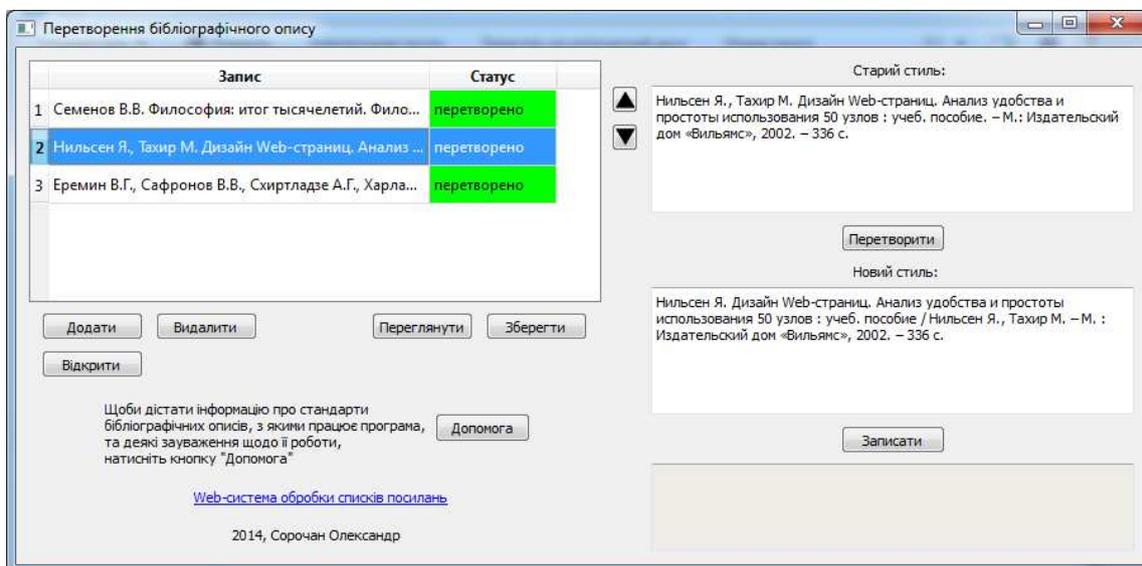


благодаря абстрактному счетчику, выбирается структура записи по новому стандарту. Также этот автомат был запрограммирован на компьютере, тем самым полностью автоматизировав этот процесс. Программа может считывать библиографические записи из файла, преобразовывать их в новый стандарт и сформировать файл с этими записями.



Литература.

1. Ахо А. Теория синтаксического анализа, перевода и компиляции Т. 1. Синтаксический анализ / А. Ахо, Дж. Ульман ; пер. с англ. В.Н. Агафонова ; ред. В.М. Курочкина. – М. : Мир, 1978. – 489 с.
2. Библиографическое описание документа. Общие требования и правила составления : ГОСТ 7.1—84. СИБИД. – [Введ. 1986-01-01 до 2000-07-01]. – М. : Изд-во стандартов, 1984. – 50 с. – (Гос. стандарты СССР).
3. Библиографическая запись. Библиографическое описание. Общие требования и правила составления : ГОСТ 7.1–2003. СИБИД. – [Взамен ГОСТ 7.1–84; введ. 2004–07–01]. – М. : Изд-во стандартов, 2004. – 54 с.
4. Карпов Ю.Г. Теория автоматов / Ю.Г. Карпов. – СПб. : Питер, 2003. – 208 с. : ил. – ISBN 5-318-00537-3.

СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ПРОТЕКАЮЩИХ В ПРОМКОВШЕ

С.Н. Федосеев, ассистент каф. МЧМ

*Юргинский технологический институт (филиал) Национального исследовательского
Томского политехнического университета*

652055, Кемеровская обл., г. Юрга, ул. Ленинградская, 26, тел.: 8 (384-51) 6-22-48

E-mail: fedoseevsn@list.ru

Математическое моделирование с помощью компьютера становится все более эффективным инструментом исследователей и инженеров и часто является одной из основных частей систем автоматизированного проектирования. Оно позволяет получить общую картину всего течения жидкости в объеме и графически визуализировать поля скоростей, давлений или температур во всей области течения. В то время как при физическом моделировании измерительные датчики располагаются в нескольких точках, где предполагается развитие исследуемых явлений.

Также при математическом моделировании исчезают проблемы, связанные с возмущениями исследуемых процессов устанавливаемыми датчиками, применяемыми в экспериментах, а также отсутствуют технические трудности, вызываемые малыми или большими размерами исследуемых объектов, высокими или низкими температурами, пожароопасными или токсичными веществами и т.п.

