

基于表面扩散机制金属纤维烧结的三维模拟

谌东东¹, 郑洲顺¹, 汤慧萍², 王建忠²

(1. 中南大学, 湖南 长沙 410083)

(2. 西北有色金属研究院 金属多孔材料国家重点实验室, 陕西 西安 710016)

摘要: 根据两条相交金属纤维在交接处不同方向的截面是不同的椭圆-椭圆结构, 基于表面扩散机制, 在任意方向截面上建立金属纤维烧结结点的椭圆-椭圆模型, 用水平集方法对所建模型进行数值求解, 实现对任意方向截面上金属纤维烧结结点生长过程的二维数值模拟。将不同方向截面上的数值模拟结果进行重构, 给出了金属纤维烧结结点生长过程的三维数值模拟方法。对夹角为 60° 的两条金属纤维烧结结点的生长过程进行了三维数值模拟, 分析了不同方向截面上烧结颈半径的生长速度。数值结果表明, 越靠近纤维锐角平分线方向烧结颈半径生长速度越快。数值模拟结果表明, 金属纤维在各个截面上的初始局部几何结构对烧结颈的形成起到关键作用。

关键词: 金属纤维; 表面扩散; 烧结颈; 数值模拟; 初始局部几何结构

中图分类号: TG111.6

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2016)11-2912-06

金属纤维多孔材料是第 3 代金属多孔材料, 对它的研究和应用已经取得很大进展^[1]。金属纤维多孔材料的微结构由纤维骨架、结点和孔隙 3 要素组成。金属纤维多孔材料孔隙率高(可达 98%)、孔隙形状复杂, 相互连通构成一个三维孔隙空间, 其独特的微结构使其表现出一系列独特的功能特性, 如过滤分离、能量吸收、吸声降噪、高效燃烧、强化传质传热、阻燃防爆等, 已成为当前材料科学研究的前沿和热点^[2-4]。

目前金属纤维的烧结研究多借用金属粉末烧结理论。早在 20 世纪 60 年代, A. L. Pranatis^[5]研究了金属纤维的烧结机制, 发现金属纤维多孔材料的烧结机制与金属粉末多孔材料存在明显差异, 金属粉末多孔材料烧结颈的形成主要由表面扩散机制完成, 而金属纤维烧结结点的形成由表面扩散和体积扩散综合作用控制。M. Y. Bal'shin^[6]的研究发现金属纤维毛坯体内的弹性应变能强烈影响烧结收缩过程。俄罗斯的 A. G. Kostornov^[7-12]系统研究了不同材质、不同丝径金属纤维的烧结过程, 发现将金属纤维与粉末一样进行压制成形后烧结时, 均出现沿压力方向先膨胀后收缩的现象; 而在自由烧结过程中, 金属纤维间存在自由搭接点和冶金结合结点 2 种形式, 并且其比例严重影响了金属纤维多孔材料的宏观电性能。A. G. Kostornov 还于 20 世纪 80 年代借助粉末烧结的粘性流动理论对金

属纤维的烧结机制进行了初步研究, 并根据表面张力作用下的粘性流动模型, 计算得出金属纤维有着比金属粉末高得多的表观粘度, 孔隙率为 50% 时是金属粉末的 1.62 倍, 孔隙率为 80% 时是金属粉末的 3.31 倍, 推算出的致密化速率是金属粉末的 1/8。

金属粉末的烧结研究已经达到了相当成熟的阶段, 金属纤维的烧结研究多借助金属粉末烧结理论。金属粉末是看做球体进行研究, 球体具有完全对称的特点, 所以对粉末烧结的研究可以简化到二维进行研究, 如球球模型, 球板模型^[13-15]。而金属纤维是看作圆柱体进行研究, 在三维的情况下, 对金属纤维烧结结点形成的研究是非常复杂的。金属纤维多孔材料的烧结过程有别于金属粉末, 其独特的外部几何特征和内部富含大量的变形储能使其烧结结点的形成机制更为复杂, 随着计算机技术和计算技术在金属成形领域中应用的发展, 对烧结结点形成过程进行数值模拟是研究结点形成的一种非常有效的方法, 目前关于这方面的研究未见文献报道, 因此开展金属纤维多孔材料烧结结点形成过程的数值模拟研究具有重要理论意义。

