

А.В. Кузьмов

## МУЛЬТИМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКАНИЯ ПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ

*Предложена мультимасштабная методология моделирования спекания, основывающаяся на параллельном отслеживании и учете взаимного влияния структуры микронеоднородной среды и макроскопических деформаций среды. Внутренняя структура пористого материала отслеживается в определенных контрольных точках макроскопического тела, при этом каждой контрольной точке соответствует своя представительная ячейка. Используемый мультимасштабный подход, в отличие от большинства известных на сегодня исследований, позволяет избавиться от ограничений связанных с выбором внутренних параметров состояния описывающих структуру гетерогенной среды. Рассматривается спекание частично закрепленного пористого тела. Результаты расчетов позволили увидеть существенную несферичность формы пор и как следствие возникновение приобретенной анизотропии в некоторых частях спекаемого тела.*

*Ключевые слова:* мультимасштабная методология, спекания, пористый материал.

*Рис. 6. Форм. 13. Лит. 3.*

А.В. Кузьмов

## МУЛЬТИМАСШТАБНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СПІКАННЯ ПОРИСТИХ МАТЕРІАЛІВ

*Запропонована мультимасштабна методологія моделювання спікання, що базується на паралельному відстежуванні та врахуванні взаємного впливу структури мікро неоднорідного середовища та макроскопічних деформацій середовища. Внутрішня структура пористого матеріалу відстежується в певних контрольних точках макроскопічного тіла, при цьому кожній контрольній точці відповідає своя репрезентативна комірка. Такий мультимасштабний підхід, на відміну від більшості відомих на сьогодні досліджень, дозволяє позбутись обмежень пов'язаних з вибором внутрішніх параметрів стану, що описують структуру гетерогенного середовища. Розглядається спікання частково закріпленого пористого тіла. Результати розрахунків дозволили виявити суттєву не сферичність форми пор і як наслідок виникнення набутої анізотропії.*

*Ключові слова:* мультимасштабна методологія, спікання, пористий матеріал.

A. Kuzmov

## MULTISCALE MODELING OF SINTERING OF POROUS MATERIALS

*A multi-scale numerical approach for the modeling of viscous sintering based on the parallel monitoring of micro- and macro-scale evolutions is proposed. The internal structure of the porous material is described by the set of unit cells defined in the special control points of the material. In the course of sintering both the macroscopic shape change and the evolution of the unit cell geometry are calculated. The approach has no restrictions on the number of internal material parameters and could be used for the analysis of the optimum set of internal characteristics during viscous sintering. Numerical examples demonstrate a high level of macroscopically non-uniform anisotropy development during the constrained sintering of a porous bar with a rectangular cross-section.*

Для описания макроскопического поведения микронеоднородных тел применяется концепция эффективных свойств. Эта концепция позволяет, зная локальные законы поведения различных фаз микронеоднородного материала и геометрию взаимного расположения фаз (микроструктуру), сформулировать аналогичные законы поведения некоей эффективной среды соответствующей микронеоднородному материалу. Согласно этой концепции каждой материальной точке эффективной среды можно поставить в соответствие подобласть микронеоднородного тела, содержащую определенный фрагмент микроструктуры, — так называемую представительную ячейку. При этом макроскопическому тензору скоростей деформаций  $e_{ij}^0$  в материальной точке эффективной среды соответствуют граничные условия относительно скоростей на представительной ячейке:

$$V_i = e_{ij}^0 x_j \quad (1)$$

При исследовании эффективных свойств для описания микроструктуры обычно вводят некоторую совокупность параметров  $V_1 \dots V_n$  характеризующих геометрию взаимного расположения фаз в микронеоднородном материале. Такие параметры принято называть внутренними параметрами состояния эффективной среды, поскольку они также являются внутренними параметрами состояния в термодинамическом смысле. Примерами таких параметров служат объёмные концентрации фаз, параметры формы частиц отдельной фазы (например эксцентриситет и угол поворота эллиптического включения), топологические характеристики взаимного расположения фаз (число межчастичных контактов, межфазная поверхность). При деформировании микронеоднородных тел микроструктура также претерпевает изменения в ходе деформирования, поэтому возникает вопрос об изменении внутренних параметров в ходе деформации. Для решения этой проблемы пытаются с тех или иных

