

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МАКРОСТРУКТУРЫ ПРЕССОВАННЫХ ПОРОШКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

© 2010 Г.Г. Винокуров¹, М.В. Федоров¹, О.Н. Попов²

¹ Институт физико-технических проблем Севера СО РАН им. В.П. Ларионова

² Институт математики и информатики
Якутского государственного университета им. М.К. Аммосова

Поступила в редакцию 10.02.2010

В работе статистическим моделированием изучена макроструктура порошковых материалов, полученных односторонним прессованием. Разработана программная реализация модели на языках Paskal и Delphi, проведены расчеты автокорреляционной функции локальной плотности прессованных порошковых материалов.

Ключевые слова: *метод Монте-Карло, порошковые материалы, макроструктура*

В настоящее время технологии порошковой металлургии широко используются для получения износостойких материалов инструментального назначения. Однако получаемые прессованием порошковые материалы характеризуются высокой степенью неоднородности, сложным строением, состоящим из выделений дисперсных и коагулированных фаз. Случайная форма затвердевших частиц входит в понятие *макроструктуры* порошкового материала, от которой зависят физико-механические и эксплуатационные свойства инструмента. Важной количественной характеристикой макроструктуры прессованных порошковых материалов является локальная плотность (пористость). Статистические закономерности, описывающие макроструктуру прессованных порошковых материалов, проявляются в деградиационных процессах при эксплуатации инструмента. Поэтому одной из актуальных задач является установление корреляционных характеристик локальной плотности, описывающих взаимосвязь элементов макроструктуры прессованных порошковых материалов и, безусловно, влияющих на процессы изнашивания и разрушения порошковых материалов инструментального назначения.

Целью настоящей работы является выявление корреляционных характеристик макроструктуры на основе разработанной модели Монте-Карло уплотнения порошковых материалов при одностороннем прессовании.

Винокуров Геннадий Георгиевич, кандидат технических наук, ведущий научный сотрудник. E-mail: g.g.vinokurov@iptpn.yfn.ru

Федоров Михаил Владимирович, ведущий инженер. E-mail: fedorov.83@mail.ru

Попов Олег Николаевич, старший преподаватель. E-mail: ponpon1@mail.ru

Прессование порошковых материалов и модель Монте-Карло для описания их макроструктуры. Как известно, при прессовании порошкового материала выделяют следующие основные стадии уплотнения порошков [1]:

- стадия нестабильных пространственных структур наблюдается при небольших внешних силах, действующих на порошковый материал;
- стадия стабильных пространственных структур наблюдается при незначительных статических давлениях и вибрациях, действующих на порошковый материал;
- стадия макродеформации объема частиц порошка, которая характеризуется значительной деформацией материала частиц и истечением его в приконтактных областях;
- стадия объемного истечения, в которой происходит внедрение материала частиц в межчастичные поры.

Уплотнение порошков сопровождается физико-химическими процессами в области межчастичных контактов, повышением уровня напряжений и деформаций материала частиц. Данные факторы практически недоступны для непосредственного экспериментального исследования и определяются в основном давлением прессования, приложенным извне к порошковому материалу [1]. Поэтому существуют теоретические и полуэмпирические зависимости характеристик макроструктуры от давления для перечисленных стадий уплотнения материала [2-4]. Моделирование порошковой среды случайной упаковкой частиц с использованием метода Монте-Карло делает возможным детальное описание характеристик макроструктуры в ходе формирования порошкового материала, а тем самым и оценку технологических параметров, в частности, давления прессования.

В данной работе для расчета корреляционных характеристик использована элементарная двумерная модель Монте-Карло формирования макроструктуры порошков при одностороннем прессовании, которая разрабатывалась для описания фрикционного изнашивания поверхности трения [5]. Модель построена на основе статистического подхода, предложенного в работе [6], где в качестве количественных характеристик макроструктуры выбраны продольные, поперечные (к направлению прессования) координационные числа частиц и пористость при каждом шаге прессования. Начальное состояние прессуемого порошкового материала задается прямоугольной матрицей макроструктуры с размерностью $(l \times m)$, которая случайным образом заполняется частицами порошка. Следует отметить, что начальная пористость в двумерных моделях задается с учетом заполнения частицами сечения трехмерного порошкового тела. Состояние макроструктуры порошкового материала на определенном шаге прессования получается из предыдущего состояния переносом частиц первого столбца по горизонтали вправо в ближайшую незаполненную ячейку; после переноса всех заполненных элементов первый столбец удаляется. Таким образом, процессу одностороннего прессования порошкового материала соответствует последовательное сокращение одного крайнего столбца матрицы. Если все ячейки в строке окажутся заполненными (возникновение *перколяции*), процесс прессования считается законченным [5, 6]. В двумерной модели Монте-Карло при каждом шаге прессования вычислялись пористость и соответствующие матрицы продольных и поперечных координационных чисел частиц; усреднением по матрице вычислялись средние продольное и поперечное координационные числа. Данная модель Монте-Карло одностороннего прессования порошковых материалов реализована программами на языках Pascal и Delphi, которые позволяют описать изменение макроструктуры в матрицах размером до 1000×1000 .

