

A fizikai és matematikai szimuláció helye és szerepe a műszaki anyagtudományban

A dolgozat a piaci igények kielégítésének folyamatából kiindulva és figyelembe véve a műszaki anyagtudományról alkotott elképzelésünket, vázolja fel a műszaki/technológiai fejlesztés egy lehetséges stratégiáját. A műszaki anyagtudomány négy tartalmi eleme közül napjainkban a fizikai és matematikai szimuláció meghatározó szerepet játszik, és a műszaki fejlesztés hatékonyságát lényegében a szimulációs technikák alkalmazásának színvonala határozza meg. A lehetséges fejlesztési stratégiát az acél szélesszalagok meleghengerrési technológiájával kapcsolatban tárgyalja a dolgozat. Az ebben foglaltak egyben a TÁMOP-4.2.2. projekt 1. kutatási területének koncepcióját is jelentik.

Bevezetés

Mint minden termelő tevékenység, így a vaskohászaté is, piaci igények kielégítésére irányul. A világ acéltermékek iránti igénye napjainkban 1,3 milliárd tonna körül van, vagyis a Föld lakosai egyenként minden évben mintegy 200 kg acélt „fogyasztanak” el. Technikatörténettel foglalkozó kutatók kiszámították, ha a jelenlegi igényeket az 50 évvel ezelőtti színvonalon elégítené ki a vaskohászat, legalább háromszor 1,3 milliárd tonna acélra lenne szükség. Ez az egyetlen adat is bizonyítja, hogy a világ vaskohászatában mélyreható változások zajlottak le az elmúlt 50 évben, technikai és technológiai szempontból egyaránt.

A világ vaskohászatában lezajlott technikai és technológiai fejlődés hátterében minden bizonnyal a műszaki anyagtudományban elért eredmények állnak. Ezeknek az eredményeknek a létrejöttében napjainkban

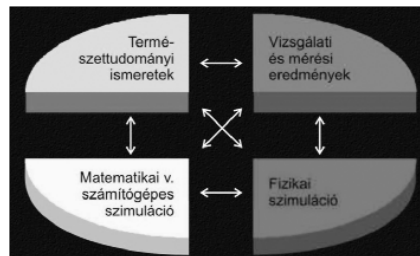
a fizikai és matematikai szimulációnak, modellezésnek kiemelkedő szerepe van.

A kiinduló gondolatom az, hogy a piac szereplői lényegében csak a termékkel szemben támasztott funkcionális igényt fogalmazzák meg, míg a termelő vállalatoknak illetve a vállalatok műszaki szakembereinek ezt az igényt le kell „fordítaniuk” az anyagtulajdonságok nyelvére, majd az elvart tulajdonság együttesű terméket az adott gyártóberendezéssel, vagyis adott technikai feltételek mellett, tudatosan megtervezett technológiával elő kell állítaniuk.

A műszaki anyagtudomány tartalmi elemei

A műszaki anyagtudomány, mint a vaskohászati kutatás háttere, négy forrásból táplálkozik (1. ábra). Ezek a következők:

- a természettudományok által feltárt törvények,



1. ábra. A műszaki anyagtudomány négy tartalmi eleme

- a korszerű vizsgálati és mérési módszerek által szolgáltatott információk,
- a fizikai szimuláció által szolgáltatott információk,
- a matematikai szimuláció által szolgáltatott információk.

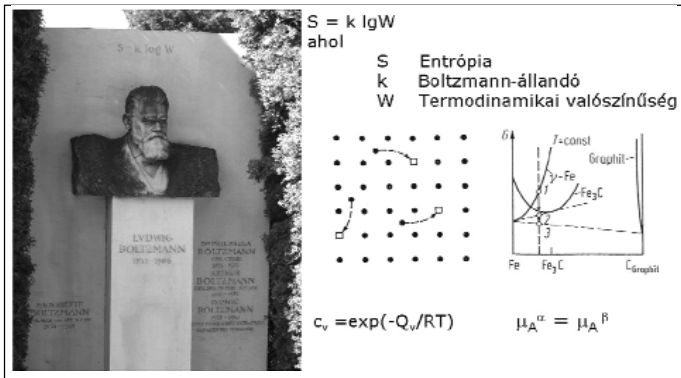
Nézzünk néhány példát a négy tartalmi elemre vonatkozóan.

