

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРАВИЛ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ЗАТВЕРДЕВАНИЯ КВАЗИРАВНОВЕСНЫХ БИНАРНЫХ СПЛАВОВ

Михайловская Т.В., Михалев А.И., Гуда А.И.

Введение. Математическое описание реальных металлургических процессов, связанных с затвердеванием, имеет значительное отличие от классической краевой задачи за счет множества факторов. При этом наиболее важные из них обусловлены: выделением тепла при фазовом переходе, который описывается сложной диаграммой состояний; переносом тепла за счет конвективных потоков в жидкой фазе; учетом реальных граничных условий теплообмена; неоднородностью свойств сплава; зависимостью теплофизических параметров от температуры. С другой стороны, математическое моделирование процесса затвердевания позволяет заменить дорогостоящие натурные эксперименты вычислительными при внедрении новых металлургических технологий или адаптации имеющихся к новым рыночным условиям. Это приводит к повышению качества изделий металлургического производства и снижению их себестоимости в целом.

Анализ методов решения проблемы. Моделирование металлургических процессов затвердевания при наличии фазовых переходов предполагает проведение всех этапов синтеза нелинейных математических моделей, динамика которых, как правило, описывается нестационарными дифференциальными уравнениями в частных производных. В свою очередь, для изучения такой динамики процессов затвердевания существует ряд подходов. Первый из них связан с получением аналитического решения задачи теплопереноса для систем с подвижными границами фаз, развитый Й. Стефаном, К. Шварцем [1]. Вторая группа методов связана с численными сеточными методами решения задачи затвердевания при наличии фазового перехода [2, 3, 4]. Математическая модель, основанная на модернизированной физико-химической модели термодинамической функции – свободной энергии Гиббса для многокомпонентных сплавов предполагает наличие большого количества экспериментальных данных о физико-химических процессах сопровождающих затвердевание [5]. С другой стороны, в последнее время широкое развитие получили интеллектуальные методы моделирования нелинейных динамических систем, основанные на применении клеточно-автоматной парадигмы. При этом машина клеточных автоматов представляется системой, поведение которой описывается на основе природных свойств объекта моделирования в терминах локальных зависимостей [6, 7], что обеспечивает построения довольно простых расчетных алгоритмов и позволяет избежать проблем с аппроксимацией, сходимостью и сложными сетками, имеющих место в разностных методах моделирования поведения распределенных динамических систем.

Целью настоящего исследования является построение клеточно-автоматных правил для моделирования фазовых переходов в квазиравновесных бинарных сплавах и исследование возможности линейной аппроксимации сложных термодинамических зависимостей при описании процесса затвердевания с фазовыми переходами на базе клеточных автоматов.

Математическое моделирование процесса затвердевания с использованием клеточно-автоматной модели предполагает построение правил для машины клеточных автоматов, которые описывают термодинамические особенности процесса затвердевания с учетом фазового перехода и, в свою очередь, определяют такие состояния клетки как: «расплав», «зона затвердевания», «затвердевшая», а также правила перехода клетки из одного состояния в другое [8, 9].

Состояние клетки однозначно определяется ее удельной энергией, которая в равновесном состоянии однозначно связана с температурой и фазовым состоянием единичного объема

$$q = \frac{Q}{\rho h S}, \quad (1)$$

где q – удельная энергия клетки, Дж/кг; Q – количество теплоты, аккумулированное в клетке, Дж; ρ – плотность, кг/м³; h – длина клетки, м; S – площадь боковой поверхности клетки, м². Теплосодержание клетки Q и его изменение определяется из уравнения Фурье

$$Q = \frac{kST}{h} \tau, \quad \Delta Q = \frac{kS\Delta T}{h} \tau, \quad (2)$$

где ΔQ , Дж количество тепла прошедшего через боковую поверхность S за время τ , с при разности температур ΔT , К. k – коэффициент теплопроводности, Вт/(мК).