1 模型的建立

1.1 几何结构

如图 1 所示, 假设 2 根金属纤维的夹角为 β , 以

收稿日期: 2015-11-08

基金项目: 国家自然科学基金项目 (51174236); 国家重点基础研究发展计划 (“973” 计划) 项目 (2011CB606306); 金属多孔材料国家重点实验室开放基金项目 (PMM-SKL-4-2012); 国家自然科学基金重点项目 (51134003)

作者简介: 谌东东, 男, 1989 年生, 硕士, 中南大学数学与统计学院, 湖南 长沙 410083, E-mail: cdd0525@163.com

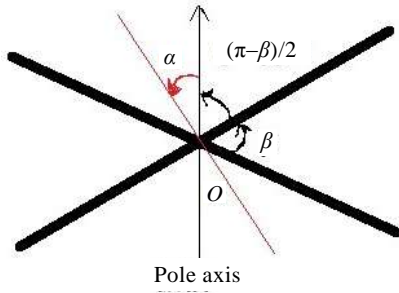


图 1 对 2 根金属纤维建立极坐标系

Fig.1 System of polar coordinates for two metal fibers

钝角平分线为极轴，极轴逆时针旋转建立极坐标系， α 表示极坐标的角度。在烧结结点处做各个方向的截面，截面可能是圆形、椭圆形或是长方形。图 2 为 2 根金属纤维与极轴方向夹角为 α 的截面图建立的笛卡尔坐标系， O_1 是上面纤维的截面， O_2 是下面纤维的截面， O_3 是与 2 根纤维在这个方向相切的圆，这个圆的半径 ρ 就是在这个方向上颈部表面的曲率半径， a 是金属纤维的半径， r 是这个方向上的颈长。

根据图 1 和图 2 所示的几何关系，可以推导出上下 2 根金属纤维分别在各个方向上的截面的函数表达式：

$$O_1: \frac{x^2}{a^2} \cos^2\left(\frac{\beta}{2} - \alpha\right) + \frac{(y-a)^2}{a^2} = 1 \quad (1)$$

$$O_2: \frac{x^2}{a^2} \cos^2\left(\frac{\beta}{2} + \alpha\right) + \frac{(y+a)^2}{a^2} = 1 \quad (2)$$

式中， α ($0 \leq \alpha \leq \pi$) 的变化描述了烧结结点的各个方向的截面。

1.2 表面扩散模型

假设在金属纤维的烧结过程中，表面扩散是唯一的扩散机制。根据 W. W. Mullins^[16] 提出的表面扩散模型：

$$\frac{\partial r_n}{\partial t} = B \frac{\partial^2 K}{\partial s^2} \quad (3)$$

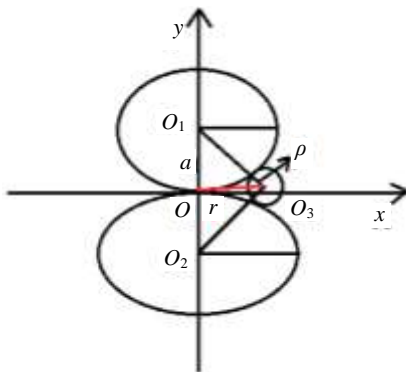


图 2 2 根金属纤维的截面图

Fig.2 Section of two metal fibers

式中， r_n 是表面法向量， t 表示时间， K 是表面曲率， s 是弧长， B 是系数可以表示为：

$$B = \frac{\delta_s D_s \gamma \Omega}{kT} \quad (4)$$

式中， D_s 表示表面扩散系数， γ 是单位面积的表面自由能， Ω 表示原子体积， δ_s 是表面扩散宽度， k 是玻尔兹曼常数， T 是绝对温度。引入无量纲变量 $t^* = \frac{Bt}{a^4}$ ，

