

КОМПЛЕКСНАЯ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА ИНДУКЦИОННОЙ ЗАКАЛКИ

Кундас С. П., Иванов Д. Г., Лемзиков А. В.

*Международный государственный экологический университет им. А.Д. Сахарова
Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
Минск, Беларусь*

Введение

Целью индукционной закалки является увеличение твердости поверхностных слоев детали посредством быстрого нагрева и последующего охлаждения. Желаемый эффект упрочнения достигается с помощью изменения микроструктуры стали. Однако, несмотря на то, что этот процесс успешно применяется в промышленности на протяжении многих лет, актуальной по-прежнему остается задача оптимального его управления и обеспечения необходимого качества термообрабатываемых деталей. Это обстоятельство связано с повышением требований к надежности и материалоемкости продукции, что, в свою очередь, вызывает увеличение сложности геометрии, уменьшение толщины конструктивных элементов деталей.

Перспективным инструментом решения названных задач является применение методов компьютерного моделирования для оптимизации технологических режимов закалки, а также их объединение с системами управления технологическим оборудованием [1].

С точки зрения физики индукционной термообработки, этот технологический процесс весьма сложен и включает в себя целый ряд явлений, который находится в тесной взаимосвязи друг с другом (рис. 1).

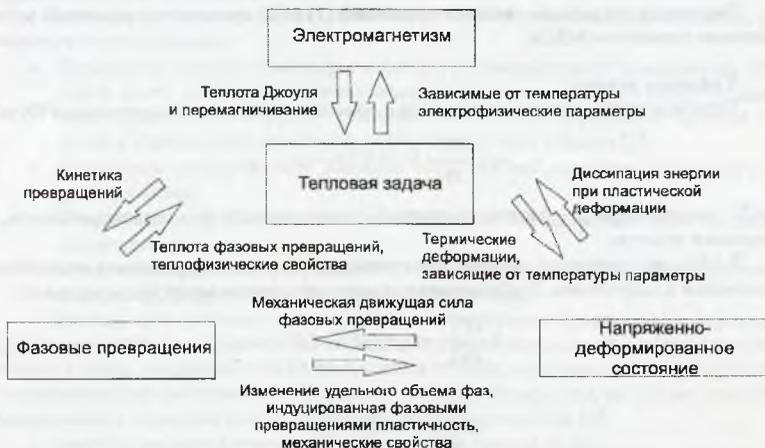


Рис. 1. Наиболее существенные физические явления, имеющие место при индукционной термообработке

Для обеспечения необходимой точности результатов моделирования рассматриваемого процесса его математическое описание должно охватывать все значимые физические явления, которые оказывают как прямое, так и косвенное влияние на выходные свойства деталей.

Очевидно, что математическое описание индукционной закалки должно включать описание электромагнитных и тепловых явлений, а также модель фазовых превращений. Стоит также понимать, что на эксплуатационные свойства детали большое влияние оказывает напряженно-деформированное состояние (остаточные напряжения) вследствие суммирования этих напряжений с внешней нагрузкой. Более того, внутренние напряжения являются дополнительной движущей силой для фазовых превращений (рис. 1).

Электромагнитные явления

Модель электромагнитных явлений в системе «индуктор–среда–деталь» разработана на основе уравнений Максвелла, которые можно записать в виде следующей системы уравнений (без учета токов смещения, что справедливо для частот, на которых осуществляется индукционный нагрев) [2]:

$$j\omega\sigma\mathbf{A} + \operatorname{rot}\left(\frac{1}{\mu}\operatorname{rot}\mathbf{A}\right) + \sigma \operatorname{grad}V = 0, \quad (1)$$

$$\operatorname{div}(j\omega\sigma\mathbf{A} + \sigma \operatorname{grad}V) = 0. \quad (2)$$

где \mathbf{A} – векторный магнитный потенциал, V – скалярный потенциал электрического поля, μ – магнитная проницаемость материала, σ – удельная электрическая проводимость материала, j – мнимая единица, ω – круговая частота тока в индукторе.

В такой постановке задачи имеется возможность расчета как источников теплоты в детали, так и распределения плотности тока, падения напряжений в индукторе, а также коэффициента полезного действия. При этом исходными электрическими параметрами являются только амплитудное напряжение, подаваемое на индуктор, и его частота.

Численная реализация системы уравнений (1) и (2) проведена с помощью метода конечных элементов (МКЭ).

Тепловая задача

Тепловое поле в детали описывается с помощью классического уравнения Фурье:

$$-\rho C \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\lambda \nabla T) = -q, \quad (3)$$

где T – температура, ρ – плотность стали, C – теплоемкость, λ – теплопроводность, q – источники теплоты.

