

УДК 621.762:678 -19

**В.В. Пастернак***Луцький національний технічний університет***АНАЛІТИЧНА АПРОКСИМАЦІЯ ДАНИХ КОМП'ЮТЕРНО-ІМІТАЦІЙНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ЗАПОВНЕННЯ ПРЕС-ФОРМ ЧАСТКАМИ РІЗНОЇ ФОРМИ**

*Досліджено функціональні залежності пористості і структури в результаті комп'ютерно-імітаційного моделювання засипок різноманітних за формою і розмірами часток у прес-формі.*

*Ключові слова: структурно-неоднорідні матеріали, модельні форми часточок, комп'ютерно-імітаційна модель, насипка-упаковка часток, пористість, бункер.*

**В.В. Пастернак****АНАЛИТИЧЕСКАЯ АПРОКСИМАЦИЯ ДАННЫХ КОМПЬЮТЕРНО-ИМИТАЦИОННОГО МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАПОЛНЕНИЕ ПРЕСС-ФОРМ ЧАСТИЦАМИ РАЗЛИЧНЫХ ФОРМ**

*Исследованы функциональные зависимости пористости и структуры с помощью компьютерно-имитационного моделирования засыпок различных по форме и размерам частиц в пресс-форме.*

*Ключевые слова: структурно-неоднородные материалы, модельные формы частиц, компьютерно-имитационная модель, насыпка-упаковка частиц, пористость, бункер.*

**V.V. Pasternak****ANALYTICAL APPROXIMATION OF DATA OF COMPUTER-SIMULATION MODELING OF FILLING OF MOLDS WITH PARTICLES OF DIFFERENT SHAPES**

*Functional dependence of porosity and structure as a result with computer-simulation modeling of fillings are various forms and sizes of the particles in the mold are investigated.*

*Key words: structurally inhomogeneous materials, model forms of particles, a computer-simulation model, the filling-packing of particles, porosity, bunker.*

**Постановка проблеми.** Виробництво деталей методами порошкової металургії полягає у максимальному наближенні форми і розмірів заготовок до готової деталі. При виготовленні таких виробів з необхідним комплексом властивостей потрібно контролювати параметри їх структури в процесі реалізації технології на всіх її етапах. Це стосується, в першу чергу, операції засипки часток в прес-форми. Відомо, що реальні порошки мають різноманітну форму і широку гаму по гранулометричному складі. У разі використання частинок регулярної форми, отримуємо заготовки з більш-менш однорідним розподілом густини за об'ємом. Інша ситуація при використанні частинок нерегулярної форми. Дослідити структурні та фізико-механічні характеристики заготовок, отриманих за допомогою таких частинок в натурних експериментах складно через велику різноманітність порошоків, різну форму та розміри часток. Тому дослідження первинної структури заготовок на базі частинок різної форми методом комп'ютерно-імітаційного моделювання є актуальним завданням матеріалознавства.

**Аналіз останніх публікацій.** Аналіз літературних джерел свідчить про те, що дослідження структурних та фізико-механічних властивостей матеріалів за допомогою комп'ютерно-інформаційних технологій поглиблюється. Про це свідчать роботи таких вчених як: L.A. Pilato, M.J. Michno, P.M. Кадушнікова, А.Р. Бекетова, О.С. Комарова [1, 2, 3]. Характерним для цих робіт є те, що у них моделюються структурні характеристики матеріалів з частинками регулярної форми. Однак, закономірності формування структури та властивостей матеріалів залежать від геометричних факторів часток порошку. Крім того, аналіз сучасних технологічних процесів порошкової металургії показує, що наявність кореляційних зв'язків між складовими шихти, структурною будовою та властивостями забезпечується всіма операціями технологічного процесу. Початковим етапом технології є заповнення прес-форм порошком, який визначає не тільки розміри, форму, густину, продуктивність, безпеку і культуру праці, але й впливає на ряд найважливіших властивостей готового продукту. Тому, модельні експерименти прогнозування властивостей матеріалів від способів засипки прес-форм з використанням комп'ютерно-імітаційного моделювання є актуальним завданням.

**Мета даної роботи:** виявити функціональні залежності пористості і структури на основі комп'ютерно-імітаційного моделювання засипок різноманітних за формою і розмірами часточок в прес-формі.

**Основні результати дослідження.** Прогнозування фізико-механічних властивостей структурно-неоднорідних матеріалів базується на кількісній моделі їх мікроструктури, яка дозволяє встановити співвідношення між пористістю і структурою часток. Структурні характеристики матеріалів дозволяють оцінити якість готової деталі, а також служать опорною точкою при побудові апроксимаційних залежностей фізичних характеристик від пористості.

