



УДК 544.454.3

Математическое прогнозирование вероятности столкновения частиц в процессе детонационного напыления

*С. Ю. Ганигин, М. С. Гречухина, А. С. Нечаев,
А. Ю. Мурзин, В. А. Воронцова*

Самарский государственный технический университет,
Россия, 443100, Самара, ул. Молодогвардейская, 244.

Аннотация

Представлены методы математического прогнозирования вероятности столкновения частиц разнородных материалов в процессе детонационного напыления композиционных покрытий. Вследствие разных свойств исходных порошковых материалов (массы, аэродинамического сопротивления) показатели качества композиционных покрытий определяются не только параметрами движения частиц, но и их взаимным положением в потоке продуктов детонации. В случае использования реагирующих компонентов взаимодействие расплавленных частиц в потоке может привести к протеканию химических реакций и образованию новых материалов на подложке, созданию неоднородной структуры покрытия и ухудшению его прочностных и адгезионных свойств. Предварительный прогноз вероятности столкновения частиц до соприкосновения с поверхностью изделия дает возможность до проведения натуральных испытаний сделать вывод о получении качественных показателей покрытия.

Ключевые слова: детонационное напыление, поток частиц, вероятность столкновения, композиционные материалы.


Получение: 12 ноября 2021 г. / Исправление: 14 декабря 2022 г. /

Принятие: 16 декабря 2022 г. / Публикация онлайн: 21 декабря 2022 г.

Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ Краткое сообщение

© Коллектив авторов, 2022

© СамГТУ, 2022 (составление, дизайн, макет)

 Контент публикуется на условиях лицензии [Creative Commons Attribution 4.0 International](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.ru) (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.ru>)

Образец для цитирования

Ганигин С. Ю., Гречухина М. С., Нечаев А. С., Мурзин А. Ю., Воронцова В. А. Математическое прогнозирование вероятности столкновения частиц в процессе детонационного напыления // *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*, 2022. Т. 26, № 4. С. 789–801. EDN: FPLFPZ. DOI: [10.14498/vsgtu1975](https://doi.org/10.14498/vsgtu1975).

Сведения об авторах

Сергей Юрьевич Ганигин  <https://orcid.org/0000-0001-5778-6516>

доктор технических наук, доцент; декан; инженерно-технологический факультет;
e-mail: ganigin.s.yu@yandex.ru

Мария Сергеевна Гречухина  <https://orcid.org/0000-0001-7797-3802>

кандидат технических наук; старший научный сотрудник; лаб. цифровых двойников материалов и технологических процессов их обработки; e-mail: mariya_grechukhina@mail.ru

1. Введение. Исследование процессов детонационного напыления композиционных материалов рассмотрено в различных научных работах, описывающих его применение [1] и параметры, к которым относятся: расстояние от среза ствола до подложки [2]; выбор и соотношение компонентов газовой смеси [3–9]; толщина покрытия [10], скорость и температура потока частиц [11]; угол наклона подложки [12]; соотношение компонентов напыляемого состава [13]; взаимодействие напыляемого состава с компонентами газовой смеси [14]; коэффициент заполнения ствола газовой смесью [15]; режим напыления [16], который оказывает существенное влияние на конечный состав наносимого материала [17]. Также описывается множество преимуществ данной технологии получения покрытий, а именно: хорошая адгезия [2], высокая износостойкость и твердость [13, 18–20], коррозионная устойчивость покрытий [22].


Наносимый подобным образом материал представляет собой порошок либо смесь порошков двух или более веществ с различным размером частиц [18]. При этом допустимо, что дисперсность частиц двух или более напыляемых материалов относительно друг друга может быть различной.


Частицы напыляемого материала проходят ствол и некоторое расстояние до поверхности изделия. Внутренние стенки ствола детонационной установки имеют однородное сечение. Расстояние от границы ствола до изделия относительно небольшое, что обеспечивает сохранение необходимого импульса частицам вещества для необходимой адгезии с поверхностью [14].


Основополагающим фактором успешной реализации технологии детонационного напыления является столкновение (вне зависимости от геометрии и природы материала) наносимых частиц друг с другом только на поверхности подложки, исключая при этом их взаимный контакт в стволе детонационной установки и на всей протяженности полета до обрабатываемой поверхности. Это обусловлено тем, что взаимодействие расплавленных частиц вещества до попадания на изделие может вызвать создание неоднородной структуры покрытия и привести к ухудшению его прочностных и адгезионных свойств.

