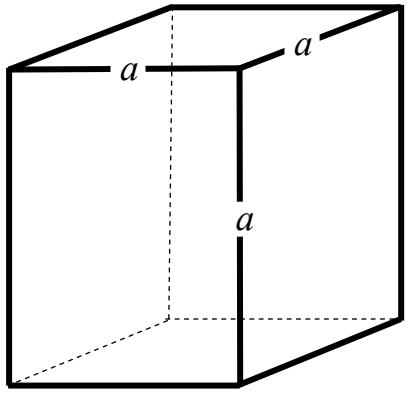
Г. А. Петасюк, кандидат технических наук

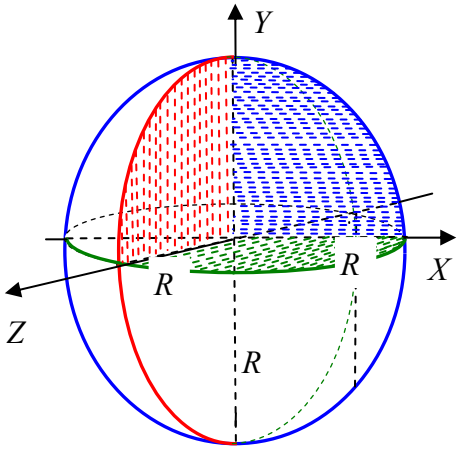
Институт сверхтвердых материалов им. В. Н. Бакуля НАН Украины,
г. Киев, Украина

ЭКСТРАПОЛЯЦИОННО-АФФИННАЯ 3D МОДЕЛЬ ЗЕРНА АЛМАЗНЫХ ПОРОШКОВ И ЕЕ ИНЖЕНЕРИЯ

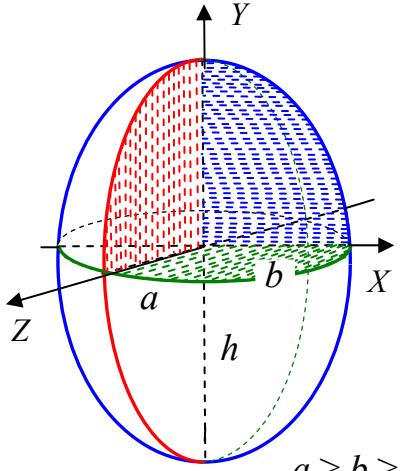
ИЗВЕСТНЫЕ 3D МОДЕЛИ ЗЕРНА, ПРИМЕНЯЕМЫЕ В СФЕРЕ АНАЛИТИЧЕСКОЙ ДИАГНОСТИКИ ХАРАКТЕРИСТИК АЛМАЗНЫХ ПОРОШКОВ И ДРУГИХ АБРАЗИВНЫХ ПОРОШКОВ



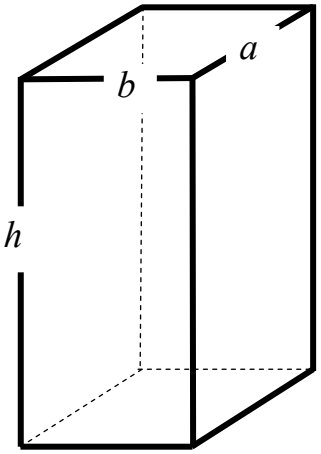
а) Куб



б) Сфера



в) $a \geq b \geq h$ Трехосный эллипсоид

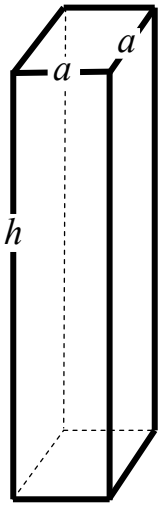


г) Параллелепипед

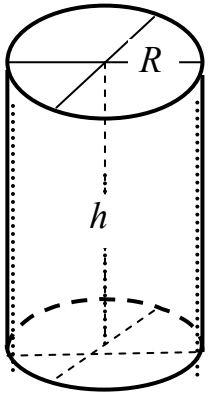
Рис. 1

Таблица 1 – Пространственно-геометрические тела, используемые обычно в качестве 3D моделей зерна алмазных порошков

