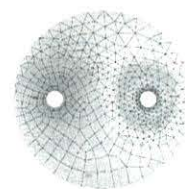




Wydawnictwo  
Naukowe  
AKAPIT



## IDENTYFIKACJA MODELI PRZEMIAN FAZOWYCH W STALACH NA PODSTAWIE PRÓBY DYLATOMETRYCZNEJ PRZY STAŁEJ PRĘDKOŚCI CHŁODZENIA

TOMASZ KONDEK, MACIEJ PIETRZYK

### *IDENTIFICATION OF PHASE TRANSFORMATION MODELS FOR STEELS, BASED ON DILATOMETRIC CONSTANT COOLING RATE TESTS*

#### *Abstract*

*The work was inspired by the fact that commonly used isothermal dilatometric tests may give erroneous results. Application of the optimization techniques to the interpretation of more complex constant cooling rate dilatometric tests is proposed in the paper. These tests are more reliable experimentally but more difficult in interpretation. Thus, the inverse algorithm, which uses non-gradient optimization methods, was developed and applied to solve this problem. The identification of phase transformation models for various carbon-manganese and eutectoid steels is performed on the basis of constant cooling rate tests. The models, after identification, are implemented in the finite element code, which simulate controlled cooling of products after hot forming. The program was tested for cooling of angles, rods and rails.*

### 1. WSTĘP

Problem modelowania przemian fazowych w stalach poddawanych chłodzeniu po plastycznej przeróbce na gorąco nabrał w ostatnich latach istotnego znaczenia. W praktyce przemysłowej wprowadzonych zostało szereg systemów kontrolowanego chłodzenia pozwalających na obróbkę cieplną wyrobów korzystając z ciepła walcowania. Przykładem mogą być systemy TEMPCORE do obróbki cieplnej prętów (Sawamiphakdi i in., 1998, Morales i in., 1990) względnie systemy do kontrolowanego chłodzenia szyn (Ackert i Nott, 1987; Jones i in., 1998). Prawidłowe zaprojektowanie procesu kontrolowanego chłodzenia i sterowanie tym procesem wymaga modelowania kinetyki przemian fazowych zachodzących w silnie zróżnicowanych warunkach wymiany ciepła. Zagadnie-

niem modelowania przemian fazowych naukowcy zajmują się od szeregu lat i w literaturze znaleźć można modele o różnym stopniu skomplikowania i o różnym stopniu uwzględnienia rzeczywistych zjawisk zachodzących w czasie przemiany. Dostępna literatura w tym zakresie jest bardzo obszerna i nie sposób nawet wymienić hasłowo poszczególne rozwiązywane problemy. Z uwagi na tematykę niniejszej pracy należy wspomnieć o powszechnie stosowanych do symulacji obróbki cieplnej po plastycznej przeróbce na gorąco konwencjonalnych modelach przemian fazowych opisujących takie parametry jak temperatura początku i końca przemiany, kinetyka wzrostu nowej fazy i ułamek objętości faz po ochłodzeniu do temperatury otoczenia (Suehiro i in., 1992; Tamura i in., 1988; Liu i in., 1996; Umemoto i in., 1992; Kuziak i in., 1997). Należy też wspomnieć o bardziej zawan-



sowanych modelach cieplno-mechaniczno-metalurgicznych wykorzystujące metodę elementów skończonych, patrz na przykład (Rońda i Oliver, 1996), oraz o pracach opisujących przemianę fazową wywołaną odkształceniem plastycznym, na przykład (Leblond i in., 1989; Fischer, 1992).

Połączenie konwencjonalnych modeli przemian fazowych z programami metody elementów skończonych symulującymi chłodzenie wyrobów po plastycznej przeróbce na gorąco otwiera nowe możliwości przed tymi modelami (Pietrzyk i Kuziak, 1999). W obliczeniach kinetyki przemian fazowych wykorzystywane są wtedy bieżące, lokalne wartości temperatury w węzłach siatki obliczone metodą elementów skończonych. W konsekwencji możliwe jest analizowanie rozkładu parametrów mikrostrukturalnych w objętości wyrobów. Dodatkową korzyścią z takiego rozwiązania jest uwzględnienie ciepła przemian fazowych w symulacji pól temperatury. Podstawowym czynnikiem ograniczającym możliwości pełnego praktycznego zastosowania konwencjonalnych modeli przemian fazowych są trudności z określeniem współczynników materiałowych, które zależą od składu chemicznego stali. Do wyznaczenia tych parametrów wykorzystuje się kosztowne i często niepewne doświadczenia. Powszechnie stosowanym doświadczeniem jest izotermiczna próba dylatometryczna. Próba ta posiada dwie podstawowe wady. Próbkę chłodzoną jest do wymaganej temperatury w skończonym czasie, czyli procesy inkubacyjny i zarodkowania mogą rozpocząć się już w czasie chłodzenia. Ponadto ustabilizowanie się temperatury po szybkim chłodzeniu jest utrudnione i często nie jest osiągalne. Dlatego za podstawowy cel niniejszej pracy postawiono sobie opracowanie metody pozwalającej wyznaczać współczynniki w modelu przemian fazowych na podstawie próby dylatometrycznej prowadzonej ze stałą prędkością chłodzenia. Próba taka daje znacznie pewniejsze i przekonujące wyniki. Do zrealizowania celu pracy zastosowano metodę analizy odwrotnej.

## 2. MODELE PRZEMIAN FAZOWYCH

Podstawowym elementem omawianego algorytmu analizy odwrotnej są modele przemian fazowych wykorzystywane do rozwiązania problemu bezpośredniego. W literaturze naukowej znaleźć można szereg takich modeli, charakteryzujących się różnym stopniem skomplikowania opisu matematycznego i różnym stopniem jakościowej zgodności z fizycznymi zjawiskami zachodzącymi w czasie przemian fazowych. Opracowana w niniejszej pracy metoda identyfikacji może zostać zastosowana do modeli dowolnego typu. W następnych rozdziałach opisane zostaną wybrane dwa rodzaje modeli przemian fazowych, które w dal-

szej części pracy zostaną wykorzystane do zademonstrowania działania programu do analizy odwrotnej.

### 2.1. Temperatura początku przemiany

Pojęcie temperatura początku przemiany fazowej ma różne znaczenie, zależnie od modelu przemian fazowych jaki jest stosowany. Niemniej jednak istnieją dwie temperatury, które kontrolują transformację i są niezależne od typu modelu. Są to temperatury  $A_{e1}$  i  $A_{e3}$ , które wynikają z warunków równowagowych i są zależne tylko od składu chemicznego stali. Wykorzystanie temperatury  $A_{e3}$  jako temperatury początku przemiany austenit-ferryt wymaga zastosowania pełnego modelu uwzględniającego czas inkubacyjny, zarodkowanie i rozrost nowej fazy. Z drugiej strony w praktycznych zastosowaniach bardzo często stosuje się modele, które łączą w jednym równaniu różne etapy przemiany fazowej. Przykładowo, nie uwzględnienie w modelu czasu inkubacji wymaga zdefiniowania temperatury początku przemiany poniżej  $A_{e3}$ , czyli założenie przechłodzenia. W takim przypadku temperatura początku przemiany jest funkcją prędkości chłodzenia, jak to przykładowo zaproponował Gladman (1997):

$$T_f = 825 - 27,6C_r \quad (1)$$

gdzie:  $T_f$  – temperatura początku przemiany austenit-ferryt,  $C_r$  – prędkość chłodzenia.

Bardziej zaawansowane równanie, uwzględniające wielkość ziarna austenitu i odkształcenie austenitu w momencie rozpoczęcia przemiany, zostało zaproponowane przez Majtę (1999):

$$T_f = A - 19C_r^{0,481} - 0,5 \exp \left[ \frac{0,042D_\gamma + 7,8}{(2,11 + \varepsilon_r)^{1,35}} \right] \quad (2)$$

gdzie:  $A$  – stała, która zależy tylko od składu chemicznego stali,  $D_\gamma$  – wielkość ziarna austenitu,  $\varepsilon_r$  – odkształcenie austenitu spowodowane niepełną rekrytalizacją.

Modele przemian fazowych, w których temperatura początku przemiany wyznaczana jest z równań typu (1) lub (2) są mało dokładne i nie mają fizycznego uzasadnienia. W niniejszej pracy metodę identyfikacji zademonstrowano na bardziej zaawansowanych modelach, które opisano w kolejnych rozdziałach.

### 2.2. Model wykorzystujący równania typu Avrami'ego

Modele przemian fazowych (ferrytycznej, perli-tycznej i bainitycznej) składają się z równań opisujących okres inkubacyjny i kinetykę danej przemiany. W takim przypadku przemiana ferrytyczna rozpoczyna się w równowagowej temperaturze  $A_{e3}$ . Poszcze-



gólne równania modelu w ogólnej postaci podane są poniżej.

- Okres inkubacyjny dla przemiany ferrytycznej [s]

$$\tau_f = x_1 k_f \exp\left[\frac{x_2}{(A_{c3} - T)^{x_3}}\right] \quad (3)$$

$$k_f = 2,6 - 1,44C - 2,95C^2 + 0,69Mn + 1,5Mn^2 + 13,9Cr + 65,5Cr^2$$

- Ułamek objętości ferrytu

$$X_f = 1 - \exp\left[-\frac{x_5 b_f}{D_V^{x_7}} (t - t_f)^{x_6}\right] \quad (4)$$

$$b_f = \exp(-142 + 48T_{100} - 4T_{100}^2) \quad T_{100} = \frac{T}{100}$$

- Okres inkubacyjny dla przemiany perlitycznej [s]

$$\tau_p = x_9 k_p \exp\left[\frac{x_{10}}{(A_{c1} - T)^{x_{11}}}\right] \quad (5)$$

$$k_p = 2,6 - 1,44C - 2,95C^2 + 0,69Mn + 1,5Mn^2 + 13,9Cr + 65,5Cr^2$$

- Ułamek objętości perlitu

$$X_p = 1 - \exp\left[-\frac{x_{13} b_p}{D_V^{x_{15}}} (t - t_p)^{x_{14}}\right] \quad (6)$$

$$b_p = \exp(-6,77T_{100} + 40) \quad T_{100} = \frac{T}{100}$$

- Okres inkubacyjny dla przemiany bainitycznej [s]

$$\tau_b = \frac{k_b}{(T_{b0} - T)^{x_{19}}} \exp\left(\frac{Q_b}{RT_K}\right) \quad (7)$$

- Ułamek objętości bainitu

$$X_b = 1 - \exp\left[-x_{21} b_b (t - t_b)^{n_b}\right] \quad (8)$$

gdzie, dla  $T \geq 350^\circ\text{C}$

$$k_b = x_{17}; \quad Q_b = x_{18}; \quad T_{b0} = 923^\circ\text{C}; \quad n_b = x_{22}$$

i dla  $T < 350^\circ\text{C}$

$$k_b = 20,8; \quad Q_b = 82000 \text{ J/mol}; \quad T_{b0} = 812^\circ\text{C}; \quad n_b = 1,25$$

$$b_b = \exp\left[-51,89 + 0,1385T_K - 0,0001039T_K^2\right]$$

- Temperatura początku przemiany martenzytycznej [ $^\circ\text{C}$ ]

$$T_m = x_{21} - 474C - 33Mn - 17Ni - 17Cr - 21Mo \quad (9)$$

- Ułamek objętości martenzytu (model Koistinena i Marburgera, podany też w pracy Umemoto (1990)):

$$F_M = (1 - F_f - F_p - F_b) \{1 - \exp[-0,011(T_M - T)]\} \quad (11)$$

gdzie:  $t_f, t_p, t_b$  – czasy od rozpoczęcia przemiany odpowiednio ferrytycznej, perlitycznej i bainitycznej,  $X_f, X_p, X_b$  – ułamki objętości odpowiednio ferrytu, perlitu i bainitu w odniesieniu do maksymalnej objętości analizowanej fazy w danych warunkach,  $F_f, F_p, F_b, F_m$  – ułamki objętości odpowiednio ferrytu, perlitu, bainitu i martenzytu w odniesieniu do całej objętości próbki,  $k_f, b_f, k_p, b_p$  – współczynniki zależne od składu chemicznego stali,  $T_m$  – temperatura początku przemiany martenzytycznej.

