

На правах рукописи

КАРЯКИН Иван Юрьевич

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
И ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ СТАЛИ
ПОСЛЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ**

**Специальность 05.13.18 – математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ**

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т
диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Тюмень – 2011

Работа выполнена на кафедре информационных систем Института математики, естественных наук и информационных технологий ФГБОУ ВПО Тюменский государственный университет.

Научный руководитель: доктор технических наук, профессор
ИВАШКО Александр Григорьевич

Официальные оппоненты: доктор технических наук, профессор
ВАКУЛИН Александр Анатольевич

доктор физико-математических наук,
профессор
ВОРОНОВА Лилия Ивановна

Ведущая организация: Омский филиал Института математики
им. С. Л. Соболева СО РАН

Защита диссертации состоится 19 декабря 2011 г. в 16⁰⁰ часов на заседании диссертационного совета Д 212.274.14 при Тюменском государственном университете по адресу 625003, г. Тюмень, ул. Перекопская, 15А, ауд. 410.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Тюменского государственного университета.

Автореферат разослан «__» ноября 2011 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета



А. А. Ступников

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. В технике существует ряд задач, в которых необходимо прогнозирование структуры стали после термической обработки. Сталь с заданными механическими свойствами выбирается таким образом, чтобы обеспечить прокаливаемость стали при закалке. В то время, как существует большое количество экспериментально построенных диаграмм практически всех марок стали, задача прогнозирования прокаливаемости по данным изотермической диаграммы не решена. Для прогнозирования свойств и структуры стали необходимо исследование структурных превращений в стали при термической обработке.

Экспериментальное исследование структурных превращений состоит в построении изотермических и термокинетических диаграмм, а также в изучении прокаливаемости стали. Экспериментальное изучение имеет ограниченное применение. Так изотермические диаграммы используются только для качественной оценки влияния химического состава на процесс распада аустенита. Термокинетические диаграммы не могут дать достоверных сведений о структуре стали, если режим охлаждения отличается от режимов охлаждения в экспериментах. По этой причине термокинетические диаграммы используются только для количественной оценки устойчивости аустенита при непрерывном охлаждении. Прокаливаемость не дает возможность прогнозировать структуру стали после термической обработки на основе ее химического состава, так как является характеристикой только конкретной марки стали.

Вышперечисленные ограничения, связанные с методикой представления экспериментальных данных, можно уменьшить путем создания математических моделей, параметры которых определяются экспериментально.

В области моделирования кинетики структурных превращений в стали фундаментальные исследования приведены в работах М.Ж. Аврами и А.Н. Колмогорова. В этих работах строятся аналитические уравнения, описывающие зависимость доли занимаемого объема структурных составляющих от вероятности зарождения центров фаз, времени превращения и скорости роста зародышей.

Наиболее полное рассмотрение теории фазовых превращений в различных условиях термообработки стали приведено в работах Б.Я. Любова. Зарубежный исследователь Дж. Кристиан рассматривает различные методы и направления в моделировании структурных превращений. В работах этих ученых приводятся аналитические модели, которые в разных случаях не учитывают стохастическую природу процесса, не позволяют рассматривать зарождение, рост и разрушение отдельных

структурных составляющих различных структурных областей, что в свою очередь не дает возможности в полной мере провести анализ стереометрических параметров.

Наряду с аналитическим подходом к изучению процесса структурных превращений существует направление имитационного моделирования. Основателем такого подхода является И.Л. Миркин, предложивший рассматривать процесс кристаллизации с помощью двумерных схем. Модель, основанная на теории И.Л. Миркина, учитывает стохастическую природу и инкубационный период процесса, позволяет получить размер зерна. Пространство расплава и кристаллов представляется в виде набора элементарных фрагментов, что увеличивает нагрузку на компьютерную технику при обработке такого рода объектов и затрудняет реализацию рассматриваемого процесса в трехмерном пространстве.

Проблемами моделирования структурных превращений в настоящее время занимаются несколько научных школ. Школы В.Н. Анцифорова (Пермский государственный университет) и Ю.Г. Гуревича (Курганский машиностроительный институт) в своих исследованиях рассматривают моделирование фазовых превращений в порошковых сталях. Группа исследователей под управлением Д.А. Мирзаева (Южно-Уральский государственный университет) занимается моделированием структурных превращений, основываясь в большинстве своем на теоретические основы М.Ж. Аврама. Школа В.Я. Шура (Уральский государственный университет им. А.М. Горького) изучает эволюции сегнетоэлектрической доменной структуры в электрическом поле. Группа исследователей под управлением А.Г. Ивашко (Тюменский государственный университет) занимается имитационным моделированием структурных превращений в трехмерном пространстве.

Разнообразие используемых методов и методик прогнозирования структуры стали является косвенным свидетельством того, что вопрос этот еще далеко не решен. Современные исследования, связанные с моделированием структурных превращений в стали, не дают возможности решить проблему количественного описания структурных превращений при любых скоростях охлаждения, что в свою очередь не позволяет прогнозировать структуру детали после термической обработки. Кроме того, не решены вопросы моделирования нестационарного зарождения структурных составляющих.

Целью работы является прогнозирование структуры стали после термической обработки на основе экспериментально построенных кинетических диаграмм распада аустенита для анализа механических свойств материала и выбора подходящего режима охлаждения для получения этих свойств.

Для достижения поставленной цели определены следующие **задачи исследования**:

- разработка имитационной модели структурных превращений при термической обработке и определение кинетических параметров по данным изотермических диаграмм;
- разработка математических методов и алгоритмов прогнозирования структуры стали после термической обработки;
- проведение вычислительных экспериментов с целью проверки адекватности предложенных методов и алгоритмов;
- создание программного комплекса прогнозирования структурного состава стали после термической обработки;
- проведение апробации построенной модели, разработанных методов и алгоритмов.

Объектом исследования являются процессы структурных изменений в стали при термической обработке.

Предметом исследования являются методы моделирования структурных превращений в стали при термообработке с целью прогнозирования структуры стали.

