Математическо моделиране на кристализацията на метални сплави

Людмил Вл. Йовков, докторант по докторска програма 02.09.01 „Металознание и термична обработка на металите“

Институт по металознание, съоръжения и технологии с център по хидро- и аеродинамика „Акад. А. Балевски“ — БАН
Научни ръководители: доц. д-р Валентин Манолов, проф. д-р Татяна Черногорова

22. 02. 2021 г.

Цели и задачи на дисертационния труд

- Основни цели на дисертационния труд
  - Разработване на компютърен алгоритъм за числено симулиране на кристализацията на метални сплави чрез използване на едномерния математически модел и с отчитане центровете на кристализация.
  - Разработване на компютърен алгоритъм за числено симулиране на кристализацията чрез използване на двумерния математически модел и с отчитане топлината на кристализация на сплавите.

Цели и задачи на дисертационния труд

- Проектиране, реализиране и тестване на собствен графичен потребителски интерфейс за решаване на двумерната кристализационна задача в диалогов режим.
- Числено изследване на кристализационния процес с използване на получените числени алгоритми.

■ Задачи, които трябва да се решат, за да се постигнат целите на изследването

Едномерен математически модел — постановка на диференциалната задача

- Диф. уравнение в течната фаза

$$\frac{\mathrm{d}\,u}{\mathrm{d}\,t} = -\frac{\alpha_1}{R\rho_1 c_1}(u - u_F), \quad t_0 < t \le t_L \tag{1}$$

$$u(t_0) = u_0, \tag{2}$$

където: α_1 — коеф. на топлообмен, $R = V_0/F$, V_0 — обем на отливката, F — площ на отливката, ρ_1 — плътност, c_1 — специфичен топлинен капацитет, u_F — температура на формата

Едномерен математически модел — постановка на диференциалната задача

- Диф. уравнение в двуфазната зона

$$(3)\quad \frac{\mathrm{d}\,\Delta u}{\mathrm{d}\,t} = \frac{\alpha_2}{R\rho_2 c_2}\left[u_A - u_F - \Delta u - \beta_0 c_0 (e^{-\omega})^{k-1}\right] - \left[\frac{\kappa}{c_2} + \beta_0 c_0 (1-k)(e^{-\omega})^{k-2}\right]\cdot e^{-\omega}\cdot\frac{\mathrm{d}\,\omega}{\mathrm{d}\,t},\ t_L < t \le t_E,$$

$$(4)\quad \Delta u(t_L) = u_A - u_L - \beta_0 c_0,$$

където: $\Delta u = u_A - u - \beta_0 c_0 f_L^{k-1}$ — преохлаждане, u_A — т. т. на чистия метал, β_0 — модул на наклона на линията на ликвидуса, c_0 — концентрация на легиращия елемент, κ — топлина на кристализация, $f_L = e^{-\omega}$ — съд. на течната фаза в двуфазната зона, k — коеф. на разпределение

Едномерен математически модел — постановка на диференциалната задача

■ Диф. уравнение в зоната на евтектиката

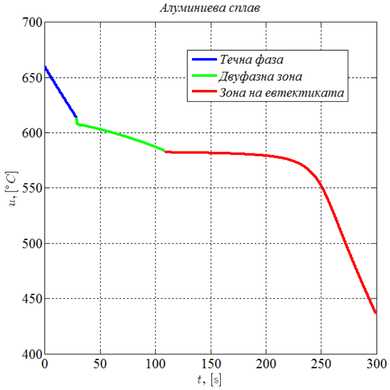
$$(5) \qquad c_3\rho_3\frac{\mathrm{d}\,u}{\mathrm{d}\,t} = -\kappa\rho_3\frac{\mathrm{d}\,f_E}{\mathrm{d}\,t} - \frac{\alpha_3}{R}(u-u_F), \quad t_E < t < t_{\mathrm{end}}$$

$$(6) \qquad u(t_E) = u_E,$$

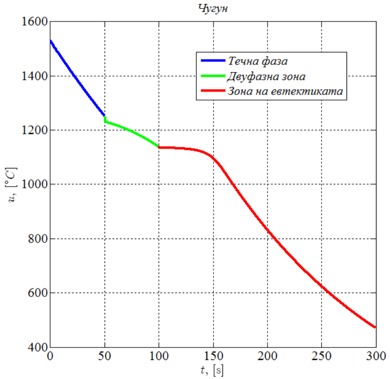
където: $f_E = e^{-sK_E}$, $s = \int\limits_{t_E}^{t}(u_E - u)\,\mathrm{d}\,t$, K_E — крист. коеф. на евтектиката

