УДК 621.762:678-19

В. Д. Рудь [1], В. В. Шиберко [1], В. Б.Сидоренко [2]
1)Луцький національний технічний університет
2) Міністерство освіти і науки України

МОДЕЛЮВАННЯ МІКРОСТРУКТУРИ ПОРОШКОВИХ МАТЕРІАЛІВ

У даній роботі проведено моделювання структурно-неоднорідних матеріалів та виконано аналіз отриманих структур з подальшим прогнозуванням фізико-механічних властивостей.

Ключові слова: *структурно-неоднорідні матеріали, фізико-механічні властивості, модельні форми часток, координаційне число часток, пористість.*

Рис. 2. Форм. 9. Літ. 8.

В. Д. Рудь, В. В. Шыберко, В. Б. Сыдоренко

МОДЕЛИРОВАНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ ПОРОШКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

В данной работе проведено моделирование структурно-неоднородных материалов и выполнен анализ полученных структур с дальнейшим прогнозированием физико-механических свойств.

Ключевые слова: *структурно-неоднородные материалы, физико-механические свойства, модельные формы частиц, координационное число частиц, пористость.*

V. Rud, V. Shyberko, V. Sydorenko

MODELLING OF MICROSTRUCTURE OF POWDER MATERIALS

In this article the modeling of structural and inhomogeneous materials is made. The analysis of the obtained structures with further prediction of physical and mechanical properties is analysed.

Key words: *structurally inhomogeneous materials, physical and mechanical properties, modeling shapes of particles, coordination number of particles, porosity.*

Постановка проблеми. На сучасному етапі розвитку економіки України роль порошкової металургії оцінюється неоднозначно. З одного боку, при виготовленні деталей конструкційного призначення вона дещо втрачає свої позиції через значну енергоємність отримання вихідної сировини – порошків. З другого боку, при виготовленні виробів з унікальними властивостями її роль значно зростає і в багатьох випадках це єдино можливий шлях їх отримання. Тому, при отриманні нових структурно-неоднорідних матеріалів з гарантованими властивостями необхідно контролювати параметри їх структури в процесі виготовлення, до яких відносяться: гранулометричний склад шихти, форма часток, щільність формованої заготовки, якість контактів, координаційне число упаковки, пористість та її розподіл по об'єму. У свою чергу, підвищити ефективність традиційних технологій, а також вести безвідходне виробництво, зберігати енергію і матеріали, скорочувати трудові витрати, забезпечувати охорону навколишнього середовища, розв'язувати ряд екологічних проблем, а також забезпечувати однорідність всередині матеріалу та отримувати структурні характеристики на якісному рівні можливо за допомогою сучасних комп'ютерно-інформаційних технологій. Таким чином, досліджувати особливості мікроструктури структурно-неоднорідних матеріалів, а також прогнозувати їх фізико-механічні властивості в процесі їх виготовлення є актуальним завданням матеріалознавства.

Аналіз останніх публікацій. Структуру матеріалів із зернистою будовою розглядали наукові колективи: К.В. Гуляєва, Р.М. Кадушникова, Г.Г. Шаповалова [1, 2, 7]. Особливість цих робіт полягає в тому, що моделі упаковок з монодисперсними елементами рівномірно розташовані в просторі, у яких елементи структури розподілені статистично. Дослідження мікроструктури порошкових матеріалів з подальшим прогнозуванням фізико-механічних властивостей доцільно будувати на методах, які засновані на натурних експериментах та чисельному моделюванні.

Мета роботи: на основі запропонованої моделі випадкового розподілу здійснити моделювання структурно-неоднорідних матеріалів, а також провести аналіз отриманих структур з подальшим прогнозуванням фізико-механічних властивостей.

Основні результати дослідження. Моделювання структури порошкових матеріалів дає можливість отримати додаткову інформацію про процеси, які відбуваються при їх виготовленні та експлуатації, а також дозволяє полегшити контроль і оптимізацію процесів їх виготовлення. Для прогнозування фізико-механічних властивостей структурно-неоднорідних матеріалів важливе місце займає кількісна модель їх мікроструктури (рис. 1), яка дозволяє встановити співвідношення

© В. Д. Рудь, В. В. Шиберко, В. Б. Сидоренко

між пористістю і координаційним числом часток. Слід відмітити, що координаційне число дозволяє оцінити якість структури структурно-неоднорідних матеріалів і служить опорною точкою при побудові апроксимаційних залежностей фізичних характеристик від пористості.

