Руководство пользователя программного обеспечения

ThermoCalc-3D Pro

Оглавление

[Введение 4](#_Toc158380200)

[Математическая модель 4](#_Toc158380201)

[Демо-задачи и краткий экскурс в ThermoCalc-3D Pro 9](#_Toc158380202)

[Демо-сценарий (по умолчанию) 9](#_Toc158380203)

[Демо-сценарий: импульсный нагрев с использованием маски 10](#_Toc158380204)

[Демо-сценарий: принудительное охлаждение 11](#_Toc158380210)

[Как выбрать шаги численной сетки? 11](#_Toc158380211)

# Введение

Программное обеспечение ThermoCalc-3D Pro предназначено для вычисления трехмерных температурных распределений в шестислойных анизотропных твердых телах, которые могут содержать до девяти внутренних дефектов. Соответствующая математическая задача теплопроводности сформулирована в декартовых координатах и решена с использованием неявной конечно-разностной схемы. Первоначально ThermoCalc-3D был разработан для того, чтобы моделировать задачи теплового неразрушающего контроля (ТНК), в которых температурные сигналы от внутренних дефектов представляют первичный интерес. Уникальный численный алгоритм, примененный в ThermoCalc-3D Pro, в отличие от большинства доступного в настоящее время коммерческого программного обеспечения, позволяет моделировать «тонкие» дефекты в «толстых» материалах при сверхмалых временах тепловых процессов без потери точности вычислений. Это позволяет анализировать до девяти дефектов в одном образце. Уникальной особенностью Программы является то, что она позволяет моделировать нагрев образца по изображению-маске, полученной из эксперимента или созданной теоретически. ThermoCalc-3D Pro соответствует нескольким тепловым методикам ТНК, используемым во всем мире, и обеспечивает сопоставимую точность температурных вычислений по сравнению с классическими одномерными решениями и с доступными программами ля решения двухмерных задач. Детальные сведения об информативных параметрах ТНК, которые могут быть получены с помощью этого программного обеспечения, содержатся в [1-5].

Программное обеспечение поставляется как версия Windows 2000/NT/XP и использует, по крайней мере, 16 Мбайт оперативной памяти и 50 Мбайт на жестком диске (хотя требуемые объемы памяти, строго говоря, зависят от поставленной задачи). Время вычислений зависит от числа заданных временных и пространственных шагов, равно как и от мощности компьютера. В любом случае скорость вычислений, обеспечиваемая Программой, превосходит другие алгоритмы, в частности, реализуемые в программах ANSYS, Femlab и т.п.

# Математическая модель

Программа ThermoCalc-3D Pro предназначена для решения уравнения теплопроводности в трехмерной декартовой системе координат для шестислойного тела, имеющего форму параллелепипеда, содержащего до девяти внутренних *пассивных дефектов*, имеющих форму параллелепипедов. Тело нагревается за счет поверхностного нагрева внешним источником тепла или окружающей средой (см. Рис. 1). Поверхностный поток тепла может быть однородным или распределенным в пространстве по гауссовскому закону. Центр гауссовского пучка при этом может быть расположен в любой точке на *передней* поверхности. Передняя и задняя поверхности тела охлаждаются по закону Ньютона (согласно этому закону, механизмы теплообмена, такие как конвекция и излучение, объединены общим коэффициентом теплообмена *h*).Теплофизические характеристики (ТФХ) тела и источников (дефектов) могут быть заданы раздельно по трем пространственным координатам, таким образом, моделируя *анизотропный* материал. Боковые поверхности тела являются адиабатически изолированными. На границах между слоями тела и между слоями и дефектами, имеют место условия непрерывности потока тепла и температуры. В ThermoCalc-3D принята концепция так называемых *емкостных* источников (дефектов). Это означает, что в теплофизических расчетах участвуют все ТФХ дефектов.

