



S. Nosewicz, J. Rojek, Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN, Warszawa

MODELOWANIE SPIEKANIA PROSZKÓW METODĄ ELEMENTÓW DYSKRETNYCH

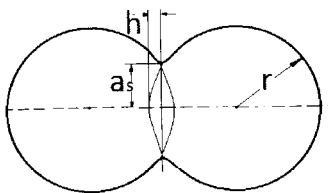
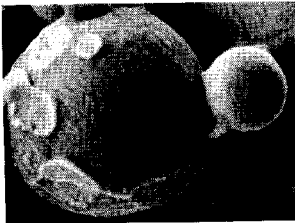
W technologii metalurgii proszków spiekanie jest jednym z podstawowych procesów technologicznych, podczas którego zdyspergowany materiał pod wpływem obróbki termicznej zostaje przekształcony (bez topienia materiału) w ciało polikrystaliczne. Jedną z metod służących do modelowania procesu spiekania jest metoda elementów dyskretnych, w której materiał reprezentowany jest jako zbiór sztywnych ciał, zwanych elementami dyskretnymi, oddziałujących między sobą poprzez siły kontaktu. W niniejszej pracy wykorzystano program metody elementów dyskretnych DEMpack. Zaproponowano model numeryczny spiekania swobodnego oraz model spiekania pod ciśnieniem. Poprawność implementacji numerycznej zbadano dla spiekania dwóch ziaren, a następnie przeprowadzono obliczenia dla modelu składającego się z kilkuset cząstek. Wyniki numeryczne ewolucji gęstości próbki porównano z wynikami doświadczalnymi otrzymując dużą zgodność. Dodatkowo szukano sposobu na zredukowanie czasu obliczeń numerycznych. W tym celu przeanalizowano skalowanie gęstości oraz lepkości cząstek. Badania potwierdziły zdecydowaną poprawę efektywności obliczeń.

1. Wstęp

Spiekanie jest szeroko stosowanym procesem wytwarzania materiałów granulowanych, podczas którego pod wpływem obróbki termicznej materiał w sypkiej postaci zostaje przekształcony w ciało polikrystaliczne. W procesie spiekania strefy kontaktu między cząstkami proszku, wytworzone podczas obróbki mechanicznej (prasowanie) oraz obróbki cieplnej umożliwiającej procesy dyfuzyjne (spiekanie), zostają przekształcone w połączenia o większej wytrzymałości (szyjki). Równolegle w strukturze spiekanego materiału zachodzi spadek porowatości i wzrost wielkości ziarna, co prowadzi w konsekwencji do wzrostu gęstości materiału. Do głównych mechanizmów transportu masy podczas spiekania należą procesy dyfuzyjne, z których najbardziej efektywnym jest proces dyfuzji po granicach ziaren oraz dyfuzja powierzchniowa.

Modelowanie materiałów, oraz modelowanie procesów wytwarzania materiałów, jest istotnym narzędziem do dogłębnej analizy zjawisk fizycznych. Metoda elementów dyskretnych reprezentuje materiał jako zbiór elementów, które oddziałują między sobą poprzez siły kontaktu. Przewagą modeli dyskretnych nad modelami ciągłymi jest uwzględnienie istoty materiałów granulowanych - nieciągłości, porowatości oraz rozdrobnienia materiału.

Ze względu na swoje szerokie możliwości, metoda elementów dyskretnych (MEID) jest stosowana do modelowania procesów prasowania materiałów granulowanych [1, 2, 3]. Wykorzystuje się ją również w modelowaniu spiekania. Geometryczny model spiekania został zaprezentowany przez Coble'a [4], który przedstawił podstawowe zależności geometryczne w spiekanych cząstkach. Na bazie tego Bouvard i McMeeking [5] analizowali zachowanie spiekanych swobodnie cząstek kontrolowanych mechanizmami dyfuzyjnymi, co zostało następnie



Rysunek 1: Przedstawienie połączenia między cząstkami : obraz mikrostruktury (z lewej) oraz schemat geometryczny (z prawej).

wykorzystane w pracy McMeeking'a [6], która przedstawia zależności na siły kontaktu występujące pomiędzy oddziaływującymi cząstkami. Obok wyżej wspomnianych autorów metodę elementów dyskretnych w modelowaniu procesu spiekania wykorzystał Martin [8, 9] weryfikując otrzymane wyniki numeryczne z danymi doświadczalnymi.

