления фазы  $Ti_3Al$ , поэтому образуются фазы  $TiAl_3$  и  $TiAl$  за исключением фазы  $Ti_3Al$ . Объемно-центрированная тетрагональная (англ., bct) структура фазы  $TiAl_3$  близка к объемно-центрированной кубической (ОЦК или англ., bcc) структуре (ее синие точки доминируют в зонах сиреневого оттенка на рисунках 5 и 7), а гране-центрированная тетрагональная (англ., fct) структура фазы  $TiAl$  близка к гране-центрированной кубической (ГЦК или англ., fcc) структуре (зеленые точки в зонах сиреневого оттенка на рисунках 4 и 5).

Используя рисунки 4-8, с учетом длины структур 420 нм для обеих систем было произведено распознавание типов элементарных ячеек (рис. 5 и 7), а также получены оценки скорости движения фронта горения в реакции СВС: для первой системы скорость близка к значению 18 м/с и для второй системы – близка к значениям 19-20 м/с (аналогичные оценки следуют из рисунков 2 и 3). Плотность вещества для первой системы к концу 16 нс в

соответствии с зоной распространения волны горения (рис. 8а) приблизительно равна 3.32-3.34 г/см<sup>3</sup> и это значение лежит в диапазоне 3.3-3.38 г/см<sup>3</sup>, соответствующего фазе TiAl<sub>3</sub>.

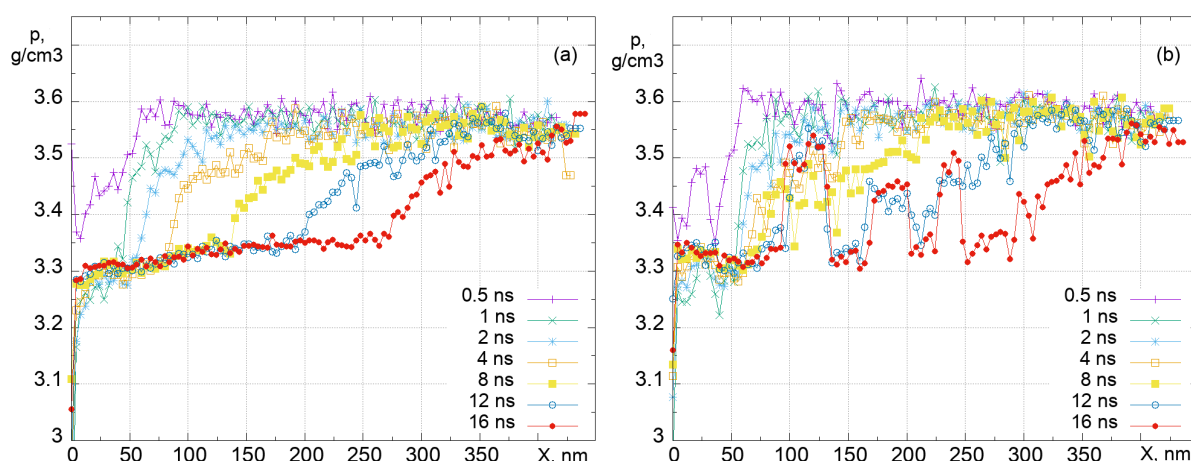


Рис. 8. Наборы профилей плотности в виде функциональных зависимостей плотности для обеих систем от координаты  $X$  в последовательные моменты времени: зажигание разогревом от 800 до 1400 К в начальных зонах: а) для первой системы ( $N_{Ti}/N_{Al} = 1.15$ ,  $N = 936998$ ); б) для второй системы ( $N_{Ti}/N_{Al} = 1.23$ ,  $N = 453974$ )

Во второй системе ( $N_{Ti}/N_{Al} = 1.23$ ,  $N = 453974$ ) в интервале от 8 до 16 нс при прохождении волны горения возникает «гетерофазная» структура (гетероструктура, рис. 7 и 8b). Как видно на рисунках 7 и 8b, к концу 16 нс появляются как минимум три зоны с резкими вертикальными границами (в них зеленые точки доминируют по отношению к малому количеству синих точек). Доминирование зеленых точек (fcc тип) над синими точками (bcc тип) в этих трех зонах подтверждает доминирование наличия фазы TiAl (ее fct тип близок к fcc типу) над количеством фазы TiAl<sub>3</sub> (ее bct тип близок к bcc типу). Ячейки Al соответствуют fcc типу (тоже зеленые точки), но эти три зоны не могут соответствовать фазе жидкого Al, так как на рисунке 7 эти зоны не имеют однородного зеленого оттенка. К тому же, профили плотности (рис. 8b) показывают высокое значение плотности 3.5-3.54 г/см<sup>3</sup> вместо значений 2.3-2.4 г/см<sup>3</sup>, которые характеризуют плотность жидкого алюминия.

Эффект появления гетерофазной структуры стабильно воспроизводится даже при изменении (уменьшении) начальной температуры зажигания реакции СВС (рис. 9-11).

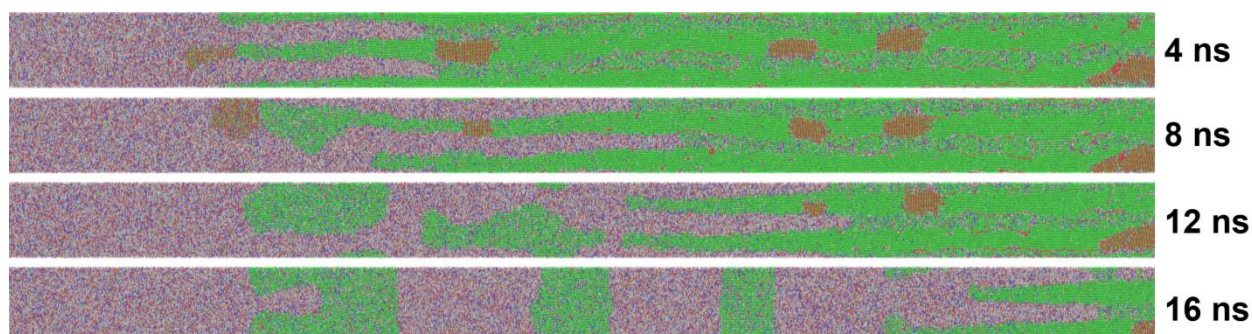


Рис. 9. Набор шлифов структуры распределения различных типов элементарных ячеек вдоль первой системы в последовательные моменты времени: красные точки – hcp тип (ячейки Ti), зеленые точки – fcc тип, синие точки – bcc тип; зажигание начальной зоны второй системы ( $N_{Ti}/N_{Al} = 1.23$ ,  $N = 453974$ ) прогревом от 800 до 1300 К

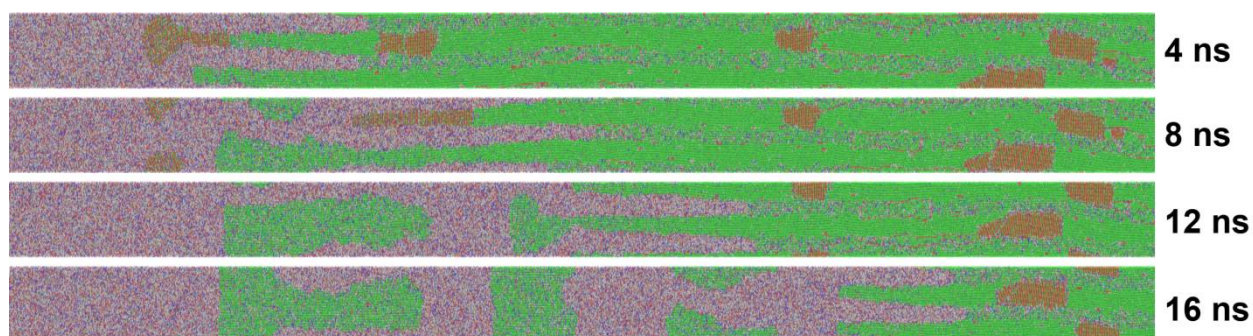


Рис. 10. Набор шлифов структуры распределения различных типов элементарных ячеек вдоль первой системы в последовательные моменты времени: красные точки – hcp тип (ячейки Ti), зеленые точки – fcc тип, синие точки – bcc тип; зажигание начальной зоны второй системы ( $N_{Ti}/N_{Al} = 1.23$ ,  $N = 453974$ ) прогревом от 800 до 1200 К

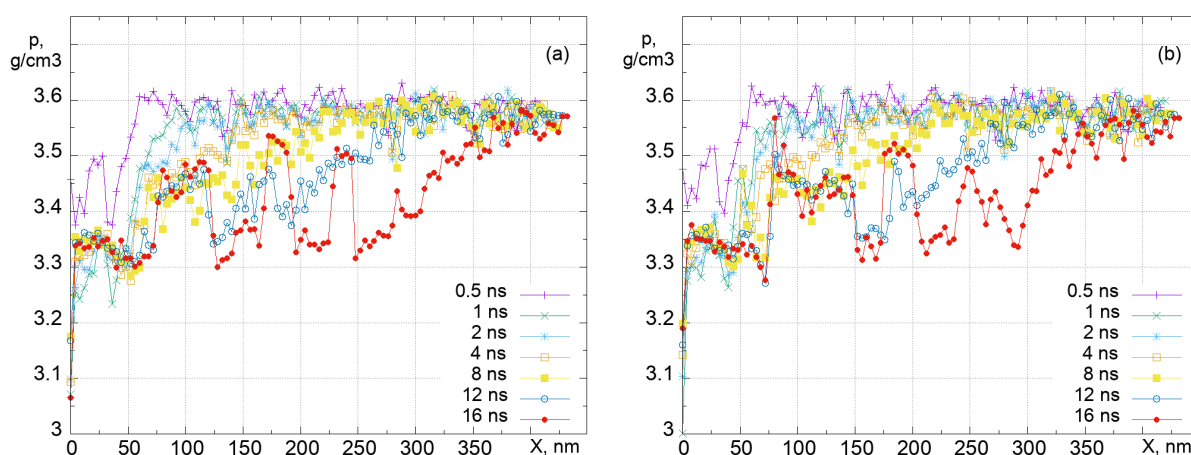


Рис. 11. Наборы профилей плотности в виде функциональных зависимостей плотности для обеих систем от координаты  $X$  в последовательные моменты времени: зажигание начальной зоны второй системы ( $N_{Ti}/N_{Al} = 1.23$ ,  $N = 453974$ ) разогревом: а) от 800 до 1300 К; б) от 1300 до 800 К

Как видно из рисунков 5 и 8а, для первой системы в зоне прошедшего фронта горения гетероструктура не возникает. Как видно из рисунков 7, 8б, 9, 10 и 11, для второй системы гетероструктура воспроизводится во всех трех режимах зажигания СВС (рис. 12).

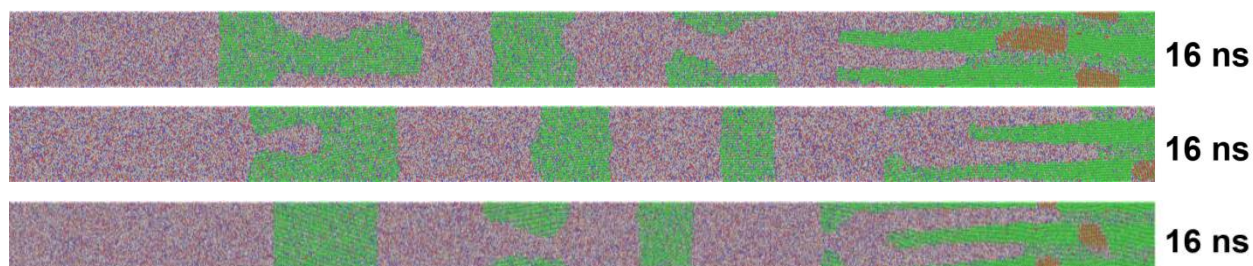


Рис. 12. Набор шлифов (снимков) с гетерофазной структурой образования и распределения интерметаллических фаз вдоль второй системы ( $N_{Ti}/N_{Al} = 1.23$ ,  $N = 453974$ ) к моменту времени 16 нс для трех режимов зажигания СВС: верхний снимок – от 800 до 1200 К; средний снимок – от 800 до 1300 К; нижний снимок – от 800 до 1400 К

Значение уровня плотности (рис. 8 и 11), приблизительно равного  $3.34 \text{ г/см}^3$ , соответствует соединению  $TiAl_3$ , а в трех зонах с резкими границами с доминированием зеленого оттенка в пределах прошедшей волны горения (приблизительно  $\frac{3}{4}$  длины от начала) с плотностью около  $3.5\text{-}3.54 \text{ г/см}^3$  преобладает соединение  $TiAl$ , для которой значение плотности соответствует  $3.8 \text{ г/см}^3$ , (присутствие в этих зонах в меньшем количестве фазы  $TiAl_3$  с плотностью  $3.38 \text{ г/см}^3$ , уменьшает значение  $3.8$  до  $3.5\text{-}3.54 \text{ г/см}^3$ ; фаза  $Ti_3Al$  в этих зонах отсутствует, так как при достижении температуры горения  $1470\text{-}1490 \text{ К}$  уже претерпела распад). Для системы Ti-Al с нестехиометрическим соотношением, близким к значению  $N_{Ti}/N_{Al} = 1.23$ , дополнительные вычислительные эксперименты подтверждают возникновение гетероструктуры. Необходимо определить границы диапазона «нестехиометричности» состава и другие параметры системы Ti-Al, при которых эффект возникновения гетероструктуры исчезает.

Для определения причин возникновения гетерофазной структуры необходимо провести цикл дополнительных вычислительных экспериментов с различными условиями инициирования СВС.

Компьютерное моделирование СВ-синтеза в системе Ti-Al методом MD в пакете LAMMPS с использованием параллельных вычислений проводилось на кластере рабочих станций (15 ПК), который является локальной сетью. Каждый ПК имеет 4-ядерный процессор Intel i5-7400, 4 ГБ оперативной памяти.

Замечание: материал, изложенный выше в подразделе 2.2.2, опубликован в источниках под номерами [6-11] списка публикаций авторов проекта, расположенного в конце отчета.

### 2.2.3. Список цитируемых публикаций к подразделу 2.2

1. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Comp. Phys. 1995. Vol. 117. Iss. 1. P. 1-19.
2. Zope Rajendra R, Mishin Y. Interatomic Potentials for Atomistic Simulations of the Ti-Al System // Phys. Rev. B. 2003. Vol. 68. Article ID 024102.
3. Mishin Y., Mehl M.J. and Papaconstantopoulos D.A. Embedded-atom potential for B2-NiAl // Phys. Rev. B. 2002. Vol. 65. Iss. 22. Article ID 224114.
4. Purja Pun G.P., Mishin Y. Development of an interatomic potential for the Ni-Al system // Philosophical Magazine. 2009. Vol. 89. Iss. 34-36. P. 3245-3267.

5. Шмаков И.А., Иордан В.И. Молекулярно-динамическое моделирование микрокинетики СВ-синтеза алюминида титана в наноразмерной слоистой системе Ti-Al // Высокопроизводительные вычислительные системы и технологии. 2018. № 2(9). С. 48-54.
6. Шмаков И.А., Иордан В.И., Савичева Т.М. Молекулярно-динамическое моделирование СВС в наноразмерной слоистой композиции Ti-32.89мас.%Al с использованием параллельных вычислений // Высокопроизводительные вычислительные системы и технологии. 2019. Том 3. № 1. С. 48-54.
6. Turlo V., Politano O. and Baras F. Dissolution process at solid/liquid interface in nanometric metallic multilayers: molecular dynamics simulations versus diffusion modelling // Acta Materialia. 2015. Vol. 99. P. 363-372.
7. Rogachev A.S. and et al. Combustion in reactive multilayer Ni/Al nanofoils: experiment and molecular dynamic simulation // Combustion and Flame. 2016. Vol. 166. P. 158-169.
8. Baras F., Politano O. Epitaxial growth of the intermetallic compound NiAl on low-index Ni surfaces in Ni/Al reactive multilayer nanofoils // Acta Materialia. 2018. Vol. 148. P. 133-146.
9. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2010. Vol. 18. Article ID 015012.
10. Ackland G.J., Jones A.P. Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation // Phys. Rev. B. 2006. Vol. 73. Iss. 5. Article ID 054104.

### **3. СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ МЕТОДИКИ TRACE-АНАЛИЗА И РАСШИФРОВКИ КАРТ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ХРОНОСКОПИИ ТЕПЛОВЫХ ПОЛЕЙ ВОЛНЫ ГОРЕНИЯ В БИНАРНЫХ СИСТЕМАХ ДЛЯ РАСПОЗНАВАНИЯ ПЕРЕХОДА СВС В НЕУСТОЙЧИВЫЙ РЕЖИМ**

В настоящее время применение СВС для разработки 3D-принтеров готовых изделий из металла и металлокерамики в области аддитивных технологий [1] относится к важным прикладным направлениям его развития. Температура и скорость распространения волны горения СВС по формованной порошковой смеси исходных продуктов реакции [2] являются основными контролируемыми параметрами. Влияние случайной структуры порошковой смеси исходных продуктов на движение фронта волны горения квазипериодически меняет температуру, скорость и направление распространения волны горения в процессе СВС [3]. Задача анализа микрогетерогенной структуры горения, представляющая собой «проблему дискретности» СВС, вызывает необходимость разработки средств анализа локальной неустойчивости движения волны горения СВС по высокоскоростным термохронограммам (картам дифференциальной хроноскопии). Решение данной проблемы авторы видят в применении математических методов сжатия видеоданных за счет введения в тракт обработки сигнала межкадровой разности и параметризации результатов дифференциальной хроноскопии (ДХС) с помощью алгоритмов быстрого преобразования Фурье (БПФ), Trace-преобразования (ТП) или алгоритмов Хафа.

Целью второго промежуточного этапа проекта является дальнейшее совершенствование средств высокоскоростной видеорегистрации процесса СВС, методики и алгоритма вычисления карт дифференциальной хроноскопии (ДХС) тепловых полей волны горения, поиска дополнительных «характерных» признаков (дополнительно к гистограммным признакам, предложенных и изученных на 1-ом этапе проекта) для распознавания перехода процесса горения из стационарного в неустойчивый режим, базируясь на анализе Trace-образов карт ДХС тепловых полей волны горения, полученных по результатам обработки данных высокоскоростной видеосъемки СВС.

#### **3.1. Синтез виртуальных хронограмм (карт ДХС) для trace-анализа неустойчивости волны горения**

**Введение.** Современные скоростные средства видеорегистрации позволяют проводить эксперименты для исследования широкого класса быстропротекающих процессов с наносекундным разрешением [1-3]. Наиболее перспективны применения оптических методов диагностики при выборе статистически устойчивых режимов в технологиях порошковой металлургии [4,5], ударно-волнового компактирования [6,7], самораспространяющегося

синтеза (СВС) [8,9], плазменного напыления покрытий [10, 11]. Основы методов микропирометрии, измерения температуры и скорости частиц, компьютерного моделирования ключевых параметров технологических процессов изложены в работах [12-16]. Результатом высокоскоростной визуализации тепловых полей в волне горения СВС, как правило, являются большие массивы видеоданных, что затрудняет их непосредственную обработку и контроль технологического процесса в режиме реального времени [17]. Для сжатия данных применяется метод дифференциальной хроноскопии (ДХС), заключающийся в бинаризации по заданному температурному порогу тепловизионного изображения волны горения СВС и вычислении, путем межкадровой разности, приращения координат фронта горения в текущий момент времени [18]. Полученную таким образом, хронограмму движения виртуальной изотермической границы волны горения можно анализировать в масштабе реального времени с помощью быстросействующего Trase-преобразования [19].

Алгоритм вычисления карт ДХС подробно описан в отчете за 1-ый промежуточный этап проекта. Основными его этапами являются: *пороговая бинаризация 2-мерного изображения-карты ДХС, межкадровая разность координат фронта горения по каждой строке у изображения, замена координат нормальной составляющей  $x$  (номер пикселя в строке) скорости движения фронта горения на координату времени  $t$  (номер кадра в серии).*

**Цель работы:** поиск характерного признака для распознавания перехода процесса горения из стационарного в неустойчивый режим на базе имеющихся экспериментальных хронограмм распространения волны СВС. Для идентификации выхода горения из стационарного режима производится синтез виртуальных хронограмм из фрагментов ДХС с явно выраженной неустойчивостью «спинового» горения (далее, спиновой неустойчивостью), затем по изменению trase-образов определяются характерные признаки перехода к неустойчивому горению.

