

Оптимизация фракционного состава композиций

Задача определения фракционного состава дисперсной системы, при котором достигается максимальная плотность упаковки, составляющих ее частиц, встречается во многих областях техники, в том числе, при подборе фракционного состава наполнителей для бетона и асфальто-бетонных композиций [1 2 3 4 5 6 7 23].

Теоретически проблема плотной упаковки сферических частиц начала изучаться достаточно давно [8]. В качестве примеров плотной упаковки монодисперсных сферических частиц можно привести кубическую и гексагональную упаковку (рис.1). Плотность кубической упаковки составляет $\pi/6$ или 52.36%. Гексагональная упаковка является наиболее плотной. Ее плотность составляет $\frac{\pi}{3\sqrt{2}}$ или 74.05%.

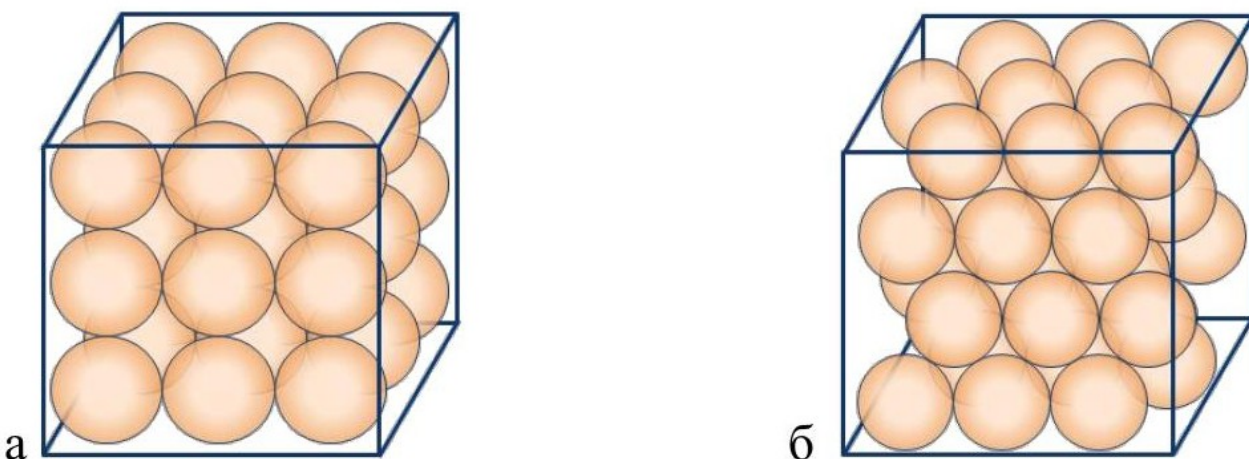


Рисунок 1 - Правильные кубическая (а) и гексагональная (б) упаковки сферических частиц.

Для получения более плотной структуры необходимо использовать би- или полидисперсные (присутствуют частицы двух и более размеров) смеси, так как пустоты, образующиеся при любом типе упаковки, заполняются частицами меньших размеров, уменьшая суммарную пустотность и увеличивая плотность упаковки. Так, например, для гексагональной упаковки использование бидисперсного распределения частиц в соотношении фракций 1:1 позволяет увеличить плотность упаковки до 78.2%.

На практике регулярной упаковки частиц для полидисперсных порошков достичь не удастся. В этой связи разными авторами были предложены различные варианты функций распределения частиц по размерам, которые теоретически должны обеспечить максимально возможную их плотную упаковку [9 10 11 12 13 14]. Поскольку получение заданного распределения по размерам частиц практически достигается путем смешения отдельных фракций, полученных при ситовом рассеивании полидисперсной смеси, такие теоретические распределения получили название оптимальных гранулометрических кривых или оптимальных кривых просеивания [9 15 16 17 18 19 20 21 22]. Из числа таких теоретических распределений наиболее известным является уравнение, или интегральная функция распределения, предложенная Фуллером (1907) и Андреасеном (1930), имеющая вид:

$$A_i = (d_i / d_{max})^n, \quad (1)$$

где A_i – проход частиц через условное сито размером d_i в относительных единицах; d_{max} – наибольший размер зерна в смеси, (или апертура верхнего сита); n – коэффициент распределения, равный по Фуллеру 0.5; по Андреасену (для пространственного распределения) – 0.37; по Гуммелю – показатель степени может колебаться от 0.1 до 1.

Швейцарской федеральной лабораторией по испытанию материалов разработана кривая гранулометрического состава плотных смесей с уравнением:

$$A_i = 0.5(d_i / d_{max} + \sqrt{(d_i / d_{max})}). \quad (2)$$

Здесь A_i - в относительных единицах.

