

MUCSI ANDRÁS

Átalakulási folyamatok modellezése új módszerrel

A fémipari gyártástechnológiák szerves és rendszerint nélkülözhetetlen része a különböző anyagszerkezeti változásokat előidéző hőkezelés. Egy adott technológiával elvégzett hőkezelés nagymértékben befolyásolja a termék anyagjellemzőit, melyek rendszerint a gyártmány legfontosabb tulajdonságai közé tartoznak. A gyártási folyamat optimalizálása megköveteli a hőkezelések életszerű modellezését is.

1. Bevezetés

Termikusan aktivált fémtani folyamatoknak nevezzük azokat a szövetszerkezeti változásokat, melyek sebessége a hőmérséklet változásával változik. Ilyen szövetszerkezeti változások közé tartozik az újrakristályosodás, a martenzit megeresztése, a mikroszerkezet homogenitását célzó difúziós izzítások és egyes kiválási folyamatok. Az átalakulási folyamatok vizsgálhatóak állandó, illetve változó hőkezelési hőmérséklet mellett. Az átalakulási folyamatok állandó hőmérsékletű hőkezelések esetén leírhatók analitikus formában a közismert Avrami- (1) illetve Arrhenius-egyenletek (2) segítségével [3, 4, 6]:

$$x = 1 - e^{-k \cdot t^n} \quad (1)$$

$$k = A \cdot e^{-\frac{Q}{R \cdot T}}, \quad (2)$$

ahol x - az átalakult hányad értéke;
 k - a folyamat sebességi állandója;
 t - az idő (s);
 n - az Avrami-kitevő;
 A - az ún. frekvencia faktor;
 Q - a folyamat aktiválási energiája

$$\left(\frac{\text{J}}{\text{mol}}\right);$$

R - az univerzális gázállandó $\left(\frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}\right)$;
 T - a hőmérséklet (K).

Az izotermikus körülményekre vonatkozó egyenletek numerikus módszerekkel átszámolhatók változó hőmérsékletű hőkezelések leírásához [1].

Ahhoz, hogy egy folyamatot az előbb megismert egyenletek segítségével leírjunk, ismerni kell a képletekben szereplő ismeretlenek (n , Q , A) számszerű értékét. Az Avrami- ill. az Arrhenius-egyenlet analitikus formában izotermikus körülmények mellett érvényes, ezért a paraméterek meghatározását rendszerint valamilyen kvázi izotermikusnak vélt kísérlet sorozat eredményeiből határozzák meg.

Ezen hőkezelések során a hőmérséklet állandóságát szinte lehetetlen biztosítani, azaz az ilyen mérések segítségével meghatározott Avrami- és Arrhenius-egyenletek meglehetősen nagy hibával írják le az átalakulási folyamatot. Felmerül tehát a kérdés, hogy vajon lehetséges-e valamilyen módszerrel figyelembe venni a hőmérséklet változásának hatását az egyenlet paramétereire.

2. Változó hőmérsékletű hőkezelések leírása izotermikus egyenletek segítségével

Az új módszer bemutatásához először meg kell ismernünk, hogyan lehet az izotermikus egyenleteket folyamatosan változó hőmérsékletű hőkezelések leírásához fel-

használni. A folyamatok modellezése változó hőmérsékletű hőkezelések esetén a 1. ábra szerinti módszerrel válik lehetővé [1]. A vízszintes tengelyen az időt, a függőleges tengelyen az átalakult hányadot ábrázoljuk.

