

ТРЕХМЕРНАЯ КЛЕТОЧНО-АВТОМАТНАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА ЗАТВЕРДЕВАНИЯ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ

Розглянуто клітинно-автоматний підхід для моделювання процесу твердіння металів і сплавів. Досліджено термодинамічні основи формування правил переходу для роботи клітинних автоматів, що моделюють механізм твердіння металів і сплавів. Показано ефективність застосування клітинно-автоматної моделі для розглянутого класу задач із урахуванням нелінійної залежності теплофізичних параметрів процесу від температури, а також в умовах розподіленого виділення прихованої теплоти плавлення в температурному інтервалі кристалізації.

Рассмотрен клеточно-автоматный подход для моделирования процесса затвердевания металлов и сплавов. Исследованы термодинамические основы формирования правил перехода для работы клеточных автоматов, моделирующих механизм затвердевания металлов и сплавов. Показана эффективность применения клеточно-автоматной модели для рассмотренного класса задач с учетом нелинейной зависимости теплофизических параметров процесса от температуры, а также в условиях распределенного выделения скрытой теплоты плавления в температурном интервале кристаллизации.

The cellular-automatic approach for modeling process of hardening of metals and alloys is considered. Thermodynamic background of the cellular automats transition rules formation for modeling the mechanism of metals and alloys hardening are researched. Efficiency of application of cellular-automatic model for the considered class of problems in view of nonlinear dependence of process parameters from temperature, and also in conditions of the distributed allocation of the fusion latent heat in a temperature interval of crystallization is shown.

Как известно, процесс математического моделирования характеризуется выполнением следующих этапов [1]: математическая формализация изучаемого процесса, выбор численного метода решения поставленной задачи, проведение вычислительного эксперимента, анализ состоятельности предложенной модели.

Введение

При традиционном подходе к моделированию процесса затвердевания для математического описания, как правило, используют дифференциальные уравнения в частных производных. В то же время формализация реальных задач приводит к трудно разрешимым, а зачастую и неразрешимым аналитически дифференциальным уравнениям в частных производных. Это требует получения их численного решения, которое при большой размерности задачи сходится медленно или имеет громоздкий в вычислительном плане алгоритм [1, 2, 3]. Для преодоления упомянутых выше трудностей используют следующие два подхода: совершенствование численных методов решения дифференциальных уравнений в частных

производных и поиск качественно новых моделей основанных на иных подходах. При синтезе новых моделей полагаются на природные свойства объекта исследования, т.е. в основу модели закладывается принцип близкодействия и другие физические законы, которые позволяют приблизить свойства моделируемых объектов к физическим свойствам природных объектов и легко интерпретировать модельные результаты.

Одним из концептуально новых классов прикладных моделей, предназначенных для описания пространственно-временных систем, являются клеточные автоматы. Основоположниками идеи клеточных автоматов являются К. Цузе и Дж. фон Нейман, предложившие в 40-х годах прошлого столетия парадигму вычислительного пространства и реализацию на ее основе развития самовоспроизводящихся систем.

С помощью клеточных автоматов построены концептуальные и прикладные модели динамических систем с распределенными параметрами, применяемых для моделирования самых разных физических процессов, таких как пространственная диффузия, газо- и гидродинамика, нелинейные химические системы, рост ветвящихся кристаллов, фазовые переходы, обработка изображений и распознавание образов, распространение эпидемий и многое другое [4].

В данной работе рассмотрены основные положения клеточно-автоматной модели процесса кристаллизации металлов и сплавов.

Затвердевание металла представляет собой сложный физико-химический процесс, при котором формируются большинство важнейших структурно-механических свойств отливки. Процесс затвердевания металлов и сплавов обусловлен отводом теплоты от расплава в форму и окружающую среду [5].

При моделировании процесса затвердевания необходимо опираться на закон сохранения массы и уравнения состояния, которые позволяют корректно учесть нелинейность термодинамических свойств металла – плотность, теплоемкость, теплопроводность зависят от температуры, а так же наличие скрытой теплоты кристаллизации, распределенной в интервале температур ликвидус-солидус.

