

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СМЕСИ ГАЗОВ И ИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С ОБРАБАТЫВАЕМОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ

Кабаева Гульнара Джамалбековна, д.ф.-м.н., профессор, КРСУ им.Б.Н.Ельцина Кыргызста, 720044, г.Бишкек, пр. Чуй 66, e-mail: kabgd@mail.ru
Аманкулова Нургуль Асимкановна, ст.преп, ИГДиГТ им.акад.У.Асаналиева Кыргызстан, 720044, г.Бишкек, пр. Чуй 215, e-mail: a_nur4@mail.ru
Аязбеков Алмаз, преп. ИГДиГТ им.акад.У.Асаналиева Кыргызста, 720044, г.Бишкек, пр. Чуй 215, e-mail: almas85@mail.ru

Цель статьи проведение термодинамическое моделирование рабочей среды и их взаимодействия с обрабатываемым металлом, для прогнозирования состава и свойства сложных многоэлементных систем применяемых в высокотемпературных установках. Проведено исследование поведения различных смеси газов и их взаимодействия со сталью в широком диапазоне температур и давлений с учетом химических и фазовых превращений. Рассчитаны температурные зависимости компонентного состава, полная энтальпия, энтропия и внутренняя энергия системы «смесь газа + сталь».

Ключевые слова: термодинамическое моделирование, смеси газов, обрабатываемый материал, равновесный состав, энтальпия системы.

THERMODYNAMIC MODELING OF MIXTURES OF GASES AND THEIR INTERACTION WITH THE SURFACE TO BE TREATED

Kabaeva Gulnara Dzhamalbekovna, D.Sc., acting Professor KRSU im.B.N.Eltsina Kyrgyzsta, 720044, Bishkek, Chui Avenue 66, e-mail: kabgd@mail.ru
Amankulova Nurgul Asimkanovna, Senior Lecturer, IGDIGT im.akad.U.Asanalieva Kyrgyzsta, 720044, Bishkek, Chui Avenue 215, e-mail: a_nur4@mail.ru
Ayazbekov Almas, teacher, IGDIGT im.akad.U.Asanalieva Kyrgyzsta, 720044, Bishkek, Chui Avenue 215, e-mail: almas85@mail.ru

The purpose of the article holding thermodynamic modeling of the working environment and their interaction with the metal to be treated, to predict the structure and properties of complex multiple systems used in high-temperature plants. A study of the behavior of various gas mixtures and their interaction with the steel in a wide range of temperatures and pressures of the chemical and phase transformations. The temperature dependences of the component composition, total enthalpy, entropy and internal energy "gas mixture + steel" system.

Keywords: thermodynamic modeling, mixture of gases, the processed material, the equilibrium composition, the enthalpy of the system.

Исследование закономерностей взаимодействия электродуговых потоков плазмы с обрабатываемым материалом при реализации конкретного технологического процесса (сварке, резке, наплавке или напылении) необходимо для управления им с целью получения конечного продукта. Для оптимизации и разработки плазменных устройств требуется исследования протекающих процессов с учетом многообразия протекающих процессов.

С позиции технологического процесса, в результате направленного воздействия источника энергии на изделие формируется определенная зона обработки материала. Нагрев сопровождается разнообразными физическими и химическими процессами в металле: плавлением, структурными превращениями, кристаллизацией, пластическими

деформациями. Процесс характеризуется неоднородностью распределения температуры, ее изменением во времени; высокой скоростью нагрева и охлаждения наличие сложного теплообмена; существованием нескольких различных фаз, соотношение между которыми изменяется и разнообразными физико - химическими явлениями, которые сопутствуют нагреву и охлаждению и лежат в основе технологии [2,3,5].

В зоне взаимодействия дуговой плазмы с поверхностью вследствие плавления и испарения металла образуется многокомпонентная система. Одним из широко применяемых методов для получения предварительной информации о возможном выходе продуктов реакций сложных и многокомпонентных систем в зависимости их концентрации от температуры и давления в плазме является термодинамическое моделирование. На сегодняшний день лучшим методом расчета равновесного состояния сложных многокомпонентных систем, применяемые в плазмохимии и плазменной металлургии, считается метод, в основу алгоритма, которого положен принцип максимума энтропии с учетом всех потенциально возможных в равновесии индивидуальных веществ [1].