W niniejszej pracy zaproponowano model numeryczny spiekania swobodnego, za pomocą którego analizowano spiekanie dwóch cząstek, oraz model spiekania pod ciśnieniem, który zastosowano do modelu składającego się z kilkuset cząstek. W celu weryfikacji modelu numerycznego, otrzymane dane wyjściowe (gęstość względna próbki) porównano z wynikami doświadczalnymi. Następnie w celu redukcji czasu obliczeń numerycznych przeanalizowano skalowanie gęstości oraz lepkości cząstek.

2. Model numeryczny

2.1. Spiekanie swobodne

W niniejszym podrozdziale został przedstawiony model spiekania swobodnego dwóch cząstek. Materiał został uprzednio poddany prasowaniu. Na podstawie analizy geometrycznej dwóch cząstek wyprowadzono zależność na początkową wartość promienia strefy kontaktu (szyjki) po prasowaniu :

$$a_0^2 = rh \quad (1)$$

W omawianym modelu dominującym mechanizmem transportu masy jest dyfuzja powierzchniowa oraz dyfuzja po granicach ziaren. Schemat reologiczny spiekania swobodnego przedstawiony został na rysunku 2A. Siła kontaktu w kierunku normalnym F , przedstawiona w pracy [6] oraz opisana zależnością (2), składa się z siły spiekania związanej z napięciami powierzchniowymi F_s (pierwszy człon po prawej stronie), oraz siły lepkościowej F_v (drugi człon po prawej stronie).

$$F = \pi \varphi_s \left[4r \left(1 - \cos \frac{\Psi}{2} \right) + a_s \sin \frac{\Psi}{2} \right] - \eta V \quad (2)$$

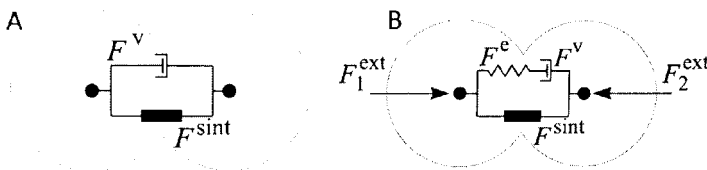
gdzie: φ_s - energia powierzchniowa, Ψ - kąt dwuścienny, $\eta = \frac{\pi a_s^4}{8D_b}$ - lepkość cząstek, $D_b = \frac{D_g \delta_g \Omega}{kT}$ - efektywny współczynnik dyfuzji po granicach ziaren, D_g - współczynnik dyfuzji dla transportu wakansów po granicach ziaren z grubością δ_g , Ω - objętość atomowa.

Wielkość a_s oznacza promień szyjki w danej chwili czasu, a jej rozrost opisany jest zależnością (3) [4]:

$$\frac{da_s}{dt} = \frac{r}{a_s} \frac{dh}{dt} \quad (3)$$

Proces spiekania dobiega końca w chwili osiągnięcia stanu równowagi opisanego promieniem szyjki a_{eq} :

$$a_{eq} = r \sin \frac{\psi}{2} \quad (4)$$



Rysunek 2: Schemat reologiczny spiekania swobodnego (po lewej) oraz pod ciśnieniem (po prawej).