**Описание решаемой задачи.** Технической базой получения экспериментальных данных является специализированный тепловизионный измерительный комплекс на основе высокоскоростной видеокамеры «VideoSprint NG» с наносекундным затвором NanoGate (НПО Видеоскан, Россия) и обработка видеопотока данных методом ДХС, аналогично описанному в работах [20-23]. К существенным отличиям, достигнутым на 2-ом этапе проекта, можно отнести увеличение в 2 раза кадровой частоты видеорегистрации (до 2000 fps), а также применение наиболее «эффективного» ядра Trase-преобразования (как показали результаты исследований 1-го этапа проекта) для обработки данных в виде [22]:

$$T_5: T(f(t)) = \left| \int_{c^*}^{\infty} e^{i4\log(r)} \sqrt{r} f(t) dt \right|.$$

Замечание: функционал Трасе-преобразования интегрирует значения яркостей  $f(t)$  точек карты ДХС вдоль проекционного направления  $t$ , повернутого на положительный угол  $\varphi$  относительно вертикальной оси карты ДХС и отстоящего на расстояние  $r$  от центра карты (матричного изображения) ДХС. То есть, вертикальная координата (номер строки матричного Трасе-образа) соответствует  $r$ , а горизонтальная координата (номер столбца матричного Трасе-образа) – углу поворота  $\varphi$ .

Повышение быстродействия выявило новые детали тепловой структуры волны горения, незаметные при прежней скорости регистрации, как это видно из сопоставления хронограмм на рисунках 1 и 2. Кроме обнаруженной ранее [23] пространственной когерентности, когда признаки неустойчивости проявляются только в виде разрывов линии фронта горения, на хронограмме с высоким разрешением на рисунке 2, стали хорошо видны точки спиновой неустойчивости.

На экспериментально полученной 2D-хронограмме волны горения условно можно выделить три зоны горения, как это показано на рисунке 3: 1- зона неустойчивого зажигания; 2- зона стационарного горения; 3- смена направления спинового горения.

Следует отметить, что на уровне масштабов микрогетерогенности везде наблюдается локальное «дрожание» линии фронта горения и это характеризует принципиальную неустойчивость волны горения на этих масштабах, при переходе от «коллективного» горения к «индивидуальному». Признаки неустойчивости здесь дополнительно проявляются в виде «веток» распространения волны СВС со сменой направления спинового горения.

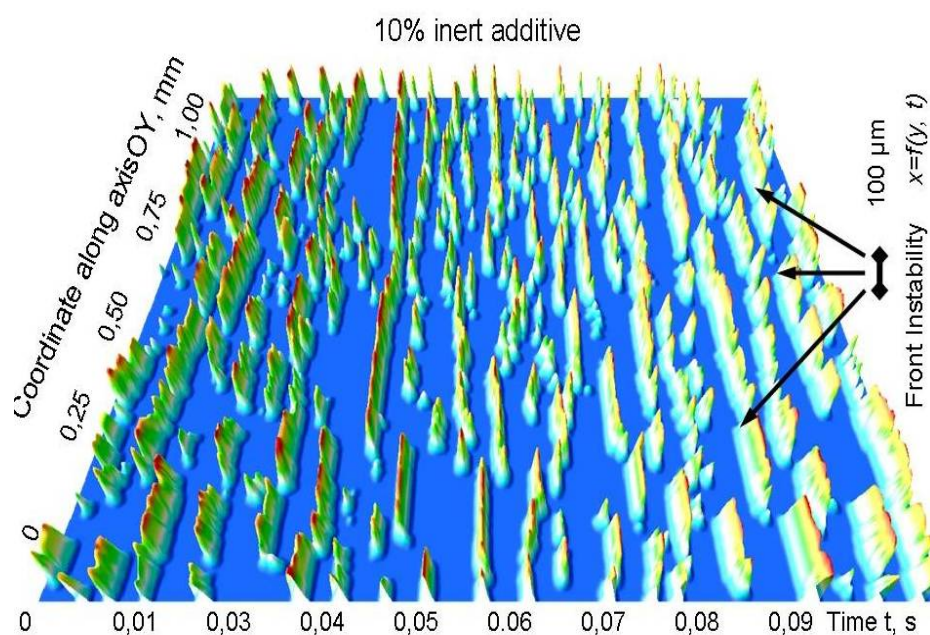


Рис. 1. Хронограмма волны горения с кадровой частотой 500 fps из работы [21]



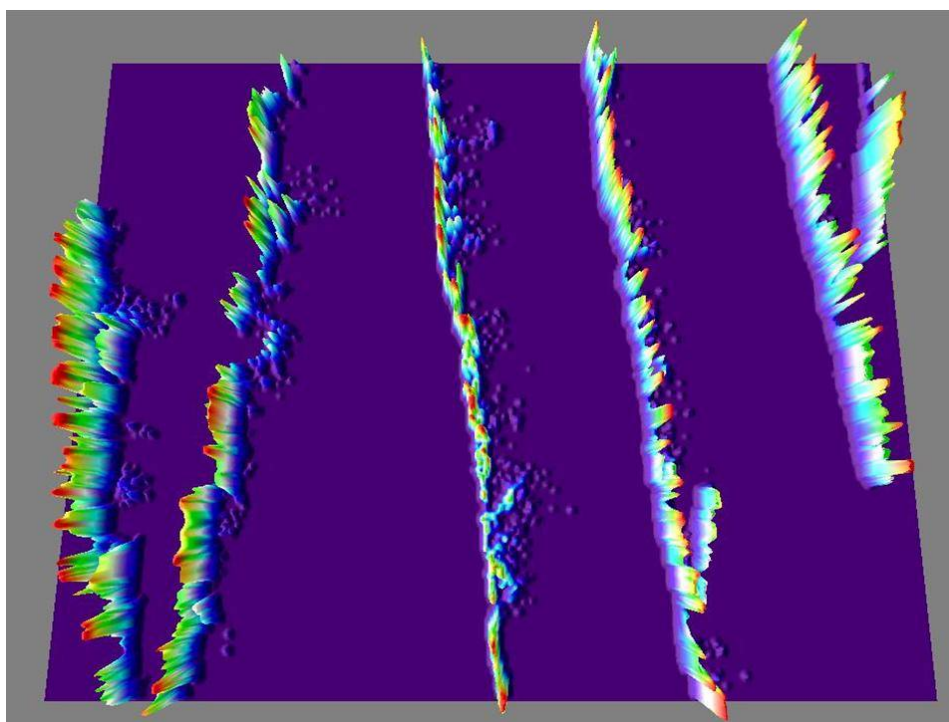


Рис. 2. Высокоскоростная 3D-хронограмма (2000 fps) визуализирует точки фронта горения со спиновой неустойчивостью

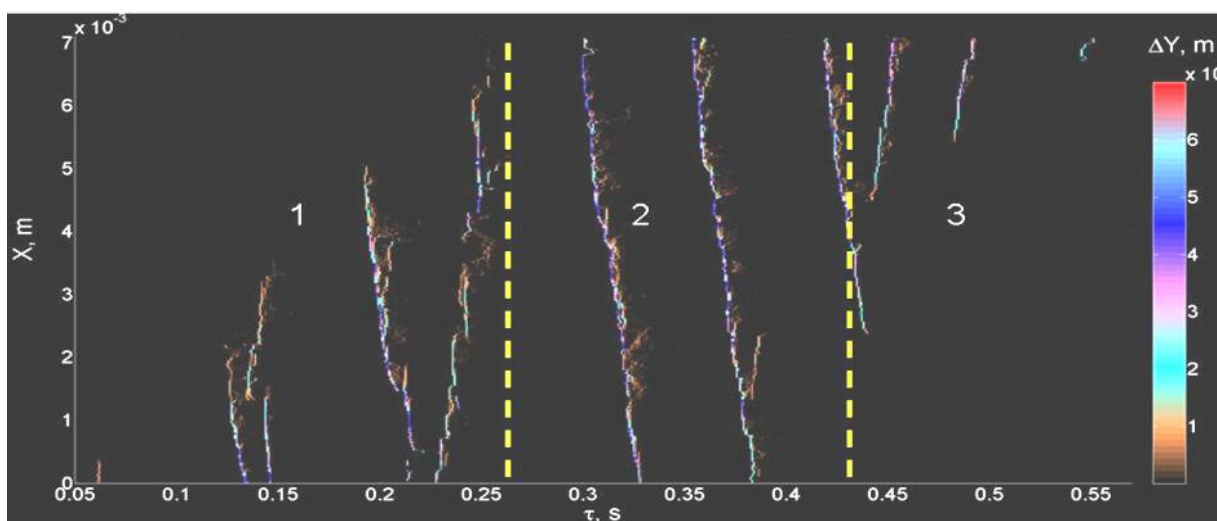


Рис. 3. Высокоскоростная 2D-хронограмма (2000 fps): 1 – интервал времени неустойчивого режима зажигания волны горения; 2 – интервал стационарного и стабилизированного распространения волны горения; 3 – область смены направления спинового горения

**Синтез виртуальных хронограмм.** Набор «эталонных» хронограмм горения состоит из виртуальной хронограммы «стационарного» устойчивого режима распространения фронта СВС, который был синтезирован циклическим повторением карты ДХС, соответствующей области 2 на рисунке 3. Результат представлен на рисунке 4, где справа изображен Trace-образ синтезированной хронограммы. Аналогично синтезированы виртуальные хронограммы для области 1 и 3 на рисунке 5 и рисунке 6.

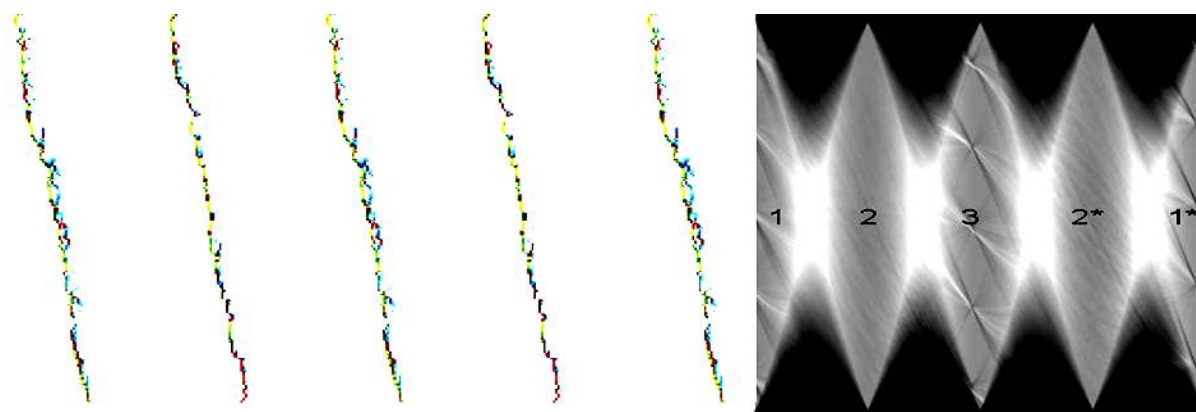


Рис. 4. Синтезированная виртуальная хронограмма «идеального» горения и её Trase-образ.

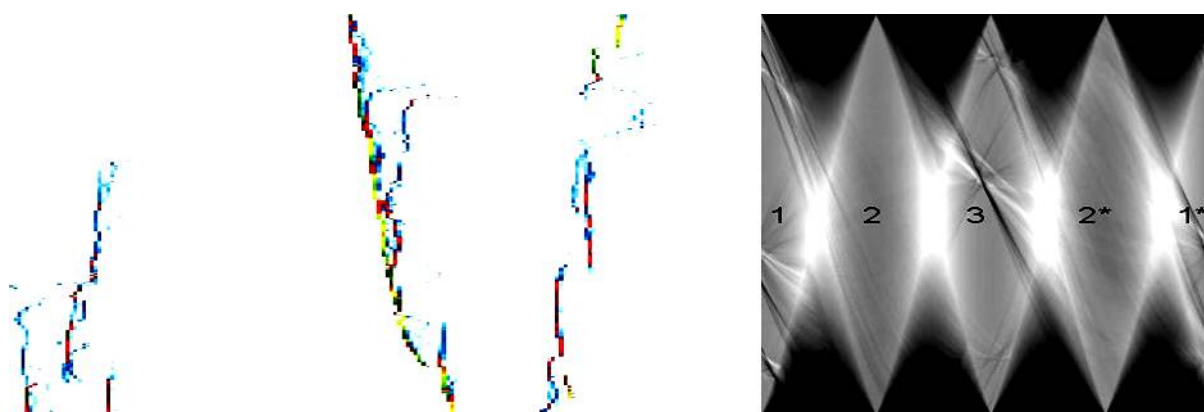


Рис. 5. Синтезированная виртуальная хронограмма неустойчивого зажигания и её Trase-образ.

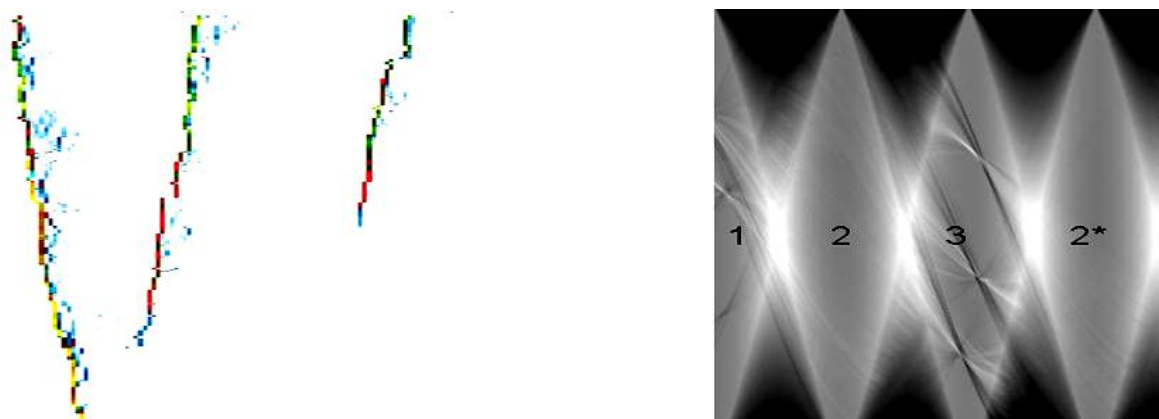


Рис. 6. Синтезированная виртуальная хронограмма смены спигового направления горения и её Trase-образ

**Обсуждение результатов.** Нетрудно заметить на рисунках 4-6, что число «узлов» трансверсальных проекционных максимумов в центральной зоне 3 Trase-матрицы синтезированных хронограмм совпадает с числом «ветвей» изображающих фронт горения. Равномерное чередование линий фронтов горения на ДХС (см. рис. 4), задает равномерное распределение «узлов» проекционных максимумов в центральной зоне 3. Неравномерное чередование «ветвей» фронта горения, задает аналогичное несимметричное расположение

«узлов» максимумов в центральной зоне 3 Trase-матрицы. Причем, в зависимости от наклона «ветви», который определяется направлением спинового горения, положение «узла» будет левее или правее оси симметрии Trase-матрицы, точнее «узлы» для левого и правого направления спинового горения являются сопряженными в пространственно-частотном спектре Trase-преобразования. Таким образом, признаком спиновой неустойчивости может быть выбран момент возникновения сопряженных максимумов в центральной трансверсальной области спектра trase-преобразования.

Дополнительный результат при анализе неустойчивости волны горения может быть получен при детальном рассмотрении одиночных ДХС-профилей фронта горения в момент образования новой «ветви» волны с противоположным спином, как это показано на рисунке 7.

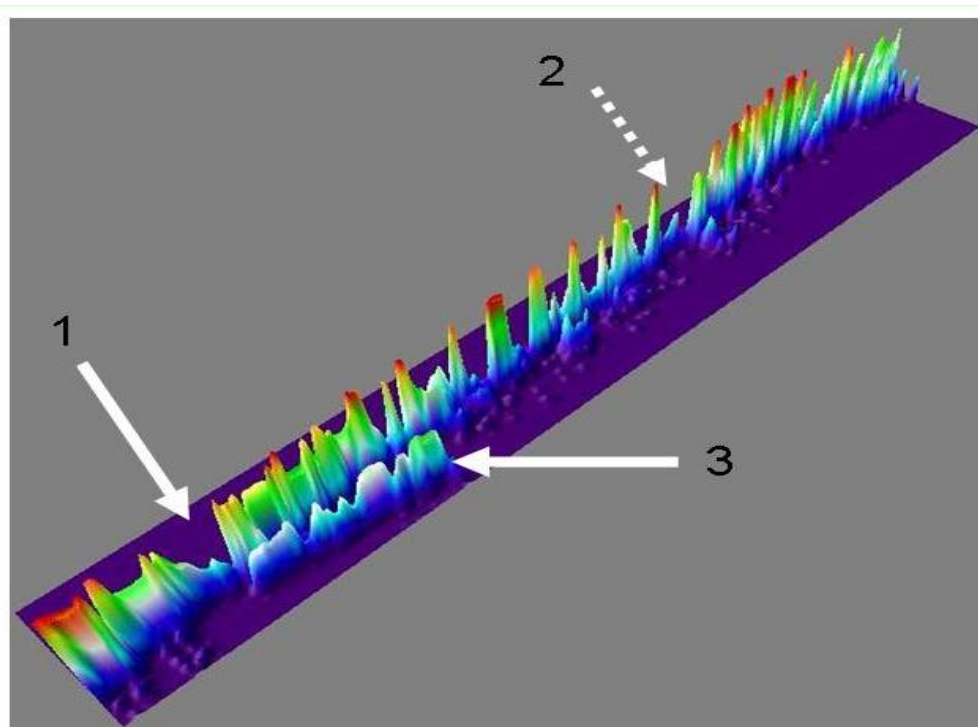


Рис. 7. Спиновая неустойчивость: 1- узел «сильной» неустойчивости; 2 – узел «слабой» неустойчивости; 3 – ответвление части фронта горения в направлении противоположного спина

Детальное изучение повторяющихся профилей в моменты возникновения спиновой неустойчивости, например в окрестностях точек 1 и 2 (на рисунке 7), позволяет заметить, что движение изотермы фронта горения выше до точки «ветвления», чем после нее. Принимая во внимание то, что коэффициент температуропроводности веществ больше коэффициента диффузии, в нашем случае можно сделать вывод: в точке 1 и 2 (на рисунке 7) спиновая неустойчивость характерна для перехода из режима тепловой неустойчивости в диффузионную, при наличии гистерезисной зависимости скорости горения от температуры.

## **Выводы.**

Новые результаты о тонкой тепловой структуре волны горения СВС и признаках её неустойчивости, были получены в данной работе за счет повышения быстродействия телевизионной измерительной системы. Следует отметить, что такой путь совершенствования методов прогноза поведения процесса СВС ограничен тем, что при малых временах экспозиции пропорционально уменьшается амплитуда видеосигнала. Температура и светимость волны горения ограничены адиабатическими значениями. Таким образом, простое повышение быстродействия приведет к ухудшению соотношения сигнал/шум в измерительном канале и очевиден вывод о существовании оптимального быстродействия для каждой системы химических компонентов реакции СВС. Для системы Ni-Al, по результатам приведенных экспериментальных данных, таким верхним порогом быстродействия можно считать частоту кадров в 2000 кГц.

По набору карт ДХС (с разрешением не хуже 512\*512) получен набор изображений Трасе-спектров движения фронта горения СВС (более 60 с разбавлением реагирующей смеси инертном от 2.5 до 30%) в переходных режимах от невозмущенного до распавшегося на тепловые микроструктуры. На изображениях Трасе-спектров выделены области матрицы Трасе-спектра, которые наиболее чувствительны к возникновению тепловой неустойчивости.

В качестве критерия для распознавания спиновой неустойчивости может быть выбран признак появления “локальных максимумов («узлов» ветвления)” в центральной трансверсальной области спектра Трасе-преобразования, а их отклонение от оси симметрии указывает на направление спинового горения.

На основании рассмотрения одиночного профиля ДХС в точке «ветвления», можно сделать вывод о том, что спиновая неустойчивость характерна для перехода из режима тепловой неустойчивости в диффузионную, при наличии гистерезисной зависимости скорости горения от температуры.