соображений найти так называемые эволюционные уравнения для внутренних параметров состояния. В случае необратимого деформирования эти эволюционные уравнения, как правило, имеют общий вид :

$$\frac{\partial v_k}{\partial t} = f(v_1 \dots v_n, e_{ij}) \quad (2)$$

Для успешного и обоснованного использования описанной выше методики внутренних переменных состояния при моделировании деформирования макроскопического микронеоднородного тела нужно, чтобы на протяжении всей истории деформирования во всех материальных точках макроскопического тела (а как отмечалось ранее, каждой макроскопической материальной точке соответствует своя представительная ячейка ) микроструктура более или менее точно описывалась с помощью конечного числа заранее выбранных внутренних параметров состояния  $v_1 \dots v_n$ . Если строго подходить к этому вопросу, то такое условие как правило не выполняется, потому что геометрия распределения фаз в микронеоднородном материале сложным образом зависит от истории макроскопического деформирования и не может быть описана конечным числом внутренних параметров состояния. Но существуют важные для приложений случаи, когда микроструктуру можно более или менее точно описать с помощью конечного числа внутренних переменных состояния: это прежде всего теория малых упругих или упруго пластических деформаций когда отождествляются Эйлеровы и Лагранжевы координаты и деформации пренебрежимо мало влияют на изменение микроструктуры. К таким случаям относится также теория течения несжимаемой жидкости с твердыми включениями в случае, когда концентрация включений относительно невелика и некоторые другие случаи. Но существует немало важных для приложений случаев, когда концепции конечного числа внутренних переменных состояния недостаточно для адекватного моделирования деформирования микронеоднородного тела.

С развитием средств вычислительной техники и методов численного анализа становится возможным прямое численное многоуровневое моделирование деформирования микронеоднородных тел, при котором геометрия представительной ячейки отслеживается непосредственно без ввода дополнительных внутренних параметров состояния эффективной среды. В этой статье описывается многоуровневое моделирование процесса спекания в случае, когда механизмом спекания является линейно-вязкое течение несжимаемой твердой фазы под действием капиллярных Лапласовских сил [1]. Следует заметить, что, в отличии от случая просто вязкого течения пористого тела, в случае спекания к форме пор чувствительны не только макроскопические вязкие свойства, но и движущие силы спекания в форме капиллярного Лапласовского давления [2]. Поэтому, как нам кажется, в случае спекания особо важно уметь правильно отслеживать форму пор на протяжении всего процесса деформирования, что обуславливает необходимость использования многоуровневого моделирования.

Опишем использовавшуюся нами методику многоуровневого моделирования. Для упрощения вычислений мы рассматривали задачу плоской деформации для тела с периодически расположенными порами. То есть рассматриваемый нами материал имеет периодическую микроструктуру. Теория эффективных свойств для материалов с периодической микроструктурой довольно хорошо разработана, более того, существует строгое теоретическое обоснование этой теории [3]. Для нас с точки зрения вычислительной эффективности важно то, что для нахождения эффективных свойств можно рассматривать краевую задачу всего на одной ячейке периодической решетки (при этом следует заметить, что в терминах микромеханики [4] размер одной ячейки не является масштабом длины осреднения, а всего лишь масштабом неоднородности, поэтому на границе ячейки берутся не граничные условия (1), а несколько иные описанные ниже).

Согласно теории, изложенной в [3] если в материальной точке макроскопической среды тензор скоростей деформаций равен  $e_{ij} = e_{ij}^0$ , то поле скоростей в ячейке решетки, которая

соответствует данной материальной точке, с точностью до членов порядка  $\left(\frac{l}{L}\right)^2$  (где  $l$  – размер

ячейки,  $L$  – размер макроскопического тела) можно представить в виде:

$$\vec{V}(\vec{x}) = \vec{V}_0 + P * \vec{x} + \vec{V}^*(\vec{x}) \quad (3)$$

где: начало системы координат  $\vec{x}$  совпадает с левым нижним углом ячейки,  $\vec{V}_0$  – константа равная макроскопической скорости в материальной точке, соответствующей данной ячейке,  $P^* \vec{x}$  – описывает поворот ячейки как жесткого целого (то есть матрица  $P$  ортогональна  $PP^T = E$ ) и зависит от макроскопического тензора скорости собственных вращений  $\omega_{ij}^0 = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial V_i}{\partial x_j} - \frac{\partial V_j}{\partial x_i} \right)$ , а

$\vec{V}^*(\vec{x})$  описывает микронеоднородность скорости в объеме ячейки, и является решением уравнений равновесия для материала ячейки со специальными периодическими граничными условиями пропорциональными  $e_{ij}^0$ . Выпишем подробно эти граничные условия для нашего двумерного случая. Ниже на рисунке изображена ячейка, которая в начальный момент времени была прямоугольной, но в результате деформирования ее границы искривились (естественно оставаясь при этом периодическими).

