

УДК 539.215

МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛУЧАЙНОЙ УПАКОВКИ НАСЫПНОГО СЛОЯ ПОЛИДИСПЕРСНЫХ СФЕРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ

О. Б. Ковалев, И. О. Ковалева

Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН,
630090 Новосибирск, Россия
E-mails: kovalev@itam.nsc.ru, iokov1@yandex.ru

Предложена методика расчета структуры насыпной упаковки полидисперсных сферических частиц с заданной функцией распределения по размерам. При этом координаты центров частиц в насыпном слое определяются в результате случайного падения на подложку одиночных сфер под действием силы тяжести, в предположении неупругого столкновения шаров и с учетом силы их адгезионного взаимодействия, а также в предположении, что движение одной сферы по поверхности другой представляет собой чистое скольжение. Путем численного моделирования получена картина расположения полидисперсных сферических частиц в насыпном слое порошка, пористость которого зависит от функции распределения частиц по размерам. Проведено сравнение полученных результатов с известными экспериментальными данными.

Ключевые слова: сфера, зернистый слой, пористость, случайная упаковка, адгезия, чистое скольжение.

Введение. Насыпной слой частиц порошка представляет собой пористую среду, в которой частицы различных размеров расположены случайно, при этом плотность зернистой среды зависит от морфологии полученной упаковки. Интерес к проблеме упаковки дисперсных материалов обусловлен тем, что характеристики пористой структуры играют важную роль в различных природных явлениях и отраслях промышленности.

Использование аддитивных лазерно-порошковых технологий объемного формообразования и быстрого прототипирования (селективное лазерное плавление (selective laser melting (SLM)), селективное лазерное спекание (selective laser sintering (SLS))) позволяет с высокой точностью создавать детали практически любой сложности [1]. Характер протекающих процессов и свойства изделия или прототипа детали существенно зависят от структуры исходного насыпного слоя порошка. Структура зернистого слоя оказывает влияние на характер распространения и поглощения лазерного излучения, теплоперенос и плавление частиц, морфология насыпного слоя порошка зависит от формы отдельных частиц (рис. 1). Плотность упаковки является функцией морфологии порошка. Порошок со сферическими частицами имеет высокую плотность случайной упаковки, предпочтительную при селективном лазерном плавлении [2].

Важным этапом в технологиях SLM и SLS является моделирование упаковки свободно насыпанного слоя порошка (см. рис. 1), определяющего начальные условия всех протекающих впоследствии процессов.

В ряде работ (см., например, [3–8]) моделировались структуры случайной упаковки шаров в плоской, двумерной и трехмерной постановках.