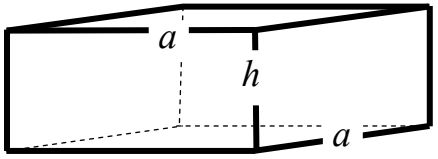
3D модель зерна	Количество унаследованных параметров
Сфера	1
Куб	1
Эллипсоид вращения	2
Трехосный эллипсоид	3
Параллелепипед	3
Прямой круговой цилиндр	2
Стержень квадратного сечения	2
Пластина квадратного сечения	2



г) Стержнень квадратного сечения



д) Прямой круговой цилиндр



ж) Пластина квадратного сечения

ПРАКТИКА ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ИЗВЕСТНЫХ 3D МОДЕЛЕЙ ЗЕРНА АЛМАЗНЫХ ПОРОШКОВ

Решаемая задача	3D модель зерна
Аналитическая диагностика внешней удельной поверхности порошков СТМ	Сфера [1,2], куб [1,2], параллелепипед [1], стержень квадратного сечения [1], пластина квадратного сечения [1]
Аналитическая диагностика насыпной плотности алмазных порошков	Сфера [3, 4]
Аналитический критерий условия прохождения зерна алмазных шлифпорошков через ячейку сита в форме квадрата	Трехосный эллипсоид [5]
Аналитическое определение количества зерен в одном карате алмазных порошков	Сфера [6, 7], куб [7], трехосный эллипсоид [6], прямой круговой цилиндр [6]

Информационные источники

1. Грег С., Синг К. Адсорбция, удельная поверхность, пористость / Перевод с английского под ред. К. В. Чмутова. - М.: Мир, 1970.- 407 с.
2. Паничкина В. В., Уварова И. В. Методы контроля дисперсности и удельной поверхности металлических порошков–Киев: Наукова думка, 1973.–167 с.
3. Циборовский Я. Основы процессов химической технологии / Пер. с польского под ред. П. Г. Романкова. – Л.: Химия, 1967. – 720 с
4. Аксенов Г. И. Основы порошковой металлургии. – Куйбышев: Кн. изд-во, 1962. – 200 с.
5. Порошки и пасты из синтетических алмазов / Ю. И. Никитин, С. М. Уман, Л. В. Коберниченко и др.– Киев: Наук. думка,1992.– 284 с.
6. Бакуль В. Н., Захаренко И. П., Кункин Я. А., Мильштейн М. З. Справочник по алмазной обработке.– Киев: Техника, 1971.– 208 с
7. List, E., Vollstaedt, H., Frenzel, J. Counting particles per carat by means of two-dimensional image analysis / 5th Zhengzhou International Superhard Materials and Related Products Conference // Vollstaedt-Diamant GmbH, Germany.

ПОНЯТИЙНЫЙ АППАРАТ СРАВНИТЕЛЬНОЙ ОЦЕНКИ 3D МОДЕЛЕЙ ЗЕРНА АЛМАЗНЫХ ПОШКОВ

Понятие (термин)	Смысл понятия
АДАПТАЦИЯ модели (к реальному порошку)	установление соответствия между параметрами модели и характеристиками проекции зерна
АДЕКВАТНОСТЬ модели	степень достоверности получаемых с использованием 3D модели результатов
ПРИЗНАКИ адекватности модели	информационные характеристики, влияющие на степень адекватности
КРИТЕРИЙ СРАВНЕНИЯ моделей	параметр или комплекс параметров, допускающий количественное (числовое) выражение. По значению критерия осуществляется ранжирование различных моделей

Критерием сравнения является адекватность. Признаками адекватности выступают:
1. количество унаследованных параметров;
2. совершенство формы зерен диагностируемого порошка, выражающееся в том, допускает ли эта форма аналитическое описание (полное, частичное).

