

УДК 681.3.06:669.18

Н.В. Назаренко, Е.А. Чичкарев, Е.А. Казачков, О.Б. Исаев

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ЧЕРНОЙ МЕТАЛЛУРГИИ НА БАЗЕ ОТКРЫТЫХ ПРОГРАММНЫХ СРЕДСТВ

Во многих современных работах, касающихся исследования процессов формирования непрерывнолитых заготовок, а также процессов, протекающих в промежуточном ковше МНЛЗ, широко применяются методы математического моделирования как для решения исследовательских задач или проведения проектных расчетов, так и для решения задач управления производством.

Большинство работ, касающихся моделирования технологических процессов, завершается разработкой приложений, реализующих ту или иную математическую модель, в виде пакета программ, разработанного с использованием языка программирования общего назначения (C++, Object Pascal и т.п.) и среды быстрой разработки приложений (Delphi, C-Builder).

В таблице 1 сопоставлены результаты тестирования кода, сгенерированного различными компиляторами языка C++: g++ в среде Linux и FreeBSD и C++-Builder 6 в среде Windows. Проводился расчет кинетики формирования непрерывнолитой заготовки, основанный на решении двумерной нелинейной нестационарной задачи теплопроводности с выводом промежуточных результатов (консольное приложение, вывод примерно 5000 строк результатов в рабочее окно) или тот же самый расчет, но с выводом только начальных и конечных результатов.

Рассматриваемая математическая модель затвердевания позволила исследовать как стационарные (путем счета на установление), так и нестационарные режимы разлива стали в слабовые заготовки, и включала уравнение теплопроводности с учетом вытягивания заготовки [1-4]:

$$\rho \cdot c_s \cdot \left(\frac{\partial T}{\partial \tau} + v \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right), \quad (1)$$

где $T(x, z, \tau)$ – температура металла; $c_s = c_s(x, z, T)$ – эффективная теплоемкость металла; $\rho = \rho(x, z, T)$ $\lambda = \lambda(x, z, T)$ – его плотность и

теплопроводность; v – линейная скорость разлива; ось Oz направлена вдоль оси заготовки, ось Ox – перпендикулярно широкой грани сляба.

Температурная зависимость коэффициента теплопроводности учитывалась в соответствии с изменением агрегатного состояния металла:

$$\lambda(x, y, z, \tau) = \begin{cases} \lambda_{m\phi}(T), T < T_S; \\ \lambda_{\partial\phi\lambda} = \lambda_{m\phi} + (\lambda_{\partial\phi\phi} - \lambda_{m\phi})(T - T_S)/(T_L - T_S), T_S < T < T_L; \\ \lambda_{\partial\phi\phi}(T), T > T_L \end{cases} \quad (2)$$

где λ_{TB} , $\lambda_{\partial\phi\lambda}$, $\lambda_{\partial\phi\phi}$ – коэффициенты теплопроводности металла в твердой и жидкой фазе, в расчетах принималось $\lambda_{\partial\phi\phi} = 5 \dots 7 \lambda_{m\phi}$.

Температурная зависимость эффективной теплоемкости учитывалась в соответствии с соотношением:

$$c(x, z, \tau) = \begin{cases} c_{m\phi}(T), T < T_S; \\ (c_{m\phi} + c_{\lambda\phi})/2 + L \cdot (T - T_S)/(T_L - T_S), T_S < T < T_L; \\ c_{\lambda\phi} + L/(T_L - T_S), T > T_L; \end{cases} \quad (3)$$

где $c_{m\phi}$, $c_{\partial\phi\phi}$ – теплоемкость металла в твердой (использовались данные [5]) и жидкой фазе соответственно, L – теплота плавления (кристаллизации).

Граничные условия записывались, исходя из условий теплообмена заготовки с внешней средой. На торцах заготовки принимались условия

$$\partial T / \partial z|_{z=L} = 0; \quad -\lambda \partial T / \partial z|_{z=0} = \alpha(T) \cdot (T - T_{o.c.}) + v \cdot c_s \cdot \rho \cdot (T_{ex} - T), \quad (4)$$

$$\partial T / \partial x|_{x=0} = 0; \quad -\lambda \partial T / \partial x|_{x=R} = \alpha_{oxl}(T, q_{oxl}) \cdot (T - T_{oxl}). \quad (5)$$

где $T_{o.c.}$ – температура окружающей среды; $\alpha(T)$ – коэффициент теплоотдачи, который рассчитывался для условий теплообмена с учетом наличия шлака на зеркале металла; T_{ex} – температура поступающего в кристаллизатор металла.

