

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КИНЕТИКИ ДВИЖЕНИЯ ПЕРЕХОДНОЙ ЗОНЫ ПРИ НАГРЕВЕ ЦИЛИНДРИЧЕСКОГО ТЕЛА ИЗ ТРЕХКОМПОНЕНТНОГО СПЛАВА

А.Д. Дрозин

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск

В случае если в теле при его нагреве или охлаждении происходит фазовый переход, процесс распространения в нем тепла претерпевает сильные изменения. Поведение энтальпии, теплоемкости, плотности, коэффициента теплопроводности как функций температуры меняется сложным образом. Например, в сплаве с тройной эвтектикой при охлаждении выделяется сначала одна твердая фаза, затем вторая и, наконец, весь сплав кристаллизуется. При нагреве поверхности твердого цилиндрического тела из трехкомпонентного металлического сплава выше температуры ликвидус у поверхности возникают двух- и трехфазные зоны, перемещающиеся к оси цилиндра. В работе предложена методика введения «эффективной» теплоемкости, позволяющая рассчитывать скорость движения этой зоны, а также температуру сплава в любой его точке и в любой момент времени. Использовалось уравнение теплопроводности с переменными коэффициентами. Для каждой точки образца для каждой соответствующей температуры рассчитывались доли жидкой и всех твердых фаз. Удельный объем, коэффициент теплопроводности и удельная энтальпия рассчитывались как средневзвешенные от соответствующих величин для жидкого и твердого состояний. Удельная теплоемкость рассчитывалась как производная по температуре от энтальпии. Полученную систему дифференциальных уравнений сводили к конечно-разностным уравнениям. Для решения полученной системы разностных уравнений была разработана компьютерная программа. В статье приведены результаты одного из таких расчетов. Представленный метод может быть полезен металлургам (расчет прогрева деталей при термообработке, расчет прогрева кусков шихты в сталеплавильной печи), метрологам (самотестирующиеся датчики температуры) и другим.

Ключевые слова: теплопроводность; фазовый переход; сплав; модель.

Введение

Расчет скорости прогрева образца (детали при термообработке, кусков шихты в начальный период ее плавления) значительно осложняется наличием фазового перехода. На поверхности раздела фаз терпят разрыв все термические коэффициенты, выделяется теплота фазового перехода, граница раздела фаз движется. Однако положение еще более осложняется, если мы имеем дело не с однокомпонентным металлом, а со сплавом, состоящим из нескольких компонентов. В этом случае границей раздела твердой и жидкой фаз служит не поверхность, а двухфазный слой, в котором сосуществуют жидкость и твердые кристаллы [1–3].

При охлаждении трехкомпонентного жидкого сплава, например, с диаграммой состояния, приведенной на рис. 1 [4, 5], процесс перехода в твердое состояние происходит постепенно. Например, если сплав имел валовый состав, соответствующий точке *A* и был жидким, то по мере снижения температуры в нем начинают выделяться кристаллы одного компонента (*Sn*) и состав жидкой части изменяется по прямой, проходящей через точку исходного состава (*A*) и вершину *Sn* диаграммы. На этой прямой жидкая часть сплава находится в равновесии с одним твердым компонентом (*Sn*). По мере снижения температуры состав жидкой части будет изменяться вдоль этой прямой до тех пор (точка *B*), пока не начнут выделяться кристаллы следующего компонента (*Bi*). Далее состав будет меняться вдоль линии равновесия жидкости уже с двумя твердыми компонентами (*Sn*, *Bi*) до точки *E* тройной эвтектики, по достижении которой весь сплав станет твердым.

По мере снижения температуры выделяется все больше кристаллов твердой фазы, состав (равновесный) и жидкой и твердой фаз непрерывно меняется, «подстраиваясь» под соответствующую температуру и, наконец, весь сплав становится твердым. При нагреве твердого сплава все происходит в обратном порядке.

