ПРЯМОЕ МУЛЬТИМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ КОНСОЛИДАЦИИ ПОРОШКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

к.ф-м.н. Максименко А.Л., к.т.н. Кузьмов А.В.

Институт проблем материаловадения НАН Украины

отдел микромеханики и реологи

СОДЕРЖАНИЕ

- Микромеханика : основные принципы и примеры
- Основы прямого мультимасштабного моделирования
- Прямое мультимасштабное моделирование вязкого спекания

СОДЕРЖАНИЕ

- **Микромеханика : основные принципы и примеры**
- Основы прямого мультимасштабного моделирования
- Прямое мультимасштабное моделирование вязкого спекания

Микромеханика занимается осреднением процессов в микронеоднородных сплошных средах. Или что тоже самое нахождением эффективных свойств микронеднородных материалов

Ключевые понятия микромеханики

- Принцип эквивалентной гомогенности
- Масштаб неоднородности
- Масштаб длинны осреднения
- Представительная ячейка

Принцип эквивалентной гомогенности

(в применении к механическим свойствам)

Существует такая величина **L** называемая масштабом длинны осреднения, что если из любого места микронеоднородного тела вырезать представительную ячейку с линейными размерами большими чем **L** то поле скоростей на границе ячейки будет примерно линейно зависеть от координат.

$$V_i = e_{ij}^0 x_j$$

Чем больше размер представительнойячейки тем точнее выполняется эта зависимость.

Несложно убедиться, что e_{ij}^0 являются средними значениями тензора скоростей деформаций по объёму представительной ячейки.Если рассматривать микронеоднородный материал как некую эффективную сплошную среду, то каждой точке такой среды мы можем поставить в соответствие свою представительную ячейку

ЭФФЕКТИВНЫЕ УПРУГИЕ СВОЙСТВА МАТЕРИАЛОВ, СОДЕРЖАЩИХ ДВУМЕРНЫЕ ДЕФЕКТЫ

ЕСЛИ ЗАДАНЫ МАКРОСКОПИЧЕСКИЕ ДЕФОРМАЦИИ ТО МОЖНО ОТЫСКАТЬ МАКРОСКОПИЧЕСКИЕ НАПРЯЖЕНИЯ

Пусть e_{ij}^{0} — макроскопические скорости деформаций

$\Downarrow$

$u_i^{micro} = e_{ij}^{0} x_j$ — граничные условия на представительной ячейке

$\sigma_{ij}^{micro} = \sigma_{ij}^{micro}(e_{ij}^{micro}(u_i^{micro}))$ — микрореология

$\sigma_{ij,j}^{micro} = f_i$ — уравнения равновесия

$\Downarrow$ решение краевой задачи для уравнений равновесия в представительной ячейке

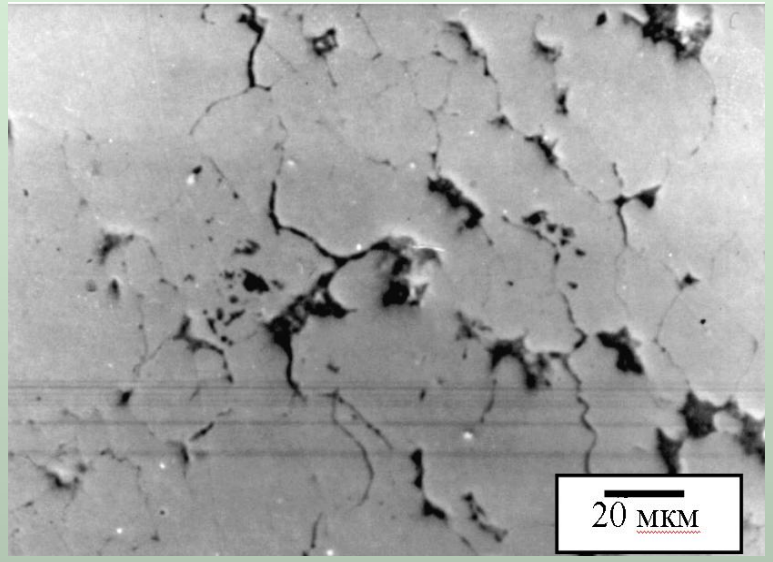
$$u_i^{micro} = u_i^{micro}\left(e_{ij}^{0}, \bar{x}\right)$$

$$\sigma_{ij}^{micro} = \sigma_{ij}^{micro}\left(e_{ij}^{0}, \bar{x}\right)$$

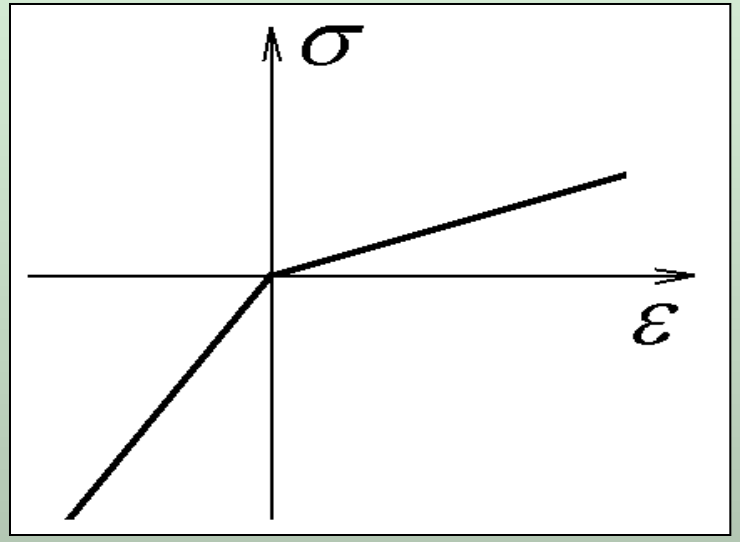
$\Downarrow$

Находим макронапряжения: $\sigma_{ij}^{macro} = \left\langle \sigma_{ij}^{micro}\left(e_{ij}^{0}, \bar{x}\right)\right\rangle = \sigma_{ij}^{macro}\left(e_{ij}^{0}\right)$