Применение метода дифференциальной пространственной хроноскопии, учитывая одномерность линий фронта горения и границ изотермических зон, позволяет не только избавиться от маскирующего влияния случайной структуры порошковой смеси исходных продуктов на геометрию фронта горения, но и количественно оценить стабильность волны СВС и режимы теплопереноса в классических терминах пространственной и временной когерентности волнового процесса.

Степень сжатия информации о движении волны горения, достигает значения 1:5000, что позволяет эффективно накапливать экспериментальную базу данных о неустойчивых режимах горения при введении инертных добавок, изменяющих константу Аррениуса и кинетику реакции.

В программе расчета Трасе-образов карт ДХС реализована достаточно простая схема распараллеливания на основе «геометрического параллелизма» (изображение карты ДХС разбивается на кластеры изображения, например, размером 512x512, для которых независимо (параллельно) рассчитываются Трасе-образы).

Повышение чувствительности Трасе-анализа открывает возможность исследовать процессы структурообразования СВС *in situ*.

Замечание: материал, изложенный выше в разделе 3, опубликован в источниках под номерами [12-17] списка публикаций авторов проекта, расположенного в конце отчета.

### **3.2. Список цитируемых публикаций к разделу 3**

1. Boronenko M., Gulyaev P. and Dolmatov A. High-speed visualization of combustion synthesis discrete reaction waves: coherent heat microstructures // Journal of Physics: Conference Series. 2018. Vol. 1115. No. 4. Article ID 042021. DOI: 10.1088/1742-6596/1115/4/042021.
2. Dolmatov, A.V., Milyukova, I.V., Gulyaev, P.Y. Investigation of structure formation in thin films by means of optical pyrometry // Journal of Physics: Conference Series. 2019. T. 1281. C. 012010. DOI:10.1088/1742-6596/1281/1/012010.
3. Methods of indication of low intensity pupil reaction on the subjectively-important stimuli / M.P. Boronenko, P.Yu. Gulyaev, V.I. Zelenskiy // *Activitas Nervosa Superior Rediviva*. 2019. Volume 61. No. 2. P. 49-56.
4. Gulyaev P., Dolmatov A., Jordan V, Panchenko Y. Limit of inert functional admixtures depending on the dispersion in the combustion synthesis of nickel aluminides// IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series 1134 (2018) 012018 doi:10.1088/1742-6596/1134/1/012018.
5. Song, X.J. Microstructure and evolution of (TiB<sub>2</sub>+Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)/NiAl composites prepared by selfpropagation high-temperature synthesis / X.J. Song, H.Z. Cui, L.L. Cao // *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*. 2016. T. 26. № 7. C. 1878-1884. DOI: 10.1016/S1003-6326(16)64265-6.
6. Saikov I.V, Alymov M.I., Vadchenko S.G., Gulyaev P.Yu. Shock-wave synthesis in powder mixtures // IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series 1115 (2018) 042012 doi :10.1088/1742-6596/1115/4/042012.
7. Гуляев П.Ю., Долматов А.В. Автоматизация контроля теплофизических параметров в технологиях детонационного напыления // *Системы управления и информационные технологии*. 2009. Т. 35. № 1.2. С. 230-233.

8. Gulyaev P. Temperature hysteresis in the unstable combustion mode of SHS: experiment with high-speed micro-pyrometry // IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series 1115 (2018) 042026. DOI:10.1088/1742-6596/1115/4/042026.
9. Borodina K., Sorokina S., Blinova N., Boronenko M., Gulyaev P. Thermal analysis of reaction producing  $K_xTiO_2$  // Journal of Thermal Analysis and Calorimetry. 2018. Т. 131. № 1. С. 561-566. DOI: 10.1007/s10973-017-6840-0.
10. Gulyaev P.Yu., Milyukova I.V, Cui H.Z. In-situ selfpropagating-hightemperature-synthesis controlled by plasma //Вестник Югорского государственного университета. 2012. № 2 (25). С. 28-33.
11. Бороненко М.П., Гуляев П.Ю. и др. Методы контроля температуры и скорости частиц конденсированной фазы в процессе плазменно-дугового напыления // Фундаментальные исследования. 2013. № 10-6. С. 1194-1199.
12. Гуляев П.Ю., Долматов А.В. Физические принципы диагностики в технологиях плазменного напыления // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. 2009. Т. 11. № 5-2. С. 382-385.
13. Гуляев П.Ю., Иордан В.И. Оптико-электронная система диагностики двухфазных потоков динамическим методом счета частиц // Известия высших учебных заведений. Физика. 2008. Т. 51. № 9-3. С. 79-87.
14. Гуляев П.Ю., Долматов А.В., Леонов Г.Н. Методы оптической диагностики частиц в высокотемпературных потоках // Ползуновский вестник. 2012. № 2-1. С. 4-7.
15. Гуляев И.П., Гуляев П.Ю., Иордан В.И. Разрешающая способность виртуальных приборов контроля температуры частиц в плазменных потоках по суммарному спектру //Ползуновский альманах. 2008. № 2. С. 13-14.
16. Гуляев П.Ю., Гуляев И.П. Моделирование технологических процессов плазменного напыления покрытий наноразмерной толщины // Системы управления и информационные технологии. 2009. Т. 35. № 1.1. С. 144-148.
17. Boronenko M.P., Gulyaev P.Yu. Phase formation time evaluation in NiAl combustion systems by the thermal fields visualization method // Scientific Visualization. 2015. Vol. 7(5). P. 102-108.
18. Dolmatov A.V., Gulyaev P.Y., Milyukova I.V. Chrono-topographic analysis of the fire focus dynamics in the SHS wave // Journal of Physics: Conference Series. 2018. Vol. 1115. No. 4. Article ID 042024. DOI: 10.1088/1742-6596/1115/4/042024.
19. Kadyrov A. The Trace Transform and its applications/A. Kadyrov, M. Petrou//IEEE Trans. PAMI. -2001. -Vol. 23(8). -P. 811-828.

20. Долматов А.В., Гуляев П.Ю. Оптические методы хроно-топографического анализа неустойчивости микрогетерогенного режима горения // Вестник Югорского государственного университета. 2019. № 1 (52). С. 75-81.
21. Gulyaev P., Jordan V., Panchenko J. Trace –analysis of a combustion wave thermal instability using high-speed video images: experiment and simulation modeling// СБОРНИК ТРУДОВ ИТНТ-2019. 2019. С. 672-677.
22. Trace-анализ дифференциальной хроноскопии волны горения СВС при высокоскоростной телевизионной регистрации / П. Ю. Гуляев, В. И. Иордан, В. В. Мулярец // Доклады ТУСУР. – 2018. – Т. 21, № 1. – С. 62–66. DOI: 10.21293/1818-0442-2018-21-1-62-67.
23. Gulyaev P., Jordan V. Trace-Analysis of Images of the Differential Chronogram of the Combustion Wave for Recognition of Transitional Modes of SHS // CEUR Workshop Proceedings: Optoelectronic equipment and devices in systems of pattern recognition, image and symbol information processing. Recognition - 2017. Т. 1940. С. 37-44.

## **4. СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ ПРОГРАММНЫХ СРЕДСТВ КОМПЬЮТЕРНОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ГАЗОТЕРМИЧЕСКИХ ПОКРЫТИЙ И ПРЕДСКАЗАНИЯ ИХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТИТАН-АЛЮМИНИЕВЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДНЫХ ПОКРЫТИЙ**

### **4.1. Реализация программного пакета на языке C/C++ с использованием кроссплатформенной библиотеки QT, предназначенного для компьютерного моделирования (проектирования) газотермических покрытий и предсказания их функциональных характеристик**

Разработанный ранее авторами программный пакет для компьютерного моделирования газотермических покрытий и предсказания их функциональных характеристик создан в программной среде Delphi (на основе языка Pascal), которая не имеет возможности использования MPI-интерфейса для параллельных вычислений. Необходимость в использовании параллельных вычислений для пакета, функционирующего в среде Delphi, достаточно актуальна, так как временные затраты на моделирование покрытий с помощью данного программного пакета уже достаточно велики (от нескольких часов до нескольких суток на один вычислительный эксперимент) и требуется увеличение размеров моделируемого «кластера покрытия» (ограничение оперативной памяти компьютера препятствует увеличению используемых в пакете массивов). К тому же, количество вычислительных экспериментов достигает несколько десятков и более. Поэтому в плане работ на 2-ом промежуточном этапе проекта была предусмотрена задача «переложения» программного кода из среды Delphi в среду MS Visual Studio (на языке C/C++), в которой имеется возможность использования параллельных MPI-вычислений. Ниже приведено краткое описание структуры и основных программных единиц программного пакета (программного комплекса), реализованного на языке C/C++ с использованием кроссплатформенной библиотеки QT.

#### **4.1.1. Краткая характеристика программного комплекса для моделирования сплэтов и покрытий**

Газотермическое напыление широко используется для производства функциональных защитных покрытий, в т.ч. термобарьерных (TBCs) покрытий и химически-реактивных покрытий [1].

Состав подсистем программного комплекса, предназначенного для моделирования газотермических покрытий, приведен на рисунке 1.





Рис. 1. Общая структура программного комплекса для моделирования газотермических покрытий

Кратко рассмотрим возможности двух основных подсистем: подсистемы «СПЛЭТ» и «ПОКРЫТИЕ».

Подсистема «СПЛЭТ» с использованием подсистемы «База данных» позволяет рассчитать геометрические характеристики сплэтов при заданном наборе значений «ключевых физических параметров (КФП)» частиц, а также определять границы диапазонов значений КФП, при которых «модельная» форма сплэтов остается цельной (неразрывной) – это является важным аспектом для настройки технологического режима напыления покрытий, образующихся при закреплении сплэтов на напыляемой поверхности [2-6]. В основу расчета характеристик сплэта положены экспериментально апробированные теоретические автомодельные решения для процесса формирования одного сплэта, требующего расчета трехмерной нестационарной краевой задачи со свободной границей для уравнений Навье-Стокса совместно с уравнениями сопряженного конвективно-кондуктивного теплообмена и фазовых превращений в растекающейся частице, а в ряде случаев – и в подложке [5]. Важные аспекты по формированию сплэтов изложены выше.

Подсистема «ПОКРЫТИЕ» опирается на алгоритм *последовательной стохастической укладки сплэтов* (метод Монте-Карло) при напылении на поверхность с изменяемой топологией (рис. 2) и на этой основе производит моделирование процесса формирования слоистой структуры плазменных покрытий, напыляемых из порошков и обладающих заранее заданными свойствами.



Рис. 2. Укладка сплэтов цилиндрической формы на поверхность с изменяемым рельефом (черный цвет): (а) – рельеф ступенчатой формы; (б) – рельеф волнообразной формы

Как видно из рисунка 2(б), в зоне ядра сплэта (отмеченного на рисунке справа темно-серым фоном, а правая часть периферии сплэта не отображена) поры не образуются в силу значительного напорного давления при соударении капли с подложкой, а в направлении периферии сплэта поры увеличиваются. Отсутствие пор в зоне контакта ядра сплэта с напыляемой поверхностью (радиус ядра сплэта  $R_{c0} \cong 1.1R_p$ ) обеспечивается первым алгоритмом распознавания и заливки углублений на поверхности в контактной зоне с ядром сплэта. Далее используется алгоритм распознавания и заливки углублений за препятствиями на поверхности в контактной зоне с периферийной кольцевой частью сплэта. Затем применяется волновой алгоритм сканирования напыляемой поверхности с изменяемым рельефом для подготовки массива «опорных вершин» с последующей аппроксимацией нижней поверхности сплэта с помощью В-сплайновых поверхностей [7]. В процедуре моделирования укладки сплэта используется дискретизация плоскости XY с определенными шагами  $\Delta x$  и  $\Delta y$  (обычно  $\Delta x = \Delta y$ ) в виде двумерной сетки узловых точек, индексы которых совпадают с индексами элементов двумерного массива «опорных вершин». Значения этих элементов массива представляют собой z-координаты «опорных вершин» напыляемой поверхности в «арифметике с плавающей запятой» без какой-либо дискретизации по оси Z. Из «остаточного» объема жидкого расплава растекающейся капли после выше упомянутых заливок углублений корректируется толщина сплэта  $h_s$ . Сплайн-аппроксимация на основе массива «опорных вершин» рассчитывает Z-координаты нижней поверхности сплэта, соответствующие рельефу напыляемой поверхности. С учетом выбранной морфологии сплэта (рис. 3) и скорректированной толщины  $h_s$  рассчитываются Z-координаты верхней поверхности сплэта, рельеф которой оказывается подобен нижней поверхности (рис. 2). Z-координаты нижней и верхней поверхностей сплэта, соответствующие X- и Y-координатам узловых точек сетки разбиения в плоскости XY, как результат процесса укладки сплэта на напыляемую поверхность запоминаются в файле на внешнем диске, на основе которого в подсистеме «Функциональные характеристики покрытия» рассчитываются такие характеристики, как пористость  $P\%$ , шероховатость  $R_a$ , адгезионная прочность сцепления покрытия с основой, строятся шлифы (вертикальные сечения) покрытий.

Программный пакет в процессе моделирования укладки сплэтов на напыляемую поверхность дает возможность применять на выбор одну из двух модельных «морфологий» сплэта: рисунок 3(а) – в форме тонкого цилиндра (диска) и рисунок 3(б) – в форме «сглаженного» сплэта (шаг дискретизации координат X и Y, соответствующий рисунку, при

моделировании намеренно был выбран не малым, поэтому ступенчатость профиля формы сглаженного сплэта довольно заметна).

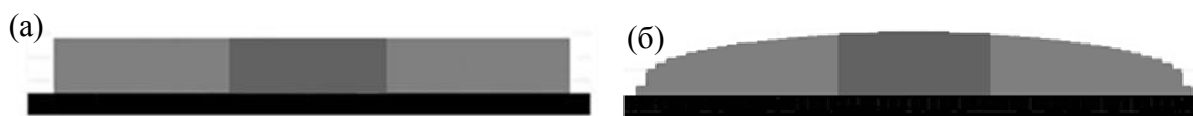


Рис. 3. Сечения модельных сплэтов (подложка – черный цвет, ядро сплэта – темно-серый фон, периферийная кольцевая часть сплэта – светло-серый фон):

(а) – цилиндр; (б) – сглаженный сплэт

Угол и траектория затекания расплава в углубление рассчитываются по определенным формулам (см. формулы (43) и (44) отчета за 1-ый промежуточный этап проекта).

#### 4.1.2. Описание структуры и основных программных единиц программного комплекса, реализованного на языке C/C++ с использованием библиотеки QT

Создан главный класс MainClass, на базе которого создается динамический экземпляр этого класса (mainClassVar) и запуск его осуществляет единственный метод Work(), выполняющий все функции, начиная от считывания данных из справочного файла до формирования всего покрытия в процессе стохастической укладки множества сплэтов, размерные параметры которых определяются набором «ключевых физических параметров (КФП)» напыляемых частиц. В процессе послойной укладки в соответствии с равномерным законом распределения генерируются координаты центров частиц. В сгенерированном множестве координат центров частиц определяется набор не перекрывающихся укладываемых на поверхность сплэтов, которые можно параллельными процессами (функциями) укладывать на поверхность.

Описание класса MainClass по методам:

```
class MainClass
{
public:
    MainClass();
    int Work();
private:
    int GenerationCoating(IniClass *iniVar, TFildType &fild, kub &up);
    int GenShablon(int maxSize, TShablonType &s, TVershArr &src_array, int &csrc_array);
    int recurent (int i, int j, int n, int hsrezsize, THsrezArrType &hsrez);
    void zalivka ( int hsrezsize, THsrezArrType &hsrez );
    void med_filtr( TVershArr &a, int &c );
    void GetSmeshenie (double x1, double y1, double z1, double x2, double y2, double z2, double x3,
double y3, double z3, int Rs, int Rp, double koef_mediani, int &smx, int &smy);
    void GetPredok (int izvx, int izvy, int xc, int yc, int R, int &rezX, int &rezY );
    void GetLast (int izvx, int izvy, int xc, int yc, int Rs, int &rezX, int &rezY );
    double RaschetProvisaniya (IniClass *iniVar, double Ri, double Si_pred, double Si_pred_R,
double hs, double Rp, double Rs, double Up, double divizor );
```

```

    int recurent3 (int j, int i, int n, int crkl_Rs_1, int sub_crkl_center_x, int sub_crkl_center_y,
TFildType &subfild2, Tvolna &volna);
    void nurbs_surface(p2 p, p4 weight, p3x uknot, p3y vknot, int m, int n, int div_x, int div_y, r1
&output, SplatVariablesClass *vrb, IniClass *iniVar );
    double GetH (int x, int y, int xc, int yc, int R , double h);
    void dropkub_init (int ty, int tx, char b1, char b2, double r1, double r2, kub &up, double &stat_h);
    void dropkub3 (int ty, int tx, versh v1, int b1, int b2, double h, int Ki, TFildType &fild, kub &up,
double &stat_h, CashUP *cashupel );
    void logf (QString s);
    void dumpFildFull (TFildType fild, QString nm);
    void dumpFildZ (TFildType fild, QString nm);
    void dumpVilna (Tvolna fild, QString nm);
    void dumpShablon (TShablonType fild, QString nm);
};

```

Описание методов класса.

1. Конструктор MainClass() «пустой» (ничего не выполняет – можно использовать для развития программы в будущем).
2. Work() – основная рабочая функция. Возвращает 0 в случае успешного завершения.

Алгоритм работы функции Work():

а) *производит считывание параметров из ini-файла (значения входных параметров)*. На следующем этапе модификации программы вместо этого файла будет использоваться класс iniFiles с одним методом Read для считывания параметров настройки из файла. Для хранения считанных параметров настроек имеется класс «IniClass» - это просто большой набор переменных без методов (в Delphi - это переменная структурного типа): программист перед запуском программы инициализирует переменные в интерфейсе. Например, размеры подложки, размер дискретного шага  $\Delta x$  ( $\Delta y$ , как правило, равно  $\Delta x$ ), типы материалов, значения температуры, скорости, все константы, настройки режимов, разновидности механообработки поверхности подложки. Это исходные данные для запуска процедуры моделирования.

б) *считывание свойств материалов*. Определен тип Tmaterial, который объявлен следующим образом:

```

struct Tmaterial
{
    int m_nId;
    TmatName m_Material;
    double m_ROms;
    double m_ROml;
    double m_CPms;
    double m_CPml;
    double m_Lms;
    double m_Lml;
    double m_Tm;

```

```

double m_TBoil;
double m_Lm;
double m_MUml;
double m_SIGml;
double m_LBoil;
double m_AW;
double Ac;
};

```

Изначально в IniClass по номеру в БД определяются типы материалов: частицы, включений, подложки - переменные члены класса называются part\_class, inc\_class, sub\_class, соответственно. Например, код 4 означает Ni. Для того, чтобы произвести чтение свойств материала из БД, используем класс для работы с БД материалов, который называется CCutBoxSet. В классе есть всего один метод int GetMatId (int A, Tmaterial &M), который вызывается несколько раз, при этом вместо A каждый раз вводится число, соответственно, из IniClass.part\_class, IniClass.inc\_class, IniClass.sub\_class. В результате получаем полностью заполненную структуру Tmaterial, где уже проставлены все физические свойства материалов (плотность, температуропроводность и т.д.).

Кроме того, добавлена функция «смешивания» материалов, которой передаются свойства материалов частицы (IniClass.part\_class), включений (IniClass.inc\_class) и объемная концентрация (IniClass.VolCon). Эта функция вызывается в случае моделирования металлокерамического покрытия, чтобы она генерировала усредненные свойства смеси материалов и сохраняла их в IniClass.part\_class (т.е. заменяла свойства материала частицы на свойства материала частицы с включениями).

в) генерация массива подложки (fld) и массива внутренней структуры (ip) покрытия.

Массив fld - это двумерный массив Z-координат вершин поверхности плюс цвет поверхности. Изначально Z=1, цвет 0 – зеленая подложка. Затем производится укладка сплэта: Z=1+толщина сплэта для всех его точек с координатами (x,y), соответствующими дискретным координатам (iΔx, jΔy). Цвет точек ядра соответствует индексу 1, периферийное кольцо имеет индекс цвета 2. В качестве примера (рис. 4) с такими индексами цветов приведен результат моделирования двух сплэтов (с помощью программного пакета авторов в среде Delphi).

