УДК 519.6:004.032.26:26:669.017

Ю.Г. Кривонос, В.Г. Писаренко, И.А. Варава

Институт кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины, г. Киев, Украина jvpisarenko@gmail.com

Моделирование интеллектуального управления кристаллизацией металлических расплавов

Предложены новые принципы управления кристаллизацией металлических расплавов для повышения его конкурентной способности на мировом рынке с применением варианта метода Монте-Карло, адаптированного к задаче эволюции во времени исходного перегретого жидкого расплава с интенсивными конвекционными потоками. Описан ряд вычислительных экспериментов авторов.

Введение

К числу актуальных проблем управления многостадийными технологическими процессами как сложными распределенными системами относится проблема управления кристаллизацией металлических расплавов [1-3]. Актуальность этой проблемы обусловлена важностью повышения эксплуатационных свойств получаемого металла для повышения его конкурентной способности на мировых рынках и недостаточной предсказуемостью специальных технологических процессов, использующих управляющие физико-химические воздействия на кристаллизирующийся расплав с целью получения металлических сплавов с улучшенными эксплуатационными свойствами [3], [4]. К числу таких управляющих воздействий относятся «дозированные» по длительности, частоте и амплитуде акустические, ультразвуковые вибрации, электромагнитное перемешивание различных типов, введение в стальной расплав азот-ванадиевых легирующих добавок и др. [3]. Несмотря на определенный прогресс в развитии подобных эмпирических подходов к управлению кристаллизацией металлических расплавов определенных типов, до сих пор не создана достаточно надежная теоретическая база для предсказания оптимальных форм подобного воздействия, обеспечивающих получение устойчивого и значительного улучшения свойств изделий.

По мнению авторов, создание подобной теоретической базы требует построения многоуровневой информационной и математической моделей явлений кристаллизации, учитывающих процессы энергомассопереноса в расплаве как на макроуровне (гидродинамика вязкой жидкости), так и на наноуровне (законы квантовой физики и химии, статистической физики и механики) [5-10].

Один из подходов, использующих достаточно строгие методы статистической физики, ведет к необходимости строить решения (начально-краевой задачи) для счетной цепочки зацепляющихся нелинейных интегро-дифференциальных уравнений с частными производными типа уравнений Больцмана [5] или подобной системы уравнений Боголюбова-Борна-Грина-Кирквуда-Ивона (уравнения ББГКИ) [8], которая для случая популяции из N взаимодействующих атомов одного сорта (т.е. взаимодействие движущихся и сталкивающихся друг с другом атомов жидкости типа расплава металла или газа) прини-

мает вид следующей системы интегро-дифференциальных уравнений для так называемых s-частичных функций распределения $f_s(t,\Omega_1,...,:\Omega_s,\Omega_j)$:

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} + \sum_{i=1}^s v_i \, \partial f_s / \partial r_i + \sum_{i=1}^s F_i^b \, \partial f_s / \partial p_i + \sum_{i,j=1}^s F_{ij} \, \partial f_s / \partial p_i =
= \sum_{i=1}^s (s - N) \partial / \partial p_i \int F_{i,s+1} f_{s+1} d\Omega_{s+1}.$$
(1)

При этом каждая s-частичная функция распределения f_s $(t,\Omega_1,...,\Omega_s,\Omega_j)$ зависит от значений времени t и от значений координат точки 6(s+1)-мерного фазового пространства, образованного пространственными координатами и скоростями $(x_l,v_l)\equiv\Omega_l,...,(x_s,v_s)\equiv \Omega_s$, $(x_j,v_j)\equiv\Omega_j$, и при этом каждая пара (x_i,v_i) понимается как значение трех координат пространственных x_i и трех координат скорости v_i для i-го атома. В правой части (1) F_{ij} – известный функционал, зависящий от функций распределения $f_{l,...,}$ f_s . Полагая последовательно s=1,2,...,N, получим цепочку уравнений, или иерархию ББГКИ.

Для системы уравнений (1) пока удалось получить лишь ряд модельных решений, относящихся, прежде всего, к разреженным газам. Вместе с тем для получения «практически полезных» решений уравнений кинетики достаточно большой популяции взаимодействующих атомов (через дальнодействующие силы на больших расстояниях и короткодействующие силы при столкновениях) последнее время все более популярными являются упрощенные математические модели этих явлений и соответствующие им алгоритмы расчета, являющиеся разновидностью метода Монте-Карло.

