
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΑΣ

ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΥΛΙΚΩΝ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΜΕ ΘΕΜΑ

**«ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΔΙΑΧΥΤΙΚΩΝ ΜΕΤΑΣΧΗΜΑΤΙΣΜΩΝ ΣΕ
ΧΑΛΥΒΕΣ ΜΕ ΤΗ ΧΡΗΣΗ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗΣ ΚΙΝΗΤΙΚΗΣ»**

Της Φοιτήτριας

Βαρβάρα Ν. Βασιλάκου

Επιβλέπων Καθηγητής

Γρηγόρης Ν. Χαϊδεμενόπουλος

ΒΟΛΟΣ

ΙΟΥΝΙΟΣ 2000



**ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ & ΚΕΝΤΡΟ ΠΛΗΡΟΦΟΡΗΣΗΣ
ΕΙΔΙΚΗ ΣΥΛΛΟΓΗ «ΓΚΡΙΖΑ ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ»**

Αριθ. Εισ.: 1971/1
Ημερ. Εισ.: 03-07-2000
Δωρεά: Συγγραφέα
Ταξιθετικός Κωδικός: ΠΤ – ΜΜΒ
2000
ΒΑΣ

**ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΔΙΑΧΥΤΙΚΩΝ
ΜΕΤΑΣΧΗΜΑΤΙΣΜΩΝ ΣΕ ΧΑΛΥΒΕΣ ΜΕ ΤΗ ΧΡΗΣΗ
ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗΣ ΚΙΝΗΤΙΚΗΣ**





αρ. εισ. 197/200

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ



004000062092

ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΩΝ

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ	iv
ΠΙΝΑΚΑΣ ΣΧΗΜΑΤΩΝ	v
ΠΙΝΑΚΑΣ ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΩΝ	vi
ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΙΝΑΚΩΝ	ix
1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ	1
2. ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΚΗ ΑΝΑΣΚΟΠΗΣΗ	2
2.1 Η ΦΥΣΗ ΤΗΣ ΔΙΑΧΥΣΗΣ	2
2.2 ΔΙΑΧΥΣΗ ΣΕ ΔΙΜΕΡΗ ΚΡΑΜΑΤΙΚΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ-ΟΙ ΝΟΜΟΙ ΤΟΥ FICK	3
2.3 ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΚΗ ΕΞΑΡΤΗΣΗ ΤΗΣ ΔΙΑΧΥΣΗΣ – ΘΕΡΜΙΚΗ ΕΝΕΡΓΟΠΟΙΗΣΗ	6
2.4 ΔΙΑΧΥΣΗ ΣΕ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΜΕ ΠΟΛΛΑ ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ	9
2.4.1 ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΩΝ ΔΙΑΧΥΣΗΣ	9
2.4.2 ΤΡΟΠΟΠΟΙΗΣΗ ΤΟΥ 1 ^{ΟΥ} ΝΟΜΟΥ ΤΟΥ FICK ΓΙΑ ΠΟΛΥΣΥΣΤΑΤΙΚΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ	10
2.5 Η ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΩΝ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΔΙΑΦΟΡΩΝ ΓΙΑ ΤΗ ΛΥΣΗ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΩΝ ΔΙΑΧΥΣΗΣ.....	10
2.6 ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΟ ΠΑΚΕΤΟ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗΣ ΚΙΝΗΤΙΚΗΣ ΔΙΑΧΥΤΙΚΩΝ ΜΕΤΑΣΧΗΜΑΤΙΣΜΩΝ DICTRA	13
2.7 ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΩΝ ΘΕΡΜΟΔΥΝΑΜΙΚΩΝ ΚΑΙ ΚΙΝΗΤΙΚΩΝ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ	15
2.7.1 ΘΕΡΜΟΔΥΝΑΜΙΚΑ ΔΕΔΟΜΕΝΑ.....	15
2.7.2 ΚΙΝΗΤΙΚΑ ΔΕΔΟΜΕΝΑ.....	15
2.8 ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΩΝ ΒΑΣΙΚΩΝ ΑΡΧΩΝ ΤΟΥ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟΥ DICTRA.....	19
2.8.1 ΚΕΛΙΑ, ΠΕΡΙΟΧΕΣ ΚΑΙ ΔΙΕΠΙΦΑΝΕΙΕΣ	19
2.8.2 ΠΕΡΙΟΧΕΣ ΚΑΙ ΠΛΈΓΜΑ	19
2.8.3 ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ	20
2.8.4 ΦΑΣΕΙΣ	20
2.8.5 ΣΥΣΤΑΣΕΙΣ	20
3. ΠΑΡΑΜΕΤΡΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΤΟΥ DICTRA	23
3.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....	23
3.2 ΠΑΡΑΜΕΤΡΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ	23
3.3 ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ	24
3.4 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	35
4. ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΤΟΥ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟΥ DICTRA ΣΤΗΝ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΜΕΤΑΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΥ α-γ	51
4.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....	51

4.2 ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΤΟΥ ΜΕΤΑΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΥ α-γ.	52
4.3 ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ ΜΕΛΕΤΗΣ.....	55
4.4 ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ-ΣΥΖΗΤΗΣΗ.....	56
5. ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΔΙΑΛΥΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΠΕΡΛΙΤΗ ΚΑΤΑ ΤΗ ΘΕΡΜΑΝΣΗ ΚΑΙ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ A_{c1}	81
5.1 ΚΡΙΣΙΜΕΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΕΣ.....	81
5.2 ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΤΟΥ ΡΥΘΜΟΥ ΘΕΡΜΑΝΣΗΣ ΣΤΗΝ ΑΥΞΗΣΗ ΤΗΣ A_{c1}	82
5.3 ΜΟΝΤΕΛΟ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΔΙΑΛΥΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΤΟΥ ΠΕΡΛΙΤΗ.....	83
5.4 ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΕΥΤΗΚΤΟΕΙΔΟΥΣ ΧΑΛΥΒΑ ΣΤΟ DICTRA ΜΕ ΣΚΟΠΟ ΤΟΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟ ΤΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ ΔΙΑΛΥΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΤΟΥ ΠΕΡΛΙΤΗ ΜΕ ΔΙΑΦΟΡΟΥΣ ΡΥΘΜΟΥΣ ΘΕΡΜΑΝΣΗΣ.....	85
5.5 ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΥΠΟΕΥΤΗΚΤΟΕΙΔΟΥΣ ΧΑΛΥΒΑ ΣΤΟ DICTRA ΜΕ ΣΚΟΠΟ ΤΟΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟ ΤΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ ΔΙΑΛΥΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΤΟΥ ΠΕΡΛΙΤΗ ΜΕ ΔΙΑΦΟΡΟΥΣ ΡΥΘΜΟΥΣ ΘΕΡΜΑΝΣΗΣ.....	93
6. ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΤΟΥ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟΥ DICTRA ΣΤΗΝ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΩΣΤΕΝΙΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΑΠΛΟΥ ΑΝΘΡΑΚΟΧΑΛΥΒΑ CK-45.....	103
6.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....	103
6.2 ΩΣΤΕΝΙΤΟΠΟΙΗΣΗ ΥΠΟΕΥΤΗΚΤΟΕΙΔΟΥΣ ΑΝΘΡΑΚΟΧΑΛΥΒΑ.....	103
6.3 ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ.....	104
6.4 ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ-ΣΥΖΗΤΗΣΗ.....	105
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΚΕΣ ΑΝΑΦΟΡΕΣ.....	110
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 1.....	111

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Για την εκπόνηση αυτής της Διπλωματικής Εργασίας θα ήθελα να ευχαριστήσω πρώτα απ' όλους τον καθηγητή μου κ. Γ. Ν. Χαϊδεμενόπουλο για την πολύτιμη βοήθειά του καθ' όλη τη διάρκεια εκπόνησης της εργασίας, καθώς επίσης και τον υποψήφιο Διδάκτορα και Διπλωματούχο Μηχανολόγο Μηχανικό Αντώνη Ι. Κατσαμά για το χρόνο που διέθεσε, για την καθοδήγησή του και τις χρήσιμες συμβουλές του. Ευχαριστώ επίσης, τον υποψήφιο Διδάκτορα και Διπλωματούχο Μηχανολόγο Μηχανικό Αποστόλη Ν. Βασιλάκο, τον κ. Νικόλαο Χασιώτη και την κ. Ελεάνα Παππά για την συμπαράσταση και το ενδιαφέρον που έδειξαν κατά την διάρκεια εκπόνησης της διπλωματικής εργασίας.

ΠΙΝΑΚΑΣ ΣΧΗΜΑΤΩΝ

- ΣΧΗΜΑ 2.1:** (α) Διάχυση των ατόμων B σε κενές θέσεις παρεμβολής, (β) προφίλ συγκεντρώσεως του συστατικού B.(4)
- ΣΧΗΜΑ 2.2:** Προφίλ συγκεντρώσεως C(x) και ροής J(x) κατά τη διάχυση παρεμβολής.(6)
- ΣΧΗΜΑ 2.3:** Ενεργειακές μεταβολές κατά τη διάρκεια άλματος από την αρχική θέση (1), μέσω της ενεργοποιημένης καταστάσεως (1*) στην τελική θέση (2).(7)
- ΣΧΗΜΑ 2.4:** Θερμοκρασιακή εξάρτηση του συντελεστή διαχύσεως. Από την κλίση προσδιορίζεται η ενέργεια ενεργοποίησης.(8)
- ΣΧΗΜΑ 2.5:** Διμερές διάγραμμα φάσεων A-B και προφίλ συγκεντρώσεως σε ζεύγος διαχύσεως μετάλλων A και B.(12)
- ΣΧΗΜΑ 2.6:** Προφίλ συγκεντρώσεως κατά τον σχηματισμό φάσεως α από τη φάση γ. (16)
- ΣΧΗΜΑ 2.7:** Διάγραμμα ροής της μεθοδολογίας DICTRA. (18)
- ΣΧΗΜΑ 2.8:** Λεπτομερής περιγραφή της δομής των δεδομένων του προγράμματος DICTRA. (22)
- ΣΧΗΜΑ 3.1:** Γεωμετρική απεικόνιση του μοντέλου για τη μελέτη μετασχηματισμού του ωστενίτη σε φερρίτη. (24)
- ΣΧΗΜΑ 4.1:** Γεωμετρική απεικόνιση του τρόπου ανάπτυξης του ωστενίτη μέσα στο φερρίτη. (53)
- ΣΧΗΜΑ 5.1:** Κρίσιμες θερμοκρασίες ψύξης (A_c), θέρμανσης (A_c) και ισορροπίας (A) σε κράματα Fe-C. (82)
- ΣΧΗΜΑ 5.2:** Γεωμετρική απεικόνιση του μοντέλου για την μελέτη της διαλυτοποίησης του περλίτη. (83)
- ΣΧΗΜΑ 5.3:** Γεωμετρική αναπαράσταση της λεπτομέρειας A που δείχνει τον τρόπο ανάπτυξης του ωστενίτη μέσα στο φερρίτη. (84)

ΠΙΝΑΚΑΣ ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΩΝ

- Διάγραμμα 3.1:** Επίδραση του 'Αριθμού των πλεγματικών σημείων στην ωστενιτική περιοχή' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο. (29)
- Διάγραμμα 3.2:** Επίδραση του 'Αρχικού χρονικού βήματος' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο. (29)
- Διάγραμμα 3.3:** Επίδραση του 'Μικρότερου αποδεκτού χρονικού βήματος' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο. (30)
- Διάγραμμα 3.4:** Επίδραση του 'Number of delta timesteps in calling MULDIF' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο. (30)
- Διάγραμμα 3.5:** Επίδραση του 'Βαθμού ακριβείας κατά τη διάρκεια ολοκλήρωσης μερικών διαφορικών εξισώσεων' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο. (31)
- Διάγραμμα 3.6:** Επίδραση του 'Τύπου του πλέγματος στην περιοχή του φερριτή' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο. (31)
- Διάγραμμα 3.7:** Επίδραση του 'Αριθμού των πλεγματικών σημείων' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο. (44)
- Διάγραμμα 3.8:** Επίδραση του 'Μέγιστου χρονικού βήματος κατά την ολοκλήρωση' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο. (44)
- Διάγραμμα 3.9:** Επίδραση της 'Κινούσας δύναμης για την ανενεργή φάση' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο. (45)
- Διάγραμμα 3.10:** Επίδραση του 'Step used by NS01A' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο. (45)
- Διάγραμμα 3.11:** Επίδραση του 'Αρχικού χρονικού βήματος' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο. (46)
- Διάγραμμα 3.12:** Επίδραση του 'Απαιτούμενου αθροίσματος τετραγώνων' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο. (46)
- Διάγραμμα 3.13:** Επίδραση του 'Maximum number of calls to calfun of NS01A' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο. (47)
- Διάγραμμα 3.14:** Επίδραση του 'Maximum step used by NS01A' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο. (47)
- Διάγραμμα 3.15:** Επίδραση της 'Μετακίνησης αριθμού πλεγματικών σημείων' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο. (48)
- Διάγραμμα 3.16:** Επίδραση της 'Αρχικής τιμής της ταχύτητας της διεπιφάνειας' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο. (48)

- Διάγραμμα 3.17:** Επίδραση του 'Μικρότερου αριθμού σχηματισμού εξισώσεων ροής' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο. (49)
- Διάγραμμα 3.18:** Επίδραση του 'Πλάτους της νέας περιοχής' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο. (49)
- Διάγραμμα 3.19:** Επίδραση του 'Κλάσματος της περιοχής που μεταβιβάζεται στη διεπιφάνεια' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο. (50)
- Διάγραμμα 4.1:** Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης για διάφορους ρυθμούς θέρμανσης και διαφορετικά μήκη περιοχών. (58)
- Διάγραμμα 4.2:** Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης για διάφορους ρυθμούς θέρμανσης και για μήκος $L=2\mu\text{m}$. (63)
- Διάγραμμα 4.3:** Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης για διάφορους ρυθμούς θέρμανσης και για μήκος $L=5\mu\text{m}$. (64)
- Διάγραμμα 4.4:** Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης για διάφορους ρυθμούς θέρμανσης και για μήκος $L=8\mu\text{m}$. (65)
- Διάγραμμα 4.5:** Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης για διάφορους ρυθμούς θέρμανσης και για μήκος $L=10\mu\text{m}$. (66)
- Διάγραμμα 4.6:** Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης για διάφορους ρυθμούς θέρμανσης και για μήκος $L=12\mu\text{m}$. (67)
- Διάγραμμα 4.7:** Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης για διάφορους ρυθμούς θέρμανσης και για μήκος $L=15\mu\text{m}$. (68)
- Διάγραμμα 4.8:** Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης για διάφορους ρυθμούς θέρμανσης και για μήκος $L=20\mu\text{m}$. (69)
- Διάγραμμα 4.9:** Σύγκριση προσομοίωσης του DICTRA με πειραματικά αποτελέσματα πάνω στη Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης. (70)
- Διάγραμμα 4.10:** Σύγκριση των αποτελεσμάτων με μία λογιστική συνάρτηση για $L=2\mu\text{m}$. (72)
- Διάγραμμα 4.11:** Σύγκριση των αποτελεσμάτων με μία λογιστική συνάρτηση για $L=5\mu\text{m}$. (72)
- Διάγραμμα 4.12:** Σύγκριση των αποτελεσμάτων με μία λογιστική συνάρτηση για $L=8\mu\text{m}$. (73)
- Διάγραμμα 4.13:** Σύγκριση των αποτελεσμάτων με μία λογιστική συνάρτηση για $L=10\mu\text{m}$. (73)
- Διάγραμμα 4.14:** Σύγκριση των αποτελεσμάτων με μία λογιστική συνάρτηση για $L=12\mu\text{m}$. (74)
- Διάγραμμα 4.15:** Σύγκριση των αποτελεσμάτων με μία λογιστική συνάρτηση για $L=15\mu\text{m}$. (74)
- Διάγραμμα 4.16:** Σύγκριση των αποτελεσμάτων με μία λογιστική συνάρτηση για $L=20\mu\text{m}$. (75)
- Διάγραμμα 4.17:** Σύγκριση των αποτελεσμάτων του συντελεστή A_1 με μία γραμμική συνάρτηση. (75)
- Διάγραμμα 4.18:** Σύγκριση των αποτελεσμάτων του συντελεστή A_2 με μία αλλομετρική συνάρτηση. (76)

- Διάγραμμα 4.19:** Σύγκριση των αποτελεσμάτων του συντελεστή H_0 με μία αλλομετρική συνάρτηση. (76)
- Διάγραμμα 4.20:** Σύγκριση των αποτελεσμάτων του συντελεστή ρ με μία γραμμική συνάρτηση. (77)
- Διάγραμμα 4.21:** Ποσοστό C στον ωστενίτη σε σχέση με την απόσταση της διεπιφάνειας για διάφορους χρόνους και για ρυθμό θέρμανσης $10^\circ\text{K}/\text{sec}$. (78)
- Διάγραμμα 4.22:** Ποσοστό C στον ωστενίτη σε σχέση με την απόσταση της διεπιφάνειας για διάφορους χρόνους και για ρυθμό θέρμανσης $100^\circ\text{K}/\text{sec}$. (78)
- Διάγραμμα 4.23:** Ποσοστό C στον ωστενίτη σε σχέση με την απόσταση της διεπιφάνειας για διάφορους χρόνους και για ρυθμό θέρμανσης $1000^\circ\text{K}/\text{sec}$. (79)
- Διάγραμμα 4.24:** Ταχύτητα της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και για ρυθμό θέρμανσης $10^\circ\text{K}/\text{sec}$. (79)
- Διάγραμμα 4.25:** Ταχύτητα της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και για ρυθμό θέρμανσης $100^\circ\text{K}/\text{sec}$. (80)
- Διάγραμμα 4.26:** Ταχύτητα της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και για ρυθμό θέρμανσης $1000^\circ\text{K}/\text{sec}$. (80)
- Διάγραμμα 5.1:** Θερμοκρασία διαλυτοποίησης περλίτη για διάφορους ρυθμούς θέρμανσης. (87)
- Διάγραμμα 5.2:** Ποσοστό άνθρακα στον ωστενίτη σε σχέση με το ρυθμό θέρμανσης. (88)
- Διάγραμμα 5.3:** Θερμοκρασία διαλυτοποίησης περλίτη για διάφορους ρυθμούς θέρμανσης. (90)
- Διάγραμμα 5.4:** Ποσοστό άνθρακα στον ωστενίτη σε σχέση με το ρυθμό θέρμανσης. (91)
- Διάγραμμα 5.5:** Θερμοκρασία A_{C_1} για ευτηκτοειδή χάλυβα για τις δυο τιμές μήκους περιοχής φερρίτη και Fe_3C , $L_1 > L_2$. (92)
- Διάγραμμα 5.6:** Θερμοκρασία διαλυτοποίησης περλίτη για διάφορους ρυθμούς θέρμανσης. (96)
- Διάγραμμα 5.7:** Ποσοστό άνθρακα στον ωστενίτη σε σχέση με το ρυθμό θέρμανσης. (97)
- Διάγραμμα 5.8:** Θερμοκρασία διαλυτοποίησης περλίτη για διάφορους ρυθμούς θέρμανσης. (99)
- Διάγραμμα 5.9:** Ποσοστό άνθρακα στον ωστενίτη σε σχέση με το ρυθμό θέρμανσης. (100)
- Διάγραμμα 5.10:** Θερμοκρασία A_{C_1} για υποευτηκτοειδή χάλυβα για τις δύο τιμές μήκους περιοχής φερρίτη και Fe_3C , $L_1 > L_2$. (101)
- Διάγραμμα 5.11:** Θερμοκρασία A_{C_1} για υποευτηκτοειδή και ευτηκτοειδή χάλυβα. (102)
- Διάγραμμα 6.1:** Ποσοστό ωστενίτη στους 780°C σε σχέση με το χρόνο ωστενιτοποίησης. (107)
- Διάγραμμα 6.2:** Ποσοστό ωστενίτη στους 800°C σε σχέση με το χρόνο ωστενιτοποίησης. (108)
- Διάγραμμα 6.3:** Επίδραση της θερμοκρασίας ωστενιτοποίησης πάνω στο ποσοστό σχηματισμού του ωστενίτη με τη μέθοδο του DICTRA. (109)

ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΙΝΑΚΩΝ

- Πίνακας 3.1:** Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και τον αριθμό των πλεγματικών σημείων. (28)
- Πίνακας 3.2:** Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και το αρχικό χρονικό βήμα. (28)
- Πίνακας 3.3:** Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και του μικρότερου αποδεκτού χρονικού βήματος. (28)
- Πίνακας 3.4:** Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και της παραμέτρου 'Number of Delta timesteps in calling MULDIF'. (28)
- Πίνακας 3.5:** Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και του βαθμού ακριβείας κατά την ολοκλήρωση των μερικών διαφορικών εξισώσεων. (28)
- Πίνακας 3.6:** Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και του τύπου του πλέγματος στην περιοχή του φερρίτη. (28)
- Πίνακας 3.7:** Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και του αριθμού των πλεγματικών σημείων. (37)
- Πίνακας 3.8:** Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και του μέγιστου χρονικού βήματος κατά την ολοκλήρωση. (37)
- Πίνακας 3.9:** Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και της κινούσας δύναμης για την ανενεργή φάση. (38)
- Πίνακας 3.10:** Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και της παραμέτρου 'Step used by NS01A'. (38)
- Πίνακας 3.11:** Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και του αρχικού χρονικού βήματος. (39)
- Πίνακας 3.12:** Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και του απαιτούμενου αθροίσματος τετραγώνων . (39)
- Πίνακας 3.13:** Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και της παραμέτρου 'Maximum number of calls to calfun of NS01A. (40)
- Πίνακας 3.14:** Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και του αριθμού της παραμέτρου 'Maximum step used by NS01A. (40)
- Πίνακας 3.15:** Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και της μετακίνησης αριθμού πλεγματικών σημείων. (41)
- Πίνακας 3.16:** Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και της αρχικής τιμής της ταχύτητας της διεπιφάνειας. (41)
- Πίνακας 3.17:** Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και του μικρότερου αριθμού σχηματισμού εξισώσεων ροής. (42)

- Πίνακας 3.18:** Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και του πλάτους της νέας περιοχής. (42)
- Πίνακας 3.19:** Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και του κλάσματος της περιοχής που μεταβιβάζεται στη διεπιφάνεια. (43)
- Πίνακας 4.1:** Εύρος τιμών των μεταβλητών που χρησιμοποιήθηκαν στην προσομοίωση. (55)
- Πίνακας 4.2:** Τιμές των συντελεστών της λογιστικής συνάρτησης για κάθε μήκος L. (59)
- Πίνακας 4.3:** Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης σε °C για διάφορα μήκη και διάφορους ρυθμούς θέρμανσης. (57)
- Πίνακας 4.4:** Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης (°C) για τα δύο μοντέλα και το ποσοστό απόκλισης. (60)
- Πίνακας 4.5:** Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης (°C) για τα δύο μοντέλα και το ποσοστό απόκλισης. (60)
- Πίνακας 4.6:** Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης (°C) για τα δύο μοντέλα και το ποσοστό απόκλισης. (60)
- Πίνακας 4.7:** Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης (°C) για τα δύο μοντέλα και το ποσοστό απόκλισης. (61)
- Πίνακας 4.8:** Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης (°C) για τα δύο μοντέλα και το ποσοστό απόκλισης. (61)
- Πίνακας 4.9:** Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης (°C) για τα δύο μοντέλα και το ποσοστό απόκλισης. (61)
- Πίνακας 4.10:** Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης (°C) για τα δύο μοντέλα και το ποσοστό απόκλισης. (62)
- Πίνακας 4.11:** Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης (°C) του DICTRA και ενός πειράματος και το ποσοστό απόκλισης. (62)
- Πίνακας 5.1:** Αποτελέσματα προσομοίωσης ευτηκτοειδούς χάλυβα Fe-0,76095wt%C και πλάτος περιοχής φερρίτη και Fe_3C , $38,03972981e-9m$ και $0,005e-6m$ αντίστοιχα. (86)
- Πίνακας 5.2:** Αποτελέσματα προσομοίωσης ευτηκτοειδούς χάλυβα Fe-0,76095wt%C και πλάτος περιοχής φερρίτη και Fe_3C , $19,01986491e-9m$ και $0,0025e-6m$ αντίστοιχα. (89)
- Πίνακας 5.3:** Αποτελέσματα προσομοίωσης υποευτηκτοειδούς χάλυβα Fe-0,45wt%C και πλάτος περιοχής φερρίτη και Fe_3C , $37,22709e-9m$ και $0,005e-6m$ αντίστοιχα. (95)

Πίνακας 5.4: Αποτελέσματα προσομοίωσης υποευτηκτοειδούς χάλυβα Fe-0,45wt%C και πλάτος περιοχής φερρίτη και Fe_3C , $18,613545e-9m$ και $0,0025e-6m$ αντίστοιχα. (98)

Πίνακας 6.1: Χρόνοι και θερμοκρασίες κατά την πειραματική διαδικασία. (104)

Πίνακας 6.2: Τελικό ποσοστό ωστενίτη για διάφορους χρόνους ωστενιτοποίησης στους $780^{\circ}C$. (106)

Πίνακας 6.3: Τελικό ποσοστό ωστενίτη για διάφορους χρόνους ωστενιτοποίησης στους $800^{\circ}C$. (106)

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Έχοντας επιβεβαιώσει την μεγάλη χρησιμότητα του υπολογιστικού πακέτου *ThermoCalc* στην ερευνητική δραστηριότητα για τα υλικά, το Εργαστήριο Υλικών προχώρησε στην αγορά ενός δεύτερου υπολογιστικού πακέτου το οποίο ονομάζεται **DICTRA** (*Diffusion Controlled Transformations*) και συνδυάζει την θερμοδυναμική και κινητική των κραμάτων. Είναι και αυτό ένα σημαντικό πρόγραμμα στον Η/Υ και αποτελεί ένα από τα βασικότερα εργαλεία που απαιτούνται για τη μετάλλαξη: «υλικά από τη σκέψη», την οποία πρότεινε ο G.B. Olson στον πρόλογο του βιβλίου του Γ.Ν. Χαιδεμενόπουλου «Φυσική Μεταλλουργία».[1]

Κατά τη διάρκεια σχεδιασμού και δημιουργίας ενός νέου υλικού απαιτείται αρκετός χρόνος και μεγάλο κόστος για την προετοιμασία, μελέτη και ανάλυση των δοκιμών πάνω στα οποία διεξάγεται το πείραμα. Κάθε φορά που δοκιμάζεται να αλλαχθεί μία θερμοδυναμική ή κινητική παράμετρος, είναι αναγκαίο να επαναληφθεί η πειραματική διαδικασία. Η προσομοίωση όμως του κάθε προβλήματος στον Η/Υ καθιστά ικανό τον κάθε χρήστη να επικεντρώσει την προσοχή του στην ανάλυση των αποτελεσμάτων κάθε φορά που μεταβάλλεται μία παράμετρος, με συνέπεια ο χρόνος και το κόστος για να βρεθεί το αποτέλεσμα να ελαχιστοποιούνται.

Αντικείμενο της παρούσας διπλωματικής εργασίας αποτελεί η μελέτη της λειτουργίας και των δυνατοτήτων του λογισμικού DICTRA, καθώς και η προσομοίωση διαφόρων μετασχηματισμών φάσεων σε χάλυβες με τη χρήση της μεθοδολογίας αυτής.

Συγκεκριμένα οι στόχοι της διπλωματικής εργασίας είναι οι εξής:

- 1.** Παραμετρική μελέτη για τον τρόπο με τον οποίο επηρεάζουν την προσομοίωση οι διάφορες παράμετροι του προγράμματος (π.χ. αριθμός κόμβων, χρονικό βήμα, κ.τ.λ). Αυτή έγινε σε δύο συγκεκριμένα παραδείγματα που δίνονται στο εγχειρίδιο του λογισμικού.
- 2.** Προσομοίωση μετασχηματισμού $\alpha \rightarrow \gamma$ (φερρίτης σε ωστενίτη) σε σύστημα Fe – 0.49% κ.β.C με μεταβαλλόμενους ρυθμούς θέρμανσης. Καθορίστηκε η θερμοκρασία πλήρους ωστενιτοποίησης κατά τη θέρμανση **A_{c3}** και συγκρίθηκε με τα αντίστοιχα αποτελέσματα των Jacot και Rappaz[2] (μοντέλο 1-D), καθώς και με διαθέσιμα πειραματικά αποτελέσματα.
- 3.** Προσομοίωση διαλυτοποίησης περλίτη κατά τη θέρμανση χαλύβων υποευτηκτοειδούς και ευτηκτοειδούς σύστασης και υπολογισμός θερμοκρασίας **A_{c1}**.

4. Προσομοίωση ωστενιτοποίησης απλού ανθρακοχάλυβα Ck-45. Εκτέλεση πειραμάτων ωστενιτοποίησης σε δοκίμια χάλυβα Ck-45 και ποσοτική μεταλλογραφία. Σύγκριση πειραματικών και υπολογιστικών πειραμάτων.

2. ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΚΗ ΑΝΑΣΚΟΠΗΣΗ

2.1 Η ΦΥΣΗ ΤΗΣ ΔΙΑΧΥΣΗΣ

Η διάχυση είναι ένας από τους πιο σημαντικούς μηχανισμούς, που ελέγχουν την κινητική μιας μεταλλουργικής διεργασίας ή ενός μετασχηματισμού φάσεων. Βασικές διεργασίες στη Φυσική Μεταλλουργία, όπως η ανάπτυξη μιας νέας φάσεως, η ομογενοποίηση ενός χυτού κράματος και η ενανθράκωση ενός χάλυβα πραγματοποιούνται με τη μετακίνηση ατόμων στο κρυσταλλικό πλέγμα, δηλαδή με διάχυση. Η διάχυση ορίζεται ως η μετακίνηση ατόμων σε αποστάσεις τουλάχιστον ίσες με την παράμετρο του πλέγματος.

Η διάχυση πραγματοποιείται έτσι, ώστε να προκύπτει πάντα μείωση της ελεύθερης ενέργειας. Επομένως, είναι δυνατό να παρατηρηθεί διάχυση ενός συστατικού από περιοχές υψηλής συγκεντρώσεως σε περιοχές χαμηλής συγκεντρώσεως και αντίστροφα. Βέβαια, στις περισσότερες περιπτώσεις που συναντώνται στην πράξη, η διάχυση λαμβάνει χώρα προς την κατεύθυνση εξάλειψης των βαθμίδων (gradient) συγκέντρωσης. Αυτό όμως αποτελεί ειδική περίπτωση, καθώς στη γενική περίπτωση η διάχυση πραγματοποιείται προς τη κατεύθυνση εξάλειψης των βαθμίδων χημικού δυναμικού, άρα προς την αποκατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας στο σύστημα. Δηλαδή, η ωθούσα δύναμη για διάχυση είναι η διαφορά χημικού δυναμικού ενός συστατικού, η οποία στις περισσότερες πρακτικές περιπτώσεις (όχι όμως σε όλες) ισοδυναμεί με διαφορά στη συγκέντρωση του συστατικού.

Ο μηχανισμός, με τον οποίο γίνεται η κίνηση των ατόμων μέσα στο κρυσταλλικό πλέγμα εξαρτάται από το είδος των ατόμων. Δηλαδή, διαχωρίζεται σε διάχυση ατόμων παρεμβολής και αντικαταστάσεως. Κατά τη διάχυση αντικαταστάσεως η μετακίνηση των ατόμων μπορεί να γίνει μόνο εφ' όσον υπάρχει διπλανή κενή πλεγματική θέση, δηλαδή οπή και εφ' όσον τα άτομα αποκτήσουν ικανή θερμική ενέργεια έτσι ώστε η ταλάντωσή τους γύρω από την πλεγματική τους θέση καταλήξει σε επιτυχές άλμα προς την οπή. Από την άλλη, στη διάχυση παρεμβολής τα άτομα που καταλαμβάνουν κενές θέσεις παρεμβολής διαχέονται σε άλλες κενές θέσεις παρεμβολής. Και τα δύο είδη μηχανισμού διαχύσεως εξαρτώνται δραστικά από τη θερμοκρασία.[1]

2.2 ΔΙΑΧΥΣΗ ΣΕ ΔΙΜΕΡΗ ΚΡΑΜΑΤΙΚΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ-ΟΙ ΝΟΜΟΙ ΤΟΥ FICK

1^{ος} νόμος του Fick

θεωρείται ένα αραιό στερεό διάλυμα παρεμβολής ατόμων B σε μητρικό απλό κυβικό κρυσταλλικό πλέγμα ατόμων A. Το διάλυμα είναι τόσο αραιό, ώστε κάθε άτομο παρεμβολής B να περιβάλλεται από έξι κενές θέσεις παρεμβολής. Θεωρείται επίσης ότι το άτομο B πραγματοποιεί Γ_B άλματα στη μονάδα του χρόνου (συχνότητα αλμάτων) προς τις κενές θέσεις παρεμβολής. Τα άλματα είναι τελείως τυχαία, δηλαδή τα άτομο B έχει την ίδια πιθανότητα να καταλάβει οποιαδήποτε από τις έξι κενές θέσεις παρεμβολής. Θεωρείται τώρα (βλ. Σχ. 2.1) ότι υπάρχει ένα gradient συγκεντρώσεως των ατόμων B και ορίζονται ως n_1 και n_2 οι συγκεντρώσεις (σε άτομα/m²) των ατόμων B στα επίπεδα (1) και (2) αντίστοιχα, τα οποία απέχουν κατά a . Η ροή των ατόμων B από το επίπεδο (1) στο (2) είναι:

$$J_{12} = \frac{1}{6} \Gamma_B n_1 \quad (\text{άτομα/m}^2\text{s}) \quad (2.1)$$

ενώ ταυτόχρονα η ροή των ατόμων B από το επίπεδο (2) προς το επίπεδο (1) είναι:

$$J_{21} = \frac{1}{6} \Gamma_B n_2 \quad (\text{άτομα/m}^2\text{s}) \quad (2.2)$$

Επειδή $n_1 > n_2$, η καθαρή ροή των ατόμων B από το επίπεδο (1) στο επίπεδο (2) είναι:

$$J_B = J_{12} - J_{21} = \frac{1}{6} \Gamma_B (n_1 - n_2) \quad (2.3)$$

Οι συγκεντρώσεις των ατόμων παρεμβολής c_B (σε άτομα/m³) είναι για τα δύο επίπεδα:

$c_B(1) = n_1/a$ και $c_B(2) = n_2/a$ οπότε:

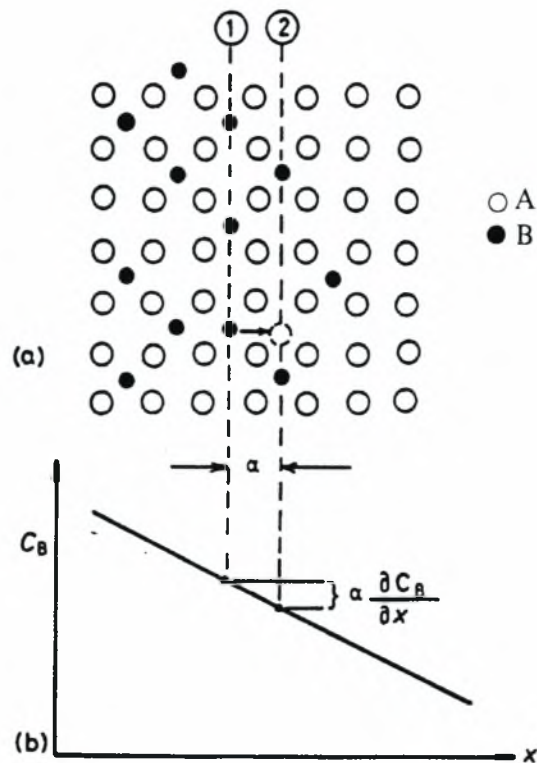
$$n_1 - n_2 = a [c_B(1) - c_B(2)] = -a^2 \frac{\partial c_B}{\partial x} \quad (2.4)$$

Έτσι η (2.3) γίνεται:

$$J_B = -\frac{1}{6} \Gamma_B a^2 \frac{\partial c_B}{\partial x} \quad (2.5)$$

Ορίζεται:
$$\frac{1}{6} \Gamma_B \alpha^2 = D_B \quad (2.6)$$

οπότε η (2.5) γίνεται:
$$J_B = -D_B \frac{\partial c_B}{\partial x} \quad (2.7)$$



Σχήμα 2.1: (α) Διάχυση των ατόμων B σε κενές θέσεις παρεμβολής, (β) προφίλ συγκεντρώσεως του συστατικού B.

Η σχέση (2.7) είναι ο **1^{ος} νόμος του Fick**, που συσχετίζει τη ροή των ατόμων παρεμβολής B με το gradient της συγκεντρώσεως $\frac{\partial c_B}{\partial x}$. Η παράμετρος D_B στη σχέση (2.7) ονομάζεται συντελεστής διαχύσεως του B και έχει μονάδες m^2/s . Εξαρτάται τόσο από τη θερμοκρασία όσο και από τη συγκέντρωση των ατόμων B στο κράμα.

2^{ος} νόμος του Fick

Σε περίπτωση που δεν δίνονται σταθερές συνθήκες αλλά η συγκέντρωση c_B μεταβάλλεται τόσο με την απόσταση όσο και με το χρόνο t , τότε δεν μπορεί να ολοκληρωθεί αμέσως ο 1^{ος} νόμος του Fick. Πρέπει, έτσι, να υπολογιστεί η μεταβολή της συγκέντρωσης c_B σε οποιοδήποτε σημείο με το χρόνο.

Στο Σχ. 2.2 θεωρείται μία βαθμίδα (gradient) συγκεντρώσεως, η οποία μεταβάλλεται χρονικά. Η ροή σε κάθε σημείο εξαρτάται από την τιμή του συντελεστή διαχύσεως D_B και του gradient $\frac{\partial c_B}{\partial x}$. Για ένα πολύ μικρό τμήμα δx η ροή των ατόμων B που εισέρχεται στο τμήμα

είναι $J_1 = -D_B \frac{\partial c_B}{\partial x}$. Η ροή που εξέρχεται από το τμήμα είναι:

$$J_2 = J_1 + \frac{\partial J_B}{\partial x} \delta x \quad (2.8)$$

Επίσης, ο αριθμός των ατόμων B, που εισρέουν μέσα στο τμήμα δx σε χρόνο δt είναι $J_1 \cdot A \cdot \delta t$. Στον ίδιο χρόνο εκρέουν $J_2 \cdot A \cdot \delta t$ άτομα. Η αύξηση της συγκεντρώσεως των ατόμων B στο τμήμα δx είναι τότε:

$$\delta c_B = \frac{(J_1 - J_2) A \cdot \delta t}{A \cdot \delta x} \quad (2.9)$$

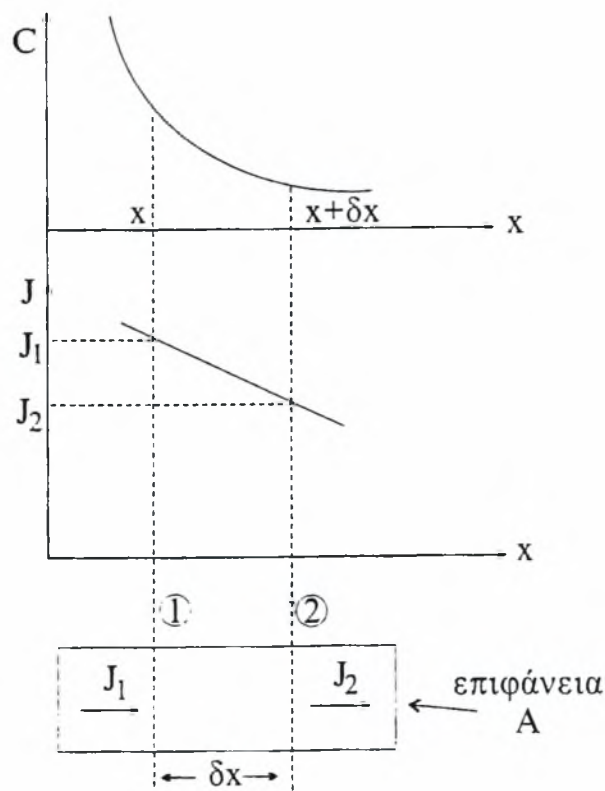
Συνδυάζοντας την (2.8) και την (2.9) στο όριο $\delta t \rightarrow 0$ προκύπτει: $\frac{\partial c_B}{\partial t} = -\frac{\partial J_B}{\partial x}$ και

$$\boxed{\frac{\partial c_B}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_B \frac{\partial c_B}{\partial x} \right)} \quad (2.10)$$

Η σχέση (2.10) είναι ο **2^{ος} νόμος του Fick**.

Εάν ο συντελεστής διαχύσεως δε μεταβάλλεται με τη συγκέντρωση των ατόμων B, τότε ο 2^{ος} νόμος του Fick γίνεται:

$$\frac{\partial c_B}{\partial t} = D_B \frac{\partial^2 c_B}{\partial x^2} \quad (2.11)$$



Σχήμα 2.2: Προφίλ συγκεντρώσεως $c(x)$ και ροής $J(x)$ κατά τη διάχυση παρεμβολής.

2.3 ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΚΗ ΕΞΑΡΤΗΣΗ ΤΗΣ ΔΙΑΧΥΣΗΣ - ΘΕΡΜΙΚΗ ΕΝΕΡΓΟΠΟΙΗΣΗ

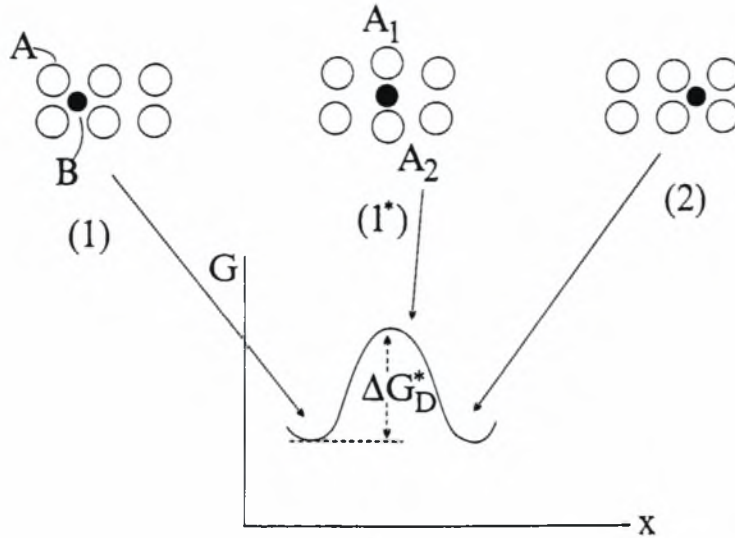
Για να ολοκληρωθεί το κεφάλαιο της διάχυσης θα πρέπει να αναφερθεί η επίδραση της θερμοκρασίας στην ταχύτητα διαχύσεως των ατόμων παρεμβολής. Θα μελετηθεί, δηλαδή, η θερμοκρασιακή εξάρτηση του συντελεστή διαχύσεως D , ο οποίος με τη σειρά του συσχετίζεται με τη συχνότητα αλμάτων σε κενές θέσεις παρεμβολής δια μέσου της σχέσεως (2.6).

Καταρχήν θα περιγραφούν οι ενεργειακές μεταβολές, που συμβαίνουν κατά τη διάρκεια ενός τέτοιου άλματος (βλ. Σχ. 2.3). Στη θέση ισορροπίας (1) το άτομο B ευρίσκεται σε ένα ελάχιστο ελεύθερης ενέργειας G_1 . Για να επιτύχει άλμα στην άλλη θέση ισορροπίας (2), η οποία αντιστοιχεί στη διπλανή θέση παρεμβολής, πρέπει να διέλθει από τη θέση (1*), ανάμεσα από τα άτομα A_1 και A_2 . Η θέση αυτή αντιστοιχεί σε υψηλότερη ενέργεια λόγω της παραμορφώσεως του δεσμού A_1-A_2 . Η πιθανότητα το άτομο B να αποκτήσει την επιπλέον ενέργεια

ΔG_D^* και να βρεθεί στην ενεργοποιημένη κατάσταση δίδεται από τον παράγοντα Boltzmann, $\exp(-\Delta G_D^*/RT)$. Εάν ν η συχνότητα ταλαντώσεως των ατόμων παρεμβολής, τότε η συχνότητα αλμάτων είναι:

$$\Gamma_B = \nu z \exp(-\Delta G_D^*/RT) \quad (2.12)$$

όπου z ο αριθμός συνδιατάξεως των θέσεων παρεμβολής.



Σχήμα 2.3: Ενεργειακές μεταβολές κατά την διάρκεια άλματος από την αρχική θέση (1), μέσω της ενεργοποιημένης καταστάσεως (1*) στην τελική θέση (2).

Τότε με τη βοήθεια της σχέσεως (2.6) προκύπτει ότι:

$$D_B = \left(\frac{1}{6} \alpha^2 z \nu \exp \frac{\Delta S_D^*}{R} \right) \exp \left(- \frac{\Delta H_D^*}{RT} \right) \quad (2.13)$$

Θέτοντας ως $D_{B0} = \frac{1}{6} \alpha^2 z \nu \exp \frac{\Delta S_D^*}{R}$, το θερμοκρασιακά ανεξάρτητο όρο προκύπτει:

$$D_B = D_{B0} \exp \left(- \frac{\Delta H_D^*}{RT} \right) \quad (2.14)$$

Η σχέση (2.14) εκφράζει τη θερμοκρασιακή εξάρτηση του συντελεστή διαχύσεως D_B των ατόμων παρεμβολής Β.

Το ΔH_D^* είναι η *ενθαλπία ή ενέργεια ενεργοποίησης* για διάχυση παρεμβολής. Για την γραφική απεικόνιση της σχέσεως (2.14) λογαριθμούνται και τα δύο μέλη της εξίσωσης:

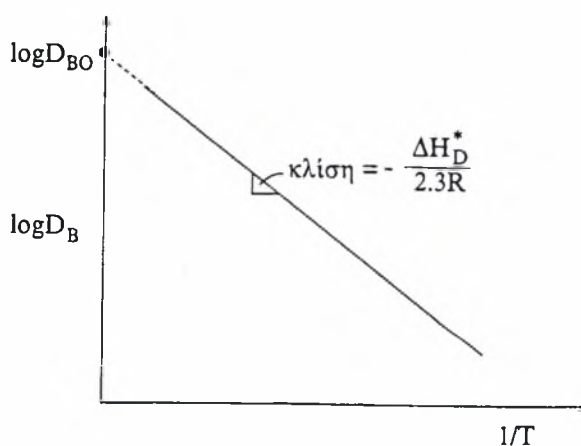
$$\log D_B = \log D_{B0} - \frac{\Delta H_D^*}{2,3RT} \quad (2.15)$$

Η γραφική παράσταση της σχέσεως (2.15) δίδεται στο Σχ. 2.4. Η σχέση μεταξύ $\log D_B$ και

$(1/T)$ είναι γραμμική. Η κλίση ισούται με $-\frac{\Delta H_D^*}{2,3R}$. Επομένως η ενθαλπία ενεργοποίησης

ΔH_D^* μπορεί να υπολογιστεί από πειραματικές μετρήσεις του D σε συνάρτηση με τη θερμοκρασία.

Η ενθαλπία ενεργοποίησης εξαρτάται από το μέγεθος του ατόμου. Δηλαδή, τα μικρότερα άτομα διαχέονται πιο γρήγορα. Αυτό συμβαίνει διότι τα μικρότερα άτομα προκαλούν μικρότερες παραμορφώσεις κατά τη μετακίνησή τους από μία κενή θέση παρεμβολής σε μία άλλη.



Σχήμα 2.4: Θερμοκρασιακή εξάρτηση του συντελεστή διαχύσεως. Από την κλίση προσδιορίζεται η ενέργεια ενεργοποίησης

2.4 ΔΙΑΧΥΣΗ ΣΕ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΜΕ ΠΟΛΛΑ ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ

2.4.1 Υπολογισμός συντελεστών διάχυσης

Οι Andersson και Ågren[3] παρουσίασαν μία μαθηματική προσέγγιση κατάλληλη να εκφράσει τους συντελεστές διάχυσης, σε σχέση με τη σύσταση και τη θερμοκρασία, σε πολυκραμικά συστήματα. Οι συντελεστές διάχυσης υπολογίζονται βάση κινητικών παραμέτρων και θερμοδυναμικών ιδιοτήτων της φάσης. Για ένα σύστημα με στοιχεία αντικατάστασης ή παρεμβολής, δίνεται η παρακάτω έκφραση για τους συντελεστές διάχυσης:

$$D_{kj} = \sum_{i \in S} (\delta_{ik} - u_k) u_i \Omega_i \frac{\partial \mu_i}{\partial u_j} V_S + \sum_{i \notin S} \delta_{ik} u_i y_{Va} \Omega_i \frac{\partial \mu_i}{\partial u_j} V_S \quad (2.16)$$

όπου $i \in S$ και $i \notin S$ δείχνει ότι το i είναι ένα άτομο αντικατάστασης ή ένα άτομο παρεμβολής, αντίστοιχα. Ο όρος δ_{ik} είναι το δέλτα του Kronecker, $\delta_{ik} = 1$ εάν $i = k$ και $\delta_{ik} = 0$ σε κάθε άλλη περίπτωση. Ο όρος V_S είναι ο γραμμομοριακός όγκος μετρούμενος ανά mole στοιχείων αντικατάστασης και y_{Va} είναι το ποσοστό των πλεγματικών θέσεων πάνω στο υποπλέγμα παρεμβολής που καταλαμβάνεται από οπές. Τέλος, ο όρος $\frac{\partial \mu_i}{\partial u_j}$ είναι ένας θερμοδυναμικός παράγοντας. Το ποσοστό του κάθε συστατικού σε κάθε φάση δίνεται από το κλάσμα u σύμφωνα με τη σχέση:

$$u_j = \frac{x_j}{\sum_{i \in S} x_i} \quad (2.17)$$

όπου τα x είναι τα γραμμομοριακά κλάσματα. Η παράμετρος Ω_i δείχνει την ατομική κινητικότητα του στοιχείου i και προκύπτει από τη σχέση του Arrhenius:

$$\Omega_i = \Omega_i^o \exp\left(\frac{-Q_i}{RT}\right) \quad (2.18)$$

όπου Ω_i^o είναι ένας παράγοντας συχνότητας και Q_i είναι η ενέργεια ενεργοποίησης. Και οι δύο μεταβλητές εξαρτώνται από τη σύσταση, την πίεση και τη θερμοκρασία.

