[19] 中华人民共和国国家知识产权局

[51] Int. Cl.
G05B 17/02 (2006.01)

[12] 发明专利说明书

专利号 ZL 200380100085.0

[45] 授权公告日 2008 年 3 月 12 日

[11] 授权公告号 CN 100374960C

[22] 申请日 2003.10.24
[21] 申请号 200380100085.0
[30] 优先权
[32] 2002.11.6 [33] DE [31] 10251716.9
[86] 国际申请 PCT/DE2003/003542 2003.10.24
[87] 国际公布 WO2004/042480 德 2004.5.21
[85] 进入国家阶段日期 2004.7.6
[73] 专利权人 西门子公司
地址 德国慕尼黑
[72] 发明人 克劳斯·温齐尔 克劳斯·弗朗兹
[56] 参考文献
WO01/47647A2 2001.7.5
CN1158999A 1997.9.10
DE19740691A 1999.3.18
审查员 刘 珺

[74] 专利代理机构 北京市柳沈律师事务所
代理人 马 莹 邵亚丽

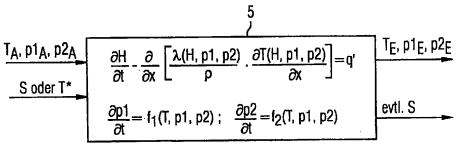
权利要求书 3 页 说明书 12 页 附图 5 页

[54] 发明名称

金属的建模方法

[57] 摘要

金属(1)的温度(T)可以由至少一个调整装置(2)直接或者间接地影响，对该调整装置(2)根据调节参数(S)进行控制。为一个材料模型(5)预先给定该调节参数(S)以及金属(1)温度和相部分的起始值(T_A，$p1_A$，$p2_A$)，在这些部分中该金属(1)至少处于第一或第二相。在该材料模型(5)内部在考虑这些参数(T_A，$p1_A$，$p2_A$)的条件下实时求解一个导热方程和一个变换方程，并由此确定这些参数的预期值(T_E，$p1_E$，$p2_E$)。在所述转化方程的范围内确定金属(1)相的吉布斯自由焓(G1，G2)，根据该吉布斯自由焓(G1，G2)确定金属(1)从第一相到第二相的金属转化率，以及根据该转化率确定预期的部分($p1_E$，$p2_E$)。



1. 一种金属（1）的建模方法，该金属的温度（T）可以由至少一个调整装置（2）直接或者间接地影响，

- 其中，为一个材料模型（5）预先给定金属的起始温度（T_A）和起始部分（$p1_A$，$p2_A$），在这些部分中该金属（1）至少处于第一或第二相，

- 其中，在该材料模型（5）内部在考虑起始温度（T_A）、起始部分（$p1_A$，$p2_A$）和对于调整装置（2）的一个调节参数（S）的条件下实时求解一个导热方程和一个转化方程，并由此确定金属（1）的一个预期温度（T_E）以及预期的部分（$p1_E$，$p2_E$），在这些部分中该金属（1）至少处于第一或第二相，

- 其中，根据调节参数（S）控制该调整装置（2），

其特征在于，在所述转化方程的范围内确定金属（1）相的吉布斯自由焓（G1，G2），根据该吉布斯自由焓（G1，G2）确定金属（1）从第一相到第二相的金属转化率，以及根据该转化率确定预期的部分（$p1_E$，$p2_E$）。

2. 根据权利要求 1 所述的建模方法，其特征在于，确定相的特定的、即涉及的是金属（1）一个标准量的吉布斯自由焓（G1，G2），并根据该特定吉布斯自由焓（G1，G2）的差值确定所述转化速度。

3. 根据权利要求 1 所述的建模方法，其特征在于， 确定相的特定的、即涉及的是金属（1）一个标准量的吉布斯自由焓（G1，G2），并根据利用相的部分（p1，p2）加权的、相的特定吉布斯自由焓（G1，G2）的和确定所述转化率。

4. 根据权利要求 1 所述的建模方法，其特征在于，确定相的特定的、即涉及的是金属（1）一个标准量的吉布斯自由焓（G1，G2），并且该特定吉布斯自由焓（G1，G2）是依赖于至少一个相的位置的，而根据对该相的特定吉布斯自由焓（G1，G2）的位置积分确定所述转化率。

5. 根据利要求 1 至 4 中任一项所述的建模方法，其特征在于，所述金属（1）包含至少两种化学上相互不同的成分，也将吉布斯自由焓（G1，G2）用于确定化学组成的成分分布。

6. 根据权利要求 1 至 4 中任一项所述的建模方法，其特征在于，所述至少一个相对应于金属（1）的一种液体聚合状态。

7. 根据权利要求 1 至 4 中任一项所述的建模方法，其特征在于，所述

至少一个相对应于金属（1）的一种固体聚合状态。

8. 根据权利要求 1 至 4 中任一项所述的建模方法，其特征在于，所述方法应用于多个局部直接相继的金属（1）位置。

9. 根据权利要求 1 至 4 中任一项所述的建模方法，其特征在于，为所述材料模型（5）预定至少一个额定温度（T*），并且该材料模型（5）可以独立地确定所述调节参数（S）。

10. 根据权利要求 9 所述的建模方法，其特征在于，所述额定温度（T*）是一种额定温度变化（T*）。

11. 根据权利要求 1 至 4 中任一项所述的建模方法，其特征在于，所述调节参数（S）是一种调节参数变化（S），在引入该调节参数变化（S）的条件下逐步地求解导热方程和转化方程，并因此确定金属的一个预期的温度变化（T_E）以及相的预期部分变化（$p1_E$，$p2_E$），以及在确定金属的预期温度变化（T_E）和相的预期部分变化（$p1_E$，$p2_E$）之后才按照该调整参数变化（S）控制所述调整装置（2）。

12. 根据权利要求 1 至 4 中任一项所述的建模方法，其特征在于，逐步地求解导热方程和转化方程，并因此确定金属的一个预期温度变化（T_E）以及相的预期部分变化（$p1_E$，$p2_E$），以及所述调节参数（S）只用于有关步骤，而在先前和随后的步骤之间按照调节参数（S）控制所述调整装置（2）。

13. 根据权利要求 1 至 4 中任一项所述的建模方法，其特征在于，所述起始温度（T_A）是一个在金属（1）被调整装置（2）影响之前、由测量装置（6）采集的金属（1）的实测温度。

14. 根据权利要求 1 至 4 中任一项所述的建模方法，其特征在于，在金属（1）被调整装置（2）影响之后、由测量装置（6'）采集金属的结束温度（T），将该结束温度（T）与预期的温度（T_E）进行比较并根据该比较调整材料模型（5）。

15. 根据权利要求 1 至 4 中任一项所述的建模方法，其特征在于，对于所述金属（1）内部待求解的导热方程具有下列的形式：

$$\frac{\partial H}{\partial t} - div\left[\frac{\lambda(H,p1,p2)}{\rho}\cdot gradT(H,p1,p2)\right] = q'$$