2. Оценка вероятности. Для рассмотрения вероятности столкновения частиц порошков в стволе экспериментальной установки возьмем двухкомпонентный состав веществ и примем ряд допущений [21], которые не противоречат физике протекающих реакций, но существенно упрощают процесс аналитического представления движения и взаимосвязи частиц вещества:

- 1) поток частиц ламинарный;
- 2) частицы обоих веществ в процессе движения распределены по сечению ствола детонационной установки равномерно;

Александр Сергеевич Нечаев  <https://orcid.org/0000-0002-0939-8292>
кандидат технических наук; доцент; каф. радиотехнических устройств;
e-mail: nechaev-as@mail.ru

Андрей Юрьевич Мурзин  <https://orcid.org/0000-0002-6737-036X>
кандидат технических наук, доцент; доцент; каф. технологий твердых химических веществ;
e-mail: ttxb@inbox.ru

Валерия Андреевна Воронцова  <https://orcid.org/0000-0002-8759-1805>
младший научный сотрудник; лаб. цифровых двойников материалов и технологических процессов их обработки; e-mail: vorontsova.va@mail.ru

- 3) вероятности, характеризующие нахождение частицы двух веществ в одно время в единице элементарного объема (рассматриваемой зоны), взаимонезависимы;
- 4) форму частиц можно с допустимой погрешностью принять сферической с определенным радиусом.

Из принятых допущений можно заключить, что факт столкновения частиц может считаться состоявшимся, если расстояние между центрами сфер двух частиц не превосходит суммы их радиусов. Также имеет место случай, когда движущиеся в ламинарном потоке частицы будут находиться в непосредственной близости к стенкам канала ствола. В этом случае допустимая площадь соприкосновения будет ограничиваться не только размерами частиц, но и внутренним радиусом ствола [15], а вероятность попадания обеих частиц в эту область будет меньше, чем та, что для частиц, удаленных от стенок установки. Однако поскольку радиальные размеры частиц значительно меньше радиуса сечения ствола, это дает основание утверждать, что количество частиц вблизи стенок установки по сравнению с количеством частиц вдали от ствола будет значительно меньше.

Принимаем, что в одном поперечном сечении ствола может находиться N частиц большого радиуса и n частиц малого радиуса. Для этого случая вероятность того, что хотя бы одна малая частица войдет хотя бы в одну область вблизи большей частицы:

$$p_{nN} = \sum_1^n \frac{N(r_b + r_s)^2}{R^2} = \frac{nN(r_b + r_s)^2}{R^2}, \quad (1)$$

где R — внутренний радиус канала ствола; r_b и r_s — радиусы большой и малой частиц соответственно. Причем ввиду относительной малости расстояния от границы ствола до поверхности изделия и сохранения условия ламинарности потока можно принять радиус потока частиц на этом промежутке равным внутреннему радиусу канала ствола.

Схематичное представление разноразмерных частиц двух веществ в сечении ствола показано на рис. 1. Пунктирной линией обозначена область, где при одновременном нахождении обеих частиц произойдет их контакт. Стоит

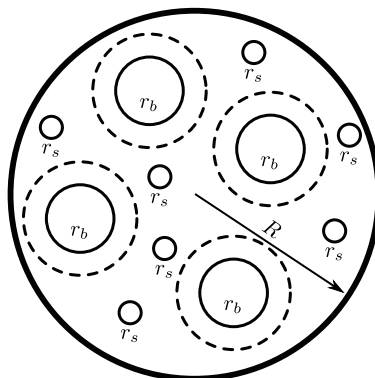


Рис. 1. Схематичное представление сечения ствола [Figure 1. The schematic image of the trunk section]

отметить, что данная область построена относительно поверхности большей частицы с учетом диаметрального размера малой.

Из формулы (1) ясно, что при больших величинах N и n вероятность контакта двух частиц будет велика, однако следует понимать, что исходя из условия проведения эксперимента величины N и n будут ограничены размерами самих частиц и внутренним радиусом ствола.

Согласно физике течения реакции, динамические параметры одних частиц (более крупных и массивных) отличаются от динамических параметров других частиц (менее крупных и массивных), что выражается в различных скоростях частиц в канале ствола и за его пределами. Данное обстоятельство свидетельствует о том, что существует область, где концентрация частиц в единице объема будет наибольшей, причем одни частицы будут догонять другие частицы. А значит, следует рассмотреть данную область как область с наибольшей вероятностью соприкосновения частиц (рис. 2).

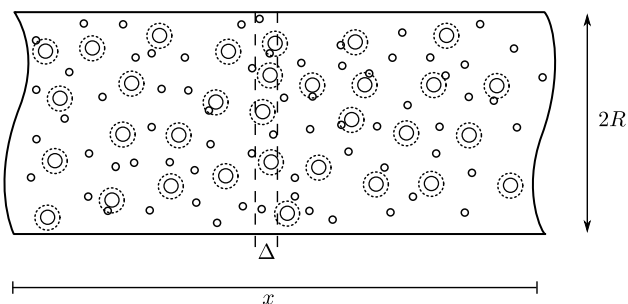


Рис. 2. Схематическое представление распределения частиц по длине в канале ствола [Figure 2. Schematic representation of the particle length distribution in the trunk channel]

Если для одной дозы загрузки порошка принять поток частиц равномерно распределенным во всем времени протекания процесса, то количество частиц в единичном объеме можно считать усредненно равным (другими словами, усредненное количество частиц в единице объема постоянное по всей длине рассматриваемой области).