Заметим, что зависимость (2) может быть аппроксимирована уравнением (1) подбором показателя n . В качестве примера на рис.2 показаны оптимальные гранулометрические кривые распределений: по уравнению (1) с показателем $n=0.5$; по уравнению (2) и по уравнению (1) с оптимизированным значением показателя $n=0.71$. Как видно, кривая 3 с достаточной для практики точностью аппроксимирует кривую 2.

Предложены также и другие аналитические выражения для оптимальных гранулометрических кривых. Все они дают похожий вид

кривых и, таким образом, могут быть аппроксимированы зависимостью, предложенной Фуллером, путем подбора соответствующего значения показателя n .

Приведенные уравнения описывают оптимальную кривую просеивания для систем со сферической формой частиц и не учитывают возможных отклонений от этой формы для реальных систем. Учет данного фактора может быть выполнен с помощью коэффициента формы частиц, который определяется как отношение площади поверхности эквивалентной сферы S_{sph} к площади поверхности частицы S_{part} равного объема, т. е.

$$K_{sf} = S_{sph} / S_{part} . \quad (3)$$

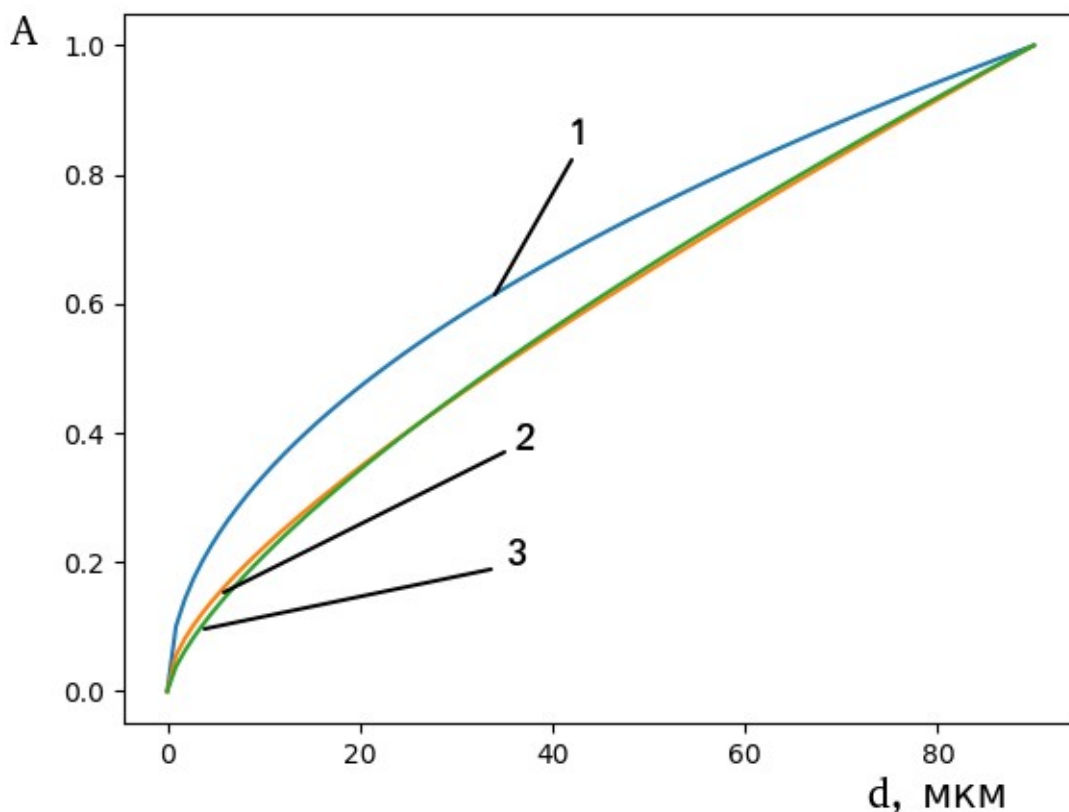


Рисунок 2 - Оптимальные гранулометрические кривые распределения: 1- по уравнению (1) с показателем $n=0.5$; 2 — по уравнению (2); 3 — по уравнению (1) с показателем $n=0.71$.

Поскольку сфера имеет минимальную площадь поверхности для тела заданного объема, то для реальных частиц фактор формы K_{sf} всегда меньше единицы и по данным многих исследователей может изменяться в пределах 0.85 — 0.95.

Для учета фактора формы уравнение Фуллера (1) может быть модифицировано в форму:

$$A_i = 1 - K_{sf} + K_{sf} (d_i / d_{max})^n. \quad (4)$$

На рис. 3 показано, как изменяется оптимальная гранулометрическая кривая по уравнению (4) при значении фактора формы, равном 0.85.