Процесс теплопереноса описывается законом Фурье [5]

$$dQ = \frac{kS\Delta T}{h} \tau, \quad (1)$$

где dQ – количество тепла, прошедшего через поверхность S за время τ при разности температур ΔT , k – коэффициент теплопроводности, h – толщина слоя.

Удельная энергия клетки однозначно связана с температурой и фазовым состоянием

$$q = \frac{Q}{\rho h S}, \quad (2)$$

где ρ – плотность.

Одномерная клеточно-автоматная модель затвердевания металлов и сплавов

Рассмотрим одномерную клеточно-автоматную модель процесса затвердевания (рис. 1), взаимодействие в которой определяется окрестностью Мура [5], т.е. в расчете принимают участие только лишь те клетки, которые имеют непосредственный контакт с рассматриваемой клеткой.

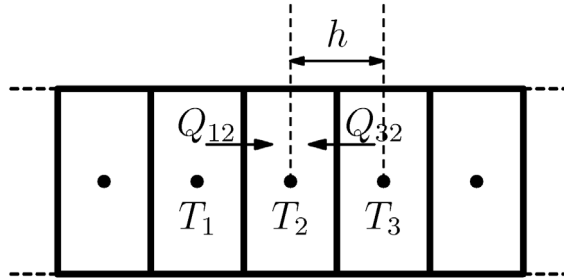


Рисунок 1 – Схематическое представление группы клеток с окрестностью Мура для одномерного случая

Если в (1) дифференциал заменить разностью, поток тепла, поступающий в клетку 2 от клетки 1, определяется по формуле

$$Q_{12} = \frac{k_{12} S (T_1 - T_2) \tau}{h}, \quad (3)$$

где k_{12} – эффективный коэффициент теплопроводности, определяемый из равенства тепловых потоков на границе соседних клеток.

Тепловой поток (рис. 2), соответствующий количеству теплоты, переданному через изотермическую поверхность в единицу времени, определяется соотношением

$$P = \frac{k S \Delta T}{h}.$$

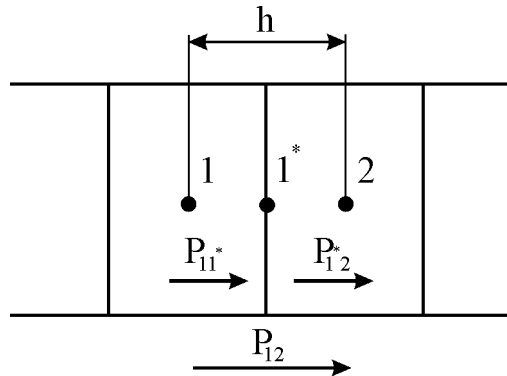


Рисунок 2 – Схема движения теплового потока между клетками

При этом тепловой поток между клетками 1 и 2 равен

$$P_{12} = \frac{k_{12}S(T_2 - T_1)}{h}.$$

В свою очередь, тепловой поток до границы, разделяющей клетки со стороны клетки 1

$$P_{11^*} = \frac{k_1S(T - T_1)}{h/2},$$

со стороны клетки 2:

$$P_{1^*2} = \frac{k_2S(T_2 - T)}{h/2}.$$

Исходя их равенства тепловых потоков на границе клеток $P_{11^*} = P_{1^*2}$ находим T - температуру на границе клеток:

$$T = \frac{k_1T_1 + k_2T_2}{k_1 + k_2}.$$

Приравниваем $P_{12} = P_{11^*}$ и получаем значение эффективного коэффициента теплопроводности

$$k_{12} = \frac{2k_1k_2}{k_1 + k_2}. \quad (4)$$

Таким образом, изменение полной энергии клетки 2 в соответствии с (3) равно

$$dQ_2 = \frac{\tau S}{h} (k_{12}(T_1 - T_2) + k_{23}(T_3 - T_2)). \quad (5)$$

Следует, однако, отметить, что все приведенные выше рассуждения справедливы лишь для одномерного случая. В то же время, формулы для вычисления полной энергии клетки в двумерной и трехмерной декартовых координатных системах будут иметь аналогичный вид.

Трехмерная цилиндрическая клеточно-автоматная модель затвердевания металлов и сплавов

Для цилиндрической системы координат изменение полной энергии клетки вычисляется, исходя из закона Фурье, с учетом осевой симметрии. На рисунке 3 представлено изображение клетки в цилиндрической системе координат.