При этом обретает бо́льшую ясность необходимость учитывать целую иерархию масштабов времени и вероятностей перехода между промежуточными стадиями достаточно многочисленной группы основных процессов тепломассопереноса (на мезо-, микро- и наноуровнях), включая уровень отдельных атомов и их связанных групп в форме формирующихся кластеров атомов и молекул, которые затем могут со временем распадаться и переконфигурироваться в новые кластеры) [11].

Концепция существования трех главных стадий всего процесса кристаллизации

Всю совокупность этих процессов применительно к кристаллизации расплава, повидимому, целесообразно разделять условно на три главных стадии всего процесса [7]: стадия процессов переноса и предкристаллизации расплава, стадия кристаллизации «в основном» и стадия посткристаллизации (в последнюю следует, в частности, включить диффузию атомов и дислокаций в несовершенном кристалле, полиморфные превращения).

С учетом сказанного, модели и алгоритмы расчета на каждой из трех основных стадий должны быть «свои индивидуальные», адекватные природе отдельных стадий движения к относительному равновесию группы атомов и молекул. Причем масштабы пространства и времени основных процессов кинетики атомов и молекул образуют некоторую иерархию, на что обращали особое внимание Н.Н. Боголюбов [5] и В.В. Струминский [6]. Понимание иерархичности по пространству и времени трехстадийного протекания процессов кристаллизации металла открывает возможности «вмешиваться» в протекание этих процессов путем «оптимальных» управляющих воздействий на соответствующих «оптимальных» стадиях этих процессов.

На таком пути использование разновидности метода Монте-Карло позволило авторам работ [12], [13] выполнить моделирование процессов так называемого эпитаксиального напыления атомных слоев на кристаллическую подложку с заданной симметрией

решетки. По сути, это осаждение потока высокотемпературного газа атомов на поверхность твердого тела. При этом была получена компьютерная модельная картина образования трехмерного поверхностного слоя на 10^7 атомных мест на поверхности кристаллического кремния. А в модели «решеточного газа» авторами работы [14] смоделирована методом Монте-Карло спонтанная кристаллизация однокомпонентных и бинарных расплавов металла и получена компьютерная модель визуализации процесса образования кристаллических кластеров как первичных зародышей кристаллизации из нескольких атомов на поверхности кристалла. Из анализа литературы авторы пришли к выводу, что расчетам кристаллизации жидкого расплава посвящено весьма ограниченное число работ.

Для построения многоуровневой информационной модели управляемой кристаллизации расплава металла с применением варианта метода Монте-Карло, адаптированного к задаче эволюции во времени исходного перегретого жидкого расплава с интенсивными конвекционными потоками через стадию Semisolid к стадии постепенного охлаждения, образования первых кристаллических кластеров атомов-зародышей кристаллизации и далее к стадии Solid всего объема необходимо, в частности, корректно учесть следующие факты:

- 1) реальный расплав металла, получаемый металлургами (например, в струе расплава из промковша), содержит, помимо декларированных ГОСТами «штатных» металлов, также распределенные весьма не равномерно по пространству примеси иных элементов, их соединений как между собой, так и со «штатными» металлами. Это означает, что такой расплав следует рассматривать как некоторую многофазную внутренне нестационарную гетеросреду с межфазовыми переходами;
- 2) до наступления кристаллизации основной массы металла энергия атомов и молекул расплава распределена не только в виде тепловой энергии их броуновского движения, но и в форме кинетической энергии поступательного движения различных групп молекул и атомов, обусловленных потоками конвекционной природы и потоками микроскопических локальных струй, вызванных процессом «втекание свободной струи в бассейн» и процессом «турбулизация пограничной зоны» взаимодействия свободной струи с «покоящейся» жидкостью в бассейне;
- 3) кристаллизация в минимальном объеме (в том числе образование так называемых нанозародышей кристаллизации (ЗК), которые можно назвать первичными твердотельными кластерами) начинается не раньше, чем: во-первых, относительные скорости поступательного движения атомов будущего ЗК в некоторой локальной (движущейся с этим ЗК) системе отсчета не обнулятся и, во-вторых, скорости вращательного движения в этой локальной системе отсчета также не обнулятся с некоторой «необходимой» точностью.