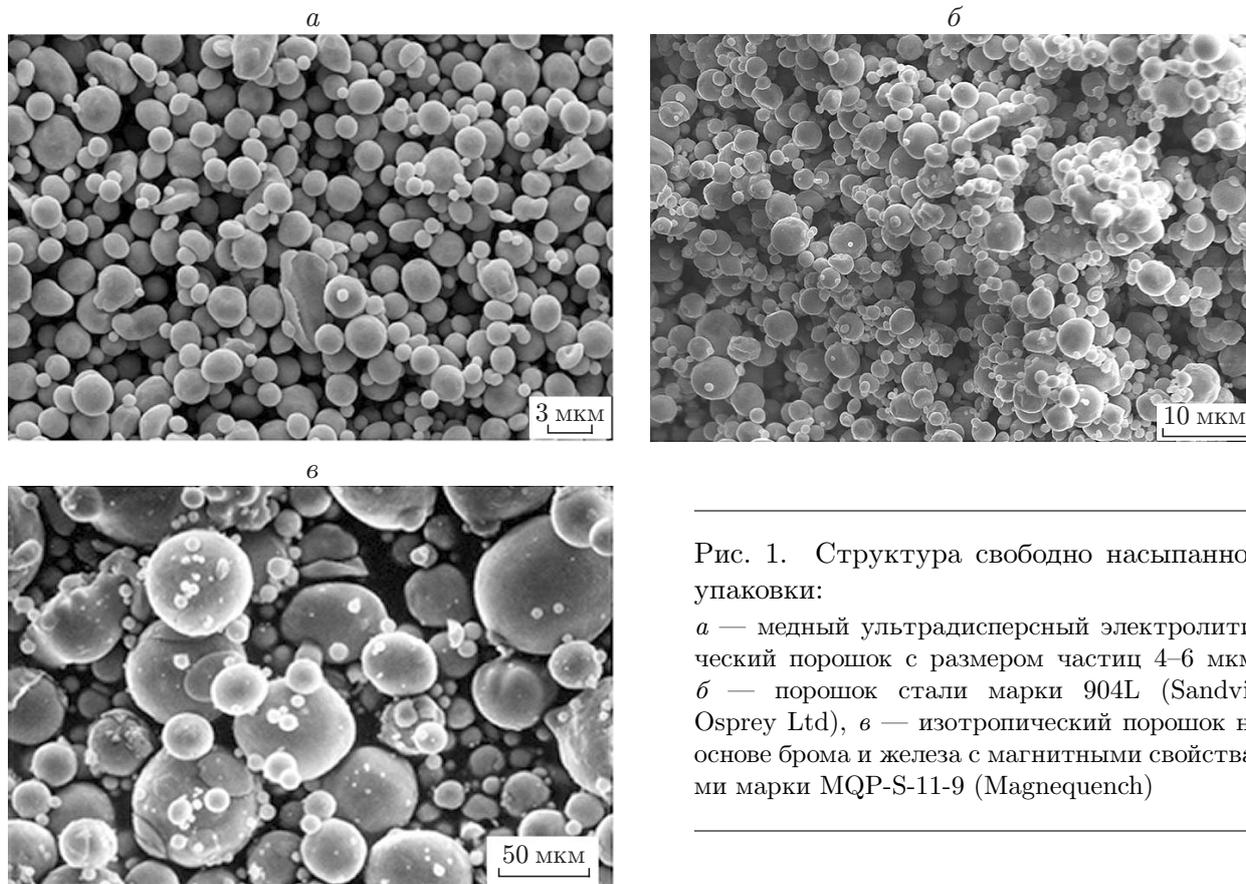


Рис. 1. Структура свободно насыпанной упаковки:

а — медный ультрадисперсный электролитический порошок с размером частиц 4–6 мкм, *б* — порошок стали марки 904L (Sandvik Osprey Ltd), *в* — изотропический порошок на основе брома и железа с магнитными свойствами марки MQP-S-11-9 (Magnequench)

В [3] построена статистическая модель случайной упаковки полидисперсных сфер без учета трения для описания геометрических свойств капельной эмульсии, позволяющая рассчитать распределение ближайших частиц, их контакты, локальные колебания плотности, среднюю плотность упаковки.

В [4] предложен простой алгоритм укладки сфер в кубическом ящике, основанный на их последовательном вбрасывании и движении под действием силы тяжести. Координаты точки вбрасывания сферы генерируются с помощью датчика случайных чисел. Рассматривается лишь упругое взаимодействие частиц. При этом трение и вращение частиц отсутствуют, осевшие твердые сферы остаются неподвижными, даже если на них попадает новая сфера. Каждая новая сфера становится неподвижной, когда сила тяжести уравновешивается упругими силами осевших сфер. Наличие при столкновении частиц упругих сил частично имитирует утряску частиц, что нарушает условия получения свободно насыпанной упаковки.

В работе [5] показана возможность численного моделирования случайной трехмерной упаковки полидисперсной совокупности частиц, которая используется в задачах фильтрации суспензий. Генерация упаковки осуществлялась путем последовательного вбрасывания частиц сферической формы со случайно выбранной координатой на верхней грани куба с единичным ребром. Математическая модель формулируется в терминах дискретных элементов с учетом сил адгезии, трения, упругого взаимодействия, сопротивления движению и др. Рассматриваемая система сил порождает момент, вызывающий вращение частиц с некоторой угловой скоростью (в [5] расчет этого момента не проводился). В [5] представлен достаточно сложный алгоритм реализации граничных условий.

При моделировании упаковок из частиц одинакового размера $2R = 1 \div 1000$ мкм в работах [6, 7] использован метод дискретных элементов [8] и рассмотрены механизмы взаимодействия мелких частиц с учетом их вращения и упругих свойств материала. Уравнения сохранения импульса и момента импульса записаны с учетом силы Ван-дер-Ваальса, описывающей адгезию частиц, а также нормальной и тангенциальной компонент силы контакта между частицами и силы тяжести. Метод дискретных элементов наиболее полно отражает характер процессов контактного взаимодействия частиц. Однако при этом в расчете упаковки из N частиц одинакового размера все частицы вбрасываются одновременно. В результате получается достаточно плотная упаковка, отличающаяся от случайной насыпной упаковки, структура которой анализируется на основе теории мозаики Вороного — Делоне.

Моделирование свободно насыпанной упаковки предполагает более полное и детальное рассмотрение механизмов контактного взаимодействия частиц: 1) движение одного шара по поверхности другого шара; 2) движение одного шара по поверхностям двух других шаров одновременно. Задача 1 обсуждается, например, в работах [8, 9], в которых предложены интегрируемые случаи ее решения, а представляющие интерес решения задачи 2 не известны.

В настоящей работе предложена компьютерная методика расчета структуры насыпной упаковки полидисперсных сферических частиц, основанная на решении задач о скольжении падающего шара по сферической поверхности одного или двух одновременно неподвижных шаров.