$r_n^* = \frac{r_n}{a}$ ， $s^* = \frac{s}{a}$ 和 $K^* = aK$ ， a 是纤维的初始半径。将这些无量纲变量代入式 (3)，可以得到无量纲模型：

$$\frac{\partial r_n^*}{\partial t^*} = \frac{\partial^2 K^*}{\partial s^{*2}} \quad (5)$$

因此，表面的法向速度与表面曲率的二阶导数成比例。

1.3 基于水平集方法的椭圆-椭圆模型

建立的椭圆-椭圆模型是在水平集方法框架下对原来表面扩散模型的推广。在水平集方法^[17,18]中，演化函数的一般表达式为：

$$\phi_t = F |\nabla \phi|, \quad \phi(x, y, t=0) \quad (6)$$

式中，法向速度 F 可以看作是 $\phi(x, y, t)$ 的空间导数的函数。在很多应用中， F 是曲率 K 以及它的空间导数的函数^[19]。曲率 K 可以通过计算水平集函数 $\phi(x, y, t)$ 求得：

$$K = \nabla \cdot n$$

$$n = \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} = \left(\frac{\phi_x}{(\phi_x^2 + \phi_y^2)^{\frac{1}{2}}}, \frac{\phi_y}{(\phi_x^2 + \phi_y^2)^{\frac{1}{2}}} \right) \quad (7)$$

式中， n 是法向量，也是表面 $\phi(x, y, t) = 0$ 的水平集单位法向量。由式 (7) 可以得到曲率 K 的表达式：

$$K = \nabla \cdot \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} = \frac{\phi_{xx}\phi_y^2 - 2\phi_x\phi_y\phi_{xy} + \phi_{yy}\phi_x^2}{(\phi_x^2 + \phi_y^2)^{\frac{3}{2}}} \quad (8)$$

在表面扩散的情况下，

$$F = -B \frac{\partial^2 K}{\partial s^2} \quad (9)$$

曲率的二阶导数可以表示为：

$$\frac{\partial^2 K}{\partial s^2} = \nabla \cdot \left[\nabla K \cdot \frac{(\phi_y, -\phi_x)}{|\nabla \phi|} \right] \cdot \frac{(\phi_y, -\phi_x)}{|\nabla \phi|}$$

$$= \frac{K_{xx}\phi_y^2 - 2K_{xy}\phi_x\phi_y + K_{yy}\phi_x^2}{\phi_x^2 + \phi_y^2} - \frac{K(K_x\phi_x + K_y\phi_y)}{\sqrt{\phi_x^2 + \phi_y^2}}$$

对每一个截面可以建立不同的水平集函数，

$$\begin{cases} \phi(x, y, t) < 0, \text{ in } \Omega(t) \\ \phi(x, y, t) = 0, \text{ on } \Gamma(t) \\ \phi(x, y, t) > 0, \text{ in } R^2 \setminus \overline{\Omega(t)} \end{cases} \quad (10)$$

其中, $\Gamma(t)$ 是由式 (1) 和 (2) 所确定的曲线, $\Omega(t)$ 表示由界面 $\Gamma(t)$ 围成的内部区域, 如图 3 所示。

在表面扩散机制下的椭圆-椭圆模型是由演化方程式 (6) 和水平集函数式 (10) 组成, 实际上就是一个关于偏微分方程的初值问题。此模型可以用水平集方法进行数值求解, 从而可以模拟出在烧结结点各个方向上截面的演化情况。金属纤维烧结结点的三维结构可以通过重构不同方向的截面得到, 实现金属纤维烧结结点生长过程的三维数值模拟。