В качестве граничных условий для уравнения (3) приняты уравнения теплообмена конвекцией и излучением. В общепринятом виде эти условия могут быть записаны:

$$-\lambda \left. \frac{dT}{dn} \right|_{\Gamma_r} = \varepsilon_r \sigma_{\text{св}} (T^4 - T_{\text{e}}^4) \quad (4)$$

$$-\lambda \left. \frac{dT}{dn} \right|_{\Gamma_r} = h(T - T_{\infty}) \quad (5)$$

где n – нормаль к граничной плоскости, ϵ_e – степень черноты тела, σ_{SB} – постоянная Стефана-Больцмана, h – коэффициент конвекции, T_∞ – температура окружающей среды.

В общем случае все коэффициенты уравнения (3) зависят от температуры. Это обстоятельство приводит к нелинейности и, вследствие этого, к необходимости использования итерационного алгоритма решения тепловой задачи. Более того, эти коэффициенты зависят от текущего фазового состава детали в каждой его точке, что определяет необходимость использования температурных зависимостей теплофизических свойств фаз в сочетании с правилом аддитивности, которое позволяет вычислять усредненное значение свойств детали. Экспериментальные данные, описывающие теплофизические свойства каждой из фаз, практически отсутствуют в доступной справочной литературе, однако в настоящее время для этих целей разработано специализированное программное обеспечение, например JMatPro [3], и эти характеристики можно получить расчетным путем.

Коэффициент конвекции в уравнении (5) существенно зависит от температуры, что является следствием сложной физической природы явления конвекции. Более того, этот коэффициент зависит и от геометрии детали. Поэтому на практике при расчетах целесообразно использовать интегрально усредненный коэффициент, который может быть вычислен исходя из данных справочной литературы или специально поставленных для этой цели экспериментов с последующим решением обратной тепловой задачи.

Фазовые превращения

Фазовые превращения можно аналитически или численно описать с помощью термокинетических (ТКД) (рис. 2, а) и изотермических диаграмм ИТД (рис. 2, б), которые строятся на основе экспериментальных исследований.

Большинство вычислительных алгоритмов, применяемых для этих целей, построены на основе интеграла Шейля (переход от изотермических к неизотермическим условиям) и уравнений параметрического вида (уравнения Авраамии) [4]. В последнем случае предпочтительно построение модели на основе ИТД.

Однако существует целый ряд проблем, который ограничивает возможность применения такого подхода.

- Недостаток данных о растворимости фаз в зависимости от температуры. Вследствие этого, необходимо использование термодинамического аппарата для расчета превращений феррита и перлита. Более того, существует большая сложность в определении максимально возможной доли бейнита [5].
- Недостаток информации о влиянии особенностей микроструктуры (например, размера зерна).
- Отсутствие информации о влиянии механической движущей силы на фазовые превращения.
- Диаграммы фазовых превращений не отражают одновременный рост долей фаз (например, феррита и перлита, бейнита и перлита).

Поэтому, для решения этих проблем целесообразно применение специализированных моделей, позволяющей вычислять диаграммы охлаждения и нагрева для производной стали, основываясь на ее химическом составе, особенностях микроструктуры и напряженно-деформированном состоянии, которые базируются на основе теорий термодинамики и кинетики и могут применяться для вычисления [6]:

- инкубационного времени зарождения зерен каждой из фаз,
- скорости зарождения и типа геометрии зерен,
- скорости и механизма их роста;
- характерных точек фазовых превращений ($Ac3$, $Ac1$, Ms).