Сложные физико - химические процессы при взаимодействии рабочей среды с обрабатываемой поверхностью требуют учитывать все большее число компонентов рабочего тела. С одной стороны, это вызвано ростом числа химических элементов, вводимых в состав материалов, в связи с чем, резко увеличивается число возможных устойчивых соединений, образованных различными комбинациями атомов элементов, в том числе и при низких температурах. С другой стороны, высокие температуры, при которых осуществляется процесс, увеличивают число компонентов в рабочем теле за счет интенсификации реакций диссоциации сложных соединений на более простые, вплоть до атомарных компонентов. При организации плазменных процессов в некоторых случаях необходимо учитывать содержание электронного газа и ионов, которые существенно изменяют состав и электрофизические свойства рабочего тела. Приступая к расчету, необходимо знать набор компонентов в системе. Реальная картина процесса может быть получена в результате выполнения теплофизических и кинетических расчетов.

Взаимодействие обрабатываемого металла с газовой фазой определяется составом газовой атмосферы дуги, околодугового пространства и химическими свойствами элементов, содержащихся в расплавленном металле. Количественное соотношение газов зависит от вида обработки и способа защиты обрабатываемой поверхности. Исследование и анализ взаимодействие компонентов различных газов с расплавленными металлами позволяет уменьшить отрицательное влияние газовой атмосферы на свойства обрабатываемого материала. В работе [4] проведен анализ для определения влияние паров обрабатываемых металлов на тепловое состояние процесса плазменной обработки металлов. Исследованы приповерхностные явления на аноде при контрагированной привязке дуги, которой дают возможность проведения более сложных расчетов определения состава многокомпонентной приповерхностной плазмы и изучения закономерностей взаимодействия электрической дуги с обрабатываемым материалом. Для этого исследуется способы создания эффективной защиты дуги и обрабатываемой поверхности.

С этой цели, в данной работе проведено термодинамическое моделирование взаимодействие обрабатываемого материала различных марок стали с плазмообразующим газом – воздуха и смеси аргона. Рассчитаны температурные зависимости компонентного состава, полная энтальпия, энтропия и внутренняя энергия системы рассматриваемой системы. Определены основные компоненты, участвующие в реакции при взаимодействии с выделением теплоты, что позволяет с большей достоверностью оценивать механизмы процессов взаимодействия смеси воздуха и аргона с различными видами стали.

Исследование выполнено с использованием методов термодинамического моделирования (ТМ). В качестве расчетного инструмента при ТМ в данной работе использован программный комплекс Астра и Терра.

Компьютерный эксперимент в программе Терра выполнено для следующего компонентного состава воздуха: – Ar- 0,93%, N₂ – 78%, O₂ -21%, CO₂- 0,03% + сталь 20

следующего состава: [C-0,14%, Si-0.15%, Mn-0.4%, Ni-0.3%, S-0.05%, P-0.04%, Cr-0.3%, Cu-0.3%, As-0.08%, Fe-98%]; смесь аргона с активными газами следующего состава: N₂ - 0.03, O₂ - 0.93, Ar - 78, CO₂ - 21+ сталь 20 [C-0,14%, Si-0.15%, Mn-0.4%, Ni-0.3%, S-0.05%, P-0.04%, Cr-0.3%, Cu-0.3%, As-0.08%, Fe-98%] в области температур 300 – 12000К при давлениях от 0,1-0,7МПа, для полного термодинамического анализа взаимодействия рабочей среды с компонентами металла. На рис.1. приведено основные компонентами газовой среды смеси газов красным отмечено смесь: N₂ - 0.03, O₂ - 0.93, Ar - 78, CO₂ - 21; черными линиями отмечено смесь: Ar- 0,93%, N₂ - 78%, O₂ -21%, CO₂- 0,03% и концентрация электронов.

