

Ю. СТОЯН

Інститут проблем машинобудування ім. А.М. Підгорного НАН України, Харків, Україна, e-mail: *yustoyan19@gmail.com*.

О. ПАНКРАТОВ

Інститут проблем машинобудування ім. А.М. Підгорного НАН України, Харків, Україна, e-mail: *pankratov2001@yahoo.com*.

І. ЛЕМІШКА

Національний університет «Львівська політехніка», Львів, Україна, e-mail: *mzihor@ukr.net*.

З. ДУРЯГІНА

Національний університет «Львівська політехніка», Львів, Україна, e-mail: *zduriagina@gmail.com*.

Дж. БЕННЕЛЛ

Університет Лідса, Лідс, Англія, e-mail: *J.Bennell@leeds.ac.uk*.

Т. РОМАНОВА

Інститут проблем машинобудування ім. А.М. Підгорного НАН України; Харківський національний університет радіоелектроніки, Харків, Україна; Університет Лідса, Лідс, Англія, e-mail: *tarom27@yahoo.com*.

П. СТЕЦЮК

Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, Київ, Україна, e-mail: *stetsyukp@gmail.com*.

МОДЕЛЮВАННЯ ЗАПОВНЕННЯ 3D-ОБ'ЄМУ НЕСФЕРИЧНИМИ ТА СФЕРИЧНИМИ ЧАСТИНКАМИ ПОРОШКУ ТИТАНОВИХ СПЛАВІВ ДЛЯ АДИТИВНОГО ВИРОБНИЦТВА¹

Анотація. Розроблено підхід до моделювання пошарового заповнення певного 3D-об'єму з комбінуванням несферичних та сферичних частинок порошку різного фракційного складу. Побудовано математичну модель задачі пакування регулярних та нерегулярних об'єктів, що вільно рухаються, із застосуванням методу *phi*-функцій. Запропоновано евристичний алгоритм, який використовує нелінійну оптимізацію для обчислення коефіцієнта щільності пакування/поруваності. Виконано порівняння результатів числового моделювання з експериментальними даними, отриманими для суміші сферичних та поліедральних порошків титанових сплавів. Встановлено, що відсоткове співвідношення частинок порошку в межах досліджуваної фракції, отримане за допомогою розробленого алгоритму, з високою точністю відповідає експериментальним результатам. Це дає змогу використовувати результати числового моделювання замість дорогих експериментальних досліджень. Застосування математичних моделей в адитивному виробництві дає можливість підвищити ефективність кожного етапу технологічного процесу, зменшити кількість бракованих виробів, раціонально планувати розхід енергетичних і матеріальних ресурсів.

Ключові слова: пакування, сферичні та несферичні частинки, 3D-об'єм, математичне моделювання, нелінійна оптимізація, адитивне виробництво.

ВСТУП

Адитивне виробництво, відоме також як 3D-друк, має величезний потенціал у галузі виготовлення різноманітних виробів та розроблення нових матеріалів. Ця технологія має надзвичайно великий вплив на всі галузі науки, техніки та економіки, відкриваючи нові перспективи для вже наявних технологій [1]. Вона забезпечує безліч можливостей для розв'язання складних проблем, пов'язаних з енергозаощадженням, матеріалозаощадженням та екологічними викликами.

За допомогою 3D-принтерів можна створювати фізичні об'єкти, виходячи з їхніх тривимірних моделей. Це особливо важливо для аерокосмічної галузі,

¹ Робота підтримана Національним фондом фундаментальних досліджень України (грант #02.2020/167), Volkswagen Foundation (грант #97775) та British Academy (грант #100072).

енергетики, інженерії, будівництва та архітектури, а також для медицини та біотехнологій. Адитивне виробництво перевершує традиційні технології як за економічними показниками, так і за термінами впровадження технологічних операцій [2]. Це забезпечує гнучкість та динамічність виробництва, оскільки дає змогу створювати складні деталі та вироби зі значною ефективністю та меншими витратами. Слід зазначити, що використання 3D-друку в медицині радикально змінює підходи до створення протезів, імплантатів та моделей для підготовки складних хірургічних операцій. У такий спосіб розробляють унікальні рішення, адаптовані до конкретного завдання, забезпечуючи цим високу точність та оптимальні результати. Це сприяє скороченню часу, витраченого на розроблення та впровадження інноваційних технологій [3, 4].

Адитивні технології можна реалізувати у різні способи, зокрема, із застосуванням лазерних 3D-принтерів [5]. При цьому використовують різноманітні матеріали, як-от: полімери, бетони, кераміку, композитні метали та порошкові сплави. Процес спікання порошків полягає у повному або частковому розплавленні підготовленої суміші для забезпечення з'єднання частинок порошку між собою. Це дає змогу створювати точні деталі, прототипи, протези, моделі та навіть ювелірні вироби з різних матеріалів.

Зауважимо, що адитивні технології з використанням порошкових сплавів відкривають нові перспективи для різних галузей промисловості [6]. Це передусім стосується порошків титану, алюмінію, міді та сплавів на їхній основі, порошків неіржавної сталі, нікелевих сплавів, благородних металів тощо. З-поміж зазначених матеріалів особливо перспективними є порошки титанових і нікелевих сплавів, які одночасно мають високу питому міцність, корозійно-ерозійну стійкість та технологічність. До того ж слід зазначити, що в Україні вже є технологія одержання несферичних порошків цих сплавів [7].

Для отримання виробів із металевих порошків методом 3D-друку використовують два основні підходи. Перший полягає у розплавленні або спіканні послідовно нанесених шарів порошку на платформу 3D-принтера відповідно до CAD-моделей. Згідно з другим підходом попередньо оплавлений порошок подають шар за шаром для друкування виробу відповідно до CAD-моделі.