НАУЧНАЯ НОВИЗНА И ПРЕИМУЩЕСТВО ПРЕДЛОЖЕННОЙ ЭКСТРАПОЛЯЦИОННО–АФФИННОЙ 3D МОДЕЛИ ЗЕРНА АЛМАЗНЫХ ПОРОШКОВ

▼ – предложена оригинальная экстраполяционно–аффинная 3D модель зерна алмазных порошков со значительно увеличенным количеством унаследованных параметров и поэтому наиболее близкая к фактической его форме. Модель базируется на таких характеристиках порошка как максимальный и минимальный диаметры проекции зерна, ее площадь и периметр, форма зерна и его высота. Использование этой модели позволяет существенно повысить точность аналитической диагностики алмазных порошков;

▼ – предложенная экстраполяционно–аффинная 3D модель зерна не является каноническим пространственно-обемным телом, но тем не менее допускает полное аналитическое представление (описание).

▼ – разработан и компьютерно реализован алгоритм инженерии (построения) предложенной 3D модели зерна. Алгоритмы основаны на 3D моделировании с использованием математического аппарата отображения аффинного пространства как инструмента моделирования. Разработана методика численного определения объема и площади поверхности предложенной экстраполяционно–аффинной 3D модели зерна.

ПРИМЕНЯЕМЫЙ МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ ИНЖЕНИРИИ ЭКСТРАПОЛЯЦИОННО-АФФИННОЙ 3D МОДЕЛИ ЗЕРНА

Метод построения – 3D-моделирование.
Математический аппарат моделирования – отображения аффинного пространства.
Используются следующие виды преобразования:

1) плоская гомотетия g относительно репера 1 (рис. 2 на следующем слайде), аффинный параметр – коэффициент гомотетии g, скорость его изменения V_g=const, связь между аффинным и независимым параметрами $g=1+V_g\,t$;
2) параллельный перенос относительно того же репера 1 в направлении, составляющем с осями X_1, Y_1, Z_1 углы $\pi/2$, 0 и $\pi/2$, аффинный параметр - длина вектора переноса l, скорость его изменения V_l=const, связь между аффинным и независимым параметрами $l=V_l\,t$.

Совмещенная матрица отображающих операторов гомотетии и переноса

$$m_{gl}=\begin{bmatrix} g & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & l \\ 0 & 0 & g & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$\vec{r}=g\cdot\vec{r}_1+\vec{l}$

$m_r=m_{gl}\cdot m_{r_1}$

Векторное и **матричное** структурные (в аффинных параметрах) уравнения для рассматриваемого отображения аффинного пространства в однородных координатах

$\vec{r}_1=(x_1,y_1,z_1,1)$ ⇒ Прообраз отображения

Результат отображения ⇐ $\vec{r}=(x,y,z,1)$

Параметрические (в независимых параметрах) уравнения:

матрица прообраза ⇐ $m_{r_1}=\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \\ 1 \end{pmatrix}$

$m_r=(x,y,z,1)$ ⇒ матрица образа (результата отображения)

$$x=g\cdot x_1;\quad y=y_1+l;\quad z=g\cdot z_1$$

Коэффициент гомотетии g определяется из условия, что траекторией результирующего движения точки-прообраза при отображении есть кривая, описываемая уравнением эллипса

$$\frac{x_m^2}{a_m^2}+\frac{y_m^2}{h^2}=1 \Rightarrow g=\frac{\sqrt{h^2-l^2}}{h}$$

Предложенная новая экстаполяционно–аффинная 3D модель зерна алмазных порошков и схема ее построения