### 2.3. Model przemiany austenit-ferryt wykorzystujący różniczkowe równanie kinetyki

Jak podają autorzy tego typu modeli przemiany ferrytycznej (Suehiro i inni, 1992, Krielaart i Zwaag, 1998), w tych modelach różniczkowe równanie kinetyki uwzględnia zarówno okres inkubacyjny jak i zarodkowanie oraz rozrost fazy ferrytu. W związku z tym w modelu tym przemiana ferrytyczna rozpoczyna się w równowagowej temperaturze  $A_{c3}$  i składa się z etapów zarodkowania, wzrostu oraz wysycenia miejsc zarodkowania. Kinetyka pierwszego z mechanizmów opisana jest równaniem:

$$\frac{dX_f}{dt} = x_1 (k_1 S I G^3)^{0,25} \left[ \ln\left(\frac{1}{1 - X_f}\right) \right]^{0,75} (1 - X_f) \quad (11)$$

gdzie:  $X_f$  – ułamek przemiany ferrytycznej,  $I$  – prędkość zarodkowania,  $G$  – prędkość przemiany,  $S$  – względna powierzchnia ziarna,  $k_1 = 17476$  – stała materiałowa.

Zależności opisujące poszczególne parametry w równaniu (11) podane są w tablicy 1. Przyjęte w tej tablicy oznaczenia:  $R$  – stała gazowa,  $T_K$  – temperatura w skali bezwzględnej,  $k_3 = 1,14$  – parametr,  $\Delta G$  – swobodna energia Gibbsa obliczana programem ThermoCalc,  $r$  – promień krzywizny rosnącej fazy,  $D$  – współczynnik dyfuzji węgla w austenicie,  $C_\gamma$  – średnia zawartość węgla w austenicie,  $C_\alpha$  – zawartość węgla w ferrycie,  $C_0$  – zawartość węgla w stali,  $C_{\gamma\alpha}$  – zawartość węgla w austenicie na granicy faz  $\gamma$ - $\alpha$ ,  $C_{\gamma\beta}$  – zawartość węgla w austenicie na granicy  $\gamma$ -cementyt,  $Q$  – prędkość generowania ciepła w wyniku przemiany (Kumar i in., 1995),  $\Delta H$  – różnica entalpii swobodnych faz  $\gamma$  i  $\alpha$ ,  $\rho$  – gęstość. Równania podane w tablicy 1 są w dużej części empiryczne i dlatego występujące w nich współczynniki mają często wymiar.

Należy jednak podkreślić, że jeżeli wszystkie wielkości fizyczne są wprowadzone do równań w układzie jednostek SI, to równania są słuszne dla wartości współczynników podanych w pracy.

Tablica 1. Równania opisujące parametry modelu.

$I = T^{-0.5} D \times 10^4 \exp\left(\frac{x_3 \times 10^9}{RT_K \Delta G}\right)$
$G = \frac{1}{2r} D \times 10^{-4} \frac{C_{\gamma\alpha} - C_\gamma}{C_\gamma - C_\alpha}$
$S = \frac{6}{D_\gamma^4}$
$C_\gamma = \frac{(C_0 - X_f C_\alpha)}{1 - X_f}$
$r = \frac{k_3 D^{0.5} (C_\gamma - C_0)}{\sqrt{(C_\gamma - C_\alpha)(C_0 - C_\alpha)}} t^{0.5}$
$C_\alpha = 0,000664 - 6,0912 \times 10^{-7} T_K$ $C_{\alpha\gamma} = 0,06328 - 5,7037 \times 10^{-5} T_K$
$X_{f0} = \frac{C_{\gamma\alpha} - C_0}{C_{\gamma\alpha} - C_\alpha}$
$Q = \rho \Delta H \frac{\Delta X}{\Delta t}$
$C_{\gamma\beta} = -0,0191 + 2,6237 \times 10^{-5} T_K$

Drugi mechanizm przemiany, odpowiadający wysyceniu miejsc zarodkowania, jest opisany równaniem:

$$\frac{dX_f}{dt} = k_f \frac{6}{D_\gamma} G (1 - X_f) \quad (12)$$

gdzie:  $D_\gamma$  – wielkość ziarna austenitu,  $k_f$  – stała materiałowa, obliczana jako (Suehiro i in., 1992):

$$k_f = 8,933 \times 10^{-12} \exp\left(\frac{21100}{T}\right)$$

Poniżej opisana jest idea działania modelu wykorzystującego różniczkowe równania (11) i (12). Gdy lokalna temperatura w próbce spadnie poniżej  $A_{c3}$ , rozpoczyna się symulacja przemiany austenit-ferryt według równania (11). Kiedy wartość pochodnej obliczona z równania (12) staje się większa od określonej równaniem (11), to przebieg przemiany obliczany jest z równania (12). Ułamek ferrytu  $X_f$  liczony jest w każdej iteracji rozwiązania w stosunku do maksymalnej zawartości ferrytu w stali  $X_{f0}$  w danej temperaturze. Zatem ułamek objętości ferrytu odniesiony do całej objętości metalu wynosi  $F_f = X_{f0} X_f$ . Jeżeli

przemiana przebiega w zmiennej temperaturze, bieżący ułamek objętości ferrytu  $X_f$  jest korygowany ze względu na zmiany wartości równowagowej  $X_{f0}$ , zgodnie z równaniem:

$$X_f^{i+1} = X_f^i \frac{X_{f0}(T^i)}{X_{f0}(T^{i+1})} \quad (13)$$

gdzie:  $i$  – numer iteracji.

Symulacja przemiany ferrytycznej jest prowadzona do momentu aż ułamek przemiany osiągnie 1. Niemniej jednak, jeżeli zawartość węgla w austenicie osiągnie wcześniej graniczną wartość  $C_{\gamma\beta}$  (Tablica 1), w pozostałej objętości austenitu rozpoczyna się przemiana perlityczna. Obliczenia dla tej przemiany, oraz ewentualnie dla przemiany bainitycznej, prowadzone są korzystając z równań (5)–(8), czyli równań typu Avrami'ego.

### 3. METODA ANALIZY ODWROTNEJ

Przedstawione w poprzednim rozdziale modele przemian fazowych zawierają szereg współczynników, które w niniejszej pracy zebrano w wektorze  $x$ . Wartości tych współczynników są różne dla różnych gatunków stali, a ponadto zależą od mikrostruktury w momencie rozpoczęcia przemiany oraz od odkształcenia austenitu. Trudności z wyznaczeniem tych współczynników są podstawowym czynnikiem ograniczającym powszechne zastosowanie modeli przemian fazowych do symulacji i sterowania procesami kontrolowanego chłodzenia wyrobów. Poniżej opisana jest propozycja metody umożliwiającej łatwe i szybkie wyznaczenie współczynników wektora  $x$ .

Identyfikację współczynników modelu przemian fazowych przeprowadzono korzystając z metody analizy odwrotnej. Zasady tej metody opisane są w licznych publikacjach, patrz np. (Lenard i in., 1999, Szyndler, 2001). Najczęstsze zastosowania metody odwrotnej dotyczą wyznaczania współczynników w modelu reologicznym materiałów poddawanych plastycznej przeróbce (Gavrus i in., 1996; Gelin i Ghouati, 1994; Szyndler i in., 2001). Jako doświadczenie wykorzystywane są plastometryczne próby skręcania lub ściskania. Z szerokiej gamy innych zastosowań metody odwrotnej wymienić można wyznaczenie współczynnika wymiany ciepła (Malinowski i in., 1994, Malinowski i in., 1995) względnie lepkości materiałów (Mitsoulis, 2002). W pracach (Pietrzyk i in., 1998, Szyndler i in., 2001, Boyer i Massoni, 1999) pokazano możliwości zastosowania analizy odwrotnej do wyznaczania parametrów dwóch różnych modeli na podstawie jednego rodzaju prób. Zadawalające wyniki zastosowania analizy odwrotnej w różnych dziedzinach skłoniły autorów niniejszej pracy do pod-



jęcia próby wykorzystania tej metody do wyznaczania współczynników w modelach przemian fazowych. Wstępna koncepcja tego rozwiązania podana jest w pracy (Pietrzyk i in., 2000) a poniżej zamieszczono szczegółowy opis modelu.

### 3.1. Ogólne sformułowanie problemu odwrotnego

Model matematyczny dowolnego procesu lub zagadnienia fizycznego można przedstawić jako układ równań:

$$\mathbf{d} = F(\mathbf{x}, \mathbf{p}), \quad F: R^k \rightarrow R^r \quad (14)$$

gdzie:  $\mathbf{d} = \{d_1, \dots, d_r\}$  – wektor wyjściowych parametrów procesu,  $\mathbf{x} = \{x_1, \dots, x_l\}$  – wektor parametrów modelu,  $\mathbf{p} = \{p_1, \dots, p_k\}$  – wektor zadanych parametrów procesu. Jeżeli znane są wektory  $\mathbf{p}$  i  $\mathbf{x}$ , to rozwiązanie problemu (14) nazywamy rozwiązaniem zadania bezpośredniego. Natomiast, dla tak sformułowanego zagadnienia, problem odwrotny zdefiniowany jest jako wyznaczenie wartości składowych wektora  $\mathbf{x}$  przy znanych wektorach  $\mathbf{d}$  i  $\mathbf{p}$ . Dla analizowanego problemu przemian fazowych, wektor wyjściowych parametrów  $\mathbf{d}$  stanowią temperatury początku i końca przemian fazowych oraz ułamki objętości poszczególnych faz w temperaturze otoczenia, które są mierzone w próbie dylatometrycznej dla stałej prędkości chłodzenia. Wektor  $\mathbf{x}$  stanowią współczynniki w modelu przemian fazowych natomiast wektor  $\mathbf{p}$  zawiera takie parametry procesu, jak na przykład prędkość chłodzenia oraz wielkość ziarna austenitu w momencie rozpoczęcia przemiany.

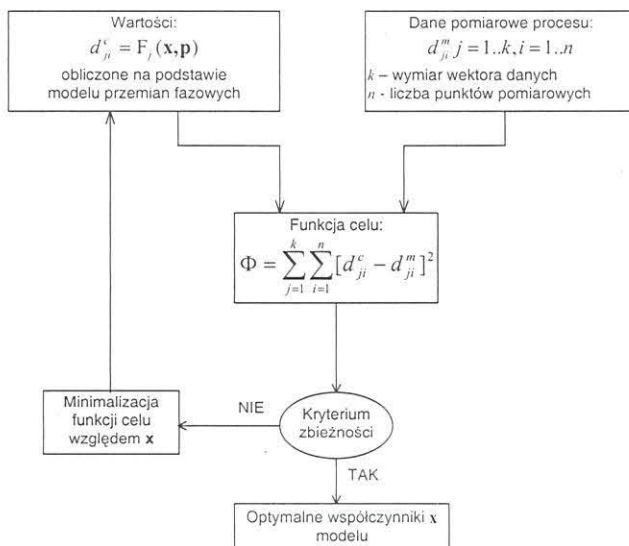
Celem analizy odwrotnej jest wyznaczenie optymalnych wartości składowych wektora  $\mathbf{x}$ . Jest to osiągnięte poprzez poszukiwanie minimum, względem wektora  $\mathbf{x}$ , funkcji celu zdefiniowanej jako średniokwadratowy błąd między zmierzonymi i obliczonymi wartościami składowych wektora  $\mathbf{d}$ :

$$\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \sum_{i=1}^n \beta_i [d_i^c(\mathbf{x}, \mathbf{p}_i) - d_i^m]^2 \quad (15)$$

gdzie:  $\mathbf{d}^m = \{d_1^m, d_2^m, \dots, d_n^m\}$  – wektor zawierający zmierzone wartości parametrów wyjściowych,  $\mathbf{d}^c = \{d_1^c, d_2^c, \dots, d_n^c\}$  – wektor zawierający obliczone wartości parametrów wyjściowych,  $\beta_i$  – wagi poszczególnych punktów, ( $i = 1 \dots n$ ),  $n$  – liczba punktów pomiarowych. Dane pomiarowe  $\mathbf{d}^m$  są otrzymywane z prób dylatometrycznych prowadzonych ze stałą prędkością chłodzenia natomiast  $\mathbf{d}^c$  jest obliczane za pomocą numerycznego modelu problemu bezpośredniego. Na rysunku 1 pokazano schemat blokowy

rozwiązania odwrotnego.