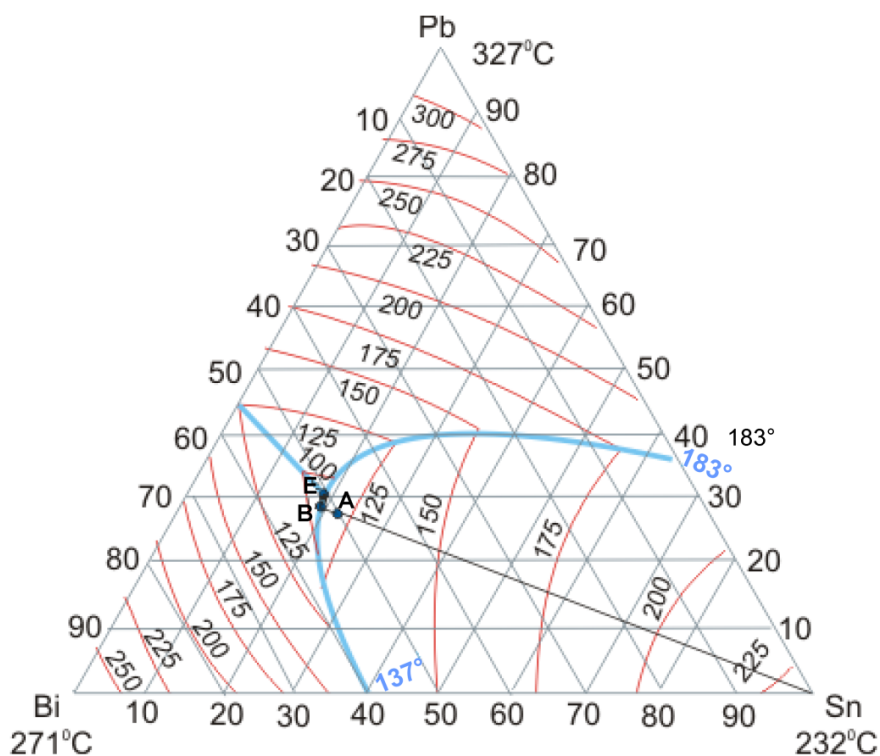


Рис. 1. Диаграмма состояния трехкомпонентного сплава

Если в однокомпонентной системе при фазовом переходе энтальпия всей системы, как функция температуры, терпит разрыв из-за одномоментного выделения или поглощения теплоты кристаллизации всей системы, то здесь процесс выделения новой фазы идет постепенно и энтальпия всей системы является непрерывной функцией температуры. Однако производная этой энтальпии, эффективная теплоемкость всей системы, уже меняется скачком в начале и в конце такого процесса.

В данной работе приведен метод расчета кинетики прогрева первоначально твердого двухкомпонентного цилиндрического образца.

За базу было взято обычное уравнение теплопроводности [6]

$$\rho^{(\Phi)} c_p^{(\Phi)} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda^{(\Phi)} r \frac{\partial T}{\partial r} \right),$$

в котором теплоемкость $c_p^{(\Phi)}$ рассчитывалась как производная по температуре от энтальпии всей сложной системы, плотность $\rho^{(\Phi)}$ и коэффициент теплопроводности $\lambda^{(\Phi)}$ рассчитывались как средне взвешенные величины от соответствующих значений жидких и твердых составляющих сплава при данной температуре.

Для этого вначале рассчитаем необходимые термодинамические характеристики трехкомпонентного сплава, для простоты считая все фазы совершенными растворами.

Термодинамика трехкомпонентного сплава

Будем снабжать величины, относящиеся к твердым фазам, верхним индексом S с номером фазы, а к жидкой – L . Обозначим символом X_i массовую долю i -го компонента в исходном сплаве.

Пусть T_L – температура ликвидус для данного сплава, то есть температура, при снижении ниже которой в жидком сплаве начинает появляться первая твердая фаза. T_{S1} – температура, при снижении ниже которой в системе начинает появляться вторая твердая фаза T_S – температура солидус для данного сплава, то есть температура, при снижении ниже которой, весь сплав является твердым. Мы рассмотрим общий случай – считаем, что выпадающие при снижении темпе-

ратуры фазы не являются чистыми компонентами, как на рис. 1, а являются различными твердыми растворами с долями компонентов $X_1^{(\Phi)}$, $X_2^{(\Phi)}$, $X_3^{(\Phi)}$.

1. Энтальпии отдельных компонентов сплава

Для температур, соответствующих твердому состоянию, удельная энтальпия ($h_i^{(S)}$) и удельный объем ($v_i^{(S)}$) i -го компонента сплава равны

$$h_i^{(S)}(T) = h_i^0 + c_{Pi}^{(S)}(T - T_i^0), \quad v_i^{(S)} = \frac{1}{\rho_i^{(S)}} \quad (i = 1, 2, 3), \quad (1)$$

где $h_i^0 = h_i(T_i^0)$ – удельная энтальпия чистого i -го компонента при некоторой температуре T_i^0 , c_{Pi} – удельная теплоемкость i -го компонента, $\rho_i^{(S)}$ удельная плотность i -го компонента сплава в твердом состоянии.

Для температур, соответствующих жидкому состоянию, удельная энтальпия ($h_i^{(L)}$) и удельный объем ($v_i^{(L)}$) i -го компонента равны соответственно

$$h_i^{(L)}(T) = h_i^0 + c_{Pi}^{(S)}(T_S - T_{i0}) + \Delta h_i^{(S-L)} + c_{Pi}^{(L)}(T - T_S), \quad v_i^{(L)} = \frac{1}{\rho_i^{(L)}} \quad (i = 1, 2, 3). \quad (2)$$

Здесь T_S – температура плавления чистого i -го компонента, $\Delta h_i^{(S-L)}$ – удельная энтальпия его плавления.

2. Энтальпия и объем сплава

2.1. При температуре выше T_L весь сплав жидкий. Его энтальпия и объем равны

$$H_A(T) = \sum_{i=1}^3 m_i^{(L)} h_i^{(L)}(T), \quad V = \sum_{i=1}^3 m_i^{(L)} v_i^{(L)}.$$

Здесь $h_i^{(L)} = \frac{\partial H_A}{\partial m_i^{(L)}}$, $v_i^{(L)} = \frac{\partial V_A}{\partial m_i^{(L)}}$ – парциальные удельные энтальпия и объем i -го компонента

сплава. Будем считать их равными соответствующим удельным величинам чистых компонентов и вычислять по формулам (2).

Так как весь сплав жидкий, то $m_i^{(L)} = m_i = m_A X_i$. Тогда

$$H_A(T) = m_A \sum_{i=1}^3 h_i^{(L)}(T) X_i, \quad V_A(T) = m_A \sum_{i=1}^3 v_i^{(L)} X_i. \quad (3)$$

При температуре $T_S \leq T \leq T_L$ из твердой фазы начинает выделяться жидкая фаза. Процесс может протекать в два этапа. При снижении температуры ниже T_L вначале выделяется одна твердая фаза ($S1$) – нужно рассматривать равновесие между жидкой фазой (L) и твердой фазой ($S1$). Затем, при дальнейшем снижении температуры, ниже T_{S2} может начать выделяться следующая твердая фаза ($S2$) – нужно рассматривать равновесие между жидкой фазой (L) и двумя твердыми фазами ($S1$), ($S2$).

