

## Popis výsledku – software

Název: Model reoxidace

Autor: Ing. Antonín Záděra, Ph.D. (ÚST odbor slévárenství FSI, VUT v Brně)  
doc. Ing. Jaroslav Šenberger, CSc. (ÚST odbor slévárenství FSI, VUT v Brně)  
doc. RNDr. Libor Čermák, CSc. (ÚM, FSI, VUT v Brně)  
Ing. Vladimír Krutiš, Ph.D. (MECAS ESI, ÚST odbor slévárenství, FSI)

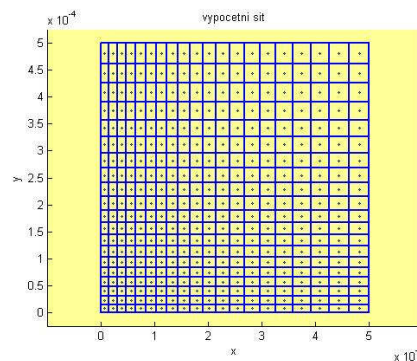
### Popis:

V rámci práce spolupráce VUT v Brně a firmy MECAS ESI s.r.o byl vytvořen model reoxidace. Sestavený model představuje komplexní algoritmus popisující fyzikálně-chemický pochod reoxidace oceli. Model umožňuje sledovat změnu aktivity kyslíku v průběhu chladnutí slitin železa a změnu koncentrace dezoxidačních přísad v důsledku jejich reakce s kyslíkem.

Pro řešení jednotlivých dějů bylo použito numerického řešení prostřednictvím metody sítí, resp. metody FDM (*Finite Different Method*). V jednotlivých časových krocích je řešena problematika adsorpce kyslíku na povrchu taveniny a jeho difuze do taveniny pomocí diferenciální rovnice difuze. Proti růstu aktivity kyslíku působí dezoxidační prvky obsažené v tavenině. Postupné pohlcování kyslíku do hloubky taveniny je proto doprovázeno oxidací, tj. poklesem v tavenině rozpuštěných dezoxidačních přísad. Pro řešení změny koncentrací dezoxidačních přísad je opět použito diferenciálních rovnic difuze.

Na základě vypočtené hodnoty aktivity kyslíku byla v každém časovém kroku a zvoleném elementu stanovena termodynamická rovnováha mezi kyslíkem a uhlíkem. V případě překročení této termodynamické rovnováhy slouží tento výpočet jako kritérium vzniku bublin a bodlin v odlitcích.

Program je sestaven v programovém prostředí Matlab, které umožňuje řešení většího počtu po sobě následujících kroků – iterací, použití většího počtu elementů a také velmi dobré grafické zobrazení vypočtených dat. Model vychází z dvourozměrné úlohy. Pro snížení počtu elementů v použité numerické síti je uvažováno se symetrickou úlohou pro součást tvaru kvádr. V modelu je uvažován pouze řez kvádr v ose  $z$  a při řešení reoxidace je pak uvažována pouze jedna ze symetrických oblastí (čtvrtin) řezu. Pohlcování kyslíku, resp. reoxidace taveniny tedy probíhá ze dvou stran. Z ostatních dvou stěn je uvažována okrajová podmínka nulové změny aktivity kyslíku. Volitelnými parametry geometrické sítě jsou velikost elementu v ose  $x$  a  $y$  a počet elementů v daném směru  $x$  a  $y$ . Geometrická síť je následně automaticky nastavena na uvedený řez. Pro urychlení výpočtu je dále možnost měnit i hustotu této sítě. Na povrchu vzorku, tzn. na rozhraní atmosféra – tavenina, kde dochází k největším změnám koncentrací kyslíku i dezoxidačních přísad, je hustota sítě největší a s postupem do hloubky taveniny se hustota sítě plynule snižuje. Způsob zředění geometrické sítě je zřejmý ze snímků na *obr. 1*.