Прежде чем определять полное изменение энергии клетки необходимо определить площади боковых поверхностей клетки.

Введем следующие обозначения:

i - номер клетки в радиальном направлении;

j - секторальный номер клетки;

k - номер клетки вдоль оси симметрии;

h_i - длина клетки в радиальном направлении;

h_j - ширина клетки вдоль сектора зависит от положения клетки в радиальном направлении;

h_k - высота клетки вдоль оси симметрии;

n_i - количество клеток в радиальном направлении;

n_j - количество клеток вдоль сектора;

n_k - количество клеток вдоль оси симметрии.

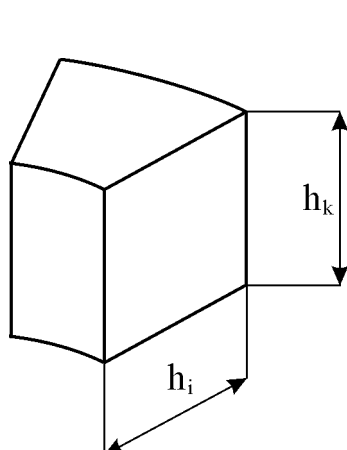


Рисунок 3 – Трехмерное изображение клетки в цилиндрической системе координат

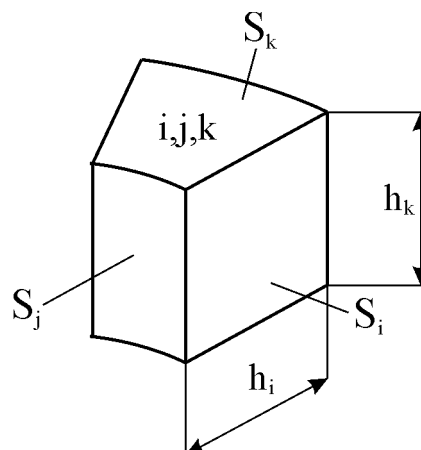


Рисунок 4 – Схематическое обозначение клетки и условные обозначения боковых площадей

На рисунке 4 приведено схематическое изображение клетки (i, j, k) и условные обозначения ее боковых поверхностей.

Боковые площади выражаются через номер клетки, длину клетки и количество клеток вдоль осей соответственно:

$$S_i = h_i h_k,$$

$$S_j(i) = \frac{2\pi h_i (i-1)}{n_j} h_k,$$

$$S_k(i) = \frac{\pi h_i^2 (2i-1)}{n_j}.$$

Ширина клетки вдоль сектора (рис. 5) зависит от положения клетки в радиальном направлении, т.е. от i

$$h_j(i) = \frac{2\pi h_i (i-0.5)}{n_j}.$$

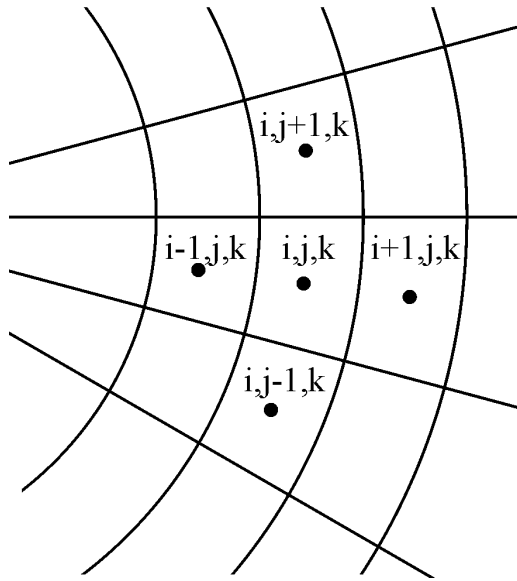


Рисунок - 5 Схематическое изображение клеток в цилиндрической системе координат (вид сверху)