На боковых гранях заготовки в границах кристаллизатора коэффициенты теплоотдачи задавались постоянными для двух зон по высоте; в зоне вторичного охлаждения коэффициент теплоотдачи к охлаждающему агенту рассчитывался по данным [2], адаптированным к конкретной МНЛЗ.

Для решения уравнения теплопроводности использовался метод конечных разностей (чисто неявная локально-одномерная схема) с

аппроксимацией величины $\partial T/\partial z$ разностью против потока. Задача теплопроводности является нелинейной, поэтому на каждом шаге по времени значения температур уточнялись итерационным путем. Положения линий, отвечающим температурам ликвидуса и солидуса, определялись путем линейной интерполяции по сеточным значениям температур.

Таким образом, задача моделирования затвердевания непрерывнолитой заготовки является достаточно сложной в вычислительном отношении и позволяет адекватно исследовать основные особенности решения расчетных задач в любой вычислительной среде.

Результат тестирования показал некоторое преимущество компилятора gcc в среде unix-подобных ОС вследствие более развитых средств оптимизации кода по скорости выполнения, хотя без оптимизации C++-Builder демонстрирует лучшие результаты, что и отмечалось ранее в Интернет-публикациях. Обращает на себя внимание разница в скорости выполнения при выводе промежуточных результатов, зависящая от организации операций ввода/вывода в ОС. Вне конкуренции оказалась FreeBSD (использовалась версия 5.2.1, аналогичные результаты получены и на версиях 5.3 и 6.0) с монолитным ядром, а для Linux с модульным ядром и Windows результаты оказались практически одинаковы. Тестирование проводилось на одном и том же компьютере (Athlon XP 1800).

В дальнейшем рассматриваемая модель была дополнена расчетом развития химической макронеоднородности. Процесс ее формирования описывался несколько видоизмененным уравнением конвективной диффузии [6] (для каждого химического элемента в составе стали):

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} + \rho \nabla(uC) = \nabla(D_{эфф,жс} \nabla(1-\xi)C_{жс} + D_{эфф,мс} \nabla \xi C_{мс}) = \nabla D_{эфф}(\nabla C), \quad (6)$$

$$\text{где } D_{эфф} = \begin{cases} D_{мс}(T), T < T_S \\ D_{жс} k_r / ((1-\xi) \cdot k_r + \xi), T_S < T < T_L; & k_r \text{ - коэффициент} \\ (5...7) \cdot D_{жс}(T), T > T_L \end{cases}$$

распределения (значения k_r выбирались по литературным данным, см. [7]); ξ - доля твердой фазы в ДФЗ. Граничные условия для уравнения (6) выбирались следующими:

$$D_{эфф} \frac{\partial C}{\partial z} \Big|_{z=0} = \nu C_{ax}; \quad \frac{\partial C}{\partial z} \Big|_{z=L} = 0; \quad \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=R} = 0 \quad (7)$$

Для решения уравнения диффузии химических элементов также использовался метод конечных разностей.

Проверка адекватности модели осуществлялась путем сопоставления результатов расчета с данными [2,3], технологическими результатами в промышленных условиях [8], а также результатами оценки развития химической неоднородности на продольных и поперечных темплетах реальных слябов, отлитых в условиях МК «Азовсталь». Достоинством разработанной модели и программного обеспечения является достаточно быстрая сходимость (по сравнению, например, с данными [4]). Результаты моделирования использованы для оптимизации режимов вторичного охлаждения, обеспечивающих снижение отсортировки слябов по поверхностным дефектам.

Тестирование модели затвердевания непрерывнолитого сляба с оценкой химической неоднородности проводилось на двух компьютерах (процессоры Athlon 2200 и Sempron 3000) и показало результаты, аналогичные представленным в таблице 1.