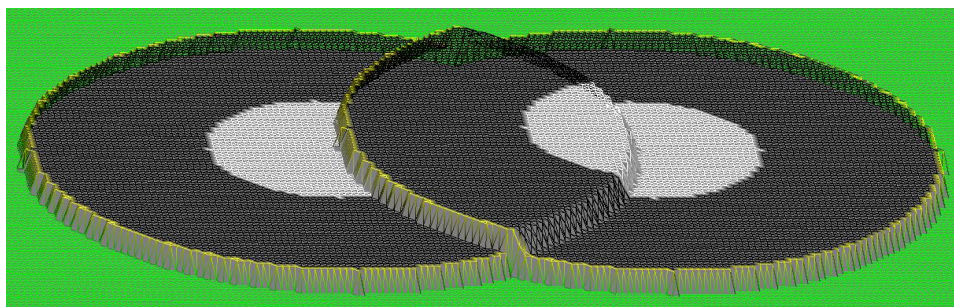


Рис. 4. Результат укладки двух перекрывающихся сплэтов

Массив структуры покрытия `up` - это двумерный массив элементов структурного типа. Структурный тип определяется следующим образом:

```
struct pair {  
    double p0;  
    double s1;  
    double s2;  
    char tp;  
    char slov;  
    int num;};
```

Таким образом, массив `up` используется для хранения информации о слоистой структуре объема покрытия в отличие от массива `fil`, который хранит информацию о текущем состоянии поверхности покрытия. Массив `cup` имеет размерности `vrb.fild_size_x_d` и `vrb.fild_size_y_d` и хранит значения индексов верхнего занятого слоя в массиве `up` (рис. 5).

Массив `cup` вначале инициализируется нулями. Инициализация массива `up` не требуется, т.к. изначально массив пуст, а элементы будут добавляться в него по мере необходимости.

По мере роста толщины напыляемого покрытия увеличивается число слоев (переменная `sloev`) в массиве `up`. Как только значение становится больше определенного наперед заданного значения, рост переменной `sloev` останавливается, а элементы из массива `up` переносятся на жесткий диск путем добавления в конец файла стандартными средствами управления файлами. При этом значения элементов массива `cup` соответственно уменьшаются. Запись на жесткий диск происходит по мере необходимости согласно правилу «обслуживания очереди» (правило FIFO – «first input – first output»). Данное действие позволяет экономить оперативную память, которая вследствие больших объемов массивов «исчерпывается» примерно через 5-20 слоев (в зависимости от исходных размеров основания подложки или КП).

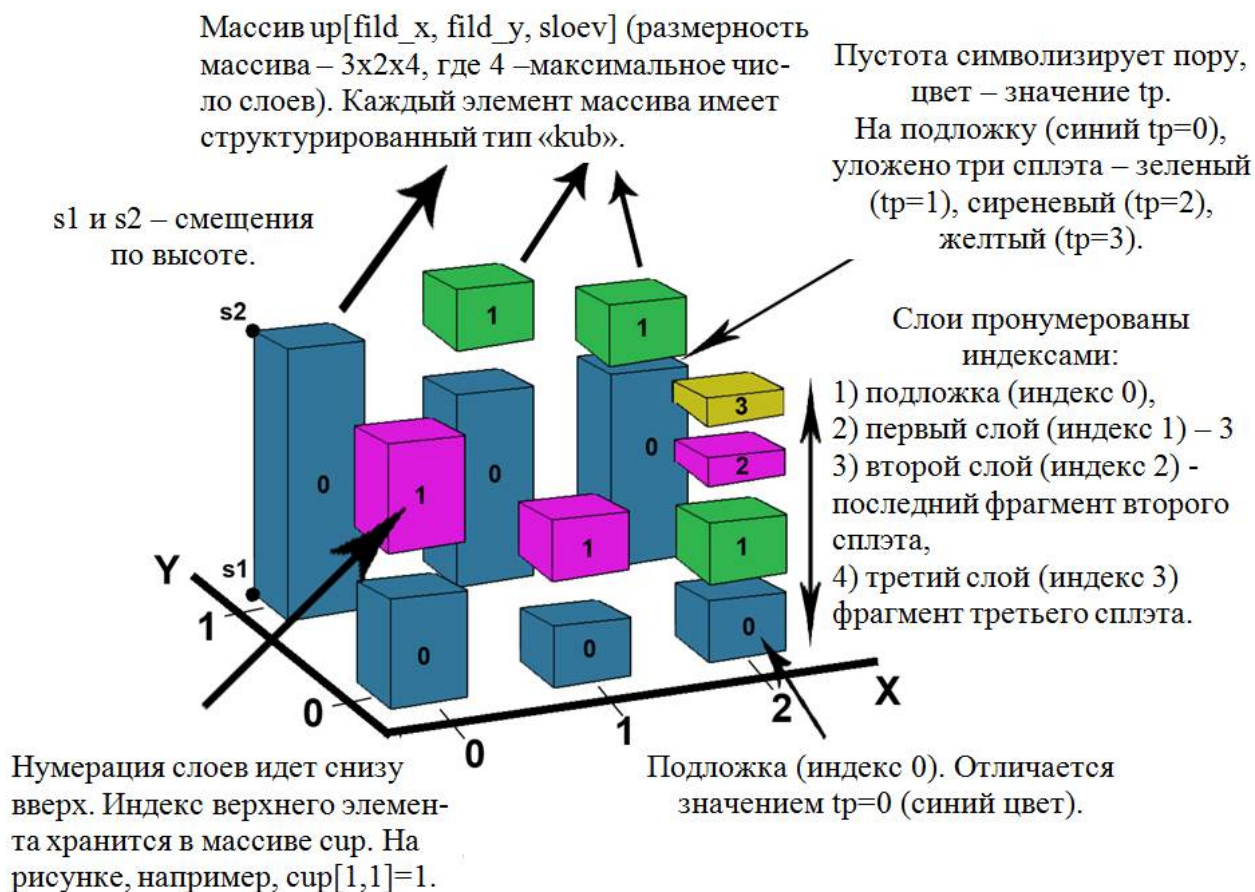


Рис. 5. Структура массива `up`, иллюстрирующая режим хранения объема покрытия в виде метаслоев

Пояснения к значениям полей структуры `struct pair`:

- Если для точки с координатами  $(i\Delta x, j\Delta y)$  значение `p0` равно `s2` нижележащего слоя, тогда это обозначает «пору», т.е. «пора» по высоте вдоль оси `Z` занимает положение от `p0=s2` нижележащего слоя до `s1` текущего слоя, а от `s1` до `s2` текущего слоя – заполненная часть материалом сплэта.
- Индекс `num` в результате укладки очередного сплэта увеличивается на 1.

г) Вызов функции `GenerationCoating` для генерации покрытия.

Вызов функции осуществляет генерацию покрытия, для которой передаются все имеющиеся данные:

```
int GenerationCoating(IniClass *iniVar, TFildType &fild, kub &up);
```

Таким образом, в пунктах а) – г) было кратко изложены особенности выполнения функции `Work()`. Ниже приведено краткое описание особенностей выполнения основной функции `GenerationCoating(IniClass *iniVar, TFildType &fild, kub &up)` в составе функции `Work()`.

Описание функции `GenerationCoating()`

- Сначала вычисляется максимальный возможный целочисленный радиус сплэта, соответствующий определенному количеству дискретов ( $\Delta x$ ).

- Создаются и по необходимости заполняются вспомогательные массивы (размерности зависят от максимального радиуса сплэта): Subfild, Subfild2, subfild3, Subfild4. Эти вспомогательные массивы для Z-координат. Например, реально сгенерированный радиус сплэта (меньше или равный максимального) определит первый массив Subfild. Выполняя последовательно различные операции с массивом «опорных вершин» (волновая прогонка, сплайн-аппроксимация нижней поверхности сплэта по этим вершинам, затем верхней поверхности и т.п.) будут заполняться массивы Subfild2, subfild3, Subfild4.
- Перед сплайн-аппроксимацией поверхностей сплэта определяется двумерный массив «опорных вершин», используемый для волнового алгоритма с названием volna.

Массив «опорных вершин» объявлен как двумерный массив элементов структурного типа volnai. Элемент структурного типа volnai имеет следующее объявление:

```
struct Tvolna_memory // память волны
{
    int r ;
    double Zreal;
    double dh;};
struct volnai // волна
{
    unsigned char Ki;
    Tvolna_memory Si};
```

Здесь  $K_i$  – это коэффициент, кодирующий состояние точки нижней поверхности сплэта: первое значение в случае расположения точки над «порой»; второе значение – когда точка поверхности сплэта совпадает с точкой поверхности покрытия (при течении расплава частицы по покрытию); третье значение – когда при растекании по поверхности покрытия расплава частицы имеется высокое препятствие. Zreal - это Z-координата поверхности покрытия, с которой начинается «полет» расплава частицы над «порой» при последующем ее затвердевании на поверхности покрытия в виде сплэта. Величина  $r$  - это текущее значение радиуса при растекании расплава частицы (в плоскости XY), соответствующего моменту отрыва от поверхности покрытия и «полету» над «порой». Величина Dh - это накопленное значение высоты расплава частицы в процессе преодоления препятствий.

- Для обработки координат точек дискретной сетки волновым алгоритмом определен вспомогательный массив, соответствующий проекции кругового сплэта на плоскость XY. В дискретном варианте определяется массивом «шаблон узловых точек (ШУТ)», представленным в программе как массив shablon\_array. Обход точек этого массива реализуется «полярной» системой координат (радиус и угол обхода). Для  $r=0$  мы имеем только одну точку смещения (0,0). Для  $r=1$  уже 4 точки (0,1) (1,0) (-1,0) (0,-1). И так далее каждый новый радиус определяет больше точек. Массив для ускорения отсортирован по



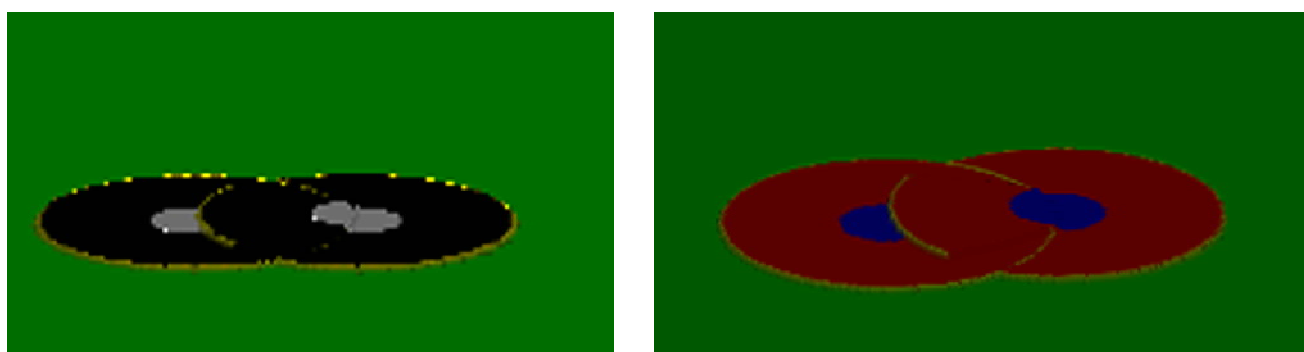
возрастанию угла для каждой точки, чтобы обход потом был по кругу. Для заполнения массива используется функция `GenShablon()`.

- Перед укладкой сплэтов на подложку (формирование первого монослоя покрытия) в массивах `fild` и `up` присваиваем всем Z-координатам 1, а цвет, равный цвету подложки (высота, равная 1-му дискрету, определяет стартовые значения толщины покрытия, которые в процессе укладки сплэтов будут увеличиваться). Для этой цели реализована функция `dropkub_init()`, записывающая значения одновременно в массивы `fild` и `up`.
- При укладке каждого очередного сплэта имеется экземпляр класса временных переменных (`SplatVariablesClass`), в который переписываются данные из `IniClass`, т.е. это: максимальный радиус сплэта, размеры массивов, координаты точки соударения частицы с поверхностью (координаты центра сплэта) и все другие переменные, которые нужны будут при работе и будут в последствии меняться от сплэта к сплэту.
- В каждой итерации цикла генерации сплэтов выполняются следующие действия:
  1. генерируются параметры текущего сплэта, используя датчики псевдослучайных чисел для получения размера частицы, координат точки соударения с поверхностью. В качестве усовершенствования программы создана функция `magic_real()`, которая возвращает параметры сгенерированной частицы и сплэта. В теле функции `magic_real()` используются функции `advcalculator_metal`, `advcalculator_oxid`, `advcalculator_metKer`. Первая вычисляет параметры сплэта в случае металлической частицы, вторая – в случае оксидной (керамической) частицы, третья – в случае металлокерамики.
  2. Определяется участок поверхности, на который укладывается очередной сплэт, и эта информация сохраняется в классе `SplatVariablesClass`.
  3. Выполняется алгоритм предварительной «заливки» ядра сплэта методом «подъема уровня» с помощью соответствующей функции `zalivka()`.
  4. Результат действий по заливке ядра сплэта функцией `zalivka()` сохраняется вновь записью в файл `fild`.
  5. Копируем в `subfild` часть массива `fild`, соответствующую укладываемому сплэту (это начало укладки сплэта).
  6. Производится медианная фильтрация Z-координат точек окружности (границы) ядра сплэта для того, чтобы определить направление «уклона» плоскости ядра, другими словами, направление стекания (смещения) по направлению уклона массы расплава частицы. Это выполняют функции `med_filtr()` и `GetSmeshenie()`. Результаты сохраняются в `SplatVariablesClass`.
  7. Далее заполняется массив `volna` с помощью вспомогательного массива `shablon_array` и волнового алгоритма.

8. Далее производится заливка в периферийной зоне сплэта (за ядром) с помощью значений параметра  $K_i$ , которые соответствуют условию затекания и не равны значению  $K_i$ , которые кодируют высокое препятствие. Вторая заливка реализуется функцией `resurgent3()`.
9. Затем производится сплайн-аппроксимация нижней поверхности сплэта с помощью функции `nurbs_surface` и позднее определяется верхняя поверхность сплэта.
10. Производится окончательная сборка данных из массива `Subfild4` для записи в массив `up`. Здесь используется функция `GetH()`, которая для точек верхней поверхности сплэта учитывает функцию профиля сплэта (например, в виде тонкого диска, либо профиль «сглаженного» сплэта)
11. Добавление данных в массив `up` выполняется функцией `dropkub3()`. Там же идет вытеснение массива `up` на жесткий диск.

Замечание: итерации по укладке каждого сплэта продолжают до достижения счетчика сплэтов до заданного в начале процедуры количества сплэтов (либо по достижению необходимой толщины напыляемого покрытия). Функция `logf` на каждой итерации выводит на диск параметры укладываемых сплэтов.

В качестве результатов тестирования вновь созданного программного комплекса для моделирования покрытий ниже на рисунке 6 приведены результаты укладки двух сплэтов на поверхность с помощью двух программных комплексов (реализованных в среде Delphi и на языке C/C++ с использованием библиотеки QT и библиотеки MPI-функций). Как видно из рисунка 6, визуальные изображения (в качественном смысле) повторяют друг друга, а значения в соответствующих массивах различаются, начиная с 10 разряда после запятой и выше.



а)

б)

Рис. 6. Результаты моделирования укладки пары сплэтов: а – результат моделирования укладки 2-х сплэтов с помощью программного пакета, реализованного в среде Delphi; б – результат моделирования укладки 2-х сплэтов с помощью программного пакета, реализованного на языке C/C++ с использованием библиотеки QT и библиотеки MPI-функций

#### 4.1.3. Список цитируемых публикаций к подразделу 4.1

1. Heimann R. B. Plasma-Spray Coating. 2nd edition. — VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim, VCH Publishers, Inc., New York, 1996. — 339 p.
2. Solonenko O.P., Blednov V.A., Jordan V.I. Computer design of thermal sprayed metal powder coatings // Thermophysics and Aeromechanics, 2011. — Vol. 18. — No. 2. — P. 255-272.
3. Solonenko O.P., Jordan V.I. and Blednov V.A. Stochastic computer simulation of cermet coatings // Advances in Materials Science and Engineering. - 2015, -Vol. 2015. - Article ID 396427. <http://dx.doi.org/10.1155/2015/396427>
4. Solonenko O.P. State-of-the-art of thermophysical fundamental plasma spraying // In coll.: "Thermal Plasma and New Materials Technology" / Eds. O.P. Solonenko and M.F.Zhukov. — Cambridge Interscience Publishing, England, 1995 — Vol. 2. — P. 7-96.
5. Solonenko O.P The thermophysical foundations of plasma spraying of coatings from oxide powders // Phys. Mesomech., 2001. — Vol. 4. — No. 6. — P. 41-52.
6. Madejski J. Solidification of droplets on cold surface // J. of Heat and Mass. Transfer., 1976. — Vol. 19, pp. — 1009-1013.
7. Иордан В.И., Бледнов В.А., Солоненко О.П. В-сплайновые поверхности в алгоритме адаптации формы сплэтов к изменяемой топологии напыляемой поверхности покрытия при моделировании формирования его структуры // Информационные технологии и математическое моделирование (ИТММ-2010): Материалы IX Всероссийской научно-практ. конференции с международным участием (19-20 ноября 2010 г.). — Томск: Изд-во Том. ун-та, 2010. — Ч. 2. — С.155-160.

#### 4.2. Определение оптимальных режимов напыления покрытий на основе титан-алюминиевых интерметаллидных сплавов и предсказание их функциональных характеристик методом компьютерного моделирования

*Приведены результаты стохастического моделирования формирования слоистой структуры и характеристик (пористость, шероховатость, адгезия) металлических покрытий из порошков на основе алюминидов титана ( $TiAl_3$ ,  $TiAl$ ,  $Ti_3Al$ ) в условиях, характерных для атмосферного плазменного напыления. Определены оптимальные режимы напыления покрытий в аспекте наилучших показателей их функциональных (эксплуатационных) характеристик.*

**Введение.** В качестве перспективных конструкционных материалов можно выделить интерметаллидные сплавы в виде алюминидов титана, например,  $TiAl_3$ ,  $TiAl$ ,  $Ti_3Al$ . Совокупность малой плотности, прочностных свойств, высокой коррозионной стойкости, жаростойкости и жаропрочности делает их весьма привлекательными для различных областей

машиностроения, в т.ч. в авиационной технике и аэрокосмической инженерии для создания защитных покрытий как распространенных конструкционных материалов [1]. Сплавы на основе TiAl и Ti<sub>3</sub>Al являются перспективными материалами для изготовления труб, опор, корпусов компрессоров, фильтров воздушных камер низкого давления, сопел, лопаток компрессоров и турбин авиационных двигателей, а также для изготовления элементов оболочек космических аппаратов и элементов систем тепловой защиты гиперзвуковых летательных аппаратов. Интерметаллическое соединение TiAl используется для изготовления выпускных клапанов, деталей турбокомпрессоров и других элементов автомобильных двигателей, вместо жаропрочных нержавеющей сталей и никелевых сплавов. Однако алюминидам титана, как и большинству интерметаллидов характерно «охрупчивание» в широком диапазоне температур, что снижает область их практического применения в машиностроении как конструкционных материалов. Повышение механических свойств титан-алюминиевых интерметаллидных сплавов достигают путем легирования данного сплава следующими элементами: Hf, Mo, Nb, Ta, V, W, Cr, Zr. Например, нанесением износостойких покрытий из сплава Ti-43,5%Al-4,5%Nb-1,7%Mo (концентрации компонентов в ат.%) на турбинные лопатки авиационных двигателей достигается надежность и долговечность при температурах от 650 до 900 °C [2]. Кроме того, сплав Ti-48%Al-2%Cr-2%Nb является одним из эффективных сплавов на основе TiAl. Этот сплав обладает хорошим сочетанием пластичности и технологичности, высокой эффективностью термостойкости, коррозионной стойкости [2]. Сплав Ti-22%Al-1,5%Nb-0,25%Cu (концентрация в мас.%) на основе интерметаллида Ti<sub>3</sub>Al относится к отечественным сплавам и характеризуется достаточной прочностью и пластичностью [2].

При напылении таких покрытий газотермическими методами (плазменным, детонационным, HVOF и др.) важным аспектом является исследование путей управления фазовым составом и микроструктурой покрытий для таких систем, химически чувствительных к продуктам детонации топливно-кислородной газовой смеси, а также для композиционных материалов, в которых возможно химическое взаимодействие между фазами при повышенных температурах, характерных для детонационного напыления.