С другой стороны, удельная энергия определяется как интеграл теплоемкости c , Дж/(кг К) по температуре и обеспечивает получение однозначной зависимости $q(T)$ при положительной определенности непрерывной функции $c(T)$

$$q = \int_0^T c(x) dx. \quad (3)$$

Для математического моделирования затвердевания с учетом фазовых переходов необходимо помимо зависимости удельной энергии от температуры знать динамику выделения скрытой теплоты затвердевания, которая вносит существенный вклад в изменение удельной энергии клетки в температурном интервале затвердевания. Исходя из обобщенной схемы работы клеточно-автоматного алгоритма (рис. 1), математическое моделирование затвердевания при наличии фазовых переходов требует нахождения взаимосвязи удельной энергии клетки с ее температурой и количеством жидкой фазы. Основной трудностью при этом является определение зависимости динамики выделения скрытой теплоты фазового перехода L , Дж/кг в температурном интервале затвердевания.

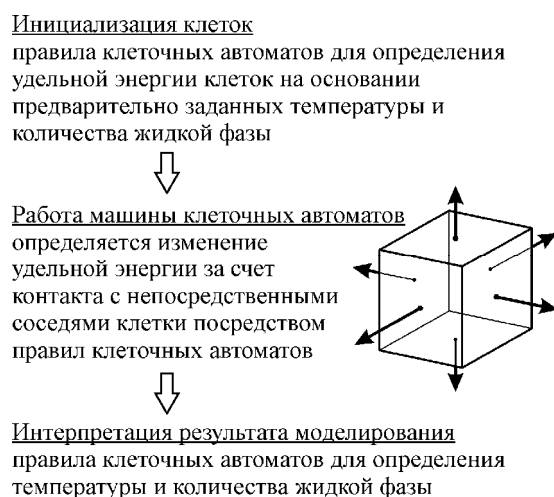


Рис. 1 Схема работы машины клеточных автоматов при моделировании процесса затвердевания

Термодинамическая модель затвердевания бинарного сплава основана на следующих предположениях: теплота фазового перехода выделяется внутри интервала затвердевания, ограниченного равновесными значениями ликвидуса и солидуса, соответствующими данному исходному содержанию растворимой примеси в расплаве; темп затвердевания

определяется из равновесной диаграммы состояния сплава с использованием «правила рычага» [10].

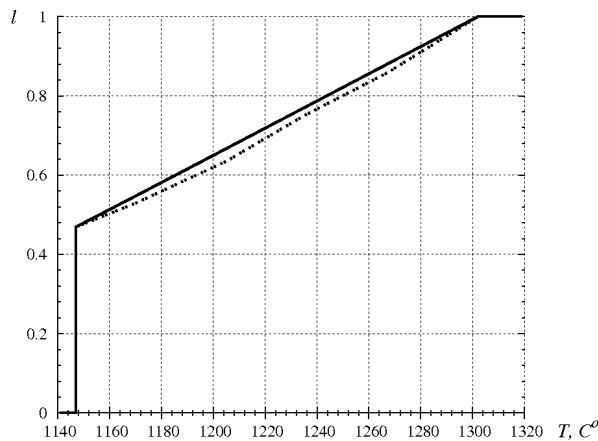


Рис. 2 Зависимость количества жидкой фазы от температуры для бинарного сплава с содержанием углерода 3.1%

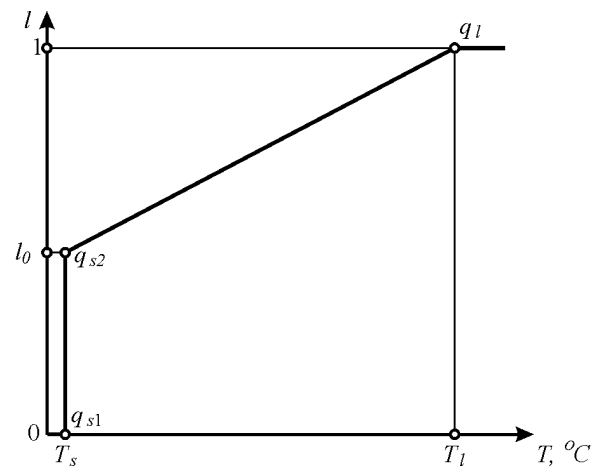


Рис. 3 Схематическое изображение зависимости количества жидкой фазы от температуры для бинарного сплава

На рис. 2 приведена динамика выделения твердой фазы в процессе затвердевания сплава с содержанием углерода 3.1%, который относится к высокопрочным чугунам, широко применяемым в металлургии (пунктирная линия отображает зависимость, полученную по диаграмме состояний, сплошная линия – аппроксимированную кусочно-линейной функцией). Максимальный модуль отклонения для экспериментальной и аппроксимированной зависимостей на наклонном участке графика составляет 5%, что позволяет использовать в дальнейших расчетах линейную зависимость количества жидкой фазы от температуры в зоне фазового перехода.