Методы исследования – теория систем массового обслуживания, методы оптимизации, математическая статистика, аналитическая геометрия, методы и алгоритмы компьютерной графики на базе библиотеки OpenGL, технология распределенных вычислений, Web-технологии, объектно-ориентированный подход программирования.

На защиту выносятся:

- имитационная модель структурных превращений при термической обработке с учетом термодинамических параметров структурных превращений и изотермических диаграмм распада аустенита;
- авторская модификация метода Нелдера-Мида для определения кинетических параметров модели структурных превращений, учитывающая стохастическую природу процесса распада аустенита;
- модель прогнозирования структурного состава стали после термической обработки детали;
- метод расчета прокаливаемости стали на основе данных изотермической диаграммы;
- архитектура программного комплекса имитационного моделирования структурных превращений.

Научная новизна работы заключается в следующем:

- разработана имитационная модель распада аустенита, построенная на основе теории массового обслуживания, в которой предлагается ис-

пользовать термодинамические параметры скоростей роста и зарождения центров структурных областей, а кинетические параметры определять из изотермических диаграмм;

- предложена авторская модификация метода Нелдера-Мида для нахождения кинетических параметров имитационной модели распада аустенита в изотермических условиях, что позволяет учесть стохастическую природу исследуемого процесса структурных превращений;

- впервые предложен метод прогнозирования структуры стали после термической обработки на основе решения дифференциального уравнения теплопроводности совместно с предложенным численным моделированием структурообразования при распаде аустенита;

- предложена архитектура проблемно-ориентированного программного комплекса, в реализации которого предусмотрены распределенные вычисления с использованием технологии виртуализации, что позволяет снизить временные затраты на проведение всех вычислительных операций.

Практическая значимость работы. Предложенные математические методы и модели доведены до уровня алгоритмического и программного обеспечения. Создан программный комплекс, представляющий собой САЕ-систему, реализующий имитационное моделирование процесса структурных превращений в стальной детали в условиях изотермической выдержки и непрерывного охлаждения. На базе построенной имитационной модели реализована оценка стереометрических параметров и прокаливаемости детали, а также графическое представление структуры стали как в 2D, так и в 3D формате. Научные результаты, полученные в работе, представляют интерес при прогнозировании структуры детали различных марок стали при любой кинетике охлаждения.

Реализация и внедрение результатов работы. Финансирование диссертации выполнялось в рамках грантов правительства РФ в области фундаментальных исследований:

- аналитическая ведомственная целевая программа Министерства образования и науки Российской Федерации «Развитие научного потенциала высшей школы (2009-2011)» – «Прогнозирование кинетики распада аустенита в порошковых сталях при непрерывном охлаждении» (регистрационный номер НИР 2.1.2/6498);

- аналитическая ведомственная целевая программа Министерства образования и науки Российской Федерации «Развитие научного потенциала высшей школы (2009-2011)» – «Прогнозирование кинетики распада аустенита в порошковых сталях при непрерывном охлаждении» (регистрационный номер НИР 2.1.2/13211).

Результаты работы могут быть использованы в учебном процессе по предмету металловедение на химическом факультете Института математики, естественных наук и информационных технологий ФГБОУ ВПО Тюменского государственного университета. Разработанный программный комплекс найдет свое применение в системах инженерного проектирования деталей машин в части выбора материала с заданными механическими свойствами, а также выбора режима термической обработки этих деталей.

Апробация работы. Основные результаты докладывались на научной конференции Тюменского государственного университета с участием академика РАН Р.И. Нигматулина (Россия, г. Тюмень, 2011 г.); международной научно-практической конференции «Экономические и экологические проблемы в меняющемся мире» (Россия, г. Тюмень, 2010 г.); международной научно-практической конференции «Современные направления теоретических и прикладных исследований» (Украина, г. Одесса, 2011); всероссийской научно-практической конференции «Имитационное моделирование. Теория и практика» (Россия, г. Санкт-Петербург, 2009 г.); региональных научно-практических конференциях «Современные проблемы математического и информационного моделирования. Перспективы разработки и внедрение инновационных ИТ-решений» (Россия, г. Тюмень, 2008-2011 гг.); научно-методических семинарах кафедры информационных систем Тюменского государственного университета (Россия, г. Тюмень, 2008-2011 гг.).

Публикации. Основное содержание работы отражено в 13 публикациях, в числе которых 3 свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ и 3 статьи в изданиях из списка ВАК.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы. Объем диссертации составляет 156 страниц, содержит 59 рисунков, 27 таблиц, 1 приложение. Библиографический список включает 87 наименований работ российских и зарубежных авторов.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность темы диссертационной работы, характеризуется объект и предмет исследования, дается обзор работ, непосредственно примыкающих к теме диссертации, определяются цели исследования, отмечаются научная новизна и практическая значимость работы.

В первой главе проводится анализ различных подходов к исследованию кинетики структурных превращений в стали при ее термической обработке на основе обзора основополагающих монографий и статей отечественных и зарубежных авторов. Рассматриваются вопросы технологии термической обработки стали, для решения которых целесообразно при-

менение результатов исследований диссертационной работы. Анализируются признанные модели и методы решения задач построения изотермических и термокинетических диаграмм, а также изучения прокаливаемости рассматриваемого образца.

На основе проведенного анализа методов и алгоритмов делается вывод о возможности применения имитационного моделирования кинетики структурных превращений в стали при термообработке с возможностью учета различных видов структурных превращений и физики рассматриваемого процесса.

Во второй главе предлагается имитационная модель структурных превращений для прогнозирования структуры стали после ее термической обработки. Модель описывает процесс распада аустенита и учитывает следующие типы структурных превращений: аустенит – феррит, аустенит – перлит, аустенит – бейнит.

Для описания процесса структурных превращений предлагается следующая схема. При охлаждении аустенита ниже критических температур A_{C1} или A_{C3} в случайной области исследуемого образца с некоторой интенсивностью и вероятностью возникают центры новой структурной области. С течением времени структурные составляющие растут линейно со скоростью определяемой типом структуры.