Размеры области, где частицы одного вещества догоняют частицы другого, можно определить радиусом ствола R и линейной величиной области x на рис. 2. Для определения вероятности контакта частиц двух веществ по всей этой области следует рассмотреть вероятность контакта частиц в единичном объеме.

В качестве единичного объема в нашем случае удобно принять область, ограниченную цилиндрической поверхностью с основаниями площадью πR^2 и высотой Δ (рис. 2):

$$V_{\Delta} = \pi R^2 \Delta, \quad (2)$$

где $\Delta = 2r_b + 2r_s$.

Количество единичных объемов во всей рассматриваемой области будет определяться выражением

$$\lambda = \frac{V}{V_{\Delta}} = \frac{x}{\Delta}. \quad (3)$$

На основании выражений (2) и (3) можно довольно точно оценить количество частиц обоих веществ в единичном объеме. Для этого сначала определим

массу больших частиц порошка одного вещества в единичном объеме $m_{\Delta b}$ по выражению

$$m_{\Delta b} = \frac{m_{\Sigma b}}{\lambda}, \quad (4)$$

где $m_{\Sigma b}$ — общая масса порошка этого вещества. Затем определим количество частиц в единичном объеме N_{Δ} :

$$N_{\Delta} = \frac{m_{\Delta b}}{m_{1b}}, \quad (5)$$

где m_{1b} — масса одной частицы этого вещества. Аналогично формулам (4) и (5) можно получить выражение для оценки количества частиц другого вещества n_{Δ} :

$$n_{\Delta} = \frac{m_{\Sigma s}}{\lambda m_{1s}}, \quad (6)$$

где $m_{\Sigma s}$ — общая масса порошка второго вещества в одной дозе загрузки, m_{1s} — масса одной частицы этого вещества.

На основании выражений (2), (5) и (6) вероятность того, что хотя бы одна малая частица одного вещества войдет в область контакта хотя бы одной большой частицы другого вещества в определенном нами единичном объеме, будет определяться выражением

$$p_{\Delta n N} = \sum_1^{n_{\Delta}} \frac{4N_{\Delta}(r_b + r_s)^3}{3R^2(2r_b + 2r_s)} = \frac{2N_{\Delta}n_{\Delta}(r_b + r_s)^2}{3R^2}.$$

Для всей рассматриваемой области вероятность контакта больших и малых частиц при равномерном распределении частиц во всем времени протекания процесса будет определяться как

$$p_{nN} = \lambda \sum_1^{n_{\Delta}} \frac{4N_{\Delta}(r_b + r_s)^3}{3R^2(2r_b + 2r_s)} = \frac{2\lambda N_{\Delta}n_{\Delta}(r_b + r_s)^2}{3R^2}. \quad (7)$$

Если же условие равномерности потока выполняться не будет, то линейную величину области x следует рассматривать как сумму отрезков, в которых количество частиц веществ будет меняться в зависимости от скорости частиц и времени их прохождения относительно начала процесса:

$$x(v(t), t) = \sum_{i=1}^{\lambda} x(v_i), \quad (8)$$

где $v(t)$ — функция скорости потока частиц, изменяющаяся в процессе движения частицы; t — время; v_i — усредненная скорость потока частиц на рассматриваемом i -том единичном участке, которую можно считать постоянной. Тогда выражение (7) с учетом (8) запишется в виде

$$p_{nN} = \sum_{i=1}^{\lambda} \sum_1^{n_{\Delta_i}} \frac{4N_{\Delta_i}(r_b + r_s)^3}{3R^2(2r_b + 2r_s)} = \sum_{i=1}^{\lambda} \frac{2N_{\Delta_i}n_{\Delta_i}(r_b + r_s)^2}{3R^2}. \quad (9)$$

Зависимость (9) можно считать окончательным выражением, дающим оценку вероятности столкновения частиц в процессе детонационного напыления с учетом приведенных допущений.

3. Математическое моделирование. Для подтверждения отсутствия взаимодействия между компонентами смеси двух веществ в стволе детонационной установки проведено математическое моделирование прогрева их частиц с дисперсностью 40 и 20 мкм (рис. 3). Для прогнозирования прогрева частиц в пространстве, а также оценки температур частиц в потоке проведено численное моделирование в программном комплексе ANSYS.¹ Температура воздействующей газовой смеси на поверхность частиц составляет 4000 °С, а значения теплового потока газа — 65 Вт/(м² · °С) (для частиц диаметром 40 мкм) и 90 Вт/(м² · °С) (для частиц диаметром 20 мкм). В качестве примера на рис. 3 представлено распределение температуры в дискретные моменты времени для частиц с размерностью 40 мкм.