Впервые идеи статистического рассмотрения характеристик порошковых материалов, состоящих из большого числа взаимодействующих частиц, высказаны еще в работах Бальшина М.Ю., которым была введена вероятность встречи с контактной поверхностью для пространственного элемента, который может вводиться в контрольный объем через любую точку его поверхности в процессе прессования. При этом контрольный объем зачастую заменяют площадью контрольной поверхности сечения [7]. Поэтому при описании процесса уплотнения порошковых материалов данная модель Монте-Карло была использована для исследования характеристик средней относительной плотности r прессуемого порошкового материала, вычисляемой по столбцу матрицы. Начальное состояние

представлялось матрицами макроструктуры с размерами до 1000×1000 , моделирующими порошковый материал с безразмерной плотностью от $r=0,25$ до $r=0,75$ в начале прессования. Относительная плотность в начале прессования резко повышается вблизи границы материала, при дальнейших шагах прессования повышение плотности распространяется вглубь материала [5]. Одновременно распределение плотности становится более пологой, увеличивается размер области повышения плотности; появляется точка перегиба функции. Поэтому целесообразным становится исследование корреляции плотности столбцов матрицы в переходной области повышения плотности.

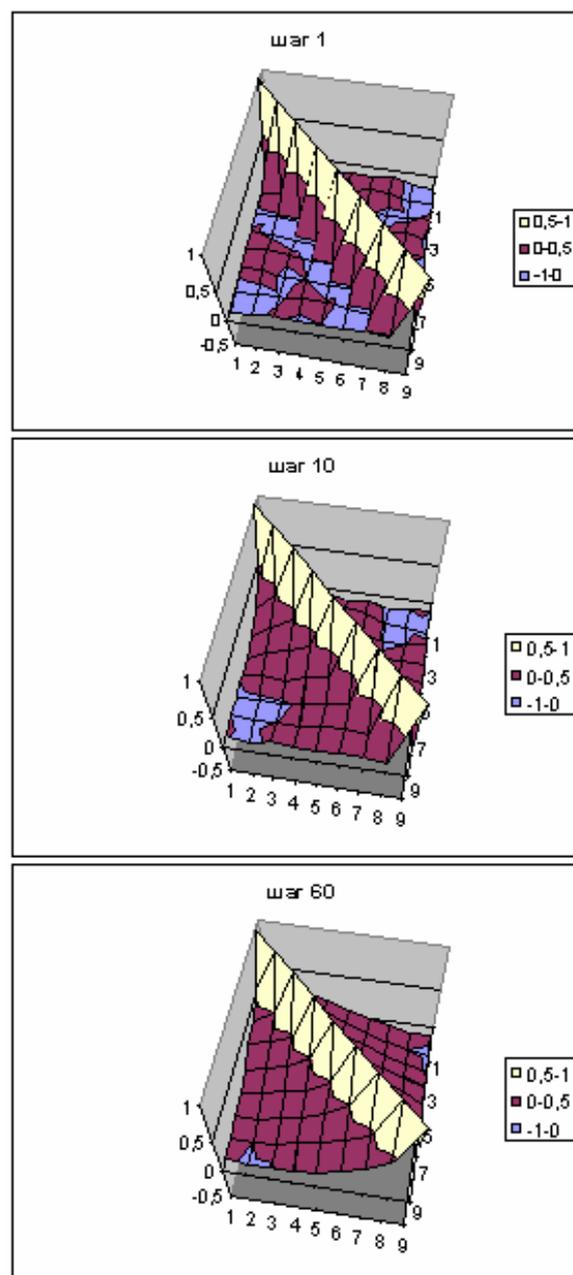


Рис. 1. Изменение автокорреляционной функции локальной плотности в зависимости от шага прессования: начальная плотность 0,25; начальная матрица 100×100 ; усреднение по 1000 реализациям