1. Постановка задачи и основные приближения. Алгоритм расчета координат центров частиц в насыпном слое основан на моделировании последовательности процессов бросания на подложку одиночных шаров. Моделирование свободно насыпанной упаковки порошка проводилось при следующих предположениях:

- рассматривается декартова система координат $OXYZ$;
- согласно второму закону Ньютона падение сферических частиц на подложку (плоскость $z = 0$) осуществляется под действием силы тяжести \mathbf{P} ;
- рассматривается N одиночных шаров, размеры которых имеют заданную функцию распределения $f(R)$, где R — радиус;
- начальные координаты центров шаров $F(x_0, y_0, z_0)$ задаются на некотором расстоянии от подложки $z_0 = z_{\max} > 0$, которое зависит от толщины насыпаемого слоя, при этом координаты x_0, y_0 выбираются с помощью датчика случайных чисел внутри заданного диапазона по осям OX и OY : $-x_{\max} < x_0 < x_{\max}$, $-y_{\max} < y_0 < y_{\max}$;
- взаимодействие при столкновении падающего шара с одним из уже осевших шаров считается абсолютно неупругим, поэтому в момент столкновения скорость падающего шара полагается равной нулю, при этом дальнейшее его движение происходит вдоль поверхности неподвижно лежащего шара в режиме чистого скольжения;
- одиночный шар, перемещающийся по поверхности другого шара, может отрываться и терять контакт, продолжая свободное падение;
- столкновение шара с одним из уже осевших шаров происходит с учетом адгезионного взаимодействия, в результате которого рассматриваемый шар может либо прилипнуть, либо продолжить свое движение по поверхности осевшего шара;
- движение брошенного j -шара вблизи поверхности i -шара, неподвижно лежащего на подложке или в твердом каркасе других шаров, рассматривается с учетом адгезии \mathbf{F}_{ij} , наличие которой обусловлено силами Ван-дер-Ваальса и выражение для которой имеет вид [7, 10]

$$\mathbf{F}_{ij} = -\frac{\text{На}}{6} \frac{64R_i^3 R_j^3 (h + R_i + R_j)}{(h^2 + 2R_i h + 2R_j h)^2 (h^2 + 2R_i h + 2R_j h + 4R_i R_j)^2} \mathbf{n}_{ij},$$

где Ha — константа Гамакера, которая для различных частиц металлов или керамики может принимать значения в диапазоне $10^{-20} \div 10^{-18}$ Дж [6, 7, 11, 12]; R_i, R_j — радиусы шаров; h — расстояние между сферами; \mathbf{n}_{ij} — единичный вектор, направленный от центра i -сферы к центру j -сферы;

— расстояние между сферами в режиме скольжения может меняться в диапазоне $h = 1 \div 100$ нм;

— движение брошенного шара прекращается, когда равнодействующая всех сил равна нулю.

2. Уравнения движения случайно брошенного шара при его контакте с другими шарами. Направления действующих сил и схема перемещения F -сферы с центром в точке $F(x_F, y_F, z_F)$ по поверхности неподвижной M -сферы с центром в точке $M(x_M, y_M, z_M)$ или M - и L -сфер одновременно показаны на рис. 2.

2.1. *Движение шара по поверхности неподвижного шара.* При движении F -сферы по поверхности неподвижной M -сферы (см. рис. 2, а) вектор скорости $\mathbf{V}_F = (u_F, v_F, w_F)$ перпендикулярен вектору \mathbf{MF} , лежащему на прямой линии, соединяющей центры сфер. Векторные уравнения движения имеют вид

$$m \frac{d\mathbf{V}_F}{dt} = \mathbf{P} + \mathbf{N}_{MF} + \mathbf{F}_{MF}; \tag{1}$$

$$\frac{d\mathbf{X}_F}{dt} = \mathbf{V}_F,$$

$$\mathbf{N}_{MF} = -\mathbf{n}_{MF}(\mathbf{P}, \mathbf{n}_{MF}) - \mathbf{n}_{MF}(\mathbf{F}_{MF}, \mathbf{n}_{MF}), \quad \mathbf{X}_F = (x_F, y_F, z_F), \tag{2}$$

$$\mathbf{F}_{MF} = -\frac{\text{Ha}}{6} \frac{64R_M^3 R_F^3 (h + R_M + R_F)}{(h^2 + 2R_M h + 2R_F h)^2 (h^2 + 2R_F h + 2R_M h + 4R_M R_F)^2} \mathbf{n}_{MF}.$$

Здесь t — время; $\mathbf{P} = (0, 0, -mg)$ — сила тяжести, направленная параллельно оси OZ ; m — масса; $g = 9,8 \text{ м/с}^2$ — ускорение свободного падения; \mathbf{N}_{MF} — нормальная составляющая силы реакции опоры в точках касания с M -сферой (эта сила возникает вследствие наличия силы тяжести \mathbf{P} и адгезии \mathbf{F}_{MF} и вычисляется через них); $\mathbf{n}_{MF} = \mathbf{MF}/|\mathbf{MF}|$ — единичный вектор нормали.