Послідовне ізотермічне нарощування шарів порошкових матеріалів і далі повільне охолодження дають змогу сформувати мікроструктуру виробів, близьку до рівноважної. Однак, незалежно від підходу, що використовується для адитивного виробництва, серйозною проблемою є поруватість готового продукту, якої складно уникнути під час 3D-друку. Це може спричинити погіршення механічних властивостей кінцевого виробу [4, 8].

Важливим аспектом якісного спікання порошку є щільність упакування окремих частинок. Тому перед процесом спікання потрібно оптимізувати розподіл частинок порошку як за розміром, так і за формою. Інакше кажучи, на стадії покрокового нарощування шарів слід узгодити кількісне співвідношення фракцій порошку різного розміру та врахувати особливості мікрорельєфу окремих його частинок. Крім того, регулюючи температуру спікання, можна уодноріднити та диспергувати мікроструктуру, оптимізувати її фазовий склад, мінімізувати кількість закритих і відкритих пор. Такий підхід попереднього «конструювання» мікроструктури виробу забезпечить високу питому міцність, підвищить опір повзучості і корозійну стійкість використаного матеріалу [8].

Отже, для отримання якісного виробу потрібно не лише підібрати фазовий та гранулометричний склад порошків, а й оптимізувати параметри техно-

логічного процесу їхнього отримання, щоб досягти максимально можливого ступеня однорідності частинок порошку та усунути дефекти їхньої поверхні [2].

Впровадження адитивних технологій в ортопедії, трансплантології, стоматології та аерокосмічній галузі дало змогу розширити спектр використання порошкових сплавів на основі неіржавних сталей, цирконію та титану [5, 9]. Постійно зростає потреба в поетапному оцінюванні їхнього хімічного, фазового, фракційного складу та технологічних властивостей. Це оцінювання також включає контроль придатності підготованої суміші порошків з певним кількісним співвідношенням окремих фракцій для 3D-друку [10]. Здійснити це традиційними методами не можна, тому виникає потреба у застосуванні фізико-математичних та комп'ютерних методів моделювання. Вони дадуть змогу комплексно розв'язати матеріалознавчі та технологічні проблеми оптимізації заповнення заданого об'єму частинками порошку різної форми та розмірів. Це, своєю чергою, забезпечить якість та довговічність кінцевого продукту. Зокрема, під час виготовлення металевих порошків буде здійснено прогнозування оптимальних розмірів та форми бездефектних частинок порошку, що забезпечить максимальну щільність упакування й однорідний розподіл частинок, а також зниження рівня поруватості у готовому виробі. Створені математичні моделі та програмні продукти на їхній основі можна використовувати «step by step» для оптимізації технологічного процесу попереднього спікання частинок порошку та дальшого 3D-друку. При цьому будуть спрогнозовані та забезпечені оптимальні значення температури, часу та тиску [11].

Послідовність дій, які стосуються розв'язання задачі «пакування рюкзака» (knapsack problem), може надати цінну інформацію у цьому контексті. Процедура розв'язання цієї задачі передбачає певні послідовні етапи від написання алгоритму через створення фізико-математичної моделі та безпосередньо процедури моделювання до готового програмного продукту, за допомогою якого можна не тільки оптимізувати розміщення частинок порошку в заданому об'ємі, але і досягти максимально можливих експлуатаційних властивостей надрукованого виробу.

Застосування математичних моделей в адитивному виробництві дає змогу підвищити ефективність кожного етапу технологічного процесу, зменшити кількість бракованих виробів, раціонально планувати розхід енергетичних і матеріальних ресурсів.

Метою цього дослідження є розроблення підходу до моделювання пошарового заповнення певного 3D-об'єму з комбінуванням несферичних та сферичних частинок порошку різного фракційного складу.

Конкретні завдання цього дослідження є такими.

1. Розроблення алгоритму оптимізації заповнення 3D-об'єму сумішами несферичних та сферичних частинок різного фракційного складу. Цей алгоритм має забезпечити оптимальне заповнення заданого об'єму частинками титанового порошку різної форми та розмірів.

2. Розроблення підходу, що полягає у порівнянні результатів числового моделювання з експериментальними даними, отриманими для порошків титанових сплавів. Це дасть змогу оцінити точність та достовірність математичної моделі.

3. Проведення аналізу отриманих результатів та встановлення відповідності між результатами числового моделювання та експериментальними даними. Це дасть змогу зрозуміти, з якою ефективністю розроблений підхід відтворює реальні умови заповнення та чи може він замінити дорогі експериментальні дослідження.

Основна цінність цього дослідження полягає в тому, що розроблений підхід до моделювання пошарового заповнення дасть можливість заощадити час, ресурси та кошти, які раніше витрачали на проведення дорогих і тривалих експериментів. Застосування числового моделювання дасть змогу ефективно прогнозувати результати заповнення контейнера з комбінуванням несферичних та сферичних частинок порошку різного фракційного складу. Це сприятиме не тільки покращенню процесу адитивного виробництва, але й удосконаленню технологій виготовлення металевих порошків та оптимізації їхніх властивостей.

ПОСТАНОВКА ТА МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ЗАДАЧІ ПАКУВАННЯ

Нехай Ω — кубоїдний контейнер заданих розмірів a, b, c . Визначимо впорядковану множину сферичних і несферичних частинок з N об'єктів відповідно до закону (законів) розподілу за розмірами та частотою появи частинок як $\Xi = \{A_1, A_2, \dots, A_N\}$. Вважатимемо набір багатогранників апроксимацією несферичних частинок порошку, а набір сфер — апроксимацією сферичних частинок порошку.