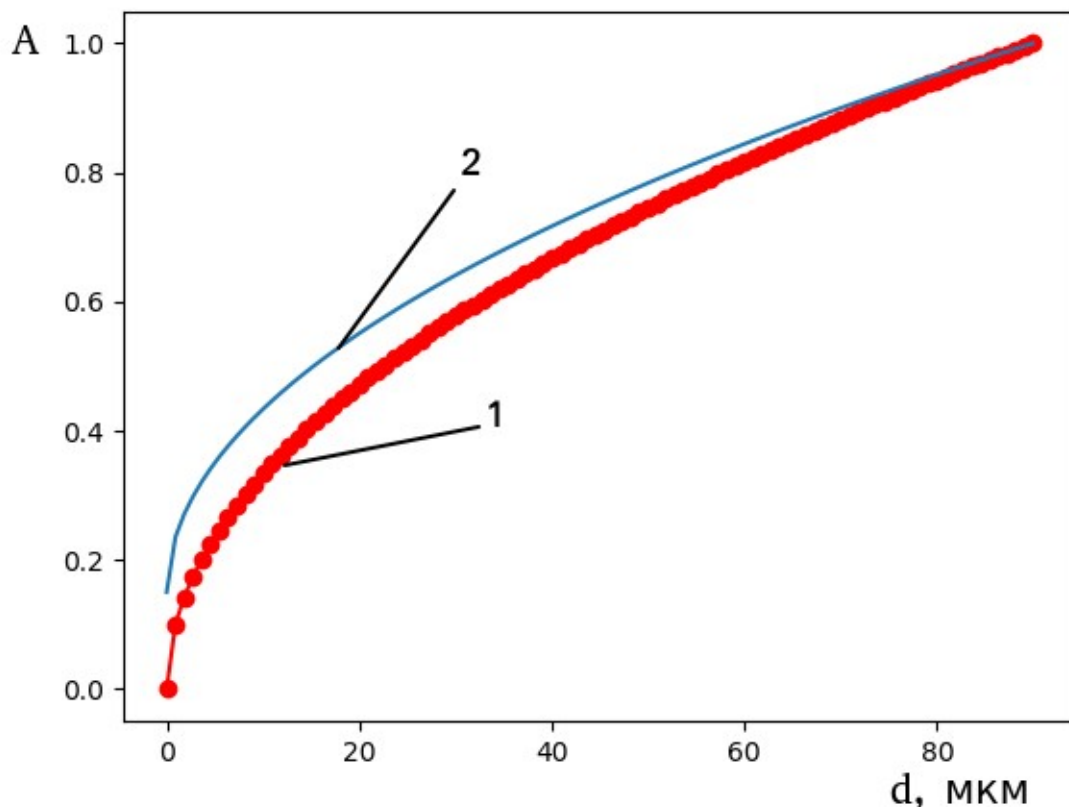


Рисунок 3 - Оптимальные гранулометрические кривые распределения: 1- по уравнению (1) с показателем $n=0.5$; 2- по уравнению (4) при значении фактора формы, равном 0.85.

Распределение Фуллера существенно отличается от таких распространенных распределений, как равномерное и нормальное распределения. Для иллюстрации на рис. 4 приведено сравнение кривой распределения Фуллера с кривыми равномерного и нормального распределений.