1.4 模型的水平集解法

由 Mullins 建立的表面扩散模型可以用多种数值方法求解, 如线上方法^[14]和有限差分方法^[15]。这些方法的缺点是不能够很好地处理烧结过程中的拓扑变化。在本研究中, 水平集方法用来求解建立的椭圆-椭圆模型。水平集方法的优点是能够自然地处理各种拓扑变化问题^[20], 这种方法可以捕获到界面的变化而不仅仅是追踪界面的变化。相应的水平集算法步骤在本节中以全离散的形式给出, 具体的算法过程参见文献[21]。

2 数值模拟结果与讨论

在表面扩散机制下, 对 2 根夹角为 60° 的金属纤维的烧结过程进行数值模拟, 得到其烧结颈的生长变化过程。此烧结模拟是用 Matlab 软件实现的, 取 $B=1$, 网格划分是 500×500 , 并且 $\Delta x = \Delta y = 1$ 。金属纤维的半径是 100。

2.1 二维数值模拟结果

从 2 根金属纤维的钝角平分线方向($\alpha=0^\circ$)到另一侧的钝角平分线方向($\alpha=180^\circ$)之间每隔 15° 选取截面进行数值模拟。本研究中只给出了从钝角平分线方向到锐角平分线方向($0^\circ \leq \alpha \leq 90^\circ$)选取的 5 个截面的演化情况, 其余截面的情况可以由对称性得出。每个截

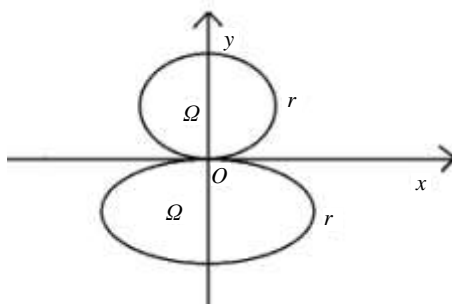


图 3 内部区域与界面

Fig.3 Internal area and interface of the cross section

面的总演化步数是 1500 步, 每隔 300 步标记一次曲线 (界面) 的演化位置, 如图 4 所示。

2.2 三维数值模拟结果

2 根金属纤维烧结结点的三维结构是通过重构不同方向的截面而得到, 这些截面就是二维数值模拟的结果。在图 5 中给出了 2 根夹角为 60° 的金属纤维在初始时刻和演化步数为 1000 步时的三维数值模拟结果。

2.3 讨论

根据各个截面的数值模拟结果, 2 根夹角为 60° 的金属纤维在 7 个方向的烧结颈半径随时间的变化曲线如图 6 所示。在烧结初期, 烧结颈的生长速度很快, 几乎是随着时间成线性增长。当时间过了 30 之后, 生长速度逐渐减慢, 最后趋于 0, 在锐角平分线方向形成的烧结颈最大, 在钝角平分线方向形成的烧结颈最小。

根据图 4 所示的各个截面的数值模拟结果和图 6 所示的各个方向烧结颈半径随时间的变化曲线可以看出, 烧结颈半径的生长速度从钝角平分线方向到锐角平分线方向逐渐增大。可知, 越靠近锐角平分线方向, 烧结颈的生长速度越快, 形成的烧结颈越大。

3 影响金属纤维烧结颈形成的主要因素

本研究的主要目的就是研究影响金属纤维烧结颈形成的主要因素。初始局部几何结构和初始演化速度对烧结颈的形成都会有一定的影响, 本节主要研究这 2 个因素中哪一个因素对烧结颈的形成起到关键作用。由数值模拟结果可以看出金属纤维的烧结颈半径在相近方向的截面上相差不是很大, 为了更加清楚地确定关键的影响因素, 只选取沿着钝角平分线方向、沿着锐角平分线方向和沿着下方纤维方向的截面上的烧结颈进行研究。