Для формализации процесса структурных превращений в стали задается геометрический вид объектов, участвующих в рассматриваемом процессе. Форма структурных составляющих феррита, перлита и бейнита представляется в виде геометрического примитива – шара. Структурная составляющая описывается в виде объекта, характеризующегося координатами центра $O(x_i, y_i, z_i)$, скоростью роста и начальным радиусом.

Для имитации процессов возникновения, роста и распада структурных составляющих используется инструмент теории массового обслуживания.

Выбранная модель массового обслуживания является многоканальной системой с моментальным временем обслуживания и шестью входящими потоками заявок: образование структурных составляющих феррита, перлита и бейнита, распад структурных составляющих феррита, перлита и бейнита.

Исходя из физических закономерностей процесса структурных превращений, входящий поток обладает свойствами стационарности, ординарности и отсутствием последствий. Таким образом, входящий поток можно считать пуассоновским. Время между поступлениями заявок распределено по показательному закону и вычисляется по формуле:

$$\tau_k = -\frac{1}{\lambda} \cdot \ln \xi_k, k = 1, 2, \dots$$

где ξ_k – случайные числа, равномерно распределенные на интервале (0, 1); λ – интенсивность потока.

Алгоритм вычислительного эксперимента при заданной температурной выдержке (T) состоит в следующем:

ШАГ 1. Задается число итераций N , и начальный номер итерации $J=1$.

ШАГ 2. Очистка пространства превращения и числовых массивов работы с данными.

ШАГ 3. Генерация моментов времени τ_k событий на зарождение и уничтожение объектов определенной структуры. При этом процесс генерации определяется параметрами: $\lambda_{create}^{\phi}(T)$, $\lambda_{create}^{\Pi}(T)$, $\lambda_{create}^{\beta}(T)$ – интенсивность возникновения объектов феррита, перлита, бейнита соответственно (1/сек); $\lambda_{raspada}^{\phi}(T)$, $\lambda_{raspada}^{\Pi}(T)$, $\lambda_{raspada}^{\beta}(T)$ – интенсивность появления событий проверки на уничтожение структурных составляющих определенной структурной области (феррита, перлита, бейнита) (1/сек).

ШАГ 4. Формирование очереди заявок.

ШАГ 5. Определение типа и момента времени τ ближайшего события.

ШАГ 6. При поступлении заявки на зарождение в случайной точке рассматриваемого образца моделируется образование нового объекта определенной структуры, размер которого растет линейно.

Скорость распространения ферритной области определяется формулой:

$$\omega_{\phi} = \frac{D_{\gamma} h}{r_a^4 K_{\phi}(T)} \cdot \frac{C_{\gamma}^{pa6} - C_{\alpha}^{pa6}}{C_{\gamma}^{нач} - C_{\alpha}^{pa6}} \cdot e^{\frac{U}{RT}} \quad (1)$$

где D_{γ} – коэффициент диффузии углерода в аустените; r_a – размер атома; $K_{\phi}(T)$ – кинетический параметр, характеризующий изменение свободной энергии при образовании единицы объема нового зародыша; C_{γ}^{pa6} – концентрация углерода γ -фазы в равновесном состоянии; $C_{\gamma}^{нач}$ – концентрация углерода γ -фазы в начальном состоянии; C_{α}^{pa6} – концентрация углерода α -фазы в равновесном состоянии; U – энергия активации перехода атомов через границу раздела фаз; h – постоянная Планка; R – газовая постоянная; T – температура.

Скорость распространения перлитной области определяется формулой:

$$\omega_{II} = K_{II}(T) \frac{4\pi D_0}{S_0} \left(1 + \frac{7}{3} \cdot \frac{VEV^2}{RT} \right) \cdot e^{-\frac{U}{RT}}, \quad (2)$$

где D_0 – коэффициент диффузии; S_0 – межпластинчатое расстояние в двухфазной структуре перлита; $K_{II}(T)$ – кинетический параметр, характеризующий скорость роста перлитного зерна; V – атомный объем, $V=N_A \cdot V_0=7 \text{ см}^3/\text{моль}$; E – константа, равная $2 \cdot 10^{11} \text{ н/м}^2 = 2 \cdot 10^4 \text{ кГ/мм}^2$; ν – коэффициент (принимается равным 0,2).

Скорость распространения бейнита определяется механизмом нормальной диффузии с учетом поправки на диффузионный подвод атомов растворенного вещества к границе выделения:

$$\omega_B = K_B(T) \frac{D}{p_0}, \quad (3)$$

где D – коэффициент диффузии; p_0 – удвоенный радиус критического зародыша; $K_B(T)$ – кинетический параметр, характеризующий скорость роста структурной составляющей бейнита.

В момент прихода заявки на уничтожение проводится анализ размера случайно выбранной структурной составляющей. Если размер меньше критического (R_{krit}), объект уничтожается, в противном случае продолжается его рост.

ШАГ 7. В момент времени τ производится пересчет размеров всех структурных составляющих в зависимости от скорости роста.

ШАГ 8. Вычисление доли объема структурных составляющих относительно объема исследуемого пространства методом Монте-Карло.

В область исследуемого пространства выбрасываются точки со случайными координатами (x, y, z) . Для каждой точки проверяется ее принадлежность каждой структурной составляющей определенной структурной области, т.е. каждому шару с центром (x_i, y_i, z_i) и радиусом R_i .

Если обозначить через N – общее число выброшенных точек, а через N_p – число точек, попавших в объекты, моделирующие структурные составляющие феррита, перлита, бейнита, то доля области, занятой объектами, составит:

$$V = \frac{N_p}{N} \cdot 100\%.$$

Может оказаться, что среди точек, случайно выброшенных в рассматриваемую область и попавших в какой-либо из объектов, окажутся точки, координаты которых будут удовлетворять сразу нескольким неравенствам

$$(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 + (z - z_i)^2 \leq R_i^2.$$

Эти точки будут принадлежать области пространства, являющейся пересечением структурных составляющих. Для таких точек возникает вопрос об их принадлежности одному из объектов. При решении этого вопроса анализируется положение границы раздела структурных областей, описываемой уравнением:

$$\sqrt{(x-x_1)^2+(y-y_1)^2+(z-z_1)^2} - \frac{\omega_1}{\omega_2} \sqrt{(x-x_2)^2+(y-y_2)^2+(z-z_2)^2} + (t_1-t_2)\omega_1 = 0$$

где ω_1 – скорость роста первого объекта; ω_2 – скорость роста второго объекта; t_1, t_2 , – моменты времени образования соответствующих объектов; $(x_1, y_1, z_1), (x_2, y_2, z_2)$ – координаты центров образования первого и второго объектов соответственно.