A műszaki anyagtudomány a természettudomány törvényeit mikroszerszámokként alkalmazza. A Boltzmann-féle és a statisztikus mechanika elvein alapuló entrópiadefiníció nélkül nem érthetnénk meg, hogy a kristályhibák közül az üres rácshelyeknek és az intersztfíciós atomoknak adott hőmérsékleten miért van, míg a diszlokációknak és a felület-szerű hibáknak miért nincs egyensúlyi koncentrációjuk (2. ábra). A Boltzmann-féle entrópia definíció szükséges például a kémiai potenciál fogalmának értelmezéséhez is, amely alapján az egymással egyensúlyban lévő fázisok összetételét jelölhetjük ki.

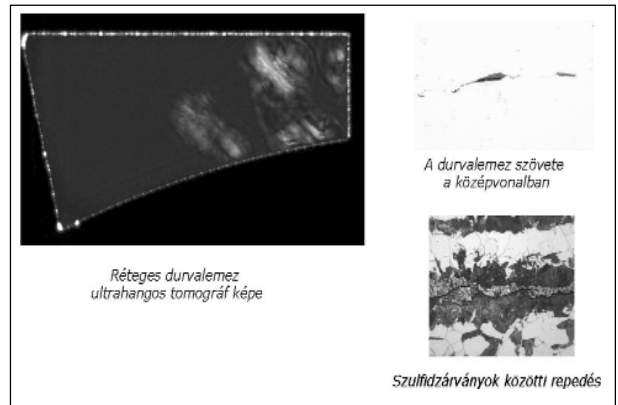
A mérési- és vizsgálati technikák nyújtotta információk köréből két példát hozok fel: egyet a roncsolásmentes, egyet a roncsolásos vizsgálatok területéről. A roncsolásmentes vizsgálatok körében egyre terjednek az egészségügyben már széles körben alkalmazott diagnosztikai eljárások, pl. az ún. ultrahangos tomográfia. Erre mutat példát egy réteges acéllemez vizsgálata kapcsán a következő ábra (3. ábra).

A roncsolásos vizsgálatok köréből a pásztázó elektronmikroszkóphoz

Verő Balázs technológus szakos okl. kohómérnök, egyetemi tanár, az MTA doktora. 1967-ben végzett az NME Kohómérnöki Karán. 1967–93-ig a Vasipari Kutató Intézet, ill. jogutódja, a Vasipari Kutató és Fejlesztő Vállalat munkatársa. 1993–2007-ig a Bay Zoltán Anyagtudományi és Technológiai Alapítvány Anyagtudományi és Technológiai Intézetének tudományos igazgatóhelyettese volt, jelenleg a Dunaújvárosi Főiskola Műszaki Intézetében egyetemi tanár. Az OMBKE-nek 1965 óta tagja, másfél évtizeden át a BKL Kohászat felelős szerkesztője volt. A Miskolci Egyetem Természettudományi Habilitációs és a BME Gépészmérnöki Karának Habilitációs és doktori tanácsának tagja, az MTA Anyagtudományi és Technológiai bizottságának elnöke. Publikációs tevékenységében adatai megtalálhatók a MTMT adattárában.



■ 2. ábra. A természettudományos törvények, mint a műszaki anyagtudomány egyik tartalmi eleme: a Boltzmann-féle entrópia fogalom. (c_v : az üres rácshelyek koncentrációja, Q_v : az üres rácshely képződésének aktiválási energiája, T: abszolút hőmérséklet, R: egyetemes gázállandó. μ_A^α és μ_A^β : az alfa és béta fázis kémiai potenciálja.)

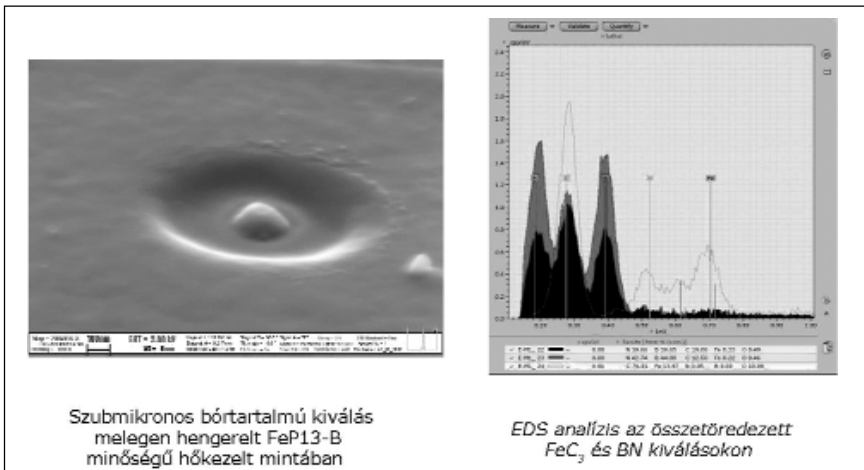


■ 3. ábra. A mérés- és a vizsgálati technika által szolgáltatott információk, mint a műszaki anyagtudomány egyik tartalmi eleme: réteges acéllemez ultrahangos tomográffal való vizsgálata