Tegyük fel, hogy egy tetszőlegesen kis időintervallumon belül (Δt) a változó hőmérsékletet konstansnak tekintjük, ekkor a T_1 hőmérsékletre tartozó Avrami-görbén 0-tól t_1 ideig az (1) egyenlet segítségével kiszámíthatjuk az átalakult hányadot (x_1). Ezután a következő rövid intervallumon megint állandónak tekintjük az előzőhöz képest megváltozott hőmérsékletet (T_2), és kiszámítjuk, hogy ezen a hőmérsékleten mennyi (fiktív) időnek (t_2) kellett volna eltelnie ahhoz, hogy éppen x_1 legyen az átalakult hányad. A T_2 hőmérsékletre tartozó görbén megint Δt ideig haladva az $x_2 - x_1$ átalakult hányadot a következőképpen számíthatjuk:

$$x_{2-1} = e^{-k_2 \cdot t_2^n} - e^{-k_2 \cdot (t_2 + \Delta t)^n} \quad (3)$$

Ennek segítségével felírhatjuk a T_2 hőmérsékleten átalakult hányadot:

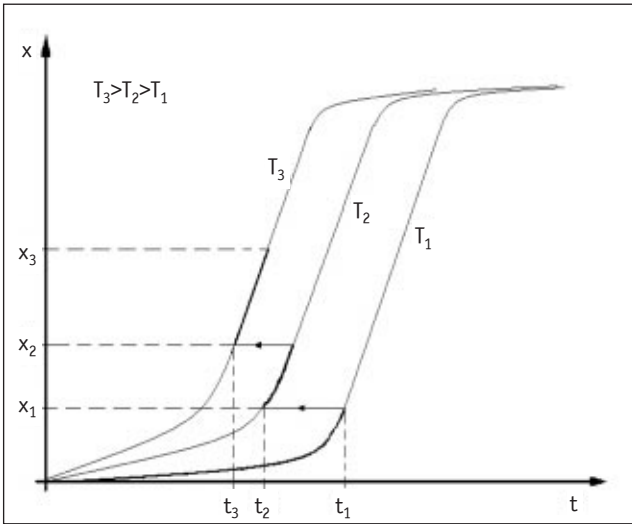
$$x_2 = x_1 + x_{2-1} \quad (4)$$

Az így kiszámolt x_2 átalakult hányad segítségével kiszámíthatjuk a T_3 hőmérsékletre tartozó k_3 sebességi állandót és t_3 időt. A ciklus az eddig leírtak szerint ismétlődik tovább. A következőkben ugyanezt a módszert alkalmazzuk visszafelé, tehát tetszőlegesen változó hőmérsékletű hőkezelésekből állapítjuk meg az izotermikus egyenletek paramétereit.

3. Az izotermikus egyenletek generálása tetszőlegesen változó hőmérsékletű mérésekből

A most bemutatásra kerülő számítási módszer segítségével tetszőlegesen változó hőmérsékletű hőkezelések eredményeiből

Mucsi András a Budapesti Műszaki Főiskola gépészmérnök szakos, CAD-CAM szakirányos hallgatója. A téma 2007 nyarán keltette fel érdeklődését, és azóta foglalkozik az átalakulási folyamatok modellezésével. Az itt leírt összefoglaló, mint TDK dolgozat, sikeresen szerepelt mind a 2008-as intézményen belüli, mind a 2009-es Országos Tudományos Diákköri Konferencián.



■ 1. ábra. Átalakulási folyamat modellezése változó hőmérséklet esetén

viszsa lehet számolni az izotermikus körülményekre vonatkozó egyenleteket. Ezzel kizárjuk a hőmérséklet változásából, ill. a hőmérséklet- és időmérésből származó hibát.

A módszer lényege a következő. Tetszőleges hőcikluson át hőkezelünk próbatestet, regisztráljuk a próbatestek hőmérsékletét az idő függvényében, majd a hőkezelés végén lemérjük a próbatestek átalakult hányad értékét. Az átalakult hányadot kiszámíthatjuk a próbatest keménységváltozásából, szövetszerkezeti és egyéb változásaiból. Felvesszünk (szintén tetszőlegesen) egy n , Q és A értéket. A felvett egyenlet-paraméterek és egy kiválasztott hőkezelés hőmérséklet-idő regisztrátuma alapján a fent leírt módszer segítségével kiszámolunk egy átalakult hányad értékét. Képezzük az adott hőkezelésű próbatest számolt és mért átalakult hányad értéke közti különbséget, majd numerikus módszerrel megkeressük ezek minimumát:

$$\min\{\sum[x_{\text{mért}} - x_{\text{számított}}(n, Q, a, b)]^2\} \quad (5)$$

Amelyik n , Q és A értéknél a legkisebb lesz a mért és a számított átalakult hányad közti különbség, azt az adott n , Q és A értéket tulajdonítjuk az izotermikus egyenletek paramétereinek. Itt kell megjegyeznünk, hogy a konvencionális Avrami-modellben az n kitevő értéke a csíráképződés geometriájától függ [5], ezért gyakran anyagminőségtől függetlenül egy egzakt értéket tulajdonítanak neki. A mi esetünkben a pontos folyamatleírás a cél, ezért az n kitevőt minden egyes anyagminőség esetén változóként tekintjük. A módszer részle-

tesebb bemutatására az újrakristályosító hőkezelés modellezésén keresztül a következőkben kerül sor.

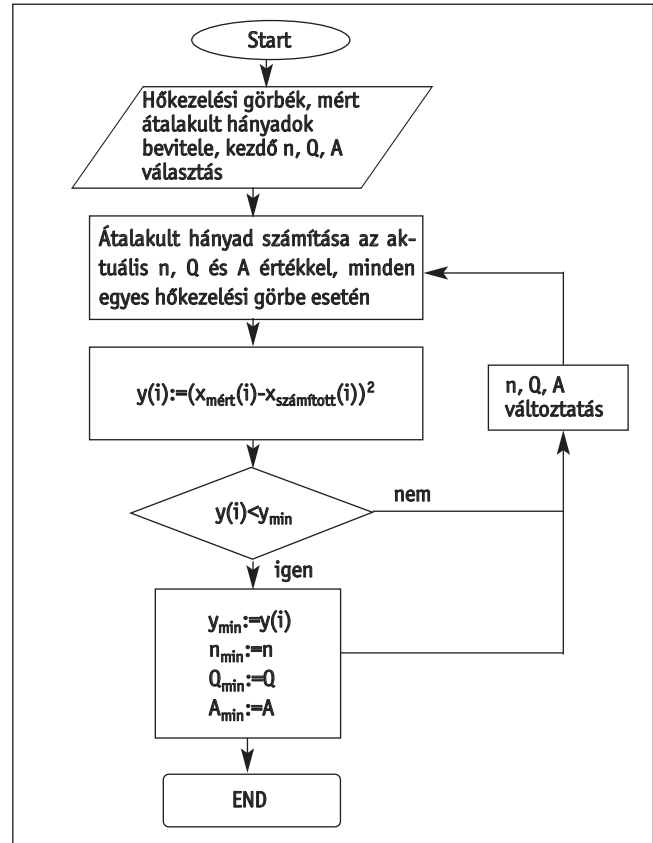
4. A módszer alkalmazása újrakristályosítási kísérlet-sorozatára

A módszer alkalmazhatóságának bizonyítására újrakristályosító hőkezeléseket végeztem. A kísérletekhez kisméretű, szilag előgyártmányból kimunkált próbatesteket tetszőlegesen változó hőmérsékleten hőkezelttem. A hőkezelések végén az átalakult hányad értékét (x) keménységméréssel állapítottam meg, és a következő közeli képlettel számítottam [2, 3, 6]:

$$x = \frac{HV_{\text{max}} - HV_t}{HV_{\text{max}} - HV_{\text{min}}} \quad (6)$$

ahol HV_{max} - a hidegalakítás utáni mért keménység;
 HV_{min} - a lágyított állapotban mért keménység;
 HV_t - a hőkezelési ciklus végén mért keménység.

Ha a keménység a hőkezelés végén lecsökkent az anyag minimális keménységének értékére, akkor nem tudhatjuk, hogy a hőkezelés melyik pillanatában lágyult ki a próbatest, így ezzel az adattal nem számolhatunk. A határt 95% átalakult hányad értékre tettem, azaz amelyik hőkezelés végén ennél nagyobb átalakult hányadot



■ 2. ábra. Folyamatábra optimumkereséshez

számítottam a keménység értékéből, azzal a hőkezelési adathalmazzal nem számoltam tovább.