Таблица 1

Сопоставление времени расчета переходного процесса формирования непрерывнолитой заготовки

Вид теста	Время выполнения, с		
	C++-Builder 6 (WindowsXP)	gcc-3.3.2 (Linux)	gcc-3.2.1 (FreeBSD)
С выводом промежут. рез-тов в текстовом режиме	209 (эмуляция dos)	202	54
То же, в графич. режиме (КДЕ)		104 (ядро 2.6)	98
Без вывода	44	47	45
С оптимизацией	42...43 (-O2 - ffast-math)	17...20 (-O3 - ffast-math)	20...22 (-O3 - ffast-math)

Для решения задач, связанных с разработкой комплексных математических моделей, существенными преимуществами по сравнению с компилируемыми языками обладают интегрированные математические пакеты, объединяющие встроенные функции для решения разнородных задач, в т.ч. построения графических

иллюстраций. Во многих отношениях стандартом подобных пакетов является система MatLab.

На настоящий момент для решения задач моделирования разработано большое количество свободного программного обеспечения, либо совместимого с MatLab по языку программирования (Octave, SciLab), либо обеспечивающего аналогичный набор возможностей (язык программирования Python с вычислительными пакетами расширениями [9]).

Сопоставление вычислительных возможностей было выполнено и для интегрированных математических систем: MatLab 6.1 (ОС Windows), Octave (на 90 % совместимый с MatLab аналог для ОС Unix и Windows), SciPy 0.3.2 (библиотека численных алгоритмов и графических утилит для программирования на языке Python [9,10]). Результаты выполнения ряда тестов приведены в таблицах 2 и 3. Тестирование проводилось на одном и том же компьютере (Athlon 2200, 256 МБ памяти, МП Asus A7V8X-X).

Таблица 2

Сопоставление времени выполнения различных тестов

Тест	MatLab 6.1	Octave 2.1.53 (MDK 10.0)	Octave 2.1.57 (Debian Sid)	SciPy 0.3 (MDK 10.0, Numeric 23.5)
1	2	3	4	5
Цикл	0.4375*	1.477	1.736	0.1533
Сортировка 3 млн. действит. чисел	1.211	2.444	2.351	
FFT примерно 1 млн. эл-тов	0.7345	1.541	0.924	
Интегрирование функции	0.047	0.1417	0.1118	
Детерминант 500x500	0.0935	0.2504	0.2003	0.2250
Обращ-ие случ. м-цы 500x500	0.273	1.428	0.2956	0.2008
Собств. числа и векторы случайной м-цы 600x600	4.242	18.02	5.888	13.4648
Произведение м-ц 500x500	0.156	2.116	0.1828	0.1848
Расчет 1 млн. чисел Фибоначчи	1.1325	0.8639	0.81	
Разложение случ. м-цы по сингулярным числам	1.383	2	1.349	1.8624
Гамма-функция элементов случайной матрицы 500x500	0.1095	0.1332	0.1255	
Функция ошибок для элементов случайной матрицы 500x500Ф	0.0855	0.04067	0.03406	
Линейная регрессия по матрице 500x500	0.117	0.2268	0.126	

* - время приведено в секундах

Таблица 3

Сопоставление результатов решения системы ОДУ и суммирования числового ряда

Тест	MatLab 6.1	Octave 2.1.53 (MDK 10.0)	Octave 2.1.57 (Debian Sid)	SciPy 0.3 (MDK 10.0, Numeric 23.5)
Решение системы ОДУ	0.1720	1.477	0.05699	0.1533
Суммирование числового ряда	1.3280	4.4873	4.2235	1.2779

В основном быстродействие математических пакетов отличаются незначительно, и связаны с технологией реализации тех или иных численных методов или использованных алгоритмов. Высокая эффективность настольных вычислительных систем достигается лишь при условии тщательной настройки системы и использования набора стандартных библиотек (ATLAS, BLAS и LAPACK) собранных из исходного кода, и перекомпиляции необходимых программ. Кроме того, в различных дистрибутивах на первый взгляд мало отличающиеся компоненты могут заметно различаться по возможностям. Эту особенность наглядно демонстрируют столбцы 3 и 4 таблицы 2. По набору всевозможного программного обеспечения для решения задач вычислительного характера непревзойденным является дистрибутив Debian Linux.