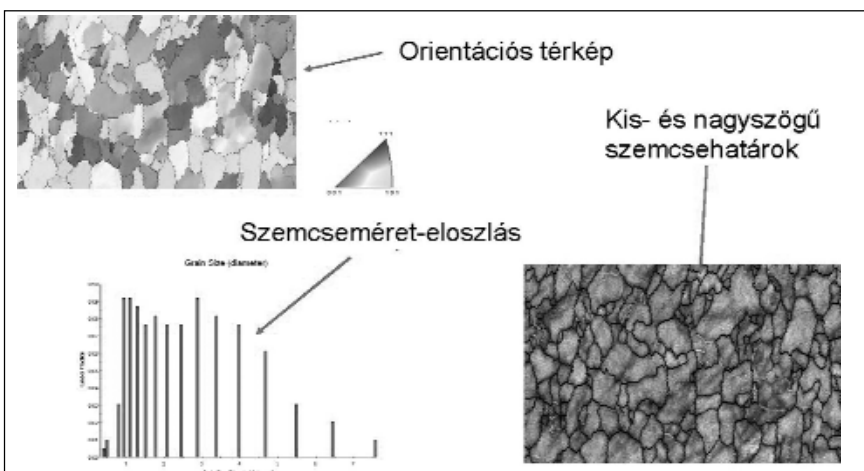
kapcsolódó eredményeket hozom fel példaként. A korszerű, téremissziós katóddal működő pásztázó elektronmikroszkópok felbontóképessége ma

már az 1 nm-es tartományban van, így ez a technika sok esetben helyettesítheti, kiválthatja a transzmissziós elektronmikroszkópiát. A pásztázó

elektronmikroszkópnak szerves kiegészítője a hullámhossz- és/vagy energiadiszerzív elemző rendszer. Az EDS-rendszerek is alkalmasak ma már a kis rendszámú elemek, mint pl. a B kimutatására, sőt azok mennyiségi meghatározására is (4. ábra).



■ 4. ábra. A mérés- és a vizsgálati technika által szolgáltatott információk, mint a műszaki anyagtudomány egyik tartalmi eleme: kis rendszámú elemek kimutatása SEM+EDS technikával



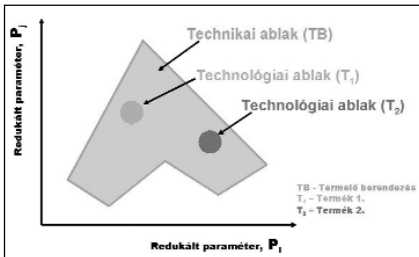
■ 5. ábra. A mérés- és a vizsgálati technika által szolgáltatott információk, mint a műszaki anyagtudomány egyik tartalmi eleme: kristallitok egyedi orientációjának és az őket elválasztó szemcsehatárok típusának meghatározása SEM+EBSD technikával

A nagy felbontású képalkotás a kis rendszámú elemek kvantitatív meghatározására is képes pásztázó elektronmikroszkópos technika napjainkra újabb lehetőséggel gazdagodott. Működik az egyes kristallitok kristálytani orientációjának és a közöttük húzódó szemcsehatár típusának meghatározására, az egyes kristallitokról származó Kikuchi-ábrák számítógépes értékelése révén (5. ábra).

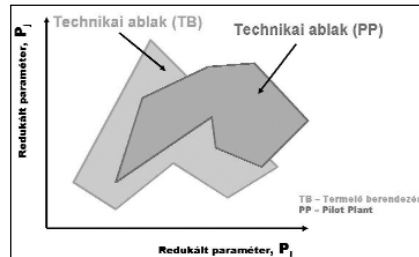
A mérési és vizsgálati technikák hihetetlenül gyors fejlődésével azonban szükségszerűen együtt jár ezeknek az eszközöknek egyre gyorsuló „erkölcsi” amortizációja, ami a laboratóriumok eszközállományának szinte permanens megújítását igényli.