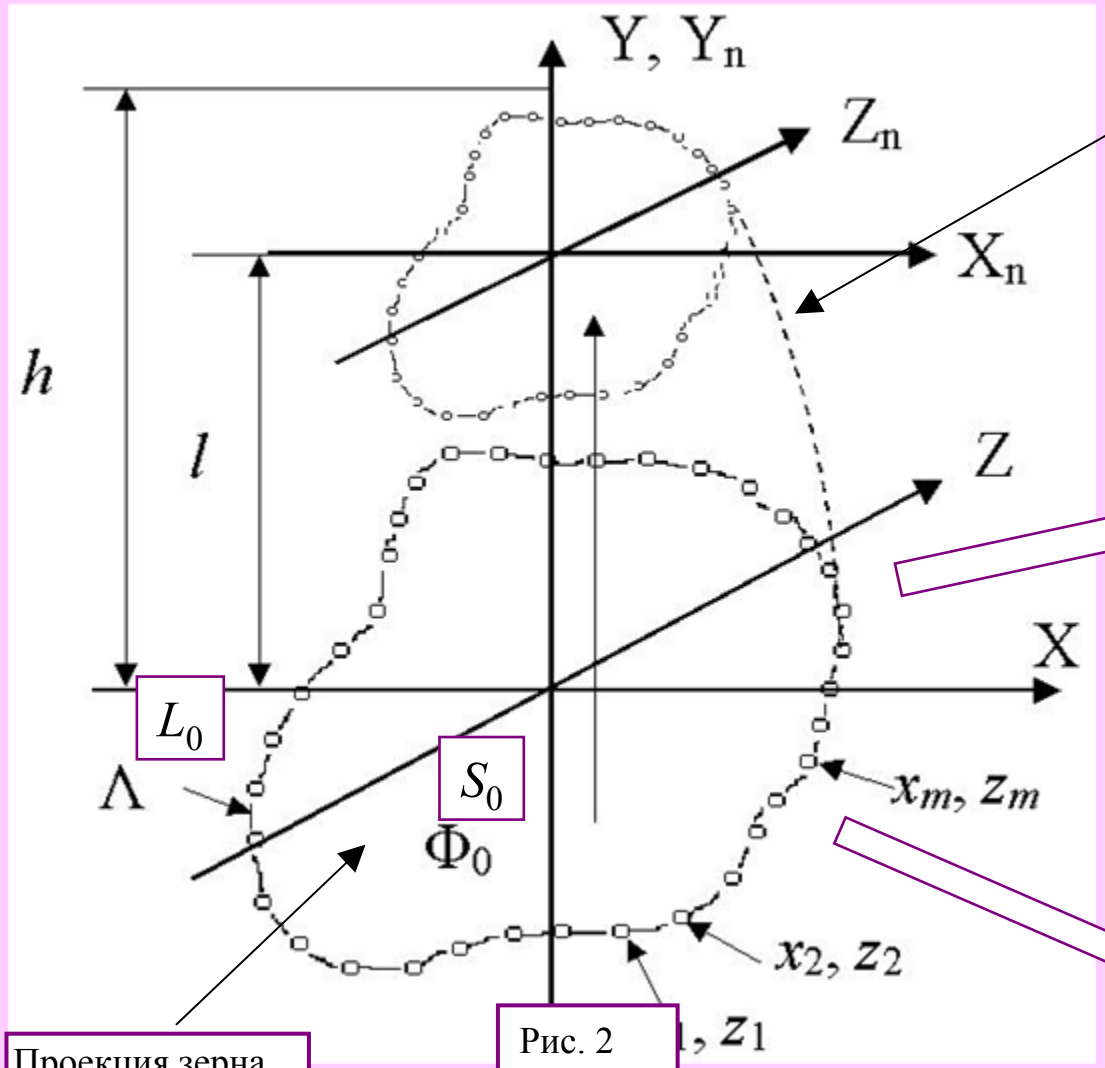
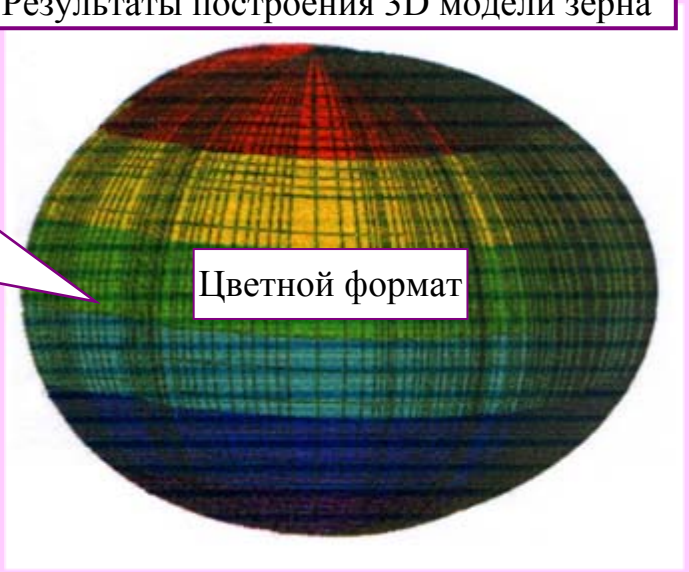