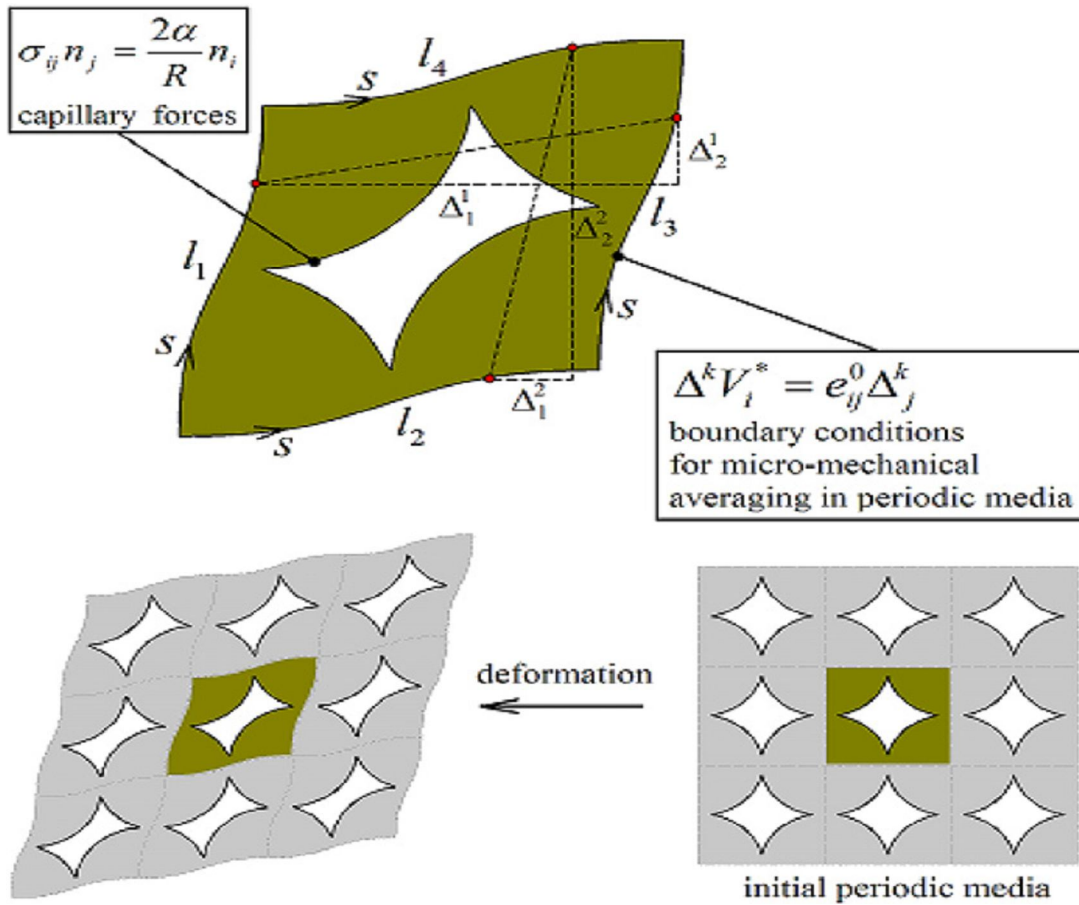


Рис. 1. Ячейка периодической решетки в процессе деформирования

Пусть каждая из четырех сторон ячейки задана параметрически с помощью длины дуги  $s$  (направление отсчета  $s$  показано на рисунке)

$$\begin{aligned} l_1: \quad x = x_1(s), \quad y = y_1(s) & \quad l_3: \quad x = x_3(s), \quad y = y_3(s) \\ l_2: \quad x = x_2(s), \quad y = y_2(s) & \quad l_4: \quad x = x_4(s), \quad y = y_4(s) \end{aligned} \tag{4}$$