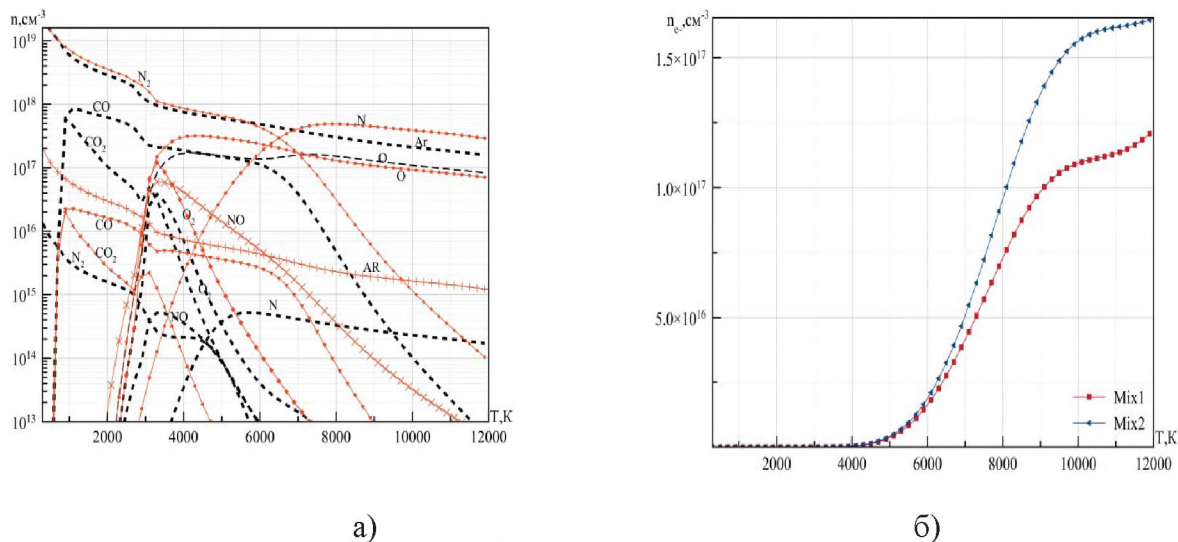


Рис.1. Распределение равновесного состава и концентрация электронов в диапазоне 300-12000К при P=0.1МПа для: а) газовой фазы смеси газов б) концентрация электронов при взаимодействии с поверхностью сталь 20.

На рис.1. рассматриваемым температурным диапазоне в равновесный состав входят атомы, молекулы и положительные ионы газов, образующейся в процессе диссоциации и ионизации. Кроме того газовая среда, дополняется компонентами газовых включений обрабатываемого материала. Распределение концентрация электронов рассматриваемых смеси газов при взаимодействии со сталью 20, заметно отличается, которые влияет электрофизические свойства рабочей среды.

На рис.2. изображены температурные зависимости конденсированных видов компонентов состава сталь20 при взаимодействии рассматриваемых смеси газов.

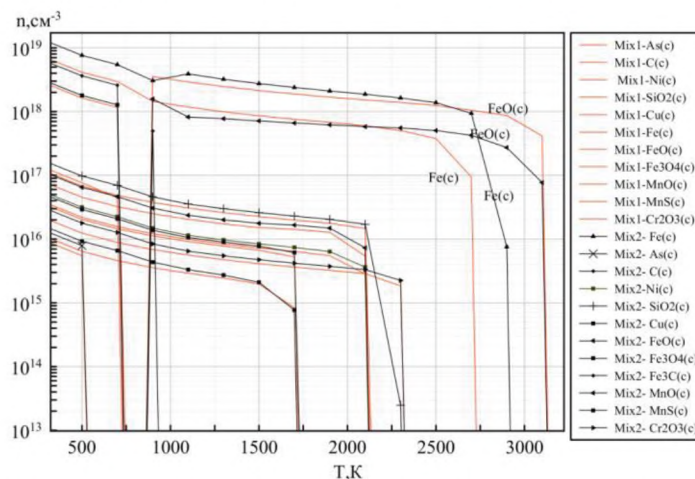


Рис.2. Температурные зависимости конденсированных компонентов при взаимодействии смеси газов со сталью 20 при P=0.1МПа.