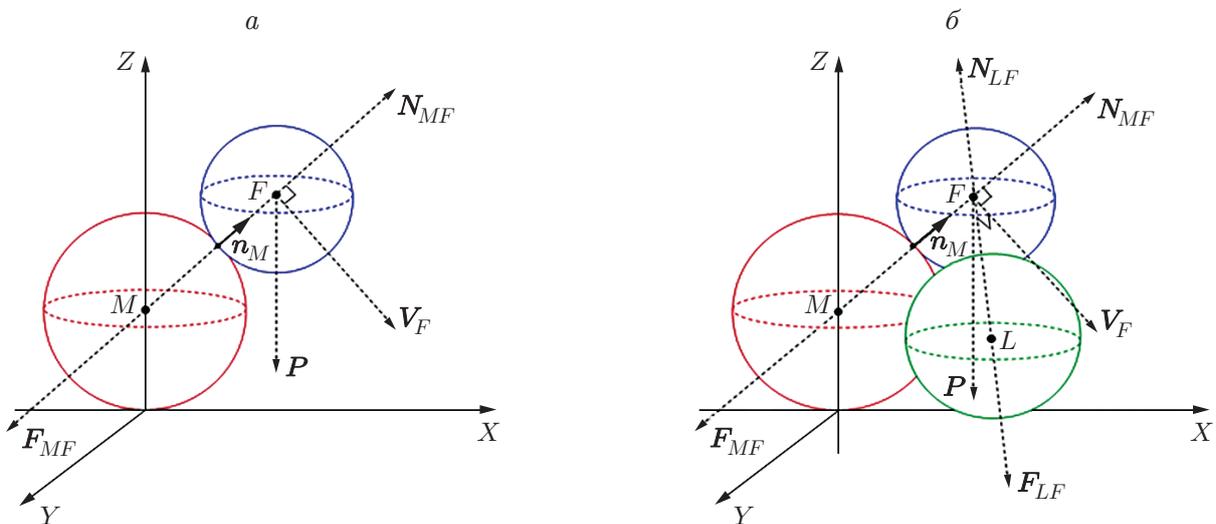


Рис. 2. Схема скольжения F -сферы по поверхности одной M -сферы (а) или двух M - и L -сфер одновременно (б), неподвижно лежащих на подложке

Уравнения (1), (2) позволяют рассчитать координаты центра и вектор скорости каждого брошенного шара в течение всего времени его движения с момента начала падения и появления контакта с подложкой или другими шарами, неподвижно лежащими на подложке, до момента полной остановки. Если выражение (1) умножить скалярно на вектор $\mathbf{V}_F = (u_F, v_F, w_F)$, то с учетом выполнения условий $(\mathbf{V}_F, \mathbf{n}_{MF}) = 0$, $(\mathbf{F}_{MF}, \mathbf{n}_{MF}) = 0$, $(\mathbf{V}_F, \mathbf{V}_F) = |\mathbf{V}_F|^2 \equiv V_0^2$ легко получить скалярное обыкновенное дифференциальное уравнение для модуля скорости V_0 . Тогда с учетом замыкающих соотношений векторные уравнения (1), (2) принимают скалярный вид

$$\frac{dV_0}{dt} = -\frac{gw_F}{V_0}; \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \frac{dx_F}{dt} &= u_F, & \frac{dy_F}{dt} &= v_F, & \frac{dz_F}{dt} &= w_F, \\ u_F &= V_0 \sin \theta \cos \varphi, & v_F &= V_0 \sin \theta \sin \varphi, & w_F &= -V_0 \cos \theta, \\ \sin \theta &= (z_F - z_M)/|\mathbf{MF}|, & \sin \varphi &= (y_F - y_M)/|\mathbf{MF}|. \end{aligned} \quad (4)$$

Движение F -сферы продолжается до тех пор, пока выполняется условие $z_F - z_M > 0$. При условии $z_F - z_M \leq 0$ F -сфера отрывается от поверхности M -сферы и вновь свободно падает.

2.2. Движение одной сферы по поверхностям двух неподвижных сфер одновременно.

В случае появления еще одного контакта, например с L -сферой, предполагается, что вектор скорости \mathbf{V}_F перпендикулярен обоим векторам \mathbf{MF} и \mathbf{LF} (см. рис. 2, б). При условии перпендикулярности векторов их скалярные произведения равны нулю: $(\mathbf{V}_F, \mathbf{MF}) = 0$, $(\mathbf{V}_F, \mathbf{LF}) = 0$.