Для анализа принадлежности точки одному из двух объектов вычисляется

$$\sigma_i = \delta(x', y', z') \cdot \delta(x_i, y_i, z_i), i = 1, 2.$$

где (x', y', z') – координаты исследуемой точки;

$$\delta(x, y, z) = \sqrt{(x-x_1)^2+(y-y_1)^2+(z-z_1)^2} - \frac{\omega_1}{\omega_2} \sqrt{(x-x_2)^2+(y-y_2)^2+(z-z_2)^2} + (t_1-t_2)\omega_1$$

Если $\sigma_i \geq 0$, то точка (x', y', z') полагается расположенной с той же стороны от поверхности раздела структур, что и центр i -го шара, а, следовательно, принадлежит структурной области, к которой отнесен i -й объект. В противном случае ($\sigma_i < 0$) точка принадлежит другой структурной составляющей.

ШАГ 9. Если структурные составляющие заняли всё исследуемое пространство, то превращение заканчивается, для текущей J -ой итерации данные вычислительного эксперимента заносятся в массив (V, τ) и осуществляется переход на ШАГ 10. В противном случае, переход на ШАГ 5.

ШАГ 10. На основе массива (V, τ) линейным интерполированием вычисляется время τ' превращения для фиксированной шкалы процентного содержания превращенного аустенита V' и заносится в массив (V', τ') для J -ой итерации.

ШАГ 11. Если $J < N$, то $J = J + 1$ и переход на ШАГ 2.

ШАГ 12. Усреднение времени образования V' по всем итерациям вычислительного эксперимента, результатом является массив $(V', \bar{\tau}')$.

Исходя из алгоритмического описания модели фазовых превращений в стали, параметрами, определяющими кинетику процесса, являются: $\lambda_{create}^{\phi}(T)$, $\lambda_{create}^{\Pi}(T)$, $\lambda_{create}^{\beta}(T)$, $\lambda_{распада}^{\phi}(T)$, $\lambda_{распада}^{\Pi}(T)$, $\lambda_{распада}^{\beta}(T)$, $K_{\phi}(T)$, $K_{\Pi}(T)$, $K_{\beta}(T)$, $\omega_{\phi}(T)$, $\omega_{\Pi}(T)$, $\omega_{\beta}(T)$; $R_0^{\phi}(T)$, $R_0^{\Pi}(T)$, $R_0^{\beta}(T)$ – начальные радиусы зародыша определенной структуры (мкм); $R_{krit}(T)$ – критический размер устойчивого зародыша (мкм).

Определение значений кинетических параметров из литературных источников не представляется возможным, поэтому параметры модели предлагается определять из изотермических кривых распада аустенита методом наименьших квадратов. С этой целью для каждого значения температуры изотермической выдержки рассматривается целевая функция:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_{i,j=1}^{n,m} (V_{\text{exp}}(x_1, x_2, \dots, x_N, \tau_{i,j}) - V(T_i, \tau_{i,j}))^2 \quad (4)$$

где n – число экспериментальных точек; m – количество температурных режимов; T_i – температура ($^{\circ}\text{C}$); $\tau_{i,j}$ – время после начала выдержки образца (сек); V – доля распавшегося аустенита по результатам натурального эксперимента (%); x_1, x_2, \dots, x_N – параметры имитационной модели; $V_{\text{exp}}(x_1, x_2, \dots, x_N, \tau_{i,j})$ – доля превращенного аустенита, полученная в результате компьютерного эксперимента.

Для определения оптимальных значений кинетических параметров решается задача минимизации функции (4):

$$f(x_1, x_2, \dots, x_N) \rightarrow \min \quad (5)$$

Для решения задачи (5) был выбран метод Нелдера-Мида, который относится к методам прямого поиска. Суть метода заключается в последовательном перемещении и деформировании симплекса вокруг точки экстремума.

Для получения корректных результатов минимизации функции (4) метод Нелдера-Мида модифицирован введением проверки статистического критерия при принятии решения об улучшении значения целевой функции.

При сравнении значений функции в точках $x^1 = (x_1^1, x_2^1, \dots, x_N^1)$, $x^2 = (x_1^2, x_2^2, \dots, x_N^2)$ проводятся несколько серий экспериментов и вычисляются значения $\bar{f}(x^1)$ и $\bar{f}(x^2)$. Если $\bar{f}(x^1) < \bar{f}(x^2)$, то выдвигается

гипотеза $H_0 : M(f(x^1)) < M(f(x^2))$ при конкурирующей гипотезе $H_1 : M(f(x^1)) \geq M(f(x^2))$. Для проверки нулевой гипотезы используется t -критерий при уровне значимости $\alpha = 0,05$:

$$t' = \frac{(\bar{f}(x_1^1, x_2^1, \dots, x_N^1) - \bar{f}(x_1^2, x_2^2, \dots, x_N^2))\sqrt{N}}{\sqrt{s^2(f(x_1^1, x_2^1, \dots, x_N^1)) + s^2(f(x_1^2, x_2^2, \dots, x_N^2))}}$$

Наблюдаемое значение t' сравнивается со значением $t_{1-\alpha}$ с ν степенями свободы, где

$$\nu = \frac{(s^2(f(x_1^1, x_2^1, \dots, x_N^1)) + s^2(f(x_1^2, x_2^2, \dots, x_N^2)))^2(L+1)}{(s^2(f(x_1^1, x_2^1, \dots, x_N^1)))^2 + (s^2(f(x_1^2, x_2^2, \dots, x_N^2)))^2}$$

где L – число значений в каждой серии.