На рис. 1. зображені модельні форми часток.

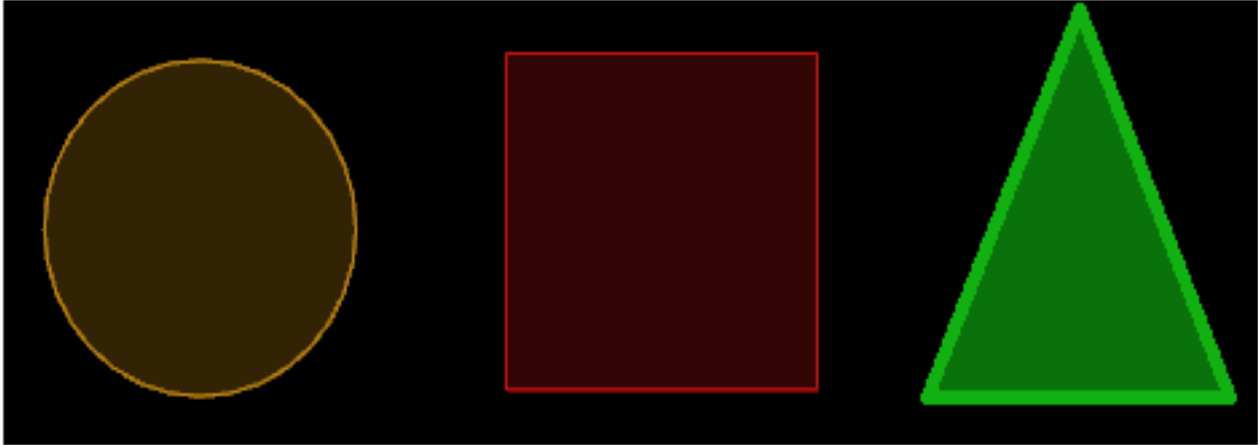


Рис. 1. Модельні форми часток, де:  
а) сферичної форми; б) сфероквадрат; в) трикутної форми.

Очевидно, що фізико-структурні характеристики матеріалів залежать від форми частинок. При дослідженні цих характеристик нами використані частинки, що наведені на рисунку 1. Алгоритм заповнення контейнера модельними частками полягає в тому, що кожний елемент в упаковці описується дев'ятьма узагальненими координатами: трьома координатами центру, довжинами трьох півосей і трьома кутами Ейлера [4, 5]. Умови неперетину сфер основ одного циліндра з сферами основи іншого, буде мати вигляд:

$$(x_{ki} - x_{pj})^2 + (y_{ki} - y_{pj})^2 + (z_{ki} - z_{pj})^2 \geq (R_i - R_j)^2 \quad (1)$$

Також має виконуватися умова: відстань між точкою основи заданого перпендикуляра і точкою, з якої опущений цей перпендикуляр, повинна бути не меншою за суму радіусів обох циліндрів:

$$(x_{pij}^0 - x_{pij})^2 + (y_{pij}^0 - y_{pij})^2 + (z_{pij}^0 - z_{pij})^2 \geq (R_i - R_j)^2 \quad (2)$$

У запропонованій комп'ютерно-імітаційній моделі описуються нестационарні динамічні процеси вільної насипки-упаковки часток. Переміщення кожної частинки у двовимірній постановці задачі описується диференціальними співвідношеннями плоского руху

$$m_i \frac{d^2 x_i}{dt^2} = T_{xi}, \quad m_i \frac{d^2 y_i}{dt^2} = -m_i g + T_{yi}, \quad J_i \frac{d^2 \varphi_i}{dt^2} = M_i, \quad (3)$$

де  $m_i$  – маса  $i$ -ої частинки (пропорційна до її об'єму чи площі);  $J_i$  – її центральний момент інерції;  $T_{xi}$ ,  $T_{yi}$  – компоненти головного вектора зовнішніх сил, що діють на частинку з боку інших часток та з боку стінок бункера;  $M_i$  – сума моментів цих сил відносно центра мас частинки.

Невідомі компоненти зусиль взаємодії між частками визначаються із умов неперетину типу (1), (2). Для спрощення моделювання вважається, що взаємодія часток відбувається шляхом абсолютно непружного гладкого удару. Інтегрування отриманої системи диференціальних рівнянь із заданими на кожному кроці обмеженнями здійснювався за допомогою методів Рунге-Кутта 4 порядку зі сталим кроком.