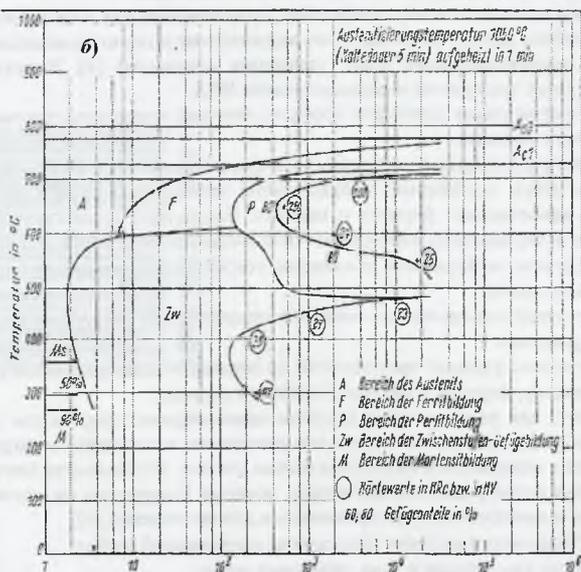
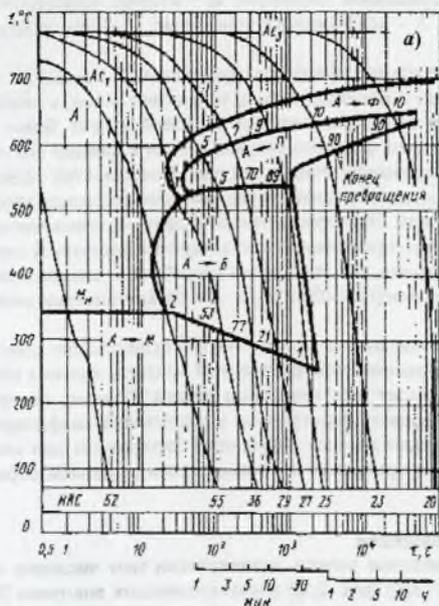


Рис. 2. Примеры характерных диаграмм фазовых превращений стали.
а - ТКД охлаждения; б - ИТД охлаждения

Вычисления с помощью указанных выше моделей проводятся на основе термодинамических данных для сплавов с различным химическим составом с использованием CALPHAD метода [7]. Существует целый ряд вычислительных программ, которые реализуют этот метод (MTEGDATA, ThermoCalc и др.).

С другой стороны, с целью обобщения экспериментальных данных для дальнейшего предсказания характерных точек фазовых превращений ($Ac3$, $Ac1$, Ms), возможно использование и регрессионного анализа [8].

Применение нейронных сетей для определения параметров фазовых превращений

Как упоминалось выше, учет фазовых превращений при моделировании процесса закалки стальных деталей можно осуществлять на основе термокинетических диаграмм. В этом случае необходимо иметь информацию о температуре начала и конца аустенитного превращения (нагрев) и температуре начала мартенситного превращения (охлаждение).

Вычисление указанных параметров может быть проведено с использованием нейронных сетей. При этом в качестве входных данных выступает химический состав стали и скорость ее нагрева [9].

Нейросетевой подход имеет как преимущества, так и недостатки. Прежде всего, стоит отметить, что часто проблемой является отсутствие необходимого количества экспериментальных данных для обучения нейронной сети, что может привести к увеличению погрешности последующего прогнозирования. Однако решение этой проблемы позволяет, применяя нейросети, создать работающую «модель» в тех случаях, для которых не существует или сложна разработка точных физических моделей.

Кроме того, следует помнить, что к экспериментальным данным предъявляются требования равномерно и случайным образом покрывать все диапазоны изменений входных переменных. Если это условие не выполняется, то возможно возникновение неопределенностей в областях, где на этапе обучения существовала недостаточность, или наоборот, избыточность данных. Соблюдение указанных требований позволяет создать, обучить и использовать нейронные сети для определения критических точек фазовых превращений.

Для достижения лучшей точности последующей работы нейросетей целесообразно разделение решаемых задач, в частности создание трех отдельных нейронных сетей, которые позволяют вычислять значения точек $Ac1$, $Ac3$ и Ms , соответственно. Такое разделение позволит избежать при обучении взаимного влияния различных данных друг на друга.

Ошибки прогнозирования в значительной степени зависят также и от структуры нейронной сети. Выбор структуры чаще всего представляет собой последовательное обучение и верификацию сетей с различной структурой и последующим определением наиболее оптимальной.

В результате проведенных исследований для решения рассматриваемой задачи были выбраны следующие структуры сетей: двухслойная сеть с 5 нейронами в первом слое и двумя – во втором – для прогнозирования точки $Ac1$; однослойная сеть с 7 нейронами – для точки $Ac3$ и двухслойная сеть с 5 и 9 нейронами в слоях, соответственно – для точки Ms .

Созданные нейронные сети верифицировались с использованием специальных баз данных, при этом для уменьшения погрешности соблюдалось условие различия набора данных для верификации и обучения. С этой целью экспериментальные данные были предварительно разделены на обучающие и тестовые наборы. В тестовый набор вошло примерно 10% экспериментальных значений.