Состав любой фазы Φ сплава характеризуется тремя долями его компонентов:

$$X_1^{(\Phi)} = \frac{m_1^{(\Phi)}}{m}, \quad X_2^{(\Phi)} = \frac{m_2^{(\Phi)}}{m}, \quad X_3^{(\Phi)} = \frac{m_3^{(\Phi)}}{m} \quad \left(m = m_1^{(\Phi)} + m_2^{(\Phi)} + m_3^{(\Phi)} \right).$$

Так как $X_1^{(\Phi)} + X_2^{(\Phi)} + X_3^{(\Phi)} = 1$, то из трех концентраций третья определяется первыми двумя, так что состав фазы можно задавать первыми двумя концентрациями ($X_1^{(\Phi)}$, $X_2^{(\Phi)}$).

2.2. Вначале рассмотрим двухфазное равновесие $(L) \rightleftharpoons (S1)$. Пусть $m^{(S1)}(T)$ и $m^{(L)}(T)$ – массы твердой и жидкой фаз сплава при данной температуре T . При этом двухфазном равновесии составы фаз: жидкой $(X_1^{(L)}, X_2^{(L)})$ и твердой $(X_1^{(S1)}, X_2^{(S1)})$ и исходный состав лежат на одной прямой. Действительно,

$$\begin{cases} m^{(L)} + m^{(S1)} = m_A, \\ m^{(L)} X_1^{(L)} + m^{(S1)} X_1^{(S1)} = m_A X_1, \\ m^{(L)} X_2^{(L)} + m^{(S1)} X_2^{(S1)} = m_A X_2. \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{X_1^{(L)} - X_1}{X_1^{(S1)} - X_1} = -\frac{m^{(S1)}}{m^{(L)}}, \\ \frac{X_2^{(L)} - X_2}{X_2^{(S1)} - X_2} = -\frac{m^{(S1)}}{m^{(L)}}. \end{cases}$$

Откуда

$$\frac{X_1^{(L)} - X_1}{X_1^{(S1)} - X_1} = \frac{X_2^{(L)} - X_2}{X_2^{(S1)} - X_2}. \quad (4)$$

Это означает, что точка $(X_1^{(L)}, X_2^{(L)})$, описывающая состав жидкой фазы сплава, лежит на прямой, проходящей через точку $(X_1^{(S1)}, X_2^{(S1)})$ и описывающей состав твердой фазы сплава, и точку (X_1, X_2) , соответствующей исходному, или валовому, составу сплава.

Найдем массы жидкой $(m^{(L)})$ и твердой $(m^{(S1)})$ фаз сплава:

$$\begin{cases} m^{(L)} + m^{(S1)} = m_A, \\ m^{(L)} X_1^{(L)} + m^{(S1)} X_1^{(S1)} = m_A X_1 \end{cases} \Rightarrow m^{(S1)} = m_A \frac{X_1^{(L)} - X_1}{X_1^{(L)} - X_1^{(S1)}}.$$

Введя обозначения

$$\alpha^{(S1)} = \frac{X_1^{(L)} - X_1}{X_1^{(L)} - X_1^{(S1)}}, \quad \alpha^{(L)} = 1 - \alpha^{(S1)}, \quad (5)$$

получим

$$m^{(S1)} = m_A \alpha^{(S1)}, \quad m^{(L)} = m_A \alpha^{(L)}. \quad (6)$$

Величины $(X_1^{(S1)}, X_2^{(S1)})$, $(X_1^{(L)}, X_2^{(L)})$ для каждой температуры должны быть известны из экспериментальных данных:

$$X_i^{(S)} = \varphi_i^{(S)}(T), \quad X_i^{(L)} = \varphi_i^{(L)}(T), \quad (i=1, 2, 3). \quad (7)$$

При этом должно выполняться соотношение (5).

Массы отдельных компонентов каждой фазы определяются по формуле

$$m_i^{(\Phi)} = m_A \alpha^{(\Phi)} X_i^{(\Phi)}, \quad (\Phi = L, S1; i=1, 2, 3). \quad (8)$$

Энтальпия и объем всего сплава при наших допущениях равны:

$$H_A(T) = m_A \sum_{\Phi=L, S1} \left(\alpha^{(\Phi)} \sum_{i=1}^3 \left(h_i^{(\Phi)} X_i^{(\Phi)} \right) \right), \quad V_A(T) = m_A \sum_{\Phi=L, S1} \left(\alpha^{(\Phi)} \sum_{i=1}^3 \left(v_i^{(\Phi)} X_i^{(\Phi)} \right) \right). \quad (9)$$

Здесь $h_i^{(\Phi)} = \frac{\partial H_A}{\partial m_i^{(\Phi)}}$, $v_i^{(\Phi)} = \frac{\partial V_A}{\partial m_i^{(\Phi)}}$ – парциальные удельные энтальпия и объем i -го компонента

сплава. За неимением точных данных будем считать их равными соответствующим удельным величинам чистых компонентов и вычислять по формулам (1), (2).

2.3. Теперь рассмотрим трехфазное равновесие $(L) \rightleftharpoons (S1) \rightleftharpoons (S2)$.