Обсуждение результатов. Автокорреляционная функция локальной плотности пресуемого порошкового материала определялась по формуле:

$$r(x, x') = \frac{[\rho(x) - \langle \rho(x) \rangle][\rho(x') - \langle \rho(x') \rangle]}{\sigma(x)\sigma(x')}, \quad (1)$$

где x, x' — порядковые номера столбцов матрицы, причем нумерация начинается с первого столбца переходной области; $\langle \rho(x) \rangle, \langle \rho(x') \rangle$ — средние плотности столбцов матрицы; $\sigma(x), \sigma(x')$ — среднеквадратические отклонения локальной плотности столбцов матрицы. Все усреднения в формуле (1) проводились по множеству реализаций модели Монте-Карло (от 100 до 1000 реализаций) для обеспечения достоверности результатов и сглаживания колебаний автокорреляционной функции.

Для подробного изучения закономерностей изменения корреляции локальной плотности целесообразным является рассмотрение случайной упаковки частиц с малой плотностью. На практике такие порошковые материалы с существенно пористой макроструктурой (т.н. трехмерные капиллярно-пористые покрытия) недавно разработаны для использования в медицине [8]. На рис.1 приведены графики автокорреляционной функции $r(x, x')$ при начальной относительной плотности 0,25. Как видно из графиков, в начале прессования автокорреляционная функция практически зависит только от разности $x - x'$, отличаясь от нуля лишь вблизи биссектрисы $x=x'$. Следует отметить, что данный вид автокорреляционной функции характерен для стационарных случайных процессов [9]. Однако далее, с увеличением шага прессования, в переходной области корреляция плотности между столбцами матрицы повышается, автокорреляционная функция увеличивается (рис. 1). Как видно из графиков, при больших значениях шага прессования наблюдается медленное убывание автокорреляционной функции локальной плотности столбцов на больших расстояниях.

Коэффициент корреляции r локальной плотности различных столбцов в зависимости от шага прессования при начальной относительной плотности 0,25 приведен на рис. 2; здесь $d = x - x'$ — расстояние между столбцами. Как видно из данного графика, в начале прессования корреляция локальной плотности исчезает на расстоянии порядка $\approx 1-2$ столбцов (соответствует размеру частиц порошкового материала); практически коррелируют плотности только соседних слоев. Далее с увеличением шага прессования в переходной области радиус корреляции плотности между столбцами матрицы монотонно возрастает, достигая к началу процессов перколяции $\approx 7-9$ столбцов.

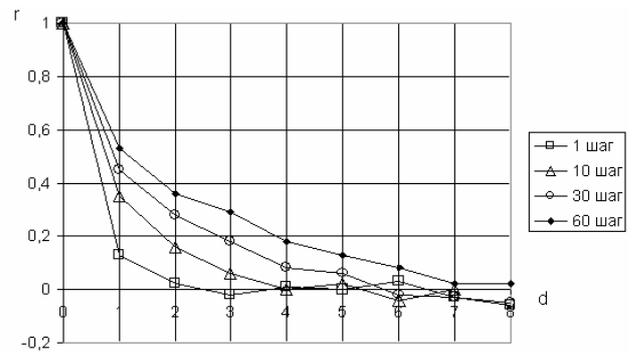


Рис. 2. Корреляция локальной плотности между столбцами в зависимости от шага прессования; начальная плотность 0,25; начальная матрица 100×100; усреднение по 1000 реализациям

Для приближения к реальным порошковым материалам была также исследована корреляция при высокой начальной плотности. При этом в процессе прессования автокорреляционная функция также практически зависит только от разности $x-x'$, отличаясь от нуля лишь вблизи биссектрисы $x=x'$. Это обусловлено тем, что при высокой плотности структура является более однородной; характеристики структуры — координационные числа близки к прямой линии, соответствующей равновесной упаковке частиц [5]. Данный вид автокорреляционной функции также характерен для стационарных случайных процессов [9]. Коэффициент корреляции r локальной плотности различных столбцов при начальной относительной плотности 0,75 в зависимости от шага прессования приведен на рис. 3. Как видно из данного графика, в процессе прессования коэффициент корреляции локальной плотности имеет низкое значение (до 0,1-0,2), наблюдаются только небольшие колебания. С ростом шага прессования корреляция немного повышается, однако к началу процессов перколяции не достигает существенных значений.