Порошок поділено на L різних фракцій, в кожній з яких задано емпіричний закон розподілу частинок за розміром та формою. Прогнозовану кількість частинок, які будуть розміщені в контейнері Ω , визначимо як $N = V_\Omega / V_E$. Тут V_E — об'єм частинки середнього розміру.

Позначимо $u_i = (v_i, \theta_i)$ змінний вектор руху (параметрів розміщення) частинки $A_i \in \Xi$, де $v_i = (x_i, y_i, z_i)$ — вектор трансляції, $\theta_i = (\theta_i^1, \theta_i^2, \theta_i^3)$ — вектор параметрів обертання (для несферичної частинки).

Позначимо частинку, що рухається, $A_i(u_i) = \{p \in R^3 : p = v_i + M(\theta_i)p^0\}$, де $p^0 \in A_i$, $M(\theta_i)$ — стандартна матриця обертання.

Процес заповнення заданого 3D-об'єму частинками порошку, що відповідає закону розподілу, можна сформулювати як задачу пакування максимальної кількості об'єктів $A_i(u_i) \in \Xi$ у контейнері Ω для обчислення коефіцієнта пакування/поруватості за умови таких геометричних обмежень:

- попарне неперетинання об'єктів, тобто

$$\text{int } A_i(u_i) \cap \text{int } A_j(u_j) = \emptyset, \quad A_i, A_j \in \Xi, \quad i > j \in I_N = \{1, \dots, N\}, \quad (1)$$

- включення кожного об'єкта $A_i \in \Xi$ у контейнер Ω , тобто

$$A_i(u_i) \subset \Omega \Leftrightarrow A_i(u_i) \cap \Omega^* = \emptyset, \quad i \in I_N, \quad (2)$$

де $\Omega^* = R^3 / \text{int } \Omega$.

У багатьох публікаціях розглянуто різні задачі розміщення сферичних/несферичних об'єктів та методи їхнього розв'язання (див., наприклад, [12–19] та відповідні посилання).

Підхід, представлений у цій роботі, дає змогу моделювати природний процес «насіпання» сферичних та несферичних частинок у контейнер заданого об'єму відповідно до закону розподілу частинок за формою та розміром.

Для моделювання обмежень розміщення сферичних і несферичних частинок у контейнері з урахуванням їхнього неперервного обертання використано метод *phi*-функцій [20, 21]. Далі розглянуто опуклі багатогранні оболонки як моделі несферичних частинок порошку.

Неперетинання несферичних частинок. Квазі*phi*-функцію багатогранників $A_i(u_i)$ та $A_j(u_j)$ для опису умови (1) можна визначити так:

$$\Psi_{ij}(u_i, u_j, t_{ij}) = \min \{\psi_i(u_i, t_{ij}), \psi_j(u_j, t_{ij})\}, \quad (3)$$

де u_i — параметри розміщення багатогранників A_i та A_j , $\psi_i(u_i, t_{ij}) = \min \{\omega_{ij}(p_k^i), k=1, \dots, m_i\}$ — ϕ -функція багатогранника $A_i(u_i)$ та півпростору $H_{ij}(t_{ij}) = \{(x, y, z): \omega_{ij}(x, y, z, t_{ij}) \leq 0\}$, t_{ij} — параметри площини $P_{ij}(t_{ij}) = \{(x, y, z): \omega_{ij}(x, y, z, t_{ij}) = 0\}$, $\psi_j(u_j, t_{ij}) = \min \{-\omega_{ij}(p_l^j, t_{ij}), l=1, \dots, m_j\}$ — ϕ -функція багатогранника $A_j(u_j)$ та півпростору $H_{ij}^*(t_{ij}) = R^3 / \text{int } H_{ij}(t_{ij})$, $p_k^i, k=1, \dots, m_i, p_l^j, l=1, \dots, m_j$, — вершини багатогранників $A_i(u_i)$ та $A_j(u_j)$.

Зазначимо, що $\Psi_{ij}(u_i, u_j, t_{ij}) \geq 0 \Rightarrow \text{int } A_i(u_i) \cap \text{int } A_j(u_j) = \emptyset$ для певного $t_{ij} \in R^3$.

Неперетинання сферичних частинок. ϕ -функція для сферичних об'єктів $A_i(v_i)$ та $A_j(v_j)$ для опису умови (1) має вигляд

$$\phi_{ij}(v_i, v_j) = (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 - (r_i + r_j)^2, \quad (4)$$

де r_i та r_j — радіуси, v_i та v_j — центри сферичних частинок $A_i, A_j \in \Xi$ відповідно.

Зазначимо, що $\phi_{ij}(v_i, v_j) \geq 0 \Leftrightarrow \text{int } A_i(v_i) \cap \text{int } A_j(v_j) = \emptyset$.

Неперетинання несферичних та сферичних частинок. Квазі ϕ -функцію багатогранника $A_i(u_i)$ та сфери $A_j(v_j)$ для опису умови (1) визначимо так:

$$\phi_{ij}(u_i, v_j, t_{ij}) = \min \{\psi_i(u_i, t_{ij}), \varphi_j(v_j, t_{ij})\}, \quad (5)$$

де u_i — параметри розміщення багатогранника $A_i(u_i)$, v_j — центр сфери $A_j(v_j)$, $\psi_i(u_i, t_{ij}) = \min \{\omega_{ij}(p_k^i, t_{ij}), k=1, \dots, m_i\}$ — ϕ -функція багатогранника $A_i(u_i)$ та півпростору $H_{ij}(t_{ij})$, $\varphi_j(v_j, t_{ij}) = \min \{-(\omega_{ij}(v_j, t_{ij}) - r_j)\}$ — ϕ -функція сфери $A_j(v_j)$ та півпростору $H_{ij}^*(t_{ij})$, $p_k^i, k=1, \dots, m_i$, — вершини багатогранника $A_i(u_i)$, тоді як r_j — радіус сферичного об'єкта $A_j(v_j)$.