Ahhoz, hogy a műszaki anyagtudomány további két elemének, a fizikai és matematikai szimulációnak a KF-folyamatban elfoglalt helyét és betöltött szerepét helyesen tudjuk értékelni, az elemzés körét ki kell terjeszteni az üzemi és félüzemi kísérletekre is, hiszen a kutatás-fejlesztési folyamat a kidolgozott technológia ipari körülmények közötti végrehajtásával fejeződik csak be.

Ehhez az elemzéshez azonban az is szükséges, hogy a termelő- és a kísérleti berendezések sajátosságait a fizikai és matematikai szimuláció



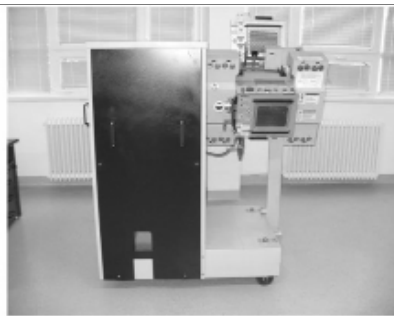
■ 6. ábra. Az ipari termelőberendezés technikai és a gyártható termékek technológiai ablakának viszonya



■ 7. ábra. A pilot plant technikai ablaka és ennek helyzete az ipari termelőberendezés technikai ablakához viszonyítva



Gleeble 3800 fizikai szimulátor



Hydrawedge egység

■ 8. ábra. A Gleeble 3800 típusú termomechanikus szimulátor

sajátosságaival együtt azonos szempontok szerint értékeljük. Vezessük be a technikai és technológiai ablak fogalmát.

A technikai és a technológiai ablak fogalma

Ennek a két fogalomnak a megvilágításához induljunk ki valamely ipari termelőberendezés műszaki jellemzőiből és valamely termék előállításához szükséges technológiai utasításából. Példaként az ISD Dunafer Zrt. félgyártatóságos meleghengerművét vettem. A műszaki adottságokat az állványok száma, az állványok terhelhetősége, a munkahengerek átmérője, a hengerek maximális fordulatszáma stb. határozza meg, vagyis számos paraméter. A technikai korlátok így csak egy sokdimenziós térben lennének ábrázolhatók. Mondanivalóm megvilágításához elegendő azonban a 2D-s ábrázolási forma is (6. ábra). A termelőberendezés technikai ablakán belül lehet csak üzemszerű gyártástechnológiát végrehajtani, vagy kutatás-fejlesztési célú üzemi kísérletet lefolytatni.

Régi törekvés, hogy a gyártási kísérleteket kísérleti gyártósorokon, ún. pilot planteken hajtsuk végre. A pilot plantek alapvető jellemzője,

hogy az ipari termelőberendezések „kicsinyített” másai, tehát a kísérleti üzemben az alakítás például továbbra is hengerek között történik. Korábban talán jellemző lehetett a pilot planteknek az üzemi termelőberendezéseknél magasabb színvonalú műszerezettség, ez az állítás ma már csak részben lehet igaz. Az üzemi termelőberendezés és a pilot plant fizikai ablaka egymást átfedő jellegű (7. ábra). Lényeges, hogy van olyan technológiai variáció, amely csak a termelőberendezésen, és van olyan, amely csak a pilot berendezésen hajtható végre.

A fizikai szimuláció lényege

A mai fogalmaink szerinti fizikai szimulátorok – például a Dunaújvárosi Főiskolán letelepített és üzembe helyezett Gleeble 3800 típusú termomechanikus szimulátor – nem valamely ipari termelőberendezés „kicsinyített” mása (8. ábra). A fizikai szimulátoroknak képeseknek kell lenniük arra, hogy a megmunkálandó anyagot az ipari termelő folyamatban érvényesülő hatásokkal megegyező igénybevételnek tegyék ki, legyenek ezek a hatások mechanikaiak, termikusak vagy akár korróziósak. A fizikai szimulátorok sokcélú berendezések.