Исходя из рис. 3, фазовый переход в бинарном сплаве при равновесном затвердевании можно условно разбить на два этапа: первый этап происходит во всем температурном интервале затвердевания и характеризуется практически равномерным выделением теплоты фазового перехода, что дает возможность однозначно сопоставить температуре количество жидкой фазы, второй этап происходит при температуре солидус. При этом температурный интервал затвердевания отсутствует и температуре солидуса можно сопоставить ряд фазовых состояний, что и порождает неоднозначность, а стало быть, сложности при моделировании процесса затвердевания рассматриваемых сплавов.

На рис. 3 схематически изображена зависимость количества жидкой фазы от температуры для бинарного сплава и указаны принятые условные обозначения: T_s – температура солидус, $^{\circ}C$; T_l – температура ликвидус, $^{\circ}C$; l – количество жидкой фазы, $[0...1]$; q_l , q_{s1} – удельная энергия начала и завершения фазового перехода, $Дж/кг$. Исходя из принятых обозначений, первый этап фазового перехода протекает в интервале температур $(T_s, T_l]$ при этом выделяется l_0 количества твердой фазы. Второй этап протекает при температуре T_s и при этом формируется $(1-l_0)$ количества твердой фазы.

Правило клеточных автоматов для определения полной удельной энергии, которая зависит от начальной температуры и фазового состояния, представляет собой сумму энергий теплопередачи и фазового перехода:

$$q(T, l) = \begin{cases} c_s T, & T < T_s, l = 0, \\ c_s T_s + lL, & T = T_s, l \in [0; l_0], \\ c_s T + \frac{(T - T_s)^2}{2} \frac{c_l - c_s}{T_l - T_s} + (T - T_s) \frac{1 - l_0}{T_l - T_s} L + l_0 L, & T(T_s; T_l), l \in [l_0; 1], \\ c_s T_l + 0.5(c_l - c_s)(T_l - T_s) + c_l(T - T_l) + L, & T > T_l, l = 1. \end{cases} \quad (4)$$

Согласно (4) значения энергий, характеризующих фазовый переход, определяются

$$q_{s1} = c_s T_s, \quad q_{s2} = c_s T_s + L l_0, \quad q_l = c_s T_l + 0.5(T_l - T_s)(c_l - c_s) + L. \quad (5)$$

Зависимость количества жидкой фазы от удельной энергии определяется правилом

$$l(q) = \begin{cases} 0, & q < q_{s1}, \\ (q - q_{s1}) l_0 / (q_{s2} - q_{s1}), & q \in [q_{s1}; q_{s2}], \\ l_0 + \frac{-\left(c_s \frac{T_l - T_s}{1 - l_0} + L\right) + \sqrt{\left(c_s \frac{T_l - T_s}{1 - l_0} + L\right)^2 - 2 \frac{(c_l - c_s)(T_l - T_s)}{(1 - l_0)^2} (c_s T_s + l_0 L - q)}}{(c_l - c_s)(T_l - T_s) / (1 - l_0)^2}, & q \in [q_{s2}; q_l], \\ 1, & q > q_l. \end{cases} \quad (6)$$

Правило взаимосвязи температуры и удельной энергии клетки имеет вид

$$T(q) = \begin{cases} q/c_s, & q < q_{s1}, \\ T_s, & q \in [q_{s1}; q_{s2}], \\ T_s + \frac{-\left(\frac{1 - l_0}{T_l - T_s} L + c_s\right) + \sqrt{\left(\frac{1 - l_0}{T_l - T_s} L + c_s\right)^2 - 2 \frac{c_l - c_s}{T_l - T_s} (l_0 L + c_s T_s - q)}}{(c_l - c_s) / (T_l - T_s)}, & q \in [q_{s2}; q_l], \\ T_l + (q - q_l) / c_l, & q > q_l. \end{cases} \quad (7)$$

На рис. 4 и 5 представлены термодинамические зависимости для бинарных сплавов с теплофизическими параметрами, указанными в таблице 1. Удельная теплоемкость тестового бинарного сплава в состоянии ликвидус и солидус отличается на 1016 %, что представляет значительное отличие. Для реальных металлургических сплавов значительное отличие значения теплоемкости в различных фазовых состояниях несвойственно и составляет в данном случае 11,6 %.