Как показано на рис.2. при взаимодействии смеси газов со сталью 20, образуются компоненты сталь 20 в виде конденсированном состоянии в диапазоне температур от 300-3000К. В зависимости от рабочей среды показаны изменения некоторых конденсированных видов сталь 20, это дает возможность анализировать влияние этих компонентов на процесс обработки и выбирать рабочей среды в зависимости от обрабатываемого материала.

Проведенное термодинамическое моделирование показывает, что при взаимодействии рабочей среды с обрабатываемой поверхностью протекает сложные физико-химические процессы. При анализе температурных зависимостей равновесного состава рассматриваемой системы, можно условно выделить три области. Первая область связана с конденсированным состоянием, когда основной вклад в теплофизические свойства вносит металлический расплав и их соединений. Вторая область связана с фазовым превращением – испарением расплава. Третья область связана с газовой фазой, основной вклад в теплофизические свойства вносит в основном компоненты рабочего газа, металлических пар железа и ионы металлов.

Полученная информация позволяет определять основные компоненты, участвующие в реакции при взаимодействии и отдельных компонентов влияющие теплофизические коэффициенты среды. А также, компьютерный эксперимент позволяет выявить термодинамические особенности взаимодействия различных марок стали с компонентами воздуха и смеси аргона для анализа и исследования неравновесное состояние приповерхностного слоя.

Рассчитанные температурные зависимости полной энтальпии рассматриваемой системы «воздух+сталь» при различных давлениях приведены на рис.3.

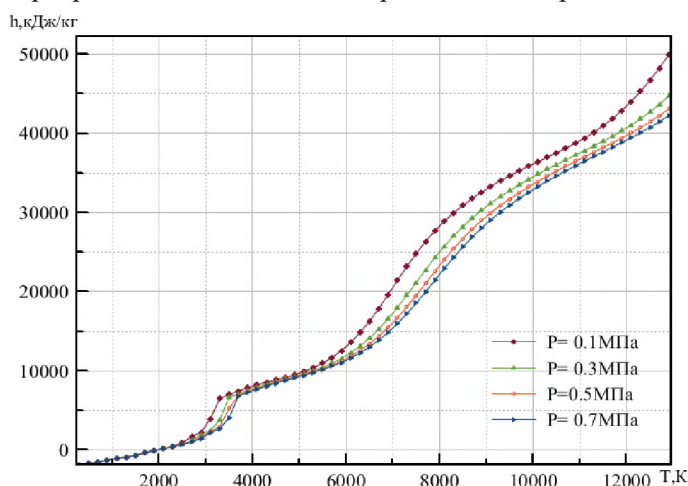


Рис.3. Энтальпия воздуха при взаимодействии поверхностью Сталь 20 при $P=0.1$, б) 0.3 МПа. в) 0.5 МПа г) 0.7 МПа.

Результаты вычисления энтальпии рассматриваемой системы показали, что с увеличением давлений можно увидеть определенные области температуры, где энтальпия резко меняется и области температуры, где эти свойства выравниваются. В области фазовых превращений можно заметить скачкообразные изменения энтальпии. Это позволяет определить температуру, близкую к температуре фазового превращения (температуру испарения) и изменение энтальпии в области интенсивного перехода расплава в газовую фазу. Стремительные изменения энтальпии обусловлены процессами диссоциации молекул и ионизации атомов рассматриваемой системы. Полученные результаты дает возможность анализировать эффективной тепловой мощности рассматриваемых систем.

На рис.4. показаны энтальпия и теплоемкость системы воздух+сталь20 сопоставлением с чистым воздухом.