ЭФФЕКТИВНЫЕ УПРУГИЕ СВОЙСТВА МАТЕРИАЛОВ, СОДЕРЖАЩИХ ДВУМЕРНЫЕ ДЕФЕКТЫ



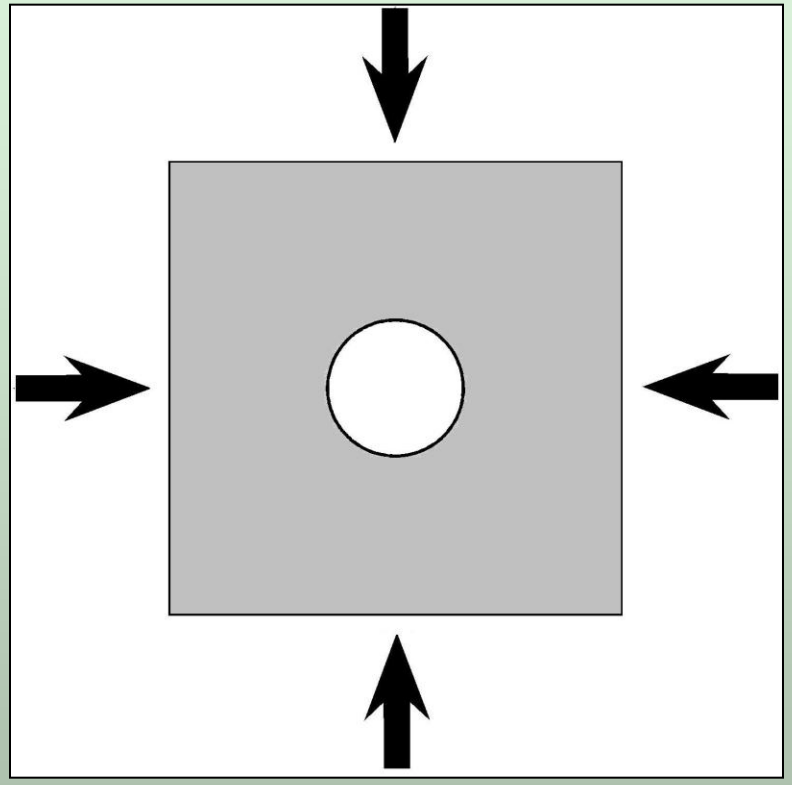
ФОТОГРАФИЯ СТРУКТУРЫ

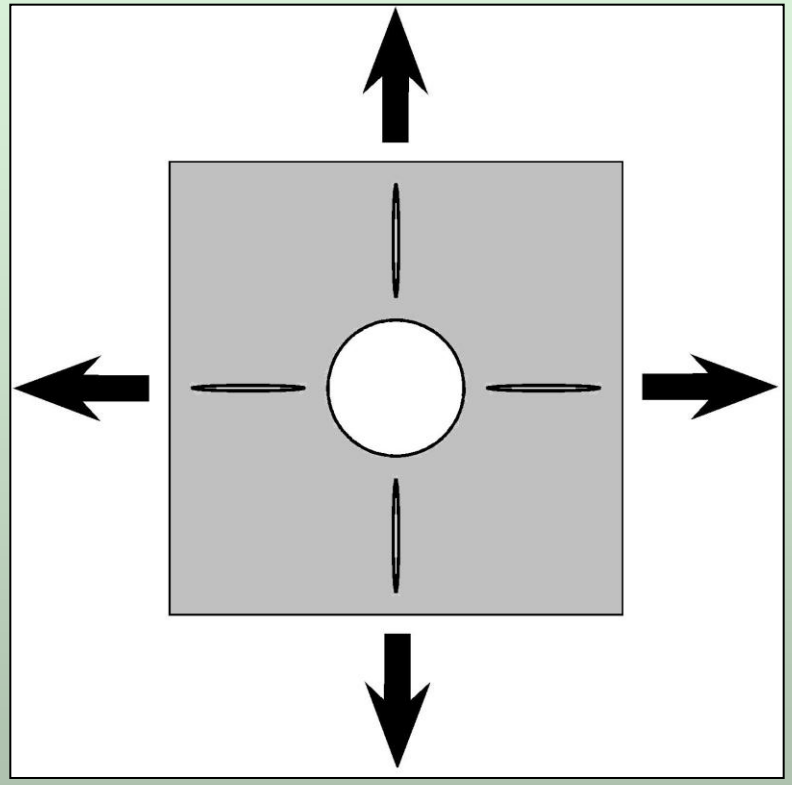


РАЗНОСОПРОТИВЛЯЕМОСТЬ РАСТЯЖЕНИЮ И СЖАТИЮ

ЭФФЕКТИВНЫЕ УПРУГИЕ СВОЙСТВА МАТЕРИАЛОВ, СОДЕРЖАЩИХ ДВУМЕРНЫЕ ДЕФЕКТЫ

РАЗЛИЧНАЯ ГЕОМЕТРИЯ ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ ДЛЯ СЛУЧАЕВ РАСТЯЖЕНИЯ И СЖАТИЯ





КРАЕВЫЕ УСЛОВИЯ НА ВНЕШНЕЙ ГРАНИЦЕ ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ

$$u_x = 0.5\,\varepsilon_0 x + \gamma_0 y\,; \qquad u_y = \gamma_0 x + 0.5\,\varepsilon_0 y$$

ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ЭНЕРГИЯ :

$$W = W(\varepsilon_0, \gamma_0)$$

ЭФФЕКТИВНЫЕ УПРУГИЕ СВОЙСТВА МАТЕРИАЛОВ, СОДЕРЖАЩИХ ДВУМЕРНЫЕ ДЕФЕКТЫ

ЗАВИСИМОСТЬ МОДУЛЯ ЮНГА ОТ ПОРИСТОСТИ И КОНЦЕНТРАЦИИ ДЕФЕКТОВ ОЦЕНКА РАЗМЕРОВ ДЕФЕКТОВ ПО ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО ИЗМЕРЕНЫМ ПОРИСТОСТИ И МОДУЛЮ ЮНГА (МЕТОДОМ РЕЗОНАНСНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ)

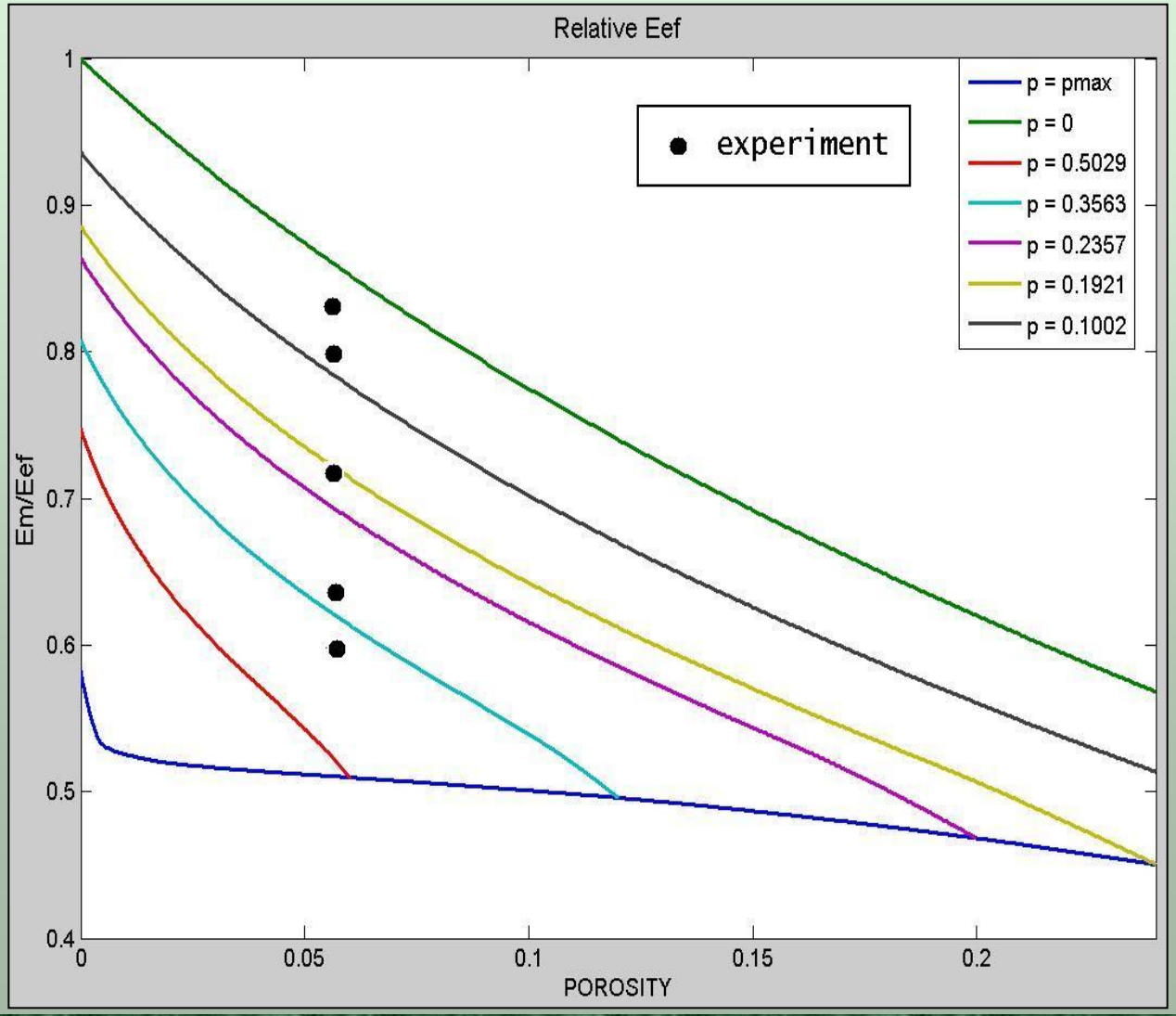
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ

Em = 2.1 ГПа

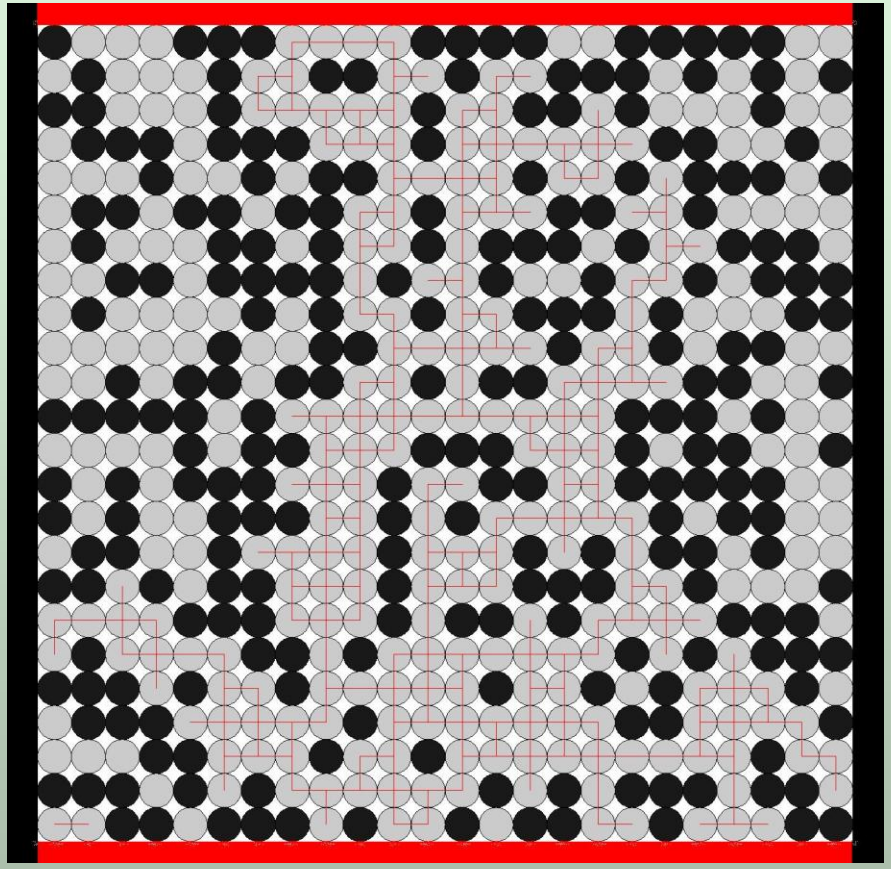
Пористость 6%

Время спекания: 1 час

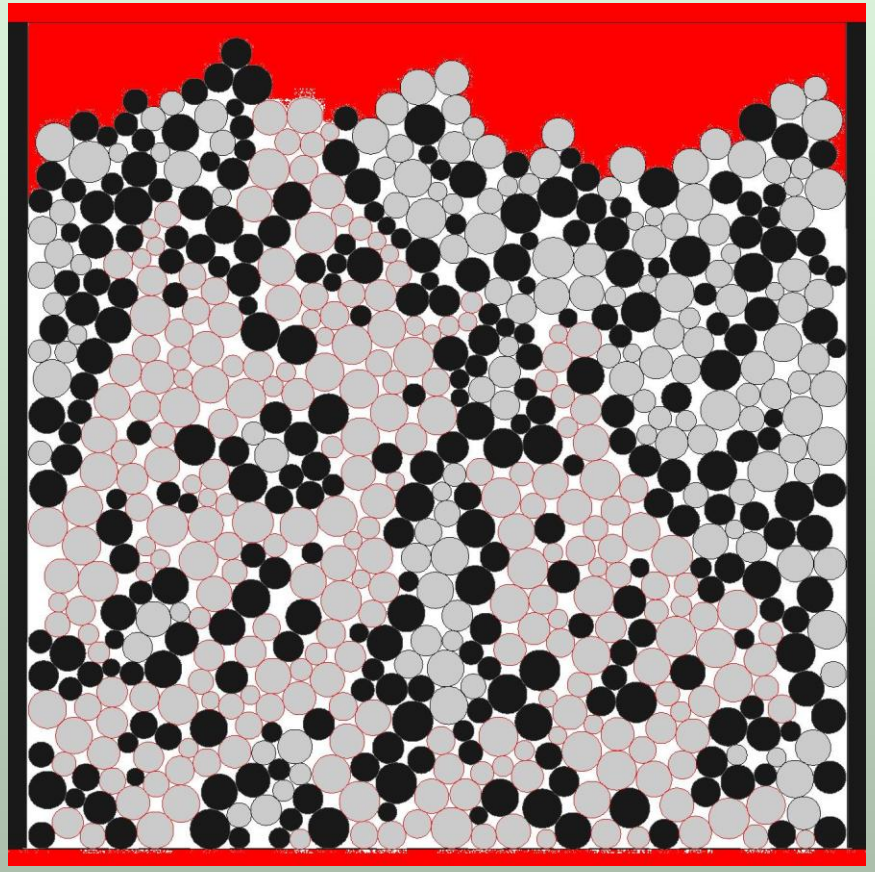
E, ГПа	Температура спекания
1.26	НЕСПЕЧЕНАЯ ПРЕСОВКА
1.37	500
1.53	700
1.67	900
1.76	1100



НАХОЖДЕНИЕ ПОРОГА ПРОТЕКАНИЯ И ПРОВОДИМОСТИ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ ПОЛИДИСПЕРСНЫХ СМЕСЕЙ ПРОВОДНИК-ИЗОЛЯТОР



РЕГУЛЯРНАЯ УПАКОВКА

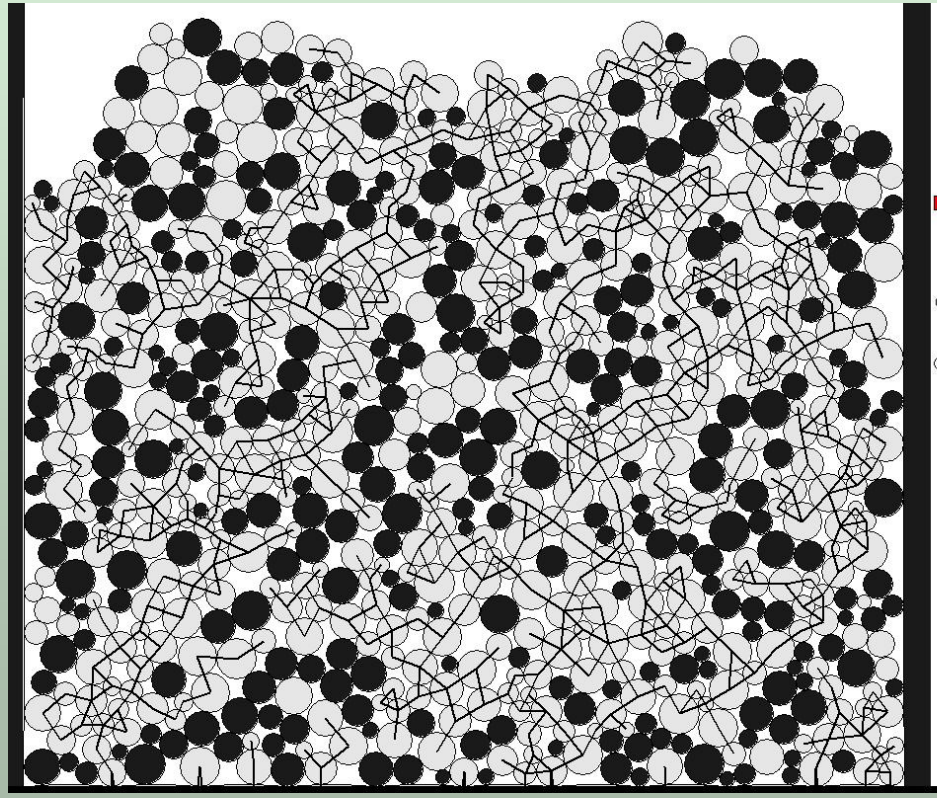


НЕРЕГУЛЯРНАЯ (СЛУЧАЙНАЯ) УПАКОВКА

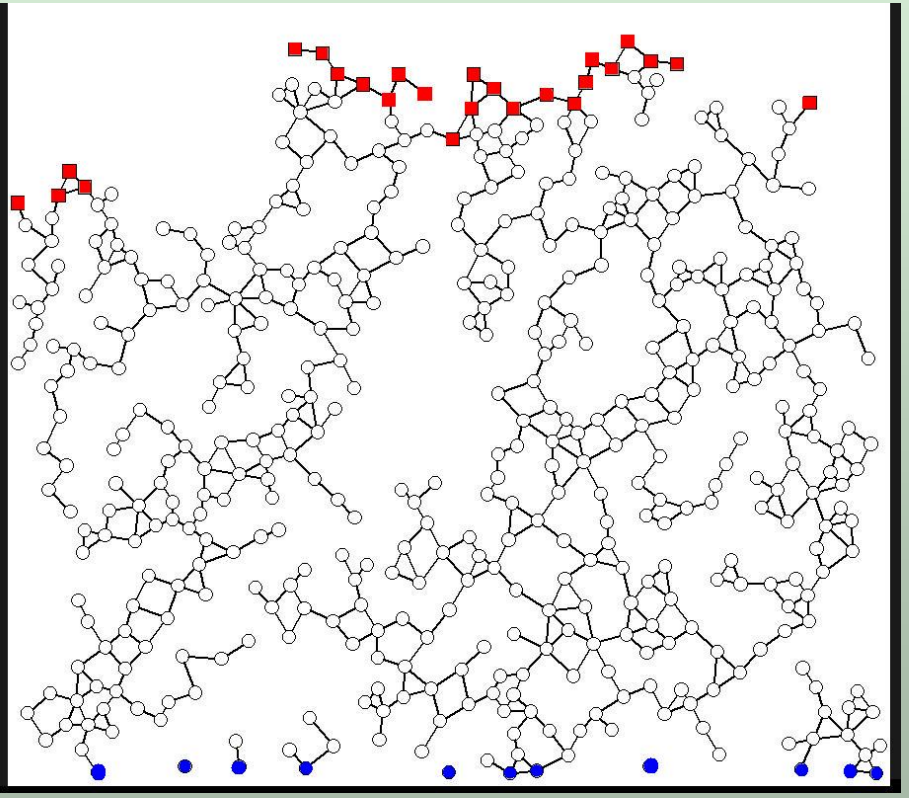
НЕВОЗМОЖНОСТЬ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ РЕГУЛЯРНЫХ УПАКОВОК ДЛЯ НАХОЖДЕНИЯ ПОРОГА ПРОТЕКАНИЯ В ПОЛИДИСПЕРСНОМ ПОРОШКОВОМ ТЕЛЕ

НАХОЖДЕНИЕ ПОРОГА ПРОТЕКАНИЯ И ПРОВОДИМОСТИ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ ПОЛИДИСПЕРСНЫХ СМЕСЕЙ ПРОВОДНИК-ИЗОЛЯТОР