2.2. Spiekanie pod ciśnieniem

Model reologiczny spiekania swobodnego został wzbogacony o element sprężysty o sztywności k_n , który jest połączony szeregowo z elementem tłumiącym o lepkości η (rysunek 2B). Oznacza to, że w jednej z połączonych równolegle gałęzi znajduje się element Maxwella, dla którego zachodzi następująca zależność:

$$V = V^e + V^v = \frac{F^e}{k_n} + \frac{F^e}{\eta} \quad (5)$$

W celu wyznaczenia siły sprężystości F^e konieczne jest całkowanie równania względem czasu, co przedstawia zależność (6). Dla danego zagadnienia wybrano jawny schemat całkowania metodą różnic centralnych.

$${}^{n+1}F^e = {}^nF^e + \Delta F^e = \frac{{}^{n+\frac{1}{2}}V\Delta t + {}^nF^e \left(\frac{1}{k_n} + \frac{\Delta t}{2^{(n+1/2)}\eta} \right)}{\frac{1}{k_n} + \frac{\Delta t}{2^{(n+1/2)}\eta}} \quad (6)$$

2.3. Skalowanie parametrów modelu

Metodę skalowania parametrów modelu numerycznego stosuje się w celu redukcji czasu obliczeń numerycznych, którą można osiągnąć poprzez skrócenie czasu procesu lub zwiększenie krytycznego kroku całkowania. Skalowanie gęstości było stosowane w szeregu prac [3, 7]. Skalowanie wielkości fizycznych opiera się na teorii podobieństwa przepływów

dwoch rozpatrywanych modeli. Analiza równań ruchu modelu oryginalnego oraz przeskalowanego:

$$\frac{m}{\eta} \frac{dV}{dt} + V = \frac{F_{sint}}{\eta} \quad ; \quad \frac{\dot{m}}{\dot{\eta}} \frac{d\dot{V}}{dt} + \dot{V} = \frac{F'_{sint}}{\dot{\eta}} \quad (7)$$

oraz zależności pomiędzy nimi:

$$\dot{m} = \frac{m}{\alpha_m} = \frac{dv}{\alpha_d \alpha_v} \quad ; \quad \dot{\eta} = \frac{\eta}{\alpha_\eta} \quad ; \quad \dot{V} = \frac{V}{\alpha_v} \quad ; \quad \dot{t} = \frac{t}{\alpha_t} \quad ; \quad F'_{sint} = \frac{F_{sint}}{\alpha_{F_{sint}}} \quad (8)$$

prowadzi do otrzymania zależności opisującej warunek podobieństwa dwóch modeli, szeroko stosowany w mechanice płynów [10]:

$$\frac{\alpha_\eta \alpha_t}{\alpha_d \alpha_v \alpha_v} = \frac{1}{\alpha_v} = \frac{\alpha_t}{\alpha_t} = \frac{\alpha_\eta}{\alpha_{F_{sint}}} \quad (9)$$

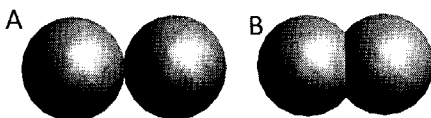
Jeżeli powyższa wartość jest spełniona, to pomiędzy modelami zachodzi podobieństwo całkowite. W przypadku częściowego spełnienia warunku podobieństwa, występuje podobieństwo częściowe.

3. Wyniki numeryczne

Model został zweryfikowany oraz skalibrowany poprzez symulację spiekania swobodnego dwóch cząstek. Dane wejściowe wykorzystywane w symulacjach numerycznych zostały zaczerpnięte z pracy [6] oraz przedstawione w tabeli 1:

Początkowa penetracja h_0 [μm]	Promień cząstki r [μm]	Temperatura spiekania T [$^{\circ}\text{C}$]	Energia powierzchniowa γ [J/m^2]
10^{-9}	22.5	1027	1.72
Współczynnik dyfuzji $D_g \delta_g$ [m^3]	Objętość atomowa Ω [m^3]	Kąt dwuścienny Ψ [$^{\circ}$]	Gęstość cząstek d [kg/m^3]
$3.83 \cdot 10^{-29}$	$1.18 \cdot 10^{-29}$	146	$8.92 \cdot 10^3$