При напылении алюминидов титана нежелательны реакции окисления [3]. Образование новых фаз способствует увеличению твердости покрытий. Соединение TiAl частично разлагается с образованием Ti<sub>3</sub>Al, которое в условиях напыления подвергается разложению в небольшой степени, но не подвергается воздействию азота. Для напыления покрытий на основе интерметаллидов TiAl, Ti<sub>3</sub>Al и TiAl<sub>3</sub> используют порошки с фракциями в диапазоне 0-70 мкм. Покрытия, в образовании которых задействованы химические реакции, приобретают

иерархическую структуру практически с неизменным химическим составом фаз в покрытиях, но может изменяться относительное содержание фаз [3].

**4.2.1. Методические особенности моделирования покрытий и параметрические условия для вычислительных экспериментов (ВЭ).** При моделировании (проектировании) слоистой структуры покрытий и предсказания их функциональных характеристик использовался ранее разработанный и апробированный программный комплекс (программная система параллельного выполнения цикла вычислительных экспериментов с различными наборами исходных «ключевых физических параметров (КФП)» напыляемых частиц порошка и подложки). В процедуре моделирования реализован подход стохастического напыления частиц (метод Монте-Карло) с учетом изменяющегося рельефа напыляемой поверхности на основе экспериментально апробированных теоретических решений, адекватно реализующих сопряженные процессы и особенности гидродинамического растекания расплава частиц в точке соударения с поверхностью и процессы затвердевания расплава растекшихся на поверхности частиц (сплэтов) [4-7]. При этом возможны четыре сценария формирования сплэтов: 1. растекание и одновременное затвердевание капли на твердой основе; 2. растекание и одновременное затвердевание капли и локальное подплавление основы в месте контакта с каплей; 3. растекание капли по поверхности твердого основания и последующее охлаждение и затвердевание растекшегося слоя; 4. растекание капли, сопровождаемое одновременным локальным плавлением основания с последующим

В вычислительных экспериментах по моделированию покрытий на основе соединений  $Ti_3Al$ ,  $TiAl$  и  $TiAl_3$  в качестве подложки использовалась пластина размером 2x2 мм из стали марки 45 (температура подложки равна 400 К). В практическом плане теплофизические свойства  $Ti_3Al$  (а также плотность, динамическая вязкость и др.) незначительно отличаются от аналогичных свойств легированного сплава  $Ti-22\%Al-1.5\%Nb-0.25\%Cu$  (концентрация в мас.%). Поэтому результаты моделирования для  $Ti_3Al$ -покрытий, приведенные ниже в таблице, и покрытий на основе сплава, близкого по составу к  $Ti_3Al$ , можно считать общими в пределах погрешности моделирования характеристик (порядка 3-5%). Аналогична ситуация для сплавов  $Ti-43,5\%Al-4,5\%Nb-1,7\%Mo$  и  $Ti-48\%Al-2\%Cr-2\%Nb$  (концентрация в ат.%), которые по своим теплофизическим свойствам (а также по плотности и вязкости и т. д.) сопоставимы с интерметаллическим соединением  $TiAl$ . Представляет интерес также прогнозирование свойств покрытий на основе интерметаллического соединения  $TiAl_3$  в сравнении со свойствами покрытий на основе интерметаллидов  $Ti_3Al$  и  $TiAl$ .

В вычислительных экспериментах при моделировании  $Ti_3Al$ -покрытий температура частиц  $T_p$  варьировалась в диапазоне от 1450 до 1850 К (температура плавления  $\alpha_2$ -фазы  $Ti_3Al$  около 1430 К); для моделирования  $TiAl$ -покрытий температура частиц  $T_p$  варьировалась в

диапазоне от 1750 до 2150 К (температура плавления  $\gamma$ -фазы TiAl около 1733) и для моделирования TiAl<sub>3</sub>-покрытий температура частиц  $T_p$  варьировалась в диапазоне от 1700 до 2100 К (температура плавления фазы TiAl<sub>3</sub> около 1668 К). Среднее значение диаметра частиц  $D_p$  было равно 30 мкм как для режима плазменного напыления ( $U_p = 200$  и  $250$  м/с), так и для высокоскоростного режима напыления ( $U_p = 500, 600$  и  $700$  м/с). Кроме того, были проведены вычислительные эксперименты при варьировании диаметра частиц  $D_p$  в диапазоне от 20 до 70 мкм. При этом фиксировались следующие значения температуры частиц: 1450 К – для Ti<sub>3</sub>Al, 1750 К – для TiAl, 1700 К – для TiAl<sub>3</sub>.

**4.2.2. Результаты вычислительных экспериментов.** Результаты моделирования покрытий (толщиной 100 мкм) на основе интерметаллических соединений Ti<sub>3</sub>Al, TiAl и TiAl<sub>3</sub> сведены в таблицы 1, 2, 3 и 4, в которых, помимо характеристик покрытий, приведены соответствующие «ключевые физические параметры (КФП)» частиц порошка. В этих таблицах (таблицы 1, 2, 3 и 4) указаны обозначения диаметра сплэта –  $D_s$  (его значения выражены в микронах), и нормированное значение диаметра сплэта –  $\bar{D}_s = D_s/D_p$  (его значения выражены в относительных единицах, о.е.).

Другими словами это значение  $\bar{D}_s$  называется «коэффициентом растекания» частиц расплава. Значение коэффициента растекания для металлических сплэтов не должен превышать значение 4,5 (начиная с 5, целостность формы сплэтов не гарантируется, [8]). Наряду с толщиной сплэта  $h_s$  в таблицах приведена нормированная величина  $\bar{h}_s = h_s/D_p$ , значение  $P\%$  обозначает пористость покрытия, а  $R_a$  обозначает параметр шероховатости поверхности покрытия.

Величина  $\bar{\sigma}_{adg}$  – это относительная адгезионная прочность связи первого монослоя покрытия с подложкой. Другими словами, это отношение абсолютной адгезионной прочности покрытия к предел прочности «на разрыв» для интерметаллического соединения, которое является основой покрытия, т.е.  $\bar{\sigma}_{adg}$  – это доля от максимально возможной абсолютной адгезионной прочности покрытия. Прочность «на разрыв» соединения TiAl составляет 1100 МПа [2], а прочность «на разрыв» соединения Ti<sub>3</sub>Al – того же порядка (около 1000 МПа [2]). Сравнение фаз Ti<sub>3</sub>Al, TiAl и TiAl<sub>3</sub> по микротвердости [1] позволяет получить для фазы TiAl<sub>3</sub> косвенную оценку прочности «на разрыв» около 500 МПа. Значение  $T_c$  в таблицах показывает температуру контакта в точке столкновения частицы расплава с поверхностью (в первом слое покрытия – с подложкой, а в следующих слоях – с напыленным слоем из тех же частиц). Как видно из таблиц 1 и 2, при напылении Ti<sub>3</sub>Al- и TiAl-покрытий, а именно при напылении второго и последующих монослоев, происходит переключение с 1-го на 3-ий сценарий формирования сплэтов, обозначенное в таблицах в столбце «Сценарий» как 1→3).

Таблица 1

Параметры частиц и характеристики  $Ti_3Al$ -покрытий, напыляемых плазменным методом (APS)

$T_p$ , К	$U_p$ , m/s	$D_p$ , $\mu\text{m}$	$D_s$ , $\mu\text{m}$	$\bar{D}_s$ , r.u.	$h_s$ , $\mu\text{m}$	$\bar{h}_s$ , r.u.	$P$ , %	$R_a$ , $\mu\text{m}$	$\bar{\sigma}_{adg}$ , r.u.	$T_c$ , К	Scenario
1450	100	30	107	3.556	1.58	0.053	12.53	1.767	0.00003	1022	1
1550	100	30	113	3.782	1.40	0.047	13.78	1.538	0.00006	1200	1→3
1650	100	30	121	4.043	1.22	0.041	13.92	1.430	0.0002	1270	1→3
1750	100	30	156	5.186	0.74	0.025	13.85	1.575	0.0089	1339	3
1850	100	30	156	5.186	0.74	0.025	13.82	1.554	0.0203	1409	3
1450	100	20	64	3.223	1.28	0.064	11.14	1.480	0.00002	1022	1
1450	100	40	153	3.815	1.83	0.046	15.10	2.208	0.00003	1130	1→3
1450	100	50	201	4.028	2.05	0.041	15.79	3.048	0.00004	1130	1→3
1450	100	60	357	5.957	1.13	0.019	15.40	3.665	0.0007	1130	3
1450	100	70	430	6.144	1.24	0.018	15.61	5.253	0.0009	1130	3
1450	150	30	118	3.926	1.30	0.043	11.33	1.581	0.00002	1130	1→3
1550	150	30	169	5.624	0.63	0.021	11.02	1.537	0.00077	1200	3
1650	150	30	169	5.624	0.63	0.021	11.18	1.444	0.00235	1270	3
1750	150	30	169	5.624	0.63	0.021	11.25	1.508	0.00574	1339	3
1850	150	30	169	5.624	0.63	0.021	11.14	1.565	0.01357	1409	3
1450	150	20	71	3.556	1.05	0.053	10.84	1.485	0.00001	1022	1
1450	150	40	238	5.957	0.75	0.019	12.04	2.370	0.00033	1131	3
1450	150	50	311	6.229	0.86	0.017	12.82	3.229	0.00045	1131	3
1450	150	60	388	6.461	0.96	0.016	13.24	4.168	0.00051	1131	3
1450	150	70	466	6.663	1.05	0.015	14.22	5.675	0.00059	1131	3
1450	500	30	215	7.156	0.39	0.013	0.93	0.552	0.00007	962	3

Таблица 2

Параметры частиц и характеристики  $TiAl$ -покрытий, напыляемых плазменным методом (APS)

$T_p$ , К	$U_p$ , m/s	$D_p$ , $\mu\text{m}$	$D_s$ , $\mu\text{m}$	$\bar{D}_s$ , o.e.	$h_s$ , $\mu\text{m}$	$\bar{h}_s$ , o.e.	$P$ , %	$R_a$ , $\mu\text{m}$	$\bar{\sigma}_{adg}$ , o.e.	$T_c$ , К	Scenario
1750	200	30	101	3.366	1.77	0.059	10.02	1.740	0.0002	1160	1
1850	200	30	106	3.525	1.61	0.054	9.95	1.648	0.0004	1195	1
1950	200	30	111	3.701	1.46	0.049	8.04	1.633	0.0006	1236	1→3
2050	200	30	117	3.899	1.32	0.044	7.91	1.600	0.0014	1278	1→3
2150	200	30	181	6.028	0.55	0.018	8.02	1.551	0.1000	1339	3
1750	200	20	61	3.052	1.43	0.072	8.92	1.544	0.0001	1160	1
1750	200	40	144	3.609	2.05	0.051	10.25	2.063	0.0003	1160	1
1750	200	50	191	3.811	2.29	0.046	10.32	2.982	0.0003	1339	1→3
1750	200	60	239	3.985	2.52	0.042	10.49	3.908	0.0003	1339	1→3
1750	200	70	500	7.141	0.92	0.013	10.91	6.091	0.0106	1339	3
1750	250	30	107	3.553	1.58	0.053	8.26	1.682	0.0002	1160	1
1850	250	30	112	3.721	1.44	0.048	8.12	1.445	0.0004	1200	1
1950	250	30	117	3.909	1.31	0.044	4.73	1.905	0.0005	1478	1→3
2050	250	30	189	6.303	0.50	0.017	4.67	1.845	0.0397	1548	3
2150	250	30	189	6.303	0.50	0.017	4.82	1.940	0.0749	1618	3
1750	250	20	64	3.220	1.29	0.064	8.15	1.394	0.0001	1160	1
1750	250	40	152	3.811	1.84	0.046	5.60	2.412	0.0002	1339	1→3
1750	250	50	201	4.025	2.06	0.041	6.15	3.167	0.0002	1339	1→3
1750	250	60	434	7.240	0.76	0.013	6.95	4.560	0.0074	1339	3

1750	250	70	523	7.467	0.84	0.012	8.49	5.826	0.0087	1339	3
1750	500	30	217	7.240	0.38	0.013	0.85	0.470	0.002	1160	1→3

Таблица 3

Параметры частиц и характеристики TiAl<sub>3</sub>-покрытий, напыляемых плазменным методом (APS)

$T_p$ , К	$U_p$ , m/s	$D_p$ , μm	$D_s$ , μm	$\bar{D}_s$ , r.u.	$h_s$ , μm	$\bar{h}_s$ , r.u.	$P$ , %	$R_a$ , μm	$\bar{\sigma}_{adg}$ , r.u.	$T_c$ , К	Сце- нарий
1700	200	30	83	2.781	2.59	0.086	8.73	2.374	0.0031	1105	1
1800	200	30	89	2.972	2.26	0.075	9.16	2.240	0.0062	1148	1
1900	200	30	96	3.201	1.95	0.065	9.51	1.937	0.0147	1195	1
2000	200	30	104	3.481	1.65	0.055	9.94	1.809	0.0310	1245	1
2100	200	30	115	3.834	1.36	0.045	10.31	1.525	0.0615	1299	1
1700	200	20	51	2.526	2.09	0.104	7.68	2.066	0.0019	1105	1
1700	200	40	119	2.980	3.00	0.075	9.29	2.500	0.0042	1105	1
1700	200	50	157	3.144	3.37	0.067	9.74	2.673	0.0054	1105	1
1700	200	60	197	3.286	3.71	0.062	9.99	3.020	0.0061	1105	1
1700	200	70	239	3.411	4.01	0.057	10.00	3.614	0.0079	1105	1
1700	250	30	88	2.934	2.32	0.077	8.48	2.204	0.0024	1105	1
1800	250	30	94	3.136	2.03	0.068	8.56	1.962	0.0053	1148	1
1900	250	30	101	3.379	1.75	0.058	8.71	1.805	0.0108	1194	1
2000	250	30	110	3.675	1.48	0.049	8.95	1.617	0.0227	1245	1
2100	250	30	121	4.049	1.22	0.041	8.79	1.487	0.0475	1298	1
1700	250	20	53	2.663	1.88	0.094	7.43	1.886	0.0016	1105	1
1700	250	40	126	3.144	2.70	0.067	9.00	2.687	0.0031	1105	1
1700	250	50	166	3.318	3.03	0.061	9.19	2.588	0.0043	1105	1
1700	250	60	208	3.468	3.33	0.055	9.14	3.415	0.0053	1105	1
1700	250	70	252	3.601	3.60	0.051	9.56	3.901	0.0058	1105	1

Таблица 4

Параметры частиц и характеристики TiAl<sub>3</sub>-покрытий, напыляемых методами HVOF, D-Gun Spraying

$T_p$ , К	$U_p$ , m/s	$D_p$ , μm	$D_s$ , μm	$\bar{D}_s$ , r.u.	$h_s$ , μm	$\bar{h}_s$ , r.u.	$P$ , %	$R_a$ , μm	$\bar{\sigma}_{adg}$ , r.u.	$T_c$ , К	Сце- нарий
1700	500	30	104	3.468	1.66	0.055	3.00	1.605	0.0013	1105	1
1800	500	30	111	3.710	1.45	0.048	2.47	1.605	0.0028	1148	1
1900	500	30	120	4.000	1.25	0.042	1.98	1.384	0.0055	1195	1
2000	500	30	243	8.115	0.30	0.010	1.07	0.396	0.2696	1529	3
2100	500	30	243	8.115	0.30	0.010	1.05	0.457	0.3446	1600	3
1700	600	30	109	3.626	1.52	0.051	1.41	1.656	0.0011	1105	1
1800	600	30	116	3.879	1.33	0.044	1.10	1.448	0.0022	1148	1
1900	600	30	252	8.416	0.28	0.009	0.18	0.572	0.1127	1459	3
2000	600	30	252	8.416	0.28	0.009	0.18	0.530	0.2376	1529	3
2100	600	30	252	8.416	0.28	0.009	0.19	0.510	0.3699	1600	3
1700	700	30	113	3.764	1.41	0.047	0.70	1.573	0.0009	1105	1
1800	700	30	121	4.028	1.23	0.041	0.56	1.640	0.0018	1148	1
1900	700	30	260	8.68	0.27	0.009	0.003	1.954	0.1002	1459	3
2000	700	30	260	8.68	0.27	0.009	0.003	2.128	0.1929	1529	3



2100	700	30	260	8.68	0.27	0.009	0.004	2.141	0.3379	1600	3
1700	500	20	67	3.362	1.18	0.059	2.69	1.539	0.0018	1148	1
1700	500	30	111	3.710	1.45	0.048	2.48	1.572	0.0028	1148	1
1700	500	40	159	3.980	1.68	0.042	2.38	2.015	0.0037	1148	1
1700	500	50	449	8.988	0.41	0.008	1.30	0.628	0.1088	1388	3
1700	500	60	559	9.321	0.46	0.008	1.49	0.949	0.1158	1388	3
1700	500	70	673	9.613	0.50	0.007	2.23	3.315	0.1214	1388	3

Как видно из таблиц (таблицы 1, 2, 3 и 4), во всех случаях с увеличением скорости частиц пористость покрытий уменьшается, а с увеличением температуры частиц адгезионная прочность покрытий увеличивается. Кроме того, переход из 1-го сценария формирования сплэта в 3-ий является прямым следствием заметного повышения температуры контакта  $T_c$ . Значения коэффициента растекания, указанные в последних строках таблиц 1 и 2 ( $Ti_3Al$ - и  $TiAl$ -покрытия) для скоростей частиц  $U_p = 500$  м/с, значительно превышают критическое значение 5. Поэтому в режимах высокоскоростного напыления (HVOF, D-Gun Spraying и т.д.) невозможно гарантировать стабильное образование сплэтов и покрытий на основе интерметаллидов  $Ti_3Al$  и  $TiAl$ , а также покрытий на основе сплавов, близких по составу к интерметаллическим соединениям  $Ti_3Al$  и  $TiAl$ . Анализируя значения коэффициента растекания в таблицах 3 и 4, для покрытий на основе соединения  $TiAl_3$  можно сделать вывод, что для таких покрытий могут быть реализованы как метод плазменного напыления APS, так и высокоскоростные методы напыления HVOF и D-Gun Spraying.

Для наиболее перспективного соединения  $TiAl$  в качестве жаростойкого и жаропрочного покрытия, используя данные таблицы 2, ниже приведены графические зависимости пористости  $TiAl$ -покрытий от температуры и диаметра частиц для двух значений скорости частиц (рисунки 1 и 2), а также температурные зависимости прочности сцепления покрытия с подложкой (рисунок 3) для тех же двух значений скорости частиц.

Анализируя последний столбец «Сценарий» в таблице 2, становится ясно, что переход из 1-го в 3-ий сценарий растекания расплава частицы сопровождается заметным увеличением температуры контакта  $T_c$ . Увеличение адгезионной прочности покрытий является прямым следствием повышения температуры контакта  $T_c$ . Из таблицы 2 (а также из рисунков 1 и 3) видно, что увеличение  $T_c$  (переход 1  $\rightarrow$  3) для обоих режимов напыления ( $U_p = 200$  и  $250$  м/с) происходит тогда, когда температура частиц  $T_p$  превышает 1950 К.

Следовательно, при температурах частиц  $T_p$  свыше 1950 К наблюдается значительное увеличение адгезионной прочности покрытий (рис. 3). Кроме того, при температурах частиц  $T_p$  свыше 1950 К тенденция резкого уменьшения пористости покрытий (рис. .1) сменяется тенденцией практически незаметного увеличения.