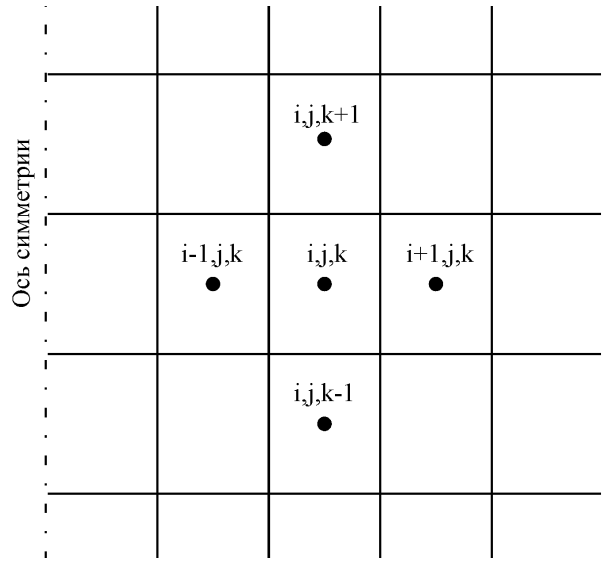


Рисунок 6 - Схематическое изображение клеток в цилиндрической системе координат (вид сбоку)

Изменение полной энергии клетки для цилиндрической системы координат состоит из сумм изменений полной энергии в радиальном и секторальном направлении, а так же вдоль оси симметрии тела.

Изменение полной энергии для i -й клетки в радиальном направлении в соответствии с (1):

$$Q_{i-1,i}^{j,k} = \frac{k_{i-1,i}^{j,k} S_j(i-1)(T_{i-1} - T_i)\tau}{h_i},$$

$$Q_{i+1,i}^{j,k} = \frac{k_{i+1,i}^{j,k} S_j(i)(T_{i+1} - T_i)\tau}{h_i};$$

для j сектора:

$$Q_{j-1,j}^{i,k} = \frac{k_{j-1,j}^{i,k} S_i(T_{j-1} - T_j)\tau}{h_j(i-1)},$$

$$Q_{j+1,j}^{i,k} = \frac{k_{j+1,j}^{i,k} S_i(T_{j+1} - T_j)\tau}{h_j(i)};$$

вдоль оси симметрии:

$$Q_{k-1,k}^{i,j} = \frac{k_{k-1,k}^{i,j} S_k(i)(T_{k-1} - T_k)\tau}{h_k},$$

$$Q_{k+1,k}^{i,j} = \frac{k_{k+1,k}^{i,j} S_k(i)(T_{k+1} - T_k)\tau}{h_k}.$$

Изменение полной энергии клетки является суммой изменений полной энергии во всех трех направлениях:

$$dQ_i = Q_{k-1,k}^{i,j} + Q_{k+1,k}^{i,j} + Q_{j-1,j}^{i,k} + Q_{j+1,j}^{i,k} + Q_{i-1,i}^{j,k} + Q_{i+1,i}^{j,k}.$$

В приведенных выше формулах неизвестным параметром является эффективный коэффициент теплопроводности, который рассчитывается из равенства тепловых потоков между клетками (рис. 7):

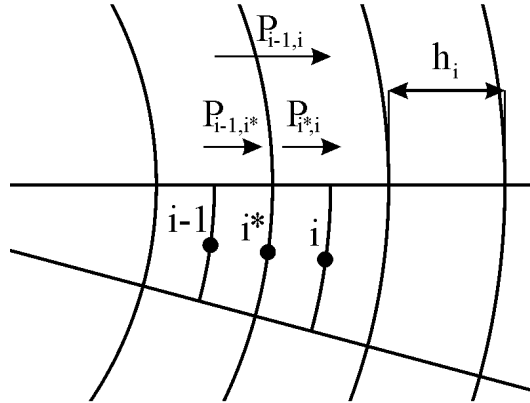


Рисунок 7 – Тепловые потоки между клетками для радиального распределения тепла

Тепловой поток между клетками $i-1$ и i определяется соотношением

$$P_{i-1,i} = \frac{k_{i-1,i} (T_i - T_{i-1}) 2\pi h_i h_k (i-1)}{h_i h_j}.$$

В свою очередь тепловой поток до границы, разделяющей клетки со стороны клетки $i-1$ определяется как

$$P_{i-1,i^*} = \frac{k_{i-1} (T^* - T_{i-1}) 2\pi h_i h_k (i-0.75)}{h_i/2 n_j},$$