Найдем массы жидкой $(m^{(L)})$ и твердых $(m^{(S1)}, m^{(S2)})$ фаз сплава:

$$\begin{cases} m^{(L)} + m^{(S1)} + m^{(S2)} = m_A, \\ m^{(L)} X_1^{(L)} + m^{(S1)} X_1^{(S1)} + m^{(S2)} X_1^{(S2)} = m_A X_1, \Rightarrow \\ m^{(L)} X_2^{(L)} + m^{(S1)} X_2^{(S1)} + m^{(S2)} X_2^{(S2)} = m_A X_2. \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} m^{(S1)} (X_1^{(L)} - X_1^{(S1)}) + m^{(S2)} (X_1^{(L)} - X_1^{(S2)}) = m_A (X_1^{(L)} - X_1), \\ m^{(S1)} (X_2^{(L)} - X_2^{(S1)}) + m^{(S2)} (X_2^{(L)} - X_2^{(S2)}) = m_A (X_2^{(L)} - X_2). \end{cases}$$

Введем обозначения:

$$\Delta = \begin{vmatrix} X_1^{(L)} - X_1^{(S1)} & X_1^{(L)} - X_1^{(S2)} \\ X_2^{(L)} - X_2^{(S1)} & X_2^{(L)} - X_2^{(S2)} \end{vmatrix}, \Delta_1 = \begin{vmatrix} X_1^{(L)} - X_1 & X_1^{(L)} - X_1^{(S2)} \\ X_2^{(L)} - X_2 & X_2^{(L)} - X_2^{(S2)} \end{vmatrix},$$

$$\Delta_2 = \begin{vmatrix} X_1^{(L)} - X_1^{(S1)} & X_1^{(L)} - X_1 \\ X_2^{(L)} - X_2^{(S1)} & X_2^{(L)} - X_2 \end{vmatrix}. \quad (10)$$

Тогда, по правилу Крамера

$$m^{(S1)} = m_A \frac{\Delta_1}{\Delta}, m^{(S2)} = m_A \frac{\Delta_2}{\Delta}, m^{(L)} = m_A \left(1 - \frac{\Delta_1}{\Delta} - \frac{\Delta_2}{\Delta} \right).$$

Обозначив

$$\alpha^{(S1)} = \frac{\Delta_1}{\Delta}, \alpha^{(S2)} = \frac{\Delta_2}{\Delta}, \alpha^{(L)} = 1 - \alpha^{(S1)} - \alpha^{(S2)}, \quad (11)$$

получим

$$m^{(S1)} = m_A \alpha^{(S1)}, m^{(S2)} = m_A \alpha^{(S2)}, m^{(L)} = m_A \alpha^{(L)}. \quad (12)$$

Величины $(X_1^{(S1)}, X_2^{(S1)})$, $(X_1^{(S2)}, X_2^{(S2)})$, $(X_1^{(L)}, X_2^{(L)})$ для каждой температуры должны быть известны из экспериментальных данных:

$$X_i^{(S1)} = \varphi_i^{(S1)}(T), X_i^{(S2)} = \varphi_i^{(S2)}(T), X_i^{(L)} = \varphi_i^{(L)}(T), (i = 1, 2, 3). \quad (13)$$

Массы отдельных компонентов каждой фазы определяются по формуле

$$m_i^{(\Phi)} = m_A \alpha^{(\Phi)} X_i^{(\Phi)}, (\Phi = S1, S2, L; i = 1, 2, 3). \quad (14)$$

Энтальпия и объем всего сплава равны

$$H_A(T) = m_A \sum_{\Phi=S1,S2,L} \left(\alpha^{(\Phi)} \sum_{i=1}^3 (h_i^{(\Phi)} X_i^{(\Phi)}) \right), V_A(T) = m_A \sum_{\Phi=S1,S2,L} \left(\alpha^{(\Phi)} \sum_{i=1}^3 (v_i^{(\Phi)} X_i^{(\Phi)}) \right). \quad (15)$$

2.4. При температуре ниже T_S весь сплав твердый. Его энтальпия и объем равны

$$H_A(T) = \sum_{i=1}^3 m_i^{(S)} h_i^{(S)}(T), V = \sum_{i=1}^3 m_i^{(S)} v_i^{(S)}.$$

Здесь $h_i^{(S)} = \frac{\partial H_A}{\partial m_i^{(S)}}$, $v_i^{(S)} = \frac{\partial V_A}{\partial m_i^{(S)}}$ – парциальные энтальпия и объем i -го компонента сплава.

За неимением лучших данных будем считать их равными соответствующим удельным величинам чистых компонентов и вычислять по формулам (1).

Так как весь сплав твердый, то $m_i^{(S)} = m_i = m_A X_i = m_A X_i$, где m_i – масса i -го компонента во всем сплаве, а $X_i = \frac{m_i}{M_A}$ – его валовая доля. Тогда

$$H_A(T) = m_A \sum_{i=1}^3 h_i^{(S)}(T) X_i, v^* = m_A \sum_{i=1}^3 v_i^{(S)} X_i. \quad (16)$$

3. Определение эффективной теплоемкости

Эффективную теплоемкость сплава, которую мы будем использовать в уравнении теплопроводности, определим как $c_P^e = \frac{\partial H_A}{\partial T \partial m_A}$.