3.1 初始局部几何结构对烧结颈形成的影响

图 7 为 2 根夹角为 60° 的金属纤维在沿着钝角平分线方向、沿着锐角平分线方向和沿着下方纤维方向的截面上初始局部几何结构。上方的纤维在沿着钝角平分线方向和沿着下方纤维方向的截面是重合的, 从沿着钝角平分线方向到沿着锐角平分线方向两根纤维之间的距离是减小的。纤维之间越接近, 烧结颈越容易形成, 烧结颈的生长速度越快, 形成的烧结颈越大。

总之, 越靠近锐角平分线方向, 2 根纤维之间的距离越小, 烧结颈的生长速度越快, 形成的烧结颈越大。这与数值模拟的结果是一致的, 说明初始几何结构对烧结颈的形成起主要作用。

3.2 初始演化速度对烧结颈形成的影响

在基于水平集方法框架下建立的椭圆-椭圆模型

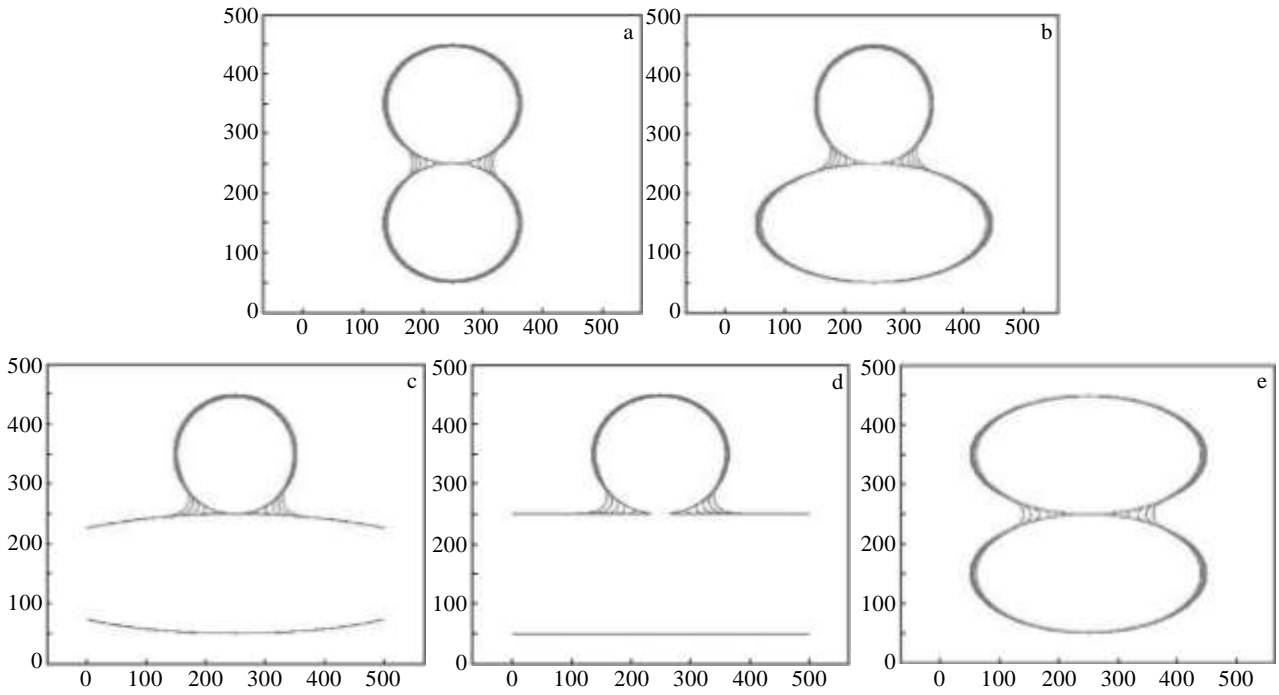


图 4 2 根夹角为 60° 的金属纤维的截面图

Fig.4 Section of two metal fibers with the fiber angle of 60° (a) $\alpha=0^\circ$ (the section in the direction of the bisector of obtuse angle), (b) $\alpha=30^\circ$, (c) $\alpha=45^\circ$, (d) $\alpha=60^\circ$ (the section in the direction of the nether fiber), and (e) $\alpha=90^\circ$ (the section in the direction of the bisector of acute angle)