■ Числен метод за приближено решаване на модела

Числени симулации

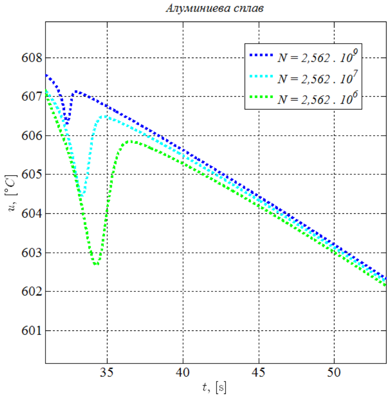


Фигура: Температурно разпределение като функция на времето, алуминиева сплав

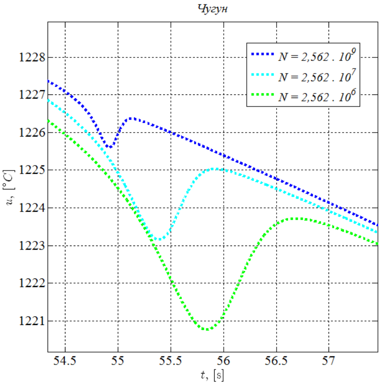


Фигура: Температурно разпределение като функция на времето, сив чугун

Числени симулации

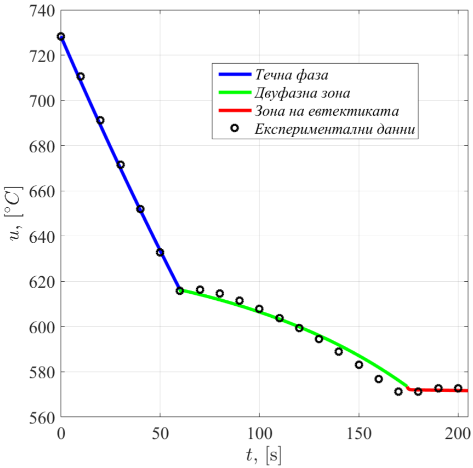


Фигура: Влияние на центровете на кристализация върху преохлаждането, алуминиева сплав



Фигура: Влияние на центровете на кристализация върху преохлаждането, сив чугун

Числени симулации



Фигура: Сравнение на резултатите от математическия модел с експериментални данни, проба от алуминиева сплав

Двумерен математически модел — основно уравнение и начално условие

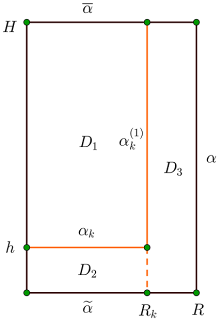
- Основно уравнение

$$c(u)\rho(u)\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\lambda(u)\frac{\partial u}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda(u)\frac{\partial u}{\partial z}\right),$$

$$r,\ z \in D = D_1 \cup D_2 \cup D_3,\ t \geq 0$$

- Начално условие

$$u(r, z, t_0) = u_0,\ r,\ z \in \overline{D}$$



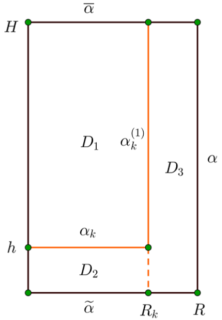
Двумерен математически модел — гранични условия в направление r

- Условие за симетрия

$$\lim_{r\to 0} r\lambda(u)\frac{\partial u}{\partial r} = 0,\ z \in \overline{D},\ t \geq 0$$

- Дясно гранично условие

$$\lambda(u)\frac{\partial u}{\partial r}\bigg|_{r=R} = -\alpha\left(u\big|_{r=R} - u_{\text{ок. ср.}}\right),\ z \in \overline{D},\ t \geq 0$$



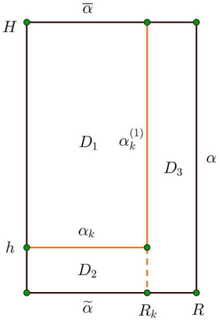
Двумерен математически модел — гранични условия в направление z

■ Гранично условие при $z = 0$

$$\lambda(u)\frac{\partial u}{\partial z}\bigg|_{z=0} = \widetilde{\alpha}\left(u\big|_{z=0} - u_{\text{ок. ср.}}\right), \; r \in \overline{D}, \; t \geq 0$$

■ Гранично условие при $z = H$

$$\lambda(u)\frac{\partial u}{\partial z}\bigg|_{z=H} = -\overline{\alpha}\left(u\big|_{z=H} - u_{\text{ок. ср.}}\right), \; r \in \overline{D}, \; t \geq 0$$



Двумерен математически модел — условия за контакт

■ Контактно условие върху правата $r = R_k$

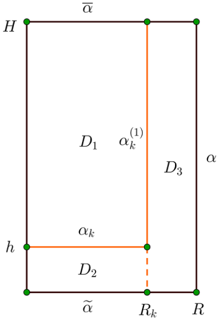
$$\lambda(u)\frac{\partial u}{\partial r}\bigg|_{r=R_k^-} = \lambda(u)\frac{\partial u}{\partial r}\bigg|_{r=R_k^+} =$$

$$\alpha_k^{(1)}\left(u\big|_{r=R_k^+} - u\big|_{r=R_k^-}\right),\ z \in \overline{D},\ t \geq 0$$