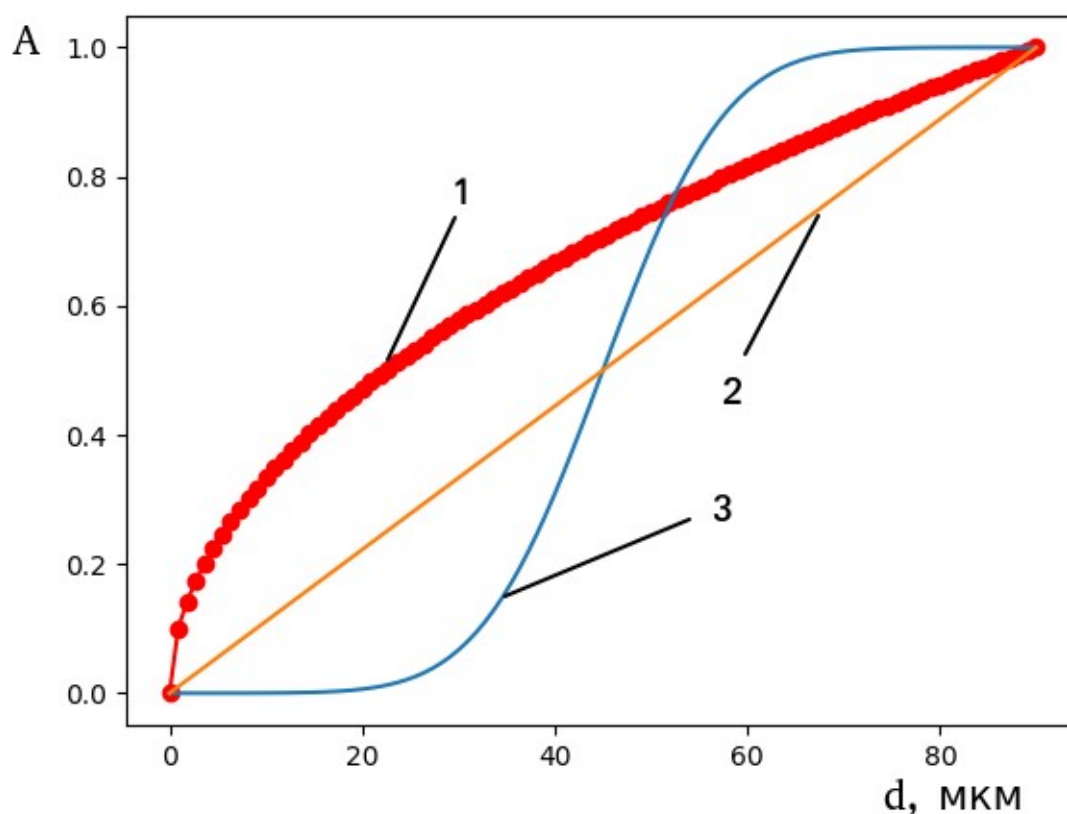


Рисунок 4 - Гранулометрические кривые распределений: 1- по уравнению (1) с показателем $n=0.5$; 2 — равномерное распределение в интервале $[0, d_{max}]$; 3 — нормальное распределение с параметрами: среднее значение — $d_{max}/2$, стандартное отклонение — $d_{max}/9$.

На практике для композиционного материала, состоящего из набора порошков с разным дисперсным составом, возникает задача подобрать его таким образом, чтобы плотность упаковки частиц была наибольшей из возможных. При этом возникает два варианта задач подбора параметров для ограниченного набора фракций порошка: 1) при заданных размерах фракций компонентов подобрать соотношение их объемов так, чтобы функция распределения была наиболее близкой к теоретической, 2) при заданном объемном соотношении компонентов подобрать соотношение размеров их фракций. При решении данных задач распределение размеров частиц в узкой фракции можно принять равномерным. Тогда опытная кривая распределения будет представлять собой набор отрезков прямых.

Степень близости опытной функции распределения к теоретической можно, например, оценивать по величине коэффициента детерминированности:

$$R^2 = 1 - \sum_i \frac{(\hat{y}_i - y_i)^2}{(\bar{\hat{y}} - y_i)^2}, \quad (5)$$

где y_i — значения функции оптимизируемого распределения \hat{y}_i — значения функции теоретического распределения; $\bar{\hat{y}}$ — среднее значение функции теоретического распределения.

Близость значения R^2 к единице будет свидетельствовать о близости теоретического и исследуемого распределений.

Если объемные доли компонентов не заданы, то для их расчета можно использовать формулу теоретического распределения, например, (1). Весь имеющийся диапазон размеров частиц $[0, d_{max}]$ с помощью набора сит рассеивается на фракции $[d_{max}^{i-1}, d_{max}^i]$, $i = 1, \dots, N$. При этом $d_{max}^0 = 0$, $d_{max}^N = d_{max}$.. Расчет объемов фракций производится на основании формулы теоретического распределения с использованием в ней в d_{max}^i качестве параметра. Если функцию теоретического распределения обозначить как $A(n, d_i, d_{max}^i)$, то объемные доли каждой фракции могут быть рассчитаны по формуле:

$$\phi^i - \phi^{i-1} = A(n, d_{max}^i, d_{max}) - A(n, d_{max}^{i-1}, d_{max}), \quad (6)$$

при этом $\phi^0 = 0, \phi^N = 1$.

