
ANWENDUNG IN DER METALLURGIE

**Einführung in die Computer-Simulation
instationärer metallurgisch-wärmetechnischer
Prozesse**

Von

Dr. sc. techn. Fred Esser
Dipl.-Math. Brigitte Esser

Mit 86 Bildern und 128 Tabellen

Fachbereich Materialwissenschaft
der Techn. Hochschule Darmstadt

Inv.-Nr.: 387



VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie · Leipzig

Inhaltsverzeichnis

1.	Einführung in die Methode der Computersimulation	13
2.	Einführung in die FORTRAN-Programmierung	17
2.1.	Einleitung	17
2.2.	Beschreibung von FORTRAN	17
2.2.1.	FORTRAN-Zeichenvorrat, Variable, Ausdrücke	18
2.2.2.	Arithmetische Ersetzungsanweisung und arithmetische Anweisungsfunktionen	19
2.2.3.	Befehle der Programmsteuerung	20
2.2.4.	Indizierte Variable, Felder und Feldreservierung	21
2.2.5.	DO-Schleifen	21
2.2.6.	Vereinfachte Darstellung der Eingabe und Ausgabe von Daten	22
2.2.7.	FORTRAN-Hauptprogramme	22
2.2.8.	SUBROUTINE- und FUNCTIONS-Unterprogramme	22
2.3.	Ergänzende Bemerkungen zur Programmierung und Grundsätze zur Gestaltung von Programmen	23
3.	Modelle für Wärmeleitungs- und Diffusionsvorgänge	25
3.1.	Grundlagen	25
3.1.1.	Explizite Lösungsmethode	26
3.1.2.	Modellentwicklung auf der Grundlage des expliziten Verfahrens	27
3.1.3.	Implizite Methode von Crank-Nicolson	27
3.1.4.	Methode der finiten Elemente	30
3.2.	Berechnung der eindimensionalen Wärmeleitung und Diffusion	31
3.2.1.	Wärmeleitung für konstante Stoffwerte	31
3.2.2.	Unterprogramm TRAF01	33
3.2.3.	Anwendung von TRAF01 für eindimensionale Diffusion	34
3.2.4.	Einfaches Beispiel für TRAF01-Anwendung	35
3.3.	Zweidimensionale instationäre Wärmeleitungs- und Diffusionsvorgänge	36
3.3.1.	Einführung	36
3.3.2.	Programmausführung mit Zuordnungsmatrix	38
3.3.3.	TRAF01-Anwendung für die näherungsweise Berechnung der Auflösung eines Gefügebestandteils in einem Gefügebereich	39
3.4.	Programmvariante für mehrdimensionale, instationäre Wärmeleitungs- und Diffusionsvorgänge	42
3.4.1.	Einführung	42
3.4.2.	Unterprogramm TRAF04	45
3.4.3.	TRAF04-Anwendung für die näherungsweise Berechnung der Blockerwärmung im Tiefofen	47

3.5.	Programme für unterschiedliche Anwendungsfälle	48
3.6.	Programmvariante für das implizite Differenzenverfahren	49
3.6.1.	Vorprogramm zur Berechnung der Gleichungskoeffizienten	49
3.6.2.	Programmentwicklung für $\dot{q} = \text{const}$	50
3.6.3.	Ergebnisse vergleichender Untersuchungen	52
3.7.	Zusammenfassung	52