A hőmérsékletmérést termoelemes hőmérővel, a hőmérséklet-idő függvények ($T-t$) számítógépre vitelét DATAQ szoftverrel és A/D átalakító segítségével valósítottam meg. A termoelemek végét közvetlenül a próbatestekhez csatlakoztam, így mindig az aktuális hőmérsékletet regisztráltam, ill. minimálisra csökkentettem a próbatestek és a termoelem hőkapacitásából származó hőmérséklet eltéréseket.

A próbatestek alakítotttsági mértéke csoportonként változó volt. Számszerű

értékei, mint relatív megnyúlás ($\epsilon = \frac{\Delta l}{l_0}$),

a következők voltak: $\epsilon_1=0,17$, $\epsilon_2=0,25$, $\epsilon_3=0,3$ és $\epsilon_4=0,4$. Minden alakítási mértékhez 8-13 próbatest tartozott. Az újrakristályosító hőkezeléseket öt anyagminőség (technikai tisztaságú Al, Cu, Fe, Ni, Ti) alkalmazásával végeztem. A fent leírtak szerint minden hőkezelés végén lemértem a próbatestek keménységét, a keménység értékeiből a már említett módszerrel kiszámítottam az újrakristályosított hányad értékét. A kísérletek adatait QBasic

nyelven írt programmal dolgoztam fel. Az hibaminimum keresése a 2. ábra szerint történt a következőkben leírtak alapján.

A hőkezelési görbék idő-hőmérséklet adatpárjait és a mért átalakult hányad értékeket DAT fájlokban tároltam. A hibaminimum kereséshez fel kell vennünk egy kiinduló n , Q és A értéket. Az eddigi eredmények, ill. szakirodalmak [2, 4, 5] alapján a következő intervallumokban kerestem a mért és számított átalakult hányad értékek közti különbség minimumát: $n=1...4$, $Q=(10\ 000...200\ 000)\text{ Jmol}^{-1}$, $A=0.01...3$. A megadott intervallumokat csak akkor lehet alkalmazni, ha az adott próbatestek alakítási mértéke azonos.

A különböző alakítási mértékű, de ugyanazon anyagminőségű próbatestek adatait futtatva észrevehetjük, hogy azonos n és Q értéknél, de különböző A paraméter mellett ad minimumot az (5) függvény. Ebből arra következtethetünk, hogy az alakítás mértékének hatása az A , ún. frekvenciafaktorban jelenik meg. Az alakítási mérték nagymértékben befolyásolja a folyamat sebességét, így hamis eredményhez vezet, ha különböző alakítottaságú próbatestek átalakulását próbáljuk meg leírni ugyanazon paraméterek alkalmazásával.

Ahhoz, hogy a különböző alakítottaságú próbatestek adatait együtt kezeljük, az A egyenletparamétert az alakítás mértékének függvényeként kell felírunk, és ennek a függvénynek a konstansait kell futtatni adott határok között, majd amikor a program az adott alakítási mérték alkalmazásához ér, akkor kell újraszámoltatni az A értékét. Az A frekvenciafaktor értékét az alakítás mértékének (ε) függvényeként fejezhetjük ki, például a következő függvénnyel:

$$A = a \cdot (1 + \varepsilon)^b \quad (7)$$

Ebben az esetben az optimumkeresés a következő paraméterek alkalmazásával történhet: $n=1...4$, $Q=(10\ 000...200\ 000)\text{ Jmol}^{-1}$, $a=0.1...1,5$, $b=0,1...2$. A programfutás során, ha az adott alakítási mértékhez ér a program, akkor az A értékét az aktuális a , b és ε értékeknek megfelelően helyettesíti a számítási módszerbe. Ekkor az optimumkeresés összegzett képlete a következő:

$$\min\{\sum [x_{\text{mért}} - x_{\text{számított}}(n, Q, a, b)]^2\} \quad (8)$$