Формула для расчета функции опытного распределения в интервале размеров частиц $[d_{max}^{i-1}, d_{max}^i]$ будет иметь вид

$$y_i = \sum_{j=0}^{i-1} \phi^j + \phi^i (d_i - d_{max}^{i-1}) / (d_{max}^i - d_{max}^{i-1}) . \quad (7)$$

Варьируя наборы диапазонов размеров частиц, что достигается путем наборов соответствующих сит, с использованием формул (6),(7) можно получать композиции с фракционным составом частиц, близким к функции теоретического распределения, а, следовательно, имеющими более высокую плотность упаковки. В качестве примера на рис. 5 приведена теоретическая кривая распределения (1) с показателем $n=0.5$ и две опытных функции, состоящие из трех фракций с равномерным распределением по размерам частиц внутри каждой фракции при разных наборах диапазонов размеров фракций $[d_{max}^{i-1}, d_{max}^i]$. Как видно, функция 2 имеет более близкие значения к теоретической, так что для нее следует ожидать более плотной упаковки частиц.

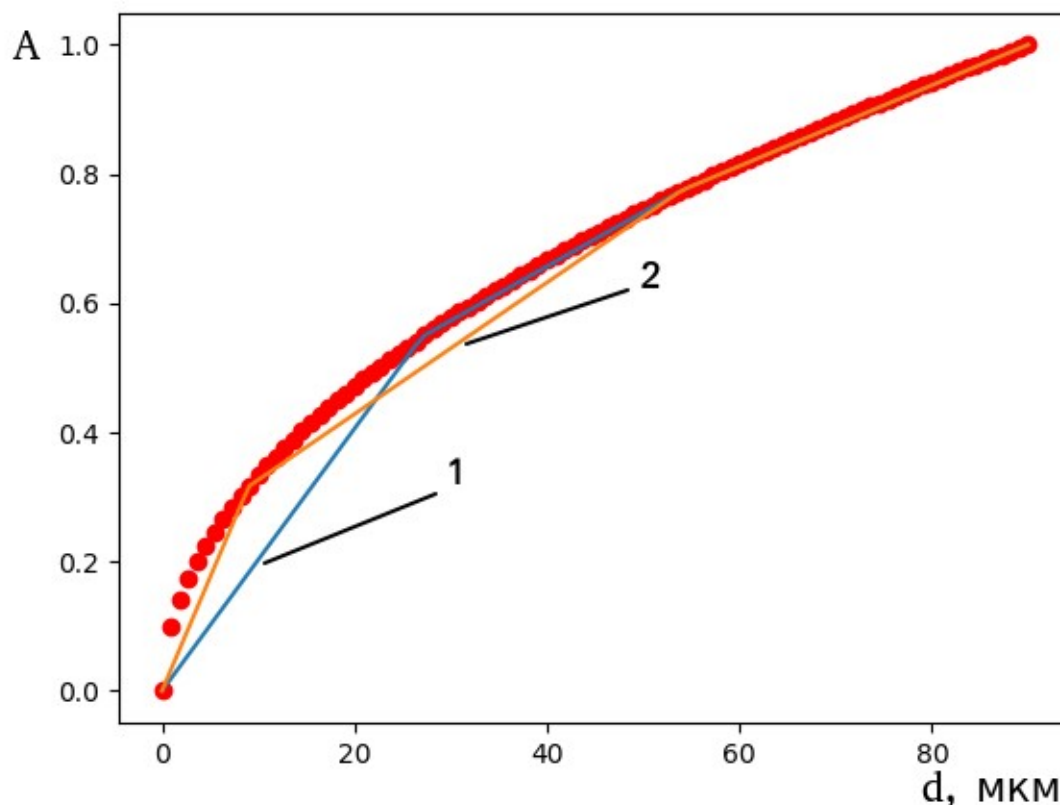


Рисунок 5 - Гранулометрические кривые распределений: точки — теоретическое распределение по уравнению (1) с показателем $n=0.5$; линии — три фракции с равномерным распределением по размерам частиц при разных диапазонах размеров: 1 — $[0-0.3d_{max}, 0.3d_{max}-0.6d_{max}, 0.6d_{max}-d_{max}]$, $R^2=0.961$; 2- $[0-0.1d_{max}, 0.1d_{max}-0.6d_{max}, 0.6d_{max}-d_{max}]$, $R^2=0.986$.

Если объемы фракций композиции заданы, например, исходя из требуемых свойств композиции, то можно решить другую задачу — при заданных объемах фракций $\phi^i, i=1...N$ подобрать размеры частиц каждой фракции так, чтобы опытная функция распределения была наиболее близка к теоретической. В этом случае для нахождения размеров частиц каждой фракции d_{max}^i нужно решить систему нелинейных уравнений

$$\sum_{j=0}^{N-i} \phi^j - A(n, d_{max}^i, d_{max}) = 0 \quad (8)$$

относительно переменных d_{max}^i .

Опытную функцию распределения можно далее построить по формулам (7).