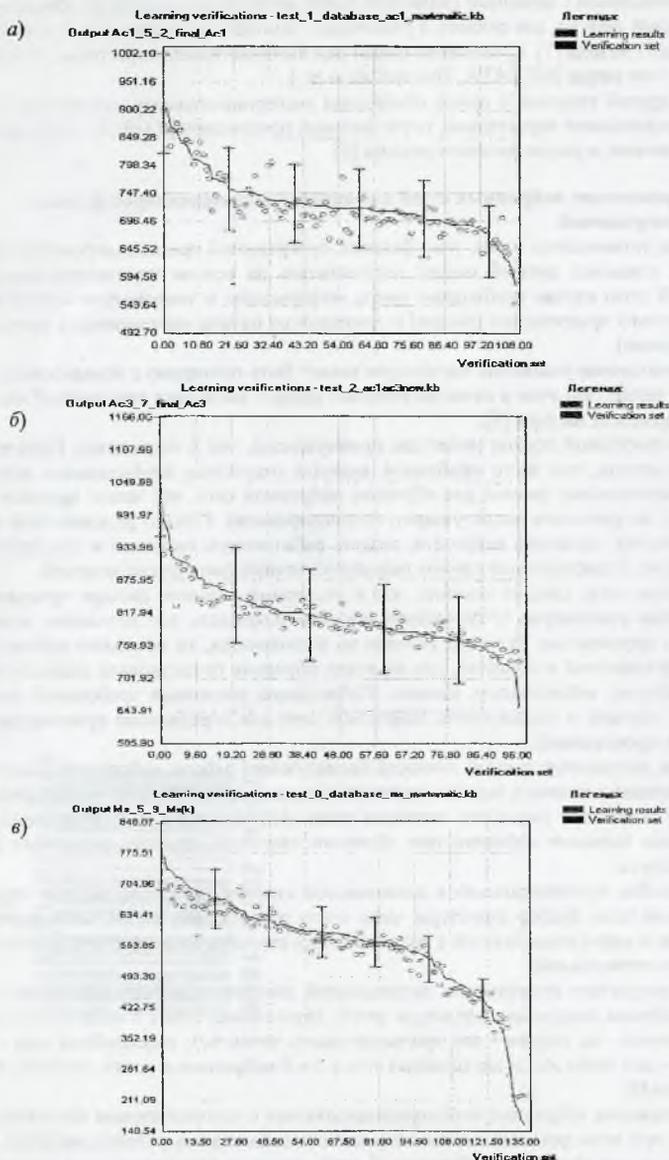


Рис. 3. Результаты верификации нейронных сетей.

a – для прогнозирования точки *Ac1*; *б* – для прогнозирования точки *Ac3*;

в – для прогнозирования точки *Ms*

Это позволило оценить ошибку прогнозирования обученной сети на ранее неизвестных для нее входных значениях. Результаты верификации сетей показаны на рис. 3, а для точки Ас1, рис. 3, б для Ас3 и рис 3, в для Мs.

Как видно из приведенных результатов прогнозирования, их погрешность в основном не превышает 10%. Средняя ошибка составляет 5–6% для каждой нейросети. Следовательно, разработанные и обученные нейронные сети можно использовать для определения характерных точек фазовых превращений в сталях при решении различных теплофизических задач, в том числе для моделирования процесса индукционной закалки.

Напряженно-деформированное состояние

На рис. 4 приведена классификация напряжений, основанная на масштабе непрерывности:

- напряжения I рода изменяются непрерывно на протяжении макромасштабов детали (σ_{Macro});
- напряжения II рода изменяются непрерывно в масштабе размера зерна (σ_{II});
- напряжения III рода – атомный уровень (σ_{III}).

Разработанная модель направлена на анализ напряжений I рода, так как они оказывают непосредственное влияние на эксплуатационные характеристики детали. При этом учитываются три основные составляющие деформаций в процессе термообработки: термические напряжения; различие удельного объема и температурных коэффициентов расширения фаз; индуцированная фазовыми превращениями пластичность.

Таким образом, задача решается в пластической постановке с использованием критерия фон Мизеса для описания перехода в область пластического течения [10]. Описание упрочнения построено на основе теории изотропного упрочнения.

Численное решение приведенных выше задач осуществлено на основе J_2 -модели [10], не требующей разностной аппроксимации частных производных в тангенциальной матрице и обеспечивающей квадратичную сходимость итерационного алгоритма. Это обстоятельство уменьшает вычислительную сложность компьютерной модели.

Заключение

Предложена комплексная модель процесса индукционной закалки стальных деталей, обеспечивающая учет всех основных физических процессов, протекающих при термообработке, т.е. комплексное решение электромагнитной, тепловой и деформационной задач с учетом фазовых превращений, пластических деформаций и упрочнения. Для описания фазовых превращений разработана модель с применением нейронных сетей. В настоящее время осуществлена компьютерная реализация комплексной модели и проводится ее экспериментальная верификация, на основе которой возможна доработка и уточнение отдельных моделей и алгоритмов.