Векторные уравнения движения F -сферы по поверхностям сфер M и L одновременно (см. рис. 2, б) в общем случае запишем в виде

$$m \frac{d\mathbf{V}_F}{dt} = \mathbf{P} + \mathbf{N}_{MF} + \mathbf{N}_{LF} + \mathbf{F}_{MF} + \mathbf{F}_{LF}; \quad (5)$$

$$\frac{d\mathbf{X}_F}{dt} = \mathbf{V}_F, \quad \mathbf{X}_F = (x_F, y_F, z_F),$$

$$\mathbf{N}_{MF} = -\mathbf{n}_{MF}(\mathbf{P}, \mathbf{n}_{MF}) - \mathbf{n}_{MF}(\mathbf{F}_{MF}, \mathbf{n}_{MF}), \quad \mathbf{N}_{LF} = -\mathbf{n}_{LF}(\mathbf{P}, \mathbf{n}_{LF}) - \mathbf{n}_{LF}(\mathbf{F}_{LF}, \mathbf{n}_{LF}).$$

Здесь \mathbf{N}_{MF} , \mathbf{N}_{LF} — нормальные составляющие силы реакции опоры в точках касания с M - и L -сферами, которые возникают при наличии силы тяжести \mathbf{P} и двух сил адгезии \mathbf{F}_{MF} , \mathbf{F}_{LF} ; $\mathbf{n}_{MF} = \mathbf{MF}/|\mathbf{MF}|$, $\mathbf{n}_{LF} = \mathbf{LF}/|\mathbf{LF}|$ — единичные векторы нормали.

Умножая скалярно выражение (5) на $\mathbf{V}_F = (u_F, v_F, w_F)$, с учетом выполнения условий $(\mathbf{V}_F, \mathbf{n}_{MF}) = 0$, $(\mathbf{V}_F, \mathbf{n}_{LF}) = 0$, $(\mathbf{F}_{MF}, \mathbf{n}_{MF}) = 0$, $(\mathbf{F}_{LF}, \mathbf{n}_{LF}) = 0$, $(\mathbf{V}_F, \mathbf{V}_F) = |\mathbf{V}_F|^2 \equiv V_0^2$ получаем замкнутую систему скалярных уравнений

$$\frac{dV_0}{dt} = -\frac{gw_F}{V_0}; \quad (6)$$

$$\frac{dx_F}{dt} = u_F, \quad \frac{dy_F}{dt} = v_F, \quad \frac{dz_F}{dt} = w_F; \quad (7)$$

$$(x_F - x_M)u_F + (y_F - y_M)v_F + (z_F - z_M)w_F = 0; \quad (8)$$

$$(x_F - x_L)u_F + (y_F - y_L)v_F + (z_F - z_L)w_F = 0; \quad (9)$$

$$V_0^2 = u_F^2 + v_F^2 + w_F^2. \quad (10)$$

Если сумма составляющих реакций всех опор уравновешивает силу тяжести, брошенная сфера становится неподвижной, при этом она может касаться или не касаться подложки и контактировать или не контактировать с соседними сферами.

Средние значения пористости насыпной упаковки порошка

Материал порошка	Марка порошка, производимого фирмой Sandvik Osprey Ltd.	2R, мкм	ε, %	
			Данные эксперимента [2]	Расчетные данные
Сталь	904L	≤16	56	53
Кобальт	Co212-F	16 ÷ 31	39	42

3. Результаты расчетов. Для решения уравнений (3), (4) и (6)–(10) использовался метод Рунге — Кутты четвертого порядка точности с переменным шагом по времени. Начальные координаты и радиусы шаров вычислялись с помощью датчика случайных чисел с учетом заданной функции распределения по размерам. Расчеты проводились для двух типов порошка, различающихся материалом и размерами частиц. Используемые в расчетах функции распределения по размерам представлены на рис. 3.

3.1. *Расчеты без учета силы адгезии.* Первоначально расчеты по предложенному выше алгоритму выполнялись без учета адгезионного взаимодействия частиц. На рис. 4 представлены результаты расчета свободно насыпанной упаковки порошка без учета силы адгезии с использованием функции распределения по размерам, приведенной на рис. 3,а. Заметим, что под действием силы тяжести все мелкие частицы проходят через скелет из крупных частиц и оседают в нижней части насыпного слоя.

3.2. *Расчеты с учетом силы адгезии.* Результаты расчета свободно насыпанной упаковки порошка с учетом адгезионных сил и с использованием функции распределения по размерам, приведенной на рис. 3,б, показаны на рис. 5, 6. Влияние силы адгезии выражается в том, что более мелкие частицы прилипают к более крупным. Структура насыпного слоя, расположение частиц в полученных упаковках свидетельствуют о качественном соответствии результатов расчетов (см. рис. 5, 6) и реально наблюдаемой морфологии (см. рис. 1).

