ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДВУХСТАДИЙНОГО ПРОЦЕССА СИНТЕЗА КОМПОЗИТА, УПРАВЛЯЕМОГО ПОДВИЖНЫМ ИСТОЧНИКОМ, В УСЛОВИЯХ СОПРЯЖЕННОГО ТЕПЛООБМЕНА

¹САЙФУЛЛИН Э. Р., ²КНЯЗЕВА А. Г.

¹ Национальный исследовательский Томский государственный университет,
634050, г. Томск, пр. Ленина, 36

² Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН,
634055, г. Томск, пр. Академический, 2/4

АННОТАЦИЯ. В работе предложена теплофизическая модель управляемого синтеза композита в слое между инертными материалами. Предполагается, что многостадийный процесс синтеза композита может быть описан двумя суммарными реакциями. Первая реакция ведет к формированию инертных включений. Вторая – к формированию матрицы. Соотношения между скоростями реакций зависят от исходного состава смеси. Управление нагревом и синтезом осуществляется нагретым роликом, движущимся по внешней поверхности материалов с одновременным приложением нагрузки. О режимах и полноте превращения предложено судить по среднеинтегральной степени превращения. Выявлено, что такая характеристика позволяет судить о роли как кинетических, так и технологических параметров.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: синтез композита, сопряженный теплообмен, давление прижатия, суммарная кинетика, численное моделирование, подвижный источник.

ВВЕДЕНИЕ

Появляющиеся новые технологии синтеза и обработки материалов требуют привлечения математического моделирования для изучения сопутствующих физико-химических явлений и оптимизации. Чем более сложными и многофакторными становятся технологии [1 – 4], тем острее проявляется необходимость учета при моделировании особенностей технологических условий. Немаловажная роль в управлении процессом синтеза принадлежит условиям теплообмена смеси, в которой идут химические превращения с окружающими телами (стенками камеры, подложками, охлаждающими устройствам, окружающей средой и др.). Это относится и к процессам синтеза композитов [1, 5 – 9], и к различным способам их соединения [10 – 13], и к современным аддитивным и комбинированным технологиям, использующим одновременно химические источники тепла и внешний нагрев [2, 14 – 16].

Моделированию процессов синтеза новых материалов в сопряженных условиях теплообмена посвящен целый ряд работ, связанных с описанием разных технологий: синтез композитов; соединение материалов, создание слоевых композиций. Например, в [17 – 20] численно изучается горение слоевых систем. В [21] анализируется модель горения цилиндрического слоя безгазовой смеси с теплопроводящим элементом и с неадиабатической боковой поверхностью. В [22 – 23] предложена модель распространения реакции в слое между инертными материалами по смеси, содержащей инертный наполнитель. Разные варианты режимов распространения реакции в слое между материалами с разными свойствами в рамках теплофизической модели описаны в [24 – 28]. Подобные модели оказались применимыми и к описанию режимов превращения в некоторых технологиях создания ламинированных объектов [29].

Однако, несмотря на большие возможности классических моделей, особенности сопряженных условий теплообмена и синтеза материалов в областях ограниченных объемов не позволяют использовать представление об узости зоны химической реакции для изучения

режимов превращения. Требуются иные критерии стационарности, полноты превращения, начала реакции и т.п. [30].

Цель настоящей работы состоит в численном исследовании управляемого процесса синтеза композита с учетом сопряженного теплообмена и выработке нового критерия для изучения роли физических параметров.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Полагаем, что синтез композита с упрочняющими частицами происходит в плоском слое, расположенном между двумя инертными пластинами (рис. 1). По поверхности верхней пластины движется роул радиуса R_0 , нагретый равномерно до некоторой температуры T_s . Площадь пятна контакта (области прогрева) ролла с верхней пластиной определяется радиусом ролла и давлением прижатия. Геометрические условия позволяют ограничиться двумерной постановкой задачи, представляющей собою трехслойную сопряженную задачу теплопроводности, дополненную кинетическими уравнениями для описания эволюции состава в процессе синтеза композита.

Задача теплопроводности включает в себя уравнения теплопроводности для инертных слоев

$$c_k \rho_k \frac{\partial T_k}{\partial t} = \lambda_k \left(\frac{\partial^2 T_k}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_k}{\partial y^2} \right) \quad (1)$$

и для реагента

$$c_G \rho_G \frac{\partial T_G}{\partial t} = \lambda_G \left(\frac{\partial^2 T_G}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_G}{\partial y^2} \right) + W, \quad (2)$$

где T_k – температура инертных слоев, $k = A, B$; T_G – температура в слое реагента; c_k – теплоемкость; ρ_k – плотность, λ_k – коэффициент теплопроводности ($k = A, B, G$), x и y – пространственные координаты, t – время; W – источник тепла в слое реагента вследствие химических реакций.

Рис. 1. Иллюстрация к постановке задачи. В скобках указаны размеры слоев в безразмерных переменных. Точки наблюдения: $K(0,0)$; $P(0,\Delta_B)$; $D(0,\Delta_B+0.5)$; $M(\bar{L}/2,\Delta_B+0.5)$; $N(\bar{L},\Delta_B+0.5)$; $Q(\bar{L},\Delta_B+1)$; $I(\bar{L},\Delta_B+\Delta_A+1)$

Полагаем, что комплекс химических реакций, приводящих к формированию состава композита, можно описать двумя суммарными стадиями [31]. Действительно, для систем $Al+Cr_2O_3+Ti$ и $Al+Fe_2O_3+Ni$ в соответствии с теплотами образования оксидов ожидается только одна реакция восстановления металла из оксида алюминием.

Из трех исходных компонентов в обеих системах алюминий тратится как на образование частиц, так и на образование матрицы. В первом случае имеем смесь

Один из продуктов реакции

приводящей к образованию упрочняющих частиц оксида алюминия, идет на образование матрицы в соответствии с суммарной реакцией

Следовательно, имеем суммарно две последовательно-параллельные стадии.

Во втором случае также из трех исходных компонентов в смеси

алюминий тратится как на образование частиц, так и на образование матрицы. Следовательно, опять имеем суммарно 2 последовательно-параллельные стадии:

В зависимости от концентрации исходных веществ, состав матрицы может быть разным. В общем случае превращения в системе можно описать следующей системой кинетических уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{dP_1}{dt} &= k_1(T)X^2Y, \\ \frac{dP_2}{dt} &= 2k_1(T)X^2Y - 2k_2(T)P_2^2XZ, \\ \frac{dP}{dt} &= k_2(T)P_2^2XZ. \end{aligned}$$

Здесь X – концентрация алюминия в смеси, P_1 – концентрация упрочняющих частиц, P_2 – концентрация промежуточного продукта, P – концентрация конечного продукта. Заметим, что компонент Y (оксид хрома в первом случае и оксид железа во втором) может быть исключен из явного рассмотрения. В представленной схеме этот компонент фактически влияет на скорость первой реакции и, следовательно, на концентрацию частиц. Включим его в новое определение скорости реакции, заменив $k_1(T)Y$ на $k_1'(T)$. Концентрация титана и никеля, обозначенная как Z , изменяет скорость второй реакции и состав матрицы. Это позволяет сделать аналогичную замену $k_2(T)Z$ на $k_2'(T)$. Далее штрихи опущены. Кроме того, закон действующих масс применим к только индивидуальным элементарным стадиям, а к суммарным – только формально. Учитывая сказанное, систему кинетических уравнений запишем в виде

$$\begin{aligned} \frac{dP_1}{dt} &= k_1(T)X^n, \\ \frac{dP_2}{dt} &= 2[k_1(T)X^n - k_2(T)P_2^m X^q], \\ \frac{dP}{dt} &= k_2(T)P_2^m X^q, \end{aligned} \quad (3)$$

где показатели степени определяются механизмом реакции на микроуровне,

$$X = 1 - P_1 - P_2 - P \quad (4)$$

– концентрация реагентов. Примем далее $n = 2$; $m = 2$; $q = 1$.