3.1. Для температур $T > T_L$

Для температур выше T_L , в соответствии с выражениями (3), получим

$$H_A' = m_A \sum_{i=1}^3 h_i^{(L)'} X_i = m_A \sum_{i=1}^3 c_{Pi}^{(L)} X_i, \text{ откуда}$$

$$c_P^e = \sum_{i=1}^3 c_{Pi}^{(L)} X_i. \quad (17)$$

3.2. Для температур $T_{S1} \leq T < T_L$

Применяя формулы (9), получим

$$H_A' = m_A \left(\sum_{\Phi=S1,L} \left(\alpha^{(\Phi)'} \sum_{i=1}^3 \left(h_i^{(\Phi)'} X_i^{(\Phi)} \right) \right) + \sum_{\Phi=S1,L} \left(\alpha^{(\Phi)'} \sum_{i=1}^3 \left(h_i^{(\Phi)'} X_i^{(\Phi)} + h_i^{(\Phi)} X_i^{(\Phi)'} \right) \right) \right). \quad (18)$$

Вычислим производные, входящие в это выражение:

$$\alpha^{(S1)'} = \frac{X_1^{(S1)'} (X_1^{(L)} - X_1) + X_1^{(L)'} (X_1 - X_1^{(S1)})}{(X_1^{(L)} - X_1^{(S1)})^2}, \quad \alpha^{(L)'} = -\alpha^{(S1)'}. \quad (19)$$

$$X_i^{(\Phi)'} = \varphi_i^{(\Phi)'}(T) \quad (\Phi = S1, L; \quad i = 1, 2, 3). \quad (20)$$

Итак

$$c_P^e = \sum_{\Phi=S1,L} \left(\alpha^{(\Phi)'} \sum_{i=1}^3 \left(h_i^{(\Phi)'} X_i^{(\Phi)} \right) \right) + \sum_{\Phi=S1,L} \left(\alpha^{(\Phi)'} \sum_{i=1}^3 \left(c_{Pi}^{(\Phi)'} X_i^{(\Phi)} + h_i^{(\Phi)} X_i^{(\Phi)'} \right) \right). \quad (21)$$

3.3. Для температур $T_S \leq T \leq T_{S1}$

Применяя формулы (15), получим

$$H_A' = m_A \left(\sum_{\Phi=S1,S2,L} \left(\alpha^{(\Phi)'} \sum_{i=1}^3 \left(h_i^{(\Phi)'} X_i^{(\Phi)} \right) \right) + \sum_{\Phi=S1,S2,L} \left(\alpha^{(\Phi)'} \sum_{i=1}^3 \left(h_i^{(\Phi)'} X_i^{(\Phi)} + h_i^{(\Phi)} X_i^{(\Phi)'} \right) \right) \right). \quad (22)$$

Вычислим производные, входящие в это выражение. Из (11) получаем

$$\alpha^{(S1)'} = \frac{1}{\Delta} \left(\Delta_1' - \frac{\Delta_1}{\Delta} \Delta' \right), \quad \alpha^{(S2)'} = \frac{1}{\Delta} \left(\Delta_2' - \frac{\Delta_2}{\Delta} \Delta' \right), \quad \alpha^{(L)'} = -\alpha^{(S1)'} - \alpha^{(S2)'}. \quad (23)$$

При этом из (10)

$$\Delta' = \begin{vmatrix} X_1^{(L)'} - X_1^{(S1)'} & X_1^{(L)} - X_1^{(S2)} \\ X_2^{(L)'} - X_2^{(S1)'} & X_2^{(L)} - X_2^{(S2)} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} X_1^{(L)} - X_1^{(S1)} & X_1^{(L)'} - X_1^{(S2)'} \\ X_2^{(L)} - X_2^{(S1)} & X_2^{(L)'} - X_2^{(S2)'} \end{vmatrix},$$

$$\Delta_1' = \begin{vmatrix} X_1^{(L)'} & X_1^{(L)} - X_1^{(S2)} \\ X_2^{(L)'} & X_2^{(L)} - X_2^{(S2)} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} X_1^{(L)} - X_1 & X_1^{(L)'} - X_1^{(S2)'} \\ X_2^{(L)} - X_2 & X_2^{(L)'} - X_2^{(S2)'} \end{vmatrix}, \quad (24)$$

$$\Delta_2' = \begin{vmatrix} X_1^{(L)'} - X_1^{(S1)'} & X_1^{(L)} - X_1 \\ X_2^{(L)'} - X_2^{(S1)'} & X_2^{(L)} - X_2 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} X_1^{(L)} - X_1^{(S1)} & X_1^{(L)'} \\ X_2^{(L)} - X_2^{(S1)} & X_2^{(L)'} \end{vmatrix}.$$

Здесь, из (13),

$$X_i^{(\Phi)'} = \varphi_i^{(\Phi)'}(T) \quad (\Phi = S1, S2, L; \quad i = 1, 2, 3). \quad (25)$$

Итак

$$c_P^e = \sum_{\Phi=S1,S2,L} \left(\alpha^{(\Phi)} \sum_{i=1}^3 \left(h_i^{(\Phi)} X_i^{(\Phi)} \right) \right) + \sum_{\Phi=S1,S2,L} \left(\alpha^{(\Phi)} \sum_{i=1}^3 \left(h_i^{(\Phi)'} X_i^{(\Phi)'} + h_i^{(\Phi)} X_i^{(\Phi)'} \right) \right). \quad (26)$$

3.4. Для температур $T < T_S$

Для температур ниже T_S , в соответствии с формулами (16), получим $H_A' = m_A \sum_{i=1}^3 h_i^{(S)} X_i$,

откуда

$$c_P^e = \sum_{i=1}^3 c_{Pi}^{(S)} X_i. \quad (27)$$

4. Пример расчета

По изложенной методике рассчитаем необходимые термодинамические характеристики сплава Sn–Bi–Pb состава (50 % Bi, 22 % Sn, 28 % Pb) с диаграммой состояния, приведенной на рис. 1.

Линии на диаграмме – срезы поверхности ликвидус, то есть состав жидкости, который будет находиться в равновесии с твердой фазой при данной температуре. Вся диаграмма разбивается на три части: области выпадения из жидкого расплава олова, висмута и свинца.