Identyfikacja parametrów modelu przemian fazowych składa się z dwóch części. Pierwszą jest rozwiązanie zadania bezpośredniego, w którym wykorzystywany jest model. Drugą część stanowi rozwiązanie zadania odwrotnego z zastosowaniem technik optymalizacyjnych. Zaproponowana metoda może być zastosowana do dowolnego gatunku stali i dla dowolnego modelu przemian fazowych.



Rysunek 1. Schemat blokowy analizy odwrotnej w zastosowaniu do identyfikacji współczynników w modelu przemian fazowych.

### 3.2. Funkcja celu

Jak już wspomniano, najczęściej funkcja celu jest średniokwadratowym błędem między zmierzonymi i obliczonymi parametrami procesu. W pierwszym przybliżeniu wykorzystano wyniki prób dylatometrycznych obejmujące temperatury początku i końca przemian fazowych, czyli w funkcji celu na rysunku 1 składowymi wektora  $\mathbf{d}$  były właśnie te temperatury. W konsekwencji funkcję celu zdefiniowano jako:

$$\Phi = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left( \frac{T_{im} - T_{ic}}{T_{im}} \right)^2} \quad (16)$$

gdzie:  $T_{im}$ ,  $T_{ic}$  – zmierzone i obliczone temperatury początku i końca przemian fazowych,  $n$  – liczba pomiarów temperatury.

Analiza wyników opisanych przez Kondka i in. (2001) wykazuje, że w niektórych przypadkach model ze współczynnikami wyznaczonymi z optymalizacji funkcji celu (16) pozwala z dobrą dokładnością modelować wykresy CTP. O ile zgodność między zmierzonymi i obliczonymi temperaturami początku i końca przemian jest zadawalająca, to rozbieżności występują w przewidywaniu kinetyki przemian i ułam-



ków objętości faz w temperaturze otoczenia. Dlatego funkcję celu rozszerzono do następującej postaci:

$$\Phi = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left( \frac{T_{im} - T_{ic}}{T_{im}} \right)^2 + \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \left( \frac{X_{im} - X_{ic}}{X_{im}} \right)^2} \quad (17)$$

gdzie:  $X_{im}, X_{ic}$  – zmierzone i obliczone ułamki objętości poszczególnych faz w temperaturze otoczenia,  $k$  – liczba pomiarów ułamków objętości faz.

### 3.3. Techniki optymalizacji

Ze względu na charakter zadania, do wyznaczenia minimum funkcji celu zastosowano bezgradientowe metody optymalizacji Hooke'a-Jeevesa, Rosenbrocka i simplex (Kusiak, 1995). Szczegółowy opis algorytmów dla zagadnień wykorzystujących wybrane metody optymalizacji w zadaniach odwrotnych podano w pracy Szyndler (2001), a poniżej omówiono podstawy aplikacji tych metod do analizowanego w niniejszej pracy problemu identyfikacji modeli przemian fazowych.

**Metoda Hooke'a-Jeevesa.** Każda iteracja w tej metodzie składa się z dwóch etapów: kroku próbnego i kroku roboczego. Kroki próbne są wykonywane wzdłuż wszystkich kierunków ortogonalnej bazy a ich celem jest zbadanie lokalnego zachowywania się funkcji celu. Krok roboczy określa przejście do nowego obszaru poszukiwań w ściśle zdeterminowany sposób i jest wykonywany wtedy, gdy w przynajmniej jednym z kroków próbnych wartość funkcji była mniejsza od wartości otrzymanej w poprzedniej iteracji, czyli krok był pomyślny. Jeśli taki krok roboczy nie istnieje, cały cykl przeszukiwania obszaru jest powtarzany dla zmniejszonej długości kroku próbnego. Dane wejściowe algorytmu to:  $\mathbf{x}^0$  – punkt startowy optymalizacji,  $[\mathbf{d}^1, \mathbf{d}^2, \dots, \mathbf{d}^n]$  – baza dla pierwszego kroku iteracyjnego, utworzona z wzajemnie ortogonalnych wektorów,  $\tau$  – początkowa długość kroku,  $\beta$  – współczynnik zmniejszający długość kroku  $\tau$ ,  $0 < \beta < 1$ ,  $\varepsilon$  – dokładność poszukiwania minimum,  $n$  – liczba zmiennych niezależnych. Dobór punktu startowego dla dużej liczby parametrów modelu jest zagadnieniem trudnym. W niniejszej pracy początkowe wartości tych parametrów dobierano na podstawie danych literaturowych.

**Metoda Rosenbrocka.** Podobnie jak w metodzie Hooke'a-Jeevesa, minimum jest poszukiwane w  $n$  wzajemnie ortogonalnych kierunkach. Kierunki te jednak, o ile spełnione są pewne warunki, zostają zmienione w wyniku obrotu. Pierwszy etap polega na wykonaniu w każdym kierunku wyznaczonym przez bazę, kroku o długości  $\tau$ . Jeśli działanie to było pomyślne, to znaczy znaleziono przynajmniej jeden kierunek, w

którym wartość funkcji była mniejsza od wartości funkcji w punkcie wyjściowym dla rozpatrywanego kroku, to w następnej iteracji w danym kierunku krok  $\tau$  zwiększany jest  $\alpha$  razy ( $\alpha > 1$ ), w przeciwnym przypadku zmniejszany  $\beta$  razy, gdzie  $0 < \beta < 1$ . Etap ten powtarzany jest tak długo, aż żaden kierunek nie daje pomyślnego wyniku, przy czym określenie pomyślny ma to samo znaczenie jak w metodzie Hooke'a-Jeevesa. Gdy pierwsza część obliczeń zostaje zakończona i kryterium na minimum jest spełnione, procedura zostaje zatrzymana. W przeciwnym przypadku uruchamiany jest algorytm obrotu współrzędnych i działanie całego algorytmu rozpoczyna się od początku.

Dane wejściowe algorytmu to:  $\mathbf{x}^0$  – punkt startowy optymalizacji,  $\mathbf{d}_0 = [\mathbf{d}^1, \mathbf{d}^2, \dots, \mathbf{d}^n]$  – baza dla pierwszego kroku iteracyjnego, utworzona z wzajemnie ortogonalnych wektorów,  $\tau_0$  –  $n$  – wymiarowy wektor początkowy długości kroku,  $\alpha$  – współczynnik korekcyjny zwiększający  $\tau$ ,  $\alpha < 1$ ,  $\beta$  – współczynnik zmniejszający długość kroku  $\tau$ ,  $0 < \beta < 1$ ,  $\varepsilon$  – dokładność poszukiwania minimum,  $n$  – liczba zmiennych niezależnych.

**Metoda sympleksów**, opracowana przez Nelder'a i Meada (1965). W pierwszym etapie algorytmu utworzony jest w przestrzeni  $R^n$   $n$ -wymiarowy sympleks o  $n+1$  wierzchołkach w taki sposób, by rozpięta na nich powierzchnia była określona przez badaną funkcję celu  $f(\mathbf{x})$ . Konstrukcja początkowego sympleksu oparta jest na założonej długości boków wielościanu. W kolejnych iteracjach dokonuje się przekształceń figury zgodnie z algorytmem składających się z kroków odbicia, ekspansji i kontrakcji, patrz np. Kusiak (1995) Szyndler (2000). Obliczenia kończą się, gdy odległość między wierzchołkami sympleksu w pobliżu skutecznego minimum jest nie większa od założonej dokładności  $\varepsilon$ .

Optymalizacja funkcji celu (16) lub (17) jest trudna. Przy dużej liczbie współczynników modelu będących zmiennymi optymalizacji, procedura optymalizacyjna często utyka w minimach lokalnych. Ponieważ nie ma możliwości analitycznego obliczenia wrażliwości funkcji celu względem zmiennych optymalizacji, ograniczono się do bezgradientowych metod poszukiwania. W opracowanym programie komputerowym (Kondek i in., 2002) optymalizacja nie przebiega automatycznie. Ingerencja użytkownika programu jest wymagana na etapie wyboru punktu startowego oraz wyboru metody w poszczególnych etapach procedury optymalizacyjnej. Z dotychczasowych doświadczeń w użytkowaniu programu wynika, że stosowanie kilku metod optymalizacji kolejno po sobie gwarantuje najlepszą skuteczność.



Tablica 2. Składy chemiczne analizowanych stali.

stal	C	Mn	Si	Cr	Ni	Al,	Cu	Mo	N	P	S
C-Mn	0,19	1,35	0,3	0,72	0,22	0,01	0,01	0,08	0,005	0,012	0,005
900ACr	0,74	0,97	0,25	0,68	0,15	-	-	-	0,006	0,02	0,02
900A	0,74	1,05	0,3	0,03	0,01	-	-	-	0,006	0,023	0,02

## 4. WYNIKI I ANALIZA

Jak już wspomniano wcześniej, opisane w rozdziale 2 modele przemian fazowych zawierają szereg współczynników, których wartość zależy od składu chemicznego stali oraz od mikrostruktury materiału. Współczynniki te zgrupowano w wektorze  $x$ . Pełny model przemian fazowych zaproponowany w niniejszej pracy dopuszcza 25 składowych wektora  $x$ , ale kilka z tych współczynników ma sens fizyczny i mogą one zostać wyznaczone bezpośrednio metodami doświadczalnymi. W konsekwencji identyfikacja objęła 17 współczynników dla stali niskowęglowych i 11 współczynników dla stali eutektoidalnych.

Do identyfikacji parametrów modeli przemian fazowych wykorzystano wyniki prób dylatometrycznych prowadzonych przy stałej prędkości chłodzenia. Wszystkie badania doświadczalne zostały wykonane w Instytucie Metalurgii Żelaza w Gliwicach. W każdej próbie mierzono temperaturę początku i końca przemian oraz skład strukturalny stali w temperaturze otoczenia. Ponadto dla dalszej weryfikacji modelu wykonano pomiary twardości wszystkich próbek.