При $t'_{набл} > t_{1-\alpha}$ гипотеза H_0 принимается, в противном случае принимается гипотеза H_1 . В случае принятия гипотезы H_0 имеем $f(x^1) < f(x^2)$. В дальнейшем при каждом сравнении значений функции в вершинах симплекса проверяются аналогичные гипотезы.

Вычислительный эксперимент для изотермических условий осуществляется в предположении, что все кинетические параметры модели зависят от температуры, но не зависят от времени превращения.

При моделировании структурных превращений при непрерывном охлаждении необходимо для каждого режима охлаждения описать зависимость температуры от времени, а также зависимость кинетических параметров превращения от температуры, и при проведении расчетов учитывать эти зависимости.

Модель при непрерывном охлаждении представляет собой событийную модель структурных превращений, где с течением времени в случайной точке пространства, не занятой объектами, создается новый объект (структурная составляющая) – шар с радиусом заданной величины. Радиус шара со временем растет линейно. Через определенные промежутки времени таким же образом в свободной области создаются новые структурные составляющие.

Время наступления событий зарождения и уничтожения объектов τ_{k+1} определяется из уравнения

$$\int_{\sum_{j=1}^k \tau_j}^{\sum_{j=1}^k \tau_j + \tau_{k+1}} \lambda(l) dl = -\ln \xi_{k+1},$$

где $\lambda(l)$ – функция интенсивности зарождения или уничтожения объектов, представленная в виде кубического сплайна.

При определении объема методом Монте-Карло учитывается, что в случае непрерывного охлаждения скорость роста вновь образованных объектов зависит от времени. В формулах скоростей роста (1)-(3) соответствующих структурных областей учтена зависимость от T .

Температура в момент времени τ определяется линейной интерполяцией по формуле:

$$T(\tau) = \frac{\tau - \tau_i}{\tau_{i+1} - \tau_i} (T_{i+1} - T_i) + T_i,$$

где $\tau \in [\tau_i; \tau_{i+1}]$; $T_i = T(\tau_i)$; $T_{i+1} = T(\tau_{i+1})$.

Таким образом, скорости роста структурных составляющих описываются зависимостями от времени превращения. При определении попадания точки в шар в момент времени τ величина $R_i(\tau)$ берется равной

$$R_i(\tau) = R_0 + \int_{\tau_i}^{\tau} \omega(t) dt,$$

где $\omega(l)$ – зависимость скорости роста фазы от времени, которая описывается кубическим сплайном; τ_i – время зарождения i -го объекта.

Размер критического радиуса в момент времени τ вычисляется по формуле:

$$R_{krit}(\tau) = \frac{T - T_j}{T_{j+1} - T_j} (R_{krit_{j+1}} - R_{krit_j}) + R_{krit_j},$$

где $T \in [T_j; T_{j+1}]$; $R_{krit_j} = R(T_j)$; $R_{krit_{j+1}} = R(T_{j+1})$.

Аналогично, с использованием линейной интерполяции, находится начальный радиус в зависимости от времени τ . Затем рассчитываются характеристики всех структурных составляющих и находится доля занимаемого ими объема исследуемого пространства.

В третьей главе излагается метод прогнозирования структуры стали после термической обработки на основе решения дифференциального уравнения теплопроводности совместно с предложенным численным моделированием структурообразования при распаде аустенита. Начальное условие определяется температурой аустенитизации (T_A), граничные ус-

ловия третьего рода задаются теплоотдачей с поверхности детали при термической обработке. Теплофизические параметры стали $\lambda(T, \psi)$, $\gamma(T, \psi)$ и $C(T, \psi)$ определяются линейной комбинацией количества превращенного аустенита соответствующих структурных составляющих. Теплота фазовых превращений задается в уравнение теплопроводности внутренним источником тепла с мощностью:

$$Q_{\phi}(T, t, x, \psi) = \gamma(T)L_{\phi} \frac{d\psi}{dt}(T, \tau) \quad (6)$$

где L_{ϕ} – удельная теплота структурных превращений, Дж/кг; $\frac{d\psi}{dt}$ – скорость распада переохлажденного аустенита.

Количество структурных составляющих и скорость распада аустенита определяется имитационным моделированием структурных превращений при непрерывном охлаждении, описанным во второй главе.

Предложенный метод реализован для решения задачи определения прокаливаемости стали после термической обработки образца. Тепловая схема охлаждения образца, нагретого выше температуры A_{c3} , приведена на рисунке 1. Передача тепла включает теплоотдачу через торцевые поверхности OA (плотность теплового потока q_1) и Bl (плотность теплового потока q_2), а также через боковую поверхность (q_3). Считается, что температура в образце изменяется непрерывно по длине образца $T(x, \tau)$, но существенно не изменяется по двум другим координатам.

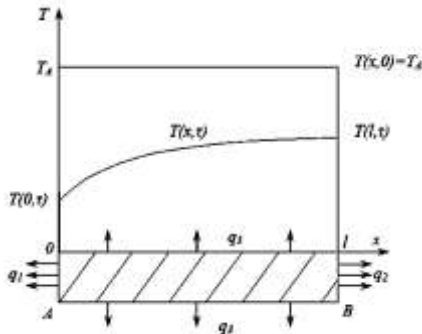


Рис. 1. Тепловая схема охлаждения образца

Теплоотвод через боковые поверхности учитывается в качестве внутренних источников тепла с мощностью, определяемой соотношением (6).