На рис.1. зображені модельні форми часток.

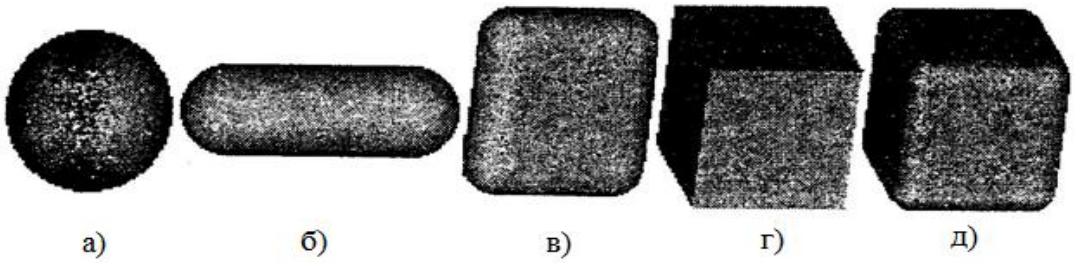

Рис. 1. **Модельні форми часток**, де:
а) сферичної форми; б) голкоподібної форми; в) сфероквадрат;
г) куб; д) сферокуб.

Очевидно, що деякі фізико-структурні характеристики структурно-неоднорідних матеріалів в тій чи іншій мірі залежать від форми частинок, тому при дослідженні цих характеристик на математичних моделях необхідно враховувати відхилення форми частинок від сферичної. У цьому випадку слід будувати випадкові заповнення несферичними елементами. Тобто, потрібно мати на увазі упаковки неізометричних елементів, які мають самостійне значення в теорії заповнення.

В моделюванні упаковок сферичних і несферичних елементів є деякі загальні принципи, які полягають у випадковому розіграші параметрів цих елементів, їх розташуванні в просторі (в упаковці), у послідовності пакування цих елементів, а також у методах побудови алгоритмів. Принципова відмінність заповнень сферичних і несферичних елементів полягає тільки в тому, що число узагальнених координат кожного елемента значно більше в порівнянні з сферичними елементами, а кількість їх визначається формою частинок в упаковці. Розіграш координат пакованих сфер з рівномірним розподілом за об'ємом пакованого контейнера буде відбуватися за твердженням Гауса:

$$F(N_y) = \frac{1}{\sigma_N\sqrt{2\pi}}\, exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{N_y-(N_y)^2}{\sigma_N}\right)\right] \qquad (1)$$

де: N_y – середнє значення КЧУ;

σ_N – дисперсія розподілу.

На основі результатів натурних і обчислювальних експериментів залежність між координаційним числом упаковки (КЧУ) і пористістю (П) регулярних упаковок матиме вигляд [3]:

$$П = 2{,}62 / КЧУ \qquad (2)$$

У свою чергу, залежність координаційного числа упаковки від пористості вільної засипки зерен розраховується за формулою:

$$КЧУ = \frac{П+3\sqrt{П^2-10\,П+9}}{2П} \qquad (3)$$

Для упаковки зернистого матеріалу з пористістю в діапазоні $0{,}3 < П < 0{,}7$ необхідно застосовувати формулу:

$$КЧУ = 11,\ 6\ (\ 1 - П) \qquad (4)$$

Згідно формул (2) – (4), для структурно-неоднорідних матеріалів залежність між КЧУ і П у спрощеному вигляді – лінійна. Слід відмітити, що при отриманих значеннях залежностей були зроблені припущення, які обмежують застосування формул при засипці зернистих порошків. У реальних порошках частинки мають форму, яка відрізняється від сферичної, що суттєво впливає

на параметри упаковки, а також мікроструктура структурно-неоднорідних матеріалів отримана насипкою і пресуванням, має зернисту будову. Для цього необхідно ввести додатковий параметр (коефіцієнт) сферичності, який показує, наскільки форма упакованих несферичних частинок відрізняється від сферичної, отримаємо [3, 4]:

$$F_S = S_s / S \tag{5}$$

де: S_s – площа поверхні сфери одиничного радіусу;
S – площа поверхні несферичної частинки.