4. Wärmetechnisch-metallurgische Prozeßmodelle durch Kopplung von Teilvorgängen 54

4.1.	Einführung	54
4.2.	Phasenumwandlung – Mathematische Berechnung der Wärmetönung bei Phasenübergängen fest \leftrightarrow fest und flüssig \leftrightarrow fest	54
4.2.1.	Phasenübergang mit Haltepunkt – Programm LISO01	55
4.2.2.	Phasenübergang im Temperaturbereich – Programm LISO02	57
4.3.	Berechnung der Temperaturerhöhung bei der Verformung metallischer Werkstoffe	59
4.3.1.	Eindimensionales Modell zur Berechnung der Umformwärme	59
4.3.2.	Programmentwicklung für UMF00 und UMF01	61
4.4.	Diffusion mit überlagerter Entmischung	62
4.4.1.	Einführung	62
4.4.2.	Programm MAKROS (Makroseigerung)	64
4.5.	Energie- und Massetransport in Schüttungen beim Niederschmelzen	67
4.5.1.	Einführung	67
4.5.2.	Programm LISO03 für das flächenhafte Niederschmelzen	68
4.5.3.	Prozeßsimulation eines flächenhaften Niederschmelzvorganges	70
4.6.	Berechnung der Energieübertragung in brennstoffbeheizten, metallurgischen Öfen	70
4.6.1.	Strahlungsaustausch zwischen Gas und Wand – Programm EPSGAS	72
4.6.2.	Berechnung der Energieübertragung für das System Ofenraum/Wärmegut	74
4.7.	Prozeßmodelle für chemische Reaktionen	77
4.7.1.	Einführung	77
4.7.2.	Programm REAC01	79
4.7.3.	Programm REAC02	81
4.7.4.	Übungsbeispiele	84
4.8.	Zusammenfassung	88

5. Modellbildung zufallsbedingter Prozesse – Monte-Carlo-Simulation 90

5.1.	Grundlagen	90
5.2.	Zufallszahlen	90
5.3.	Lösung partieller Differentialgleichungen	92
5.3.1.	Grundlagen	92
5.3.2.	Programm TRAFMC zur Lösung des Randwertproblems für die Laplace-Differentialgleichung	92
5.4.	Werkstofftechnische Prozeßmodelle auf der Grundlage der Monte-Carlo-Simulation	96
5.5.	Zusammenfassung	100

6.	Computer-Simulation auf Mikrorechnern	101
6.1.	Einführung	101
6.2.	Dateneingabe im Dialogbetrieb	103
6.3.	Programmerweiterung für die PC-Version von MAKROS	106
6.4.	Programme für die grafische Darstellung der Berechnungsergebnisse	106
6.5.	PC-Stapelverarbeitung	110
6.6.	Ergebnisse des PC-Dialogs	110
6.7.	Zusammenfassung	113
7.	Prozeßmodelle für den Energietransport an Grenzflächen	114
7.1.	Mathematische Beschreibung von Strömungsvorgängen	114
7.1.1.	Grundlagen	114
7.1.2.	Numerische Lösung der Navier-Stokesschen Differentialgleichung	116
7.1.3.	Programm MAC01	118
7.1.4.	Programm zur Simulation von Strömungsvorgängen	120
7.1.5.	Erläuterung weiterer Ergebnisse	125
7.1.6.	Modellrechnungen zum energetischen Leistungsverhalten von Plasma-bögen	127
7.2.	Energieübertragung durch Strahlung	131
7.2.1.	Berechnungsverfahren	131
7.2.2.	Programmentwicklung für Energieaustausch durch Strahlung	132
7.2.3.	Anwendungsbeispiel – Energieaustauschberechnung in einem Durchlaufofen	139
7.3.	Prozeßmodell für die Energieübertragung an Grenzflächen unter Berücksichtigung einer Spaltbildung	142
7.3.1.	Einführung	142
7.3.2.	Prozeßmodell	142
7.3.3.	Simulationsversuche zur randnahen Stahlerstarrung	149
8.	Computer-Simulation des Energie- und Massetransportes in Schüttungen beim Niederschmelzen	151
8.1.	Ergebnisse der Prozeßanalyse	151
8.2.	Prozeßmodell für das Einschmelzen in UHP- und Plasmaöfen	155
8.3.	Prozeßmodelle für ausgewählte Vorgänge	159
8.3.1.	Energietransport im Kraterbereich und Strahlungsaustausch im Ofeninnenraum mit begrenzter Sichtbarkeit der Austauschflächen	159
8.3.2.	Vertikaler und horizontaler Masse- und Energietransport in Schüttungen beim Niederschmelzen	161
8.3.3.	Prozeßnachbildung technologischer Besonderheiten	161
8.4.	Ergebnisse der Computer-Simulation	162
8.4.1.	Modelljustierung	162
8.4.2.	Ergebnisse der Prozeßsimulation bei UHP- und Plasmaschmelzöfen	164
8.5.	Programm-Entwicklung für die Prozeßsimulation von Niederschmelzvorgängen – Anwendungsbeispiel	167