Зазначимо, що $\phi_{ij}(u_i, v_j, t_{ij}) \geq 0 \Rightarrow \text{int } A_i(u_i) \cap \text{int } A_j(v_j) = \emptyset$ для певного $t_{ij} \in R^3$.

Отже, умову (1) можна описати нерівністю $\Phi_{ij} \geq 0$, де Φ_{ij} має вигляд (3), (4) або (5) залежно від форм об'єктів A_i та A_j .

Включення несферичних частинок. ϕ -функцію багатогранника $A_i(u_i)$ та об'єкта Ω^* для опису умови (2) можна визначити так:

$$\psi'_i(u_i) = \min_{k=1, \dots, m_i} \{\psi'_{1k}(u_i), \psi'_{2k}(u_i), \dots, \psi'_{6k}(u_i)\}, \quad (6)$$

де u_i — змінні параметри розміщення багатогранника A_i ,

$$\psi'_{1k}(u_i) = x_i + p_{xk}^i, \psi'_{2k}(u_i) = -(x_i + p_{xk}^i) + a, \psi'_{3k}(u_i) = y_i + p_{yk}^i,$$

$$\psi'_{4k}(u_i) = -(y_i + p_{yk}^i) + b, \psi'_{5k}(u_i) = z_i + p_{zk}^i, \psi'_{6k}(u_i) = -(z_i + p_{zk}^i) + c,$$

а $p_k^i = (p_{xk}^i, p_{yk}^i, p_{zk}^i), k=1, \dots, m_i$, — вершини багатогранника $A_i(u_i)$.

Зазначимо, що $A_i(u_i) \subset \Omega \Leftrightarrow \psi'_i(u_i) \geq 0$.

Включення сферичних частинок. ϕ -функцію сферичного об'єкта $A_i(v_i)$ та об'єкта Ω^* для опису умови (2) можна визначити як

$$\phi_i(v_i) = \min \{\varphi'_1(v_i), \varphi'_2(v_i), \dots, \varphi'_6(v_i)\}, \quad (7)$$

де

$$\begin{aligned}\varphi_1^{i_i}(v_i) &= x_i + r_i, \quad \varphi_2^{i_i}(v_i) = -(x_i + r_i) + a, \quad \varphi_3^{i_i}(v_i) = y_i + r_i, \\ \varphi_4^{i_i}(v_i) &= -(y_i + r_i) + b, \quad \varphi_5^{i_i}(v_i) = z_i + r_i, \quad \varphi_6^{i_i}(v_i) = -(z_i + r_i) + c,\end{aligned}$$

а r_i — радіус сферичного об'єкта $A_i \in \Xi$.

Зазначимо, що $A_i(v_i) \subset \Omega \Leftrightarrow \varphi_i'(v_i) \geq 0$.

Отже, умову (2) можна описати нерівністю $\Phi_i \geq 0$, де Φ_i має вигляд (6) або (7) залежно від форми об'єкта A_i .

Математичну модель задачі пакування можна представити так:

$$\max_{u, t, \eta} \sum_{i=1}^N \eta_i \quad (8)$$

за умов

$$\eta_i \cdot \eta_j \cdot \Phi_{ij}(u_i, u_j, t_{ij}) \geq 0, \quad i < j \in I_N, \quad (9)$$

$$\eta_i \cdot \Phi_i(u_i) \geq 0, \quad i \in I_N, \quad (10)$$

$$u = (u_i, i \in I) \in R^{6N}, \quad u_i = (v_i, \theta_i) \in R^6, \quad (11)$$

$$t = (t_{ij}, i < j \in I_N), \quad \eta = (\eta_i, i \in I_N) \in \Lambda^N, \quad \eta_i \in \{0, 1\}, \quad (12)$$

де (u, t) — вектор неперервних змінних, η — вектор булевих змінних,

$\eta_i = \begin{cases} 1, & \text{якщо } \Phi_i(u_i) \geq 0, \\ 0, & \text{якщо } \Phi_i(u_i) < 0. \end{cases}$ Умова неперетинання визначається нерівністю

$\Phi_{ij}(u_i, u_j, t_{ij}) \geq 0$ з використанням функцій (3)–(5), тоді як умова включення $T_i(u_i)$ у контейнер Ω описується нерівністю $\Phi_i(u_i) \geq 0$ за допомогою *phi*-функцій (6), (7).

Для розв'язання задачі (8)–(12) запропоновано евристичний алгоритм, представлений у наступному розділі.

АЛГОРИТМ РОЗВ'ЯЗАННЯ

В алгоритмі використано ідею пошарового розміщення частинок у поєднанні з методом оптимізації за групами змінних. Функції (3)–(7) застосовано для розв'язання задач нелінійного програмування під час пошуку оптимального розміщення об'єктів $A_i \in \Xi$, що належать активному шару.

Основні кроки алгоритму є такими.

Крок 1. Визначаємо висоту Δ активного шару для заданих частинок (в обчислювальних експериментах вважаємо, що $\Delta = 3d_a$, де $d_a = \sum_{k=1}^m f_k D_k$ — середній діаметр частинок, обчислений відповідно до заданого закону розподілу розмірів частинок). Нижня межа h_b активного шару збігається з основою контейнера. Нехай номер частинки $n=1$.

Крок 2. Збільшуємо висоту контейнера на $2D_m$ (D_m — максимальний діаметр частинок).

Крок 3. Вибираємо тип частинки A_n з урахуванням заданого закону розподілу типів частинок у фракції.

Крок 4. Вибираємо розмір частинки A_n на основі заданого закону розподілу розмірів для фракції.