На рисунку 2 показано інтерфейс розробленої комп'ютерної програми, що використовується для моделювання засипки прямокутного контейнера частками різноманітних за формою і розмірами. Перевірка адекватності запропонованої моделі шляхом співставлення комп'ютерних та натурних експериментів показала їх задовільну збіжність.

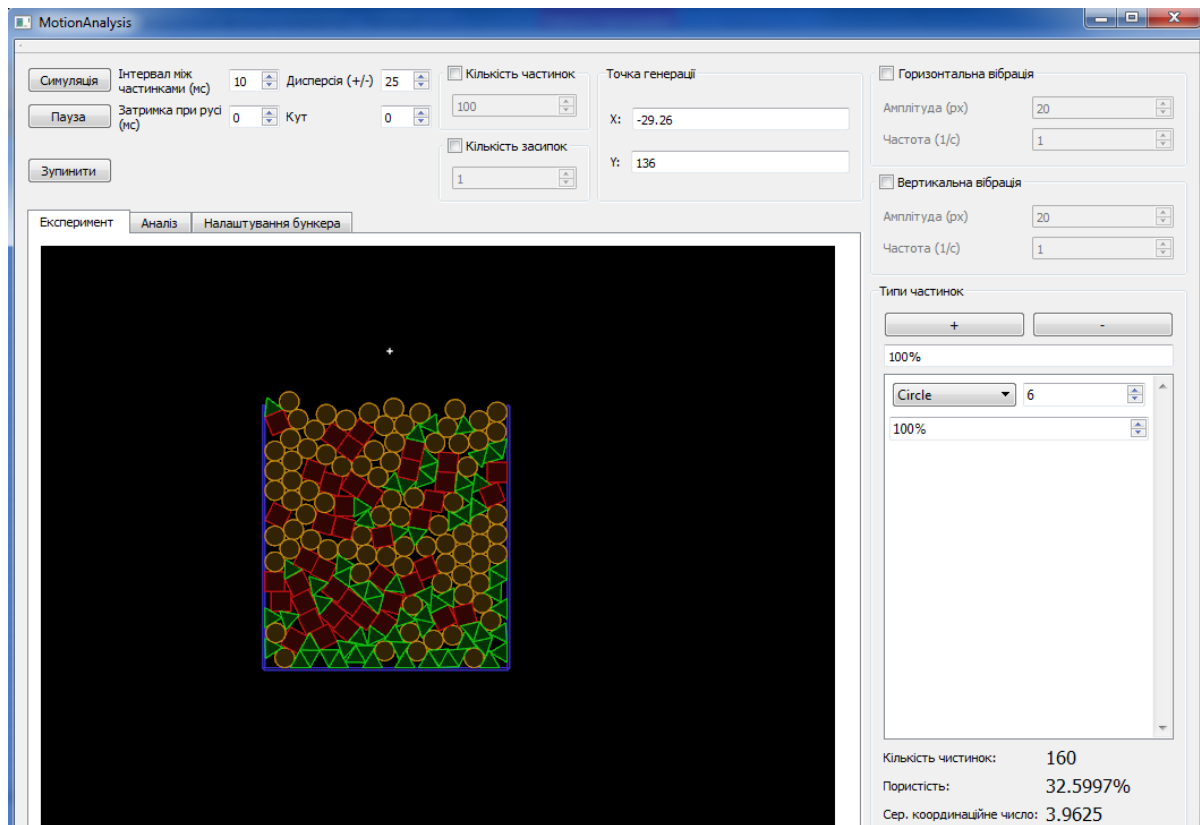


Рис. 2. Заповнення частинок за різною формою та розмірами

Побудовані програмні засоби (комп'ютерно-імітаційні моделі) дають можливість здійснювати імітацію процесів засипки порошкових матеріалів. Проте для отримання необхідних у практиці залежностей властивостей СНМ від розмірів часток, їхньої форми, розмірів бункера тощо треба здійснити серію експериментів і за знайденими та вхідними параметрами побудувати певні функціональні зв'язки. Отримані результати комп'ютерної засипки опрацьовані за допомогою методу найменших квадратів [6].