Аналіз отриманих результатів показав, що поява в упаковці несферичних частинок (многогранників) сприяє збільшенню КЧУ. Це додатково підтверджується комп'ютерно – імітаційним моделюванням розробленої моделі у програмному середовищі С++. Вікно розробленої комп'ютерно – імітаційної моделі зображено на рис. 2. Перевірка адекватності запропонованої моделі шляхом співставлення комп'ютерних та натурних експериментів показала їх задовільну збіжність.

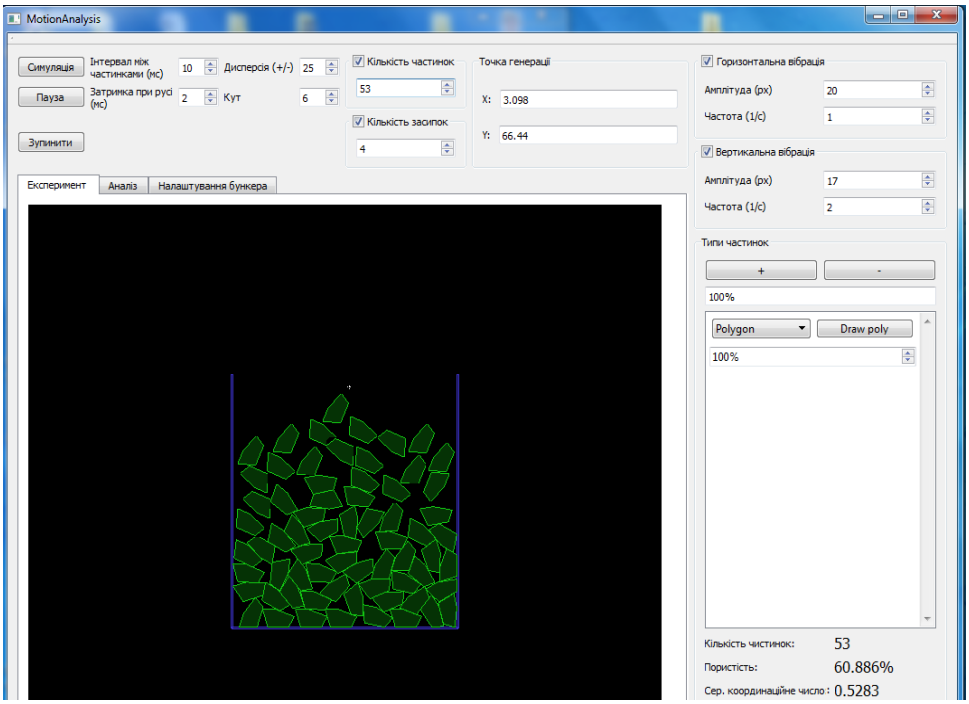

Рис.2. **Інтерфейс комп'ютерної програми для випадкового пакування часток у прямокутному контейнері.**

У моделях упаковок опуклих многогранників узагальненими координатами можуть служити координати всіх їх вершин. При цьому може моделюватися заповнення контейнера з елементами, як з однаковою формою, так із різною, а також різним числом вершин (рис. 2.). У цьому випадку необхідно лише задаватися їх максимальним числом.

Отже, умова неперетину двох многогранників буде описуватися наступною системою рівнянь:

$$\frac{x - x_{ki}}{x_{pi} - x_{ki}} = \frac{y - y_{ki}}{y_{pi} - y_{ki}} = \frac{z - z_{ki}}{z_{pi} - z_{ki}}$$
$$\begin{vmatrix} x - x_{ij} & y - y_{ij} & z - z_{ij} \\ x_{gi} - x_{ij} & y_{gi} - y_{ij} & z_{gi} - z_{ij} \\ x_{hi} - x_{ij} & y_{hi} - y_{ij} & z_{hi} - z_{ij} \end{vmatrix} = 0 \tag{6}$$

Якщо рішенням системи є точки x^0, y^0, z^0, то у випадку, коли грань і ребро перетинаються необхідно, щоб ці точки належали співвідношенню:

$$x_{ki} < x_0 < x_{pi};\ y_{ki} < y_0 < y_{pi};\ z_{ki} < z_0 < z_{pi} \tag{7}$$