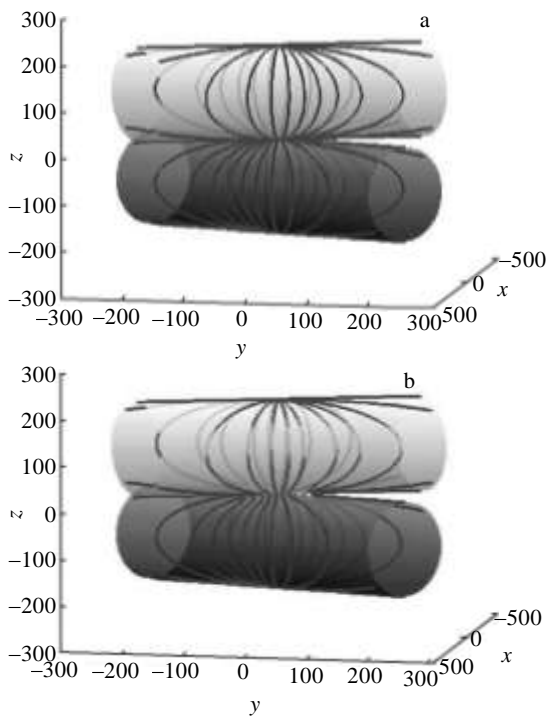


图 5 2 根夹角为 60° 的金属纤维的三维重构几何结构

Fig.5 Reconstructed three dimensional geometry structure of two metal fibers with the fiber angle of 60° (a) initial moments and (b) evolution step number of 1000

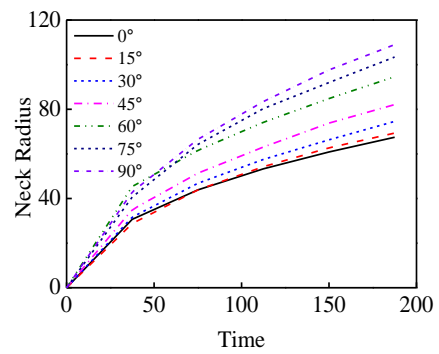


图 6 2 根夹角为 60° 的金属纤维烧结颈半径随时间变化曲线

Fig.6 Sintering neck radius vs time for two metal fibers with the fiber angle of 60°

中, 式(6)的演化速度可以表示为: $F = -B \frac{\partial^2 K}{\partial s^2}$, 这个演化速度的其他形式是^[16]:

$$F = -B \left\{ (1 + y_x^2)^{-\frac{1}{2}} \left[y_{xx} (1 + y_x^2)^{-\frac{3}{2}} \right] \right\}_x \quad (11)$$

式中, 曲率 $K = -y_{xx} (1 + y_x^2)^{-\frac{3}{2}}$ 。本节中只考虑了上方

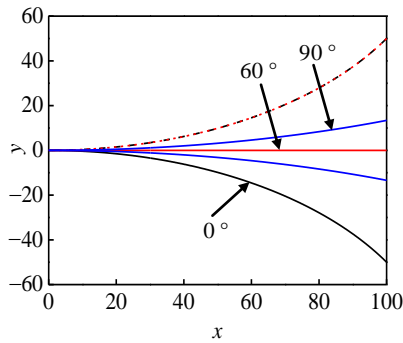


图 7 2 根夹角为 60° 的金属纤维烧结颈的局部几何结构
Fig.7 Initial local geometrical structure of the sintering neck with the fiber angle of 60°