Таблица 1

Теплофизические параметры бинарных сплавов

Теплофизический параметр	Сплав			
	тестовый		реальный	
	солидус	ликвидус	солидус	ликвидус
Температура, °C	1147	1302	1147	1302
Плотность, кг/м ³	7200	7000	7200	7000
Удельная теплоемкость, Дж/(кг K)	750	8370	750	837
Коэффициент теплопроводности, Вт/(м K)	28	20	28	20
Скрытая теплота фазового перехода $L = 330 \text{ кДж/кг}$.				

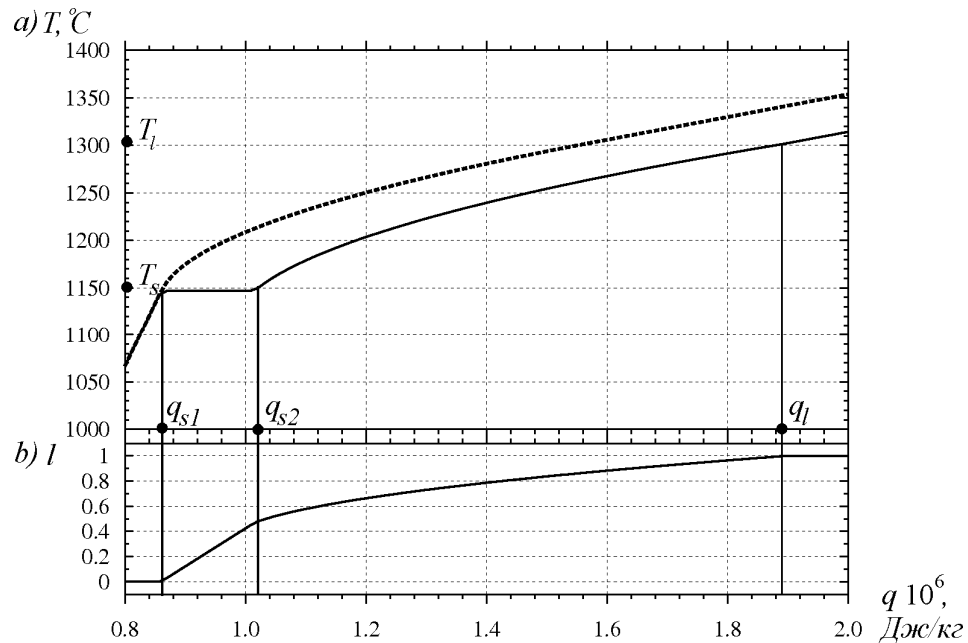


Рис. 4 Термодинамические зависимости для тестового бинарного сплава:
 а) температура от удельной энергии,
 б) количество жидкой фазы от удельной энергии

Зависимости 4 (а) и 5 (а) представляют собой взаимосвязь температуры и удельной энергии, где сплошная линия отображает термодинамические зависимости для сплава, обладающего скрытой теплотой фазового перехода, а пунктирная – при ее отсутствии, что подтверждает необходимость корректного физического и математического описания фазового перехода, для последующего моделирования процесса затвердевания в бинарных квазиравновесных сплавах.