Для перевірки точок $x_0,\ y_0,\ z_0$ та їх площини, необхідно переконатися, що точки x_0, y_0, z_0 розташовані рівномірно в просторі кожної наступної частинки, тобто слідує перевірити наступне співвідношення:

$$\begin{aligned} cos\ (gfh) &> \max[\cos(gf_0), \cos(hf_0)] \\ cos\ (fhg) &> \max[\cos(fh_0), \cos(gh_0)] \\ cos\ (fgh) &> \max[\cos(fg_0), \cos(hg_0)] \end{aligned} \tag{8}$$

При цьому із співвідношення (8) достатньо перевірити тільки будь-які дві нерівності. Слід зазначити, що умови неперетину многогранників значно простіші за умови неперетину круглих тіл, не ізометричної форми, проте, кількість обчислень по перевірці цих умов значно підростають. Невиконання хоча б однієї з цих умов веде до того, що пакована сфера з координатами центру відкидається.

Крім того, упаковані сфери не повинні перетинати межі прийнятого гіпотетичного контейнера і повинні дотримуватися умови:

$$\begin{aligned} R_1 \le x_i \le 1 - R_i \\ R_1 \le y_i \le 1 - R_i \\ R_1 \le z_i \le 1 - R_i \end{aligned} \tag{9}$$

Отже, моделювання структури зернистих матеріалів шляхом побудови щільної упаковки несферичних частинок (многогранників) дозволяють адекватніше відтворювати реальну структуру порошкових виробів і, відповідно, прогнозувати його фізико-механічні властивості. Крім того, форма упакованих часток не обмежується видами, розглянутими в роботі, а може змінюватися в широких межах. Єдиним обмеженням для варіації форми частинок є їх опуклість та симетричність.

Висновки:

Запропонований підхід до комп'ютерно – імітаційного моделювання заповнення контейнерів частками сферичної та несферичної форми дозволяє прогнозувати структуру матеріалу, яка передбачає пористість зразків та координаційне число. Дійсне значення пористості та координаційного числа впливає на експлуатаційні характеристики матеріалів.

1. Гуляев К.В.Математические модели и моделирование. – М: Металлургия, 1970. – 471 с.
2. Кадушников Р.М., Геометрическое моделирование структуры материалов. – П.: Металлургия, 1997. – С.69–74.
3. Рудь В.Д. До моделювання структури матеріалів / В.Д. Рудь, В.В. Шиберко // Актуальні проблеми комп'ютерних технологій. Збірник наукових праць за матеріалами восьмої міжнародної науково-технічної конференції АПКТ 2014. – Хмельницький: ХНУ, 2014 – С. 295–301.
4. Рудь В.Д. Роль комп'ютерного та імітаційного моделювання в технологіях отримання структурно-неоднорідних матеріалів / В.Д. Рудь, В.В. Шиберко // Інформаційні технології в освіті, техніці та промисловості. Збірник тез доповідей Всеукраїнської науково-практичної конференції молодих учених, аспірантів та студентів. – Івано-Франківськ, 2013. – С. 159-161.
5. Салтыков С. А. Стереометрическая металлография. – М: Металлургия, 1970. – 371 с.
6. Хоменко О. І. Використання програмного комплексу AMIC для кількісної металографії / Математичні моделі та обчислювальний експеримент в матеріалознавстві. Вип. 15: Праці Інституту проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України. – Київ: ІПМ НАНУ, 2014. – С. 35–42.
7. Шаповалов Г.Г., Імітаційне моделювання випадкової неоднорідної структури порошків. Двомірна постановка задачі. – П.: Металлургия, 1997. – 201 с.
8. Шыберко В.В. Прогнозирование структурных характеристик порошковых материалов с помощью 3D моделирования / В.В. Шыберко, В.Д. Рудь, А.Ю. Повстяной // Порошковая металлургия: инженерия поверхности, новые порошковые композиционные материалы. Сварка: материалы 9-ого Международного симпозиума (г. Минск, Беларусь, 2-10 апреля 2015 г.) / Нац. акад. наук Беларуси [и др.]; редкол.: профессора, член-корреспондента НАН Беларуси А.Ф. Ильющенко (гл. ред.) [и др.] – Минск: Белорусская наука, 2014. – С. 231–-238.

Стаття прийнята до друку 25.03.2015.

© В. Д. Рудь, В. В. Шиберко, В. Б. Сидоренко