тогда граничные условия для  $\vec{V}^* = \{V_x^*(x, y), V_y^*(x, y)\}$  можно представить в виде:

$$\begin{aligned} V_x^*(x_3(s), y_3(s)) - V_x^*(x_1(s), y_1(s)) &= e_{xx}^0 (x_3(s) - x_1(s)) + e_{xy}^0 (y_3(s) - y_1(s)) \\ V_y^*(x_3(s), y_3(s)) - V_y^*(x_1(s), y_1(s)) &= e_{yx}^0 (x_3(s) - x_1(s)) + e_{yy}^0 (y_3(s) - y_1(s)) \\ V_x^*(x_4(s), y_4(s)) - V_x^*(x_2(s), y_2(s)) &= e_{xx}^0 (x_4(s) - x_2(s)) + e_{xy}^0 (y_4(s) - y_2(s)) \\ V_y^*(x_4(s), y_4(s)) - V_y^*(x_2(s), y_2(s)) &= e_{yx}^0 (x_4(s) - x_2(s)) + e_{yy}^0 (y_4(s) - y_2(s)) \end{aligned} \tag{5}$$

Введем обозначения :

$$\begin{aligned} \Delta^1 V_1^* &= V_x^*(x_3(s), y_3(s)) - V_x^*(x_1(s), y_1(s)); \quad \Delta^1 V_2^* = V_y^*(x_3(s), y_3(s)) - V_y^*(x_1(s), y_1(s)) \\ \Delta^2 V_1^* &= V_x^*(x_4(s), y_4(s)) - V_x^*(x_2(s), y_2(s)); \quad \Delta^2 V_2^* = V_y^*(x_4(s), y_4(s)) - V_y^*(x_2(s), y_2(s)) \\ \Delta_1^1 &= x_3(s) - x_1(s); \quad \Delta_2^1 = y_3(s) - y_1(s) \\ \Delta_1^2 &= x_4(s) - x_2(s); \quad \Delta_2^2 = y_4(s) - y_2(s) \end{aligned} \quad (6)$$

можно переписать условия (5) в компактной форме, похожей на условия (1),

$$\Delta^k V_i^* = e_{ij}^0 \Delta_j^k \quad (7)$$

заметим, что несмотря на искривление формы ячейки величины  $\Delta_j^k$  постоянны, то есть не зависят от  $s$ . Отметим, что условия (7) задают поле скоростей в ячейке с точностью до произвольной константы, которая подбирается из условия  $\vec{V}^*(\vec{0}) = \vec{0}$ .

Используя этот факт мы в первых можем найти изменение микроструктуры на ячейке при заданном макроскопическом тензоре скоростей деформаций  $e_{ij}^0$  в материальной точке соответствующей данной ячейке, то есть, получаем некий аналог уравнений эволюции для внутренних параметров состояния. Во вторых, можем найти эффективные механические определяющие соотношения в материальной точке соответствующей данной ячейке. Поскольку в нашем случае реология твердой фазы линейна, то и макроскопическая реология тоже будет линейной. Учитывая наличие дополнительных внутренних Лапласовских сил, в нашем случае в каждой точке макроскопического тела эффективные определяющие уравнения будут иметь вид:

$$\sigma_{ij} = A_{ijkl} e_{kl} + pl_{ij} \quad (8)$$

а диссипативный потенциал  $D$  такой, что  $\sigma_{ij} = \frac{\partial D}{\partial e_{ij}}$  соответственно будет иметь вид

$$D = \frac{1}{2} A_{ijkl} e_{kl} e_{ij} + pl_{ij} e_{ij} \quad (9)$$

где:  $A_{ijkl}$  – тензор (4 ранга) модулей вязкости, имеющий в нашем плоском случае в силу симметрии 6 независимых компонент;  $pl_{ij}$  – эффективные Лапласовские напряжения, возникающие вследствие действия капиллярных сил на поверхности поры (симметричный тензор второго ранга). Полный потенциал  $D$  можно записать в виде суммы вязкого диссипативного потенциала  $D_0 = \frac{1}{2} A_{ijkl} e_{kl} e_{ij}$  и потенциала спекания  $D_{pl} = pl_{ij} e_{ij}$

$$D = D_0 + D_{pl} \quad (10)$$

Для нахождения  $D_0$  решаются уравнения равновесия на ячейке с краевыми условиями (7) на границе ячейки и условиями отсутствия напряжений на поверхности поры. Поскольку существует 6 независимых компонент  $A_{ijkl}$ , для нахождения  $D_0$  необходимо решить 6 различных краевых задач. Для дальнейших выкладок удобно записать  $D_0$  в неинвариантном виде:

$$D_0 = D_0(e_{xx}, e_{yy}, e_{xy}) = a_{11}(e_{xx})^2 + a_{22}(e_{yy})^2 + a_{33}(e_{xy})^2 + 2a_{12}e_{xx}e_{yy} + 2a_{23}e_{yy}e_{xy} + 2a_{31}e_{xy}e_{xx} \quad (11)$$