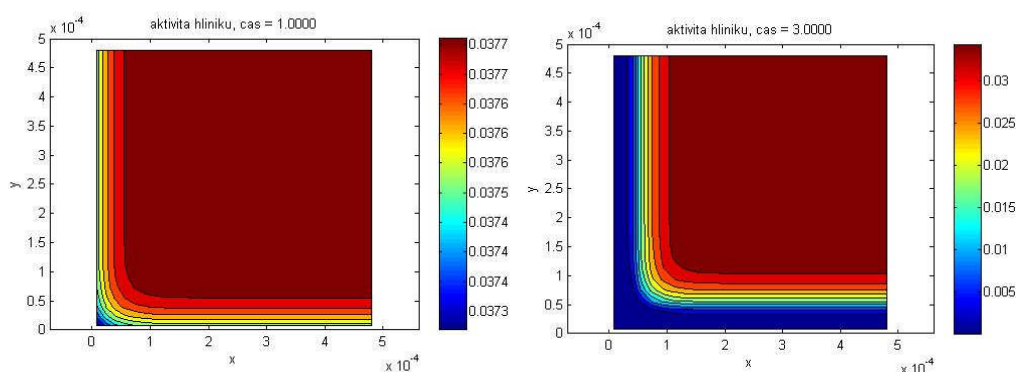
Obr. 1 Geometrická síť v modelu reoxidace 20x 20 elementů

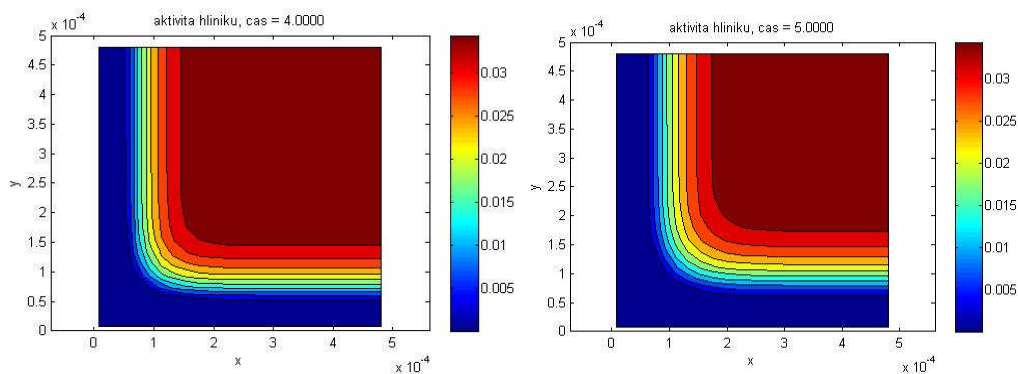
Kromě volby parametrů výpočtové sítě jsou v programu reoxidace volitelnými parametry dále doba po kterou probíhá pohlcování kyslíku, počáteční teplota a chemické složení taveniny apod. Kromě těchto základních vstupních parametrů obsahuje program další parametry závislé na počátečních podmínkách. Jedná se např. o aktivity jednotlivých prvků, stanovené na základě jejich počátečních koncentrací a interakčních koeficientů obsažených v databázi modelu. Dále jsou v modelu určovány rovnovážné aktivity kyslíku s jednotlivými dezoxidačními prvky a to v každém elementu vždy pro každý časový krok. Program obsahuje dále celou řadu dílčích výpočtů potřebných pro řešení difuze a oxidace jednotlivých prvků.

Na základě počátečních (zadaných) hodnot vstupních veličin je programem stanoveno rozložení aktivit všech uvažovaných dezoxidačních prvků a dále aktivity kyslíku. Podle počtu kroků, v nichž je provedeno ukládání průběžných výsledků, je možné sledovat průběh reoxidace kovu v závislosti na čase nebo prostoru. Z hlediska posouzení rozsahu reoxidačních pochodů má největší význam možnost sledovat aktivity dezoxidačních prvků Al, Si a Mn a aktivity kyslíku.

Důležitým hlediskem při vyhodnocení a verifikaci modelu jsou možnosti volby způsobu zobrazení výše uvedených veličin. V modelu je možné tyto veličiny zobrazit hned několika způsoby např. řez pro daný čas, řez pro danou buňku (element) nebo plocha koncentrace prvku pro daný čas. Na základě vlastních požadavků je možné vybranou veličinu graficky zobrazit v dvourozměrném (plošném) nebo třírozměrném (prostorovém) grafu a to opět hned několika způsoby. Řez pro daný čas umožňuje pro danou vrstevnici v ose  $x$  nebo ose  $y$  zobrazit časový průběh aktivit. Řez pro danou buňku umožňuje sledovat časový průběh aktivity daného prvku ve vybraném elementu výpočtové sítě. Z hlediska vyhodnocení důsledků reoxidace taveniny je výhodné použít zobrazení vrstevnice pro daný čas.