Крок 5. Генеруємо у випадковий спосіб допустимі параметри розміщення u_n^0 частинки A_n у верхній частині контейнера у шарі висотою D_m .

Крок 6. Починаючи з побудованої стартової точки u_n^0 , розміщуємо частинку A_n , для чого розв'язуємо задачу нелінійного програмування

$$\min_{u_n, \tau} z_n \quad (13)$$

за умов

$$\Phi_{nj}(u_n, \hat{u}_j, \tau_{nj}) \geq 0, \quad j \in \hat{I}, \quad \tau = (\tau_{nj}, j \in \hat{I}), \quad \tau_{nj} \in R^3, \quad (14)$$

$$\Phi_n(u_n) \geq 0, \quad u_n = (x_n, y_n, z_n, \theta_n^1, \theta_n^2, \theta_n^3) \in R^6, \quad (15)$$

$$z_n > h_b, \quad (16)$$

де $\hat{I} \subset I_N$ — індексна множина частинок, що вже розміщені у контейнері та перетинаються з поточним активним шаром.

У такий спосіб враховуємо умови неперетинання тільки для тих частинок, що перетинаються з активним шаром, і додаємо умову належності частинки півпростору $z > h_b$.

Фіксуємо вектор параметрів розміщення u_n частинки A_n , який отримано як локальний мінімум задачі (13)–(16).

Крок 7. Якщо нова частинка розміщена вище верхньої межі активного шару $h_a = h_b + \Delta$, присвоюємо $h_a = \min_{s \in A_n} s_z - \Delta$, де $s = (s_x, s_y, s_z) \in R^3$.

Крок 8. Якщо $n < N$ і частинка повністю розміщена в контейнері висотою $c + D_m$, присвоюємо $n = n + 1$ та переходимо до кроку 3.

Крок 9. Відновлюємо стартову висоту контейнера та видаляємо частинки, які не відповідають умовам включення (2), тобто не задовольняють умову належності півпростору $z \leq c$.

ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ

Експериментальні дослідження проведено для суміші порошків титанових сплавів з частинками сферичної та несферичної форми різного фракційного складу (рис. 1). Фракції порошку отримано ситовим методом, який характеризувався малим розкидом частинок за розміром.

Для досягнення високої якості готового виробу потрібно оптимізувати параметри порошків титанових сплавів. Зокрема, слід забезпечити максимально однорідний розмір частинок порошку [22–24]. Тут слід враховувати властивості порошків зі сферичними та несферичними частинками різних фракцій. Під час досліджень здійснено змішування таких частинок та вивчено їхню придатність до пакування.

Для цього проведено аналіз розміру частинок порошків титанового сплаву за допомогою програмного забезпечення для аналізу зображень ImageJ [25, 26]. Відповідні результати представлено на рис. 2 для чотирьох фракцій ($L = 4$), де f — відсоткове співвідношення частинок порошку в межах досліджуваної фракції (по осі ординат), D — діаметр досліджуваних частинок (по осі абсцис).

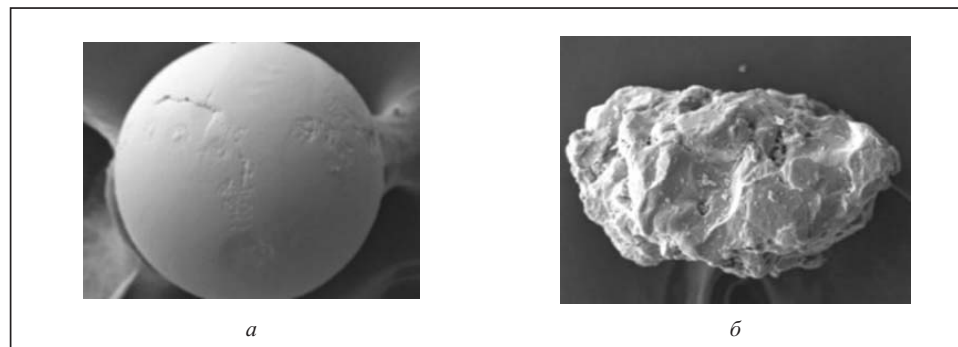


Рис. 1. Морфологія поверхні порошків титанового сплаву з частинками різної форми: сферичної (а), несферичної (б)

