И.Н. Лецко // Известия НАН Беларуси. Сер. физ.-техн. наук. – 2007. – № 3. – С. 21–26.

**4.** Либенсон, Г.А. Производство порошковых изделий / Г.А. Либенсон. – М.: Металлургия, 1990. – 240 с.

**5.** Pollock, C.B. The eta carbides in the Fe-W-C and Co-W-C systems / C.B. Pollock, H.H. Stadelmaier // Metallurgical and Materials Transactions B. -1970. - Vol. 1, No 4. - pp. 767–770.

**6.** Витязь, П.А. Исследование структурно-фазового состояния и свойств спеченных сплавов, модифицированных наноразмерными алмазосодержащими добавками / П.А. Витязь, В.И. Жорник, В.А. Кукареко // Известия НАН Беларуси. Серия физ.-техн. наук. – 2011. – № 3. – С. 5–17.

УДК 621.771, 004.94

#### К.Е. БЕЛЯВИН, д-р техн. наук, А.Н. БЕЛЫЙ (БНТУ), А.А. АБРАМОВ (ОИПИ НАНБ<sup>1</sup>)

# КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ ПОРОШКОВЫХ АНТИФРИКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ\*

В машиностроении используется большое количество антифрикционных изделий – подшипников скольжения, направляющих, втулок, вкладышей, применяемых в различных узлах трения машин и механизмов.

Одним из перспективных направлений получения таких изделий являются биметаллические композиции, состоящие из стальной основы со спеченным пористым слоем порошка бронзы.

Трудностью получения таких антифрикционных изделий является малая толщина стальной основы (1,5–3 мм) и слоя бронзового порошка (1–1,5 мм), а также существенная разница в температурах плавления материалов композиции.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Объединенный институт проблем информатики НАН Беларуси

Компьютерное моделирование позволяет за счет выбора наиболее эффективных технологических процессов обработки изделий всесторонне проанализировать свойства получаемых изделий, путем проведения виртуальных исследований, не требующих натурных экспериментов, с высокой точностью определить физикомеханические характеристики разрабатываемого материала, рассчитать технологические параметры производства и т.д.

Однако адекватность применения компьютерных моделей при исследовании порошковых материалов во многом зависит от корректного задания модели деформируемого некомпактного материала. Модель материала представлена в виде определенного материатического выражения, которое содержит ряд параметров, описывающих конкретную структурно-неоднородную среду, поэтому очень важным является их правильное определение. Таким образом, проблема разработки адекватных компьютерных моделей и определение констант для моделей порошковых антифрикционных материалов является достаточно актуальной задачей.

В данной статье рассмотрены вопросы, связанные с возможностью проведения компьютерного моделирования порошков в системе LS-DYNA.

В основе компьютерного моделирования порошковых материалов лежит метод конечных элементов (МКЭ). Данный метод получил широкое распространение при моделировании процессов обработки металлов давлением (штамповки, прокатки, ковки и т.д.), однако его использование при решении задач, связанных с обработкой порошковых металлов, является относительно новым направлением.

Особенность использования МКЭ в таких задачах связана с тем, что традиционные подходы механики сплошной среды, в частности гипотеза об однородности деформируемой среды, не подходят для моделирования процесса деформации порошковых материалов, поскольку необходимо учитывать как неоднородность структуры материала, так и изменение плотности при деформации.

В настоящее время опубликовано ряд работ, в которых рассмотрены различные подходы моделирования порошковых металлов с использованием различных инженерных программ: ABAQUS, ANSYS, LS-DYNA, DEFORM и т.д. С их помощью можно не только выявить характерные особенности процесса обработки порошковых металлов, но и установить напряженное состояние деформируемой 170 заготовки, характер и картину течения материала, рассчитать усилия и т.д.

Крезалек и Сивакумар [1] одними из первых изучили движение порошка при прессовании с использованием конечно-элементной модели и проверили эти результаты экспериментально для порошка железа, разделенного тонкими слоями меди. С помощью модели они достаточно точно предсказали распределения напряжений и смещение слоев в заготовке, результаты эксперимента были примерно на 10–15 % выше, чем в КЭ модели.

В 1999 г. группа по исследованию порошковых металлов РМ Modnet Research Group для изучения поведения пористых материалов использовала различные модели материала в нескольких конечно-элементных программах [2]. Сделанные ими выводы показывают, что используя компьютерные модели, могут быть получены адекватные результаты, с помощью которых можно оценивать поведение пористого материала при различных воздействиях на него.