со стороны клетки i

$$P_{i^*,i} = \frac{k_i (T_i - T^*) 2\pi h_i h_k (i+0.25)}{h_i/2 n_j}.$$

Исходя их равенства тепловых потоков на границе клетки $P_{i-1,i^*} = P_{i^*,i}$ находим T^* - температуру на границе клеток:

$$T = \frac{k_{i-1} T_{i-1} (i-0.75) + k_i T_i (i+0.25)}{k_{i-1} (i-0.75) + k_i (i+0.25)}.$$

Приравниваем $P_{i-1,i} = P_{i-1,i^*}$ и получаем значение эффективного коэффициента теплопроводности для распространения тепла в радиальном направлении:

$$k_{i-1,i} = \frac{2k_{i-1}k_i(i-0.75)(i+0.25)}{(i-1)(k_{i-1}(i-0.75) + k_i(i+0.25))}.$$

При вычислении изменения полной энергии вдоль оси симметрии и вдоль окружности эффективный коэффициент теплопроводности рассчитывается аналогично одномерному случаю по формуле (4).

На основании закона Фурье определено правило, описывающее зависимость полной энергии Q клетки (единичного объема) от температуры T соседних клеток, для одномерного, двумерного, трехмерного случаев и цилиндрических координат.

Для определения фазового состояния сформулируем правило определяющее зависимость температуры клетки от ее удельной внутренней энергии q , фазового состояния окружающих клеток и внешних условий.

Для представления фазового состояния сложных систем используются фазовые диаграммы, которые отображают тепловые эффекты фазового перехода, в частности определяют динамику выделения скрытой теплоты кристаллизации в интервале температур ликвидус-солидус[6].

В случае, если процесс затвердевания (плавления) происходит без выделения скрытой теплоты кристаллизации, то связь между удельной энергией q и температурой T описывается:

$$q = \int_0^T c(T) dt, \quad (6)$$

где c – теплоемкость.

В случае непрерывности и положительной определенности функции $c(T)$ зависимость $q(T)$ однозначна.

Ведем обозначения: c_s, c_l – теплоемкость вещества в твердом и расплавленном состоянии соответственно; ρ_s, ρ_l – плотность вещества в твердом и расплавленном состоянии соответственно; $q_s = c_s T, q_l = c_l T + L$ – удельные энергии, соответствующие началу и концу фазового перехода, L – скрытая теплота кристаллизации.

Рассмотрим правило взаимосвязи температуры T и удельной энергии q для чистого металла или эвтектического сплава, т.е. сплава, не имеющего температурного интервала кристаллизации, затвердевание которого происходит при температуре T_f :

$$T(q) = \begin{cases} q/c_s, & q < q_s \\ (q - q_l)/c_l + T_f, & q > q_l \\ T_f, & q \in [q_s, q_l] \end{cases} \quad (7)$$

На рисунке 8 представлены зависимости температуры и количества жидкой фазы от удельной энергии для серого чугуна.