Суммарное тепловыделение в реакции есть

$$W = Q_1\Phi_1 + Q_2\Phi_2.$$

Скорости реакций зависят от температуры. Кроме того, возникающие в системе напряжения могут оказывать влияние как на тепловой эффект реакции, так и совершая работу, изменять скорость реакции. Опишем это следующим образом:

$$k_1(T) = k_{10} \exp\left(\alpha_1 \sigma_{\max} - \frac{E_1}{RT_G}\right); \quad k_2(T) = k_{20} \exp\left(\alpha_2 \sigma_{\max} - \frac{E_2}{RT_G}\right);$$

$$Q_1 = Q_{10} + \beta_1 \sigma_{\max}; \quad Q_2 = Q_{20} + \beta_2 \sigma_{\max},$$

где Q_{10} – тепловой эффект реакции образования упрочняющих частиц и промежуточного продукта без учета напряжений, и Q_{20} – тепловой эффект реакции образования матрицы без учета напряжений, β_1 и β_2 – комплексные физические величины, включающие в себя механические свойства, молярные массы и т.п. [32] (в настоящей работе для упрощения полагаем $\beta_1 = \beta_2 = 0$); $\sigma_{\max}$ – максимальное напряжение, возникающее в зоне контакта ролла и инертного слоя A ; k_{10} – предэкспонент реакции образования упрочняющих частиц, k_{20} – предэкспонент реакции образования матрицы; α_1 и α_2 – коэффициенты чувствительности скоростей реакции к напряжениям; E_1 – энергия активации образования упрочняющих частиц; E_2 – энергия активации образования промежуточного продукта; R – универсальная газовая постоянная.

Максимальное напряжение в зоне контакта инертного слоя A и ролла, движущегося с постоянной скоростью v , определяется равенством [33]:

$$\sigma_{\max} = \mu \sqrt{\frac{p}{2R_0(\theta_1 + \theta_2)}}. \quad (5)$$

Полуширина площадки контакта следует из формулы

$$s = \mu \sqrt{2pR_0(\theta_1 + \theta_2)}. \quad (6)$$

Здесь $\mu = 0.798$ – численный коэффициент, полученный при приближенном решении контактной задачи в [33]; p – давление прижатия ролла; $\theta_k = (1 - \nu_k)/E_k$ – комплексы из коэффициентов Пуассона и модулей упругости контактирующих тел.

Граничные условия запишем следующим образом.

Принимаем условия адиабатичности на торцах и в плоскости $y = 0$:

$$x = 0, \quad x = L: \quad \lambda_k \frac{\partial T_k}{\partial x} = 0, \quad k = B, G, A; \quad (7)$$

$$y = 0: \quad \lambda_B \frac{\partial T_B}{\partial x} = 0. \quad (8)$$

На границах раздела слоев полагаем справедливыми условия идеального теплового контакта:

$$y = H_B: \quad \lambda_B \frac{\partial T_B}{\partial y} = \lambda_G \frac{\partial T_G}{\partial y}; \quad T_B = T_G, \quad (9)$$

$$y = H_B + H_G: \quad \lambda_G \frac{\partial T_G}{\partial y} = \lambda_A \frac{\partial T_A}{\partial y}; \quad T_G = T_A. \quad (10)$$

На поверхности слоя A вследствие движения горячего ролла имеется подвижный источник тепла ограниченных размеров. Поэтому для $y = H_B + H_G + H_A$ в зоне соприкосновения ролла со слоем A имеется условие

$$T_A = T_s, \text{ если } vt + x_0 - s \leq x \leq vt + x_0 + s, \quad (11)$$

и

$$\frac{\partial T_A}{\partial y} = 0, \text{ если } x \leq \nu t + x_0 - s \text{ и } x \geq \nu t + x_0 + s, \quad (12)$$

где x_0 – начальное положение ролла.

В начальный момент времени $t = 0$ образец имеет температуру T_0 . В среднем слое есть только реагент $X = 1$.

ПЕРЕХОД К БЕЗРАЗМЕРНЫМ ПЕРЕМЕННЫМ

Перейдем к безразмерным переменным

$$\theta_k = \frac{T_k - T_s}{RT_s^2} E_1, \xi = \frac{x}{H_G}, \eta = \frac{y}{H_G}, \tau = \frac{t}{t_a}, \Pi = \frac{p}{p_*}, \quad (13)$$

где

$$t_a = \frac{c_G \rho_G R T_s^2}{k_{10} Q_1 E_1} \exp\left(\frac{E_1}{RT_s}\right) -$$

период адиабатической индукции при протекании только первой реакции;

$$p_* = \frac{H_G^2}{2\mu^2 R_0 (\theta_1 + \theta_2)}.$$

Тогда задача примет вид:

$$\begin{aligned} K_{ck} \frac{\partial \theta_k}{\partial \tau} &= \frac{K_{\lambda k}}{\delta} \left(\frac{\partial^2 \theta_k}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 \theta_k}{\partial \eta^2} \right), \quad k = A, B; \\ \frac{\partial \theta_G}{\partial \tau} &= \frac{1}{\delta} \left(\frac{\partial^2 \theta_G}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 \theta_G}{\partial \eta^2} \right) + \bar{\Phi}_1 + q\kappa \bar{\Phi}_2; \\ \frac{dP_1}{d\tau} &= \gamma \bar{\Phi}_1; \\ \frac{dP_2}{d\tau} &= 2\gamma (\bar{\Phi}_1 - \kappa \bar{\Phi}_2); \\ \frac{dP}{d\tau} &= \gamma \kappa \bar{\Phi}_2; \\ \xi = 0, \quad \xi = \bar{L}: \quad \frac{\partial \theta_k}{\partial \xi} &= 0, \quad k = A, G, B; \\ \eta = 0: \quad \frac{\partial \theta_B}{\partial \eta} &= 0; \\ \eta = \Delta_B: \quad K_{\lambda B} \frac{\partial \theta_B}{\partial \eta} &= \frac{\partial \theta_G}{\partial \eta}; \quad \theta_B = \theta_G; \\ \eta = 1 + \Delta_B: \quad \frac{\partial \theta_G}{\partial \eta} &= K_{\lambda A} \frac{\partial \theta_A}{\partial \eta}; \quad \theta_G = \theta_A \\ \eta = 1 + \Delta_B + \Delta_A: \quad \theta_A &= 0, \text{ если } \omega\tau + \xi_0 - \xi_A \leq \xi \leq \omega\tau + \xi_0 + \xi_A \\ \text{и } \frac{\partial \theta_A}{\partial \eta} &= 0 \text{ в других точках этой поверхности;} \\ \tau = 0: \quad \theta_k &= -\theta_0, \quad X = 1. \end{aligned} \quad (14)$$