МЕТОДОЛОГИЯ ПОСТРОЕНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ СХЕМЫ НА ОСНОВЕ УПАКОВКИ

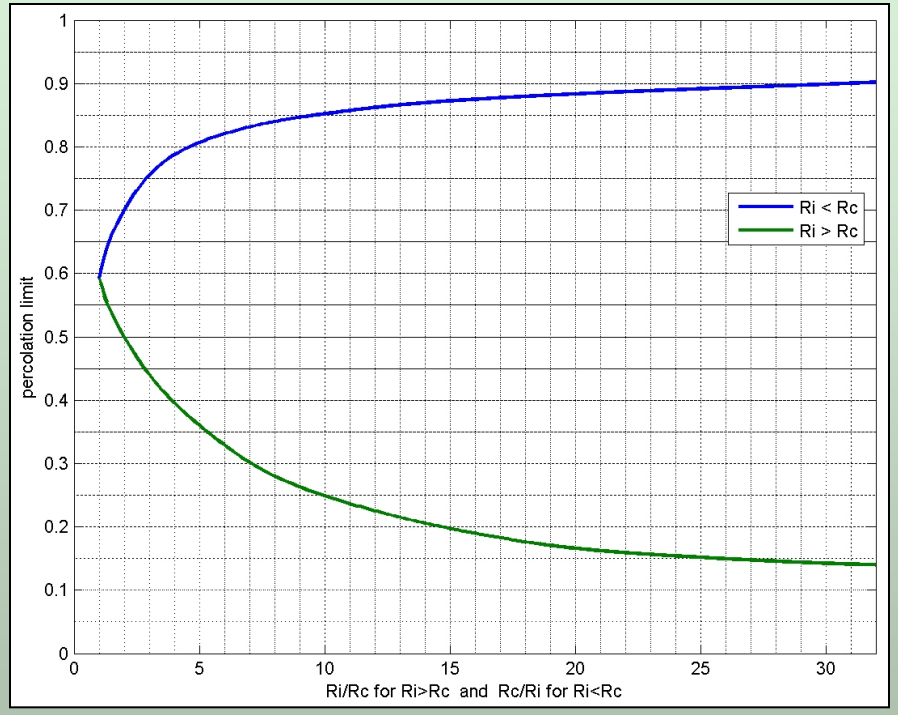


УПАКОВКА С ПРОВОДЯЩИМ КЛАСТЕРОМ

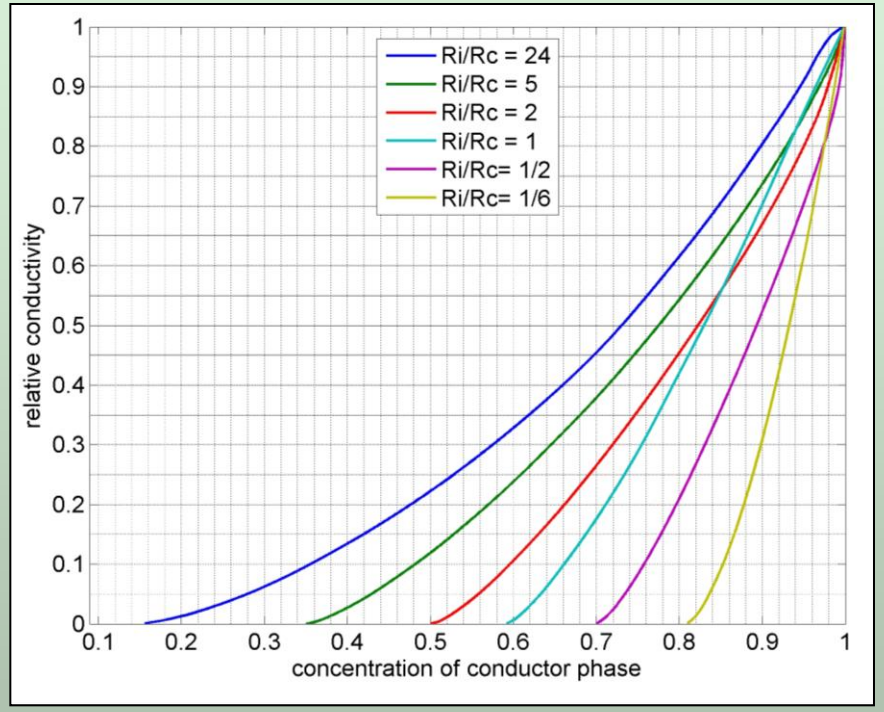


ЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ СХЕМА И ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ

НАХОЖДЕНИЕ ПОРОГА ПРОТЕКАНИЯ И ПРОВОДИМОСТИ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ ПОЛИДИСПЕРСНЫХ СМЕСЕЙ ПРОВОДНИК-ИЗОЛЯТОР

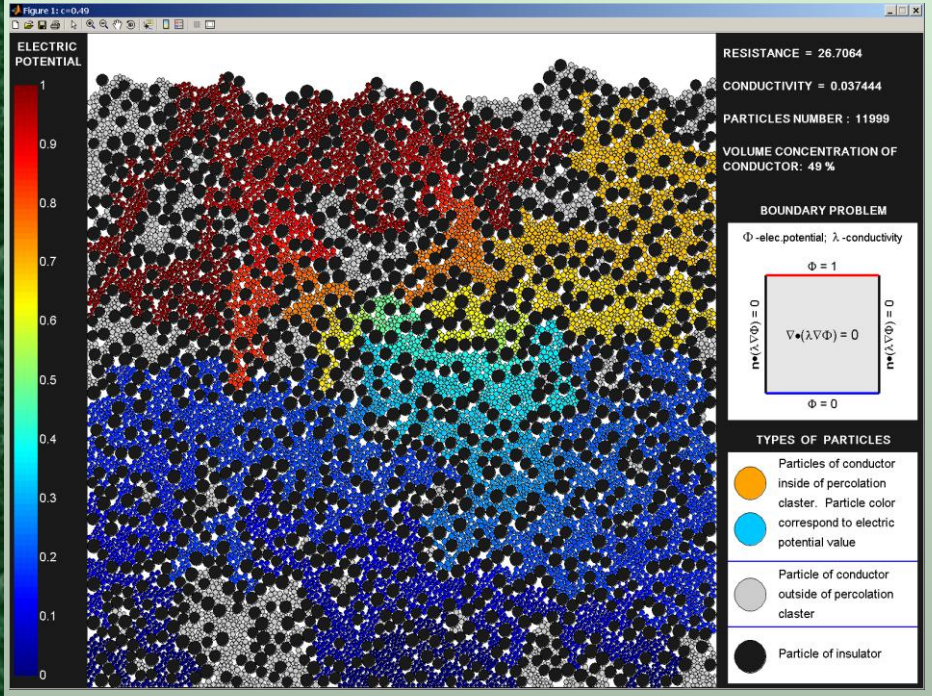


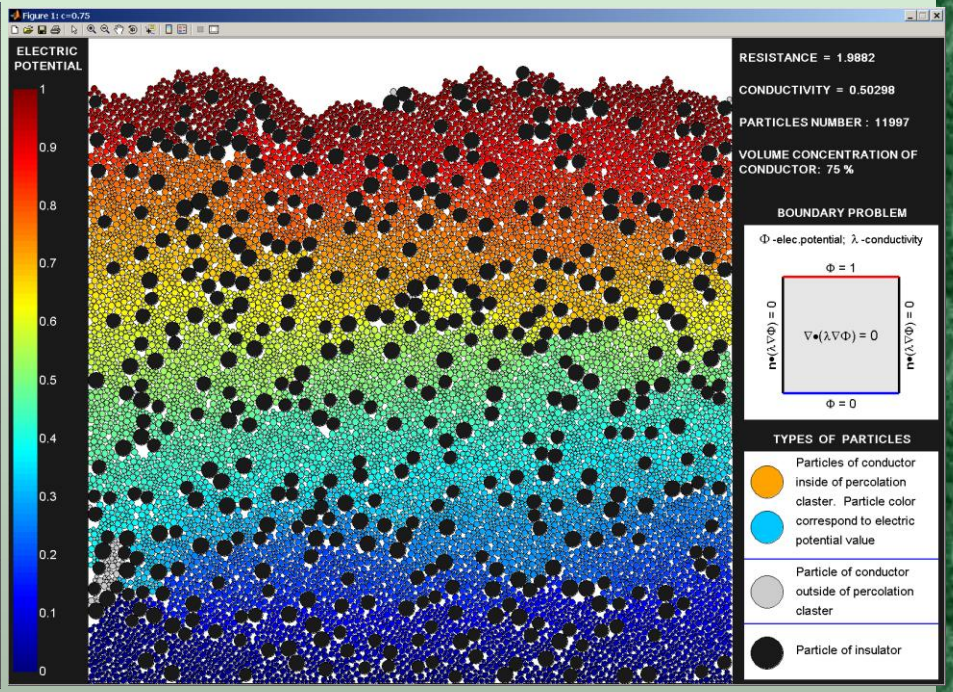
Зависимость порога протекания в бидисперсной среде от отношения размеров частиц проводящей и изолирующей фазы



Зависимости проводимости бидисперсних смесей от концентрации проводника для различных отношений размеров частиц проводящей и непроводящей фазы

НАХОЖДЕНИЕ ПОРОГА ПРОТЕКАНИЯ И ПРОВОДИМОСТИ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ ПОЛИДИСПЕРСНЫХ СМЕСЕЙ ПРОВОДНИК-ИЗОЛЯТОР





КОНТИНУАЛЬНАЯ ТЕОРИЯ СПЕКАНИЯ

Компоненты скоростей деформаций

Объёмный модуль: сопротивление изменению объёма - <u>функция пористости</u>

Сдвиговый модуль: сопротивление формоизменению <u>функция пористости</u>

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma(W)}{W}\left[\varphi \dot{e}_{ij} + \left(\psi - \frac{1}{3}\varphi\right)\dot{e}\delta_{ij}\right] + P_L \delta_{ij}$$

Скорость объёмных деформаций

Обобщенная вязкость: относится к определяющим свойствам твердой фазы

Эффективное напряжение спекания: <u>функция пористости</u>

внешние напряжения отклик материала спекание

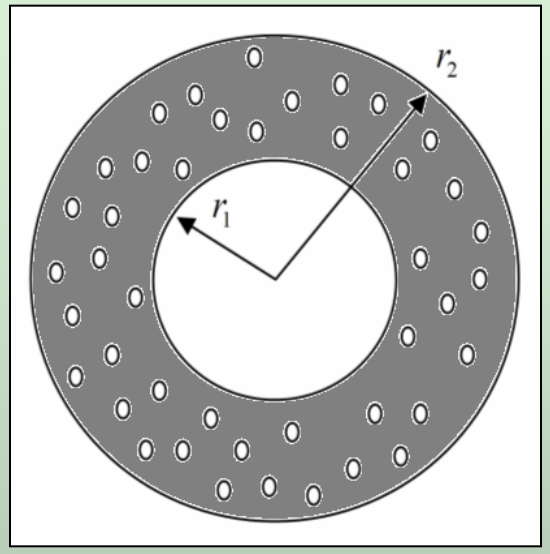
Olevsky E.A. (1998), Theory of sintering: from discrete to continuum, *Mater. Sci. & Eng. R: Reports*, 40-100