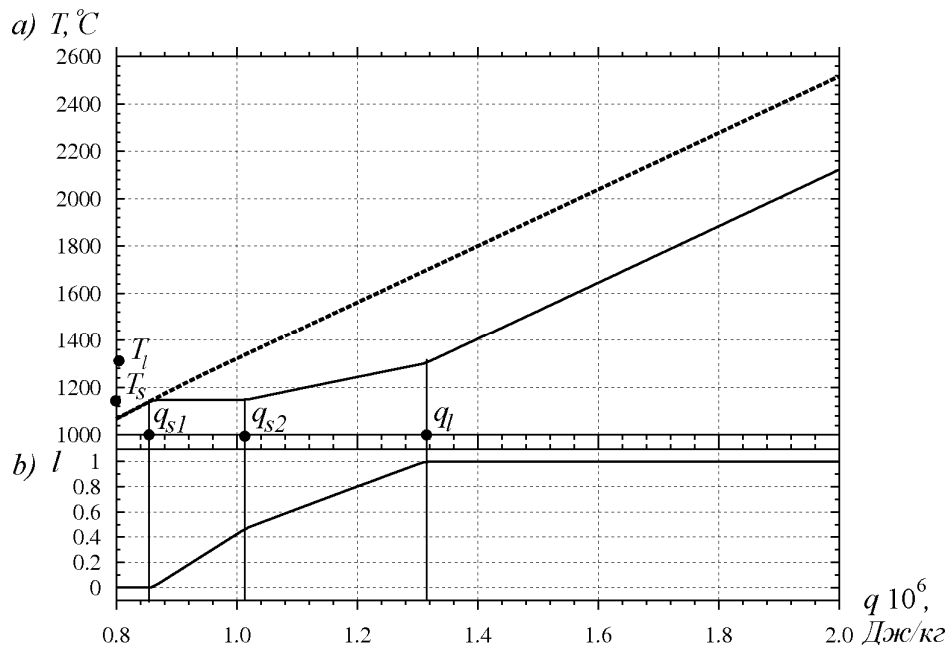


Рис. 6 Термодинамические зависимости для бинарного сплава:
 а) температура от удельной энергии,
 б) количество жидкой фазы от удельной энергии

Анализ зависимостей температуры и количества жидкой фазы от удельной энергии, для двух принципиально разных по теплофизическим параметрам сплавов (рис. 4, 6) пока-

зал, что нелинейная зависимость в значительной степени проявилась для тестового сплава, у которого значения удельной теплоемкости для состояний ликвидус и солидус отличается более чем в десять раз. Удельная теплоемкость большинства сплавов применяемых в металлургии и машиностроении для состояния ликвидус и солидус отличается не более чем на 25%. Сплав, теплофизические параметры которого приведены в таблице, относится к их числу. Термодинамические зависимости (рис. 5) реального металлургического сплава носят явно выраженный линейный характер, что дает возможность для упрощения работы алгоритма и уменьшения громоздкости формул (4, 6, 7) использовать кусочно-линейную аппроксимацию при описании термодинамических характеристик клетки. В этом случае правила клеточных автоматов приобретут вид:

– удельная энергия зависит от начальной температуры и фазового состояния

$$q(T, l) = \begin{cases} c_s T, & T < T_s, l = 0, \\ c_s T_s + lL, & T = T_s, l \in [0; l_0], \\ c_s T + l_0 L + (T - T_s) \frac{c_s T_l + \frac{1}{2}(T_l - T_s)(c_l - c_s) - c_s T_s}{T_l - T_s} + \\ \quad + (T - T_s) \frac{1 - l_0}{T_l - T_s} L, & T(T_s; T_l), l \in [l_0; 1], \\ c_s T_l + \frac{1}{2}(c_l - c_s)(T_l - T_s) + c_l(T - T_l) + L, & T > T_l, l = 1. \end{cases} \quad (8)$$

– количество жидкой фазы от удельной энергии

$$l(q) = \begin{cases} 0, & q < q_{s1}, \\ (q - q_{s1}) \frac{l_0}{q_{s2} - q_{s1}}, & q \in [q_{s1}; q_{s2}], \\ l_0 + (q - q_{s2}) \frac{1 - l_0}{q_l - q_{s2}}, & q \in [q_{s2}; q_l], \\ 1, & q > q_l. \end{cases} \quad (9)$$

– температура от удельной энергии

$$T(q) = \begin{cases} \frac{q}{c_s}, & q < q_{s1}; \\ T_s, & q \in [q_{s1}; q_{s2}]; \\ T_s + (q - q_{s2}) \frac{T_l - T_s}{q_l - q_{s2}}, & q \in [q_{s2}; q_l]; \\ T_l + \frac{q - q_l}{c_l}, & q > q_l. \end{cases} \quad (10)$$

На рис. 6 – 9 представлены зависимости температуры и количества жидкой фазы от удельной энергии, где сплошной линией представлены зависимости, полученные с использованием нелинейных соотношений 6 и 7, пунктирной – аппроксимированные зависимости, полученные на основании соотношений 9 и 10.