8.5.1.	Aufgabenstellung	168
8.5.2.	Berechnung der Energieübertragung und des Energietransports	168
8.5.3.	Berechnung des Niederschmelzvorganges	169
8.5.4.	Prozeßsimulation	172
9.	Prozeßsimulation nichtkontinuierlicher und kontinuierlicher Erstarrungsvorgänge	174
9.1.	Blockerstarrung in der Kokille	177
9.1.1.	Modellvorstellungen	177
9.1.2.	Ergebnisse von Modelluntersuchungen	178
9.2.	Umschmelzvorgänge unter Vakuum – Berechnung der Blockerstarrung beim EMO-Verfahren	181
9.2.1.	Prozeß- und Modellgrundlagen	181
9.2.2.	Möglichkeiten und Grenzen der Prozeßnachbildung – Ergebnisse der Modelljustierung	182
9.2.3.	Extrapolationsrechnungen für die thermischen Erstarrungsbedingungen bei großen Rundblöcken	186
9.3.	Programme für Verfahrensstufen bei kontinuierlichen Erstarrungsvor- gängen	188
9.4.	Anwendungsbeispiel – Prozeßsimulation des Schmelzspinnverfahrens	192
9.4.1.	Grundlagen	192
9.4.2.	Programm-Notierung	195
9.4.3.	Simulationsergebnisse	195
10.	Einsatzguterwärmung in Mehrzonen-Durchlauföfen	200
10.1.	Einführung	200
10.2.	PC-Simulationsmodell	200
10.2.1.	Modellkonzeption	200
10.2.2.	Wärmetechnische Modellgrundlagen	201
10.3.	Ergebnisse der Untersuchung eines Beispiels mit dem Beratersystem »Prozeßuntersuchung von Durchlauföfen«	203
10.3.1.	Kurzbeschreibung eines Beispiels	203
10.3.2.	Einsatzguterwärmung mit vorgegebener Chargierfolge	204
10.3.3.	Skid-Marks-Simulation	212
10.3.4.	Prozeßsimulation einer Chargierfolge	215
11.	Prozeßsimulation Warmwalzen von Warmbreit- band – Temperatur- und Walzkraftmodell	223
11.1.	Einleitung	223
11.2.	Vereinfachtes Prozeßmodell für das Warmwalzen	224
11.2.1.	Vorbetrachtungen	224
11.2.2.	Prozeßablauf und Erläuterung von Prozeßelementen	225
11.2.3.	Modellgestaltung und Teilmodelle für den Prozeßablauf – Eingabewerte im PC-Dialog	226

11.2.4.	Wärmeableitung und Wärmeleitung	230
11.2.5.	Walzvorgang	230
11.2.6.	Programm UMF01 für die Prozeßsimulation	230
11.3.	Ergebnisdarstellung im PC-Dialog	234
11.4.	Zusammenfassung	236

12. Prozeßsimulation von Gefügeeigenschaften 238

12.1.	Einleitung und Vorbetrachtungen	238
12.2.	Computer-Simulation der Gefügeentwicklung beim Warmbreitbandwalzen	239
12.2.1.	Grundlagen	239
12.2.2.	Programm-Realisierung	240
12.2.3.	Ergebnisdarstellung im PC-Dialog	242
12.3.	Zusammenfassung	245
	Programm-Notierungen im Überblick	246
	Sachwörterverzeichnis	247