### 4.1. Stale niskowęglowe

W pierwszej kolejności analizie poddano stal węglowo-manganową o składzie chemicznym podanym w Tablicy 2, pierwszy wiersz. Przedmiotem identyfikacji były współczynniki w modelu przemiany austenit-ferryt opisanym równaniami (11) – (13) oraz w modelach pozostałych przemian opisanych równaniami (5) – (12). Wykonane obliczenia wykazały, że dobór współczynników w modelu przemiany ferrytycznej jest w tym przypadku bardzo trudny. Autorzy modelu (Suehiro i in., 1992) podają, że w symulacji nie należy wprowadzać okresu inkubacyjnego, ponieważ jest on uwzględniony przez różniczkowe równanie kinetyki przemiany (11). Przeprowadzona obszerna analiza wyników symulacji wykazała, że przy pominięciu okresu inkubacyjnego model nie przewiduje temperatury początku przemiany ferrytycznej zgodnie z ob-

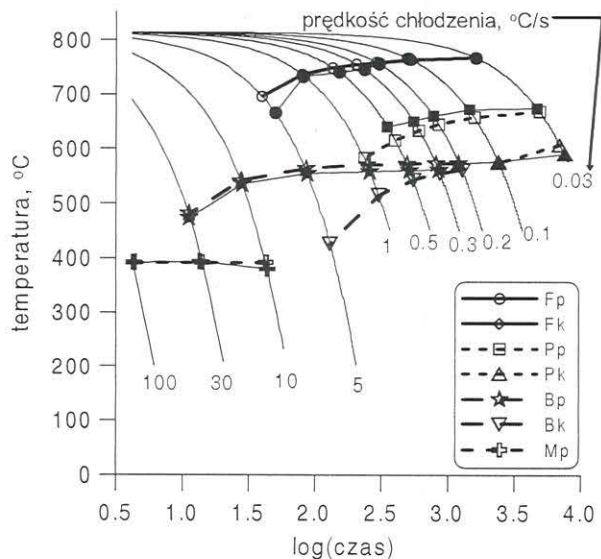
serwacjami w próbie dylatometrycznej. Ponadto, w przypadku dużych prędkości chłodzenia model zawsze przewiduje pewną wartość ułamka objętości ferrytu, podczas gdy wyniki badań strukturalnych wskazują na brak ferrytu. W związku z tymi obserwacjami, model wykorzystujący różniczkowe równania (11) i (12) może być wykorzystywany do symulacji przemiany austenit ferryt jeżeli przyjmie się założenie, że początek przemiany ma miejsce w chwili, kiedy obliczona z rozwiązania równania (11) wielkość ułamka objętości ferrytu osiągnie pewną progową wartość. Przy takim założeniu, w oparciu o minimalizację funkcji celu (17), możliwe było wyznaczenie współczynników równań w modelu dających dobrą zgodność między obliczonymi i zmierzonymi wykresami CTP.

W przeprowadzonym rozwiązaniu wszystkie zmierzone parametry modelu przemian fazowych, wybrana metoda optymalizacji, początkowe wartości składowych wektora  $x$  oraz zestaw wyników doświadczalnych były wprowadzane jako dane wejściowe do programu. Skład chemiczny stali, początkowa temperatura obliczeń oraz wielkość ziarna austenitu w momencie rozpoczęcia przemiany (w tym przypadku 30 mm) stanowiły składowe wektora  $p$  również wprowadzane do modelu jako dane wejściowe, wraz z wynikami pomiarów czyli wektorem  $d^m$ . Dane są wprowadzane do programu w postaci macierzy, której każdy wiersz zawiera wielkość ziarna austenitu, prędkość chłodzenia, temperatury początku i końca przemian fazowych oraz skład strukturalny stali dla jednego doświadczenia. Dodatkowo do programu wprowadzane są ograniczenia zakresu poszukiwań, czyli maksymalne i minimalne wartości współczynników  $x$ , wynikające z ograniczeń modelu. Wartości współczynników wyznaczonych metodą analizy odwrotnej dla funkcji celu (17) podano w Tablicy 3, a porównanie wykresów CTP obliczonych teoretycznie za pomocą modelu z optymalnymi współczynnikami  $x$  i otrzymanych w próbie dylatometrycznej pokazano na rysunku 2. Ponieważ uchwycenie temperatury końca przemiany bainitycznej w próbie dylatometrycznej jest trudne, na wykresie zamieszczono tę krzywa tylko dla wyników teoretycznych.

Tablica 3. Współczynniki w modelu przemian fazowych dla stali C-Mn z Tablicy 2 wyznaczone metodą analizy odwrotnej.

$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_9$	$x_{10}$	$x_{11}$	$x_{13}$	$x_{14}$	$x_{15}$	$x_{17}$	$x_{18}$	$x_{19}$	$x_{21}$	$x_{22}$
4,6	0,56	0,98	6,36	118	3,9	0,3	2	3	20	90	3	0,01	2

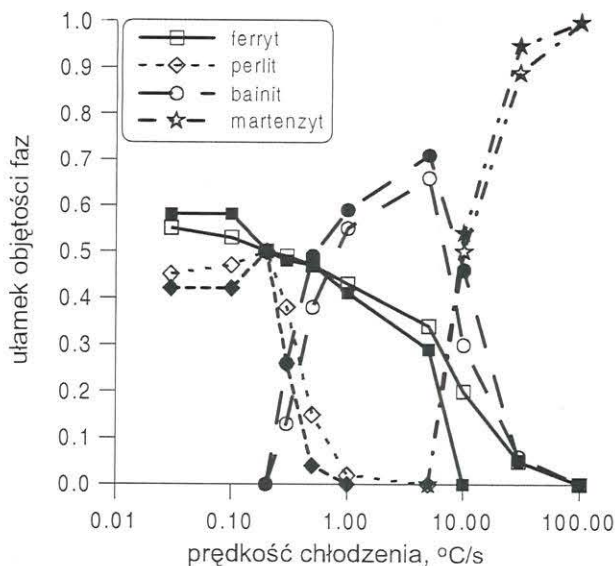




Rysunek 2. Wykresy CTP wyznaczone w próbie dylatometrycznej (punkty zaciemnione) i obliczone za pomocą modelu ze współczynnikami podanymi w Tabelicy 2 (p – początek, k – koniec przemiany).

Porównanie zmierzonych i obliczonych wykresów CTP wykazuje dobrą zgodność. Dla pełnej weryfikacji modelu przeprowadzono również porównanie zmierzonych i obliczonych ułamków objętości faz po ochłodzeniu do temperatury otoczenia (rysunek 3). W tym przypadku wystąpiły nieco większe rozbieżności, szczególnie w wartościach ułamka objętości ferrytu dla dużych prędkości chłodzenia. Wynika to z diskutowanego wcześniej faktu nie uwzględnienia w modelu okresu inkubacyjnego dla przemiany ferrytycznej. Ten problem wymaga dalszej analizy.

Podsumowując przedstawione wyniki weryfikacji modelu (rysunki 2 i 3) można uznać, że model z dobrą dokładnością przewiduje kinetykę przemian oraz skład fazowy stali węglowo-manganowych w próbach dy-



Rysunek 3. Porównanie zmierzonych (ciemne punkty) i obliczonych (jasne punkty) ułamków objętości faz po ochłodzeniu do temperatury otoczenia.

latometrycznych prowadzonych ze stałą prędkością chłodzenia. Podstawową zaletą modelu jest jego zdolność do opisywania przebiegu przemian fazowych zachodzących w zmiennych warunkach chłodzenia. Pozwala to na połączenie modelu z programem na bazie metody elementów skończonych symulującym pole temperatury w objętości wyrobów poddawanych kontrolowanemu chłodzeniu.

## 4.2. Stale perlityczne

W drugiej kolejności rozważono stale perlityczne na pręty do betonu (900Acr) i na szyny (900A). Składy chemiczne tych stali zamieszczono w Tabelicy 2. Szczegółowy opis wykonanych badań podany jest we wcześniejszych publikacjach dla szyn (Pietrzyk i Kuziak, 2000) i dla prętów (Kondek i in., 2001).

Wartości składowych wektora  $x$  obliczone w wyniku optymalizacji funkcji  $\Phi$  opisanej równaniem (16) podano w Tabelicy 4 (przypadek I). Zmierzona średnia wielkość ziarna w próbkach dylatometrycznych wynosiła 35  $\mu\text{m}$ . W pracy (Kondek i in., 2003) pokazano porównanie zmierzonych i obliczonych dla optymalnego wektora  $x$  wykresów CTP i wykazano, że zastosowany model nie jest w stanie opisać prawidłowo temperatury początku przemiany perlitycznej. Należy w tym miejscu podkreślić, że dokładność analizy odwrotnej zależy między innymi od zdolności modelu do opisanego fizycznych zjawisk, jakie mają miejsce w rozważanym procesie. Analiza odwrotna pozwala znaleźć wartości współczynników, które dają najlepszy opis analizowanego zjawiska wybranym modelem. Można w tym miejscu wnioskować, że równanie (7) opisujące czas inkubacyjny dla przemiany perlitycznej nie pozwala uzyskać dobrych jakościowo wyników. Analiza działania modelu wykazała, że poprawę dokładności modelu można uzyskać uzależniając czas inkubacyjny od prędkości chłodzenia, co pokazano w pracy (Kuziak i Pietrzyk, 2000).

Uzależnienie czasu inkubacyjnego od prędkości chłodzenia dało zadawalającą zbieżność procedury optymalizacyjnej i małą wartość błędu, ale nie ma ono uzasadnienia fizycznego. Dlatego poszukiwano innych możliwości poprawy wyników i w pracy (Kondek i in., 2001) zastosowano równanie na czas inkubacyjny przemiany perlitycznej zaproponowane przez Hougardy'ego (1987):

$$\tau_p = x_9 \exp\left(\frac{x_{12}}{T_K}\right) \exp\left[\frac{x_{10}}{T_K (A_{el} - T)^{x_{11}}}\right] \quad (18)$$

W trakcie prowadzonych obliczeń stwierdzono, że podobnie jak w przypadku stali niskowęglowych uzyskiwano dobrą dokładność optymalizacji, czyli małą wartość funkcji celu (11), ale porównanie wyników

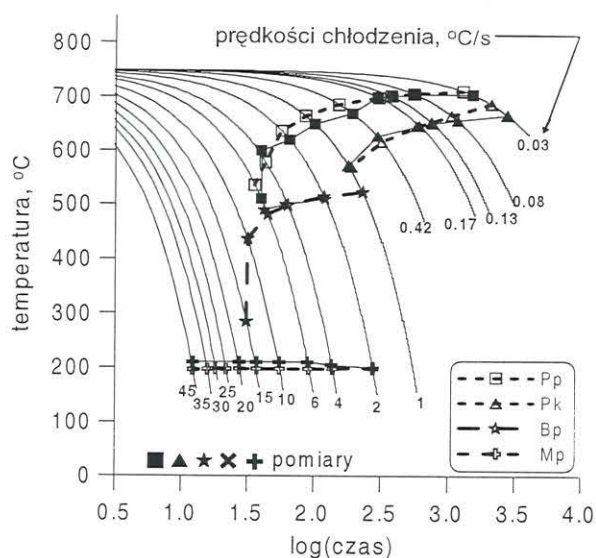


Tablica 4. Optymalne wartości współczynników modelu przemian fazowych.

	$x_9$	$x_{10}$	$x_{11}$	$x_{12}$	$x_{13}$	$x_{14}$	$x_{15}$	$x_{17}$	$x_{18}$	$x_{19}$	$x_{21}$	$x_{22}$
I	0,593	100	4,89	-	2,4	1,52	1,96	20,8	90	3	0,9	1,4
II	0,25	7899	0,24	1524	1,5	1,52	2,1	24,5	88	3	0,3	1,2
III	10	9656	0,37	771	9,8	0,52	0,97	26,1	80	2,78	0,3	1,51

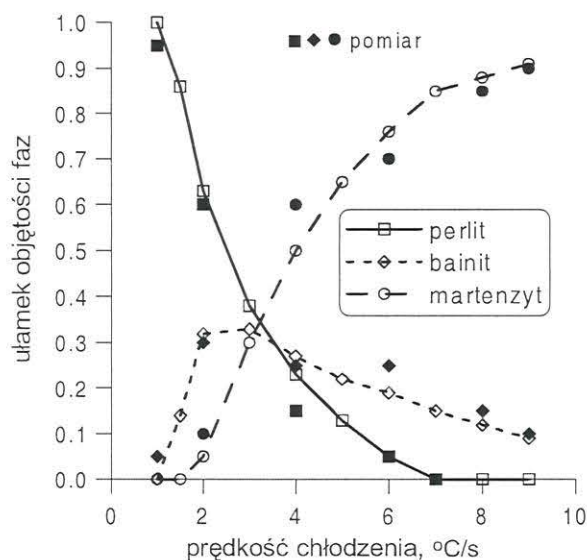
obliczeń i pomiarów ułamków objętości faz w temperaturze otoczenia nie było zadawalające. Dlatego dalszą analizę prowadzono w oparciu o funkcję celu (17), uzupełnioną o średni błąd kwadratowy między zmierzonymi i obliczonymi ułamkami objętości faz. Identyfikacja modelu z równaniem (18) na okres inkubacyjny oraz z funkcją celu (17) dała wartości współczynników  $x$  podane w wierszu II w Tablicy 4.