В качестве примера на рис.6 приведена теоретическая

гранулометрическая кривая и опытное распределение, рассчитанное по формулам (7),(8) для композиции из трех компонентов с объемными долями, представленными списком: $\phi^1=0.565$, $\phi^2=0.212$, $\phi^3=0.223$, полученным на основании оптимизации состава композиции. В данном случае по значению R^2 видно, что опытное распределение несколько хуже аппроксимирует теоретическую кривую по сравнению с распределениями, приведенными на рис.5. Это связано с тем, что в данном случае распределение объемных долей компонентов не является оптимальным с точки зрения гранулометрического состава, а принято заданным, полученным в результате оптимизации свойств композиции.

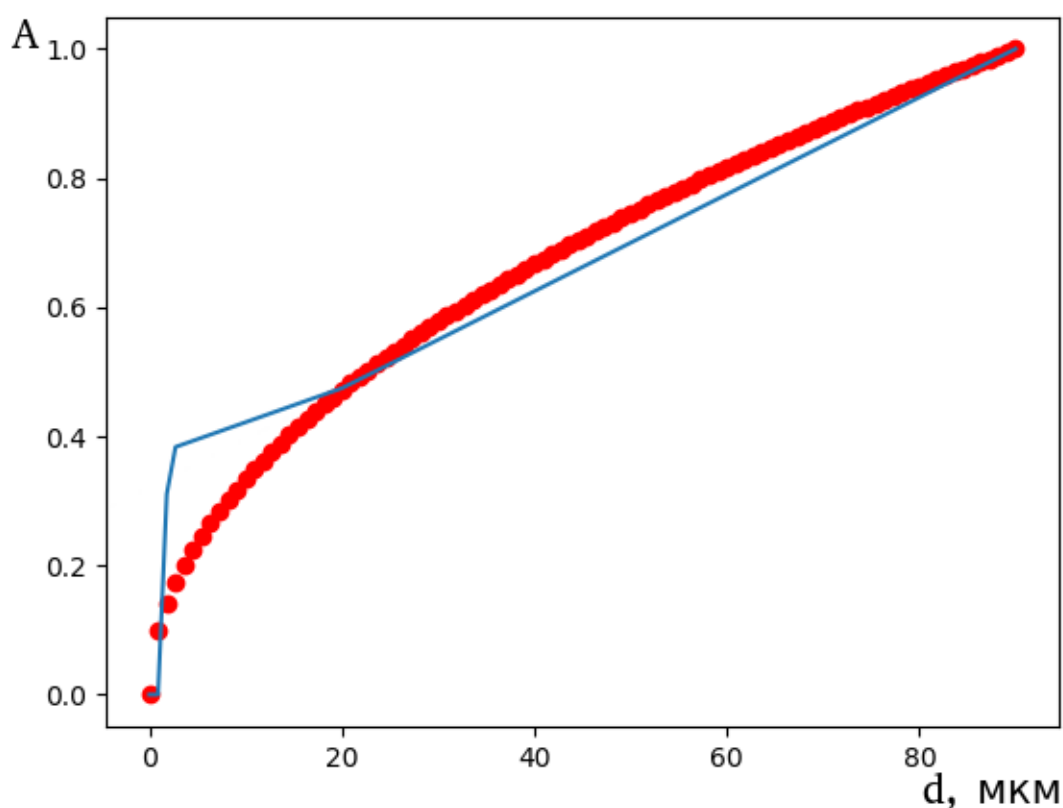


Рисунок 6 - Гранулометрические кривые распределений: точки — теоретическое распределение по уравнению (1) с показателем $n=0.5$; линия — опытное распределение для композиции с объемными долями компонентов $\phi^1=0.34$, $\phi^2=0.21$, $\phi^3=0.45$, $R^2=0.92$

Для моделирования фракционного состава композиции в программе CompositesV_1 имеется одноименная форма (рис. 7) доступ к которой для

выбранной композиции осуществляется по кнопке «Фракционный состав» в форме «Композиции» из главного меню «Базы данных\Композиции».

Моделирование фракционного состава

Параметр n кривой Фуллера: 0.5

Выбрана композиция:

Компонент	Масс.%
Al2O3	33.0
NiCr	43.0
BN	24.0

Для каждого компонента введите параметры фракционного состава

Минимальный размер фракции, мкм: 5

Максимальный размер фракции, мкм: 20

Максимальный размер расплавленных частиц, мкм: 0

Фактор формы частиц: 1.0

Добавить компонент Очистить

Компонент	Масс.%	d_min	d_max	d_melt	S_fact
Al2O3	33.0	10.0	90.0	20.0	1.0
NiCr	43.0	20.0	63.0	30.0	1.0
BN	24.0	5.0	20.0	0.0	1.0

Принять Выход

Рисунок 7 - Окно формы моделирования фракционного состава

Параметр n теоретической кривой Фуллера отображается в одноименном поле в верхней части формы. По умолчанию для него установлено значение, равное 0.5. При необходимости его можно изменить.