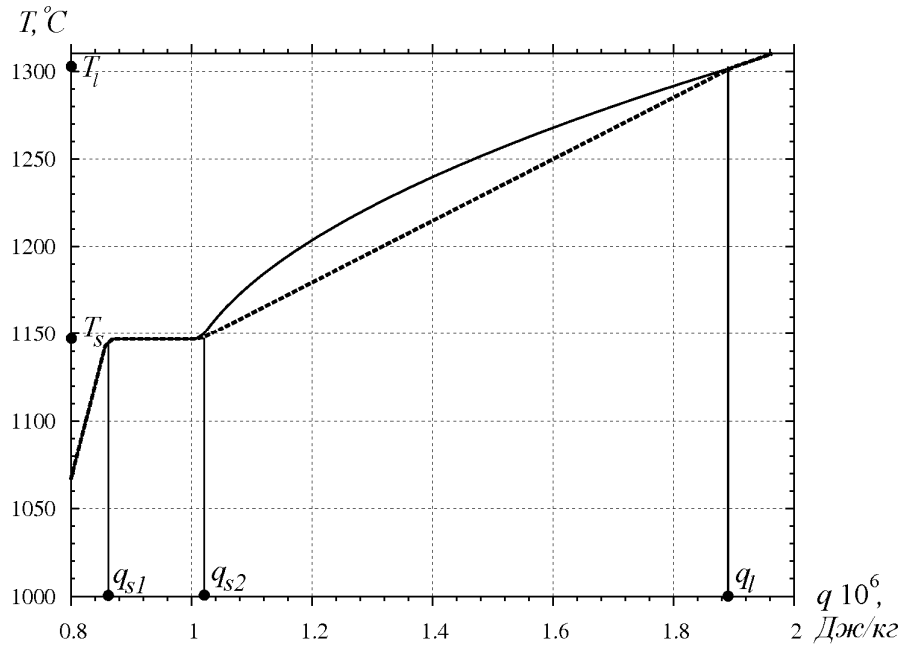


Рис. 6 Зависимость температуры от удельной энергии для тестового бинарного сплава

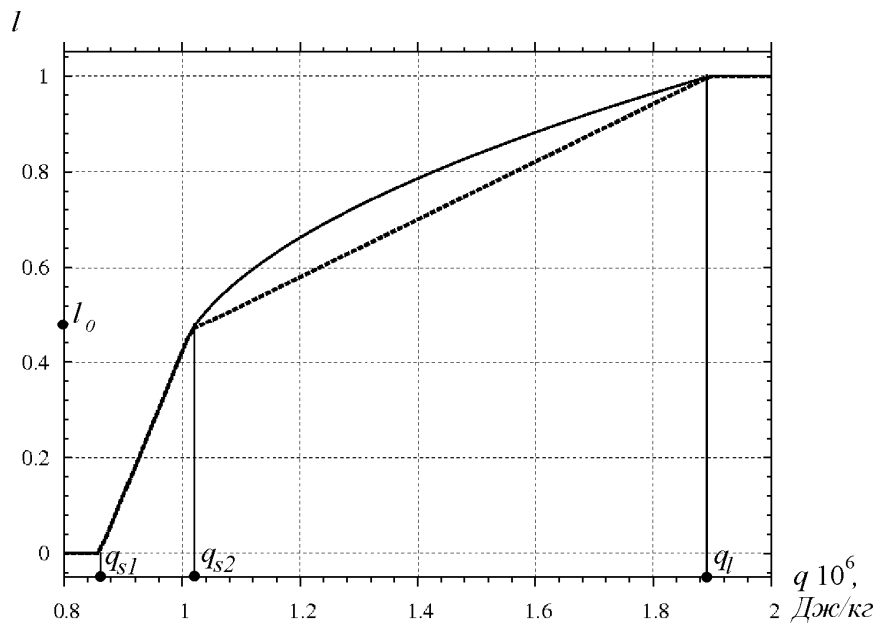


Рис. 7 Зависимость количества жидкой фазы от удельной энергии для тестового бинарного сплава

Максимальный модуль отклонения для аналитического решения и аппроксимированной зависимости, представленной на рис. 6 составляет 16.7% , для рис. 8 – 16% . Большие отклонения связаны с значительной разницей значений удельной теплоемкости в состоянии ликвидус и солидус.