Задача решается численно конечно-разностным методом с использованием неявной схемы. В координатно-временном пространстве вводится сетка:

$$x_i = h \cdot i, \quad i = 2, \dots, (N-1); \quad \tau_j = \Delta \tau \cdot j, \quad j = 2, \dots, L.$$

Разностный аналог решаемой задачи имеет вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} C_{i,j} \gamma_{i,j} \frac{T_{i,j} - T_{i,j-1}}{\tau} = \frac{1}{h} \left[\lambda_{i+\frac{1}{2},j} \frac{(T_{i+1,j} - T_{i,j})}{h} - \lambda_{i-\frac{1}{2},j} \frac{(T_{i,j} - T_{i-1,j})}{h} \right] + f_{i,j} \\ \lambda_{N-\frac{1}{2},j} \cdot \frac{T_{N,j} - T_{N-1,j}}{h} + 0.5h \left(C_{N,j} \cdot \gamma_{N,j} \frac{T_{N,j} - T_{N,j-1}}{\tau} - f_{i,j} \right), \\ + \alpha_{2,N,j} \cdot (T_{N,j} - T_{C_2}) = 0, \text{ где } \alpha_{2,N,j} = \alpha_2(T_{N,j}, T_{C_2}), \\ \lambda_{\frac{3}{2},j} \cdot \frac{T_{1,j} - T_{2,j}}{h} + 0.5h \left(C_{1,j} \cdot \gamma_{1,j} \frac{T_{1,j} - T_{1,j-1}}{\tau} - f_{i,j} \right) \\ + \alpha_{11}^j \cdot (T_1^j - T_{C_2}) = 0, \text{ где } \alpha_{11}^j = \alpha_1(T_{1,j}, T_{C_2}), \end{array} \right. \quad (7)$$

где $f_{i,j} = \frac{P}{S} \alpha_{2i,j} (T_{i,j} - T_{C_2}) + f_{i,j} L_\phi \left(\frac{d\psi}{dt} \right)_{i,j}$, $\left(\frac{d\psi}{d\tau} \right)_{i,j} = \frac{d\psi}{d\tau} \cdot (T_{i,j}, \tau_j)$.

При решении разностной задачи (7) методом прогонки используется итерационный алгоритм. В качестве нулевого приближения $\psi_{i,j}^{(0)}$, $\psi_{i,j-1}^{(0)}$, $C_{i,j}^{(0)}$, $\gamma_{i,j}^{(0)}$, $\lambda_{i,j}^{(0)}$ берутся значения на предыдущем временном слое. Последующие приближения $T_{i,j}^{(k)}$ находятся из системы уравнений методом прогонки, в которой коэффициенты теплоотдачи, плотность, теплопроводность и теплоемкость вычислены для $T_{i,j}^{(k-1)}$ (значения температуры предыдущего итерационного цикла). Значение скорости превращения для k -ой итерации в узле (i, j) определяется по формуле:

$$\left(\frac{d\psi}{dt} \right)_{i,j}^{(k)} = \frac{\psi_{i,j}^{(k-1)} - \psi_{i,j-1}^{(k-1)}}{\Delta \tau}.$$

Итерационный процесс проводится до выполнения условия

$$\max_i |T_{i,j}^{(k)} - T_{i,j}^{(k-1)}| < \varepsilon \max |T_{i,j}^{(k)}|.$$

После завершения итерационного процесса для каждого узла сетки полученные значения температур усредняются:

$$T_{i,j}^{(k)} = \frac{T_{i,j}^{(k)} + T_{i,j}^{(k-1)}}{2}.$$

С помощью данных термокинетических диаграмм и разностного уравнения (7) может быть определено количество превращенного аустенита в каждой точке образца. По температуре и количеству превращенного аустенита в каждой точке образца определяется содержание мартенсита по длине образца, это является целью расчета прокаливаемости по данным диаграмм распада переохлажденного аустенита.

Четвертая глава посвящена рассмотрению архитектурного решения и практике создания программного комплекса, реализующего разработанную имитационную модель.

Разработанный программный комплекс представляет собой САЕ-систему, являющуюся системой полнофункционального инженерного исследования. Комплекс позволяет пользователю проводить компьютерное моделирование структурных превращений в стали в условиях изотермической выдержки и непрерывного охлаждения, строить изотермические и термокинетические диаграммы, осуществлять расчет прокаливаемости материала, по результатам моделирования вычислять основные стереометрические параметры рассматриваемого процесса, сохранять, редактировать и просматривать результаты экспериментов. Кроме того, предусмотрена возможность построения шлифа детали и 3D визуализации процесса структурных превращений.

Для взаимосвязанной работы всех модулей и реализации необходимых функциональных возможностей программный комплекс построен на основе трехуровневой архитектуры: терминал, сервер приложений, сервер базы данных (рис. 2).

Терминал является интерфейсной компонентой и служит для авторизации пользователя, ввода необходимых данных, запуска расчетов и просмотра результатов. Данная компонента представлена в виде Windows-приложения, которое связано с сервером приложений, находящимся на ftp-сервере, подключение к которому происходит посредством доступа в Интернет. Интерфейсная часть программного комплекса реализована в среде разработки Delphi 7. Связь между терминалом и сервером приложений осуществляется с помощью отправки по протоколу HTTP XML-запроса на выполнение соответствующих расчетов. Для организации обмена данными между клиентским приложением и сервером приложений используется HTTP-сервер Apache.

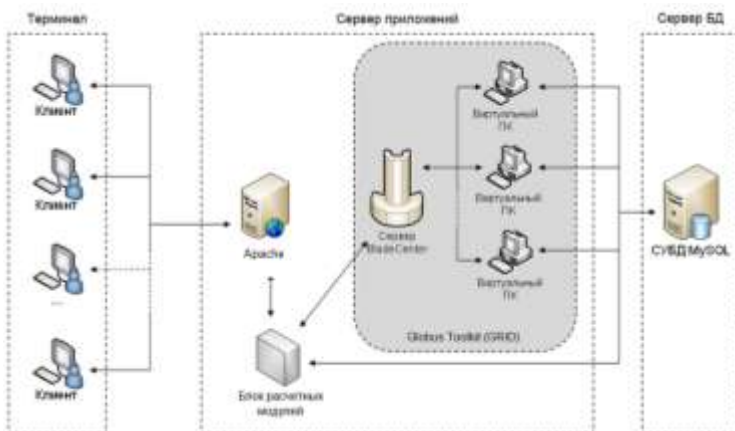


Рис. 2. Архитектура программного комплекса

Результаты расчетов отправляются с сервера клиенту и отображаются в соответствующих интерфейсах приложения. Для графической 3D визуализации процесса структурных превращений и шлифа детали (рис. 3) используется библиотека OpenGL.