Ha más, termikusan aktivált folyamatot

vizsgálunk, akkor is alkalmazhatjuk az előbb említetteteket. Ha egy adott termikusan aktivált folyamat sebessége nem teljes mértékben az elméleti Arrhenius-egyenlet szerint függ a hőmérséklettől, akkor alkalmazhatjuk a következő formulát is:

$$k = A \cdot T^\alpha \cdot e^{-\frac{Q}{R \cdot T}} \quad (9)$$

ahol T^α – korrekciós tényező, melyben
 T – hőmérséklet (K);
 α – konstans.

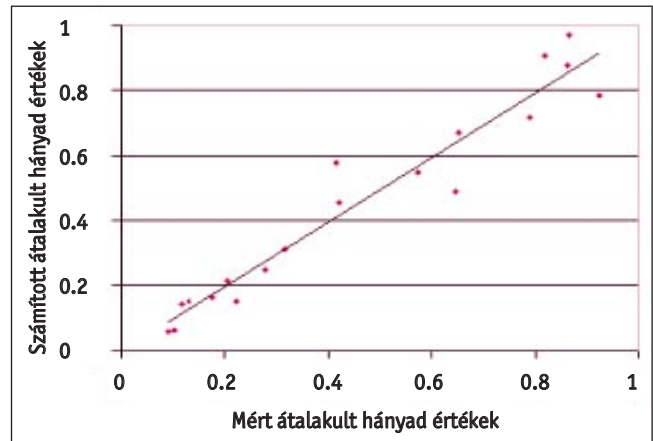
5. Számítási eredmények

Az optimumkeresések eredményeképp megkaptuk a kísérleti anyagok átalakulási függvényeit, de nem minden anyagminőség esetében kaptam megbízható eredményt. Ez abból adódik, hogy az optimumkeresés csak megfelelő számú mérés esetén ad konkrét eredményt. Ha kevés mérési adatunk van, akkor többféle n , Q és A kombináció esetén találunk minimumot, így nem tudjuk eldönteni, melyik az a paraméter kombináció, amely ténylegesen jellemzi a folyamatot. Nikkel és titán anyagminőségek adatainak futtatásakor jelentkezett ez a probléma. A 3. ábra a réz próbatestek mérési és számítási adatainak korrelációját szemlélteti.

Összefüggést véltem felfedezni a kísérleti anyagok rekrisztallizációs aktiválási energiái és az olvadáspontjuk között. A 4. ábra szerint az aktiválási energia az olvadáspont monoton növekvő függvénye.

Az Avrami-kitevő (n) anyagtól ill. technológiától való esetleges függését további kísérletek elvégzésével lehet megállapítani.

A kiszámított izotermikus egyenletek felhasználásával modellezhető a



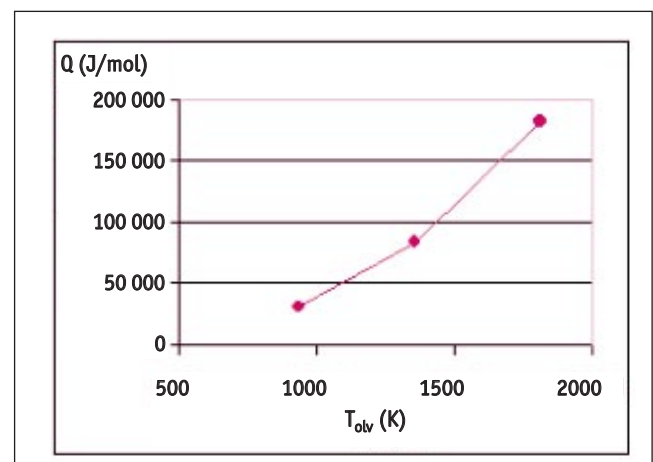
3. ábra. Korreláció a mért és a számított átalakult hányad értékek között

változó hőmérsékletű hőkezelések. Erre mutat példát az 5. ábra. Az ábra egy alkaterész adott pontjának hőmérsékletét és az átalakult hányad értékét mutatja az idő függvényében. Megfigyelhetjük, hogy ahol a hőmérséklet alacsony, ott az átalakulás sebessége lelassul.