Здесь

$$\bar{\Phi}_1 = X^2 \exp\left(\bar{\alpha}_1 \sigma + \frac{\theta}{1 + \beta \theta}\right); \quad \bar{\Phi}_2 = X P_2^2 \exp\left(\bar{\alpha}_2 \sigma + \frac{\theta + \varepsilon}{1 + \beta \theta}\right).$$

Задача включает в себя геометрические параметры: длину образца, высоты инертных слоев A и B . Высота слоя G в безразмерных переменных равна единице ($H_G = 1$).

$$\bar{L} = \frac{L}{H_G}, \Delta_A = \frac{H_A}{H_G}, \Delta_B = \frac{H_B}{H_G} \text{ и } \nu = \frac{\mu^2}{H_G} \quad (\mu = 0.798).$$

Безразмерные параметры, связанные с технологическими условиями:

$$\Pi, \xi_0 = \frac{x_0}{H_G}, \omega = \frac{\nu t_a}{H_G},$$

так что

$$\xi_A = \sqrt{\Pi}, \sigma = \nu \sqrt{\Pi}.$$

Безразмерные параметры, связанные с теплофизическими свойствами слоев и с химическими реакциями в слое G :

$$\begin{aligned} K_{CA} &= \frac{c_A \rho_A}{c_G \rho_G}, K_{CB} = \frac{c_B \rho_B}{c_G \rho_G}, K_{\lambda A} = \frac{\lambda_A}{\lambda_G}, K_{\lambda B} = \frac{\lambda_B}{\lambda_G}, \\ \theta_0 &= \frac{T_S - T_0}{RT_S^2} E_1, \delta = \frac{H_G^2 c_G \rho_G}{\lambda_G t_a}, \gamma = \frac{c_G \rho_G R T_S^2}{Q_1 E_1}, \beta = \frac{RT_S}{E_1}, \\ \kappa &= \frac{k_{20}}{k_{10}}, \bar{\alpha}_k = p_* \alpha_k, \varepsilon = \frac{E_1 - E_2}{RT_S} = \frac{E_1 - E_2}{\beta E_1}, q = \frac{Q_2}{Q_1}. \end{aligned}$$

МЕТОД РЕШЕНИЯ

Задача (14) решена численно с использованием неявной разностной схемы, расщепления по координатам и линейной прогонки [34]. Кинетические уравнения были численно решены методом Эйлера. Разностная схема для решения системы кинетических уравнений представлена в Приложении 1.

Здесь и далее (если это не оговаривается специально) в расчетах используются следующие параметры: $K_{CA} = K_{CB} = K_{\lambda A} = K_{\lambda B} = 1$ – свойства слоев одинаковы; $\beta = 0.03$; $\theta_0 = 10$ (начальная температура образца $\theta_k = -\theta_0$); $\delta = 50$; $\gamma = 0.03$; $\varepsilon = 0.2$ ($E_1 > E_2$) – энергия активации образования упрочняющих частиц больше энергии активации образования промежуточного слоя; $\kappa = 0.6$; $q = 0.6$ – тепловой эффект реакции образования упрочняющих частиц больше теплового эффекта образования матрицы; принято $\bar{\alpha}_1 = \bar{\alpha}_2 = 0$, т.е. не учитывается чувствительность скоростей реакции к напряжениям; $\bar{L} = 12$; $\nu = 0.4$; $\xi_0 = 0$, т.е. ролл начинает движение с левого края образца.

Для проверки сходимости решения и последующего анализа результатов были выбраны несколько точек наблюдения: $K(0,0)$; $D(0, \Delta_B + 0.5)$; $P(0, \Delta_B)$; $M(\bar{L}/2, \Delta_B + 0.5)$, $N(\bar{L}, \Delta_B + 0.5)$; $I(\bar{L}, \Delta_B + \Delta_A + 1)$; $Q(\bar{L}, \Delta_B + 1)$. Как видно из таблицы, представленной в Приложении 2 для $\Pi = 1$; $\omega = 0.01$, при изменении шагов по пространству и времени результаты вычисления температуры в точках наблюдения различаются менее чем на 1 %, что подтверждает хорошую сходимость численного решения.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 2 представлены зависимости температуры от времени в некоторых точках образца для $\omega = 0.005$ и $\delta = 50$, слева – в инертных материалах, справа – в слое реагента. Даже при идентичных свойствах материалов поле температуры оказывается неоднородным вследствие явления теплопроводности и движения ролла. В каждой выбранной точке температура ведет себя различным образом (см. кривые 1 и 2 или 3, 4 и 5 на рис. 2, a и

рис. 2, б соответственно). Увеличение давления прижатия приводит к увеличению области контакта и, следовательно, к ускорению степени нагрева, что влечет за собой и ускорение реакций. Дополнительно неоднородный характер поля температуры иллюстрирует рис. 3, где более темный цвет соответствует области, более близкой к подвижному источнику тепла. Пунктирные линии на рисунке, параллельные оси абсцисс, соответствуют границам раздела между реагентом и инертными материалами.

Рис. 2. Зависимость температуры от времени для $\omega = 0.005$; $\delta = 50$ при варьировании значения давления прижатия рола: сплошная кривая – $\Pi = 0.1$; кривая с крупным пунктиром – $\Pi = 1$; кривая с мелким пунктиром – $\Pi = 4$. Цифрами обозначены точки наблюдения: 1 – $K(0,0)$; 2 – $I(L, \Delta_B + \Delta_A + 1)$; 3 – $D(0, \Delta_B + 0.5)$; 4 – $M(\bar{L}/2, \Delta_B + 0.5)$; 5 – $N(\bar{L}/2, \Delta_B + 0.5)$

Рис. 3 Двумерные распределения температуры при $\omega = 0.005$; $\Pi = 0.1$; $\delta = 50$

Как правило, химические реакции начинаются не сразу. Достаточно длительный промежуток времени реакции практически не идут, пока не сформируется необходимый прогретый слой, и максимальная температура в нем не приведет к ускорению реакций. Реакции продолжают и после того, как рола покинет область начального прогрева или образец. Например, для тех же параметров, что и на рис. 2, на рис. 4 показана зависимость концентрации продуктов реакций и реагента от времени. Очевидно, промежуточный продукт образуется в первой реакции, а затем тратится, в то время как исходные реагенты только расходуются. Увеличение давления прижатия рола приводит к ускорению реакций, но в целом характер кривых не изменяется.