Пример использования полностью открытой системы Python+SciPy – реализация математической модели циркуляционного течения в промежуточном ковше (ПК) машины непрерывного литья заготовок и практические расчеты с ее использованием (использованы встроенные функции пакета для решения ОДУ).

Один ручей трехсекционного ПК представлялся комбинированной моделью, включающей ячейку идеального смешения, характеризующую приемную секцию ПК; ячейку идеального смешения, характеризующую область свободных струй в разливочной секции ПК; разливочную секцию, описываемую моделью с обратным перемешиванием:

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} + w \cdot \frac{\partial c}{\partial x} = D_E \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \quad (8)$$

где w – осредненная по поперечному сечению ПК скорость движения жидкости; D_E – эффективный коэффициент турбулентной диффузии (определялся по данным [11]); c – концентрация

индикатора. ПК без перегородок представляется аналогичной моделью, включающей ячейку идеального смешения, характеризующую область струи, поступающей из стальной ковша, и ячейку вытеснения с обратным перемешиванием (рис. 1; пример обработки результатов моделирования с использованием (8) – рис. 2).

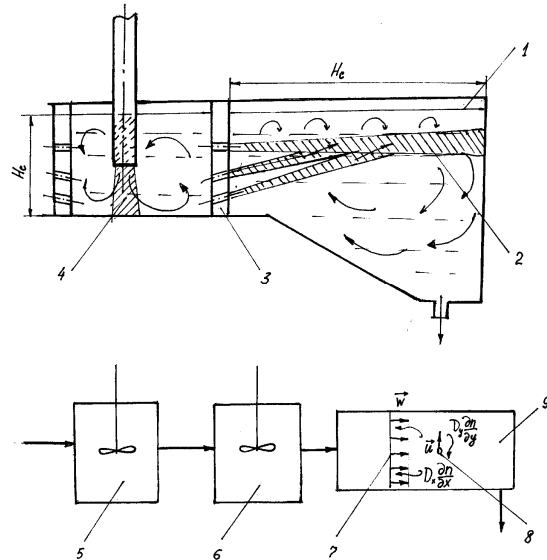


Рисунок 1 – Схема структуры потоков в математической модели структуры потоков в промежуточном ковше: 1 – зеркало металла в ПК (граница раздела с покровным шлаком); 2 – область свободных струй в разливочной секции; 3 – перфорированная перегородка; 4 – область свободной струи в приемной секции; 5 – ячейка идеального смешения, характеризующая приемную секцию; 6 – ячейка идеального смешения, характеризующая область свободных струй в разливочной секции; 7 – фронт осредненного течения; 8 – всплывающее неметаллическое включение; 9 – ячейка вытеснения с обратным перемешиванием, характеризующая разливочную секцию

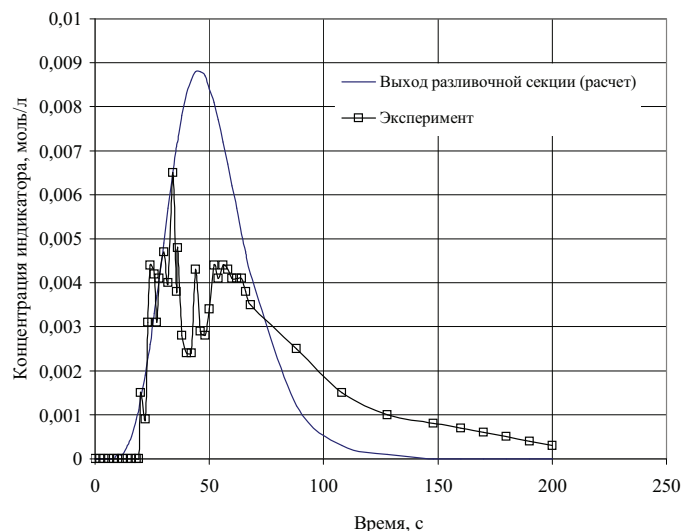


Рисунок 2 – Сопоставление экспериментальной кривой отклика и результатов численного решения уравнения (8) ($Pe=4$)

Результаты моделирования были использованы для оценки количества алюминия, вводимого в промежуточный ковш с целью компенсации его окисления и стабилизации концентрации в выходном потоке.