При этом численное решение можно получить для реальных условий исследуемого процесса, что далеко не всегда возможно при экспериментальных исследованиях.

Указанные преимущества, а также интенсивное развитие вычислительной техники и численных методов в последние годы, позволяют успешно использовать универсальные программные комплексы для математического моделирования тепломассообмена и гидрогазодинамики во многих областях науки и техники, включая и металлургию промковша.

В связи с тем, что современная математика дает мощные и универсальные средства исследования, закономерно выделить наиболее важные требования, предъявляемые к математическим моделям: универсальность, характеризующая полноту отображения моделью изучаемых свойств реального объекта; адекватность – способность отражать нужные свойства объекта с погрешностью не выше заданной; точность, оцениваемая степенью совпадения значений характеристик реального объекта и значений этих характеристик, полученных с помощью математических моделей.

К настоящему времени разработано и реализовано множество математических моделей рассматриваемых разнообразных аспектов металлургии промковша: гидродинамику, резидентное время, поведение включений и перенос тепловой энергии, электромагнитное перемешивание, процессы турбулентности.

Анализ публикаций, посвященных изучению гидродинамических явлений, показывает, что математические модели базируются в основном на уравнениях Навье-Стокса, включающих уравнение неразрывности (закон сохранения массы); уравнение импульса (закон сохранения импульса); уравнение энергии (закон сохранения энергии). Эти законы, представленные в виде дифференциальных уравнений в частных производных, решаются методом конечных элементов с применением стандартных пакетов для компьютерного моделирования движения жидкости (PHOENICS, FLOW, CFX, ANSYS) или с помощью самостоятельно разрабатываемых программ, реализующих этот метод.

Из всех известных коммерческих программных продуктов наибольшее распространение получили пакеты ANSYS и FLUENT.

Согласно методологии пакета ANSYS, разработка математической модели включает следующие этапы:

I. Препроцессорная стадия, включающая операции по созданию геометрической модели рассматриваемой расчетной области; заданию физических свойств среды (материалов) в расчетной области; генерации конечно-элементной модели (дискретизация) рассматриваемой расчетной области, т.е. созданию сетки конечных элементов; приложению к модели граничных условий: внешних воздействий (температур, тепловых потоков, сил и т.д.) и закреплений на границах области.

Дискретизация области включает задание числа, размеров и формы элементов, которые используются для построения конечно-элементной модели. Элементы связаны друг с другом в узловых точках (узлах) и в совокупности аппроксимируют форму расчетной области. Окончательный выбор размеров элементов производится, исходя из физической сущности задачи.

II. Процессорная стадия, заключающаяся в выполнении таких операций: получение на основе функций конечных элементов кусочно-непрерывной функции, определенной на всей расчетной области, и построение глобальной матрицы теплопроводности; составление системы алгебраических уравнений путем минимизации некоторой величины, связанной с физической постановкой задачи, и решение этой системы относительно узловых значений – температуры в задачах теплопроводности, смещений в прочностных задачах и т.п.

III. Постпроцессорная стадия: вывод результатов расчета в графической и текстовой формах (поля скоростей, деформаций и напряжений, потоки тепла, температурные градиенты и др.); анализ полученных результатов.

Таким образом, учитывая особенности компьютерного моделирования в пакете ANSYS, была создана математическая модель перемешивания жидкой стали за счет продувки инертным газом в ковше, учитывающая явление теплопереноса.

Уравнение неразрывности, соответствующее закону сохранения массы, имеет вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho V_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho V_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho V_z)}{\partial z} = 0$$

- где V_x, V_y, V_z – компоненты вектора скорости в направлениях x, y и z соответственно;
- ρ – плотность;
- x, y, z – глобальные декартовы координаты;
- t – время.