Σε πρακτικούς υπολογισμούς, χρησιμοποιείται ένας ανηγμένος συντελεστής διάχυσης όπου η συγκέντρωση ενός στοιχείου n έχει επιλεγθεί σαν συνάρτηση των άλλων. Ο ανηγμένος συντελεστής διάχυσης δίνεται από τη σχέση:

$$D_{kj}^n = D_{kj} - D_{kn} \frac{V_j}{V_n} \quad (2.19)$$

όπου n είναι το στοιχείο που απομακρύνεται και V_j είναι ο μερικός γραμμομοριακός όγκος του στοιχείου j .

2.4.2 Τροποποίηση του 1^{ου} νόμου του Fick για πολυσυστατικά συστήματα

Σύμφωνα με το νόμο του Onsager η βαθμίδα συγκέντρωσης ενός συστατικού μπορεί να προκαλέσει τη διάχυση ενός άλλου συστατικού σύμφωνα με τη σχέση:

$$J_k = - \sum_{j=1}^n D_{kj} \frac{\partial c_j}{\partial x} \quad (2.20)$$

όπου n ο αριθμός συστατικών. Για $k=1,2,3$ στοιχεία ισχύουν οι σχέσεις:

$$J_1 = -D_{11} \frac{\partial c_1}{\partial x} - D_{21} \frac{\partial c_2}{\partial x} - D_{31} \frac{\partial c_3}{\partial x} \quad (2.21)$$

$$J_2 = -D_{12} \frac{\partial c_1}{\partial x} - D_{22} \frac{\partial c_2}{\partial x} - D_{32} \frac{\partial c_3}{\partial x} \quad (2.22)$$

$$J_3 = -D_{13} \frac{\partial c_1}{\partial x} - D_{23} \frac{\partial c_2}{\partial x} - D_{33} \frac{\partial c_3}{\partial x} \quad (2.23)$$

το οποίο εκφράζεται σε μητρώϊκή μορφή ως εξής:

$$\begin{bmatrix} J_1 \\ J_2 \\ J_3 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} D_{11} & D_{21} & D_{31} \\ D_{12} & D_{22} & D_{32} \\ D_{13} & D_{23} & D_{33} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \frac{\partial c_1}{\partial x} \\ \frac{\partial c_2}{\partial x} \\ \frac{\partial c_3}{\partial x} \end{bmatrix} \quad (2.24)$$

2.5 Η ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΩΝ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΔΙΑΦΟΡΩΝ ΓΙΑ ΤΗ ΛΥΣΗ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΩΝ ΔΙΑΧΥΣΗΣ

Η μέθοδος DICTRA βασίζεται στην αριθμητική επίλυση των εξισώσεων διαχύσεως με πολλά συστατικά θεωρώντας ότι στα διαφασικά σύνορα επικρατεί *τοπική θερμοδυναμική ισορροπία*. Η επίλυση των εξισώσεων αυτών γίνεται με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών.

Για να κατανοηθεί ο τρόπος με τον οποίο επιλύονται προβλήματα διαχύσεως με πεπερασμένες διαφορές, θα θεωρηθεί ένα σχετικά απλό πρόβλημα και η κατάσταση της λύσεώς του. Στο Σχ.2.5 δίνονται δύο μέταλλα σε επαφή. Το μέταλλο A, πάχους 1mm και το B, πάχους 4mm. Τα μέταλλα αυτά συγκροτούν ένα ζεύγος διαχύσεως. Όταν το ζεύγος αυτό υποστεί ανόπτηση στη θερμοκρασία T_1 , λόγω της διαχύσεως η διεπιφάνεια θα μετακινηθεί. Η διεύθυνση κινήσεως της διεπιφάνειας εξαρτάται από τις τιμές των D_α και D_β , δηλαδή τους συντελεστές διαχύσεως στις φάσεις α και β. Οι συντελεστές διαχύσεως εξαρτώνται από τη συγκέντρωση, δηλαδή $D_\alpha = D_\alpha(c)$ και $D_\beta = D_\beta(c)$, αντίστοιχα. Η μέση σύσταση είναι $\bar{c} = 0,8$, οπότε στο τέλος της ανοπτήσεως, σε κατάσταση ισορροπίας, όλο το ζεύγος πάχους 5mm θα αποτελείται από 100% φάση β.

Για να λυθεί το πρόβλημα αυτό με πεπερασμένες διαφορές, ακολουθείται η εξής διαδικασία:

1. Δημιουργείται ένα πλέγμα με κομβικά σημεία j σε κάθε φάση. Τα κομβικά σημεία απέχουν Δx^α και Δx^β αντίστοιχα.
2. Επιλέγεται ένα χρονικό διάστημα Δt . Λύνεται η εξίσωση διαχύσεως για τη νέα συγκέντρωση στο χρόνο $i+1$ για κάθε κομβικό σημείο j . Οι εξισώσεις διαχύσεως σε μορφή πεπερασμένων διαφορών είναι
 - για τη φάση α:

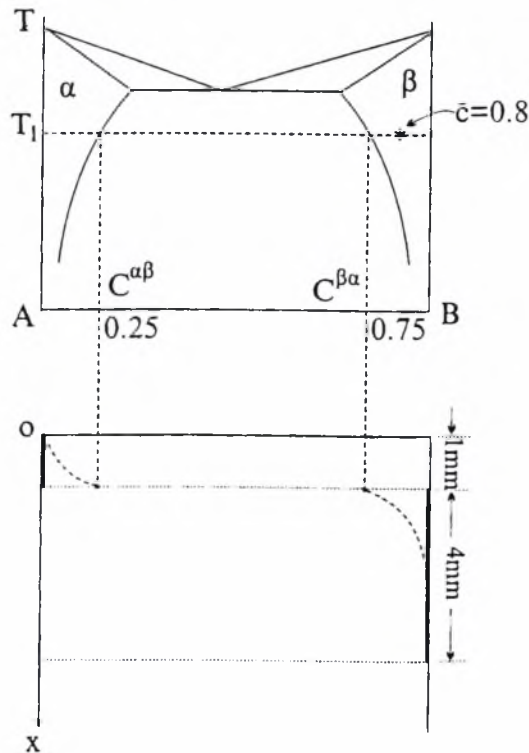
$$\left(\frac{c_{i+1} - c_i}{\Delta t} \right)_j = D^\alpha \left[\frac{c_{j+1} - 2c_j + c_{j-1}}{(\Delta x^\alpha)^2} \right]_i \quad (2.25)$$

- για τη φάση β:

$$\left(\frac{c_{i+1} - c_i}{\Delta t} \right)_j = D^\beta \left[\frac{c_{j-1} - 2c_{j-2} + c_{j-3}}{(\Delta x^\beta)^2} \right]_i \quad (2.26)$$

3. Λαμβάνονται υπόψη οι συνοριακές συνθήκες. Εάν π.χ. η συνοριακή συνθήκη ορίζει μηδενική ροή στην επιφάνεια, τότε θεωρείται ένα εικονικό κομβικό σημείο έξω από το υλικό με την ίδια σύσταση, που έχει και το κομβικό σημείο στην επιφάνεια του υλικού.
4. Υπολογίζεται η κίνηση της διεπιφάνειας. Εάν ξ_{i+1} η νέα θέση της διεπιφάνειας τη χρονική στιγμή $i+1$, τότε (βλ. Σχ.2.5):

$$(c^{\beta\alpha} - c^{\alpha\beta}) \left(\frac{\xi_{i+1} - \xi_i}{\Delta t} \right)_j = -D_\beta \left(\frac{-c_{j-1} + c^{\beta\alpha}}{\Delta x^\beta} \right)_i + D_\alpha \left(\frac{c_{j+1} - c^{\alpha\beta}}{\Delta x^\alpha} \right)_i \quad (2.27)$$



Σχήμα 2.5: Διμερές διάγραμμα φάσεων A-B και προφίλ συγκεντρώσεως σε ζεύγος διαχύσεως μετάλλων A και B.

5. Για μικρούς χρόνους η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών παρουσιάζει σημαντικό σφάλμα. Για το λόγο αυτό χρησιμοποιούνται αναλυτικές λύσεις (π.χ. συναρτήσεις λάθους) για τον υπολογισμό του προφίλ συγκεντρώσεως σε μικρούς χρόνους και χρησιμοποιείται το προφίλ αυτό ως αρχικό δεδομένο για τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών.[1]

2.6 ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΟ ΠΑΚΕΤΟ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗΣ ΚΙΝΗΤΙΚΗΣ ΔΙΑΧΥΤΙΚΩΝ ΜΕΤΑΣΧΗΜΑΤΙΣΜΩΝ DICTRA

Η πρόβλεψη των κρίσιμων θερμοκρασιών μετασχηματισμού, των ποσοστών και των συστάσεων των φάσεων στην ισορροπία είναι πολύ σημαντική στο σχεδιασμό κραμάτων. Όμως, πολλές φορές η μικροδομή των υλικών διαμορφώνεται μέσω διεργασιών μακριά από την ισορροπία (π.χ. μαρτενσιτικός μετασχηματισμός, ταχεία στερεοποίηση). Άλλες φορές η βέλτιστη μικροδομή επιτυγχάνεται διακόπτοντας μια θερμική κατεργασία, πριν επικρατήσουν συνθήκες θερμοδυναμικής ισορροπίας, όπως για παράδειγμα γίνεται στην τεχνητή γήρανση των κραμάτων αλουμινίου. Εδώ η πρόβλεψη της χρονικής εξέλιξης των μετασχηματισμών είναι απαραίτητη προϋπόθεση για οποιαδήποτε αξιόπιστη προσπάθεια σχεδιασμού κραμάτων. Τα τελευταία χρόνια έχει γίνει μεγάλη προσπάθεια στην κατεύθυνση του συνδυασμού της θερμοδυναμικής και της κινητικής για την πρόβλεψη σχηματισμού μικροδομών μακριά από την ισορροπία. Ένα μέρος αυτών των προσπαθειών έχει εστιαστεί στον υπολογισμό της μετασταθούς ισορροπίας, ενώ ένα άλλο μέρος στην απευθείας σύζευξη θερμοδυναμικών και κινητικών μοντέλων. Η δεύτερη μεθοδολογία παρουσιάζει σημαντικά πλεονεκτήματα αφού οι τοπικές θερμοδυναμικές επιδράσεις (π.χ. οι συστάσεις των φάσεων σε ένα διαφασικό σύνορο) μπορούν να υπολογιστούν αντί να εισαχθούν ως εκτιμήσεις στο κινητικό μοντέλο. Η πιο διαδεδομένη και αξιόπιστη μεθοδολογία συζεύξεως θερμοδυναμικής και κινητικής είναι η μεθοδολογία DICTRA (Diffusion Controlled Transformations). Η μέθοδος DICTRA βασίζεται στην αριθμητική επίλυση των εξισώσεων διαχύσεως με πολλά συστατικά, θεωρώντας ότι στα διαφασικά σύνορα επικρατεί *τοπική θερμοδυναμική ισορροπία*. Η επίλυση των εξισώσεων γίνεται με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών. [1]

Έτσι λοιπόν, το DICTRA είναι ένα λογισμικό για την προσομοίωση μετασχηματισμών υπό διαχυτικό έλεγχο σε πολυκραμματικά συστήματα. Είναι κατάλληλο για να επεξεργαστεί προβλήματα με κινούμενο σύνορο. Οι συνοριακές συνθήκες μπορούν να δοθούν με έναν αρκετά ευέλικτο τρόπο, ο οποίος κάνει το χρήστη ικανό να επεξεργαστεί προβλήματα πρακτικού ενδιαφέροντος. Παραδείγματα προβλημάτων που μπορεί να επεξεργαστεί το DICTRA είναι:

1. Προβλήματα μίας φάσης:

- Ομογενοποίηση Κραμάτων
- Ενανθράκωση και απανθράκωση χαλύβων στην ωστενιτική περιοχή.

2. Προβλήματα κινούμενου συνόρου:

- Διαλυτοποίηση καρβιδίου κατά τη διάρκεια ωστενιτοποίησης χάλυβα.
- Στερεοποίηση κραμάτων Al.
- Ανάπτυξη σε κράματα Ti.
- Αντιδράσεις κατά την επιφανειακή επικάλυψη χάλυβων.

3. Διάχυση σε διεσπαρμένα συστήματα:

- Ενανθράκωση υπερκραμάτων.
- Ενανθράκωση ταχυχάλυβων.

4. Συνεργατική ανάπτυξη:

- Ανάπτυξη περλίτη σε κραματωμένους χάλυβες.

Το πρόγραμμα βασίζεται σε μία αριθμητική λύση των εξισώσεων της διάχυσης σε διάφορες περιοχές ενός υλικού, υποθέτοντας ότι επικρατεί τοπικά σε όλες τις διεπιφάνειες της φάσης θερμοδυναμική ισορροπία. Το DICTRA είναι συζευγμένο με το THERMO-CALC, το οποίο χειρίζεται όλους τους θερμοδυναμικούς υπολογισμούς που είναι απαραίτητοι για το DICTRA.

Το DICTRA είναι διαιρεμένο σε 4 βασικά τμήματα:

- Επίλυση των εξισώσεων της διάχυσης.
- Υπολογισμός της θερμοδυναμικής ισορροπίας.
- Επίλυση εξισώσεων ισοζυγίου μάζας.
- Μετατόπιση των θέσεων της διεπιφάνειας της φάσης και ρύθμιση των σημείων του πλέγματος κ.λ.π.

Επιπλέον, υπάρχει μία διαδικασία που κάνει ικανό το χρήστη να σχεδιάσει και να κάνει μία λίστα της προσομοίωσης, π.χ. διαγράμματα συγκέντρωσης, μέγεθος του κόκκου σε συνάρτηση με το χρόνο κ.λ.π. και μία βάση δεδομένων διαμορφωμένη έτσι ώστε να χειρίζεται θερμοδυναμικά και κινητικά δεδομένα.[4]

2.7 ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΩΝ ΘΕΡΜΟΔΥΝΑΜΙΚΩΝ ΚΑΙ ΚΙΝΗΤΙΚΩΝ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ

2.7.1 Θερμοδυναμικά Δεδομένα

Στους υπολογισμούς που θα ακολουθήσουν στα παρακάτω προβλήματα, υποτίθεται ότι στην κινούμενη διεπιφάνεια της φάσης επικρατεί ισορροπία. Για το διαδικασία αυτή χρησιμοποιείται το πακέτο THERMO-CALC, το οποίο υπολογίζει την τοπική ισορροπία στην κινούμενη διεπιφάνεια της φάσης.

Σε ένα διμερές σύστημα υπό ατμοσφαιρική πίεση η συνδετική γραμμή ισορροπίας καθορίζεται μόνο από τη θερμοκρασία και μπορεί να καθοριστεί απευθείας από το διάγραμμα φάσεων. Σε ένα σύστημα με n συστατικά θα πρέπει να προσδιοριστούν $n-2$ συνθήκες σύμφωνα με τη θερμοκρασία και την πίεση για να τεθεί το πρόβλημα με μοναδική λύση και να υπολογιστεί η συνδετική γραμμή. Υπάρχει, έτσι, εκφυλισμός στην επιλογή της συνδετικής γραμμής και απαιτούνται μερικές αρχές για να επιλεγθεί ανάμεσα στις άπειρες συνδετικές γραμμές που υπάρχουν. Σε έναν συνήθη υπολογισμό ισορροπίας, η κατάλληλη συνδετική γραμμή είναι εκείνη που ικανοποιεί το ισοζύγιο μάζας στη διεπιφάνεια. Έτσι, θα πρέπει να θεωρηθούν $n-2$ χημικά δυναμικά σαν άγνωστοι και να μεταβληθούν αυτά μέχρι να βρεθεί η σωστή συνδετική γραμμή. Σε κάθε περίπτωση είναι απαραίτητο να υπολογιστεί η ισορροπία για καθορισμένα χημικά δυναμικά.[5]

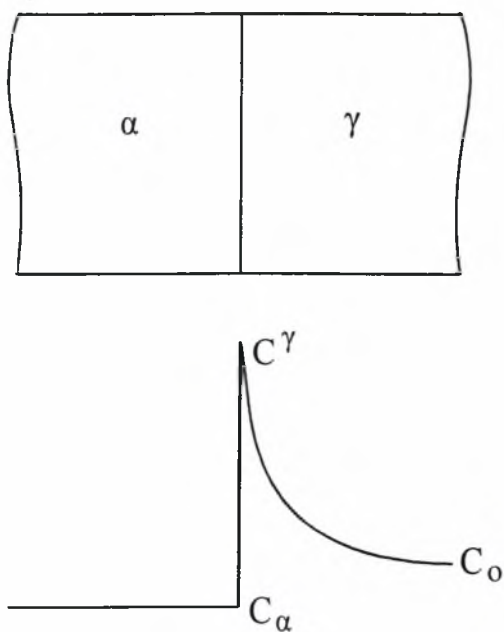
2.7.2 Κινητικά Δεδομένα

- ***Εξισώσεις ισοζυγίων ροής***

Για να γίνει κατανοητή η διαδικασία επεξεργασίας των κινητικών δεδομένων στο πρόγραμμα DICTRA επιλύεται ένα πρόβλημα μετασχηματισμού. Θεωρείται ένα σωματίδιο φερριτη, που αναπτύσσεται μέσα στον ωστενίτη. Το προφίλ συγκεντρώσεως των συστατικών φαίνεται στο Σχ.2.6. Για ένα σύστημα n συστατικών οι εξισώσεις ισοζυγίου ροής μάζας στη διεπιφάνεια είναι:

$$u^{\alpha} * C_k^{\alpha} - u^{\gamma} * C_k^{\gamma} = J_k^{\alpha} - J_k^{\gamma} \quad k = 1, 2, \dots, n \quad (2.28)$$

όπου u^{α} και u^{γ} είναι οι ταχύτητες μετατοπίσεως του διαφασικού συνόρου στο τοπικό σύστημα αναφοράς στις φάσεις α και γ , $*C_k^{\alpha}$ και $*C_k^{\gamma}$ είναι οι συγκεντρώσεις του συστατικού k στις φάσεις α και γ στο διαφασικό σύνορο και J_k^{α} , J_k^{γ} είναι οι διαχυτικές ροές του συστατικού k στις φάσεις α και γ σε κάθε πλευρά του διαφασικού συνόρου.



Σχήμα 2.6: Προφίλ συγκεντρώσεως κατά τον σχηματισμό φάσεως α από τη φάση γ .

Οι διαχυτικές ροές δίδονται από το νόμο του Fick:

$$J_k^\alpha = -D_k^\alpha \frac{\partial C_k^\alpha}{\partial x} \quad (2.29)$$

$$J_k^\gamma = -D_k^\gamma \frac{\partial C_k^\gamma}{\partial x} \quad (2.30)$$

Η ροή των ατόμων στο εσωτερικό της κάθε φάσης περιγράφεται από το 2^ο νόμο του Fick σύμφωνα με τις σχέσεις:

$$\text{Στη φάση } \alpha: \frac{\partial C_k^\alpha}{\partial t} = -\frac{\partial J_k^\alpha}{\partial x} \quad (2.31)$$

$$\text{Στη φάση } \gamma: \frac{\partial C_k^\gamma}{\partial t} = -\frac{\partial J_k^\gamma}{\partial x} \quad (2.32)$$

Σαν τοπικό σύστημα αναφοράς μπορεί να θεωρηθεί είτε το *σταθερού αριθμού* (number fixed) ως προς τον αριθμό των γραμμομορίων των συστατικών k , οπότε:

$$\sum_{k=1}^n J_k^\alpha = \sum_{k=1}^n J_k^\gamma = 0 \quad (2.33)$$

είτε το *σταθερού όγκου* (volume fixed), το οποίο ορίζεται έτσι ώστε να μην υπάρχει καθαρή μεταβολή όγκου, οπότε:

$$\sum_{k=1}^n J_k^{\alpha} V_k^{\alpha} = \sum_{k=1}^n J_k^{\gamma} V_k^{\gamma} = 0 \quad (2.34)$$

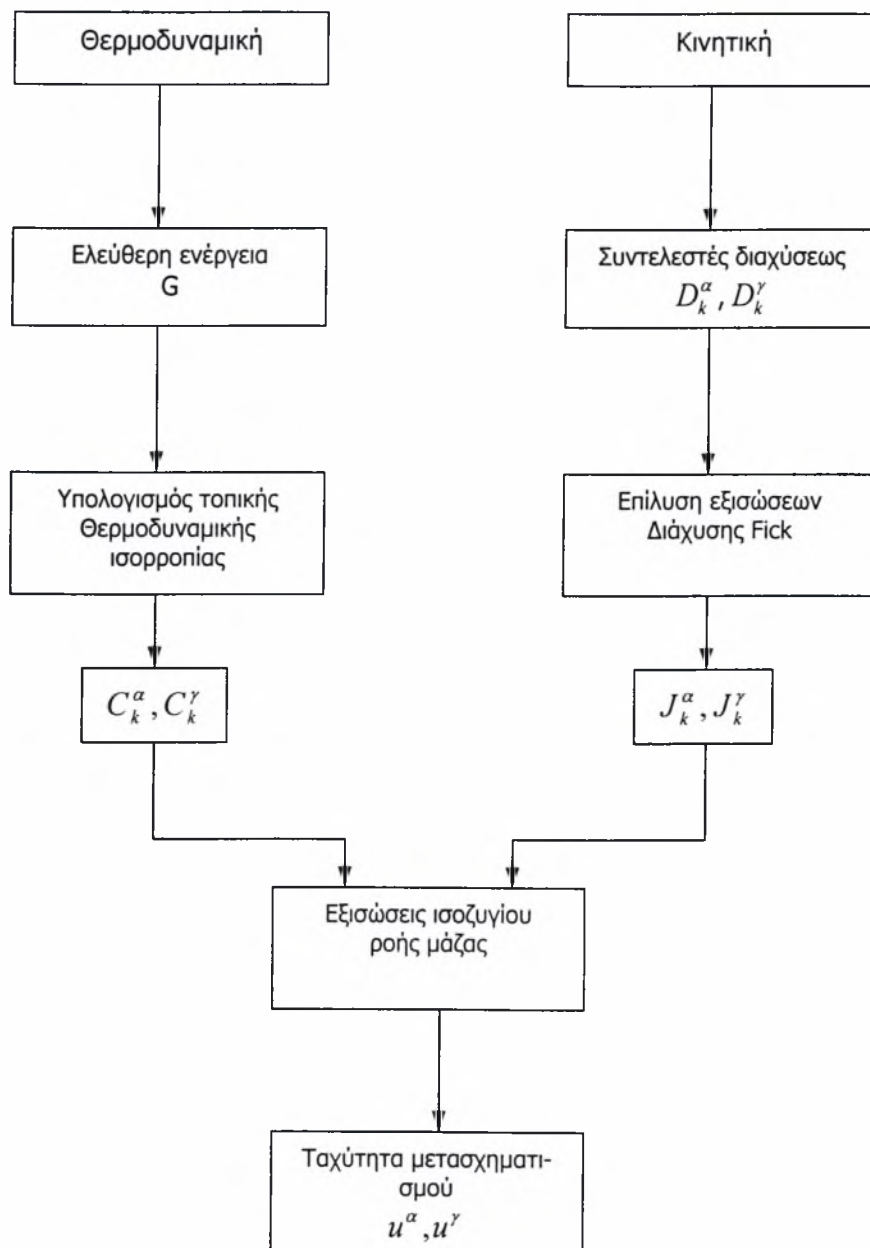
όπου V_k^{α} και V_k^{γ} είναι οι μοριακοί όγκοι του συστατικού k στις φάσεις α και β αντίστοιχα.

Μεταξύ των u^{α} και u^{γ} υπάρχει πάντα μία σχέση, που μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την απαλοιφή μιας εκ των δύο με αντίστοιχη μείωση των εξισώσεων (2.28) σε $n-1$.

Έτσι, αν θεωρηθεί ότι όλα τα στοιχεία αντικαταστάσεως στο φερρίτη έχουν τον ίδιο μοριακό όγκο V_s^{α} και αντίστοιχα στον ωστενίτη V_s^{γ} , τότε:

$$u^{\alpha} = u^{\gamma} \frac{V_s^{\alpha}}{V_s^{\gamma}} \quad (2.35)$$

Σε ένα διμερές σύστημα ($n=2$) η χρήση της (2.35) αφήνει μία μόνο εξίσωση ισοζυγίου ροής (σχέση 2.28), από την οποία είναι δυνατόν να υπολογιστεί η ταχύτητα μετασχηματισμού u^{γ} . Τα ${}^*C_k^{\alpha}$ και ${}^*C_k^{\gamma}$ καθορίζονται για μια συγκεκριμένη θερμοκρασία από την τοπική θερμοδυναμική ισορροπία (μπορούν να διαβαστούν απ' ευθείας από το διμερές διάγραμμα φάσεων). Σε ένα σύστημα με $n>2$ τα ${}^*C_k^{\alpha}$ και ${}^*C_k^{\gamma}$ δεν καθορίζονται μονοσήμαντα, αφού υπάρχουν άπειρες συνδετικές γραμμές (tie line), που ελαχιστοποιούν την ελεύθερη ενέργεια. Κάθε συνδυασμός των ${}^*C_k^{\alpha}$ και ${}^*C_k^{\gamma}$ μπορεί να προσδιοριστεί (για σταθερή θερμοκρασία και πίεση) από $n-2$ χημικά δυναμικά. Έτσι, ο αριθμός των αγνώστων είναι $n-1$ (η ταχύτητα μετασχηματισμού και τα $n-2$ χημικά δυναμικά). Με $n-1$ εξισώσεις ισοζυγίου ροής είναι επομένως δυνατό να βρεθεί μοναδική λύση και στο πρόβλημα του συστήματος με $n>2$. Έτσι ξεκινώντας με αρχικές τιμές των χημικών δυναμικών μπορούν να υπολογιστούν οι διαχυτικές ροές από τις εξισώσεις διαχύσεως και να ελεγχθούν αν ικανοποιούνται οι $n-1$ εξισώσεις ισοζυγίου ροής. Εάν δεν ικανοποιούνται, τότε μετατρέπονται οι αρχικές τιμές των χημικών δυναμικών και επαναλαμβάνεται η διαδικασία μέχρι να υπάρξει σύγκλιση. Το διάγραμμα ροής της μεθοδολογίας DICTRA φαίνεται στο Σχ. 2.7[1]



Σχ. 2.7: Διάγραμμα ροής της μεθοδολογίας DICTRA [1]

2.8 ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΩΝ ΒΑΣΙΚΩΝ ΑΡΧΩΝ ΤΟΥ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟΥ DICTRA

Πριν αρχίσει μία προσομοίωση, θα πρέπει να προσδιοριστούν ορισμένες συνθήκες. Θα πρέπει να καθοριστούν η αρχική κατάσταση του συστήματος και οι συνοριακές συνθήκες του. Θα πρέπει να δοθούν ορισμένοι παράγοντες που εμπλέκονται στους αριθμητικούς υπολογισμούς. Μερικοί από αυτούς περιέχονται στο λογισμικό σαν καθορισμένες τιμές, ενώ άλλοι πρέπει να εισαχθούν από το χρήστη. Οι βασικές αρχές που χρησιμοποιούνται όταν ορίζονται τα προβλήματα περιγράφονται συνοπτικά παρακάτω.

2.8.1 Κελιά, περιοχές και διεπιφάνειες

Το DICTRA αφορά ένα σύστημα διαιρεμένο σε κελιά. Το απλούστερο σύστημα αποτελείται από τουλάχιστον ένα κελί. Εάν υπάρχουν αρκετά κελιά, αυτά είναι αλληλοσυνδεδεμένα υπό την προϋπόθεση ισορροπίας λόγω διάχυσης και δεν υπάρχουν έτσι διαφορές στα δυναμικά διάχυσης ανάμεσα στα κελιά. Τα κελιά μπορούν να ανταλλάσσουν ύλη, ωστόσο, ένα σύστημα κελιών σχηματίζει ένα κλειστό σύστημα. Ένα κελί περιέχει μία ή αρκετές περιοχές μέσα στην οποία λύνεται το πρόβλημα διάχυσης. Το μέγεθος ενός κελιού παραμένει σταθερό κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης, αν και το μέγεθος μιας περιοχής μπορεί να αναπτύσσεται ή να συρρικνώνεται. Δύο γειτονικές περιοχές χωρίζονται από μια διεπιφάνεια η οποία συνήθως κινείται, αν και ο ρυθμός μετατόπισής της μπορεί να είναι πολύ αργός. Μία τέτοια διεπιφάνεια ονομάζεται εσωτερική και η κατάσταση της κίνησής της είναι αποτέλεσμα της προσομοίωσης. Το σύνορο ενός κελιού ονομάζεται εξωτερική διεπιφάνεια και η κατάσταση αυτού του τύπου της διεπιφάνειας μπορεί να επηρεαστεί από την επιλογή των συνοριακών συνθηκών.

2.8.2 Περιοχές και πλέγμα

Η εξίσωση διάχυσης λύνεται πάνω σε μια περιοχή η οποία θα πρέπει να περιέχει τουλάχιστον μία φάση, αλλά μπορεί να περιέχει και περισσότερες φάσεις. Μία περιοχή θα πρέπει, επίσης, να περιέχει ένα κατάλληλο αριθμό σημείων πλέγματος σε καθορισμένες θέσεις, ο οποίος αναπροσαρμόζεται κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης. Η σύσταση είναι γνωστή μόνο στα σημεία του πλέγματος και υποθέτουμε ότι μεταβάλλεται γραμμικά ανάμεσα στα σημεία. Σε κάθε περίπτωση όπου μία περιοχή περιέχει διάφορες φάσεις μία από αυτές θα πρέπει να επιλεγεί σαν μητρική μέσα στην οποία λύνεται το πρόβλημα διάχυσης.

Τα σημεία του πλέγματος μέσα σε μια περιοχή μπορούν να ταξινομηθούν γραμμικά, γεωμετρικά ή να εισαχθούν σημείο προς σημείο. Όταν τα πλεγματικά σημεία ταξινομούνται

γραμμικά ισαπέχουν μέσα στην περιοχή, ενώ όταν ταξινομούνται γεωμετρικά τα διαστήματα μεταξύ τους ορίζονται από την τιμή μίας μεταβλητής που καθορίζεται από τον χρήστη.

2.8.3 Γεωμετρία

Η γεωμετρία του προβλήματος ορίζεται από ένα γεωμετρικό εκθέτη. Το πρόγραμμα μπορεί να χειρίζεται προβλήματα που μπορούν να αναχθούν σε μονο-διάστατη γεωμετρία. Ο γεωμετρικός εκθέτης μπορεί να πάρει τιμές 0, 1 ή 2. Όπου:

0: Επίπεδη γεωμετρία

Αντιστοιχεί σε απείρου πλάτους πλάκα συγκεκριμένου πάχους.

1: Κυλινδρική γεωμετρία

Αντιστοιχεί σε απείρου μήκους κύλινδρο συγκεκριμένης ακτίνας.

2: Σφαιρική γεωμετρία

Αντιστοιχεί σε σφαίρα με συγκεκριμένη ακτίνα.

Το μέγεθος του συστήματος ορίζεται από το άθροισμα των μεγεθών όλων των περιοχών.

2.8.4 Φάσεις

Μία περιοχή μπορεί να περιέχει μία ή περισσότερες φάσεις. Μία φάση μπορεί να εισαχθεί σαν ενεργή ή ανενεργή, όπου ανενεργή χαρακτηρίζεται η φάση που αρχικά είναι ανύπαρκτη και δημιουργείται κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης. Το όνομα ανενεργή σημαίνει ότι η κινούσα δύναμη για καθίζηση της φάσης ελέγχεται συνεχώς. Εάν αυτή υπερβαίνει μία προκαθορισμένη θετική τιμή η φάση θα συμβάλει στην προσομοίωση και το όνομα της φάσης θα αλλάξει αυτόματα σε ενεργή. Τότε δημιουργείται μία νέα περιοχή και δίνεται το όνομα της φάσης.

Μία φάση μπορεί να ανήκει σε τρεις διαφορετικούς τύπους: *μητρική*, *σφαιροειδής* και *λαμελική*. Εάν υπάρχει μόνο μία φάση μέσα σε μια περιοχή τότε η φάση έχει μητρικό τύπο. Ο σφαιροειδής τύπος χρησιμοποιείται για να είναι δυνατή η μεταχείριση μίας ή περισσότερων διασκορπισμένων φάσεων μέσα σε μια μητρική. Θα πρέπει να τονισθεί ότι όσο διαρκεί η διάχυση μεταχειρίζεται μόνο η μητρική φάση. Η σφαιροειδής φάση υποτίθεται ότι είναι ομοιογενής και βρίσκεται σε ισορροπία με τη μητρική φάση σε κάθε σημείο. Ο λαμελικός τύπος χρησιμοποιείται για την προσομοίωση ανάπτυξης μιας ευτηκτικής ή ευτηκτοειδούς περιοχής.

2.8.5 Συστάσεις

Το DICTRA χρησιμοποιεί εσωτερικά κυρίως δύο τύπους μεταβλητών σύστασης, κλάσματα πλεγμάτων θέσεων (*site-fractions*) και κλάσματα u (*u-fractions*), αν και ο χρήστης

μπορεί να χρησιμοποιήσει επίσης %κ.β. (*wt%*), *κλάσμα μάζας (weight-fraction)* και γραμμομοριακό κλάσμα (*mole-fraction*) για ευκολία.

- ***κλάσματα πλεγμάτων θέσεων (Site-fractions) γ_k***

Το *site-fraction*, γ_k , είναι το κλάσμα θέσεων ενός ισοδύναμου πλέγματος κατειλημμένο από k είδη. Μόνο η μεταβλητή της συγκέντρωσης που μοναδικά ορίζει τη σύσταση μιας φάσης είναι απαραίτητο να χρησιμοποιεί το *site-fractions* στην αποθήκευση των δεδομένων κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης.

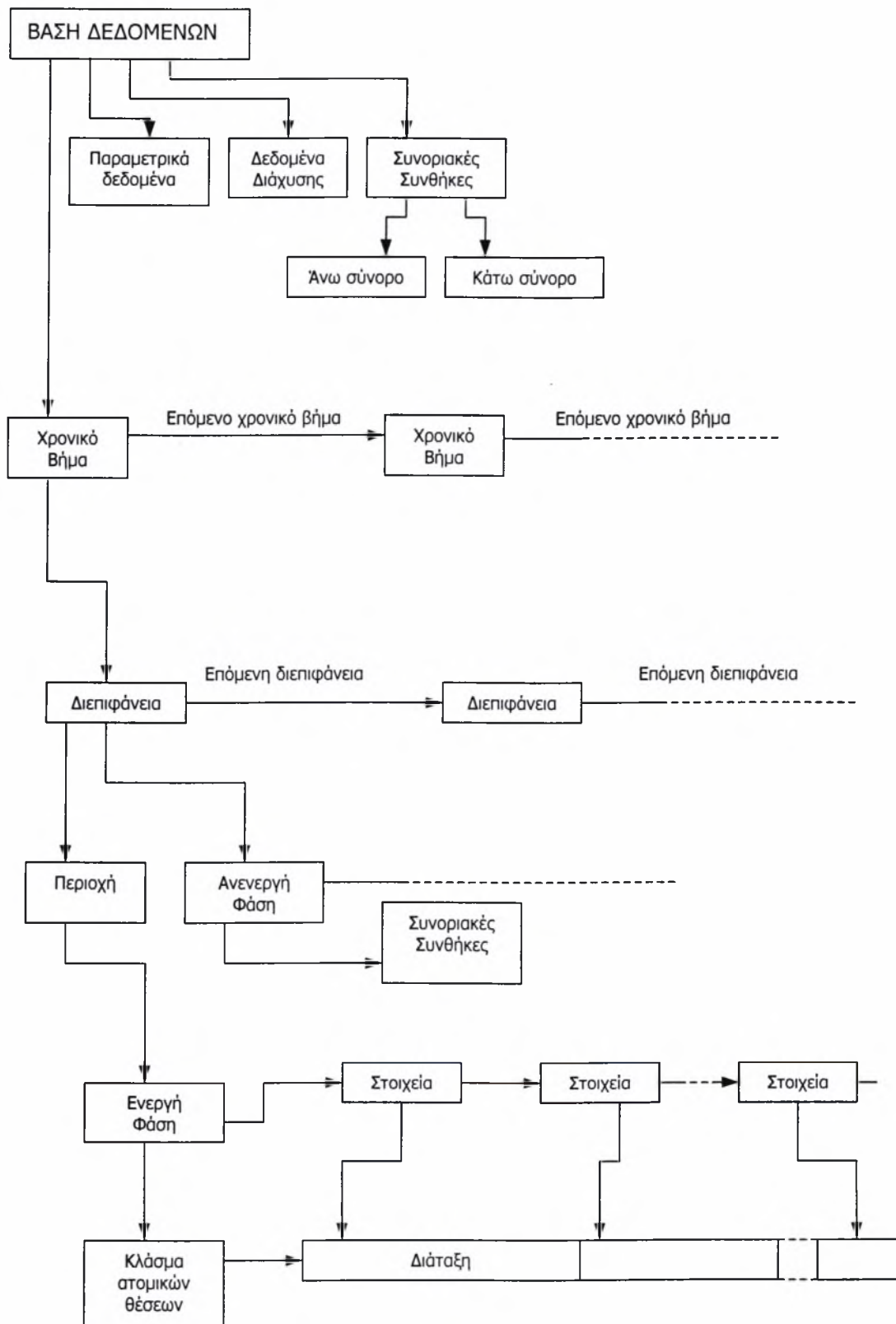
- ***κλάσματα u (u -fractions) u_k***

Το *u-fraction* ενός συστατικού ορίζεται

$$u_k = \frac{x_k}{\sum x_j}$$

όπου το άθροισμα αφορά μόνο τα στοιχεία αντικατάστασης. Η επιλογή καθορισμού της μορφής της σχέσης του όγκου στους υπολογισμούς, απαιτεί τη χρήση μίας μεταβλητής της σύστασης η οποία να σχετίζεται με τον όγκο. Ο ορισμός του *u-fraction* βασίζεται στη υπόθεση ότι ένας τύπος μπορεί ή δεν μπορεί να συμβάλλει στον όγκο μιας φάσης. Ένας τύπος ατόμου παρεμβολής υποθέτουμε ότι δεν συμβάλλει στον όγκο.

Κλείνοντας την περιγραφή του λογισμικού προσομοίωσης διαχυτικών μετασχηματισμών DICTRA, παρατίθεται το Σχ. 2.8, στο οποίο αναλύεται η διαδικασία προσομοίωσης και τα βήματα του υπολογιστή.



Σχ. 2.8: Λεπτομερής περιγραφή της δομής των δεδομένων του προγράμματος DICTRA [6]

3. ΠΑΡΑΜΕΤΡΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΤΟΥ DICTRA

3.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η παραμετρική μελέτη του DICTRA αποτελεί μία από τις σημαντικότερες εργασίες της διπλωματικής αυτής. Σκοπός της είναι η μελέτη μιας σειράς από παραμέτρους, οι οποίες χρησιμοποιούνται στην επίλυση των προβλημάτων και οι τιμές τους καθορίζονται από το χρήστη. Θα δειχτεί έτσι, πόσο και πως κάθε παράμετρος από αυτές επηρεάζει το αποτέλεσμα.

Κατά τη διάρκεια επίλυσης ενός συγκεκριμένου προβλήματος επιλέχθηκαν παράμετροι με τιμές μεγάλου εύρους. Κάθε φορά που επιλέγονταν μια παράμετρος ως μεταβλητή, οι υπόλοιπες παράμετροι του προβλήματος παρέμεναν σταθερές.

Επιλύθηκαν δύο προβλήματα διάχυσης με κινούμενο σύνορο. Το πρώτο αφορά τον μετασχηματισμό του διμερούς Fe-C και το δεύτερο τον μετασχηματισμό του τριμερούς Fe-Mn-C.

3.2 ΠΑΡΑΜΕΤΡΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ

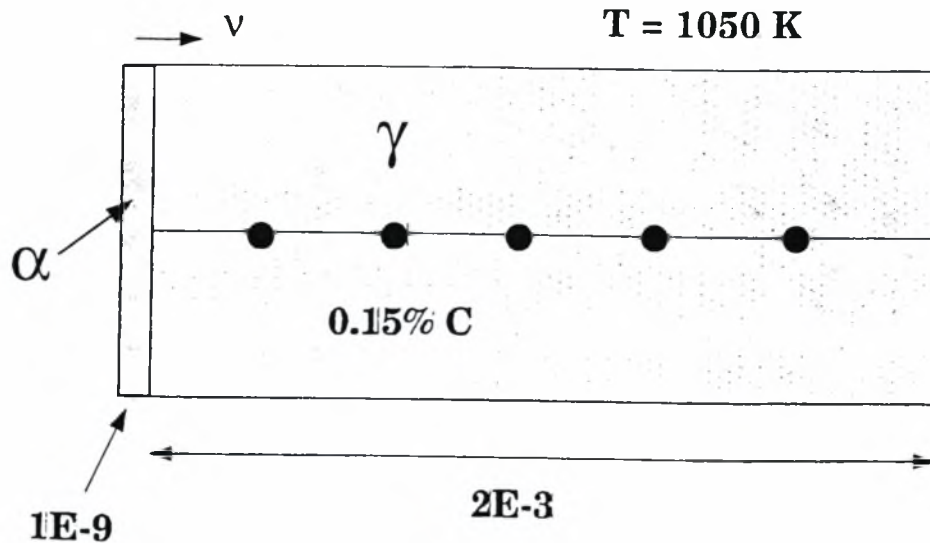
A) Παράδειγμα 1: Μετασχηματισμός ωστενίτη(fcc) σε φερρίτη(bcc) στο διμερές κράμα Fe-C.

Η αρχική κατάσταση είναι ωστενίτης πάχους 2mm. Η σύνθεση του ωστενίτη είναι Fe-0.15wt%C. Μετά τη ωστενιτοποίηση το δοκίμιο ψύχεται στους 1050K. Το σύστημα θεωρείται ότι είναι κλειστό.

Αναμένεται ο φερρίτης να αναπτυχθεί μέσα στον ωστενίτη. Για τον λόγο αυτό κατά την έναρξη του μετασχηματισμού γίνεται η υπόθεση ότι υπάρχει μια λεπτή περιοχή φερρίτη δίπλα στον ωστενίτη όπως φαίνεται στο Σχ. 3.1.

B) Παράδειγμα 2: Μετασχηματισμός ωστενίτη(fcc) σε φερρίτη(bcc) στο τριμερές κράμα Fe-Mn-C.

Η αρχική κατάσταση είναι ωστενίτης πάχους 2mm. Η σύνθεση του ωστενίτη είναι Fe-0.75wt%Mn-0.15wt%C. Μετά την ωστενιτοποίηση το δοκίμιο ψύχεται στους 1050K. Το σύστημα θεωρείται ότι είναι κλειστό.



Σχήμα 3.1: Γεωμετρική απεικόνιση του μοντέλου για τη μελέτη μετασχηματισμού του ωστενίτη σε φερρίτη.

Αναμένεται ο φερρίτης να αναπτυχθεί μέσα στον ωστενίτη. Για τον λόγο αυτό κατά την έναρξη του μετασχηματισμού γίνεται η υπόθεση ότι υπάρχει ανενεργός φερρίτης δίπλα στον αρχικό ωστενίτη.

Κατά τη διάρκεια του πρώτου μέρους του μετασχηματισμού αναμένεται ένας περιορισμένος μετασχηματισμός εξ' αιτίας των ατόμων του Mn, τα οποία είναι μεγάλα και χρειάζονται μεγάλη ενέργεια ενεργοποίησης. Όμως και στα επόμενα στάδια το ποσοστό της αντίδρασης θα καθοριστεί από τη διάχυση του Mn διότι το μέγεθος του ατόμου του είναι μεγαλύτερο από αυτό του C.

Τα αποτελέσματα που ελήφθησαν αφορούσαν τη θέση της διεπιφάνειας σε συνάρτηση με τον χρόνο.

3.3 ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

A) Παράδειγμα 1: Μετασχηματισμός ωστενίτη(fcc) σε φερρίτη(bcc) στο διμερές κράμα Fe-C.

- Επίδραση του 'Αριθμού των πλεγματικών σημείων στην ωστενιτική περιοχή (Number of grid points in austenite region)'(N.OF.P)

Οι τιμές που επιλέχθηκαν είναι οι εξής: 3, 5, 10, 20, 50, 100.

Τα αποτελέσματα φαίνονται στον *Πίνακα 3.1* και το αντίστοιχο *Διάγραμμα 3.1*.

Παρατηρείται, ότι στους μικρούς χρόνους η διαφορά μεταξύ λίγων και πολλών πλεγματικών σημείων είναι μεγάλη. Σε μεγαλύτερους χρόνους όμως, η διαφορά αυτή εξαλείφεται. Ειδικά για 20 πλεγματικά σημεία και πάνω δεν υπάρχει καμία διαφορά στη θέση της διεπιφάνειας για μικρούς και μεγάλους χρόνους. Γενικά, όσο λιγότερα πλεγματικά σημεία χρησιμοποιούνται, τόσο ταχύτερα κινείται η διεπιφάνεια, δηλαδή βρίσκεται πιο μπροστά για κάποιο δεδομένο χρόνο, πράγμα που σημαίνει ότι η λύση που θα προκύψει δεν θα είναι ακριβής. Επομένως, η μέθοδος είναι ευαίσθητη στους μικρούς χρόνους. Για λύσεις όμως που αφορούν μεγάλους χρόνους, μπορεί να χρησιμοποιηθούν πολύ λίγα πλεγματικά σημεία, χωρίς να προκύψει ανακριβής λύση.

- Επίδραση του Αρχικού χρονικού βήματος (Initial timestep)(I.T.S)

Οι τιμές που επιλέχτηκαν είναι οι εξής: 100, 10, 1, 1e-3, 1e-5, 1e-6, 1e-9.

Τα αποτελέσματα φαίνονται στον *Πίνακα 3.2* και το αντίστοιχο *διάγραμμα 3.2*.

Το αρχικό χρονικό βήμα δεν φαίνεται να επηρεάζει τη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο αφού υπάρχει πολύ καλή συμφωνία για όλες τις τιμές που επιλέχτηκαν. Αυτό σημαίνει ότι η λύση του προβλήματος κάθε φορά δεν εξαρτάται από τη μεταβλητή αυτή. Ωστόσο, τα αποτελέσματα σταθεροποιούνται πολύ περισσότερο για τιμές $<1E-5$. Άρα, προτιμούνται να χρησιμοποιούνται τιμές μικρότερες του $1E-5$.

- Επίδραση του ελάχιστου αποδεκτού βήματος (smallest acceptable timestep)(S.A.T.S)

Αυτή η παράμετρος καθορίζει το μικρότερο επιτρεπόμενο χρονικό βήμα κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης. Η τιμή του απαιτείται όταν χρησιμοποιείται αυτόματη διαδικασία που καθορίζει το χρονικό βήμα.

Οι τιμές που επιλέχτηκαν είναι οι εξής: 1, 1e-3, 1e-5, 1e-6, 1e-9.

Τα αποτελέσματα φαίνονται στον *Πίνακα 3.3* και το αντίστοιχο *διάγραμμα 3.3*.

Παρατηρείται πολύ καλή ταύτιση των αποτελεσμάτων για όλες τις τιμές που δοκιμάστηκαν. Έτσι λοιπόν, το ελάχιστο αποδεκτό χρονικό βήμα δεν επηρεάζει τη θέση της διεπιφάνειας σε συνάρτηση με το χρόνο. Επομένως μπορεί να χρησιμοποιηθεί οποιαδήποτε τιμή χωρίς να επηρεάσει τη λύση των προβλημάτων.

- Επίδραση του 'Number of Delta timesteps in calling MULDIF' (N.O.D.T.S.P)

Αυτή η παράμετρος καθορίζει τον αριθμό του ίσου μεγέθους χρονικών υπο-βημάτων στα οποία ένα χρονικό βήμα θα πρέπει να υποδιαιρείται.

Οι τιμές που επιλέχτηκαν είναι οι εξής: 1, 2, 5, 10, 100.

Τα αποτελέσματα φαίνονται στον *Πίνακα 3.4* και το αντίστοιχο *διάγραμμα 3.4*.

Η επίδραση της παραμέτρου αυτής στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με τον χρόνο είναι αμελητέα. Μπορεί να χρησιμοποιηθεί οποιαδήποτε τιμή από αυτές που δοκιμάστηκαν χωρίς να επηρεάζει τη λύση του κάθε προβλήματος που επιλύεται μέσω της κίνησης της διεπιφάνειας.

- Επίδραση του 'Βαθμού ακρίβειας κατά την ολοκλήρωση των μερικών διαφορικών εξισώσεων (Degree of implicitness when integrating PDEs)'(D.Im.)

Η παράμετρος αυτή καθορίζει τον βαθμό ακρίβειας των Δ.Ε. Κανονικά θα πρέπει να χρησιμοποιείται η τιμή 0.5 (κανόνας τραπεζίου). Εάν, ωστόσο, υπάρχει μεγάλη διακύμανση στο προφίλ θα πρέπει απαραίτητα να χρησιμοποιηθεί η τιμή 1.0 (οπίσθια Euler).

0.0 Εμπρόσθια αντικατάσταση κατά Euler

0.5 κανόνας τραπεζίου

1.0 Οπίσθια αντικατάσταση κατά Euler

Οι τιμές που επιλέχθηκαν είναι οι εξής: 0, 0.5, 1.

Τα αποτελέσματα φαίνονται στον *Πίνακα 3.5* και το αντίστοιχο *διάγραμμα 3.5*.

Για την τιμή 0 που πήρε η παράμετρος αυτή, το πρόγραμμα δεν έδωσε αποτελέσματα. Για τις τιμές 0.5 και 1 φαίνεται ότι δεν υπάρχει μεγάλη διαφορά στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο. Η σημασία της παραμέτρου αυτής θα πρέπει να μελετηθεί σε μεγαλύτερο βάθος για να εξηγηθεί και να καθοριστεί η συμπεριφορά της.