( $a_{ij}$  не являются компонентами тензора)

Как легко видеть:

$$\begin{aligned} a_{11} &= D_0(1,0,0); \quad a_{22} = D_0(0,1,0); \quad a_{33} = D_0(0,0,1) \\ a_{12} &= \frac{1}{2}(D_0(1,1,0) - a_{11} - a_{22}); \quad a_{23} = \frac{1}{2}(D_0(0,1,1) - a_{22} - a_{33}); \quad a_{31} = \frac{1}{2}(D_0(1,0,1) - a_{33} - a_{11}) \end{aligned} \quad (12)$$

поэтому для нахождения диссипативного потенциала достаточно решить следующую серию краевых задач для уравнений равновесия с граничными условиями вида

$$p_i = \sigma_{ij} n_j = 0 \quad \text{– на поверхности поры}$$

$$\Delta^k V_i^* = e_{ij}^0 \Delta_j^k (*) \quad \text{– на границе ячейки}$$

для следующих 6 наборов  $(e_{xx}^0, e_{yy}^0, e_{xy}^0)$ :  $(1,0,0)$ ;  $(0,1,0)$ ;  $(0,0,1)$ ;  $(1,1,0)$ ;  $(0,1,1)$ ;  $(1,0,1)$  и затем вычислить  $a_{ij}$  по формулам (12).

Для вычисления  $pl_{ij}$  непосредственно вычислим мощность работы капиллярных Лапласовских сил в объеме одной ячейки на скоростях вызванных макроскопической скоростью деформации  $e_{ij}^0$ . Для нахождения  $pl_{ij}$  последовательно решаются уравнения равновесия на ячейке с учетом капиллярных напряжений  $p_i = \sigma_{ij} n_j = \frac{2\alpha}{R} n_i$  на поверхности поры, и с краевыми условиями  $\Delta^k V_i^* = e_{ij}^0 \Delta_j^k$  на границе ячейки для следующих 3 наборов  $(e_{xx}^0, e_{yy}^0, e_{xy}^0)$ :  $(1,0,0)$ ;  $(0,1,0)$ ;  $(0,0,1)$ ; Затем непосредственно вычисляется мощность работы капиллярных напряжений путем интегрирования скалярного произведения скорости  $\vec{V}$  (полученной в результате решения описанных выше уравнений равновесия на ячейке) на усилие  $(\vec{P} = \vec{n} \frac{2\alpha}{R})$  по границе поры

$$W = \int_i (\vec{V} \cdot \vec{P}) dl \quad (13)$$

Соответственно набору  $(1,0,0)$  соответствует  $pl_{xx}$ , набору  $(0,1,0)$  –  $pl_{yy}$ , набору  $(0,0,1)$  –  $pl_{xy} = pl_{yx}$ .

До сих пор мы описывали методику работы с единственной ячейкой и единственной соответствующей ей материальной точкой. Далее рассмотрим моделируемое нами макроскопическое тело произвольной формы. В этом теле мы выбираем так называемые контрольные точки, в процессе многоуровневого моделирования мы будем отслеживать изменение микроструктуры и находить эффективные свойства именно в этих контрольных точках.

Пусть известна геометрия ячеек в момент времени  $t$ , найдем по описанной выше методике эффективные свойства во всех контрольных точках. Значения эффективных свойств во всех остальных точках макроскопического тела находятся путем численной интерполяции по известным значениям в контрольных точках. Зная, таким образом, эффективные свойства во всех материальных точках тела (с точки зрения численной реализации во всех узлах конечно-элементной сетки) мы можем составить и решить уравнения механического равновесия для макроскопического тела, соответственно найти макроскопическое поле скоростей и по нему вычислить значения макроскопических скоростей деформаций  $e_{ij}^0$ , в том числе и в контрольных точках. Зная  $e_{ij}^0$  в каждой контрольной точке мы можем, решив, подробно описанную выше краевую задачу, найти микроскопическое поле скоростей в каждой ячейке соответствующей своей контрольной точке, и выбрав определенным образом шаг по времени  $\Delta t$  найти новые координаты точек ячейки в момент времени  $t + \Delta t$