其中，H 是焓，t 是时间，λ 是导热率，p1 和 p2 是相的部分，ρ 是金属（1）的密度而 T 是金属（1）的温度，q'是在金属（1）内部通过外部影响产生的

热量。

16. 根据权利要求 1 至 4 中任一项所述的建模方法，其特征在于，所述金属（1）被构造为具有一个带厚方向的金属带，并且对于所述金属（1）内部待求解的导热方程具有下列的形式：

$$\frac{\partial H}{\partial t}-\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\lambda(H,p1,p2)}{\rho}\cdot\frac{\partial T(H,p1,p2)}{\partial x}\right]=q'$$

其中，H 是焓，t 是时间，x 是带厚方向的位置，λ 是导热率，p1 和 p2 是相的部分，ρ 是金属（1）的密度而 T 是金属（1）的温度，q'是在金属（1）内部通过外部影响产生的热量。

17. 根据权利要求 1 至 4 中任一项所述的建模方法，其特征在于，所述金属（1）包含铁作为主要成分。

金属的建模方法

技术领域

本发明涉及一种金属的建模方法，该金属的温度可以通过至少一个调整装置直接或者间接地受到影响，

- 其中，为一个材料模型预先给定金属的起始温度和起始部分，在这些部分中该金属至少处于第一或第二相，

- 其中，在该材料模型内部，在考虑起始温度、起始部分和调整装置的一个调节参数的条件下实时求解一个导热方程和一个变换方程，并由此确定金属的一个预期温度以及预期部分，在这些部分中该金属至少处于第一或第二相，

- 其中，根据调节参数控制该调整装置。

背景技术

这种方法例如由 W. BORCHERS 等在 Erlangen-Nuernberg 大学的校刊第 102 册，2001 年 10 月，第 27 年度中公开的论文 “Numerische Simulation der Waermeleitung in Stahlblechen – Mathematik hilft bei der Steuerung von Kuehlstrecken” 所公布。

该公知方法尤其在轧钢机中用于控制冷却剂调整装置。在此，该冷却剂调整装置可以设置在轧钢机架之间。其也可以设置在轧钢机架之后。不过，也可以考虑其它的应用情形，例如在连续铸造或者在轧钢机控制中计算凝固过程的范围内。

为了确定相的部分在现有技术中引入 Scheilsche 规则或者 Johnson-Mehl-Avrami 或者 Brimacombe 方程组。

现有技术的方程组在实际中并不是在所有情况下无误地工作。尤其是其具有一系列系统的缺点。一方面必须将每个材料分别参数化。在不同材料之间的内插是不可能或者起码只是有限可能的。第二，在现有技术的方法中仅仅考虑了两个相。由于系统原因使得扩展到两个以上相是不可能的。第三，现有技术的方法仅仅在有关金属完全变换的条件下才在模型和实际

之间提供良好的一致性。第四，现有技术的方法不提供关于在相变换中释放的转化热量的信息。而了解转化热量对于正确求解导热方程是绝对必要的。

发明内容

本发明要解决的技术问题是，提供一种产生更好模型结果的金属建模方法。

上述技术问题是这样解决的，即，在转化方程的范围内确定金属相的吉布斯自由焓，根据该吉布斯自由焓确定金属从第一相到第二相的转化率，以及根据该转化率确定预期的部分。

在最简单的情况下，本发明如同现有技术中一样考虑纯粹的两相系统，例如从奥氏体转化到铁氧体以及反之。不过，也可以将其容易地扩展到多相系统，特别是铁氧体-奥氏体-渗碳体系统。

通常，不能将附加材料的部分相互独立地加以考虑。不过，附加原料对吉布斯自由焓（也耦合的）影响是公知的。例如参见 Jyrki Miettinen 的专业论文“Approximate Thermodynamic Solution Phase Data for Steels”，Calphad, Vol. 22, No.2, 275-300 页,1998，以及 Bo Sundman 和 John Agren 的“A Regular Solution Model for Phases with Several Components and Sublattices, Suitable for Computer Application”，Journal Phys. Chem. Solids, Vol.42, 297-301 页。因此对于钢可以将铁碳混合物的吉布斯自由焓确定为碳成分和温度的函数，并将例如镍、硅、磷的附加原料的影响考虑为铁碳混合物和温度的函数。在设计材料模型时通过也预先给定附加原料部分，从而对于不是明显预定的材料也可以确定有关相的吉布斯自由焓。

如果确定相的特定吉布斯自由焓、即涉及的是金属的一个标准量，则可以按照特别简单的方式、即根据特定吉布斯自由焓的差值确定转化率。

作为另一种选择，可以根据利用相的部分加权的、相的特定吉布斯自由焓的和确定转化率。

此外还可以根据特定吉布斯自由焓的位置积分确定转化率。这种确定特别在至少一个相的吉布斯自由焓依赖于位置时具有优势。

如果金属包含至少两种化学上相互不同的成分，则也可以将吉布斯自由焓用于确定化学组成的成分分布。

如果至少一个相对应于金属的一种液体聚合状态，则也可以采用本发明的方法。不过也可以至少一个（优选为所有）相对应于金属的一种固体聚合状态。

可以将本方法对于每种金属仅仅使用一次。不过，优选地将其使用在多个局部直接相继的金属位置。

如果为材料模型预定至少一个额定温度，则材料模型可以自动确定调节参数。这里，额定温度可以尤其是一种（时间上的）额定温度变化。

调节参数可以是一种时间上的调节参数变化。在这种情况下尤其可以在引入调节参数变化的条件下逐步地求解导热方程和转化方程，并因此确定金属的一个预期的温度变化以及相的预期部分变化。在这种情况下，调整装置的控制优选地在对导热方程和转化方程的完整求解之后才进行。

不过，调节参数也可以是单个的值。在这种情况下仅仅将其用于一个步骤。在这种情况下调整装置的控制优选地在先前和随后的步骤之间进行。

如果起始温度是一个在金属被调整装置影响之前、由测量装置采集的实测温度的话，该建模方法工作特别可靠。

如果在金属被调整装置影响之后、由测量装置采集金属的结束温度，将该结束温度与预期的温度进行比较并根据该比较调整材料模型的话，则该材料模型被构造为自学习的模型。

优选地，对于材料内部待求解的导热方程具有下列的形式:

$$\frac{\partial H}{\partial t}-div\left[\frac{\lambda(H,p1,p2)}{\rho}\cdot gradT(H,p1,p2)\right]=q'$$

其中，H是焓，t是时间，λ是导热率，p1和p2是相的部分，ρ是金属的密度而T是金属的温度。q'是在金属内部通过外部影响（例如，通过轧制变形或者感应加热）产生的热量。由于相转化形成的转化热量则已经在方程的左边加以了考虑。