- Επίδραση του 'Τύπου πλέγματος της περιοχής του φερριτη (Type of grid of ferrite region)'(T.OF.G)

Στο γραμμικό πλέγμα τα σημεία ισαπέχουν μεταξύ τους. Σε μία γεωμετρική κατανομή πλέγματος θα υπάρξει μεγαλύτερος αριθμός πλεγματικών σημείων στο χαμηλότερο σημείο της περιοχής, αν ο γεωμετρικός συντελεστής είναι μεγαλύτερος από ένα δεδομένο, ενώ θα υπάρξει μεγαλύτερος αριθμός πλεγματικών σημείων στο υψηλότερο μέρος της περιοχής εάν ο συντελεστής i είναι μικρότερος από ένα δεδομένο.

Τα είδη που επιλέχθηκαν είναι τα εξής: linear, geometric, double - geometric.

Τα αποτελέσματα φαίνονται στον *Πίνακα 3.6* και το αντίστοιχο *διάγραμμα 3.6*.

Φαίνεται τελικά ότι στον συγκεκριμένο τύπο προσομοίωσης το είδος των σημείων (γραμμικό, γεωμετρικό, διπλό γεωμετρικό) δεν οδηγεί σε σημαντικές αποκλίσεις. Έτσι, αυτή η παράμετρος δεν θεωρείται σημαντική.

Ωστόσο, εάν η φύση του προβλήματος είναι τέτοια ώστε να απαιτείται ειδική προσοχή και ακρίβεια σε συγκεκριμένα τμήματα μιας περιοχής, τότε τα γεωμετρικά και διπλά γεωμετρικά σημεία θα μπορούσαν πιθανόν να προσφέρουν αξιόλογα πλεονεκτήματα.

Πίνακας 3.1: Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και τον αριθμό των πλεγματικών σημείων.

ΧΡΟΝΟΣ	N.OF.P=3	N.OF.P=5	N.OF.P=10	N.OF.P=20	N.OF.P=50	N.OF.P=100
1,00E+03	4,909	4.81	2,545	1,322	0.81	0.578
1,00E+05	7,967	7,355	5,537	4,661	4,677	4,463
1,00E+09	13,818	13,818	13,818	13,818	13,818	13,818

Πίνακας 3.2: Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και το αρχικό χρονικό βήμα.

ΧΡΟΝΟΣ	I.T.S=100	I.T.S=10	I.T.S=1	I.T.S=1E-3	I.T.S=1E-5	I.T.S=1E-6	I.T.S=1E-9
1,00E+03	0,430	0.661	0.793	0.81	0.81	0.727	0.81
1,00E+05	4,264	4,611	4,694	4,694	4,677	4,644	4,694
1,00E+09	13,785	13,180	13,180	13,180	13,180	13,180	13,180

Πίνακας 3.3: Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και του μικρότερου αποδεκτού χρονικού βήματος.

ΧΡΟΝΟΣ	S.A.T.S=1	S.A.T.S=1E-3	S.A.T.S=1E-5	S.A.T.S=1E-6	S.A.T.S=1E-9
1,00E+03	0.793	0.81	0.81	0.793	0.793
1,00E+05	4,694	4,743	4,677	4,694	4,677
1,00E+09	13,818	13,818	13,818	13,818	13,818

Πίνακας 3.4: Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και της παραμέτρου 'Number of Delta timesteps in calling MULDIF'.

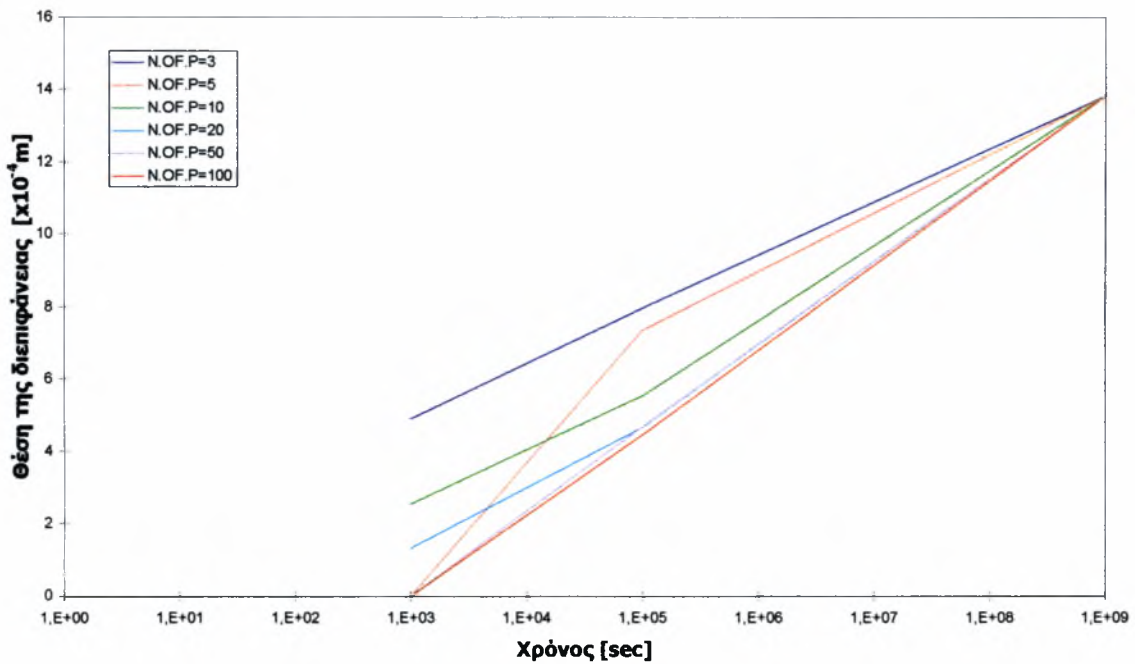
ΧΡΟΝΟΣ	N.O.D.T.S.P=1	N.O.D.T.S.P=2	N.O.D.T.S.P=5	N.O.D.T.S.P=10	N.O.D.T.S.P=100
1,00E+03	0.777	0.81	0.793	0.793	0.793
1,00E+05	4,859	4,677	4,578	4,479	4,495
1,00E+09	13,818	13,818	13,818	13,818	13,818

Πίνακας 3.5: Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και του βαθμού ακριβείας κατά την ολοκλήρωση των μερικών διαφορικών εξισώσεων.

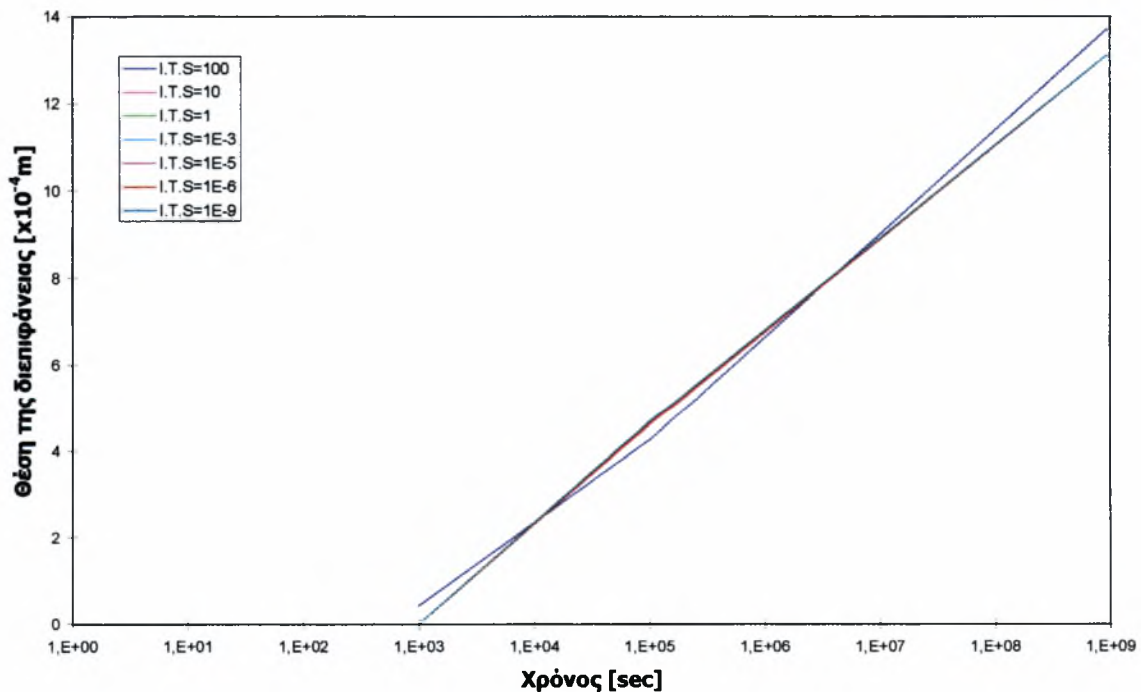
ΧΡΟΝΟΣ	D.Im.=0	D.Im.=0.5	D.Im.=1
1,00E+03		0.628	0.81
1,00E+05		4,843	4,677
1,00E+09		13,785	13,818

Πίνακας 3.6: Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και του τύπου του πλέγματος στην περιοχή του φερρίτη.

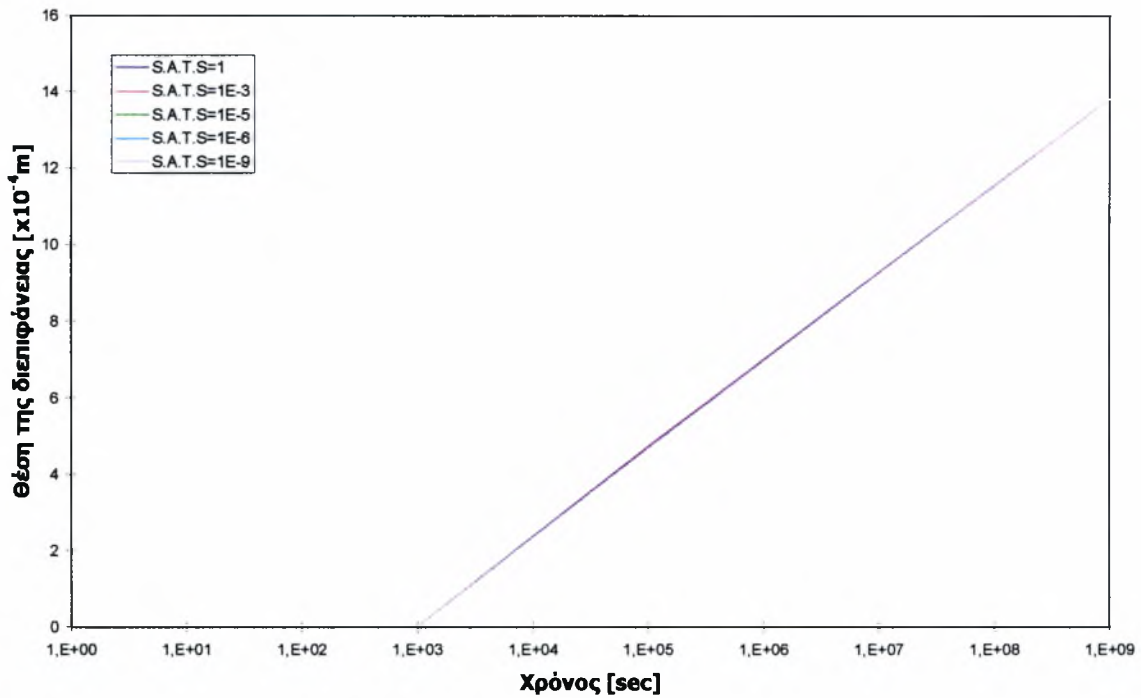
ΧΡΟΝΟΣ	T.OF.G.=linear	T.OF.G.=geometric(0.5)	T.OF.G.=double geom.(0.5,0.5)
1,00E+03	0,810	0,810	0,810
1,00E+05	4,677	4,810	4,810
1,00E+09	13,818	13,851	13,851



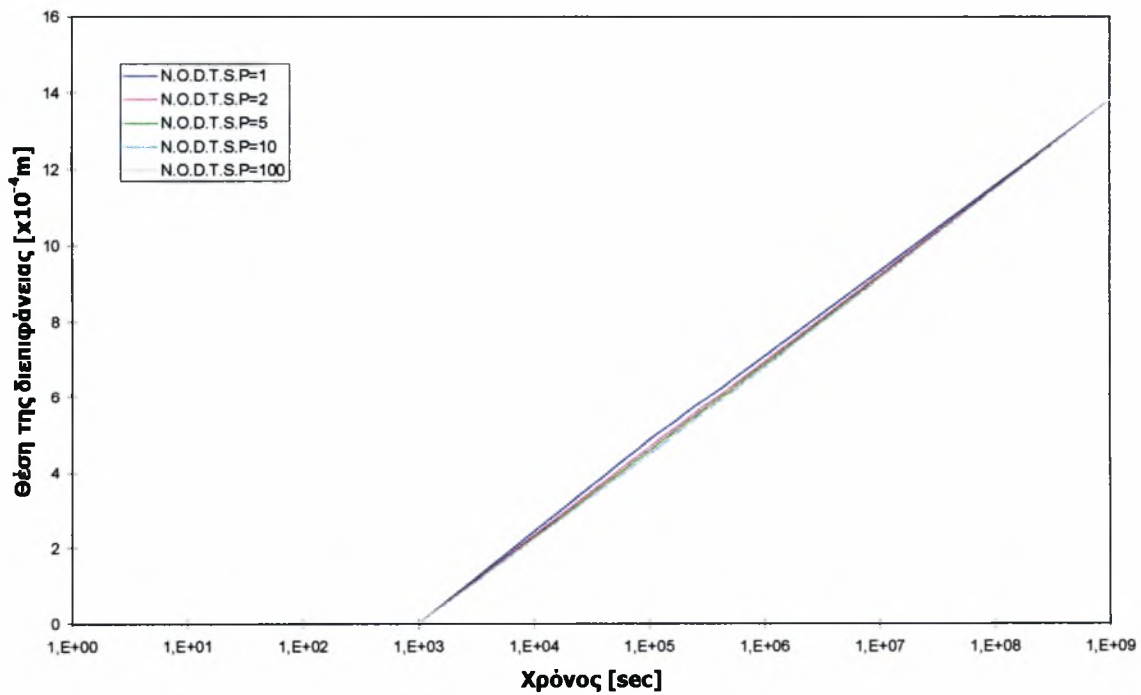
Διάγραμμα 3.1: Επίδραση του 'Αριθμού των πλεγματικών σημείων στην ωστενιτική περιοχή' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο.



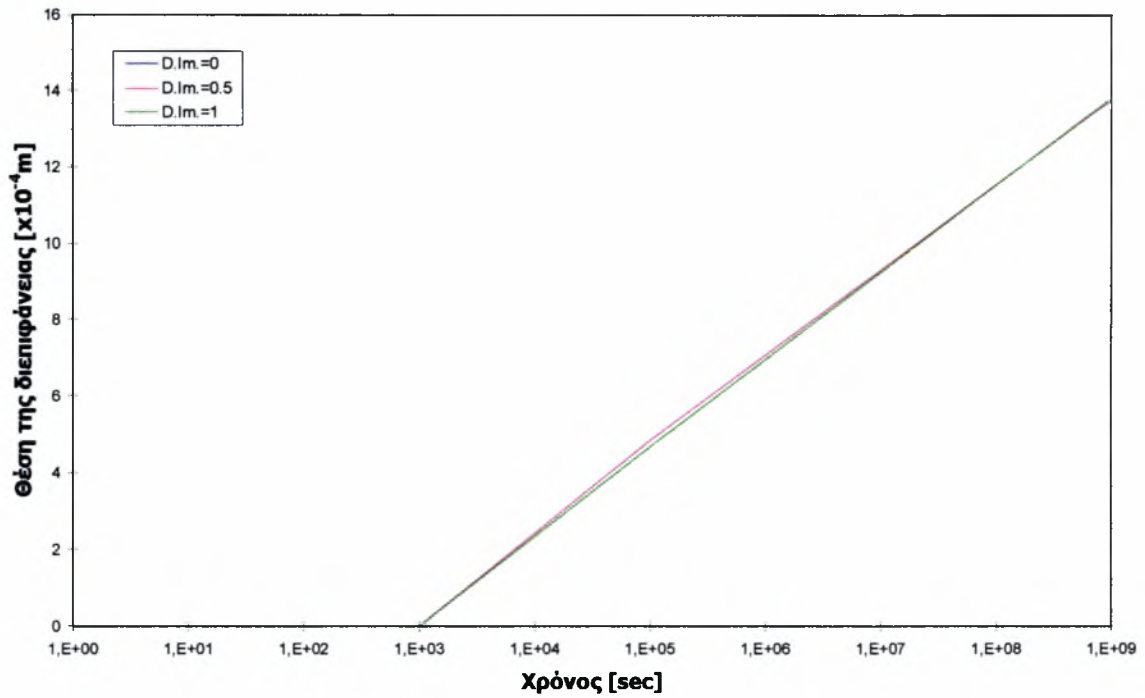
Διάγραμμα 3.2: Επίδραση του 'Αρχικού χρονικού βήματος' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο.



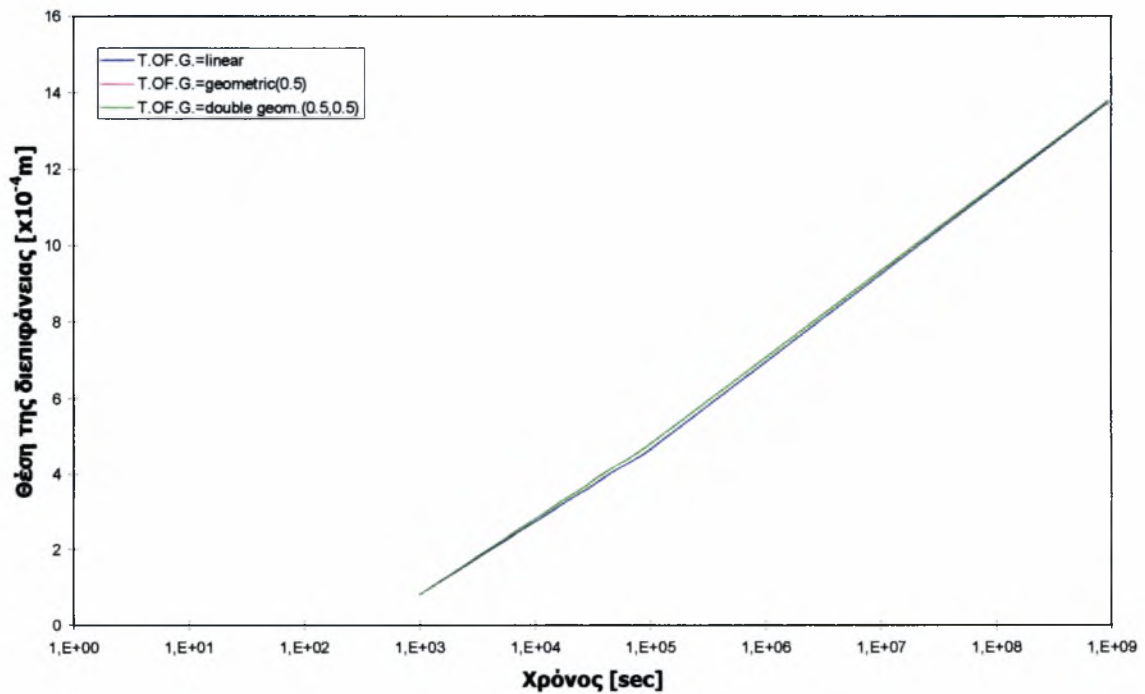
Διάγραμμα 3.3: Επίδραση του 'Μικρότερου αποδεκτού χρονικού βήματος' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο.



Διάγραμμα 3.4: Επίδραση του 'Number of delta timesteps in calling MULDIF' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο.



Διάγραμμα 3.5: Επίδραση του 'Βαθμού ακριβείας κατά τη διάρκεια ολοκλήρωσης μερικών διαφορικών εξισώσεων' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο.



Διάγραμμα 3.6: Επίδραση του 'Τύπου του πλέγματος στην περιοχή του φερριτί' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο.

B) Παράδειγμα 2: Μετασχηματισμός φερρίτη(bcc) σε ωστενίτη(fcc) στο τριμερές κράμα Fe-Mn-C.

- Επίδραση του 'Αριθμού των πλεγματικών σημείων (Number of grid points)'(N.OF.G.P)
 Οι τιμές που επιλέχθηκαν είναι οι εξής: 3, 5, 10, 20, 50, 100, 300, 500, 1000.
 Τα αποτελέσματα φαίνονται στον *Πίνακα 3.7* και το αντίστοιχο *διάγραμμα 3.7*.
 Όπως και στο προηγούμενο παράδειγμα, φαίνεται ότι τους μικρούς χρόνους η διαφορά μεταξύ λίγων και πολλών πλεγματικών σημείων είναι πολύ μεγάλη. Προχωρώντας σε μεγαλύτερους χρόνους η διαφορά αυτή μειώνεται σημαντικά. Τα αποτελέσματα φαίνεται να σταθεροποιούνται από τους 50 κόμβους και πάνω. Επίσης, γενικά, όσο λιγότερα πλεγματικά σημεία χρησιμοποιούνται, τόσο γρηγορότερα κινείται η διεπιφάνεια, δηλαδή βρίσκεται πιο μπροστά για κάποιο δεδομένο χρόνο. Έτσι, η μέθοδος είναι πολύ ευαίσθητη στους μικρούς χρόνους. Αν το ενδιαφέρον εστιάζεται σε πολύ μεγάλους χρόνους, μπορούν να χρησιμοποιηθούν πολύ λίγα πλεγματικά σημεία χωρίς σημαντικές απώλειες ακρίβειας.
- Επίδραση του 'Μέγιστου χρονικού βήματος κατά τη διάρκεια της ολοκλήρωσης (Maximum timestep during integration)'(M.T.S.D.I)
 Οι τιμές που επιλέχθηκαν είναι οι εξής: 1e3, 1e5, 1e6, 1e7, 1e9.
 Τα αποτελέσματα φαίνονται στον *Πίνακα 3.8* και το αντίστοιχο *διάγραμμα 3.8*
 Καταρχήν, σχετικά μικρές τιμές της παραμέτρου (π.χ. 1e3) σε σχέση με το συνολικό χρόνο ανάλυσης (1e9) παρουσιάζουν πρόβλημα, αφού δεν προκύπτει αποτέλεσμα. Από εκεί και πέρα το μέγιστο χρονικό βήμα κατά τη διάρκεια της ολοκλήρωσης από 1e5~1e9 δεν επηρεάζει ιδιαίτερα το αποτέλεσμα. Το επηρεάζει λίγο και μόνο στους μεγάλους χρόνους (>1e6). Συμπερασματικά, η παραπάνω παράμετρος δεν θα πρέπει να θεωρείται ιδιαίτερα κρίσιμη, με την προϋπόθεση ότι η τιμή της θα βρίσκεται μέσα σε κάποιο αποδεκτό εύρος τάξεων μεγέθους.
- Επίδραση της 'Κινούσας δύναμης για την ανενεργή φάση (Driving force for inactive phase (ferrite))'(Driving force).
 Αυτή η παράμετρος καθορίζει την κινούσα δύναμη που απαιτείται για την ανενεργή φάση να αρχίσει να καθιζάνει.
 Οι τιμές που επιλέχθηκαν είναι οι εξής: 1e-9, 1e-6, 1e-5, 1e-3, 1e-1, 1, 10.
 Τα αποτελέσματα φαίνονται στον *Πίνακα 3.9* και το αντίστοιχο *διάγραμμα 3.9*.

Είναι φανερό ότι όταν το Driving force πέσει κάτω από ένα όριο (στο συγκεκριμένο παράδειγμα κάτω από $1e-1$), τότε δεν επηρεάζει την ανάλυση. Επομένως, προτείνεται η χρήση κάποιας τιμής από $1e-3$ έως $1e-6$ για το Driving force.

- Επίδραση του 'Step used by NS01A'

Η παράμετρος αυτή που καθορίζεται από το χρήστη, χρησιμοποιείται για τις αριθμητικές εκτιμήσεις των μερικών Δ.Ε. κατά τη διάρκεια επίλυσης των εξισώσεων ισοζυγίων ροής.

Οι τιμές που επιλέχτηκαν είναι οι εξής: $1e-6$, $1e-3$, 1, 10.

Τα αποτελέσματα φαίνονται στον *Πίνακα 3.10* και το αντίστοιχο *διάγραμμα 3.10*.

Η παράμετρος αυτή αν πάρει τιμές χαμηλές (<1), δε φαίνεται να μπορεί να επηρεάσει την ανάλυση.

- Επίδραση του 'Αρχικού χρονικού βήματος (Initial timestep)'

Οι τιμές που επιλέχτηκαν είναι οι εξής: $1e-2$, 1, 10.

Τα αποτελέσματα φαίνονται στον *Πίνακα 3.11* και το αντίστοιχο *διάγραμμα 3.11*.

Η επίδραση του αρχικού χρονικού βήματος περιορίζεται ουσιαστικά στους πολύ μικρούς χρόνους και μόνο όταν λαμβάνει υψηλές τιμές (≥ 1). Χρησιμοποιώντας μικρές τιμές του αρχικού χρονικού βήματος ($1e-2$ - $1e-3$ ή και μικρότερο) εξαλείφεται η επίδρασή του στην ανάλυση, σε όλους τους χρόνους.

- Επίδραση του 'Απαιτούμενου άθροίσματος τετραγώνων (Required sum of squares)'(R.S.OF.S.).

Η παράμετρος αυτή καθορίζει την απαιτούμενη ακρίβεια κατά την επίλυση των εξισώσεων ισοζυγίων ροής.

Οι τιμές που επιλέχτηκαν είναι οι εξής: $1e-15$, $1e-12$, $1e-9$, $1e-6$, $1e-3$, 1.

Τα αποτελέσματα φαίνονται στον *Πίνακα 3.12* και το αντίστοιχο *διάγραμμα 3.12*.

Το απαιτούμενο άθροισμα τετραγώνων καθορίζει την απαιτούμενη ακρίβεια που τίθεται για τη σύγκλιση της μεθόδου. Η παράμετρος αυτή πρέπει να παίρνει πολύ μικρή τιμή ($1e-12 \sim 1e-16$), ώστε να επιτυγχάνεται υψηλή σύγκλιση και ακρίβεια της μεθόδου. Σε αυτό το εύρος τιμών ($1e-12 \sim 1e-16$) το αποτέλεσμα δε φαίνεται να επηρεάζεται. Αντίθετα, σε υψηλότερες τιμές ($> 1e-9$), η μέθοδος αδυνατεί να δώσει λύση.

- Επίδραση του 'Maximum number of calls to calfun of NS01A' (Max N.Of C.To C.)

Αυτή η παράμετρος καθορίζει το μέγιστο αριθμό επαναλήψεων κατά την επίλυση των εξισώσεων των ισοζυγίων ροής.

Οι τιμές που επιλέχθηκαν είναι οι εξής: 10, 50, 200, 300.

Τα αποτελέσματα φαίνονται στον *Πίνακα 3.13* και το αντίστοιχο *διάγραμμα 3.13*.

Η παράμετρος αυτή δε φαίνεται να επηρεάζει το αποτέλεσμα, παρά μόνον αν πάρει πολύ μικρές τιμές (≤ 10), οπότε η ανάλυση αρχίζει να γίνεται ασταθής. Με τιμές από 50 και πάνω δεν θα πρέπει να υπάρχει πρόβλημα. Θα πρέπει να διαπιστωθεί αν η παράμετρος αυτή είναι ο μέγιστος επιτρεπόμενος αριθμός επαναλήψεων. Π.χ. στην τιμή 10, αν ξεπεραστούν οι δέκα επαναλήψεις (συνολικά) η επίλυση σταματάει (Fatal error?), γι' αυτό ίσως δεν έδωσε αποτέλεσμα για χρόνους $\geq 1e7$. Πάντως δε φαίνεται να επηρεάζει τα αποτελέσματα, εάν πάρει κάποια ικανοποιητικά μεγάλη τιμή.

- Επίδραση του 'Maximum step used by NS01A' (Max S- NS01A)

Η παράμετρος αυτή που καθορίζεται από το χρήστη, θα πρέπει να καθορίζει μία ευρύ εκτίμηση της «απόστασης» μεταξύ της αρχικής προσέγγισης και της απαιτούμενης λύσης των εξισώσεων διάχυσης.

Οι τιμές που επιλέχθηκαν είναι οι εξής: 1, 10, 1e2, 1e3, 1e4, 1e6.

Τα αποτελέσματα φαίνονται στον *Πίνακα 3.14* και το αντίστοιχο *διάγραμμα 3.14*.

Η παράμετρος αυτή αδυνατεί να δώσει λύση για μικρές τιμές, επομένως, εάν πάρει αρκετά μεγάλη τιμή ($1e3 \sim 1e6$) δεν φαίνεται να παίζει κάποιο ρόλο στο αποτέλεσμα.

- Επίδραση της 'Μετακίνησης αριθμού πλεγματικού σημείου (Gridpoint removal number)' (Grid P.Rem.No.)

Οι τιμές που επιλέχθηκαν είναι οι εξής: 10, 50, 100, 300, 500.

Τα αποτελέσματα φαίνονται στον *Πίνακα 3.15* και το αντίστοιχο *διάγραμμα 3.15*.

Η παράμετρος αυτή δεν φαίνεται να επηρεάζει το αποτέλεσμα, εάν πάρει κάποια τιμή > 50 .

- Επίδραση της 'Αρχικής τιμής για την ταχύτητα της διεπιφάνειας (Start value for velocity of interface)' (S.V.F.V.Of.I.)

Οι τιμές που επιλέχθηκαν είναι οι εξής: 1e-9, 1e-6, 1e-4, 1e-3, 1, 100.

Τα αποτελέσματα φαίνονται στον *Πίνακα 3.16* και το αντίστοιχο *διάγραμμα 3.16*.

Η μεταβλητή αυτή, παρ' ότι μεταβλήθηκε σε ένα εύρος 11 τάξεων μεγέθους ($1e-2 \sim 1e-9$), δεν επηρέασε καθόλου τα αποτελέσματα.

- Επίδραση του 'Μικρότερου αριθμού σχηματισμού εξισώσεων ροής (smallest number used in scaling flux equations)' (Small N.U.F.E.)

Οι εξισώσεις ισοζυγίων ροής σταθμίζονται από τις ταχύτητες που υπολογίζονται από το προηγούμενο χρονικό βήμα. Αυτός ο αριθμός ωστόσο, μπορεί να μειωθεί σε μία μικρή τιμή έτσι ώστε να μην υπάρξει σύγκλιση. Ο συντελεστής στάθμισης δεν επιτρέπει τη μείωση κάτω από αυτή την αξία.

Οι τιμές που επιλέχθηκαν είναι οι εξής: $1e-10$, $1e-9$, $1e-6$, 1

Τα αποτελέσματα φαίνονται στον *Πίνακα 3.17* και το αντίστοιχο *διάγραμμα 3.17*.

Η παράμετρος αυτή θα πρέπει να παίρνει αρκετά μικρές τιμές ($1e-9 \sim 1e-10$) για να μην επηρεάζει τα αποτελέσματα.

- Επίδραση του 'Πλάτους της νέας περιοχής (Width of new region)' (Width of N.R.)

Οι τιμές που επιλέχθηκαν είναι οι εξής: $1e-15$, $1e-12$, $1e-10$, $1e-9$, $1e-6$, $1e-3$.

Τα αποτελέσματα φαίνονται στον *Πίνακα 3.18* και το αντίστοιχο *διάγραμμα 3.18*.

Η μεταβλητή αυτή πρέπει οπωσδήποτε να παίρνει πολύ μικρές τιμές ($\leq 1e-9$). Σε μεγαλύτερες τιμές η λύση αρχίζει να αποσταθεροποιείται.

- Επίδραση του 'Κλάσματος της περιοχής που μεταβιβάζεται στη διεπιφάνεια (Fraction of region assigned to the interface)' (F.Of.R.A.To.I.)

Η παράμετρος αυτή καθορίζει το ποσοστό μιας περιοχής στην άκρη της περιοχής, η οποία θεωρείται σαν μέρος της διεπιφάνειας. Η παράμετρος αυτή χρησιμοποιείται για την διαδικασία η οποία μετατοπίζει «μη απαραίτητα» πλεγμικά σημεία από το προφίλ κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης.

Οι τιμές που επιλέχθηκαν είναι οι εξής: $1e-2$, $5e-2$, $1e-1$, $2e-1$, $5e-1$, $7,5e-1$.

Τα αποτελέσματα φαίνονται στον *Πίνακα 3.19* και το αντίστοιχο *διάγραμμα 3.19*.

Η παράμετρος αυτή φαίνεται να μην επηρεάζει γενικά το αποτέλεσμα παρά μόνον, ελάχιστα, σε μεγάλους χρόνους.

3.4 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Συνοψίζοντας όλα τα παραπάνω αποτελέσματα σημειώθηκαν οι εξής σημαντικοί παράμετροι που επηρεάζουν τα αποτελέσματα επίλυσης των προβλημάτων.

Για το *παράδειγμα 1* μπορεί να σημειωθούν τα εξής συμπεράσματα τα οποία θα πρέπει να λαμβάνονται υπόψη κάθε φορά που λύνεται κάποιο πρόβλημα αυτού του τύπου:

Η παράμετρος του 'Αριθμού των πλεγμικών σημείων' παίζει πολύ σημαντικό ρόλο στην ανάλυση του προβλήματος.

Η παράμετρος 'Number of Delta timesteps in calling MULDIF' θα μπορούσε να θεωρηθεί σημαντική καθώς επίσης μια πιο εκτεταμένη έρευνα θα οδηγούσε σε πιο αποφασιστικά συμπεράσματα.

Η παράμετρος του 'Βαθμού ακρίβειας κατά την ολοκλήρωση των μερικών διαφορικών εξισώσεων' θα έπρεπε να μελετηθεί εκτενέστερα, ώστε να εξηγηθεί λεπτομερώς η συμπεριφορά της.

Η παράμετρος του 'Τύπου του πλέγματος στην περιοχή του φερρίτη δεν θεωρείται γενικά σημαντική. Ωστόσο, αν η φύση του προβλήματος είναι τέτοια ώστε απαιτείται ειδική προσοχή και ακρίβεια σε συγκεκριμένα τμήματα μιας περιοχής, τότε τα είδη 'geometric' και 'double geometric' θα μπορούσαν να προσφέρουν αξιόλογα πλεονεκτήματα.

Για το παράδειγμα 2 μπορεί να σημειωθούν τα εξής συμπεράσματα τα οποία θα πρέπει να λαμβάνονται υπόψη κάθε φορά που λύνεται κάποιο πρόβλημα αυτού του τύπου:

Η παράμετρος του 'Αριθμού των πλεγματικών σημείων' οπωσδήποτε επηρεάζει πάρα πολύ την όλη ανάλυση, γεγονός που άλλωστε αναμενόταν.

Η παράμετρος 'Κινούσα δύναμη για την ανενεργή φάση' για τιμές μεγαλύτερες ενός ορίου ($1e-1$) μηδενίζει τα αποτελέσματα.

Η παράμετρος 'Απαιτούμενος αριθμός τετραγώνων' για μεγάλες τιμές ($>1e-9$) η μέθοδος αδυνατεί να δώσει λύση.

Η παράμετρος 'Maximum step used by NS01A' αν πάρει αρκετά μικρές τιμές ($<1e2$) μηδενίζει τα αποτελέσματα.

Η παράμετρος 'smallest number used in scaling flux equations' για πολύ μεγάλες τιμές (>1), για μικρούς χρόνους παρουσιάζει μεγάλες διαφορές ενώ για μεγάλους χρόνους αδυνατεί να δώσει λύση.

Η παράμετρος του 'Πλάτους της νέας περιοχής' για μεγάλες τιμές ($>1e-3$) αρχίζει να αποσταθεροποιεί τη λύση.

Τέλος, Θα πρέπει να προστεθεί ότι το κεφάλαιο της παραμετρικής ανάλυσης θα μπορούσε να συμπεριλάβει πολύ περισσότερα στοιχεία. Δηλαδή, Θα ήταν πολύ κατατοπιστικό για του χρήστες να γίνει επιπλέον παραμετρική ανάλυση για μεγαλύτερα εύροι τιμών για ορισμένες παραμέτρους, καθώς επίσης να αναλυθούν και προβλήματα άλλων τύπων που επιλύει το DICTRA, τα οποία αναφέρθηκαν στο κεφάλαιο 2.6.

Πίνακας 3.7: Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και του αριθμού των πλεγματοτικών σημείων.

ΧΡΟΝΟΣ	N.OF.GP=3	N.OF.GP=5	N.OF.GP=10	N.OF.GP=20	N.OF.GP=50	N.OF.GP=100	N.OF.GP=300	N.OF.GP=500	N.OF.GP=1000
0	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000		
1	0,000	0,000	0,000	0,424	0,070	0,083	0,028	0,017	0,009
10	2,992	1,818	0,909	0,437	0,079	0,093	0,041	0,033	0,025
100	3,157	1,818	0,909	0,450	0,117	0,129	0,087	0,075	0,066
1,00E+05	4,248	3,405	2,611	0,297	1,835	1,901	1,901		
1,00E+06	7,086	6,535	5,432	4,992	5,115	5,448	5,008		
1,00E+07	7,568	6,535	7,037	7,210	7,518	7,395	7,448		
1,00E+08	7,609	7,205	7,086	7,288	7,654	7,539	7,629		
1,00E+09	8,000	7,687	7,831	7,946	8,082	8,033	8,189		

Πίνακας 3.8: Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και του μέγιστου χρονικού βήματος κατά την ολοκλήρωση.

ΧΡΟΝΟΣ	M.T.S.D.I=1e3	M.T.S.D.I=1e5	M.T.S.D.I=1e6	M.T.S.D.I=1e7	M.T.S.D.I=1e9
0	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
1	0,000	0,070	0,070	0,070	0,070
10	0,000	0,079	0,079	0,079	0,079
100	0,000	0,117	0,117	0,117	0,117
1,00E+05		1,835	1,835	1,835	1,835
1,00E+06		6,277	5,572	5,115	5,119
1,00E+07		7,658	7,617	7,518	7,498
1,00E+08		7,856	7,827	7,654	7,613
1,00E+09				8,082	7,946

Πίνακας 3.9: Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και της κινούσας δύναμης για την ανενεργή φάση.

ΧΡΟΝΟΣ	Driving force=1e-9	Driving force=1e-6	Driving force=1e-5	Driving force=1e-3	Driving force=1e-1	Driving force=1	Driving force=10
0	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
1	0,070	0,070	0,070	0,070	0,000	0,000	0,000
10	0,079	0,079	0,079	0,079	0,000	0,000	0,000
100	0,117	0,117	0,117	0,117	0,000	0,000	0,000
1,00E+05	1,835		1,835	1,835	0,000	0,000	0,000
1,00E+06	5,119		5,115	5,119	0,000	0,000	0,000
1,00E+07	7,498		7,518	7,506	0,000	0,000	0,000
1,00E+08	7,658		7,654	7,658	0,000	0,000	0,000
1,00E+09	8,082		8,082	8,082	0,000	0,000	0,000

Πίνακας 3.10: Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και της παραμέτρου 'Step used by NS01A'.

ΧΡΟΝΟΣ	Step used by NS01A=1e-6	Step used by NS01A=1e-3	Step used by NS01A=1	Step used by NS01A=10
0	0,000	0,000	0,000	0,000
1	0,070	0,070	0,070	0,070
10	0,079	0,079	0,079	0,079
100	0,117	0,117	0,117	0,117
1,00E+05	1,835	1,835	1,835	1,835
1,00E+06	5,119	5,123	5,123	5,782
1,00E+07	7,514	7,498	7,498	7,329
1,00E+08	7,654	7,658	7,658	7,699
1,00E+09	8,082	8,082	8,082	8,160

Πίνακας 3.1.1: Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και του αρχικού χρονικού βήματος.

ΧΡΟΝΟΣ	Initial timestep=1e-2	Initial timestep=1	Initial timestep=10
0	0,000	0,000	0,000
1	0,070	0,070	0,070
10	0,079	0,079	0,079
100	0,117	0,117	0,117
1,00E+05	1,835	1,835	1,835
1,00E+06	5,123	5,119	5,777
1,00E+07	7,514	7,510	7,477
1,00E+08	7,658	7,654	7,638
1,00E+09	8,085	8,082	8,082

Πίνακας 3.1.2: Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και του απαιτούμενου αθροίσματος τετραγώνων .

ΧΡΟΝΟΣ	R.S.OF.S=1e-15	R.S.OF.S=1e-12	R.S.OF.S=1e-9	R.S.OF.S=1e-6	R.S.OF.S=1e-3	R.S.OF.S=1
0	0,000	0,000	0,000			
1	0,070	0,070	0,070			
10	0,079	0,079	0,082			
100	0,117	0,117	0,121			
1,00E+05	1,835	1,835	1,797			
1,00E+06	5,119	5,123	5,033			
1,00E+07	7,498	7,498	6,885			
1,00E+08	7,654	7,642	6,942			
1,00E+09	8,082	8,168	7,452			

Πίνακας 3.13: Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και της παραμέτρου 'Maximum number of calls to calfun of NS01A.

ΧΡΟΝΟΣ	Max N.Of C.To C.=10	Max N.Of C.To C.=50	Max N.Of C.To C.=200	Max N.Of C.To C.=300
0	0,000	0,000	0,000	0,000
1	0,071	0,070	0,070	0,070
10	0,078	0,079	0,079	0,079
100	0,112	0,117	0,117	0,117
1,00E+05	1,835	1,835	1,835	1,835
1,00E+06	5,094	5,124	5,123	5,123
1,00E+07		7,487	7,498	7,498
1,00E+08		7,653	7,654	7,658
1,00E+09		8,016	8,082	8,082

Πίνακας 3.14: Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και του αριθμού της παραμέτρου 'Maximum step used by NS01A.

ΧΡΟΝΟΣ	Max S-NS01A=1	Max S-NS01A=10	Max S-NS01A=1e2	Max S-NS01A=1e3	Max S-NS01A=1e4	Max S-NS01A=1e6
0	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
1	0,000	0,000	0,070	0,070	0,070	0,070
10	0,000	0,000	0,079	0,079	0,079	0,079
100	0,000	0,000	0,117	0,117	0,117	0,117
1,00E+05	0,000	0,000	1,835	1,835	1,835	1,835
1,00E+06	0,000	0,000	5,119	5,123	5,119	5,123
1,00E+07	0,000	0,000	7,514	7,506	7,498	7,498
1,00E+08	0,000	0,000	7,654	7,658	7,654	7,654
1,00E+09	0,000	0,000	8,082	8,082	8,082	8,082

Πίνακας 3.17: Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και του μικρότερου αριθμού σχηματισμού εξιώσεων ροής.

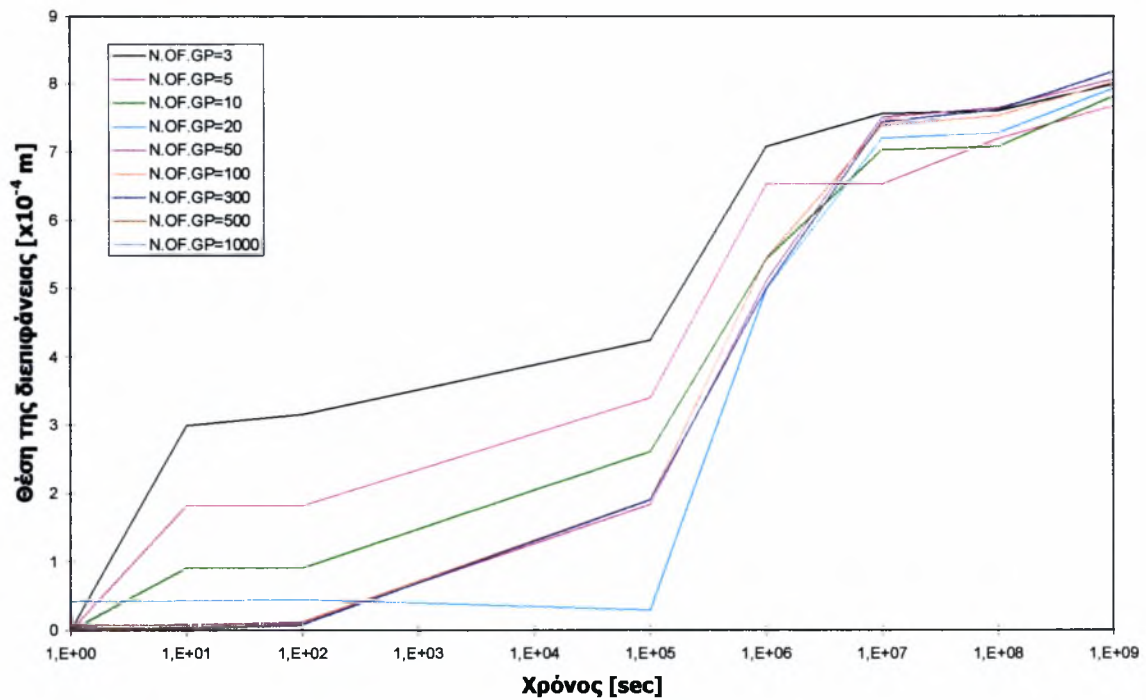
ΧΡΟΝΟΣ	Small N.U.F.E=1e-10	Small N.U.F.E=1e-9	Small N.U.F.E=1e-6	Small N.U.F.E=1
0	0,000	0,000	0,000	0,000
1	0,070	0,070	0,070	0,080
10	0,079	0,079	0,079	0,083
100	0,117	0,117	0,117	0,090
1,00E+05	1,835	1,835	1,835	
1,00E+06	5,119	5,123	5,102	
1,00E+07	7,498	7,498	7,374	
1,00E+08	7,654	7,654	7,691	
1,00E+09	8,082	8,082	10,793	

Πίνακας 3.18: Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και του πλάτους της νέας περιοχής.

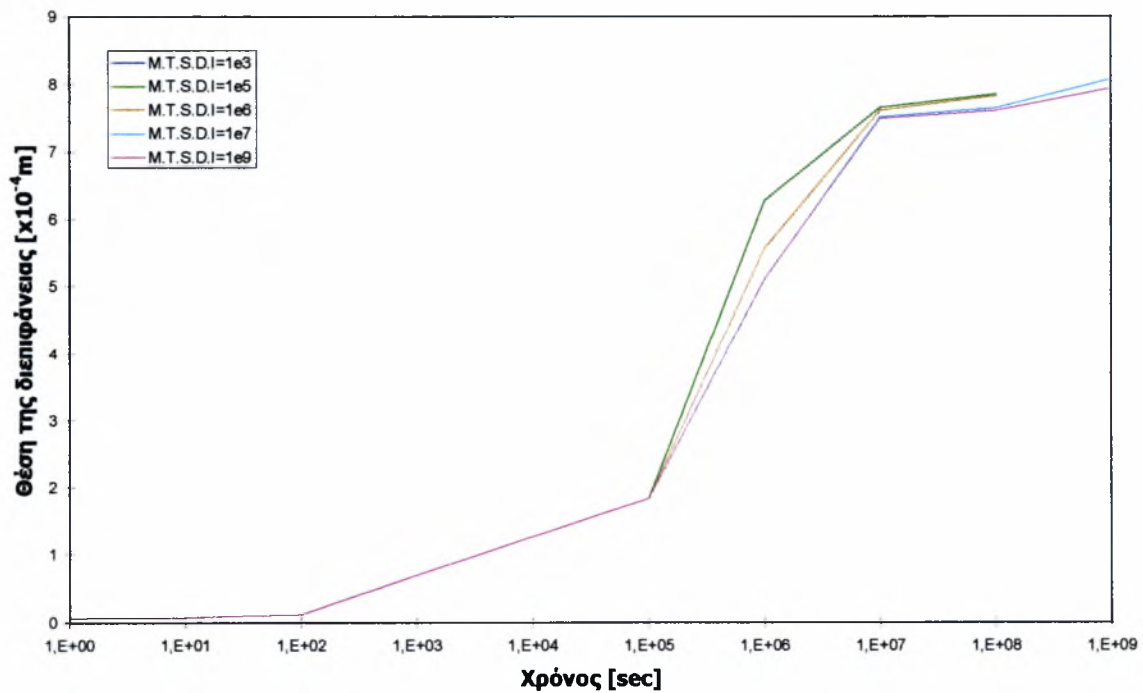
ΧΡΟΝΟΣ	Width of N.R.=1e-15	Width of N.R.=1e-12	Width of N.R.=1e-10	Width of N.R.=1e-9	Width of N.R.=1e-6	Width of N.R.=1e-3
0	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	
1	0,070	0,070	0,070	0,070	0,079	
10	0,079	0,079	0,079	0,079	0,089	
100	0,117	0,117	0,117	0,117	0,127	
1,00E+05	1,835	1,835	1,835	1,835	1,835	
1,00E+06	5,123	5,123	5,119	5,123	5,786	
1,00E+07	7,522	7,498	7,498	7,514	7,498	
1,00E+08	7,658	7,654	7,654	7,654	7,638	
1,00E+09	8,082	8,082	8,082	8,082	8,082	

Πίνακας 3.19: Η θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και του κλάσματος της περιοχής που μεταβιβάζεται στη διεπιφάνεια.