$$x_i(t + \Delta t) = x_i(t) + V_i \Delta t,$$

а значит и микроструктуру каждой ячейки в момент времени  $t + \Delta t$ . Зная новую геометрию ячеек в момент времени  $t + \Delta t$ , опять находим эффективные свойства во всех контрольных точках и т.д. повторяем эту процедуру по времени. Мы изначально располагали контрольные точки в узлах прямоугольной решетки (далее в процессе деформирования контрольные точки уже не будут образовывать правильную решетку) и для вычисления эффективных коэффициентов в других точках тела использовали билинейную интерполяцию. Как показали наши численные эксперименты с небольшим количеством контрольных точек (до 100) интерполяция более высокой степени (кубическими сплайнами, бикубическая) приводила в некоторых задачах с большим градиентом эффективных коэффициентов к значительным искажениям и биениям эффективных свойств (вплоть до физически невозможных значений, как например отрицательный модуль Юнга). Для задачи о связанном спекании бралось 25 контрольных точек.

В качестве одного из примеров применения описанной выше методики исследуем спекание закрепленного сверху и снизу и свободного по бокам образца (Рис. 2.)

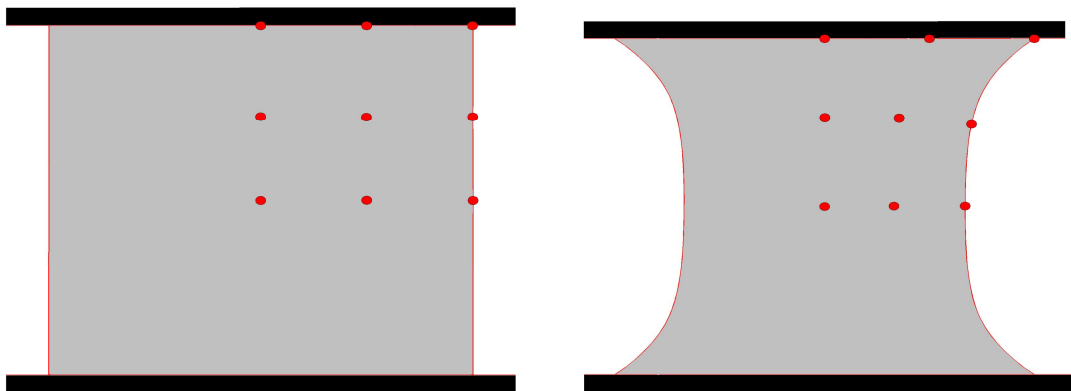


Рис. 2. Начальное и конечное расположение контрольных точек при закрепленном спекании

Рассматривался случай когда каждая периодическая ячейка содержит только одну пору. В этом случае из соображений симметрии достаточно рассмотреть четверть образца, в этой области бралось 9 контрольных точек (Рис. 2.). Эволюция формы пор для случая изначально круглых пор показана на (Рис. 3.). Рассматривался также случай вытянутых и повернутых на  $45^\circ$  пор, в этом случае необходимо рассматривать уже не четверть а половину образца (Рис. 4). Для случая вытянутых пор бралось 15 контрольных точек.