В 2000 г. Кубе и Ридель изучали образование трещин при уплотнении порошковых заготовок из железа [3]. Их компьютерная модель достаточно хорошо прогнозировала (с точностью до 0,05 г/см<sup>3</sup>) распределение плотности материала в заготовке, при расчете рассматривались как двухмерная (2D) так и трехмерная (3D) постановки задачи. В том же году Викман с коллегами, используя КЭ модель, провели исследование для цилиндрической заготовки из порошкового железа зависимости коэффициента трения о стенки от относительной плотности [4]. Было обнаружено, что в целом коэффициент уменьшается с увеличением относительной плотности.

В 2001 г. был предложен набор стандартных виртуальных тестов для определения параметров математической модели Drucker-Prager, описывающей поведение пористого материала [5]. В основе тестов лежит имитация процесса прессования пористой детали и сравнения распределения плотности и усилий с экспериментальными данными. Разница в расчетах плотности составляла в среднем 1,5 % (максимум 3 %), в то время как рассчитанные усилия отличались от экспериментальных максимум на 10 %.

В 2002 г. Хтороу в соавторстве представили работу [6], в которой рассматривался подход моделирования осесимметричной заготовки с моделью материала Drucker-Prager. Ставилась задача получить наилучшую сходимость результатов с экспериментальными данными для трехосного и изостатического случая нагружения. Было также обнаружено, что переменные модели Drucker-Prager имеют различную степень влияния на результаты. Затем были выполнены исследования возможности практического применения этой модели в промышленности и еще раз показано, что результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментальными данными [7].

В работе Михайлова и Штерна [8] использовалась модель материала Cam-Clay для изучения распределения плотности в заготовке для различных схем прессования и различных скоростей обжатия, при этом была обнаружена хорошая сходимость с результатами экспериментов для выбранной модели материала.

В приведенных выше работах в качестве материала для заготовок в основном рассматривались черные металлы. Одна из первых работ, в которой изучался порошок сплава алюминия, это работа Ли и Кима [9], где рассматривалось холодное изостатическое прессование для данного материала. Целью их работы было сравнение нескольких доступных математических моделей материала с экспериментальными данными. Для имеющихся моделей было установлено, что модель Shima-Oyane хорошо согласуется с экспериментальными данными в областях с высокой плотностью, но занижает результаты при низкой плотности, в то время как модели Fleck-Gurson, Cam-Clay и Drucker-Prager слегка завышают плотность распределения порошка в областях с низкой плотностью и занижают результаты при более высокой плотности.

Постановка задачи моделирования. В рамках данной работы предложен подход использования пакета LS-DYNA при исследовании процесса прессования в закрытой пресс-форме цилиндрического образца, изготовленного из порошкового алюминиевого сплава Al6061 и сплава циркония. С использованием компьютерных моделей получено распределение плотности порошка в заготовках из разного материала при различных условиях обжатия и смазки.

Схема проводимого виртуального эксперимента показана на рисунке 1.



а – трехмерная модель пресс-формы; б – параметры заготовки;
в – 2D осесимметричная постановка задачи моделирования

Рисунок 1 - Схема эксперимента

Процесс прессования является нелинейным из-за отклика материала, больших деформаций и напряжений, контактных условий и характера трения. Чтобы адекватно описать процесс формоизменения заготовки, необходимо учитывать все эти особенности, однако наиболее важным является выбор подходящей модели материала для пористых тел. Анализ литературных источников по теме моделирования порошковых материалов показал, что наиболее часто используют следующие феноменологические модели: POROUS METAL PLASTICITY [10], CAM-CLAY [11], DRUCKER-PRAGER [12] и GEOLOGIC CAP MODEL [13].

В рамках данной работы рассмотрены две модели: MODIFIED DRUCKER-PRAGER CAP MODEL (DPC модель) для сплава циркония и GEOLOGIC CAP MODEL для материала Al6061, которые являются наиболее популярными при компьютерном моделировании процессов обработки пористых материалов. Модели позволяют описывать процессы уплотнения структурно-неоднородных материалов. При этом результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными [14].