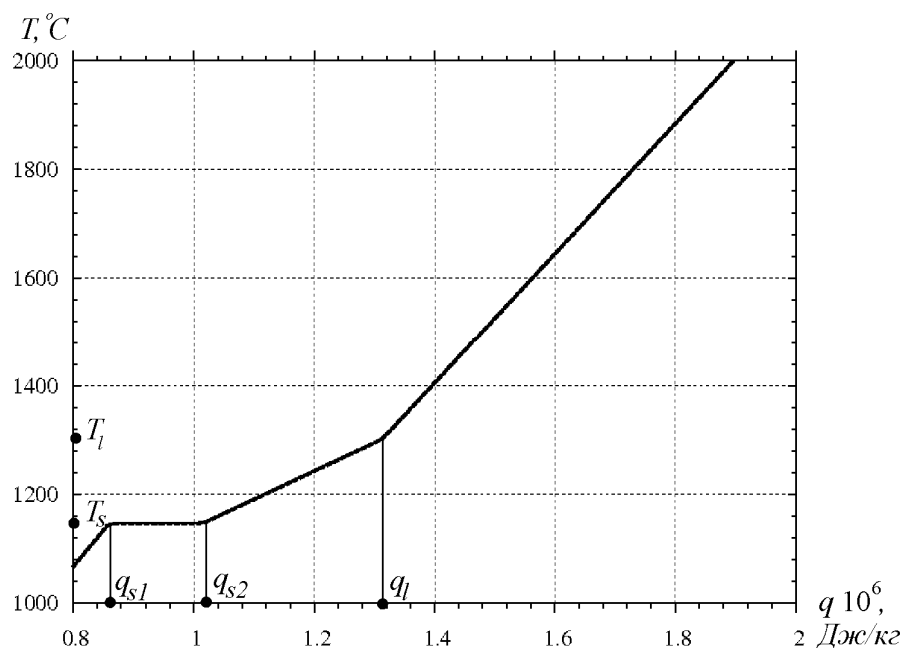


Рис. 8 Зависимость температуры от удельной энергии для бинарного сплава

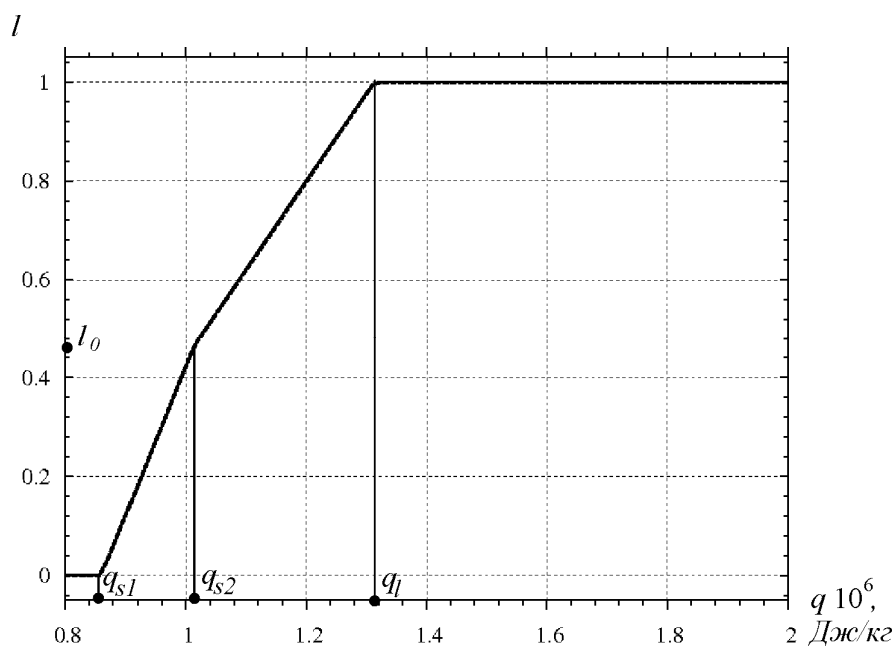


Рис. 9 Зависимость количества жидкой фазы от удельной энергии для бинарного сплава