上述正确的导热方程总是可以独立于金属的构成和聚合状态应用的。如果金属被构造为具有一个带厚方向的金属带，则可以求解下列简化的方程来替代上面的方程:

$$\frac{\partial H}{\partial t}-\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\lambda(H,p1,p2)}{\rho}\cdot\frac{\partial T(H,p1,p2)}{\partial x}\right]=q'$$

其中，x是带厚方向的位置。

附图说明

本发明的其它优点和细节借助于附图由下面对实施方式的描述给出。其中，按原理图示出了：

图 1 是一种对金属进行温度影响的设备，

图 2 和图 3 是材料模型，

图 4 是求解转化方程的电路框图，

图 5 和图 6 是吉布斯自由焓示例变化，

图 7 至图 9 是对金属进行温度影响的其它设备。

具体实施方式

根据图 1，对金属 1 进行温度影响的设备具有一个调整装置 2。借助于调整装置 2 可以直接或者间接影响金属 1 的温度 T，通常是通过冷却，不过在个别情况下也通过加热。例如，可以将一定量的冷却剂（典型地是水）加到金属 1 上。

金属 1 在给出的情况下是处于固体聚合状态下的钢。不过其也可以具有液体的聚合状态。金属 1 可以是不同于钢的其它金属，例如铝或者有色金属。根据图 1，还将金属 1 构造成具有带厚方向的金属带。不过也可以考虑其它形式的金属 1，例如棒形的特征（如导线）、管或者 U 形特性。

该设备由一台控制计算机 3 控制。尤其是调整装置 2 也由控制计算机 3 根据一个调节参数 S 控制。利用计算机程序 4 对控制计算机 3 进行了编程。由于利用计算机程序 4 的编程，控制计算机 3 除了控制该设备以外还执行一个下面将详细描述的、对于金属 1 的建模方法。

在执行建模方法的范围内，按照图 2 为金属 1 的材料模型 5 预先给定金属 1 的起始温度 T_A 和以及起始部分 $p1_A$，$p2_A$，在这些起始部分中金属 1 处于第一或第二相。起始温度 T_A 可以是一个估计值或者一个理论上的计算值。不过，该设备优选地具有一个测量装置 6，见图 1。借助于测量装置 6 可以采集金属 1 的实测温度 T。在示出的情况下在通过调整装置 2 影响金属 1 之前进行实测温度 T 的这种采集。在该时刻采集的实测温度 T 是送入到材料模型 5 的起始温度 T_A。

起始部分 $p1_A$，$p2_A$ 通常根据计算确定或者是由于过程条件而公知的值。

例如预先得知，在铸造之前金属 1 完全处于液体相。或者公知如果将钢保持在超过钢的转化温度以上足够长，则该材料为奥氏体。

按照图 2，在材料模型 5 的内部，在考虑这些起始值 T_A，$p1_A$，$p2_A$，调节参数 S 以及调整装置 2 对金属 1 的内部的影响的条件下，实时求解材料方程。该材料方程包括具有下列形式的导热方程

$$\frac{\partial H}{\partial t} - div\left[\frac{\lambda(H,p1,p2)}{\rho}\cdot gradT(H,p1,p2)\right] = q'。$$

以及一个转化方程。方程中 H 是焓，t 是时间，λ 是导热率，p1 和 p2 是相的部分，ρ 是金属 1 的密度而 T 是金属 1 的温度。q'是在金属 1 内部通过外部影响（例如，通过轧制变形或者感应加热）产生的热量。由于相转化形成的转化热量则已经在方程的左边加以了考虑。因此，在材料模型 5 的内部实时确定了金属 1 的期待温度 T_E 以及期待的部分 $p1_E$，$p2_E$，在这些部分中金属 1 处于第一或第二相。

求解导热方程和考虑调节参数 S 以及调整装置 2 的影响对专业人员一般是公知的。因此，下面不再详细涉及。还仅仅需要提到的是，上述导热方程是一般的、独立于金属 1 的聚合状态和构成而待求解的方程。在金属 1 呈现具有带厚方向的金属带情况下，可以按照图 3 将该导热方程表示为一维的，因为在带厚方向上以及在带宽上的梯度基本上是零。在这种情况下可以将该导热方程简化为：

$$\frac{\partial H}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\lambda(H,p1,p2)}{\rho}\cdot\frac{\partial T(H,p1,p2)}{\partial x}\right] = q'$$

其中，x 另外是带厚方向的位置。

为了求解转化方程使用了一种方法，下面结合附图 4 对该方法进行详细的解释。在按照图 4 的表示中进行了金属 1 可以采用两相的简化假设。不过，该方法可以容易地扩展到具有多于两相的金属 1。

根据图 4 将多个输入参数引入到方程求解块 7。首先为方程求解块 7 输入热量 Q'，该热量 Q'一方面包括由于导热引起的热平衡变化，另一方面同样包括金属 1 内部通过外部影响产生的热量 q'。

此外，还为方程求解块 7 输入其中金属 1 呈现第一相的部分 p1。还为方程求解块 7 输入时间上的变化 p1'。由于按照图 4 仅仅涉及两相系统这样的条件，因此第二相的部分 p2 及其变化 p2'也是已知的。

最后，为方程求解块 7 输入金属 1 相的焓 H1，H2。在此，焓 H1，H2 涉及的是金属 1 的一个标准量，例如一千克或者一摩尔。

根据下列线性方程组方程求解块确定焓 H1，H2 的时间上的变化 H1'，H2':

$$\begin{bmatrix} p1 & 1-p1 \\ -T_1' & T_2' \end{bmatrix}\begin{bmatrix} H_1' \\ H_2' \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} Q'-(H_1-H_2)p1' \\ 0 \end{bmatrix}。$$

该变化 H1'，H2'被送至积分器 8，9，后者则计算焓 H1，H2 并作为输出信号。

积分器 8，9 利用起始值 $H1_0$，$H2_0$ 得到适当的初始化。这里，起始值 $H1_0$，$H2_0$ 可以相互有关地预先给定。不过，必须这样地确定它们，即，形成的在相转化温度下的特定的吉布斯自由焓 G1，G2 取得同样的值。

在线性方程组中，T1'和 T2'理解为各温度 T1，T2 对于各自的焓 H1 以及 H2 的一阶导数，即，不是时间上的导数。

替代上述线性方程组也可以求解下列形式的非线性方程:

$$\begin{bmatrix} p1H_1+(1-p1)H_2 \\ -T_1(H_1)+T_2(H_2) \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} Q-H_0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

其中，H_0 是系统焓 H 的合适的起始值。该方程组直接提供了焓 H1，H2。为此，如已经提到的其不是线性的。

将确定的焓 H1 送至温度确定装置 10。后者根据焓 H1 确定所涉及相的预期温度 T1。此外，还将焓 H1 送至熵确定装置 11。后者根据下列关系确定所涉及相的熵 S1:

$$S_1(H1)=\int_{H10}^{H1}\frac{1}{T_1(H)}dH。$$

预期的温度 T1 和确定的熵 S1 被送至乘法器 12。该乘法器具有负的符号的输出被送至加法器 13，此外焓 H1 也被送至加法器 13。该加法器 13 的输出信号对应于所涉及相的特定吉布斯自由焓 G1。