Расчет пористости проводился приближенно. Объем, занятый насыпным слоем, разделялся на кубические сегменты, размеры которых значительно превышали диаметр наиболее крупных частиц. В каждом таком сегменте занятый частицами объем суммировался:

$$W_p = \frac{4\pi}{3} \sum_j R_j^3 \text{ и определялась пористость } \varepsilon = 1 - W_p/W_S \text{ (} W_S \text{ — объем сегмента).}$$

Суммирование проводилось по всем частицам, координаты центров которых попадали в область рассматриваемого сегмента. На рис. 7 показаны распределения пористости внутри свободно насыпанных слоев. Средние значения пористости насыпной упаковки порошков приведены в таблице.

Заключение. Разработана методика трехмерного расчета структуры насыпного зернистого слоя, в котором сферы различных размеров расположены в случайном контакте друг с другом. Структура насыпного слоя рассчитывается в предположении о неупругом столкновении шаров с учетом силы адгезионного взаимодействия, при этом полагается, что движение одной сферы по поверхности другой представляет собой чистое скольжение.

Модель позволяет проследить поведение каждой сферы в течение всего времени движения с момента начала падения и появления одного или двух контактов с другими частицами, лежащими на подложке, до момента полной остановки при наличии трех контактов одновременно.

Сравнение рассчитанной компьютерной морфологии насыпных упаковок и морфологии реальных упаковок позволяет сделать вывод, что результаты расчетов и экспериментальные данные качественно согласуются.

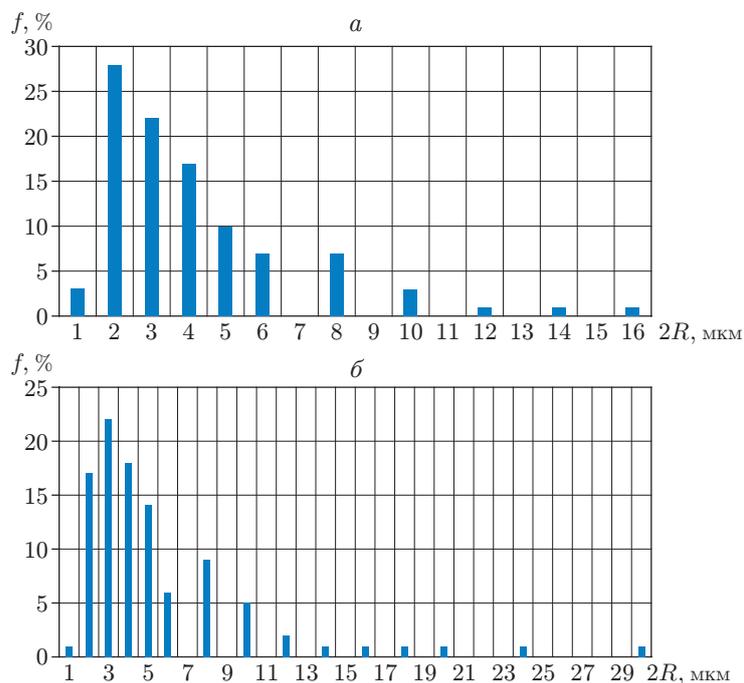


Рис. 3. Распределение частиц порошка по размерам [2]:
 а — сталь марки 904L, б — кобальт марки Co212-F