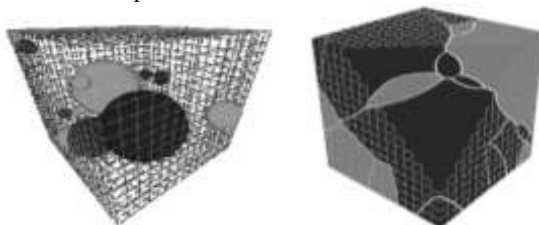


Рис. 3. 3D визуализация процесса структурных превращений и шлифа детали

Сервер базы данных служит для хранения введенной пользователями информации и результатов произведенных вычислений. Сервер приложений предназначен для проведения требуемых расчетов, взаимосвязи интерфейсной компоненты и сервера базы данных, а также выполнения распределенных вычислений.

Для выполнения вычислений выделен расчетный блок, состоящий из следующих модулей: имитации процесса структурных превращений при заданной изотермической выдержке; 3D визуализации; расчета кинетических параметров стали на основе введенных диаграмм распада аустенита при изотермических условиях; расчета данных термокинетических диа-

грамм; оцифровки изотермических и термокинетических диаграмм; прогнозирования структуры стали после термической обработки, оценки прокаливаемости получаемого материала и вычисления стереометрических параметров превращения феррита, перлита и бейнита.

Для выполнения оцифровки используется волновой метод распознавания изображений. Метод заключается в анализе пути прохождения сферической волны по изображению. На каждом шаге анализируется смещение центра масс точек, образующих новый шаг (генерацию) волны, относительно его предыдущих положений. Волновой метод модифицирован с учетом ограничений распространения волны на растре: дискретность пространства и направлений распространения.

Выполнение расчетов по вычислению значений кинетических параметров требует больших вычислительных, аппаратных и временных ресурсов, поэтому целесообразно применение технологии распределенных вычислений. Для организации распределенных вычислений используется GRID-система, представляющая собой сеть из компьютеров, один из которых выполняет роль главного, остальные – роль второстепенных. При разработке данной GRID-системы используется комплекс Globus Toolkit 4, представляющий собой набор программных компонент, реализующих необходимые части архитектуры GRID.

Разработанный программный комплекс развернут на сервере IBM BladeCenter с использованием технологии виртуализации.

В пятой главе описывается проведение вычислительных экспериментов, позволяющих оценить функциональные возможности программного комплекса и адекватность математических методов, алгоритмов и моделей, реализующих предложенный метод моделирования.

Компьютерное моделирование структурных превращений проводилось для следующих марок стали: 1) ПК40Н2М; 2) ПК80 с 6-8% пористостью; 3) ПК80 с 14-18% пористостью; 4) ПК80 с 26-28% пористостью; 5) ПК120 с 6-8% пористостью; 6) ПК120 с 26-28% пористостью; 7) ПК45 с 6-8% пористостью; 8) У8; 9) 45Х; 10) 35Х; 11) Углеродистая сталь 45; 12) 45Г2. Для каждой марки стали были построены изотермические и термокинетические диаграммы.

В результате проведенного компьютерного моделирования структурных превращений получены кинетические параметры для одиннадцати температур выдержки. Эти параметры положены в основу моделирования в условиях непрерывного охлаждения для заданных режимов охлаждения. Получены термокинетические диаграммы для вышеперечисленных марок стали.

На рисунке 4 приведено графическое сопоставление изотермических и термокинетических диаграмм, полученных в результате компьютерного и натурального экспериментов для стали ПК40Н2М.

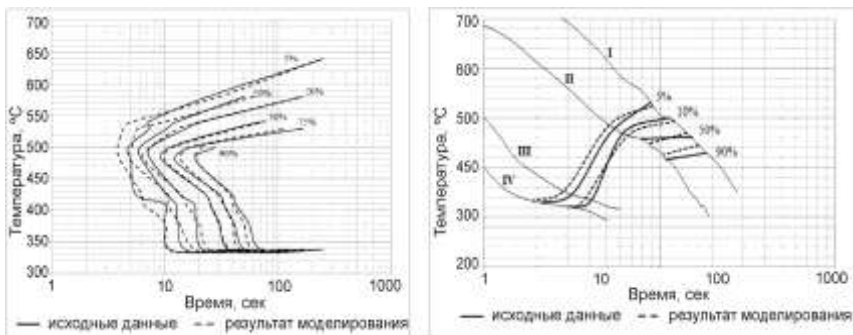


Рис. 4. Изотермическая и термокинетическая диаграммы распада аустенита для стали ПК40Н2М

Приведенные графики и расчеты показали сопоставимость диаграмм, полученных в результате компьютерного и натурального экспериментов. Средняя относительная погрешность составила 9% для изотермических диаграмм, 13% – для термокинетических.

В целях более полного представления о структуре получившегося материала в работе реализована оценка стереометрических параметров: объемная доля структурных областей; удельная поверхность границ структурных областей; плотность линейных элементов структуры; средний размер структурных составляющих.

Результаты компьютерного моделирования в условиях температурной выдержки и непрерывного охлаждения показали адекватность предложенной имитационной модели и корректную работу комплекса программ.

В заключении приведены основные результаты диссертационной работы. Автором были изучены особенности процесса структурных превращений в стали, проанализированы работы теплофизического и математического характера, рассмотрены различные методы решения подобных задач. При этом получены следующие **результаты**:

- разработана четырехфазная имитационная модель структурных превращений, учитывающая физику рассматриваемого процесса путем ввода термодинамических параметров характеризующих рост центров структурных областей феррита, перлита и бейнита;

- предложена модификация метода Нелдера-Мида, позволяющая учесть стохастическую природу целевой функции;

- предложена архитектура программного комплекса имитационного моделирования процесса структурных превращений в стали при изотермических и термокинетических условиях с применением технологии распределенных вычислений.

В приложение вынесены результаты вычислительных экспериментов по различным маркам стали.

По результатам, полученным в диссертационной работе можно сделать следующие **выводы**.