Рис. 4. Зависимость концентрации реагента и продуктов от времени для $\omega = 0.005$; $\delta = 50$ при варьировании значений давления прижатия рола. Слева кривые соответствуют границам реагента и инертных слоев; справа – области реагента; сплошная кривая – $\Pi = 0.1$; кривая с крупным пунктиром – $\Pi = 1$; кривая с мелким пунктиром – $\Pi = 4$. Цифрами обозначены точки наблюдения: 1 – $P(0, \Delta_B)$; 2 – $Q(L, \Delta_B + 1)$; 3 – $D(0, \Delta_B + 0.5)$; 4 – $M(\bar{L}/2, \Delta_B + 0.5)$; 5 – $N(\bar{L}/2, \Delta_B + 0.5)$

Увеличение параметра δ , который характеризует размер области прогрева по сравнению с шириной области, занятой реагентом, приводит к замедлению роста температуры (рис. 5) и к еще большей неоднородности процесса синтеза.

Ни в одной из рассмотренных ситуаций не устанавливается стационарный или квазистационарный режим, так как идет постоянный подвод тепла от инертных материалов, способствующий поддержанию реакции, или, наоборот, тепло из области реагента тратится на прогрев инертных материалов, если тепловыделение в реакции велико. Поэтому требуется выработать критерий, который позволял бы судить о возможности активации и/или завершения процесса синтеза.

Для образца конечных размеров будем определять среднеинтегральные концентрации реагента и продуктов реакций

$$Y_k = \frac{1}{L} \int_0^{\bar{L}} \int_{\Delta_B}^{\Delta_B+1} y_k d\xi d\eta,$$

где $y_k = X, P_1, P_2, P$.

Из рис. 5 видно, что при $\omega = 0.005$; $\Pi = 4$; $\delta = 50$ реакции не завершаются полностью, и через достаточно длительный промежуток времени в смеси остается некоторая доля исходных веществ. В этом случае о процессе можно судить по величине среднеинтегральной концентрации реагентов, равной 0.5. Это соответствует времени полупревращения и показано на рис. 5 пунктирной линией. Кроме того, значения концентраций для момента времени, когда реакции можно считать практически прекратившимися, могут характеризовать состав продукта синтеза. В дальнейшем, при учете теплотерьер и процесса охлаждения, продукт будет характеризовать состав, полученный в результате всех технологических стадий, что пока в модели не отражено.

Рис. 5. Зависимость среднеинтегральных концентраций реагента и продуктов реакций от времени для $\omega = 0.005$; $\Pi = 4$; $\delta = 50$: 1 – концентрация упрочняющих частиц (P_1); 2 – концентрация промежуточного продукта (P_2); 3 – концентрация конечного продукта (P); 4 – концентрация реагента (X). Пунктирная линия соответствует величине концентрации равной 0.5

Примеры зависимостей времени полупревращения от параметров модели показаны на рис. 6. С увеличением давления прижатия растет температура, что приводит к уменьшению времени полупревращения при любых значениях δ (рис. 6, а, б). Чем выше скорость движения ролла, тем быстрее прогревается внешняя поверхность инертного материала (но до меньшей температуры), с одной стороны, с другой, – тем меньше тепла успевает отдать ролл за время движения. При этом быстрее формируется прогретый слой, необходимый для ускорения реакций. Чем больше δ , тем более неоднородным оказывается температурное поле, тем медленнее формируется область прогрева и позже стартуют реакции (рис. 6, в).

Из рис. 6, з отчетливо видно, что при $\varepsilon \ll 0$ и $\varepsilon \gg 0$ ведущей становится одна из стадий, которая и определяет скорость процесса синтеза композита. В области в окрестности $\varepsilon = 0$ наблюдается взаимодействие реакций и переход от одного режима к другому. Подобные зависимости вполне соответствуют традиционным представлениям химической кинетики.

Рис. 6. Зависимость времени полупревращения t_p от параметров модели: а) – от величины давления прижатия ролла $\omega = 0.001$; $\varepsilon = 1$; $\kappa = 0.6$; б) – от δ для $\omega = 0.001$; $\varepsilon = 1$; $\kappa = 0.6$: 1 – $\Pi = 0.1$; 2 – $\Pi = 1$; 3 – $\Pi = 10$; в) – от ω ; $\delta = 25$; $\varepsilon = 1$; $\kappa = 0.6$; $\Pi = 1$; г) – от ε при $\delta = 25$; $\omega = 0.001$; $\kappa = 0.6$; $\Pi = 1$. На а – в цифрами указаны различные значения δ : 1 – $\delta = 5$; 2 – $\delta = 25$; 3 – $\delta = 50$, на рисунке г указаны различные значения параметра q : 1 – $q = 0.2$; 2 – $q = 0.6$; 3 – $q = 1$

Состав продуктов к моменту полупревращения и температуру характеризуют рис. 7 и рис. 8. При любом наборе параметров реагент прогреет неоднородно, о чем говорит разная температура в разных точках (рис. 7, а), что приводит к разной динамике изменения состава в разных точках (рис. 7, в и г). Существуют две предельные области среднеинтегрального состава продуктов (при фиксированных иных параметрах). Если $\varepsilon < -2.5$, слой G к моменту полупревращения (кривая 4 на рис. 7, б) содержат значительное количество промежуточного продукта. В этом случае энергия активации второй реакции существенно превышает энергию активации первой. В случае $\varepsilon \gg 1$ к моменту полупревращения имеются только реагенты, частицы и матрица, не содержащая промежуточных продуктов. Это также согласуется с традиционными представлениями химической кинетики.

Рис. 7. Зависимость к моменту полупревращения температуры (а) в выбранных точках, интегральных концентраций (б) и концентраций всех веществ (в и г) в точках D (в) и M (г) от соотношения энергий активации реакций. $\Pi = 1$; $\delta = 25$; $\omega = 0.001$; $\kappa = 0.6$ (а): 1 – $D(0, \Delta_B + 0.5)$; 2 – $M(\bar{L}/2, \Delta_B + 0.5)$; 3 – $N(\bar{L}, \Delta_B + 0.5)$; (б – г): 1 – упрочняющие частицы; 2 – промежуточный продукт; 3 – конечный продукт; 4 – реагент

В соответствии с постановкой задачи, параметр κ характеризует не только соотношение скоростей реакций, но исходный состав реагентов. Даже при незначительном увеличении этого параметра наблюдается изменение как температуры, так и состава продуктов (рис. 8). Наиболее быстро изменяется концентрация промежуточного продукта, который тратится на формирование матрицы.

В случае образца достаточно больших размеров, как и в [29], может установиться квазистационарный режим, однако область, где происходят реакции, остается достаточно широкой; о фронте реакции говорить сложно. Результат можно характеризовать и некоторым предельным составом, который может сформироваться за достаточно большое время, поскольку запасенное в инертных материалах тепло, способствует завершению реакций. Конечный состав, очевидно, зависит только от параметров, характеризующих реакции, т.е. должен быть термодинамически равновесным, если нет принудительного охлаждения или кинетических затруднений, что в модели не учтено.