按照类似的方式也为第二相确定了对应的特定吉布斯自由焓 G2。然后，在加法器 14 中形成这两个特定吉布斯自由焓 G1，G2 的差值 ΔG。

这样确定的特定吉布斯自由焓 G1，G2 的差值 ΔG 被送至转化率确定器 15。后者根据差值 ΔG 和部分 p1 确定转化率。该转化率被送至积分器 16，还将起始部分 $p1_A$ 作为起始值输入到该积分器。然后，又将积分器 16 的输

出信号，即所确定的期望部分 $p1_E$ 送至方程求解块 7 和转化率确定装置 15。

如图 4 显示的，逐步地求解了转化方程，其中，在每个步骤中将此前确定的期望值输入方程求解块 7。按照类似的方法，也逐步地求解导热方程。在此，自然在每个步骤之后对导热方程和转化方程的结果进行平衡。优选地将该方法应用于导热方程的每个支持点。不过，为了节省计算时间，也可以通过在相转化中综合支持点来减少对转化模型的计算花费。但是，即使在这种情况下总是要对于每个支持点求解导热方程。

此外，温度 T1，T2 在正确计算的条件下对于每个时刻具有同样的值，下面也记为期望的温度 T_E。因此，温度 T1，T2 相互间可能的偏差是材料模型 5 的结构欠优化的证明。因此可以在编程建立材料模型 5 的范围中将其用于材料模型 5 的优化，特别是熵和温度确定装置 10，11 的优化。

因此，按照图 4 的方法的装置确定了期望的温度 T_E 和期望的部分 $p1_E$，$p2_E$ 在时间上的变化。

按照图 4 的方法中调节参数 S 不必在每个时刻具有同样的值。而是，调节参数 S 可以具有时间上的变化，下面称之为调节参数变化。因此，在每个步骤中对调节参数 S 的当前值进行更新。该当前值只在影响金属 1 表面的处理（例如浇注水）中才影响在求解导热方程时需注意的边界条件。而在金属 1 的影响体积的处理（例如铸造过程或者感应加热）中，调节参数 S 尤其影响热量 Q'。

在逐步地求解导热方程和转化方程中，可以有两个另外的措施。一方面可以按照预定的调节参数变化 S 在确定了期望温度 T_E 和期望部分 $p1_E$，$p2_E$ 的时间变化之后，控制调整装置 2。不过，另一方面也可以只将调节参数 S 用于每个步骤，而在先前和随后的步骤之间根据该调节参数 S 控制调整装置 2。

在两种情况下都有可能仅仅为材料模型 5 预定调节参数 S。不过，按照图 2 和 3 也可以为材料模型 5 预先给定一个额定温度 T*，优选地甚至预先给定额定温度 T*的时间上的变化。在这种情况下，材料模型 5 有可能根据额定温度 T*、起始温度 T_A 和调整装置 2 的作用自动地确定调节参数 S。

在金属 1 通过调整装置 2 受到影响之后，按照图 1 借助于另一个测量装置 6'重新采集金属 1 的实测温度 T。下面被称为结束温度的该温度 T，按照图 5 由一个匹配装置 5'与期望的温度 T_E 进行比较。然后，匹配装置 5'根

据该比较对材料模型 5 进行调整。例如，可以改变导热方程的传热参数或者对转化率的影响参数。

即，按照给出的实施方式确定了涉及金属 1 一个标准量的相的特定吉布斯自由焓 G1，G2。然后，根据差值 ΔG 确定转化率。在最简单的情况下作为一个常数与所确定的差值 ΔG 的乘积给出转化速度。不过，在此优选地使用转化率确定装置 15，其从差值 ΔG 和瞬时相部分 p1 确定转化率 p1'。对不同的钢，可以例如根据 ZTU 流程图的数据组参数化这样一个转化率确定装置 15。

此外，完全等效的是，根据利用相部分 p1，p2 加权的特定吉布斯自由焓 G1，G2 的和确定转化率。这里利用了，在保持的温度下转化自身仅仅按减少吉布斯自由焓 G 的方向进行。

如果同一化学成分进行纯相转化，例如从奥氏体至铁氧体的纯转化，则上述结合图 4 描述的过程尤其具有意义。如果纯相转化从固体至液体相或者反之进行，也可以使用该过程。

在上面描述的对于部分 p1，p2 的确定中，总是使用特定吉布斯自由焓 G1，G2、特定的熵 S1，S2、特定焓 H1，H2、期待温度 T1，T2 的当前瞬时值。不过温度和熵确定装置 10，11 的处理的前提是，已知温度 T1，T2 和特定熵 S1，S2 与对应的特定焓 H1，H2 的函数变化或依赖关系。因此，为了能够良好和正确地描述相转换，需要为温度确定装置 10 和熵确定装置 11 提供基本的函数，这些函数取决于实际建模的金属 1，尤其取决于其化学组成。为此，在开发材料模型 5 时优选地首先为涉及原料的相而将特定吉布斯自由焓 G1，G2 确定为温度的函数。该作为温度函数的特定吉布斯自由焓 G1，G2 的确定例如在 Per Gutstafson 的专业论文 “A Thermodynamic Evaluation of the Fe-C System”，Scandinavian Journal of Metallurgy 14 (1985)，259 至 267 页进行了描述。

然后，根据这样确定的、作为对应温度 T1 以及 T2 函数的特定吉布斯自由焓 G1 以及 G2，即，特定吉布斯自由焓 G1，G2 的变化，可以容易地将温度 T1，T2 以及特定熵 S1，S2 的函数变化确定为特定焓 H1，H2 的函数。这种确定对于专业人员来说是一般公知的。有关的细节可以重新参考上述 Per Gutstafson 的论文。

在确定特定吉布斯自由焓 G1，G2 的函数变化以及温度 T1，T2 和特定

熵 S1，S2 的函数变化时，还必须特别考虑由于添加物引起的特定吉布斯自由焓 G1，G2 的变化。即，对于待考察的添加物将特定吉布斯自由焓 G1，G2 的变化确定为有关添加物的添加量的函数。尽管这种变化对于有关添加物的量来说可能是强烈非线性的。其也可能是相互有关的。不过，该作用以及相互依赖关系都是已知的，见已经提到的 J. Miettinen 以及 B. Sundman 和 J. Agren 的论文。因此，如果已知添加物的部分，则在结果中温度确定装置 10 和熵确定装置 11 对于未知的混合也是确定的。因此有可能将未知的混合（特别是未知的钢成分）按较高的精确度进行建模。