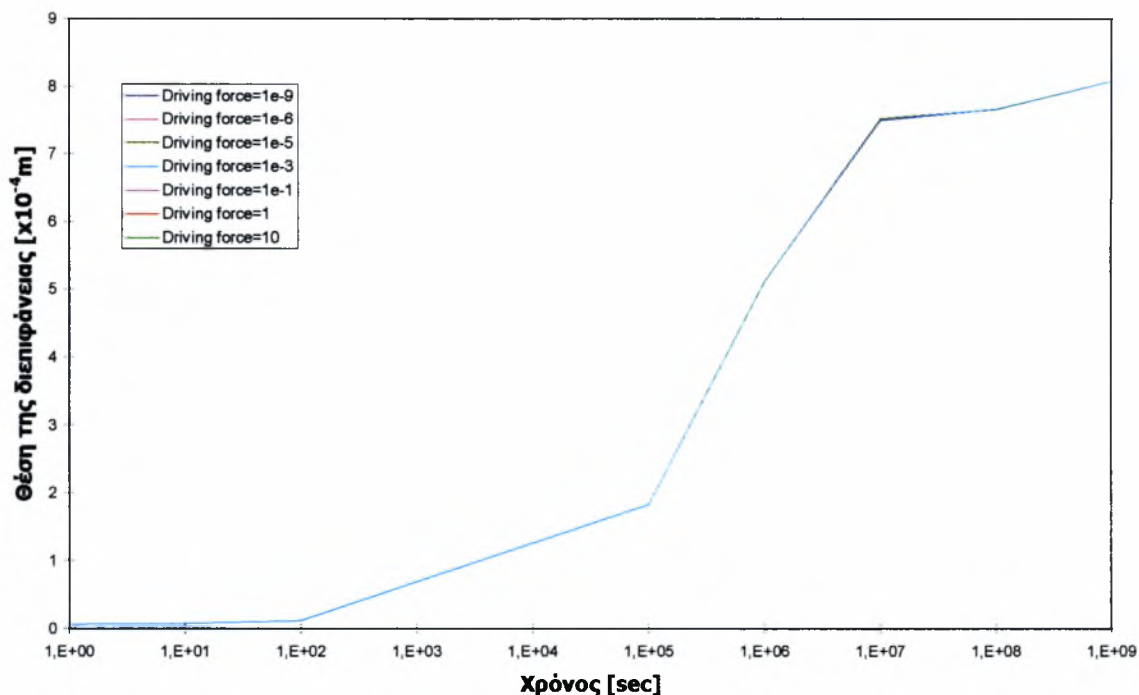
ΧΡΟΝΟΣ	F.of R.A.To I.=0.01	F.of R.A.To I.=0.05	F.of R.A.To I.=0.1	F.of R.A.To I.=0.2	F.of R.A.To I.=0.5	F.of R.A.To I.=0.75
0						
1	0,07	0,07	0,07	0,07	0,07	0,07
10	0,079	0,083	0,079	0,079	0,079	0,079
100	0,12	0,12	0,12	0,12	0,119	0,117
1,00E+05	1,916	1,833	1,917	1,833	1,917	1,835
1,00E+06	5,250	5,160	5,250	5,333	5,250	5,119
1,00E+07	7,666	7,666	7,650	7,666	7,667	7,510
1,00E+08	7,833	7,833	7,817	7,833	7,833	7,654
1,00E+09	8,333	8,333	8,250	8,333	8,250	8,082



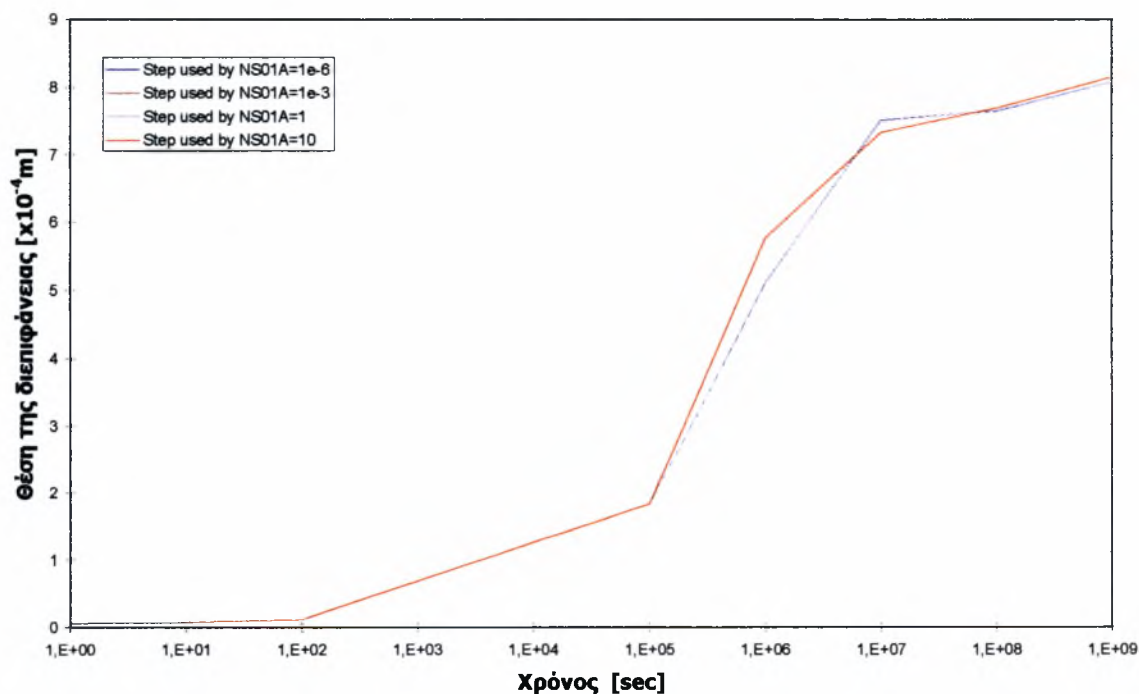
Διάγραμμα 3.7: Επίδραση του 'Αριθμού των πλεγματικών σημείων' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο.



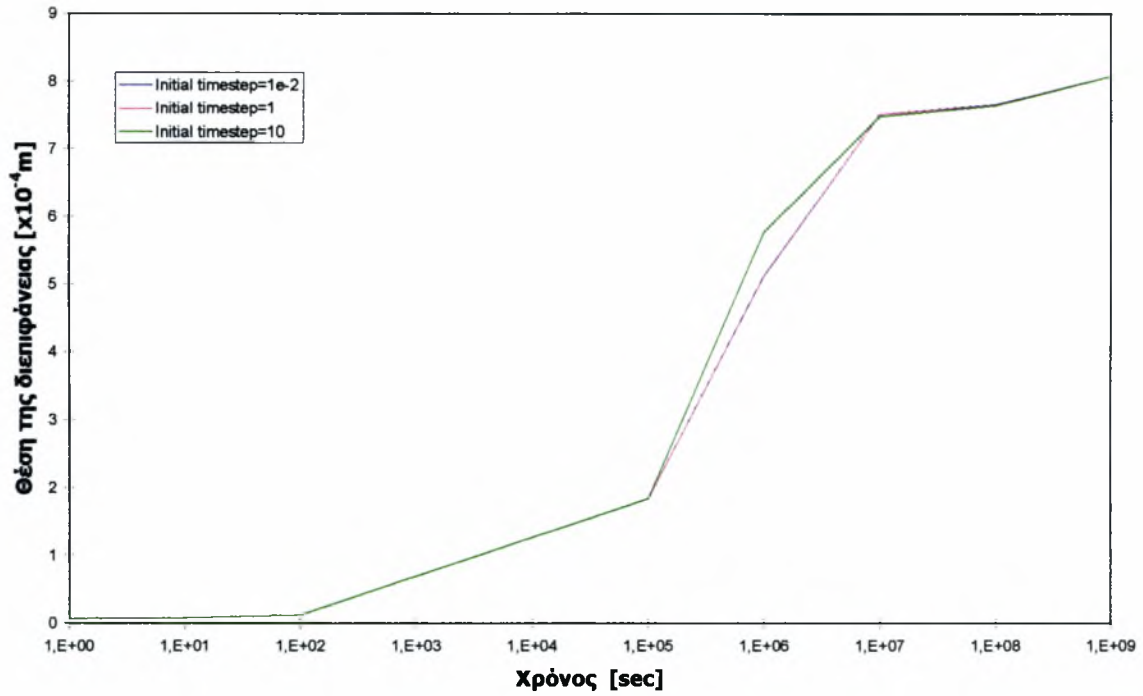
Διάγραμμα 3.8: Επίδραση του 'Μέγιστου χρονικού βήματος κατά την ολοκλήρωση' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο.



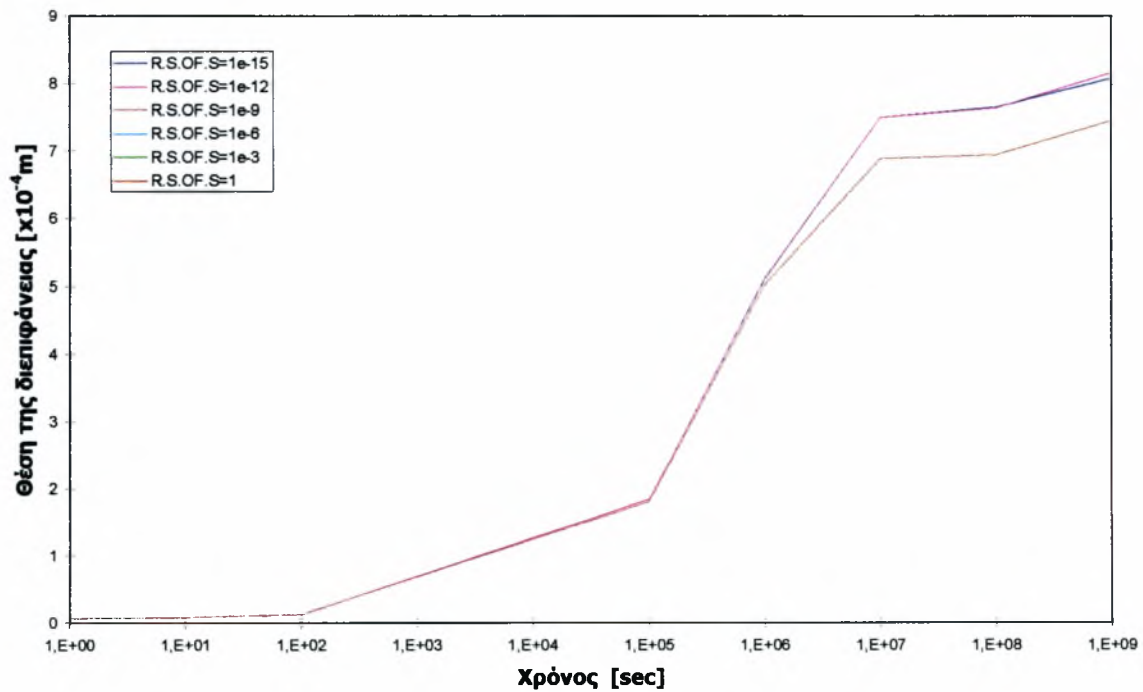
Διάγραμμα 3.9: Επίδραση της 'Κινούσας δύναμης για την ανενεργή φάση' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο.



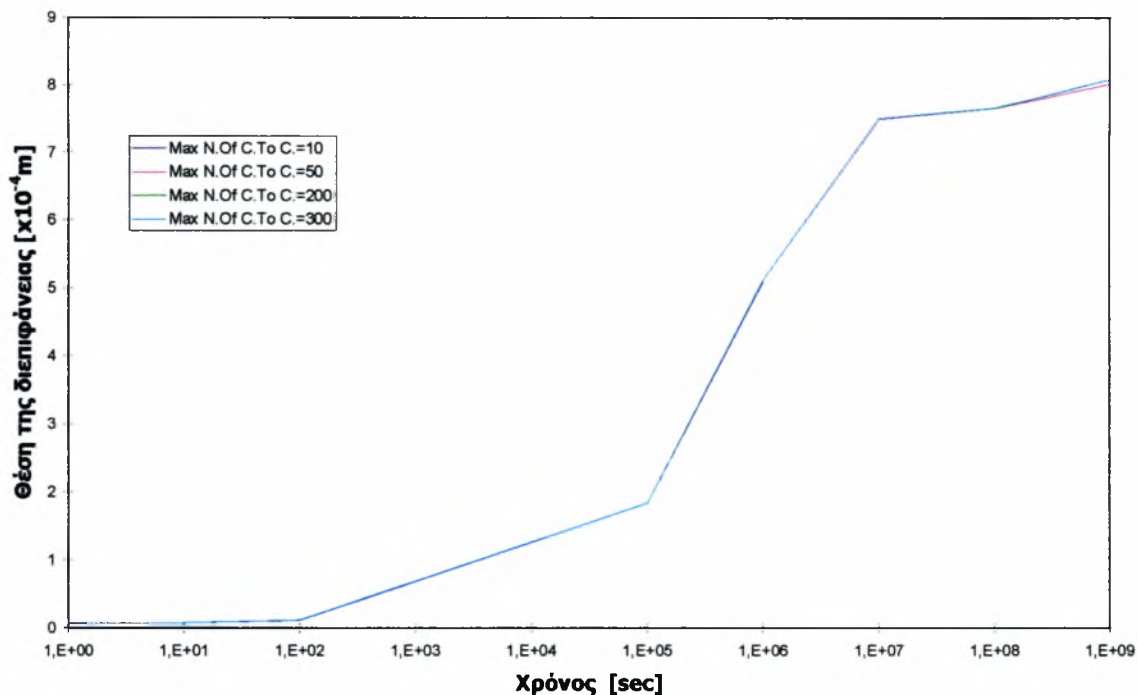
Διάγραμμα 3.10: Επίδραση του 'Step used by NS01A' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο.



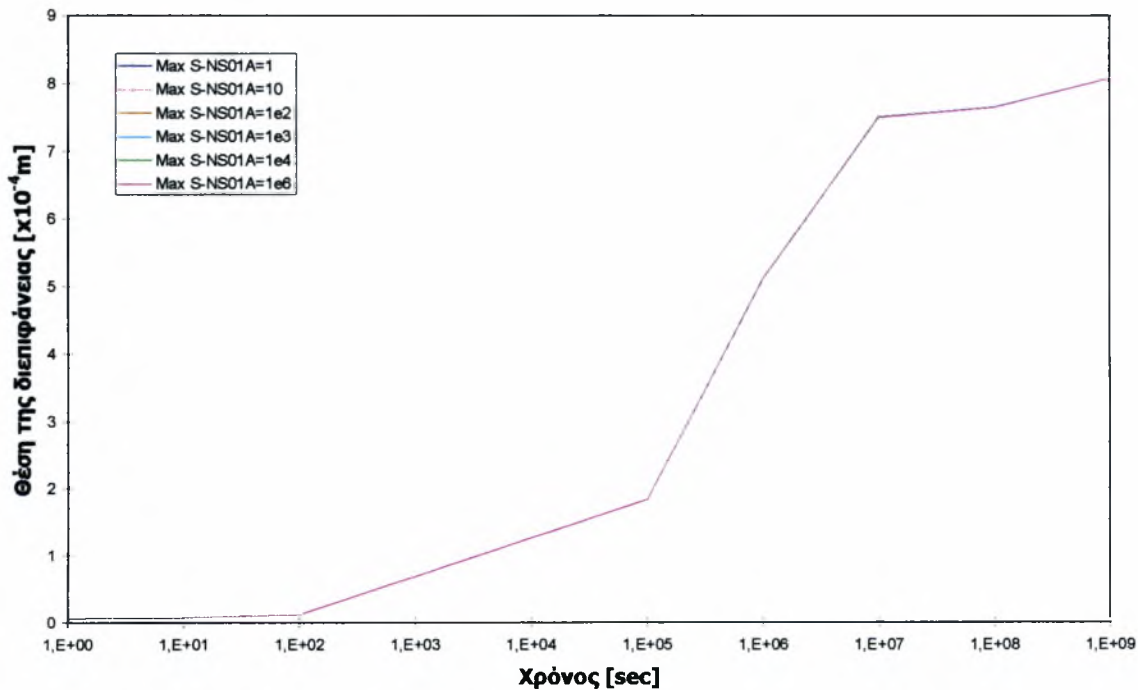
Διάγραμμα 3.11: Επίδραση του 'Αρχικού χρονικού βήματος' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο.



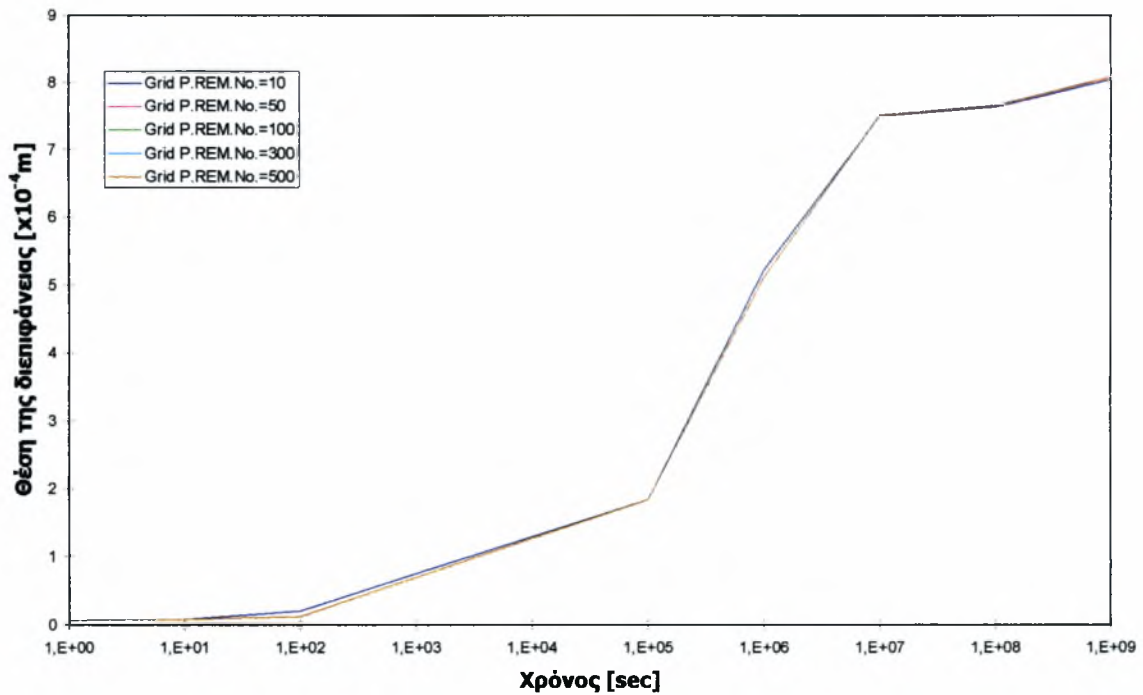
Διάγραμμα 3.12: Επίδραση του 'Απαιτούμενου αθροίσματος τετραγώνων' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο.



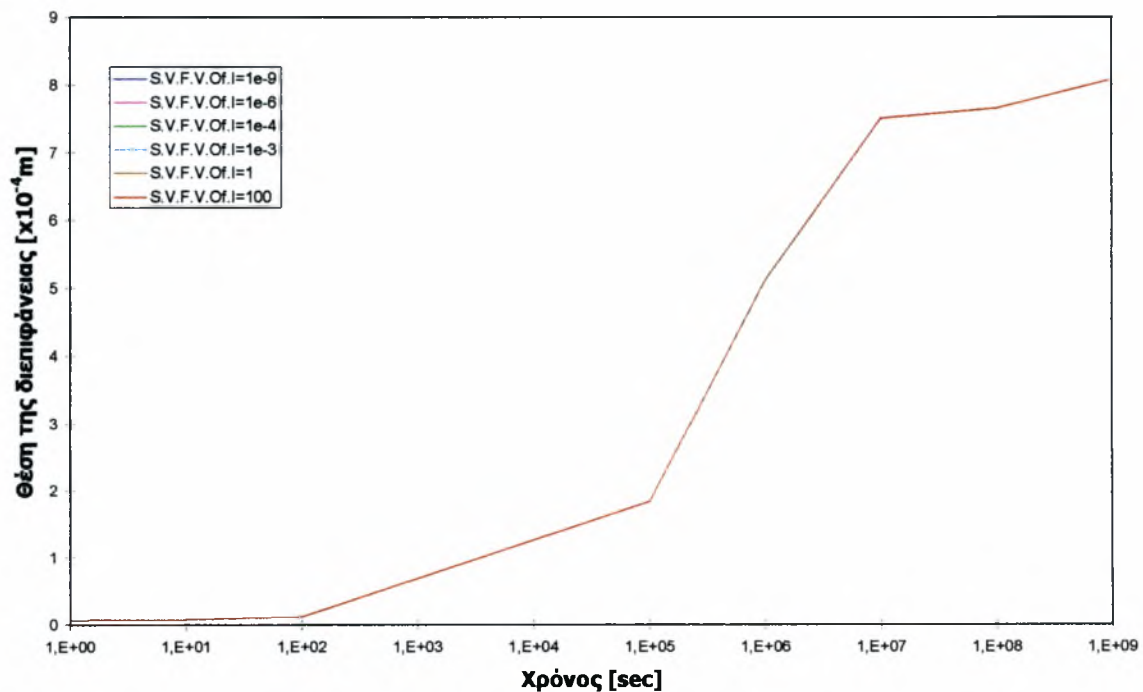
Διάγραμμα 3.13: Επίδραση του 'Maximum number of calls to calfun of NS01A' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο.



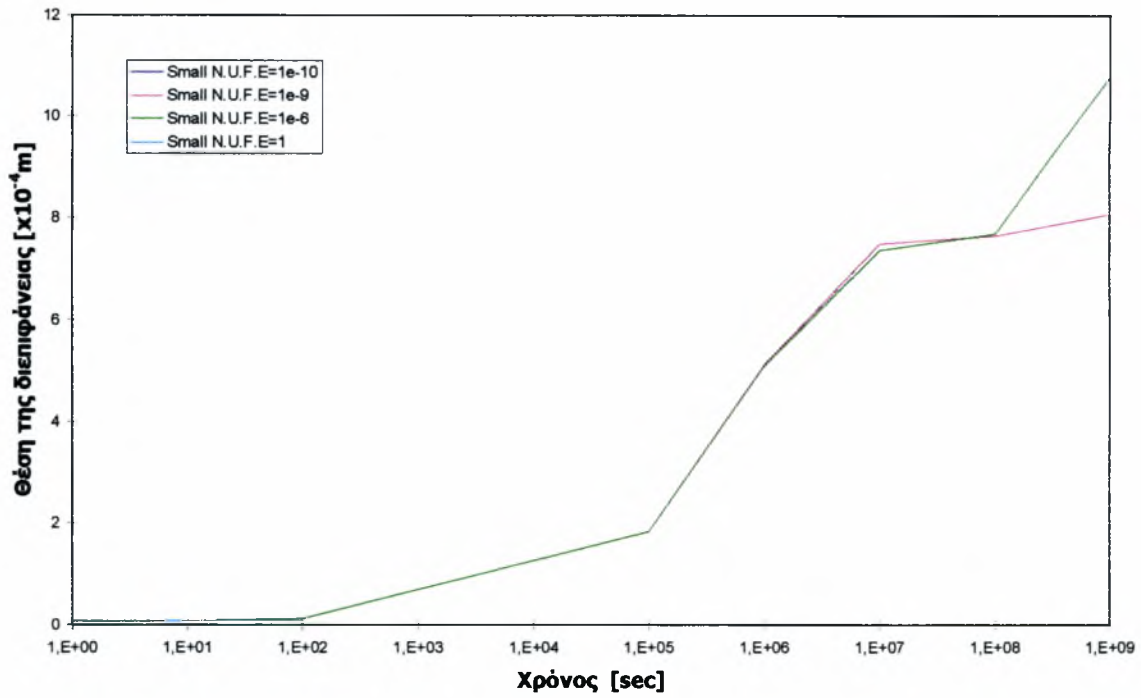
Διάγραμμα 3.14: Επίδραση του 'Maximum step used by NS01A' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο.



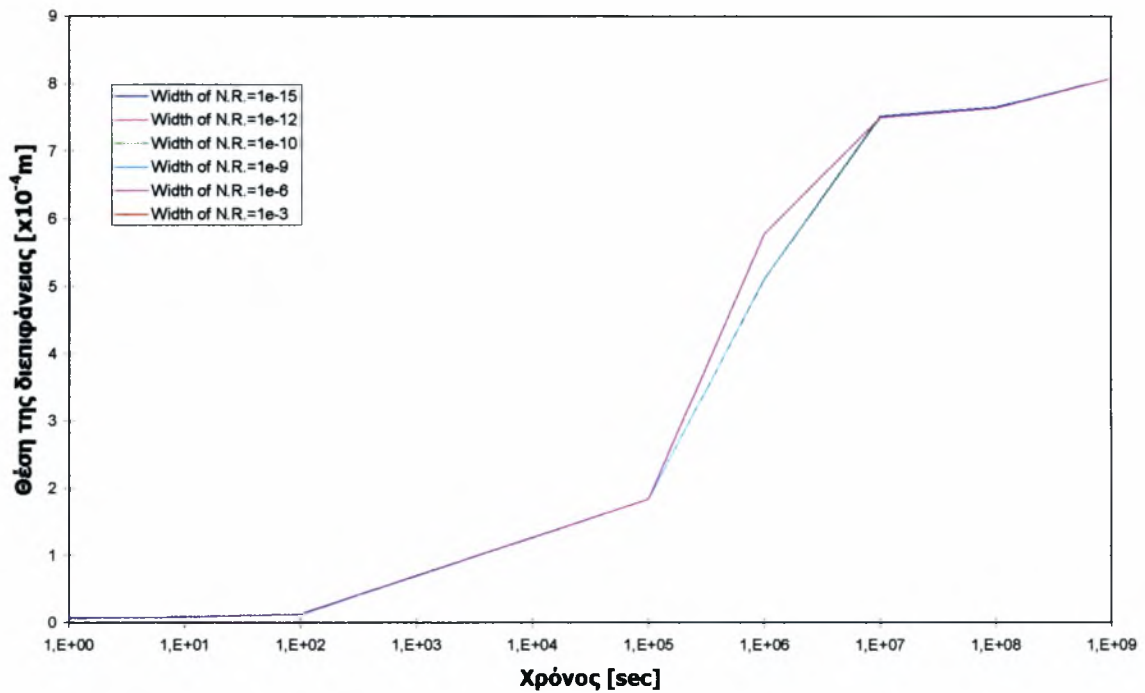
Διάγραμμα 3.15: Επίδραση της 'Μετακίνησης αριθμού πλεγματικών σημείων' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο.



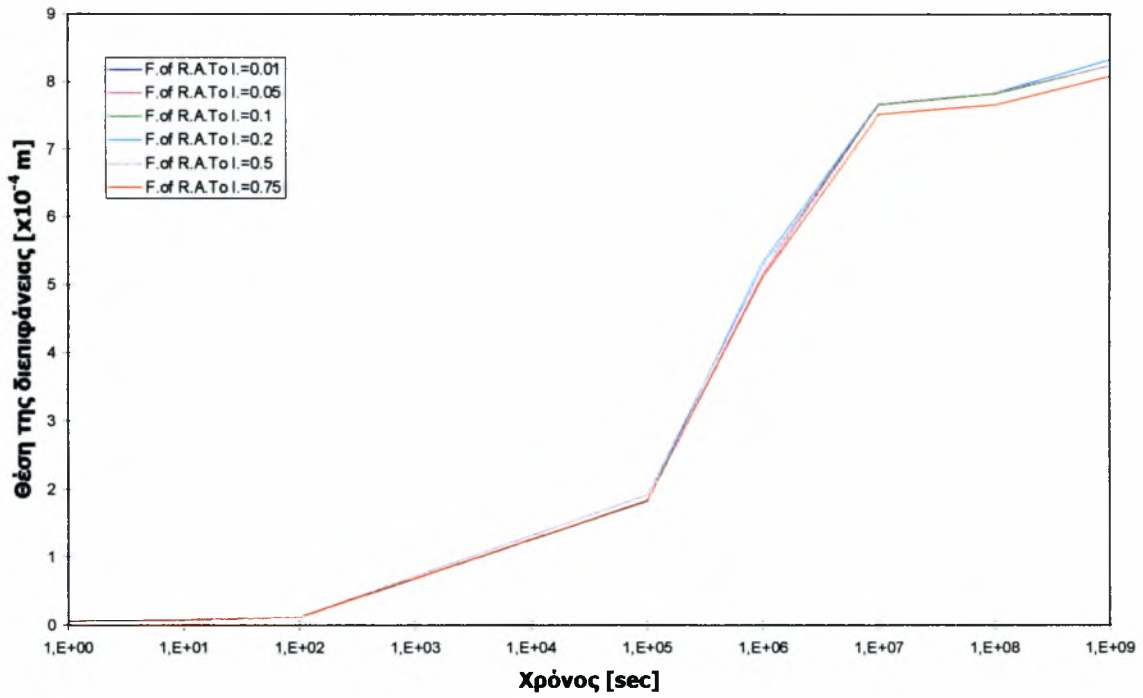
Διάγραμμα 3.16: Επίδραση της 'Αρχικής τιμής της ταχύτητας της διεπιφάνειας' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο.



Διάγραμμα 3.17: Επίδραση του 'Μικρότερου αριθμού σχηματισμού εξισώσεων ροής' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο.



Διάγραμμα 3.18: Επίδραση του 'Πλάτους της νέας περιοχής' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο.



Διάγραμμα 3.19: Επίδραση του 'κλάσματος της περιοχής που μεταβιβάζεται στη διεπιφάνεια' στη θέση της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο.

4. ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΤΟΥ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟΥ DICTRA ΣΤΗΝ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΜΕΤΑΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΥ $\alpha \rightarrow \gamma$

4.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η εξέλιξη της μοντελοποίησης της σχηματιζόμενης μικροδομής στα υλικά έχει εμφανώς προοδεύσει τα τελευταία χρόνια, ειδικά στα θέματα ανακρυστάλλωσης, πρόβλεψης του μεγέθους κόκκου στη δομή κατά την διαδικασία στερεοποίησης και δενδριτικής ανάπτυξης. Η μοντελοποίηση προσφέρει απεικονίσεις που αναπαριστούν τις πραγματικές μικροδομές. Γίνεται όλο και περισσότερο σημαντική στην πρόβλεψη ατελειών της μικροδομής και τις τελικές μηχανικές ιδιότητες. Ωστόσο, η πολυπλοκότητα των μετασχηματισμών της στερεάς κατάστασης και η παρουσία πολλών φάσεων και μορφολογιών έχουν περιορίσει τη χρήση αυτών των τεχνικών σε μια περιοχή θερμικών κατεργασιών των χάλυβων. Το πρώτο στάδιο στο μοντέλο θερμικής κατεργασίας των χάλυβων είναι να θεωρηθούν οι μετασχηματισμοί φάσεων που συμβαίνουν κατά τη θέρμανση, διότι η κατάσταση της μικροδομής μετά τη θέρμανση (ποσοστό όγκου, ομογενοποιημένη συγκέντρωση και πυκνότητα των ωστενιτικών κόκκων) έχει μεγάλη επίδραση πάνω στην κινητική του μετασχηματισμού φάσης κατά τη διάρκεια της ψύξης και μεταγενέστερα στις μηχανικές ιδιότητες του χάλυβα. Τα περισσότερα από τα μοντέλα πρόβλεψης της κινητικής του μετασχηματισμού της μικροδομής κατά τη διάρκεια της ωστενιτοποίησης των χάλυβων βασίζονται πάνω σε πειραματικά διαγράμματα TTT και μερικές επιπρόσθετες αρχές. Οι αρχές αυτές επιτρέπουν στα δεδομένα που πάρθηκαν σε συνθήκες ισόθερμου μετασχηματισμού να εφαρμόζονται για την προσομοίωση του μετασχηματισμού κατά τη διάρκεια συνεχούς θέρμανσης. Παρ' όλα αυτά τέτοια μοντέλα έχουν περιορισμένη εφαρμογή, διότι τα πειραματικά δεδομένα εφαρμόζονται μόνο για δεδομένη αρχική μικροδομή.

Μία διαφορετική προσέγγιση στην πρόβλεψη μετασχηματισμών διαχυτικών φάσεων είναι η επίλυση της εξίσωσης διάχυσης σε ένα αντιπροσωπευτικό τμήμα της μικροδομής, όπου οι παραγόμενες φάσεις (φερρίτης-σεμεντίτης-ωστενίτης) περιγράφονται. Αυτό έχει επιτευχθεί για μία διάσταση (1-D) για την πρόβλεψη χρόνων ομογενοποίησης και αντίστροφων διαγραμμάτων TTT. Μερικές προσπάθειες έχουν επίσης πραγματοποιηθεί σε δύο διαστάσεις (2-D) για τον υπολογισμό μικροδομών. Ωστόσο, δεν υπάρχουν μοντέλα δύο διαστάσεων που να λαμβάνουν υπόψη συνοριακές συνθήκες μιας κινούμενης διεπιφάνειας. Έχει αποδειχθεί ότι απαιτούνται δύο συνθήκες για τη διεπιφάνεια. Η μία επιβάλλεται από το διάγραμμα ισορροπίας φάσεων και η δεύτερη από το ισοζύγιο της ροής των ατόμων κραμάτωσης. [2]

Στο κεφάλαιο αυτό γίνεται σύγκριση των αποτελεσμάτων ωστενιτοποίησης και ομογενοποίησης υποευτηκτοειδών χάλυβων που υπολογίστηκαν με το λογισμικό πακέτο DICTRA, με ένα γενικό διφασικό μοντέλο το οποίο προβλέπει την εξέλιξη της μικροδομής σε υλικά τα οποία υφίστανται μετασχηματισμό φάσης.

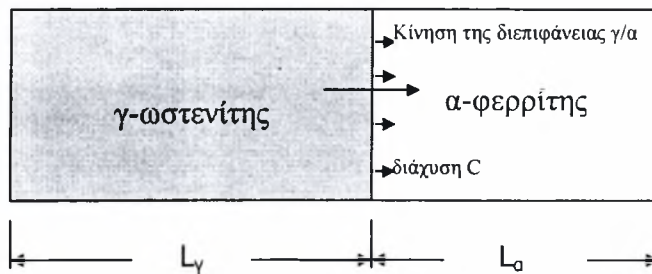
4.2 ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΤΟΥ ΜΕΤΑΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΥ α-γ.

Κατά την αργή θέρμανση υποευτηκτοειδούς χάλυβα με σύσταση Fe-0,49wt% από τη θερμοκρασία A_{e1} έως τη θερμοκρασία πλήρους ωστενιτοποίησης A_{e3} , ο μετασχηματισμός από φερρίτη σε ωστενίτη γίνεται με διαχυτικό μηχανισμό πυρηνώσεως και αναπτύξεως. Στη θερμοκρασία $A_{e1}+\theta$ υπάρχει ωστενίτης που προήλθε από τον περλίτη και είναι πλούσιος σε άνθρακα και φερρίτη φτωχό σε άνθρακα. Θερμαίνοντας σχηματίζεται περισσότερος ωστενίτης, ενώ ο υπόλοιπος φερρίτης εμπλουτίζεται διαρκώς σε άνθρακα. Ο εμπλουτισμός αυτός οφείλεται στην απόρριψη του άνθρακα από τον ωστενίτη λόγω της μεγάλης διαφοράς στη στερεά διαλυτότητα των δύο φάσεων (μέγιστη στερεά διαλυτότητα του άνθρακα στον ωστενίτη είναι 2,1% στους 1147°C ενώ στο φερρίτη είναι 0,025% στους 723 °C).

Το σύστημα αρχικά αποτελείται από δύο περιοχές. Από γ-ωστενίτη υψηλής περιεκτικότητας σε άνθρακα (σχηματιζόμενο από περλίτη) και προευτηκτοειδή α-φερρίτη. Το μοντέλο είναι μονοδιάστατο 1-D, και η γεωμετρία του θεωρείται επίπεδη με διεπιφάνεια μοναδιαίου εμβαδού Σχ. 4.1. Έτσι, τα αρχικά πλάτη των δύο περιοχών, L_α και L_γ , μπορούν να υπολογιστούν απ' ευθείας από τα κλάσματα όγκου των δύο φάσεων, ϕ_α και ϕ_γ , υπολογισμένα στη θερμοκρασία $A_{e1}=999,79\text{K}$, η οποία αντιπροσωπεύει τη θερμοκρασία στην οποία όλος ο περλίτης έχει διαλυθεί και μόνο γ-ωστενίτης και προευτηκτοειδής α-φερρίτης έχει μείνει στο σύστημα:

$$L_\gamma = \phi_\gamma L \quad (4.1)$$

$$L_\alpha = \phi_\alpha L \quad (4.2)$$



Σχήμα 4.1: Γεωμετρική απεικόνιση του τρόπου ανάπτυξης του ωστενίτη μέσα στον φερρίτη

Με τη βοήθεια του προγράμματος υπολογιστικής θερμοδυναμικής (Thermo-Calc) υπολογίστηκαν τα κλάσματα όγκου του ωστενίτη, φ_γ και του φερρίτη, φ_α , στη θερμοκρασία $A_{e1}=999,79\text{K}$, και επομένως εάν δοθεί μία τιμή αυθαίρετα στο L , μπορούν να υπολογιστούν τα L_γ και L_α από τις εξισώσεις (4.1) και (4.2) αντίστοιχα. Επίσης, στην ίδια θερμοκρασία μπορεί να καθοριστούν οι περιεκτικότητες του ωστενίτη και του φερρίτη σε C από το Thermo-Calc.

Η ωστενιτοποίηση προσομοιώνεται λύνοντας τις εξισώσεις διάχυσης στις δύο φάσεις που παίρνουν μέρος στο μετασχηματισμό.

Η ροή των ατόμων σε κάθε φάση περιγράφεται από το 2^ο νόμο του Fick:

- Μέσα στο γ

$$\frac{\partial c^\gamma}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D^\gamma \frac{\partial c^\gamma}{\partial x} \right) \quad (4.3)$$

- Μέσα στο α

$$\frac{\partial c^\alpha}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D^\alpha \frac{\partial c^\alpha}{\partial x} \right) \quad (4.4)$$

όπου c^α, c^γ είναι οι συγκεντρώσεις του άνθρακα και D^α, D^γ οι συντελεστές διάχυσης στο φερρίτη και ωστενίτη, αντίστοιχα. Οι εξισώσεις (4.3) και (4.4) ισχύουν στο εσωτερικό της κάθε φάσης, δηλαδή:

- Στον ωστενίτη $0 \leq x \leq x_{\gamma/\alpha}$
- Στον φερρίτη $x_{\gamma/\alpha} \leq x \leq L_\gamma + L_\alpha$

όπου $x_{\gamma/\alpha}$ είναι η συντεταγμένη της διεπιφάνειας.

- Η ροή ατόμων διαμέσου της διεπιφάνειας γ/α περιγράφεται από την εξίσωση:

$$V_{\gamma/\alpha} \cdot (C_{\gamma/\alpha}^{\gamma} - C_{\gamma/\alpha}^{\alpha}) = D^{\alpha} \left(\frac{\partial c^{\alpha}}{\partial x} \right)_{\gamma/\alpha} - D^{\gamma} \left(\frac{\partial c^{\gamma}}{\partial x} \right)_{\gamma/\alpha} \quad (4.5)$$

$C_{\gamma/\alpha}^{\gamma}$, $C_{\gamma/\alpha}^{\alpha}$ είναι οι συγκεντρώσεις του άνθρακα στις πλευρές της διεπιφάνειας του γ και α , αντίστοιχα. Θεωρείται ότι στη διεπιφάνεια επικρατεί τοπική θερμοδυναμική ισορροπία οπότε τα $C_{\gamma/\alpha}^{\gamma}$ και $C_{\gamma/\alpha}^{\alpha}$ υπολογίζονται μέσω του Thermo-calc, για κάθε θερμοκρασία. Το $V_{\gamma/\alpha}$ δείχνει την ταχύτητα της διεπιφάνειας γ/α , ενώ τα D^{γ}, D^{α} είναι οι συντελεστές διάχυσης του άνθρακα στις δύο φάσεις. Οι συντελεστές διάχυσης εξαρτώνται από τη θερμοκρασία και τη συγκέντρωση και υπολογίζονται χρησιμοποιώντας τα κινητικά δεδομένα που είναι διαθέσιμα στο DICTRA.

Το σύστημα θεωρείται κλειστό, έτσι οι συνοριακές συνθήκες είναι:

$$\left. \frac{\partial c^{\gamma}}{\partial x} \right|_{x=0} = 0 \quad (4.6)$$

$$\left. \frac{\partial c^{\alpha}}{\partial x} \right|_{x=L} = 0 \quad (4.7)$$

Οι αρχικές συνθήκες της συγκέντρωσης των διαλυμένων ατόμων του γ και του α στην αρχική θερμοκρασία A_{e1} , δίνονται από τις παρακάτω εξισώσεις:

$$c^{\gamma}(x,0) = c^{\gamma}(T_{Ae1}), \quad 0 \leq x \leq L_{\gamma} \quad (4.8)$$

$$c^{\alpha}(x,0) = c^{\alpha}(T_{Ae1}), \quad L_{\gamma} \leq x \leq L_{\gamma} + L_{\alpha} \quad (4.9)$$

Οι αρχικές συνθήκες υπολογίστηκαν από το Thermo-Calc, όπως αναφέρθηκε νωρίτερα. Αυτό το πρόβλημα του μονοδιάστατου μοντέλου λύνεται χρησιμοποιώντας τη μέθοδο των

πεπερασμένων διαφορών, σε συνδυασμό με μία αριθμητική μέθοδο για την επίλυση των εξισώσεων διάχυσης αναπτυγμένη από τον Ågren [5], μία διαδικασία που εκτελείται επίσης από το DICTRA.

Τέλος, η θερμοκρασία θεωρείται ότι αυξάνεται με γραμμικό τρόπο από την αρχική A_{e1} μέχρι τη θερμοκρασία πλήρους ωστενιτοποίησης A_{c3} σύμφωνα με τη σχέση:

$$T(t) = 999,79 + H \cdot t$$

όπου H είναι ο ρυθμός θέρμανσης σε K/sec.

4.3 ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ ΜΕΛΕΤΗΣ

Στη συγκεκριμένη εργασία μελετήθηκε η τελική θερμοκρασία πλήρους ωστενιτοποίησης κατά τη θέρμανση A_{c3} του χάλυβα Fe-0,49wt%, για διάφορους ρυθμούς θέρμανσης και για διαφορετικά μήκη περιοχών φερρίτη και ωστενίτη. Στον Πίνακα 4.1 παρουσιάζεται το εύρος τιμών των μεταβλητών για τα οποία έγιναν οι προσομοιώσεις. Για κάθε μέγεθος περιοχής φερρίτη και ωστενίτη δοκιμάστηκαν οι αναφερόμενοι ρυθμοί θέρμανσης.

Πίνακας 4.1: Εύρος τιμών των μεταβλητών που χρησιμοποιήθηκαν στην προσομοίωση

Ρυθμός θέρμανσης H [K/sec]	Συνολικό μέγεθος περιοχής L[m]
0,1	2×10^{-6}
0,2	5×10^{-6}
1	8×10^{-6}
3	10×10^{-6}
10	12×10^{-6}
30	15×10^{-6}
100	20×10^{-6}
300	
1000	
2500	

Για να δειχθεί η επίδραση της αρχικής μικροδομής στο μετασχηματισμό, οι υπολογισμοί έχουν επαναληφθεί χρησιμοποιώντας διάφορα μεγέθη μήκους L. Επίσης, με σκοπό τη μελέτη

της εγκυρότητας του προγράμματος DICTRA, συγκρίθηκαν οι θερμοκρασίες ωστενιτοποίησης για κάθε ρυθμό θέρμανσης και για κάθε μήκος με αυτές ενός 1-D μοντέλου των A.Jacot και M.Rappaz.

Τέλος, συγκρίθηκαν τα αποτελέσματα που βρέθηκαν από το DICTRA για μήκος $L=5e-6$, με αυτά μιας πειραματικής διαδικασίας που αναφέρεται από τους A.Jacot και M.Rappaz στην εργασία τους [2].

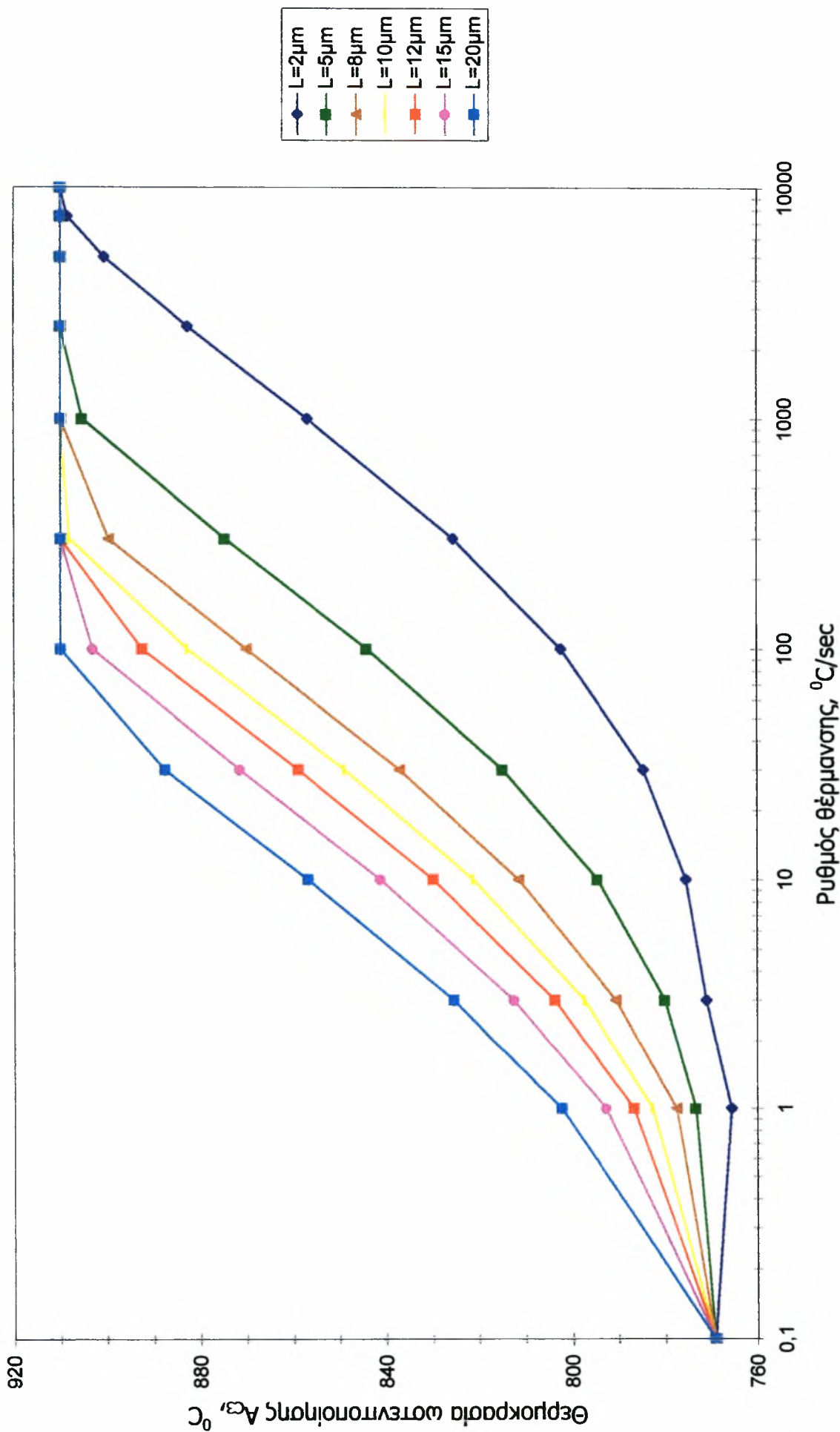
4.4 ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ-ΣΥΖΗΤΗΣΗ

Στον *πίνακα 4.3* καταγράφονται συγκεντρωτικά τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων στο DICTRA και στο *διάγραμμα 4.1* απεικονίσθηκαν γραφικά. Από το διάγραμμα διαπιστώνεται ότι η A_{c3} κυμαίνεται μεταξύ δύο ακραίων τιμών. Σε πολύ χαμηλούς ρυθμούς θέρμανσης (0.1K/sec) υπάρχει αρκετός χρόνος για τη διαλυτοποίηση και διάχυση του άνθρακα, έτσι ώστε η διεπιφάνεια να κινείται με μεγάλη ταχύτητα και ο μετασχηματισμός ολοκληρώνεται μόλις στους 770°C. Όσο αυξάνεται ο ρυθμός θέρμανσης ο χρόνος διαλυτοποίησης και διάχυσης του άνθρακα περιορίζεται, με αποτέλεσμα ο μετασχηματισμός να μετατοπίζεται σε υψηλότερες θερμοκρασίες. Σε πολύ υψηλούς ρυθμούς ο άνθρακας δεν έχει διαθέσιμο χρόνο να διαχυθεί και ουσιαστικά όλος ο φερρίτης μετασχηματίζεται σαν καθαρός σίδηρος στους 910°C. Το DICTRA δεν μπορεί να υπολογίσει μεγαλύτερη θερμοκρασία ωστενιτοποίησης από τους 910°C, διότι μετά από αυτή τη θερμοκρασία σύμφωνα με το διάγραμμα φάσεων δεν είναι δυνατό να υπολογίσει τις συστάσεις των δύο φάσεων μέσω του Thermo-Calc.

Επίσης, από την επανάληψη της διαδικασίας χρησιμοποιώντας διαφορετικά συνολικά πλάτη περιοχών μπορεί να παρατηρηθεί ότι το αρχικό μέγεθος του φερρίτη έχει μεγάλη επίδραση στην κινητική του μετασχηματισμού. Δηλαδή, όσο αυξάνεται το πλάτος από 2μm σε 20μm, αυξάνεται και η A_{c3} για κάθε ρυθμό θέρμανσης. Αυτό συμβαίνει διότι όσο πιο λεπτόκοκκο είναι το υλικό, τόσο μικρότερες είναι οι αποστάσεις διάχυσης που πρέπει να καλύψουν τα άτομα C, επομένως ο μετασχηματισμός ολοκληρώνεται σε χαμηλότερες θερμοκρασίες.

Οι *πίνακες 4.4-4.10* και τα αντίστοιχα *διαγράμματα 4.2-4.8* παρουσιάζουν τις τιμές τις θερμοκρασίας ωστενιτοποίησης που υπολογίστηκαν με τη χρήση των δύο μοντέλων που εξετάζονται. Είναι φανερό, τόσο από τα διαγράμματα όσο και από το ποσοστό απόκλισης που αναγράφεται στους πίνακες ότι τα αποτελέσματα του DICTRA συμφωνούν κατά μεγάλη προσέγγιση με αυτά του 1-D μοντέλου των A.Jacot και M.Rappaz.

Παρόμοια, πολύ καλή προσέγγιση παρατηρείται στον *πίνακα 4.11* και στο αντίστοιχο *διάγραμμα 4.9*, όπου τα αποτελέσματα του DICTRA συγκρίθηκαν με πειραματικά τα οποία αναφέρονται στην εργασία των A.Jacot και M.Rappaz[2]. Η καμπύλη αναφέρεται σε



Διάγραμμα 4.1: Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης για διάφορους ρυθμούς θέρμανσης και διαφορετικά μήκη περιοχών

πειραματικά αποτελέσματα ωστενιτοποίησης χάλυβα Ck-45, ο οποίος έχει χημική σύσταση παραπλήσια με αυτή που χρησιμοποιήθηκε στη προσομοίωση και δίνει τη θερμοκρασία A_{c3} σαν συνάρτηση του ρυθμού θέρμανσης.