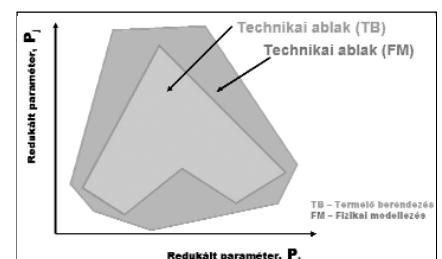
A Gleeble 3800 típusú termomechanikus szimulátorban például a meleghengertést az ún. Ford-módszerrel szimuláljuk, hiszen a hengertés nem más, mint forgó hengerekkel folyamatossá tett nyújtó kovácsolás. A berendezés Hydrawedge egysége azért egyedülálló, mert az alakváltozás mértékét és sebességét is képes az előírt, programozott értéken tartani. A Gleeble 3800 típusú termomechanikus szimulátor alkalmas továbbá hegesztési hőfolyamatok, hőkezelési-, termikus fázisát-, gyorsított kúszási vizsgálatok elvégzésére is, sőt a dermedési folyamatok néhány jelensége is előnyösen vizsgálható ezzel a berendezéssel.

A fizikai szimulátor akkor hatékony kutatási eszköz, ha technikai ablaka az ipari berendezés technikai ablakát magában foglalja, sőt annál tágabb (9. ábra.).

Ennek a megállapításnak azonban nemcsak egy termelőberendezésre vonatkozóan kell igaznak lennie, hanem célszerűen többféle esetre is. Lényeges, hogy a fizikai szimuláció mindig valószerű. A fizikai szimulátorokkal szemben azt is megköveteljük, hogy bennük további vizsgálatokra alkalmas méretű mintákat kezelhessünk. A fizikai szimulátorok segítségével végzett munka 5–10-szer hatékonyabb, mint pl. a pilot berendezéssel végzett.

A matematikai szimuláció lényege

Áttérve a műszaki anyagtudomány negyedik tartalmi elemére, a számítógépes modellezésre, a reális világból a virtuális világba jutunk. A számítógépes szimuláció, amely végeredményben anyagtudományi folyamatokat leírni képes szoftverek futtatását igényli, általában nem valószerű,



■ 9. ábra. A fizikai szimulátor technikai ablaka és ennek helyzete az ipari termelőberendezés technikai ablakához viszonyítva

bálgatás nélkül. Ha adott tulajdonságegyütteshez keresünk összetételt és technológiát, akkor szükségszerűen felvetődik az a kérdés is, hogy bármely tulajdonságegyütteshez hozzárendelhető-e valamely létező anyag vagy sem.

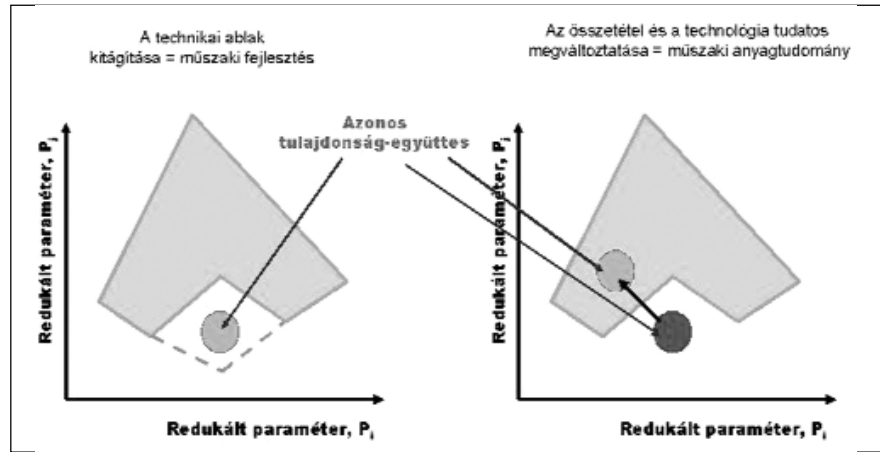
A jelenlegi tudásunk alapján az ún. reciprocitás elv nem érvényesülhet a tulajdonságok és az anyagok össze-tétele és szerkezete közötti kapcsolatrendszer teljes körére. Az anyagtudomány fejlődése azonban feltétlenül ennek az érvényességi körnek a kibővülése irányában hat, gondoljunk csak a társított anyagokra.