Выбор пространства переменных конкретной имитационной модели

Предлагаемое в докладе алгоритмическое и программное обеспечение предусматривает возможность моделирования ряда процессов (но пока далеко не всех!) каждой из трех главных стадий процесса кристаллизации: процессов переноса и предкристаллизации расплава, процесса кристаллизации «в основном» и процесса посткристаллизации. Для каждой такой модели производится некоторый оптимальный выбор следующей комбинации входных или выходных параметров расчета:

- количество атомов «штатных» металлов N_i , i=1,2,...,q и количество атомов P_j , j=1,2,...,h «примесных» элементов каждого сорта;
- начальное распределение по пространству и по скоростям атомов «штатных» металлов и атомов «примесных» элементов;

- количество соударений всего множества «атомов» за время счета $t \in [0, t^*] \equiv \tau$,
- скорость изменения среднего значения температуры (равновесного квазимаксвелловского распределения скоростей популяции «атомов» каждого сорта);
- количество направлений Q учитываемых скоростей (это мера грубости аппроксимации необходимой статистической гомогенности всего множества актов столкновений);
- количество V градаций модуля векторов скоростей (до или после столкновения);
- количество W градаций вращательной скорости «атомов» (вращения по или против часовой стрелки);
- мера В достигнутой релаксации скорости (импульса) входящего инжектируемого пучка в результате многих столкновений с прочими «атомами» обеих популяций;
- количество Р используемых в программе процессоров на кластере СКИТ Института кибернетики НАН Украины.

Выбор критерия оптимизации в программном обеспечении конкретной имитационной модели

Критерий оптимизации в программном обеспечении может быть в виде максимизации некоторой функции в пространстве вышеуказанных семи параметров:

$$S = \sum_{i=1}^{k} R_i(\tau, N, Q, V, W, B, P),$$
 (2)

где k дробно-рациональных функций $R_i(T,N,Q,V,W,B,P)$ выбираются пользователем в зависимости от конкретной выбираемой реализации информационной модели предметной области и соответствующего программного обеспечения. В частности, функция (2) для задачи расчета эволюции поступательной и вращательной энергии популяции «атомов» расплава в условиях управляемого теплоотвода через внешнюю границу рабочей области (отток энергии за счет охлаждения) и выбор дробно-рациональной функции R(T,N,Q,V,W,B,P) будет отражать требование минимизации максимального пространственного градиента кинетической энергии популяции «атомов» во всей рабочей зоне.

Модель-1. В качестве примера рассмотрим «атомы» одного сорта (т.е. q=1, h=0), приводятся результаты некоторых проведенных численных экспериментов, посвященных изучению механизмов соударения атомов в 2D-приближении для «сферически симметричных атомов». Ширина каждого интервала скорости при построении гистограммы скоростей «атомов» выбиралась одинаковой. Начальная конфигурация моделируемой проблемы многих тел выбиралась в виде «равновесной» популяции «атомов». Это Популяция-1, их число выбиралось равным не менее 10^3 . И впрыскиваемой (инжектируемой) популяции «атомов». Это Популяция-2, их число на порядок меньше. Популяция-1 движется внутри замкнутого участка 2D-пространства (рабочая зона), сторона которого равна $100D_a$, где D_a — диаметр «атома». Начальное распределение скоростей атомов каждого сорта выбирается с помощью генератора случайных чисел для следующего распределения значения скоростей атомов популяции (распределение Максвелла):

$$\Phi(V) = N (m/2\pi)^{1/2} (kT)^{-3/2} \exp(-mV^2/2kT),$$
(3)

где T — абсолютная температура, k — постоянная Больцмана, m и V — масса и скорость атома, N — число атомов популяции.

Пучок «атомов» Популяции-2, инжектируемый через внешнюю границу рабочей зоны (рис. 1), выбирается монохроматичным (т.е. вектор скорости для каждого «атома» пучка одинаков), а модуль скорости каждого «атома» пучка выбирается равным $10\ V_{\rm д}$, где $V_{\rm g}$ – среднеквадратичная скорость распределения для Популяции-1.