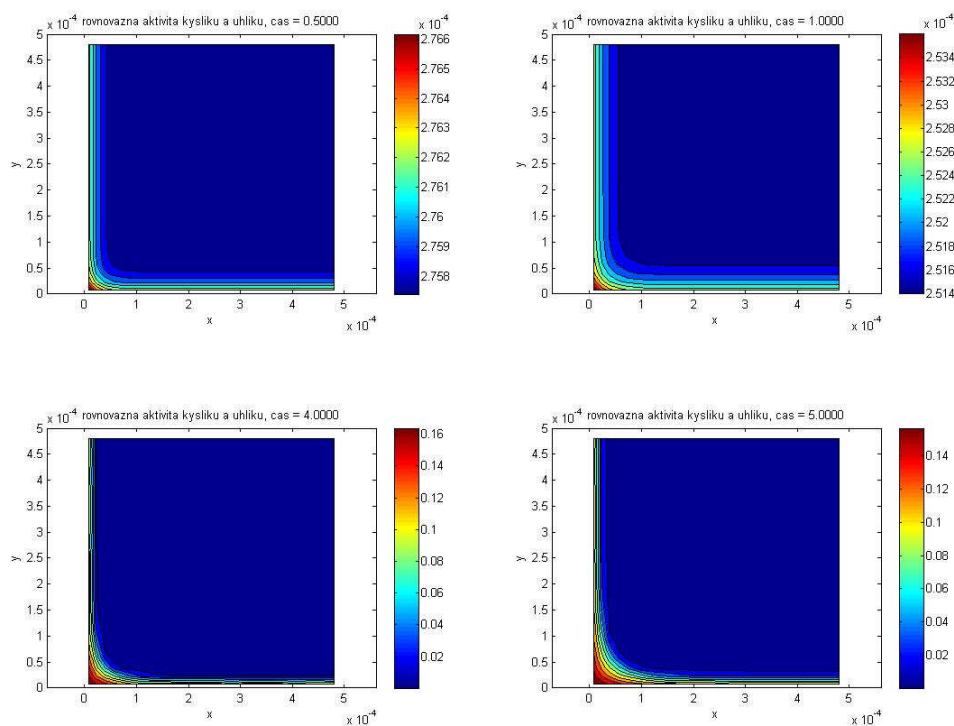
Možnosti grafického zobrazení zvolených veličin jsou pro případ hliníku a pro modelový příklad uvedeny na obr. 2. Na jednotlivých snímcích obr. 2 jsou uvedeny výsledky pro rozložení aktivit hliníku při použití vykreslení vrstevnice pro daný čas. Ze snímků na obr. 2 je jasně patrný postupný pokles aktivity hliníku do hloubky taveniny s rostoucím časem, po který reoxidace taveniny probíhá.





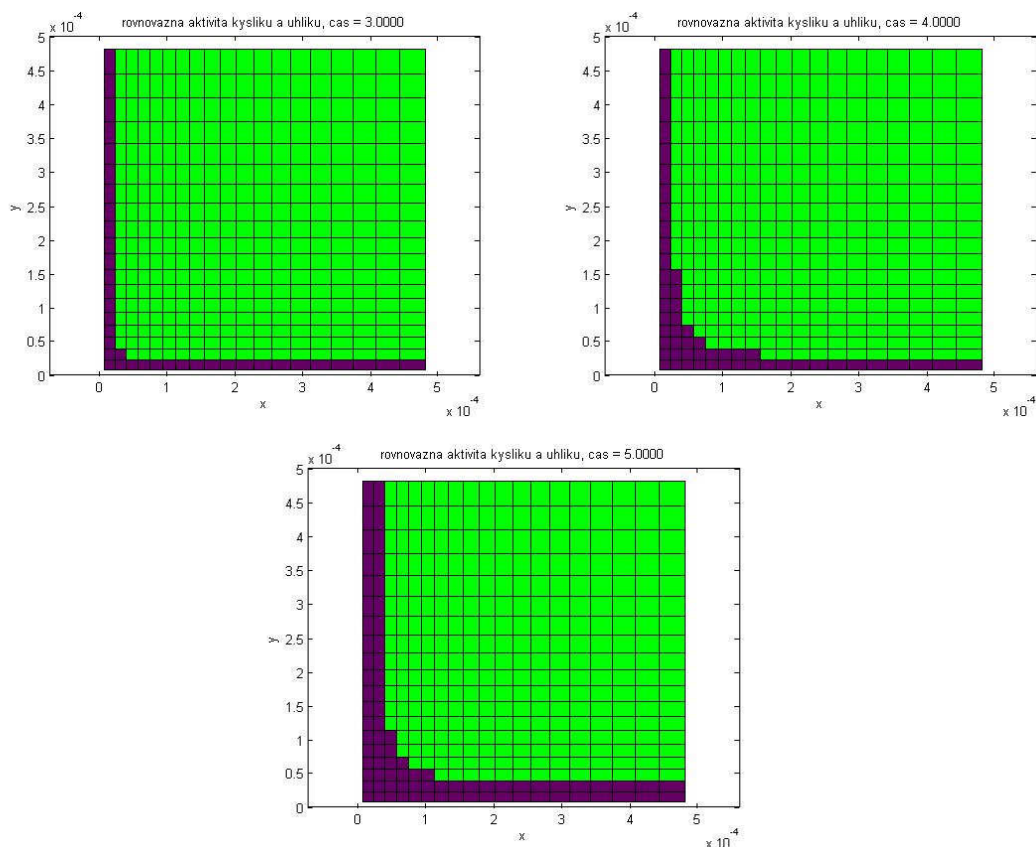
Obr. 2 Plošné zobrazení aktivit hliníku v závislosti na čase pro modelový příklad