Рис. 8. Зависимость κ моменту полупревращения температуры (а) в выбранных точках; среднеинтегральных концентраций (б) и концентраций в точках D (в) и M (г) от соотношения предэкспонентов реакций. $\Pi=1$; $\delta=25$; $\omega=0.001$; $\varepsilon=1$ (а): 1 – $D(0, \Delta_B + 0.5)$; 2 – $M(\bar{L}/2, \Delta_B + 0.5)$; 3 – $N(\bar{L}, \Delta_B + 0.5)$; (б–г): 1 – упрочняющие частицы; 2 – промежуточный продукт; 3 – конечный продукт; 4 – реагент

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в работе предложена модель процесса синтеза композита в условиях управления подвижным воздействием. Показано, что при наличии сопряженного теплообмена зона реакции не может быть узкой, и в большинстве случаев невозможно говорить о распространении фронта реакции. Зоной реакции может быть охвачен весь реагент. Предложено судить о динамике процесса по поведению среднеинтегральных концентраций, которые дают представление как об иницировании реакции, так и о последующей эволюции состава. Показано, что зависимость времени полупревращения от параметров модели не противоречит представлениям химической кинетики и вполне может служить критерием протекания реакции в сопряженных условиях теплообмена.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 20-03-00303.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Рогачев А. С., Мукасян А. С. Горение для синтеза материалов: введение в структурную макрокинетику. М.: Физматлит, 2013. 400 с.
2. Najmon J. C., Raeisi S., Tovar A. Review of additive manufacturing technologies and applications in the aerospace industry // In book: Additive Manufacturing for the Aerospace Industry, 2019, Chapter 2, pp. 7-31.

3. Мержанов А. Г. Процессы горения и синтез материалов. Сборник статей, под. ред. В.Т. Телепы, А.В. Хачояна. Черноголовка: Изд-во ИСМАН, 1998. 512 с.
4. Макино А., Одавара О., Миямото Е. и др. Химия синтеза сжиганием / под ред. М. Коидзуми, пер. с яп. А.В. Хачояна. М.: Мир, 1998. 247 с.
5. Щербаков В. А., Грядунов А. Н., Баринюв Ю. Н., Ботвина О. И. Синтез и свойства композитов на основе боридов циркония и хрома // Известия высших учебных заведений. Порошковая металлургия и функциональные покрытия. 2018. № 1. С. 18-25.
6. Levashov E. A., Mukasyan A. S., Rogachev A. S., Shtansky D. V. Self-propagating high-temperature synthesis of advanced materials and coatings // International Materials Reviews, 2017, vol. 62, iss. 4, pp. 1-37.
7. Naplocha K. Self-propagating high-temperature synthesis (SHS) of intermetallic matrix composites // In book: Intermetallic Matrix Composites. Properties and Applications, 2018, Chapter 8, pp. 203-220.
8. Дворецкий Д. С., Дворецкий С. И., Стельмах Л. С., Столин А. М. Системный анализ и оптимизация процессов СВС-формования твердосплавных материалов // Вестник Тамбовского государственного технического университета. 2015. Т. 21, № 2. С. 344-359.
9. Yousefian R., Emadoddin E., Baharnezhad S. Manufacturing of the aluminum metal-matrix composite reinforced with micro- and nanoparticles of TiO_2 through accumulative roll bonding process (ARB) // Reviews on Advanced Materials Science, 2018, vol. 55, iss. 1, pp. 1-11.
10. Zhu W., Wu F., Wang B., Hou E., Wang P., Liu C., Xia W. Microstructural and Mechanical Integrity of Cu/Cu Interconnects Formed by Self-Propagating Exothermic Reaction Method // Microelectronic Engineering, 2014, vol. 128, pp. 24-30.
11. Sytshev A. E., Vadchenko S. G., Kamynina O. K., Sachkova N. V. Simultaneous Synthesis and Joining of a Ni-Al-Based Layer to a Mo Foil by SHS // International Journal of Self-Propagating High-Temperature Synthesis, 2009, vol. 18, no. 3, pp. 213-216.
12. Colombini E., Rosa R., Veronesi P., Cavallini M., Poli G., Leonelli C. Microwave Ignited Combustion Synthesis As a Joining Technique for Dissimilar Materials: Modeling and Experimental Results // International Journal of Self-Propagating High-Temperature Synthesis, 2012, vol. 21, iss. 1, pp. 25-31.
13. Lin Y.-Ch., McGinn P. J., Mukasyan A. S. High temperature rapid reactive joining of dissimilar materials: silicon carbide to aluminum alloy // Journal of the European Ceramic Society, 2012, vol. 32, iss. 14, pp. 3809-3818.
14. Dermeik B., Travitzky N. Laminated object manufacturing of ceramic-based materials // Advanced Engineering Materials, 2020, vol. 22, iss. 9, pp. 2000256(1-24).
15. Kotoban D., Nazarov A., Shishkovsky I. Comparative study of selective laser melting and direct laser metal deposition of Ni_3Al intermetallic alloy // Procedia IUTAM, 2017, vol. 23, pp. 138-146.
16. Шишковский И. В. Лазерный синтез функционально-градиентных мезоструктур и объемных изделий. М.: Физматлит, 2009. 424 с.
17. Писклов А. В., Прокофьев В. Г., Смоляков В. К. Безгазовое горение слоевого пакета в неадиабатических условиях // Известия вузов. Цветная металлургия. 2006. № 5. С. 102-108.
18. Прокофьев В. Г., Лапшин О. В., Смоляков В. К. Макрокинетика горения слоевых композиций с легкоплавким инертным слоем // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2018. № 52. С. 102-113.
19. Prokof'ev V. G., Smolyakov V. K. Gasless combustion in two-layer structures: A theoretical model // International Journal of Self-Propagating High-Temperature Synthesis, 2013, vol. 22, no. 1, pp. 5-10.
20. Прокофьев В. Г., Смоляков В. К. Безгазовое горение системы термически сопряженных слоев // Физика горения и взрыва. 2016. Т. 52, № 1. С. 70-75. <https://doi.org/10.15372/FGV20160108>
21. Прокофьев В. Г., Писклов А. В., Смоляков В. К. Влияние теплопроводящего элемента на безгазовое горение образцов цилиндрической формы в неадиабатических условиях // Физика горения и взрыва. 2007. Т. 42, № 1. С. 66-71.
22. Чащина А. А., Князева А. Г. Режимы распространения твердофазной реакции в щели между двумя инертными пластинами // Физическая мезомеханика. Материалы международной конференции по физической мезомеханике, компьютерному конструированию и разработке новых материалов. 2004. Т. 7, № S1-1. С. 82-88.
23. Чащина А. А., Князева А. Г. Режимы соединения материалов с использованием синтеза в твердой фазе // Химия в интересах устойчивого развития. 2005. Т. 13, № 2. С. 343-350.