在实际中，金属 1 经常具有两种化学上相互不同的基本组成成分。在钢中这两种组成成分典型地为铁(作为具有明显超过 50 原子%的主要成分）和碳。在这种情况下，首先将特定吉布斯自由焓 G 确定为两种组成成分之一的（相对）部分 n 和温度的函数。然后，又对于涉及的添加物确定该函数是如何改变的。这次该改变虽然又是强烈非线性的。但这点既适用于针对添加物的量，又适用于针对同样量的添加物在铁和碳的不同混合比例中的作用。即完全可能，添加物的确定量（例如 1%硅和 2%的磷）在具有 1%的碳和 99%的铁的铁-碳混合物中对特定吉布斯自由焓 G 的影响完全不同于在具有 4%的碳和 96%的铁的铁-碳混合物中的影响。这里，百分量涉及的是原子百分率。例如，也完全可能，添加物加倍的量对于特定吉布斯自由焓 G 具有完全不同于添加物的基本量的影响。但是，此外还已知添加物的影响或者可以按公知的方式进行确定。

按这种方式确定的铁-碳混合物的特定吉布斯自由焓 G 的变化可以用来，确定金属 1 的成分的化学组成的分布。下面按照铁-碳混合物的例子对这点进行详细的说明。

假设，有一种铁和碳的混合物。其中，n_A 是混合物中铁的部分，n_B 是碳的部分。部分 n_A，n_B 的和当然是 1。还假设，n_{A1} 是按第一化学组成的铁的部分，n_{A2} 是按第二化学组成的铁的部分。其中，这些部分 n_{A1}，n_{A2} 的和自然对应于铁的总的部分 n_A。类似地，在这两种组成中还包含了碳的部分 n_{B1}，n_{B2}。其中，这些部分 n_{B1}，n_{B2} 的和又给出碳的总的部分 n_B。利用 $m_1=n_{A1}+n_{B2}$ 和 $m_2=n_{A1}+n_{B2}$ 引入了每种组成的部分。因此，产生整个系统的特定吉布斯自由焓为：

$$G = m_1 \cdot G1\left(\frac{n_{B1}}{n_{A2}+n_{B1}}\right) + m_2 \cdot G2\left(\frac{n_{B2}}{n_{A2}+n_{B2}}\right)。$$

通过该方程对 n_{A1} 和 n_{B1} 的（完全）微分和设置导数为零，得到两个方程并由此得到 n_{A1} 和 n_{B1} 的两个边界条件。在此必须注意，在该方程中 m_1，m_2 和自变量 G2 隐含着作为变量的 n_{A1} 和 n_{B1}。

如果如图 5 所示，铁-碳混合物的吉布斯自由焓 G 作为碳部分 n 的函数具有一个凸形变化，则不可能分配为两种化学组成，在这两种组成中特定吉布斯自由焓 G1，G2 的部分加权和小于均匀混合系统的吉布斯自由焓。在这种情况下，各方程线性相关。产生了金属 1 的一种均匀化学组成。

反之，如果如图 6 所示，铁-碳混合物的吉布斯自由焓 G 作为碳部分的函数不只是呈现凸形变化，则可能分配为两个不同的化学组成，在这两种组成中特定吉布斯自由焓 G1，G2 的部分加权和小于均匀混合的吉布斯自由焓。在这种情况下，各方程线性独立。由此，产生了部分 n_{A1}，n_{A2}，n_{B1} 和 n_{B2} 的明确值。在这种情况下，金属 1 分解为两个相互不同的化学组成。这些组成具有混合比例 n_1 以及 n_2。该混合比例 n_1，n_2 通过下列方程定义：

$$n_1 = \frac{n_{B1}}{n_{A1}+n_{B1}},$$

$$n_2 = \frac{n_{B2}}{n_{A2}+n_{B2}}。$$

在实际中，必须经常干预这两种过程的混合。这样，例如在奥氏体中可以熔解相对高量的碳。而在铁氧体中仅仅可以熔解很少量的碳。因此，奥氏体在冷却时分解为铁氧体和珠光体的混合物，其中珠光体是一种低共熔的混合物，该混合物由渗碳体（Fe_3C）和铁氧体组成，并且在转化温度以下通过冷却饱含碳的奥氏体形成。

相转化速度通过一个所谓的转化扩散模型描述。这里，不同的相通过移动的相边界相互分开。在每个相的内部具有移动的和不移动的元素。不移动的元素是均匀分布的。移动的元素通常在相中不是均匀分布的。移动元素的扩散在每个相中沿所属化学势（chemische Potential）的负梯度方向进行。这里，移动元素的扩散速度是有限的。其中，化学势是通过按照移动元素的浓度微分特定（即，涉及相同的量的）吉布斯自由焓而获得的。对于一种或者多种移动元素扩散的精确表示是专业人员公知的。在自由相

边界表面为了确定相边界表面移动的速度，建立了直接在相边界表面之前和之后的特定吉布斯自由焓的差值。这种任务表示被专业人员称为具有扩散的自由边界值问题或者斯蒂芬问题（Stefan-Problem），并且是公知的。一种近似的解法例如见 Kar, A. 和 Mazumder, J.的: Analytic Solution of the Stefan Problem in Finite Mediums. Quart. Appl. Math., Vol. 52, 1994。

在本发明的范围内可以为每个转化—既可以为相转化、又可以为一种化学组成分解为其它化学组成—确定一个自身的转化率。总之要确定，随时在减少总系统吉布斯自由焓 G 的方向上进行的转化情况。因此，可以在没有明显使用在相边界表面的特定吉布斯自由焓 G1，G2 的差值的条件下建立上述模型介绍。因此，特别是在考虑金属 1 的冷却特性的条件下，不仅可以断定金属 1 的相状态，而且可以断定其组织结构及其粒度。

按照图 7 将设备构造为用于金属 1 的冷却装置。将调整装置 2 构造为冷却剂调整装置 2。该冷却剂调整装置要么设置在轧钢机架之间，要么设置在轧钢机架之后。该装置可以将冷却剂（典型地是水）通过单个可控制段 2'定义的量浇注到金属 1 上。

如在上面结合图 1 介绍的，借助于测量装置 6，6'分别采集金属 1 的温度 T。如果冷却装置仅仅设置在轧钢机架之后，则将测量装置 6 设置在最后的轧钢机架之后和冷却装置之前。否则的话，将测量装置 6 优选地设置在安装在冷却装置之前的轧钢机架之前，而将测量装置 6'设置在安装在冷却装置之后的轧钢机架之后。

在冷却段的运行中，按时钟随着导热方程和转化方程的分别求解还借助于测量装置 6 采集金属 1 的起始温度 T_A。此外，为材料模型 5 引入一个材料速度 v。由此，材料模型 5 可以针对金属 1 的采集了起始温度 T_A 的位置进行材料跟踪并且及时地控制调整装置 2 的各段 2'。也可以及时地借助于另一个测量装置 6'在冷却段的末端采集结束温度，并分配到金属 1 的对应位置上。即，在按照图 7 的实施方式中将建模方法应用到金属 1 的多个局部直接相互跟随的位置。