Z obr. 2 je patrné, že s rostoucím časem, probíhá reoxidace taveniny (oxidace hliníku) do větší hloubky a kritickým místem je v napojení dvou ploch, na kterých je uvažována reoxidace. Obdobným způsobem je možné vyjádřit dále aktivitu kyslíku a manganu během probíhající reoxidace taveniny. Na obr. 3 je zobrazen průběh aktivity kyslíku pro modelový příklad.



Obr. 3 Plošné zobrazení aktivit kyslíku v závislosti na čase pro modelový příklad

Z obr. 3 je zřejmé, že kritickým místem s největší aktivitou kyslíku je ve styku dvou ploch, na kterých je uvažována reoxidace. Pomocí stupnice lze také snadno určit, jaké konečné aktivity kyslíku lze v daném průřezu taveniny očekávat. Kriteřiem pro posouzení vzniku bublin a bodlin je stav, kdy výsledná aktivita kyslíku překročí termodynamickou rovnováhu s uhlíkem. Tato místa lze vykreslit v grafu označeném v sestaveném programu jako mapa pro daný čas. Uvedený způsob umožňuje zvýraznit v plošném diagramu ty elementy geometrické sítě, ve kterých je překročena termodynamická rovnováha mezi kyslíkem a uhlíkem. Uvedený typ grafu, tj. mapa kyslíku pro daný čas, je uveden na obr. 4. Přířsun kyslíku do taveniny absorpcí je v tomto případě větší než přířrůstek koncentrace dezoxidačních přířsad difuzí z objemu kovu na toto rozhraní. Důsledkem je pak vznik okysličené vrstvy na povrchu taveniny.



Obr. 4 Mapa aktivit kyslíku v závislosti na čase pro modelový příklad

Sestavený program reoxidace je možné používat ve dvou základních módech a to rovnovážném a nerovnovážném pojetí oxidačních reakcí. Rovnovážný model je založen na neustálém ustavování termodynamické rovnováhy mezi dezoxidačními prvky a kyslíkem. Při řešení je v každém časovém kroku difuzní rovnice stanovována termodynamická rovnováha mezi dezoxidačními prvky a kyslíkem. Ten prvek, který dává nižší rovnovážnou aktivitu, je oxidován vždy o množství odpovídající stechiometrickému poměru daného oxidu. Nerovnovážný model je založen na stejném algoritmu jen s tím rozdílem, že je předpokládána termodynamická kvazirównováha mezi dezoxidačními prvky a kyslíkem. Za reálných podmínek neprobíhají žádné chemické reakce až do úplného dosažení termodynamické rovnováhy. Počátek každé reakce nastartuje až po určitém přesycení látek, které do reakce vstupují. Toto přesycení je výsledkem toho, že pro každou reakci je potřeba určité velikosti hnací – aktivační energie (překonání kinetických odporů soustavy). V sestaveném modelu je proto uvažována v oxidačních reakcích namísto rovnováhy ( $\Delta G = 0$ ) dosažení určité hodnoty změny volné entalpie. Výsledek stanovený modelem je pak co do průběhu aktivit obdobný, avšak posunutý k vyšším hodnotám, které přesněji odpovídají reálným podmínkám.