Макроскопическое моделирование спекания направлено на прогнозирование

- эволюции распределения пористости в спекаемом теле
- искажения формы спекаемого тела

РЕОЛОГИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ СПЕКАНИЯ МАТЕРИАЛОВ С БИМОДАЛЬНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ ПОР ПО РАЗМЕРАМ

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЕФФЕКТИВНОГО КОЭФФИЦИЕНТА ОБЪЁМНОЙ ВЯЗКОСТИ И ЕФФЕКТИВНОГО ПОТЕНЦИАЛА СПЕКАНИЯ



$$\sigma_{rr|r=r_1|} = P_{L2}\,; \quad \sigma_{r\varphi|r=r_1|} = 0\,; \quad \sigma_{r\psi|r=r_1|} = 0$$

$$\sigma_{rr|r=r_2|} = \langle P \rangle\,; \quad \sigma_{r\varphi|r=r_2|} = 0\,; \quad \sigma_{r\psi|r=r_2|} = 0$$

граничные условия

$$\sigma_{ij,j} = 0 \quad \Downarrow$$

Решение уравнений равновесия

$$\mathrm{V_r}(r) = \frac{r}{3\varsigma}\left((\langle P \rangle - P_{L1}) + \frac{r_1^3}{r_1^3 - r_2^3}(\langle P \rangle - P_{L2}) \right) + \frac{1}{r^2}\frac{r_1^3 r_2^3}{r_2^3 - r_1^3}\frac{\langle P \rangle - P_{L2}}{4\eta}$$

$$\frac{r_1^3}{r_2^3} = \Pi_2; \quad e = 3\frac{\dot{r}_2}{r_2} \quad \Rightarrow \quad \langle e \rangle = 3\frac{\mathrm{V_r}(r_2)}{r_2} = \frac{1}{\varsigma}\left((\langle P \rangle - P_{L1}) + (\langle P \rangle - P_{L2})\frac{\Pi_2}{1-\Pi_2} \right) + \frac{3\Pi_2}{1-\Pi_2}\frac{\langle P \rangle - P_{L2}}{4\eta}$$

$$\langle P \rangle = \zeta_{eff}\langle e \rangle + P_{Leff} \quad \Rightarrow$$

$$\varsigma_{eff} = \frac{4\eta\varsigma(1-\Pi_2)}{4\eta + 3\varsigma\,\Pi_2}$$

$$P_{Leff} = \frac{4\eta\, P_{L1}(1-\Pi_2) + P_{L2}\Pi_2(4\eta + 3\varsigma)}{4\eta + 3\varsigma\,\Pi_2}$$

РЕОЛОГИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ СПЕКАНИЯ МАТЕРИАЛОВ С БИМОДАЛЬНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ ПОР ПО РАЗМЕРАМ

ОПРЕДЕЛЯЮЩИЕ СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ БИПОРИСТОЙ СРЕДЫ

$$\sigma_{ij} = 2\eta_{eff}\left(e_{ij} - \frac{1}{3}e\delta_{ij}\right) + \zeta_{eff}\ e\delta_{ij} + P_{L\,eff}\delta_{ij}$$

$\Pi_1 -$ СОДЕРЖАНИЕ МАЛЕНЬКИХ ПОР ВМАТЕРИАЛЕ МЕЛКОПОРИСТОЙ МАТРИЦЫ

$\Pi_2 -$ СОДЕРЖАНИЕ БОЛЬШИХ ПОР В МАТЕРИАЛЕ ПРЕССОВКИ

$$\varsigma_{eff} = \eta_0 \frac{4}{3}\frac{(1-\Pi_2)(1-\Pi_1)^3}{\Pi_1 + (1-\Pi_1)\Pi_2}; \quad \eta_{eff} = \eta_0 \frac{(3-\Pi_1)(1-\Pi_1)^2(1-\Pi_2)}{3 + 2\Pi_1 - (1-\Pi_2)\Pi_1}$$

$$P_{Leff} = \frac{\Pi_2(P_{L1} - P_{L2}) - P_{L1}(1-\Pi_2) + P_{L2}\Pi_2\left(1 + \frac{3}{4}\frac{\varsigma}{\eta}\right)}{1 + \frac{3}{4}\frac{\varsigma}{\eta}\Pi_2}$$

РЕОЛОГИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ СПЕКАНИЯ МАТЕРИАЛОВ С БИМОДАЛЬНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ ПОР ПО РАЗМЕРАМ

УРАВНЕНИЯ ЭВОЛЮЦИИ ДЛЯ СОДЕРЖАНИЯ БОЛЬШИХ И МАЛЫХ ПОР

$$\frac{\dot{\Pi}_2}{1-\Pi_2} = \frac{3\zeta\Pi_2}{4\eta + 3\zeta\Pi_2} e - \frac{3\Pi_2}{4\eta + 3\zeta\Pi_2}\left(P_{L2} - P_{L1}\right)$$

$$\frac{\dot{\Pi}_1}{1-\Pi_1} = \frac{4\eta}{4\eta + 3\zeta\Pi_2} e + \frac{3\Pi_2}{4\eta + 3\zeta\Pi_2}\left(P_{L2} - P_{L1}\right)$$

$$\eta = \eta_0\left(1-\Pi_1\right)^2;\ \varsigma = \frac{4}{3}\eta_0\frac{\left(1-\Pi_1\right)^3}{\Pi_1};\ P_{L1} = \frac{3\sigma}{r_0}\left(1-\Pi_1\right)^2; P_{L2} = \frac{2\sigma}{R_{pore}}$$

УРАВНЕНИЯ ЭВОЛЮЦИИ ДЛЯ НАКОПЛЕНОЙ ДЕФОРМАЦИИ ТВЕРДОЙ ФАЗЫ

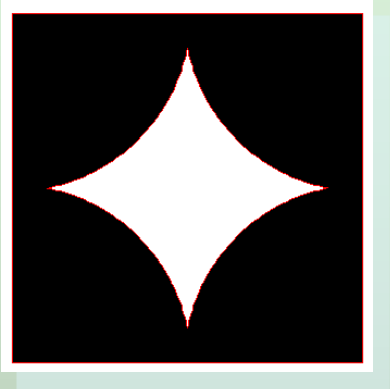
$$\frac{d\omega}{dt} = \sqrt{\frac{1}{2\eta_0}\left(\frac{1}{1-\theta}(\varsigma_{eff}e^2 + 2\eta_{eff}\gamma^2 + P_{Leff}e) - P_{L1}\frac{\dot{\Pi}_1}{\left(1-\Pi_1\right)^2}\right)}$$

СОДЕРЖАНИЕ

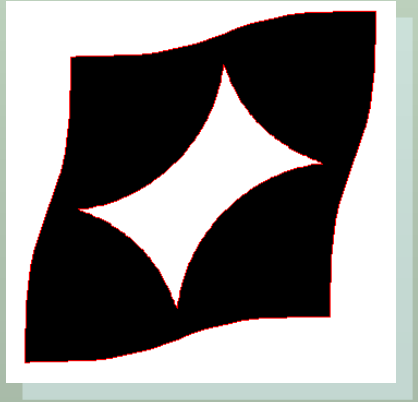
- Микромеханика : основные принципы и примеры
- **Основы прямого мультимасштабного моделирования**
- Прямое мультимасштабное моделирование вязкого спекания

Как в этом случае можно с помощью внутреннирх параметров сотояния описать эволюцию поры на всех стадиях спекания?

Как найти уравнения эволюции для этих параметров?