Επίσης, θα ήταν πολύ ενδιαφέρον η εύρεση μιας συνάρτησης η οποία να συνδέει την θερμοκρασία A_{c3} με το ρυθμό θέρμανσης, H και το μήκος, L . Για το λόγο αυτό παρουσιάζεται η παρακάτω διαδικασία.

Από τα *διαγράμματα 4.10* έως *4.16* φαίνεται κατά πόσο τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων που έγιναν παραπάνω για κάθε μήκος L , ακολουθούν κάποια γνωστή συνάρτηση. Πράγματι, παρατηρείται πολύ καλή συμφωνία των σημείων της προσομοίωσης με μία καμπύλη συνάρτησης η οποία ονομάζεται *λογιστική* και δίνεται από τη σχέση:

$$A_{c3} = \frac{A_1 - A_2}{1 + \left(\frac{H}{H_0}\right)^p} + A_2 \quad (4.10)$$

όπου A_1 , A_2 , H_0 και p είναι κάποιο συντελεστές των οποίων οι τιμές που πήραν για κάθε περίπτωση φαίνονται στον *Πίνακα 4.2*.

Πίνακας 4.2: Τιμές των συντελεστών της λογιστικής συνάρτησης για κάθε μήκος L .

L[μm]	A₁	A₂	H₀	p
2	763.37905	958.8469	1165.07648	0.57037
5	767.60397	930.98038	114.8299	0.68744
8	772.27589	918.82685	38.37075	0.80936
10	777.82819	916.13158	25.81475	0.90058
12	779.34613	915.58326	18.61245	0.90914
15	786.10235	913.8922	13.07159	1.00675
20	793.17877	913.07679	8.42075	1.10945

Πίνακας 4.4: Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης (°C) για τα δύο μοντέλα και το ποσοστό απόκλισης.

L=2*e-6m			
H[K/sec]	Ac₃ [DICTRA]	Ac₃ [Jacot-Rappaz]	ΑΠΟΚΛΙΣΗ [%]
1	766	771	0,65
3	771	772	0,13
10	775	780	0,64
30	785	789	0,51
100	802	807	0,62
300	825	834	1,08
1000	857	872	1,72
2500	882	900	2,00

Πίνακας 4.5: Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης (°C) για τα δύο μοντέλα και το ποσοστό απόκλισης.

L=5*e-6m			
H[K/sec]	Ac₃ [DICTRA]	Ac₃ [Jacot-Rappaz]	ΑΠΟΚΛΙΣΗ [%]
1	773	772	-0,13
3	780	776	-0,52
10	794	783	-1,40
30	815	800	-1,88
100	844	825	-2,30
300	874	858	-1,86
1000	905	898	-0,78
2500	911	903	-0,89

Πίνακας 4.6: Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης (°C) για τα δύο μοντέλα και το ποσοστό απόκλισης.

L=8*e-6m			
H[K/sec]	Ac₃ [DICTRA]	Ac₃ [Jacot-Rappaz]	ΑΠΟΚΛΙΣΗ [%]
1	778	776	-0,26
3	790	783	-0,89
10	811	800	-1,38
30	837	821	-1,95
100	870	858	-1,40
300	899	896	-0,33
1000	911	903	-0,89
2500	911	912	0,11

Πίνακας 4.7: Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης ($^{\circ}\text{C}$) για τα δύο μοντέλα και το ποσοστό απόκλισης.

L=10*e-6m			
H[K/sec]	A_{c3} [DICTRA]	A_{c3} [Jacot-Rappaz]	ΑΠΟΚΛΙΣΗ [%]
1	783	783	0,00
3	797	796	-0,13
10	821	818	-0,37
30	849	847	-0,24
100	883	890	0,79
300	908	903	-0,55
1000	911	912	0,11
2500	911	912	0,11

Πίνακας 4.8: Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης ($^{\circ}\text{C}$) για τα δύο μοντέλα και το ποσοστό απόκλισης.

L=12*e-6m			
H[K/sec]	A_{c3} [DICTRA]	A_{c3} [Jacot-Rappaz]	ΑΠΟΚΛΙΣΗ [%]
1	786	792	0,76
3	804	811	0,86
10	830	840	1,19
30	858	880	2,50
100	892	909	1,87
300	911	912	0,11
1000	911	912	0,11
2500	911	912	0,11

Πίνακας 4.9: Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης ($^{\circ}\text{C}$) για τα δύο μοντέλα και το ποσοστό απόκλισης.

L=15*e-6m			
H[K/sec]	A_{c3} [DICTRA]	A_{c3} [Jacot-Rappaz]	ΑΠΟΚΛΙΣΗ [%]
1	793	800	0,88
3	813	818	0,61
10	841	854	1,52
30	872	894	2,46
100	903	912	0,99
300	911	912	0,11
1000	911	912	0,11
2500	911	912	0,11

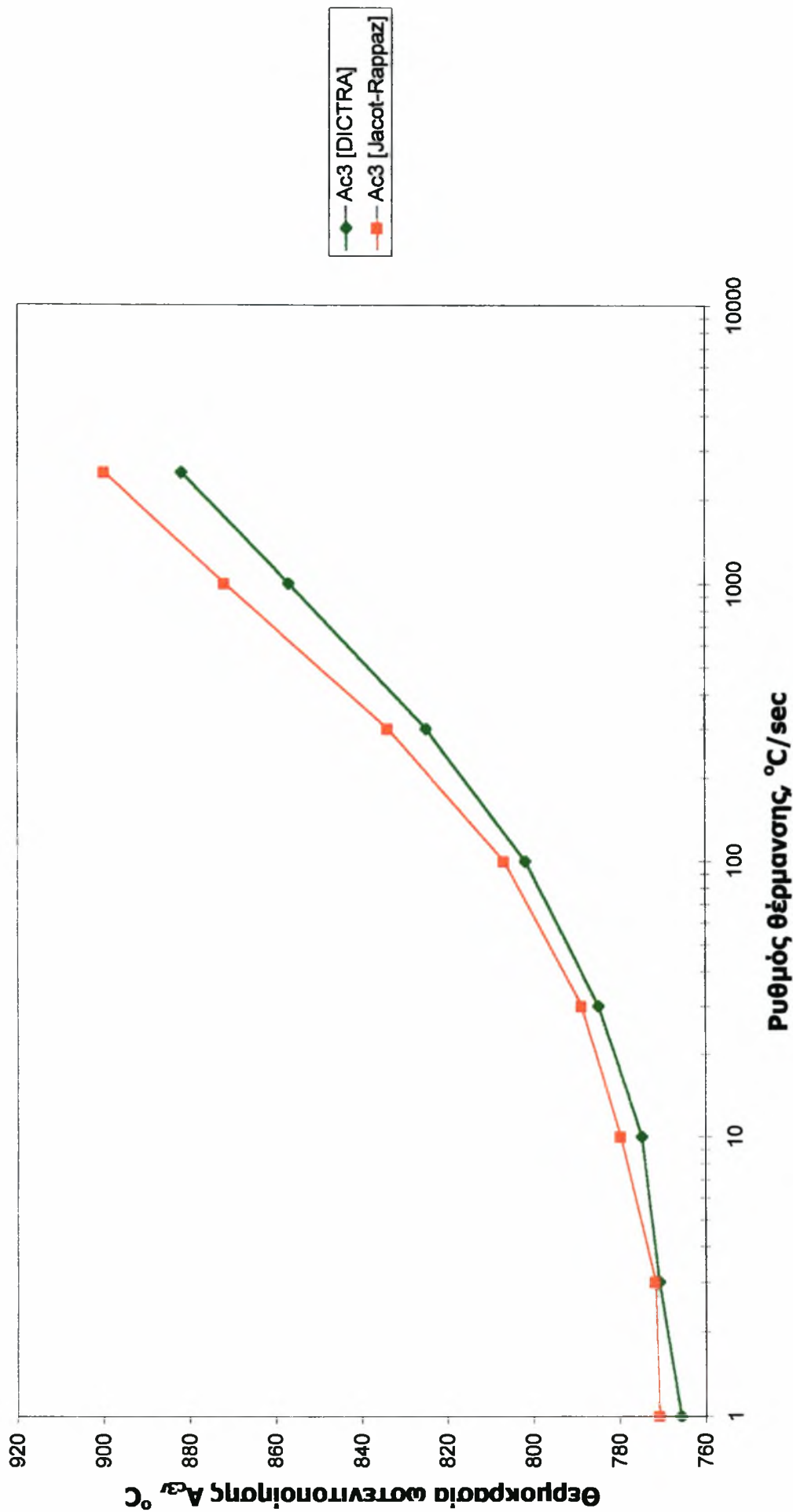
Πίνακας 4.10: Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης ($^{\circ}\text{C}$) για τα δύο μοντέλα και το ποσοστό απόκλισης.

L=20*e-6m			
H[K/sec]	A_{c3} [DICTRA]	A_{c3} [Jacot-Rappaz]	ΑΠΟΚΛΙΣΗ [%]
1	802	811	1,11
3	825	834	1,08
10	857	872	1,72
30	888	907	2,09
100	911	912	0,11
300	911	912	0,11
1000	911	912	0,11
2500	911	912	0,11

Πίνακας 4.11: Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης ($^{\circ}\text{C}$) του DICTRA και ενός πειράματος και το ποσοστό απόκλισης.

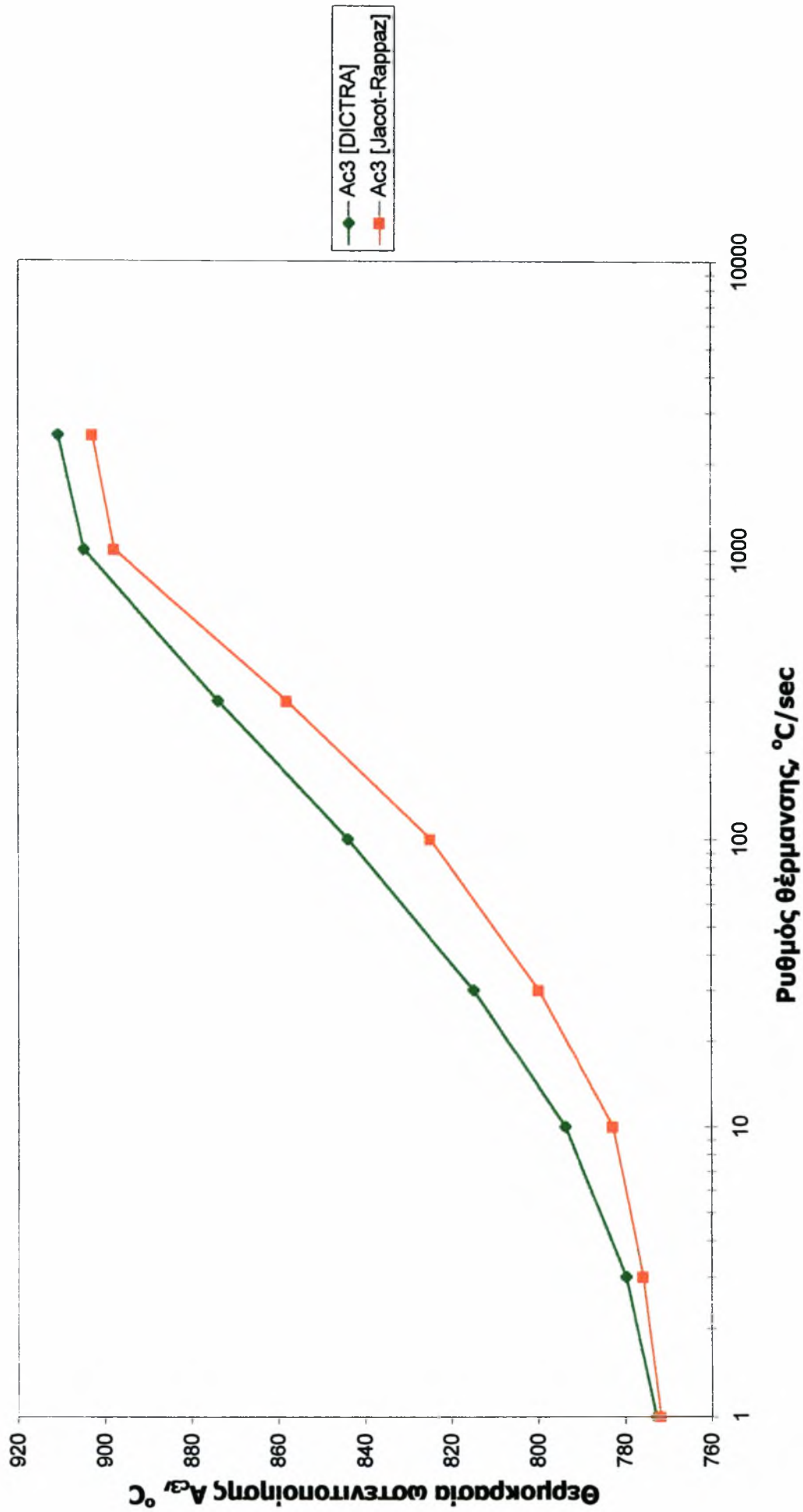
L=5μm			
H[K/sec]	A_{c3} [DICTRA]	A_{c3} [Experimental]	ΑΠΟΚΛΙΣΗ [%]
1	773	776	0,39
3	780	784	0,51
10	794	796	0,25
30	815	813	-0,25
100	844	843	-0,12
300	874	875	0,11
1000	905	911	0,66
2500	911	911	0,00

$L=2 \mu\text{m}$



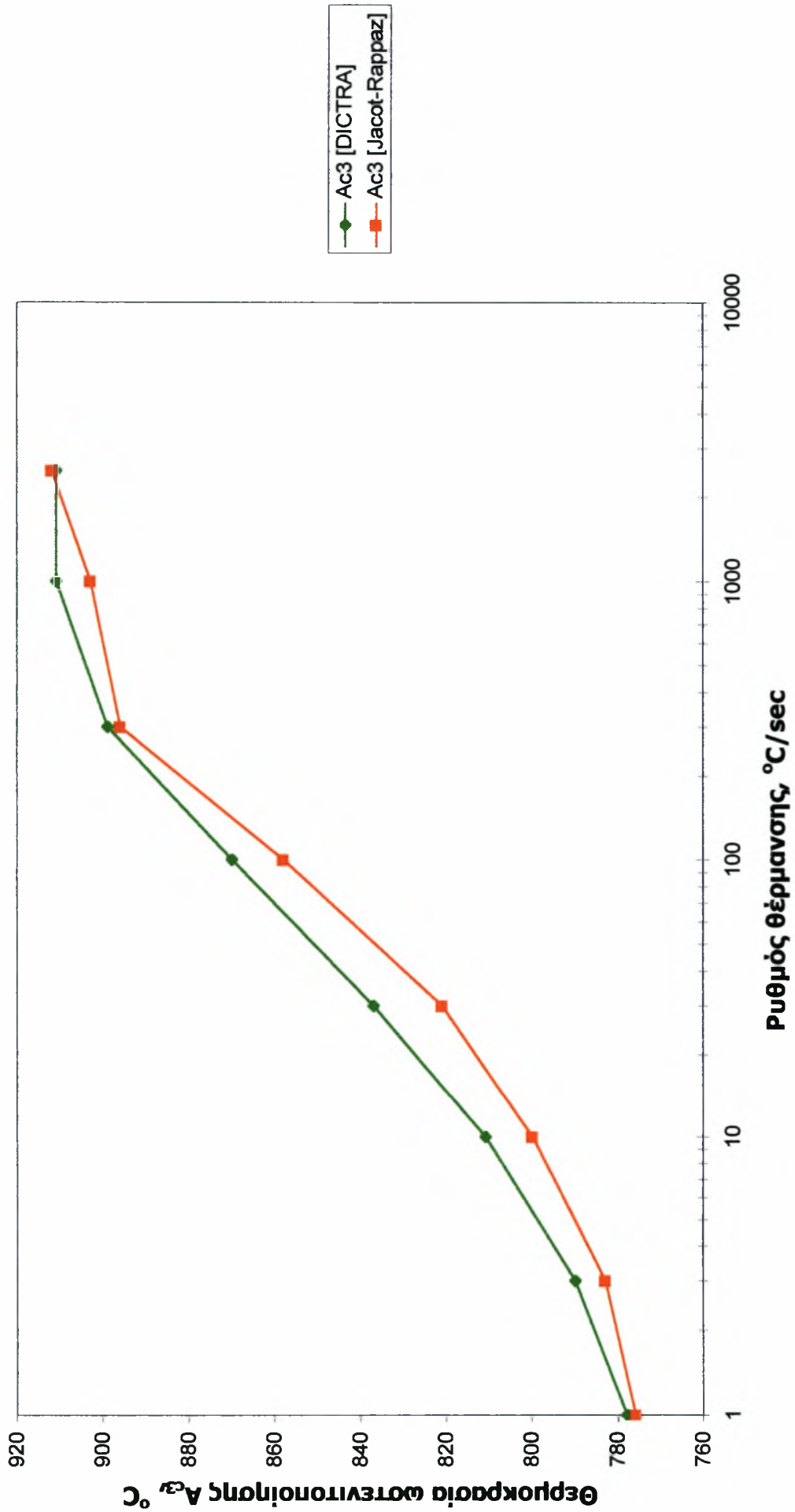
Διάγραμμα 4.2: Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης για διάφορους ρυθμούς θέρμανσης και για μήκος $L=2\mu\text{m}$

L=5 μm



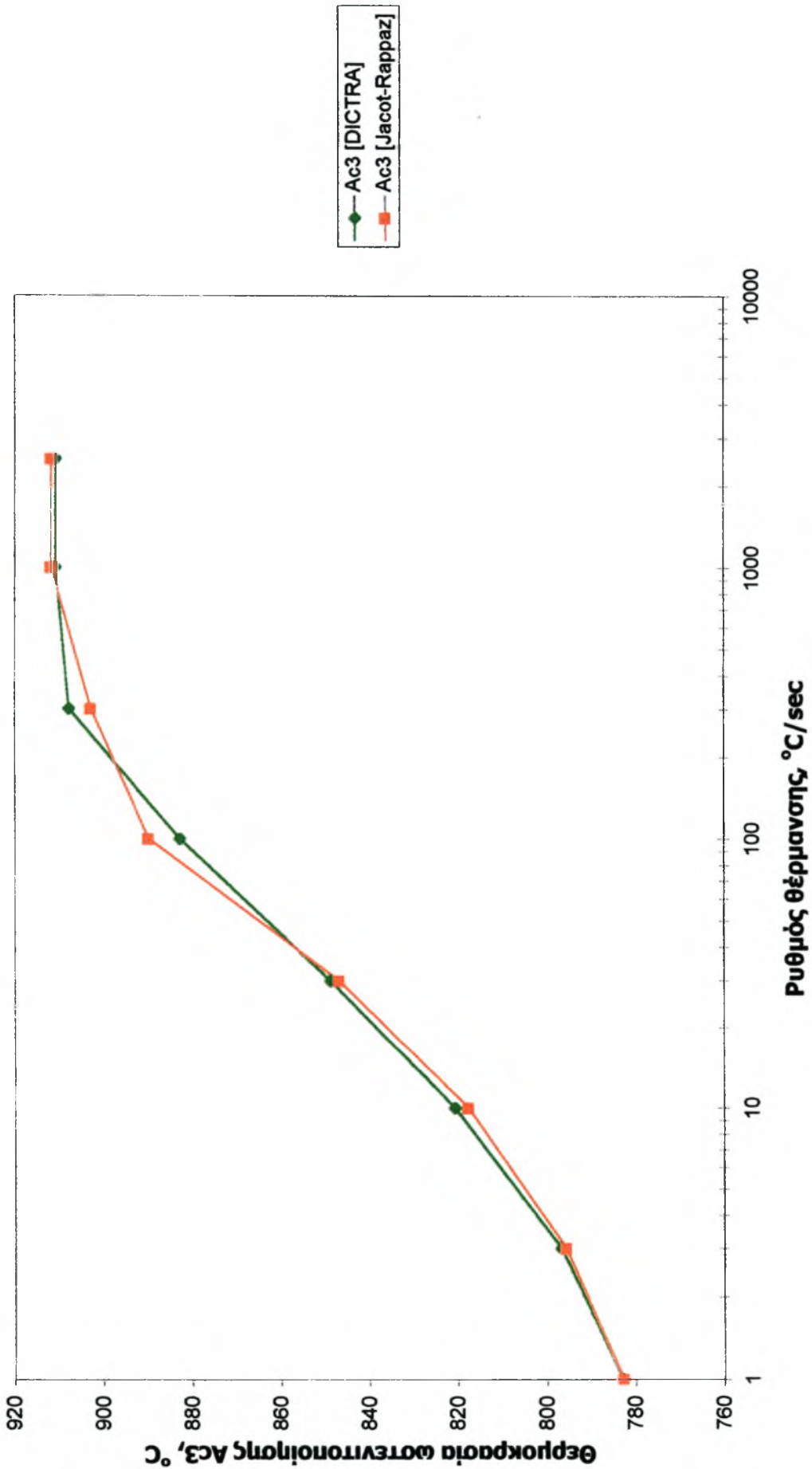
Διάγραμμα 4.3: Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης για διάφορους ρυθμούς θέρμανσης και για L=5μm

L=8 μm

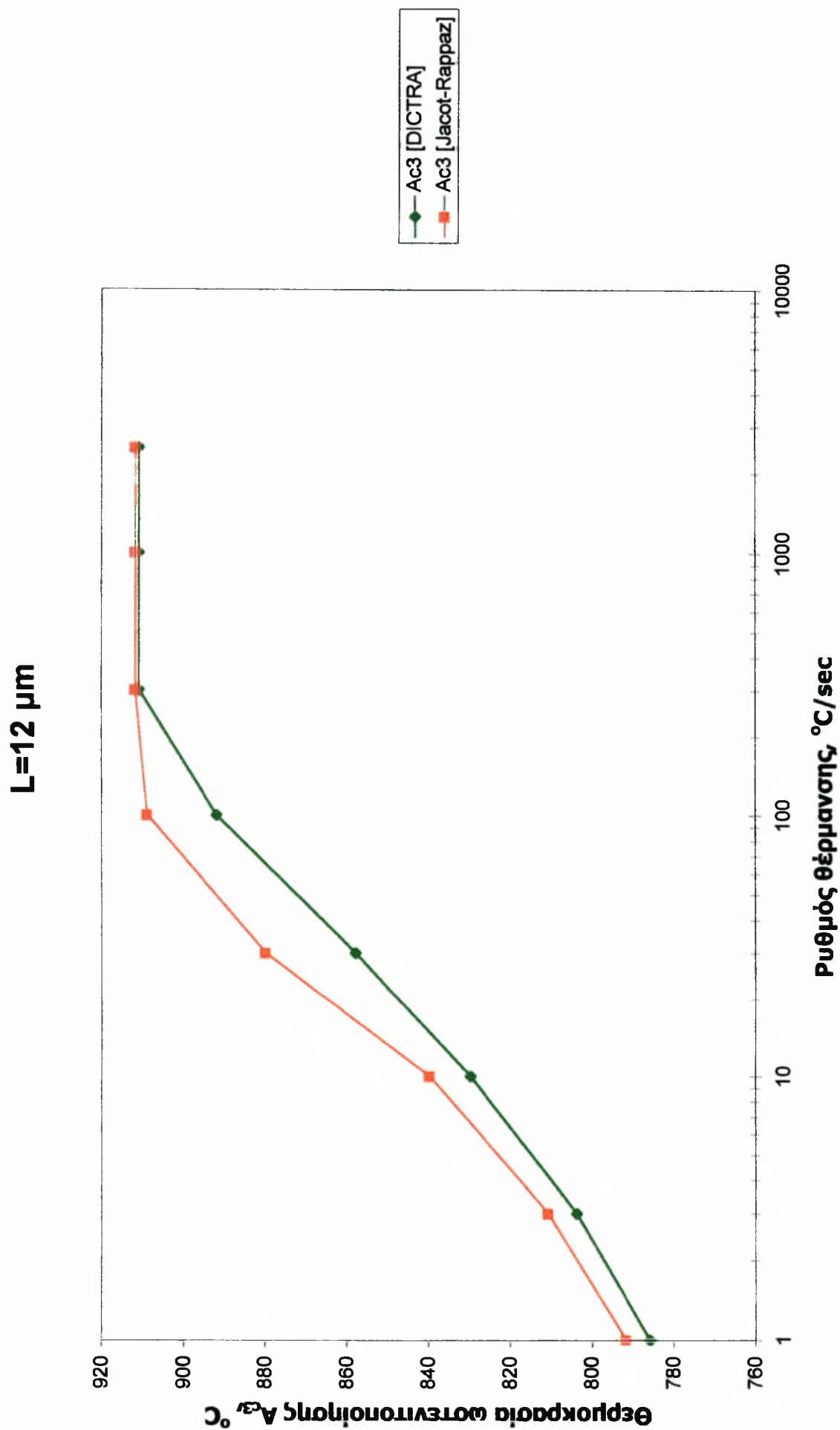


Διάγραμμα 4.4: Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης για διάφορους ρυθμούς θέρμανσης και για μήκος L=8μm

L=10 μm

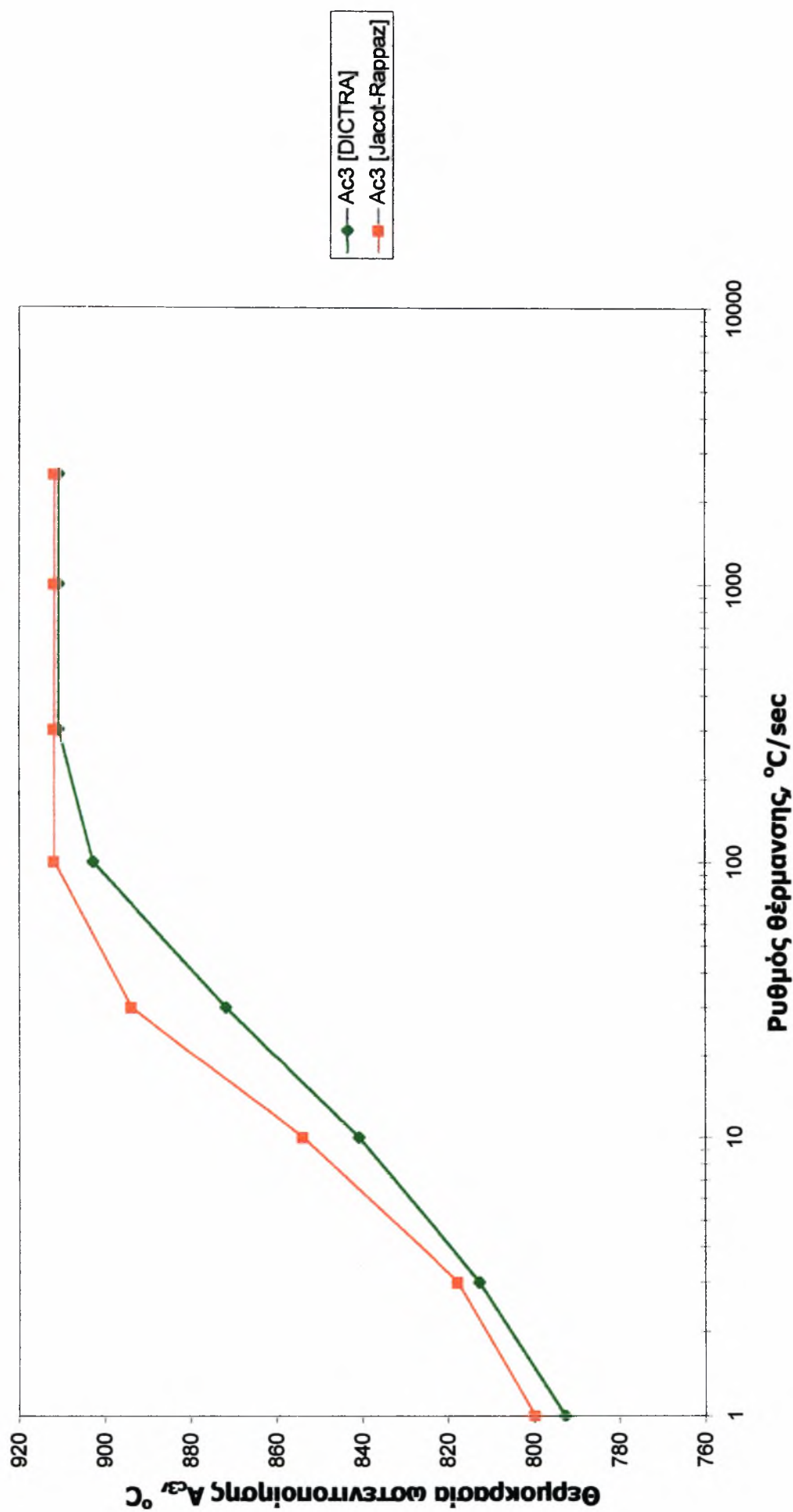


Διάγραμμα 4.5: Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης για διάφορους ρυθμούς θέρμανσης και για L=10μm



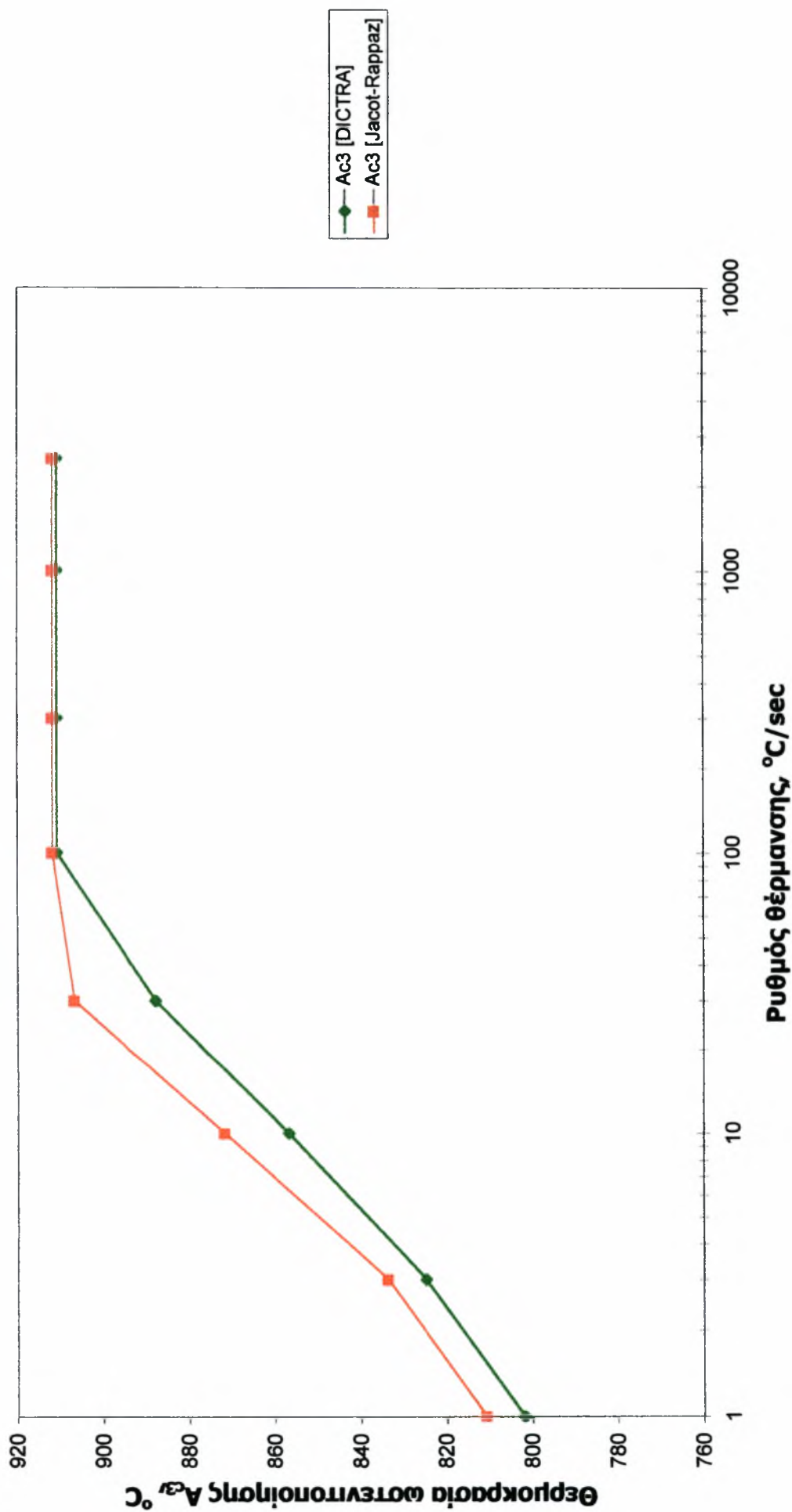
Διάγραμμα 4.6: Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης για διάφορους ρυθμούς θέρμανσης και για L=12μm

L=15 μm



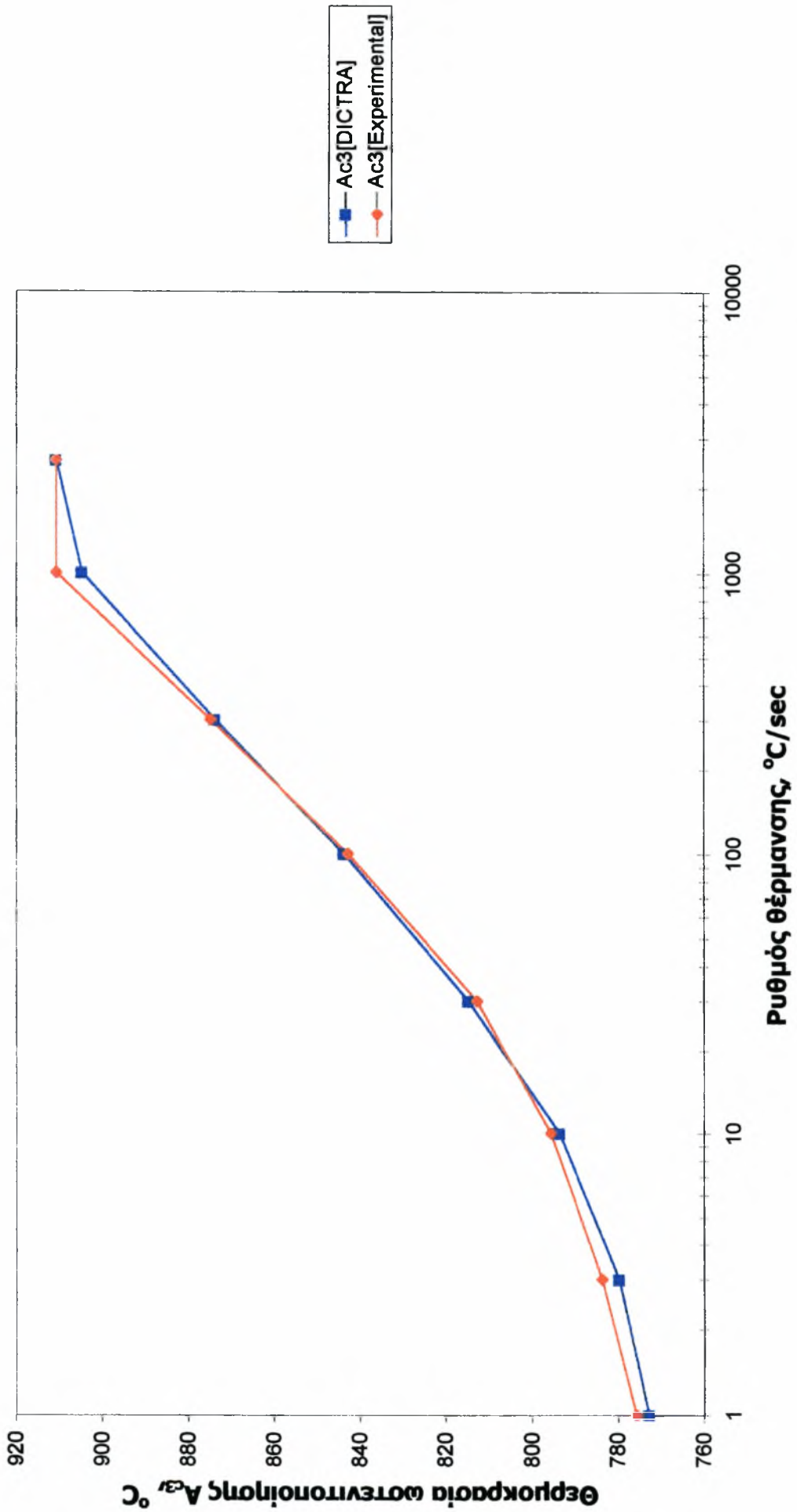
Διάγραμμα 4.7: Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης για διάφορους ρυθμούς θέρμανσης και για L=15μm

L=20 μm



Διάγραμμα 4.8: Θερμοκρασία ωστενιτοποίησης για διάφορους ρυθμούς θέρμανσης και για L=20μm

L=5μm



Διάγραμμα 4.9: Σύγκριση προσομοίωσης του Dictra με πειραματικά αποτελέσματα πάνω στη θερμοκρασία ωστενιτοποίησης

Συνεχίζοντας την ανάλυση, για κάθε συντελεστή A_1 , A_2 , H_0 και p έγινε η ίδια επεξεργασία εύρεσης μίας συνάρτησης που να τους εκφράζει σε σχέση με το μήκος L . Από τα *διαγράμματα 4.17* έως *4.20* φαίνεται ποια συνάρτηση ακολουθούν περισσότερο οι τιμές των συντελεστών σε σχέση με τα μήκη L . Έτσι, από το *διάγραμμα 4.17* ο συντελεστής A_1 μπορεί να θεωρηθεί ότι ακολουθεί μία γραμμική συνάρτηση σύμφωνα με τη σχέση:

$$A_1 = \alpha_1 + b_1 L \quad (4.11)$$

Από την άλλη, ο συντελεστής A_2 ακολουθεί μία συνάρτηση η οποία ονομάζεται αλλομετρική και εκφράζεται σύμφωνα με τη σχέση:

$$A_2 = \alpha_2 L^{b_2} \quad (4.12)$$

Ομοίως, ο συντελεστής H_0 εμφανίζει αλλομετρική μορφή σύμφωνα με τη σχέση:

$$H_0 = \alpha_3 L^{b_3} \quad (4.13)$$

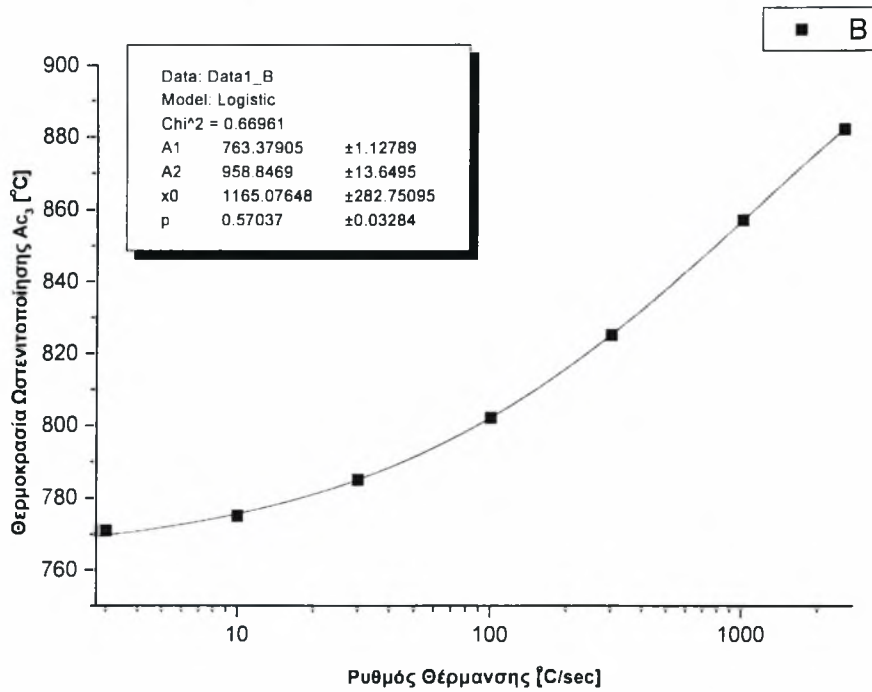
Ενώ, ο συντελεστής p προσεγγίζεται περισσότερο από μία γραμμική σχέση η οποία εκφράζεται:

$$p = \alpha_4 + b_4 L \quad (4.15)$$

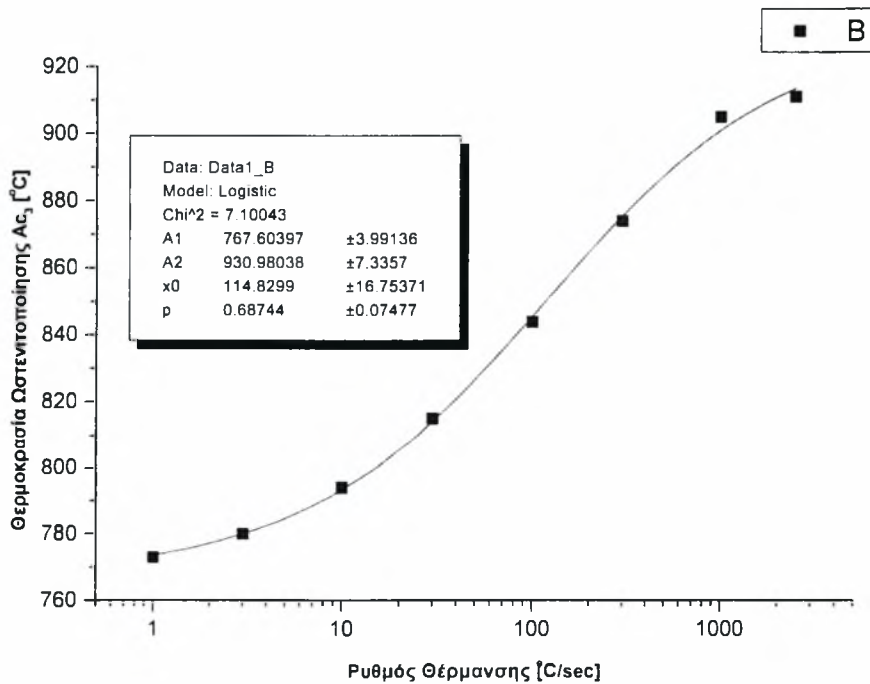
Επομένως, αντικαθιστώντας τις εξισώσεις (4.11), (4.12), (4.13) και (4.14) στην εξίσωση (4.10) υπολογίζεται η παρακάτω σχέση, η οποία εκφράζει την θερμοκρασία A_{c3} σε σχέση με το ρυθμό θέρμανσης H και το μήκος L :

$$A_{c3} = \frac{\alpha_1 + b_1 L - \alpha_2 L^{b_2}}{1 + \left(\frac{H}{\alpha_3 L^{b_3}} \right)^{(\alpha_4 + b_4 L)}} + \alpha_2 L^{b_2} \quad (4.16)$$

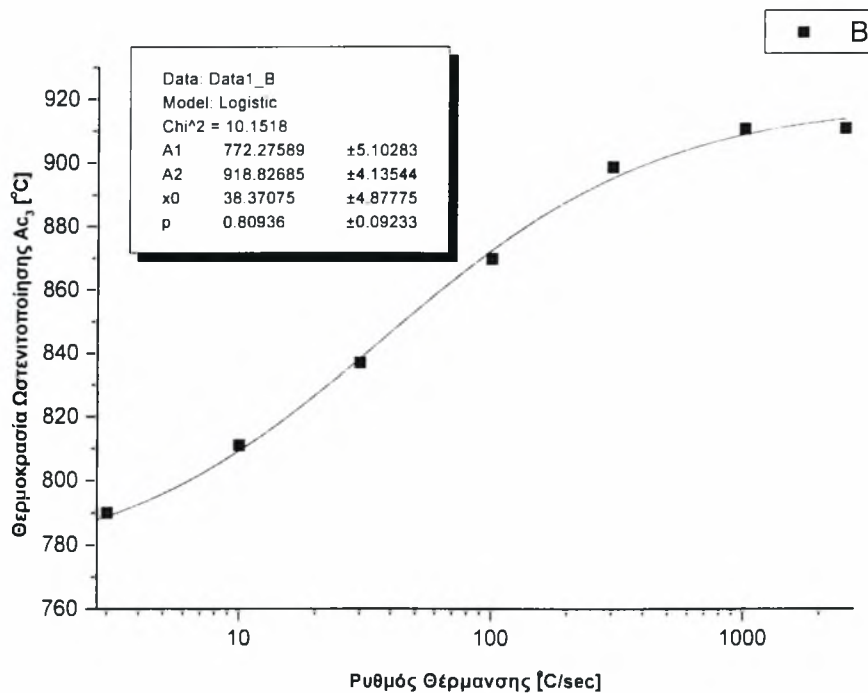
Τέλος, στα *διαγράμματα 4.21-4.26* παρουσιάζεται ένα μικρό δείγμα διαγραμμάτων τα οποία μπορούν να σχεδιαστούν από το DICTRA μετά το τέλος κάθε προσομοίωσης. Τα παρόντα διαγράμματα αφορούν συνολικό μέγεθος περιοχής $L=2e-6m$ και για ρυθμούς θέρμανσης 10, 100 και 1000 K/sec. Συγκεκριμένα, στα *διαγράμματα 4.21-4.23* φαίνεται το ποσοστό του άνθρακα του ωστενίτη για τρεις χρόνους και το πώς κινείται η διεπιφάνεια. Παρομοίως, στα *διαγράμματα 4.24-4.26* σχεδιάστηκε η ταχύτητα της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο. Είναι φανερό ότι η ταχύτητα αυξάνεται απότομα καθώς αυξάνεται και ο ρυθμός θέρμανσης ενώ κάθε φορά πέφτει απότομα μετά το τέλος της προσομοίωσης.



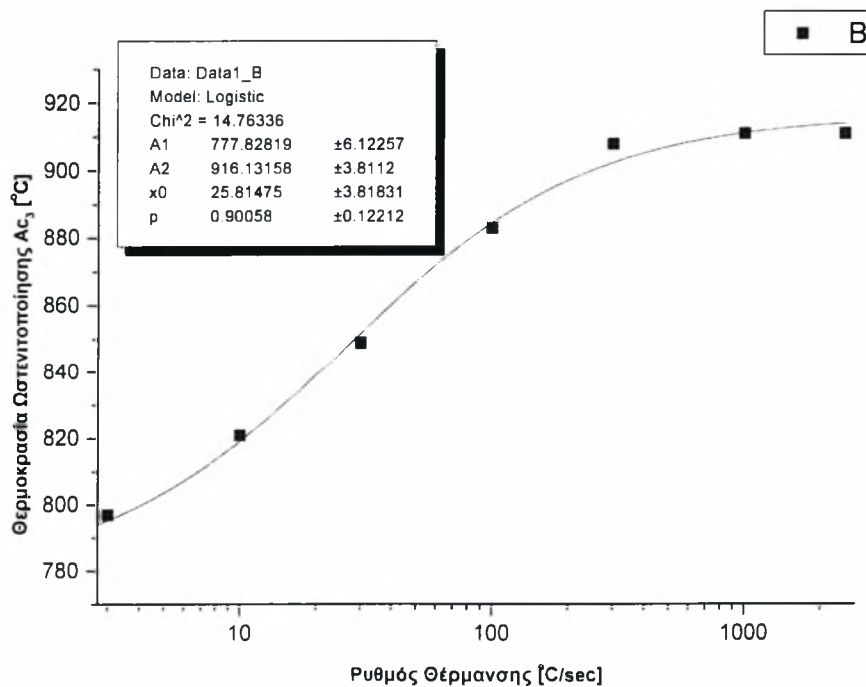
Διάγραμμα 4.10: Σύγκριση των αποτελεσμάτων με μία λογιστική συνάρτηση για L=2μm.



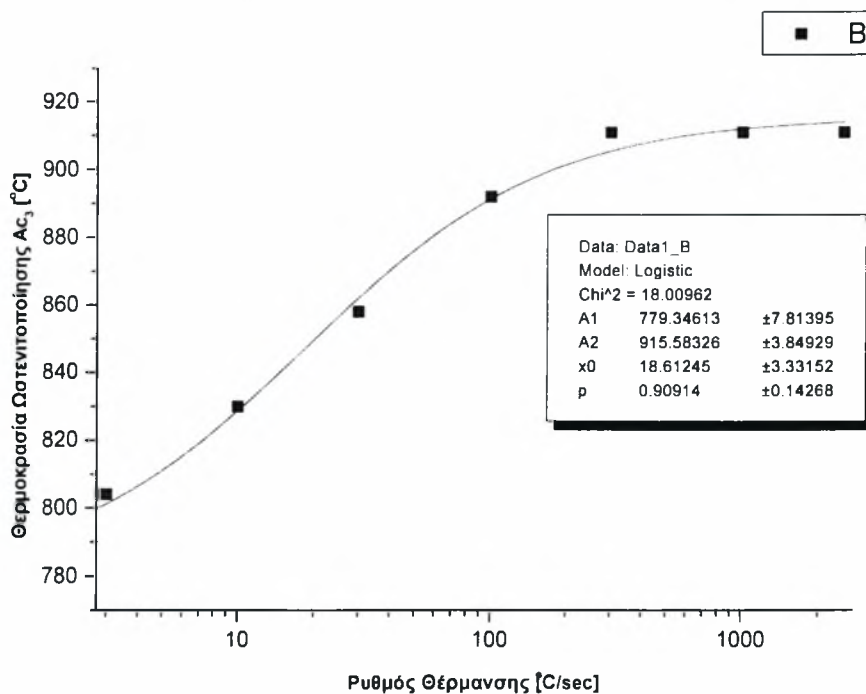
Διάγραμμα 4.11: Σύγκριση των αποτελεσμάτων με μία λογιστική συνάρτηση για L=5μm.