在图 7 的例子中材料的流动方向总是相同的。不过，材料的流动方向也可以是变换的。这样，例如在一个厚板轧机机组中用于冷却的材料可以再次返回到轧钢机架，并经历一个重新的轧制过程和接着的冷却过程。

图 8 和 9 示出了本发明的建模方法另外的应用可能性。

按照图 8 将设备构造成轧机机组。在这种情况下，调整装置 2 是一台轧钢机架，对应的调节参数 S 是轧制速度。必要时调整装置 2 也可以是一台轧钢机架和一个冷却装置的组合。在这种情况下，调节参数 S 自然也可以是一个组合的调节参数。

在按照图 9 的实施方式中，将设备构造成连续铸造设备。调整装置 2 构造为组合的调整装置，借助于该调整装置一方面影响连续铸造设备的结晶器的冷却，另一方面影响铸造条 1 从结晶器出来的下降速度 v。

本发明的优点是多方面的。一方面本发明的材料模型 5 在针对可能的添加物进行完全参数化时允许一般有效的结果，该结果也允许对未知的材料类别和原材料进行处理。另外，与 Scheil 和 Avrami 的方程组相反，转化的结果也正确地描述了不完全转化的情况。其中，与现有技术的方法相反，在材料模型 5 的范围内还正确确定并考虑了在相转化中形成的转化热。不过，首先将状态流程和 ZTU 图的复杂的拓扑结构返回到了常规的光滑曲线的参数化。由此，才使得在钢中对合金元素极其复杂的依赖性的技术处理成为可能。因为如果所涉及系统（这里是金属 1）的压力和温度 T 保持为常数，则系统的吉布斯自由焓 G 接近于其最小值。因此，不同相的吉布斯自由焓 G1，G2 的比较给出了相转化的方向。在此，即使在金属具有添加物和如渗碳体（Fe_3C）的关联的特别困难的情况下也可以作为相在物理上正确地处理。最后，该方程组不仅可以用于温度计算，而且可以用于组织和粒度的计算。

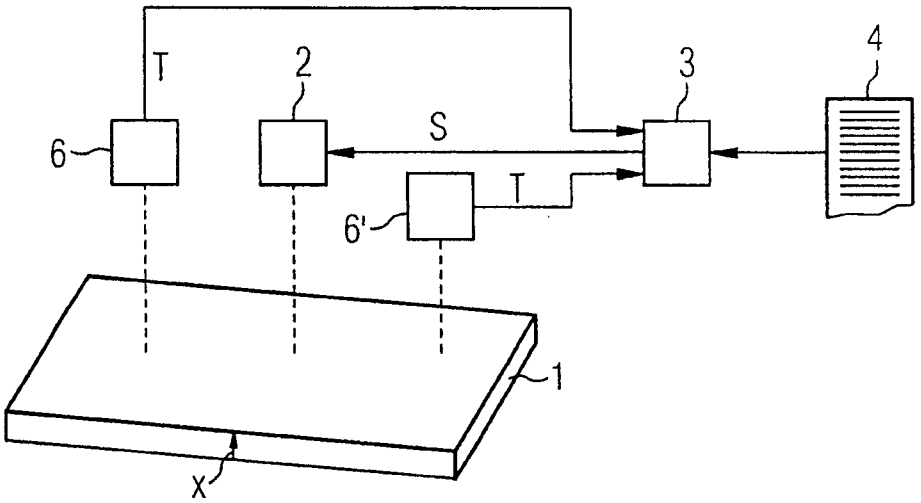

T
2
3
4
6
S
T
6'
1
X

图 1

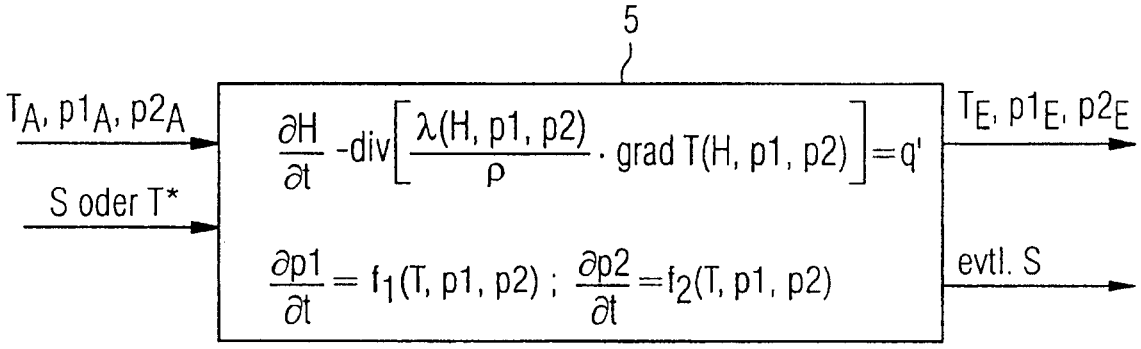

5
$T_A, p1_A, p2_A$
S oder T*
$\frac{\partial H}{\partial t} - \mathrm{div}\left[\frac{\lambda(H, p1, p2)}{\rho} \cdot \mathrm{grad}\, T(H, p1, p2)\right] = q'$
$\frac{\partial p1}{\partial t} = f_1(T, p1, p2)\ ;\ \frac{\partial p2}{\partial t} = f_2(T, p1, p2)$
$T_E, p1_E, p2_E$
evtl. S

图 2

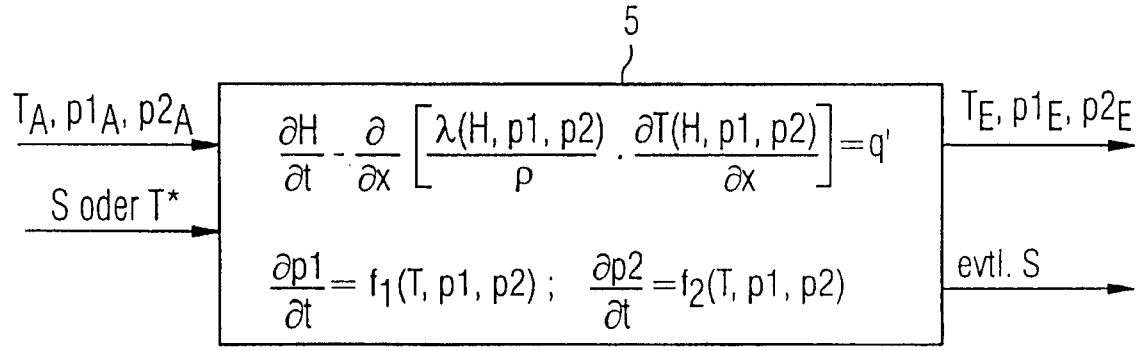

5
$T_A, p1_A, p2_A$
S oder T*
$\frac{\partial H}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\lambda(H, p1, p2)}{\rho} \cdot \frac{\partial T(H, p1, p2)}{\partial x}\right] = q'$
$\frac{\partial p1}{\partial t} = f_1(T, p1, p2)\ ;\ \frac{\partial p2}{\partial t} = f_2(T, p1, p2)$
$T_E, p1_E, p2_E$
evtl. S