На диаграмме A (Bi = 50, Sn = 22) – состав исходного сплава, E (Bi = 51, Sn = 19, $T_{S-L} = 96^\circ\text{C}$) – тройная эвтектика.

Состав жидкой фазы изменяется по прямой (Sn)–(A).

Аппроксимируя зависимость температуры от состава линией второго порядка (используя точки пересечения линии состава с изотермами 175, 150 и 125 °C), получим

$$T = -0,00804(\% \text{ Sn})^2 + 2,183988(\% \text{ Sn}) + 77,39461.$$

По полученной формуле рассчитали температуры начала кристаллизации для точек A (данный сплав) и B (двойная эвтектика). Получили $T_L = 121,55^\circ\text{C}$, $T_{S1} = 115,71^\circ\text{C}$.

По этим же точкам можно аппроксимировать зависимость состава каждого компонента сплава от температуры, например, квадратичной функцией. Но зависимости обеих концентраций аппроксимировать нельзя, так как они связаны соотношением (4). Поэтому аппроксимировали квадратичной зависимостью концентрацию лишь того компонента, который составляет основу выпадающей твердой фазы, то есть олова. В результате получили формулы зависимости концентрации олова и висмута от температуры при $T_{S1} \leq T \leq T_L$:

$$X_1^{(L)} = 2,192 \cdot 10^{-5} T^2 - 7,6 \cdot 10^{-5} T - 0,094,$$

$$X_2^{(L)} = \frac{X_2}{1 - X_1} \left(1 - X_1^{(L)} \right).$$

Эти формулы годятся для температур $T_{S1} \leq T \leq T_L$.

Для температур $T_S \leq T \leq T_{S2}$ у нас имеются только две точки B и E .

Поэтому аппроксимировать зависимости концентраций компонентов сплава от температуры будем прямолинейными зависимостями.

Получили

$$\% \text{ Sn} = -0,00761T + 19,73059,$$

$$\% \text{ Bi} = 0,05175T + 46,03196.$$

Итак, исходный сплав имеет температуру начала кристаллизации $T_L = 121,55^\circ\text{C}$ (точка A на диаграмме), при этом из расплава начинают выпадать кристаллы твердого олова. При дальнейшем снижении температуры до величины $T_{S2} = 115,71^\circ\text{C}$ (точка B) начинает выпадать висмут и образуется двойная эвтектика (Sn – Bi). При температуре $T_S = 96^\circ\text{C}$ выпадает свинец, образуется тройная эвтектика (Sn – Bi – Pb) и расплав полностью закристаллизовывается.

Из справочных данных [7, 8] подобрали необходимые для расчетов данные (см. таблицу)

Параметры расчета

Параметр	Sn	Bi	Pb
Удельная теплота плавления (Дж/кг)	$h_1^{S-L}=59\ 000$	$h_2^{S-L}=11\ 300$	$h_3^{S-L}=24\ 300$
Удельная теплоемкость (Дж/(кг·К)) тв.	$c_{p1}^{(S)}=243$	$c_{p2}^{(S)}=127$	$c_{p3}^{(S)}=144$
Удельная теплоемкость (Дж/(кг·К)) ж.	$c_{p1}^{(L)}=240$	$c_{p2}^{(L)}=140$	$c_{p3}^{(L)}=140$
Плотность (кг/м ³) тв.	$\rho_1^{(S)}=7280$	$\rho_2^{(S)}=9800$	$\rho_2^{(S)}=11\ 300$
Плотность (кг/м ³) ж.	$\rho_1^{(L)}=6850$	$\rho_2^{(L)}=10\ 300$	$\rho_3^{(L)}=10\ 680$
Коеф. теплопроводности (Вт/(м·К)) тв.	$\lambda_1^{(S)}=65,8$	$\lambda_2^{(S)}=6,37$	$\lambda_3^{(S)}=33,5$
Коеф. теплопроводности (Вт/(м·К)) ж.	$\lambda_1^{(L)}=31,6$	$\lambda_2^{(L)}=14,65$	$\lambda_3^{(L)}=15,12$

Результаты расчетов приведены на рис. 2.