Na rysunku 4 pokazano porównanie wykresów CTP zmierzonych oraz obliczonych dla optymalnych współczynników II. Jak widać na tym rysunku, wprowadzenie równania (18) i funkcji celu (17) pozwoliło na znaczną poprawę zgodności wyników obliczeń z pomiarami. Na rysunku 5 przedstawiono porównanie zmierzonych i obliczonych ułamków objętości poszczególnych faz w temperaturze otoczenia.



Rysunek 4. Wykresy CTP otrzymane z pomiaru (ciemne punkty) i obliczone przez model z równaniem (18) (jasne punkty) dla stali na pręty 900ACr dla współczynników II (b) w Tablicy 4 (p – początek, k – koniec przemiany).

Przedstawiona powyżej analiza wykazuje, że metoda analizy odwrotnej pozwala na wyznaczenie współczynników w modelu przemian fazowych na podstawie prób dylatometrycznych wykonanych dla stałych prędkości chłodzenia. Efektywność metody zależy w głównej mierze od ilości dostępnych wyników pomiarów. Lepsze wyniki uzyskano gdy zastosowano funkcję celu (17), uzupełnioną o średni błąd kwadratowy między zmierzonymi i obliczonymi ułamkami objętości faz.



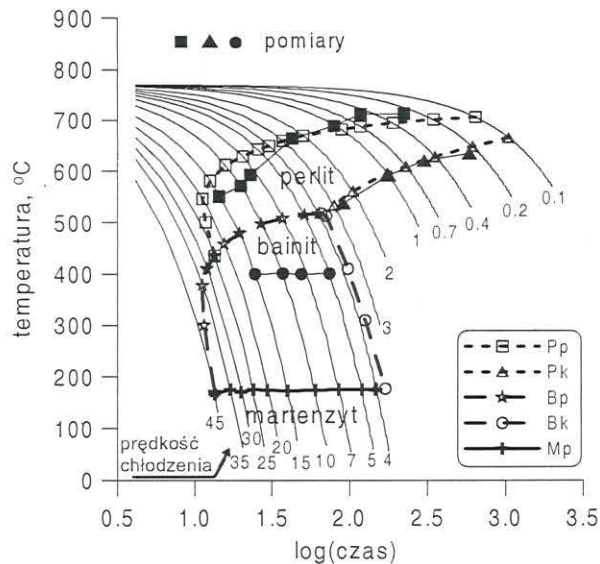
Rysunek 5. Zmierzone (ciemne punkty) i obliczone dla współczynników II w Tablicy 4 (jasne punkty) ułamki objętości faz dla stali na pręty 900ACr po ochłodzeniu do temperatury otoczenia.

Podobną analizę wykonano dla stali szynowej 900A. Obliczenia odwrotne wykazały, że dla tej stali najlepsze wyniki uzyskuje się przyjmując do opisu czasu inkubacyjnego w przemianie perlitycznej następującą zależność:

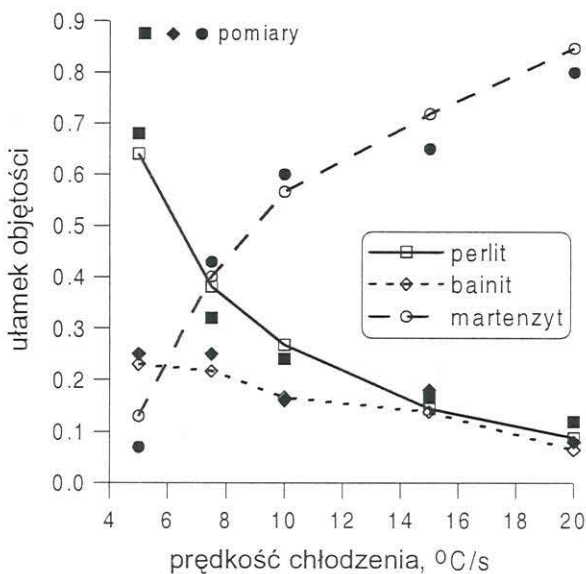
$$\tau_P = \frac{x_9 10^{-3}}{(Ae_1 - T)^{x_{11}}} \exp\left(\frac{x_{10}}{RT_K}\right) \quad (19)$$

Równanie (19) zostało włączone do modelu przemian fazowych w miejsce równania (18) i przeprowadzono identyfikację parametrów modelu, a wyniki zebrano w Tablicy 4, przypadek III. Zmierzona średnia wielkość ziarna w próbkach dylatometrycznych wynosiła w tym przypadku 70 mm. Na rysunku 6 pokazano porównanie wykresów CTP otrzymanych z pomiarów oraz z obliczeń dla modelu ze współczynnikami III w Tablicy 3. Jak widać na tym rysunku wyniki nie są tak dobre jak dla stali na pręty. Model przewiduje poprawnie koniec przemiany perlitycznej dla prędkości chłodzenia poniżej 4°C/s. Obliczenia temperatury początku przemiany perlitycznej nie dają w pełni zadawalających wyników. Model nie jest w stanie przewidzieć zmian nachylenia krzywej początku przemiany, jakie są obserwowane w doświadczeniu.





Rysunek 6. Wykresy CTP otrzymane z pomiaru (ciemne punkty) i obliczone przez model (jasne punkty) dla stali szynowej 900A dla współczynników III w Tabelicy 4.



Rysunek 7. Zmierzone (ciemne punkty) i obliczone dla współczynników III w Tabelicy 4 (jasne punkty) ułamki objętości faz dla stali szynowej 900A po ochłodzeniu do temperatury otoczenia.

Na rysunku 7 pokazano porównanie obliczonych i zmierzonych ułamków objętości perlitu, bainitu i martenzytu w funkcji prędkości chłodzenia. Jak widać na tym rysunku, model przewiduje z dobrą dokładnością skład strukturalny stali w temperaturze otoczenia.

Podsumowując wyniki analizy odwrotnej opisane w niniejszej pracy można wyciągnąć wniosek, że metoda pozwala na identyfikację parametrów modeli przemian fazowych na podstawie prób dylatometrycznych prowadzonych ze stałą prędkością chłodzenia. Dokładność identyfikacji zależy w głównej mierze od zdolności modelu przemian fazowych do poprawnego opisanie rzeczywistych zjawisk zachodzących w materiale. Należy jednak zaznaczyć, że na obecnym etapie badań nie ma dowodu jednoznaczności uzyska-

tego rozwiązania. Przy dużej liczbie optymalizowanych parametrów dobre przybliżenie można uzyskać dla różnych kombinacji tych parametrów. Wyniki zamieszczone w Tabelicy 4 wykazują, że niewielkie zmiany charakteru równań zastosowanych w modelu powodują duże zmiany współczynników  $x$ . Oznacza to, że metoda w obecnej wersji nie może być stosowana do wyznaczania parametrów materiałowych mających sens fizyczny. Metoda pozwala jedynie wyznaczyć współczynniki modelu, które zagwarantują dobrą dokładność symulacji analizowanych procesów i mogą stanowić użyteczne narzędzie wspomagania projektowania technologii kontrolowanego chłodzenia wyrobów, jak to pokazano w następnym rozdziale.

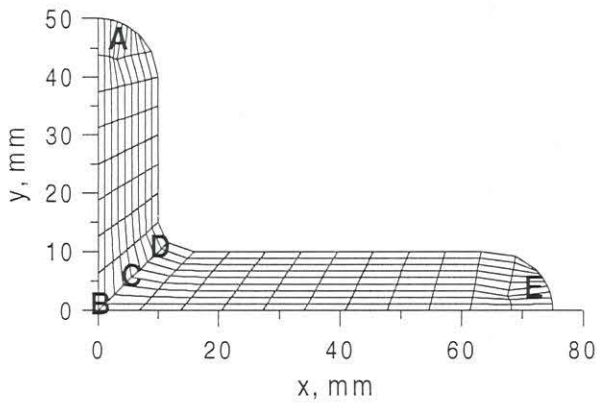
## 5. SYMULACJA METODĄ ELEMENTÓW SKOŃCZONYCH

Opisane powyżej modele przemian fazowych zostały włączone do programu z metody elementów skończonych symulującego proces chłodzenia wyrobów po plastycznej przeróbce na gorąco. Model MES opiera się na rozwiązaniu różniczkowego równania transportu ciepła z zastosowaniem schematu całkowania Galerkinia i jest szczegółowo opisany w pracy (Leonard i in., 1999). W rozwiązaniu zastosowano warunek brzegowy 3-go rodzaju, przyjmując odpowiednie współczynniki wymiany ciepła dla swobodnego chłodzenia w powietrzu (Staniszewski, 1980), wymuszonego chłodzenia w powietrzu (Kuziak i Pietrzyk, 2000) oraz dla chłodzenia natryskiem wodnym (Hodgson i in.). Równania kinetyki przemian fazowych są rozwiązywane w każdym węzle siatki elementów w każdym kroku czasowym, wykorzystując bieżącą, lokalną wartość temperatury. W konsekwencji możliwe było przewidywanie rozkładów ułamków objętości faz w objętości wyrobów dla różnych warunków chłodzenia. Podejście takie zastosowano z powodzeniem do symulacji chłodzenia prętów w systemie TEMPCORE (Kuziak i Pietrzyk, 1999). Poniżej przedstawiono przykładowe wyniki symulacji dla chłodzenia drobnych kształtowników ze stali węglowo-manganowych oraz prętów do betonu i szyn ze stali eutektoidalnych.

### 5.1. Kształtowniki ze stali węglowo manganowych

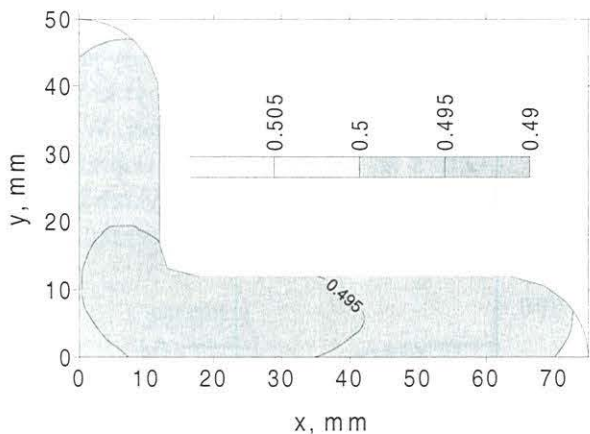
Przykładowe symulacje wykonano dla kątownika nierównoramiennego ze stali węglowo-manganowej o składzie chemicznym podanym w Tabelicy 1. Zastosowaną siatkę elementów pokazano na rysunku 8. Literami oznaczono na tym rysunku punkty, dla których prezentowane są wyniki obliczeń. W pierwszej kolejności rozważono przypadek, w którym po walcowa-





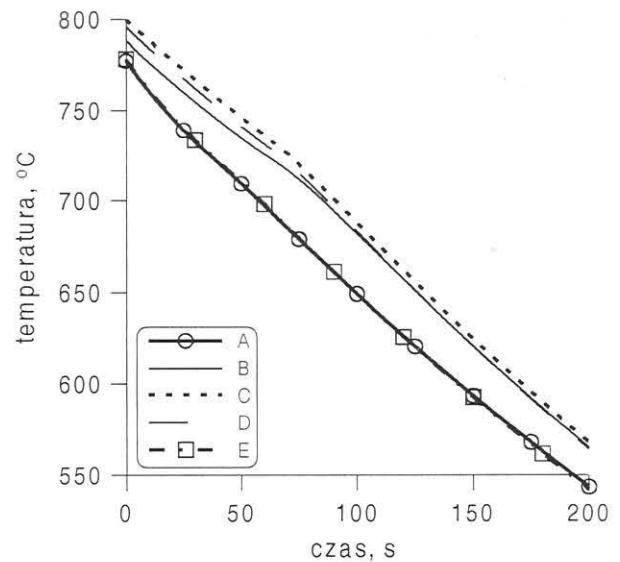
Rysunek 8. Siatka elementów dla kątownika z zaznaczonymi punktami, dla których prezentowane są wyniki obliczeń.

niu kątownik przez 10 s poddawany jest wymuszone-  
mu chłodzeniu powietrzem poruszając się z prędko-  
ścią 10 m/s, a następnie chłodzony jest na chłodni swo-  
bodnie w powietrzu. W fazie chłodzenia na chłodni  
uwzględniono wzajemny wpływ sąsiednich kształt-  
owników na obniżenie wartości współczynnika wymia-  
ny ciepła. W wyniku wolnego odprowadzania ciepła  
rozkład temperatury na przekroju kątownika był nie-  
mal równomierny i w konsekwencji na całym prze-  
kroju uzyskano strukturę składającą się po połowie z  
ferrytu i perlitu, bez innych składników strukturalnych.  
Na rysunku 9 pokazano pole rozkładu ułamka objęto-  
ści ferrytu, które jest niemal równomierne.