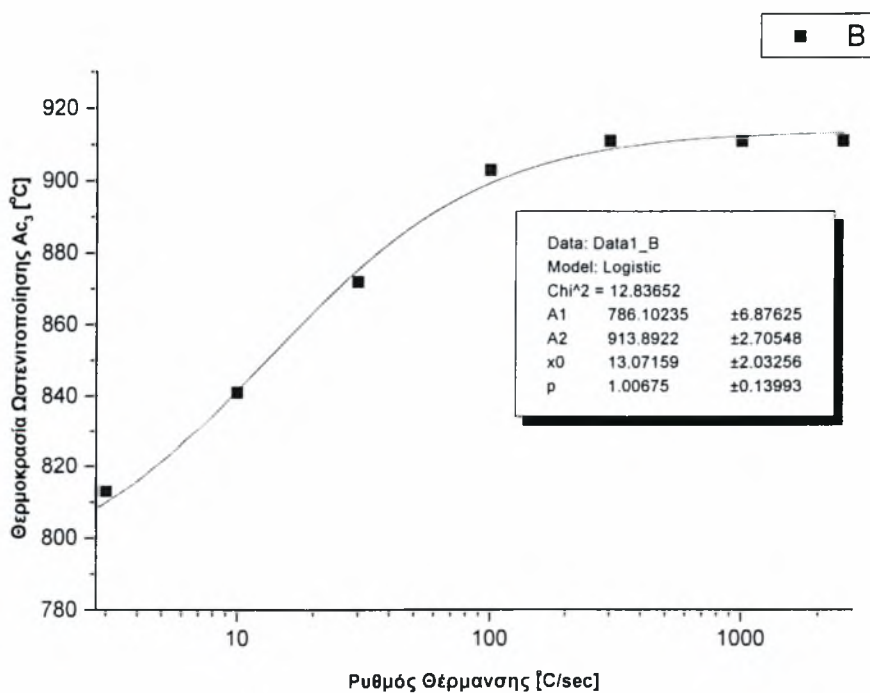
Διάγραμμα 4.12: Σύγκριση των αποτελεσμάτων με μία λογιστική συνάρτηση για L=8μm.



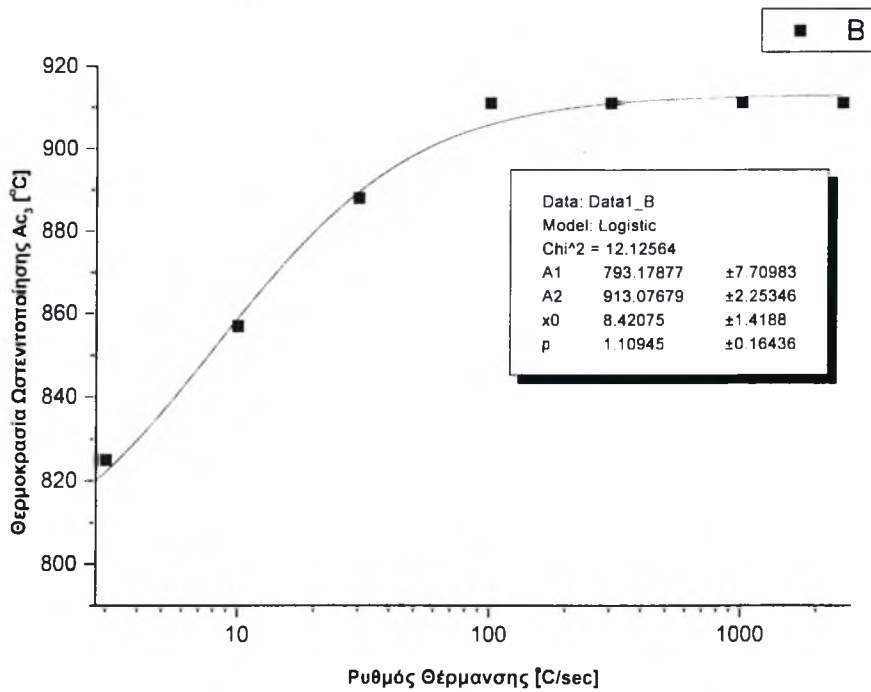
Διάγραμμα 4.13: Σύγκριση των αποτελεσμάτων με μία λογιστική συνάρτηση για L=10μm.



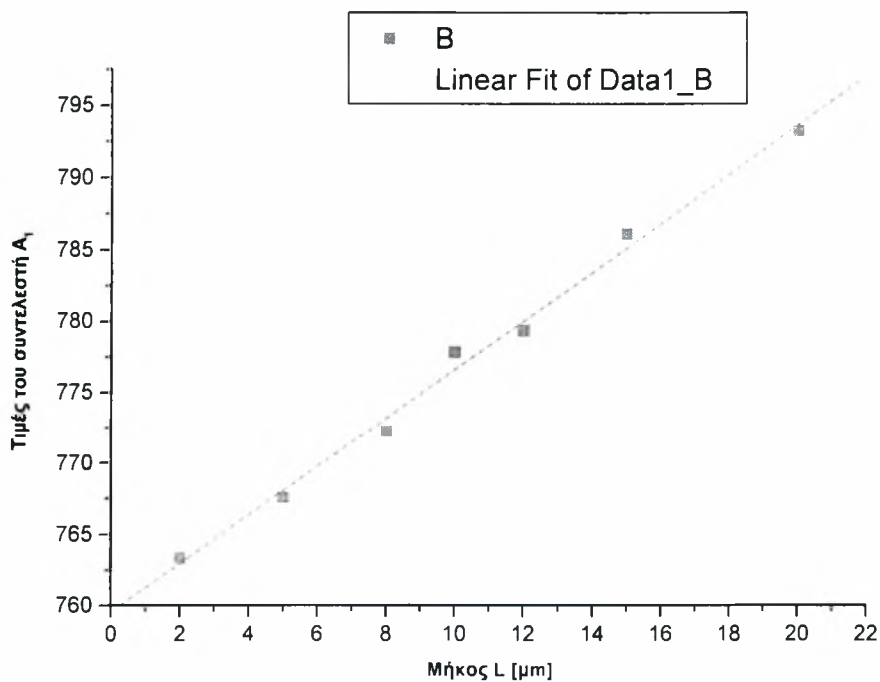
Διάγραμμα 4.14: Σύγκριση των αποτελεσμάτων με μία λογιστική συνάρτηση για L=12μm.



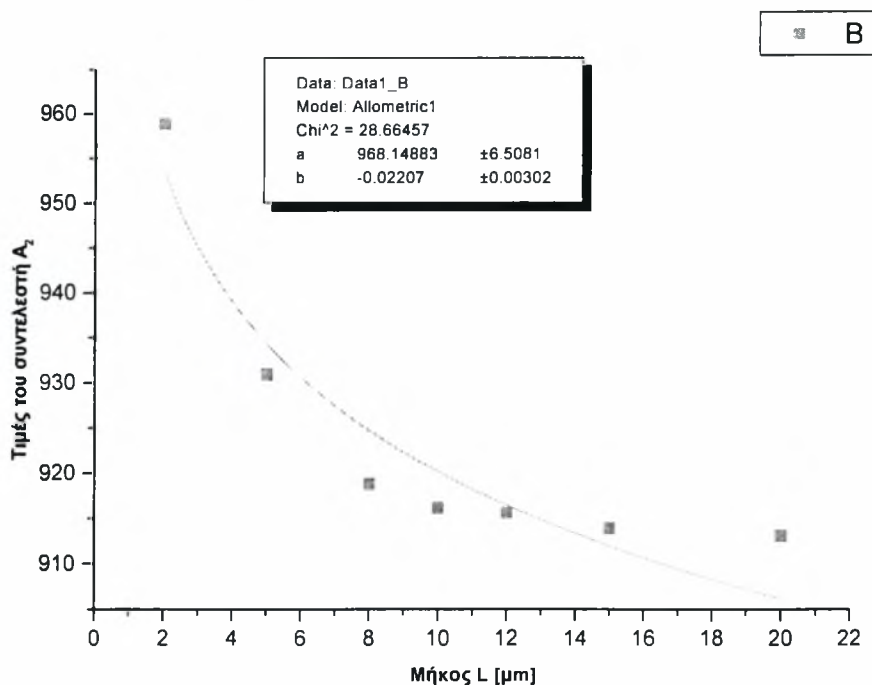
Διάγραμμα 4.15: Σύγκριση των αποτελεσμάτων με μία λογιστική συνάρτηση για L=15μm.



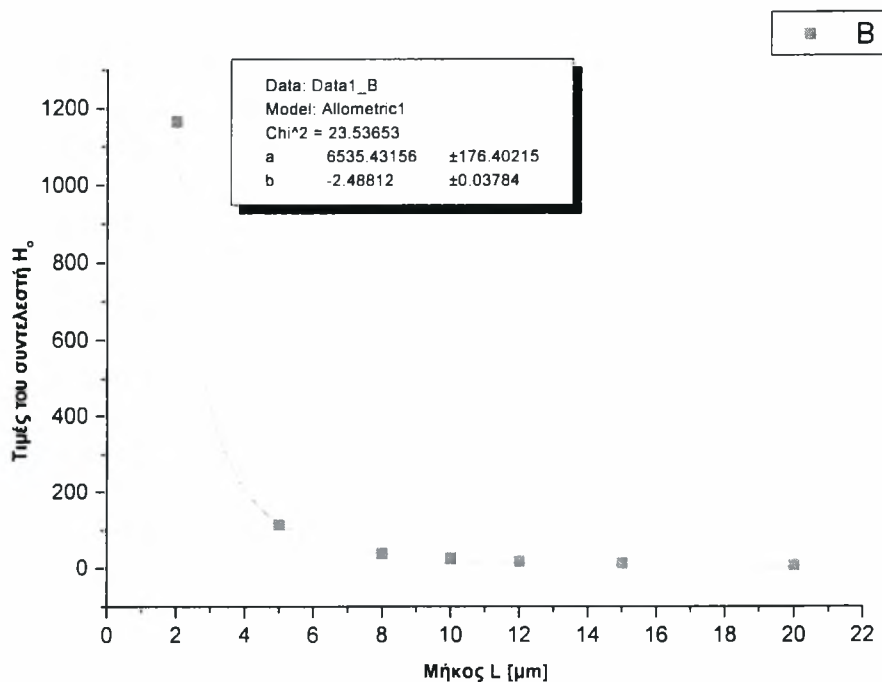
Διάγραμμα 4.16: Σύγκριση των αποτελεσμάτων με μία λογιστική συνάρτηση για L=20μm.



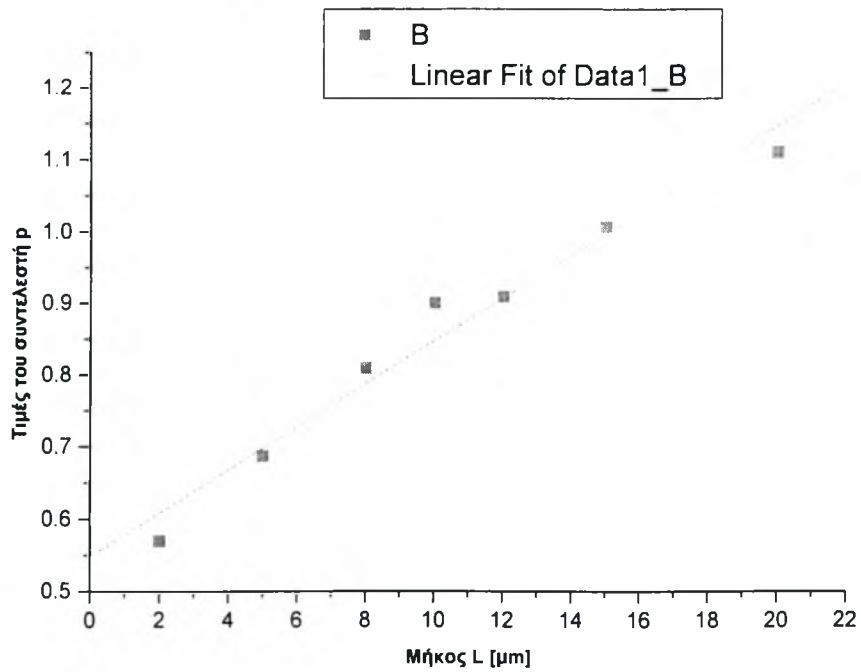
Διάγραμμα 4.17: Σύγκριση των αποτελεσμάτων του συντελεστή A₁ με μία γραμμική συνάρτηση.



Διάγραμμα 4.18: Σύγκριση των αποτελεσμάτων του συντελεστή A₂ με μία αλλομετρική συνάρτηση.



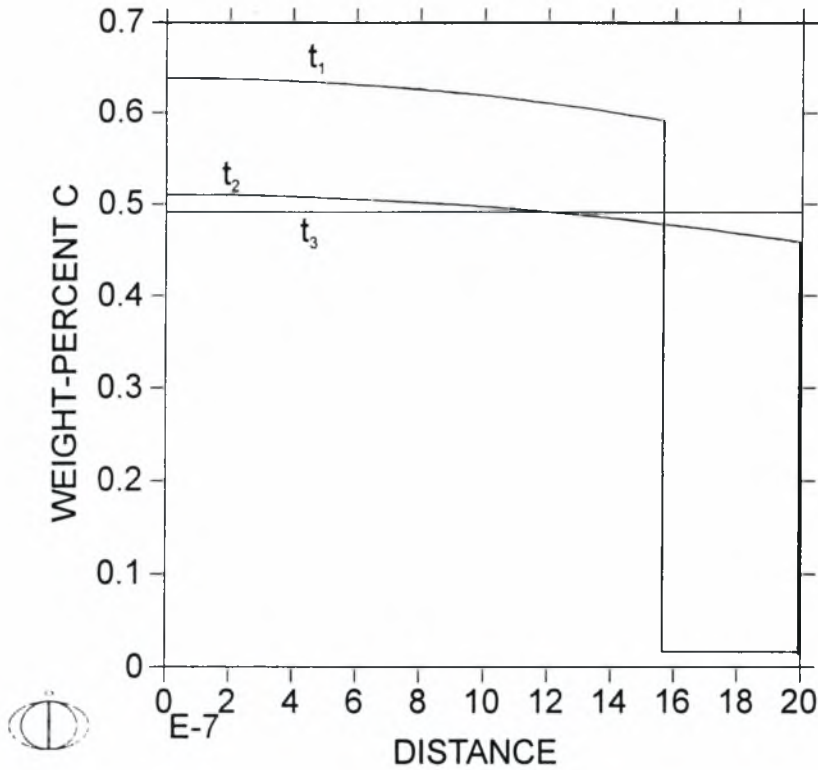
Διάγραμμα 4.19: Σύγκριση των αποτελεσμάτων του συντελεστή H₀ με μία αλλομετρική συνάρτηση.



Διάγραμμα 4.20: Σύγκριση των αποτελεσμάτων του συντελεστή ρ με μία γραμμική συνάρτηση.

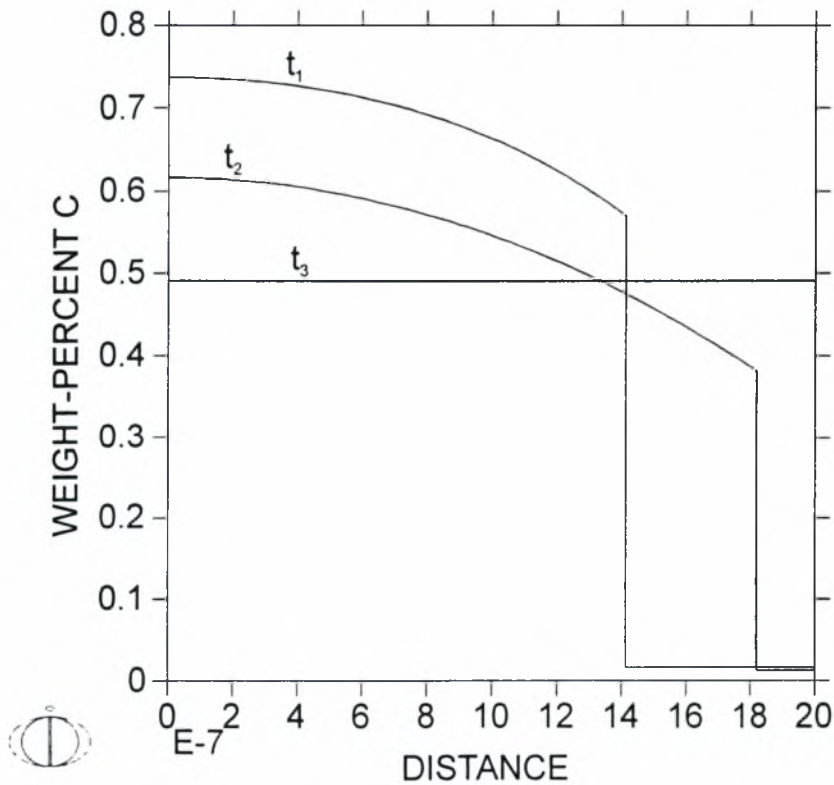


TIME = $t_1=2.5217535$, $t_2=4.8640337$, $t_3=17.410923$ [sec]



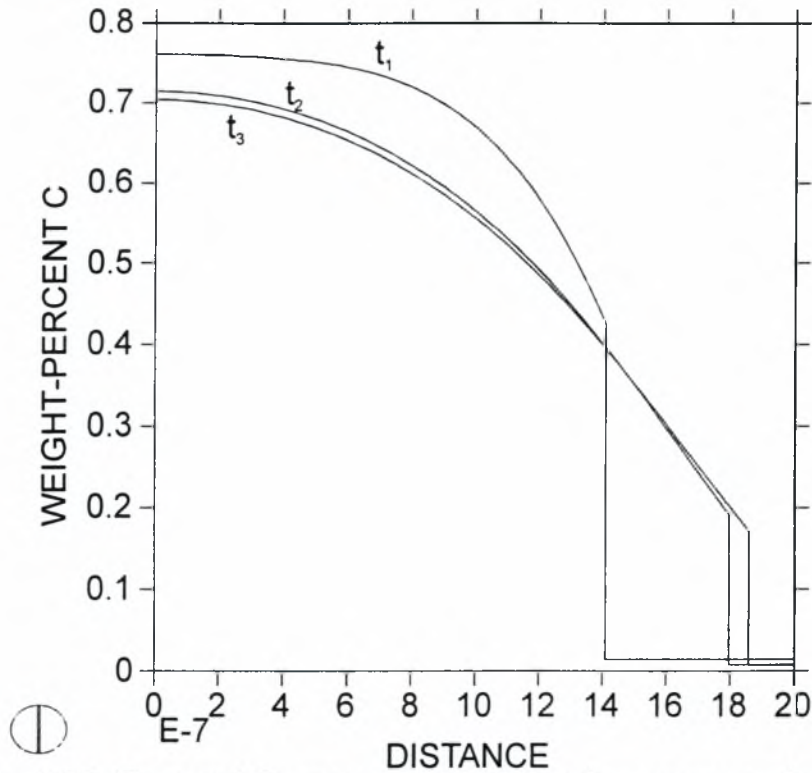
Διάγραμμα 4.21: Ποσοστό C στον ωστενίτη σε σχέση με την απόσταση της διεπιφάνειας για διάφορους χρόνους και για ρυθμό θέρμανσης 10°K/sec

TIME = $t_1=0.2863991$, $t_2=0.64271909$, $t_3=1.7542644$ [sec]



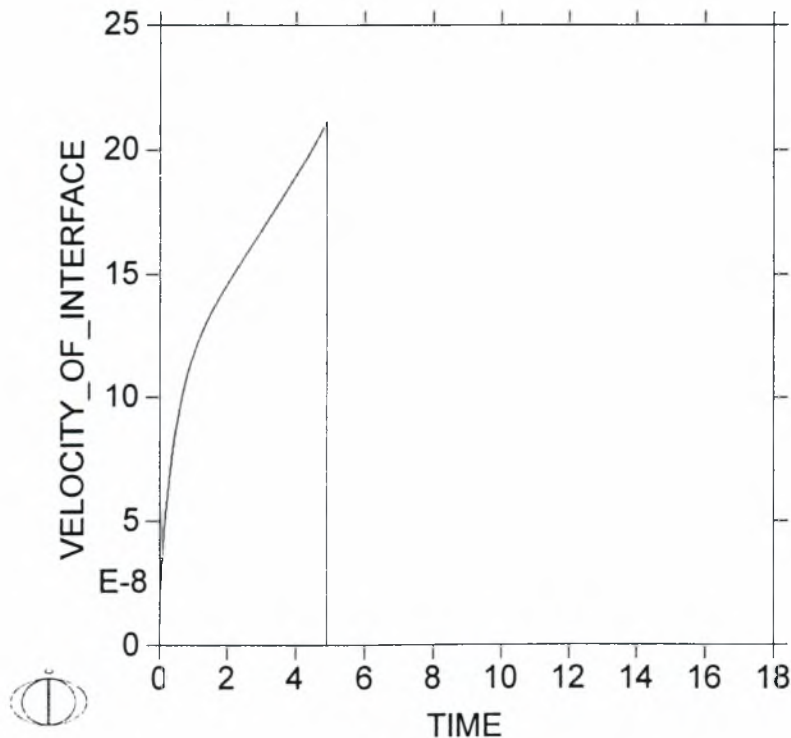
Διάγραμμα 4.22: Ποσοστό C στον ωστενίτη σε σχέση με την απόσταση της διεπιφάνειας για διάφορους χρόνους και για ρυθμό θέρμανσης 100°K/sec

TIME = $t_1=0.055436701$, $t_2=0.1119763$, $t_3=0.11811164$ [sec]



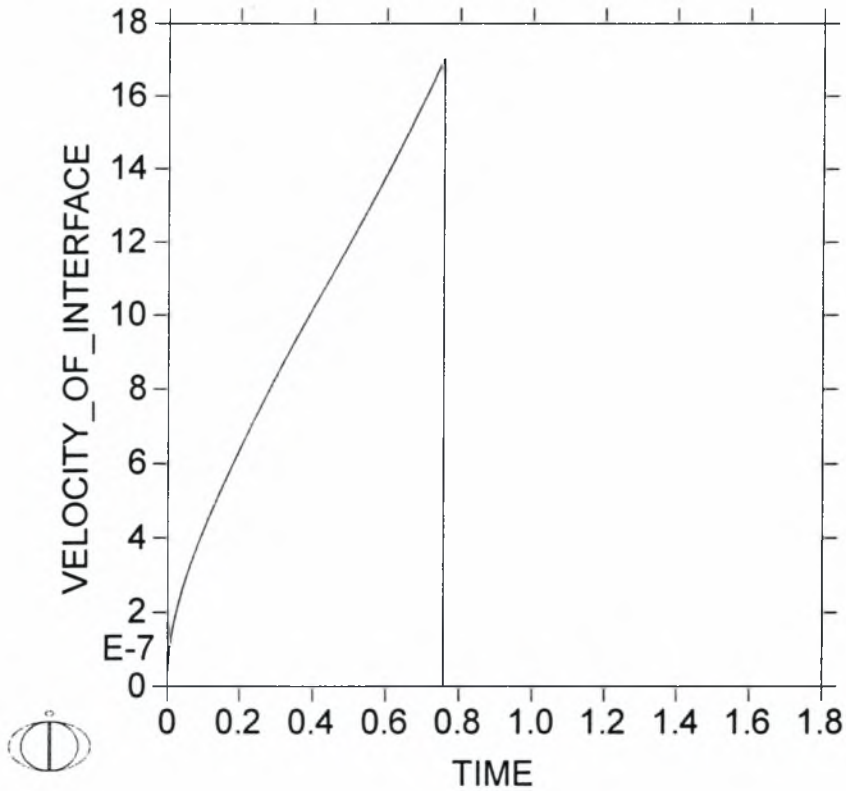
Διάγραμμα 4.23: Ποσοστό C στον ωστενίτη σε σχέση με την απόσταση της διεπιφάνειας για διάφορους χρόνους και για ρυθμό θέρμανσης 1000°K/sec

UPPER INTERFACE OF REGION "AUSTENITE#1"



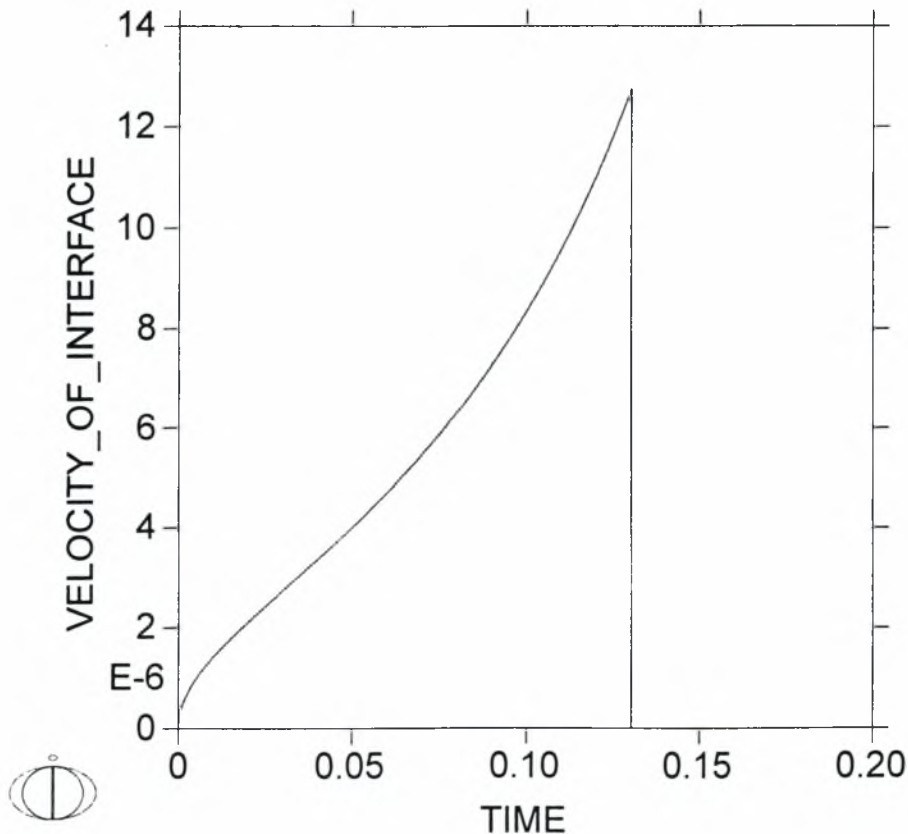
Διάγραμμα 4.24: Ταχύτητα της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και για ρυθμό θέρμανσης 10°K/sec

UPPER INTERFACE OF REGION "AUSTENITE#1"



Διάγραμμα 4.25: Ταχύτητα της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και για ρυθμό θέρμανσης 100°K/sec

UPPER INTERFACE OF REGION "AUSTENITE#1"



Διάγραμμα 4.26: Ταχύτητα της διεπιφάνειας σε σχέση με το χρόνο και για ρυθμό θέρμανσης 1000°K/sec

5. ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΔΙΑΛΥΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΠΕΡΙΤΗ ΚΑΤΑ ΤΗ ΘΕΡΜΑΝΣΗ ΚΑΙ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ A_{C1} .

5.1 ΚΡΙΣΙΜΕΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΕΣ

Τα σύνορα μεταξύ των περιοχών των φάσεων του διαγράμματος φάσεων Fe-C όπως φαίνονται στο *Σχήμα 5.1* προσδιορίζουν τις θερμοκρασίες για τους διάφορους μετασχηματισμούς φάσεων που μπορούν να συμβούν σε ένα κράμα Fe-C. Για παράδειγμα, εάν ένα κράμα Fe-C θερμανθεί από τη θερμοκρασία δωματίου με πολύ αργό ρυθμό, μέρος του φερρίτη και όλος ο σεμεντίτης θα μετασχηματιστούν σε ωστενίτη στους 727°C, ενώ στους 860°C και η τελευταία περιοχή του φερρίτη θα μετασχηματιστεί σε ωστενίτη.

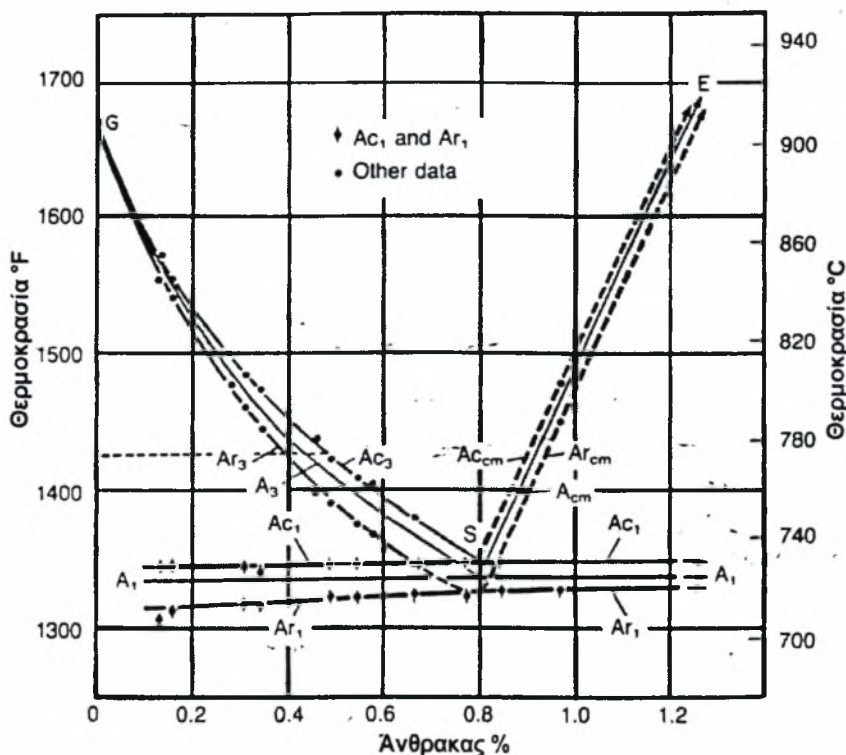
Οι θερμοκρασίες μετασχηματισμού συχνά αναφέρονται σαν κρίσιμες θερμοκρασίες και παρατηρούνται μετρώντας τις αλλαγές στην προσφερόμενη θερμότητα ή στον όγκο καθώς τα δοκίμια ψύχονται ή θερμαίνονται. Κατά τη θέρμανση, απορροφάται θερμότητα και στο δοκίμιο πραγματοποιείται συστολή καθώς ο φερρίτης και σεμεντίτης αντικαθίστανται από τον ωστενίτη. Κατά την ψύξη, απελευθερώνεται θερμότητα και το δοκίμιο επιμηκύνεται.

Υπάρχουν τρεις κρίσιμες θερμοκρασίες που παρουσιάζουν ενδιαφέρον κατά τη θέρμανση των χάλυβων:

1. **A_1** : Αντιστοιχεί στα όρια ανάμεσα στην περιοχή φερρίτη – σεμεντίτη και στις περιοχές ωστενίτη και φερρίτη ή ωστενίτη και σεμεντίτη.
2. **A_3** : Αντιστοιχεί στα όρια των περιοχών ανάμεσα στον φερρίτη – ωστενίτη και στον ωστενίτη.
3. **A_{cm}** : Αντιστοιχεί ανάμεσα στα όρια των περιοχών σεμεντίτη – ωστενίτη και στον ωστενίτη.

Αυτές οι θερμοκρασίες υποτίθεται ότι ισχύουν σε συνθήκες ισορροπίας-αυτό σημαίνει ότι διατηρούνται πολύ αργοί ρυθμοί θέρμανσης ή ψύξης.

Οι μετασχηματισμοί που συμβαίνουν στις θερμοκρασίες **A_1** , **A_3** και **A_{cm}** ελέγχονται από τη διάχυση. Έτσι, οι κρίσιμες θερμοκρασίες είναι ευαίσθητες στη σύσταση και στο ρυθμό θέρμανσης ή ψύξης. Αύξηση του ρυθμού θέρμανσης επιτρέπει λιγότερο χρόνο για διάχυση και αυτό οδηγεί σε αύξηση των κρίσιμων θερμοκρασιών πάνω από αυτές που συνδέονται με την ισορροπία. Ομοίως, αύξηση του ρυθμού ψύξης οδηγεί σε χαμηλότερες κρίσιμες θερμοκρασίες. Σαν αποτέλεσμα της επίδρασης της θέρμανσης και της ψύξης, υπάρχουν δύο άλλοι ορισμοί των κρίσιμων θερμοκρασιών: Οι θερμοκρασίες που υπολογίζονται σύμφωνα με το ρυθμό θέρμανσης ονομάζονται A_{C1} , A_{C2} , $A_{C_{cm}}$, ενώ αυτές κατά την ψύξη A_{r1} , A_{r2} , $A_{r_{cm}}$. [7]



Σχήμα 5.1: Κρίσιμες Θερμοκρασίες ψύξης (A_r), θέρμανσης (A_c) και ισορροπίας (A) σε κράμματα Fe-C.

5.2 ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΤΟΥ ΡΥΘΜΟΥ ΘΕΡΜΑΝΣΗΣ ΣΤΗΝ ΑΥΞΗΣΗ ΤΗΣ A_{c1}

Σύμφωνα με τα πειραματικά δεδομένα τα οποία πάρθηκαν από την αναφορά των K.J.Albutt και S.Garber, για χάλυβα με σύσταση 0.086%C και για ευτηκτοειδή χάλυβα η θερμοκρασία A_{c1} αυξάνεται γραμμικά με το λογάριθμο του ρυθμού θέρμανσης για μέσους ρυθμούς θέρμανσης, π.χ. περίπου 100°C/s. Αυτή η συμπεριφορά δεν είναι ασυνήθιστη διότι η πυρήνωση είναι ένα χρονικά εξαρτώμενο φαινόμενο και τα κινητικά ενός τέτοιου φαινομένου βασίζονται συνήθως σε μερική λογαριθμική συνάρτηση.

Επιπλέον, στην αναφορά διαπιστώνεται ότι η αύξηση της θερμοκρασίας A_{c1} με τον ρυθμό θέρμανσης δεν εξαρτάται από την κατανομή του καρβιδίου και τον άνθρακα που περιέχεται. Αυτό είναι λογικό, επειδή η θερμοκρασία A_{c1} είναι απλώς η θερμοκρασία στην οποία ο πρώτος πυρήνας αρχίζει να αναπτύσσεται και είναι ανεξάρτητη από τον αριθμό των πυρήνων που σχηματίστηκαν και το ρυθμό με τον οποίο ο μετασχηματισμός προάγεται: συντελεστές τους οποίους αναμένονταν να επηρεάσουν τη δομή.

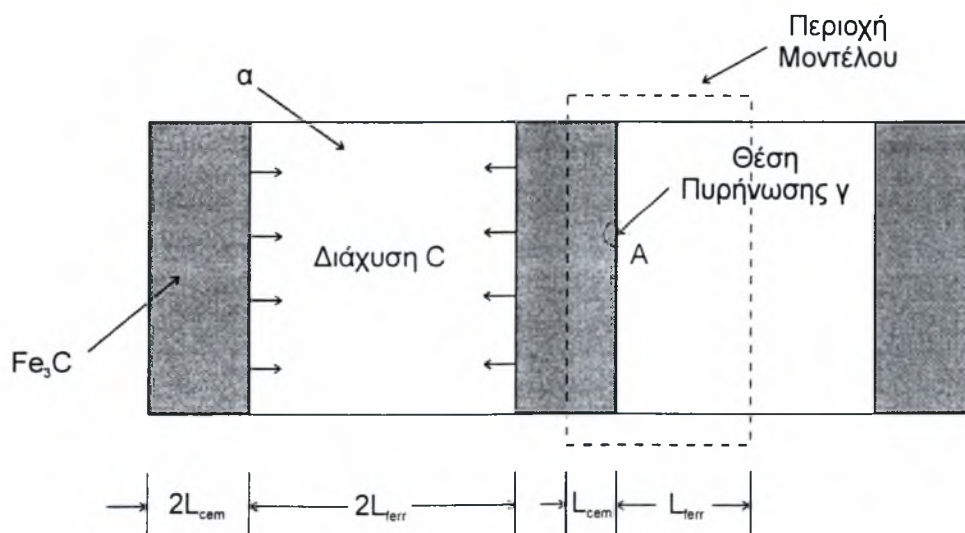
Σε όλες τις περιπτώσεις η προέκταση της θερμοκρασίας A_{c1} σε χαμηλότερους ρυθμούς θέρμανσης στον άξονα των θερμοκρασιών δίνει μία τιμή για τη θερμοκρασία A_{c1} παρόμοια με

την A_{e1} (τη θερμοκρασία έναρξης του μετασχηματισμού α-γ κάτω από συνθήκες ισορροπίας, π.χ. 723°C).[8]

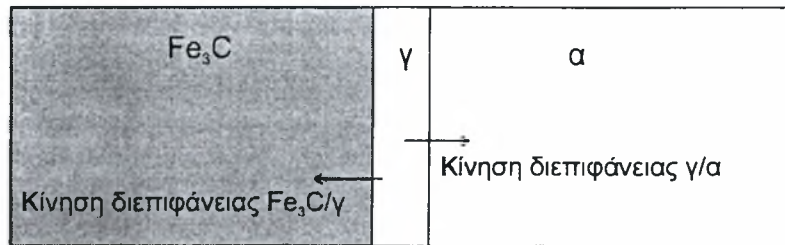
5.3 ΜΟΝΤΕΛΟ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΔΙΑΛΥΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΤΟΥ ΠΕΡΛΙΤΗ

Σύμφωνα με την κινητική του μετασχηματισμού, η διαλυτοποίηση του περλίτη πραγματοποιείται με τη διάχυση του άνθρακα από το σεμεντίτη προς το φερρίτη. Αυτό φαίνεται και στο Σχ. 5.2 όπου σε ένα τμήμα περλιτικού κόκκου διακρίνονται τα πλακίδια του σεμεντίτη (Fe_3C) να εναλλάσσονται με τα πλακίδια του φερρίτη (α).

Είναι γνωστό ότι οι ευνοϊκότερες θέσεις πυρήνωσης του ωστενίτη σε μια περλιτική μικροδομή είναι δύο: α) Τα όρια μεταξύ δύο διαφορετικών περλιτικών κόκκων και β) οι διεπιφάνειες Fe_3C/α μέσα σε ένα περλιτικό κόκκο. Από αυτές οι πρώτες είναι και οι δυναμικότερες, όμως παρουσιάζουν σημαντικές υπολογιστικές δυσκολίες κατά την προσομοίωση ανάπτυξης του ωστενίτη. Για το λόγο αυτό, στο μοντέλο που αναπτύχθηκε, έγινε η παραδοχή ότι ο ωστενίτης (γ) πυρηνώνεται μόνο στη διεπιφάνεια των πλακιδίων Fe_3C/α , σχηματίζοντας δύο νέες διεπιφάνειες, Fe_3C/α και γ/α , όπως περιγράφεται στο Σχ. 5.3. Ο ωστενίτης αναπτύσσεται ανάμεσα στις δύο διεπιφάνειες οι οποίες κινούνται προς τα αριστερά (μέσα στο Fe_3C) και προς τα δεξιά (μέσα στο α), αντίστοιχα. Από το Σχ. 5.3 είναι φανερό ότι το μοντέλο είναι μονοδιάστατο (1-D). Επιπλέον, επειδή το μοντέλο παρουσιάζει συμμετρία, είναι αρκετό να μελετηθεί η περιοχή που σημειώνεται με τις διακεκομμένες γραμμές, δηλαδή το μισό πλακίδιο του Fe_3C και το αντίστοιχο μισό πλακίδιο του α.



Σχήμα 5.2: Γεωμετρική απεικόνιση του μοντέλου για την μελέτη της διαλυτοποίησης του περλίτη.



Σχήμα 5.3: Γεωμετρική αναπαράσταση της λεπτομέρειας A που δείχνει τον τρόπο ανάπτυξης του ωστενίτη μέσα στον περλίτη.

Κατόπιν, πρέπει να υπολογιστούν τα ημι-εύρη των δύο περιοχών, L_{cem} και L_{ferr} . Με τη βοήθεια του Thermo-Calc υπολογίζονται τα κλάσματα όγκου του Fe_3C , φ_{cem} , και του α φ_{ferr} , που βρίσκονται μέσα στο περλίτη για περιεκτικότητα σε C, w_C του χάλυβα που εξετάζεται κάθε φορά. Όμως, η διεπιφάνεια μεταξύ των δύο φάσεων θεωρείται ότι έχει μοναδιαίο εμβαδόν και έτσι μπορεί να ισχύει η σχέση:

$$\frac{\varphi_{cem}}{\varphi_{ferr}} = \frac{L_{cem}}{L_{ferr}} \quad (5.1)$$

Αυτό σημαίνει ότι επιλέγοντας αυθαίρετα κάποια τιμή για το L_{cem} , ή μετρώντας το με κάποιο τρόπο (π.χ. ηλεκτρονική μικροσκοπία), αυτόματα μπορεί να καθοριστεί και το L_{ferr} .

Για τη χρησιμοποίηση του μοντέλου που περιγράφηκε παραπάνω, ήταν απαραίτητο να γίνουν κάποιες θεωρήσεις σχετικά με τον τρόπο που μεταβάλλεται η θερμοκρασία του υλικού κατά τη θέρμανση. Έτσι λοιπόν, η θερμοκρασία θεωρείται ότι αυξάνεται γραμμικά από την θερμοκρασία περιβάλλοντος, T_0 , μέχρι τη μέγιστη θερμοκρασία, T_{max} , με ρυθμό θέρμανσης H . Ο χρόνος κατά τον οποίο η θερμοκρασία γίνεται μέγιστη είναι t_p .

Η εξίσωση που περιγράφει την άνοδο της θερμοκρασίας δίνεται από τη σχέση:

$$T(t) = T_0 + H \cdot t \quad (5.2)$$

όπου H ο ρυθμός θέρμανσης σε K/sec

t ο χρόνος σε sec

Επίσης, ο χρόνος t_p δίδεται από τη σχέση:

$$t_p = \frac{T_{max} - T_0}{H} \quad (5.3)$$

Για την εκτέλεση των προσομοιώσεων καθορίστηκε σαν μέγιστη θερμοκρασία, μία θερμοκρασία πλήρους ωστενιτοποίησης $T_{max} = 1173,15K$ ($900^\circ C$). Σκοπός των προσομοιώσεων ήταν

ο καθορισμός του χρόνου διαλυτοποίησης t_d , της αντίστοιχης θερμοκρασίας διαλυτοποίησης A_{c1} και του ποσοστού άνθρακα στον ωστενίτη σε σχέση με το ρυθμό θέρμανσης. Οι υπολογισμοί έγιναν για ένα υποευτηκτοειδή χάλυβα με σύσταση Fe-0,45 κ.β% C και για πλάτη περιοχής σεμεντίτη $L_{cem}=0.005 \times 10^{-6} \text{ m}$ και $L_{cem}=0.0025 \times 10^{-6} \text{ m}$ καθώς επίσης και για ένα ευτηκτοειδή χάλυβα για τα ίδια πλάτη περιοχής σεμεντίτη. Οι διάφοροι ρυθμοί θέρμανσης για τους οποίους εκτελέστηκαν οι υπολογισμοί φαίνονται στους *Πίνακες 5.1, 5.2, 5.3, 5.4*.

Τέλος, θα πρέπει να σημειωθεί ότι στο DICTRA αρχικά εισάγονται οι δύο φάσεις, του σεμεντίτη και του φερρίτη. Ο ωστενίτης τοποθετείται ανάμεσά τους, αλλά σαν αδρανής (inactive) φάση, δηλαδή σαν μία φάση που αρχικά δεν υπάρχει. Αυτό γίνεται επειδή η αρχική θερμοκρασία είναι η θερμοκρασία δωματίου ($T_0=298.15\text{K}$) όπου ο ωστενίτης δεν είναι θερμοδυναμικά σταθερός.

Το DICTRA για κάθε αδρανή φάση που του ορίζεται χρειάζεται να γνωρίζει την ωθούσα δύναμη ΔG για το σχηματισμό ωστενίτη που αντιστοιχεί στη θερμοκρασία εμφάνισης των πρώτων πυρήνων του ωστενίτη, A_{e1} . Πάνω από αυτό το σημείο η αδρανής φάση μετατρέπεται σε δραστική (active), δηλαδή σε φάση που συμμετέχει κανονικά στο μετασχηματισμό.

5.4 ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΕΥΤΗΚΤΟΕΙΔΟΥΣ ΧΑΛΥΒΑ ΣΤΟ DICTRA ΜΕ ΣΚΟΠΟ ΤΟΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟ ΤΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ ΔΙΑΛΥΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΤΟΥ ΠΕΡΛΙΤΗ ΜΕ ΔΙΑΦΟΡΟΥΣ ΡΥΘΜΟΥΣ ΘΕΡΜΑΝΣΗΣ.

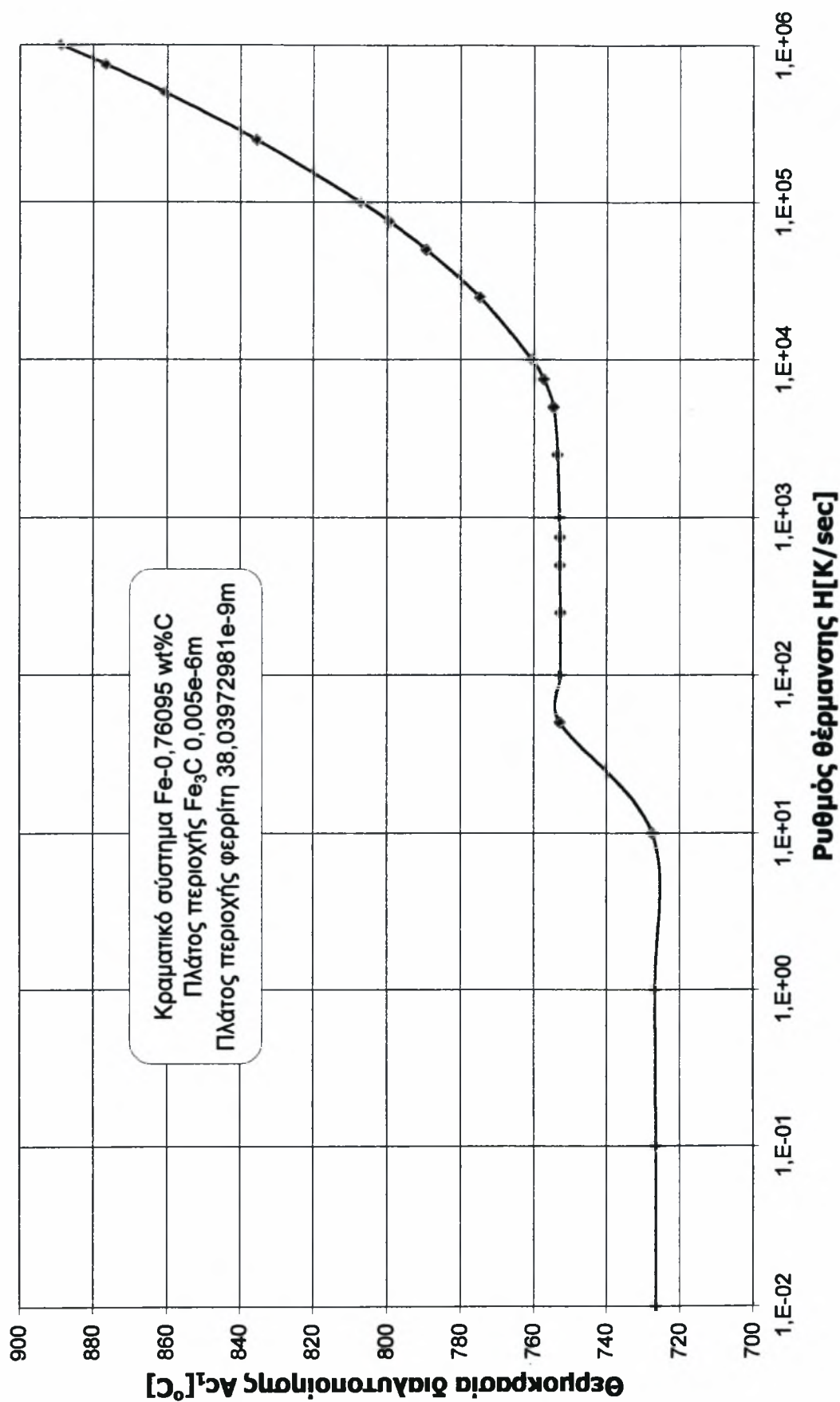
Από τα αποτελέσματα μελέτης ευτηκτοειδή χάλυβα 0,76095wt% C με πλάτος περιοχής Fe_3C : $0,005 \times 10^{-6} \text{ m}$ και πλάτος περιοχής φερρίτη: $38,03972981 \times 10^{-9} \text{ m}$ που κατασκευάστηκαν στο *διάγραμμα 5.1* παρατηρούνται οι εξής τρεις ζώνες:

Ζώνη I : Για ρυθμό θέρμανσης από 0,01 έως 10 K/sec φαίνεται ότι διατηρείται σταθερή θερμοκρασία διαλυτοποίησης στους 726°C . Αυτό συμβαίνει διότι γι' αυτούς τους ρυθμούς θέρμανσης θεωρείται ότι υπάρχουν συνθήκες ισορροπίας.