Параметры модели DPC для материала заготовки (сплав циркония) были взяты из работы Кима [15]. В таблице 1 приведены основные параметры модели материала, используемые в программе LS-DYNA. Таблица 1 – Параметры DPC модели материала для порошка сплава циркония

Параметр	Значение
Начальная плотность (31 % от плотности алюминия – 6080 кг/м <sup>3</sup> )	1885 кг/м <sup>3</sup>
Упругий модуль сдвига, <i>q</i>	206 ГПа
Коэффициент Пуассона	0,31
Параметр формы поверхности разрушения, <i>R</i>	0,835
Значение когезии, d	1,53 МПа

Параметры материала GEOLOGIC CAP MODEL для материала заготовки (Al6061) были взяты из работы Ли и Кима [9]. В таблице 2 приведены основные параметры модели, которые задаются в программе LS-DYNA для данного материала.

Таблица 2 – Параметры GEOLOGIC САР модели материала для порошка Al6061

Параметр	Значение
Начальная плотность (51 % от плотности алюминия – 2700 кг/м <sup>3</sup> )	1377 кг/м <sup>3</sup>
Начальный модуль объемного сжатия	55,76 ГПа
Начальный модуль сдвига	13,26 ГПа
Параметр кривой разрушения, α	0 Па
Линейный коэффициент кривой разрушения, $\theta$	0,394
Экспоненциальный коэффициент кривой разрушения, ү	0 Па
Экспонента кривой разрушения, в	$0 \Pi a^{-1}$
Отношение масштабов по осям кривой разрушения, <i>R</i>	2,800
Экспонента закона упрочнения, D	5E-10
Коэффициент закона упрочнения, W	0,62

Объемная плотность порошка в начальный момент времени и после прессования определялась по формуле:

$$\rho_V = 1,273 \frac{m_{\pi}}{D^2 H},$$
 (1)

где  $m_{\rm n}$  – масса порошка с порами, D – диаметр заготовки, H – высота заготовки (рисунок 1, б).

Однако данный параметр не очень удобно использовать при оценке плотности порошкового материала, поэтому рассматривались параметры относительной плотности и пористости:

$$\rho_{\rm OTH} = \frac{\rho_V}{\rho_{\rm M}}; \tag{2}$$

$$\Pi = (1 - \rho_{\text{oth}}) \cdot 100\%, \qquad (3)$$

где р<sub>м</sub> – истинная плотность материала образца.

Матрица и нижняя шайба зафиксированы в пространстве, прессшайба может перемещаться только в осевом направлении под действием приложенной нагрузки (рисунок 1, а). Контакт между формующим инструментом и заготовкой моделируется, используя контактный алгоритм поверхность-поверхность, трение между заготовкой и инструментом принималось равным 0,24.

Матрица, нижняя шайба и пресс-шайба моделируются как абсолютно твердые тела, так как сделаны из стали. Их геометрия, а также геометрия порошка моделируется с помощью осесимметричных четырехугольных элементов, для этого используется формулировка оболочечного элемента, взвешенная по объему (рисунок 1, в).

Это означает, что нагрузки интерпретируются как значения на единицу радиан (в противоположность значению на единицу длины для формулировки оболочки, взвешенной по поверхности) [16]. Для задания нагрузки на пресс-шайбу использовалась карта LOAD\_RIGID\_BODY, которая определяет сосредоточенное усилие для всего жесткого тела:

$$F = \frac{\pi}{4}D^2P,\tag{4}$$

где *Р* – давление, приложенное к пресс-шайбе, *D* – диаметр прессшайбы (заготовки).

При решении различных задач формообразования возможно возникновении ошибки «Negative volume», связанной с критическими перемещениями узлов, в результате чего элементы приобретают неправильную форму. Для устранения данной проблемы при решении задачи прессования применялся стандартный параметр подавления искажения формы элементов CONTROL HOURGLASS со значением 0,1, который предназначен для учета усилий скручивания.

Как было сказано выше, задача прессования порошковых металлов относится к типу нелинейных задач, поэтому численное решение в LS-DYNA требует небольшого размера шага по времени, что дает преимущество явных методов решения по сравнению с неявными. В связи с этим при решении задачи прессования использовался явный (explicit) решатель. Недостатком данного метода является его условная устойчивость, т.е. решение задачи не будет зависеть от шага по времени, только если он меньше определенного значения, которое определяется из критерия Куранта.

Пакет LS-DYNA сам определяет размер шага по времени так, чтобы критерий Куранта не нарушался. В результате размер шага по времени может оказаться очень маленьким и расчет задачи займет много времени. Однако в случае использования осесимметричных оболочечных элементов имеется значительный выигрыш по времени решения в сравнении с твердотельными элементами, что и определило выбор двухмерной постановки задачи.

Таким образом, в предложенной модели приняты следующие допущения:

1. Рассматривалась двухмерная осесимметричная постановка.