- Закон сохранения импульса, связывающий напряжения и скорость деформации жидкости для трех направлений, можно представить в виде уравнений Навье-Стокса

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho V_x}{\partial t} + \frac{\partial(\rho V_x V_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho V_x V_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho V_x V_z)}{\partial z} &= \rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} \mu_3 \frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \mu_3 \frac{\partial V_x}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \mu_3 \frac{\partial V_x}{\partial z} + T_x, \\ \frac{\partial \rho V_y}{\partial t} + \frac{\partial(\rho V_x V_y)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho V_y V_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho V_y V_z)}{\partial z} &= \rho g_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} \mu_3 \frac{\partial V_y}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \mu_3 \frac{\partial V_y}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \mu_3 \frac{\partial V_y}{\partial z} + T_y, \\ \frac{\partial \rho V_z}{\partial t} + \frac{\partial(\rho V_x V_z)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho V_y V_z)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho V_z V_z)}{\partial z} &= \rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} \mu_3 \frac{\partial V_z}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \mu_3 \frac{\partial V_z}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \mu_3 \frac{\partial V_z}{\partial z} + T_z. \end{aligned}$$

- где g_x, g_y, g_z – компоненты вектора ускорения свободного падения в направлениях x, y и z , соответственно;
- μ_3 – эффективная вязкость;
- T_x, T_y, T_z – компоненты вектора вязких потерь в направлениях x, y и z , соответственно

$$\begin{aligned} T_x &= \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \mu \frac{\partial V_y}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \mu \frac{\partial V_z}{\partial x}, \\ T_y &= \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial V_x}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} \mu \frac{\partial V_y}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \mu \frac{\partial V_z}{\partial y}, \\ T_z &= \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial V_x}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial y} \mu \frac{\partial V_y}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \mu \frac{\partial V_z}{\partial z}. \end{aligned}$$

Эффективная вязкость учитывает ламинарную вязкость μ (которая определяется свойствами расплава) и турбулентную вязкость μ_t (которая рассчитывается по модели турбулентности)

$$\mu_3 = \mu + \mu_t$$

Для описания турбулентности была использована SST модель (Shear Stress Transport Model) (двухслойная модель Ментера), которая сочетает в себе преимущества как стандартной $k-\epsilon$ модели, так и $k-\omega$ модели.

Связь теплопереноса и движения жидкости отражает закон сохранения энергии, представляемый в виде термического транспортного уравнения

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho C_p T)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho C_p V_x T)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho C_p V_y T)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho C_p V_z T)}{\partial z} &= \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + Q_v, \end{aligned}$$

- где T – температура расплава;
- Q_v – объемные источники тепла;
- k – теплопроводность расплава;
- C_p – удельная теплоемкость расплава.

Переходя от записи уравнений в частных производных к матричной форме, формируется система уравнений, решением которых являются значения компонентов вектора скорости, давления, температуры в пределах рассматриваемой расчетной области. Этот переход выполняется встроенными алгоритмами пакета ANSYS.

С учетом приведенной выше последовательности разработка математической модели перемешивания расплава в промковше включала следующие этапы.

А. Создание геометрической модели расчетной области.

Исходной информацией для создания геометрической модели расчетной области выступал шестиручьевой промковш (рисунок 3.18), оборудованный металлоприемником ведрообразной формы. В качестве расчетной области при создании геометрической модели принят внутренний объем промковша, занимаемый жидкой сталью.

Б. Задание типа конечного элемента.

В модуле Flotran предусмотрено два типа конечных элементов: двумерные 4-х узловые – 2D FLOTRAN 141 и трехмерные 8-ми узловые – 3D FLOTRAN 142, применяемые соответственно в двумерной и трехмерной постановках задачи.



Рис. 1. Схема шестиручьевого промковша

В. Генерация конечно-элементной сетки.

Для каждой линии, образующей расчетную область, в ручном режиме задавалось количество делений, соответствующих числу элементов. Для создания регулярной сетки стремились, чтобы расчетная область была ограничена 4 линиями (для двумерной задачи) или 6 площадями (для трехмерной задачи). В отдельных случаях использовалось произвольное разбиение на конечные элементы. В результате такого подхода формировалась конечно-элементная модель расчетной области (рисунок 3.19).

Г. Выбор типа решаемой задачи.

Проведенные исследования выполнялись в постановке термической, нестационарной задачи для несжимаемой жидкости с турбулентным течением. Количество итераций, используемых при решении системы уравнений, принималось равным 12.