Изменение во времени содержания алюминия в металле приемной секции в рамках модели идеального смешения было представлено одним обыкновенным дифференциальным уравнением:

$$\frac{dc_1}{d\tau} = \frac{c_{ex} + c_{don}}{\theta} - \frac{c_1}{\theta}, \quad (9)$$

где c_{ex} – концентрация алюминия в металле на входе ПК; c_1 – концентрация алюминия на выходе приемной секции; θ – среднее время пребывания металла в приемной секции; $\theta = G/R$; G – емкость приемной секции; R – массовая скорость разливки; c_{don} – дополнительная концентрация алюминия во входном потоке за счет ввода катанки, % масс., которая рассчитывалась по формуле $c_{don} = w \cdot g \cdot \eta / R$; w – скорость ввода катанки, м/с; g – ее линейная масса, кг/м; R – массовая скорость разливки, кг/с; η – степень усвоения алюминия, % (для расчета на математической модели ПК принималась равной 70 %).

Для разливочной секции использована однопараметрическая модель с обратным перемешиванием (8) (c – концентрация алюминия, % масс). Установлено, что чем выше максимальное снижение концентрации алюминия на выходе ПК, тем выше и суммарные потери алюминия (результаты расчета для разливки одной плавки приведены на рис. 3).

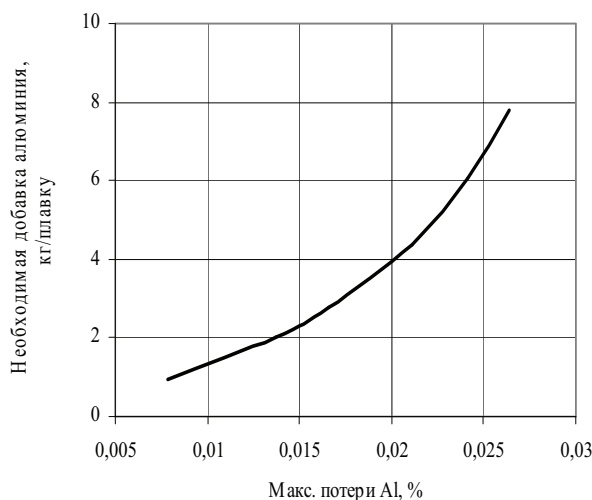


Рисунок 3 – Зависимость необходимой добавки алюминия от максимального снижения его концентрации в начале разливки плавки

Потери алюминия, которые необходимо скомпенсировать за счет дополнительного ввода алюминия в приемочную секцию ПЖ в начале разливки плавки, оценивались по уравнению:

$$П = \frac{R}{100} \cdot \int_0^{\tau_{раз}} (\bar{c} - c(\tau)) d\tau, \quad (10)$$

где \bar{c} - средняя концентрация алюминия на выходе разливочной секции; $c(\tau)$ - текущая концентрация, зависящая от времени; $\tau_{раз}$ - время разливки плавки.

Опробование режимов обработки стали в проковше монолитной алюминиевой катанкой осуществлялось в промышленных условиях конверторного цеха МК “Азовсталь”. За счет использования рационального режима ввода алюминия в ПЖ в два раза снижена частота переназначения плавков качественных низколегированных марок стали в партии стали пониженного качества.

Достоинством интегрированных систем компьютерной математики при проведении научных расчетов является высокая скорость и надежность разработки приложений. Среда MatLab и ее аналоги (или язык Python с необходимыми модулями расширения) обеспечивают быструю разработку прототипов и возможность использования большого числа различных функций, а также легкость приспособления к конкретным потребностям.

Кроме того, все упомянутые математические пакеты обеспечивают широкие возможности разработки модулей расширения. В частности, для использования разработанной модели затвердевания непрерывнолитой заготовки в учебном процессе ПГТУ авторами разработаны модули расширения для решения задач одно- и двумерной задачи Стефана в вычислительной среде MatLab или Python+SciPy. Представленные в статье разработки использованы в практикуме по курсу «Математическое моделирование и системный анализ» (реализации как MatLab, так и на Octave и SciPy).