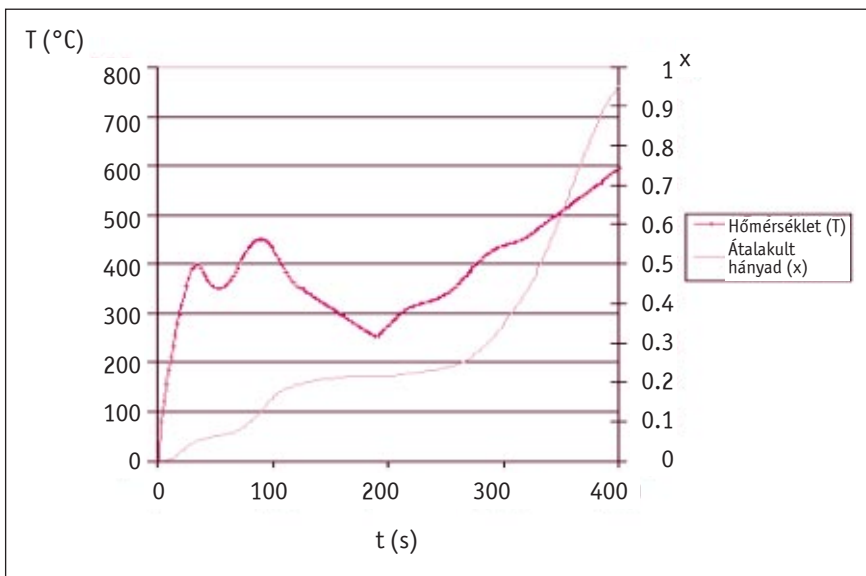
6. Összefoglalás

Az eddigi kutatási eredmények igazolták, hogy az izotermikus egyenletek átszámolhatóak folyamatosan változó folyamatok leírására; most pedig bizonyítottá vált az a feltételezés, hogy ez fordítva is igaz, azaz időben változó sebességű átalakulásokból származtathatók izotermikus egyenletek.

A bemutatott módszer alkalmas természetesen változó hőmérsékletű átalakulási folyamatok izotermikus körülményekre vonatkozó egyenleteinek meghatározására. A módszer hátránya, hogy



4. ábra. A kísérleti fémek aktiválási energiája az olvadáspontjuk függvényében



■ 5. ábra. Változó hőmérsékletű hőkezelés hőmérséklete és átalakulási görbéje

megbízható eredményt legalább 10-12 mérési adathalmaz számítógépes optimumkeresésével kaphatunk. A kifejlesztett módszer előnye, hogy kizárjuk a hőmérséklet előre nehezen számszerűsíthető változásából adódó számítási hibákat.

Az ipari megvalósítás folyamatkövető célprocesszorok alkalmazásában rejlik. A

célprocesszor bemeneti adatai az adott anyagminőség tulajdonságai, hőkezelés előtti állapota és a hőkezelés megkezdése után a darab pillanatnyi hőmérséklete. A célprocesszorok segítségével ismertté válik az átalakulási folyamat jelenlegi állapota, bárhogyan is változik a hőmérséklet.