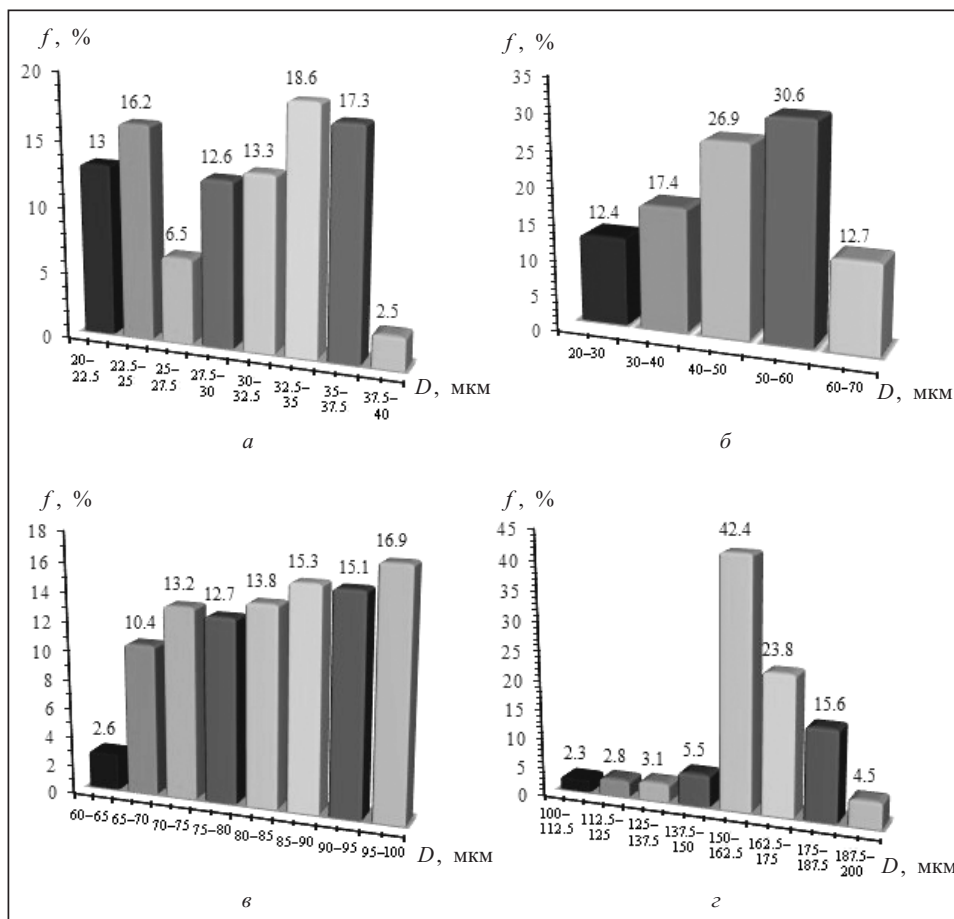


Рис. 2. Гістограми розподілу порошків титанового сплаву з частинками сферичної та несферичної форми для різних фракцій: фракція 1 (20–40 мкм) (а), фракція 2 (20–63 мкм) (б), фракція 3 (63–100 мкм) (в), фракція 4 (100–200 мкм) (г)

Як видно з гістограм розподілу частинок порошку сплаву ВТ20, у фракції 1 переважають частинки, що мають середній діаметр 33 мкм, у фракції 2 — частинки із середнім діаметром 55 мкм, у фракції 3 — із середнім діаметром 97 мкм, а у фракції 4 — із середнім діаметром 156 мкм.

Експериментально встановлено, що зі зменшенням середнього діаметра частинок порошку в межах певної фракції збільшується розкид розмірів інших частинок відносно цього значення.

Числові результати наведено в табл. 1. У третьому і четвертому стовпцях представлено розподіл частинок в абсолютних одиницях та відсотках відповідно. Дані розподілу за діаметром Фере, що відповідають кожній фракції, наведено у другому стовпці. На підставі табл. 1 можна дійти висновку, що фракції порошку досить однорідні і цей порошок можна використовувати для 3D-друку.

Нехай розподіл частинок за формою у разі змішування в заданому об'ємі (кубічному контейнері розмірами $l = w = h = 1000$) є таким: 30 % становлять сферичні частинки та 70 % — несферичні.

На рис. 3 наведено результат пакування частинок порошків титанового сплаву для чотирьох фракцій: фракція 1 — 20–40 мкм (рис. 3, а), фракція 2 — 20–63 мкм (рис. 3, б), фракція 3 — 63–100 мкм (рис. 3, в), фракція 4 — 100–200 мкм (рис. 3, г).

Таблиця 1. Гранулометричний склад досліджуваного порошку

Фракція порошку	Розподіл частинок за діаметром Фере, мкм	Кількість частинок	
		штуки	%
Фракція 1 (20–40 мкм)	20–22.5	58	13.0
	22.5–25	72	16.2
	25–27.5	29	6.5
	27.5–30	56	12.6
	30–32.5	59	13.3
	32.5–35	83	18.6
	35–37.5	77	17.3
	37.5–40	11	2.5
Фракція 2 (20–63 мкм)	20–30	166	12.4
	30–40	232	17.4
	40–50	358	26.9
	50–60	408	30.6
	60–70	170	12.7
Фракція 3 (63–100 мкм)	60–65	38	2.6
	65–70	153	10.4
	70–75	194	13.2
	75–80	188	12.7
	80–85	204	13.8
	85–90	225	15.3
	90–95	223	15.1
	95–100	250	16.9
Фракція 4 (100–200 мкм)	100–112.5	25	2.3
	112.5–125	31	2.8
	125–137.5	34	3.1
	137.5–150	60	5.5
	150–162.5	464	42.4
	162.5–175	261	23.8
	175–187.5	171	15.6
	187.5–200	49	4.5

У табл. 2 представлено результати, отримані за допомогою запропонованого алгоритму для засипання порошку в куб розмірами $a = b = c = 1000$ мкм, та експериментальні результати. Останні відповідають об'ємній щільності пакування частинок досліджуваного порошку.

Обчислювальні експерименти проведено з використанням комп'ютера, що має такі характеристики: процесор AMD Ryzen 5 3500U, Radeon Vega Mobile Gfx 2.10 GHz, оперативна пам'ять 8 ГБ, операційна система Windows 10, IPOPT Dynamic Link Library, Version 3.11.0.0.