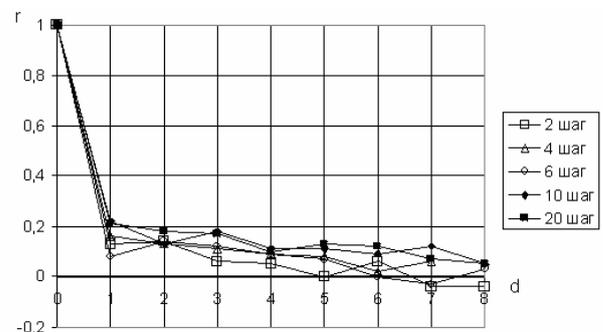


Рис. 3. Корреляция локальной плотности между столбцами в зависимости от шага прессования; начальная плотность 0,25; начальная матрица 100×100; усреднение по 1000 реализациям

Выводы:

1. Автокорреляционная функция локальной плотности макроструктуры прессованных порошковых материалов, независимо от начальной плотности, практически зависит только от расстояния между слоями частиц вдоль направления прессования; вид автокорреляционной функции является характерным для стационарных случайных процессов.

2. При небольшой начальной плотности наблюдается существенная корреляция локальной плотности слоев прессованных порошковых материалов и медленное убывание автокорреляционной функции локальной плотности на больших расстояниях.

3. При высокой начальной плотности наблюдается незначительная корреляция локальной плотности слоев прессованных порошковых материалов, практически коррелируют локальные плотности лишь соседних слоев. С ростом шага прессования корреляция немного повышается, однако не достигает существенных значений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. *Радомысльский, И.Д.* Некоторые особенности уплотнения порошков на разных стадиях прессования. / *И.Д. Радомысльский, Н.И. Щербань* // Порошковая металлургия. – 1980. - №11. – С. 12-19.

2. *Безухов, Н.И.* Основы теории упругости, пластичности и ползучести. – М.: Высшая школа, 1968. – 512 с.

3. *Петрова, Е.М.* Об уплотняемости порошков Fe, Co и Ni с добавками карбидов циркония, ниобия и молибдена / *Е.М. Петрова, Н.И. Щербань, В.М. Слепцов* // Порошковая металлургия. – 1969. - №7. – С. 7-12.

4. *Николаев, А.Н.* Связь между давлением и плотностью прессовок из металлических порошков // Порошковая металлургия. – 1975. - №6. – С. 32-42.

5. *Винокуров, Г.Г.* Статистические подходы для описания формирования и изнашивания макроструктуры порошковых покрытий и материалов, полученных высокоэнергетическими методами / *Г.Г. Винокуров, О.Н. Попов*. – М.: Academia, 2009. – 184 с.

6. *Каминский, В.М.* Двумерная стохастическая модель уплотнения порошковых материалов. / *В.М. Каминский, А.Н. Николенко, И.Я. Сидоренко* // Порошковая металлургия. – 1982. - №2. – С. 29-31.

7. *Рогозин, В.Д.* Уравнение прессования порошков // Порошковая металлургия. – 1981. - № 6. – С. 28-31.

8. *Гнедовец, А.Г.* Модель формирования макроструктуры покрытий при плазменном напылении / *А.Г. Гнедовец, В.И. Калина* // Физика и химия обработки материалов. – 2007. – №1. – С. 30-39.

9. *Рытов, С.В.* Введение в статистическую радиофизику. – М.: Наука, 1966. – 404 с.

RESEARCH BY MONTE-CARLO METHOD THE CORRELATION CHARACTERISTICS OF MOULDING POWDERED MATERIALS MACROSTRUCTURE

© 2010 G.G. Vinokurov¹, M.V. Fedorov¹, O.N. Popov²

¹ Institute of Physico-technical Problems of the North SB RAS

² Institute of Mathematics and Computer Science of Yakut State University

In paper by statistical modeling is studied macrostructure of the powdered materials gained by single-sided pressing. Program implementation of model in Paskal and Delphi languages is developed, calculations of auto-correlation function of local density of molded powdered materials are lead.

Key words: *Monte-Carlo method, powdered materials, macrostructure*

Gennadiy Vinokurov, Candidate of Technical Sciences, Leading Research Fellow. E-mail:

g.g.vinokurov@iptpn.ysn.ru

Michail Fyodorov, Leading Engineer. E-mail:

fedorov.83@mail.ru

Oleg Popov, Senior Teacher. E-mail: ponpon1@mail.ru