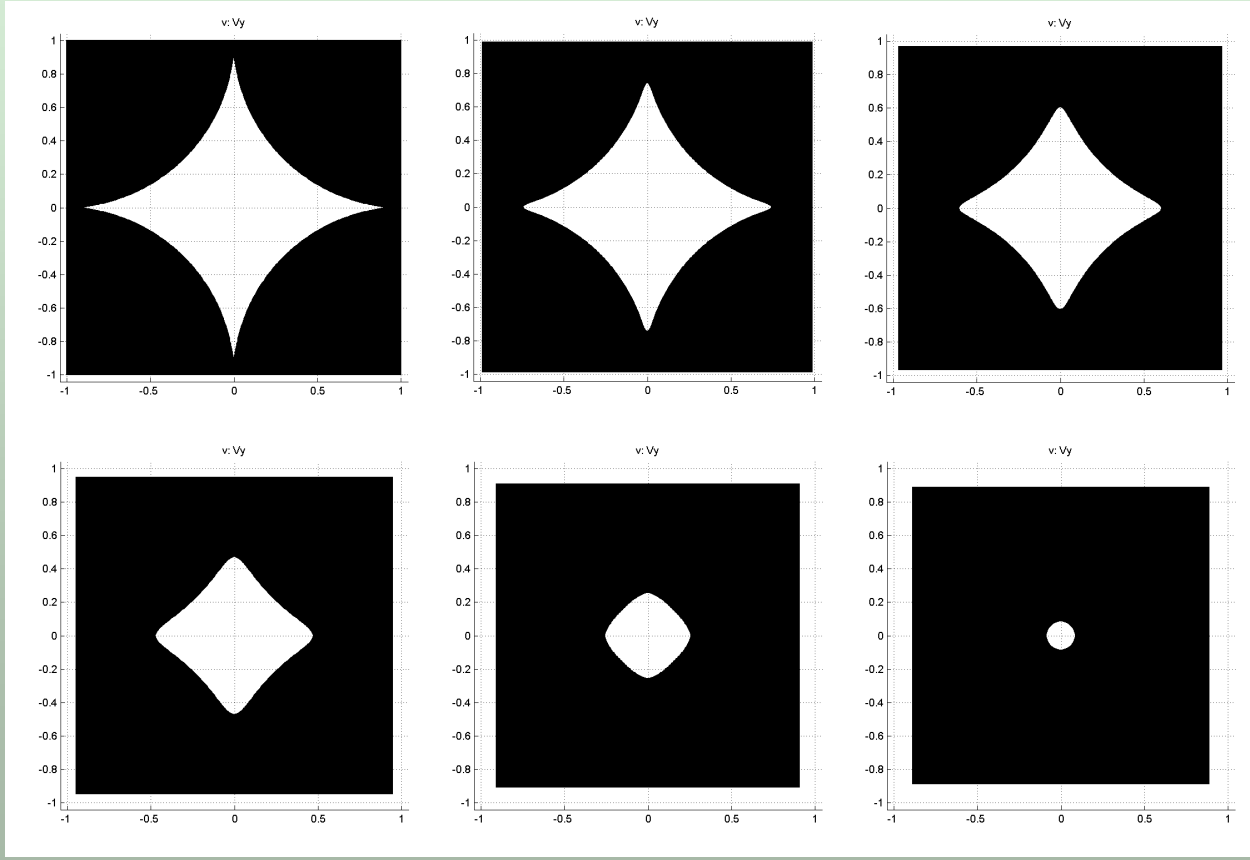


начальная форма поры

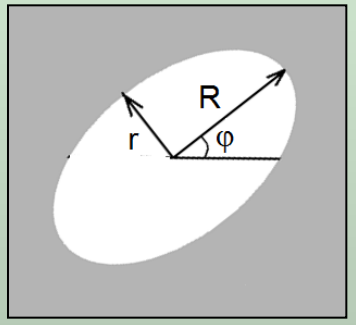
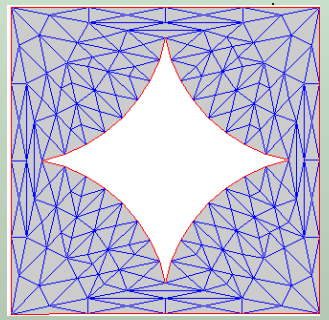
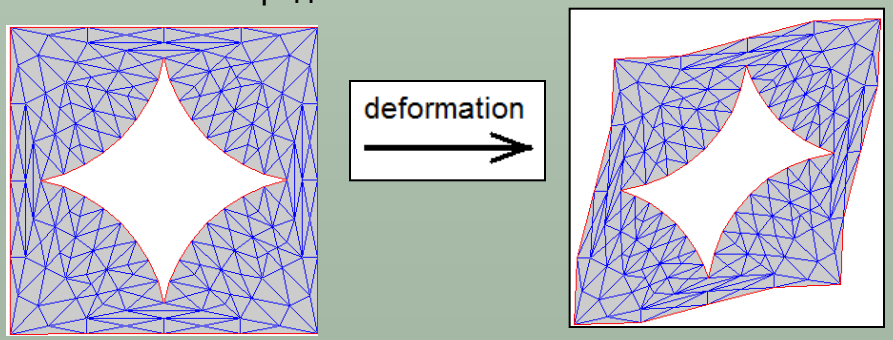


форма поры при макроскопическом деформировании

Эволюция формы поры образованной квадратной укладкой цилиндрических волокон



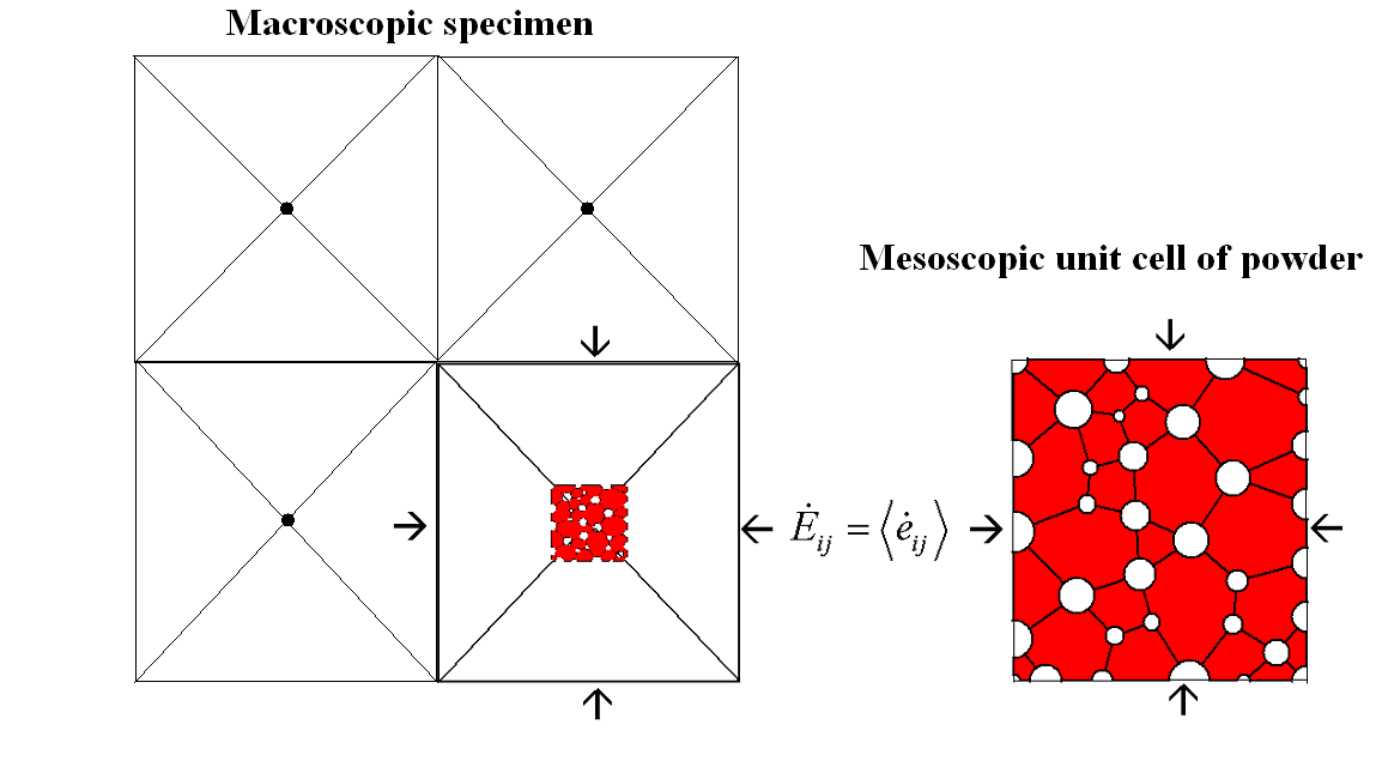
СРАВНЕНИЕ ТРАДИЦИОННОГО МИКРОМЕХАНИЧЕСКОГО И ПРЯМОГО МУЛЬТИМАСШТАБНОГО ПОДХОДОВ К ОПИСАНИЮ СВОЙСТВ МИКРОНЕОДНОРОДНЫХ ТЕЛ

	Традиционный подход	Мультимасштабный подход
Метод усреднения	Концепция эффективных свойств (принцип эквивалентной гомогенности) $V_i = e_{ij}^0 x_j$	
Описание внутренней структуры материала	Использование внутренних переменных состояния  $\nu_1 = R$ $\nu_2 = r$ $\nu_3 = \varphi$	Внутреннее состояние неоднородной сплошной среды определяется конфигурацией представительной ячейки (координаты узлов конечных элементов, на которые разбита представительная ячейка) 
Описание эволюции внутренней структуры материала	Уравнения эволюции для внутренних переменных состояния $\frac{\partial \nu_k}{\partial t} = f(\nu_1 \ldots \nu_n, e_{ij}^0)$	Деформация сетки конечных элементов, на которые разбита представительная ячейка 

НОВЫЙ ПОДХОД: ПРЯМОЕ МУЛЬТИМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Термин «мультимасштабный» означает паралельное и взаимосвязанное моделирование на мезоуровне частиц порошка и макроскопическом уровне образца

Макроскопический образец разбивается на элементы. Каждому элементу или групе элементов ставится в соответствие представительная ячейка, описывающая структуру материала в этих элементах



Кинематическая связь между уровнями обеспечивается сродством мезоскопического и макроскопического тензора скоростей деформаций

ПРЯМОЕ МУЛЬТИМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКАНИЯ

Термин «прямое» означает, что результаты мезоскопического моделирования напрямую используются в макроскопическом моделировании без промежуточной формулировки каких-либо макроскопических определяющих соотношений в аналитическом виде.