Рис. 2

Проекция зерна, наблюдаемая под микроскопом

Траектория результирующего движения (параллельный перенос + гомотетия) точки-прообраза при отображении

Результаты построения 3D модели зерна



ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ РАСЧЕТА ПЛОЩАДИ ПОВЕРХНОСТИ И ОБЪЕМА МОДЕЛИ

Формулы вычисления площади боковой поверхности ($s_{i,n}$) и объема ($v_{i,n}$) эллипсоидоподобных слоев, образованных разбиением 3D модели зерна, как усеченных некруговых конусов (i – номер анализируемого зерна, n – номер слоя; S_o – площадь проекции зерна, g – коэффициент гомотетии) :

$$s_{i,n} = \frac{t_n^{d\max} + t_n^{d\min}}{2} \cdot \frac{g(y_n) + g(y_{n+1})}{2} \cdot L_0 \quad (1)$$

$$v_{i,n} = S_0 \cdot \Delta y_n \cdot [g^2(y_n) + g^2(y_{n+1}) + g(y_n) \cdot g(y_{n+1})]/3 \quad (2)$$

$$t_n^{d\max} = E(\varphi_{n+1}^{d\max}, k) - E(\varphi_n^{d\max}, k) \quad (3)$$

$$t_n^{d\max} = E(\varphi_{n+1}^{d\min}, k) - E(\varphi_n^{d\min}, k) \quad (4)$$

Эллиптические интегралы 2- го рода:

Используются для вычисление длин дуг эллипсов как образующих усеченных некруговых конусов

Полный

$$E(\varphi,k) = \frac{2\cdot\varphi}{\pi} E(q) + \sin(\varphi)\cdot\cos(\varphi)\cdot \sum_{n=1}^{\infty} t_{2n}\cdot A_{2n}\cdot k^{2n} \quad (5)$$

Обычный

$$E(q) = \frac{\pi}{2\cdot(1+m)} \sum_{n=0}^{\infty} \mu_{2n}\cdot q^{2n} \quad (6)$$

$$k = \frac{\sqrt{a^2 - h^2}}{a}, \quad \varphi = arctg\frac{x}{y}\frac{h}{a}$$

– модуль и аргумент полного эллиптического интеграла 2-го рода соответственно; (7)

$$q = \frac{a - h}{a + h}$$

– модуль полного эллиптического интеграла (8)

$$t_2 = \frac{1}{2}; \quad t_{2n} = \frac{2n-3}{2n} t_{2n-2}$$

$$A_{2n} = \frac{2n-1}{2n} + \frac{1}{2n}\sin^{2n-2}(\varphi), \quad n = 2,3,4,... \quad (9)$$

$$\mu_0 = 1; \quad \mu_2 = \frac{1}{4}; \quad \mu_{2n} = \frac{(2n-3)^2}{(2n)^2}\mu_{2n-2}, \quad n = 2,3,4,... \quad (10)$$