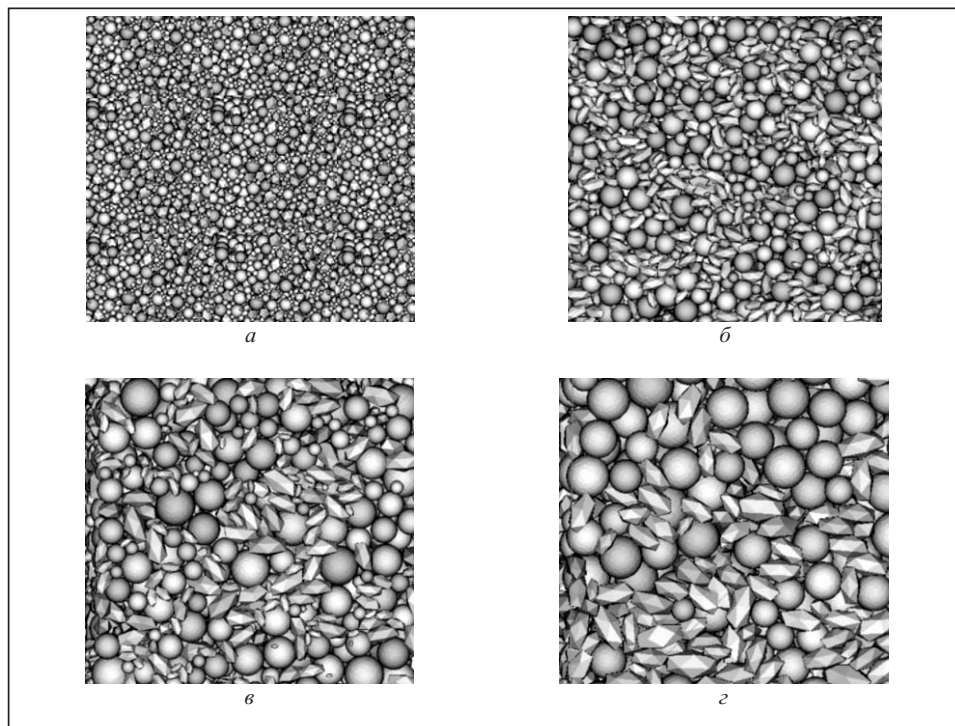


Рис. 3. Результат пакування частинок для чотирьох фракцій: коефіцієнт заповнення 67.7 % для фракції 1 (а), коефіцієнт заповнення 62.24 % для фракції 2 (б), коефіцієнт заповнення 62.95 % для фракції 3 (в), коефіцієнт заповнення 61.76 % для фракції 4 (г)

Таблиця 2. Результати числового моделювання та експериментальні дані

Фракція порошку	Коефіцієнт заповнення		Похибка, %
	експеримент, %	числове моделювання, %	
Фракція 1 (20–40 мкм)	73.68	67.7	5.98
Фракція 2 (20–63 мкм)	65.12	62.24	2.88
Фракція 3 (63–100 мкм)	62.93	62.95	0.03
Фракція 4 (100–200 мкм)	59.77	61.76	1.99

ВИСНОВКИ

Розроблено математичну модель задачі пакування сферичних та несферичних об'єктів, що вільно рухаються, з використанням методу *phi*-функцій. Це дає змогу адекватно описувати процес пакування сумішей сферичних та несферичних частинок у 3D-об'ємі. Запропоновано алгоритм для обчислення коефіцієнта щільності пакування/поруватості. Встановлено, що відсоткові співвідношення частинок порошку для реальних сумішей частинок титанового порошку в межах досліджуваної фракції, отримані за допомогою розробленого алгоритму, з високою точністю відповідають експериментальним результатам. Це свідчить про можливість використання результатів числового моделювання замість проведення витратних експериментальних досліджень.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Abdullah A., Mustafa S., Fawaz M.A., Abdulrahman M. Al-A. Design for additive manufacturing: A systematic review. *Sustainability*. 2020. Vol. 12(19), 7936. <https://doi.org/10.3390/su12197936>.
2. Zhou J., Zhang Y., Chen J.K. Numerical simulation of random packing of spherical particles for powder-based additive manufacturing. *Journal of Manufacturing Science and Engineering*. 2009. Vol. 131, Iss. 3. Article number 031004. <https://doi.org/10.1115/1.3123324>.
3. Meier C., Penny R., Zou Y., Gibbs J., Hart A.J. Thermophysical phenomena in metal additive manufacturing by selective laser melting: fundamentals, modeling, simulation and experimentation. *Annual Reviews of Heat Transfer*. 2018. Vol. 20, Iss. 1. P. 59. <https://doi.org/10.1615/AnnualRevHeatTransfer.2018019042>.
4. Markl M., Körner C. Multiscale modeling of powder bed-based additive manufacturing. *Annual Review of Materials Research*. 2016. Vol. 46. P. 93–123. <https://doi.org/10.1146/annurev-matsci-070115-032158>.
5. Zhang J., Jung Y.-G. Additive Manufacturing: Materials, Processes, Quantifications and Applications. Butterworth Heinemann, 2018. 352 p. <https://doi.org/10.1016/C2016-0-01595-4>.
6. Zhang W., Attar H. Additive manufacturing of high-performance materials. Springer, 2021.
7. Овчинников О.В., Дурягіна З.А., Романова Т.Є., Лемішка І.А., Панкратов А.В., Кулик В.В., Басов Ю.Ф., Хазнаферов М.В. Порошкові титанові сплави для адитивних технологій: структура, властивості, моделювання. Київ: Наукова думка, 2021. 196 с.
8. Zhao Z., Li L., Tan L., Bai P., Li J., Wu L., Liao H., Cheng Y. Simulation of stress field during the selective laser melting process of the nickel-based superalloy. *Materials*. 2018. Vol. 11, Iss. 9. Article number 1525. <https://doi.org/10.3390/ma11091525>.
9. Gebhardt A. Understanding Additive Manufacturing: Rapid Prototyping, Rapid Tooling, Rapid Manufacturing. 2nd ed. Мюнхен: Carl Hanser Verlag, 2017. 161 p.
10. Chen J., Hou W., Wang X., Chu S., Yang Z. Microstructure, porosity and mechanical properties of selective laser melted AlSi10Mg. *Chinese Journal of Aeronautics*. 2020. Vol. 33, Iss. 7. P. 2043–2054. <https://doi.org/10.1016/j.cja.2019.08.017>.
11. Svyetlichnyy D. Model of the selective laser melting process-powder deposition models in multistage multi-material simulations. *Appl. Sci*. 2023. Vol. 13, Iss. 10. Article number 6196. <https://doi.org/10.3390/app13106196>.
12. Hifi M., Mohamed-Youssouf A., Yousef L. A threshold search-based population algorithm for the sphere packing problem. *Knowledge-Based Systems*. 2023. Vol. 261. Article number 110177. <https://doi.org/10.1016/j.knsys.2022.110177>.
13. Romanova T.E., Stetsyuk P.I., Fischer A., Yaskov G.M. Proportional packing of circles in a circular container. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2023. Vol. 59, N 1. P. 82–89. <https://doi.org/10.1007/s10559-023-00544-8>.
14. M'Hallah R., Alkandari A., Mladenovic N. Packing unit spheres into the smallest sphere using VNS and NLP. *Computers & Operations Research*. 2013. Vol. 40, Iss. 2. P. 603–615. <https://doi.org/10.1016/j.cor.2012.08.019>.
15. Zhao B., An X., Wang Y., Zhao H., Shen L., Sun X., Zou R. Packing of different shaped tetrahedral particles: DEM simulation and experimental study. *Powder Technology*. 2020. Vol. 360. P. 21–32. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2019.09.072>.
16. Zhao B., An X., Zhao H., Gou D., Shen L., Sun X. DEM simulation on random packings of binary tetrahedron-sphere mixtures. *Powder Technology*. 2020. Vol. 361. P. 160–170. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2019.09.055>.
17. Li J., An X., Wang J., Zhao H., Zou R., Dong K., Gou D. Experimental study on 3D vibrated packing densification of mono-sized dodecahedral particles. *Powder Technology*. 2020. Vol. 367. P. 703–712. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2020.04.020>.