238

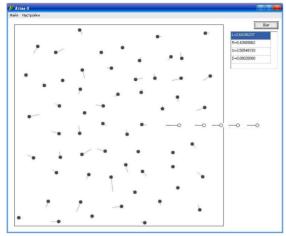


Рисунок 1 — Начальное распределение медленных (Популяция-1) и быстрых (Популяция-2) «атомов»

«Атомы» в пучке инжектируются в исходную «равновесную» Популяцию-1 вдоль одной оси. Расстояния между соседними «атомами» на оси пучка одинаковы к моменту попадания внутрь рабочей зоны. Область для моделирования представлена в виде квадрата. Каждый «атом» Популяции-1 и Популяции-2 моделируется кругом такого радиуса, что общая площадь, занимаемая собственно Популяцией-1, составляет 60 - 80% всей рабочей зоны. Площадь, занимаемая Популяшией-2. в 30 – 40 раз меньше. Одним из параметров моделирования служит отношение диаметра «атома» к длине стороны квадрата. Моделирование осуществлялось по алгоритму, являющемуся разновидностью метода

Монте-Карло. Результатом численного моделирования служит общее количество соударений между шарами на момент достижения динамического равновесия всей популяции «атомов», а также гистограмма распределения их скоростей (рис. 2 а, б).

В частности, для осуществления серии экспериментов разработана программа «АТОМ-1». При этом вращательные степени свободы не учитываются (т.е. W=0) и количество интервалов усреднения для получения гистограммы итогового распределения скоростей практически выбирается неограниченным. Графические приложения создавались для двух модификаций: исполняемые на персональном компьютере (Delphi 9.0) и в виде программы для суперкомпьютера СКИТ Института кибернетики НАН Украины (на языке C).

На вход программы поступает файл координат и скоростей Популяции-1 и Популяции-2 «атомов». В теле итерационного цикла осуществляется вычисление новых координат «атомов», а также происходит смена и перераспределение скоростей при их столкновениях с одной из стенок или друг с другом. Для заданного количества итераций вычисляется усредненная гистограмма и сохраняется в файл (рис. 2 а, б).

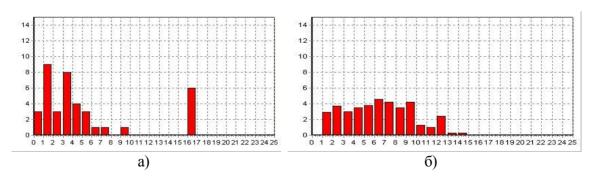


Рисунок 2 – Гистограммы распределения скоростей «атомов» в модели-1: а) начальная гистограмма скоростей; б) средняя по 10 последним гистограммам

Результатами моделирования служат общее количество соударений между шарами, время до достижения динамического равновесия, гистограмма распределения скоростей.

С помощью одного из приложений формируется начальное расположение «атомов» в прямоугольной области, и задаются векторы их скоростей. На старте «атомам» Попу-

ляции-1 задается скорость, которая вычисляется при помощи генератора случайных чисел. «Атомам» Популяции-2 скорости задаются пользователем в виде монохроматического тонкого пучка, инжектируемого в рабочую зону существования Популяции-1.

Другое приложение служит для обработки файлов гистограмм и позволяет их отображать и проводить их усреднение из числа файлов, выбранных пользователем. На вход программы поступает файл координат и скоростей «атомов». В теле итерационного цикла проводится вычисление новых координат шаров, а также происходит смена и перераспределение скоростей при столкновении шаров о стенку или друг с другом. Для заданного количества итераций вычисляется усредненная гистограмма и сохраняется в файл. На рис. 2 приведены гистограммы одного из экспериментов.

Модель-2. Проводилось моделирование взаимодействий между «атомами» специального типа, а именно, не обладающими сферической симметрией и способными соединяться попарно и в большие группы. На рис. 3 каждый такой «атом» символически обозначен треугольником с линией-биссектрисой одной из трех его вершин. Введено «правило скрепления» двух атомов в следующей форме: «Если два таких соседних сблизившихся «атома» вращаются (к концу некоторого расчетного цикла) с минимально возможной скоростью и при этом линии-биссектрисы этих двух атомов параллельны и направлены в одну и ту же сторону, то они считаются скрепленными в пару и сохраняют на всех последующих расчетных циклах это состояние». На «матрице скоростей» из рис. 3 каждый нескрепленный атом изображается темной точкой, а скрепленный – пробелом.

В данной модели рассматривается популяция «атомов», обладающих как поступательной, так и вращательной скоростями, распределенными в начальный момент случайным образом, близким к максвелловскому распределению. Процесс отражения «атома» приобретает несимметричный вид из-за потерь энергии при столкновении на охлаждаемой стенке (отметим, что в предыдущей модели-1 и нашей работе [6] охлаждение атомов на стенке не рассматривалось). В модели-2 возможно формирование устойчивых наборов «атомов», являющихся моделью зарождающегося кристалла, реализованной в программе «АТОМ-3».