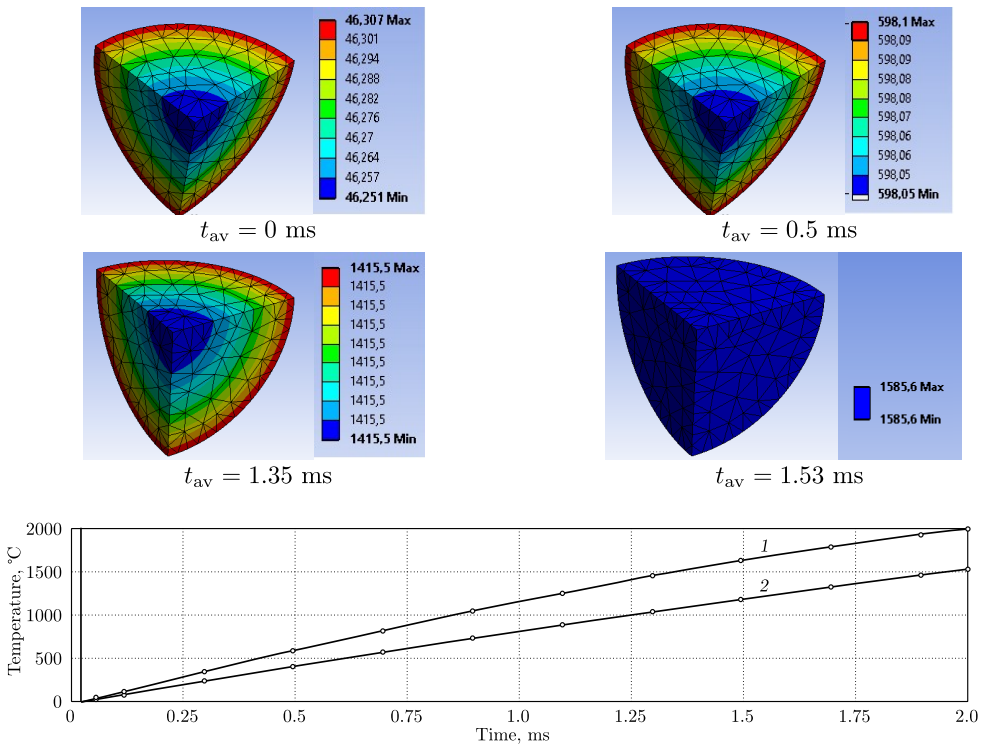


Рис. 3. Зависимость процесса прогрева частиц диаметром 40 мкм (1) и 20 мкм (2) от времени при детонационном напылении
 [Figure 3. The dependence of the heating process of particles with diameters of 40 μm (1) and 20 μm (2) on the time during detonation spraying]

Математическим моделированием показано, что частицы диаметром 40 мкм прогреваются медленнее частиц диаметром 20 мкм, что свидетельствует об отсутствии взаимодействия между ними в процессе детонационного напыления — от момента их попадания в ствол детонационной установки и до завершения процесса напыления.

¹Лицензия на ПО ANSYS Academic Research AUTODYN от 19 ноября 2009 г. № 00606251.

4. Заключение. Полученные в ходе работы зависимость и математическая модель дают оценку вероятности столкновения разноразмерных частиц в ламинарном потоке. По этой оценке можно до проведения испытаний на установке судить о количестве расплавленных частиц порошка, вступивших в реакцию до попадания на поверхность изделия. Это позволит уже на ранней стадии процесса внести поправки количественных показателей массы порошка и определить допустимые диапазоны размера используемых в процессе гранул.

Возможность практического использования приведенных результатов теоретических исследований следует в дальнейшем скорректировать экспериментальными исследованиями, которые позволят уточнить значения вероятности столкновения частиц двух и более выбранных веществ с определенными значениями дисперсности, массы и скорости в потоке.

Конкурирующие интересы. Заявляем, что в отношении авторства и публикации этой статьи конфликта интересов не имеем.

Авторский вклад и ответственность. С.Ю. Ганигин — идея исследования; объяснение новых фактов в контексте собственной теории процесса; постановка задач исследования; анализ результатов исследований; работа с переработанным вариантом рукописи. М.С. Гречухина — математическое моделирование прогрева частиц, находящихся в стволе детонационной установки при напылении; подготовка литературного обзора; подготовка графического материала; работа с черновиком и переработанным вариантом рукописи. А.С. Нечаев — расчет статистических данных вероятности столкновения частиц в стволе детонационной установки; интерпретация результатов; работа с черновиком и переработанным вариантом рукописи. В.А. Воронцова — моделирование в программном комплексе ANSYS; обработка и анализ результатов моделирования; работа с черновиком рукописи. А.Ю. Мурзин — работа с переработанным вариантом рукописи; перевод на английский язык. Авторы несут полную ответственность за предоставление окончательной рукописи в печать. Окончательная версия рукописи была одобрена всеми авторами.

Финансирование. Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания (тема № АААА-А12-2110800012-0).

Благодарность. Авторы благодарны рецензенту за тщательное прочтение статьи и ценные предложения и комментарии.