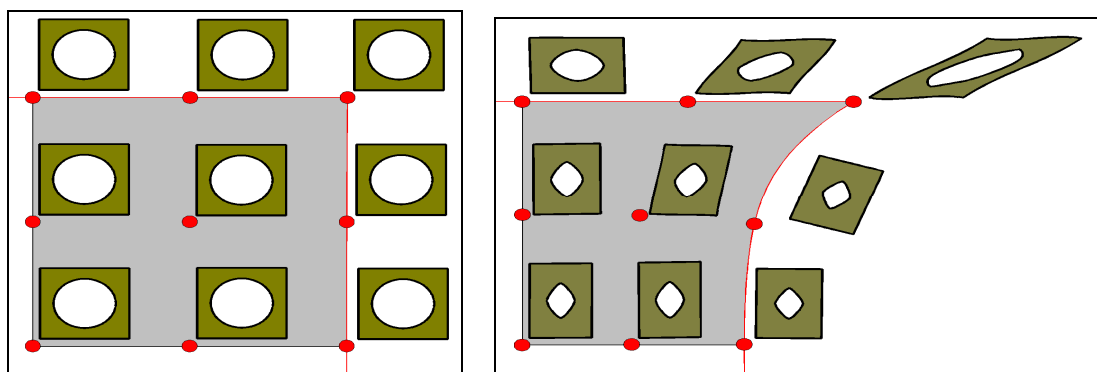


Рис. 3. Изменение формы изначально круглых пор при закрепленном спекании

В качестве еще одного примера рассмотрим спекание композитной пористой двухслойной пластины с одинаковой средней плотностью в каждом из слоев. При этом предполагается, что отличается форма пор слоев, в одном они сферические, а в другом вытянутые эллипсоидальные (с соотношением осей 1:4). Нужно заметить, что предсказывают однородную усадку такой двухслойной пластины

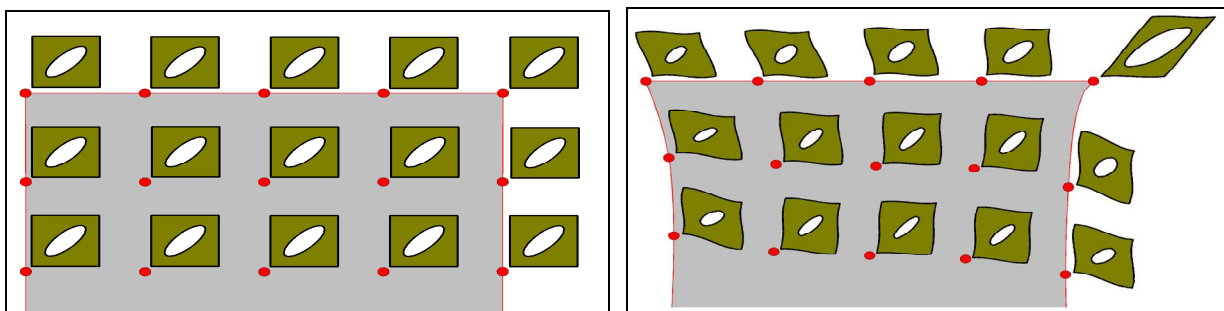


Рис. 4. Изменение формы изначально вытянутых и повернутых пор при закрепленном спекании