Формулы вычисления площади боковой поверхности (S_i) и объема (V_i) отдельного зерна зерна:

$$S_i = 2\cdot\sum_{n=1}^{N} s_{i,n} \quad (11)$$

$$V_i = 2\cdot\sum_{n=1}^{N} v_{i,n} \quad (12)$$

НОВЫЕ МЕТОДЫ АНАЛИТИЧЕСКОЙ ДИАГНОСТИКИ ХАРАКТЕРИСТИК ПОРОШКОВ СТМ, БАЗИРУЮЩИХСЯ НА ПРЕДЛОЖЕННОЙ 3D МОДЕЛИ ЗЕРНА

1. Экстраполяционно-геометрический метод определения внешней удельной поверхности порошков СТМ

Таблица 2. – Результаты ($S_{уд.}$, м^2/кг) и относительная погрешность (δ,%) определения внешней удельной поверхности стандартных порошков синтетического алмаза известными и разработанным методами.

Марка и зернистость (мкм) порошка	Эталон [1]	По методике работ				Разработанный метод	
		[2]		[3]			
	$S_{уд.}$	$S_{уд.}$	δ	$S_{уд.}$	δ	$S_{уд.}$	δ
АСМ 28/20	260,00	78,32	69,88	57,01	66,53	249,94	3,87
АСМ 60/40	110,00	40,18	63,47	29,52	73,16	123,84	12,54
АС4 160/125	37,00	9,22	75,00	5,39	80,00	36,18	2,22
АС6 63/50	78,00	22,04	71,74	16,62	78,69	69.49	10,90
АС15 100/80	50,00	15,14	75,97	11,68	81,46	48,22	3,56
АС32 400/315	12,00	4,09	66,00	3,42	71,50	11,46	4,67
АС20 315/250	----------	5,23	----------	4,14	----------	19,38	----------
АС50 400/315	----------	4,17	----------	3,39	----------	10,43	----------
АС100 315/250	----------	5,53	----------	4,77	----------	15,09	----------

1. Ниитин Ю. И. Технология изготовления и контроль качества алмазных порошков. – Киев: Наук. думка, 1984. – 264 с.

2. Грег С., Синг К. Адсорбция, удельная поверхность, пористость / Перевод с английского под ред. К. В. Чмутова. – М.: Мир, 1970. – 407 с.

3. Паничкина В. В., Уварова И. В. Методы контроля дисперсности и удельной поверхности металлических порошков – Киев: Наукова думка, 1973. – 167 с.

2. Безукладный экстраполяционно-аналитический метод определения насыпной плотности порошков СТМ

Среднее значение и вариационный размах относительной погрешности метода

Свободная засыпка

1) для шлифпорошков: среднее значение 2,24%, вариационный размах от 0,086% до 5,45%, охватывающая оболочка по варианту прямого не кругового цилиндра с $2h=D_{min}$;

2) для микропорошков: среднее значение 1,89%, вариационный размах от 0,5% до 2,60%, охватывающая оболочка по варианту прямого не кругового цилиндра с $2h=(D_{max} + D_{min})/4)$.

Засыпка с утряской

1) как для шлиф-, так и для микропорошков: погрешность 9,56%, вариационный размах значений от 0,33% до 13,82%.

Наиболее адекватная охватывающая оболочка по варианту эллипсоида вращения.

3. Определения ситового зернового состава и зернистости порошков СТМ методом математического моделирования

Марка шлифпорошка	Тип показателя	Зернистость, мкм	Показатели зернового состава, %				
			Пф	Кф	Оф	Мф	Оф + Прф
АС4	фактический	125/100	0	4	84	0	96
	расчетный	125/100	0	6	78	0	94
АС20	фактический	100/80	0	2	81	1	98
	расчетный	100/80	0	0	78	0	99
АС65	фактический	315/250	0	8	82	0	92
	расчетный	315/250	0	11	80	0	89
АС32	фактический	500/400	0	4	88	0	96
	расчетный	500/400	0	5	86	0	95
АС100	фактический	250/200	0	15	73	0	85
	расчетный	250/200	0	17	71	0	83

Пф – предельная фракция, Кф - крупная фракция, Оф – основная фракции, Мф – мелкая фракция, Прф – промежуточная (между основной и мелкой) фракция.