Припустимо, що дані експериментів апроксимуються функцією

$$y = f(x; a_0, a_1, \dots, a_m) \quad (4)$$

незалежної змінної  $x$  та  $(m + 1)$  параметрів  $a_0, a_1, \dots, a_m$ . Ці параметри є сталими, але наперед невідомі і потребують визначення. Для цього здійснюється низка вимірювань величин  $x$  та  $y$ . Підставляючи їх у рівняння (4) отримаємо рівняння між параметрами  $a_0, a_1, \dots, a_m$ :

$$y_i = f(x_i; a_0, a_1, \dots, a_m) \quad (i = 1, 2, \dots, n), \quad (5)$$

де  $x_i$  та  $y_i$  – відповідні одне одному виміряні значення, а  $n$  – кількість вимірювань. Якби значення  $x$  та  $y$  знаходилися точно, то для пошуку  $(m + 1)$  параметра необхідно було б здійснити  $(m + 1)$  вимірювань. Проте насправді ці значення містять похибку, а тому жодні  $(m + 1)$  вимірювань не дадуть можливість визначити істинні значення параметрів. Тому зазвичай, здійснюють більшу кількість вимірювань ( $n > m + 1$ ), в результаті чого кількість рівнянь (5) буде більшою за кількість невідомих параметрів. У цьому випадку система (5) буде, загалом, несумісною, тобто точні розв'язки яких-небудь  $(m + 1)$  рівнянь із системи можуть не задовольняти решту рівнянь. Таким чином завдання полягає в тому, щоб знайти такі значення невідомих параметрів, які будуть якнайкраще задовольняти ці рівняння. Тобто, треба знайти найбільш імовірні значення параметрів.

Оскільки рівняння (5) у цьому випадку задовольнятимуться неточно, то будемо мати

$$y_i - f(x_i; a_0, a_1, \dots, a_m) = \varepsilon_i \quad (i = 1, 2, \dots, n), \quad (6)$$

де  $\varepsilon_i$  – відхилення вимірних значень  $y_i$  від обчислених за формулою (4). Принцип найменших квадратів стверджує, що найімовірнішими значеннями параметрів будуть ті, за яких сума квадратів відхилень  $\varepsilon_i$  буде найменшою.

$$\sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i; a_0, a_1, \dots, a_m)]^2 = \min \quad (7)$$

Розглянемо методику відшукування коефіцієнтів для степеневих функцій виду

$$y = ax^b \quad (8)$$

Відомо, що функції такого типу представляються прямою у подвійно-логарифмічній шкалі. Дійсно, логарифмуючи вираз (8) та враховуючи потім вирази  $\lg x = X$ ,  $\lg y = Y$ ,  $\lg a = A$ , отримуємо рівняння

$$Y = A + bX \quad (9)$$

Застосовуючи до модифікованого рівняння (9) процедуру (7) методу найменших квадратів отримуємо систему двох лінійних алгебричних рівнянь для визначення невідомих коефіцієнтів  $A$  та  $b$ :

$$\begin{cases} nA + b \sum_{i=1}^n \lg x_i = \sum_{i=1}^n \lg y_i, \\ A \sum_{i=1}^n \lg x_i + b \sum_{i=1}^n (\lg x_i)^2 = \sum_{i=1}^n \lg x_i \lg y_i. \end{cases} \quad (10)$$

При цьому відповідно до означення  $a = 10^A$ .

Використаємо співвідношення (8) та (10) для побудови функціональної залежності пористості від відносної ширини бункера для частинок різної форми, згідно даних таблиці 1 у формі

$$Q(w) = aw^b \quad (11)$$

де  $w = W/d$  – безрозмірна відносна ширина бункера;  $W$  – ширина бункера (мкм);  $d$  – діаметр частинок (мкм);  $a, b$  – параметри, що потребують визначення. Вихідні параметри та отримані результати наведені у таблиці 1.

Таблиця 1

**Залежність пористості від ширини та висоти прямокутного бункера**

Розміри бункера (мкм)		Середня пористість $Q$ в залежності від діаметра часток (мкм)		
Ширина	Висота	10	14	24
200	500	22,55	24,18	26,18
300	500	21,05	22,64	24,9
400	500	20,30	22,05	24,08
500	500	19,49	21,9	22,45
600	500	19,56	21,80	22,1

Підставляючи подані у таблиці 1 дані у рівняння (10) отримуємо апроксимацію пористості у вигляді: для круглих частинок –  $Q(w) = 35,72w^{-0,147}$ ; для квадратних частинок –  $Q(w) = 30,15w^{-0,279}$ ; для трикутних частинок –  $Q(w) = 21,8w^{-0,053}$ .