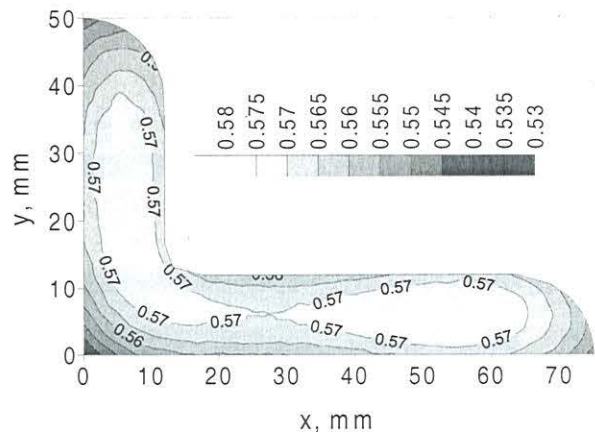


Rysunek 9. Rozkład ułamka objętości ferrytu po swobodnym chłodzeniu wielu kątowników na chłodni.

W drugiej kolejności rozważono przypadek chłod-  
zenia pojedynczego kątownika w powietrzu. Na ry-  
sunku 10 pokazano zmiany temperatury w funkcji cza-  
su w pięciu wybranych punktach na przekroju  
poprzecznym kątownika. Prędkość chłodzenia jest w  
tym przypadku znacznie większa niż przy chłodzeniu  
wielu kątowników na chłodni i w konsekwencji otrzy-  
muje się strukturę składającą się z ferrytu i bainitu z  
niewielką ilością (rzędu 2%) perlitu. Na rysunku 11  
pokazano pole rozkładu ułamka objętości bainitu w  
pojedynczym kątowniku chłodzonym swobodnie w



Rysunek 10. Zmiany temperatury w funkcji czasu w wybranych punktach na przekroju poprzecznym pojedynczego kątownika chłodzonego w powietrzu.



Rysunek 11. Rozkład ułamka objętości bainitu po swobodnym chłodzeniu pojedynczego kątownika w powietrzu.

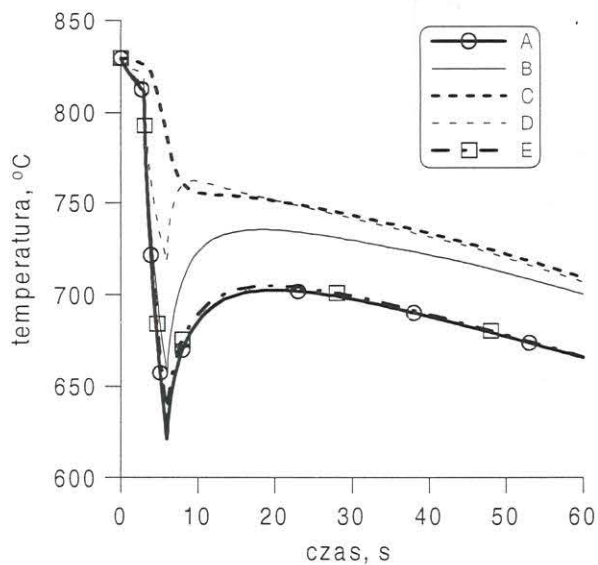
powietrzu.

Ostatnim analizowanym procesem chłodzenia był  
hipotetyczny układ składający się z 3 sekund chłod-  
zenia w powietrzu, 3 sekund chłodzenia natrykiem  
wodnym i następnie dalszego chłodzenia w powietrzu.  
Obliczone dla takiego układu zmiany temperatury w  
funkcji czasu w wybranych punktach na przekroju  
kątownika pokazano na rysunku 12. Struktura wyro-  
bu gotowego w temperaturze otoczenia składała się  
wyłącznie z ferrytu i bainitu. Na rysunku 13 pokaza-  
no pole rozkładu ułamka objętości bainitu na prze-  
kroju poprzecznym kątownika. Jak widać na tym ry-  
sunku największą zawartość bainitu obserwuje się w  
końcach ramion kątownika.

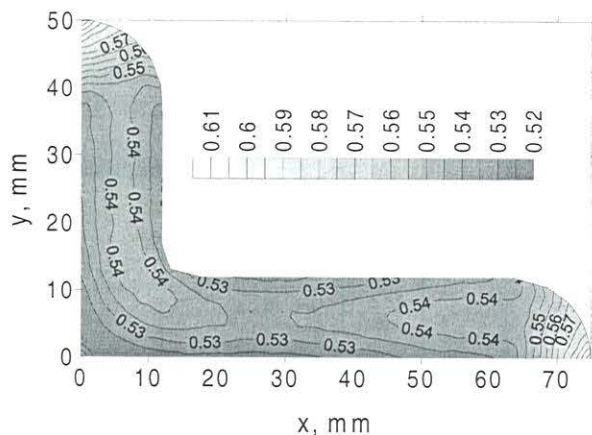
## 5.2. Pręty do betonu ze stali eutektoidalnych

Szczegółowy opis testów numerycznych wykona-  
nych dla chłodzenia prętów do betonu ze stali eutek-





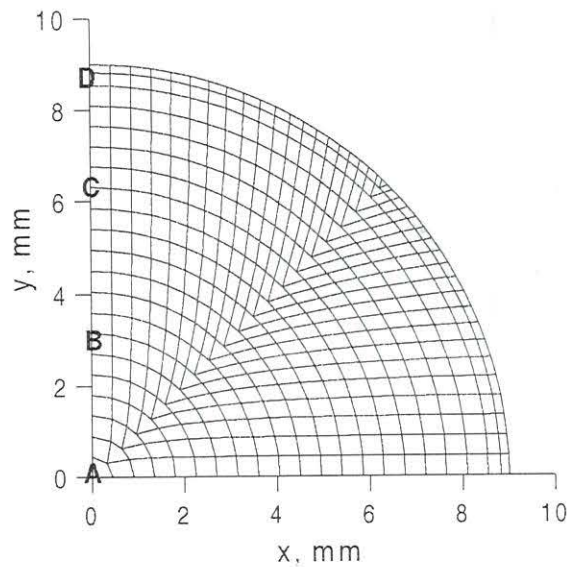
Rysunek 12. Zmiany temperatury w funkcji czasu w wybranych punktach na przekroju poprzecznym pojedynczego kątownika chłodzonego natryskiem wodnym.



Rysunek 13. Rozkład ułamka objętości bainitu po chłodzeniu pojedynczego kątownika natryskiem wodnym.

toidalnej 900Cr o składzie chemicznym podanym w Tabelicy 2 zamieszczony jest w pracy (Kuziak i Pietrzyk, 2002). Poniżej zaprezentowane są wybrane wyniki obliczeń, których celem była ocena możliwości obróbki cieplnej tych prętów w systemie TEMP-CORE. W systemie tym pręt poddawany jest krótkiemu intensywnemu chłodzeniu natryskiem wodnym pod wysokim ciśnieniem. Zadaniem systemu TEMP-CORE (Sawamiphakdi i in., 1998, Kuziak i Pietrzyk, 1999) jest szybkie schłodzenie warstwy przypowierzchniowej pręta, tak aby wydzielił się w niej bainit i martenzyt. Warstwa ta ogrzewa się następnie od cieplejszego środka pręta i następuje odpuszczenie martenzytu, co poprawia plastyczność.

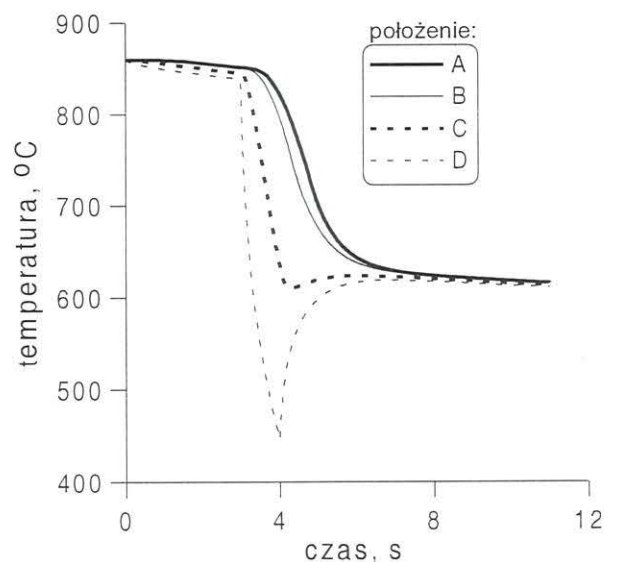
Przykładowe obliczenia wykonano dla chłodzenia pręta o średnicy 18 mm od temperatury 860°C przez 3 s w powietrzu, następnie w systemie TEMP-CORE i ponownie w powietrzu. Proces ten charakteryzuje się dużą nierównomiernością temperatury na przekroju pręta i dużymi zmianami prędkości chłodzenia w róż-



Rysunek 14. Siatka elementów dla 1/4 przekroju pręta z zaznaczonymi punktami, dla których prezentowane są wyniki.

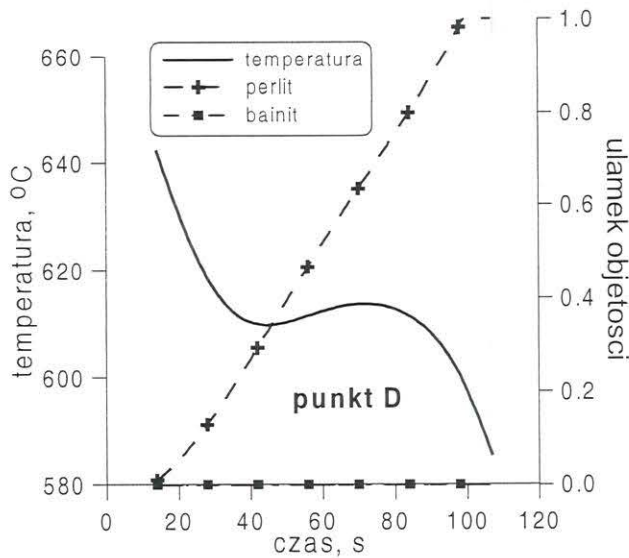
nych punktach pręta. Na rysunku 14 pokazano siatkę elementów przyjętą do obliczeń i zaznaczono punkty, w których prezentowane są wyniki obliczeń temperatury. Rozważano 1/4 przekroju pręta zakładając możliwość nierównomiernego chłodzenia na obwodzie, z dwoma osiami symetrii.