Максимальный модуль отклонения для аналитического решения и аппроксимированной зависимости, представленной на рис. 8 составляет 0.56%, для зависимости рис. 9 – 0.55%. Полученные отклонения позволяют использовать линейную аппроксимацию при описании термодинамических зависимостей квазиравновесных бинарных сплавов.

Сравнение максимальных модулей отклонений термодинамических зависимостей для двух рассматриваемых сплавов, показало целесообразность применения клеточно-автоматных правил взаимосвязи аппроксимированных прямой для сплавов, удельная теплоемкость которых в состоянии ликвидус и солидус отличается не более чем на 25%.

Заключение

1. Построены клеточно-автоматные правила для описания фазового перехода в бинарном квазиравновесном сплаве.
2. Для бинарного квазиравновесного сплава с содержанием углерода 3.1% определена динамика выделения скрытой теплоты фазового перехода в температурном интервале затвердевания по диаграмме состояния с использованием «правила рычага». Установлено, что нелинейную зависимость количества жидкой фазы от температуры для бинарных квазиравновесных сплавов возможно аппроксимировать кусочно-линейной функцией, при этом ошибка аппроксимации составляет 5%.
3. Установлено, что для сплавов, значение удельной теплоемкости которых в состоянии ликвидус и солидус отличается не более чем на 25%, применение кусочно-линейных правил взаимосвязи термодинамических параметров: удельной энергии клетки, температуры и количества жидкой фазы приводит к значительному упрощению расчетного алгоритма и вносит погрешность вычисления порядка 0.5%, что допустимо при термодинамических расчетах.

Thermodynamic bases of cellular automata construction rules at mathematical modelling solidification are considered. Interrelation rules of cell net energy and its condition in view of phase transition at solidification are formulated. Research of cellular automata rules for quasiequilibrium binary alloys solidification modelling are carried out.

1. Гуляев Б.Б. Теория литейных процессов / Гуляев Б.Б. – Л. Машиностроение, 1976. – 216 с.
2. Зарубин В.С. Математическое моделирование в технике / Зарубин В.С. – М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2001. – 495 с.
3. Назоратин В.В. Технология изготовления стальных отливок ответственного назначения / Назоратин В.В. – М.: Машиностроение, 2006. – 234 с.
4. Никитенко Н.И. Теория тепломассопереноса / Никитенко Н.И. – Киев: Наук.думка, 1983. – 352 с.
5. Голод В.М. Теория, компьютерный анализ и технология стального литья / В.М. Голод, В.А. Денисов. – СПб.: ИПЦ СПГУТД, 2007. – 610 с.
6. Ванаг В.К. Исследование пространственно распределенных динамических систем методами вероятностного клеточного автомата / В.К. Ванаг // Успехи физических наук. – 1999. – Том 169, № 5. – С. 481 – 505.
7. Тоффоли Т. Машины клеточных автоматов / Т. Тоффоли, Н. Марголус. – М.: Мир, 1991. – 280 с.
8. Михайловская Т.В. Применение клеточных автоматов для математического моделирования фазового перехода в эвтектических сплавах / Т.В. Михайловская // Системные технологии. Региональный межвузовский сборник научных трудов. 2007. – Выпуск 5 (53). – С. 162 – 170.
9. Михайловская Т.В. Трехмерная клеточно-автоматная модель процесса затвердевания металлов и сплавов / Т.В. Михайловская, А.И. Михалев // Сучасні проблеми металургії. Наукові праці. 2006. – Том 9. – С. 102 – 112.
10. Самойлович Ю.А. Системный анализ кристаллизации слитка / Самойлович Ю.А. – Киев: Наукова думка, 1983. – 246 с.