Вычислительные эксперименты осуществляются с целью определения оптимального количества «атомов» инжектируемого пучка и оптимального времени формирования зародышей кристаллов в виде устойчивых симметричных кластеров, состоящих из взаимодействующих в состоянии равновесия «атомов». Предполагается, что программа «АТОМ-3» потребует для оптимальной работы не менее 20 процессоров суперкомпьютера СКИТ Института кибернетики НАН Украины.

В данной модели-2 расчет проводится двумя последовательными этапами: на первом этапе инжектируемый пучок быстрых атомов (имеющих поступательную скорость, отвечающую температуре $T_{\Pi y v \kappa a} > T_0$), внедряясь в исходную популяцию медленных атомов, в начальный момент имеющих максвелловское распределение скоростей со средней температурой $T = T_0$, за счет последовательности столкновений отдает свою энергию исходной популяции атомов. Возникшая смешанная популяция обладает новой температурой T_C , такой, что $T_0 < T_C < T_H$. Эти расчеты выполняются программой «ATOM-1». На втором этапе подпрограмма «ATOM-2» моделирует процесс релаксации поступательной энергии инжектируемого пучка быстрых атомов с учетом заданного закона снижения температуры стенки, что будет определять отвод энергии поступательного движения всей смешанной популяции. На выходе подпрограммы «ATOM-2» получаем модель кристаллизирующегося расплава, представленного смешанной популяцией в виде фазы Semisolid, предшествующей возникновению сначала отдельных изолированных кластеров взаимосвязанных атомов, а затем с помощью программы ATOM-3 и состояния закристаллизировавшегося твердого тела (фаза Solid).

Именно формирование возникновения отдельных кластеров связанных групп атомов в остывающем расплаве моделируется подпрограммой «ATOM-3», позволяющей «наблюдать» компьютерное видео процесса слипания первых «лидерских» групп соприкасающихся атомов в новообразованный кластер (в нем атомы, входящие в состав такого кластера, уже закреплены химическими связями и согласно выводам квантовой механики и экспериментальным наблюдениям, способны лишь колебаться в окрестности положения равновесия некоторой мини-решетки, образуя трехмерную высокосимметричную геометрическую конфигурацию, индивидуальную для каждого химического элемента, к которому принадлежит рассматриваемая популяция атомов).

Результаты расчета с помощью программы «ATOM-3» показаны на рис. 3, причем справа приведен текущий вид матрицы скоростей вращения популяции модельных несферически симметричных «атомов» (рабочая зона из точек и пробелов), где пробелы означают уже не вращающиеся, скрепленные в некоторую пару «атомы». В правом нижнем углу на гистограмме отображено количество вращающихся «атомов» в конце каждого из 38 расчетных шагов.

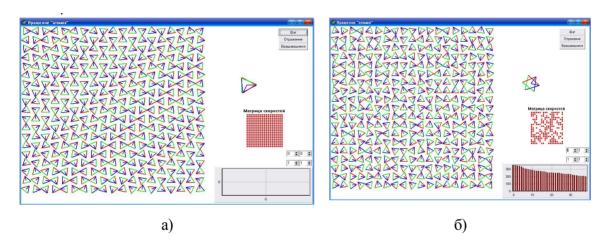


Рисунок 3 — Популяция из вращающихся атомов с изображением справа матрицы скоростей вращения модельной популяции несферически симметричных «атомов»: а) исходная популяция; б) популяция из вращающихся атомов в конце 38-го расчетного шага

Вычислительные эксперименты с помощью программ «ATOM-1», «ATOM-2» и «ATOM-3» проводятся с целью определения оптимального количества «атомов» инжектируемого пучка и оптимального времени формирования зародышей кристаллов в виде устойчивых симметричных кластеров, состоящих из взаимодействующих в состоянии равновесия «атомов».