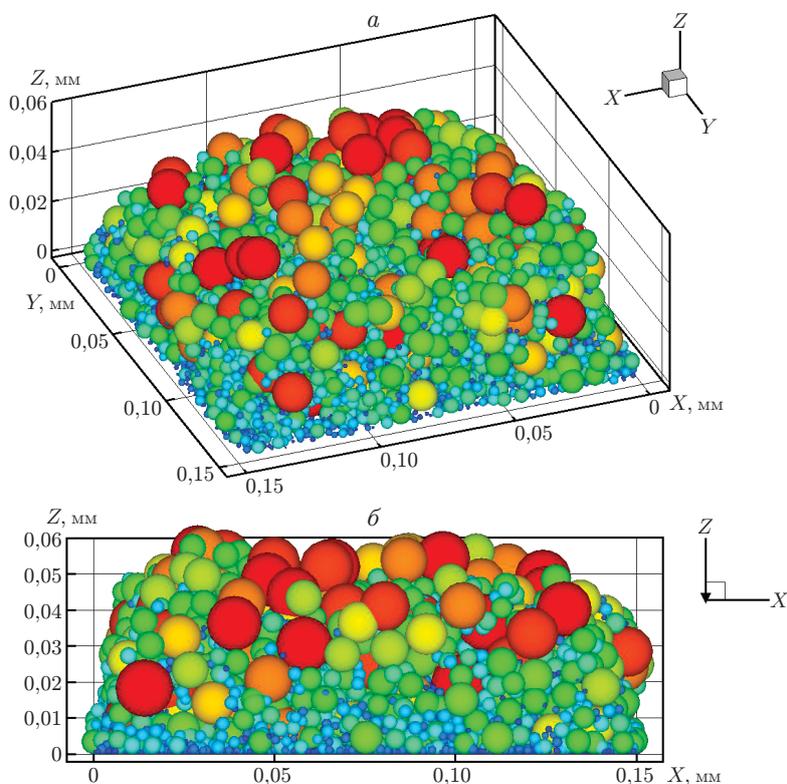


Рис. 4. Морфология насыпной упаковки частиц размером $2R \leq 16 \text{ мкм}$, рассчитанная без учета адгезионного взаимодействия:
 а — трехмерный план, б — проекция на плоскость OXZ ($N = 25\,000$, размеры зернистого слоя — $150 \times 150 \times 60 \text{ мкм}$)

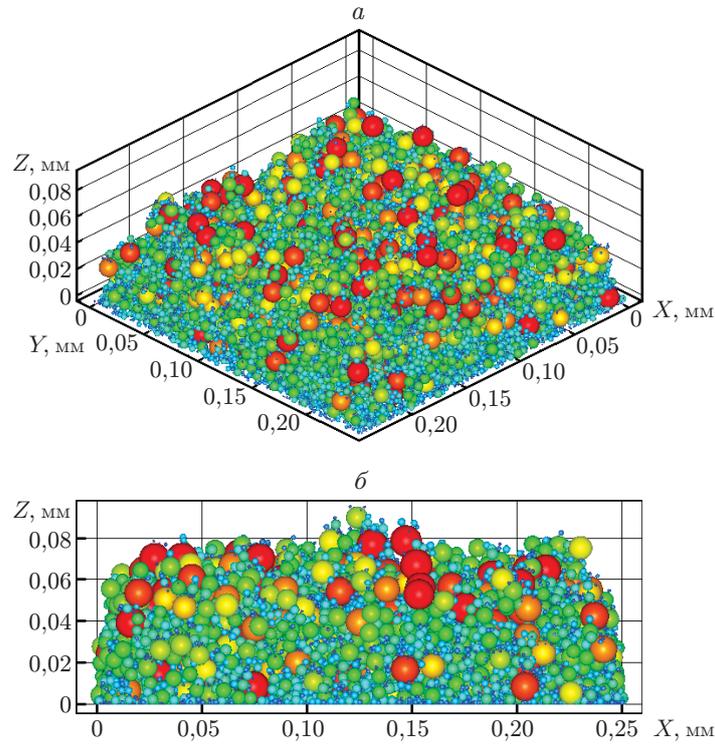


Рис. 5. Морфология насыпной упаковки частиц размером $2R \leq 16$ мкм, рассчитанная с учетом адгезионных сил:
a — трехмерный план, *б* — проекция на плоскость *OXZ* ($N = 30\,000$, размеры зернистого слоя — $250 \times 250 \times 80$ мкм)

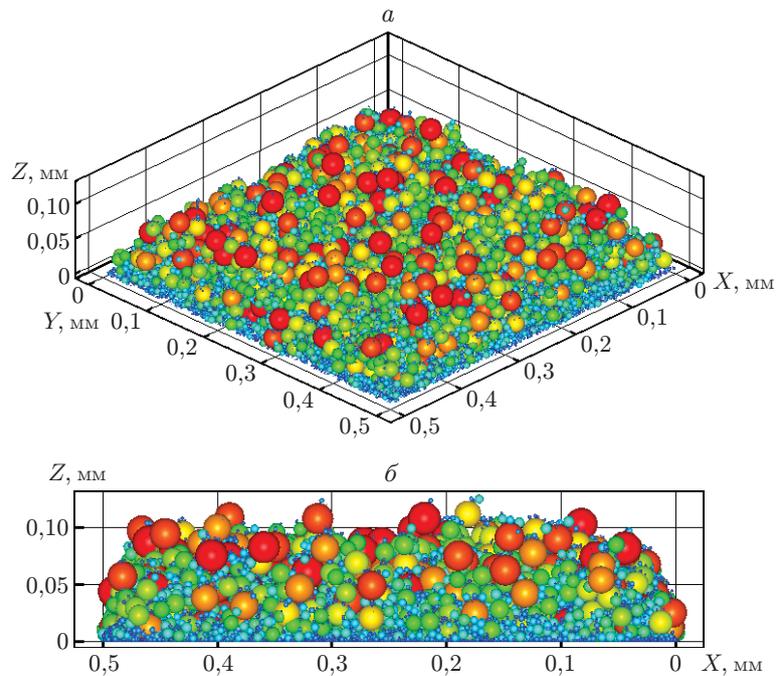


Рис. 6. Морфология насыпной упаковки частиц размером $16 \text{ мкм} \leq 2R \leq 30 \text{ мкм}$, рассчитанная с учетом адгезионных сил:
a — трехмерный план, *б* — проекция на плоскость *OXZ* ($N = 35\,000$, размеры зернистого слоя — $500 \times 500 \times 100$ мкм)