24. Aligozhina K. A., Knyazeva A. G. Modeling of the heat and kinetic phenomena accompanying the different material joining using solid-phase synthesis // *Advanced Materials Research*, 2014, vol. 1040, pp. 519-524.
25. Aligozhina K. A., Knyazeva A. G. The influence of the layer sizes on the conversion regimes realizing at layered composite synthesis // *AIP Conference Proceedings*, 2014, vol. 1623, pp. 7-10.
26. Aligozhina K. A., Knyazeva A. G. Numerical investigation of thermophysical processes accompanying the solid-phase synthesis of a multilayer composite taking into account the melting reactive layer // *AIP Conference Proceedings*, 2015, vol. 1683, pp. 020003(1-4).
27. Aligozhina K. A., Knyazeva A. G. Chemical reaction front propagation between inert materials with different properties taking into account the reagent melting // *Key Engineering Materials*, 2016, vol. 685, pp. 789-793.
28. Алигожина К. А., Князева А. Г. Моделирование распространения твердофазной реакции в условиях сопряженного теплообмена // *Физика горения и взрыва*. 2017. № 4. С. 48-57. <https://doi.org/10.15372/FGV20170405>
29. Knyazeva A. G. Model of chemical conversion initiation in the adhesive bonding layer during roll motion in the process of laminated object creation // *Nanoscience and Technology. An International Journal*, 2018, vol. 9, iss. 1, pp. 77-89.
30. Князева А. Г. Особенности инициирования химических реакций в плоском слое подвижным источником энергии // Сборник трудов Десятой Всероссийской конференции "Внутрикамерные процессы и горение в установках на твердом топливе и ствольных системах" (ICOC'2020). 2020. С. 117-132.
31. Knyazeva A. G. Coupling model of the combustion synthesis of composite with reinforcing inclusions // *Proceedings 7th International Congress on Energy Fluxes and Radiation Effects (EFRE)*, 2020, pp. 1222-1226.
32. Knyazeva A. G., Bukrina N. V. A coupled mathematical model for the synthesis of composites // *Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics*, 2020, vol. 13, no. 6, pp. 708-717.
33. Биргер И. А., Шорп Б. Ф., Иосилевич Г. Б. Расчёт на прочность деталей машин: Справочник. М.: Машиностроение, 1993. 640 с.
34. Самарский А. А. Теория разностных схем. 3-е изд., исправленное. М.: Наука, 1989. 616 с.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

Для решения системы кинетических уравнений

$$\frac{dP_1}{d\tau} = \gamma \bar{\Phi}_1; \quad (1)$$

$$\frac{dP_2}{d\tau} = 2\gamma(\bar{\Phi}_1 - \kappa \bar{\Phi}_2); \quad (2)$$

$$\frac{dP}{d\tau} = \gamma \kappa \bar{\Phi}_2. \quad (3)$$

Используется следующий алгоритм. Детали покажем на уравнении (1)

$$\frac{dP_1}{d\tau} = X^2 \gamma \exp\left(\bar{\alpha}_1 \sigma + \frac{\theta_G}{1 + \beta \theta_G}\right),$$

Используя баланс масс, запишем

$$\frac{dP_1}{d\tau} = \gamma(1 - P - P_1 - P_2)^2 \exp\left(\bar{\alpha}_1 \sigma + \frac{\theta_G}{1 + \beta \theta_G}\right),$$

$$P_{li} - \check{P}_{li} = \Delta \tau \gamma \left[(-P_{li}) + \left(1 - \check{P}_i - \check{P}_{2i} \right) \right] \left[\left(1 - \check{P}_i - \check{P}_{li} - \check{P}_{2i} \right) \exp\left(\bar{\alpha}_1 \sigma + \frac{\check{\theta}_G}{1 + \beta \check{\theta}_G}\right) \right],$$

где знак « $\check{}$ » означает, что величина берется с предыдущего слоя по времени.

Тогда

$$P_{li} = \frac{\check{P}_{li} + \left(1 - \check{P}_i - \check{P}_{2i}\right) Z_1}{1 + Z_1},$$

где

$$Z_1 = \Delta \tau \gamma \left(1 - \check{P}_i - \check{P}_{li} - \check{P}_{2i}\right) \exp \left(\bar{\alpha}_1 \sigma + \frac{\check{\theta}_G}{1 + \beta \check{\theta}_G} \right).$$

Аналогично поступаем со вторым и третьим уравнениями:

$$\frac{dP_2}{d\tau} = 2\gamma \left[(1 - P - P_1 - P_2)^2 \exp \left(\bar{\alpha}_1 \sigma + \frac{\theta_G}{1 + \beta \theta_G} \right) - (1 - P - P_1 - P_2) P_2^2 \kappa \exp \left(\bar{\alpha}_2 \sigma + \frac{\theta_G + \varepsilon}{1 + \beta \theta_G} \right) \right],$$

$$P_{2i} = 2\gamma \left[\Delta \tau \left(1 - \check{P}_i - \check{P}_{li} - P_{2i}\right) \left(1 - \check{P}_i - \check{P}_{li} - \check{P}_{2i}\right) \exp \left(\bar{\alpha}_1 \sigma + \frac{\check{\theta}_G}{1 + \beta \check{\theta}_G} \right) - \right. \\ \left. - \Delta \tau \kappa P_{2i} \check{P}_{2i} \left(1 - \check{P}_i - \check{P}_{li} - \check{P}_{2i}\right) \exp \left(\bar{\alpha}_2 \sigma + \frac{\check{\theta}_G + \varepsilon}{1 + \beta \check{\theta}_G} \right) \right] + \check{P}_{2i},$$

$$P_{2i} = \frac{\check{P}_{2i} + \left(1 - \check{P}_i - \check{P}_{li}\right) Z_2}{1 + Z_2 + Z_3},$$

где

$$Z_2 = 2\gamma \Delta \tau \left(1 - \check{P}_i - \check{P}_{li} - \check{P}_{2i}\right) \exp \left(\bar{\alpha}_1 \sigma + \frac{\check{\theta}_G}{1 + \beta \check{\theta}_G} \right),$$

$$Z_3 = 2\gamma \Delta \tau \kappa \check{P}_{2i} \left(1 - \check{P}_i - \check{P}_{li} - \check{P}_{2i}\right) \exp \left(\bar{\alpha}_2 \sigma + \frac{\check{\theta}_G + \varepsilon}{1 + \beta \check{\theta}_G} \right).$$

$$\frac{dP}{d\tau} = \gamma \kappa P_2^2 (1 - P - P_1 - P_2) \exp \left(\bar{\alpha}_2 \sigma + \frac{\theta_G + \varepsilon}{1 + \beta \theta_G} \right),$$

$$P_i = \check{P}_i + \Delta \tau \gamma \kappa \check{P}_{2i}^2 \left(1 - \check{P}_i - \check{P}_{li} - \check{P}_{2i}\right) \exp \left(\bar{\alpha}_2 \sigma + \frac{\check{\theta}_G + \varepsilon}{1 + \beta \check{\theta}_G} \right),$$

$$P_i = \frac{\check{P}_i + \left(1 - \check{P}_{li} - \check{P}_{2i}\right) Z_4}{[1 + Z_4]},$$

