

«Высокие интеллектуальные технологии образования и науки».

Материалы X Международной научно-методической конференции. С.301-302, 2003. © Санкт-Петербургский государственный технический университет, 2003

РАЗВИТИЕ АППАРАТА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ФАЗОВЫХ РАВНОВЕСИЙ В ЛИТЕЙНЫХ СПЛАВАХ

Савельев К.Д., Голод В.М., Радгударзи Т.А.

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

В работе предложен метод решения основной задачи термодинамического моделирования многофазных равновесий: отыскание минимума энергии Гиббса многокомпонентной системы - применительно к равновесиям, реализующимся при первичной кристаллизации сплавов.

Разработанные алгоритмы позволяют при расширении понятия химического потенциала компонента в фазе переменного состава унифицировать математическую форму записи условия равновесия различного типа фаз в виде

$$\mu_k^\alpha = \mu_k^\beta = \dots = \mu_k, \quad (*)$$

где μ_k – химический потенциал компонента k , состоящего из нескольких химических элементов, в фазе φ .

Система нелинейных уравнений (*) решается итерационным способом при линейризации уравнений по неизвестным, что позволяет получать их значения с достаточной точностью при малом времени счета. Сходимость процедуры при корректном задании начального приближения проверена многочисленными вычислительными экспериментами в том числе с участием фаз одинаковой физико-химической природы, концентрационная зависимость энергии Гиббса которых описывается функцией с двумя минимумами и одним максимумом. Выбор стабильного равновесия из ряда возможных производится на основе критерия максимальной температуры ликвидуса.

На основе предложенной методики разработаны алгоритмы и программные модули для расчета равновесий конденсированных фаз любой физико-химической природы (фазы постоянного, переменного, полупостоянного состава, фазы с химическим упорядочением), которые эффективно применены при анализе диаграмм состояния многокомпонентных промышленных сплавов (стали, чугуны, силумины и др.).

В рамках работы предусмотрено активное включение научных, методологических и технологических результатов, получаемых на основе современных достижений химической термодинамики материалов, в учебный процесс подготовки бакалавров, инженеров, магистров и аспирантов – специалистов нового профиля на базе реализации концепции наукоемких технологий образования, а также решение важной социальной проблемы – восполнение потери квалифицированных инженерных кадров на машиностроительных и металлургических пред-

приятиях Санкт-Петербурга на основе радикального преобразования статуса инженера-металлурга в условиях изменившейся ориентации производства и экономики в переходный период и на ближайшую перспективу.

Работа проведена при совместной финансовой поддержке Министерства образования РФ и Комитета по науке и высшей школе Администрации Санкт-Петербурга (грант PD02-2.10-148).