На основі здійсненої серії числових експериментів (15 точок) та методу найменших квадратів отримано такі значення невідомих параметрів: для круглих частинок –  $a = 35,72$ ;  $b = -0,147$ ; для квадратних частинок –  $a = 30,15$ ;  $b = -0,279$ ; для трикутних частинок –  $a = 21,8$ ;  $b = -0,053$ .

На рис. 3. зображено залежність (11) (суцільні криві), а також отримані на підставі числових експериментів дискретні значення пористості для конкретних значень відносної ширини бункера.

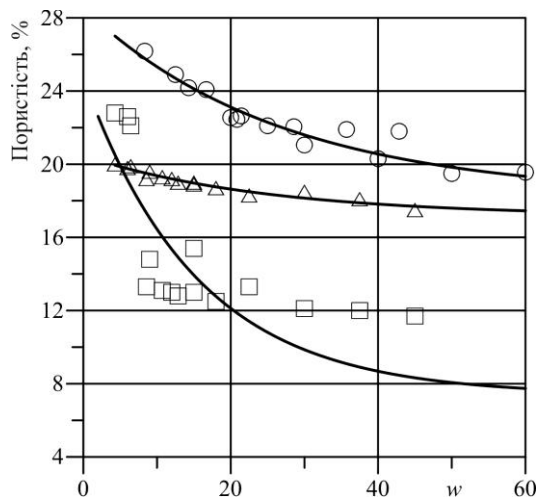


Рис. 3. Залежність пористості  $Q$  по відношенню до розміру часток від ширини квадратної прес-форми, отримана шляхом апроксимації (суцільні криві) даних числового експерименту, де: 1 – круглі частинки; 2 – трикутні частинки; 3 – квадратні частинки

Із рис. 3. видно достатньо добру узгодженість отриманої функційної залежності (11) із даними числових експериментів. Це свідчить про те, що отримані результати підкоряються певним залежностям, отже, додатково підтверджує їхню достовірність. З іншого боку, запропонований підхід дає можливість отримати зручні для використання в інженерній практиці формули, що пов'язують основні фізико-механічні характеристики СНМ із параметрами вихідних сумішей та технологічних процесів.

#### Висновки:

На основі розробленої комп'ютерно-імітаційної моделі можливо вирішувати структурно-імітаційні задачі по таких напрямках:

- прогнозування закономірностей формування структури та властивостей матеріалів з урахуванням їх форми та розмірів;
- встановлення кореляційних зв'язків між складовими, будовою та властивостями;
- моделювання процесів руйнування на полідричних структурах із заданими фізико-механічними властивостями;
- дослідження структурно-неоднорідних матеріалів без постановки дорогого і трудомісткого експерименту, що дозволяє ввести безвідходне виробництво виробів широкого цільового призначення, зберігати енергію та матеріали, скорочувати трудові затрати за рахунок зменшення кількості технологічних операцій та автоматизації процесів.

Слід відмітити, що здійснені обчислення вказують на те, що зі збільшенням ширини бункера пористість СНМ зменшується. Шляхом апроксимації даних числових експериментів з'ясовано, що залежність пористості від відносної ширини бункера добре описується степеневою функцією.

#### Література:

1. Pilato L. A. Advanced Composite Materials / L. A. Pilato, M. J. Michno, – В.: 1994. – 194 p.
2. Кадушников Р.М. Разработка и применение двумерной модели Монте-Карло для исследования структуры порошковых материалов при прессовании / Р.М. Кадушников, А.Р. Бекетов. – П.: Порошковая металлургия, 1997. – 230 с.
3. Комаров О.С. Технология конструкционных материалов / О.С. Комаров, В.М. Ковалевський. – М.: Металлургия, 2005. – 560 с.
4. Рудь В.Д. До моделювання структури матеріалів / В.Д. Рудь, В.В. Шиберко // Актуальні проблеми комп'ютерних технологій. – Х.: АПКТ, 2014. – С. 295–301.
5. Рудь В.Д. Структурные характеристики заготовок при заполнении пресс-форм частицами нерегулярной формы / В.Д. Рудь, Л.М. Самчук, Н.М. Гулиева, В.В. Шиберко // Proceedings of the International Scientific and Practical Conference «Science and Education – Our Future (November 24-26, 2014) Abu Dhabi». – Dubai.: Rost Publishing, 2014. – P. 18 – 24.
6. Корн Г. Справочник по математике / Г. Корн, Т. Корн. – М.: Наука, 1978. – 832 с.

Стаття надійшла до редакції 25.04.2016.