Наиболее широкое применение результаты приведенных тестов и открытое ПО в реальном учебном процессе нашли в дипломном проектировании как для студентов, обучающихся по специальности «Информатика», так и для студентов-технологов.

Выводы

1. Перспективным направлением развития методики математического моделирования гидродинамических, тепловых и физико-химических процессов для технических приложений является использование специализированных скриптовых языков программирования, включающих функции, реализующие основные численные методы и возможности создания графических иллюстраций.
2. Проведено сравнительное исследование ряда открытых и коммерческих средств разработки вычислительных программ. Установлено, что в UNIX-подобных ОС скорость выполнения оптимизированного кода, построенного при помощи компилятора gcc, при решении вычислительных задач может быть выше, чем в среде Windows при использовании развитых коммерческих компиляторов.
3. Проведено сравнительное исследование ряда открытых и коммерческих систем компьютерной математики как с использованием бенчмарк-тестов, так и на реальных задачах. Установлено, что высокая эффективность настольных вычислительных систем с открытым кодом достигается лишь при условии тщательной настройки системы и использования набора стандартных библиотек.
4. Разработан комплекс математических моделей процессов и агрегатов непрерывной разливки стали, который использован для оптимизации условий ввода алюминия для дополнительного легирования и режима вторичного охлаждения на МНЛЗ.
5. Для практического использования результатов математического моделирования при решении производственных задач или в учебном процессе целесообразно объединение разрозненных моделей в специализированные пакеты расширения для программных сред общего назначения – MatLab, Python и др.

ЛИТЕРАТУРА

1. Огурцов А.П., Недопекин Ф.В., Белоусов В.В. Математическое моделирование процессов переноса в слитках и отливках с учетом внешних воздействий. – ДГТУ, 1997. – 199 с.
2. Тепловые процессы при непрерывном литье стали // Самойлович Ю.А., Крулевцкий С.А., Горяинов В.А. и др. - М.: Металлургия, 1982. - 152 с.

3. Емельянов В.А. Тепловая работа машин непрерывного литья заготовок. – М.: Металлургия, 1988. – 143 с.
4. Сарычев В.Д., Голоненко Н.А., Ливерц Е.И. Математическая модель охлаждения непрерывного слитка. // Моделирование, программное обеспечение и наукоемкие технологии. Труды Всероссийской научно-практической конференции. – СибГИУ. – Новокузнецк, 2001. – С.310-317.
5. Применение ЭВМ для численного решения температурного поля при сварке встык тонких пластин. / Ларионов В.П., Павлов А.Р., Тихонов А.Г. и др. // Автоматическая сварка. – 1979. - № 11. – С.19-22.
6. A.K. Singh, B. Basu. Numerical Study of Effect of Cooling Rate on Double-Diffusive Convection and Macro-segregation in Iron-Carbon System. // ISIJ Int., Vol. 41. – 2001. – N 12. – P.1481-1487.
7. Forming of Positive Macro-segregation during Steel Ingot Solidification / Z. Radovic, M. Lalovic, M. Tripkovic e.a. // ISIJ Int., Vol. 39. – 1999. – N 4. – P.329-334.
8. Математическое моделирование затвердевания непрерывнолитых заготовок при нестационарных режимах разливки // Чичкарев Е.А., Исаев О.Б., Носоченко О.В. и др. – Металл и литье Украины. – 2003. - № 7-8. – С.33-35.
9. Лесса А. Python. Руководство разработчика. – СПб.: ООО «ДиаСофт», 2001. – 688 с.
10. SciPy: Open Source Scientific Tools for Python // Eric Jones, Travis Oliphant, Pearu Peterson and others//<http://www.scipy.org>
11. Стабилизация общего содержания алюминия в непрерывнолитых слябах за счет ввода алюминиевой катанки в промковш // Аникаева А.А., Казачков Е.А., Чичкарев Е.А. и др.- Материалы VI Междунар. Науч.-техн. Конф. «Тепло- и массообменные процессы в металлургических системах». Мариуполь, ПГТУ, 2000 – С.267-271.

Получено __.__.2006 г.