的金属纤维的初始几何结构的演化速度。根据式 (1), 初始局部几何结构的表达式为:

$$y = a - \sqrt{a^2 - x^2 \cos^2(\frac{\beta}{2} - \alpha)} \quad (12)$$

则演化速度可以表示为:

$$F = -\frac{By_{xxx}(1+y_x^2)^2 - 10y_x y_{xx} y_{xxx}(1+y_x^2) + 3y_{xx}^3(5y_x^2 - 1)}{(1+y_x^2)^4} \quad (13)$$

图 8 为上方的金属纤维在沿着钝角平分线方向、沿着锐角平分线方向和沿着下方纤维方向的截面上初始局部几何结构的演化速度。由于在沿着钝角平分线方向和沿着锐角平分线方向的上下两根金属纤维的截面是对称的(对应的演化速度是相同的), 并且在沿着下方纤维方向的下方金属纤维的截面是矩形(对应的演化速度为 0), 所以只需要研究上方的金属纤维的初始演化速度即可。由图 7 可以看出上方的纤维在沿着钝角平分线方向和沿着下方纤维方向的截面是重合的, 所以它们对应的演化速度也是相同的(演化速度与曲率的二阶导数成比例), 如图 8 所示。初始演化速

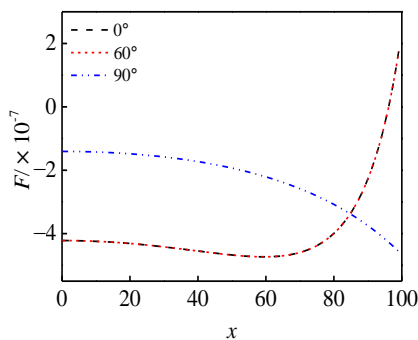


图 8 上方的金属纤维在初始几何结构上的演化速度
Fig.8 Evolution speed of the initial local geometrical structure of the upper metal fiber

度是负的, 说明曲线向 x 轴负方向演化。在物理上, 可以解释为原子沿着表面向颈部运动。沿着钝角平分线方向和沿着下方纤维方向的初始演化速度比沿着锐角平分线方向的演化速度要大。根据烧结动力学理论, 演化速度越大, 形成的烧结颈的速度越快, 形成的烧结颈越大。

总之, 越靠近锐角平分线方向, 初始演化速度越小, 烧结颈的生长速度越慢, 形成的烧结颈越小。这与数值模拟的结果是矛盾的, 说明了初始演化速度对烧结颈的形成作用不是很显著。

3.3 主要因素的数学分析

在数学上, 表面扩散的数学模型实际上就是一个关于初值问题的偏微分方程, 初值往往会对偏微分方程的解有非常大的影响。本研究建立的椭圆-椭圆模型, 在不同方向截面上对应的椭圆结构是不相同的, 相当于在每个截面上建立的椭圆-椭圆模型的初值条件是不同的, 导致数值模拟结果的差异。因此, 初始局部几何结构对烧结颈的形成起到关键作用。

4 结论

1) 将金属粉末烧结的表扩散模型推广到金属纤维烧结的过程中, 在水平集方法框架下建立了椭圆-椭圆模型, 实现了金属纤维烧结颈形成过程的二位数值模拟, 通过重构二维数值模拟结果实现三维数值模拟。

2) 分析了不同方向截面上烧结颈半径的生长速度, 数值结果表明越靠近纤维钝角平分线方向烧结颈半径生长速度越快。

3) 根据数值模拟结果和模型的数学分析, 金属纤维的初始局部几何结构对烧结颈的形成起到关键作用。

参考文献 References

[1] Zhou Wei, Tang Yong, Wan Zhenping *et al. Transactions of Nonferrous Metals Society of China*[J], 2007, 17(5): 1028
 [2] Wang Jianzhong(王建忠), Xi Zhengping(奚正平), Tang Huiping(汤慧萍) *et al. Rare Metal Materials and Engineering* (稀有金属材料与工程)[J], 2011, 40(9): 1688
 [3] Clyne T W, Markaki A E, Tan J C. *Composites Science and Technology*[J], 2005, 65(15): 2492
 [4] Wang Jianzhong(王建忠), Tang Huiping(汤慧萍), Zhu Jilei(朱纪磊) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2013, 42(12): 2433
 [5] Pranatis A L, Seigle L. *Proceedings of International Conference on Powder Metallurgy*[C]. New York: Interscience, 1961