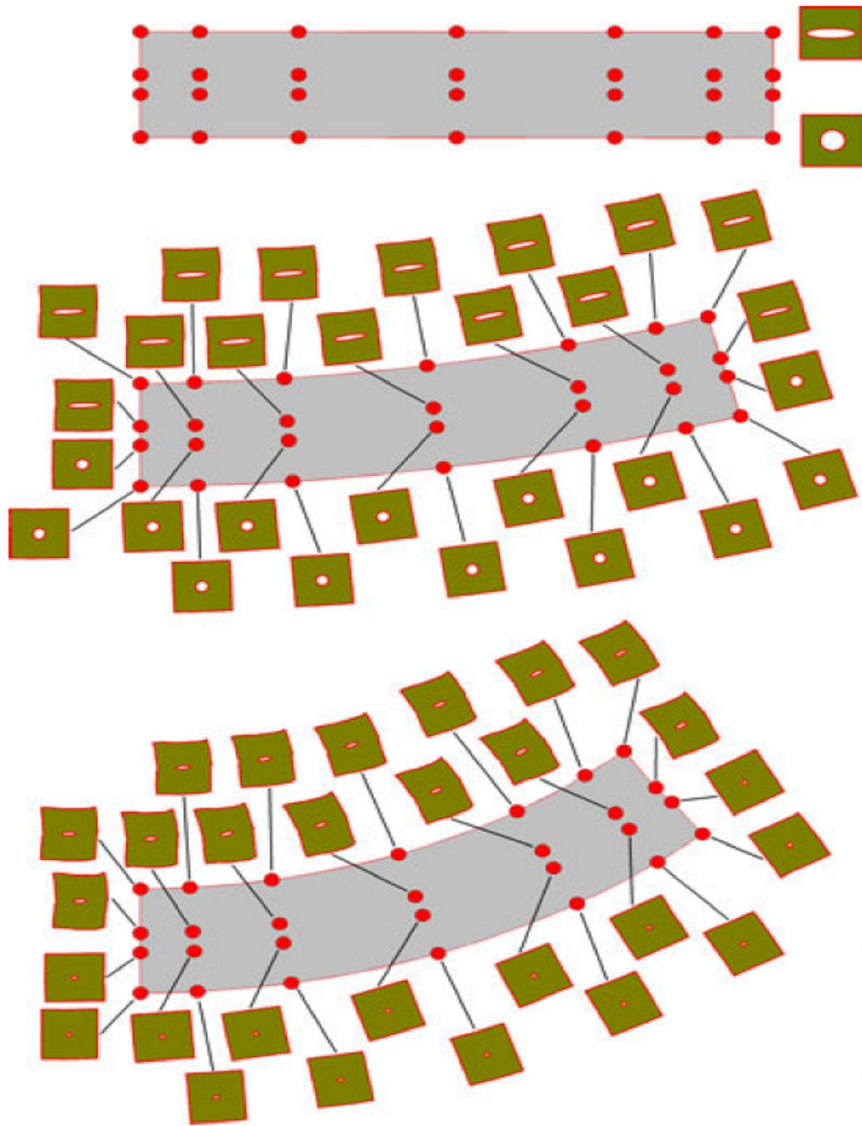


Рис. 5. Спекание двухслойной пластины

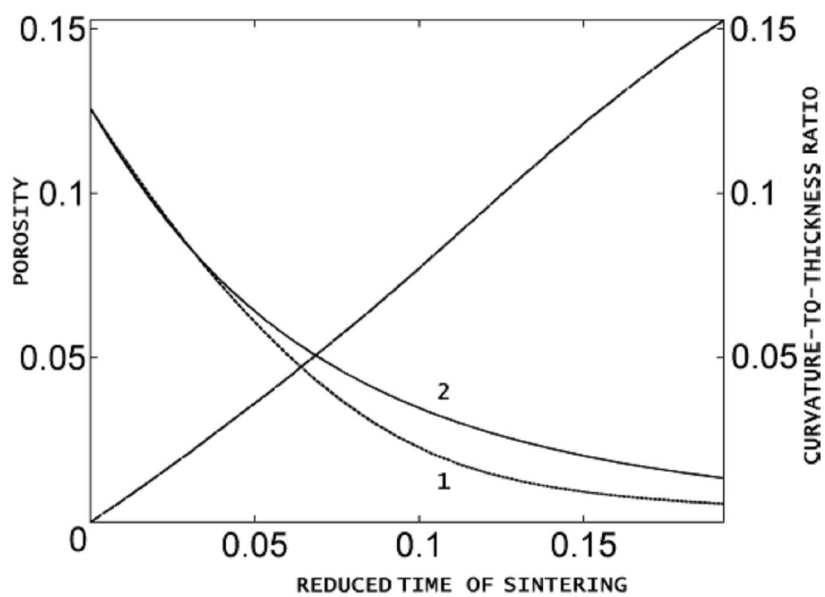


Рис. 6. Эволюция пористости и отношения кривизны к толщине: (1) пористость в нижнем слое; (2) пористость в верхнем слое.

Учет же формы пор в произведенном нами мультимасштабном моделировании показывает, что такая пластинка в результате спекания будет существенно искривляться, на рис.5. показано в какую именно сторону. Следует обратить внимание еще на два интересных результата. Во-первых вытянутая форма пор в верхнем слое сохраняется практически до полной усадки, причем степень вытянутости меняется не очень значительно рис.6. Во-вторых несмотря на меньшую интегральную усадку рис.6. именно верхний слой больше укорачивается при искривлении.

Применение мультимасштабного подхода при моделировании спекания позволяет отслеживать (или по крайней мере отражает) ряд важных эффектов к которым в принципе нечувствительны классические континуальные модели спекания, в которых единственным внутренним параметром описывающим структуру порового пространства является интегральная плотность. Наличие закрепления при спекании вызывает существенную неоднородность формы пор в процессе спекания. Начальная анизотропия формы пор приводит к несимметричной усадке во время спекания. Различная же форма пор по объёму образца может приводить к существенному искажению формы окончательного изделия даже при однородной начальной средней плотности.

1. Френкель Я. И. Вязкое течение кристаллических тел под действием поверхностного натяжения // Журн. эксперим. и теорет. физики.—1946.—16.—с. 29–34
2. В.В. Скороход Реологические основы теории спекания. – Киев, Наук. Думка, 1972. – 151 с.
3. Бахвалов Н.С., Панасенко Г.П. Осреднение процессов в периодических средах. - М.: Наука, 1984.–352 с.
4. Кристенсен Р. Введение в механику композитов. – М: Мир. – 1982. – 396 с.

Стаття надійшла до редакції 26.04.2013.