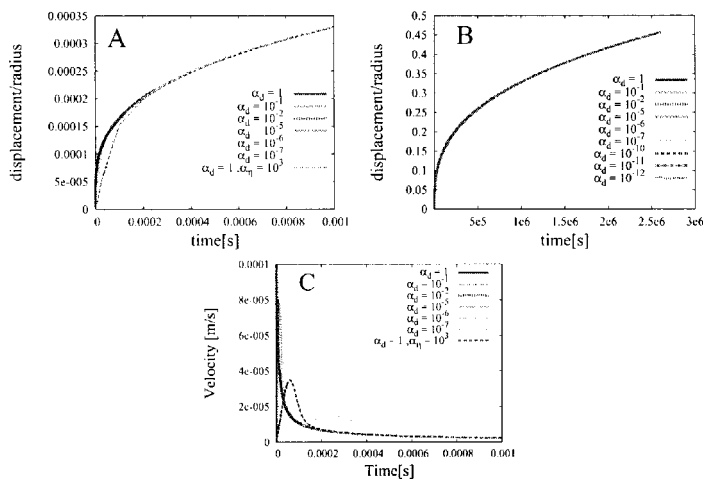
Tabela 1: Dane wejściowe użyte w omawianych symulacjach numerycznych



Rysunek 3: Symulacja spiekania dwóch cząstek : A - na początku procesu, B - na końcu procesu

Rysunek 3A pokazuje dwie identyczne cząstki w początkowej fazie spiekania. Rysunek 3B przedstawia cząstki w stanie równowagi w końcowej fazie spiekania. Wykres zależności przemieszczenia względnego oraz prędkości względnej cząstek od czasu przedstawia rysunek 4.

W niniejszej analizie modelu spiekania swobodnego wykorzystano skalowanie gęstości d oraz lepkości cząstek η jako efektywny sposób redukcji czasu obliczeń. W celu określenia

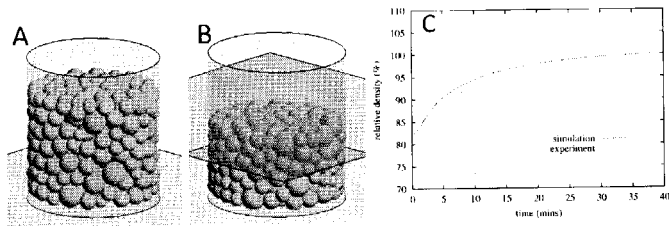


Rysunek 4: Wykresy zależności przemieszczenia względnego oraz prędkości względnej od czasu dla modelu oryginalnego oraz modeli skalowanych : wykres A - przemieszczenie w początkowej fazie symulacji, wykres B - przemieszczenie dla całego przebiegu symulacji, wykres C - prędkość w początkowej fazie symulacji.

wplywu skalowania omawianych parametrów na wyniki symulacji (względne przemieszczenie cząstek, względna prędkość cząstek oraz czas procesu), przeprowadzono szereg symulacji numerycznych różniących się stopniem przeskalowania gęstości oraz lepkości cząstek. Wykorzystano podobieństwo częściowe dwóch modeli numerycznych.

Na podstawie analizy wykresów 4A, 4B oraz 4C zauważono, że skalowanie gęstości ma wpływ na wartości przemieszczenia względnego oraz prędkości względnej jedynie w początkowej fazie symulacji. Wraz ze wzrostem współczynnika skalowania gęstości cząstek wartość przemieszczenia względnego (rysunki 4 A i B) oraz prędkości względnej cząstek (rysunek 4 C) rośnie wolniej, później osiągając stan oryginalny przebiegu symulacji bez skalowania. Dodatkowo przeanalizowano wpływ skalowania lepkości na wyniki symulacji numerycznej spiekania swobodnego. Zauważono, że skalowaniu lepkości towarzyszy zmiana wartości czasu symulacji oraz prędkości cząstek. Wzrost wartości η powoduje spadek wartości t oraz wzrost wartości V . W związku z tym powyższe wartości przeskalowano "wstecz", aby w ten sposób odnieść otrzymane wyniki do wykresu oryginalnego. Ponadto wykresy na rysunku 4 pokazują pokrywające się krzywe symulacji ze skalowaną gęstością ($\alpha_d = 10^{-6}$) oraz symulacji ze skalowaną lepkością ($\alpha_\eta = 10^3$). Powyższy fakt można wytłumaczyć teorią podobieństwa całkowitego między dwoma modelami (równanie 9).