Для каждого компонента выбранной композиции нужно выделить его в окне выбранной композиции и заполнить поля «Минимальный размер фракции, мкм:»; «Максимальный размер фракции, мкм:»; «Максимальный размер расплавленных частиц, мкм:»; «Фактор формы частиц:» и нажать кнопку «Добавить компонент». После этого добавленный компонент отображается в расположенном ниже окне. Очистить поле данного окна можно кнопкой «Очистить».

После добавления всех компонентов нужно нажать кнопку «Принять» и для выбранного фракционного состава, а также теоретического и рационального состава будет построен график в интерактивном окне рис. 8. На графике отображаются три кривые: красным цветом с точками отображается теоретическая кривая Фуллера, линия голубого цвета соответствует фракционному составу, введенному в поля формы моделирования фракционного состава, кроме того на графике отображена третья линия, пурпурного цвета, соответствующая «рациональному фракционному составу», рассчитанному по уравнениям (8) для заданного соотношения компонентов выбранной композиции (в мас. %). График можно сохранить в виде файла, нажав кнопку с изображением дискеты.

Выбранный фракционный состав, а также рассчитанный рациональный фракционный состав и соответствующие значения критерия детерминированности (5) выводятся в главное окно программы (рис. 9). Как видно, в рассмотренном примере значения критерия для выбранного состава и рационального состава совпали, из чего можно сделать вывод, что выбранный состав близок к оптимальному для данной композиции.