■ Контактно условие върху правата $z = h$

$$\lambda(u)\frac{\partial u}{\partial z}\bigg|_{z=h^-} = \lambda(u)\frac{\partial u}{\partial z}\bigg|_{r=h^+} =$$

$$\alpha_k\left(u\big|_{z=h^+} - u\big|_{z=h^-}\right),\ r \in \overline{D},\ t \geq 0,\ \alpha_k = 10^6$$



Физични параметри на математическия модел

- Топлофизични характеристики

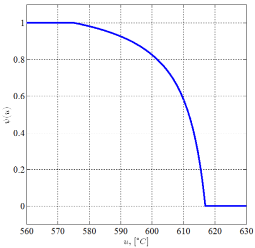
$$c,\ \rho,\ \lambda = \begin{cases} c_1(u),\ \rho_1,\ \lambda_1, & (r;\ z) \in \overline{D}_1, \\ c_2,\ \rho_2,\ \lambda_2, & (r;\ z) \in \overline{D}_2, \\ c_3,\ \rho_3,\ \lambda_3, & (r;\ z) \in \overline{D}_3, \end{cases}$$

$$c_1(u) = \begin{cases} c_L, & u > u_L, \\ c_S - \kappa \dfrac{\mathrm{d}\,\psi}{\mathrm{d}\,u}, & u_S \le u \le u_L, \\ c_S, & u < u_S \end{cases}$$

- Топлина на кристализация κ
- Коефициенти на топлообмен $\alpha,\ \widetilde{\alpha},\ \overline{\alpha},\ \alpha_k,\ \alpha_k^{(1)}$

- Относителен дял на твърдата фаза $\psi(u)$

$$\psi(u) = \begin{cases} 0, & u > u_L, \\ \dfrac{-0.0014u + 0.8420}{-0.0012u + 0.7304}, & u_S \leq u \leq u_L, \\ 1, & u < u_S \end{cases}$$



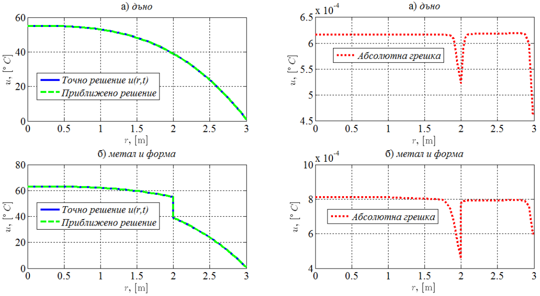
Диференчна схема — структура и особености

- Избор на локално едномерна диференчна схема — устойчивост, сходимост, ред на апроксимация
- Трудности в изчислителния процес
- Коректност на схемата — сравнение с едномерни тестови примери

Диференчна схема — сравнение с тестови примери

■ Конструиране на тестов пример, едномерен в направление r — сравнение, точност

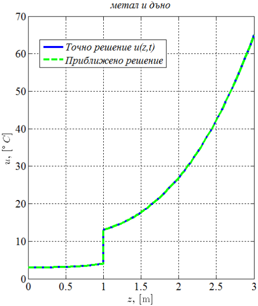
$$u(r,t) = \begin{cases} -t^2 - r^3 + 64, & r \in \overline{D}_1, \\ -t^2 - 2r^3 + 56, & r \in \overline{D}_2 \end{cases} \text{(тф. х. } D_2 \equiv \text{тф. х. } D_3\text{)}$$

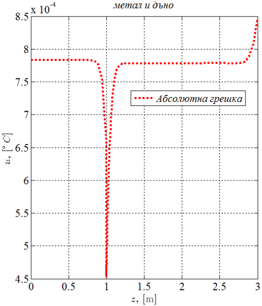


Диференчна схема — сравнение с тестови примери

■ Конструиране на тестов пример, едномерен в направление z — сравнение, точност

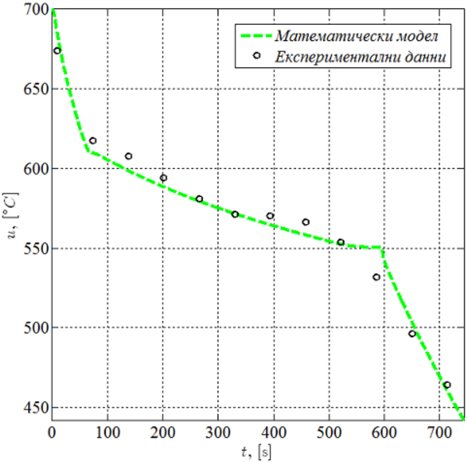
$$u(z,t) = \begin{cases} -10t^2 - 2z^3 + 40z + 30, & z \in \overline{D}_1, \\ 30t^2 + z^2 + 10, & z \in \overline{D}_2 \end{cases}$$