2. В исходном состоянии среда считалась однородной и имела постоянную плотность.

3. Трение на всей поверхности контакта подчиняется закону сухого трения Кулона, причем коэффициент трения постоянен на всей контактной поверхности.

4. Время протекания процесса считаем малым, термодинамические эффекты связанными с внешними потоками тепла не учитываются.

5. Рабочая поверхность инструмента считалась абсолютно жесткой.

**Результаты моделирования.** Для оценки адекватности выбранных моделей материала были решены тестовые задачи. Одной из таких задач является эксперимент, поставленный Ли и

Кимом [9] для модели материала GEOLOGIC САР, в их работе рассматривался процесс одноосного сжатия под давлением в 300 МПа цилиндрического образца в закрытой пресс-форме, материал образца – алюминиевый сплав Al6061 (параметры материала см. выше), размеры образца – диаметр D = 20 мм, исходная высота H = 30 мм. Начальная относительная плотность материала – 0,51.

Результаты натурного эксперимента показаны на рисунке 1, а, здесь в сечении заготовки показано распределение относительной плотности.



а – эксперименты Ли и Кима; б – компьютерная модель
в 2D осесимметричной постановке

Рисунок 2 - Распределение плотности в тестовом образце

Так как LS-DYNA не выполняет расчет распределения плотности в материале заготовки, то для ее оценки использовалась эффективная пластическая деформация:

$$\rho_f = \rho_0 e^{\varepsilon_v^p},\tag{5}$$

где  $\rho_f$  – плотность материала после деформации,  $\rho_0$  – начальная плотность заготовки.

Результаты численного моделирования показаны на рисунке 5,б. Как видно на примере данного тестового эксперимента, используемая модель GEOLOGIC САР достаточно адекватно описывает процесс прессования порошкового материала. Максимальная погрешность результатов не более 2 %. На рисунке 3 показана зависимость объемной плотности порошка в зависимости от приложенной нагрузки для различных значений коэффициента трения (0,1, 0,24 и 0,5).



Рисунок 3 – Зависимость объемной плотности порошка от нагрузки в тестовом образце

На рисунке 4 показано распределение эквивалентных напряжений (по Мизесу) и пластических деформаций в заготовке под давлением в 300 МПа.



Рисунок 4 – Расперделение эквивалентных напряжений (а) и пластических деформаций (б)

Для оценки адекватности модели DPC использовались результаты экспериментов Кима [15] по одноосному сжатию образца из сплава циркония. Диаметр заготовки D = 13 мм, высота – H = 15 мм, начальная относительная плотность материала – 0,31.

К заготовке прикладывалась осевая нагрузка в 100 МПа. Особенностью данного виртуального эксперимента является то, что для решения задачи использовалась трехмерная постановка.

Сравнение результатов натурного эксперимента и компьютерной модели показано на рисунке 5. Как и ожидалось, максимальное значение относительной плотности отмечается на внешней кромке заготовки в контактной области с пресс-шайбой, кроме того согласуются и численные результаты.



а – эксперимент Кима; б – компьютерная модель в 3D постановке
Рисунок 5 – Распределение плотности в тестовом образце

На рисунке 6 показан график зависимости относительной плотности от приложенного давления, полученный экспериментально и численными методами.

Выводы. В рамках данной работы предложен подход моделирования порошковых материалов при использовании пакета инженерного анализа LS-DYNA, построены тестовые конечноэлементные модели для проведения численного моделирования процесса прессования цилиндрических образцов.

Результаты проведенных виртуальных экспериментов дают представление о характере протекающих процессов, общих закономерностях формоизменения порошков, численных данных, характеризующих физические величины (плотность, напряжения и др.).



а – натурный эксперимент; б – компьютерная модель

Рисунок 6 - Распределение плотности в тестовом образце

Как показали эксперименты, обе рассматриваемые модели материала DRUCKER-PRAGER CAP MODEL и GEOLOGIC CAP MODEL достаточно точно описывают поведение порошка при прессовании, результаты согласуются как количественно, так и качественно, что в принципе и подтверждено в работах [9, 15] с использованием другой программы конечно-элементного анализа ABAQUS.

Таким образом, можно говорить об адекватности разработанных компьютерных моделей и их возможности использования при моделировании более сложных процессов, к примеру, прокатке заготовок из порошкового материала.

## Литература

**1. Krezalek, I.** Computational simulation of powder movement during uni-axial die compaction of metal powders / I. Krezalek, K. Sivakumar // Journal of Materials Processing Technology. – 1995. – 48(1). – P. 421–428.