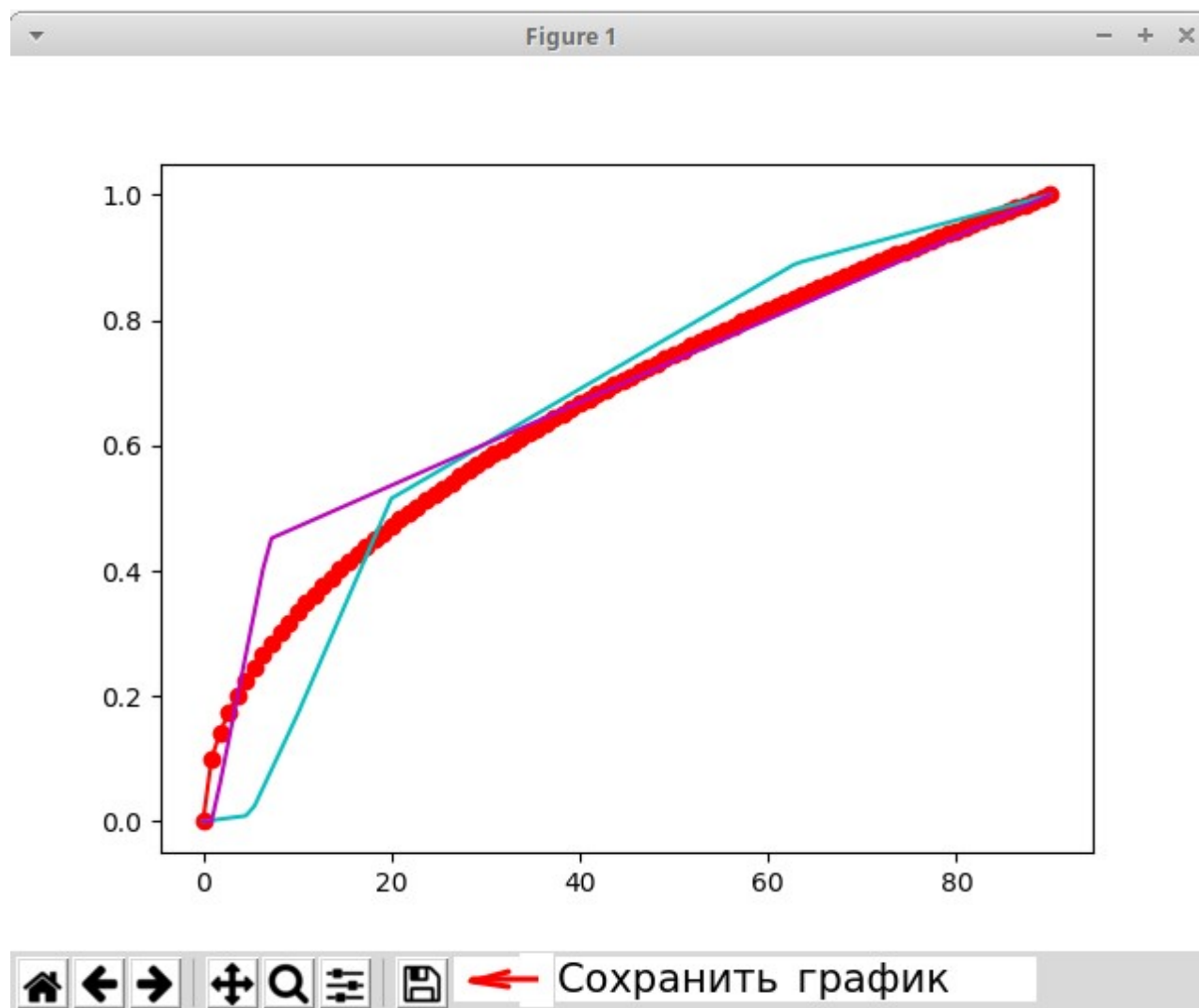


Рисунок 8 - Интерактивное окно с графиком фракционного состава

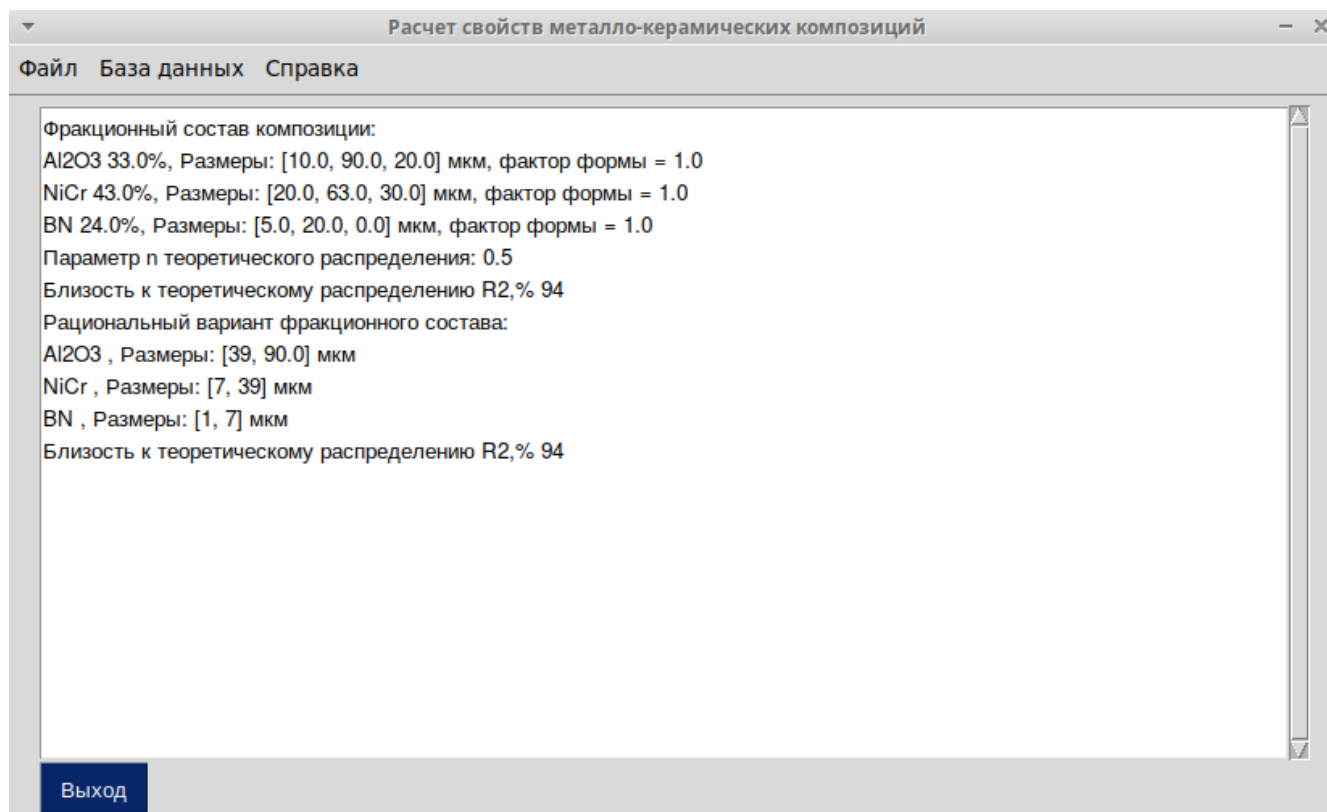


Рисунок 9 - Главное окно с выводом фракционного состава