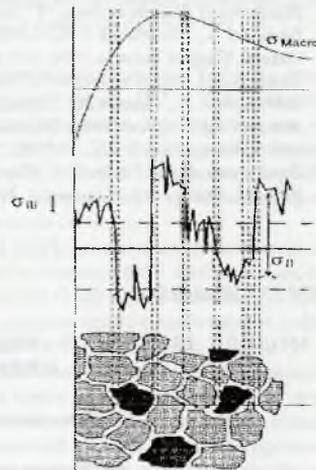


Рис. 4. Классификация напряжений

Список литературы

1. Кундас С.П. Компьютерное моделирование процессов термической обработки сталей. Мн.: Бестпринт, 2005. 313 с.
2. Кундас С.П., Гущелюк И.А., Иванов Д.Г., и др. Математическое моделирование индукционной закалки с применением метода конечных элементов // Материалы Междунар. конф. «Актуальные проблемы теории и практики индукционного нагрева». СПб.: ГЭТУ «ЛЭТИ» 2005. с. 292-299.
3. Saunders N., Li X., Miodownik A., Schille J.-P. Materials Design Approaches and Experiences. (J.-C. Z. al., Ed.) Warrendale: PA:TMS, 2001. p. 85-96
4. Kurek K., Dolega D. Modeling of Induction Hardening. // International Scientific Colloquium "Modeling for Electromagnetic Processing". Hannover, 2003. pp. 125-130
5. Reti T., Fried Z., Felde I. Computer simulation of steel quenching process using a multi-phase transformation model. Computational Materials Science. 2001. 26:1-278.
6. Bhadeshia H. Bainite in steels (2nd Edition). London: IOM Communications Ltd. 2001. 454 p.
7. Saunders N., Miodownik A. CALPHAD - Calculation of Phase Diagrams (Vol. 1). (R. Cahn, Ed.) Oxford: Elsevier Science. 1991. 132 p.
8. Bhadeshia H. Neural Networks in Materials Science. ISIJ International, 39, 1999, pp. 966-979.
9. Лемзиков А.В., Иванов Д.Г., Кундас С.П., Куцьюло В.В. Применение нейросетей для определения характерных точек фазовых превращений в сталях с различным химическим составом // Информатика. Мн.: №1(13), 2007 – С. 89-97.
10. Zienkiewicz O.C., Taylor R.L. The Finite Element Method. Volume 2: Solid Mechanics (5th Edition). Butterworth-Heinemann. 2000. 476 p.

УДК 539.383:548.0

МОДЕЛИ ДВОЙНИКОВАНИЯ И ЗАЛЕЧИВАНИЯ ПОР ПРИ ПОЛУЧЕНИИ ОПТИЧЕСКИХ КЕРАМИК

Акчурин М. Ш., Закалюкин Р. М., Каминский А. А., Харченко Ю. В.

*Институт кристаллографии РАН, Москва,
Akchurin@ns.crys.ras.ru*

В настоящее время высокопрозрачные оптические керамики привлекают особое внимание исследователей. Наиболее качественные из них получают по VSN технологии (Vacuum sintering and nanotechnology) модифицированными методами химического осаждения и последующего вакуумного спекания [1]. Эти керамики практически не отличаются по плотности и прозрачности от соответствующих монокристаллов и заметно превосходят их по механическим характеристикам [2]. Среди наиболее ярких достижений следует отметить создание высокопрозрачных VSN-керамик на основе $Y_3Al_5O_{12}$ и RE_2O_3 ($RE=Y, Sc, Gd, Lu$) с генерирующими стимулированное излучение ионами Ln^{3+} [3]. Дешевая и практически не имеющая размерных ограничений лазерная керамика $Y_3Al_5O_{12} : Nd^{3+}$ может составить определенную конкуренцию самым используемым в квантовой электронике и лазерной инженерии монокристаллам $Y_3Al_5O_{12} : Nd^{3+}$, а лазерная $RE_2O_3 : Ln^{3+}$ – нанокристаллическая керамика вообще вне конкуренции, т.к. крупных монокристаллов RE_2O_3 высокого оптического качества известными ростовыми методами получить не удается.

Несмотря на достигнутый прогресс в использовании, механизмы образования высокопрозрачных керамик остаются до конца не выясненными. В технологии получения