18. Araújo L.J.P., Özcan E., Atkin J.A.D., Baumers M. Analysis of irregular three-dimensional packing problems in additive manufacturing: A new taxonomy and dataset. *International Journal of Production Research*. 2019. Vol. 57, Iss. 18. P. 5920–5934. <https://doi.org/10.1080/00207543.2018.1534016>.
19. Kiseleva E.M. The emergence and formation of the theory of optimal set partitioning for sets of the n-dimensional euclidean space. Theory and application. *Journal of Automation and Information Sciences*. 2018. Vol. 50, Iss. 9. 1–24.
20. Romanova T., Litvinchev I., Pankratov A. Packing ellipsoids in an optimized cylinder. *European Journal of Operational Research*. 2020. Vol. 285, Iss. 2. 429–443. <https://doi.org/10.1016/j.ejor.2020.01.051>.
21. Kallrath J. Cutting and packing beyond and within mathematical programming. In: *Business Optimisation Using Mathematical Programming*. 2nd ed. Cham: Springer, 2021. P. 495–526. URL: <https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-030-73237-0>.
22. Duriagina Z., Lemishka I., Trostianchyn A., Kulyk V., Shvachko S., Tepla T., Pleshakov E., Kovbasyuk T. The effect of morphology and particle-size distribution of VT20 titanium alloy powders on the mechanical properties of deposited coatings. *Powder Metall. Met. Ceram.* 2019. Vol. 57, Iss. 11–12. P. 697–702. <https://doi.org/10.1007/s11106-019-00033-8>.
23. Duriagina Z., Lemishka I., Litvinchev I., Marmolejo J.A., Pankratov A., Romanova T., Yaskov G. Optimized filling of a given cuboid with spherical powders for additive manufacturing. *Journal of the Operations Research Society of China*. 2021. Vol. 9, Iss. 4. P. 853–868. <https://doi.org/10.1007/s40305-020-00314-9>.
24. Duriagina Z., Pankratov A., Romanova T., Litvinchev I., Bennel, J., Lemishka I., Maximov S. Optimized packing titanium alloy powder particles. *Computation*. 2023. Vol. 11, Iss. 2. Article number 22. <https://doi.org/10.3390/computation11020022>.
25. Verguet A., Messaoudi C., Marco S., Donnadiou P. An ImageJ tool for simplified post-treatment of TEM phase contrast images (SPCI). *Micron*. 2019. Vol. 121. P. 90–98. <https://doi.org/10.1016/j.micron.2019.01.006>.
26. OriginLab. User guide. URL: <http://www.originlab.com/doc/User-Guide>.

**Yu. Stoyan, O. Pankratov, I. Lemishka, Z. Duriagina, J. Bennel,
T. Romanova, P. Stetsyuk**

**SIMULATION OF 3D VOLUME FILLING WITH NON-SPHERICAL AND SPHERICAL
TITANIUM ALLOY POWDER PARTICLES FOR ADDITIVE MANUFACTURING**

Abstract. The authors developed an approach to modeling the layer-by-layer filling of a particular 3D volume with a combination of non-spherical and spherical powder particles of different fractional composition. A mathematical model of the problem of packing regular and irregular freely moving objects is provided using the phi-function technique. A heuristic algorithm that uses nonlinear optimization is proposed for calculating packing density factor/porosity. The results of numerical modeling are compared with experimental data obtained for a mixture of spherical and polyhedral powders of titanium alloys. It is established that the relative frequencies obtained by the developed algorithm correspond to the experimental results with high accuracy. This indicates the possibility of using numerical modeling results instead of costly experimental studies. The use of mathematical modeling and optimization techniques in additive manufacturing makes it possible to improve the efficiency of each stage of the technological process, reduce the number of defective products, and rationally plan the consumption of energy and material resources.

Keywords: packing, spherical and non-spherical particles, 3D volume, mathematical modeling, nonlinear optimization, additive manufacturing.

Надійшла до редакції 05.09.2023