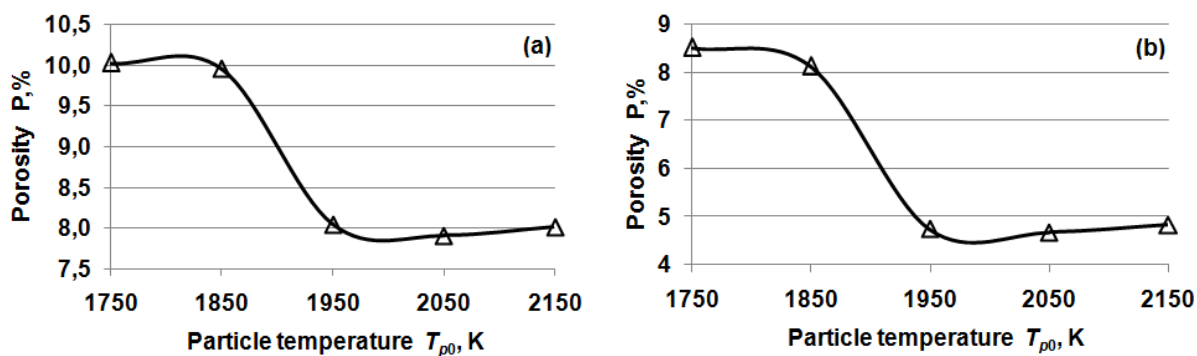


Рис. 1. Температурные зависимости пористости TiAl-покрытий  $P\%$  для двух значений скорости частиц: (a) – скорость частиц  $U_p = 200$  m/s; (b) – скорость частиц  $U_p = 250$  m/s

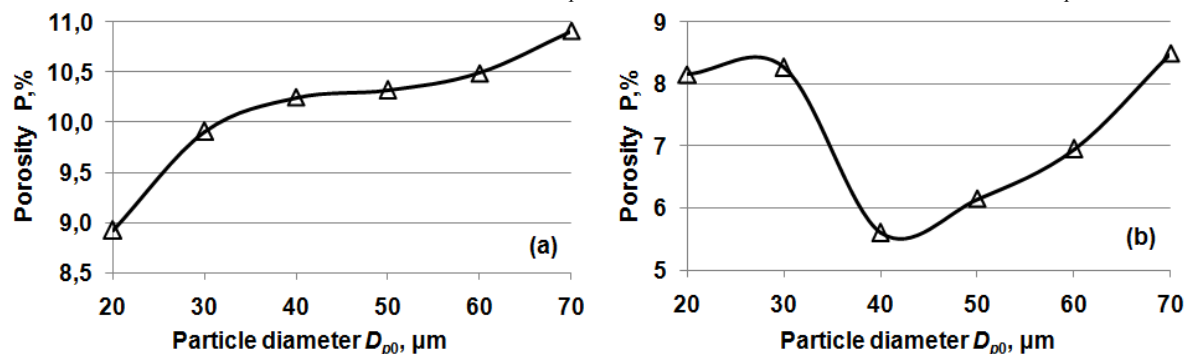


Рис. 2. Зависимости пористости TiAl-покрытий  $P\%$  от диаметра частиц  $D_p$  для двух значений скорости частиц: (a) – скорость частиц  $U_p = 200$  m/s; (b) – скорость частиц  $U_p = 250$  m/s

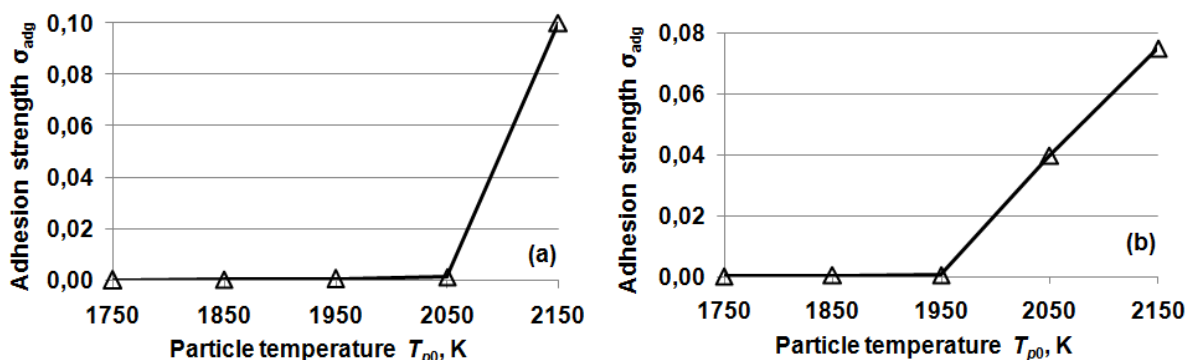


Рис. 3. Температурные зависимости адгезионной прочности связи TiAl-покрытий  $\bar{\sigma}_{adg}$  к подложке для двух значений скорости частиц: (a) – скорость частиц  $U_p = 200$  m/s; (b) – скорость частиц  $U_p = 250$  m/s

Также из таблицы 2 и рисунка 2 видно, что увеличение  $T_c$  (переход 1  $\rightarrow$  3) для обоих режимов напыления ( $U_p = 200$  и  $250$  м/с) происходит тогда, когда диаметр частиц  $D_p$  превышает 40 мкм. Тенденция к увеличению пористости покрытий практически одинакова для обоих режимов ( $U_p = 200$  и  $250$  м/с), но различна для значений диаметра частиц  $D_p$  в диапазоне 20–40 мкм. Для первого режима напыления ( $U_p = 200$  м/с) и для значений диаметра частиц  $D_p$  в диапазоне 20–40 мкм пористость покрытий также увеличивается, как и для значений диаметра частиц выше 40 мкм. Однако во втором режиме ( $U_p = 250$  м/с) значения пористости покрытия падают для значений диаметра частиц в диапазоне 30–40 мкм. Второй

режим напыления ( $U_p = 250$  м/с) предпочтительнее первого, поскольку в целом значения пористости покрытия во втором режиме значительно ниже, чем в первом.

### **Выводы.**

Для стабильного формирования металлических сплэтов и покрытий с учетом условий ( $\bar{D}_s < 5$ ), а также условий минимальной пористости и максимальной адгезионной прочности покрытий, можно считать, что следующие режимы являются оптимальными для напыления покрытий на основе титан-алюминиевых интерметаллидных сплавов.

1. Для напыления покрытий на основе интерметаллических соединений  $Ti_3Al$  может быть реализован метод APS, и его оптимальный режим определяется следующими параметрами частиц (таблица 1): скорость частиц  $U_p = 150$  м/с, температура частиц  $T_p \leq 1500$  К, диаметр частиц  $D_p = (30 \pm 10)$  мкм.

2. Для напыления покрытий на основе интерметаллидов  $TiAl$  может быть реализован метод APS, и его оптимальный режим определяется следующими параметрами частиц (таблица 2): скорость частиц  $U_p = 250$  м/с, температура частиц  $T_p \leq 2000$  К, диаметр частиц  $D_p = (30 \pm 10)$  мкм.

3. Для напыления покрытий на основе интерметаллических соединений  $TiAl_3$  могут быть реализованы как метод APS, так и высокоскоростные методы распыления HVOF и D-Gun Spraying. Оптимальный режим определяется следующими параметрами частиц (таблица 4): скорость частиц  $U_p = 700$  м/с, температура частиц  $T_p = 1800$  К, диаметр частиц  $D_p = (30 \pm 10)$  мкм.

Разработанный авторами программный пакет реализован в виде программной системы с параллельным запуском SIMD-задач для моделирования газотермических покрытий с различными наборами частиц КФП. Возможность параллельных вычислений позволяет выполнять большой цикл вычислительных экспериментов и устанавливать связь между режимами напыления и функциональными эксплуатационными характеристиками покрытий.

Сокращение временных затрат с использованием параллельных вычислений достигается в несколько раз (до 10 раз и более). Схема распараллеливания использует параллельную укладку на напыляемую поверхность группы неперекрывающихся сплэтов

Замечание: материал, изложенный выше в разделе 4.2, опубликован в источниках под номерами [18-22] списка публикаций авторов проекта, расположенного в конце отчета.

#### 4.2.3. Список цитируемых публикаций к подразделу 4.2

1. Пячин С.А., Ершова Т.Б., Бурков А.А., Власова Н.М., Комарова В.С. Использование алюминидов титана для создания электроискровых покрытий // Известия ВУЗов. Порошковая металлургия и функциональные покрытия. 2015. № 1. С. 55-61.
2. Аванесян Т.Ч. Особенности высокотемпературного окисления и микродугового оксидирования сплавов на основе  $\gamma$ -TiAl // Дисс. ... к.х.н.: 05.17.03. – М., 2014. – 159 с.
3. Dudina D.V., Korchagin M.A., Zlobin S.B., Ulianitsky V.Yu., Lomovsky O.I., Bulina N.V., Bataev I.A., Bataev V.A. Compositional variations in the coatings formed by detonation spraying of Ti<sub>3</sub>Al at different O<sub>2</sub>/C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> ratios // Intermetallics. 2012. No. 29. P. 140-146.
4. Solonenko O.P., Blednov V.A., Jordan V.I. Computer design of thermal sprayed metal powder coatings // Thermophysics and Aeromechanics. 2011. Vol. 18. No. 2. P. 255-272.
5. Solonenko O.P., Jordan V.I., Blednov V.A. Stochastic Computer Simulation of Cermet Coatings Formation // Advances in Materials Science and Engineering. 2015. Vol. 2015. Article ID 396427. 16 p. <http://dx.doi.org/10.1155/2015/396427>.
6. Jordan V.I., Solonenko O.P., Blednov V.A. Computer experiment on studying the properties of thermally sprayed alumina coatings with lamellar structure // IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series. 2017. Vol. 857. Article ID 012015. doi:10.1088/1742-6596/857/1/012015.
7. Jordan V.I., Blednov V.A. Computer-aided design and prediction of the functional properties of double-layered thermal barrier coatings NiAl-YSZ // IOP Conference Series: Journal of Physics: Conf. Series. 2018. Vol. 1134. Article ID 012024.
8. Solonenko O.P., Smirnov A.V. Equilibrium solidification of melted microdroplets under their collision with substrate: Model experiment and criteria generalization of splats morphology // Thermal Plasma Torches and Technologies. 2001. Vol. 2. P. 99-113.

#### 4.3. Температурная диагностика газотермической струи напыления покрытий. Оптимизация параметров температурного распределения частиц газотермического потока по спектру теплового излучения частиц

В данном подразделе рассматривается применение метода измерения распределенного параметра температуры в потоке частиц, основываясь на решении обратной задачи, использующей экспериментально зарегистрированный суммарный (интегральный) спектр теплового излучения частиц гетерогенного газотермического потока. Для выходного сигнала, регистрирующего спектр теплового излучения частиц линейным многоэлементным фотоприемником, приведено «измерительное» уравнение в виде уравнения Фредгольма 1-го рода, в котором используется функция плотности температурного распределения частиц и функция Планка.

Приведено краткое изложение вывода обратного интегрального оператора для решения «обратной» задачи по определению температурного распределения частиц. Для двух модельных функций температурного распределения частиц выведены функции интегрального спектра теплового излучения частиц, для которых на основе экспериментально зарегистрированного интегрального спектра теплового излучения с помощью процедуры «наименьших квадратов» осуществлена оптимизация параметров обеих модельных функций распределений.

**Введение.** В современном машиностроении и других отраслях промышленности важное место занимают газотермические технологии напыления защитных покрытий (плазменное, детонационно-газовое, сверхзвуковое газопламенное HVOF и др.) [1]. В результате их применения получают достаточно плотные, термобарьерные, износостойкие и коррозионно-устойчивые покрытия. Оптические методы контроля скорости и температуры дисперсной фазы потока позволяют поддерживать оптимальные режимы напыления покрытий [2-6].

В настоящей статье рассматривается применение метода измерения распределенного параметра температуры по потоку частиц, основываясь на решении обратной задачи, использующей экспериментально зарегистрированный интегральный спектр теплового излучения потока частиц.

**4.3.1. Теоретические аспекты метода измерения распределенного параметра температуры по потоку частиц.** В работах [7, 8] с учетом спектральной плотности энергетической светимости ансамбля нагретых частиц теоретически обосновано «измерительное» уравнение в виде интегрального уравнения Фредгольма 1-го рода

$$B(\lambda) = S_{\Sigma} \cdot \beta(\lambda) \cdot \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} \varphi(\lambda, T) \cdot \varepsilon_2(T) \cdot P(T) dT, \quad (1)$$

$$\beta(\lambda) = \alpha(\lambda) \cdot \varepsilon_1(\lambda). \quad (2)$$

где  $B(\lambda)$  - выходной сигнал, регистрируемый линейным многоэлементным фотоприемником, установленным в фокальной плоскости спектрофотометра;  $S_{\Sigma}$  - суммарная поверхность всех частиц потока из измерительного объема;  $\varphi(\lambda, T) = C_1 \cdot \lambda^{-5} / (e^{\frac{C_2}{\lambda T}} - 1)$  - спектральная плотность излучения «абсолютно черного тела» – функция Планка ( $C_1 = 2\pi hc^2$ ,  $C_2 = hc/k$ );  $P(T)$  - функция плотности вероятности распределения частиц по значениям температуры. Функция  $\alpha(\lambda)$  является «аппаратной функцией мультипликативных искажений» выходного сигнала [7, 8]. В формулах (1), (2) учтена относительная излучательная способность частиц порошка в виде модельной функции

$$\varepsilon(\lambda, T) = \varepsilon_1(\lambda) \cdot \varepsilon_2(T), \quad (3)$$

где  $\varepsilon_1(\lambda)$  – осредненная изменяющаяся в узком диапазоне спектральная составляющая относительной излучательной способности частиц  $\varepsilon(\lambda, T)$ , а вторую составляющую  $\varepsilon_2(T) = \varepsilon_q(T)$  называют «интегральным коэффициентом черноты  $\varepsilon_q(T)$ » серого тела [4, 9-12] (как правило, для металлических частиц растет с увеличением  $T$ ). Для фотоприемников, регистрирующих спектр в оптическом диапазоне (в относительном смысле, в узком диапазоне), функцию  $\varepsilon_1(\lambda)$  можно принять за константу  $\varepsilon_1$ . В плазменных потоках напыления частиц величина «разброса» значений температуры частиц от  $T_{\min}$  до  $T_{\max}$  по отношению к самой температуре частиц не велика, поэтому, в первом приближении, довольно часто коэффициент черноты  $\varepsilon_q(T)$  полагают константой [4, 9-12]. В работе [8] были получены выражения для решения «обратной» задачи.

Ниже повторим основные формульные преобразования с некоторыми изменениями в замене переменных. Полученные в результате преобразований выражения (11)-(13) будут использованы в следующем подразделе статьи при выводе расчетных формул «интегрального» спектра теплового излучения частиц струи напыления, соответствующих модельным функциям плотности распределения частиц  $P(T)$ .

Введем обозначения функций:  $g(T) = \varepsilon_q(T) \cdot P(T)$ ,  $\eta(\lambda) = C_1 \cdot \lambda^{-5} \cdot S_{\Sigma} \cdot \alpha(\lambda) \cdot \varepsilon_1(\lambda)$ . Тогда экспериментально зарегистрированный интегральный спектр  $B(\lambda)$  равен:

$$B(\lambda) = \eta(\lambda) \cdot \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} J(\lambda, T) \cdot g(T) dT, \quad (4)$$

$$J(\lambda, T) = 1 / (e^{\frac{C_2}{\lambda T}} - 1). \quad (5)$$

Произведем замену переменных подобно тому, как это сделано в [8], но переменная  $\omega$  имеет другое выражение:  $\omega = 1/\lambda$ ;  $t = C_2/T$ . При этом:  $\lambda = 1/\omega$ ,  $T = C_2/t$ ;  $dT = -C_2 dt/t^2$ ;  $t_{\max} = C_2/T_{\min}$ ;  $t_{\min} = C_2/T_{\max}$ . Тогда

$$G(\omega) = B(1/\omega) = \gamma(\omega) \cdot \int_{t_{\min}}^{t_{\max}} J(\omega, t) \cdot f(t) dt, \quad (6)$$

где знак «минус», полученный при замене дифференциала, учтен при перестановке значений пределов интегрирования. Функции  $f(t)$ ,  $\gamma(\omega)$  и  $J(\omega, t)$  принимают несколько иные выражения по сравнению с выражениями в [8]

$$f(t) = \varepsilon_q(C_2/t) \cdot P(C_2/t)/t^2, \quad (7)$$

$$\gamma(\omega) = C_1 \cdot C_2 \cdot \omega^5 \cdot S_\Sigma \cdot \alpha(1/\omega) \cdot \varepsilon_1(1/\omega), \quad (8)$$

$$J(\omega, t) = \frac{1}{e^{\omega t} - 1} = \frac{e^{-\omega t}}{1 - e^{-\omega t}} = e^{-\omega t} \cdot \frac{1}{1 - e^{-\omega t}}. \quad (9)$$

Так как в (9) переменная  $t \in [t_{\min}, t_{\max}]$  и  $t_{\min} \neq 0$ , тогда  $e^{-\omega t} < 1$  и с учетом известного разложения в ряд Маклорена функции  $(1-x)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} x^n$  ядро  $J(\omega, t)$

$$J(\omega, t) = e^{-\omega t} \cdot \frac{1}{1 - e^{-\omega t}} = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n \cdot \omega t}. \quad (10)$$

При  $\omega \rightarrow 0$  в (10) сомножитель  $e^{-\omega t} \cong 1 - \omega t$ , и тогда функция ядра  $J(\omega, t)$  имеет особенность вида  $J(\omega, t) \cong (1 - \omega t) / \omega t$ , которая корректируется сомножителем  $\omega^5$  за счет  $\gamma(\omega)$ . Нормировка зарегистрированного фотоприемником интегрального теплового спектра  $G(\omega)$  на функцию  $\gamma(\omega)$ , определяемую на этапе калибровки, позволяет с учетом (6), (10) и обозначения

$$\Phi(\omega) = G(\omega) / \gamma(\omega), \quad (11)$$

учитывая вне диапазона  $[t_{\min}, t_{\max}]$  условие  $f(t) = 0$ , перейти к уравнению [8]:

$$\Phi(\omega) = \int_{t_{\min}}^{t_{\max}} J(\omega, t) \cdot f(t) dt = \sum_{n=1}^{\infty} \int_{t_{\min}}^{t_{\max}} e^{-n \cdot \omega t} f(t) dt = \sum_{n=1}^{\infty} F(n\omega), \quad (12)$$

$$F(n\omega) = \int_{t_{\min}}^{t_{\max}} e^{-n \cdot \omega t} f(t) dt = \int_0^{\infty} e^{-n \cdot \omega t} f(t) dt, \quad (13)$$

Аппроксимируя функцию  $G(\omega)$ , полученную в эксперименте, можно определить функцию  $\Phi(\omega) = G(\omega) / \gamma(\omega)$ . С учетом (13) для  $n = 1$

$$F(\omega) = \int_0^{\infty} e^{-\omega t} f(t) dt. \quad (14)$$

С другой стороны, с учетом  $\Phi(\omega) = \sum_{n=1}^{\infty} F(n\omega)$  из (12) и на основании известной формулы обращения [13], использующей функцию Мебиуса  $\mu(m)$ , для  $\omega > 0$

$$F(\omega) = \sum_{m=1}^{\infty} \mu(m) \cdot \Phi(m\omega), \quad (15)$$

В отношении действительной переменной  $\omega$  справедливо аналитическое продолжение в комплексной плоскости с комплексной переменной  $s$ .

$$F(s) = \int_0^{\infty} e^{-s \cdot t} f(t) dt = \sum_{m=1}^{\infty} \mu(m) \cdot \Phi(ms) \quad (16)$$

соответствует прямому одностороннему преобразованию Лапласа. Используя обратное

преобразование Лапласа  $f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} e^{s \cdot t} F(s) ds$ , получим функцию

$$\begin{aligned} f(t) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} e^{p \cdot t} \left( \sum_{m=1}^{\infty} \mu(m) \cdot \Phi(mp) \right) dp = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \left( \sum_{m=1}^{\infty} \mu(m) \cdot e^{p \cdot t} \Phi(mp) \right) dp = \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \left( \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\mu(m)}{m} \cdot e^{\frac{mp \cdot t}{m}} \Phi(mp) \right) d(mp) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma'-i\infty}^{\sigma'+i\infty} \left( \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\mu(m)}{m} \cdot e^{\frac{s \cdot t}{m}} \right) \Phi(s) ds = \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma'-i\infty}^{\sigma'+i\infty} J_{-1}(s, t) \Phi(s) ds. \end{aligned} \quad (17)$$

Ядро обратного интегрального оператора (17) – производящая функция

$$J_{-1}(s, t) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\mu(m)}{m} \cdot e^{\frac{s \cdot t}{m}}, \quad (18)$$

В вычислительном аспекте решение «обратной» задачи (17)-(18) затруднительно. Поэтому далее рассмотрим решение «обратной» задачи на двух примерах модельных функций плотности температурного распределения.

**4.3.2. Модельные температурные распределения частиц и их интегральные спектры теплового излучения.** В процессе плазменного напыления покрытия из порошка частиц диоксида циркония  $ZrO_2$  (стабилизированного  $Y_2O_3$ ) был зарегистрирован интегральный спектр  $B(\lambda)$  теплового излучения плазменного потока частиц  $ZrO_2$  с помощью спектрометра ВТС-110S в диапазоне длин волн (280 – 850 нм). Как уже говорилось выше, в первом приближении осредненную функцию  $\varepsilon_1(\lambda) = \varepsilon_1(1/\omega)$  можно считать константой  $\varepsilon_1$  (в оптическом диапазоне). Тогда с учетом констант формулу (8) можно записать в виде (произведение констант заменим на  $C_3$ )



$$\gamma(\omega) = C_3 \cdot \omega^5 \cdot \alpha(1/\omega) = C_3 \cdot \lambda^{-5} \cdot \alpha(\lambda). \quad (19)$$

Аналогично, вторую составляющую  $\varepsilon_2(T) = \varepsilon_q(T)$  заменим константой  $\varepsilon_2 = \varepsilon_q$ .

Согласно (7) и условию  $t = C_2/T$  функция  $f(t) = C_4 \cdot T^2 \cdot P(T)$  и,

$$P(T) = C_5 \cdot f(C_2/T)/T^2, \quad (20)$$

где константы:  $C_4 = \varepsilon_2/C_2^2$  и  $C_5 = 1/C_4$ . Тогда с учетом (6), (11)-(13), (19) и условия  $\omega = 1/\lambda$  определяем следующие выражения

$$\Phi(1/\lambda) = C_6 \cdot \lambda^5 \cdot W(\lambda) = \sum_{n=1}^{\infty} F(n/\lambda), \quad (21)$$

$$F(n/\lambda) = \int_{t_{\min}}^{t_{\max}} e^{-(n/\lambda)t} f(t) dt, \quad (22)$$

где  $C_6 = 1/C_3$  и  $W(\lambda)$  - результат коррекции экспериментально зарегистрированного спектра  $B(\lambda)$  с учетом «аппаратной» функции  $\alpha(\lambda)$

$$W(\lambda) = B(\lambda)/\alpha(\lambda). \quad (23)$$

В вычислительных экспериментах были выбраны две модельные функции  $f(t)$ .

1. Функция в виде «параболы» (ее ветви направлены «вниз»)

$$f(t) = \begin{cases} f_0(t) \equiv 0, & t \in (-\infty, \tau_1), \\ f_1(t) = -A_1 \cdot (t - \tau_1) \cdot (t - \tau_2), & t \in [\tau_1, \tau_2], \\ f_2(t) \equiv 0, & t \in (\tau_2, +\infty), \end{cases}$$

$$\begin{aligned} f_1(t) &= -A_1 \cdot (t - \tau_1) \cdot [(t - \tau_1) - (\tau_2 - \tau_1)] = -A_1 \left\{ \frac{2}{2!} \cdot (t - \tau_1)^2 - \frac{(\tau_2 - \tau_1)}{1!} (t - \tau_1) \right\} = \\ &= -A_1 \cdot (t - \tau_2) \cdot [(t - \tau_2) + (\tau_2 - \tau_1)] = -A_1 \left\{ \frac{2}{2!} (t - \tau_2)^2 + \frac{(\tau_2 - \tau_1)}{1!} (t - \tau_2) \right\}. \end{aligned} \quad (24)$$

В выражении (24) в каждой «фигурной» скобке записаны разложения  $f_1(t)$  в ряды Тейлора (в точках  $\tau_1$  и  $\tau_2$ ) и производные, начиная с третьей и выше, равны 0. Используя свойства «ступенчатой» функции [14]:  $u(t - \tau_1) = 1$  и  $u(t - \tau_2) = 0$  при  $\tau_1 < t < \tau_2$ , т.е.

$[u(t - \tau_1) - u(t - \tau_2)] \cdot f_1(t) = f_1(t)$ , получим [14]:

$$f(t) = u(t - \tau_1) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f_1^{(k)}(\tau_1)}{k!} (t - \tau_1)^k - u(t - \tau_2) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f_1^{(k)}(\tau_2)}{k!} (t - \tau_2)^k, \quad (25)$$

для которого «изображение» (по преобразованию Лапласа, [14]) имеет вид

$$\overline{f(s)} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f_1^{(k)}(\tau_1)}{s^{k+1}} e^{-s \cdot \tau_1} - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f_1^{(k)}(\tau_2)}{s^{k+1}} e^{-s \cdot \tau_2}. \quad (26)$$

В нашем случае

$$\begin{aligned} \overline{f(s)} &= -A_1 \left\{ \left[ \frac{2}{s^3} e^{-s \cdot \tau_1} - \frac{(\tau_2 - \tau_1)}{s^2} e^{-s \cdot \tau_1} \right] - \left[ \frac{2}{s^3} e^{-s \cdot \tau_2} + \frac{(\tau_2 - \tau_1)}{s^2} e^{-s \cdot \tau_2} \right] \right\} = \\ &= \frac{A_1}{s^2} \left\{ (\tau_2 - \tau_1) (e^{-s \cdot \tau_1} + e^{-s \cdot \tau_2}) - \frac{2}{s} (e^{-s \cdot \tau_1} - e^{-s \cdot \tau_2}) \right\}. \end{aligned} \quad (27)$$

Переходя в «частотную» область ( $s = n\omega = n/\lambda$ ), получим выражение

$$\begin{aligned} F(n/\lambda) &= \frac{A_1 \lambda^2}{n^2} \left\{ (\tau_2 - \tau_1) \left( e^{\frac{-n \cdot \tau_1}{\lambda}} + e^{\frac{-n \cdot \tau_2}{\lambda}} \right) - \frac{2 \cdot \lambda}{n} \left( e^{\frac{-n \cdot \tau_1}{\lambda}} - e^{\frac{-n \cdot \tau_2}{\lambda}} \right) \right\} = \\ &= \frac{A_1 \lambda^2}{n^2} \left\{ C_2 \cdot \left( \frac{1}{T_{\min}} - \frac{1}{T_{\max}} \right) \cdot \left( e^{\frac{-n \cdot C_2}{\lambda \cdot T_{\max}}} + e^{\frac{-n \cdot C_2}{\lambda \cdot T_{\max}}} \right) - \frac{2 \cdot \lambda}{n} \left( e^{\frac{-n \cdot C_2}{\lambda \cdot T_{\max}}} - e^{\frac{-n \cdot C_2}{\lambda \cdot T_{\min}}} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (28)$$

где  $\tau_1 = t_{\min} = C_2 / T_{\max}$ ,  $\tau_2 = t_{\max} = C_2 / T_{\min}$ .

Используя (22), выражение (28) получается при взятии интеграла «по частям» (замена переменной:  $z = -n \cdot (t - \tau_1) / \lambda$  и  $z_0 = -n \cdot (\tau_2 - \tau_1) / \lambda$ ):

$$\begin{aligned} F(n/\lambda) &= -A_1 \int_{\tau_1}^{\tau_2} \left[ (t - \tau_1)^2 - (\tau_2 - \tau_1)(t - \tau_1) \right] e^{\frac{-n \cdot t}{\lambda}} dt = \\ &= A_1 \left( \frac{\lambda}{n} \right)^3 e^{\frac{-n \cdot \tau_1}{\lambda}} \left\{ \int_0^{z_0} z^2 e^z dz - z_0 \int_0^{z_0} z e^z dz \right\} = A_1 \left( \frac{\lambda}{n} \right)^3 e^{\frac{-n \cdot \tau_1}{\lambda}} \left\{ e^{z_0} (2 - z_0) - (2 + z_0) \right\} = \\ &= A_1 \left( \frac{\lambda}{n} \right)^2 e^{\frac{-n \cdot \tau_1}{\lambda}} \left\{ \left( \frac{\lambda}{n} \right) e^{z_0} (2 - z_0) - \left( \frac{\lambda}{n} \right) (2 + z_0) \right\} = \\ &= \frac{A_1 \lambda^2}{n^2} \left\{ (\tau_2 - \tau_1) \cdot \left( e^{\frac{-n \cdot \tau_1}{\lambda}} + e^{\frac{-n \cdot \tau_2}{\lambda}} \right) - \frac{2 \cdot \lambda}{n} \cdot \left( e^{\frac{-n \cdot \tau_1}{\lambda}} - e^{\frac{-n \cdot \tau_2}{\lambda}} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (29)$$

2. Функция в виде «треугольного» распределения

$$f(t) = \begin{cases} f_0(t) \equiv 0, & t \in (-\infty, \tau_1), \\ f_1(t) = k_1 \cdot (t - \tau_1), & t \in [\tau_1, \tau_2], \\ f_2(t) = k_2 \cdot (t - \tau_3), & t \in (\tau_2, \tau_3], \\ f_3(t) \equiv 0, & t \in (\tau_3, +\infty), \end{cases} \quad (30)$$

где  $k_1 = h/(\tau_2 - \tau_1)$ ;  $k_2 = -h/(\tau_3 - \tau_2)$ ,  $h$  – высота «треугольника» (рис. 1),

$$\tau_1 = t_{\min} = C_2 / T_{\max}, \quad \tau_2 = t_0 = C_2 / T_0, \quad \tau_3 = t_{\max} = C_2 / T_{\min}.$$

$$f_1(t) = k_1 \cdot (t - \tau_1) = k_1 \cdot (t - \tau_2) + k_1 \cdot (\tau_2 - \tau_1) = k_1 \cdot (t - \tau_2) + h, \quad (31)$$

$$f_2(t) = k_2 \cdot (t - \tau_3) = k_2 \cdot (t - \tau_2) + k_2 \cdot (\tau_2 - \tau_3) = k_2 \cdot (t - \tau_2) + h. \quad (32)$$

Используя «ступенчатую» функцию, для функции  $f(t)$  получим выражение

$$\begin{aligned} f(t) &= [u(t - \tau_1)f_1(t) - u(t - \tau_2)f_1(t)] + [u(t - \tau_2)f_2(t) - u(t - \tau_3)f_2(t)] = \\ &= \{k_1(t - \tau_1) \cdot u(t - \tau_1) - [k_1(t - \tau_2) + h] \cdot u(t - \tau_2)\} + \\ &+ \{[k_2(t - \tau_2) + h] \cdot u(t - \tau_2) - k_2(t - \tau_3) \cdot u(t - \tau_3)\}. \end{aligned} \quad (33)$$

Тогда преобразование Лапласа для функции (33) принимает вид

$$\begin{aligned} \overline{f(s)} &= \left\{ \frac{k_1}{s^2} e^{-s\tau_1} - \left[ \frac{k_1}{s^2} e^{-s\tau_2} + \frac{h}{s} \right] \right\} + \left\{ \left[ \frac{k_2}{s^2} e^{-s\tau_2} + \frac{h}{s} \right] - \frac{k_2}{s^2} e^{-s\tau_3} \right\} = \\ &= \frac{1}{s^2} \{k_1 e^{-s\tau_1} + (k_2 - k_1) e^{-s\tau_2} - k_2 e^{-s\tau_3}\} = \\ &= \frac{A_2}{s^2} \{(\tau_3 - \tau_2) e^{-s\tau_1} + (\tau_2 - \tau_1) e^{-s\tau_3} - (\tau_3 - \tau_1) e^{-s\tau_2}\}, \end{aligned} \quad (34)$$

$$A_2 = \frac{h}{(\tau_2 - \tau_1) \cdot (\tau_3 - \tau_2)} = \frac{h \cdot T_0^2 \cdot T_{\min} \cdot T_{\max}}{C_2^2 \cdot (T_0 - T_{\min}) \cdot (T_{\max} - T_0)}. \quad (35)$$

Переходя в «частотную» область ( $s = n\omega = n/\lambda$ ), получим выражение

$$\begin{aligned} F\left(\frac{n}{\lambda}\right) &= \frac{A_2 \lambda^2}{n^2} \left\{ (\tau_3 - \tau_2) e^{\frac{-n\tau_1}{\lambda}} + (\tau_2 - \tau_1) e^{\frac{-n\tau_3}{\lambda}} - (\tau_3 - \tau_1) e^{\frac{-n\tau_2}{\lambda}} \right\} = \\ &= \frac{A_2 \lambda^2}{n^2} \left\{ \left( \frac{1}{T_{\min}} - \frac{1}{T_0} \right) \cdot e^{\frac{-n \cdot C_2}{\lambda \cdot T_{\max}}} + \left( \frac{1}{T_0} - \frac{1}{T_{\max}} \right) \cdot e^{\frac{-n \cdot C_2}{\lambda \cdot T_{\min}}} - \left( \frac{1}{T_{\min}} - \frac{1}{T_{\max}} \right) \cdot e^{\frac{-n \cdot C_2}{\lambda \cdot T_0}} \right\}. \end{aligned} \quad (36)$$

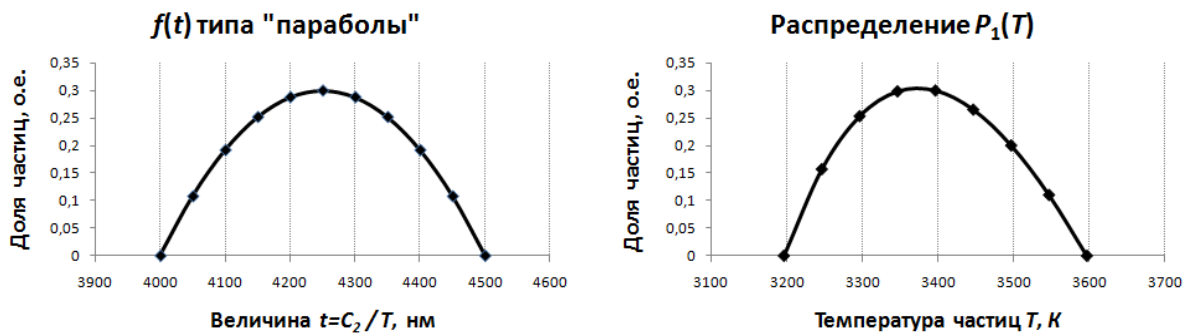
Выражение (36) получается, используя (22) и замены переменной  $t$  ( $y = -n \cdot (t - \tau_1) / \lambda$ ;

$y_0 = -n \cdot (\tau_2 - \tau_1) / \lambda$ ;  $z = -n \cdot (t - \tau_3) / \lambda$ ;  $z_0 = -n \cdot (\tau_3 - \tau_2) / \lambda$ ):

$$\begin{aligned} F\left(\frac{n}{\lambda}\right) &= k_1 \int_{\tau_1}^{\tau_2} (t - \tau_1) e^{\frac{-nt}{\lambda}} dt + k_2 \int_{\tau_2}^{\tau_3} (t - \tau_3) e^{\frac{-nt}{\lambda}} dt = \frac{\lambda^2}{n^2} \left\{ k_1 e^{\frac{-n\tau_1}{\lambda}} \int_0^{y_0} y e^y dy + k_2 e^{\frac{-n\tau_3}{\lambda}} \int_{-z_0}^0 z e^z dz \right\} = \\ &= \frac{\lambda^2}{n^2} \left\{ k_1 e^{\frac{-n\tau_1}{\lambda}} [(y_0 - 1) e^{y_0} + 1] + k_2 e^{\frac{-n\tau_3}{\lambda}} [-1 + (z_0 + 1) e^{-z_0}] \right\} = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\lambda^2}{n^2} \left\{ k_1 e^{\frac{-n \cdot \tau_1}{\lambda}} + (k_2 - k_1) \cdot e^{\frac{-n \cdot \tau_2}{\lambda}} - k_2 \cdot e^{\frac{-n \cdot \tau_3}{\lambda}} \right\} = \\
&= \frac{A_2 \lambda^2}{n^2} \left\{ (\tau_3 - \tau_2) e^{\frac{-n \cdot \tau_1}{\lambda}} + (\tau_2 - \tau_1) e^{\frac{-n \cdot \tau_3}{\lambda}} - (\tau_3 - \tau_1) e^{\frac{-n \cdot \tau_2}{\lambda}} \right\}. \quad (37)
\end{aligned}$$

**4.3.3. Результаты вычислительных экспериментов.** Рабочий диапазон длин волн для спектрометра ВТС-110S составляет 280 – 850 нм, в котором компоненты  $F(n/\lambda)$ , начиная с  $n=4$ , порядка в  $10^8$  раз меньше  $F(1/\lambda)$ . Поэтому в сумме (21) учитывались первые три члена. Используя связь (21) между тепловым спектром  $W(\lambda)$  частиц  $ZrO_2$  (после коррекции согласно (23)) и  $\Phi(1/\lambda)$ , из экспериментальных значений  $W_{\text{эксн.}}(\lambda_i)$  были пересчитаны  $\Phi_{\text{эксн.}}(1/\lambda_i)$  для 2-х модельных температурных распределений (24) и (30). Используя выражения (28) и (36) для формирования соответствующих сумм  $\sum_{n=1}^3 F(n/\lambda_i)$ , соответствующих распределениям (24) и (30), в соответствии с процедурой метода «наименьших квадратов» были получены «оптимальные» параметры модельных распределений (24) и (30). Затем согласно (20) были рассчитаны соответствующие температурные распределения по шкале  $T$  в кельвинах ( $T = C_2 / t$ ,  $C_2 = 14.38786 \cdot 10^6 \text{ нм} \cdot K$ , рис. 1):  $P_1(T)$  – для модели в виде «параболы» (24);  $P_2(T)$  – для модели «треугольника» (30). Получены оптимальные значения параметров для модели «параболы»:  $\tau_1 \cong 4000 \text{ нм}$ ,  $\tau_2 \cong 4500 \text{ нм}$ ,  $T_{\text{min}} \cong 3197 K$ ,  $T_{\text{max}} \cong 3597 K$ ,  $M(T) \cong 3388.2 K$  – математическое ожидание распределения  $P_1(T)$ . Для модели «треугольника»:  $\tau_1 \cong 3980 \text{ нм}$ ,  $\tau_2 \cong 4276 \text{ нм}$ ,  $\tau_3 \cong 4475 \text{ нм}$ ,  $T_{\text{min}} \cong 3215 K$ ,  $T_0 \cong 3365 K$ ,  $T_{\text{max}} \cong 3615 K$ ,  $M(T) \cong 3392.8 K$  – математическое ожидание распределения  $P_2(T)$ .



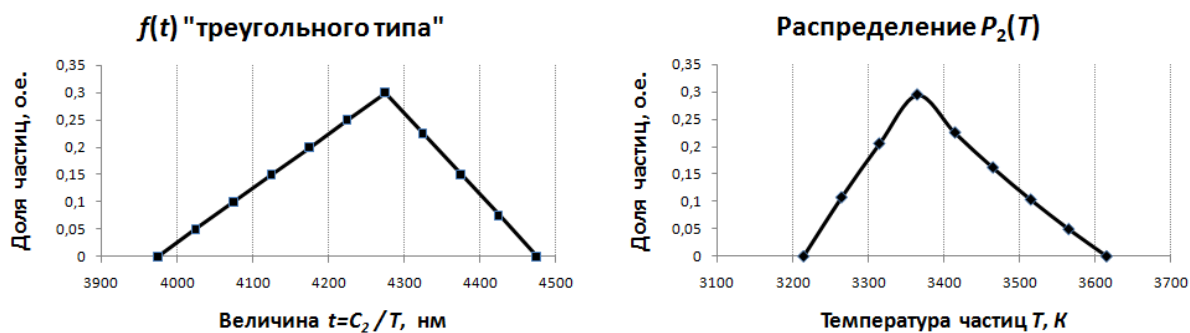


Рис. 1. Температурные распределения частиц для двух моделей: слева – в координатах  $t = C_2 / T$  ; справа – по абсолютной шкале температур  $T$

Замечание: на графиках (рис. 1) по оси Y для удобства выбран диапазон от 0 до 0.35,

поэтому условие нормировки вероятности  $\int_{T_{\min}}^{T_{\max}} P(T) dT = 1$  не соблюдено, однако при оценке

математических ожиданий распределений оно было учтено.

**Заключение.** Как видно из рисунка 1 и приведенных оптимальных параметров распределений, математические ожидания для двух различных моделей достаточно близки (различие менее 5 К) и «дисперсионные» диапазоны практически совпадают (сдвиг относительно друг друга составляет 18 К), что подтверждает перспективность предлагаемого метода измерения распределенного параметра температуры в газотермическом потоке частиц.

**Благодарности.** Выражаю благодарность И.П. Гуляеву, с.н.с. лаборатории № 9 ИТПМ им. С.А. Христиановича СО РАН, за предоставленные данные по экспериментальному спектру теплового излучения потока частиц  $ZrO_2$ .

Замечание: материал, изложенный выше в подразделе 4.3, опубликован в источнике под номером [23] списка публикаций авторов проекта, расположенного в конце отчета.

#### 4.3.4. Список цитируемых публикаций к подразделу 4.3.

1. Жуков М.Ф., Солоненко О.П. Высокотемпературные запыленные струи в процессе обработки порошковых материалов: монография // Под ред. акад. В.Е. Накорякова. – Новосибирск, 1990.
2. Иордан В.И., Соловьев А.А. Оптико-электронные методы тестирования систем измерения температурно-скоростных параметров частиц при плазменном напылении порошковых покрытий // Известия Алтайского государственного университета. Серия Физика.– 2010. – № 1/2 (65).

3. Долматов А.В., Гуляев И.П., Имамов Р.Р. Спектральный пирометр для контроля температуры в процессах термосинтеза // Вестник Югорского государственного университета. – 2014. – № 2 (33).
4. Магунов А.Н. Спектральная пирометрия (обзор) / Приборы и техника эксперимента, 2009. – № 4.
5. Mauer G., Vassen R. and Stöver D. Study on detection of melting temperatures and sources of errors using two-color pyrometry for in-flight measurements of plasma sprayed particles // International Journal of Thermophysics. – 2008. – Vol. 29. – Issue 2.
6. Lee J. Estimation of emission properties for silica particles using thermal radiation spectroscopy // Applied Optics. – 2011. – Vol. 50. – Issue 22. <https://doi.org/10.1364/AO.50.004262>.
7. Иордан В.И., Соловьев А.А. Редукция температурного распределения частиц гетерогенных потоков методом «обращения» их интегрального теплового спектра / Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. – 2010. – № 2 (98).
8. Иордан В.И. Обратное интегральное преобразование для восстановления температурного распределения частиц гетерогенного потока по их интегральному тепловому спектру // Известия вузов. Физика. – 2013. – Т. 56. – № 8/3.
9. Петров В.А. Излучательная способность высокотемпературных материалов. – М., 1969.
10. Латыев Л.Н. Излучательные свойства твердых материалов: справочник / Л.Н. Латыев и др.; под общ. ред. А.Е. Шейндлина. – М., 1974.
11. Свет Д.Я. Оптические методы измерения истинных температур. – М., 1982.
12. Чернин С.М., Коган А.В. Измерение температуры малых тел пирометрами излучения. – М., 1980.
13. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и таблицами / Под ред. М. Абрамовица и И. Стигана; пер. с англ. В.А. Диткина и Л.Н. Кармазиной. – М., 1979.
14. Шостак Р.Я. Операционное исчисление. Краткий курс. Изд. второе, доп. Учебное пособие для вузов. – М., 1972.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Фундаментальная научная междисциплинарная задача проекта относится к классу задач предсказательного многомасштабного моделирования свойств и структуры функциональных материалов, востребованных в высокотехнологических отраслях индустрии и фундаментальной науке, и служит доказательной базой для принятия эффективных научно-технических решений о структуре и параметрах проектируемых систем и для прогнозирования их поведения при различных управлениях и условиях окружающей среды. Актуальность задачи проекта не вызывает сомнений. При выполнении промежуточного этапа проекта № 2, получены следующие результаты.

На втором этапе выполнения проекта по *первой задаче* получены следующие результаты:

1. Разработан и программно реализован алгоритм для генерации структуры плотнейшей упаковки сферических частиц (мезоячеек) в качестве «тестовой» структуры.

2. Разработан и программно реализован алгоритм формирования 3-х мерной сеточной структуры точек «расчетной области» уравнений теплопроводности и диффузионной кинетики СВС

3. Для 7 промежуточных временных слоев неявной схемы двуциклического расщепления на основе симметричной схемы Кранка-Николсона выведены формулы одномерных «прогонок» в рациональном виде для программной реализации, а также получена схема для уравнения кинетики.

4. Разработан и создан основной программный модуль на языке C/C++, предназначенный для 3D сеточных вычислений с использованием «расчетной области» уравнений теплопроводности и диффузионной кинетики СВС на основе тестовой структуры плотнейшей упаковки сферических частиц (мезоячеек) для исследования макрокинетики СВС. В основном программном модуле реализована схема параллельных вычислений с учетом разбиения вдоль оси  $Z$  «расчетной области» на кластеры (вдоль направления распространения волны горения СВС). Проведены тестовые вычислительные эксперименты (ВЭ) по моделированию процесса СВС на тестовой структуре (в двух режимах по 10 экспериментов). Как показали ВЭ, температурные профили волны горения в последовательные моменты времени качественно согласуются с экспериментально регистрируемыми профилями. Наличие сверхадиабатических перепадов температуры горения подтверждает дискретность процесса СВС (наличие «микроочагов горения»).

6. С использованием программных пакетов LAMMPS и OVITO были продолжены дополнительные вычислительные эксперименты по исследованию микрокинетики СВ-синтеза

алюминидов титана в наноразмерных слоистых системах в различных режимах и с различной стехиометрией состава. Для системы Ti-Al нестехиометрического состава ( $N_{Ti}/N_{Al} = 1.23$ ) с количеством атомов  $N = 453974$  был обнаружен эффект возникновения гетерофазной структуры – несколько зон с резкими границами, в которых доминирует один интерметаллид.

На втором этапе выполнения проекта по *второй задаче* получены следующие результаты:

7. По набору карт ДХС (с разрешением не хуже  $512 \times 512$ ) получен набор изображений Тгасе-спектров движения фронта горения СВС (более 60) в переходных режимах от невозмущенного до распавшегося на тепловые микроструктуры. На изображениях Тгасе-спектров выделены области матрицы Тгасе-спектра, которые наиболее чувствительны к возникновению тепловой неустойчивости.

8. В качестве критерия для распознавания спиновой неустойчивости выбран признак появления локальных максимумов («узлов» ветвления) в центральной трансверсальной области спектра Тгасе-преобразования, а их отклонение от оси симметрии указывает на направление спинового горения.

9. На основании рассмотрения одиночного профиля ДХС в узле «ветвления» можно сделать вывод о том, что спиновая неустойчивость характерна для перехода из режима тепловой неустойчивости в диффузионную при наличии гистерезисной зависимости скорости горения от температуры.

10. В программе расчета Тгасе-образов карт ДХС реализована достаточно простая схема распараллеливания на основе «геометрического параллелизма» (изображение карты ДХС разбивается на кластеры изображения, например, размером  $512 \times 512$ , для которых независимо (параллельно) рассчитываются Тгасе-образы).

На втором этапе выполнения проекта по *третьей задаче* получены следующие результаты:

10. Создан программный пакет, реализованный на языке C/C++ с использованием библиотеки QT на основе ранее разработанного авторами проекта программного пакета, функционирующего в среде Delphi. , Отладка программного пакета в версии параллельных вычислений произведена на «тестовом» примере моделирования покрытий. Схема распараллеливания использует параллельную укладку на напыляемую поверхность группы неперекрывающихся сплэтов. В результате тестовых расчетов временные затраты на полный процесс укладки сплэтов сокращаются в несколько раз (до 10 раз).

11. Проведены серия вычислительных экспериментов (более 50) по моделированию покрытий (толщиной 100 мкм) на основе интерметаллических соединений  $Ti_3Al$ ,  $TiAl$  и  $TiAl_3$



в различных режимах напыления (плазменное, высокоскоростное HVOF и D-Gun Spraying), рассчитаны характеристики пористости, адгезионной прочности и шероховатости. Определены оптимальные режимы напыления таких покрытий.

12. Разработан и обоснован метод измерения распределенного параметра температуры в потоке частиц, основываясь на решении обратной задачи, использующей экспериментально зарегистрированный суммарный (интегральный) спектр теплового излучения частиц гетерогенного газотермического потока. Для интегрального спектра теплового излучения частиц теоретически обоснована математическая модель в виде «измерительного» уравнения в виде интегрального уравнения Фредгольма 1-го рода (в интегральный оператор Фредгольма входит функция плотности температурного распределения частиц в потоке). Получен «точный» обратный интегральный оператор для решения обратной задачи по определению функции плотности температурного распределения. Разработана методика оптимизации параметров модельных температурных распределений частиц и получены оценки «средних» температур частиц и дисперсионных диапазонов разброса температур.

13. Опубликовано 7 статей в научных журналах, цитируемых в базах Scopus и WoS (по плану – 4 статьи), 2 статьи в журналах из списка ВАК, а в итоге за второй год выполнения проекта опубликовано 21 научных работ (по плану – 15 работ).

14. Участвовали с докладами в 5-и международных научных конференциях (по плану - не менее, чем в 3-х).

В целом в соответствие с заявкой на второй год выполнения проекта план работ практически полностью выполнен. Полученные результаты создают основу для безусловного выполнения плана работ третьего (окончательного) этапа проекта (2020 год).

Создаваемые теоретические основы и практические рекомендации нацелены на оптимизацию как СВС-технологии стабильного формирования алюминидов никеля и титана, так и технологии плазменного напыления функциональных покрытий, в т.ч. теплозащитных покрытий, которые можно использовать для энергосбережения в теплоэнергетических установках и теплосетях, как в Алтайском крае, так и в других регионах страны. Полученные результаты предполагается использовать в системах автоматического управления высокопроизводительными устройствами синтеза керамики и металлокерамики для аддитивных технологий на основе СВС.

## СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ УЧАСТНИКОВ ПО ТЕМЕ ПРОЕКТА № 18-41-220004

1. Иордан В.И., Полуэктов Д.А., Шмаков И.А. Методические особенности процедуры моделирования СВС в модельной пористой смеси Ni-Al // Ползуновский альманах. 2019. № 4. С. 28-33. <https://elibrary.ru/item.asp?id=42355474> (РИНЦ),  
[https://www.elibrary.ru/download/elibrary\\_42355474\\_74710519.pdf](https://www.elibrary.ru/download/elibrary_42355474_74710519.pdf)
2. Шмаков И.А., Иордан В.И., Савичева Т.М. Молекулярно-динамическое моделирование СВС в наноразмерной слоистой композиции Ti-32.89мас.%Al с использованием параллельных вычислений // Высокопроизводительные вычислительные системы и технологии. 2019. Том 3. № 1. С. 77-81. <https://elibrary.ru/item.asp?id=39242599> (РИНЦ),  
[https://www.elibrary.ru/download/elibrary\\_39242599\\_84066750.pdf](https://www.elibrary.ru/download/elibrary_39242599_84066750.pdf)
3. Шмаков И.А., Иордан В.И. Распознавание программным пакетом OVITO алюминидов никеля и титана по изображениям диаграмм распределения атомных структур в процессе моделирования СВ-синтеза // Оптико-электронные приборы и устройства в системах распознавания образов и обработки изображений. Распознавание – 2019: сб. материалов XV Междунар. науч.-техн. конф. / ред. кол.: С. Г. Емельянов [и др.]; Юго-Зап. гос. ун-т. Курск, 2019. 227 с. С. 200-202. <https://elibrary.ru/item.asp?id=38237508> (РИНЦ),  
[https://www.elibrary.ru/download/elibrary\\_38049996\\_54078194.pdf](https://www.elibrary.ru/download/elibrary_38049996_54078194.pdf)
4. Jordan V.I., Shmakov I.A. The influence of the initiation's conditions of the SH-synthesis of intermetallic compounds on the combustion parameters of the nanoscale layered composition Ti-15.82wt.%Al // Информационные технологии и нанотехнологии: Сборник трудов V Международной конференции ИТНТ-2019 (21-24 мая 2019 г.). Том 4. Науки о данных. Самара: Новая техника, 2019. С. 252-258. <https://elibrary.ru/item.asp?id=37640297> (РИНЦ),  
Пока не понятно, как добыть ссылку из elibrary (сделал файл Тезисы\_Иордан\_Шмаков\_Vol\_4.pdf для загрузки в КИАС в папке ИТНТ-2019)
5. Jordan V.I. and Shmakov I.A. The influence of the ignition conditions of the SH-synthesis of intermetallic compounds on the combustion parameters of the Ti-15.82wt.%Al composition: computer simulation and computing experiments // IOP Conference Series: Journal of Physics: Conf. Series. 2019. Vol. 1368. Article ID 042046. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/1368/4/042046/pdf> (статья проиндексирована а в базах Scopus и Web of Science)
6. Иордан В.И., Шмаков И.А. Воспроизводимость эффекта возникновения гетерофазной структуры при изменении температуры зажигания СВС в слоистой наноразмерной нестехиометрической системе Ti-Al // Пленки и покрытия-2019: Труды 14-й Международной конференции. 14 мая – 16 мая 2019 г. / Под редакцией д-ра техн. наук В. Г. Кузнецова. – СПб: Изд-во Политехн. ун-та, 2019. – 640 с. - С. 88-92.

7. Jordan V.I. and Shmakov I.A. The emergence of a heterostructure of the intermetallic phases in the process of SH-synthesis simulation in a nonstoichiometric nanoscale layered Ti-Al system // IOP Conference Series: Journal of Physics: Conf. Series. 2019. Vol. 1333. Article ID 022005. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/1333/2/022005/pdf> (статья проиндексирована в базах Scopus и Web of Science)
8. Jordan V.I. and Shmakov I.A. Reproducibility of a heterophase structure emergence effect when changing the ignition temperature of SHS in a layered nanosized nonstoichiometric Ti-Al system // IOP Conference Series: Journal of Physics: Conf. Series. 2019. Vol. 1281. Article ID 012030. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/1281/1/012030/pdf> (статья проиндексирована в базах Scopus и Web of Science)
9. Алымов М.И., Гуляев П.Ю., Семичев С.В. Консолидация порошковых наноматериалов: обзор тенденций развития и применения // Вестник Югорского государственного университета. 2019. № 4 (55). <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=41572051> (БАК).  
[https://www.elibrary.ru/download/elibrary\\_41572051\\_32040994.pdf](https://www.elibrary.ru/download/elibrary_41572051_32040994.pdf)
10. Григорьевская А.А., Гуляев П.Ю. Компьютерная визуализация радиационного теплопереноса в волне горения СВС // Ползуновский альманах. 2019. № 4. С. 5-9. <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=42355469> (РИНЦ),  
[https://www.elibrary.ru/download/elibrary\\_42355469\\_29262826.pdf](https://www.elibrary.ru/download/elibrary_42355469_29262826.pdf)
11. Cui H.Z., Gulyaev P.Yu. Intelligent powder nanomaterials: sintering technology review // Ползуновский альманах. 2019. № 4. С. 18-23. <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=42355472> (РИНЦ), [https://www.elibrary.ru/download/elibrary\\_42355472\\_26259438.pdf](https://www.elibrary.ru/download/elibrary_42355472_26259438.pdf)
12. Гуляев П.Ю., Иордан В.И., Шмаков И.А. Синтез виртуальных хронограмм для Трасе-анализа неустойчивости волны горения // Ползуновский альманах. 2019. № 4. С. 58-62. <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=42355483> (РИНЦ),  
[https://www.elibrary.ru/download/elibrary\\_42355483\\_15102822.pdf](https://www.elibrary.ru/download/elibrary_42355483_15102822.pdf)
13. Долматов А.В., Гуляев П.Ю. Оптические методы хроно-топографического анализа неустойчивости микрогетерогенного режима горения в процессах самораспространяющегося высокотемпературного синтеза материалов // Вестник Югорского государственного университета. 2019. № 1(52). С.75-81. (DOI: 10.1786/byusu20190175-81) <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=38213852>  
[https://www.elibrary.ru/download/elibrary\\_38213852\\_70241830.pdf](https://www.elibrary.ru/download/elibrary_38213852_70241830.pdf) (БАК)
14. Gulyaev P., Jordan V., Panchenko J. Trace-analysis of a combustion wave thermal instability using high-speed video images: experiment and simulation modelling // Информационные технологии и нанотехнологии: Сборник трудов V Международной конференции ИТНТ-2019 (21-24 мая 2019 г.). Том 3. Математическое моделирование физико-технических процессов и

- систем. Самара: Новая техника, 2019. С. 672-677. <https://elibrary.ru/item.asp?id=37574774> (РИНЦ)  
<http://repo.ssau.ru/bitstream/Informacionnye-tehnologii-i-nanotehnologii/Traceanalysis-of-a-combustion-wave-thermal-instability-using-highspeed-video-images-experiment-and-simulation-modeling-76336/1/paper104.pdf>
15. Григорьевская А.А., Гуляев П.Ю., Иордан В.И., Шмаков И.А. Вычислительная методика расчета признаков спиновой неустойчивости СВС по альбому трассе-образов дифференциальных хронограмм движения фронта горения // Высокопроизводительные вычислительные системы и технологии. 2019. Т. 3, № 2. С. 82-91.  
<https://elibrary.ru/item.asp?id=41829916>,  
[https://www.elibrary.ru/download/elibrary\\_41829916\\_87020699.pdf](https://www.elibrary.ru/download/elibrary_41829916_87020699.pdf) (РИНЦ)
16. Gulyaev P., Dolmatov A., Jordan V. Visualization of thermal diffusion instability of a combustion wave in Zeldovich-Barenblatt parameter // Информационные технологии и нанотехнологии: Сборник трудов V Международной конференции ИТНТ-2019 (21-24 мая 2019 г.). Том 3. Математическое моделирование физико-технических процессов и систем. Самара: Новая техника, 2019. С. 617-621. <https://elibrary.ru/item.asp?id=37574749> (РИНЦ)  
<http://repo.ssau.ru/bitstream/Informacionnye-tehnologii-i-nanotehnologii/Visualization-of-thermal-diffusion-instability-of-a-combustion-wave-in-ZeldovichBarenblatt-parameter-76328/1/paper96.pdf>
17. Gulyaev P., Dolmatov A. and Jordan V. Instability of the Ni-Al combustion wave in the Zeldovich-Barenblatt parameters // IOP Conference Series: Journal of Physics: Conf. Series. 2019. Vol. 1353. Article ID 012036. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/1353/1/012036/pdf> (статья проиндексирована в базах Scopus и Web of Science)
18. Иордан В.И., Бледнов В.А. Предсказание функциональных характеристик плазменных покрытий из порошков алюминидов титана методом компьютерного моделирования // Пленки и покрытия-2019: Труды 14-й Международной конференции. 14 мая – 16 мая 2019 г. / Под редакцией д-ра техн. наук В. Г. Кузнецова. – СПб: Изд-во Политехн. ун-та, 2019. – 640 с. - С. 428-431.
19. Jordan V.I. and Blednov V.A. Prediction of the functional characteristics of plasma titanium aluminide coatings by computer simulation // IOP Conference Series: Journal of Physics: Conf. Series. 2019. Vol. 1281. Article ID 012029. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/1281/1/012029/pdf> (статья проиндексирована в базах Scopus и Web of Science)
20. Jordan V.I. and Blednov V.A. Computer-aided detection of the optimal spraying modes of coatings based on intermetallic titanium-aluminum alloys // IOP Conference Series: Journal of Physics: Conf. Series. 2019. Vol. 1333. Article ID 042011.

<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/1333/4/042011/pdf> (статья проиндексирована в базах Scopus и Web of Science)

21. Jordan V.I., Kobelev D.I. Determination of distributions of key physical parameters of plasma jet particles by means of image stream processing during high-speed video filming // IOP Conference Series: Journal of Physics: Conf. Series. 2019. Vol. 1333. Article ID 032031. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/1333/3/032031/pdf> (статья проиндексирована в базах Scopus и Web of Science)

22. Иордан В.И., Кобелев Д.И., Астахов Е.С. Диагностика распределенных параметров гетерогенного газотермического потока методами обработки потока изображений при высокоскоростной видеосъемке // Высокопроизводительные вычислительные системы и технологии. 2019. Том 3. № 1. С. 89-93. <https://elibrary.ru/item.asp?id=39242601> (РИНЦ), [https://www.elibrary.ru/download/elibrary\\_39242601\\_10797555.pdf](https://www.elibrary.ru/download/elibrary_39242601_10797555.pdf)

23. Иордан В.И. Оптимизация параметров температурного распределения частиц газотермического потока по спектру теплового излучения частиц // Известия Алтайского государственного университета. - 2020. - № 1 (111).- С. 11-17. DOI 10.14258/izvasu(2020)1-01 [https://doi.org/10.14258/izvasu\(2020\)1](https://doi.org/10.14258/izvasu(2020)1) , <http://izvestiya.asu.ru/article/view/%282020%291-01/6157> <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=42550845> , [https://www.elibrary.ru/download/elibrary\\_42550845\\_24071786.pdf](https://www.elibrary.ru/download/elibrary_42550845_24071786.pdf) (БАК)