Dodatkowo w niniejszej pracy przeprowadzono symulację spiekania pod ciśnieniem ($p = 30$ MPa), gdzie analizowano próbkę złożoną z 350 cząstek - rysunek 5 A. Rysunek 5 B przedstawia spiekaną próbkę w ostatniej fazie symulacji. Widoczny jest wyraźny skurcz materiału. Wyniki symulacji porównano do wyników doświadczalnych przeprowadzonych w pracy [11], co zostało zaprezentowane na wykresie 5C.



Rysunek 5: Wykres ewolucji gęstości względnej próbki w czasie - porównanie wyników eksperymentalnych oraz numerycznych.

4. Wnioski końcowe

Metoda elementów dyskretnych jest dogodnym narzędziem do modelowania spiekania proszków. Otrzymane wyniki świadczą o dużym potencjale omawianej metody, jednak dalszy rozwój metody jest niezbędny. Dodatkowo potwierdzono pozytywny wpływ skalowania gęstości oraz lepkości na poprawę efektywności obliczeń.

Podziękowanie

Praca naukowa finansowana ze środków Programu Operacyjnego: Innowacyjna Gospodarka 2007-2013 w ramach projektu badawczego KomCerMet: „Kompozyty i nanokompozyty ceramiczno-metalowe dla przemysłu lotniczego i samochodowego”.

5. Literatura

- [1] P.R. Heyliger, R.M. Mc Meeking : *Cold Plastic Compaction of Powders by a Network Model*, J. Mech. Phys. Solids, Vol.49, 2001
- [2] C.L. Martin, D. Bouvard, S. Shima : *Study of particle rearrangement during powder compaction by the Discrete Element Method*, J. Mech. Phys. Solids, Vol.51, 2003
- [3] C.L. Martin, D. Bouvard : *Study of the cold compaction of composite powders by the Discrete Element Method*, J. Mech. Phys. Solids, Vol.51, 2003
- [4] R.L.Coble : *Initial Sintering of Alumina and Hemattite*, Journal of The American Ceramic Society, Vol.41, 1958
- [5] D. Bouvard, R.M. Mc Meeking : *Deformation of Interparticle Necks by Diffusion-Controlled Creep*, J. Am. Ceram. Soc., Vol.79, 1996
- [6] F. Parhami, R.M. McMeeking : *A network model for initial stage sintering*, Mechanics of Materials, Vol.27, 1998
- [7] B. Henrich, A. Wonisch, T. Kraft, M. Mosler, H. Riedel : *Simulations of the influence of rearrangement during sintering*, Acta Materialia, Vol.55, 2007
- [8] C.L. Martin, L.C.R. Schneider, L. Olmos, D. Bouvard : *Discrete element modeling of metallic powder sintering*, Scripta Materialia, Vol.55, 2006
- [9] L.Olmos, C.L.Martin, D.Bouvard : *Sintering of mixtures of powders: Experiments and modelling*, Scripta Materialia, Vol.55, 2006 425-428
- [10] K. Jeżowiecka - Kabsch, H. Szewczyk : *Mechanika Płynów*, Oficyna Politechniki Wrocławskiej, 2001
- [11] J.Rojek, K.Pietrzak, M.Chmielewski, D.Kaliński, S.Nosewicz : *Discrete element simulation of powder sintering*, Computer Methods In Materials Science, Vol.11, 2011

DISCRETE ELEMENT MODELLING OF POWDER SINTERING

This paper presents numerical modelling of powder sintering. The numerical model introduced in this work employs the discrete element method which assumes that material can be modelled by a large assembly of discrete elements (particles) of spherical shape interacting among one another. The model implementation has been verified and calibrated using a simple example of free sintering of two particles. Model of stress assisted sintering which consist of 350 particles was also analysed. Numerical studies of sintering have been supplemented with experimental data which was taken from literature. Comparison of numerical and experimental results shows a good performance of the numerical model developed.