4. НОВОЕ ПРИМЕНЕНИЕ ПРЕДЛОЖЕННОЙ 3D МОДЕЛИ ЗЕРНА – ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЛИЧЕСТВА ЗЕРЕН В ОДНОМ КАРАТЕ ПОРОШКОВ СТМ

Общая методологическая схема аналитического определения количества зерен в одном карате

1. Задаются определенной 3D моделью зерна, идентифицируются унаследованные параметры принятой модели .
2. Осуществляется диагностика морфометрических характеристик порошка, принятых в качестве унаследованных параметров. Диагностируется проба порошка в количестве *N* зерен.
3. Производится расчет объема каждого зерна пробы, затем и суммарный объем всех *N* зерен.
4. Находится масса продиагностированной пробы зерен путем умножения суммарного объема на плотность материала порошка.
5. Осуществляется приведение продиагностированного количества зерен к одному карату. Данная процедура сводится к вычислению среднего веса одного зерна пробы и нахождения частного от деления веса 1 карат (0,2 г) на полученную среднюю массу одного зерна. Таким образом (путем такого приведения) получены все известные формулы расчетного определения количества зерен порошков синтетического алмаза в одном карате порошка.

Формула Бакуля В. Н [1]

$$n = \frac{P}{K\gamma d^3_{c.n.}} \qquad (1)$$

P – вес одного карата алмазного порошка (в мг), γ – удельный вес материала порошка; $d^3_{c.n.}$ – средний взвешенный кубический размер зерна (мкм**);** К – коэффициент заполнения объема;

$$d_{\tilde{n}.\ddot{i}.} = \sqrt[3]{\frac{d^3_{\tilde{n}.\hat{e}.}P_{\hat{e}.} + d^3_{c..o}P_{o.} + d^3_{c.\ddot{a}.}P_{\hat{a}.} + d^3_{c.\grave{i}.}P_{\grave{i}.}}{100}} \qquad (2)$$

$d_{с.к.}$, $d_{с.о.}$, $d_{с.д.}$, $d_{с.м.}$ – средний кубический размер зерна соответственно крупной, основной, дополнительной и мелкой фракции; $P_к$, $P_о$, $P_д$, $P_м$ – содержание в данном порошке соответственно крупной, основной, дополнительной и мелкой фракции, %.

Формулы List E. и соавторов [2]:

$$n = \frac{0{,}2\,N}{\gamma\sum_{i=1}^{N} A_i^{3/2}} \qquad (3) \qquad n = \frac{0{,}15N\sqrt{\pi}}{\gamma\sum_{i=1}^{N} A_i^{3/2}} \qquad (4)$$

N – количество продиагностированных прибором DiaInspect.OSM зерен; A_i – площадь проекции зерна;
π – математическая константа.
Формула (3) основана на 3D модели зерна в форме куба и рекомендуется для кристаллов с ориентацией решетки 100, формула (4) – на 3D модели в форме шара и и рекомендуется для кристаллов с ориентацией решетки 111.

1. Бакуль В. Н., Захаренко И. П., Кункин Я. А., Мильштейн М. З. Справочник по алмазной обработке.– Киев: Техника, 1971.– 208 с
2. List, E., Vollstaedt, H., Frenzel, J. Counting particles per carat by means of two-dimensional image analysis / 5th Zhengzhou International Superhard Materials and Related Products Conference // Vollstaedt-Diamant GmbH, Germany.