Выводы

Таким образом, в статье дан обзор ряда работ по построению информационных, математических и алгоритмических моделей ключевых процессов кристаллизации из газовой фазы (молекулярно-лучевая эпитаксия) и из жидкой фазы. Предложены принципы построения многоуровневой информационной модели управляемой кристаллизации расплава металла с применением варианта метода Монте-Карло, адаптированного к задаче эволюции во времени исходного перегретого жидкого расплава с интенсивными конвекционными потоками. Описан ряд вычислительных экспери-

ментов авторов данной работы, направленных на определение оптимального количества «атомов» инжектируемого пучка и оптимального времени формирования кристалла в виде симметричного кластера, состоящего из взаимодействующих в состоянии равновесия «атомов». В работе отмечается, что подобные вычислительные эксперименты и получаемые при этом базы знаний весьма актуальны для прогресса в понимании перспективных принципов управления кристаллизацией расплавов металлов в целях получения изделий с улучшенными эксплуатационными характеристиками.

Литература

- 1. Ефимов В.А. Разливка и кристаллизация стали / Ефимов В.А. М.: Металлургия. 1976. 551 с.
- 2. Ефимов В.А. Физические методы воздействия на процессы затвердевания сплавов / В.А. Ефимов, А.С. Эльдарханов. М.: Металлургия, 1995. 272 с.
- 3. Бабаскин Ю.3. Конструкционные и специальные стали с нитридной фазой / Бабаскин Ю.3., Шипицын С.Я., Кирчу И.Ф. Киев : Наукова думка, 2005. 372 с.
- 4. Писаренко В.Г. Информационные модели кристаллизации стальных расплавов / Писаренко В.Г., Чайковский О.И., Бойко А.Г. М. : Астра, 2005. 84 с.
- 5. Боголюбов Н.Н. Избранные труды в трех томах / Боголюбов Н.Н. Том 2. Киев : Наукова думка, 1970. 522 с.
- 6. Струминский В.В. О решении цепочки уравнений кинетической теории газов / В.В. Струминский // ДАН СССР. 1966. Том 169. № 1. С. 58-61.
- 7. Неравновесные явления: Уравнение Больцмана : пер. с англ.; под ред. Дж.Л. Либовица, Е.У. Монтролла. 1986. 272 с.
- 8. Алексеев Б.В. Математическая кинетика реагирующих газов / Алексеев Б.В. М.: Наука, 1982. 424 с.
- 9. Писаренко В.Г. Некоторые вычислительные алгоритмы оптимизации режимов импульсного воздействия на охлаждаемый расплав металла / В.Г. Писаренко, И.А. Варава // Праці Міжнародного симпозіуму «Питання оптимізації обчислень (ПОО-XXXIII)». Київ. 2007. С. 238-239.
- 10. Писаренко В.Г. Моделирование субмолекулярных кластеров в гетерожидкостях / Писаренко В.Г. М. : Aстра, 2008. 104 с.
- 11. Кривонос Ю.Г. Точные решения уравнений турбулентной диффузии в задачах управления кристаллизацией металла / Ю.Г. Кривонос, В.Г. Писаренко // Искусственный интеллект. − 2007. − № 3. − С. 469-475.
- 12. Саркисов Г.Н. Структурные модели воды / Г.Н. Саркисов // Успехи физических наук. 2006. Том 176. № 8. С. 833-845.
- 13. Зверев А.В. Моделирование процессов эпитаксии, сублимации и отжига в трехмерном приповерхностном слое кремния / А.В. Зверев, И.Г. Неизвестный, Н.Л. Шварц, З.Ш. Яновицкая // Физика и техника полупроводников. 2001. Т. 35. Вып. 9. С. 1067-1074.
- 14. Овруцкий А.М. Моделирование спонтанной кристаллизации металлов / А.М. Овруцкий, М.С. Расшулкина, А.А. Рожко // Металлофизика и новейшие технологии. − 2006. − Т. 28, № 3. − С. 281-293.

Ю.Г. Кривонос, В.Г. Писаренко, І.А. Варава

Моделювання інтелектуального управління кристалізацією металевих розплавів

Запропоновано нові принципи управління кристалізацією металевих розплавів для підвищення його конкурентноспроможності на світовому ринку з використанням варіанта методу Монте-Карло, адаптованого до задачі еволюції в часі вихідного перегрітого рідкого розплаву з інтенсивними конвекційними потоками. Описано ряд обчислювальних експериментів авторів.

Yu. Krivonos, V. Pisarenko, I. Varava

Crystallization Intelligent Control Modeling of Metal Melts

New management principles crystallization of metal melts to increase its competitiveness in the global market with the use of variants of Monte Carlo method, adapted to the evolution in time the source of superheated liquid melt with intense convection currents are proposed. A series of computational experiments conducted authors are described.

Статья поступила в редакцию 09.06.2009.