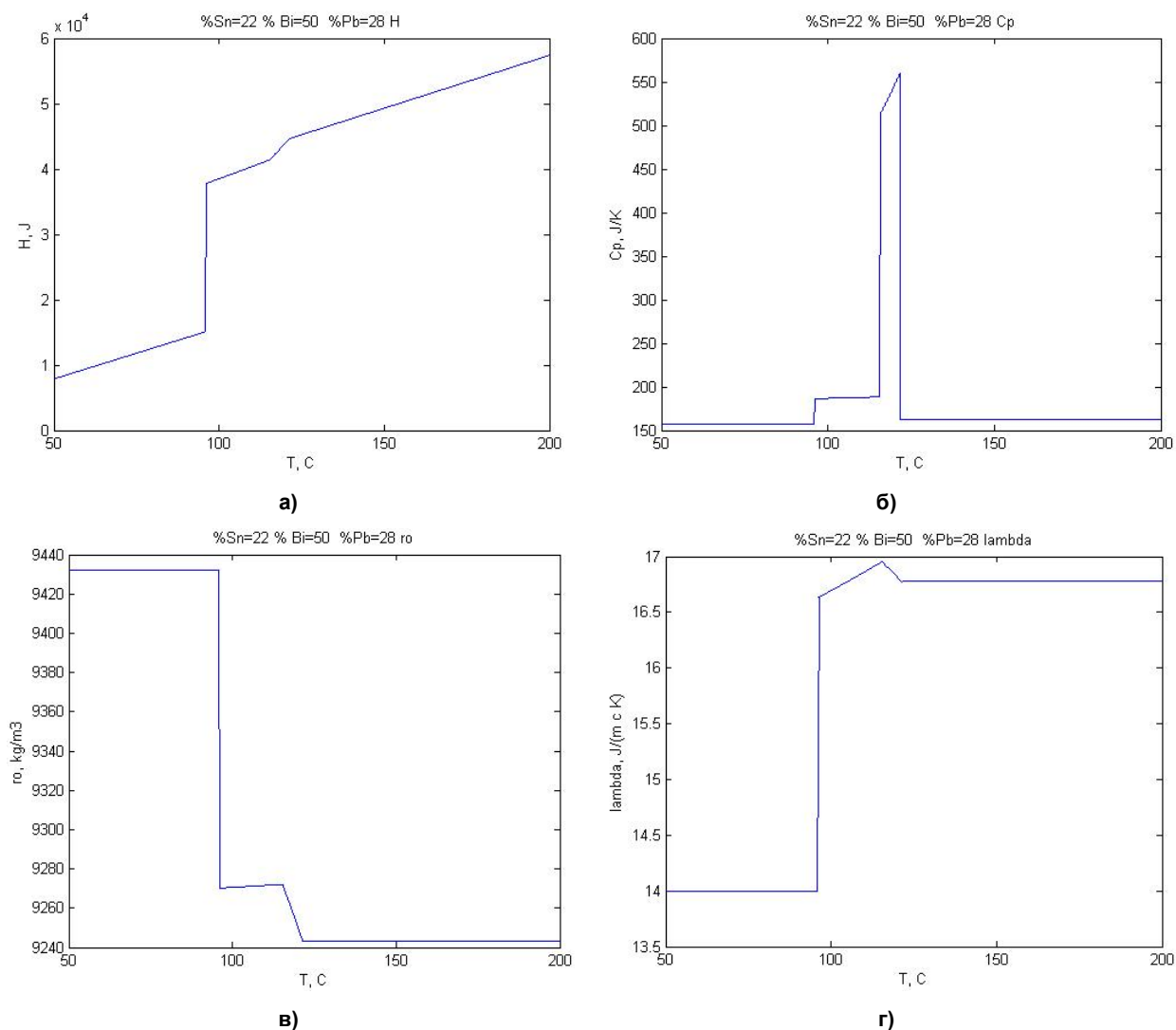


Рис. 2. Зависимости удельной энтальпии (а), эффективной теплоемкости (б), удельного объема (в) и коэффициента теплопроводности сплава Sn–Bi–Pb (22 % Sn, 50 % Bi, 28 % Pb, мас.) от температуры

Заключение

Разработана методика, позволяющая рассчитывать скорости процессов, происходящих при нагреве или охлаждении образца с учетом происходящих при этом фазовых переходах. Хотя в данной работе при расчете термодинамических величин, для простоты изложения, сплав считали совершенным раствором, метод расчета движения переходной зоны легко обобщается для любых термодинамических теорий и любого числа компонентов.

Литература

1. Любов, Б.Я. Теория кристаллизации в больших объемах / Б.Я. Любов. – М.: Наука, 1975. – 256 с.
2. Скрипов, В.П. Спонтанная кристаллизация переохлажденных жидкостей / В.П. Скрипов, В.П. Коверда. – М.: Наука, 1984. – 232 с.
3. Авдонин, Н.А. Математическое описание процессов кристаллизации / Н.А. Авдонин. – Рига: Зинатне, 1980. – 180 с.
4. Захаров, А.М. Диаграммы состояния двойных и тройных систем / А.М. Захаров. – М: Металлургия, 1990. – 250 с.
5. Справочник по пайке / под ред. И. Е. Петрунина. – М.: Машиностроение, 2003. – 480 с.
6. Тихонов, А.Н. Уравнения математической физики / А.Н. Тихонов, А.А. Самарский. – М.: Наука, 1972. – 736 с.
7. Физические величины. Справочник / под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. – М: Энергоатомиздат, 1991. – 1250 с.
8. Рабинович, В.А. Краткий химический справочник / В.А. Рабинович, З.Я. Хавин. – Л: Химия, 1978. – 392 с.
9. Самарский, А.А. Теория разностных схем / А.А. Самарский. – М.: Наука, 1977. – 656 с.
10. Самарский, А.А. Методы решения сеточных уравнений / А.А. Самарский, Е.С. Николаев. – М.: Наука, 1978. – 592 с.
11. Шестаков, А.Л. Модель самодиагностирующегося датчика параметра с нелинейной функцией преобразования / А.Л. Шестаков, А.С. Семенов // Измерение. Мониторинг. Управление. Контроль. – 2015. – № 1 (11). – С. 17–22.
12. Шестаков, А.Л. Методы теории автоматического управления в динамических измерениях / А.Л. Шестаков. – Челябинск: ЮУрГУ, 2013.
13. Самокалибрующийся термометр на основе точек плавления. Конструкция и алгоритмы работы / М.Д. Белоусов, В.В. Дьячук, Д.А. Мирзаев, А.Л. Шестаков // Вестник ЮУрГУ. Серия «Компьютерные технологии, управление, радиоэлектроника». – 2013. – Т. 13, № 1. – С. 26–33.
14. Белоусов, М.Д. Оценка собственного состояния термометров сопротивлений / М.Д. Белоусов, А.Л. Шестаков, Н.М. Япарова // Вестник ЮУрГУ. Серия «Компьютерные технологии, управление, радиоэлектроника». – 2012. – № 35. – С. 105–109.

Дрозин Александр Дмитриевич, д-р техн. наук, профессор кафедры материаловедения и физико-химии материалов, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск; drozinad@susu.ru.

Поступила в редакцию 7 ноября 2016 г.

MATHEMATICAL MODEL OF THE TRANSITION ZONE MOTION DURING HEATING OF THE THREE-COMPONENT CYLINDRICAL OBJECT

A.D. Drozin, drozinad@susu.ru

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

If due to heating or cooling of an object, a phase transition occurs, the propagation of heat significantly changes. Behavior of the enthalpy, heat capacity, density, coefficient of the heat-conductivity as a function of temperature, changes in a complicated manner. For example, when a ternary eutectic alloy is cooling, one solid phase is formed first, then the second, and finally the entire alloy crystallizes. By heating the surface of the solid metal cylindrical object with three-component composition above the liquidus temperature, the two- or three-phase zone occurs at the surface, and moves to the cylinder axis. We propose a method of introducing “effective” specific heat that allows calculating the speed of this zone movement, as well as the temperature of the object at any point and at any time. The ordinary equation of heat conductivity with variable coefficients was used. For each point of a sample for each corresponding temperature, the fractions of liquid and all solid phases were calculated. Specific volume, thermal conductivity and specific enthalpy were calculated as the weighted average of the corresponding values for the liquid and solid states. The specific heat was calculated as the derivative of the enthalpy with respect to temperature. The resulting system of differential equations is reduced to finite-difference equations. A computer program was developed to solve the resulting system of difference equations. Results of one of such calculations are given in the article. The developed method allows to calculate the velocity of the phase boundary, as well as the object temperature at any point and at any time. The presented method may be useful for metallurgists (calculation of heating of parts in heat treatment, calculation of heating of pieces of charge in the steel smelting furnace), for metrologists (self-testing temperature sensors) and others.

Keywords: heat conduction; phase transition; alloy; model.

References

1. Lyubov B.Ya. *Teoriya kristallizatsii v bol'shikh ob'emakh* [Theory of Crystallization in Large Volumes]. Moscow, Nauka Publ., 1975. 256 p.
2. Skripov V.P., Koverda V.P. *Spontannaya kristallizatsiya pereokhlazhdennykh zhidkostey* [Spontaneous Crystallization of Undercooled Liquids]. Moscow, Nauka Publ., 1984. 232 p.
3. Avdonin N.A. *Matematicheskoe opisanie protsessov kristallizatsii* [Mathematical Description of Crystallization Processes]. Riga, Zinatne Publ., 1980. 180 p.
4. Zakharov A.M. *Diagrammy sostoyaniya dvoynykh i troynykh sistem* [Phase Diagrams of Binary and Ternary Systems]. Moscow, Metallurgiya Publ., 1990. 250 p.
5. *Spravochnik po payke* [Soldering Reference Book]. Petrunin I.E. (Ed.). Moscow, Mashinostroenie Publ., 2003. 480 p.
6. Tikhonov A.N., Samarskiy A.A. *Uravneniya matematicheskoy fiziki* [Equations of Mathematical Physics]. Moscow, Nauka Publ., 1972. 736 p.
7. *Fizicheskie velichiny. Spravochnik* [Physical Values. Reference Book]. Grigor'ev I.S. and Meylikhov E.Z. (Eds). Moscow, Energoatomizdat Publ., 1991. 1250 p.
8. Rabinovich V.A., Khavin Z.Ya. *Kratkiy khimicheskiy spravochnik* [Brief Chemical Reference Book]. Leningrad, Khimiya Publ., 1978. 392 p.
9. Samarskiy A.A. *Teoriya raznostnykh skhem* [Theory of Difference Schemes]. Moscow, Nauka Publ., 1977. 656 p.
10. Samarskiy A.A., Nikolaev E.S. *Metody resheniya setochnykh uravneniy* [Methods of Solving Grid Equations]. Moscow, Nauka Publ., 1978. –592 s.
11. Shestakov A.L., Semenov A.S. [Model of a Self-Diagnosing Parameter Sensor with Nonlinear

Transformation Function]. *Izmerenie. Monitoring. Upravlenie. Kontrol'*, 2015, no. 1 (11), pp. 17–22. (in Russ.)

12. Shestakov A.L. *Metody teorii avtomaticheskogo upravleniya v dinamicheskikh izmereniyakh* [Methods of Automatic Control Theory in Dynamic Measurements]. Chelyabinsk, South Ural St. Univ. Publ., 2013.

13. Belousov M.D., D'yachuk V.V., Mirzaev D.A., Shestakov A.L. [Self-Calibrating Thermometer Based on Melting Points. Construction and Operation Algorithms]. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Computer Technologies, Automatic Control & Radioelectronics*, 2013, vol. 13, no. 1, pp. 26–33. (in Russ.)

14. Belousov M.D., Shestakov A.L., Yaparova N.M. [Estimation of Eigenstate of Resistive Thermometers]. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Computer Technologies, Automatic Control & Radioelectronics*, 2012, no. 35 (294), issue 17, pp. 105–109. (in Russ.)

Received 7 November 2016

ОБРАЗЕЦ ЦИТИРОВАНИЯ

Дрозин, А.Д. Математическая модель кинетики движения переходной зоны при нагреве цилиндрического тела из трехкомпонентного сплава / А.Д. Дрозин // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». – 2017. – Т. 17, № 1. – С. 24–34. DOI: 10.14529/met170103

FOR CITATION

Drozin A.D. Mathematical Model of the Transition Zone Motion During Heating of the Three-Component Cylindrical Object. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Metallurgy*, 2017, vol. 17, no. 1, pp. 24–34. (in Russ.) DOI: 10.14529/met170103