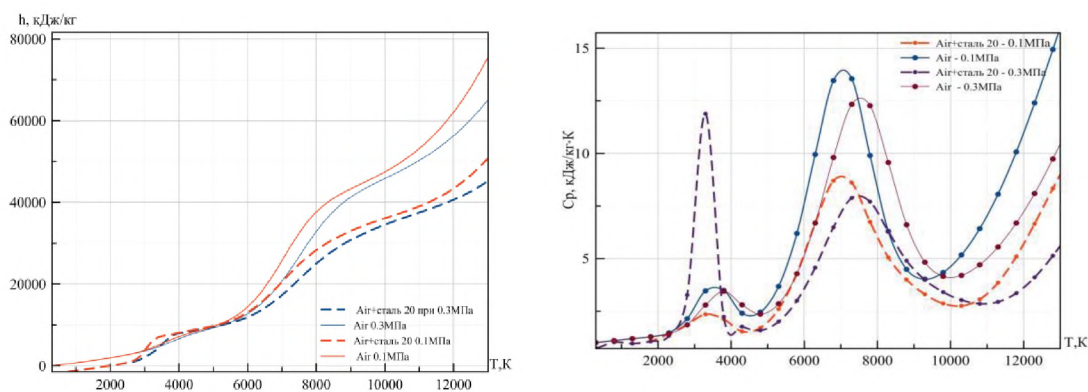


Рис.4. Энтальпия и теплоемкость рассматриваемой системы

Как показано на рис.4. теплофизические свойства рабочей среды при взаимодействии с обрабатываемой поверхностью значительно отличается от свойства чистого газа воздуха при различных равновесных давлениях. Установлено, что увеличение равновесного давления в системе приводит к значительному изменению температурного интервала в области фазового превращения и высоких температур. Это объясняет, роль и влияние компонентов металла или паров металла на теплофизические свойства системы.

Результаты термодинамического исследования взаимодействия плазмообразующего газа с обрабатываемой поверхностью дают количественную оценку участвующих при взаимодействии с газами компонентов, и позволяют прогнозировать их влияние не только на характеристики электрической дуги и процессы в прианодной области, а также на структурный состав поверхности обработки. Исследование и анализ взаимодействие компонентов различных газов с расплавленными металлами позволяет уменьшить отрицательное влияние газовой атмосферы на свойства обрабатываемого материала.

Выводы. Таким образом, полученные данные дают возможность проведения более сложных комплексных расчетов для исследования прианодной области столба дуги, где происходят сложные физико-химические процессы. Результаты исследований могут быть использованы также для изучения взаимодействия различных смесей газов с обрабатываемыми поверхностями, целью расширения области применения электродуговой плазмы и изучения процессов сложных многокомпонентных систем, применяемых в плазмохимии и плазменной металлургии. Дальнейшие исследования с использованием этих данных направлены на проведение численного моделирование рассматриваемых систем.

Список литературы

1. Вотолин Н.А. Термодинамическое моделирование высокотемпературных неорганических системах / Н.А. Вотолин, Г.К. Моисеев, Б.Г. Трусов - Москва: Металлургия. 1994.-352с.
2. Жайнаков А.Ж. Особенности моделирования процессов теплообмена при плазменной резке металлов / А.Ж. Жайнаков, Г.Д. Кабаева //Известия КГТУ, Материалы Межд.юбил.конференции «Информ. техн. и матем. мод. в науке, технике образовании.-2011.- № 24.- С.30-37
3. Рыкалин Н.Н. Высокотемпературные технологические процессы / Н.Н. Рыкалин, А.А. Углов, Л.М Анищенко - Москва: Наука,1985.-172с.
4. Султангазиева Р.Т. О влиянии паров металла сварочной ванны на параметры электродуговой плазмы / Р.Т. Султангазиева, Аманкулова Н.А. // Известия КГТУ.-2015.-№3. – С.220-225
5. Оборудование для плазменной сварки, наплавки и резки / Э.М.Эсибян, П.В. Гладкий, Н.И. Никифоров и др - Москва: Машиностроение, 1999.-375с.