

## Wstęp

Rozwijająca się technika komputerowa i wzrost mocy obliczeniowej komputerów stworzyły niezwykle korzystne warunki zarówno do modelowania procesów technologicznych, jak i do wspomaganego sterowania nimi przez dobór pożądanych (optymalnych) wartości wybranych parametrów tych procesów metodami obliczeniowymi. Komputerowe modelowanie procesów technologicznych jest aktualnie tanim i efektywnym sposobem optymalizacji na przykład składu chemicznego stali, a także doboru takich wartości parametrów technologicznych procesu, które zapewnią uzyskanie pożądanych własności fizycznych stali przy możliwie niskich kosztach wytwarzania.

W obliczeniach inżynierskich szczególne zastosowania znajdują metody numeryczne, pozwalające obliczyć wartości wybranych parametrów z zakładaną dokładnością w przypadku, gdy brak jest analitycznego opisu procesu ze względu na jego złożoność. Metody numeryczne stanowią współcześnie wydzieloną, obszerną dziedzinę badań naukowych, a ich opisy i przykłady zastosowań prezentowane są w szeregu monografiach. W niniejszej pracy znajdują zastosowanie wybrane metody numeryczne, które okazały się szczególnie użyteczne w obliczeniach parametrów procesów obróbki cieplnej. Do tych metod w pierwszej kolejności zaliczyć należy metody rozwiązywania układów równań liniowych i równań nieliniowych, numeryczne obliczanie całek oznaczonych, metody rozwiązywania równań różniczkowych, a także metody analizy regresji wielomianowej. Szereg eksperymentalnych danych wykorzystywanych w obliczeniach pozyskiwano z wykresów. Zastosowanie tych danych w obliczeniach wymagało stworzenia ich matematycznej reprezentacji. W tym celu najczęściej wykorzystywano aproksymację wielomianową. Matematyczny opis danych prezentowanych w postaci wykresów ułatwiają profesjonalne programy komputerowe, takie jak MS Excel, Statistica czy Statgraphics. Należy tu zaznaczyć, że uzyskane z aproksymacji wielomianowej równania mają zastosowanie do obliczania wartości danych tylko w takim zakresie zmiennych niezależnych, w jakim dokonano aproksymacji, ponieważ próba ekstrapolacji ich poza zbadany obszar może prowadzić do błędnych wyników będących skutkiem własności funkcji wielomianowej.

Do przewidywania składu strukturalnego stali po obróbce cieplnej, w zależności od jej warunków, są wykorzystywane wykresy równowagi fazowej oraz – przy

szybkich zmianach temperatury – wykresy kinetyki przemian przechłodzonego austenitu – wykresy CTP<sub>c</sub> lub CTP<sub>i</sub>. Obliczanie wykresów równowagi fazowej jest związane z rozwiązywaniem układów równań nieliniowych. Taką bowiem postać mają równania opisujące energię swobodną faz występujących w stali. Z kolei przy obliczaniu kinetyki rozpadu przechłodzonego austenitu istotną rolę odgrywa znajomość pola temperatury w obrabianym cieplnie przedmiocie. Informację o polu temperatury można uzyskać z rozwiązania równania różniczkowego, którym jest równanie przewodnictwa cieplnego. Dla przedmiotów o prostych kształtach i dla nieskomplikowanych warunków chłodzenia istnieją rozwiązania analityczne. Natomiast w innych przypadkach informacje o polu temperatury w czasie chłodzenia uzyskuje się przy zastosowaniu metod numerycznych rozwiązywania równań różniczkowych, takich jak metoda elementów skończonych (MES), metoda elementów brzegowych (MEB), czy metoda różnic skończonych (MRS). Metoda MRS bywa rzadziej stosowana niż pozostałe ze względu na trudności z zapewnieniem stabilności rozwiązania numerycznego. Jej niewątpliwą zaletą jest prosty model fizyczny, a przy zapewnieniu odpowiednich warunków obliczeń można otrzymać stabilne rozwiązania.

W niniejszej pracy w rozdziałach 1 i 2 przedstawiono sposób numerycznego obliczania wykresów równowagi fazowej dla stopów dwuskładnikowych, ze szczególnym uwzględnieniem układu Fe-Fe<sub>3</sub>C, odgrywającego ważną rolę w procesach obróbki cieplnej stopów żelaza.

Rozdział 3 jest poświęcony obliczeniom warunków równowagi termodynamicznej w stalach mikrostopowych, w układzie wieloskładnikowym Fe-Ti-Nb-V-Al-C-N przy zawartościach mikroelementów (Ti, Nb, V, Al) nieprzekraczających sumarycznie 0,5% masowych.

W rozdziale 4 przedstawiono metodykę obliczania pola temperatury podczas procesów obróbki cieplnej za pomocą analitycznych i numerycznych metod rozwiązywania równania przewodnictwa cieplnego. Zmiany pola temperatury warunkują, powstającą w wyniku rozpadu przechłodzonego austenitu, mikrostrukturę i własności mechaniczne stali po obróbce cieplnej. Analiza zmian pola temperatury została połączona z półempirycznym modelem obliczenia wykresu CTP i obliczania składu strukturalnego powstającej mikrostruktury (rozd. 5).

Rozdział 6 zawiera wprowadzenie do metody pola fazowego obliczania powstającej podczas przemian fazowych mikrostruktury, ilustrowane przykładem analizy krzepnięcia dendrytycznego w stopie Ni-Cu.

W rozdziale 7 przedstawiono metodykę analizy hartowności i odpuszczalności stali konstrukcyjnych. Własności mechaniczne stali poddawanych ulepszeniu cieplnemu silnie zależą od jej hartowności, na którą w zasadniczym stopniu wpływają skład chemiczny i wielkość ziarna austenitu. Skład chemiczny stali wpływa również na własności mechaniczne stali po odpuszczaniu. Możliwość przewidywania własności stali na podstawie składu chemicznego ma duże znaczenie praktyczne dla optymalizacji składu i parametrów procesów obróbki cieplnej.

Na końcu niniejszego opracowania znajduje się dodatek, w którym przedstawiono charakterystykę podstawowych metod numerycznych, stosowanych w pracy (rozwiązywanie układów równań liniowych – metoda eliminacji Gaussa, i nieliniowych – metoda Newtona–Raphsona, aproksymacja wielomianowa, metoda różnic skończonych rozwiązywania równań różniczkowych cząstkowych) oraz zamieszczono wybrane tabele, zawierające dane fizyczne, wykorzystane w analizie numerycznej procesów obróbki cieplnej.

Praca zawiera omówienie autorskich programów komputerowych opracowanych do przewidywania struktury i własności mechanicznych stopów żelaza po obróbce cieplnej i przykłady ich zastosowania. Jest przeznaczona do wspomagania nauczania przedmiotów takich jak: „numeryczne modelowanie procesów obróbki cieplnej”, „obróbka cieplna” i „metody komputerowe w inżynierii materiałowej”. Może być również przydatna dla technologów, zajmujących się procesami obróbki cieplnej stopów metali.