图 3

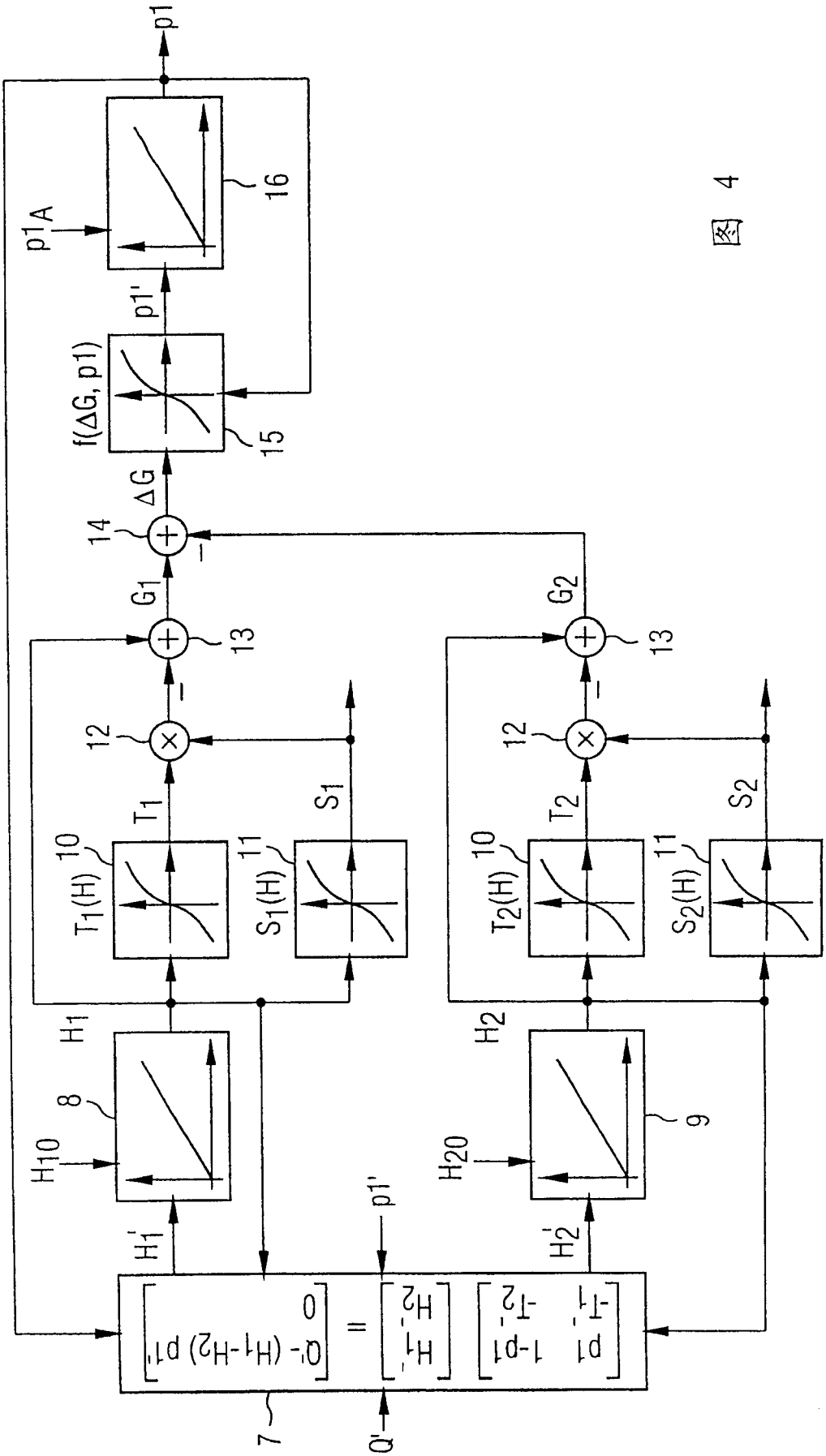

p1
16
p1A
p1'
f(ΔG, p1)
15
ΔG
14
G1
G2
13
12
T1
T2
S1
S2
T1(H)
T2(H)
S1(H)
S2(H)
10
11
H1
H2
8
9
H10
H20
H1'
H2'
p1'
7
Q'

图 4

图 5

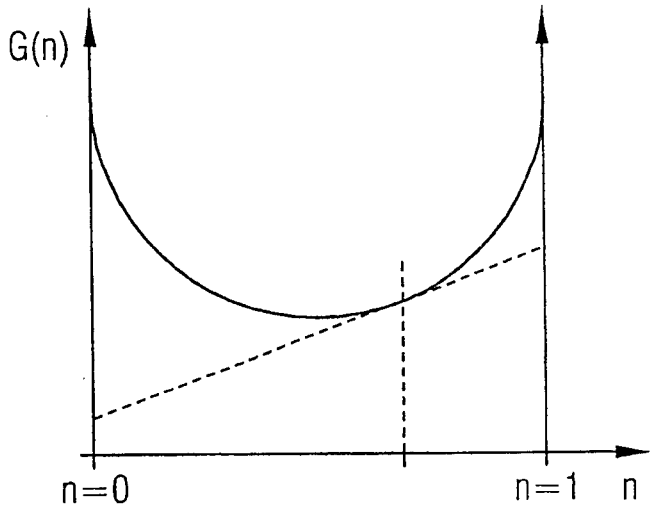


图 6

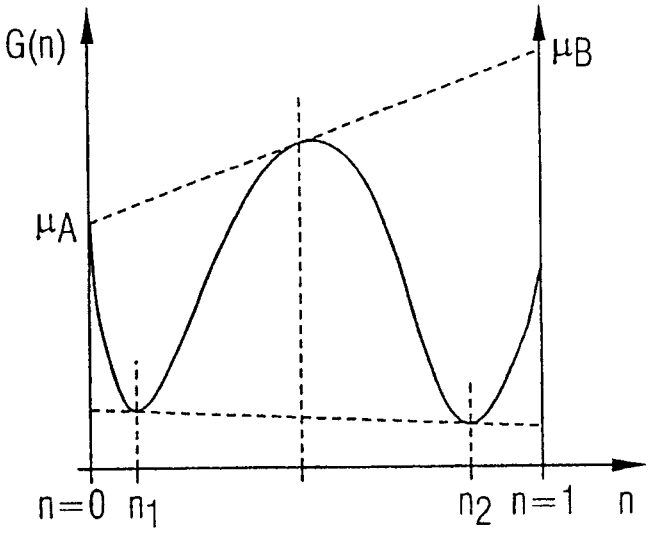
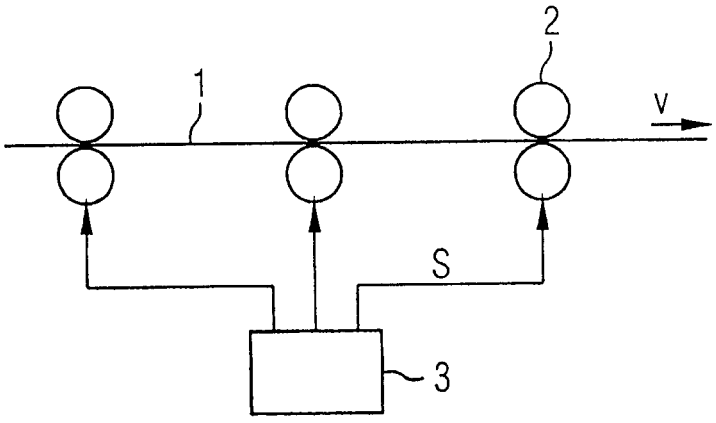