1. Разработана имитационная модель распада аустенита выше температуры начала мартенситного превращения, построенная на основе теории массового обслуживания, в которой предлагается использовать известные из литературы термодинамические параметры скоростей роста и зарождения центров структурных областей, а кинетические параметры определять из изотермических диаграмм. Модель позволяет корректно учитывать физическую природу фазовых превращений и особенности структурообразования в термокинетических условиях.

2. Получены уравнения границы раздела двух и более структурных составляющих для расчета процентной доли объема, занимаемого структурными составляющими, методом Монте-Карло.

3. Модифицирован алгоритм метода Нелдера-Мида для нахождения кинетических параметров модели при заданной температурной выдержке. Модификация позволяет учесть стохастическую природу исследуемого процесса структурных превращений, снизить неточность и вероятность ошибки в получаемых результатах.

4. Предложен метод прогнозирования структуры стали после термической обработки на основе решения дифференциального уравнения теплопроводности совместно с предложенным численным моделированием структурообразования при распаде аустенита. Реализация данного метода на примере решения задачи определения прокаливаемости стали, показала возможность учета зависимости теплофизических параметров стали от ее структурного состава при изменении кинетики охлаждения детали.

5. Разработана и обоснована архитектура программного комплекса, включающая: GRID-систему, на базе которой реализована схема распределенных вычислений кинетических параметров имитационной модели; модуль автоматизированного ввода данных из изотермических и термокинетических диаграмм, реализующий модифицированный волновой алгоритм распознавания растровых изображений; модуль визуализации структуры стали и расчета ее стереометрических параметров.

6. Выполнено моделирование кинетики распада аустенита в изотермических и термокинетических условиях для 11 различных марок порошковых и компактных сталей. Показано, что погрешность вычислительных экспериментов в сравнении с натурными испытаниями составляет не более 15%, что свидетельствует об адекватности предложенных методов, моделей и алгоритмов.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. *Ивашко А.Г., Цыганова М.С., Карякин И.Ю.* Модифицированный метод Хука-Дживса для нахождения параметров модели фазовых превращений // Вестник Тюменского государственного университета, 2009. № 6. – Тюмень: Изд-во ТюмГУ, 2009. – С. 197-203.
2. *Ивашко А.Г., Карякин И.Ю., Зюркалов А.А.* Анализ методов Хука-Дживса и Нелдера-Мида применительно к задаче нахождения параметров модели фазовых превращений // Вестник Тюменского государственного университета, 2010. № 6. – Тюмень: Изд-во ТюмГУ, 2010. – С. 162-168.
3. *Ивашко А.Г., Карякин И.Ю.* Моделирование кинетики $\gamma \rightarrow \alpha$ превращений в сплаве 05X9 // Вестник Тюменского государственного университета, 2011. № 6. – Тюмень: Изд-во ТюмГУ, 2011. – С. 122-128.
4. *Ивашко А.Г., Карякин И.Ю.* Решение задачи нахождения параметров модели фазовых превращений в стали при термообработке методами прямого поиска // Сборник научных трудов по материалам международной научно-практической конференции «Современные направления теоретических и прикладных исследований, 2011». Т. 6. Технические науки. – Одесса: Черноморье, 2011. – С. 24-28.
5. *Ивашко А.Г., Карякин И.Ю.* Применение метода Нелдера-Мида для нахождения кинетических параметров модели фазовых превращений в стали при термической обработке // Экономические и экологические проблемы в меняющемся мире: сборник материалов Международной научно-практической конференции. Тюмень: Печатник, 2010. – С. 407-409.
6. *Карякин И.Ю.* Имитационная модель структурных преобразований в стали при термической обработке // Имитационное моделирование. Теория и практика. (ИММОД-2009): Сборник докладов четвертой всероссийской научно-практической конференции. Т. 2. – СПб., 2009. – С. 100-104.
7. *Воробьева М.С., Карякин И.Ю.* Визуализация процесса образования аустенита при термической обработке стали // Современные проблемы математического и информационного моделирования. Перспективы разработки внедрения инновационных IT-решений: сборник научных трудов. – Тюмень: Изд-во ТюмГУ, 2008. – С. 51-58.
8. *Ивашко А.Г., Цыганова М.С., Карякин И.Ю.* Имитационное моделирование фазовых превращений // Информационное и компьютерное моделирование: сборник научных трудов. Вып. 10. – Тюмень: Изд-во «Вектор Бук», 2008. – С. 106-113.
9. *Ивашко А.Г., Карякин И.Ю., Криванкова Е.А.* Система оцифровки кинетических диаграмм фазовых преобразований // Современные проблемы математического и информационного моделирования. Перспективы разработки внедрения инновационных IT-решений: сборник научных трудов. – Тюмень: Изд-во ТюмГУ, 2010. – С. 100-105.
10. *Ивашко А.Г., Карякин И.Ю.* Представление модели фазовых превращений в виде системы дифференциальных уравнений // Современные проблемы математического и информационного моделирования. Перспективы разработки внедрения инновационных IT-решений: сборник научных трудов. – Тюмень: Изд-во ТюмГУ, 2010. – С. 105-110.
11. *Ивашко А.Г., Карякин И.Ю., Криванкова Е.А.* Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2010617811 «Система оцифровки кинетических диаграмм фазовых преобразований» от 24.11.2010.

12. *Ивашко А.Г., Карякин И.Ю.* Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2011611631 «Программное приложение 3D-визуализации процесса фазовых превращений в стали при термической обработке» от 18.02.2011.
13. *Ивашко А.Г., Карякин И.Ю., Зюркалов А.А.* Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2011611944 «Программный модуль для нахождения параметров модели фазовых превращений в стали методом Нелдера-Мида» от 03.03.2011.

Подписано в печать 09.11.2011. Тираж 100 экз.
Объем 1,0 уч.-изд. л. Формат 60x84/16. Заказ 809.

Издательство Тюменского государственного университета
625003, г. Тюмень, ул. Семакова, 10.
Тел./факс (3452) 45-56-60; 46-27-32
E-mail: izdatelstvo@utmn.ru