



ПОЛИТЕХ
Санкт-Петербургский
политехнический университет
Петра Великого

На правах рукописи

свайданг

Ле Као Данг

**Компьютерный анализ структурной и химической микронеоднородности
низколегированных сталей при формировании качества отливок**

Специальность 05.16.04 – Литейное производство

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Санкт-Петербург – 2021

Работа выполнена в ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»

Научный руководитель: кандидат технических наук, доцент **Голод Валерий Михайлович**, доцент Высшей школы физики и технологий материалов ФГАОУ ВО «СПбПУ».

Официальные оппоненты:

доктор технических наук, профессор **Пряхин Евгений Иванович**, заведующий кафедрой материаловедения и технологии художественных изделий ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургского горного университета» (г. Санкт-Петербург);

доктор технических наук, профессор **Харанжевский Евгений Викторович**, заведующий Лабораторией физики и химии материалов Института математики, информационных технологий и физики ФГБОУ ВО «Удмуртского государственного университета» (г. Ижевск);

кандидат физико-математических наук **Стародумов Илья Олегович**, младший научный сотрудник Лаборатории многомасштабного математического моделирования ФГАОУ ВО «Уральского федерального университета имени первого Президента России Б. Н. Ельцина» (г. Екатеринбург).

Защита состоится 31 мая 2021 г. в 16 часов на заседании диссертационного совета УР.05.16.04 федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» (195251, г. Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29, ЛАК, ауд. кафедры ВШ машиностроения).

С диссертацией можно ознакомиться в Фундаментальной библиотеке и на сайте <http://www.spbstu.ru> ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого».

Автореферат разослан 27 апреля 2021 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета УР.05.16.04

кандидат технических наук, доцент



Ковалев П. В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Надежность и долговечность изделий в условиях эксплуатации определяется не только уровнем физико-механических свойств металла, но и однородностью этих свойств во всем объеме заготовки, что наиболее полно характеризует металлургическое качество продукции.

Однородность механических свойств по объему заготовки обеспечивается однородностью ее структуры и концентрации компонентов. Поэтому при разработке технологических операций или их оптимизации в первую очередь должны быть решены основные задачи, от которых зависит структурная и химическая однородность по объему изготавливаемой заготовки.

Развитие и улучшение компьютерных средств прогнозирования качества продукции позволяет проектировать реализацию более эффективных направлений исследования с целью освоения новых технологий материалов, соответствующих практическим и техническим потребностям продукции из стали.

Важным инструментом, способствующим обеспечению качества отливок, является компьютерное моделирование литейных процессов, результаты которого используются для прогноза параметров формирующейся микроструктуры с целью экономии усилий и затрат на эксперименты с промышленными образцами, а также для разработки средств управления механическими и эксплуатационными свойствами литого металла. Несмотря на многолетние усилия, универсальная модель для теоретического расчета и анализа значений междоузных промежутков дендритов с учетом теплофизических, физико-химических и кинетических факторов во взаимосвязи с диффузионной коалесценцией в процессе эволюции дендритной структуры, не разработана. По этой причине фактически неосуществим достоверный прогноз структурной и химической микронеоднородности литых заготовок, в связи с чем решение данной задачи является весьма актуальным.

Целью диссертационной работы является компьютерное моделирование мезомасштабной неравновесной кристаллизации многокомпонентных низколегированных сталей с целью прогнозирования параметров структурной и химической неоднородности при формировании качества отливок.

Для достижения этих целей в диссертации сформулированы и предложены решения следующих задач:

1. Компьютерный анализ значений базовых геометрических параметров диаграмм состояния и закономерностей равновесной кристаллизации внеперитектических и перитектических многокомпонентных сплавов системы $Fe-C-\sum X_i$ на основе термодинамического моделирования температурно-зависимых значений темпа выделения твердой фазы, межфазного перераспределения компонентов и состава остаточной жидкой фазы.

2. Исследование и развитие системной модели и программного обеспечения для компьютерного моделирования и анализа сопряженных теплофизических, кристаллизационных и диффузионных процессов в условиях непрерывной капиллярно-диффузионной коалесценции боковых ветвей

дендритов при неравновесной мезомасштабной кристаллизации внеперитектических и перитектических многокомпонентных сплавов системы Fe-C- $\sum X_i$.

3. Экспериментальное исследование, оценка и анализ фактических значений междуосных промежутков дендритных ветвей второго порядка λ_2 в многокомпонентных сплавах на основе железа с целью компьютерного прогнозирования статистических характеристик мезомасштабных значений их разброса и эволюции осредненной величины $(\lambda_2)_{\text{ср}}$ в процессе капиллярно-диффузионной коалесценции.

4. Обобщенный анализ закономерностей мезомасштабной неоднородности вторичных междуосных промежутков дендритов стальных отливок на основе использования статистического аппарата логнормального распределения, а также химической неоднородности компонентов по сечению ветвей второго порядка.

Научная новизна положений, выносимых на защиту, заключается в следующем:

1. На основе термодинамического комплекса *POLYTHERM* выполнена оценка влияния легирующих компонентов на параметры многокомпонентного перитектического превращения. Полученные сводные уравнения для расчета температуры и концентрации углерода в критических точках *H*, *J*, *B* позволяют определить тип сплава с заданным химическим составом, его положение на диаграмме состояния, а также прогнозировать термодинамическую кинетику фазовых превращений при равновесной кристаллизации.

2. Разработана системная модель *ALLSYS*, а также программное и информационное обеспечение для компьютерного моделирования и анализа сопряженных процессов неравновесной кристаллизации многокомпонентных низколегированных Fe-C- $\sum X_i$ сплавов с обеспечением температурно-зависимых термодинамических, теплофизических, физико-химических и кинетических параметров с помощью программы *POLYTHERM*.

3. На базе модели *ALLSYS* разработан алгоритм и программное обеспечение для моделирования перитектического превращения с расчетом перемещения межфазной границы L/γ , происходящего под влиянием теплоотвода, и диффузионного перераспределения компонентов на межфазной границе δ/γ в результате перитектического превращения.

4. В результате системного моделирования комплекса процессов неравновесной кристаллизации реализован расчет кинетики изменения среднего мезомасштабного размера междуосных промежутков дендритных ветвей в результате капиллярно-диффузионной коалесценции и перераспределения компонентов по сечению вторичных дендритных ветвей с учетом непрерывной эволюции размеров междуосных промежутков.

5. Впервые установлена (с доверительной вероятностью 95 %) возможность компьютерного моделирования формирования и развития мезомасштабной дендритной неоднородности с использованием закономерностей их логнормального распределения и определены обобщенные

параметры для расчета непрерывной эволюции микроструктурных характеристик в результате коалесценции.

Теоретическая и практическая значимость исследования. Совместное использование расчетной модели *ALLSYS* в сочетании с программными комплексами *POLYCAST* (теплообмен при затвердевании литых заготовок) и *POLYTHERM* (термодинамика фазовых превращений в многокомпонентных сплавах) обеспечивает возможность моделирования неравновесной кристаллизации низколегированных сталей для исследования и технологического проектирования процесса формирования фасонных отливок.

Методология диссертационного исследования базируется на системном анализе сопряженных литейных процессов. Для системного анализа неравновесного выделения твердой фазы и межфазного перераспределения компонентов в условиях коалесценции вторичных дендритных ветвей реализован комплекс последовательных этапов компьютерного моделирования – от разработки системной дифференциальной модели, ее программного и информационного обеспечения до многофакторного анализа физико-химических условий формирования и прогнозирования дендритной микроструктуры. Компьютерное моделирование структурно-фазовых превращений базируется на принципе аддитивного физико-химического влияния компонентов сплава на процесс диффузионно-капиллярной морфологической эволюции дендритной структуры и формирование локальной дендритной неоднородности, стохастическая природа и масштабы которой выявлены при металлографическом исследовании.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Разработанная физико-химическая модель *ALLSYS*, реализующая системное описание взаимосвязанных процессов теплообмена, межфазного диффузионного перераспределения компонентов и фазовых превращений при перитектическом превращении, а также формирования и развития дендритной структуры при затвердевании низколегированных сталей.

2. Количественный анализ отдельного и совместного влияния компонентов низколегированных сталей на параметры перитектического превращения с помощью термодинамического комплекса *POLYTHERM*.

3. Логнормальный характер статистического распределения величины вторичных междоузельных промежутков дендритов и определение обобщенных параметров для описания их эволюции при прогнозировании мезомасштабной структурной неоднородности, формирующейся при кристаллизации исследованных сталей.

4. Сопряженный численный анализ процессов возникновения структурной и химической неоднородности фасонных отливок из низколегированных сталей на основе разработанной модели *ALLSYS* и программных комплексов *POLYCAST* и *POLYTHERM* при технологическом прогнозировании условий формирования качества литой заготовки.

Обоснованность и достоверность научных результатов работы подтверждена их сопоставлением с параметрами термодинамического моделирования и экспериментальными данными исследований дендритной

структуры. В качестве информационного обеспечения компьютерных расчетов использованы лицензированные программные комплексы *POLYTHERM* и *POLYCAST*. Достоверность экспериментальных данных металлографического и термического анализа обеспечена использованием аттестованных измерительных установок и применением статистического анализа при оценке структуры исследованных стальных образцов.

Апробация полученных результатов. Основные результаты работы были представлены и обсуждались на следующих совещаниях и конференциях:

XLVII Международная научно-практическая конференция «НЕДЕЛЯ НАУКИ СПбГПУ» (СПб, СПбГПУ, 19-24 ноября 2018 г.); 12 Всероссийская научно-практическая конференция "Литейное производство сегодня и завтра" (СПб, СПбГПУ, 12-14 сентября 2018 г.); VIII международная конференция «Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии» (Ижевск, Удмуртский гос. университет, 11-12 апреля 2019 г.); Научно-практическая конференция с международным участием «НЕДЕЛЯ НАУКИ СПбГПУ» (СПб, СПбГПУ, 18-23 ноября 2019 г.); 13 Всероссийская научно-практическая конференция "Литейное производство сегодня и завтра" (СПб, СПбПУ, 16-18 сентября 2020 г.).

Публикации. По результатам диссертационной работы опубликовано 9 работ, из них 2 – в журналах, входящих в наукометрическую базу SCOPUS, 2 – в журналах, входящих в рекомендованный список ВАК.

Личный вклад. Автор участвовал в постановке задач диссертации, разработке алгоритмов моделирования неравновесной дендритной кристаллизации и в их программной реализации, проведении экспериментальных исследований, а также в анализе и изложении результатов работы.

Структура и объем диссертационной работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав и заключения. Объем диссертации составляет 108 страниц и включает 12 таблиц и 30 рисунка. Список литературы содержит 95 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы диссертационной работы, сформулированы ее цель и задачи, показана научная новизна и практическая значимость, представлены основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе представлен литературный обзор, в котором на основе сопоставления опубликованных работ рассматриваются особенности кристаллизации исследованных низколегированных сталей, влияющие на формирование и эволюцию дендритной структуры, дано сравнение аналитических и эмпирических моделей для анализа перераспределения компонентов на межфазных границах. Рассмотрены результаты исследований перитектического превращения, а также различные подходы, ориентированные на численное моделирование кинетики этого процесса. На основе обзора представленных работ сделан вывод о том, что опубликованные

детерминированные модели не содержат общепризнанного обобщения для адекватной оценки взаимосвязанного влияния компонентов стали и условий их кристаллизации на формирование структурной и химической неоднородности.

Во второй главе рассмотрен термодинамический анализ фазовых превращений при кристаллизации литейных сплавов Fe-C- ΣX_i (X_i =Si, Mn, Cr, Ni).

Расчет координат области H - J - $B(t,C)$ перитектического превращения диаграммы состояния выполнен на основе условий равенства химического потенциала каждого компонента во всех фазах (L , δ , γ -фазы), представленных системой уравнений:

$$\sum_{i,0} [\mu_i^L = \mu_i^\omega]; i=\text{Fe, C, } \Sigma X_i; X_i=\text{Si, Mn, Cr, Ni}; \omega=\delta, \gamma. \quad (1)$$

Решение системы (1) для углеродистых низколегированных сталей (таблица 1) осуществлено с помощью программного комплекса *POLYTHERM* с целью оценки влияния *раздельного* и *совместного* введения в них кремния, марганца, хрома и никеля в пределах их марочного содержания (ГОСТ 977-88).

Таблица 1 – Содержание компонентов в исследованных сталях

Содержание компонентов X_i , масс. %				
Базовые компоненты	Si	Mn	Cr	Ni
Пределы изменения X_i	0,20-0,40	0,40-1,20	0,60-1,60	0,70-1,60
Средний уровень X_i	0,30	1,15	0,75	1,15

С добавлением кремния (рисунок 1,а), марганца (рисунок 1,б) и хрома (рисунок 1,в) в сплавы, содержащие остальные компоненты на *среднем* уровне (таблица 1), вершины перитектических треугольников смещаются в направлении снижения критических значений температуры и концентрации. Исключением является никель (рисунок 1,г), который в сплавах Fe-C- ΣX_i вызывает сдвиг точек H - J - B в направлении повышения их температуры при одновременном снижении концентрации.

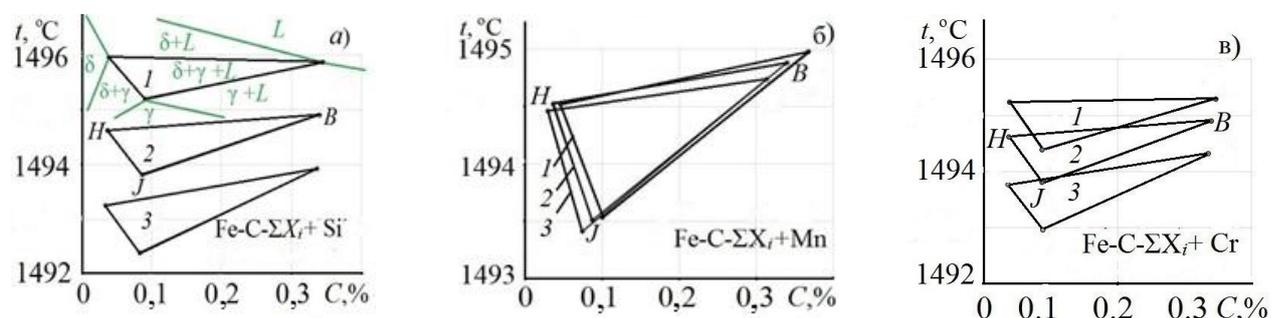


Рисунок 1 – Изменение положения критических точек H - J - B в зависимости от содержания компонентов в сплавах Fe-C- ΣX_i

Примечание: Цифры 1, 2, 3 соответствуют минимальному (1), среднему (2) и максимальному (3) содержанию *вводимого* компонента – Si (а), Mn (б), Cr (в), Ni (г); содержание остальных компонентов X_i в сплавах отвечает среднему уровню (таблица 1)

На основе полученных значений концентрации и температуры критических точек H - J - B в соответствии с методикой ортогонального планирования экспериментов определены коэффициенты уравнений, отражающие вклад различных компонентов в изменение условий перитектического превращения (таблица 2).

Таблица 2 – Сводные уравнения зависимости концентрации и температуры точек H - J - B от содержания базовых компонентов Si, Mn, Cr и Ni

Критические точки H - J - B (C, t)	Нелинейные уравнения регрессии $C_{H-J-B}(X_i)$ и $T_{H-J-B}(X_i)$		
C_H, C_J, C_B , масс. %	$C_H=0,094-0,013Si-0,017Mn-0,019Ni$	$C_J=0,179-0,024Si-0,029Mn-0,033Ni$	$C_B=0,535-0,055Mn-0,086Ni$
T_H, T_J, T_B , °C	$T_H=1494,5-17,10Si-0,88Cr+5,13Ni+3,12SiMn-0,63MnCr+1,01MnNi$	$T_J=1494,5-17,90Si-1,38Mn-0,85Cr+4,49Ni+3,41SiMn-0,62MnCr+0,72MnNi$	$T_B=1494,5-12,11Si-0,84Mn-0,60Cr+3,94Ni+2,07SiMn-0,42MnCr+0,46MnNi$

Согласно приведенным коэффициентам регрессии, при оценке которых были опущены статистически незначимые величины, влияние различных компонентов описывается не только линейными соотношениями разного знака (C_H, C_J, C_B), но также включает значительное число парных взаимодействий, отражающих разнонаправленное изменение температурных параметров (T_H, T_J, T_B). Полученные сводные уравнения, представленные в таблице 2, и аналогичные им использованы для количественной оценки температурно-концентрационных границ перитектических сплавов, а также при компьютерном моделировании хода перитектических превращений в низколегированных сталях.

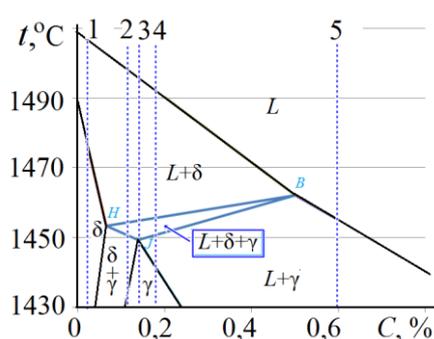


Рисунок 2 – Квазибинарный разрез расчетной диаграммы состояния для системы Fe-C-2% Si-0,75% Mn-0,80% Cr
 $C_H=0,065$ %; $t_H=1453,4$ °C
 $C_J=0,139$ %; $t_J=1449,4$ °C
 $C_B=0,501$ %; $t_B=1462,2$ °C

На рисунке 2 представлен фрагмент расчетной диаграммы состояния с нанесенными критическими точками H - J - B , ограничивающими область перитектического превращения, а также указаны координаты ряда сплавов (1-5), для которых на рисунке 3 приведены диаграммы равновесного выделения твердой фазы $m(t)$ при кристаллизации, что позволяет выявить соотношение этапов выделения и растворения фаз (L, δ и γ) для последующего теплофизического анализа условий затвердевания и образования дендритной структуры (глава 3).

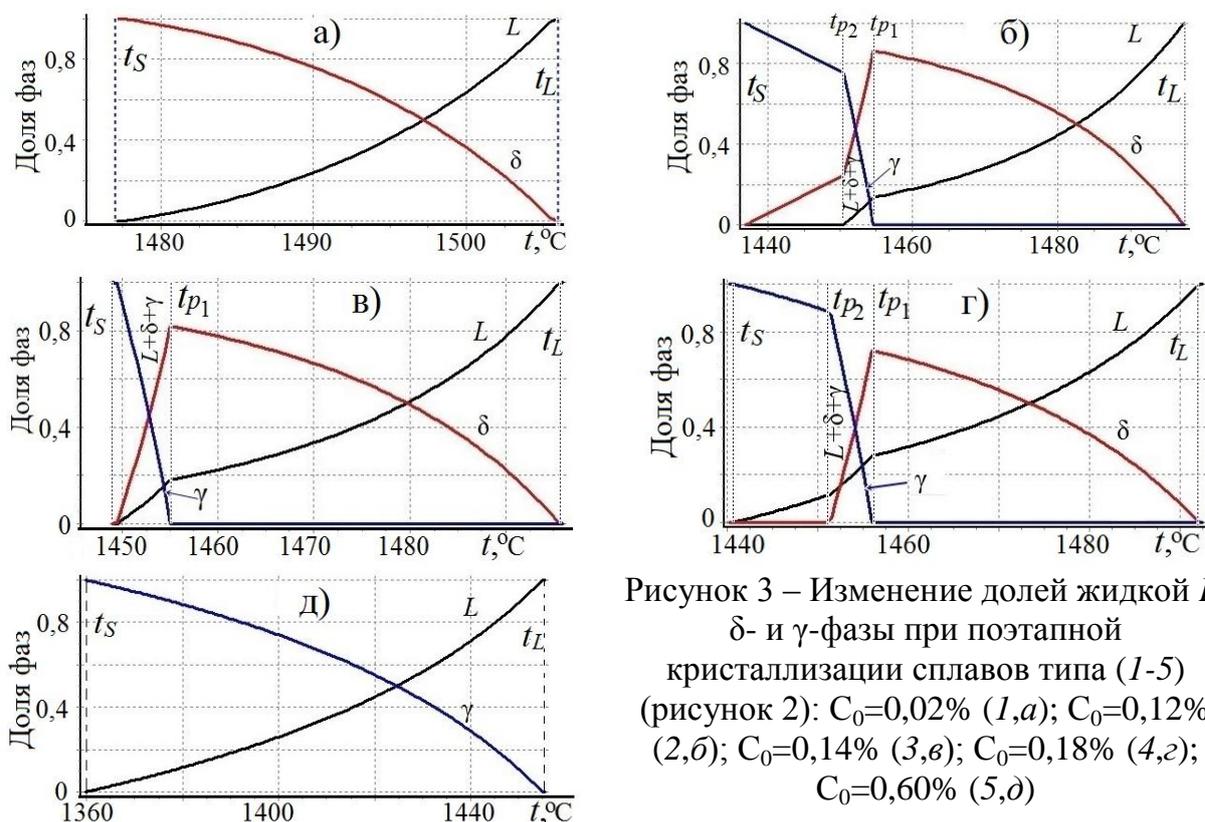


Рисунок 3 – Изменение долей жидкой L , δ - и γ -фазы при поэтапной кристаллизации сплавов типа (1-5) (рисунок 2): $C_0=0,02\%$ (1,а); $C_0=0,12\%$ (2,б); $C_0=0,14\%$ (3,в); $C_0=0,18\%$ (4,г); $C_0=0,60\%$ (5,д)

Характер поэтапного выделения твердой фазы оказывает непосредственное воздействие на ход тепловых и усадочных процессов, формирование структуры литого металла и возникновение комплекса дефектов различной природы (усадочных, газовых, ликвационных, деформационных и т.д.), механизм образования которых связан с ходом кристаллизации $m(t)$ и темпом выделения твердой фазы dm/dt .

Начальное содержание углерода (C_0) в сплаве (рисунки 1-2) относительно точек H , J , B дает базовую информацию о направлении изменений фазового состава на каждом этапе по ходу равновесной кристаллизации – положении необходимых для последующих кинетических расчетов критических точек (температуры ликвидуса t_L , солидуса t_S , начала t_{p1} и конца t_{p2} перитектического превращения) и темпе выделения твердой δ - и γ -фазы (рисунок 3).

В третьей главе представлена разработка численной модели ALLSYS и соответствующего программного и информационного обеспечения для расчета кристаллизации исследованных сталей и проведена проверка адекватности разработанной модели для расчета сопряженных процессов кристаллизации первичной твердой фазы.

Ключевым инструментом исследования неравновесной кристаллизации стали на этапе выделения из расплава первичного твердого раствора (δ - или γ -фазы) является системный анализ сопряженных процессов в мезоэлке кристаллизующегося сплава Fe-C- ΣX_i (рисунок 4), масштаб которой обеспечивает равномерное распределение температур.

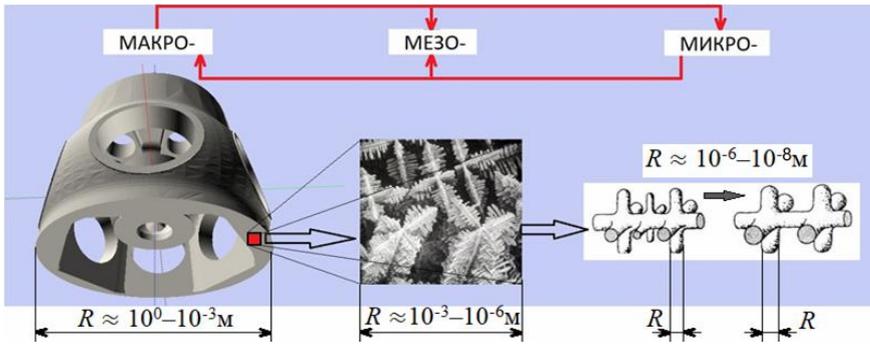


Рисунок 4 –
 Моделирование
 процессов при
 кристаллизации как
 многоуровневая задача

Моделирование этих процессов для внеперитектических систем выполнено с помощью системы уравнений (2,а-г), описывающей изменение во времени τ температуры $t(\tau)$ (2,а) и доли твердой фазы $m(t)$ в мезо-масштабной ячейке (2,б), а также эволюцию среднего состава жидкой фазы $C_i^L(m)$ (2,в) и размеров междусосных промежутков $\lambda_2(\tau)$ дендритов (2,г). Совокупность численно решаемых уравнений (2,а-г) образует системную модель ALLSYS:

$$\begin{cases}
 qd\tau = -Rcdt + RLdm; & \text{а)} \\
 \frac{dm}{dt} = \frac{1}{\sum_{i=1}^K \frac{p_i C_i^L (1-k_i)}{1-m(1-\sigma_i k_i)}}; & \text{б)} \\
 \frac{dC_i^L}{dm} = \frac{C_i^L (1-k_i)}{1-m(1-\sigma_i k_i)}; i=1, \dots, K; & \text{в)} \\
 \frac{d(\lambda_2^3)}{d\tau} = \frac{1}{\varphi_j \sum_{i=1}^K \frac{p_i (1-k_i) C_i^L}{\Gamma_i D_i^L}}. & \text{г)}
 \end{cases} \quad (2)$$

Здесь c , L – объемная теплоемкость и скрытая теплота кристаллизации сплава; q – эффективный тепловой поток на границах мезоячейки; k_i , p_i – коэффициент распределения и тангенс угла наклона поверхности ликвидуса i -го компонента K -компонентного сплава; D_i^L , D_i^S – коэффициенты диффузии компонентов в жидкой и твердой фазе; σ_i – параметр обратной диффузии, учитывающий полноту ($0 \leq \sigma_i \leq 1$) протекания диффузионных процессов в твердой фазе; $\sigma_i = \frac{2\alpha_i}{1+2\alpha_i}$; $\alpha_i(t, \tau) = \frac{8D_i^S \tau}{\lambda_2^2}$; Γ – коэффициент Гиббса-Томсона; φ_j – коэффициент, учитывающий принятую для анализа j -ую радиальную модель коалесценции дендритных ветвей.

Системный характер анализа процесса кристаллизации обеспечен совместным решением комплекса уравнений (2,а-г) при использовании информационного обеспечения, в котором физико-химические (k , p , L , c) и кинетические (D^L , D^S , λ_2) параметры модели являются зависимыми от базовых переменных (t , τ , m), непрерывно передаваемых в расчетную программу ALLSYS по ходу численного расчета значений температурно-зависимых переменных термодинамического моделирования, получаемых с помощью лицензированного программного комплекса POLYTHERM.

Допущения, принятые при моделировании первичной кристаллизации с использованием компьютерной модели ALLSYS, включают:

- 1) локальное равновесие на межфазных границах в объеме рассматриваемой мезоэчейки;
- 2) отсутствие диффузионного переноса компонентов на границах мезоэчейки (закрытая система) в условиях теплообмена с окружающей средой;
- 3) равномерное диффузионное распределение концентрации компонентов в объеме жидкой фазы;
- 4) аддитивное влияние компонентов сплава на процесс диффузии в расплаве, отмеченное в системе уравнений знаками суммирования, при незначительном вкладе коэффициентов перекрестной диффузии $D_{ij}=0$;
- 5) учет обратной диффузии компонентов сплава в твердой фазе.

Сравнительное исследование базовых параметров кристаллизации в зависимости от состава и полноты протекания диффузионных процессов в твердой фазе с помощью системной модели *ALLSYS* (рисунок 5) проведено для различных внеперитектических многокомпонентных сплавов системы Fe-C- ΣX_i , в которых кристаллизация происходит с превращением ($L \rightarrow \delta$) или ($L \rightarrow \gamma$).

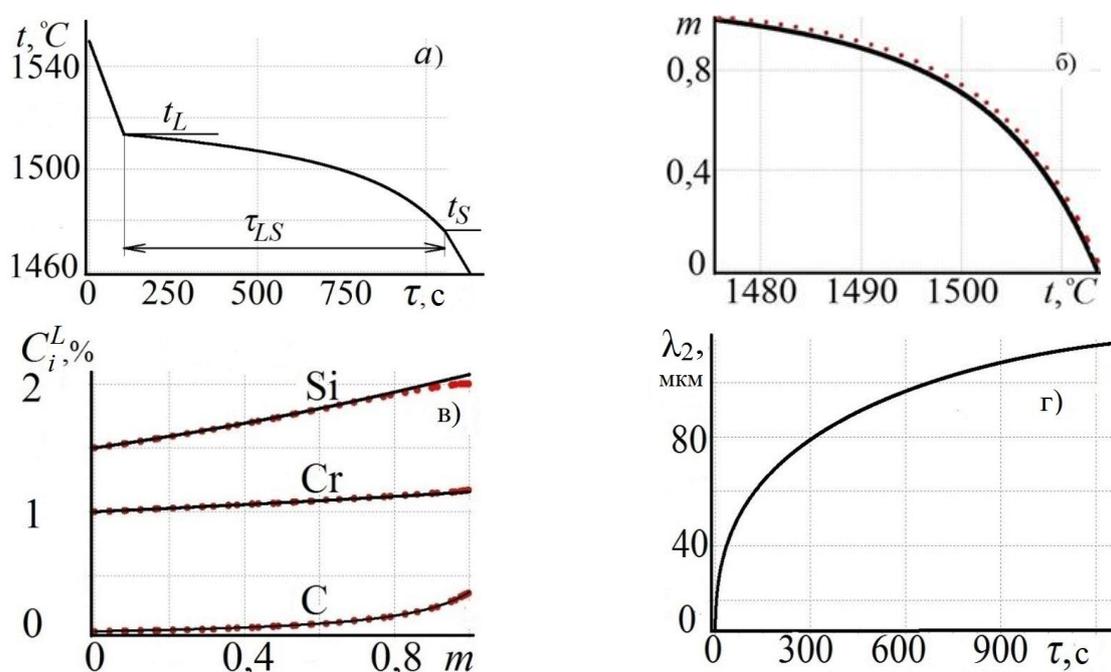


Рисунок 5 – Изменение температуры $t(\tau)$ (а), доли твердой фазы $m(t)$ (б), состава жидкой фазы $C_i^L(m)$ (в) и размеров междоусных промежутков дендритов (г) в мезоэчейке при равновесной кристаллизации ($\sigma_i=1$) внеперитектического сплава Fe-0,06% C-1,5% Si -1,0% Cr по данным компьютерной программы *ALLSYS* (а–в, линии) и термодинамического моделирования *POLY THERM* (б–в, пунктир)

Для подтверждения адекватности разработанной численной модели при компьютерном анализе кристаллизации низколегированных сталей на рисунке 5 представлены результаты численного расчета с помощью системной модели *ALLSYS* в режиме *равновесной* кристаллизации (при $\sigma_i=1$) в сопоставлении с данными термодинамического моделирования *POLY THERM*, убедительно демонстрирующие согласие этих данных.

Обобщение полученных результатов по сплавам разного состава и условиям теплоотвода показывает, что величина погрешности не превышает

1 % по доле твердой фазы и 3-4 % по отклонению расчетной концентрации от среднего содержания компонентов. Это позволяет использовать модель *ALLSYS* в качестве гибкого инструмента для анализа влияния теплофизических, физико-химических и технологических факторов на процесс кристаллизации исследованных многокомпонентных сталей и их структурной и химической микронеоднородности (см. главы 4-5).

При моделировании реальной кинетики затвердевания сплавов учет неравновесного характера процессов с помощью модели *ALLSYS* в ходе кристаллизации осуществлен путем включения в расчетные соотношения (2,б) и (2,в) параметра обратной диффузии $0 \leq \sigma_i(D_i^S, \tau_{LS}, \lambda_2) \leq 1$ (таблица 3), в котором учитываются температурно-зависимые параметры $D_i^S(t)$ и $\lambda_2(\tau)$.

Таблица 3 – Сравнительные условия формирования дендритной структуры сплавов серий *A* и *B* с различным содержанием углерода при вводе по 1 % Si, Mn, Cr и Ni

Сплавы серии <i>A</i> ($C_0 \leq C_H$)	Состав сплава (C_i), %				
	$C_0=0,06$	0,06 C +1,0 Si	0,06 C +1,0 Mn	0,06C +1,0 Cr	0,06C +1,0 Ni
$D_i^\delta, 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$	5,20	0,037	0,019	0,021	0,014
$k_i^{\delta/L}$	0,16	0,68	0,60	0,88	0,80
$ p_i^{\delta/L} $ (К/%)	79,90	12,62	5,06	2,30	3,66
$\Delta t_{LS}, \text{ К (EQ)}$	23	32	27	24	25
Ω_i (К)	5	3,8	1,5	0,28	0,68
$(\sigma_i)_{\text{ср}}$	0,995	0,753	0,530	0,513	0,431
λ_2 (мкм) при $q = 2000 \text{ Вт/м}^2$	155	118	138	148	142
Сплавы серии <i>B</i> ($C_0 \geq C_B$)	$C_0=0,60$	0,60 C +1,0 Si	0,60 C +1,0 Mn	0,60 C +1,0 Cr	0,60 C +1,0 Ni
$D_i^\gamma, 10^{-10} \text{ м}^2/\text{с}$	8,22	0,012	0,0216	0,0004	0,0016
$k_i^{\gamma/L}$	0,32	0,75	0,68	0,86	0,92
$ p_i^{\gamma/L} $ (К/%)	68,50	16,12	4,02	2,13	2,32
$\Delta t_{LS}, \text{ К (EQ)}$	81,0	102,8	84,8	76,0	85,0
Ω_i (К)	27,55	5,80	1,30	0,40	0,28
$(\sigma_i)_{\text{ср}}$	0,991	0,147	0,221	0,005	0,021
λ_2 (мкм) при $q = 2000 \text{ Вт/м}^2$	82	72	80	82	81
Примечание: $(\sigma_i)_{\text{ср}}$ – среднее значение коэффициента обратной диффузии; $ p_i^{\omega/L} $ – абсолютное значение параметра $p_i^{\omega/L}$; D_i^ω – среднее значение коэффициента диффузии i -компонента ω -фазы в интервале кристаллизации Δt_{LS} ; τ_{LS} – локальная продолжительность кристаллизации					

Как показано на рисунке 6,а-б, высокая диффузионная подвижность углерода ($\sigma_C^\gamma \approx 0,96-0,99$) обуславливает при неравновесной кристаллизации (*NE*) изменение доли твердой фазы (а) и содержания углерода (б), практически совпадающее с равновесными условиями (*EQ*) в широком интервале температур. Хром, имеющий наиболее низкую величину коэффициента D_{Cr}^γ и

наименьшее значение $\sigma_{Cr}^{\gamma} \approx 0,01-0,08$ (таблица 3), демонстрирует при *NE* (рисунок б,в) наиболее крутое и нарастающее повышение его концентрации в расплаве C_{Cr}^L , характерное для условий значительного подавления диффузии в твердой фазе (модель Шейля).

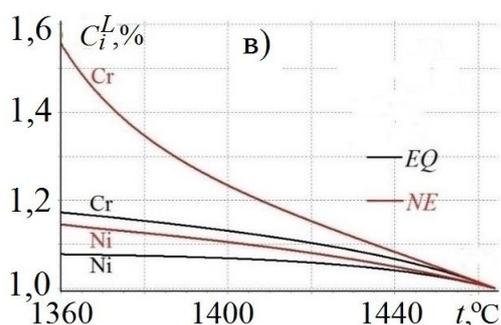
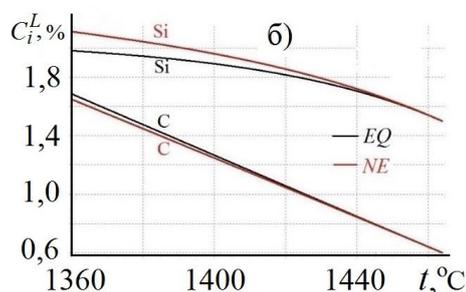
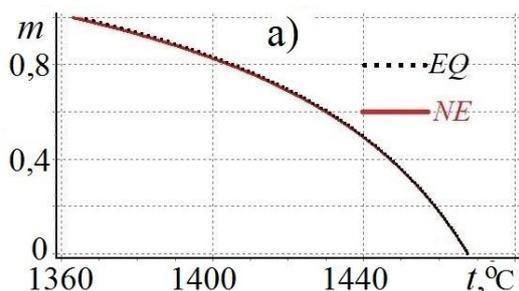


Рисунок 6 – Изменение доли первичной твердой фазы $m(t)$ (а) и состава жидкой фазы C_i^L (б-в) заперитектического сплава Fe-0,6 % C-1,5 % Si-1,0 % Cr-1,0 % Ni в условиях равновесной (*EQ*) и неравновесной (*NE*) кристаллизации $t_L=1466$ °C(*EQ*, *NE*); $t_S=1357$ °C (*EQ*); $t_S=1353$ °C (*NE*); $\tau_{LS}=1160$ с (*EQ*, *NE*);

Изменение концентрации кремния при соотношении коэффициентов диффузии $D_C^{\gamma} \gg D_{Si}^{\gamma} > D_{Cr}^{\gamma}$ происходит (в условиях *NE*) с умеренной интенсивностью вследствие относительно низкого значения $(\sigma_{Si})^{\gamma} \approx 0,15-0,68$.

Расчет доли первичной твердой фазы $m(t)$ (рисунок б,а) при неравновесной кристаллизации выполнен с использованием уравнения (2,б), в котором знак суммирования учитывает совместное влияние всех компонентов с помощью комплекса $\Omega = \sum_{i=1}^K \frac{p_i C_i^L (1-k_i)}{1-m(1-\sigma_i k_i)}$. В таблице 3 приведено значение вклада Ω_i для различных компонентов, среди которых углерод имеет максимальное значение и играет определяющую роль, в результате чего темп выделения твердой фазы при *NE* практически совпадает с данными при *EQ*.

Сравнительное влияние различных компонентов на изменение темпа выделения твердой фазы $dm(t)/dt$ и размеров междуосных промежутков в результате коалесценции вторичных дендритных ветвей представлено на рисунке 7 и в таблице 3, где сопоставлено изменение $m(t)$ и $\lambda_2(\tau)$ в результате раздельного добавления по 1 % Si, Mn, Cr и Ni к основе, соответствующей сравниваемым внеперитектическим сплавам серии *A* (0,06 % C) и серии *B* (0,60 % C). Общий ход кривых $m(t)$ мало изменяется с повышением содержания углерода с 0,06 до 0,60 % за исключением существенного снижения их среднего темпа кристаллизации от 0,030-0,040 K⁻¹ (*A*) до 0,010-0,012 K⁻¹ (*B*) в результате значительного расширения температурного интервала затвердевания Δt_{LS} (с 20-30 до 80-100 K). Соотношение скоростей прироста размеров междуосных промежутков и взаимное расположение кривых $\lambda_2(\tau)$

При анализе хода перитектического превращения рассматриваются изменения, которые сопровождают выделение γ -фазы из расплава на границе раздела L/γ , а также в условиях твердо-фазного превращения на границе раздела δ/γ . Текущее состояние трехфазной системы (δ - γ - L) условно представлено графиком распределения углерода A_1 - A_2 - A_3 в областях m^L , m^δ и m^γ (рисунок 8,б), отражающим разнонаправленное перемещение межфазных границ от исходного положения границы L/δ (штрих-пунктир на нулевой отметке) на момент начала перитектического превращения. Кинетика коалесценции, т.е. капиллярно-диффузионное изменение расстояний между дендритными ветвями на стадии выделения γ -фазы, оценивается как продолжение и развитие процесса их эволюции $\lambda_2(\tau)$ в результате образования и последующего роста (в начальный период кристаллизации при выделении δ -фазы), описывается уравнением (2,з), которое позволяет дать совместную оценку интенсивности коалесценции с учетом частичного подавления диффузии компонентов в области γ -фазы, имеющей относительный объем $m^\gamma = m^{L\gamma} + m^{\delta\gamma}$.

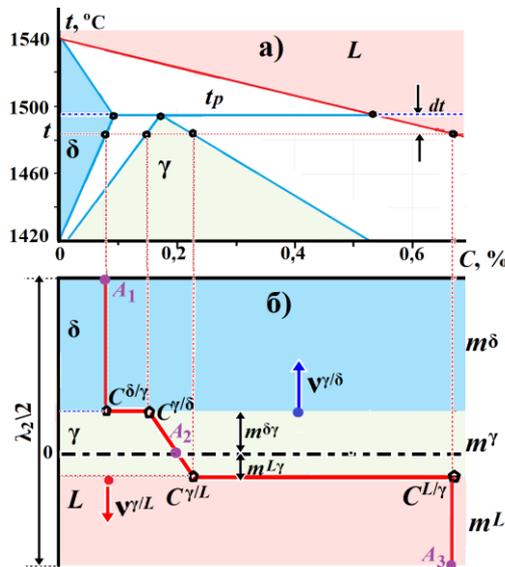


Рисунок 8 – Кинетика изменения концентрации углерода и положения межфазных границ γ/δ и γ/L на этапе перитектического превращения A_1 - A_2 - A_3 в сплавах Fe-C- ΣX_i

Кинетика выделения γ -фазы из расплава на межфазной границе γ/L оценивается по скорости увеличения относительных размеров области $m^{L\gamma}$ и рассчитывается на основе модели ALLSYS при совместном решении уравнения (2,б) для расчета темпа неравновесного выделения γ -фазы и уравнения (2,а), определяющего локальную скорость изменения температуры ($dt/d\tau$) при заданных условиях теплоотвода:

$$v^{\gamma/L} = \left(\frac{dm^{L\gamma}}{dt} \right) \left(\frac{dt}{d\tau} \right)^{L\gamma} \frac{\lambda_2(\tau)}{2} = \left[\sum_2^K \frac{P_i^{L/\gamma} C_i^{L/\gamma} (k_i^{L/\gamma} - 1)}{1 - m^{L\gamma} (1 - \sigma_i k_i^{L/\gamma})} \right]^{-1} \left(\frac{dt}{d\tau} \right)^{L\gamma} \frac{\lambda_2(\tau)}{2}. \quad (5)$$

Этот результат позволяет оценить локальную интенсивность накопления на границе L/γ (при $p_i^{L/\gamma} < 0$ и $k_i^{L/\gamma} < 1$) избыточного углерода и других компонентов, диффундирующих под влиянием градиента концентрации в растущем слое γ -фазы (рисунок 8,б).

(рисунок 7,б) по степени их влияния в обеих группах при этом аналогично ходу кривых $m(t)$ остается неизменным: С-(Cr-Ni-Mn)-Si при значительном преобладании вклада кремния.

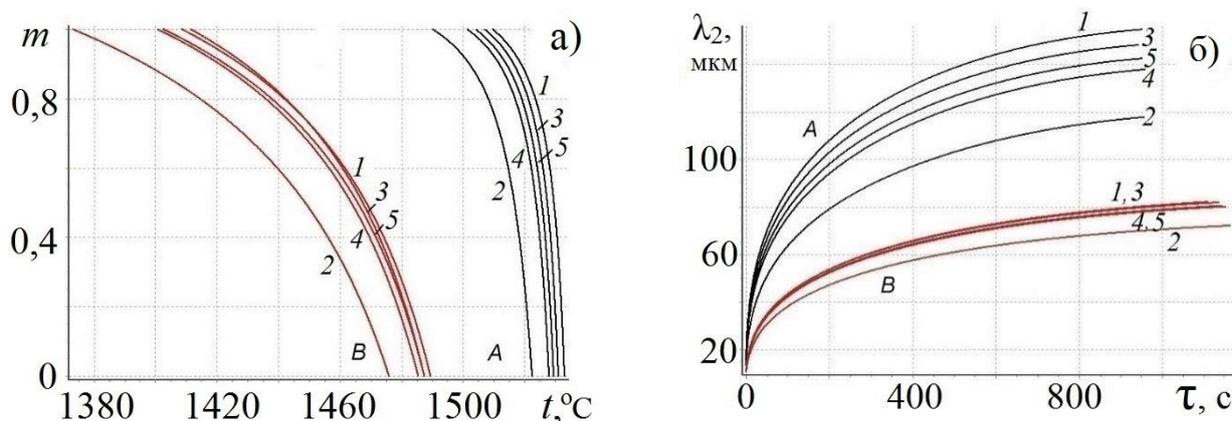


Рисунок 7 – Доля твердой фазы (а) и размеры междоусных промежутков $\lambda_2(\tau)$ (б) в сплавах серий А (0,06 % С) и В (0,60 % С) при введении по 1 % Si (2), Cr (3), Mn (4) и Ni (5)

Путем статистической обработки полученных данных по средней величине междоусных промежутков $\lambda_2(\tau_{LS}, C, Si, Mn, Cr, Ni)$ получены сводные статистические модели, коэффициенты которых отдельно отражают влияние теплофизических и физико-химических факторов в форме соотношений:

для серии А при $C=0,06\%$

$$\lambda_2 = 15,90 (\tau_{LS})^{0,332} (1 - 0,242Si - 0,116Mn - 0,038Cr - 0,082Ni); \quad (3)$$

для серии В при $C=0,60\%$

$$\lambda_2 = 8,24 (\tau_{LS})^{0,326} (1 - 0,128Si - 0,026Mn + 0,077Cr - 0,016Ni). \quad (4)$$

Коэффициенты регрессии уравнений (3-4) согласуются с данными различных публикаций, в которых приведены эмпирические формулы для исследованных углеродистых сталей, и содержат близкие к экспериментальным значения параметров для формул вида $\lambda_2(\text{мкм})=K\tau^n$; ($K=7,2-28 \text{ К/с}^{-n}$; $n=0,32-0,50$).

Таким образом, с помощью разработанной программной модели ALLSYS в сочетании с адекватным информационным обеспечением реализован системный анализ процесса объемной кристаллизации внеперитектических сплавов $Fe-C-\sum X_i$, отражающий взаимосвязанное протекание сопряженных во времени и пространстве мезомасштабной ячейки тепловых, кристаллизационных, диффузионных и капиллярных процессов.

Разработанный дополнительный программный модуль для расчета неизотермической кинетики перитектического превращения базируется на основе системы уравнений (2,а-г), адаптированной применительно к этой области, и получен путем совместного решения диффузионной задачи перераспределения углерода на межфазных границах L/γ и δ/γ (рисунок 8) для сопряженных процессов фазовых превращений в комбинированной области γ -фазы ($m^{L\gamma}+m^{\delta\gamma}$), непрерывно расширяющейся после их начала.

Диффузионный поток углерода в слое γ -фазы общей толщиной m^γ вызывает смещение границы γ/δ в направлении уменьшения размеров области m^δ вследствие межфазного перераспределения углерода на границе γ/δ с неравновесным темпом выделения γ -фазы при $p_C^{\delta/\gamma} < 0$ и $k_C^{\delta/\gamma} > 1$:

$$\frac{dm^{\delta\gamma}}{dt} = \left[\frac{p_C^{\delta/\gamma} C^{\delta/\gamma} (k_C^{\delta/\gamma} - 1)}{1 - m^{\delta\gamma} (1 - \sigma_C k_C^{\delta/\gamma})} \right]^{-1} > 0. \quad (6)$$

Уравнение (6) описывает межфазное превращение на границе γ/δ , характеризуемое величиной параметра обратной диффузии σ_C , близкого к единице (таблица 3), без учета компонентов замещения, что обусловлено высокой диффузионной подвижностью углерода и его преобладающим влиянием.

Скорость диффузионного увеличения толщины слоя γ -фазы m^γ на границе γ/δ при соответствующем сокращении относительных размеров области m^δ определяется соотношением, аналогичным (5) при:

$$v^{\gamma/\delta} = \left(\frac{dm^{\delta\gamma}}{dt} \right) \left(\frac{dt}{d\tau} \right)^{\delta\gamma} \frac{\lambda_2(\tau)}{2} = \left[\frac{p_C^{\delta/\gamma} C^{\delta/\gamma} (k_C^{\delta/\gamma} - 1)}{1 - m^{\delta\gamma} (1 - \sigma_C k_C^{\delta/\gamma})} \right]^{-1} \left(\frac{dt}{d\tau} \right)^{\delta\gamma} \frac{\lambda_2(\tau)}{2}, \quad (7)$$

которое рассчитывается с учетом уменьшения концентрации углерода в δ -фазе $\Delta C^{\delta/\gamma} = m^{\delta\gamma} dC^{\delta/\gamma} + 2v^{\gamma/\delta} (C^{\gamma/\delta} - C^{\delta/\gamma}) (\lambda_2)^{-1} d\tau$ в результате неравновесного понижения температуры по уравнениям (2,а) и (2,б).

На рисунке 9 сопоставлена эволюция количества фаз в ходе перитектического превращения, представленная с помощью модели *неравновесной* кристаллизации в сопоставлении с *равновесными* условиями при заданных условиях теплоотвода $\left(\frac{dt}{d\tau} \right)$.

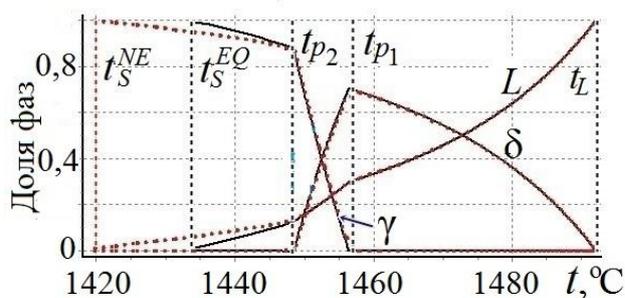


Рисунок 9 – Изменение количества фаз L, δ и γ сплава Fe-0,18 % C-2 % Si-0,75 % Mn-0,80 % Cr при равновесной (EQ) (линии) и неравновесной (NE) (пунктир) кристаллизации t_S^{EQ}, t_S^{NE} – температура солидуса при равновесных (EQ) и неравновесных (NE) условиях

В период первичного выделения твердой δ -фазы и перитектического превращения диффузионные процессы протекают практически одинаково, что обусловлено преобладающим соотношением коэффициентов обратной диффузии углерода в сравнении с компонентами замещения (таблица 3) $\sigma_i^\gamma < \sigma_i^\delta \ll (\sigma_C \approx 1)$. На этапе неравновесного превращения ($L \rightarrow \gamma$) интенсивно повышается содержание углерода и остальных легирующих компонентов в остаточной жидкой фазе, вследствие чего значительно снижается температура солидуса сплава.

Наиболее важным результирующим параметром перитектического превращения, который позволяет судить об адекватности представленной

модели, является величина и соотношение скоростей перемещения межфазных границ δ/γ и L/γ , поскольку для этих параметров получены инструментальные данные их регистрации, в частности, по скорости $v^{\gamma/L}=0,02-4,0$ мкм/с и $v^{\gamma/\delta}=0,50-10,0$ мкм/с в зависимости от состава сплава и температурных условий перитектического превращения. Результаты, полученные при использовании формул (5) и (7), находятся в тех же пределах ($v^{\gamma/L}=0,3-2,0$ мкм/с и $v^{\gamma/\delta}=3,0-7,0$ мкм/с).

В четвертой главе представлены разработка и программная реализация *вероятностной* модели прогнозирования дендритной структуры, характеризуемой специфической неравномерностью распределения вторичных междуосных промежутков дендритных ветвей λ_2 в мезомасштабе, которая оказывает значительное воздействие на ход литейных процессов при формировании стальных отливок.

Для исследования дендритной структуры стальных отливок различного состава и условий затвердевания в работе проведены детальные микроструктурные измерения (таблица 4) междуосных промежутков боковых ветвей дендритов (от 100 до 300 для каждого сплава), выявленных на травленых шлифах углеродистых и низколегированных марок, полученных путем закалки при затвердевании (образцы 1-7), и из высоколегированной стали 10X16H25M2T (образцы 8-10), вырезанных из средней части по высоте слитка массой 500 кг на удалении от поверхности соответственно на 100, 140 и 175 мм.

Таблица 4 – Химический состав и условия затвердевания исследованных образцов стали

Номер образца	1	2	3	4	5	6	7	8-10
C,%	0,11	0,12	0,18	0,19	0,36	0,69	1,01	0,08
Si,%	0,12	0,27	0,44	0,40	0,27	0,23	0,25	0,51
Mn,%	1,25	1,53	1,26	1,42	0,58	0,72	0,46	1,66
Cr,%	–	–	–	–	0,08	–	–	15,5
Ni,%	–	–	–	0,13	0,05	–	–	24,3
Δt_{LS} , К	65	75	80	65	75	120	140	30
τ_{LS} , с	240	230	210	210	230	250	300	300-450

На основе статистического анализа экспериментальных данных на рисунке 10,а приведены гистограммы распределения вторичных междуосных промежутков (λ_2) исследованных образцов стали различного состава при варьировании условий их затвердевания – по средней скорости охлаждения от 0,50 К/с (для образцов 1-7) до 0,10 К/с (образцы 8-10) и по режиму кристаллизации, прерываемой в образцах 1-7 закалкой жидко-твердого металла при выделении от 40 до 80 % твердой фазы сплава.

Преобразование исходного массива данных $X[\lambda_2]$ (рисунок 10,а) путем использования относительных значений $(\lambda_2/(\lambda_2)_{ср})$ размеров междуосных промежутков (рисунок 10,б) при совмещении их локальных координат для

$\lambda_2/(\lambda_2)_{cp}=1$ приводит к существенному изменению взаимного расположения гистограмм $Y[\lambda_2/(\lambda_2)_{cp}]$. При сохранении их индивидуальной асимметричности на рисунке 10,б проявляется сходственный характер геометрии различных кривых относительно общей вершины и компактное взаимное расположение всего составного ансамбля.

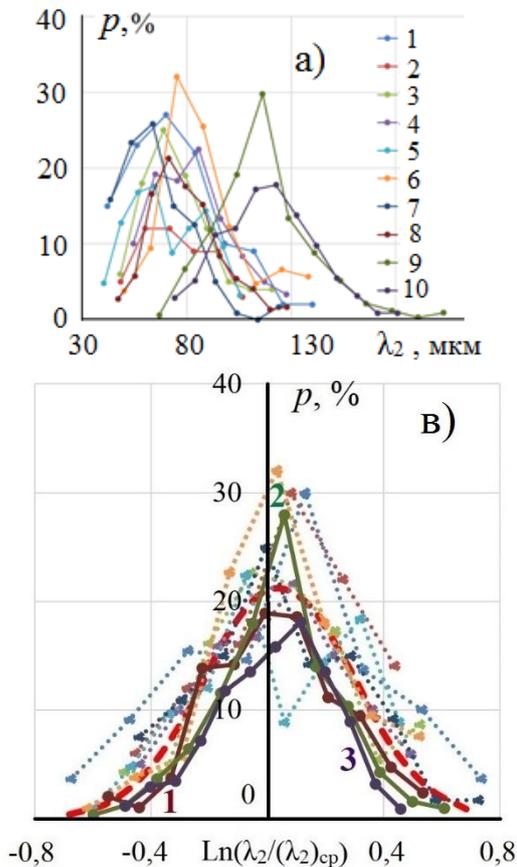


Рисунок 10 – Сводные гистограммы распределения частоты p массива исходных размеров $X[\lambda_2]$ (а), массива $Y[(\lambda_2/(\lambda_2)_{cp})]$ относительных размеров вторичных междоусных промежутков дендритов (б) и логарифмического массива $Z[\ln(\lambda_2/(\lambda_2)_{cp})]$ (в) в исследованных литых образцах из сталей различных марок (точки для образцов 1-7 и линии для образцов 8-10) в сопоставлении с обобщенной кривой распределения частоты (пунктир) в полулогарифмических координатах (в)

Представленные на рисунке 10,в результаты логарифмического преобразования $Z[\ln(\lambda_2/(\lambda_2)_{cp})]$ промежуточного набора данных $Y[\lambda_2/(\lambda_2)_{cp}]$ демонстрируют симметрию положительных и отрицательных ветвей гистограмм массива $Z[\ln(\lambda_2/(\lambda_2)_{cp})]$, что позволило разработать обобщенную численную модель для прогнозирования неоднородности дендритной структуры, построенную на основе использования концепции *логнормального* распределения вероятности случайных величин:

$$f\left[z, \mu^*, \sigma^*, \lambda_2/(\lambda_2)_{cp}\right] = \frac{1}{\left[\lambda_2/(\lambda_2)_{cp}\right] \sigma^* \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2(\sigma^*)^2}(z - \mu^*)^2\right], \quad (8)$$

где $z = \ln(\lambda_2/(\lambda_2)_{cp})$; μ^* и σ^* – математическое ожидание и стандартное отклонение параметра z .

Эффективность использования *логнормального* распределения для дисперсных систем различной природы (экономических, организационных, механических и др.), обладающих *мультипликативным* характером взаимодействия их компонентов, надежно установлена.

Для исследуемого процесса капиллярно-диффузионной коалесценции дендритной структуры исследуемых сплавов статистические параметры полученного *логнормального* распределения междуосных промежутков (нулевое значение величины математического ожидания μ^* и коэффициента асимметрии A^* , равенство отрицательного $|z_{min}|$ и положительного z_{max} размаха гистограмм – см. рисунок 10,в) подтверждены с доверительной вероятностью 95 %, в том числе – с использованием стандартной процедуры оценки гипотез по критерию Хи-квадрат (таблица 5).

Таблица 5 – Сравнительная оценка экспериментальных $p(Z)$ и расчетных $P(Z)$ значений частоты логнормального массива $Z[\text{Ln}(\lambda_2/(\lambda_2)_{cp})]$ для заданных промежутков $[z_1, z_2]$

$Z[\text{Ln}(\lambda_2/(\lambda_2)_{cp})]$	-0,54	-0,41	-0,27	-0,14	0	0,14	0,27	0,41	0,54
$p(z)$	0,02	0,05	0,10	0,17	0,22	0,20	0,14	0,07	0,03
$P(z)$	0,032	0,061	0,126	0,183	0,220	0,189	0,131	0,066	0,018

Эмпирические значения вероятности $p(Z)$ логнормальных значений исследованного массива $Z[\text{Ln}(\lambda_2/(\lambda_2)_{cp})]$ на каждом выделенном промежутке $[z_1; z_2]$ в интервале $[z^*_{min} = -0,816; z^*_{max} = 0,816]$, приведенные в таблице 5, хорошо согласуются с теоретическими значениями $P(Z)$ и практически использованы для построения обобщенной пунктирной кривой (рисунок 10,в), отражающей результаты проведенных этапов статистической обработки экспериментальных данных микроструктурных измерений для исследованных образцов стали, что наглядно подтверждает целесообразность практического применения обобщенного уравнения (8).

Для выявленных статистических параметров обобщенного логнормального распределения междуосных промежутков получены следующие статистически достоверные значения параметров:

$$Z_{min} = -0,68; Z_{max} = 0,68; \mu^* = 0; \sigma^* = 0,25; A^* = 0. \quad (9)$$

Их использование позволяет с помощью уравнений (8) рассчитывать эмпирические значения мезомасштабной частоты $p(z)$ размеров междендритных промежутков $f(z_i)$ в заданном интервале $[a = z^*_{min}, b = z^*_{max}]$ на основе известных табличных значений для нормального распределения (глава 5).

Вместе с тем, полученные оценки устойчивой стабильности параметров (9) свидетельствуют о возможности их использования для решения *обратной* задачи – расчета относительной доли дендритов, междуосные промежутки которых находятся в заданном интервале значений $\Delta X[\lambda_2]$ или $\Delta Y[\lambda_2/(\lambda_2)_{cp}]$, с целью количественной характеристики мезомасштабной структурной неоднородности (глава 5).

Образование разветвленных дендритных кристаллитов и развития химической неоднородности твердой фазы являются сопряженными и взаимосвязанными процессами. Расчет дендритной ликвации по сечению ветвей цилиндрической морфологии как в δ -, так и в γ -фазе, осуществлен с

помощью численного анализа на основе разностной модификации уравнения Фика (рисунок 11):

$$\frac{\Delta C_i^N}{\Delta \tau_D} = D_i^\omega \left[\frac{C_i^{N+1} - 2C_i^N + C_i^{N-1}}{\Delta R^2} + \frac{1}{R^N} \frac{C_i^{N+1} - C_i^{N-1}}{2\Delta R} \right]; 0 \leq R^N \leq \lambda_2(m)/2; 0 \leq \tau \leq \tau_{LS}, (10)$$

где C_i^N – концентрация i -го компонента сплава в N -ом узле расчетной сетки; ΔR – пространственный шаг расчетной сетки; $\Delta \tau_D$ – временной шаг диффузионного расчета по явной схеме.

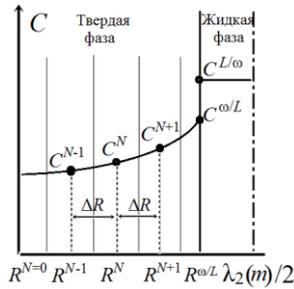


Рисунок 11 – Расчетная сетка для моделирования распределения компонентов сплава в масштабе $\lambda_2(m)/2$ при перемещении подвижной межфазной границы ω/L

Уравнение (10) применимо для анализа перераспределения i -го компонента в узлах сетки в пределах $2 \leq N \leq (F-1)$, где F – ближайший к межфазной границе сеточный узел $R^{\omega/L}$.

Для граничных точек, расположенных на оси ветви ($N=0$) и в ближайшей к оси точке ветви ($N=1$), концентрация i -го компонента рассчитывается по следующим уравнениям:

$$\frac{\Delta C_i^{N=0}}{\Delta \tau_D} = \frac{4D_i^\omega}{\Delta R^2} (C_i^{N=1} - C_i^{N=0}), (11)$$

$$\frac{\Delta C_i^{N=1}}{\Delta \tau_D} = \frac{D_i^\omega}{\Delta R^2} \left(\frac{C_i^{N=0}}{2} - 2C_i^{N=1} + \frac{3C_i^{N=2}}{2} \right). (12)$$

Начальная концентрация компонентов на оси дендритных ветвей рассчитывается по соотношению: $(C_i^{N=0})_0 = k_i^{\omega/L} (C_i^L)_0$, где $(C_i^L)_0$ – исходная концентрация i -го компонента сплава. На подвижной межфазной границе $R(F) = \lambda_2(m)/2$, где состав остаточной жидкой фазы $C_i^L[R(F), m] = C_i^L(t_L)$ отвечает текущей температуре ликвидуса $t_L(\tau)$, концентрация образующейся твердой фазы определяется согласно условиям локального равновесия на межфазной границе $R^{\omega/L}$ по соотношению $C_i^{\omega/L} = k_i^{\omega/L} C_i^{L/\omega}$.

На основе уравнений (10-12) с учетом приведенных начальных и граничных условий производится прогноз перераспределения компонентов по сечению вторичной дендритной ветви во время кристаллизации твердой фазы, непрерывно выделяющейся на межфазной границе ω/L из расплава.

На рисунке 12 приведен ход микроликвации для стали марки 30ХНМЛ, являющейся (см. уравнения в таблице 2) постперитектическим сплавом, согласно которому перераспределение компонентов происходит не только на межфазной границе вследствие накопления легирующих компонентов в остаточной жидкой фазе, а также в результате диффузионного перераспределения компонентов по сечению дендритных ветвей во время

кристаллизации. Согласно уравнениям (10), поэтапное распределение концентрации i -го компонента в сплаве в N -ом узле расчетной сетки находится в прямой многофакторной зависимости от величины коэффициента диффузии D_i^{ω} в ω -твердой фазе и межфазного коэффициента распределения $k_i^{\omega/L}$, а также предшествующей эволюции среднего состава C_i^L жидкой фазы.

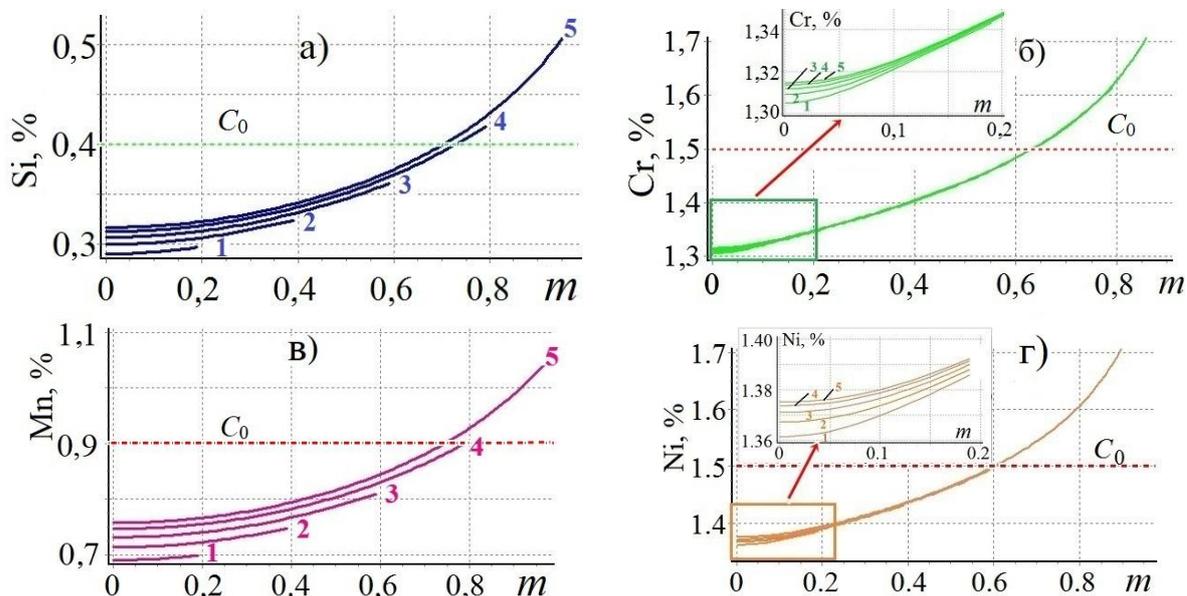


Рисунок 12 – Этапы (1-5) перераспределения легирующих компонентов Si (а), Cr (б), Mn (в) и Ni (г) по сечению дендритных ветвей второго порядка во время кристаллизации

Значительное различие коэффициентов диффузии (см. таблицу 3) кремния и марганца (порядок величины $\approx 10^{-12}$ м²/с) по сравнению с хромом и никелем ($\approx 10^{-14}$ м²/с) наглядно отражается на характере их распределения и величине ликвационной неоднородности. В связи с малой величиной коэффициентов диффузии и большим коэффициентом распределения $k_i^{\gamma/L}$ дендритная ликвация, обусловленная накоплением хрома и никеля на межфазной границе L/γ при ее перемещении во время кристаллизации, а также перераспределение этих компонентов по сечению дендритных ветвей, происходит многократно слабее по сравнению с другими компонентами (Si и Mn).

Таким образом, в работе установлена применимость стандартной функции вероятности логнормального распределения для исследования дендритной структуры образцов различных литейных сталей и определены сводные значения соответствующих обобщенных параметров. Этот результат, совпадающий с ранее полученными данными исследования значительного массива многокомпонентных литейных сплавов алюминия, позволяет заключить, что мезомасштабное превращение дендритной структуры при капиллярно-диффузионной коалесценции в процессе объемного затвердевания сплавов вследствие тождественного характера происходящих при этом физико-химических процессов демонстрирует критериальное подобие структурных характеристик по ряду количественных параметров и автомодельность в отношении базовых эволюционных факторов (состав сплавов, условия теплоотвода и др.).

В пятой главе рассмотрено использование разработанной модели *ALLSYS* для анализа формирования структурной и химической микронеоднородности при затвердевании литой заготовки массой 6200 кг из стали 50ХГЛ (рисунок 13,а).

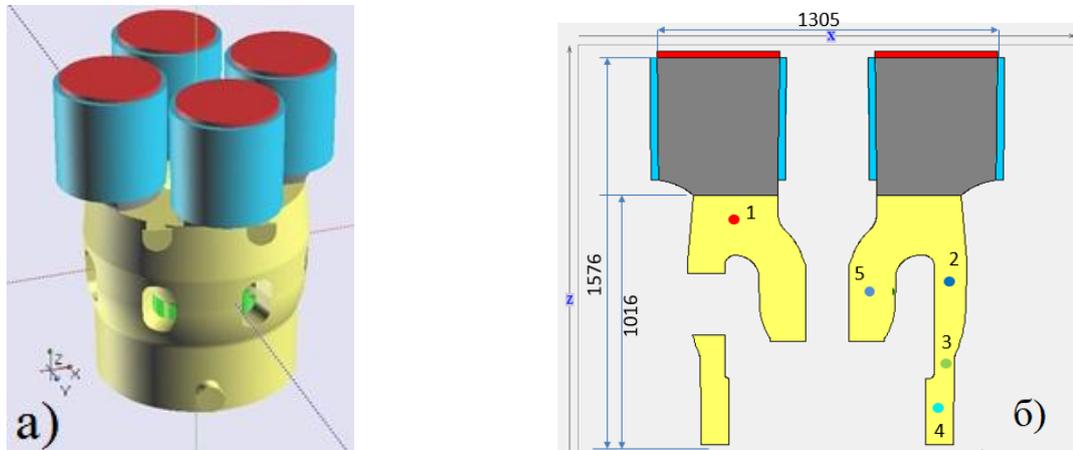
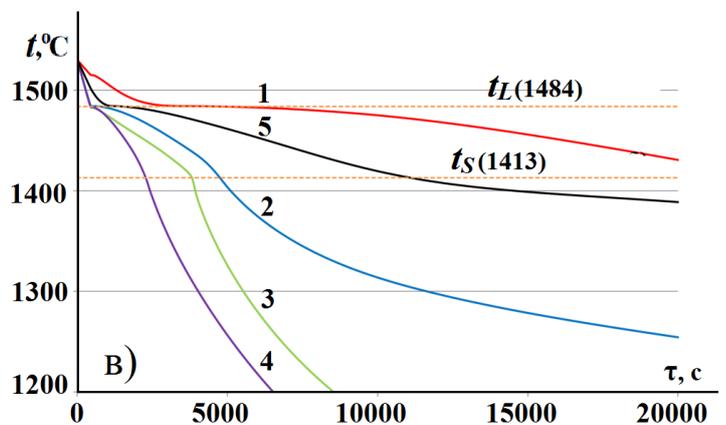


Рисунок 13 – Макро-моделирование затвердевания отливки «Корпус»
 а – геометрическая модель;
 б – схема расположения контрольных точек (1-5);
 в – расчетные термические кривые для контрольных точек (1-5), полученные с помощью программного комплекса *POLYCAST*



$M_{отл.}$ кг	$t_L, ^\circ\text{C}$	$t_S, ^\circ\text{C}$	$\Delta t_{LS}, ^\circ\text{C}$
6200	1484	1413	71

Номер точки	1	2	3	4	5
τ_{LS}, c	19000	4100	3500	1800	9800

По результатам макромасштабного моделирования затвердевания отливки, полученным с помощью лицензионного программного комплекса *POLYCAST*, определен ход и локальная продолжительность затвердевания в характерных контрольных точках (рисунок 13,в), а также рассчитано изменение междоусных промежутков дендритов по сечению участков (1-5) в результате непрерывной коалесценции боковых ветвей.

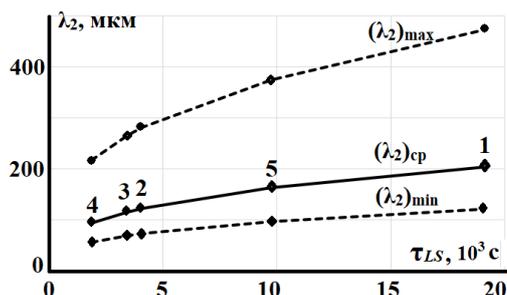


Рисунок 14 – Эволюция дендритной неоднородности, выявленная путем сравнения граничных и средних значений междоусных промежутков в контрольных точках (1-5)

Параметры конечной дендритной структуры, представленные на

рисунке 14, демонстрируют их асимметричные размеры, отражающие логнормальный характер распределения значений междуосных промежутков λ_2 , находящихся в интервале $(\lambda_2)_{min} \leq \lambda_2 \leq (\lambda_2)_{max}$ между минимальным $(\lambda_2)_{min}$ и максимальным $(\lambda_2)_{max}$ значением. Как показано на рисунке 14, асимметричность восходящей ($\lambda_2 < (\lambda_2)_{cp}$) и нисходящей ($\lambda_2 > (\lambda_2)_{cp}$) ветвей гистограмм возрастает с повышением продолжительности коалесценции, а также средних значений междуосных промежутков.

Сопоставление ликвационных кривых (рисунок 15) показывает, что распределение углерода является практически равномерным, в то время как для кремния и хрома значение индекса ликвационной неоднородности β превышает 0,5-0,7 и имеет величину менее 0,45 для марганца. Это обусловлено значительным различием величины их физико-химических параметров – коэффициента диффузии в твердой фазе и коэффициента распределения, при этом характер зависимости индекса β от условий затвердевания обусловлен различной интенсивностью дендритной коалесценции (см. таблицу 3 в главе 3).

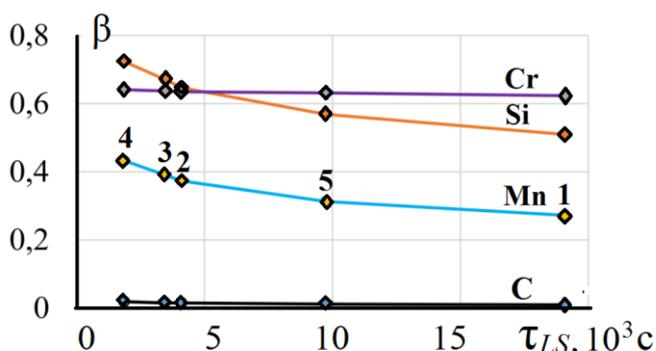


Рисунок 15 – Зависимость индекса результирующей ликвационной неоднородности

$$\beta = \frac{(C_i)_{max} - (C_i)_{min}}{(C_i)_0} \quad \text{компонентов}$$

по сечению дендритных ветвей от интенсивности теплоотвода в локальных точках (1-5)

Для хрома, отличающегося высокой склонностью к ликвации, изменение β незначительно, в то время как для марганца и кремния склонность к ликвации заметно снижается при увеличении локального времени затвердевания τ_{LS} и, соответственно, величины средних междуосных промежутков λ_2 .

Решение *обратной* задачи, сформулированной в главе 4 для определения относительной доли дендритов, междуосные промежутки которых находятся в заданном интервале значений $[(\lambda_2)_{i-1}; (\lambda_2)_i]$, демонстрирует на рисунке 16 результаты, которые отчетливо выявляют асимметрию развития дендритной структуры в течение всего периода затвердевания мезоэчейки и масштабный характер ее формирующейся структурной неоднородности, которые играют определяющую роль в динамике ряда сопряженных литейных процессов. На основе приведенных данных по дендритной неоднородности реализована возможность практической модернизации средств фильтрационного анализа *внутридендритного* течения расплава, являющихся основным инструментом для прогнозирования усадочных дефектов.

В качестве параметра, определяющего фильтрационное развитие усадочных пустот в отливках, обычно используют коэффициент проницаемости K_p , величина которого согласно формуле Козени пропорциональна площади сечения λ_2^2 внутридендритных фильтрационных каналов. Учитывая статистическую неоднородность распределения междуосных промежутков

$p_i(\lambda_2)_i$ и широкий диапазон их варьирования (рисунок 16), при расчете коэффициента проницаемости необходимо использовать вместо средней величины $(\lambda_2)_{cp}(\tau)$ в ходе кристаллизации эффективное значение:

$$(\lambda_2)_{эф} = \sum_{(i)} p_i \left(\overline{(\lambda_2)_i} \right) * \overline{(\lambda_2)_i}, \text{ где } \overline{(\lambda_2)_i} = \frac{(\lambda_2)_{i-1} + (\lambda_2)_i}{2}. \quad (13)$$

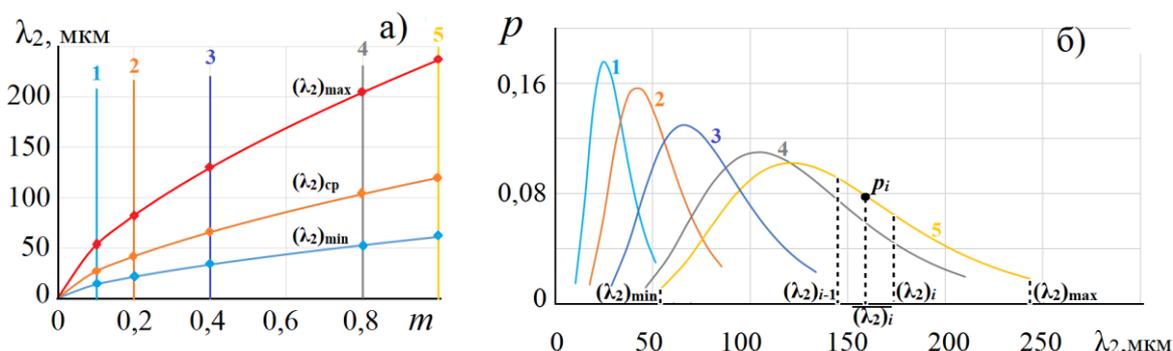


Рисунок 16 – Кинетика изменения минимальных $(\lambda_2)_{min}$, средних $(\lambda_2)_{cp}$ и максимальных $(\lambda_2)_{max}$ междусных промежутков дендритов в результате коалесценции боковых ветвей (а) и гистограммы дендритной неоднородности мезомасштабного распределения междусных промежутков боковых ветвей (б) с изменением доли твердой фазы при $m=0,1$ (1); 0,2 (2); 0,4 (3); 0,8 (4); 1.0 (5) в период затвердевания стали (таблица 4, образец 1, $\tau_{LS} = 240$ с)

В таблице 6 приведены результаты сравнительного расчета коэффициента проницаемости K_p для пяти разных периодов ($m=0,1; 0,2; 0,4; 0,8; 0,98$) в ходе затвердевания стали с учетом логнормальной оценки дендритной неоднородности согласно формуле (13) и при средней величине $(\lambda_2)_{cp}(\tau)$.

Таблица 6 – Изменение коэффициента проницаемости K_p с учетом неизменной величины и логнормального распределения размеров междусных промежутков в ходе кристаллизации сплава

Варианты расчета K_p		$m=0,1$	$m=0,2$	$m=0,4$	$m=0,8$	$m=0,98$	
(1)	$(\lambda_2)_{cp}=\text{const}$	$K_p, (10^{-12} \text{ м}^2)$	8750	4390	1160	26,3	0,0027
(2)	$(\lambda_2)_{эф}=\text{var}$	$(\lambda_2)_{эф}, \text{ мкм}$	26,8	44,5	70,2	109,8	127,3
		$(K_p)_{эф} (10^{-12} \text{ м}^2)$	10471	5069	1330	30,1	0,0032
Относительное изменение, %		$\frac{(K_p)_{эф} - K_p}{K_p}$	19,6	15,5	14,8	14,7	18,5

Примечания: (1) – значение K_p при неизменной величине междусных промежутков; (2) – эффективное значение $(\lambda_2)_{эф}$ и $(K_p)_{эф}$ на основе логнормальной оценки дендритной неоднородности

Данные таблицы 6 показывают существенное различие в величине коэффициента проницаемости при учете его неоднородности в пределах локальных мезообластей, что приводит к значительному повышению интенсивности потока фильтрующегося расплава на 14-20% для рассматриваемых условий литья.

Таким образом, результаты локального прогнозирования дендритной структуры и микроликвации исследуемых участков отливки демонстрируют возможности использования реализованного в работе системного подхода при моделировании процессов затвердевания стальных отливок для проведения многофакторного анализа технологических условий затвердевания литых заготовок.

Заключение

1. Современное состояние теории кристаллизации отливок не позволяет получить адекватное реальности количественное описание неравновесных физико-химических превращений при затвердевании внеперитектических и перитектических сталей вследствие недостаточной изученности процесса формирования дендритной структуры и ее реальной неоднородности, выявляемой при металлографических исследованиях.

2. Для решения задачи исследования и прогнозирования микроструктуры низколегированных сталей в отливках разработана численная системная модель *ALLSYS*, с помощью которой реализовано моделирование неравновесной кристаллизации и получено описание сопряженного изменения температуры, доли твердой фазы, состава остаточной жидкой фазы и величины вторичных междоусных промежутков дендритов в мезомасштабной ячейке в условиях диффузионной коалесценции дендритных ветвей с учетом частичного подавления диффузии в твердой фазе.

3. При моделировании кинетики перитектического превращения в связи с возникновением вторичной твердой γ -фазы модель *ALLSYS* модифицируется путем включения расчетных процедур для оценки перемещения межфазной границы L/γ , происходящего под влиянием теплоотвода, и диффузионного перераспределения компонентов на межфазной границе δ/γ в результате определяющей роли углерода.

4. Адекватность результатов моделирования обеспечивается путем использования разработанного программного обеспечения для термодинамического расчета равновесных физико-химических и теплофизических параметров сплавов при перитектических превращениях, а также учета опубликованных экспериментальных данных по температурно-зависимым значениям коэффициентов диффузии компонентов сплава. В работе представлены данные публикаций, подтверждающие достоверность проведенных расчетов.

5. Совместное использование системной модели *ALLSYS* в сочетании с обобщенной моделью логнормального распределения междоусных промежутков дендритных ветвей для исследованных стальных отливок позволяет определить не только их среднюю величину в ходе кристаллизации, но и количественно оценить возникающую структурную неоднородность, т.е. относительную долю дендритов, междоусные промежутки которых находятся в заданном интервале значений.

6. По результатам численного расчета затвердевания фасонной отливки с учетом технологических условий ее изготовления реализован прогноз дендритной структуры и микроликвации с оценкой характеристик

структурной и химической микронеоднородности, определяемых путем компьютерного моделирования мезо- и микромасштабных процессов для заданной величины локальной интенсивности теплоотвода.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Публикации в изданиях, рецензируемых ВАК

1. Голод В.М., Ле К.Д. Обобщенное уравнение мезомасштабного распределения вторичных междоусных промежутков дендритов для стального литья // *Материаловедение. Энергетика.* – 2020. – Т. 26, № 3. – С. 101-116.
2. Голод В.М., Цветков А.С., Теплухина И.В., Ле К.Д. Анализ и прогнозирование дендритной неоднородности, возникающей в стальных отливках при кристаллизации // *Литейное производство.* – 2020, № 9. – С. 17-22.

Публикации в изданиях, включенных в БД Scopus

3. Golod V.M., Le C.D. System analysis of the nonequilibrium conditions of peritectic transformation for Fe-C- ΣX_i alloys // *Journal of Crystal Growth.* – 2019. – Vol. 532. – P. 125419.
4. Le C.D., Savelyev K.D., Golod V.M. Structure diagnostic of iron-based out of peritectic alloys during nonequilibrium crystallization // *Key engineering materials.* – 2019. – Vol. 822. – P. 3-10.

Публикации в других изданиях

5. Голод В.М., Ле К.Д. Анализ неравновесной кристаллизации внеперитектических сплавов на основе железа // *Сб. Литейное производство сегодня и завтра.* – СПб.: Тр. 12-й междунар. науч.-техн. конф. – 2018. – С. 358-368.
6. Ле К.Д., Голод В.М. Исследование совместного влияния компонентов на положение критических точек перитектического превращения в литейных сталях // *Неделя науки СПбГПУ.* – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та – 2018. – С. 175-177.
7. Ле К.Д., Голод В.М. Проверка гипотезы нормального распределения вторичных междоусных промежутков для стали // *Неделя науки СПбГПУ.* – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2019. – С. 13-15.
8. Ле К.Д., Голод В.М. Исследование неравновесной кристаллизации многокомпонентных перитектических сплавов на основе железа // *Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии: Тезисы VIII междунар. конф.* – Ижевск: Изд-во Удм. ун-та. – 2019. – С. 121-123.
9. Голод В.М., Цветков А.С., Ле К.Д. Моделирование дендритной неоднородности при кристаллизации аустенитной стали // *Литейное производство сегодня и завтра.* – Тр. 13-й междунар. науч.-техн. конф. – СПб.: Изд-во Культ-информ-пресс. – 2020. – С. 14-23.