Irodalom

- [1] Gergely M.: Az austenit izotermás és folyamatos lehűlés közben végbemenő átalakulásai közötti összefüggések. BKL Kohászat, 104. évf., 1971. 7. sz., p. 309-313.
- [2] P. N. Kalu – D. R. Warybo: A JMAK-Microhardness Model for Quantifying the Kinetics of Restoration Mechanisms in Inhomogeneous Microstructure, Acta Materialia, 2007, Vol. A 464, p. 68-75.
- [3] M. Réger – S. Takács – T. Réti: Modellierung der Rekristallisationskinetik von Weichstahl. IV. Konferenz „Metallkundliche Probleme der Werkstoffentwicklung“, Freiberg, 13. bis 15. September 1989., p. 153-168.
- [4] E. Woldt: New Kinetic Model for Primary Recrystallization of Pure Metals. Metallurgical and Materials Transactions, October 2001., Vol. 32A, p. 2465-2473.
- [5] A. G. Guy: Fémfizika. Műszaki Könyvkiadó, Bp., 1978.
- [6] G. Benchabane – Z. Boumerzoug – I. Thibon – T. Gloriant: Recrystallisation of pure copper investigated by calorimetry and microhardness. Materials Characterisation, 2008, Vol. 59, p. 1425-1428.

Az Európai Akadémiák Tudományos Tanácsadó Testületének Memoranduma az újonnan megválasztott európai parlamenti képviselők és biztosok számára

Az Európai Akadémiák Tudományos Tanácsadó Testülete (European Academies Science Advisory Council, EASAC) legutóbbi ülésén memorandumot bocsátott ki az újonnan megválasztott EP képviselők számára. A magas rangú tudományos testület szerint a jelenlegi gazdasági válság kihívásainak megoldásában alapvető fontosságú az európai tudományos kutatási eredmények felhasználása. A memorandum szerint kiemelkedő fontosságúak a környezetvédelem, az energia- és élelmiszerbiztonság, továbbá az egészségügy problémái, melyek megoldásában az EASAC segíteni kívánja az Európai Parlament, ill. az Európai Bizottság illetékes testületeit.

A bányászat és kohászat mind a környezetvédelem, mind az energiaellátás és felhasználás (valamint az ezzel szorosan összefüggő klímavédelem) ügyében erősen érintett, és vállalja az ezzel összefüggő felelősséget. Ennek megfelelően az MTA Metallurgiai Bizottsága már korábban felajánlotta

szakmai segítségét az MTA illetékes vezetőknek. Az alábbiakban közöljük a címben említett memorandum szakmaink szempontjából fontos részeit.

Napjaink gazdasági klímája egyszerre teremt feszültségeket és lehetőségeket. Legfőképpen arra kínál lehetőséget, hogy az EU drámaian és gyökeresen átalakítsa gazdasági rendszerét, valamint hogy bizalmat keltsen hosszú távú céljai iránt. Minden hiteles válságkezelő tervzetnek kötelezően számolnia kell tudományos, technológiai, fenntarthatósági és alacsony szén-dioxid-kibocsátási szempontokkal. Azon kell lennie, hogy Európa fejlett tudományos kutatóbázisa teljes mértékben hozzájárulhasson Európa jövőbeli prosperitásához, és egyúttal a globális kihívások kezeléséhez is. A jelenleg még meglévő korlátok lebontásával új, valóban multidiszciplináris és nemzetközi munkamódszereket kell ösztönöznie, és össze kell hangolnia az alap- és alkalmazott kutatásokat. Ilyen kutatásokból merítve kell

azután erőteljes és megalapozott politikai tervzeteket javasolnia minden olyan, a régiót – és valójában az egész világot – érintő sorsdöntő kihívás kezelése tekintetében, mint amilyen egyebek között az éghajlatváltozás, az élelmiszer- és energiabiztonság, az emberi egészség, a környezeti kihívások.

Létfonosságú, hogy az európai döntések szilárd bizonyítékokon alapuljanak, valamint hogy az Európai Bizottság és a Miniszterek Tanácsa rendszeresen és következetesen vegyen igénybe független szakértői véleményeket a széles hatókörű tervzetek előkészítési szakaszában, vegye napirendre a döntéshozatali tevékenység politikai megalapozását és erősítse meg az általános végrehajtási folyamatot. Az EASAC, mint a nemzeti tudományos akadémiák legfejlettebb természet- és társadalomtudományi kutatóbázisait képviselő szervezet, helyzeténél fogva kiválóan alkalmas arra, hogy független, reprezentatív és hiteles ajánlásaival tu-

(folytatás a 10. oldalon)