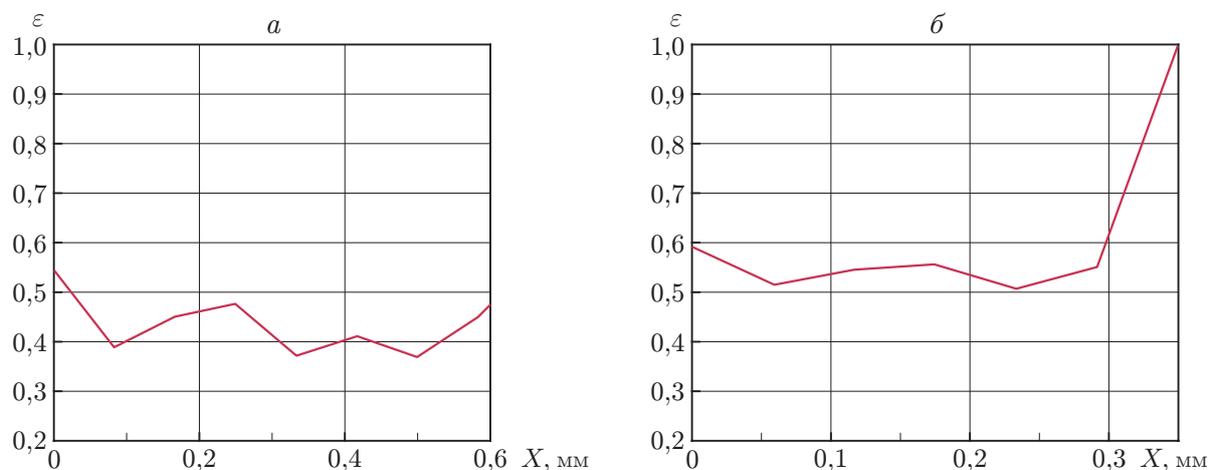


Рис. 7. Зависимость пористости внутри насыпной упаковки от координаты X при $Y = 0,1$ мм:

a — функция распределения частиц размером $2R \leq 16$ мкм при толщине слоя 80 мкм,
 b — функция распределения частиц размером $16 \text{ мкм} \leq 2R \leq 30$ мкм при толщине слоя 100 мкм

Рассчитаны средние значения пористости внутри насыпного слоя порошка для двух функций распределения по размерам, согласующиеся с данными экспериментов.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Шипковский И. В.** Лазерный синтез функционально-градиентных мезоструктур и объемных изделий. М.: Физматлит, 2009.
2. **Yadroitsev I.** Selective laser melting. Saarbrückened: Lambert Acad. Publ., 2010.
3. **Corwin E. I., Clusel M., Siemens O. N., et al.** Model for ransom packing of polydisperse frictionless // Soft Matter. 2010. N 6. P. 2945–2959.
4. **Taguchi I., Kurashige M., Imai K.** Effect of cubic container's wall or floor on random packing structures of spherical particles // JSME. Intern. J. Ser. A. 2006. V. 49, N 2. P. 265–272.
5. **Дик И. Г., Дьяченко Е. Н., Миньков Л. Л.** Моделирование случайной упаковки шаров // Физ. мезомеханика. 2006. Т. 9, № 4. С. 63–69.
6. **Yang R. Y., Zou R. P., Yu A. B.** Effect of material properties on the packing of fine particles // J. Appl. Phys. 2003. V. 94, N 5. P. 3025–3034.
7. **Yang R. Y., Zou R. P., Yu A. B.** Pore structure of the packing of fine particles // J. Colloid Interface Sci. 2006. V. 299. P. 719–725.
8. **Раус Э. Дж.** Динамика системы твердых тел. М.: Наука, 1983. Т. 2.
9. **Борисов А. В., Мамаев И. С.** Качение неоднородного шара по сфере без скольжения и вращения // Нелинейная динамика. 2006. Т. 2, № 4. С. 445–452.
10. **Cundall P. A., Strack O. D. L.** A discrete numerical model for granular assemblies // Géotechnique. 1979. V. 29, iss. 1. P. 47–65.
11. **Hamaker H. C.** The London-van der Waals attraction between spherical particles // Physica IV. 1937. N 10. P. 1058–1072.
12. **Israelachvili J. N.** Intermolecular and surface forces. L.: Academic, 1991.