МАКРОСКОПИЧЕСКИЕ ОПРЕДЕЛЯЮЩИЕ СООТНОШЕНИЯ ЗАМЕНЯЮТСЯ МОДЕЛИРОВАНИЕМ НА ЯЧЕЙКЕ

Преимущества:

- При макроскопическом моделировании спекания может быть учтено любое количество внутренних параметров: не только пористость но также размер зерен и их распределение по размерам, распределение пор по размерам, анизотропия формы пор и их расположение в материале и любые другие параметры которые можно смоделировать в мезоскопической представительной ячейке.
- Эволюционные уравнения для внутренних параметров следуют из моделирования и не требуют аналитической формулировки.
- Прямое мультимасштабное моделирование один из наиболее перспективных путей для прогнозирования влияния и взаимосвязи более чем двух внутренних параметров при макроскопическом спекании.

СОДЕРЖАНИЕ

- Микромеханика : основные принципы и примеры
- Основы прямого мультимасштабного моделирования
- **Прямое мультимасштабное моделирование вязкого спекания**

ПРЯМОЕ МУЛЬТИМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЯЗКОГО СПЕКАНИЯ

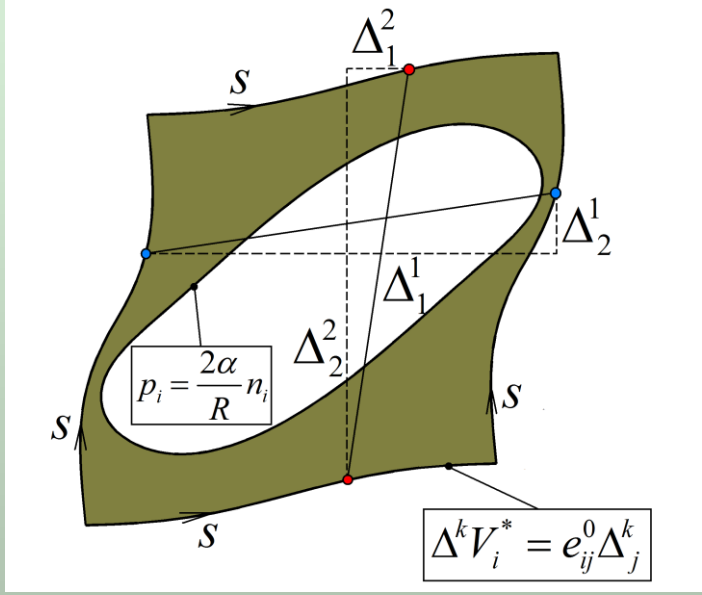
Материал матрицы несжимаемый и линейно-вязкий с мощностью диссипации энергии

$$\Pi_i = \frac{1}{2}\int_{S_c} \eta \dot{\gamma}^2 dS + \int_L P_L v_n dL$$

η сдвиговая вязкость материала

Капиллярные силы направлены по нормали к поверхноти и равны:

$$P_L = \frac{2\gamma_S}{R}$$

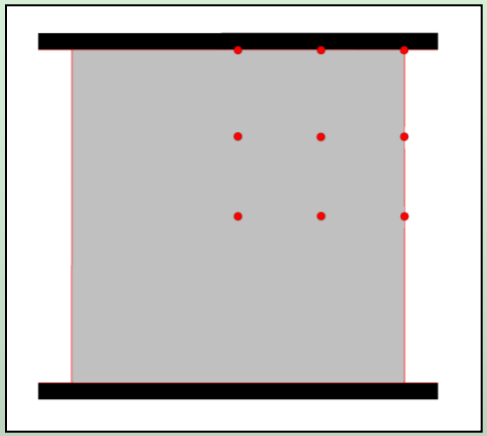


Under strain both unit cells and pores can change their shapes

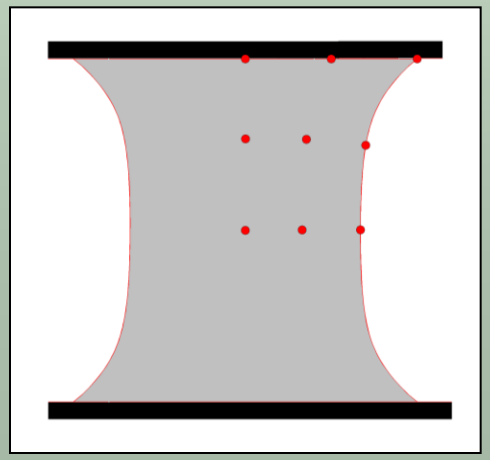
ПРЯМОЕ МУЛЬТИМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЯЗКОГО СПЕКАНИЯ

Спекание одноосно закрепленного тела (случай 1)

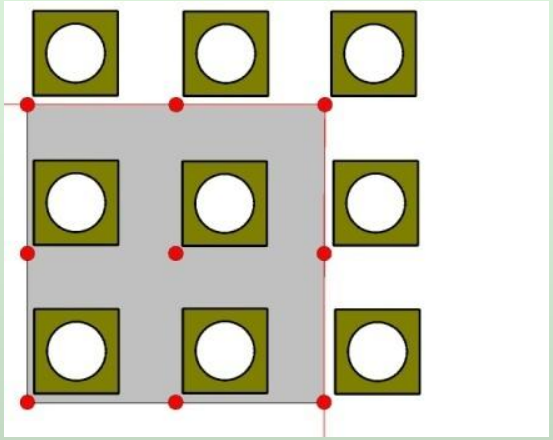
Расположение контрольных точек



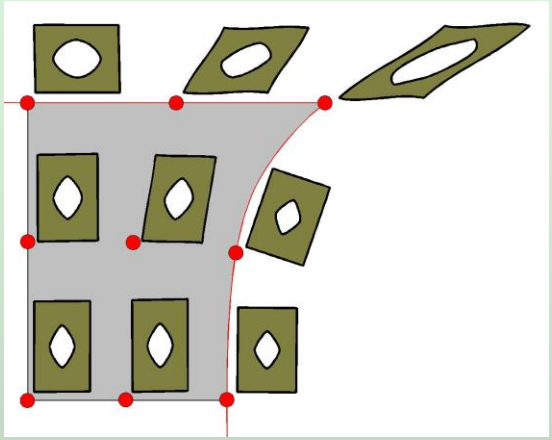
начальное расположение



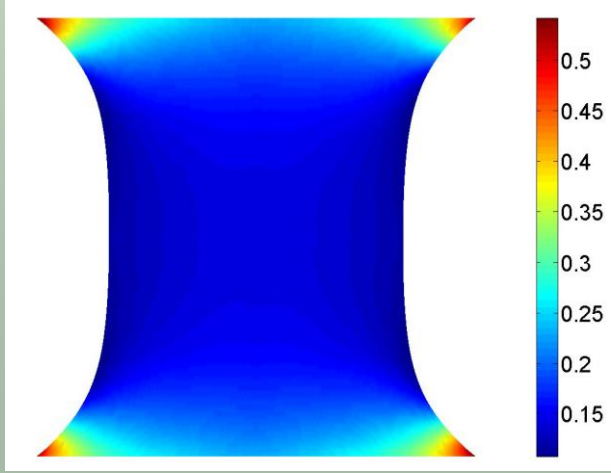
после спекания



Начальное состояние



Искривленный образец после спекания

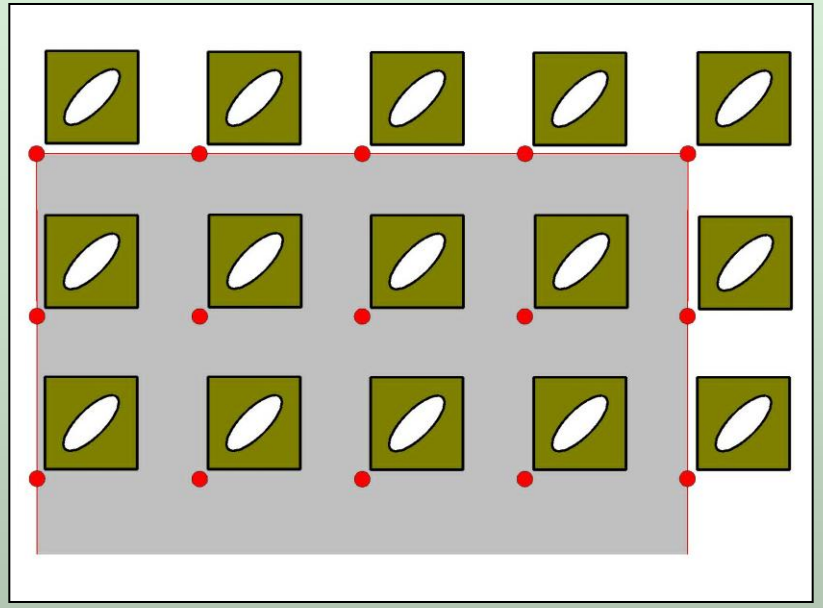


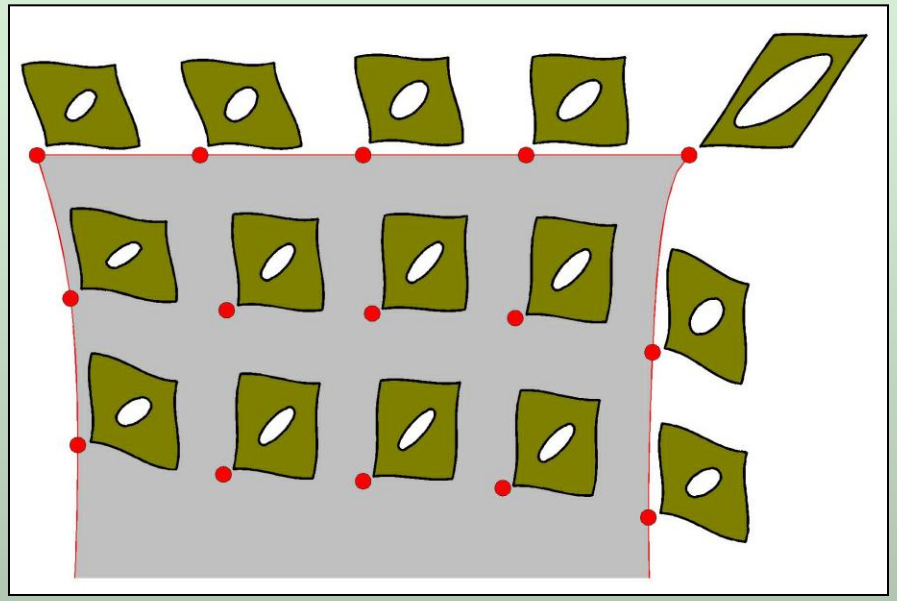
Распределение пористости

ПРЯМОЕ МУЛЬТИМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЯЗКОГО СПЕКАНИЯ