где

$$Z_4 = \Delta \tau \gamma \kappa \check{P}_{2i}^2 \exp \left(\bar{\alpha}_2 \sigma + \frac{\check{\theta}_G + \varepsilon}{1 + \beta \check{\theta}_G} \right).$$

Проверка сходимости численного решения

$\Delta\tau$	$\Delta\xi = \Delta\eta$	$T(x=0, y=ny/2)$	$T(x=L/4, y=ny/2)$	$T(x=L/3, y=ny/2)$	$T(x=L/2, y=ny/2)$
1	0.02	-5.4733	-5.3911	-5.3250	-5.1177
	0.01	-5.4608	-5.3786	-5.3125	-5.1052
	0.005	-5.4588	-5.3766	-5.3106	-5.1035
	0.0025	-5.4576	-5.3755	-5.3095	-5.1025
0.5	0.02	-5.4355	-5.3530	-5.2867	-5.0783
	0.01	-5.4228	-5.3402	-5.2739	-5.0655
	0.005	-5.4158	-5.3332	-5.2668	-5.0585
	0.0025	-5.4144	-5.3318	-5.2655	-5.0573
0.25	0.02	-5.4076	-5.3248	-5.2583	-5.0492
	0.01	-5.3951	-5.3123	-5.2458	-5.0367
	0.005	-5.3879	-5.3050	-5.2384	-5.0293
	0.0025	-5.3840	-5.3011	-5.2345	-5.0254

Numerical Study of the Two-Stage Process of Synthesis of a Composite Controlled by a Moving Source Under Conditions of Conjugate Heat Exchange

¹Sayfullin E. R., ²Knyazeva A. G.

¹National Research Tomsk State University, Tomsk, Russia

²Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, Russia

SUMMARY. The paper proposes a thermophysical model of controlled synthesis of a composite in a layer between inert materials. It is assumed that the multistage composite synthesis process can be described by two total reactions. The first reaction leads to the formation of inert inclusions. The second one leads to matrix formation. The ratios between reaction rates depend on the initial composition of the mixture. Heating and synthesis are controlled by a heated roll moving on the outer surface of the materials with simultaneous application of the load. It was proposed to judge the modes and completeness of transformation by the average integral degree of transformation. It was found that such a characteristic allows to judge the role of both kinetic and technological parameters.

KEYWORDS: composite synthesis, conjugate heat exchange, compression pressure, summary kinetics, numerical modeling, motion source.

REFERENCES

1. Rogachev A. S., Mukasyan A. S. *Gorenie dlya sinteza materialov: vvedenie v strukturnuyu makrokinetiku* [Combustion for Synthesis of Materials: An Introduction to Structural Macrokinetics]. Moscow: Fizmatlit Publ., 2013. 400 p. (In Russian).
2. Najmon J. C., Raeisi S., Tovar A. Review of additive manufacturing technologies and applications in the aerospace industry. In book: *Additive Manufacturing for the Aerospace Industry*, 2019, Chapter 2, pp. 7-31. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-814062-8.00002-9>
3. Merzhanov A. G. *Protsessy goreniya i sintez materialov* [Combustion processes and materials synthesis]. Sbornik statey, pod. red. V.T. Telepy, A.V. Khachoyana. Chernogolovka: ISMAN Publ., 1998. 512 p. (In Russian).
4. Makino A., Odavara O., Miyamoto E. i dr. *Khimiya sinteza szhiganiem* [Chemistry of combustion synthesis]. Pod red. M. Koidzumi; per. s yap. A.V. Khachoyana. Moscow: Mir Publ., 1998. 247 p. (In Russian).

5. Shcherbakov V. A., Gryadunov A. N., Barinov Yu. N., Botvina O. I. Sintez i svoystva kompozitov na osnove boridov tsirkoniya i khroma [Synthesis and properties of composites based on zirconium and chromium borides]. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Poroshkovaya metallurgiya i funktsional'nye pokrytiya* [Russian Journal of Non-Ferrous Metals], 2018, no. 1, pp. 18-25. (In Russian). <https://doi.org/10.17073/1997-308X-2018-1-18-25>
6. Levashov E. A., Mukasyan A. S., Rogachev A. S., Shtansky D. V. Self-propagating high-temperature synthesis of advanced materials and coatings. *International Materials Reviews*, 2017, vol. 62, iss. 4, pp. 1-37. (In Russian). <https://doi.org/10.1080/09506608.2016.1243291>
7. Naplocha K. Self-propagating high-temperature synthesis (SHS) of intermetallic matrix composites. In book: *Intermetallic Matrix Composites. Properties and Applications*, 2018, Chapter 8, pp. 203-220. <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-85709-346-2.00008-X>
8. Dvoretzkiy D. S., Dvoretzkiy S. I., Stel'makh L. S., Stolin A. M. Sistemnyy analiz i optimizatsiya protsessov SVS-formovaniya tverdosplavnykh materialov [System analysis and optimization of the processes of SHS-compaction of hard-alloy materials]. *Vestnik Tambovskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta* [Transactions TSTU], 2015, vol. 21, no. 2, pp. 344-359. (In Russian). <https://doi.org/10.17277/vestnik.2015.02.pp.344-359>
9. Yousefian R., Emadoddin E., Baharnezhad S. Manufacturing of the aluminum metal-matrix composite reinforced with micro- and nanoparticles of TiO₂ through accumulative roll bonding process (ARB). *Reviews on Advanced Materials Science*, 2018, vol. 55, iss. 1, pp. 1-11. <https://doi.org/10.1515/rams-2018-0022>
10. Zhu W., Wu F., Wang B., Hou E., Wang P., Liu C., Xia W. Microstructural and Mechanical Integrity of Cu/Cu Interconnects Formed by Self-Propagating Exothermic Reaction Method. *Microelectronic Engineering*, 2014, vol. 128, pp. 24-30. <https://doi.org/10.1016/j.mee.2014.05.035>
11. Sytshev A. E., Vadchenko S. G., Kamynina O. K., Sachkova N. V. Simultaneous Synthesis and Joining of a Ni-Al-Based Layer to a Mo Foil by SHS. *International Journal of Self-Propagating High-Temperature Synthesis*, 2009, vol. 18, no. 3, pp. 213-216. <https://doi.org/10.3103/S1061386209030133>
12. Colombini E., Rosa R., Veronesi P., Cavallini M., Poli G., Leonelli C. Microwave Ignited Combustion Synthesis As a Joining Technique for Dissimilar Materials: Modeling and Experimental Results. *International Journal of Self-Propagating High-Temperature Synthesis*, 2012, vol. 21, iss. 1, pp. 25-31. <https://doi.org/10.3103/S1061386212010050>
13. Lin Y.-Ch., McGinn P. J., Mukasyan A. S. High temperature rapid reactive joining of dissimilar materials: silicon carbide to aluminum alloy. *Journal of the European Ceramic Society*, 2012, vol. 32, iss. 14, pp. 3809-3818. <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2012.05.002>
14. Dermeik B., Travitzky N. Laminated object manufacturing of ceramic-based materials. *Advanced Engineering Materials*, 2020, vol. 22, iss. 9, pp. 2000256(1-24). <https://doi.org/10.1002/adem.202000256>
15. Kotoban D., Nazarov A., Shishkovsky I. Comparative study of selective laser melting and direct laser metal deposition of Ni₃Al intermetallic alloy. *Procedia IUTAM*, 2017, vol. 23, pp. 138-146. <https://doi.org/10.1016/j.piutam.2017.06.014>
16. Shishkovskiy I. V. *Lazernyy sintez funktsional'no-gradientnykh mezostruktur i ob'emnykh izdeliy* [Laser synthesis of functional-gradient mesostructures and bulk products]. Moscow: Fizmatlit Publ., 2009. 424 c. (In Russian).
17. Pisklov A. V., Prokof'ev V. G., Smolyakov V. K. Bezgazovoe gorenje sloevogo paketa v neadiabatcheskikh usloviyakh [Gasless combustion of layered package under nonadiabatic conditions]. *Izvestiya vuzov. Tsvetnaya metallurgiya* [Russian Journal of Non-Ferrous Metals], 2006, no. 5, pp. 102-108. (In Russian).
18. Prokof'ev V. G., Lapshin O. V., Smolyakov V. K. Makrokinetika goreniya sloevykh kompozitsiy s legkoplavkim inertnym sloem [Microkinetics of combustion of layered compositions with a low-melting inert layer]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika* [Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics], 2018, no. 52, pp. 102-113. (In Russian). <https://doi.org/10.17223/19988621/52/10>
19. Prokof'ev V. G., Smolyakov V. K. Gasless combustion in two-layer structures: A theoretical model. *International Journal of Self-Propagating High-Temperature Synthesis*, 2013, vol. 22, no. 1, pp. 5-10. <https://doi.org/10.3103/S1061386213010093>
20. Prokofiev V. G., Smolyakov V. K. Gasless combustion of a system of thermally coupled layers. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 2016, vol. 52, no. 1, pp. 62-66. (In Russian). <https://doi.org/10.1134/S0010508216010081>