4. Новое применение предложенной 3D модели зерна: расчет количества зерен в одном карате порошков СТМ

Новый экстраполяционно–аффинный метод аналитического определения количества зерен в одном карате порошков СТМ

Формулы приведения к одному карату:

$$n = \frac{0{,}2N}{V_\Sigma \gamma} \qquad (4)$$

$$n = \frac{0{,}2}{\left[\frac{n_1 m_1}{N_1} + \frac{n_2 m_2}{N_2} + \frac{n_3 m_3}{N_3} + \frac{n_4 m_4}{N_4} + \frac{n_5 m_5}{N_5}\right] V_\Sigma \gamma}$$

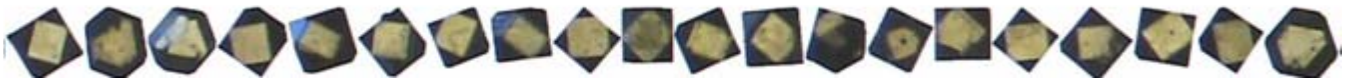
γ – удельный вес синтетического алмаза;

V_Σ — суммарный объем всех продиагностированных зерен; N – количество продиагностированных зерен.

Таблица 4–Экспериментальные (Э) и расчетные (Расчет) данные по количеству зерен в одном карате шлифпорошков СА некоторых высокопрочных марок и зернистостей, полученные экстраполяционно-аффинным метод

Зернистость, мкм (меш)	N	Количество зерен в одном карате, штук				
		Э	Расчет			
			Новая модель		Эллипсоид	
			Расчет	Относит. погрешность,%	Расчет	Относит. погрешность,%
АС300 425/355 (40/45)	232	1395	1366,2	2,60	1320	5,37
АС250 425/355 (40/45)	235	1493	1503,1	0,67	1461,1	2,14
АС32-Н 425/355 (40/45)	212	1794	1781,3	0,72	1656,9	7,64
АС300 500/425 (35/40)	288	969	955,1	1,43	989,0	2,06
АС32 500/425 (35/40)	278	998	990,16	0,8	906,4	9,18
АС200 600/500 (30/35) – 1	122	585	579,2	0,98	556,2	4,92
АС200 600/500 (30/35) – 2	111	568	566,2	0,35	526,3	7,34
АС200 600/500 (30/35) – 3	157	485	496,5	2,44	464,5	4,23
АС200 710/600 (25/30) – 1	101	380	373,2	1,8	360,9	5,03
АС200 710/600 (25/30) – 2	92	325	321,0	1,23	305,8	5,90
АС200 800/710 (20/25)	97	234	231,5	1,07	224,1	4,27

Таблица 5 – Шлифпорошки синтетического алмаза, на которых проводилась экспериментальная проверка экстраполяционно–аффинного метода аналитического определения количества зерен в одном карате порошков СТМ.

Зернистость, мкм (меш)	DiaInspect-фотографии алмазных порошков
AC300 425/355 (40/45)	
AC250 425/355 (40/45)	
AC32-H 425/355 (40/45)	
AC300 500/425 (35/40)	
AC32 500/425 (35/40)	
AC200 600/500 (30/35) – 1	
AC200 600/500 (30/35) – 2	
AC200 600/500 (30/35) – 3	
AC200 710/600 (25/30) – 1	
AC200 710/600 (25/30) – 2	
AC200 800/710 (20/25)	

Выводы

1. Предложена новая экстраполяционно-аффинная пространственно-геометрическая модель зерна алмазных порошков. В качестве исходных данных для ее построения и обсчета используются линейные размеры, площадь и периметр проекции каждого зерна проанализированной их пробы.

2. Экстраполяционно-аффинная 3D модель зерна и математическое ее описание позволяют на индивидуальном уровне частично учитывать фактическую форму зерен (в одной проекции) и фактор формы. Благодаря этому достигается существенное уменьшение погрешности компьютерно-аналитической диагностики характеристик порошков СТМ с ее применением.

3. Адекватность предложенной 3D модели зерна подтверждается высоко точностью, достигаемой при решении прикладных задач диагностики характеристик порошков СТМ.

3. Продемонстрировано применение предложенной 3D модели зерна к решению задачи аналитического определения количества зерен порошков синтетического алмаза в одном их карате. Среднее значение погрешности расчетного определения составляет 1,34% при максимальном ее значении 3% (для 3D модели в форме трехосного эллипсоида эти показатели составляют 5,28% и 9,18% соответственно) .

Благодарю за внимание