图 8



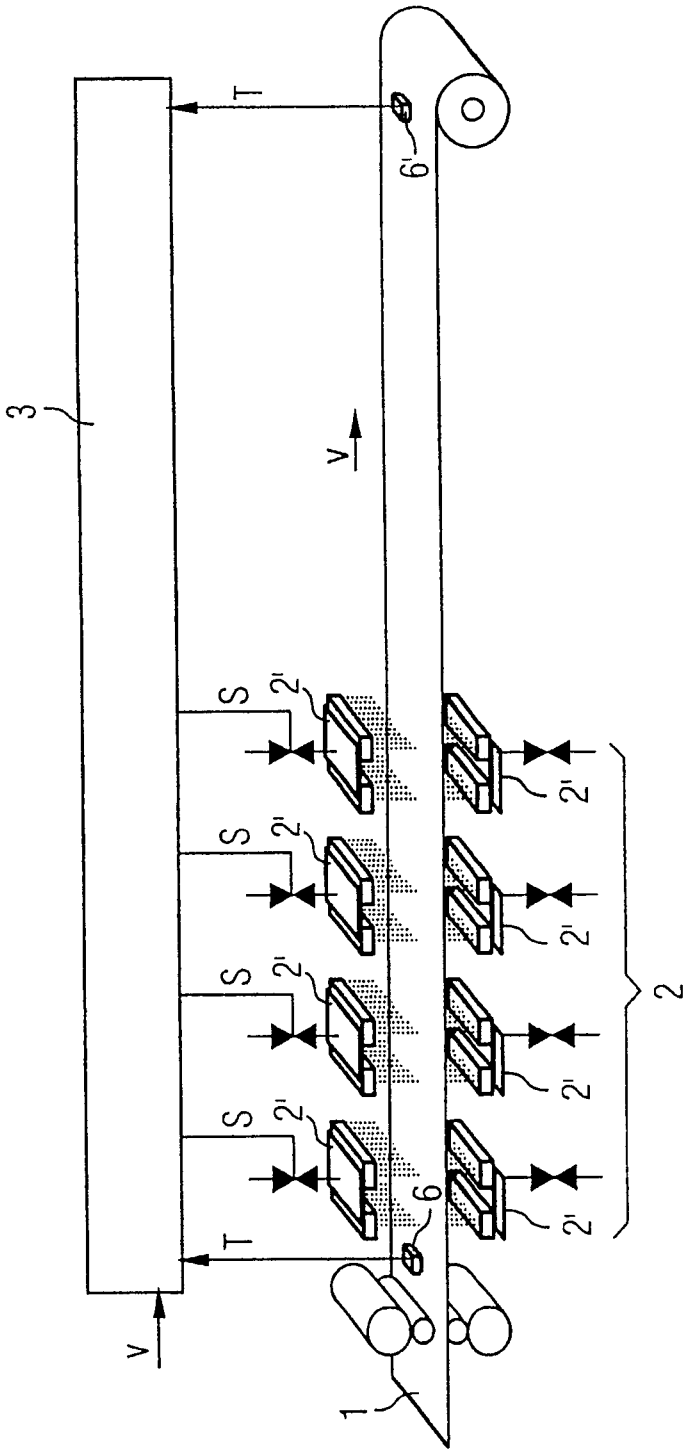


图 7

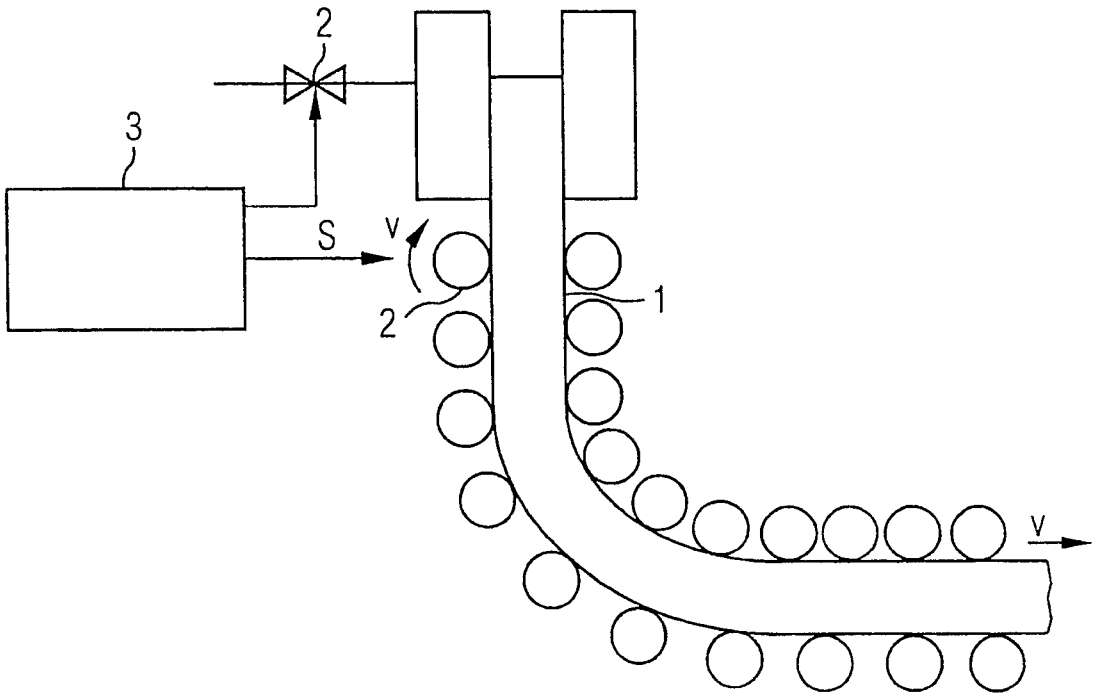


图 9