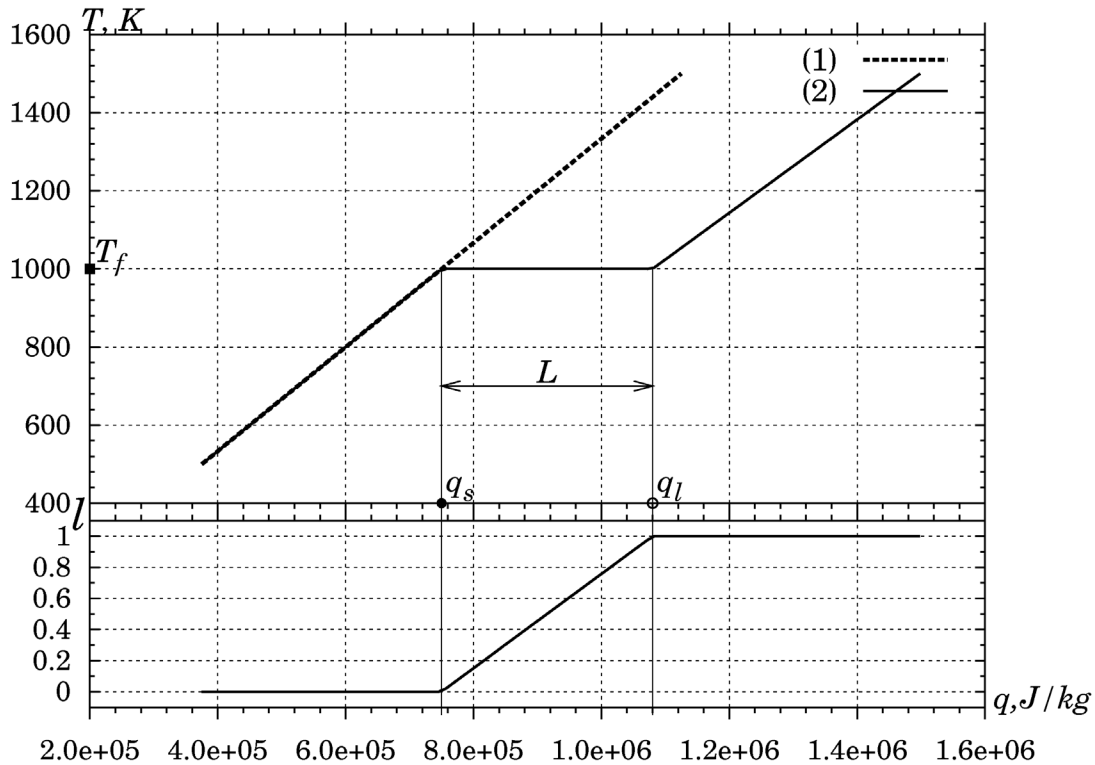


Рисунок 8 – Зависимости температуры и количества жидкой фазы от удельной энергии, 1 – при отсутствии фазового перехода, 2 – с учетом фазового перехода

Правило взаимосвязи удельной энергии q и температуры T выражается зависимостью

$$q(T, l) = \begin{cases} Tc_s, & T < T_f, l = 0 \\ q_l + (T - T_f)c_l, & T > T_f, l = 1 \\ q_s + Ll, & T = T_f, l \in [0, 1] \end{cases} \quad (8)$$

где l - количество жидкой фазы, 0 соответствует твердому состоянию, 1 – жидкому.

На рисунке 9 проведены значения температуры в соседних клетках и соответствующие им значения удельной энергии и доли жидкой фазы в зоне фазового перехода. Из рисунка видно, что 12 клетка имеет температуру фазового перехода и удельную энергию, лежащую в интервале кристаллизации, что свидетельствует о том, что в этой клетке происходит фазовый переход – количество жидкой фазы меньше 1.

Это тем самым подтверждает, что применение клеточных автоматов позволяет корректно описать термодинамические процессы при затвердевании металла с учетом фазовых превращений.

Задание граничных условий в клеточно-автоматных моделях, осуществляется заданием типов клеток автомата. Например, граничные условия первого рода, которые определены в виде известной зависимости

температуры от времени $T(t)$ на поверхности образца в терминах клеточно-автоматного подхода имеют вид:

$$dQ_2 = \frac{\tau S}{h} (k_{12} (T(t) - T_2) + k_{23} (T_3 - T_2)). \quad (12)$$