Na rysunku 15 przedstawiono wyniki obliczeń temperatury w wybranych punktach dla przyjętego wariantu chłodzenia, zakładającego przejście przez system TEMP-CORE w czasie 1 s a następnie swobodne chłodzenie w powietrzu. Temperatura powierzchni pręta spada wprawdzie poniżej temperatury początku przemiany bainitycznej, ale czas jest zbyt krótki aby ta przemiana zaszła w stali eutektoidalnej. W konsekwencji struktura na całym przekroju poprzecznym pręta składa się z perlitu, co wyjaśnia wykres kinetyki przemian strukturalnych pokazany na rysunku 16. Jak



Rysunek 15. Zmiany temperatury w czasie przejścia pręta przez system TEMP-CORE.

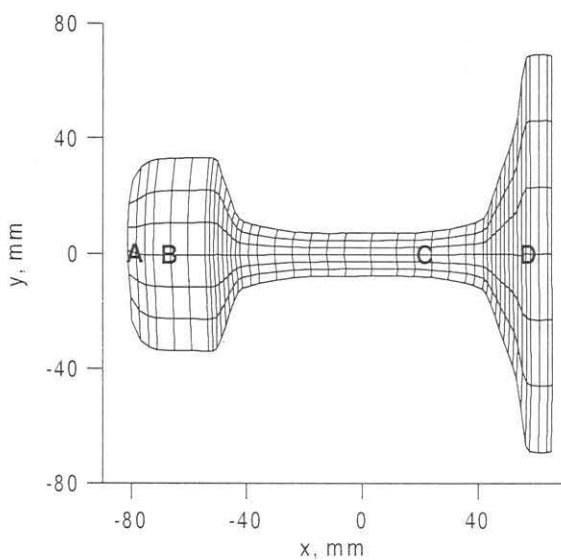




Rysunek 16. Przebieg temperatury i przemian strukturalnych przy powierzchni pręta dla przyjętego schematu chłodzenia (1 s wodą).

widać na tym rysunku przemiana perlityczna rozpoczyna się w kilka sekund po wyjściu pręta z systemu TEMPCORE.

Jak wykazano w pracy (Kuziak i Pietrzyk, 2002), wydłużenia czasu chłodzenia pręta w systemie TEMPCORE nie daje dobrych wyników. O ile w przypadku stali węglowo-manganowej czas 1,9 s w systemie TEMPCORE jest wystarczający do zainicjowania przemiany bainitycznej, a nawet martenzytycznej (Kuziak i Pietrzyk, 1999), a w tym samym czasie rdzeń pręta jest w wyższej temperaturze i w czasie dalszego chłodzenia zachodzą tam przemiany ferrytyczna i perlityczna, o tyle w stalach eutektoidalnych przemiana martenzytyczna zachodzi w niższych temperaturach, a przemiana bainityczna jest wolniejsza i rozpoczyna się dopiero w czasie etapu swobodnego chłodzenia w powietrzu po wyjściu ze strefy natrysku wodnego.



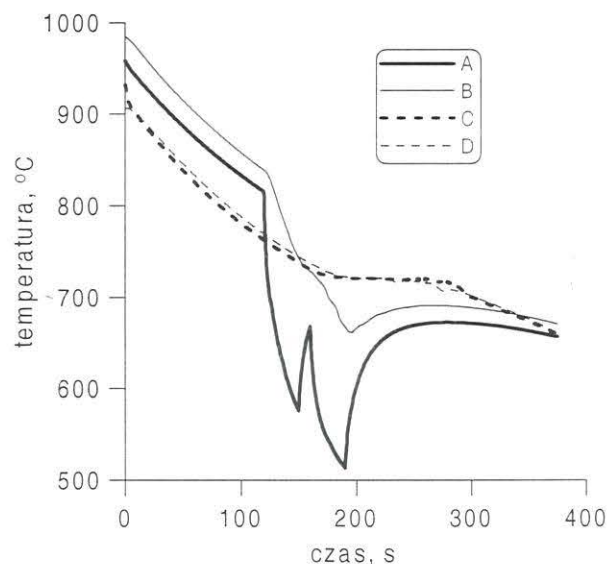
Rysunek 17. Siatka elementów na przekroju szyny z zaznaczonymi punktami, dla których prezentowane są wyniki.

Rozkład temperatury na przekroju pręta ze stali eutektoidalnej jest wtedy bardziej równomierny i przemiana zachodzi w podobnym stopniu przy powierzchni pręta i w jego rdzeniu. Wydłużenie czasu przejścia przez system TEMPCORE prowadzi do wzrostu udziału bainitu na całym przekroju poprzecznym, a nie tylko w obszarze przy powierzchni, czyli nie zostaje osiągnięty cel tej specyficznej metody obróbki cieplnej.

### 5.3. Obróbka cieplna główki szyny

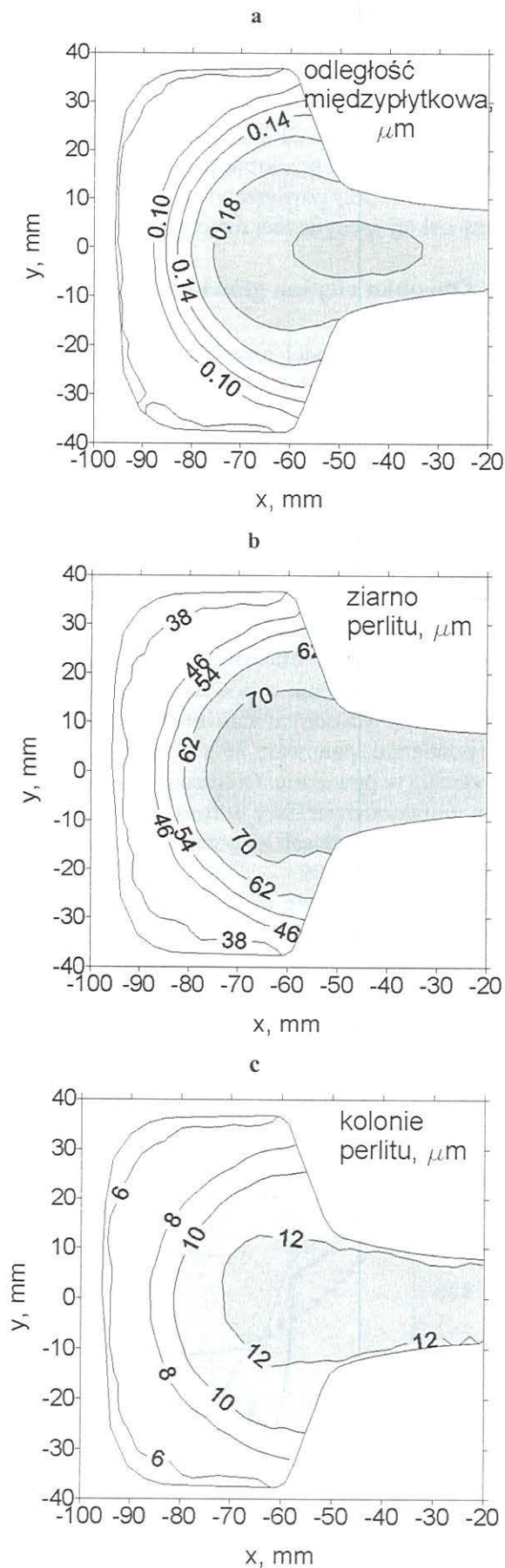
Opracowany model przemian fazowych dla stali szynowej 900A o składzie chemicznym podanym w Tabelicy 2 połączono z programem MES i zastosowano do symulacji procesu obróbki cieplnej główki szyny. Na rysunku 17 pokazano kształt analizowanej szyny z siatką elementów i z zaznaczonymi punktami, dla których prezentowane są wyniki obliczeń temperatury. Pełny zestaw symulacji różnych wariantów kontrolowanego chłodzenia główki szyny opisano w pracy (Pietrzyk i Kuziak, 2000). Poniżej przedstawiono wybrane wyniki obliczeń dla schematu obejmującego 120 s chłodzenia w powietrzu, 30 s zanurzenia główki szyny w wodnym roztworze polimerowym, 10 s w powietrzu, ponownie 30 s w roztworze i dalsze chłodzenie w powietrzu. Obliczone dla takiego schematu zmiany temperatury w funkcji czasu w wybranych czterech punktach na przekroju szyny przedstawiono na rysunku 18.

Celem tego typu analizy jest dobranie takiego schematu chłodzenia, który zagwarantuje otrzymanie powierzchni główki szyny o odpowiedniej twardości i odporności na pękanie. Efekt ten zostanie uzyskany, jeżeli struktura warstwy przypowierzchniowej zawierać będzie perlit drobnoziarnisty i możliwie niewiel-



Rysunek 18. Zmiany temperatury w czasie kontrolowanego chłodzenia główki szyny według analizowanego schematu.





Rysunek 19. Obliczone pola rozkładu parametrów mikrostruktury perlitu dla analizowanego schematu chłodzenia; a) odległość międzypłytkowa, b) wielkość ziarna perlitu, c) wielkość kolonii perlitu.

ką ilość bainitu.

Jak wykazano w pracy (Pietrzyk i Kuziak, 2000), opracowany program komputerowy umożliwia optymalizację warunków chłodzenia główki szyny w aspekcie podanego powyżej kryterium. Na rysunku 19 pokazano wyniki obliczeń parametrów charakteryzujących mikrostrukturę perlitu, a mianowicie odległości międzypłytkowej, wielkości ziarna i wielkości kolonii perlitu po opisanym powyżej schemacie chłodzenia. Do obliczeń parametrów mikrostruktury zastosowano wzory opracowane w Instytucie Metalurgii Żelaza w Gliwicach i podane w pracy (Pietrzyk i Kuziak, 2000). Ponieważ przedmiotem kontrolowanej obróbki cieplnej jest tylko główka szyny, prezentację wyników ograniczono do tej części przekroju poprzecznego. Jak widać na rysunku 19, zaproponowana obróbka cieplna główki szyny daje wymaganą drobnoziarnistą strukturę perlitu w wąskiej warstwie przy powierzchni tocznej główki. Zastosowanie cyklicznego zanurzenia główki szyny w roztworze ogranicza spadek temperatury, bo temperatura powierzchni rośnie w czasie wynurzenia, co pozwala uzyskać materiał zawierający głównie perlit, o pomijalnie małej ilości bainitu.

Niezależnie od przedstawionych powyżej możliwości programu, obejmujących przewidywanie pól rozkładu temperatury i parametrów struktury w czasie kontrolowanego chłodzenia, program został uzupełniony o równania opisujące podstawowe własności wyrobu gotowego. W przypadku stali węglowo-manganowych wykorzystano tutaj równania zaproponowane w pracy (Hodgson i Gibbs, 1992), natomiast w przypadku stali eutektoidalnych równania podane w pracach (Pietrzyk i Kuziak, 2000, Kuziak i Pietrzyk, 2002). Równania te są rozwiązywane w każdym węzle siatki, wykorzystując lokalne wartości parametrów mikrostruktury obliczone przez model przemian fazowych. Kompleksowy model pozwala zatem przewidywać także rozkłady w objętości wyrobu wielkości charakteryzujących wytrzymałość i plastyczność materiału.

## 6. WNIOSKI

W pracy przedstawiono modele przemian fazowych dla stali węglowo manganowych i stali eutektoidalnych, które opisują kinetykę przemian w warunkach zmiennych prędkości chłodzenia. Przedstawiono algorytm i program pozwalający na identyfikację współczynników w tych modelach, w oparciu o wyniki badań dylatometrycznych.