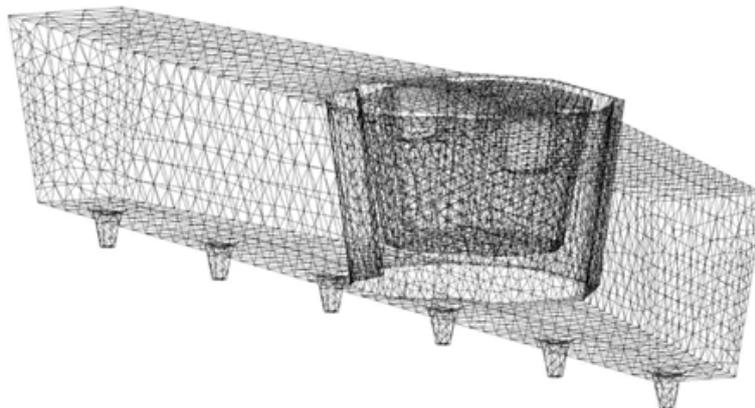


Рис. 2. Вид конечно-элементной модели расчетной области шестиручьевого промковша (трехмерная задача, произвольная сетка)

Д. Задание свойств жидкой стали

Математическая модель перемешивания расплава учитывала такие свойства стали как плотность, вязкость, теплопроводность и теплоемкость. Плотность и вязкость рассматривались зависимыми от температуры. Для выражения этих зависимостей на основании справочных данных [62] были рассчитаны коэффициенты в уравнениях, описывающих рассматриваемые свойства. Теплопроводность и теплоемкость стали считались постоянными, независимыми от температуры. В результате в модель были внесены следующие данные и выражения, описывающие свойства жидкой стали:

- плотность, кг/м³

$$\rho = 7700 - 95,7 \cdot 10^{-3} (T - 293) - 15,471 \cdot 10^{-6} (T - 293)^2$$

- вязкость, Н*с/м²

$$\mu = 0,0035 \exp \left[10699,32 \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{1473} \right) + 3,8 \cdot 10^{-11} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{1473} \right)^2 \right],$$

- где T – температура, К;
- теплоемкость $c = 840$ Дж/(кг*К);
- теплопроводность $\lambda = 27$ Вт/(м*К).

Е. Задание нагрузок и граничных условий.

В качестве нагрузок и граничных условий для задач гидродинамики могут выступать: скорости (м/с), температуры (К), тепловые потоки (Вт/м²), источники энергии (Вт/м³), коэффициенты конвективной теплоотдачи (передачи) (Вт/м²), давление (Па).

Для каждого из рассчитываемых параметров (составляющие скорости, давление, температура и др.) задаются методы решения системы уравнений и погрешность для поиска их сходимости. Далее автоматически выполнялось решение систем уравнений для каждого временного шага.

Литература.

1. Банди, Б. Основы линейного программирования / Б. Банди; пер. с англ. М.: Радио и связь, 1989. 176 с.
2. Цымбал, В. П. Математическое моделирование металлургических процессов / В. П. Цымбал. М.: Металлургия, 1986. 240 с.
3. Новые информационные технологии в управлении металлургическими процессами / Б. М. Горенский, Ю. Н. Чурсанов, А. В. Киселев, О. Е. Халикова; ГАЦМиЗ. Красноярск, 1999. 80 с.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОСТ-ПРОЦЕССОВ РАЗЛОЖЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ АТМ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ СЛАБЫМ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ПОЛЕМ

*А.П. Родзевич**, *Е.Г. Газенаур*, к.ф.-м.н., доц., *В.И. Крашенинин*, д.ф.-м.н., профессор
 *Юргинский технологический институт (филиал) Национального исследовательского
 Томского политехнического университета
 652055, Кемеровская обл., г. Юрга, ул. Ленинградская, 26, тел. (38451)62248
 Кемеровский государственный университет
 650043, г. Кемерово, ул. Красная, 6, тел. (3842)580605
 E-mail: nimez@tpu.ru

Колебательный характер пост-процессов в кристаллах азидов тяжелых металлов (АТМ) связан с действием постоянного электрического поля, а химическая реакция протекает в реакционной области (РО), состоящей из линии дислокации, обладающей электростатическим отрицательным зарядом и облака Коттрелла, состоящего из положительно заряженных ионов. РО является электронной в отсутствие внешнего поля, а при его включении происходит смещение облака Коттрелла, что приводит снова к полной компенсации внешнего поля внутри РО в течение определенного времени. Будем исходить из того, что внешнее постоянное электрическое поле производит максимальное смещение положительно заряженных ионов относительно отрицательно заряженной линии дислокации в момент его отключения. Период колебаний пост-процессов определяется периодом колебаний и подвижностью положительно заряженных ионов облака Коттрелла относительно отрицательно заряженной линии дислокации. Это предположение имеет вполне определенный физический смысл, поскольку время периода колебаний неплохо совпадает со временем ионных процессов (минуты). Процесс изменения локального поля не может привести к колебательному характеру изменения зарядовой плотности в приэлектродных областях, но может влиять на скорость химических реакций