Спекание одноосно закрепленного тела (случай 2)

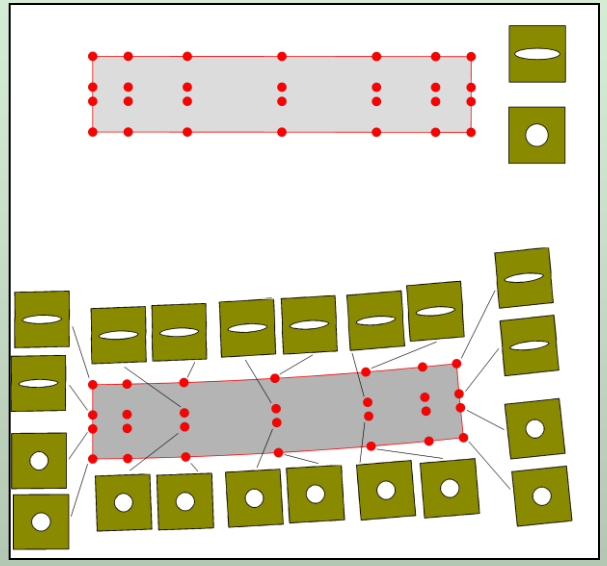
Искажения формы пор

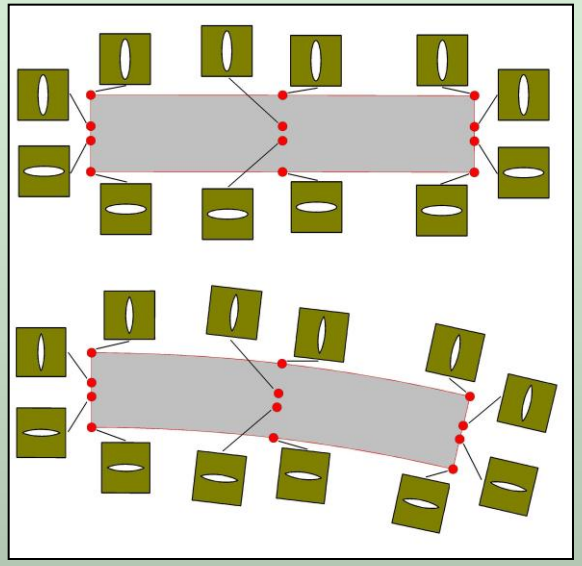


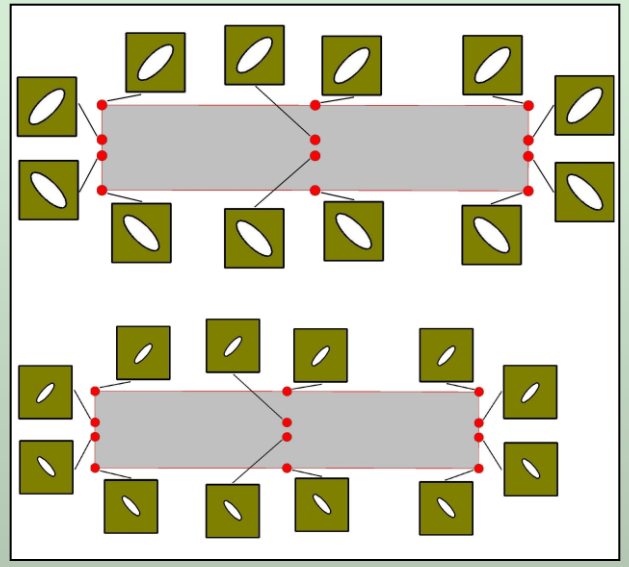


ПРЯМОЕ МУЛЬТИМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЯЗКОГО СПЕКАНИЯ

Спекание двухслойных пластин с одинаковой средней плотностью по всему объёму пластин, но с различной формой пор в каждом из слоев. Влияние формы и ориентации пор на изгиб двухслойной пластины при спекании.





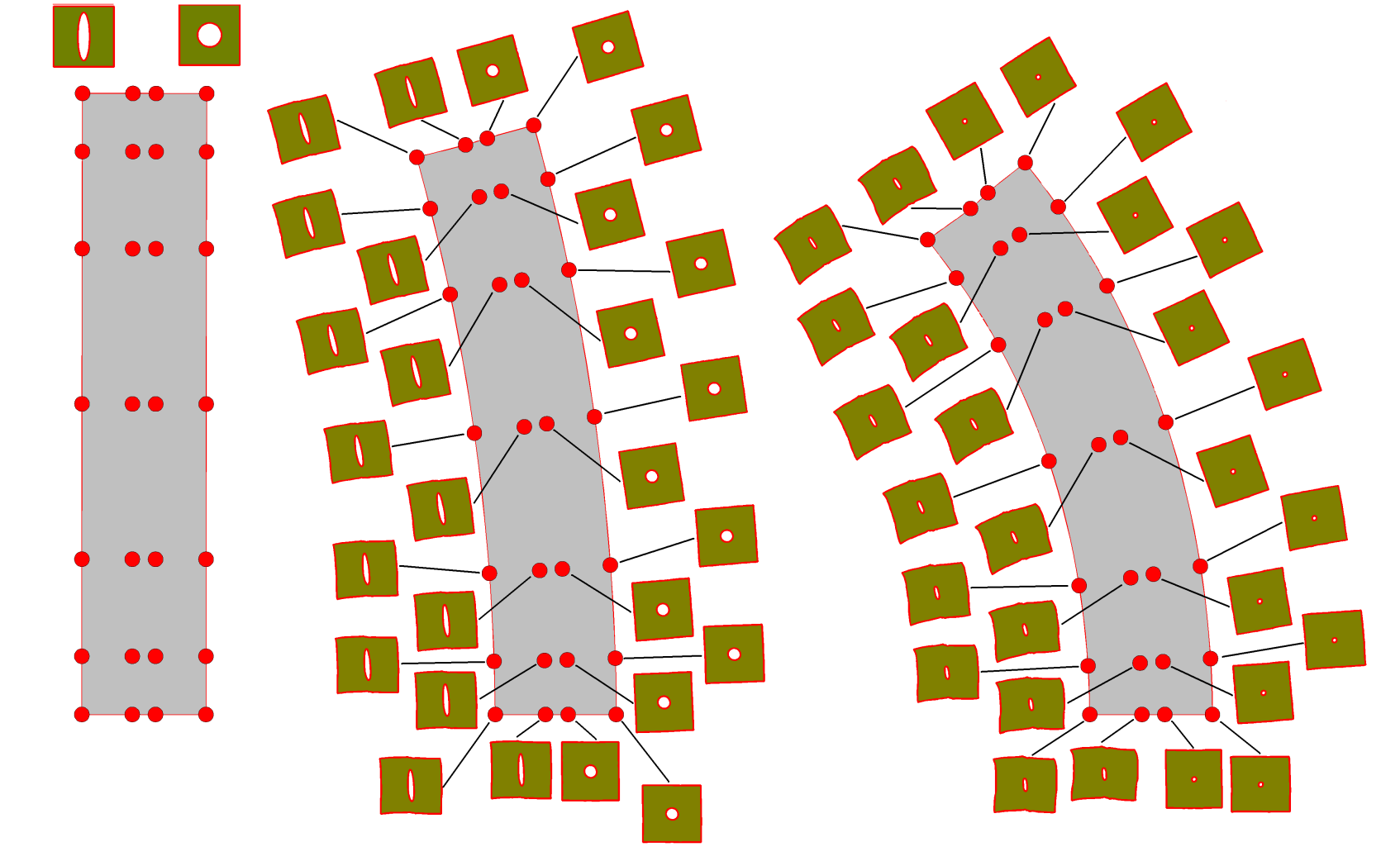


В случае разной формы или нессиметричной ориентации пор в разных слоях пластинка изгибается в ту или иную сторону

Случай когда двухслойная пластинка сохраняет плоскую форму при спекании

ПРЯМОЕ МУЛЬТИМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЯЗКОГО СПЕКАНИЯ

Спекание двухслойных пластин с одинаковой средней плотностью по всему объёму пластин, но с различной формой пор в каждом из слоев. Явление сохранения вытянутой формы пор даже при значительной усадке и изгибе



СОДЕРЖАНИЕ

- **Мультимасштабное моделирование спекания: основные принципы**
- Основы прямого мультимасштабного моделирования спекания
- Прямое мультимасштабное моделирование диффузионного спекания
- Прямое мультимасштабное моделирование вязкого спекания
- Выводы

ВОПРОСЫ ?