**2. PM Modnet** Research Group. Comparison of computer models representing powder compaction process. Powder Metallurgy. – 1999. – 42(4). – P. 301–311.

3. Coube, O. Numerical simulation of metal powder die compaction with special consideration of cracking / O. Coube, H. Riedel // Powder Metallurgy. -2000. -43(2). - P. 123-154.

4. Wall friction coefficient estimation through modeling of powder die pressing experiment / B. Wikman [et al] // Powder Metallurgy. – 2000. - 43(2). - P. 132-140.

**5. Doremus, P.** Simple tests and standard procedure for the characterization of green compacted powder / P. Doremus, F. Toussaint, O. Alvain // Recent Developments in Computer Modeling of Powder Metallurgy Processes, 2000. – P. 29–41.

**6.** Chtourou, H. Modeling of the metal powder compaction process using the cap model. Part I. Experimental material characterization and validation / H. Chtourou, M. Guillot, A. Gakwaya // International Journal of Solids and Structures. – 2002. – 39(4). – P. 1059–1075.

**7. Chtourou, H.** Modeling of the metal powder compaction process using the cap model. Part II. Numerical implementation and practical applications / H. Chtourou, M. Guillot, A. Gakwaya // International Journal of Solids and Structures. – 2002. – 39(4). P. 1077–1096.

**8.** Mikhailov, O.V. Numerical modeling of the compaction of powder articles of complex shape in rigid dies: effect of compaction scheme on density distribution II. Modeling procedure and analysis of forming schemes / O.V. Mikhailov, M.B. Shtern // Powder Metallurgy and Metal Ceramics. -2003. -42(3-4). - P. 114-135.

**9. Lee, S.C.** Densification behavior of aluminum alloy powder under cold compaction / Lee, S.C., Kim, K.T. // International Journal of Mechanical Sciences. – 2002. – 44(7). – P. 1295–1308.

**10. Sinka, I.C.** Modelling Powder Compaction / I.C. Sinka // KONA Powder and Particle Journal.  $-2007. - N \ge 24. - P. 93-103.$ 

**11.** Schofield, A. Critical State Soil Mechanics / A. Schofield and C. P. Wroth. – New York: McGraw-Hill, 1968. – 218 p.

**12.** A modified Drucker-Prager Cap model for die compaction simulation of pharmaceutical powders / L.H. Han [et al] // International Journal of Solids and Structures.  $-2008. - Vol. 45. - N_{2} 10. - P. 3088-3106.$ 

**13. Selig, S.G.** Finite element simulation of the compaction and spring back of an aluminum powder metallurgy alloy, Submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Applied

Science / S.G. Selig. – Dalhousie University Halifax, Nova Scotia, March 2012.

14. Modeling the mechanical behavior of pharmaceutical powders during compaction / C.-Y. Wu [et al] // Powder Technology.  $-2005. - Vol.152. - N \ge 1-3. - P. 107-117.$ 

**15. Kim, K.T.** Densification behavior of ceramic powder under cold compaction / K.T. Kim, S.W. Choi, H. Park // Journal of Engineering Materials and Technology. – 2000. – Vol. 122. – P. 238–244.

**16. LS–DYNA** Keyword User's Manual. – Vol. 1. – Livermore Software Technology Corporation, 2001. – 853 p.

УДК 621.793.18

#### И.А. ИВАНОВ, д-р техн. наук, И.В. МИСНИК (БНТУ)

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ МАССОПЕРЕНОСА ПРИ НАНЕСЕНИИ PVD-ПОКРЫТИЙ

Широкое распространение технологические методы и оборудование для нанесения покрытий физическим осаждением в вакууме (PVD-методы) получили в 70-х годах прошлого века. Это связано с такими достоинствами методов как возможность формирования покрытий из любых, в том числе тугоплавких материалов, возможность формирования покрытий из соединений (оксидов, нитридов и др.), высокая чистота процесса и высокий коэффициент использования осаждаемого материала, высокая производительность процесса. В последнее время, в ряде случаев, PVD-покрытия рассматриваются единственным эффективным технологическим приёмом повышения эксплуатационных свойств (например, долговечность, износостойкость, коррозионная стойкость) машиностроительных изделий.

Основными показателями, определяющими свойства и функциональное назначение сформированного покрытия, являются состав и качество нанесенного слоя. Если состав покрытия будет задаваться материалом мишени, а также присутствующим в объеме вакуумной