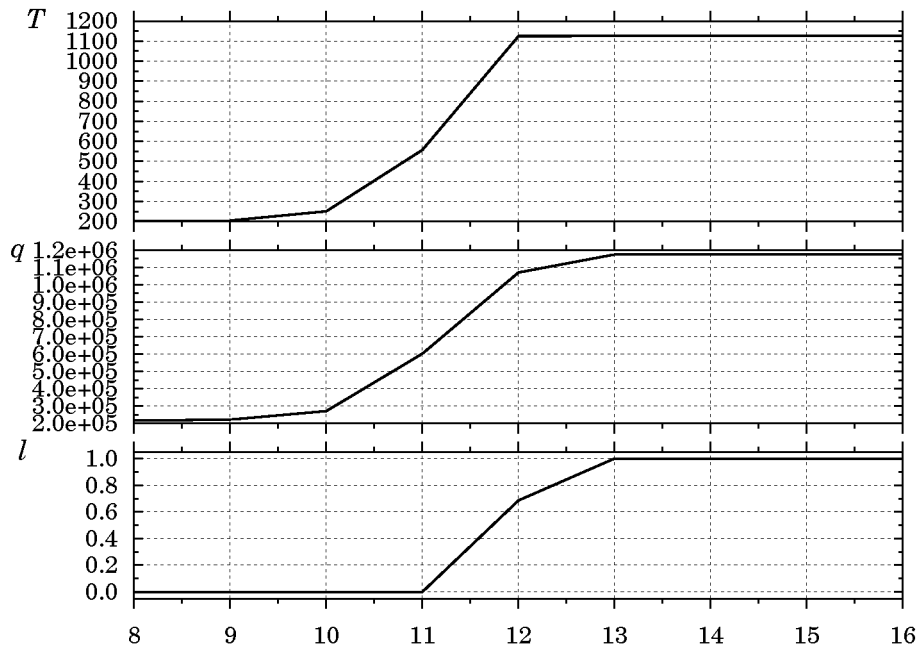


Рисунок 9 – Распределение а) – температуры, б) – удельной энергии, с) – доли жидкой фазы для клеток в зоне фазового перехода

Здесь функция $T(t)$ задана на левой границе тестового объекта.

Граничные условия второго рода определены в виде теплового потока $Q(t)$ как функции времени на поверхности тела:

$$dQ_2 = Q(t) + \frac{\tau S}{h} k_{23} (T_3 - T_2). \quad (13)$$

В свою очередь граничные условия третьего рода описывают взаимодействие тела с окружающей средой по закону конвективного теплообмена:

$$dQ_2 = \alpha (T_1 - T_{out}) + \frac{\tau S}{h} k_{23} (T_3 - T_2), \quad (14)$$

где α – коэффициент теплообмена $[Bm/m^2]$.

Для лучистого теплообмена граничное условие в терминах клеточных автоматов сформулировано как

$$dQ_2 = \varepsilon_o \sigma (T_1^4 - T_{out}^4) + \frac{\tau S}{h} k_{23} (T_3 - T_2), \quad (15)$$

где ε_0 – постоянная, характеризующая степень черноты тела, σ – постоянная Стефана-Больцмана.

Прикладная часть

Для тестирования предложенной математической модели разработано приложение на языке C++, которое выполняет расчет зависимости распределения температуры в моделируемом объекте от времени.

Для сравнения решения полученного с применением клеточно-автоматного подхода было программно реализовано аналитическое решение, задачи Стефана для затвердевания полупространства, и решение задачи Стефана-Шварца для задачи затвердевания металла в неограниченной форме.

Выводы

Температурное поле, полученное на основании решения Стефана и клеточно-автоматного подхода, характеризуется абсолютной погрешностью 0.92%, т.е. не более 1% отклонения от реальных данных. Закон сохранения энергии для обоих решений выполняется.

В то же время сравнение температурных полей полученных путем программной реализации решения Стефана-Шварца и клеточно-автоматного метода показало значительное отклонение, полученных решений составляющее 17.29%. При этом наблюдается нарушение закона сохранения энергии при расчете температурного поля методом Стефана-Шварца. Теряется 38.15% энергии системы.

Таким образом, предложенные машины клеточных автоматов и правила перехода клеток из одного состояния в другое, являются адекватными моделями, основанными на природных свойствах систем, и могут быть использованы для описания процессов затвердевания металлов и сплавов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Лебедев А. М. Моделирование в научно-технических исследованиях. - М.: Радио и связь, 1989.
2. Малинецкий Г.Г., Потапов А.Б., Подлазов А.В. Нелинейная динамика: подходы, результаты, надежды. – М.: КомКнига, 2006.
3. Разностные схемы (введение в теорию), С.К. Годунов, В.С. Рябенский, учебное пособие. - М.: Наука, 1977.
4. Самарский А.А. Теория разностных схем. – М.: Наука, 1989.
5. Тоффоли Т., Марголюс Н. Машины клеточных автоматов. – М.: Мир, 1991.
6. Баландин Г.Ф. Основы теории формирования отливки. В 2-х частях. Ч.1. Тепловые основы теории. Затвердевание и охлаждение отливки. - М.: Машиностроение, 1976.
7. Вайнгард У. Введение в физику кристаллизации металла. – М.: Мир, 1967.