- [6] Bal'shin M Y, Rybal'chenko M K, Padalko O V *et al.* *Poroshkovaya Metallurgiya*[J], 1964, 3(3): 185
- [7] Kostornov A G, Akhmedov M K. *Poroshkovaya Metallurgiya* [J], 1993, 369(9): 110
- [8] Kostornov A G, Fedorchenko I M, Shevchuk M S *et al.* *Poroshkovaya Metallurgiya*[J], 1972, 109(1): 41
- [9] Kostornov A G, Fedorova N E, Chernyshev L I. *Poroshkovaya Metallurgiya*[J], 1981, 227(11): 21
- [10] Kostornov A G, Galstyan L G. *Poroshkovaya Metallurgiya*[J], 1984, 254(2): 41
- [11] Kostornov A G, Kirichenko O V, Brodikovskii N P. *Poroshkovaya Metallurgiya*[J], 2008, 47(9): 21
- [12] Kostornov A G, Kirichenko O V, Brodikovskii N P. *Poroshkovaya Metallurgiya*[J], 2008, 47(5): 39
- [13] Zhang Wen, Gladwell I. *Computational Materials Science*[J], 1998, 12(2): 84
- [14] Zhang Wen, Schneibel J H. *Acta Metall Mater*[J], 1995, 43(12): 4377
- [15] German R M, Lathrop J F. *Journal of Materials Science*[J], 1978, 13(5): 921
- [16] Mullins W W. *J Appl Phys*[J], 1957, 28(3): 333
- [17] Osher S, Sethian J A. *J Comput Phys*[J], 1988, 79(1): 12
- [18] Osher S, Fedkiw R. *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*[M]. New York: Springer-Verlag Inc, 2003: 3
- [19] Sethian J A. *Commun Math Phys*[J], 1995, 101(4): 487
- [20] Sethian J A. *Level Set Method: Evolving Interface in Geometry, Fluid Mechanics, Computer Vision and Materials Science*[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1996: 31
- [21] Khenner M, Averbuch A, Isreali M *et al.* *J Comput Phys*[J], 2001, 170 (2): 764

Three-dimensional Simulation of the Sintering Metal Fibers by Surface Diffusion

Chen Dongdong¹, Zheng Zhoushun¹, Tang Huiping², Wang Jianzhong²

(1. Central South University, Changsha 410083, China)

(2. State Key Laboratory of Porous Metal Materials, Northwest Institute for Nonferrous Metal Research, Xi'an 710016, China)

Abstract: Based on the section of the junction of two metal fibers which is different oval-oval geometry structure in different directions, the oval-oval model for the sintering crunode of two metal fibers was established by surface diffusion in one section. The model was numerically solved by a level set method to achieve the numerical simulation of the growth process of the sintering crunode in different sections. The three dimensional numerical simulation of the growth process of the sintering crunode was achieved by reconstituting the numerical simulation results in these sections. For the two metal fibers with the fiber angle 60° , the three-dimensional numerical simulation of the growth process of the sintering crunode was implemented, and the growth rates of sintering neck were discussed in different sections. The numerical simulation results show that the closer to the bisector of acute angle the direction is, the faster the growth rate of sintering neck is. The initial local geometrical structure in each section plays a key role in the sintering neck formation.

Key words: metal fiber; surface diffusion; sintering neck; numerical simulation; initial local geometrical structure

Corresponding author: Zheng Zhoushun, Ph. D., Professor, School of Mathematics and Statistics, Central South University, Changsha 410083, P. R. China, E-mail: zszheng@csu.edu.cn