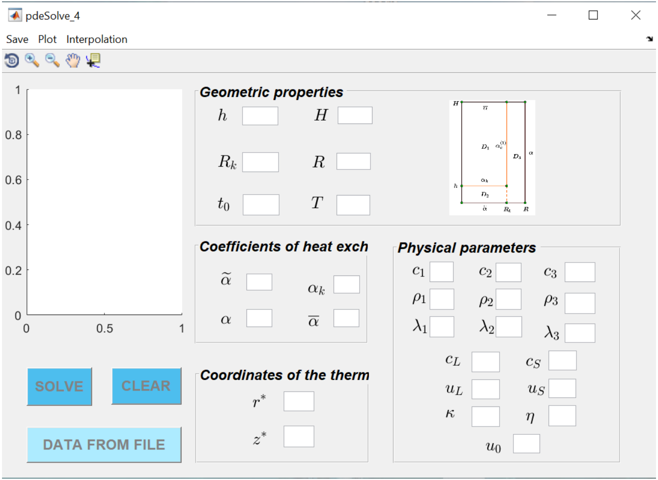
Числени симулации

- Метална сплав *AlSi7Mg* — легирана със 7 wt% *Si*
- Сравнение с данни от реален експеримент — $\varepsilon < 4\%$



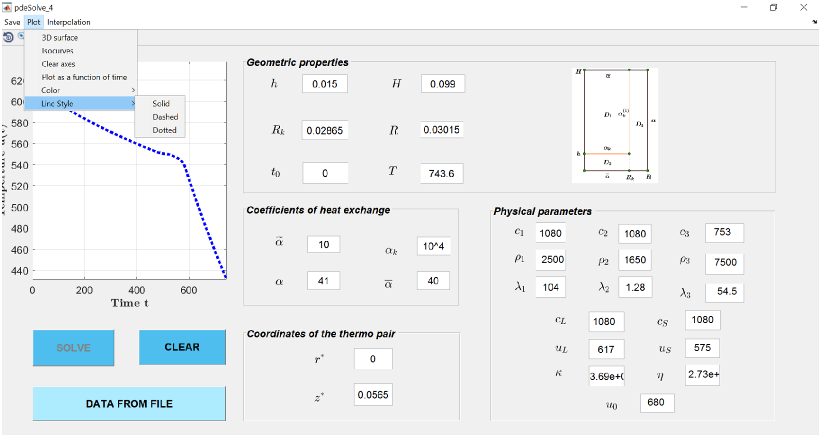
Графичен потребителски интерфейс в MATLAB R2014A

- Основни концепции. Общ изглед на приложението



Графичен потребителски интерфейс в MATLAB R2014A

- Менюта и функционалности на приложението



Изводи от работата по дисертацията. Приноси на дисертационния труд

- Изводи от проведеното изследване
- Приноси на дисертационния труд
  - Разработен е компютърен алгоритъм за приближено решаване на едномерния математически модел.
  - Разработен е компютърен алгоритъм за приближено решаване на двумерния математически модел.
  - Реализираните компютърни програми позволяват да бъдат определени с добра точност някои от основните величини, характеризиращи процеса на затвърдяване: температурното поле, изотермите $u = u_S$, темпът на кристализация и др.

Приноси на дисертационния труд

- Имплементиран е собствен графичен потребителски интерфейс PDE Solve в средата на MATLAB R2014a, с помощта на който задачата за кристализация на сплави, отляти в цилиндрични форми, може да се решава в диалогов решим.
- Разработеният софтуерен продукт може да се прилага за обучение на специалисти в областта на компютърното симулиране.
- Потребителският интерфейс ще бъде опорна точка при съставяне на база от данни с резултатите за различни видове сплави. Информацията, съхранявана в базата, ще е от полза при провеждане на лабораторни практикуми, реални експерименти, изготвяне на статии и научни трудове и др.

Благодарности

Настоящата докторска работа е подкрепена от:

1. Проект №ДН 07/20/15.12.2016 на тема „Теоретично и експериментално изследване на кристализацията на метална сплав с въведени в нея наночастици“, финансиран от фонд „Научни изследвания“.
2. Bulgarian National Science Fund under Bilateral Project DNTS/Russia 02/12 'Development and investigation of finite difference schemes of higher order of accuracy for solving applied problems of fluid and gas mechanics and ecology', 2018.

БЛАГОДАРЯ ВИ ЗА ВНИМАНИЕТО!