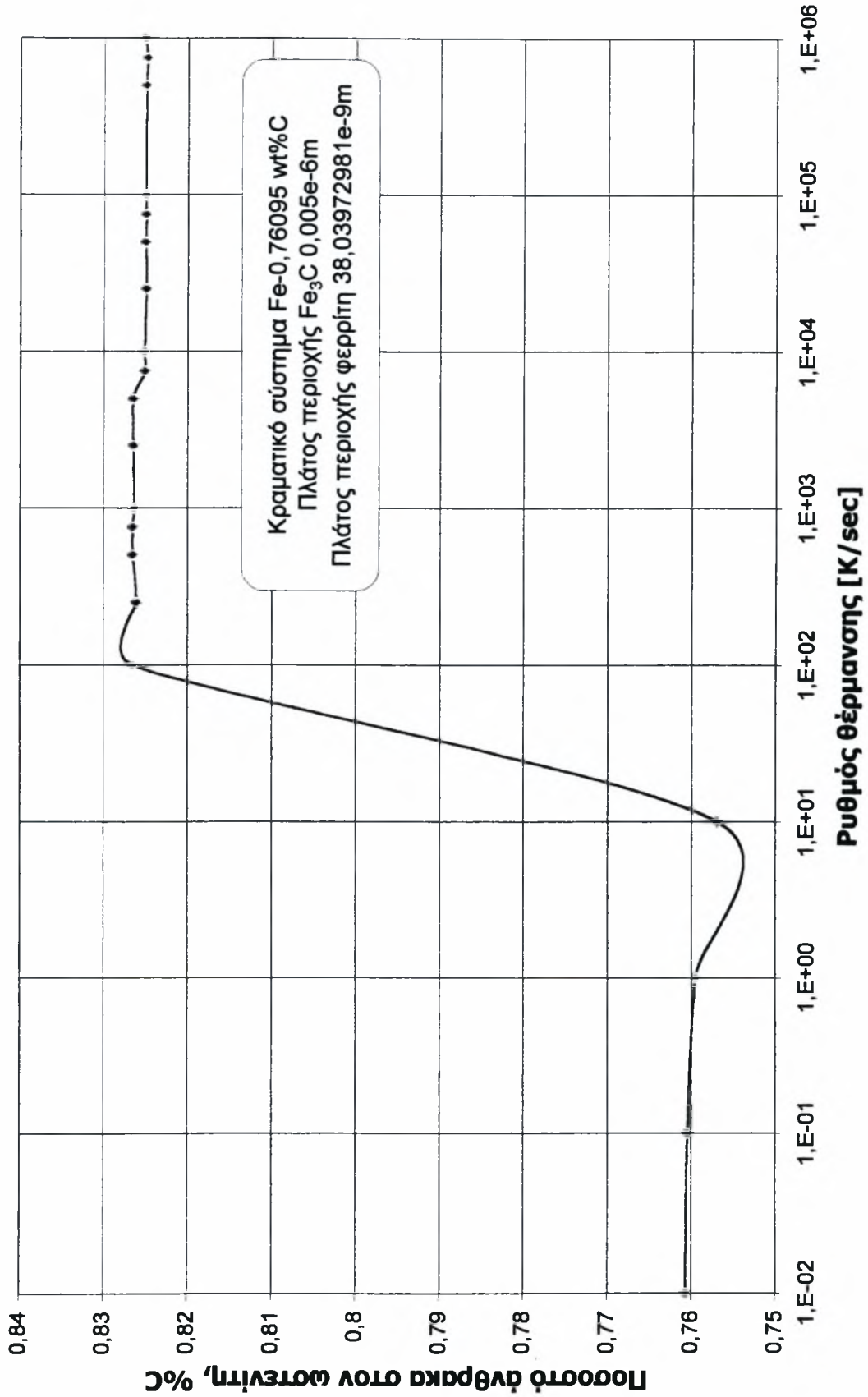
Ζώνη II : Για ρυθμό θέρμανσης 50 K/sec παρατηρείται ότι υπάρχει μία απότομη αύξηση της θερμοκρασίας στους 753°C και διατήρηση αυτής μέχρι τους 5000 K/sec. Αυτό συμβαίνει διότι η θερμοκρασία αυξάνεται γρήγορα και τα άτομα του άνθρακα δεν έχουν επαρκή χρόνο για να προσλάβουν τη θερμότητα και να διαχυθούν σε χαμηλές θερμοκρασίες. Έτσι, ο μετασχηματισμός ολοκληρώνεται αφού η θερμοκρασία στο σύστημα έχει αυξηθεί αρκετά.

Πίνακας 5.1: Αποτελέσματα προσομοίωσης ευτηκτοειδούς χάλυβα Fe-0,76095wt%C και πλάτος περιοχής φερρίτη και Fe₃C, 38,03972981e-9m και 0,005e-6m αντίστοιχα.

Ρυθμός θέρμανσης H[K/sec]	Χρόνος διαλυτοποίησης περλίτη t_d [sec]	Θερμοκρασία διαλυτοποίησης περλίτη A_{c1} [°C]	Ποσοστό άνθρακα στον ωστενίτη %C στον γ
0,01	7,01663203120E+04	726,663	0,76081
0,1	7,01723828120E+03	726,724	0,76052
1	7,01905029300E+02	726,905	0,75962
10	7,02589416500E+01	727,589	0,757006
50	1,45608310700E+01	753,041	
100	7,27960968020E+00	752,961	0,82656
250	2,91134500500E+00	752,836	0,82612
500	1,45621156690E+00	753,105	0,82661
750	9,70656454560E-01	752,992	0,82661
1000	7,28189766410E-01	753,189	0,82644
2500	2,91471481320E-01	753,678	0,82652
5000	1,45979344840E-01	754,896	0,8265
7500	9,76738631730E-02	757,554	0,82515
10000	7,35769197340E-02	760,769	0,82519
25000	2,99984589220E-02	774,961	0,82504
50000	1,52888130400E-02	789,44	0,82509
75000	1,03256534790E-02	799,424	0,825025
100000	7,82193336640E-03	807,193	0,825065
250000	3,24267242100E-03	835,668	
500000	1,67145172600E-03	860,726	0,82499
750000	1,13569269890E-03	876,769	0,82488
1000000	8,63900291730E-04	888,9	0,82516



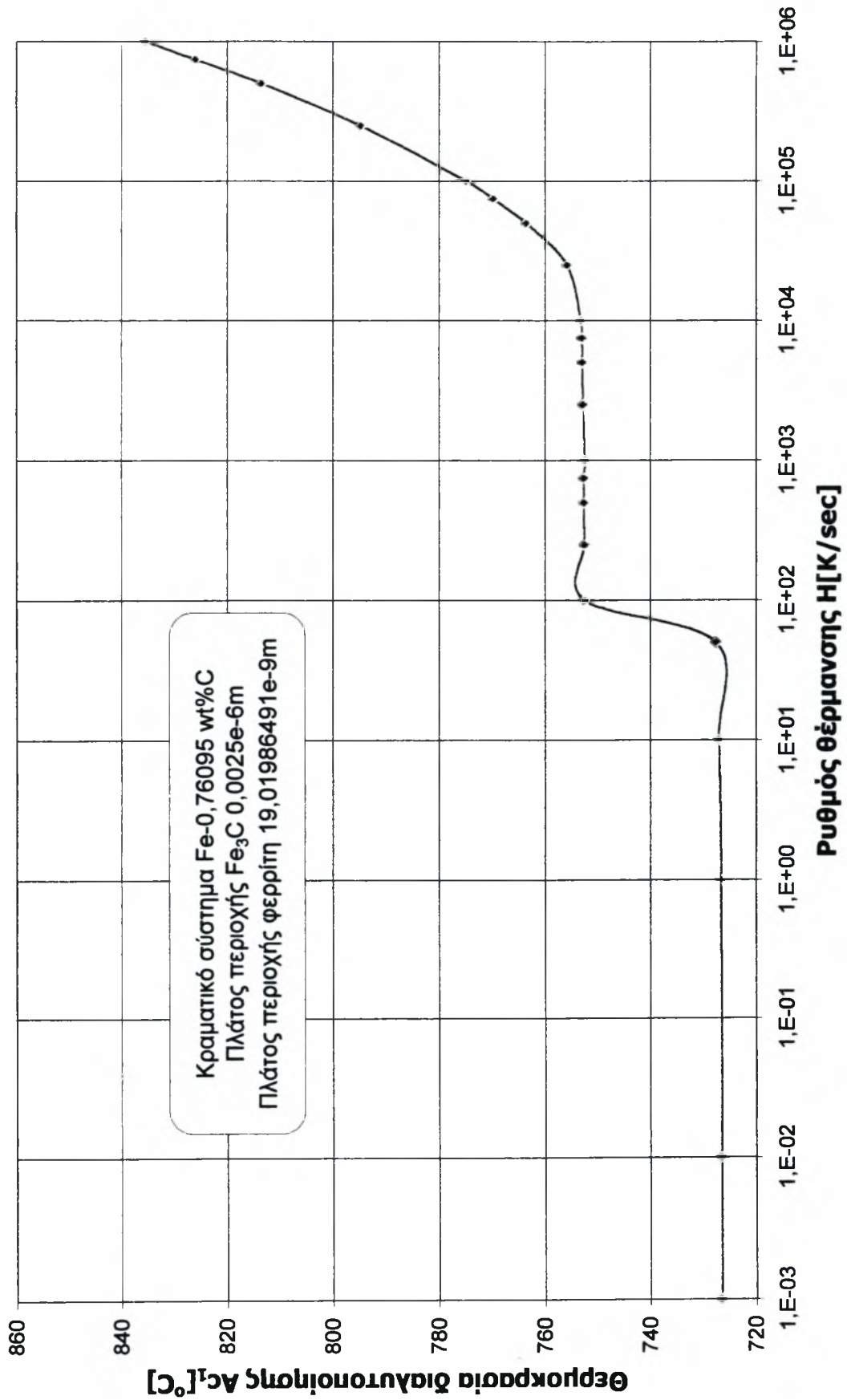
Διάγραμμα 5.1: Θερμοκρασία διαλυτοποίησης περλίτη για διάφορους ρυθμούς θέρμανσης



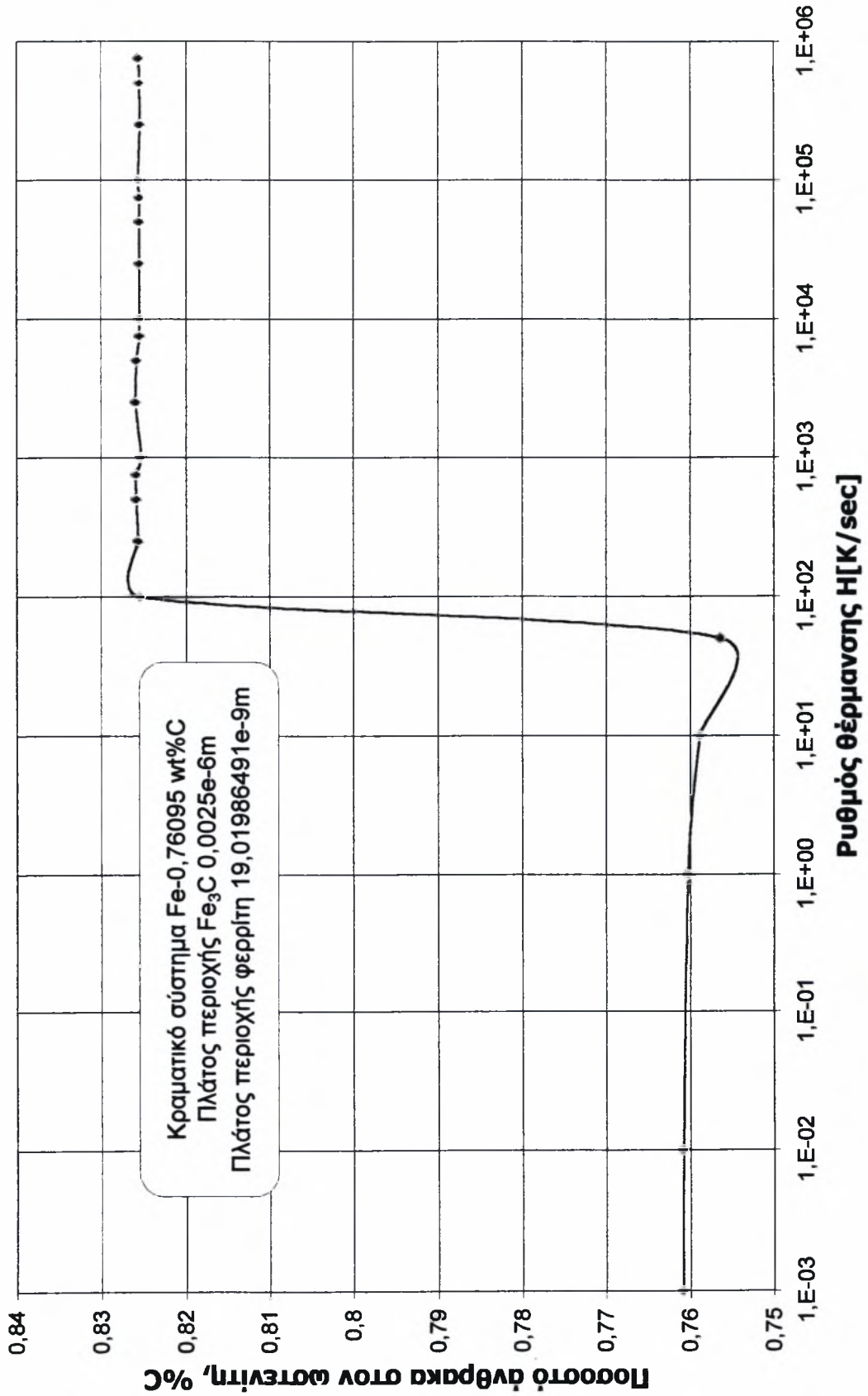
Διάγραμμα 5.2: Ποσοστό άνθρακα στον ωστενίτη σε σχέση με το ρυθμό θέρμανσης.

Πίνακας 5.2: Αποτελέσματα προσομοίωσης ευτηκτοειδούς χάλυβα Fe-0,76095wt%C και πλάτος περιοχής φερρίτη και Fe₃C, 19,01986491e-9m και 0,0025e-6m αντίστοιχα.

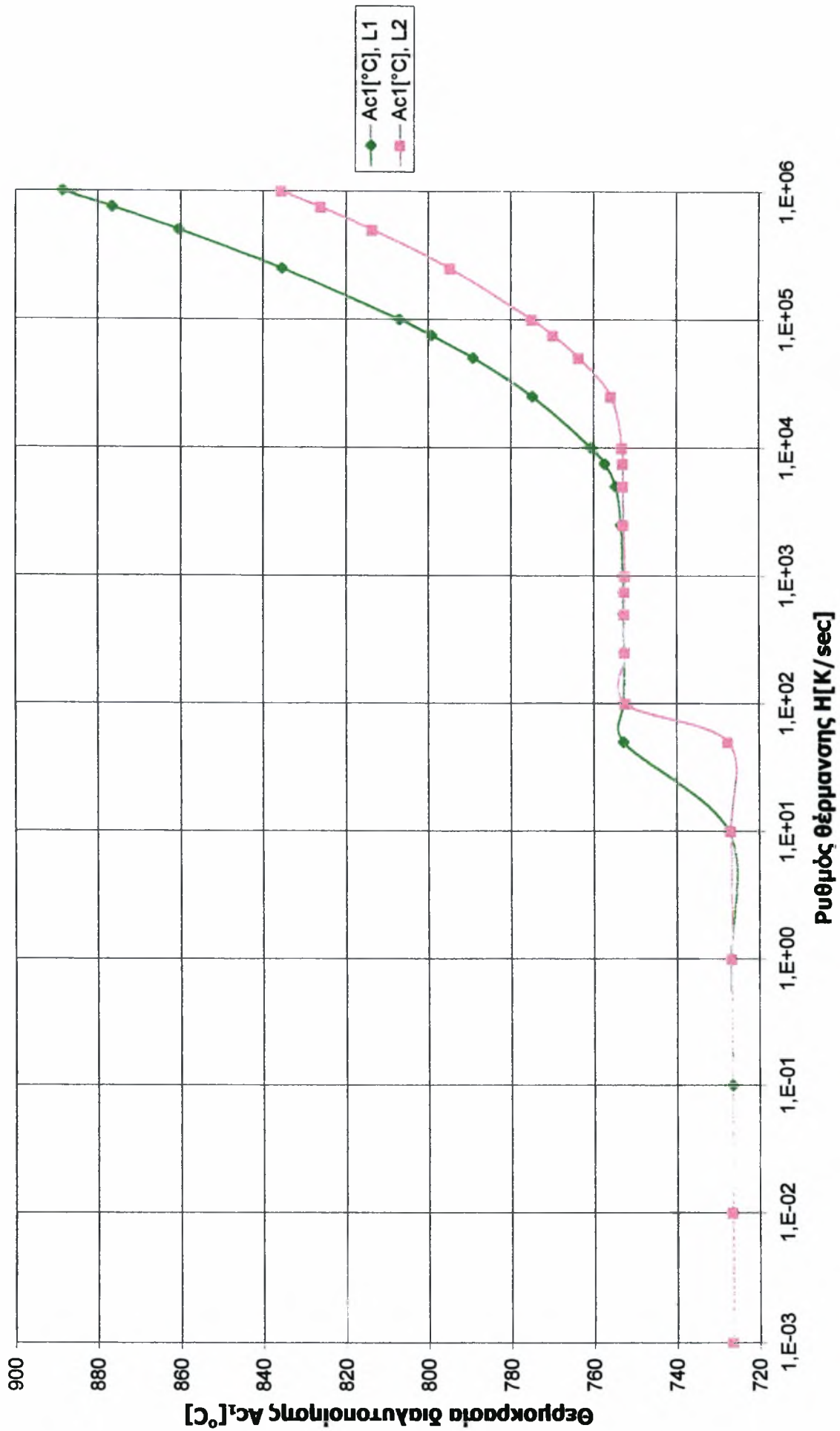
Ρυθμός θέρμανσης H[K/sec]	Χρόνος διαλυτοποίησης περλίτη t _d [sec]	Θερμοκρασία διαλυτοποίησης περλίτη A _{c1} [°C]	Ποσοστό άνθρακα στον ωστενίτη %C στον γ
0,001	7,0164025000E+05	726,640	0,76092
0,01	7,0164953125E+04	726,649	0,76087
1	7,0176971436E+02	726,769	0,76029
10	7,0208946228E+01	727,089	0,75887
50	1,4054365158E+01	727,718	0,75644
100	7,2752370834E+00	752,523	0,82545
250	2,9105482101E+00	752,637	0,8257
500	1,4555312390E+00	752,765	0,82598
750	9,7037869600E-01	752,784	0,82598
1000	7,2757953400E-01	752,579	0,82542
2500	2,9117053747E-01	752,926	0,82604
5000	1,4561215043E-01	753,060	0,825908
7500	9,7082197666E-02	753,116	0,82559
10000	7,2830900550E-02	753,309	0,82558
25000	2,9240870848E-02	756,022	0,8256
50000	1,4773573726E-02	763,678	0,82563
75000	9,9326455966E-03	769,948	0,82558
100000	7,5002233498E-03	775,022	0,82571
250000	3,0793678015E-03	794,842	0,825528
500000	1,5773194609E-03	813,659	0,8256
750000	1,0682382854E-03	826,178	0,82565
1000000	8,1072299508E-04	835,722	



Διάγραμμα 5.3: Θερμοκρασία διαλυτοποίησης περλίτη για διάφορους ρυθμούς θέρμανσης



Διάγραμμα 5.4: Ποσοστό άνθρακα στον ωστενίτη σε σχέση με το ρυθμό θέρμανσης.



Διάγραμμα 5.5: Θερμοκρασία Ac₁ για ευτηκτοιδή χάλυβα για τις δύο τιμές μήκους περιοχής φερριτη και Fe₃C, L1>L2.

Ζώνη III : Για ρυθμούς θέρμανσης πάνω από τους 7500 K/sec παρατηρείται μία συνεχής αύξηση της θερμοκρασίας μέχρι τους 900°C περίπου. Αυτό συμβαίνει για τον ίδιο λόγο που αναφέρθηκε και προηγουμένως, μόνο που εδώ η θερμοκρασία δεν αυξάνεται κατά πολύ με την αύξηση του ρυθμού θέρμανσης.

Η ίδια συμπεριφορά παρατηρείται και για τον ίδιο χάλυβα με πλάτος περιοχής Fe_3C 0,025e-6m και πλάτος περιοχής φερρίτη 19,01986491e-9m που φαίνεται στο *διάγραμμα 5.3*.

Στα *διαγράμματα 5.2* και *5.4* σχεδιάστηκε η περιεκτικότητα του ωστενίτη σε C σε σχέση με το ρυθμό θέρμανσης και για τις δύο παραπάνω περιπτώσεις. Και στις δύο περιπτώσεις παρατηρείται μία απότομη αύξηση του ποσοστού του άνθρακα από μία τιμή ρυθμού θέρμανσης και πάνω. Αυτό φυσικά δεν είναι λογικό, εφόσον το σύστημα είναι κλειστό και δεν εμπλουτίζεται με άτομα C. Πιθανόν να οφείλεται σε υπολογιστικούς παράγοντες που χρησιμοποιεί το DICTRA για την επίλυση των προβλημάτων.

Από τη σύγκριση των δύο περιπτώσεων που φαίνεται στο *διάγραμμα 5.5* παρατηρείται ότι οι θερμοκρασίες διαλυτοποίησης για κάθε ρυθμό θέρμανσης είναι χαμηλότερες στη δεύτερη περίπτωση. Αυτό είναι λογικό διότι στη δεύτερη περίπτωση το υλικό είναι λεπτόκοκκο και άρα τα άτομα διαχέονται ταχύτερα χωρίς να απαιτούνται υψηλότερες θερμοκρασίες.

5.5 ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΥΠΟΕΥΤΗΚΤΟΕΙΔΟΥΣ ΧΑΛΥΒΑ ΣΤΟ DICTRA ΜΕ ΣΚΟΠΟ ΤΟΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟ ΤΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ ΔΙΑΛΥΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΤΟΥ ΠΕΡΙΛΙΤΗ ΜΕ ΔΙΑΦΟΡΟΥΣ ΡΥΘΜΟΥΣ ΘΕΡΜΑΝΣΗΣ.

Από τα αποτελέσματα μελέτης υποευτηκτοειδούς χάλυβα 0,45wt%C με πλάτος περιοχής Fe_3C : 0,005e-6m και πλάτος περιοχής φερρίτη: 37,22709e-9m που φαίνονται στο *διάγραμμα 5.6* παρατηρούνται οι εξής τρεις ζώνες:

Ζώνη I : Για μικρούς ρυθμούς θέρμανσης από 0,001 έως 0,1K/sec παρατηρείται διατήρηση της θερμοκρασίας διαλυτοποίησης στους 726°C. Αυτό συμβαίνει όπως ειπώθηκε και παραπάνω διότι ο μετασχηματισμός γίνεται σε συνθήκες ισορροπίας.

Ζώνη II : Για μεσαίους ρυθμούς θέρμανσης από 1 έως 10000 K/sec φαίνεται ότι ο μετασχηματισμός λαμβάνει μέρος σε θερμοκρασία 760°C όπου εξηγείται με τον ίδιο τρόπο που παρατηρήθηκε και στον ευτηκτοειδή χάλυβα.

Ζώνη III : Για υψηλούς ρυθμούς θέρμανσης πάνω από 10000 K/sec παρατηρείται συνεχής αύξηση της θερμοκρασίας μέχρι τους 900°C. Δηλαδή, παρόμοια αντίδραση του συστήματος με αυτή του ευτηκτοειδή χάλυβα.

Η ίδια συμπεριφορά παρατηρείται και για τον ίδιο χάλυβα με πλάτος περιοχής Fe_3C 0,025e-6m και πλάτος περιοχής φερρίτη 18,613545e-9m που φαίνεται στο *διάγραμμα 5.8*.

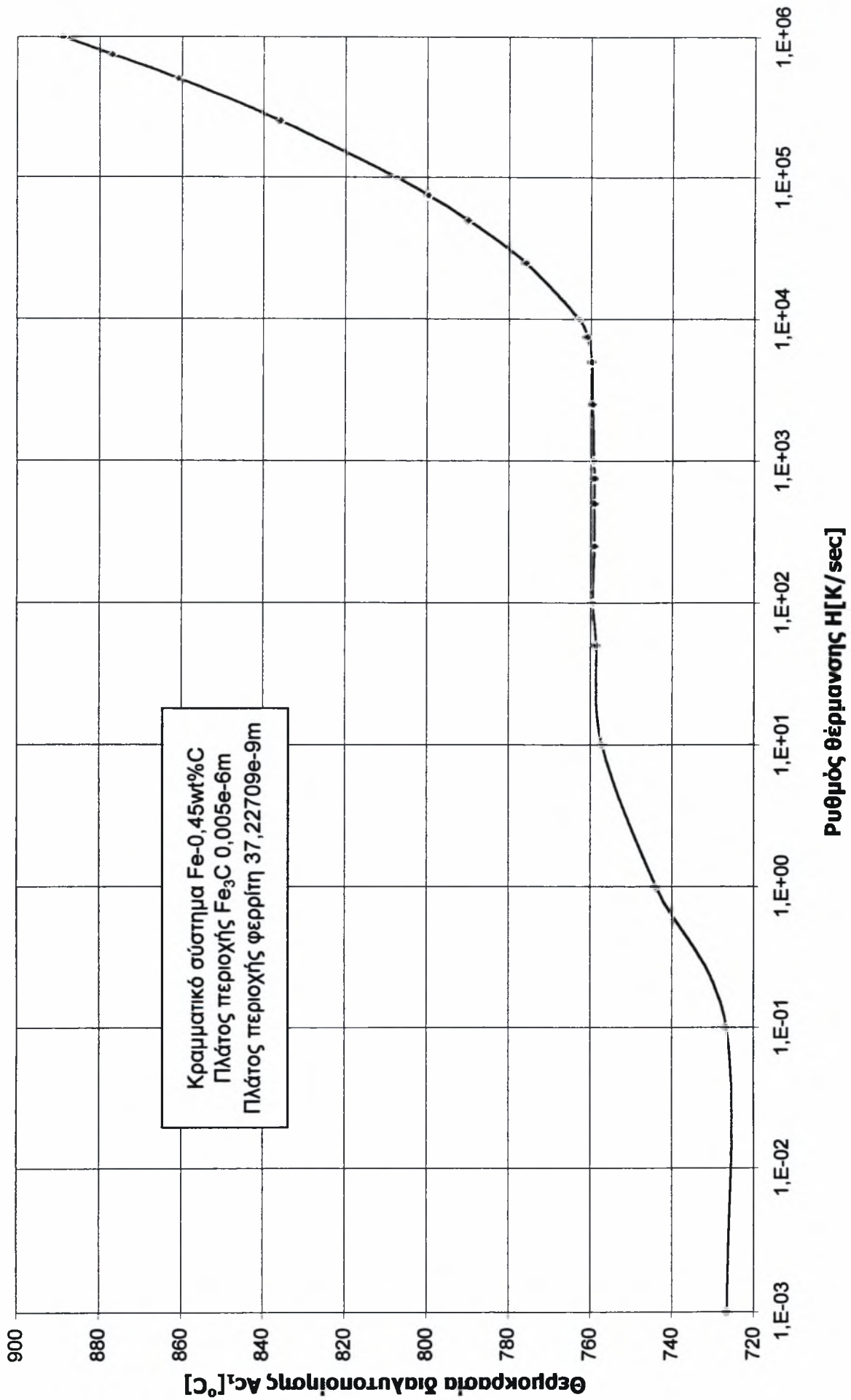
Επίσης, στα *διαγράμματα 5.7 και 5.9* σχεδιάστηκε η περιεκτικότητα του ωστενίτη σε C σε σχέση με το ρυθμό θέρμανσης και για τις δύο παραπάνω περιπτώσεις. Παρόμοια όπως και στον ευτηκτοειδή χάλυβα παρατηρείται μία διακύμανση του ποσοστού, πράγμα που όπως ειπώθηκε οφείλεται πιθανόν σε υπολογιστικούς παράγοντες.

Από τη σύγκριση των δύο περιπτώσεων που φαίνεται στο *διάγραμμα 5.10* παρατηρείται ότι οι θερμοκρασίες διαλυτοποίησης για κάθε ρυθμό θέρμανσης είναι χαμηλότερες στη δεύτερη περίπτωση όπου υπάρχει λεπτόκοκκο υλικό. Εδώ επιβεβαιώνεται πάλι ότι όσο λεπτόκοκκο είναι το υλικό τόσο χαμηλότερη είναι η θερμοκρασία ωστενιτοποίησης που αναπτύσσεται για κάθε ρυθμό θέρμανσης.

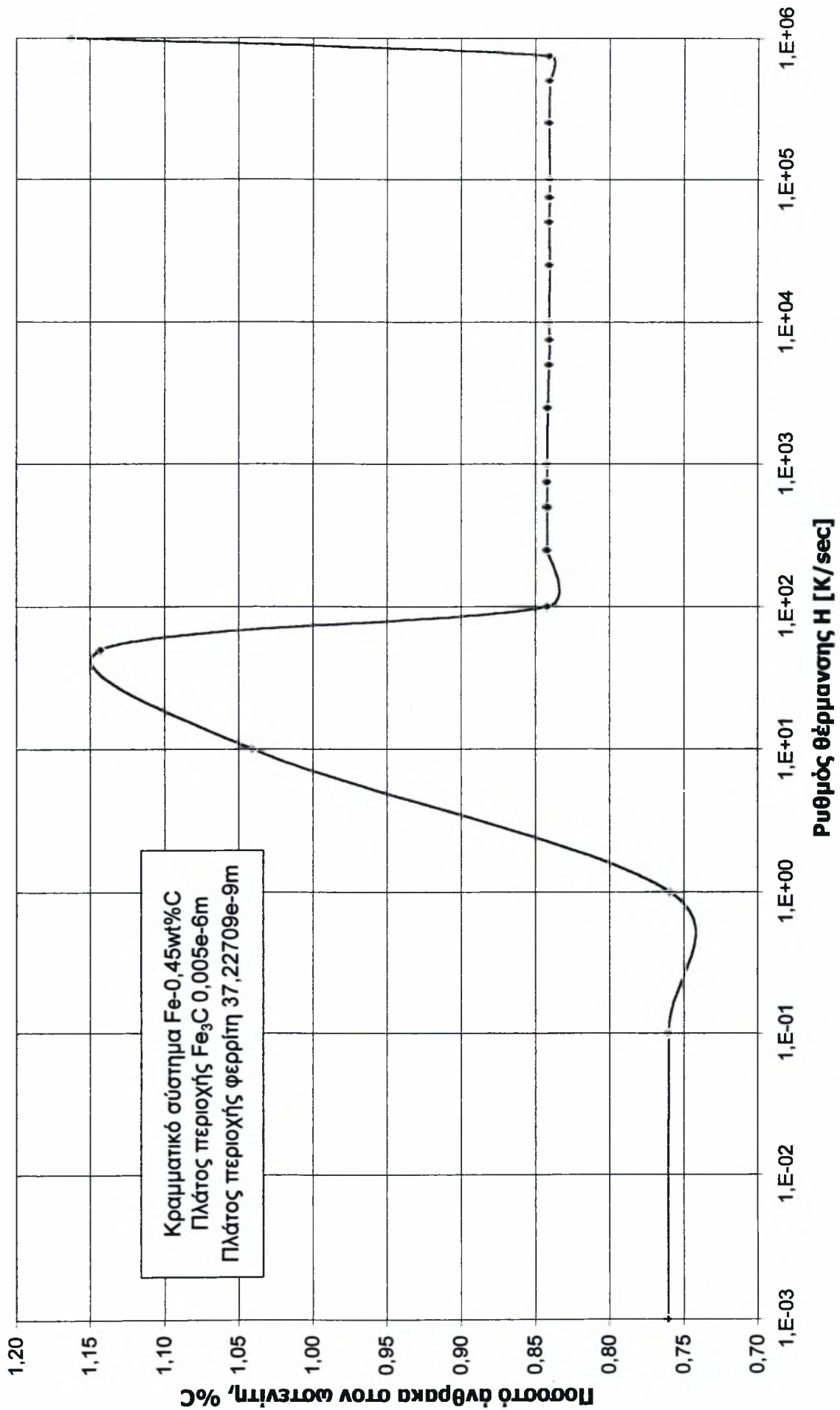
Τέλος, στο *διάγραμμα 5.11* συγκρίθηκαν οι θερμοκρασίες διαλυτοποίησης του περλίτη A_{c1} για τον ευτηκτοειδή και τον υποευτηκτοειδή χάλυβα. Όπως φαίνεται, για μικρούς ρυθμούς θέρμανσης η θερμοκρασία A_{c1} είναι μεγαλύτερη για τον υποευτηκτοειδή χάλυβα, ενώ για ρυθμούς θέρμανσης πάνω από 100000K/sec οι θερμοκρασίες είναι ίδιες.

Πίνακας 5.3: Αποτελέσματα προσομοίωσης υποευτηκτοειδούς χάλυβα Fe-0,45wt%C και πλάτος περιοχής φερρίτη και Fe₃C, 37,22709e-9m και 0,005e-6m αντίστοιχα.

Ρυθμός θέρμανσης H[K/sec]	Χρόνος διαλυτοποίησης περλίτη t _d [sec]	Θερμοκρασία διαλυτοποίησης περλίτη A _{c1} [°C]	Ποσοστό άνθρακα στον ωστενίτη %C στον γ
0,001	7,0164393750E+05	726,644	0,7609
0,1	7,0172382812E+03	726,724	0,76053
1	7,1905029300E+02	744,050	0,7596
10	7,3225470947E+01	757,255	1,0408
50	1,4674473763E+01	758,724	1,14316
100	7,3454546928E+00	759,545	0,84224
250	2,9367473125E+00	759,187	0,84224
500	1,4685356617E+00	759,268	0,84224
750	9,7902059555E-01	759,265	0,84213
1000	7,3438018560E-01	759,380	0,84225
2500	2,9388093948E-01	759,702	0,842081
5000	1,4698387682E-01	759,919	0,84088
7500	9,8139464855E-02	761,046	0,840769
10000	7,3815762997E-02	763,158	0,84084
25000	3,0040763319E-02	776,019	0,840824
50000	1,5303026885E-02	790,151	0,840914
75000	1,0333225131E-02	799,992	0,840824
100000	7,8268153593E-03	807,682	0,840816
250000	3,2438286580E-03	835,957	0,840887
500000	1,6720230924E-03	861,012	0,84082
750000	1,1360609205E-03	877,046	0,84088
1000000	8,6403574096E-04	889,036	1,162908



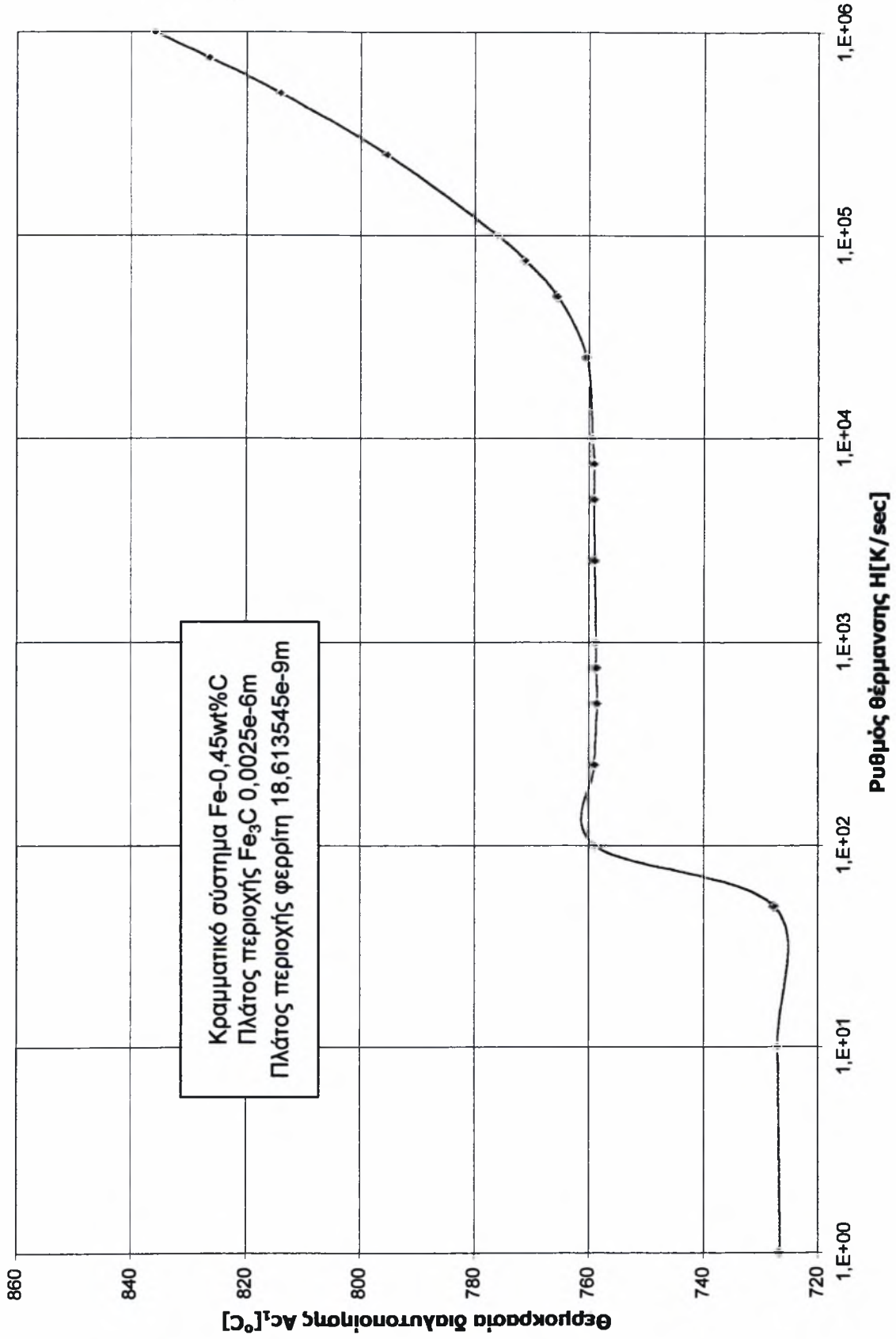
Διάγραμμα 5.6: Θερμοκρασία διαλυτοποίησης περλίτη σε σχέση με το ρυθμό θέρμανσης.



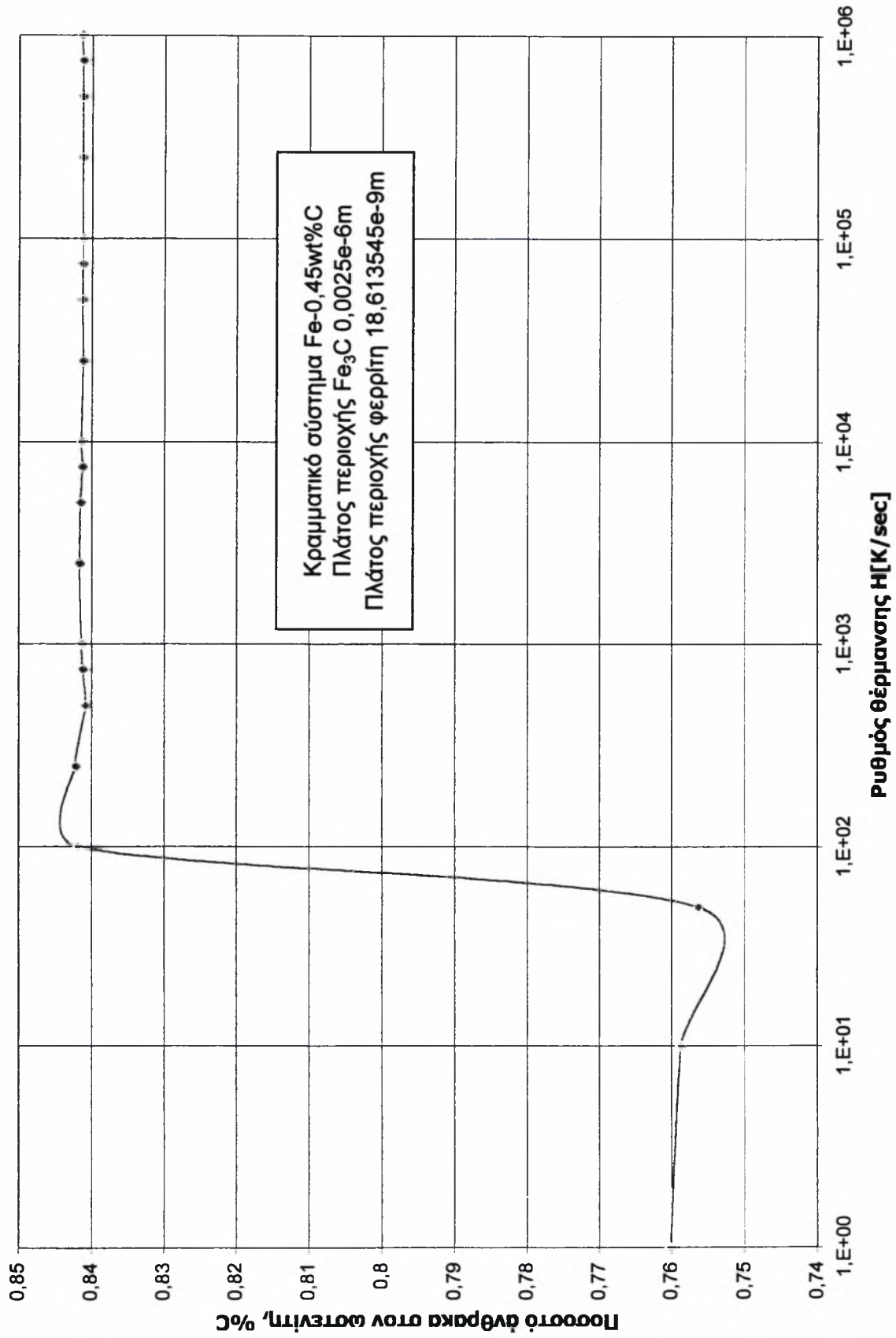
Διάγραμμα 5.7: Ποσοστό άνθρακα στον ωστενίτη σε σχέση με το ρυθμό θέρμανσης

Πίνακας 5.4: Αποτελέσματα προσομοίωσης υποευτηκτοειδούς χάλυβα Fe-0,45wt%C και πλάτος περιοχής φερρίτη και Fe₃C, 18,613545e-9m και 0,0025e-6m αντίστοιχα.

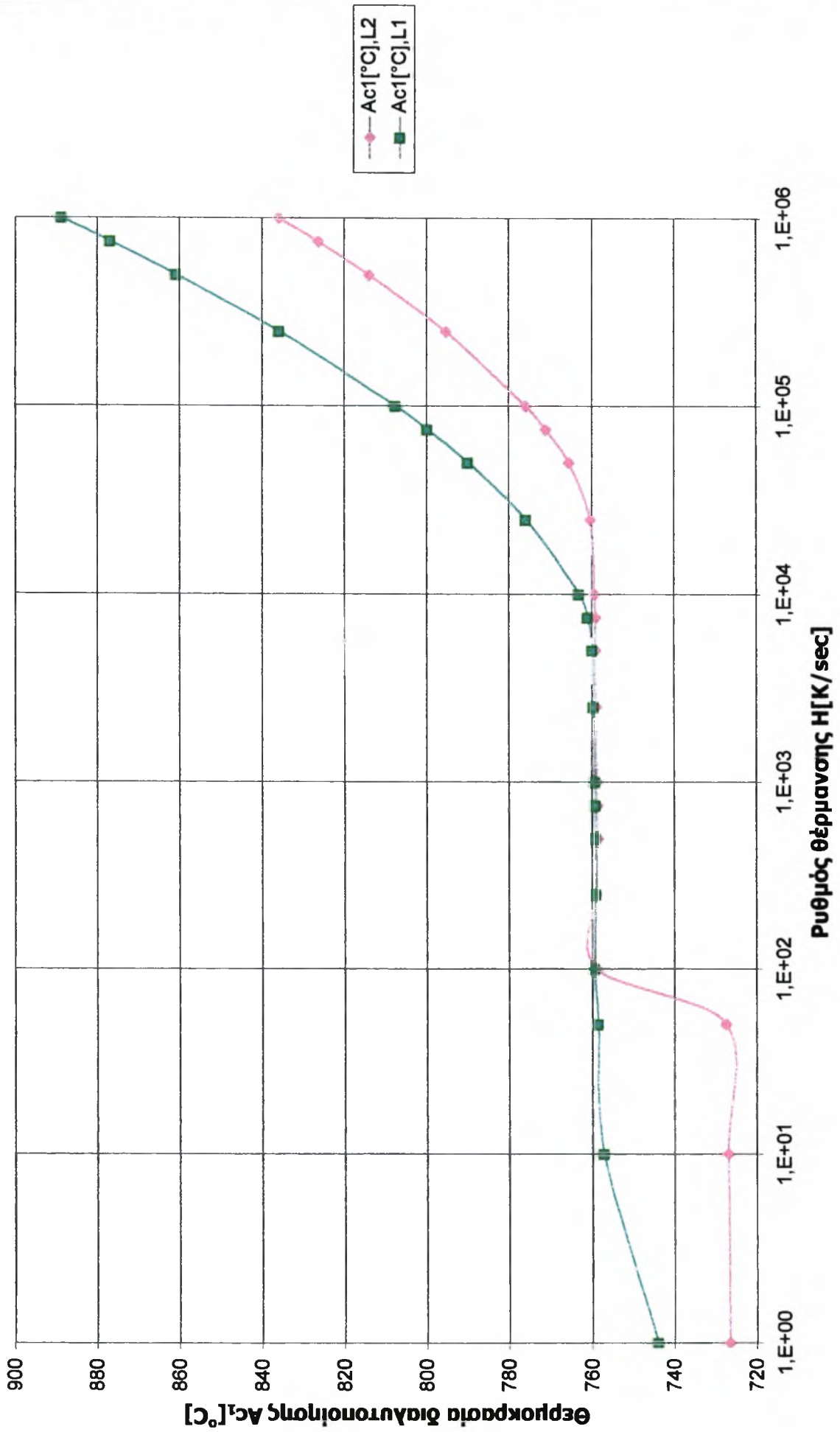
Ρυθμός θέρμανσης H[K/sec]	Χρόνος διαλυτοποίησης περλίτη t_d [sec]	Θερμοκρασία διαλυτοποίησης περλίτη A_{c1} [°C]	Ποσοστό άνθρακα στον ωστενίτη %C στον γ
1	7,0176971436E+02	726,770	0,76029
10	7,0208946228E+01	727,089	0,75886
50	1,4054365158E+01	727,718	0,75644
100	7,3404774666E+00	759,048	0,84198
250	2,9367740154E+00	759,194	0,84233
500	1,4673476222E+00	758,674	0,84097
750	9,7845351696E-01	758,840	0,84136
1000	7,3392635584E-01	758,926	0,84153
2500	2,9364594817E-01	759,115	0,84179
5000	1,4684499800E-01	759,225	0,84167
7500	9,7900807858E-02	759,256	0,84137
10000	7,3448792100E-02	759,488	0,84150
25000	2,9421310872E-02	760,533	0,84131
50000	1,4812938869E-02	765,647	0,84137
75000	9,9501954392E-03	771,265	0,84135
100000	7,5108776800E-03	776,088	0,84136
250000	3,0819165986E-03	795,479	0,84136
500000	1,5781964175E-03	814,098	0,84141
750000	1,0686994065E-03	826,525	0,84136
1000000	8,1101694377E-04	836,017	0,84149



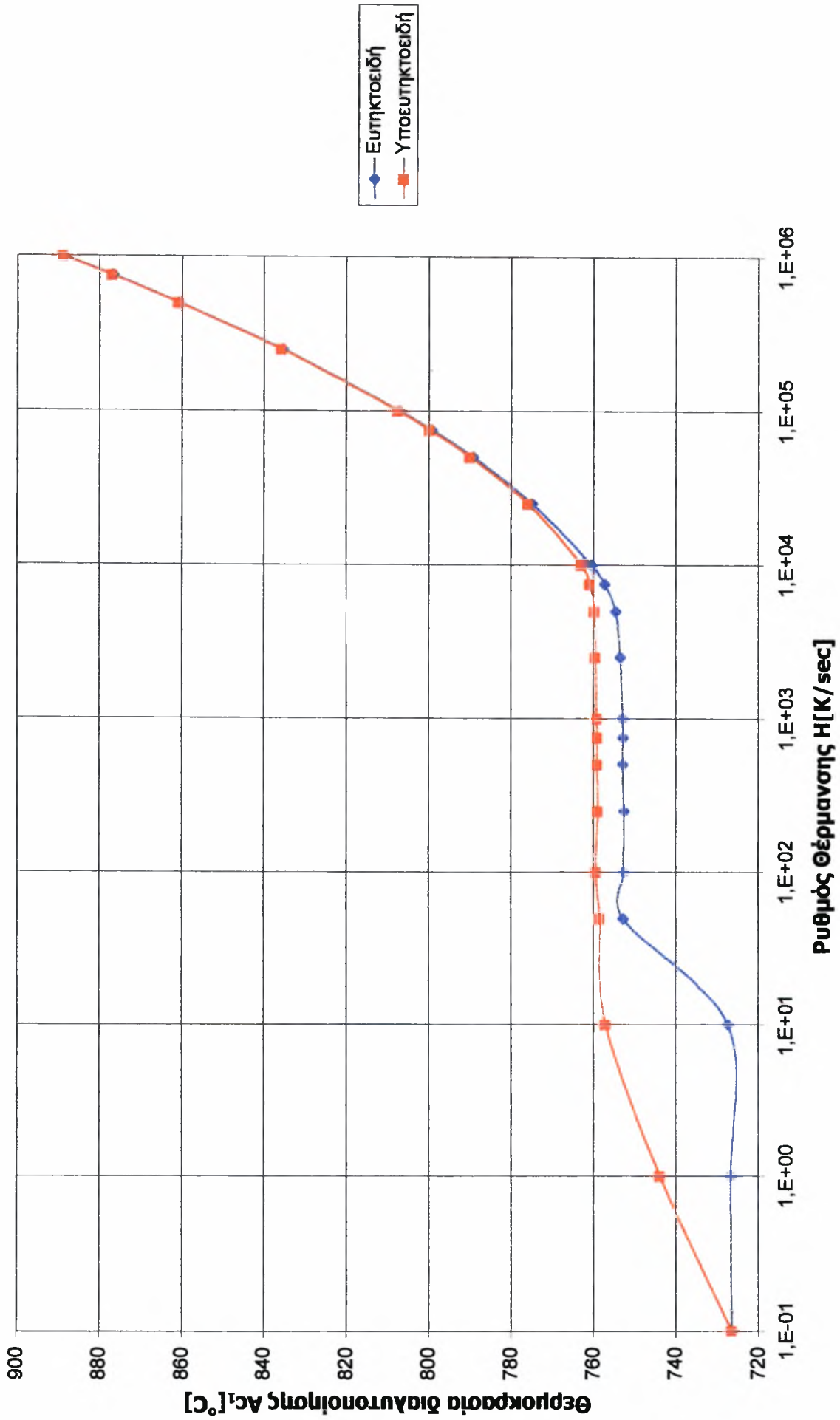
Διάγραμμα 5.8: Θερμοκρασία διαλυτοποίησης περλίτη σε σχέση με το ρυθμό θέρμανσης.



Διάγραμμα 5.9: Ποσοστό άνθρακα στον ωστενίτη σε σχέση με το ρυθμό θέρμανσης.



Διάγραμμα 5.10: Θερμοκρασία A_{c1} για υποεπιτηκτοειδή χάλυβα για τις δύο τιμές μήκους περιοχής φερριτή και Fe_3C , $L1 > L2$.