21. Prokof'ev V. G., Pisklov A. V., Smolyakov V. K. Effect of a heat-conducting element on the gasless combustion of cylindrical samples under nonadiabatic conditions. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 2007, vol. 42, no. 1, pp. 56-61. (In Russian). <https://doi.org/10.1007/s10573-007-0009-2>
22. Chashchina A. A., Knyazeva A. G. Rezhimy rasprostraneniya tverdogaznoy reaktsii v shcheli mezhdu dvumya inertnymi plastinami [Regimes of solid-phase reaction propagation in a slit between two inert plates]. *Fizicheskaya mezomekhanika. Materialy mezhdunarodnoy konferentsii po fizicheskoy mezomekhanike, komp'yuternomu konstruirovaniyu i razrabotke novykh materialov* [Physical Mesomechanics. Proceedings of the International Conference on Physical Mesomechanics, Computer Design and Development of New Materials], 2004, vol. 7, no. S1-1, pp. 82-88. (In Russian).
23. Chashchina A. A., Knyazeva A. G. Rezhimy soedineniya materialov s ispol'zovaniem sinteza v tverдой faze [Regimes of connecting materials with the help of synthesis in the solid phase]. *Khimiya v interesakh ustoychivogo razvitiya* [Chemistry for Sustainable Development], 2005, vol. 13, no. 2, pp. 343-350. (In Russian).
24. Aligozhina K. A., Knyazeva A. G. Modeling of the heat and kinetic phenomena accompanying the different material joining using solid-phase synthesis. *Advanced Materials Research*, 2014, vol. 1040, pp. 519-524. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMR.1040.519>
25. Aligozhina K. A., Knyazeva A. G. The influence of the layer sizes on the conversion regimes realizing at layered composite synthesis. *AIP Conference Proceedings*, 2014, vol. 1623, pp. 7-10. <https://doi.org/10.1063/v1623.frontmatter>
26. Aligozhina K. A., Knyazeva A. G. Numerical investigation of thermophysical processes accompanying the solid-phase synthesis of a multilayer composite taking into account the melting reactive layer. *AIP Conference Proceedings*, 2015, vol. 1683, pp. 020003(1-4). <http://dx.doi.org/10.1063/1.4932693>
27. Aligozhina K. A., Knyazeva A. G. Chemical reaction front propagation between inert materials with different properties taking into account the reagent melting. *Key Engineering Materials*, 2016, vol. 685, pp. 789-793. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/KEM.685.789>
28. Aligozhina K. A., Knyazeva A. G. Modeling the solid phase reaction distribution in the case of conjugate heat exchange. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 2017, vol. 53, no. 4, pp. 411-419. (In Russian). <https://doi.org/10.1134/S0010508217040050>
29. Knyazeva A. G. Model of chemical conversion initiation in the adhesive bonding layer during roll motion in the process of laminated object creation. *Nanoscience and Technology: An International Journal*, 2018, vol. 9, iss. 1, pp. 77-89. <https://doi.org/10.1615/NanoSciTechnolIntJ.2018026088>
30. Knyazeva A. G. Osobennosti initsirovaniya khimicheskikh reaktsiy v ploskom sloe podvizhnym istochnikom energii [Features of chemical reaction initiation in a plane layer by moving energy source]. *Sbornik trudov Desyatoy Vserossiyskoy konferentsii "Vnutrikamernye protsessy i gorenie v ustanovkakh na tverdom toplive i stvol'nykh sistemakh" (ICOC'2020)* [Proceedings of the Tenth All-Russian Conference "Intrachamber Processes and Combustion in Solid Fuel Plants and Barrel Systems" (ICOC'2020)], 2020, pp. 117-132. (In Russian).
31. Knyazeva A. G. Coupling model of the combustion synthesis of composite with reinforcing inclusions. *Proceedings 7th International Congress on Energy Fluxes and Radiation Effects (EFRE)*, 2020, pp. 1222-1226. <https://doi.org/10.1109/EFRE47760.2020.9242174>
32. Knyazeva A. G., Bukrina N. V. A coupled mathematical model for the synthesis of composites. *Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics*, 2020, vol. 13, no. 6, pp. 708-717. (In Russian). <https://doi.org/10.17516/1997-1397-2020-13-6-708-717>
33. Birger I. A., Shorr B. F., Iosilevich G. B. *Raschet na prochnost' detaley mashin: Spravochnik* [Calculation of the strength of machine parts: Reference book]. Moscow: Mashinostroenie Publ., 1993. 640 p. (In Russian).
34. Samarskiy A. A. *Teoriya raznostnykh skhem* [Theory of difference schemes]. 3-e izd., ispravlennoe. Moscow: Nauka Publ., 1989. 616 p. (In Russian).

Сайфуллин Эльмир Равильевич, аспирант ТГУ

Князева Анна Георгиевна, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник ИФПМ СО РАН, тел. 7(3822) 286-831, e-mail: anna-knyazeva@mail.ru