Библиографический список

1. Haridasan V. P., Velayudham A., Krishnamurthy R. Response surface modeling and parameter optimization of detonation spraying with enhanced coating performance // *Materials Today: Proceedings*, 2021. vol. 46, no. 9. pp. 3474–3481. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.11.867>.
2. Ulianitsky V. Yu., Shtertser A. A., Batraev I. S., Rybin D. K. Fabrication of layered ceramic-metal composites by detonation spraying // *Ceramics Intern.*, 2020. vol. 46, no. 17. pp. 27903–27908. EDN: PAVTPA. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.07.225>.
3. Ulianitsky V. Yu., Batraev I. S., Shtertser A. A., Dudina D. V., Bulina N. V., Smurov I. Detonation spraying behavior of refractory metals: Case studies for Mo and Ta-based powders // *Adv. Powder Technol.*, 2018. vol. 29, no. 8. pp. 1859–1864. EDN: YCBFVR. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apt.2018.04.023>.
4. Rybin D. K., Batraev I. S., Dudina D. V., Ukhina A. V., Ulianitsky V. Yu. Deposition

- of tungsten coatings by detonation spraying // *Surf. Coat. Technol.*, 2021. vol. 409, 126943. EDN: EUTKJS. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2021.126943>.
5. Shtertsera A. A., Rybin D. K., Ulianitsky V. Yu., Park W., Datekyu M., Wada T., Kato H. Characterization of nanoscale detonation carbon produced in a pulse gas-detonation device // *Diamond Relat. Mater.*, 2020. vol. 101, 107553. EDN: HRUGOT. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2019.107553>.
 6. Cui S., Zhai H., Li W., Fan X., Li X., Ning W., Xiong D. Microstructure and tribological properties of Fe-based amorphous coating prepared by detonation spray // *J. Non-Cryst. Solids*, 2021. vol. 556, 120564. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrsol.2020.120564>.
 7. Ulianitsky V. Yu., Rybin D. K., Ukhina A. V., Bokhonov B. B., Dudina D. V., Samodurova M. N., Trofimov E. A. Structure and composition of Fe-Co-Ni and Fe-Co-Ni-Cu coatings obtained by detonation spraying of powder mixtures // *Materials Letters*, 2021. vol. 290, 129498. EDN: SINNEA. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2021.129498>.
 8. Ulianitsky V. Yu., Dudina D. V., Batraev I. S., Kovalenko A. I., Bulina N. V., Bokhonov B. B. Detonation spraying of titanium and formation of coatings with spraying atmosphere-dependent phase composition // *Surf. Coat. Technol.*, 2015. vol. 261. pp. 174–180. EDN: UEKMPD. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2014.11.038>.
 9. 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 Ti₃Al at different O₂/C₂H₂ ratios // *Intermetallics*, 2012. vol. 29. pp. 140–146. EDN: RGCVLH. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2012.05.010>.
 10. Haridasan V. P., Velayudham A., Krishnamurthy R. Response surface modeling and parameter optimization of detonation spraying with enhanced coating performance // *Materials Today: Proceedings*, 2021. vol. 46, no. 9. pp. 3474–3481. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.11.867>.
 11. Batraev I. S., Ulianitsky V. Yu., Dudina D. V. Detonation spraying of copper: Theoretical analysis and experimental studies // *Materials Today: Proceedings*, 2017. vol. 4, no. 11. pp. 11346–11350. EDN: XOISOM. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2017.09.006>.
 12. Ulianitsky V., Batraev I., Dudina D., Smurov I. Enhancing the properties of WC/Co detonation coatings using two-component fuels // *Surf. Coat. Technol.*, 2017. vol. 318. pp. 244–249. EDN: XNHHSJ. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2016.08.008>.
 13. Dudina D. V., Pribytkov G. A., Krinitcyn M. G., Korchagin M. A., Bulina N. V., Bokhonov B. B., Batraev I. S., Rybin D. K., Ulianitsky V. Yu. Detonation spraying behavior of TiC_x-Ti powders and the role of reactive processes in the coating formation // *Ceramics Intern.*, 2016. vol. 42, no. 1, part A. pp. 690–696. EDN: XXBCUX. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2015.08.166>.
 14. Dudina D. V., Batraev I. S., Ulianitsky V. Yu., Korchagin M. A. Possibilities of the computer-controlled detonation spraying method: A chemistry viewpoint // *Ceramics Intern.*, 2014. vol. 40, no. 2. pp. 3253–3260. EDN: SKKGHD. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2013.09.111>.
 15. Dudina D. V., Zlobin S. B., Bulina N. V., Bychkov A. L., Korolyuk V. N., Ulianitsky V. Yu., Lomovsky O. I. Detonation spraying of TiO₂-2.5 vol.% Ag powders in a reducing atmosphere // *J. Europ. Ceramic Soc.*, 2012. vol. 32, no. 4. pp. 815–821. EDN: PDGOPL. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2011.10.022>.
 16. Shtertser A., Muders C., Veselov S., Zlobin S., Ulianitsky V., Jiang X., Bataev V. Computer controlled detonation spraying of WC/Co coatings containing MoS₂ solid lubricant // *Surf. Coat. Technol.*, 2012. vol. 206, no. 23. pp. 4763–4770. EDN: RGCAMH. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2012.03.043>.
 17. Ulianitsky V. Yu., Dudina D. V., Batraev I. S., Rybin D. K., Bulina N. V., Ukhina A. V., Bokhonov B. B. The influence of the in-situ formed and added carbon on the formation of metastable Ni-based phases during detonation spraying // *Materials Letters*, 2016. vol. 181. pp. 127–131. EDN: XFJUMP. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2016.06.022>.