*Примечание 1.* Отметим, что все дефекты имеют форму параллелепипедов и расположены параллельно передней и задней поверхности образца. Они могут быть расположены внутри слоев или совпадать с поверхностями слоев, но *не пересекать* границы слоев. Границы дефектов *не* *могут достигать* внешних поверхностей. Составной дефект, то есть состоящий из двух различных материалов, может быть смоделирован, но при этом, по крайней мере, один узел сетки должен располагаться между границами источников, т.е. в основном материале. На Рис. 1 предполагается, что образец нагревается снизу. В Программе возможно представление объекта контроля с 6-ти возможных ракурсов.

*Примечание 2.* Из-за специфической схемы вычисления, реализованной в Программе, толщина источника (дефекта) может быть задана независимо от толщины слоя, что, в отличие от многих подобных программ, дает Пользователю больше свободы при анализе «тонких» дефектов в «толстых» материалах.

|  |
| --- |
|  |
| Рис. 1. Трехмерная декартова модель многослойного тела с внутренними дефектами |

Математическая постановка решаемой задачи выглядит следующим образом.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1) |
| ; | (2) |
|  | (3) |
|  | (4) |
| для  для | (5) |
| и | (6) |
| на границах слоев, а также на границах дефектов и основного материала |

Здесь:  -температура в *i*-й области, отсчитанная от заданной начальной температуры ( соответствует 6-ти слоям,  соответствует 9-ти дефектам);

 -начальная температура изделия;

 -температуро- и теплопроводность в *i* –й области по координате ;

 -декартовы координаты;  -одна из декартовых координат  или ();

-время;

 -плотность мощности внешнего потока нагрева, изменяется во времени и в пространстве;

 -коэффициенты теплообмена на передней и задней поверхностях;

 -температура окружающей среды;

 -размеры изделия.

(1) –трехмерное уравнение теплопроводности параболического типа;

(2) –начальное условие;

(3) –граничное смешанное условие теплообмена на поверхности (нагрев + охлаждение);

(4) –граничное условие на задней поверхности (только охлаждение);

(5) –условие адиабатического теплообмена на боковых поверхностях по *x* и *y*;

(6) –условия неразрывности тепловых потоков и температур на границах слоев и дефектов.

Отметим, что при моделировании анизотропных твердых тел предполагается, что анизотропна только теплопроводность, а теплоемкость и плотность постоянны по всеми координатам. Таким образом, анизотропная температуропроводность задается следующей формулой: .

В зависимости от того, как заданы источники и определены параметры в выражении (3), ThermoCalc-3D Pro реализует различные условия теплообмена на передней поверхности образца, включая принудительный нагрев и охлаждение на поверхности. Эти условия описаны в Табл. 1.

Табл. 2 содержит две рекомендуемые комбинации входных параметров, которые соответствуют трем возможным опциям нагрева и двум основным тепловым процедурам ТНК.

Для решения задачи, определенной выражениями (1-6), ThermoCalc-3D Pro использует неявную численную конечно-разностную схему. Особенность этой схемы то, что численная сетка в дефектных областях создается автоматически, принимая во внимание указанную толщину дефекта и пространственный шаг. В отличие от многих других программ, ThermoCalc-3D Pro гарантирует анализ дефектов, которые являются весьма тонкими по отношению к толщине образца.

*Примечание 3.* ThermoCalc-3D Pro позволяет моделировать неравномерный поверхностный нагрев/охлаждение гауссовским источником тепла , центром которого располагается в произвольной точке  (см. Табл. 1 и *Примечание 6*). Коэффициенты  и  определяют степень локализации источника нагрева. При  моделируется равномерный нагрев.

Табл. 1

Условия теплообмена на передней поверхности объекта контроля

в программе ThermoCalc-3D Pro

|  |
| --- |
| Общее уравнение теплообмена (3): |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Механизм | Пространственная функция | Временная функция |
| Импульсный нагрев  Прямоугольный или гармонический импульс  действует в течение. Образец адиабатический () или неадиабатический (). | Неравномерный нагрев/охлаждение (I)  Нагрев импульсом или принудительное охлаждение гауссовским потоком с центром в точке {}:    (См. *Примечание 3*). | Импульсный нагрев/охлаждение  Нагрев или принудительное охлаждение действуют в течение времени  (импульс прямоугольной формы) |
| Непрерывный нагрев  Неадиабатическое изделие нагревается или охлаждается средой с температурой  (,).  Непрерывный нагрев может быть также моделирован соответствующим значением . | Неравномерный нагрев (II)  Нагрев маской , которая выбирается из эксперимента или рассчитывается теоретически. | Гармонический нагрев/охлаждение  Нагрев или принудительное охлаждение действуют в течение времени  (импульс косинусоидальной формы) |
| Принудительное конвекционное охлаждение  Принудительное охлаждение с коэффициентом  в течение времени  , после чего продолжается «нормальное» охлаждение с коэффициентом . | Равномерный нагрев  При  =0. | Непрерывный теплообмен  Непрерывный нагрев или охлаждение средой с температурой . |

Табл. 2

Рекомендуемые процедуры теплового контроля,

реализуемые с помощью программы ThermoCalc-3D Pro

|  |  |
| --- | --- |
| Описание процедуры контроля | Комбинация входных параметров |
| Нагрев прямоугольным или косинусоидальным импульсом, а также непрерывный нагрев (равномерный или неравномерный)  Опции From file или Exponential heating |  |
| Принудительное охлаждение предварительно нагретого изделия в виде импульса прямоугольной формы (равномерный или неравномерный)  Опция Exponential cooling |  |

# Демо-задачи и краткий экскурс в ThermoCalc-3D Pro

## Демо-сценарий (по умолчанию)

Поскольку программа ThermoCalc-3D Pro первоначально создавалась для анализа задач активного ТНК, в нее зашит демо-сценарий задачи контроля углепластиковой пластины толщиной 1 мм с дефектами различной толщины, расположенными на различной глубине. Данный сценарий реализуется непосредственно после запуска Программы. Входные параметры могут быть просмотрены в окне Расчет/Параметры.

Образец:

Длина – 0.025 [м];

Ширина – 0.035 [м];

Коэффициент теплообмена на передней поверхности - 10 [ *Вт/(м2 ·К)*];

Коэффициент теплообмена на задней поверхности - 10 [ *Вт/(м2 ·К)*];

Коэффициенты пространственного распределения теплового импульса равны 50·1/м2 и 100 1/м2 по координатам *X* и *Y* соответственно. Центр теплового импульса расположен в центре образца;

Максимальная плотность теплового импульса – 105 [ *Вт/(м2 ·К)*];

Число шагов вдоль оси *Х* – 25;

Число шагов вдоль оси *Х* – 35;

Число слоев – 1;

Число дефектов –6.

Слой Слой 1 изготовлен из анизотропного углепластикового композита:

1-й компонент тензора в плоскости *XY* – 6.4 [ *Вт/(м·К)*] ;

Теплопроводность – 0.64 [ *Вт/(м·К)*] в направлении *Z;*

Теплоемкость – 2460[*(Вт·с)/(кг·К)*];

Плотность – 500 [*кг/м3*];

Толшина слоя – 0.001 [*м*];

Число пространственных шагов по оси *Z* – 100.

Дефект Дефект 1 (воздух):

Теплопроводность – 0.07 4 [ *Вт/(м·К)*] во всех направлениях;

Теплоемкость – 928 [*(Вт·с)/(кг·К)*];

Плотность – 1.3 [*кг/м3*];

Длина дефекта по оси *Х* – 0.005 [*м*];

Координата начала дефекта по оси *Х*  – 0.005 [*м*];

Ширина дефекта по оси Y – 0.005 [*м*];

Координата начальной точки дефекта по оси Y – 0.005 [*м*];

Толщина дефекта по оси *Z* – 0.00005 [*м*];

Координата начальной точки дефекта по оси *Z* – 0.00025 [*м*].

Дефекты Дефекты 2-6 имеют один и тот же поперечный размер 5×5 *мм*2 и расположены на глубинах от 0.25до 0.75 *мм* с толщиной 50 и 100 *мкм*.

Время (для случая Импульсный нагрев):

Временной шаг расчета – 0.01 [*с*] ;

Время нагрева – 1 [*с*] ;

Время импульса - 0.001 [*с*] .

Шаг выдачи данных Временной шаг вывода на передней поверхности изделия равен 0.01 [*с*].

Для иллюстрации работы Программы запустите демо-сценарий и просмотрите результаты. Примеры Поле температур, Численная таблица результатов, Временной Дельта-профиль и Пространственный профиль показаны в описании функциональных характеристик на Рис. 6. Измените параметры задачи для того, чтобы проиллюстрировать их влияние на температурные изображения.

Демо-сценарий позволяет: 1) проиллюстрировать эффекты неравномерного нагрева (сильнее в центре); 2) изучить диффузию тепла в анизотропном случае (больше по координате *X*); 3) проанализировать влияние глубины залегания и толщины дефектов на поверхностные температурные сигналы и моменты их оптимальной регистрации. Рекомендуется выполнить расчет также и для случаев, когда температурное поле определяют на задней поверхности изделия или внутри него. В последнем случае можно наблюдать интересные феномены при размещении плоскости выдачи данных между дефектами, расположенными на различных глубинах.

## Демо-сценарий: импульсный нагрев с использованием маски

Пакет ThermoCalc™-6L содержит файл изображения-маски HeatMask.img и соответствующий демо-сценарий Demo-Mask.tcl, который использует маску HeatMask для моделирования неравномерного нагрева. Изображение HeatMask.img форматом 12-бит, 272×136 было позаимствовано из экспериментальной последовательности, полученной с помощью тепловизора ThermovisionTM-900 и соответствовало непосредственно окончанию нагрева. Отметим, что офсет равен 512 Байт. Неравномерный нагрев производили двумя лампами (см. Рис. 2а). Сценарий DemoMask.tlc описывает импульсный нагрев стали толщиной 3 мм, в которой воздушные дефекты расположены на глубине 0.3 и 0.6 мм (толщина дефектов 0.00009 мм, ширина 0.9 мм, длина дефектов 80.7 мм и 4.5 мм). Запустите функцию Расчет. Температурное поле образца при *равномерном* нагреве показано на Рис. 2б, где видны все три дефекта. Наложение маски приводит к *неравномерному* нагреву (Рис. 2в), причем самый глубокий дефект практически не обнаруживается. Таким образом, модель нагрева с маской наглядно иллюстрирует феномен неравномерного нагрева. Заметим, что черные полосы справа и слева соответствуют окружающей среде, потому что объект контроля не заполнял полностью все поле зрения тепловизора. Таким образом, области, соответствующие окружающей среде, также участвуют в маске нагрева в виде специфических зон.

*Примечание 16.* Перед запуском демо-сценария убедитесь, что правильно выбран путь к маске HeatMask.img в опции Расчет/Параметры/Нагрев (маска HeatMask.img должна размещаться в той же папке, что и сама программа ThermoCalc™-6L).

На любом этапе работы с Программой, Вы можете вернуться ко встроенному демо-сценарию с помощью опции File/New.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |
| a) | б) | в) |
| Рис. 2. Рассчитывая температурные распределения с помощью наложенной маски  (сценарий Demo-Mask.tcl, маска HeatMask.img):  a-маска HeatMask.img;  б-распределение температуры при 0.0125 с (без маски);  в- распределение температуры при 0.0125 с (с маской) | | |

## Демо-сценарий: принудительное охлаждение

Пакет ThermoCalc™-6L содержит демо-сценарий DemoC.tcl, который моделирует принудительное охлаждение изделия из стали (то же самое изделие, что и в демо-сценарии DemoMask.tcl). Начальная температура изделия +850oC, температура окружающей среды +20oC. Примеры расчета приведены на Рис. 8. В отличие от случая нагрева, при охлаждении воздушные дефекты видны более холодными по сравнению с окружающими областями (Рис. 3а). Абсолютная температура образца спадает в течение действия импульса  (Рис. 3б) вследствие принудительной конвекции с коэффициентом теплообмена . После того, как принудительная конвекция прекращается, поверхность образца начинает подогреваться более теплыми внутренними слоями, поскольку теплоотдача в среду мала ( по сравнению с принудительным охлаждением. Соответственно дифференциальные температурные сигналы являются отрицательными и возрастают во времени (Рис. 3в). Пространственный вертикальный профиль показан на Рис. 3г для 0.0125 с, что близко к оптимальному времени наблюдения, имеющему место в процедуре импульсного нагрева. Координаты дефектов хорошо выделяются на вертикальных или горизонтальных профилях (Пространственный профиль). Для представления развития температурных сигналов во времени увеличьте время теплового процесса до 0.03 с, затем выберите опцию Временной дельта-профиль и, например, следующие точки: [1,1] в качестве бездефектной точки и [135, 34], [135, 70], а также[135, 102] в качестве точек, расположенных над дефектами.

## Как выбрать шаги численной сетки?

Для удобства Пользователя в Табл. 3 приведены ТФХ распространенных материалов. Точность вычислений с помощью Программы ThermoCalc-3D Pro была проверена на аналитических моделях, а также в сравнении с численными программами ThermoCalc-2D и Femlab. В большинстве случае точность определения бездефектных температур менее 0.1% и дефектных температур – менее 1%. Точность зависит от шагов по времени и пространству, число которых может быть достаточно большим (что, однако, окупается высоким быстродействием Программы). Некоторые рекомендации по выбору шагов сетки, полученные Разработчиком для материалов толщиной более 1 мм, приведены в Табл. 4 для случая обнаружения скрытых пассивных дефектов (носят рекомендательный характер также в случае обнаружения активных источников тепловыделения).

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
| a) | б) |
|  |  |
| в) | г) |
| Рис. 3. Процедура принудительного охлаждения  (сценарий Demo-C.tcl):  а- распределение температуры;  б- изменение температуры во времени в двух точках;  в- изменение дифференциального температурного сигнала  над двумя дефектами;  г-вертикальный пространственный профиль температуры. | |

Табл. 3

Теплофизические характеристики материалов

(в порядке возрастания коэффициента теплопроводности)

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Материал\*\* | Плотность  ,  кг/м3 | Теплоем-кость  ,  Дж/(кг.К) | Теплопро-водность  ,  Вт/(м.К) | Температу-ропровод-ность  ,  10-6 м2/c | Тепловая инерция  ,  Вт.с1/2/(м2.К) |
| Воздух (тонкие промежутки)  Резина (мягкая)  Полиизопрен  Поливинилхлорид  Полиарамид  Эпоксидная смола  Сосна (параллельно волокон)  Формальдегидная смола  Стеклопластик\*  Штукатурка  Вода  Тефлон  Тринитротолуол  Песок речной сухой  Капролон-В  Углепластик\*  Кирпич (красный)\*  Стекло  Песок речной влажный  Двуокись кремния  Бетон\*  Почва  Никелевый сплав  Бороэпоксидный композит\*  Сталь (марки AISI 316)  Нитрид кремния\*  Титан  Цирконий  Бор  Окись алюминия  Бронза  Сталь (марки AISI 1010)  Кремний  Графит  Кремний  Вольфрам  Дюралюминий 2024-T6  Золото  Медь  Карбид кремния  Алмаз | 1.2  1100  913  -  1330  1100…1300  550  1200  -  1100  1000  2210  -  1520  -  -  1700  2442  1650  2200  2400  -  8300  2000  8240  3000  4500  6570  2340  3970  8800  7830  2330  2300  2330  19300  2770  19450  9000  3160  3516 | 1005  2010  1905  -  1047  800…1200  2512  1850  -  1005  4193  1050  -  800  -  -  879  837  2090  745  837  -  440  1000  468  700  522  278  600  765  420  434  800  670  712  132  875  134  406  675  502 | 0.070  0.130  0.134  0.140  0.142 (⊥)  1.69 (||)  0.17…0.19  0.174  0.2  0.3 (⊥)  0.38 (||)  0.233  0.586  0.23  0.23  0.34  0.37  0.64 (⊥)  1.28 (||)  0.755  0.879  1.13  1.38  1.51  2.6  9.5  11 (⊥)  16 (||)  13.4  15-30  21.9  22.7  27,4  46.0  52.0  63.9  84-126  116  148  174  177  313  365  490  660 | 58.0  0.0588  0.0770  0.11  0.102 (⊥) \*\*  0.121 (||)  0.15  0.126  0.09  0.13 (⊥)  0.17 (||)  0.211  0.140  0.099  0.0925  0.28  0.21  0.52 (⊥)  1.04 (||)  0.505  0.430  0.328  0.842  0.752  0.5  2.60  5,5 (⊥)  8,0 (||)  3.47  7.14-14.28  9.32  12.4  20,0  15.2  14.1  18.8  45.1-67.6  75.3  89.2  68.3  73.0  120  100  230.0  374 | 9.19  536  483  422  445 (⊥)  485 (||)  465  490  666  832 (⊥)  922 (||)  507  1570  731  -  643  -  888 (⊥)  1260 (||)  1060  1340  1974  1504  1740  -  5890  -  7190  5612-7937  7170  6440  -  11800  13900  14700  12513-15325  13400  15700  21100  20700  28600  36500  32300  34100 |

\* Ориентировочные значения (зависят от изготовителя и технологического процесса).

\*\* (⊥) – перпендикулярно волокнам; (||) – параллельно волокнам. В композиционных материалах,

например, в углепластике, могут быть определены три компоненты теплопроводности, зависящие

от взаимного расположения волокон.

. Табл. 4

Рекомендуемые пространственно-временные шаги численной сетки при решении задач ТНК с помощью программы ThermoCalc-3D

(глубина дефекта *l* =10%*L*; толщина дефекта *d* =10%*L*, ТФХ материалов:

алюминий - ;

сталь - ;

углепластик - ;

бетон: ;

воздух (в дефекте) – ; коэффициент теплообмена на обеих поверхностях ; точность в скобках приведена по отношению к решению двумерной задачи ТНК с помощью программы ThermoCalc™-2D) \*

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Тол-  щина \*\*, | Условия нагрева | Рекомендуемые шаги сетки  (верхняя строка–RZ сетка , нижняя строка–шаг по времени, *с*;  в скобках–точность, %) | | | |
| мм |  | Алюминий | Сталь | Бетон | Углепластик |
| 1 |  | 25x25x200  0.001  (3.9%) | 5050x200  0.0025  (7%) | 25x25x200  0.01  (2.7%) | 20x20x200  0.005  (1.1%) |
|  |  | 30x30x100  0.01  (9.8%) | 50x50x200  0.01  (7) | 25x25x200  0.05  (3.7) | 20x20x200  0.05  (1.2%) |
| 5 |  | 25x25x100  0.01  (6.5%) | 25x25x200  0.01  (2%) | 25x25x200  0.01  (1.7%) | 20x20x200  0.01  (0.8%) |
|  |  | 25x25x100  1  (7.8%) | 25x25x200  1  (3.3%) | 225x25x100  1  (2%) | 20x20x100  1  (2%) |
| 50 |  | 25x25x100  0.01  (8.4%) | 20x20x200  0.01  (2.7%) | 25x25x100  0.01  (1.1%) | 20x20x200  0.01  (0.8%) |
|  |  | 25x25x200  1  (4.6%) | 25x25x200  5  (2.1%) | 20x20x200  5  (1.6%) | 20x20x200  5  (0.6%) |

\* В этой таблице важно число шагов сетки по координате *Z*. Число шагов по поперечным координатам слабо влияет на точность вычислений.

\*\* Шаг по времени расчета должен быть выбран тщательным образом в зависимости от материала и времени нагрева. При контроле изделий микроэлектроники величина шагов по времени может находиться в микросекундном диапазоне.