Visszatérve a meleghengerlés konkrét példájára, amennyiben sikerült a megfelelő meleghengerlési szűr-
rástervet és hűtési stratégiát megtalálni, a jellemző adatokat átvihetjük – akár online – a termomechanikus szimulátorba, és ott a megfelelő acél-mintán elvégezzük a fizikai szimulációt. A tényleges ipari folyamat idejével megegyező idő eltelte után kezünkbe vehetjük a próbatestet és a mérési eredményeket. Metallográfiai úton ellenőrizzük a szövetet, lehetőség szerint az ausztenit újrakristályosodásának mértékét is. A matematikai és fizikai szimuláció eredményeinek összesítése már lehetővé teszi a megalapozott üzemi kísérlet végrehajtását.

Mivel mind a matematikai, mind a fizikai szimuláció technikai ablaka tágabb, mint a termelőberendezésé, lényegében két esettel találhatjuk magunkat szembe. Kedvező esetben a szimulációs módszerekkel meghatározott technológiai ablak az ipari termelőberendezés technikai ablakán belül van, ekkor az üzemi kísérlet végrehajtható.

A piaci igények folyamatos változása elsősorban a speciális tulajdonságegyüttesű acéltermékek iránti fokozott igények miatt szükségszerűen egyre gyakrabban olyan technológiai variációk megvalósítását követeli meg, amely technológiai ablaka az ipari termelőberendezés technikai lehetőségén kívül esik.

Amennyiben ez a helyzet alakul ki, a vállalat kétféle megoldási módot értékelhet. Az első esetben a megoldást az ipari termelőberendezés technikai adottságainak bővítése jelenti (14.a ábra). Ez a megoldás természetesen igen jelentős



■ 14. ábra. Egy új tulajdonság-együttesű termék előállításának lehetőségei
 a) technikai adottságok fejlesztésével
 b) új összetételű anyag és módosított technológia alkalmazásával

költségigényű lehet, és megvalósítása viszonylag hosszú időt vesz igénybe.

A második esetben – hangsúlyozva azt, hogy adott tulajdonságegyüttesű terméket kívánunk előállítani – módosítanunk kell az adott technológiai folyamatban feldolgozandó anyag összetételét, és ehhez az összetételhez kell kidolgozni a technológiát. Kedvező esetben az új technológiai variáció már beleeshet az ipari termelőberendezés technikai ablakába (13.b ábra).

A vázolt folyamat maga a tudatos anyagtervezés és -előállítás folyamata, amely mai fogalmaink szerint a műszaki anyagtudomány lényegét jelenti.

Összefoglalás

Az eddig elmondottak összegzéseként eljuthatunk a virtuális üzemi, a virtuális termék és a virtuális terméktulajdonságok fogalmakhoz. Egy modern vaskohászati üzemi, pontosabban annak működtetése nem képzelhető el folyamatirányítás, folyamatirányító szoftverek nélkül. Ezek legfejlettebb változataival nem csak a technológiai paramétereiket „tartjuk” kézben, hanem a termék tulajdonságait is számítjuk.

Az egyes termelési folyamatok folyamatirányító és tulajdonságbecslő szoftverei egymás után kapcsolva létrehozzák az ún. virtuális vaskohászati üzemet. Nyilvánvaló, hogy a virtuális üzemi a felsőfokú oktatási intézmények, a kutató intézetek illetve a vállalatok innovációs részlegeiben

működtethető. Ezeknek a szoftvereknek a fejlesztése is lényegében ugyanezekben a munkahelyeken történhet, az üzemi szakemberek tapasztalatainak messzemenő figyelembevételével.

Ha az elmondottak összefoglalásaként elfogadjuk, hogy a vázolt kutatás-fejlesztési stratégia eredményes és hatékony, akkor ebből a konszenzusból – véleményem szerint – az is levezethető, hogy a 21. század első harmadában működő alkalmazott kutatást végző intézményeknek milyen struktúrájának, milyen személyi állományúnak és milyen felszereltségűnek kell lennie.

Köszönetnyilvánítás

Köszönetet mondok a felsorolt kollégáknak az egyes ábrák anyagainak rendelkezésemre bocsátásáért:

- Dénes Éva, ISD Dunaferri Zrt.,
- Tóth Attila Lajos, KFKI-MFA,
- Dobránszky János, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem,
- Szabó Péter János, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem,
- Jenei István, Dunaújvárosi Főiskola,
- Kardos Ibolya, Dunaújvárosi Főiskola,
- Sebő Sándor, Hujber Zoltán, Illés Péter, ISD Dunaferri Zrt.,
- Farkas Péter, Dunaújvárosi Főiskola,
- Felde Imre, Bay Zoltán Anyagtudományi és Technológiai Intézet.