18. Liao W.-B., Wu Zh.-X., Lu W., He M., Wang T., Guo Z., Huang J. Microstructures and mechanical properties of CoCrFeNiMn high-entropy alloy coatings by detonation spraying // *Intermetallics*, 2021. vol. 132, 107138. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2021.107138>.
19. Shtertser A. A., Batraev I. S., Ulianitsky V. Yu., Kuchumova I. D., Bulina N. V., Ukhina A. V., Bokhonov B. B., Dudina D. V., Trinh Ph. V., Phuong D. D. Detonation spraying of Ti-Cu mixtures in different atmospheres: Carbon, nitrogen and oxygen uptake by the powders // *Surf. Interf.*, 2020. vol. 21, 100676. EDN: JEFFAG. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.surfin.2020.100676>.
20. Патент № RU 2744805 C1: Способ нанесения реакционноспособного композиционного покрытия на основе Ni-Al / М. В. Ненашев, Д. А. Деморецкий, С. Ю. Ганигин, И. В. Нечаев, И. А. Кузнецов, А. А. Новиков, В. Л. Симогин, А. Ю. Мурзин, А. Г. Попов, А. Т. Нурмухаметов, Н. С. Альдебенев, М. С. Гречухина, И. Р. Тонеев. Патентообладатель: ФГБОУ ВО «СамГТУ». Номер заявки: 2020113997. Дата регистрации: 03.04.2020. Дата публикации: 15.03.2021, 2021. <http://www.fips.ru/cdfi/fips.dll/ru?ty=29&docid=2744805>. EDN: XVKCSP.
21. Nechaeva I., Nechaev A. Method of assessing the sensitivity of the dust-air mixture to thermal effects caused by electric discharge / *2019 XXI International Conference Complex Systems: Control and Modeling Problems (CSCMP)*, 2019. pp. 553–557. EDN: DMELHU. DOI: <https://doi.org/10.1109/CSCMP45713.2019.8976612>.
22. Lakshmi D. V., Babu P. S., Krishna L. R., Vijay R., Rao D. S., Padmanabham G. Corrosion and erosion behavior of iron aluminide (FeAl(Cr)) coating deposited by detonation spray technique // *Adv. Powder Technol.* vol. 32, no. 7. pp. 2192–2201. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.appt.2021.04.032>.

MSC: 80A17, 74A40

Mathematical prediction of the probability of particle collisions during detonation spraying

*S. Yu. Ganigin, M. S. Grechukhina, A. S. Nechaev,
A. Yu. Murzin, V. A. Vorontsova*

Samara State Technical University,
244, Molodogvardeyskaya st., Samara, 443100, Russian Federation.

Abstract

The paper presents methods of mathematical prediction of the probability of collision of particles of dissimilar materials in the process of detonation spraying of composite coatings. As a consequence of different properties of initial powder materials (mass, aerodynamic resistance), quality indicators of composite coatings are determined not only with the motion parameters of the particles but with their mutual position in the flow of the detonation products. In the case of the use of reactive components, the interaction of molten particles in the flow can lead to chemical reactions, formation of new materials on the substrate, heterogeneous structure of the coating, and deterioration of its strength and adhesive properties. A preliminary forecast of the probability of collision of particles before contact with the surface of the product makes it possible to conclude before conducting full-scale tests that high-quality coating indicators have been obtained.

Keywords: detonation spraying, particle flow, collision probability, composite materials.


Received: 12th November, 2021 / Revised: 14th December, 2022 /

Accepted: 16th December, 2022 / First online: 21st December, 2022

Mathematical Modeling, Numerical Methods and Software Complexes Short Communication

© Authors, 2022

© Samara State Technical University, 2022 (Compilation, Design, and Layout)

 The content is published under the terms of the [Creative Commons Attribution 4.0 International License](http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/) (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>)

Please cite this article in press as:

Ganigin S. Yu., Grechukhina M. S., Nechaev A. S., Murzin A. Yu., Vorontsova V. A. Mathematical prediction of the probability of particle collisions during detonation spraying, *Vestn. Samar. Gos. Tekhn. Univ., Ser. Fiz.-Mat. Nauki* [J. Samara State Tech. Univ., Ser. Phys. Math. Sci.], 2022, vol. 26, no. 4, pp. 789–801. EDN: [PPLFZP](https://doi.org/10.14498/vsgtu1975). DOI: [10.14498/vsgtu1975](https://doi.org/10.14498/vsgtu1975) (In Russian).

Authors' Details:

Sergey Yu. Ganigin  <https://orcid.org/0000-0001-5778-6516>

Dr. Techn. Sci., Associate Professor; Dean; Faculty of Engineering and Technology;
e-mail: ganigin.s.yu@yandex.ru

Maria S. Grechukhina  <https://orcid.org/0000-0001-7797-3802>

Cand. Techn. Sci.; Senior Researcher; Lab. of Digital Doubles of Materials and Technological Processes of their Processing; e-mail: mariya_grechukhina@mail.ru

Competing interests. We declare that we have no conflicts of interest with respect to the authorship and publication of this article.

Authors' contributions and responsibilities. S.Y. Ganigin: Idea of study; Explanation of new facts in the context of his own theory of the process, Setting research goals; Analysis of the results; Writing — review & editing. M.S. Grechukhina: Mathematical modeling of the heating of particles in the barrel of the detonation unit during spraying; Preparation of a literature review; Preparation of graphic material; Writing — original draft and review & editing. A.S. Nechaev: Calculation of statistical data on the probability of collision of particles in the barrel of the detonation unit; Interpretation of the results; Writing — original draft and review & editing. V.A. Vorontsova: Modeling in the ANSYS software package; Processing and analysis of simulation results; Writing — original draft. A.Y. Murzin: Writing — review & editing; Translation into English. Each author has participated in the development of the concept of the article and in the writing of the manuscript. The authors are absolutely responsible for submitting the final manuscript in print. Each author has approved the final version of the manuscript.

Funding. The research was carried out with the financial support of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within the framework of the state task (theme no. AAAA12-2110800012-0).


Acknowledgments. The authors are grateful to the referee for careful reading of the paper and valuable suggestions and comments.

References

1. Haridasan V. P., Velayudham A., Krishnamurthy R. Response surface modeling and parameter optimization of detonation spraying with enhanced coating performance, *Materials Today: Proceedings*, 2021, vol. 46, no. 9, pp. 3474–3481. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.11.867>.
2. Ulianitsky V. Yu., Shtertser A. A., Batraev I. S., Rybin D. K. Fabrication of layered ceramic-metal composites by detonation spraying, *Ceramics Intern.*, 2020, vol. 46, no. 17, pp. 27903–27908. EDN: PAVTPA. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.07.225>.
3. Ulianitsky V. Yu., Batraev I. S., Shtertser A. A., Dudina D. V., Bulina N. V., Smurov I. Detonation spraying behavior of refractory metals: Case studies for Mo and Ta-based powders, *Adv. Powder Technol.*, 2018, vol. 29, no. 8, pp. 1859–1864. EDN: YCBFVR. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apt.2018.04.023>.
4. Rybin D. K., Batraev I. S., Dudina D. V., Ukhina A. V., Ulianitsky V. Yu. Deposition of tungsten coatings by detonation spraying, *Surf. Coat. Technol.*, 2021, vol. 409, 126943. EDN: EUTKJS. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2021.126943>.
5. Shtertser A. A., Rybin D. K., Ulianitsky V. Yu., Park W., Datekyu M., Wada T., Kato H. Characterization of nanoscale detonation carbon produced in a pulse gas-detonation device, *Diamond Relat. Mater.*, 2020, vol. 101, 107553. EDN: HRUGOT. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2019.107553>.

Alexander S. Nechaev  <https://orcid.org/0000-0002-0939-8292>

Cand. Techn. Sci.; Associate Professor; Dept. of Radio Engineering Devices;
e-mail: nechaev-as@mail.ru

Andrey Yu. Murzin  <https://orcid.org/0000-0002-6737-036X>

Cand. Techn. Sci.; Associate Professor; Dept. of Solid Chemical Technology;
e-mail: ttxb@inbox.ru

Valeria A. Vorontsova  <https://orcid.org/0000-0002-8759-1805>

Junior Researcher; Lab. of Digital Doubles of Materials and Technological Processes of their Processing; e-mail: vorontsova.va@mail.ru

6. Cui S., Zhai H., Li W., Fan X., Li X., Ning W., Xiong D. Microstructure and tribological properties of Fe-based amorphous coating prepared by detonation spray, *J. Non-Cryst. Solids*, 2021, vol. 556, 120564. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2020.120564>.
7. Ulianitsky V. Yu., Rybin D. K., Ukhina A. V., Bokhonov B. B., Dudina D. V., Samodurova M. N., Trofimov E. A. Structure and composition of Fe-Co-Ni and Fe-Co-Ni-Cu coatings obtained by detonation spraying of powder mixtures, *Materials Letters*, 2021, vol. 290, 129498. EDN: SINNEA. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2021.129498>.
8. Ulianitsky V. Yu., Dudina D. V., Batraev I. S., Kovalenko A. I., Bulina N. V., Bokhonov B. B. Detonation spraying of titanium and formation of coatings with spraying atmosphere-dependent phase composition, *Surf. Coat. Technol.*, 2015, vol. 261, pp. 174–180. EDN: UEKMPD. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2014.11.038>.
9. 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 Ti₃Al at different O₂/C₂H₂ ratios, *Intermetallics*, 2012, vol. 29, pp. 140–146. EDN: RGCVLH. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2012.05.010>.
10. Haridasan V. P., Velayudham A., Krishnamurthy R. Response surface modeling and parameter optimization of detonation spraying with enhanced coating performance, *Materials Today: Proceedings*, 2021, vol. 46, no. 9, pp. 3474–3481. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.11.867>.
11. Batraev I. S., Ulianitsky V. Yu., Dudina D. V. Detonation spraying of copper: Theoretical analysis and experimental studies, *Materials Today: Proceedings*, 2017, vol. 4, no. 11, pp. 11346–11350. EDN: XOISOM. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2017.09.006>.
12. Ulianitsky V., Batraev I., Dudina D., Smurov I. Enhancing the properties of WC/Co detonation coatings using two-component fuels, *Surf. Coat. Technol.*, 2017, vol. 318, pp. 244–249. EDN: XNHHSJ. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2016.08.008>.
13. Dudina D. V., Pribytkov G. A., Krinitsyn M. G., Korchagin M. A., Bulina N. V., Bokhonov B. B., Batraev I. S., Rybin D. K., Ulianitsky V. Yu. Detonation spraying behavior of TiC_x-Ti powders and the role of reactive processes in the coating formation, *Ceramics Intern.*, 2016, vol. 42, no. 1, part A, pp. 690–696. EDN: XXBCUX. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2015.08.166>.
14. Dudina D. V., Batraev I. S., Ulianitsky V. Yu., Korchagin M. A. Possibilities of the computer-controlled detonation spraying method: A chemistry viewpoint, *Ceramics Intern.*, 2014, vol. 40, no. 2, pp. 3253–3260. EDN: SKKGHD. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2013.09.111>.
15. Dudina D. V., Zlobin S. B., Bulina N. V., Bychkov A. L., Korolyuk V. N., Ulianitsky V. Yu., Lomovsky O. I. Detonation spraying of TiO₂-2.5 vol.% Ag powders in a reducing atmosphere, *J. Europ. Ceramic Soc.*, 2012, vol. 32, no. 4, pp. 815–821. EDN: PDGOPL. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2011.10.022>.
16. Shtertser A., Muders C., Veselov S., Zlobin S., Ulianitsky V., Jiang X., Bataev V. Computer controlled detonation spraying of WC/Co coatings containing MoS₂ solid lubricant, *Surf. Coat. Technol.*, 2012, vol. 206, no. 23, pp. 4763–4770. EDN: RGCAMH. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2012.03.043>.
17. Ulianitsky V. Yu., Dudina D. V., Batraev I. S., Rybin D. K., Bulina N. V., Ukhina A. V., Bokhonov B. B. The influence of the in-situ formed and added carbon on the formation of metastable Ni-based phases during detonation spraying, *Materials Letters*, 2016, vol. 181, pp. 127–131. EDN: XFJUMP. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2016.06.022>.
18. Liao W.-B., Wu Zh.-X., Lu W., He M., Wang T., Guo Z., Huang J. Microstructures and mechanical properties of CoCrFeNiMn high-entropy alloy coatings by detonation spraying, *Intermetallics*, 2021, vol. 132, 107138. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2021.107138>.
19. Shtertser A. A., Batraev I. S., Ulianitsky V. Yu., Kuchumova I. D., Bulina N. V., Ukhina A. V., Bokhonov B. B., Dudina D. V., Trinh Ph. V., Phuong D. D. Detonation spraying

- of Ti-Cu mixtures in different atmospheres: Carbon, nitrogen and oxygen uptake by the powders, *Surf. Interf.*, 2020, vol. 21, 100676. EDN: JEFFAG. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.surfin.2020.100676>.
20. Patent RU 2744805 C1, A method of applying a reactive composite coating based on Ni-Al / M. V. Nenashev, D. A. Demoretsky, S. Yu. Ganigin, I. V. Nechaev, I. A. Kuznetsov, A. A. Novikov, V. L. Simogin, A. Yu. Murzin, A. G. Popov, A. T. Nurmukhametov, N. S. Aldebenev, M. S. Grechukhina, I. R. Toneev; publ. 15 Mar 2021, 2021 (In Russian). <http://www.fips.ru/cdfi/fips.dll/ru?ty=29&docid=2744805>. EDN: XVKCSP.
21. Nechaeva I., Nechaev A. Method of assessing the sensitivity of the dust-air mixture to thermal effects caused by electric discharge, In: *2019 XXI International Conference Complex Systems: Control and Modeling Problems (CSCMP)*, 2019, pp. 553–557. EDN: DMELHU. DOI: <https://doi.org/10.1109/CSCMP45713.2019.8976612>.
22. Lakshmi D. V., Babu P. S., Krishna L. R., Vijay R., Rao D. S., Padmanabham G. Corrosion and erosion behavior of iron aluminide (FeAl(Cr)) coating deposited by detonation spray technique, *Adv. Powder Technol.*, vol. 32, no. 7, pp. 2192–2201. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apt.2021.04.032>.