Do identyfikacji zastosowano metodę analizy odwrotnej, w której wartości współczynników modelu są wyznaczane przez poszukiwanie minimum funkcji



celu zdefiniowanej jako średni błąd kwadratowy między zmierzonymi i obliczonymi wartościami parametrów wyjściowych procesu. Przeprowadzone liczne testy numeryczne pozwoliły na wyciągnięcie następujących wniosków:

- Poszukiwanie minimum funkcji celu (16) lub (17) jest skomplikowane. Procedury optymalizacyjne utykają w minimach lokalnych, a zatem wymagana jest ciągła ingerencja użytkownika programu.
- Dobre wyniki uzyskano stosując przemiennie bezgradientowe metody optymalizacji Hooke'a-Jeevesa, Rosenbrocka i simplex. Wykonane testy nie pozwoliły na zaproponowanie jednej skutecznej procedury optymalizacyjnej. Dobór metody w różnych stadiach optymalizacji prowadzony był przypadkowo, w oparciu o wyczucie użytkownika programu
- Nie ma dowodu jednoznaczności uzyskanego rozwiązania. Można przypuszczać, że podobne wartości funkcji celu uzyskuje się dla różnych kombinacji współczynników modelu. Dlatego nie można zastosować zaproponowanej metody do wyznaczenia wartości współczynników modelu, które mają sens fizyczny, na przykład energii aktywacji. Niezależnie od tych niedociągnięć metody, pozwala ona na wyznaczenie parametrów modelu pozwalających na dokładną symulację przebiegu przemian fazowych, czyli osiągnięty został cel pracy.
- Jak wykazano w pracy, włączenie opracowanego modelu przemian fazowych z wyznaczonymi optymalnymi współczynnikami z programem MES stwarza bardzo użyteczne i skuteczne narzędzie projektowania procesów kontrolowanego chłodzenia wyrobów po plastycznej przeróbce na gorąco. Przedstawione w pracy wyniki symulacji chłodzenia kątowników ze stali węglowo-manganowych oraz prętów i szyn ze stali eutektoidalnych potwierdziły duże możliwości modelu.

Uwaga: praca wykonana w ramach działalności statutowej AGH, umowa nr. 11.11.110.436.

## LITERATURA

- Ackert, R.J., Nott, M.A., 1987, Accelerated Water Cooling of Railway Rails In-Line with the Hot Rolling Mill, *Mat. Symp. Accelerated Cooling of Rolled Steels*, ed., Ruddle, G.E., Crawley, A.F., Pergamon Press, Winnipeg, 359-372.
- Boyer, B., Massoni, E., 1999, Identification of Tribological Parameters during Upsetting Tests Using Inverse Analysis with a 2D Finite Element Code, *Proc. 6th ICTP*, Norymberga, 323-328.
- Fischer, F.D., 1992, Transformation Induced Plasticity in Triaxially Loaded Steel Specimens Subjected to a Martensitic Transformation, *Eur. J. Mech. Solids*, 11, 233-244.
- Gavrus, A., Massoni, E., Chenot, J.L., 1996, An Inverse Analysis Using a Finite Element Model for Identification of Rheological Parameters, *Mat. Konf. Metal Forming'96*, ed., Pietrzyk, M., Kusiak, J., Hartley, P., Pillinger, I., *J. Mat. Proc. Techn.*, 60, 447-454.
- Gelin, J.C., Ghouati, O., 1994, The Inverse Method for Determining Viscoplastic Properties of Aluminium Alloys, ed., P. Hartley, I. Pillinger, C.E.N. Sturgess, R. Hall, M. Pietrzyk and J. Kusiak, *Mat. Konf. Metal Forming'94*, Birmingham, *J. Mat. Proc. Techn.*, 34, 435-440.
- Gladman, T., 1997, *The Physical Metallurgy of Microalloyed Steels*, The Institute of Materials, London.
- Hodgson, P.D., Browne, K.M., Collinson, D.C., Pham, T.T., Gibbs, R.K., 1991, A Mathematical Model to Simulate the Thermomechanical Processing of Steel, *Mat. 3. Symp. Quenching and Carbonizing*, Melbourne, 139-159.
- Hodgson, P.D., Gibbs, R.K., 1992, A Mathematical Model to Predict the Mechanical Properties of Hot Rolled C-Mn and Microalloyed Steels, *ISIJ Int.* 32, 1329-1338.
- Hougardy, H.P., 1987, A Model for the Calculation of the Isothermal Transformation of Steels, *Metal. Odlew.*, 13, 389-405.
- Jones, J.A., Perlman, A.B., Orringer, O., 1998, Tailoring Heat Treatment and Composition for Production of On-Line Head-Hardened Bainitic Rail, *Mat. 39 MWSP Konf.*, Indianapolis, 1029-1036.
- Kondek, T., Pietrzyk, M., Kuziak, R., Zalecki, W., 2001, Matematyczne modelowanie procesów umacniania cieplnego profili kształtowych ze stali perlitycznych z uwzględnieniem przemian fazowych zachodzących w silnie zróżnicowanych warunkach wymiany ciepła, *Przegląd Mechaniczny*, 60, 5-9.
- Kondek, T., Głowacki, M., Pietrzyk, M., 2002, Komputerowy program do identyfikacji parametrów modeli przemian fazowych, *Mat. 9. Konf. KomPlasTech 2002*, ed., Pietrzyk, M., Kusiak, J., Grosman, F., Piela, A., Szczawnica, 127-134.
- Kondek, T., Kuziak, R., Pietrzyk, M., 2003, Identification of Parameters of Phase Transformation Models for Steels, *Steel GRIPS*, (w druku).
- Krielaart, G.P., van der Zwaag, S., 1998, Simulation of Pro-Eutectoid Ferrite Formation Using a Mixed Control Growth Model, *Mat. Sci. Eng.*, A246, 104-116.
- Kumar i in., 1995, Mathematical Model for Predicting the thermal and Mechanical Behaviour of Rebar during Quenching and Self Tempering, *Steel Res.*, 66, 476-481.
- Kusiak, J., 1995, Zastosowanie technik optymalizacyjnych w symulacji procesów plastycznej przeróbki metali, *Rozprawy Monografie* nr. 31, Wydawn. AGH, Kraków.
- Kuziak, R., Cheng, Y.-W., Głowacki, M., Pietrzyk, M., 1997, Modelling of the Microstructure and Mechanical Properties of Steels during Thermomechanical Processing, *NIST Technical Note* 1393, Boulder.
- Kuziak, R., Pietrzyk, M., 1999, Finite-Element Modelling of Accelerated Cooling of Rods after Hot Rolling, *Mat. 41. MWSP Konf.*, Baltimore, 405-413.
- Kuziak, R., Pietrzyk, M., 2000, Physical and Mathematical Simulation of Phase Transformation during Accelerated Cooling of Eutectoid Steel Rods, *Mat. 42. MWSP Konf.*, Toronto, 101-110.
- Kuziak, R., Pietrzyk, M., 2002, Modelowanie przemian fazowych i własności wyrobów ze stali eutektoidalnych chłodzonych po walcowaniu na gorąco, *Polska Metalurgia w latach 1998-2002*, *Mat. Konf. Sprawozdawczej*, ed., Świątkowski, K., Krynica, 422-430.
- Leblond, J.B., Devaux, J., Devaux, J.C., 1989, Mathematical Modelling of Transformation Plasticity, *Int. J. Plasticity*, 5, 551-572.
- Lenard, J.G., Pietrzyk, M., Cser, L., 1999, *Mathematical and Physical Simulation of the Properties of Hot Rolled Products*, Elsevier, Amsterdam.



- Liu, Z., Wang, G., Gao, W., 1996, Modelling of Phase Transformation Behaviour in Hot De-formed and Continuously Cooled C-Mn Steels, *J. Mat. Eng. Perform.*, 5, 521-525.
- Majta, J., Zurek, A.K., Pietrzyk, M., 1999, Modelling of Developing Inhomogeneities in the Ferrite Microstructure and Resulting Mechanical Properties Induced by Deformation in the Two-Phase Region, *Mat. Konf. Recrystallization'99*, ed., Sakai, T., Suzuki, H.G., 691-696.
- Malinowski, Z., Lenard, J.G., Davies, M.E., 1994, A Study of Heat Transfer Coefficient as a Function of Temperature and Pressure, *J. Mat. Proc. Techn.*, 41, 125-142.
- Malinowski, Z., Kuziak, J., Pietrzyk, M., 1995, Application of the Inverse Techniques to the Experimental Tests, *Mat. Konf. Application of Mathematical Methods in Science and Technique*, Kraków, vol. 1, 43-53.
- Mitsoulis, E., 2002, Determination of Elongational Viscosity in a Spin-Line Rheometer by Inverse Analysis, *Mat. Konf. ESAFORM 5 on Material Forming*, eds, Pietrzyk, M., Mitura, Z., Kaczmar, J., Kraków, 179-182.
- Morales, R.D., Lopez, A.G., Olivares, I.M., 1990, Heat Transfer Analysis during Water Spray Cooling of Steel Rods, *ISIJ Int.*, 30, 48-57.
- Nelder, J.A., Mead, R., 1965, A Simplex Method for Function Minimization, *Comp. Jour.*, 7, 308-313.
- Pietrzyk, M., Kędzierski, Z., Lenard, J.G., 1998, Inverse Analysis Applied to the Evaluation of Rheological and Microstructural Parameters in Hot Forming of Steels, *Mat. Konf. NUMIFORM'98*, ed., Hueting, J., Baaijens, F.P.T., Enschede, 163-168.
- Pietrzyk, M., Kuziak, R., 1999, Coupling the Thermal-Mechanical Finite-Element Approach with Phase Transformation Model for Low Carbon Steels, *Mat. Konf. ESAFORM 2 on Material Forming*, ed., Covas, J., Guimaraes, 525-528.
- Pietrzyk, M., Kuziak, R., 2000, Modeling of Controlled Cooling of Rails after Hot Rolling, *Mat. Konf. Rolling 2000*, Vasteros, CD ROM.
- Pietrzyk, M., Kondek, T., Majta, J., Zurek, A.K., 2000, Method of Identification of the Phase Transformation Model for Steels, *Mat. COM 2000*, Ottawa, CD ROM.
- Rońda, J., Oliver, G.J., 1996, Consistent Thermo-Mechanical-Metallurgical Model of Welded Steel with Unified Approach to Derivation of Phase Evolution Laws and Transformation Induced Plasticity, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 189, 361-417.
- Sawamiphakdi, K., Damm, E.B., Ives, J.E., Shivpouri, R., Pauskar, P., 1998, Computer Modelling of Hot Bar Rolling at the Timken Company, *Mat. Konf. STEEL ROLLING'98*, Chiba, 557-562.
- Staniszewski, B., 1980, *Wymiana ciepła, podstawy teoretyczne*, PWN, Warszawa.
- Suehiro, M., Senuma, T., Yada, H., Sato, K., 1992, Application of Mathematical Model for Predicting Microstructural Evolution to High Carbon Steels, *ISIJ Int.*, 32, 433-439.
- Szyndler, D., 2001, *Problem odwrotny w zastosowaniu do identyfikacji parametrów procesów plastycznej przeróbki metali*, Praca doktorska, AGH, Kraków.
- Szyndler, D., Pietrzyk, M., Kuziak, R., 2001, Estimation of Rheological and Friction Parameters in Hot Forming Processes as an Inverse Problem, *Mat. Konf. ESAFORM 4 on Material Forming*, Liege, ed., Habraken, A.M., 191-194.
- Szyndler, D., Pietrzyk, M., Hodgson, P.D., 2001, Identification of Parameters in the Internal Variable Constitutive Model and Friction Model for Hot Forming of Steels, *Mat. Konf. NUMIFORM 2001*, ed., Mori, K., Publ. A. Balkema, Toyohashi, 297-302.
- Tamura, I., Ouchi, C., Tanaka, T., Sekine, H., 1988, *Thermomechanical Processing of High Strength Low Alloy Steels*, Butterworth, London.
- Umamoto, M., 1990, Mathematical Model of Phase Transformation from Work-Hardened Austenite, *Mat. Symp. Math. Mod. of Hot Rolling of Steel*, ed., Yue, S., Hamilton, 404-422.
- Umamoto, M., Hiramatsu, A., Moriya, A., Watanabe, T., Nanba, S., Nakajima, N., Anan, G., Higo, Y., 1992, Computer Modelling of Phase Transformation from Work-Hardened Austenite, *ISIJ Int.*, 32, 306-315.

Artykuł otrzymano 30 sierpnia 2002 r.