Διάγραμμα 5.11: Θερμοκρασία A_{c1} για υποευτηκτοειδή και ευτηκτοειδή χάλυβα.

6. ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΤΟΥ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟΥ DICTRA ΣΤΗΝ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΩΣΤΕΝΙΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΑΠΛΟΥ ΑΝΘΡΑΚΟΧΑΛΥΒΑ CK-45

6.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Βασικός στόχος αυτού του κεφαλαίου είναι η αξιολόγηση των αποτελεσμάτων που υπολογίζει το DICTRA, σε σχέση με αυτά που προέκυψαν από πείραμα, το οποίο πραγματοποιήθηκε στο εργαστήριο υλικών στο Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας. Ως δευτερεύων στόχος καθορίστηκε η ανάλυση των ιδίων αποτελεσμάτων.

6.2 ΩΣΤΕΝΙΤΟΠΟΙΗΣΗ ΥΠΟΕΥΤΗΚΤΟΕΙΔΟΥΣ ΑΝΘΡΑΚΟΧΑΛΥΒΑ

Σύμφωνα με το διάγραμμα φάσεων ο μετασχηματισμός υποευτηκτοειδούς ανθρακοχάλυβα συμβαίνει σε δύο στάδια: το πρώτο αφορά τη διαλυτοποίηση του περλίτη και κατόπιν ο μετασχηματισμός του προευτηκτοειδούς φερρίτη σε ωστενίτη. Το πρώτο στάδιο λαμβάνει μέρος στην ευτηκτοειδή θερμοκρασία A_{e1} και εξαρτάται από την κινητική διαλυτοποίησης του σεμεντίτη και από τη διάχυση του άνθρακα στις λαμμέλες του φερρίτη. Το στάδιο αυτό πραγματοποιείται σχετικά σύντομα επειδή οι αποστάσεις της διάχυσης είναι μικρές. Το δεύτερο στάδιο συμβαίνει μέσα σε ένα θερμοκρασιακό εύρος το οποίο οριοθετείται από την ευτηκτοειδή γραμμή και τη μεταβατική θερμοκρασία α/γ φτωχού σιδήρου. Το μέγιστο ποσοστό του ωστενίτη που μπορεί να σχηματισθεί σε κάθε θερμοκρασία δίνεται από το διάγραμμα και τον κανόνα του μοχλού. Γίνεται 100% ωστενίτης στην θερμοκρασία A_{e3} . Η κινητική του μετασχηματισμού εξαρτάται από τη διάχυση των ατόμων του άνθρακα από τις πλούσιες περιοχές του ωστενίτη στους κόκκους του προευτηκτοειδούς φερρίτη. Έτσι, η κινητική της διαδικασίας ωστενιτοποίησης ελέγχεται κυρίως από το δεύτερο στάδιο του μετασχηματισμού. Στο μοντέλο του DICTRA έχει γίνει η υπόθεση ότι ο χρόνος που απαιτείται για τη διαλυτοποίηση του περλίτη είναι ασήμαντος σε σχέση με τη διάρκεια του δεύτερου σταδίου. Επομένως στους υπολογισμούς του DICTRA ως αρχικό στάδιο καθορίστηκε η τελική δομή του πρώτου σταδίου δηλαδή ωστενίτης και φερρίτης. Το ποσοστό του ωστενίτη και του φερρίτη υπολογίστηκε από το Thermo-Calc στους 991,39K και είναι: $f_{\gamma}=0,603509308$ και $f_{\alpha}=0,396490692$. Επίσης, υπολογίστηκε και το μέγεθος κόκκου του φερρίτη σύμφωνα με την προδιαγραφή της

ASTM E562 και βρέθηκε ότι είναι $L_0=11.4\mu\text{m}$. Επιπλέον, από την αναλογία $\frac{f_\gamma}{L_\gamma} = \frac{f_\alpha}{L_\alpha}$ βρέθηκε και το μήκος της περιοχής του ωστενίτη ίσο με $L_\gamma=17.35225\mu\text{m}$. Το μοντέλο προσομοίωσης που χρησιμοποιήθηκε από το DICTRA είναι το ίδιο με αυτό που περιγράφηκε στο Κεφάλαιο 4.2.

6.3 ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ

Για την διεκπεραίωση της πειραματικής διαδικασίας μελετήθηκαν συνολικά 11 δοκίμια ανθρακοχάλυβα Ck-45. Από αυτά τα 6 υπέστησαν θερμική κατεργασία στους 780°C και τα υπόλοιπα 5 στους 800°C .

Η ακριβής σύσταση του υλικού ήταν Fe-0,45%C-0,65%Mn και η μικροδομή του προευτηκτοειδής φερρίτης και περλίτης. Η θέρμανση των δοκιμών έγινε σε φούρνο αλάτων και ακολούθησε απότομη ψύξη (βαφή) σε νερό. Στη συνέχεια το κάθε κομμάτι χάλυβα εγκιβωτίστηκε, λειάνθηκε και υπέστη χημική προσβολή έτσι ώστε να είναι κατάλληλο για την ποσοτική μεταλλογραφία που ακολούθησε. Τα δοκίμια θερμάνθηκαν στους 780°C και 800°C για διάφορους χρόνους όπως φαίνονται στον *πίνακα 6.1*:

Πίνακας 6.1: Χρόνοι και θερμοκρασίες κατά την πειραματική διαδικασία.

Χρόνος παραμονής στους 780°C σε sec	Χρόνος παραμονής στους 800°C σε sec
11	4
42	16
104	39
155	70
266	80
300	

Η ποσοτική μεταλλογραφία των δοκιμών έγινε σύμφωνα με τις προδιαγραφές της ASTM E562. Μετρήθηκε το ποσοστό του φερρίτη το οποίο στις φωτογραφίες που πάρθηκαν κατά την ανάλυση εμφανίζεται σαν λευκές περιοχές. Αφαιρώντας το ποσοστό του φερρίτη από το 100% βρέθηκε το ποσοστό του μαρτενσίτη το οποίο αντιπροσωπεύει το ποσοστό του ωστενίτη που σχηματίστηκε κατά τη θέρμανση σε διάφορους χρόνους. Είναι ο μόνος τρόπος μέ-

τρησης του ωστενίτη, αφού κατά την βαφή σε νερό όλος ο ωστενίτης που σχηματίστηκε μετατράπηκε σε μαρτενσίτη. Τα αποτελέσματα της ποσοτικής μεταλλογραφίας περιγράφονται στο Παράρτημα 1.

6.4 ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ-ΣΥΖΗΤΗΣΗ

Τα αποτελέσματα από την προσομοίωση στο DICTRA και αυτά της πειραματικής διαδικασίας αναγράφονται στους *πίνακες 6.2 και 6.3*. Η γραφική απεικόνιση αυτών φαίνεται στα *διαγράμματα 6.1 και 6.2*, για 780°C και 800°C αντίστοιχα. Από τα διαγράμματα είναι φανερό ότι υπάρχει πολύ καλή συμφωνία των αποτελεσμάτων του DICTRA και των πειραματικών και για τις δύο θερμοκρασίες. Η έλλειψη συμφωνίας που υπάρχει σε ορισμένα σημεία πιθανότατα οφείλεται στο γεγονός ότι κατά την πειραματική διαδικασία υπήρχε μία μικρή απόκλιση διατήρησης της θερμοκρασίας, περίπου $\pm 3^\circ\text{C}$, κατά τη διάρκεια ωστενιτοποίησης. Επομένως, η χρήση του λογισμικού DICTRA για την εύρεση του ποσοστού ωστενίτη σε σχέση με το χρόνο και τη θερμοκρασία δίνει αξιόπιστα αποτελέσματα στον κάθε χρήστη.

Από τα διαγράμματα φαίνεται επίσης, ότι ο σχηματισμός του ωστενίτη απαιτεί ορισμένο χρόνο για να σχηματισθεί ο πρώτος πυρήνας και κατόπιν αναπτύσσεται πιο γρήγορα καθώς σχηματίζονται και μεγαλώνουν περισσότεροι πυρήνες. Η χρονική εξάρτηση αυτή είναι αναμενόμενη εξαιτίας της διάχυσης του άνθρακα που απαιτείται για να παραχθεί ωστενίτης. Έτσι, για μικρούς χρόνους ωστενιτοποίησης όπου δεν προλαβαίνει να διαχυθεί όλος ο άνθρακας, δεν προκύπτει πλήρης ωστενιτοποίηση του υλικού. Όσο όμως αυξάνεται ο χρόνος ωστενιτοποίησης τόσο αυξάνεται και το ποσοστό του ωστενίτη πράγμα που σημαίνει ότι υπάρχει διαθέσιμος χρόνος για την διάχυση του άνθρακα.

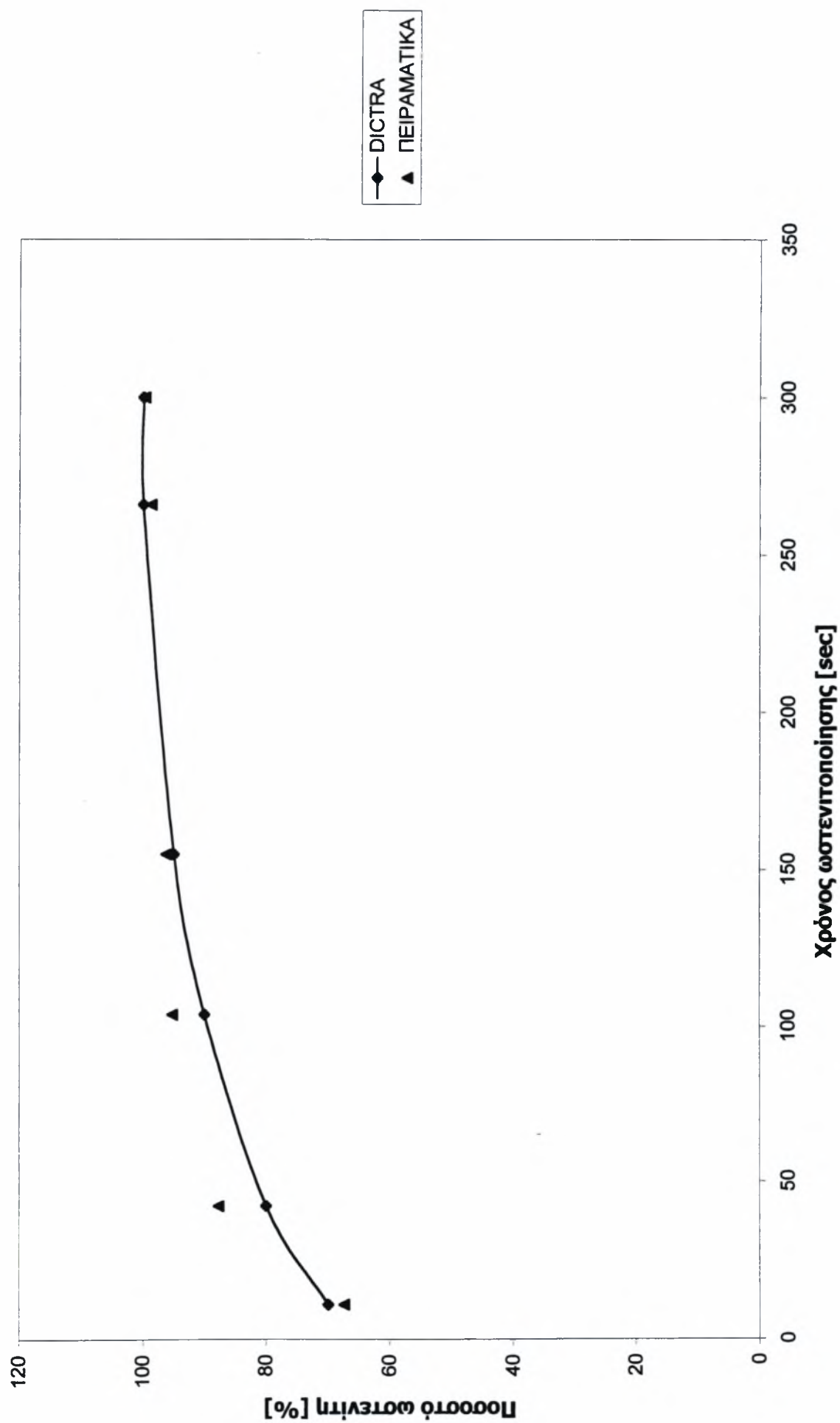
Όμως, αξίζει να σημειωθεί και η επίδραση της θερμοκρασίας κατά την ωστενιτοποίηση. Από το *διάγραμμα 6.3* φαίνεται ότι σε υψηλότερη θερμοκρασία, στους 800°C, παρόλο που οι χρόνοι ωστενιτοποίησης είναι πιο μικροί, τα ποσοστά του ωστενίτη που παίρνονται κάθε φορά είναι μεγαλύτερα σε σχέση με αυτά στους 780°C όπου για μεγαλύτερους χρόνους προκύπτει μικρότερο ποσοστό ωστενίτη. Αυτό είναι φυσικό και αναμενόμενο διότι με αύξηση της θερμοκρασίας αυξάνεται και το ποσοστό της διάχυσης, με αποτέλεσμα να σχηματίζεται ωστενίτης πιο γρήγορα.

Πίνακας 6.2: Τελικό ποσοστό ωστενίτη για διάφορους χρόνους ωστενιτοποίησης στους 780°C.

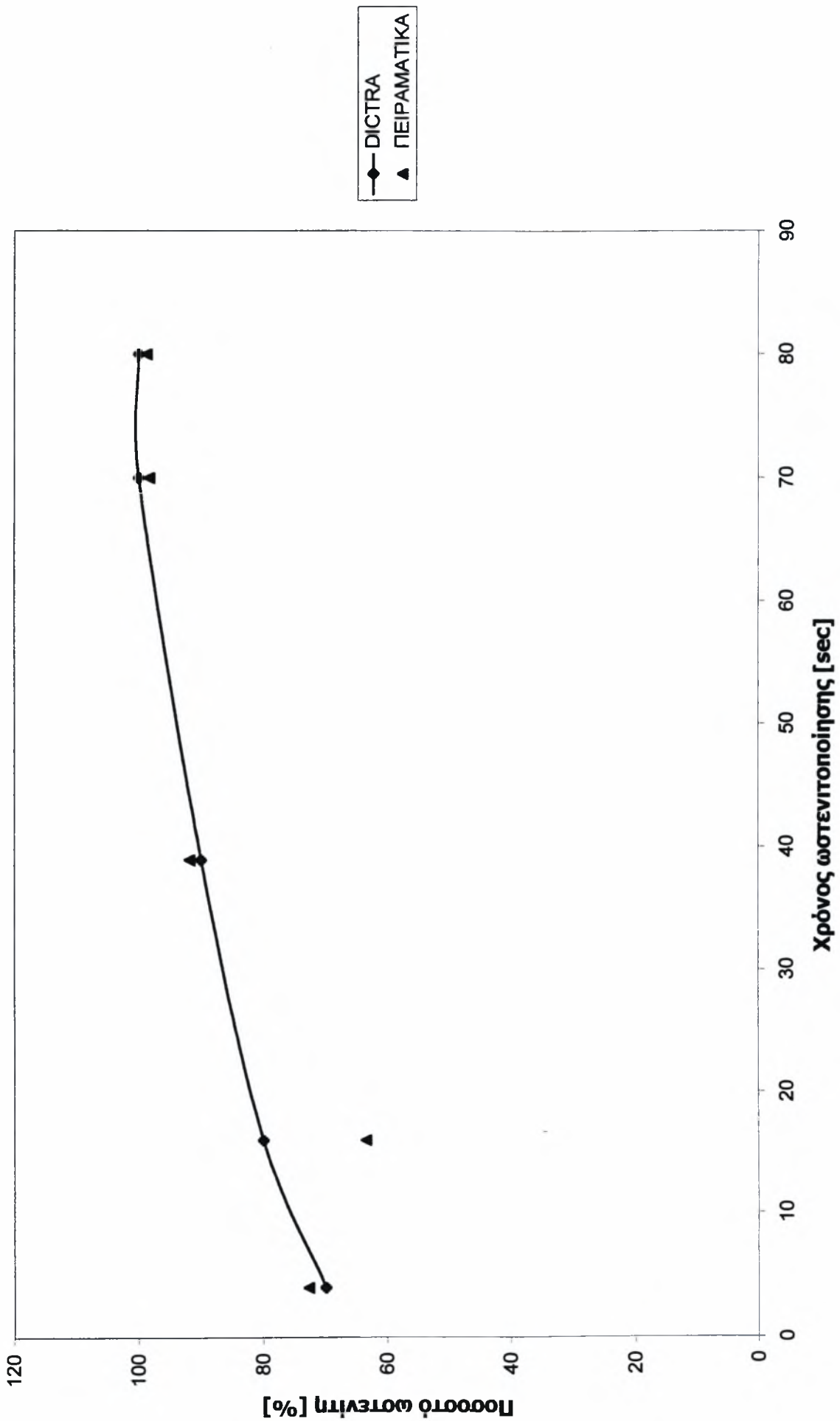
ΧΡΟΝΟΣ [sec]	ΔICTRA [%]	ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΑ [%]
11	70	67,377
42	80	87,729
104	90	95,196
155	95	96,223
266	100	98,646
300	100	99,734

Πίνακας 6.3: Τελικό ποσοστό ωστενίτη για διάφορους χρόνους ωστενιτοποίησης στους 800°C.

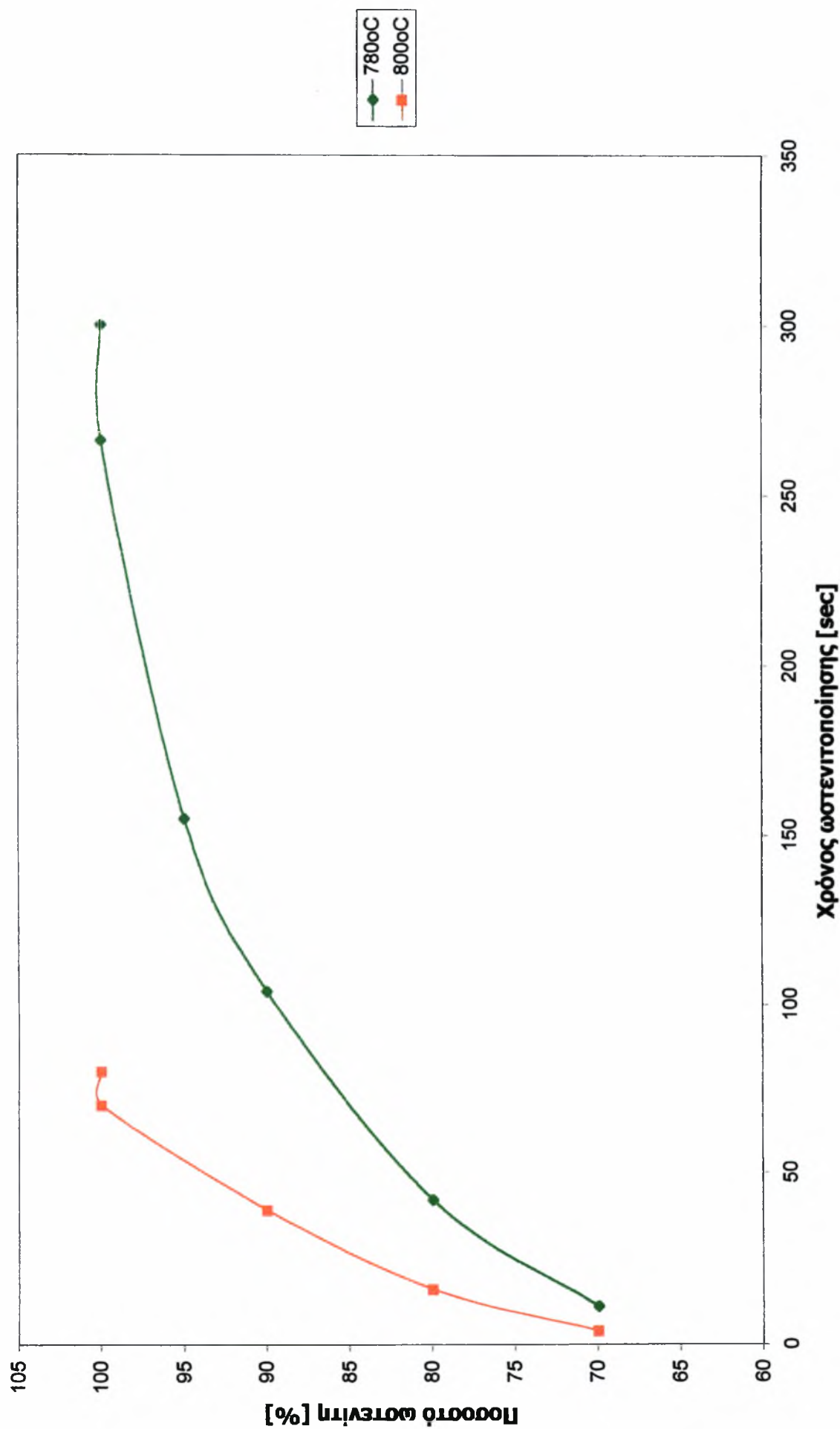
ΧΡΟΝΟΣ [sec]	ΔICTRA [%]	ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΑ [%]
4	70	72,685
16	80	63,358
39	90	91,809
70	100	98,31
80	100	98,722



Διάγραμμα 6.1: Ποσοστό ωστενίτη στους 780°C σε σχέση με το χρόνο ωστενιτοποίησης



Διάγραμμα 6.2: Ποσοστό ωστενίτη στους 800°C σε σχέση με το χρόνο ωστενιτοποίησης



Διάγραμμα 6.3: Επίδραση της θερμοκρασίας ωστενιτοποίησης πάνω στο ποσοστό σχηματισμού του ωστενίτη με τη μέθοδο του DICTRA

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΚΗ ΑΝΑΦΟΡΑ

- [1] Γ.Ν. Χαιδεμενόπουλος , Φυσική Μεταλλουργία, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Θεσσαλίας, 2000
- [2] A. Jacot and Rappaz, Acta Metall.,Vol. 45, No. 2, 1997
pp. :575-585
- [3] ZI-KUI LIU, LARS HÖGLUND, BJÖRN JÖNSSON, and JOHN ÅGREN, Vol. 22A, AUGUST 1991-1745
- [4] DICTRA User manual
- [5] J.Ågren, ISIJ Intern., 32 (1992) 291
- [6] J.O. Andersson, L. Höglund, Jönsson and J.Ågren
Divison of Physical Metallurgy, Royal Institute of Technology, S-100 44 Stockholm, Sweden
- [7] G.KRAUSS 'Steels Heat Treatment And Processing Principles'
- [8] K.J. Albutt and S. Garber. Journal of the iron and steel Institute, September 1966.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 1

ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΠΟΣΟΤΙΚΗΣ ΜΕΤΑΛΛΟΓΡΑΦΙΑΣ

Οι παρακάτω πίνακες δείχνουν το νούμερο που αντιστοιχεί σε κάθε δοκίμιο.

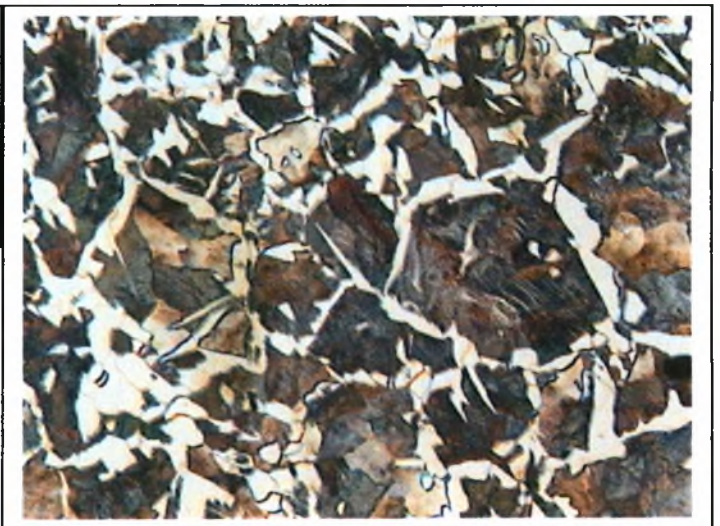
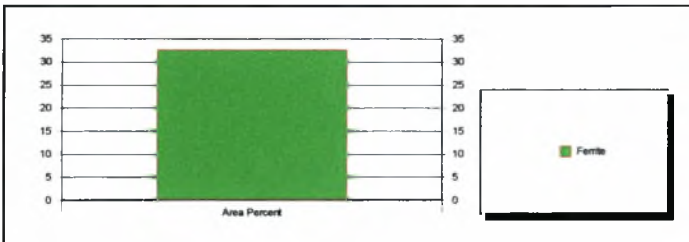
780°C	Χρόνος Ωστενιτοποίησης
No3	11sec
No4	42 sec
No5	104 sec
No6	155 sec
No7	266 sec
No8	300 sec

800°C	Χρόνος Ωστενιτοποίησης
No9	4sec
No10	16 sec
No11	39 sec
No12	70 sec
No13	80 sec

QPhase Report: Standard ASTM E562

<i>Customer:</i>	University of Thessaly (Lab of materials)	<i>Specimen ID:</i>	No3
<i>Heat Treatment:</i>		<i>Preparation:</i>	
<i>Operator:</i>	DefaultSupervisor	<i>Analysis Method</i>	Auto
<i>Origin of Sample:</i>		<i>Material Type:</i>	Ck45
<i>Date:</i>	17/04/2000	<i>Time:</i>	11:47:30
<i>Location:</i>		<i>Orientation:</i>	
<i>Magnification:</i>	10 x + 0.5 x	<i>Calibration:</i>	0.84 um/pixel
<i>Number of Fields:</i>	5	<i>Field Area:</i>	0.306 mm ²

Phase	Ferrite
Area %	32.623
Max %	36.355
Min %	30.186
Mean % per Field	32.623
Std. Dev	2.563
95 % CI	3.557
Rel. Accuracy	10.905
Fields Measured	5

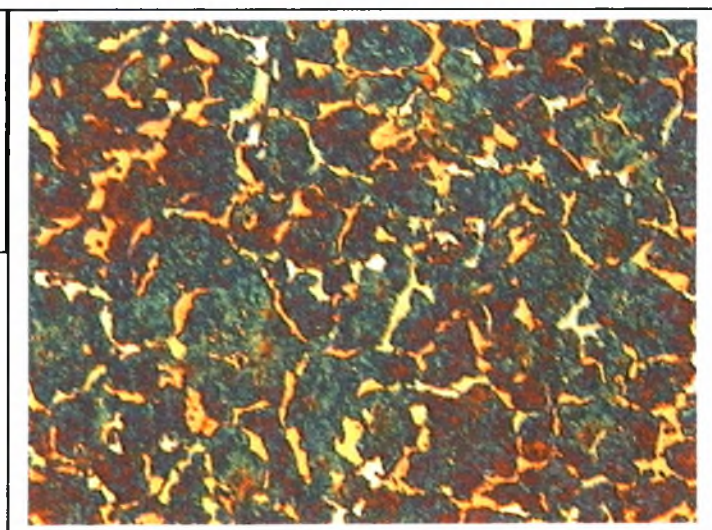
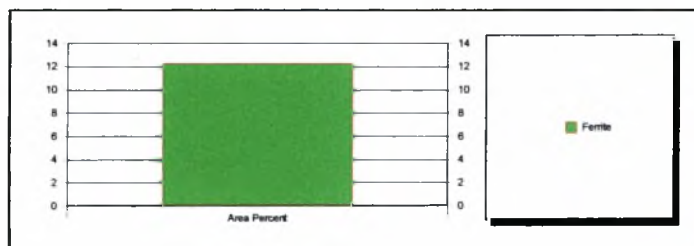


Comment:

QPhase Report: Standard ASTM E562

<i>Customer:</i>	University of Thessaly (Lab of materials)	<i>Specimen ID:</i>	No4
<i>Heat Treatment:</i>		<i>Preparation:</i>	
<i>Operator:</i>	DefaultSupervisor	<i>Analysis Method</i>	Auto
<i>Origin of Sample:</i>		<i>Material Type:</i>	Ck45
<i>Date:</i>	17/04/2000	<i>Time:</i>	12:06:00
<i>Location:</i>		<i>Orientation:</i>	
<i>Magnification:</i>	10 x + 0.5 x	<i>Calibration:</i>	0.84 um/pixel
<i>Number of Fields:</i>	5	<i>Field Area:</i>	0.306 mm ²

Phase	Ferrite
Area %	12.271
Max %	13.948
Min %	11.330
Mean % per Field	12.271
Std. Dev	1.074
95 % CI	1.491
Rel. Accuracy	12.147
Fields Measured	5

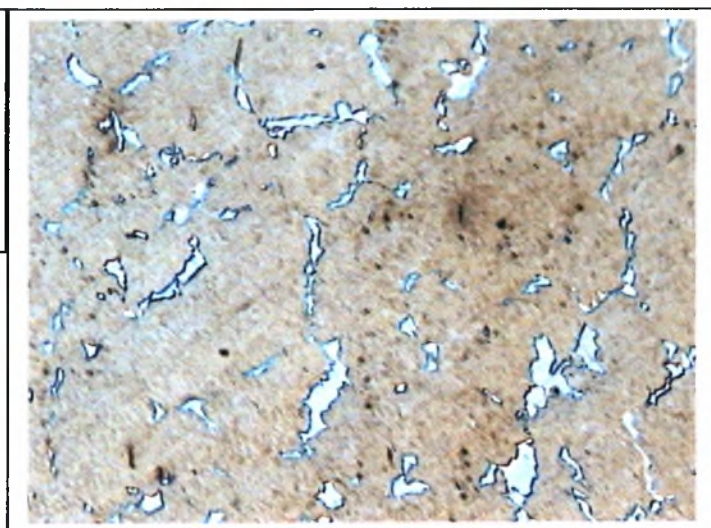
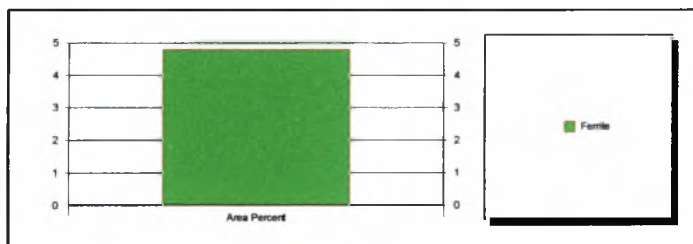


Comment:

QPhase Report: Standard ASTM E562

<i>Customer:</i>	University of Thessaly (Lab of materials)	<i>Specimen ID:</i>	No5
<i>Heat Treatment:</i>		<i>Preparation:</i>	
<i>Operator:</i>	DefaultSupervisor	<i>Analysis Method</i>	Auto
<i>Origin of Sample:</i>		<i>Material Type:</i>	Ck45
<i>Date:</i>	18/04/2000	<i>Time:</i>	10:29:31
<i>Location:</i>		<i>Orientation:</i>	
<i>Magnification:</i>	10 x + 0.5 x	<i>Calibration:</i>	0.84 um/pixel
<i>Number of Fields:</i>	5	<i>Field Area:</i>	0.306 mm ²

Phase	Ferrite
Area %	4.804
Max %	6.565
Min %	3.555
Mean % per Field	4.804
Std. Dev	1.114
95 % CI	1.547
Rel. Accuracy	32.199
Fields Measured	5

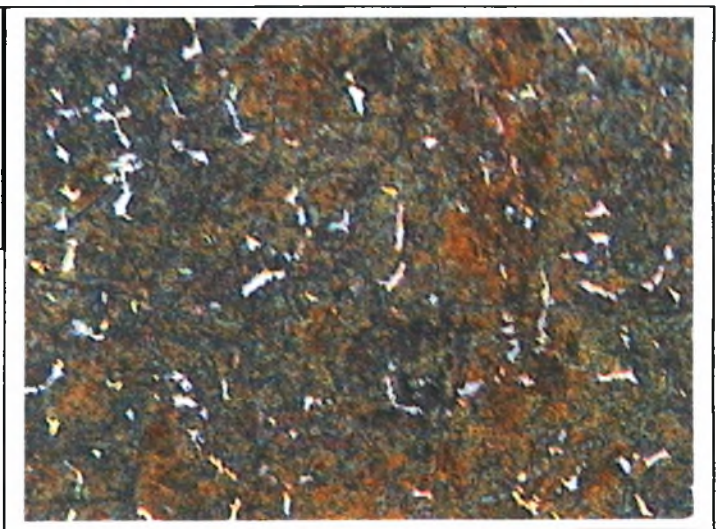
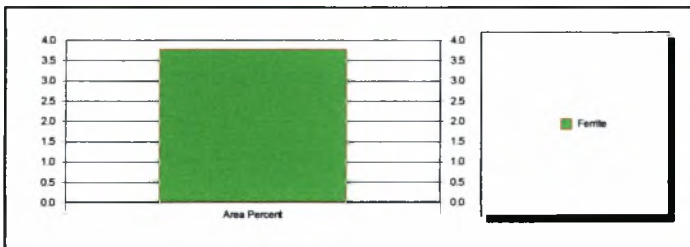


Comment:

QPhase Report: Standard ASTM E562

<i>Customer:</i>	University of Thessaly (Lab of materials)	<i>Specimen ID:</i>	No6
<i>Heat Treatment:</i>		<i>Preparation:</i>	
<i>Operator:</i>	DefaultSupervisor	<i>Analysis Method</i>	Auto
<i>Origin of Sample:</i>		<i>Material Type:</i>	Ck45
<i>Date:</i>	17/04/2000	<i>Time:</i>	12:25:18
<i>Location:</i>		<i>Orientation:</i>	
<i>Magnification:</i>	10 x + 0.5 x	<i>Calibration:</i>	0.84 um/pixel
<i>Number of Fields:</i>	5	<i>Field Area:</i>	0.306 mm ²

Phase	Ferrite
Area %	3.777
Max %	4.306
Min %	3.438
Mean % per Field	3.777
Std. Dev	0.352
95 % CI	0.488
Rel. Accuracy	12.933
Fields Measured	5

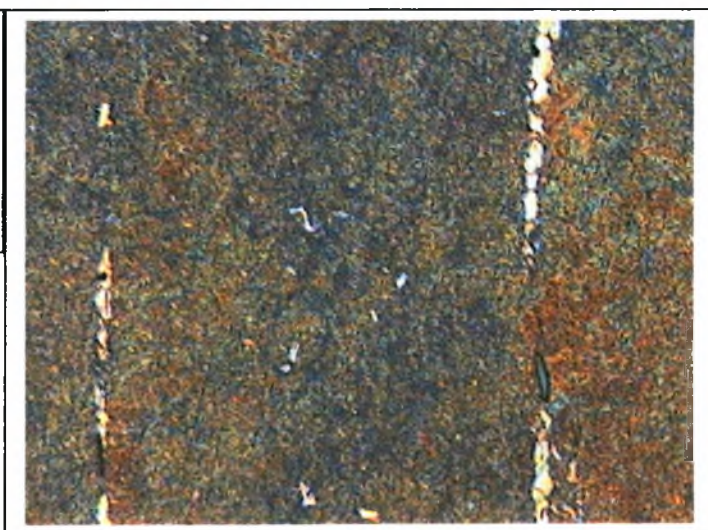
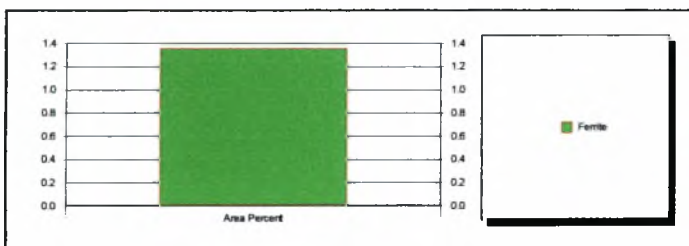


Comment:

QPhase Report: Standard ASTM E562

<i>Customer:</i>	University of Thessaly (Lab of materials)	<i>Specimen ID:</i>	No7
<i>Heat Treatment:</i>		<i>Preparation:</i>	
<i>Operator:</i>	DefaultSupervisor	<i>Analysis Method</i>	Auto
<i>Origin of Sample:</i>		<i>Material Type:</i>	Ck45
<i>Date:</i>	17/04/2000	<i>Time:</i>	12:39:24
<i>Location:</i>		<i>Orientation:</i>	
<i>Magnification:</i>	10 x + 0.5 x	<i>Calibration:</i>	0.84 um/pixel
<i>Number of Fields:</i>	5	<i>Field Area:</i>	0.306 mm ²

Phase	Ferrite
Area %	1.354
Max %	2.292
Min %	0.612
Mean % per Field	1.354
Std. Dev	0.610
95 % CI	0.846
Rel. Accuracy	62.476
Fields Measured	5

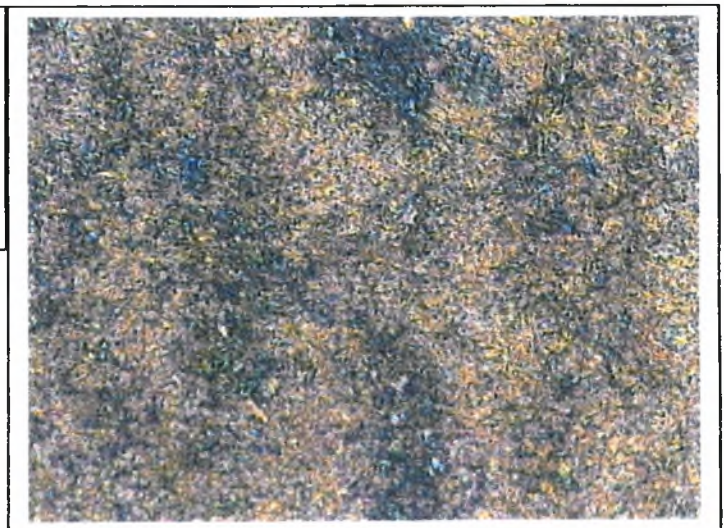
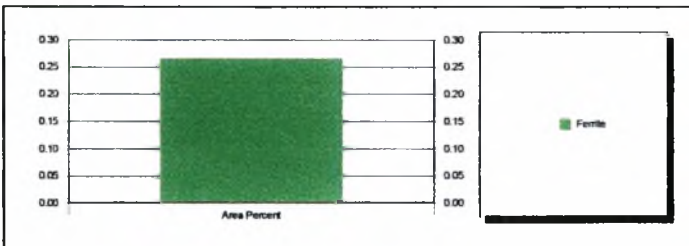


Comment:

QPhase Report: Standard ASTM E562

<i>Customer:</i>	University of Thessaly (Lab of materials)	<i>Specimen ID:</i>	No8
<i>Heat Treatment:</i>		<i>Preparation:</i>	
<i>Operator:</i>	DefaultSupervisor	<i>Analysis Method</i>	Auto
<i>Origin of Sample:</i>		<i>Material Type:</i>	Ck45
<i>Date:</i>	17/04/2000	<i>Time:</i>	13:01:07
<i>Location:</i>		<i>Orientation:</i>	
<i>Magnification:</i>	10 x + 0.5 x	<i>Calibration:</i>	0.84 um/pixel
<i>Number of Fields:</i>	3	<i>Field Area:</i>	0.306 mm²

Phase	Ferrite
Area %	0.266
Max %	0.599
Min %	0.021
Mean % per Field	0.266
Std. Dev	0.300
95 % CI	
Rel. Accuracy	
Fields Measured	3

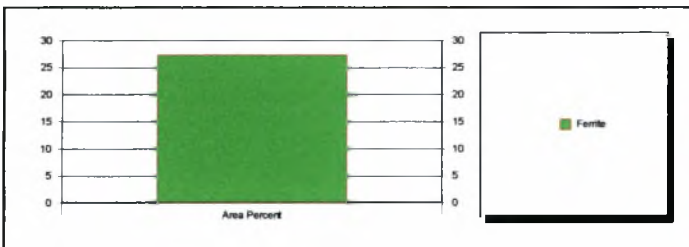


Comment:

QPhase Report: Standard ASTM E562

<i>Customer:</i>	University of Thessaly (Lab of materials)	<i>Specimen ID:</i>	No9
<i>Heat Treatment:</i>		<i>Preparation:</i>	
<i>Operator:</i>	DefaultSupervisor	<i>Analysis Method</i>	Auto
<i>Origin of Sample:</i>		<i>Material Type:</i>	Ck45
<i>Date:</i>	17/04/2000	<i>Time:</i>	13:48:15
<i>Location:</i>		<i>Orientation:</i>	
<i>Magnification:</i>	10 x + 0.5 x	<i>Calibration:</i>	0.84 um/pixel
<i>Number of Fields:</i>	5	<i>Field Area:</i>	0.306 mm ²

Phase	Ferrite
Area %	27.315
Max %	29.445
Min %	24.058
Mean % per Field	27.315
Std. Dev	2.389
95 % CI	3.316
Rel. Accuracy	12.139
Fields Measured	5

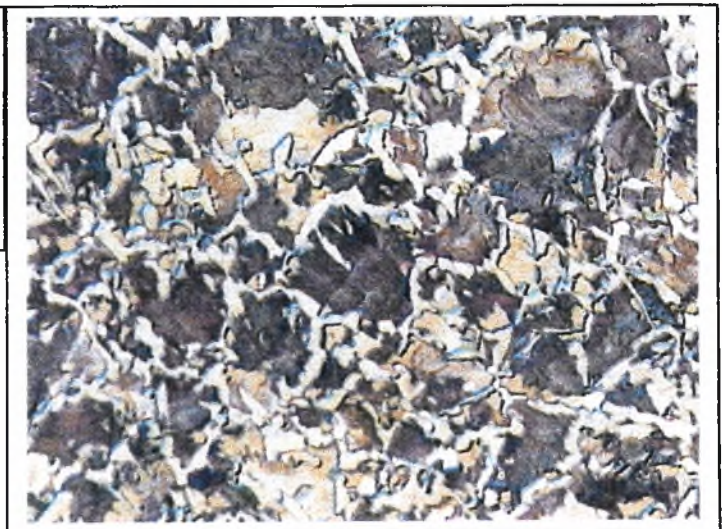
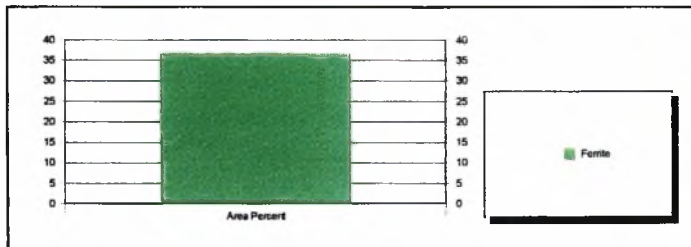


Comment:

QPhase Report: Standard ASTM E562

<i>Customer:</i>	University of Thessaly (Lab of materials)	<i>Specimen ID:</i>	No10
<i>Heat Treatment:</i>		<i>Preparation:</i>	
<i>Operator:</i>	DefaultSupervisor	<i>Analysis Method</i>	Auto
<i>Origin of Sample:</i>		<i>Material Type:</i>	Ck45
<i>Date:</i>	17/04/2000	<i>Time:</i>	13:57:40
<i>Location:</i>		<i>Orientation:</i>	
<i>Magnification:</i>	10 x + 0.5 x	<i>Calibration:</i>	0.84 um/pixel
<i>Number of Fields:</i>	5	<i>Field Area:</i>	0.306 mm ²

Phase	Ferrite
Area %	36.642
Max %	42.203
Min %	34.766
Mean % per Field	36.642
Std. Dev	3.154
95 % CI	4.378
Rel. Accuracy	11.948
Fields Measured	5

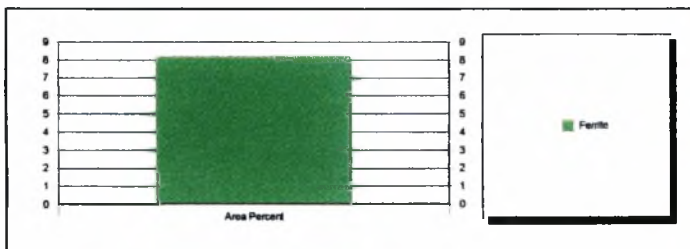


Comment:

QPhase Report: Standard ASTM E562

<i>Customer:</i>	University of Thessaly (Lab of materials)	<i>Specimen ID:</i>	No11
<i>Heat Treatment:</i>		<i>Preparation:</i>	
<i>Operator:</i>	DefaultSupervisor	<i>Analysis Method</i>	Auto
<i>Origin of Sample:</i>		<i>Material Type:</i>	Ck45
<i>Date:</i>	17/04/2000	<i>Time:</i>	14:06:49
<i>Location:</i>		<i>Orientation:</i>	
<i>Magnification:</i>	10 x + 0.5 x	<i>Calibration:</i>	0.84 um/pixel
<i>Number of Fields:</i>	5	<i>Field Area:</i>	0.306 mm²

Phase	Ferrite
Area %	8.191
Max %	9.518
Min %	6.786
Mean % per Field	8.191
Std. Dev	1.047
95 % CI	1.454
Rel. Accuracy	17.747
Fields Measured	5

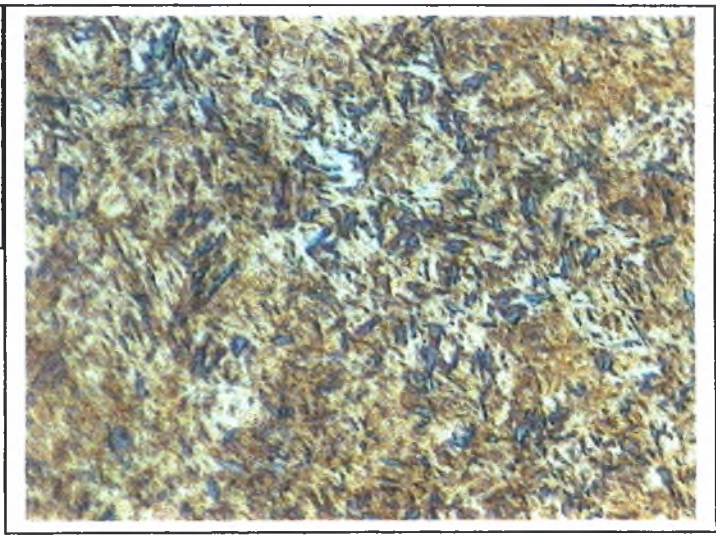
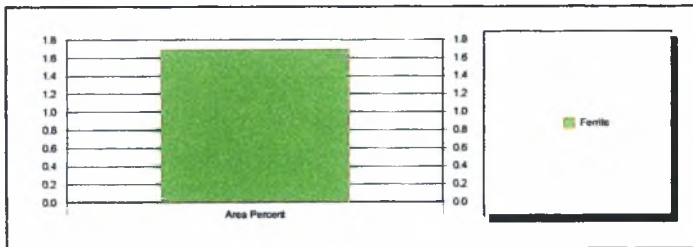


Comment:

QPhase Report: Standard ASTM E562

<i>Customer:</i>	University of Thessaly (Lab of materials)	<i>Specimen ID:</i>	No12
<i>Heat Treatment:</i>		<i>Preparation:</i>	
<i>Operator:</i>	DefaultSupervisor	<i>Analysis Method</i>	Auto
<i>Origin of Sample:</i>		<i>Material Type:</i>	Ck45
<i>Date:</i>	17/04/2000	<i>Time:</i>	14:36:07
<i>Location:</i>		<i>Orientation:</i>	
<i>Magnification:</i>	50 x + 0.5 x	<i>Calibration:</i>	0.17 um/pixel
<i>Number of Fields:</i>	5	<i>Field Area:</i>	0.012 mm ²

Phase	Ferrite
Area %	1.690
Max %	1.943
Min %	1.497
Mean % per Field	1.690
Std. Dev	0.201
95 % CI	0.279
Rel. Accuracy	16.519
Fields Measured	5

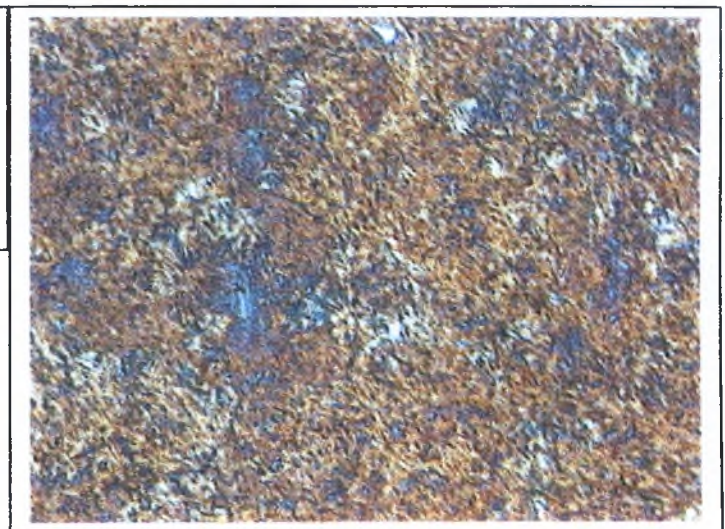
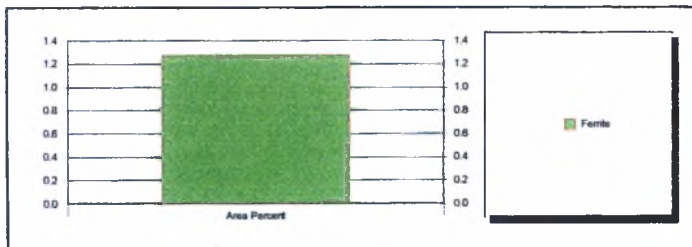


Comment:

QPhase Report: Standard ASTM E562

<i>Customer:</i>	University of Thessaly (Lab of materials)	<i>Specimen ID:</i>	No13
<i>Heat Treatment:</i>		<i>Preparation:</i>	
<i>Operator:</i>	DefaultSupervisor	<i>Analysis Method</i>	Auto
<i>Origin of Sample:</i>		<i>Material Type:</i>	Ck45
<i>Date:</i>	17/04/2000	<i>Time:</i>	15:00:31
<i>Location:</i>		<i>Orientation:</i>	
<i>Magnification:</i>	20 x + 0.5 x	<i>Calibration:</i>	0.42 um/pixel
<i>Number of Fields:</i>	5	<i>Field Area:</i>	0.076 mm ²

Phase	Ferrite
Area %	1.278
Max %	1.965
Min %	0.859
Mean % per Field	1.278
Std. Dev	0.418
95 % CI	0.581
Rel. Accuracy	45.415
Fields Measured	5



Comment: