

Министерство образования и науки РФ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ  
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

ЕМЕЛЬЯНОВ Константин Игоревич

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ НЕРАВНОВЕСНОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ  
УГЛЕРОДИСТЫХ И НИЗКОЛЕГИРОВАННЫХ СТАЛЕЙ  
ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ИХ СТРУКТУРНОЙ И ХИМИЧЕСКОЙ  
МИКРОНЕОДНОРОДНОСТИ

Специальность 05.16.04 – Литейное производство

Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата технических наук

Научный руководитель:  
кандидат технических наук,  
профессор Голод В.М.

Санкт-Петербург – 2014

## Оглавление

Список условных обозначений.....	4
Введение.....	8
1. Обзор литературы.....	12
1.1. Исследование дендритной микроструктуры литых заготовок.....	14
1.1.1. Статистическая оценка параметров микроструктуры.....	14
1.1.2. Исследование первичных междоусных промежутков $\lambda_1$ .....	20
1.1.3. Исследование вторичных междоусных промежутков $\lambda_2$ .....	23
1.2. Исследования дендритной ликвации в литых заготовках.....	36
1.2.1. Формирование дендритной ликвации.....	36
1.2.2. Перитектическое превращение.....	37
1.2.3. Численный анализ дендритной ликвации.....	39
1.2.4. Результаты численных исследований дендритной ликвации.....	44
1.3. Заключение.....	46
2. Компьютерный анализ условий неравновесной кристаллизации низколегированных сталей.....	48
2.1. Модель неравновесной кристаллизации многокомпонентных сплавов.....	48
2.1.1. Общая структура модели.....	51
2.1.2. Модель неравновесной кристаллизации первичной $\delta$ -фазы.....	54
2.1.3. Этап перитектического превращения.....	62
2.2. Информационное обеспечение модели.....	67
2.2.1. Теплофизические параметры сплавов.....	68
2.2.2. Физико-химические параметры сплавов.....	72
2.2.3. Параметры вычислительной схемы.....	76
2.3. Результаты численного анализа затвердевания углеродистых и низколегированных сталей.....	77

Раздел 3. Компьютерный анализ структурной микронеоднородности при неравновесной кристаллизации многокомпонентных сплавов.....	86
3.1. Модель роста дендритов.....	86
3.2. Формирование структурной микронеоднородности кристаллитов твердой фазы.....	89
3.3. Компьютерное моделирование структурной микронеоднородности при кристаллизации многокомпонентных сплавов.....	93
3.4. Исследование параметров дендритной структуры.....	102
3.5. Компьютерный анализ структурной микронеоднородности.....	107
4. Компьютерное моделирование дендритной ликвации в условиях неравно- весной кристаллизации.....	117
4.1. Физическая модель дендритной ликвации.....	117
4.2. Компьютерный анализ дендритной ликвации.....	124
4.2.1. Численная модель анализа ликвации для двухфазных систем ( $\delta+L$ ) и ( $\gamma+L$ ).....	125
4.2.2. Моделирование перитектического превращения.....	130
4.3. Результаты моделирования дендритной ликвации.....	133
5. Использование результатов работы для анализа неравновесной кристал- лизации литых заготовок.....	143
5.1. Возможности и перспективы развития.....	143
5.2. Компьютерный анализ затвердевания отливки «Корпус».....	145
Выводы.....	154
Список литературы.....	158
Приложение 1.....	168
Приложение 2.....	176

## Список условных обозначений

Обозначение	Размерность	Описание
<b>Индексы</b>		
$i$	—	компонент сплава
$j$	—	Фаза
$K$	—	механизм коалесценции
$L$	—	Жидкое
$S$	—	Твердое
$P$	—	перитектика
$m$	—	Металл
$кр$	—	кристаллизация
$0$	—	исходное значение
<b>Физико-химические параметры</b>		
$p$	К/%	тангенс угла наклона линии ликвидуса диаграммы состояния
$k$	—	коэффициент распределения
$t_P$	°С	температура перитектического превращения
$C_P$	масс. %	концентрация углерода в перитектической точке $J$ диаграммы состояния.
$D$	м <sup>2</sup> /с	коэффициент диффузии
$\Gamma$	К·м	коэффициент Гиббса-Томсона
$C$	масс. %	концентрация компонента
$C_L^0$	масс. %	исходная концентрация компонента в сплаве
$t_L$	°С	температура ликвидуса
$t_S$	°С	температура солидуса
$\sigma$	Дж/м <sup>2</sup>	межфазное натяжение
<b>Теплофизические параметры</b>		
$H$	МДж/м <sup>3</sup>	объемная скрытая теплота кристаллизации

$c$	МДж/м <sup>3</sup> К	объемная теплоемкость
$\rho$	кг/м <sup>3</sup>	плотность
$a$	м <sup>2</sup> /с	температуропроводность
$\alpha$	Вт/м <sup>2</sup> ·К	коэффициент теплоотдачи
$\lambda$	Вт/м·К	коэффициент теплопроводности
<b>Геометрические параметры</b>		
$\lambda_1$	м	величина междусосных промежутков дендритных осей первого порядка
$\lambda_2$	м	величина междусосных промежутков дендритных ветвей второго порядка
$\sigma_\lambda$	м	среднеквадратичное отклонение $\lambda_2$
$(\lambda_2)_0$	м	величина начальных междусосных промежутков дендритных ветвей второго порядка
$R_{ip}$	м	радиус кривизны вершины дендрита
$R$	м	радиус прирастающей дендритной ветви второго порядка
$R$	м	радиус растворяющейся дендритной ветви второго порядка
$r_0$	м	радиус основания дендритной ветви
$R_\kappa$	м	конечный радиус
$R_d$	м	радиус дендритной сферы, описанной по вершинам осей дендритных кристаллитов
$L$	м	длина свободно растущих ветвей второго порядка
$x$	м	пространственная координата
$V$	м <sup>3</sup>	объем твердой фазы
$V^e$	м <sup>3</sup>	«продолженный» объем твердой фазы
$F$	м <sup>2</sup>	поверхность мезо-ячейки
$V_\text{я}$	м <sup>3</sup>	объем мезо-ячейки
<b>Условия и параметры кристаллизации</b>		
$C_R$	К/с	скорость охлаждения
$v_\text{кр}$	м/с	скорость движения фронта кристаллизации
$G$	К/м	градиент температуры
$\tau_{LS}$	с	локальная продолжительность кристаллизации
$T$	К	абсолютная температура
$t$	°С	температура

$N_C$	$\text{м}^{-3}\text{с}^{-1}$	количество образовавшихся самопроизвольных зародышей
$N_B$	$\text{м}^{-3}$	количество образовавшихся вынужденных зародышей
$N_0$	$\text{м}^{-3}$	количество атомов в единице объема расплава ( $N_0 \approx 10^{40} \text{ м}^{-3}$ )
$\Delta T$	К	переохлаждение
$v_d$	м/с	скорость роста вершины дендрита
$k_B$	Дж/К	константа Больцмана
$f_S$	—	доля твердой фазы
$N_3$	$\text{м}^{-3}$	объемная плотность центров кристаллизации
$N_S$	$\text{м}^{-3}$	объемная плотность вторичных ветвей
$f_D$	—	объемная доля дендритных сфер, описанных по вершинам дендритов
$m$	—	доля твердой фазы в мезо-ячейке
$K_V$	$\text{м}/(\text{с} \cdot \text{К}^2)$	коэффициент скорости роста
<b>Критерии, симплексы и функции</b>		
$P_C$	—	концентрационное число Пекле $P_C = v_d R / 2D$
$P_t$	—	термическое число Пекле $P_T = v_d R / 2a$
Fo	—	критерий Фурье $ Fo = a\tau / R^2$
Bi	—	критерий Био $ Bi = \alpha R / \lambda$
$\Omega_{DL}$	—	диффузионный критерий Прандтля $\Omega_{DL} = D_L / a_m$
$\Omega_V$	—	критерий скорости роста $\Omega_V = v_d R / (2a)$
$\Omega_N$	—	критерий зарождения $\Omega_N = (\varphi N_S)^{1/3} R$
$\Omega_P$	—	критерий концентрационного переохлаждения $\Omega_P = p C_L^0 (1-k)(c/H)$
$\Omega_\Gamma$	—	критерий капиллярного переохлаждения $\Omega_\Gamma = \Gamma / R \ (c/L)$
$\Omega_{\Delta T}$	—	критерий термического переохлаждения $\Omega_{\Delta T} = \Delta T (c/L)$
$\Omega_m$	—	критерий кинетики кристаллизации $\Omega_m = m$
$\Omega_{DS}$	—	диффузионный критерий Фурье $\Omega_{DS} = D_S \tau_{LS} / \lambda_2^2$
$\Omega_0$	—	относительный размер начальных междоусных промежутков $\Omega_0 = (\lambda_2)_0 / R$
$\Omega_2$	—	относительный размер вторичных междоусных промежутков $\Omega_2 = \lambda_2 / R$
$\Omega_{CL}$	—	относительная концентрация жидкой фазы $\Omega_{CL} = C_L / C_L^0$
$I_v$	—	функция Иванцова

$Ei$	—	интегральная экспоненциальная функция
<b>Безразмерные параметры и коэффициенты</b>		
$\mu$	—	коэффициент принадлежности
$\beta$	—	константа, параметр дендритной ликвации
$\psi$	—	количество совместно выделяющихся фаз
$\phi$	—	параметр, учитывающий принятую модель коалесценции
$\eta$	—	размерность объекта кристаллизации
$\kappa$	—	волновое число

## Введение

Технический прогресс во многих базовых областях техники (судостроительной, энергетической, транспортной и т.д.) в значительной степени связан с повышением качества литых заготовок. Присущие им внутренние дефекты обусловлены формированием при первичной кристаллизации структурной и химической микронеоднородности, приводящей, в сочетании с усадочными процессами, к ухудшению качества металла и значительным затратам на термическую обработку.

Традиционными способами влияния на качество металла являются металлургические и технологические факторы, которые позволяют регулировать параметры микроструктуры и микроликвации, непосредственно влияющие на гидравлические, кристаллизационные, усадочные и другие важные процессы.

Для прогнозирования результатов влияния того или иного фактора на эволюцию микроструктуры, как правило, используются статистические модели, полученные на основе экспериментальных данных. Указанные модели связывают параметры дендритной структуры сталей с условиями ее формирования, однако характеризуются расхождениями по математической форме, а также по знаку и величине коэффициентов регрессии, которые оценивают вклад различных компонентов, и вследствие этого мало пригодны для получения надежных результатов.

Поскольку данные о дендритной ликвации сталей носят отрывочный характер и их надежное обобщение не выполнено, в целом проблема существенного улучшения качества литой стали остается актуальной в течение последних десятилетий и может быть разрешена только в сочетании с компьютерным моделированием ее кристаллизации на базе глубокого анализа эволюции дендритной структуры. Реализация подобного подхода, несмотря на его актуальность и перспективность, до сих пор не осуществлена, поскольку требует



преодоления значительных трудностей системного анализа и решения совокупности уравнений, описывающих кристаллизацию.

На основании вышеизложенного можно заключить, что благодаря широкому кругу учитываемых факторов системный анализ комплекса сложных взаимосвязанных кристаллизационных процессов, позволяющий решать ряд важных научных и практических задач (влияние физико-химических и технологических факторов на процесс кристаллизации, прогнозирование хода литейных процессов и возникновения дефектов и др.), **является актуальным.**

*Целью* настоящей работы является разработка и компьютерная реализация системной модели формирования структурной микронеоднородности и анализ сопряженного развития на ее базе дендритной ликвации при неравновесной кристаллизации сталей с перитектическим превращением.

Для достижения цели диссертации были поставлены следующие **задачи**:

- разработать системную модель и программное обеспечение для моделирования и анализа сопряженных теплофизических, кристаллизационных и диффузионных процессов при неравновесной кристаллизации многокомпонентных Fe-C- $\Sigma X_i$  ( $X_i$ =Si, Mn, Cr, Ni и др.) сплавов;
- разработать и программно реализовать системную модель для исследования формирования и эволюции равноосных дендритных кристаллитов твердой фазы с целью прогнозирования статистического разброса величины междоусных промежутков дендритных ветвей второго порядка;
- разработать и программно реализовать модель для исследовать развитие дендритной ликвации на основе численного анализа перераспределения компонентов сплава по сечению дендритных ветвей второго порядка с учетом подвижных границ раздела фаз в двух- ( $L+\delta$  или  $L+\gamma$ ) и трехфазных ( $L+\delta+\gamma$ ) системах.

*Научная новизна* данной работы заключается в том, что предложен и реализован системный подход к анализу хода и конечных результатов дендритной кристаллизации, на основе которого разработано программное обеспечение для моделирования процесса затвердевания и формирования локальной дендритной

структуры и микроликвации стали и оценки влияния технологических параметров процесса затвердевания на морфологию и структуру кристаллизующегося металла.

Средствами компьютерного моделирования исследовано взаимное влияние физико-химических параметров процесса неравновесной кристаллизации на кинетику развития структурной и химической микронеоднородности стали. Изучено проявление основных термодинамических, теплофизических и физико-химических факторов, которые при варьировании условий теплоотвода и состава стали определяют изменение переохлаждения и покомпонентной концентрации расплава, зарождение и формирование вторичных мезо-масштабных междоусных промежутков и микро-масштабную химическую неоднородность различных компонентов.

На основе метода Монте-Карло разработана методика и реализован вероятностный анализ эволюции статистических характеристик распределения вторичных междоусных промежутков в процессе их диффузионной коалесценции при кристаллизации.

Проанализирована вероятность различных механизмов коалесценции дендритной структуры и установлен их вклад в формирование конечной структурной микронеоднородности стали в зависимости от начальной морфологии вторичных дендритных ветвей и физико-химических характеристик расплава.

С помощью разработанной модели формирования дендритной ликвации исследовано влияние состава сплава, интенсивности теплоотвода и локальной неоднородности дендритной структуры на характер химической микронеоднородности и кинетику перитектического превращения в условиях пара-равновесного перераспределения компонентов замещения в стали по сечению дендритных ветвей.

*Практическая ценность* работы состоит в возможности использования разработанных моделей и формируемого на их основе программного обеспечения в качестве инструментария в составе вычислительных комплексов, используемых для моделирования макромасштабных процессов затвердевания стальных отливок и прогнозирования дефектов литого металла. Благодаря использованию результа-

тов работы в технологической практике существенно расширяется возможность оптимизации технологических процессов при их разработке и изготовлении заготовок с учетом прогнозируемого уровня микроликвационной и микроструктурной неоднородности.

*Основные положения, выносимые на защиту.*

1. Базовая детерминированная модель системного анализа мезо-масштабной неравновесной кристаллизации сплавов Fe–C– $\Sigma X_i$  ( $X_i$ =Si, Mn, Cr, Ni и др.) с перитектическим превращением, позволяющая количественно анализировать ход кристаллизационных процессов (температура и скорость выделения твердой фазы, изменение переохлаждения и скорости роста кристаллитов, кинетику образования непрерывного скелета твердой фазы и др.) под действием факторов металлургического и технологического характера.

2. Вероятностная модель формирования локальной неоднородности дендритной структуры, учитывающая влияние покомпонентного состава сплава и многофакторных условий кристаллизации.

3. Микромасштабная модель развития дендритной ликвации с учетом перитектического превращения, комплекса тепловых и физико-химических условий кристаллизации, дендритной морфологии и локальной микронеоднородности структуры.

4. Закономерности эволюции тепловых, кристаллизационных и диффузионных процессов при неравновесной кристаллизации сплавов системы Fe–C– $\Sigma X_i$  ( $X_i$ =Si, Mn, Cr, Ni и др.) с перитектическим превращением.

## **1. Обзор литературы**

### **Постановка задачи**

В рамках поставленной в работе общей задачи системного исследования неравновесной кристаллизации стальных отливок важно отметить, что такая постановка обусловлена, в первую очередь, сложностью формирования их качества в процессе зарождения и роста разветвленных дендритных кристаллитов, исследование которого, несмотря на привлечение в последние годы широкого круга инструментальных (микротомография, синхротронное излучение и др.) и теоретических (методы клеточных автоматов, фазового поля и т.д.) средств его изучения, не позволило до сих пор получить адекватного реальности представления об их морфологическом многообразии [1, 2]. Об этом свидетельствуют заключения о низком качестве моделей, описывающих влияние состава стали и роль основных факторов, определяющих параметры дендритной структуры [3, 4]. По этой причине для достижения поставленной цели становится необходимым в полной мере использовать возможности системного анализа процесса формирования структуры [5-7 и др.], принимая во внимание многоуровневый характер явлений макро-, мезо- и микро-масштаба, обуславливающих его ход, и фокусируя основное внимание на тщательном отборе факторов и уравнений, соразмерных наиболее значимым для объективного анализа морфологическим дендритным параметрам. Вследствие отмеченной выше сложности намечаемого исследования в качестве основного инструментария для системного анализа должен быть использован аппарат численного моделирования уравнений, возможности которого в результате активного развития вычислительной техники и программных средств могут быть оценены, как адекватные поставленной задаче, при условии необходимой и объективно-корректной схематизации рассматриваемых явлений.

Отличительной чертой формирования дендритной структуры, игнорирование которой исключает возможность его эволюционного анализа, является стоха-

стический характер происходящих процессов зарождения и роста и порождаемых объектов разного масштаба – микро-зародышей, мезо-(стволов и ветвей), макрокристаллитов, в связи с чем для их адекватного отображения необходим статистический аппарат, реализуемый, наряду с уравнением Колмогорова, в рамках метода Монте-Карло [8, 9] и используемый для получения обобщенных структурных и кинетических параметров процесса, в первую очередь – их макро- и мезомасштабной неоднородности.

Основными объектами системного анализа и моделирования неравновесной кристаллизации в работе являются углеродистые и низколегированные стали, процессы формирования и характеристики которых наиболее интенсивно рассматриваются в публикациях в связи с широким распространением непрерывного литья стальных заготовок [10-12 и др.]. В связи с возможностью анализа обширного массива соответствующих экспериментальных и теоретических материалов, получаемых при этом и нередко служащих для обобщенных оценок и формулировки выводов, в последующих разделах работы эти исследования, корректность и адекватность которых важны в равной мере для слитков и отливок, активно использованы для анализа закономерностей формирования дендритной структуры как процесса, интенсивность и результаты которого имеют важное значение для понимания вклада различных факторов и их взаимодействия.

Для оценки и практического использования результатов компьютерного моделирования, развиваемого в работе, существенно, что именно морфология дендритной структуры и ее эволюция в процессе кристаллизации сплавов, как правило, диктуют ход ряда сопряженных литейных процессов (объемная и линейная усадка, дендритной ликвации, формирование и локализация неметаллических включений, микропустот, горячих трещин и т.д.), интенсивность которых предопределяет уровень качества литого металла. В связи с этим целевая ориентация работы на исследование процессов дендритной кристаллизации позволила дополнительно реализовать решение задачи о формировании дендритной ликвации и позволяет выявить перспективные направления компьютерного анализа некото-

рых литейных процессов, базирующиеся на оценке той роли, которую играют в них дендритные характеристики выделяющейся твердой фазы.

## **1.1. Исследование дендритной микроструктуры литых заготовок**

### **1.1.1. Статистическая оценка параметров микроструктуры**

Актуальность исследований дендритной структуры с усовершенствованием методов анализа процессов, протекающих при кристаллизации металла, возрастает вместе с появлением новых теоретических разработок и практических открытий. Изучение процессов формирования микроструктуры связано с одной стороны с обобщением экспериментальных данных и построением основы для развития теоретических разработок. При этом результатами экспериментальных исследований являются не только полученные массивы данных, но и эмпирические выражения для расчета  $\lambda_2$ , демонстрирующие характер зависимости параметров микроструктуры от исследуемых факторов. С другой стороны, полученный экспериментальный материал ложится в основу дальнейшего развития теоретических изысканий, направленных на формирование аналитических моделей, в явном виде отражающих влияние параметров сплава и технологических факторов. Повышение требований к аналитическим моделям приводит к необходимости их усовершенствования путем более детальной проработки теоретических положений, заложенных в основу модели, что требует проведения новых эмпирических исследований.

На сегодняшний день по углеродистым и низколегированным сталям, которые являются объектом исследования, накоплен обширный экспериментальный материал. Опубликовано значительное количество исследовательских работ, рассматривающих формирование дендритной структуры под действием тепловых условий кристаллизации [13-29 и др.] и анализирующих влияние химического состава сплава [21-29 и др.], а также представлены варианты аналитического описа-

ния эволюции микроструктуры с помощью теории коалесценции [30-39 и др.], метода фазового поля и ячеистых автоматов [40-43].

Прогнозирование дендритной структуры металла в настоящий момент осуществляется по эмпирическим, полуэмпирическим и аналитическим моделям, позволяющим, с точки зрения исследователя, получить наиболее адекватные расчетные значения. Непосредственное влияние на качество расчета оказывает корректность учета теплофизических и физико-химических параметров сплава и условий кристаллизации.

Начало активного исследования микроструктуры заготовок связано с интенсивным внедрением и совершенствованием установок непрерывной разливки стали. С ростом объемов производства непрерывно литых заготовок возникла необходимость более надежного прогнозирования возможных дефектов металла в зависимости от скорости литья, температуры кристаллизатора, металлургических и других факторов, влияющих на конечную картину структурной и химической микронеоднородности. Глубина анализа исследуемых процессов, протекающих при кристаллизации металла, связана с характером проводимых исследований. Работы, использовавшие в качестве экспериментального материала производственные данные, нацелены на выявление корреляционных связей строго определенных технологических параметров с кинетикой кристаллизации, формированием макро- и микроструктурной неоднородности. В связи с этим, и выводы данных публикаций имеют частный характер и лишь завершают картину понимания исследуемых процессов.

Более глубокий анализ эволюции микроструктуры с учетом независимого влияния на нее различных факторов реализован посредством использования специальных лабораторных установок. Специализированное оборудование дает возможность гибко варьировать различные параметры кристаллизации (теплоотвод, градиенты температур в различных зонах формы, скорость движения фронта кристаллизации и др.), создавать равномерные условия теплоотвода на всем фронте выделения твердой фазы. При этом фиксация изменения температуры производится термопарами, что позволяет контролировать локальные условия роста кри-

сталлитов твердой фазы и оценивать независимое влияние параметров процесса на эволюцию дендритной структуры.

Таблица 1.1.

Условия проведения исследований и оценки факторов

№ / №	Условия экспери- мента		Сталь			Характеристика условий Кристаллизации							Анализ влияния химического состава	Источник
	Производств.(непр. литье)	Лабораторат.	Углеродистая	Низколегированная	Высоколегированная	Скорость.охлаждения $R$	Скорость $v_{кр}$		Градиент темпе- ратур $G$			Локальная продол- жит.затвердевания $\tau_{LS}$		
							Скорость роста дендрита	Скорость фронта затвердевания	Средний	В жидкой фазе	В твердой фазе			
1	●		*	*		P		Э				Э	+(C и др.)	[10]
2	●			*		P			P			P	+(C)	[11]
3	●		*	*		P		Э			P	Э	+(C)	[12]
4		●		*		P						Э	–	[13]
5		●		*		P						Э	0	[14]
6		●		*		P						Э	0	[15]
7		●		*				Э	Э				+	[16]
8		●		*		P		Э	Э	Э	Э	Э	0	[17]
9		●		*	*		Э		Э	Э	Э	P	+	[18]
10		●		*	*	P						Э	0	[19]
11		●		*		P	Э	Э	Э			Э	0	[20]
12		●		*		P		Э	Э	Э	Э	P	+	[21]
13		●		*								P	+(C)	[22]
14	Литер.		*	*	*	Э							+(C)	[23]
15	Литер.		*			Э	Э					P	+(C)	[24]
16	Литер.		*	*		Э+P							+(C и др.)	[25]
17	Литер.		*	*		Э							+(C)	[26]
18	Литер.		*	*		Э+P						Э	+(C)	[27]
19	Литер.		*	*	*	Э						Э	+(C)	[28]
20	Литер.		*	*		Э+P							+(C и др.)	[29]
Примечания: Влияние хим. состава: (+/–) - компоненты стали влияют/не влияют; 0 - не исследовано; Э - эксперимент; P - расчёт														

В табл. 1.1 представлена характеристика работ, посвященных исследованию дендритной структуры сталей – приведены данные о способе изготовления образцов из выбранных групп сталей, представлена сравнительная оценка исследованных параметров кристаллизации, а также влияния химического состава сплава.



Как видно из таблицы, в качестве количественной характеристики условий кристаллизации выбран значительный набор теплофизических параметров предикторов: скорость охлаждения ( $C_R$ ); скорость кристаллизации ( $v_{кр}$ ); градиенты температур ( $G$ ); локальная продолжительность затвердевания ( $\tau_{LS}$ ). Однако, несмотря на существование большого количества публикаций, состояние вопроса исследования дендритной микроструктуры до сих пор требует решения ряда принципиальных вопросов, связанных с оценкой роста дендритных осей первого порядка, а также развития разветвленной системы ветвей второго и более высоких порядков.

Ранние исследования, анализировавшие влияние условий затвердевания на дендритную микроструктуру – величину междоосных промежутков ветвей дендрита первого  $\lambda_1$  и второго порядка  $\lambda_2$ , основаны на выявлении закономерных связей между наиболее очевидными параметрами кристаллизации. Результатом подобных поисков явились степенные модели вида  $\lambda_{1,2} = K_1 C_R^{-n} = K_2 \tau_{LS}^f = K_3 v_{кр}^{-q} G^{-b}$  ( $K_1, K_2, K_3, n, f, q, b$  – коэффициенты), которые, несмотря на простоту использования, имеют ряд существенных недостатков. Основными из них являются использование разрозненных экспериментальных данных и отсутствие полноценной теоретической базы. В результате точность параметров, входящих в модель, достаточно низкая и существенно различается в зависимости от погрешности методики их определения. В частности, наиболее распространенным методом определения  $\tau_{LS}$  и температурного интервала кристаллизации  $\Delta t_{LS} = (t_L - t_S)$ , где  $t_L, t_S$  – температуры ликвидуса и солидуса, является термический анализ. Измеренная по температурной кривой продолжительность охлаждения металла от  $t_L$  до  $t_S$  использовалась большинством исследователей одновременно и для расчета средней скорости охлаждения металла в двухфазной зоне  $C_R = \Delta t_{LS} / \tau_{LS}$ . В то же время, нет единого мнения насчет выбора критических температур  $t_L$  и  $t_S$  для использования в расчете  $C_R$ . В тех случаях, когда выбор  $t_L$  и  $t_S$  производится на основе термического анализа, их значения определяются в неравновесных условиях. При отсутствии возможности проведения термического анализа, расчет критических температур производили для равновесных условий кристаллизации путем термодинамическо-

го моделирования многокомпонентных сплавов [29 и др.], либо по правилу рычага, если исследование проводилось для углеродистых сталей [10]. Для расчета локальной скорости охлаждения  $C_R$  справедливо выражение  $C_R = Gv_{кр}$ , где  $G$  – градиент температуры;  $v_{кр}$  – скорость движения фронта кристаллизации. Однако исследование  $G$  и  $v_{кр}$ , диктующих кинетику роста осей дендритов, сопряжено со сложным определением их локальных значений на фронте кристаллизации. В связи с этим исследователями используются осредненное значение  $\bar{G}$  в двухфазной зоне  $(L+\delta, \gamma)$ , полученное по данным термического анализа, и средняя скорость  $\bar{v}_{кр}$ , полученная посредством измерения пути, пройденного фронтом за определенное время. Таким образом, использование несогласованных, а также осредненных параметров может давать существенные погрешности расчета микроструктуры (при осреднении  $C_R$  и  $v_{кр}$  по полной продолжительности затвердевания или  $G$  по ширине зоны кристаллизации).

В качестве основного метода получения экспериментальных данных о структуре исследователями используется металлографический анализ. С целью минимизации погрешности измерений междоосных промежутков дендритных ветвей первого (ствол дендрита) и второго порядка анализ следует производить только для тех дендритов, оси которых лежат в плоскости шлифа. Однако в существующих публикациях комментарии по методике измерения междоосных промежутков, как правило, имеют краткий формальный вид, что ограничивает возможности полноценного анализа результатов. Наиболее предпочтительным методом анализа дендритной микроструктуры является трехмерное сканирование металлического образца [44, 45]. Указанный способ получения экспериментальных данных имеет существенные преимущества по сравнению с традиционной оптической микроскопией: не требуется травление и полировка, измерению подвергаются все дендриты, а не только те, что ориентированы параллельно плоскости шлифа. Однако в силу значительной трудоемкости и высокой стоимости оборудования данный метод весьма труднодоступен и не позволяет набрать необходимый массив экспериментальных данных.

Адекватность последующей статистической обработки экспериментальных данных связана с количеством произведенных замеров. Математическая статистика позволяет оценить необходимое количество экспериментальных точек для построения статистической модели с допустимой погрешностью. Так, степенная эмпирическая зависимость  $\lambda_2 = K_I C_R^{-n}$ , часто используемая в литературе в качестве базовой для расчета  $\lambda_2$ , после линеаризующего преобразования ( $y = \ln \lambda_2$ ;  $x = \ln C_R$ ;  $y = a + bx$ ) может быть обработана с помощью следующих уравнений математической статистики:

$$\Delta a = \pm t(\alpha, N-2) \frac{s}{s_x \sqrt{N}} \sqrt{\frac{1}{N} \sum_n x_i^2}; \quad \Delta b = \pm t(\alpha, N-2) \frac{s}{s_x \sqrt{N}},$$

где  $t(\alpha, N-2)$  – табличное значение квантиля распределения Стьюдента;  $\alpha$  – уровень значимости;  $N$  и  $s_x$  – общее число опытных точек с известными значениями  $x_i$  и их среднеквадратичное отклонение

$s_x = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_N (x_i - \bar{x})^2}$  относительно среднего значения всего массива данных  $\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_n x_i$ ;  $s$  – среднеквадратичная погрешность

линейной модели  $s^2 = \frac{1}{N-2} \sum_N (y_i - a - bx_i)^2$ .

На рис. 1.1 продемонстрирована зависимость вероятной погрешности от различного числа опытных точек, использованных для расчета параметров модели [3].

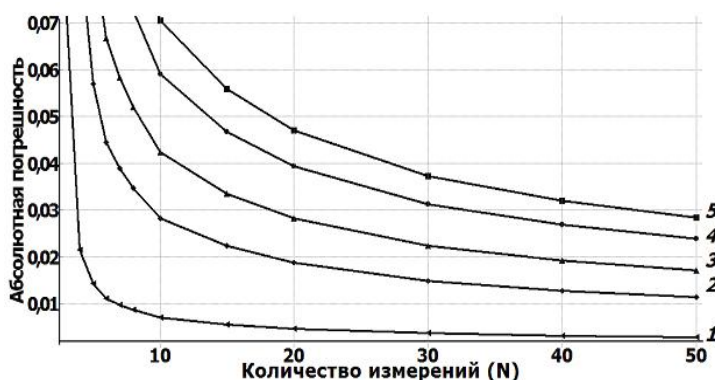


Рисунок 1.1. Зависимость вероятной погрешности  $\Delta(n)$  определения параметра  $n$  от числа измерений  $N$  и соотношения  $s/s_x$  [3]

Значение  $s/s_x$ : 1 – 0.01; 2 – 0.04; 3 – 0.06; 4 – 0.08; 5 – 0.10

Как видно из рисунка, при значениях показателя степени  $n = 0.30-0.50$  анализируемого уравнения, приемлемая погрешность модели ( $\Delta n \leq 0.02-0.03$ ) может быть обеспечена при  $N > 20$  (для характерных значений  $s/s_x = 0.025-0.050$ ). Таким

образом, увеличение числа измерений  $N$  влияет не только на точность определения степенного коэффициента  $n$ , но также посредством снижения среднеквадратичной погрешности  $s$  повышает качество модели.

### 1.1.2. Исследование первичных междоусных промежутков $\lambda_1$

Началом формирования структуры металла при кристаллизации является, как показано в [46], образование и рост центров зарождения твердой фазы под действием термического переохлаждения, а также концентрационного пересыщения расплава. Впоследствии получило экспериментальное подтверждение предположение о разнохарактерном процессе зарождения центров кристаллизации. Так, в трудах Френкеля, Фольмера, Иванцова и др. [47-50] был развит и теоретически обоснован принцип их вынужденного и самопроизвольного образования.

В зависимости от металлургических (рафинирование, модифицирование и др.) факторов и условий кристаллизации возможна последовательная и/или совместная активация самопроизвольного и вынужденного зарождения кристаллов.

Исследование кинетики образования центров кристаллизации схематично проиллюстрировано на рис. 1.2 [51]. В ходе исследования самопроизвольного зарождения кристаллов на примере модельных сплавов были выявлены следующие закономерности: 1 – в реальных сплавах реализуется лишь восходящий участок схемы; 2 – интервал метастабильности (рис. 1.2) в реальных сплавах практически отсутствует, в силу наличия в расплаве большого количества активных включений.

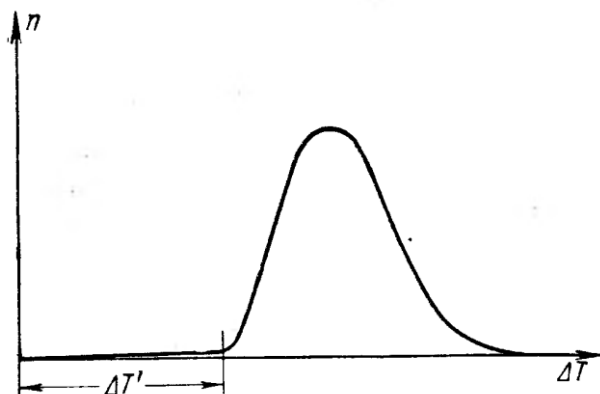


Рисунок 1.2. Схема зависимости скорости зарождения центров кристаллизации от переохлаждения  $\Delta T$  ( $\Delta T'$  – интервал метастабильности) [51].

Таким образом, характер изменения скорости зарождения  $n_c$  в зависимости от переохлаждения сплава позволяет рассматривать данный процесс статически - с постоянным количеством центров кристаллизации.

В момент начала кристаллизации стали быстро нарастающее переохлаждение приводит к образованию разветвленных кристаллитов древовидной формы [1, 52]. В начальный период развития кристаллов, когда росту вершин дендритов ничего не препятствует, скорость их роста определяется переохлаждением междендритной жидкой фазы исходного состава  $\Delta T = t_L(C_L^0) - t$ . При этом столбчатая форма кристаллитов твердой фазы характерна для поверхностных слоев литой заготовки, в то время как в ее массивных частях с низкой скоростью охлаждения наблюдаются равноосные кристаллы. Основным объектом исследований при анализе влияния параметров кристаллизации на величину  $\lambda_1$  являются столбчатые дендриты, благодаря тому, что, во-первых, в зоне столбчатых дендритов степень влияния  $\lambda_1$  на механические свойства более высокая, нежели в зоне равноосных дендритов с развитой системой боковых ветвей второго и более высоких порядков; во-вторых, рост столбчатых дендритов достаточно легко моделируется в лабораторных условиях, что позволяет с высокой точностью фиксировать параметры кристаллизации.

В табл. 1.2 приведена сводка эмпирических и в табл. 1.3 - аналитических уравнений для расчета величины  $\lambda_1$ .

Как отмечено в ряде публикаций [53-55 и др.], основными параметрами, влияющими на  $\lambda_1$ , являются скорость роста вершины дендрита  $v_d$ , равная скорости движения макро-масштабного фронта кристаллизации, и градиент температур в расплаве  $G_L$  (уравнение (1.4)), произведение которых дает скорость охлаждения  $C_R$  (уравнение (1.3)).

$$\lambda_1 = K_1 C_R^{-n}; \quad (1.3)$$

$$\lambda_1 = K_2 v_d^{-q} G_L^{-b}, \quad (1.4)$$

где  $K_1, K_2, n, q, b$ —константы.

Таблица 1.2.

Эмпирические уравнения для расчета  $\lambda_1$ 

№/ №	Формула	Сплав	Источник
1	$\lambda_1=5650G_L^{-0.5}v_d^{-0.5}$	Al-2.4%Cu	[53]
2	$\lambda_1=3050G_L^{-0.5}v_d^{-0.36}$	Al-4.4%Cu	
3	$\lambda_1=4650G_L^{-0.5}v_d^{-0.43}$	Al-10.1 %Cu	
4	$\lambda_1=440G^{-0.38}v_d^{-0.5}$	Циклогексанол	[54]
5	$\lambda_1=28,9\tau_{LS}^{0.48}$	Fe-0.59 %C-1.1 %Mn	[17]
6	$\lambda_1=1750G^{-0.14}v_d^{-0.5}$	Fe-0.6 %C-0.6 %Mn	[20]
7	$\lambda_1=G^{-0.5}v_d^{-0.25}(1990\%C+380\%Si-0.221\%Mn-9840\%Al+20\%Ni-40\%Cr)$	Низколегированные стали	[21]
8	$\lambda_1=410\pm89.1(\%C)^{0.155\pm0.106}G_L^{-0.391\pm0.0258}v_d^{-0.223\pm0.033}$	Fe-0.1÷0.4 % C- 1.6 % Mn	[55]
9	$\lambda_1=400C_R^{-0.35}\exp(-(0.5647\%C+0.2143\%Si+0.0110\%Mn+0.0999\%Cr+0.3765\%Mo+0.0282\%Ni-0.35115\%C^2-0.00345\%Cr^2-0.00043\%Ni^2-0.01052\%C\%Cr+0.00144\%Cr\%Ni)^{0.4})$	Углеродистые и низколегированные стали	[29]
Обозначения: $G_L$ – градиент температур в жидкой фазе; $v_d$ – скорость роста вершин дендрита.			

При этом в [54] отмечено более сильное влияние скорости  $v_d$ , в то время как в [53] авторы склонны дать менее однозначную оценку, сведя расхождение в значениях степенных коэффициентов  $q$  и  $b$  к погрешностям аппроксимации.

Анализ приведенных в табл. 1.2-1.3 уравнений показывает существенное влияние химического состава сплава, а также параметров кристаллизации на величину  $\lambda_1$ . При этом характер влияния отдельных компонентов сплава далеко не однозначен, о чем свидетельствуют результаты работ [21, 29 и 55]. В то же время, в публикации [54] продемонстрирована независимость  $\lambda_1$  от  $C_R$  под действием конвекционных потоков, а в [1] отмечен качественный характер приводимого уравнения.

Таблица 1.3.

Аналитические уравнения для расчета  $\lambda_1$ 

№ / №	Формула	Ис- точник
1	$\lambda_1 = 2\beta \left( \frac{-p(1-k)C_L^0 D^L}{C_R} \right)^{0.5}$	[55]
2	$\lambda_1 = \frac{4.3(\Delta T^* D^L \Gamma)^{0.25}}{k^{0.25} v_d^{0.25} G^{0.5}}$	[1]
3	$\lambda_1 = 4.09 k^{-0.335} \left( \frac{\Gamma}{p C_L^0 (k-1)} \right)^{0.41} \left( \frac{D^L}{v_{kp}} \right)^{0.59}$	[56]
4	$\lambda_1 = \frac{2\pi(k \Delta T^* D^L \Gamma)^{0.25}}{v_d^{0.25} G^{0.5}}$	[57]
Обозначения: $\Delta T^*$ – переохлаждение на вершине дендрита; $C_L^0$ – исходный состав сплава; $D^L$ – коэффициент диффузии в расплаве; $\Gamma$ – коэффициент Гиббса-Томсона ( $\Gamma = \sigma t / H^j$ , где $\sigma$ – поверхностное натяжение); $k$ – коэффициент распределения; $\beta$ – константа; $p$ – тангенс угла наклона линии ликвидуса.		

Таким образом, в силу сложности рассматриваемых явлений, эмпирические и аналитические модели могут лишь полуколичественно оценивать величину  $\lambda_1$ , кинетика изменения которой зависит от специфических (частных) условий кристаллизации каждого конкретного сплава, что затрудняет распространение данных моделей на более широкие группы углеродистых и низколегированных сталей.

**1.1.3. Исследования вторичных междоусных промежутков  $\lambda_2$** **Формирование ветвей второго порядка**

Рост вершин дендрита сопровождается появлением нестационарного по термическим и концентрационным условиям слоя на вершине и боковой поверхности первичного ствола. Возникновение неустойчивости на межфазной границе приводит к появлению и росту ортогонально расположенных *начальных* боковых

ветвей. Расстояние между вторичными ветвями, появляющимися в процессе роста осей  $(\lambda_2)_0$ , характеризует исходную микроструктуру.

Процесс развития комплекса дендритных кристаллитов принято рассматривать в рамках их двухстадийной морфологической эволюции [58, 59]. На первой стадии происходит смыкание первичных дендритных осей и формирование исходной микроструктуры  $(\lambda_2)_0$ ; на второй стадии – эволюция (укрупнение) исходной микроструктуры под действием коалесценции. Исследованию первой стадии кристаллизации, как правило, посвящены работы с использованием цветных и неметаллических модельных сплавов [53, 54, 57 и др.], что позволяет упростить процедуру эксперимента. В то же время характер полученных зависимостей для различных цветных и модельных сплавов дает основание полагать, что аналогичные зависимости свойственны и железоуглеродистым сплавам. Так в работе [60] исследовано влияние скорости роста дендритных осей первого порядка, а также концентрации третьего компонента в сплаве Al-Cu-Mg на величину исходных междоосных промежутков ветвей второго порядка  $(\lambda_2)_0$ . По результатам экспериментального исследования авторам удалось определить величину отношения  $(\lambda_2)_0/R_{tip}$ , где  $R_{tip}$  – радиус кривизны вершины дендрита. Для сплавов Al-5 % Cu-0.5÷5 % Mg средняя величина отношения  $(\lambda_2)_0/R_{tip}$  составила 2.09, в то время как для двухкомпонентного сплава Al-3÷24%Cu  $(\lambda_2)_0/R_{tip}=2.8$  [58], а для модельных сплавов от 2.08 до 3.7 [58, 59, 61]. Влияние кинетики роста осей дендрита отражается на величине  $(\lambda_2)_0/R_{tip}$  через изменение  $R_{tip}$ , который находится в обратной зависимости со скоростью роста. В работе [60] произведен сводный анализ аналитических уравнений для расчета данного радиуса [1, 62, 63] при кристаллизации квазибинарных сплавов с постоянным градиентом температур в зоне затвердевания. Характерный вид уравнения для расчета радиуса  $R_{tip}$ , давшего хорошее совпадение с экспериментом, выглядит следующим образом:  $R_{tip}=2\pi[\Gamma D^L/p(k-1)]^{0.5}(C_L^0)^{-0.5}v_d^{-0.5}$  [1].

Уравнение для расчета  $R_{tip}$  для равноосного дендритного кристаллита, являющегося основным объектом нашего исследования, представлено в работе [64].



$$R_{tip} = \frac{-2\pi^2 \Gamma}{\sum_{i=1}^n p_i (P_c)_i \frac{(C_L^0)_i (1-k_i)}{1-(1-k_i)Iv((P_c)_i)}}; \quad (1.5)$$

$$v_d = a_m P_t \frac{2}{R_{tip}}; \quad (1.6)$$

$$Iv((P_c)_i) = (P_c)_i \exp((P_c)_i) Ei((P_c)_i), \quad (1.7)$$

где  $P_c$ ,  $P_t$  – концентрационное и термическое число Пекле;  $Iv$  – функция Иванцова;  $Ei$  – интегральная экспоненциальная функция;  $a_m$  – температуропроводность металла. Уравнение (1.5) позволяет рассчитать радиус кривизны вершины дендрита и скорость ее продольного роста  $v_d$  по уравнению (1.6) при кристаллизации многокомпонентного сплава с учетом концентрационного переохлаждения на вершине и неполной обратной диффузии в твердой фазе:

Попытка аналитического описания  $(\lambda_2)_0$  реализована в работе [65] на основе принципа маргинальной устойчивости:

$$\sqrt{2\xi} \left( \frac{\kappa^2 - 1}{2\xi} + \left( \frac{2\pi}{\xi} \right)^2 \right) = \frac{v_d R_{tip}^2}{\Gamma} \sum \frac{p_i (1-k_i) ((C_L^0)_i)}{D_i^L}, \quad \xi = \frac{(\lambda_2)_0}{R_{tip}}, \quad (1.8)$$

где  $\phi$  – волновое число ( $\phi=4$  для решетки с кубической симметрией);  $v_d$  – скорость роста вершины дендрита. Как видно из уравнения (1.5), величина  $(\lambda_2)_0$  определяется кинетикой роста осей, а также физико-химическими параметрами сплава.

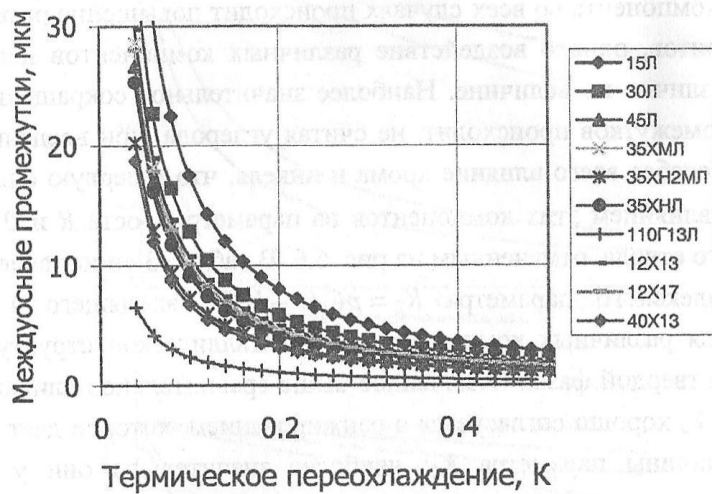


Рисунок 1.3. Изменение  $(\lambda_2)_0$  различных марок сталей в зависимости от термического переохлаждения [66]

Оценка влияния термического переохлаждения (рис. 1.3), а также концентрации третьего компонента сплава Fe-C-X, где X – P, S, Si, Mn, Cr, Ni на величину  $(\lambda_2)_0$  произведена в [66] на основе вышеуказанных соотношений. Как видно из

результатов, использование системы уравнений (1.5-1.8) позволяет оценивать кинетику роста вершин дендритов и появления ветвей второго порядка с определенной величиной междудендритных промежутков.

### Исследование влияния факторов различной природы на формирование микроструктуры

Влияние тепловых условий кристаллизации. Изучение процессов формирования микроструктуры ( $\lambda_2$ ) связано со следующими направлениями исследований: обобщение экспериментальных данных и построение эмпирических и полуэмпирических выражений для расчета  $\lambda_2$  [10-29]; формирование аналитических моделей эволюции дендритной морфологии, в том числе, для оценки влияния коалесценции [31-37] и учета влияния технологических факторов и химического состава сплавов [17-29 и др.].

Таблица 1.5.

Значения коэффициентов  $K_I$  и  $n$  для низколегированных сталей  
в зависимости от концентрации основных легирующих элементов

№	C	Si	Mn	$K_I$	$n$	Источник
1	0.14	0.46	0.65	158	0.36	14
2	0.27	0.46	0.64	153	0.35	
3	0.43	0.45	0.65	150	0.37	
4	0.62	0.36	0.60	143	0.40	
5	0.76	0.46	0.70	134	0.39	
6	0.88	0.46	0.73	140	0.44	
7	0.003	0.4	1.48	140	0.173	17
8	0.1	0.4	1.51	110		
9	0.19	0.42	1.47	72		
10	0.4	0.42	1.5	58		
11	0.62	0.12	0.58	63.3	1/3	10
12	0.52	0.1	0.56	63.6		

В табл. 1.5-1.6 приведена краткая сводка полученных экспериментально для сплавов разного состава значений параметров  $K_1$ ,  $K_2$ ,  $n$  и  $f$  в уравнении  $\lambda_2 = K_1 C_R^{-n} = K_2 \tau_{LS}^f$ , которые следует оценивать с учетом двух важных обстоятельств: применяемой методики определения  $C_R$  и объема использованного массива экспериментальных данных  $N$  (в большинстве случаев в публикациях не указан), от которых зависит погрешность вычисления эмпирических параметров.

Сравнительный анализ сводных данных, проведенный в [3], демонстрирует существенные различия в значениях коэффициентов  $K_1=58-367$  и  $n=0.173-0.45$ ,  $K_2=7.2-53$  и  $f=0.32-0.51$ .

Таблица 1.6.

Значения коэффициентов  $K_2$  и  $f$  для низколегированных сталей  
в зависимости от концентрации основных легирующих элементов

№	C	Si	Mn	Ni	Cr	$K_2$	$f$	Источник
1	0.09	-	1.36	-	-	28	0.51	24
2	0.15	-	1.44	-	-	16	0.43	
3	0.59	-	1.1	-	-	15.8	0.44	
4	1.48	-	1.14	-	-	7.2	0.5	
5	0.1	0.08	0.4	0.05	0.05	9.5*	0.33	23
6	0.08	0.86	1.48	0.01	0.04	47*		
7	0.09	0.55	1.2	0.03	0.03	32*		
8	0.63	0.21	0.67	0.03	0.03	53*		
9	0.55-0.56	0.24-0.3	0.75-0.85	-	-	52	0.32	25
10	0.471	0.37	0.73	-	-	40	0.35	
11	0.14-0.20	0.27-0.53	1.35-1.71	-	-	15	0.46	
Примечание: * - вычислено на основе приведенной формулы.								

Представленные различия обуславливаются влиянием химического состава сплавов, условий кристаллизации, качества термодинамических моделей расчета неизвестных параметров, а также связаны с погрешностью оценки и взаимной несогласованностью дифференциальных характеристик  $C_R$  и  $\tau_{LS}$ . При этом следует отметить, что теоретически обоснованное соотношение  $\lambda^3(\tau) - \lambda^3(0) = K_2 \tau_{LS}$ , при  $\lambda(\tau)$

»  $\lambda(0)$  дает уравнение  $\lambda(\tau) \approx (K_2 \tau_{LS})^{0.33}$ , где степенной коэффициент соответствует нижней границе значений статистического коэффициента  $f$ , а также  $(-n)$ , за исключением [26]. В ряде работ [10, 23 и др.] данное обстоятельство непосредственно учитывается при расчете коэффициентов  $K_1$  и  $K_2$  ( $-n = f = 1/3$  – табл. 1.5, №15-16 и табл. 1.6, №5-8), сводя отклонение значений  $n$  и  $m$  от величины  $1/3$  к погрешностям их расчета.

Один из путей повышения качества эмпирических моделей реализован в работах [19, 22 и др.] путем замены скорости охлаждения  $C_R$  эквивалентным произведением скорости роста дендрита/фронта кристаллизации  $v_d$  на градиент температур в зоне затвердевания  $G$  ( $C_R = v_d G$ ). Введение степенного коэффициента для каждого из исследуемых параметров ( $\lambda_2 = K_3 v_d^a G^b$ ) позволяет, по мнению авторов работы [18], повысить коэффициенты корреляции полученных моделей и качество прогнозирования дендритной микроструктуры. Однако независимое изменение  $v_d$  и  $G$  возможно лишь в случае использования специального оборудования, в то время как в естественных условиях (фасонное или непрерывное литье) эти параметры жестко связаны и зависят от тепловых условий кристаллизации, а также физико-химических параметров сплава. Помимо этого, существует сложность экспериментальной фиксации  $v_d$  и  $G$ , связанная с техническими трудностями. Например, в качестве метода фиксации структуры дендрита в основном используется закалка, которая приводит к возрастанию неравновесности процесса кристаллизации, что может сказываться на правильности интерпретации экспериментальных результатов и точности полученной модели.

Таким образом, эмпирические модели формирования дендритной структуры (табл. 1.5-1.6), полученные путем статистической обработки экспериментальных данных, в силу ограниченных инструментальных возможностей оценки условий затвердевания отливок и слитков, отражают связь микроструктуры лишь с основными измеряемыми параметрами кристаллизации ( $\tau_{LS}$ ,  $C_R$ ,  $G$ ,  $v_d$ ). Как видно на примере низколегированных сталей (табл. 1.5-1.6), существует достаточно большой разброс значений полученных эмпирических коэффициентов статистических

моделей  $\lambda_2$ , что свидетельствует о недостаточно полном учете факторов, влияющих на величину вторичных междоусных промежутков.

Влияние химического состава. Публикация исследования [13] актуализировало проблему оценки влияния химического состава сплава на величину  $\lambda_2$ , так как его выводы вошли в противоречие с существовавшими представлениями о процессе формирования дендритной структуры. Некоторое время спустя появляются работы, на примере низколегированных сталей демонстрирующие непосредственное влияние углерода на величину  $\lambda_2$  с помощью анализа зависимости микроструктуры от химического состава стали (рис. 1.4) [16, 18 и др.]. Однако характер этого влияния остается на тот момент в значительной степени неясным, в связи с тем, что во-первых, экспериментальные данные достаточно разрознены, во-вторых, инструментальные и аналитические возможности исследователей были существенно ограничены и не имели современных способов анализа дендритной микроструктуры (измерение, либо расчет теплофизических и физико-химических параметров сплава; комплексный анализ тепловых, диффузионных и кристаллизационных процессов, статистическая обработка большого массива экспериментальных данных). Таким образом, результаты исследований влияния химического состава сплава на величину  $\lambda_2$  представляли из себя набор частных эмпирических уравнений  $\lambda_2 = K_1 C_R^{-n} = K_2 \tau_{LS}^f$ , где  $K_1$ ,  $n$ ,  $K_2$ ,  $f$  в неявном виде отражают влияние химического состава и, соответственно, имеют все недостатки указанного типа эмпирических уравнений.

С накоплением разрозненного экспериментального материала появилась необходимость в обобщении частных эмпирических моделей расчета  $\lambda_2$  с целью построения более универсальных зависимостей для расширения области их использования. Один из подходов к реализации данной задачи связан с учетом химического состава сплавов путем введения в уравнения для расчета  $\lambda_2$  соответствующих концентраций (табл. 1.7).

Сопоставление уравнений, приведенных в табл. 1.5-1.6, демонстрирует несогласованность оценок влияния компонентов стали на дисперсность дендритной

структуры. В частности, в большинстве публикаций [14, 19, 21 и др.] установлено, что  $\lambda_2$  существенно снижается при повышении содержания углерода, однако, в ряде работ при этом отмечено повышение  $\lambda_2$  [20] или отсутствие какого-либо влияния.

Представленная в табл. 1.7 сводка математических моделей, описывающих влияние химического состава стали на конечную величину  $\lambda_2$ , позволяет оценить вклад отдельных компонентов, а также сопоставить структуру моделей. Разнохарактерность приведенных формул и их сложная структура очевидно ориентированы на подходящую аппроксимацию экспериментальных данных и не предполагает какой-либо физико-химической интерпретации и обобщения.

Данные, приведенные в табл. 1.5-1.6, свидетельствуют об изменении дендритной структуры в зависимости от содержания ряда компонентов, в первую очередь – углерода. Однако, сопоставление результатов расчета по математическим моделям, учитывающим влияние химического состава (табл. 1.7), показывает, что влияние углерода на величину  $\lambda_2$  носит сложный характер и не согласуется даже по знаку выявленного эффекта (рис. 1.3) (см. также табл. 1.1).

Наиболее полно набор легирующих элементов стали отражен в моделях полумпирического типа (табл. 1.7 – формулы 3, 8), при выводе которых благодаря использованию компьютерного моделирования тепловых условий кристаллизации удалось обобщить большее количество экспериментальных данных за счет восстановления параметров, не отраженных в публикациях. Однако, несмотря на охваченный спектр данных и использование аппарата компьютерного моделирования, судить о влиянии каждого отдельного компонента на эволюцию микроструктуры можно лишь качественно, поскольку представленные математические модели имеют разнообразный вид, при этом отсутствует информация о доверительных интервалах коэффициентов регрессии. В частности, сопоставление расчетных графиков зависимости  $\lambda_2$  от концентрации углерода (рис. 1.4) по имеющимся уравнениям, демонстрирует отсутствие надежной оценки характера влияния углерода на дисперсность дендритной структуры.

Таблица 1.7.

Статистические модели влияния компонентов стали на величину вторичных междоусных промежутков  $\lambda_2$

№	Расчетная формула ( $\lambda_2$ , мкм; R, К/с; $\tau_{LS}$ , с; $G_L$ , К/см; $V_L$ , см/с; $X_i$ , C, Si, Mn, ..., масс.%)	Условия применения (C, %)	год публикации	источник
1	$\lambda_2 = 146(C_R)^{-0.386}$ ;	$0.14 \leq C \leq 0.88$	1968	[13]
2	$\lambda_2 = 79(\%C)^{-0.187} \tau_{LS}^{0.38}$ ;	$0.11 \leq C \leq 1.01$	1977	[23]
3	$\lambda_2 = A_1 (C_R)^{-n}$ ; $A_1=148$ ; $n=0.38$ ;	$0 \leq C \leq 0.53$	1996	[24]
4	$\lambda_2 = A_2 (\tau_{LS})^d$ ; $A_2=21.52764 - 9.40(\%C)$ ; $d=0.4+0.08(\%C)$ ;	$0.53 \leq C \leq 1.5$		
5	$\lambda_2 = \tau_{LS}^{1/3} (70C + 50Si - 0.178Mn - 430Al + 0.755Ni + 3.42Cr)$ ;	$0.18 \leq C \leq 1.48$	1998	[21]
6	$\lambda_2 = 18.61 \tau_{LS}^{0.36} \exp(1.49(\%C))$ ; $\lambda_2 = 64.80 C_R^{-0.36} \exp(2.12(\%C))$ ; $\lambda_2 = 6275 G_L^{-0.53} \exp(2.38(\%C))$ ; $\lambda_2 = v_{sp}^{-0.61} \exp(1.77(\%C))$ ;	$0.14 \leq C \leq 0.56$	1999	[10]
7	$\lambda_2 = (169.1 - 720.9C) C_R^{-0.4935}$ ;	$0 < C \leq 0.15$	2001	[26]
8	$\lambda_2 = 143.9 C_R^{-0.3616} (\%C)^{(0.5501 - 1.996\%C)}$ ;	$C > 0.15$		
9	$\lambda_2 = 123 C_R^{-0.33} \exp(A)$ ; $A = -0.281C + 0.175Mn - 0.063Cr - 0.136Mo - 0.091Ni$ ;	—	2006	[25]
10	$\lambda_2 = (166.38 - 567.07(\%C) - 85.39(\%C)^2) C_R^{-0.49}$ ;	$0 < C < 0.15$	2009	[37]
11	$\lambda_2 = A C_R^{-0.36} (\%C)^{(0.55 - 2.0\%C)}$ ; $A = (671.31(\%C)^2 - 627.80(\%C) + 232.23)$	$0.15 \leq C \leq 0.53$		
12	$\lambda_2 = (27.93 - 11.19(\%C)) \tau_{LS}^{(0.4 + 0.08\%C)}$ ;	$C > 0.53$		
13	$\lambda_2 = (-40.02 C_R^{-0.40} + 0.78 C_R^{-1.11} C + 86.74 C_R^{-0.099} Si - 38.72 C_R^{-0.15} Mn + 1193.95 C_R^{-0.28} Al + 1276.71 C_R^{-0.23} Cr - 18.02 C_R^{-0.17} Ni - 2383.63 C_R^{-0.20} Nb) \tau_{LS}^{1/3}$ ;	$0.05 \leq C \leq 0.30$		
14	$\lambda_2 = 200 C_R^{-0.33} \exp(A^{0.4})$ ; $A = -0.6844C - 0.0069Si - 0.0674Mn - 0.1412Cr - 0.0057Mo - 0.1259Ni + 0.14788C^2 + 0.00387Cr^2 + 0.00101Ni^2 - 0.10295CrC + 0.00456CrNi$ ;	—	2010	[29]
15	$\lambda_2 = 18.39(1 - 0.73(\%C)) \tau_{LS}^{0.329}$ ;	$0.01 \leq C \leq 0.07$ Si=0.3; Mn=1	2013	[38]
16	$\lambda_2 = 45.36(1 - 0.68 Si - 0.49 Mn - 0.26 Cr - 0.68 Ni) \tau_{LS}^{0.33}$ ;	$C=0.06$ ; $X_i=1$		
17	$\lambda_2 = 21.70(1 - 0.47 Si - 0.15 Mn - 0.042 Cr - 0.072 Ni) \tau_{LS}^{0.33}$ ;	$C=0.6$ ; $X_i=1$		
18	$\lambda_2 = 49.58(1 - 0.97 C - 0.74 Si - 0.58 Mn - 0.450 Cr - 0.51 Ni) \tau_{LS}^{0.325}$ ;	$0.06 \leq C \leq 0.6$ ; $X_i=1$		

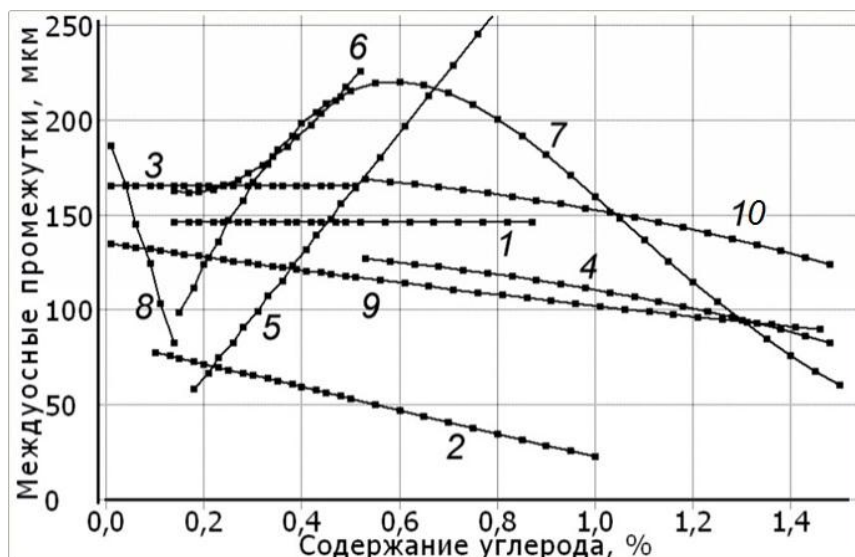


Рисунок 1.4. Зависимость вторичных междоусных промежутков  $\lambda_2$  от содержания углерода по различным моделям (1-10) при локальной продолжительности затвердевания  $\tau_{LS}=100$  с или скорости охлаждения  $C_R=0.5$  К/с. Нумерация кривых 1-10 отвечает табл. 1.7

Подобные неоднозначные оценки выявляются при сравнительном анализе формул (5), (9), (13)-(14) в табл. 1.7 и для других компонентов стали. Так, для Si, Mn, Ni и Cr неоднократно зафиксирована перемена знака на обратный, что требует дополнительных исследований.

Таким образом, несмотря на обширную экспериментальную базу и учет химического состава сплавов, модели эмпирического и полуэмпирического типа имеют существенный недостаток – в них остаются нераскрытыми связи теплофизических (температура ликвидуса  $t_L$  и солидуса  $t_S$ , теплота кристаллизации  $H$ , теплоемкость  $c$ , темп выделения твердой фазы и др.) и физико-химических (концентрация компонентов в расплаве  $C_L$ , коэффициент распределения  $k$ , наклон поверхности ликвидуса  $p$ , коэффициент диффузии в расплаве  $D^L$ , коэффициент Гиббса-Томсона  $\Gamma$  и др.) параметров сплава с кинетикой изменения  $\lambda_2$ . Это обстоятельство не позволяет использовать данные уравнения для содержательного анализа микроликвации, фильтрации расплава сквозь разветвленные дендриты, образования непрерывной твердой фазы, образования дефектов и реализации других процессов, в частности, для исследования влияния на величину  $\lambda_2$  отдельных легирующих элементов.

Аналитические модели для расчета  $\lambda_2$ . Надежность компьютерного моделирования дендритной структуры обуславливается качеством используемых моделей расчета  $\lambda_2$ . В зависимости от целей расчета, существуют различные пути ре-



шения. Так, для решения фундаментальных вопросов эволюции микроструктуры, например, расчета геометрических параметров ветвей дендрита, концентрационных градиентов и некоторых других параметров в зависимости от условий кристаллизации, целесообразно использовать симуляцию дендритного роста по методу «фазовых полей» («ячеистых автоматов»). Метод «фазовых полей», предложенный в 2001 году [40] и существенно развитый в последнее время для решения двух- и трехмерных задач [41-43], основывается на представлении кристаллизующейся области в виде сетки с заданным размером ячейки. В процессе расчета фазовое состояние каждой ячейки определяется ее равновесными параметрами (температура, концентрация компонентов сплава и др.). При этом учитывается диффузионная подвижность компонентов сплава в масштабе анализируемой сетки, что позволяет исследовать эволюцию температурных и концентрационных полей, движение фронта кристаллизации, геометрические параметры дендрита, а также ряд других сопутствующих процессов. Однако, несмотря на достоинства данной методики, реализующей «виртуальный» эксперимент, она имеет существенные недостатки, среди которых: невозможность анализа термически неравновесной кристаллизации; значительная продолжительность расчетного времени, затрудняющая использование метода «фазового поля» для расчета кристаллизации мезо- и макрообъемов металла.

Более эффективный анализ процессов формирования микро- и макроструктуры отливок реализован посредством использования аналитических моделей, позволяющих прогнозировать конечную дендритную структуру на основе теории коалесценции [31-39] (табл.1.8). При этом модели данного типа в явном виде учитывают достаточно широкий спектр параметров сплава и условий кристаллизации.

Аналитический подход к исследованию эволюции микроструктуры впервые был применен А.А. Черновым в работе [67]. В данном исследовании на основе теории коалесценции получила математическое выражение скорость «отшнуровывания» ветвей дендрита от несущего основания (оси) (табл. 1.8, формула 1). На примере препаратов хлористого аммония было продемонстрировано определяю-

щее влияние диффузионных процессов на перераспределение компонентов сплава по поверхности дендрита к участкам с наименьшей кривизной.

Позднее, в [68] была аналитически рассмотрена изотермическая коалесценция дендритной ветви при растворении ее основания, а также при радиальном растворении. Впоследствии данная работа была развита с целью учета дополнительных механизмов коалесценции, наблюдаемых при кристаллизации модельных сплавов: осевого растворения и сращивания ветвей [31-34, 36-38].

Таблица 1.8.

Уравнения для оценки кинетики коалесценции  
при радиальном растворении дендритных ветвей

№	Расчетная формула	Год	Источник
1	$\frac{dr}{d\tau} = \frac{\sigma p D^L C_L^0}{k_B \rho R T} \left( \frac{1}{r} - \frac{1}{R} \right)$	1956	[67]
2	$\frac{dr}{d\tau} = \frac{\Gamma D^L}{p \lambda_2 C_L (1-k)} \left( \frac{1}{r} - \frac{1}{R} \right)$	1967	[68]
3	$\lambda_2^2 d\lambda_2 = \frac{9 D^L \Gamma}{4 C_L p (1-k) m (1-\sqrt{m})} d\tau$	1989	[61]
4	$\lambda_2^2 d\lambda_2 = \min B \left( \frac{\Gamma D^L}{p (1-k) C_L} d\tau \right)$	1990	[69]
5	$\lambda_2^2 \frac{\partial \lambda_2}{\partial \tau} = \frac{6 D^L \Gamma}{p C_L (1-k) m^{2/3} (1-m^{1/3})}$	1996	[70]
6	$\tau = \frac{\lambda_2^3}{\Gamma} \varphi \sum \frac{p_i (C_L^0)_i (1-k_i) (1-m)^{k_i-1}}{D_i^L}$	1997	[36]
7	$\frac{dr}{d\tau} = \frac{\Gamma}{d^*} \frac{1}{\sum_{(i)} \frac{p_i (1-k_i) (C_L)_i}{D_i^L}}$	1999	[64]
Обозначения: $R, r$ – радиусы ветвей дендрита; $k_B$ – константа Больцмана; $\varphi$ – параметр, учитывающий принятую модель коалесценции; $\sigma$ – межфазное натяжение; $\rho$ – плотность; $B$ – геометрический фактор; $d^* = \lambda_2 - (R+r)$ .			

Представленные в табл. 1.8 различные аналитические выражения для расчета скорости растворения (утолщения) ветвей при коалесценции учитывают, по-

мимо теплофизических факторов (доля твердой фазы  $m$ , теплота кристаллизации  $H$ , теплоемкость  $c$  и др.) и физико-химических параметров (коэффициент распределения  $k$ , наклон поверхности ликвидуса  $p$ , коэффициент диффузии в расплаве  $D^L$  и др.) сплава влияние капиллярных сил, морфологии дендритов ( $R$ ,  $r$  и  $\lambda$ ) и состава жидкой фазы.

При рассмотрении многокомпонентных систем исследователи расходятся в методике учета состава сплава. Так, в [35, 69] влияние компонентов сплава на кинетику коалесценции рассматривается на основе принципа выбора из них одного лимитирующего; в уравнениях (6-7) (табл. 1.8) учитывается аддитивный вклад всех компонентов сплава. Представленные альтернативы, а также использование иных подходов решения данной задачи [71-72] не получили до сих пор исчерпывающей аргументации или надежного экспериментального подтверждения. Наибольший интерес в табл. 1.8 представляет уравнение (6), предполагающее выбор подходящего значения коэффициента  $\phi$  для одного из альтернативных механизмов коалесценции [36]. Использование коэффициента  $\phi$  вносит в уравнение дополнительную степень свободы, позволяя решать прямую и обратную задачу формирования дендритной микроструктуры. В то же время, преобразование этого выражения путем замены базового диффузионного соотношения – уравнения Шейля (для условий полного подавления диффузии в твердой фазе, что нехарактерно для сплавов железа с ускоренной диффузией компонентов внедрения), позволило дать обобщенное описание частичного протекания диффузии в твердой фазе на основе уравнения Онака [66].

Важной особенностью представленных статистических моделей для прогнозирования дендритной микроструктуры, является практически полное отсутствие в них сведений об экспериментальных данных и характере их осреднения (аппроксимации). Во всех моделях отражена информация лишь о *средних* значениях вторичных междудендритных промежутков дендритов  $(\lambda_2)_{cp}$ , при этом не указывается характер распределения первичных измерений  $(\lambda_2)_i$  относительно среднего  $(\lambda_2)_{cp}$ . Количество публикаций, в том или ином виде представляющих такую информацию, весьма мало [11, 13, 21, 29]; в них не указаны методы статистической

обработки первичных массивов данных, отсутствуют какие-либо обобщенные данные о характере их разброса и возможных средства его прогнозирования.

Таким образом, существующий достаточно широкий спектр частных эмпирических и полуэмпирических уравнений, а также аналитических решений задачи формирования микроструктуры позволяет приближенно оценить лишь осредненную характеристику микроструктуры –  $(\lambda_2)_{cp}$ , которая не раскрывает реальную картину *структурной микронеоднородности*, тогда как результаты металлографических исследований демонстрируют значительный разброс  $\lambda_2$  относительно среднего значения  $(\lambda_2)_{cp}$  (рис. 1.1) не только в макромасштабе изделия (слитка, отливки), но и в микромасштабе.

## **1.2. Исследования дендритной ликвации в заготовках**

### **1.2.1. Формирование дендритной ликвации**

Одной из центральных задач компьютерного моделирования кристаллизации является прогнозирование дендритной ликвации, оказывающей влияние на качество металла. Расчет дендритной ликвации основывается на модели перераспределения компонентов сплава в масштабе  $\lambda_2$ . В данной модели анализируется диффузионный перенос компонентов сплава с учетом влияния кинетики движения фронта кристаллизации, фазового состава затвердевающего металла, кинетики перитектического превращения, морфологии дендритов и других факторов.

Наиболее ранние работы по исследованию микроликвации, формирующейся при кристаллизации, ориентированы на расчет изменения концентрации компонентов сплава во внутريدендритной жидкой фазе  $(C_L)_i$  (табл. 1.9).

Правомерность использования представленных в таблице уравнений обуславливается принимаемыми при расчете допущениями. Уравнение (1) в табл. 1.9 получено для систем, в которых диффузия компонентов сплава в жидкой фазе происходит бесконечно быстро ( $D_i^L = \infty$ ), а в твердой фазе полностью подавлена ( $D_i^S = 0$ ) или настолько мала, что может не учитываться при моделировании кристаллизации. Для сталей ис-

пользование данного уравнения дает большие погрешности в силу относительно высокой диффузионной активности компонентов сплава в твердой фазе.

Таблица 1.9.

Уравнения для расчета состава жидкой фазы  $(C_L)_i$  при кристаллизации стали

№	Модель	Авторы (год)
1	$(C_L)_i = (C_L^0)_i [1 - (1 - k_i)m]^{-1};$	Шейль и др. (1935) [73]
2	$(C_L)_i = (C_L^0)_i [1 - (1 - \gamma_i k_i)m]^{\frac{k_i-1}{1-\gamma_i k_i}};$ $\gamma_i = \frac{8D_i^S \tau}{\lambda_2^2},$	Броди и Флемингс (1977) [73]
3	$(C_L)_i = (C_L^0)_i \left[ 1 - \left( 1 - \gamma_i' k_i \right) m \right]^{\frac{k_i-1}{1-2\gamma_i' k_i}};$ $\gamma_i' = \gamma_i \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{1}{\gamma_i}\right) \right\} - \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{1}{2\gamma_i}\right), \quad \gamma_i = \frac{4D_i^S \tau}{\lambda_2^2},$	Клайн и Курц (1981) [1]
4	$(C_L)_i = (C_L^0)_i \left[ 1 - \left( 1 - \frac{2\gamma_i k_i}{1 + 2\gamma_i} \right) m \right]^{\frac{k_i-1}{1 - \frac{2\gamma_i k_i}{1 + 2\gamma_i}}}; \quad \gamma_i = \frac{8D_i^S \tau}{\lambda_2^2},$	Онака (1986) [74]

Использование уравнения (2) оказалось неприемлемым в силу некорректности ряда допущений, принятых при выводе. Более совершенными оказались уравнения (3) и (4), которые позволяют учесть обратную диффузию в твердой фазе ( $0 < D_i^S < \infty$ ), при этом, в отличие от уравнения (2), дают корректные значений  $(C_L)_i$  и нашли широкое применение при анализе процессов кристаллизации.

### 1.2.2. Перитектическое превращение

Перитектическое превращение, являющееся важным этапом кристаллизации ряда промышленных металлических сплавов (углеродистые и нержавеющие стали, оловянные бронзы и латуни, алюминиевые сплавы), оказывает значительное влияние на их механические свойства и склонность к горячим трещинам (вследствие значительных объемных изменений), а также ликвационную и структурную неоднородность металла [75-77 и др.].

Механизм перитектического превращения в сплавах на основе железа, несмотря на значительное число выполненных ранее и активно проводимых исследований, остается дискуссионным и для его уточнения в последние годы использованы различные экспериментальные методы [78-79] и компьютерный анализ [79-80]. Согласно основной схеме реализации перитектического превращения в стали [81-84 и др.] вскоре после начала перитектической реакции поверхностная пленка  $\gamma$ -фазы, весьма быстро распространяющаяся на выделениях первичной  $\delta$ -фазы, отделяет их от расплава, после чего формирование  $\gamma$ -фазы сосредотачивается на подвижных границах  $L/\gamma$  (кристаллизация из расплава  $L \rightarrow \gamma$ ) и  $\gamma/\delta$  (твердофазное превращение  $\delta \rightarrow \gamma$  за счет диффузионного переноса легирующих элементов) (рис. 1.5).

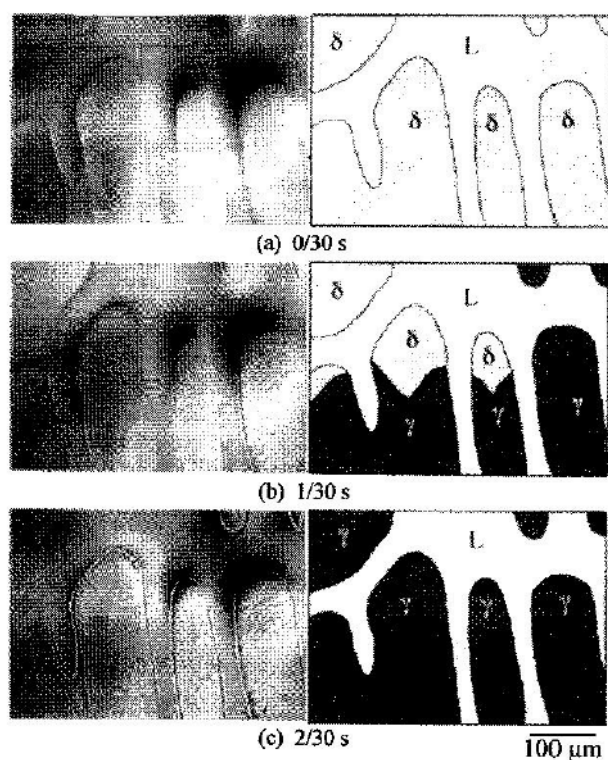


Рисунок 1.5. Этапы перитектического превращения сплава Fe-0.14%С при переохлаждении  $\Delta T \approx 10$  К [84].

Скорость движения фронта кристаллизации (границы  $L/\gamma$ ) определяется условиями теплоотвода, в то время как кинетика перитектического превращения зависит скорости диффузионного переноса компонентов сплава по толщине слоя вторичной фазы. Соответственно на скорость перитектического превращения влияет перепад концентраций на границах раздела фаз, величина которого зависит от существующего в системе переохлаждения относительно перитектической температуры. Таким образом, зная величину переохлаждения, можно рассчитать количество диффундировавшего компонента сплава к границе  $\gamma/\delta$

и глубину перитектического превращения за определенное время. Данная методика анализа диффузионно-контролируемого перитектического превращения реализована в работах [78, 83, 85 и др.].

В случае необходимости анализа не только кинетики перитектического превращения, но и одновременного формирования дендритной ликвации используется схема детерминированного расчета диффузионных потоков по второму закону Фика. При этом анализ перераспределения компонентов сплава в прослойке вторичной  $\beta$ -фазы производится при наличии двух подвижных границ  $L/\gamma$  и  $\gamma/\delta$  [80, 85 и др. ].

### 1.2.3. Численный анализ дендритной ликвации

В зависимости от глубины решаемых задач в литературе используются два подхода к анализу кинетики изменения концентраций компонентов сплава в жидкой фазе. Первый подход – аналитический – предполагает использование уравнения для расчета непосредственно величины  $(C_L)_i$ . При этом анализ распределения компонентов в твердой фазе не является целью подобных расчетов, так как они ориентированы преимущественно на анализ кинетики кристаллизации. Данный подход был использован в комплексной модели неравновесной кристаллизации, в которой решение диффузионной задачи направлено на расчет температуры ликвидуса, зависящей именно от концентрации компонентов в расплаве. С целью повышения адекватности аналитических расчетов при повышенных скоростях охлаждения иногда используют параметры неравновесной диаграммы состояния [35]. Однако их определение является нетривиальной задачей, вследствие чего используется достаточно редко. В то же время, хорошо себя зарекомендовал принцип «локального равновесия», подтверждающий правомерность использования равновесной диаграммы для анализа сегрегации компонентов на фронте кристаллизации, благодаря чему получил широкое распространение [26, 78 и др.].

Второй подход – численный – предполагает расчет диффузионного перераспределения компонентов по сечению дендритной ветви, что по завершению кристаллизации позволяет проанализировать характер сформировавшейся химической микронеоднородности. Особенностью численного моделирования является необходимость разбиения исследуемой области сеткой с определенным шагом. Для специфических задач моделирования по методу фазовых полей/ячеистых автоматов исследуемая область разбивается двумерной, либо трехмерной сеткой. При классическом методе моделирования

дендритной ликвации [84-86 и др.] используется одномерная сетка, которая предполагает сведение сложной морфологии дендритной ветви к простым полубесконечным телам (пластина, цилиндр и др.).

Перераспределение компонентов сплава в любой фазе осуществляется диффузией и происходит в объеме, ограниченном поверхностью раздела фаз. Если для расчета диффузии компонентов сплава исследователями традиционно используется второй закон Фика:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{n}{x} \frac{\partial C}{\partial x} \right), \quad 0 \leq x \leq \lambda_2/2,$$

который позволяет рассчитать изменение концентрации диффундирующих элементов при плоской, цилиндрической или сферической поверхности раздела фаз, то по другим аспектам (конфигурация поверхности раздела фаз, морфология дендритной ветви, коалесценция и ее учет) в публикациях нет единообразного решения (здесь  $x$  – пространственная координата;  $n=0, 1$  или  $2$  при плоской, цилиндрической или сферической задаче).

Геометрия дендритной ветви и, соответственно, поверхности фронта кристаллизации принимается исследователями с точки зрения наиболее адекватного отображения реальной картины. В основном в литературе рассматривается схема плоского фронта [75-77 и др.], при этом в некоторых работах конфигурация ветви, влияющая на особенности численного расчета диффузии компонентов сплава, принимается в виде шестигранника [85, 87], либо четырехконечной звезды [81] (табл. 1.10).

Одним из наиболее распространенных видов аппроксимации геометрии дендритной ячейки является вписанный многогранник (табл. 1.10, №1,2,4), по форме близкий ячеистому фронту кристаллизации. В некоторых случаях, исследователи производят аппроксимацию растущего ствола в виде звезды с ортогонально направленными лучами (табл. 1.10, №3). Данный метод целесообразно применять в случае формирования четко выраженных ветвей третьего порядка.

В работе [85] произведен сравнительный анализ влияния геометрических моделей дендритных ветвей на конечную картину химической микронеоднородности (рис. 1.6). Как видно из представленных результатов, зависимость конечного распределения ком-



понентов сплава от вида аппроксимации ветви носит сложный характер и связана с различием их физико-химических параметров.

Как было указано ранее, кристаллизация сопровождается растворением одних дендритных ветвей и увеличением за их счет размеров других ветвей. Таким образом, эволюция каждой отдельной ветви включена в эволюцию локальной микроструктуры, характеризуемой осредненной величиной  $(\lambda_2)_{\text{ср}}$ . При этом постепенное увеличение  $(\lambda_2)_{\text{ср}}$  наблюдается от начала до конца кристаллизации.

Описание процесса эволюции микроструктуры трудоемко и малоизучено, поэтому при моделировании дендритной ликвации применяются следующие упрощенные подходы: коалесценция не учитывается – в расчете используется фиксированное значение  $(\lambda_2)_{\text{ср}}$  [73, 79, 85 и др.]; коалесценция учитывается – для расчета  $(\lambda_2)_{\text{ср}}$  по ходу кристаллизации используются эмпирические или полуэмпирические уравнения [76-77].

Использование фиксированного значения  $\lambda_2$  при расчете микроликвации позволяет значительно упростить её математическую модель, но приводит к появлению дополнительных погрешностей, связанных с тем, что не учитывается прирост твердой фазы за счет растворения соседних ветвей; не учитывается существенное различие скорости изменения концентраций компонентов сплава в твердой фазе на начальной и конечной стадии кристаллизации. В связи с этим отсутствует возможность анализа взаимного влияния дендритной ликвации и структурной микронеоднородности.

В зависимости от морфологии ветвей и принятых допущений, численное решение задачи перераспределения компонентов сплава в масштабе  $\lambda_2$  может заключать в себе некоторые различия. Так, например, в [85-87] используется накопительная схема учета движения фронта кристаллизации со скачкообразным перемещением границ раздела фаз, в то время как в [81, 84] реализуется схема поступательного движения фронта в соответствии с ходом теплового расчета. Однако, несмотря на эти различия, основная структура математической модели представляет собой уравнение Фика, преобразованное для детерминированного расчета дендритной ликвации. Численное решение задачи предполагает деление междоусного интервала сеткой на определенное количество элементов заданным размером  $dR$ . При этом величина  $dR$  подбирается, исходя из условия

устойчивости вычислительной схемы и минимизации погрешности расчета (как правило,  $dR \leq \lambda_2/80$  [87, 89]).

Таблица 1.10.

Виды геометрической аппроксимации морфологии  
дендритной ветви

№	Геометрия	Учет коалесценции	Сетка в жидкой фазе	Источник
1		Нет	Да	[81]
2		Нет	Нет	[88]
3		Нет	Да	[85]
4		Нет	Да	[86]

№	Геометрия	Учет коалесценции	Сетка в жидкой фазе	Источник
5	Плоский одномерный фронт <div style="text-align: center;"> <math>L/\gamma</math>      <math>\gamma/\delta</math>  </div>	Нет	Нет	[84]
6	Плоский одномерный фронт <div style="text-align: center;"> </div>	Нет	Нет	[87]
7	<div style="display: flex; justify-content: space-around;"> </div>	Нет	Нет	[82]

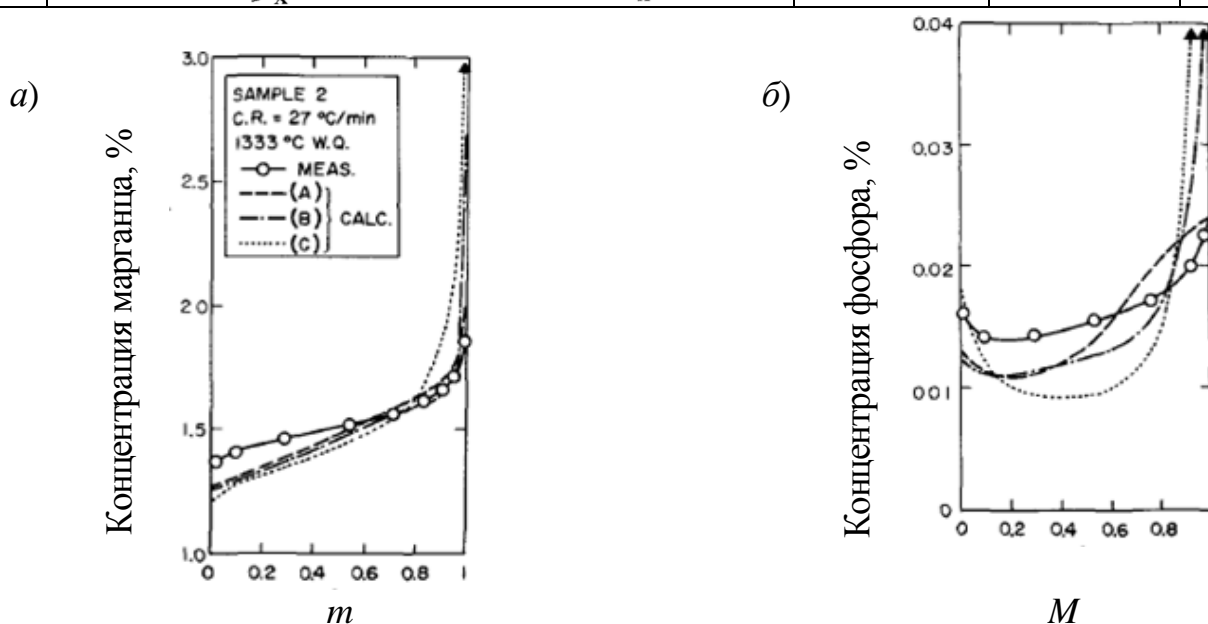


Рисунок 1.6. Распределение по сечению дендритной ячейки а – марганца, б - фосфора для трех вариантов геометрической аппроксимации [81].

Движение фронта кристаллизации за счет выделения твердой фазы состава  $(C_S)_i = k_i(C_L)_i$  сопровождается обогащением (при  $k_i < 1$ ), либо обеднением (при  $k_i > 1$ ) расплава растворенными в нем компонентами.

Развитие дендритной ликвации приводит к постепенному понижению температуры ликвидуса в системе  $T_L$ . При падении  $T_L$  ниже температуры перитектического превращения на поверхности  $\delta$ -фазы образуется тонкий слой вторичной  $\gamma$ -фазы. Достаточ-

но быстро вся поверхность дендритов, образовавшихся на первой стадии кристаллизации, становится отделенной от расплава пленкой  $\gamma$ -фазы. Таким образом, этап кристаллизации  $\delta$ -фазы из расплава заканчивается с появлением новой границы раздела фаз, что требует соответствующей корректировки численной модели формирования дендритной ликвации.

#### 1.2.4. Результаты численных исследований дендритной ликвации

Вышеописанная методика анализа дендритной ликвации легла в основу широкого круга исследовательских работ [74-89 и др.]. Результаты исследований демонстрируют возможности анализа микроликвации многокомпонентных сплавов в масштабе  $\lambda_2$  (рис. 1.7) как для простых двухфазных систем (а), так и для сложных, учитывающих последовательное движение межфазной границы, характеризующее реальную кристаллизацию и перитектическое превращение (б) [89].

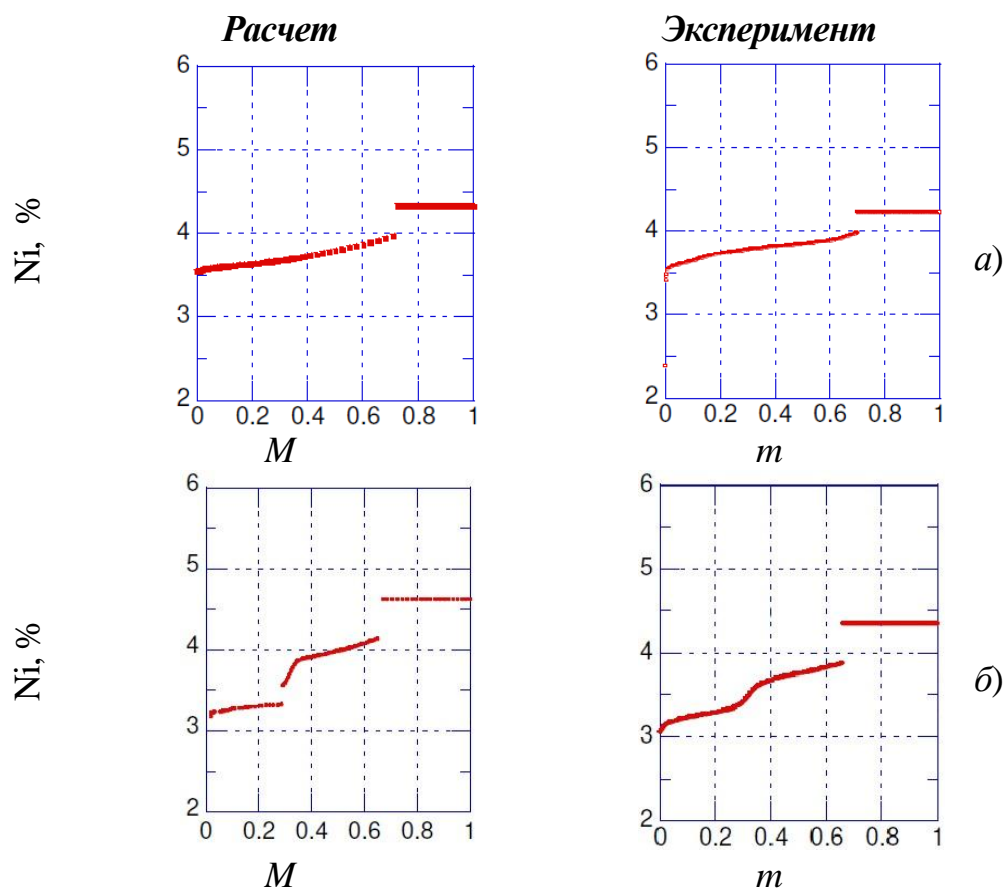


Рисунок 1.7. Распределение Ni в микро-масштабе  $\lambda_2/2$  при кристаллизации сплавов [90]:  
а – Fe-0.4% C-4% Ni (при  $m=0.7$ ,  $\lambda_2/2=475$  мкм); б – Fe-0.1% C-4% Ni (при  $m=0.65$ ,  $\lambda_2/2=275$  мкм).

Сложность рассматриваемых процессов и неполнота представлений о них создают предпосылки для их вариативных толкований, что выражается в принятии и использовании различных упрощений. В результате выводы некоторых исследовательских работ могут противоречить друг другу. Так, в работах [83, 91] применен принцип «локального равновесия» для анализа микросегрегации всех компонентов сплава не только на фронте кристаллизации, но также для межфазной границы  $\gamma/\delta$ . В то же время в [92] использован принцип «параравновесия», согласно которому равновесная концентрация на границе  $\gamma/\delta$  поддерживается только углеродом, так как менее подвижные компоненты не успевают диффундировать к границе в нужном количестве. Принцип «параравновесия» использован в модели дендритной ликвации и подробнее рассмотрен в разд. 4.

Стремление более детально рассмотреть сегрегацию компонентов в кристаллизующейся микро-ячейке в зависимости от физико-химических параметров сплава, побудило ряд исследователей использовать расчетную сетку для жидкой фазы (табл. 1.9.). Однако диффузионная подвижность компонентов углеродистых и низколегированных сталей в расплаве настолько высока, что позволяет практически полностью выравнивать их концентрации в расплаве за достаточно короткий промежуток времени [90]. Анализ дендритной ликвации, проведенный в работе [90] с использованием расчетной сетки для жидкой фазы подтверждает правомерность данного заключения. Как видно из рис. 1.7, благодаря низкому коэффициенту диффузии Ni в аустените ( $\approx 10^{-14}$  м<sup>2</sup>/с) концентрация этого элемента на оси дендритной ветви второго порядка  $(C_S)_{Ni}$  близка к концентрации первоначально выделившейся твердой фазы  $(C_S)_{Ni} \approx k_{Ni}(C_0)_{Ni} = 3.56$  %. При этом диффузионная подвижность Ni в расплаве на несколько порядков превышает его подвижность в аустените, что приводит к быстрому выравниванию его концентрации в жидкой фазе (рис. 1.7, а). При перитектическом превращении (рис. 1.7, б) наличие двух твердых фаз с различными коэффициентами диффузии приводит к образованию неравномерного распределения концентраций с перегибом, свидетельствующем о положении границы  $\gamma/\delta$  на момент начала перитектического превращения.

В работах [81, 86] исследована кинетика перитектического превращения железо-углеродистых сплавов, продемонстрирована работоспособность и адекватность численной модели диффузионно-контролируемого перитектического превращения.

На примере бинарного перитектического сплава Fe-0.42% С рассмотрен подход, согласно которому кинетика движения границы раздела первичной и вторичной твердой фазы определяется диффузией углерода (рис. 1.8), поскольку его перераспределение между фазами диктует изменение упаковки кристаллической решетки. При этом углерод обладает наиболее высоким коэффициентом диффузии по сравнению с другими компонентами сплава, что дает основание использовать его в качестве «маркера» положения границы перитектического превращения при моделировании кристаллизации многокомпонентных сплавов на основе железа.

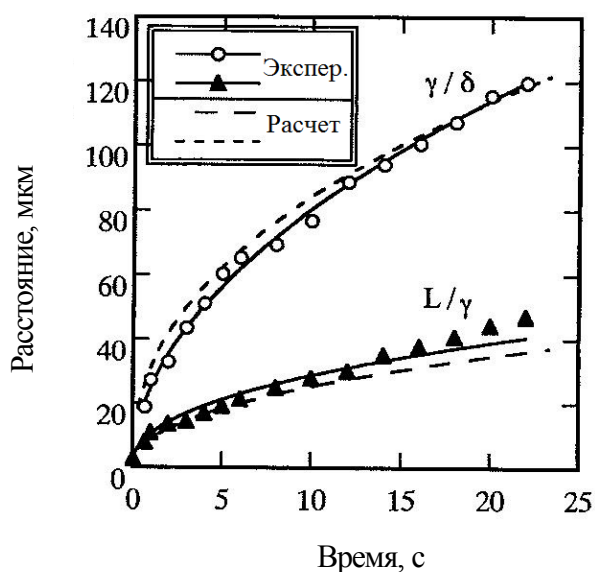


Рисунок 1.8. Сравнение расчетных и экспериментальных данных о движении границ раздела фаз  $L/\gamma$  и  $\gamma/\delta$  при перитектическом превращении в стали Fe-0.42% C [86].

### 1.3. Заключение

Приведенные в разд. 1.1 и 1.2 экспериментальные, теоретические и вычислительные работы, отражающие масштабы, направления и современное состояние исследований, посвященных формированию микроструктуры стали, позволяют сделать ряд итоговых выводов, определяющих выбор основных направлений и методологии выполнения работы:

1. Несмотря на обширный объем проводимых работ, их многоплановый характер и использование различных подходов при выборе объектов исследования и применяемых методик в целом можно заключить, что основные количественные зависимости, связывающие дендритную структуру сплавов с их составом и условиями кристаллизации, представленные многочисленными *статистическими* моделями, не поддаются

ся обобщению, поскольку нередко имеют неопределенную точность, разную математическую структуру, носят сложный, в большом числе случаев – противоречивый, характер и опираются на различные теоретические подходы, вследствие чего они нуждаются в критическом отборе, а также в модернизации и унификации формы на основе согласования с детерминированными моделями, прошедшими проверку адекватности.

2. Приведенные теоретические публикации и отражающие их математическую структуру *детерминированные* модели в совокупности дают схематичное представление о механизме отдельных проявлений, комплекс которых образует физико-химическую концепцию процесса кристаллизации расплава, фрагменты которой в силу его сложности вследствие сочетания разномасштабных явлений различной природы, согласованы друг с другом на полуколичественном уровне, хотя их отдельные фрагменты находятся в неразвитом состоянии и нуждаются в пересмотре и модернизации, чтобы концепция могла приобрести *системное единство*.

3. Актуальной задачей построения такой концепции является реализация *системного подхода* применительно ко всей совокупности сопряженных процессов и их взаимное количественное согласование как проявление физико-математической адекватности отдельных модельных концепций при их неизбежной корректировке, выявлении ошибочных гипотез и необходимости осуществления их переработки.

4. Процесс формирования структуры, сочетающий многократно повторяемые акты зарождения центров кристаллизации (на первом этапе), а также ветвления дендритных стволов и ветвей (на втором этапе) и их исчезновения в результате коалесценции, в силу своей стохастической природы для адекватного отображения в количественной форме требует использования соответствующего математического аппарата, каким является метод Монте-Карло.

## **2. Компьютерный анализ условий неравновесной кристаллизации низколегированных сталей**

### **2.1. Модель неравновесной кристаллизации многокомпонентных сплавов**

Целью компьютерного анализа кристаллизации стальных заготовок (отливок и слитков) является диагностика возникновения литейных дефектов на этапе проектирования технологии и оптимизация технологических режимов их изготовления. Эффективность выполнения этих задач обусловлена созданием таких программных комплексов, которые дают адекватное отображение системного характера процессов, протекающих при фазовых превращениях (теплообмен, выделение твердой фазы, формирование структуры, диффузионное перераспределение компонентов и т.д.), что требует создания многоуровневых моделей (в макро-, мезо- и микромасштабе). Затруднения в их реализации связаны в первую очередь с ограниченной изученностью указанных явлений, а также необходимостью рассмотрения наиболее сложных аспектов взаимосвязи процессов различной природы и информационного обеспечения их описания соответствующими параметрами.

В отличие от большинства известных компьютерных комплексов (Magma, ProCast, LVMFlow, SolidCast и др., основным объектом которых являются модели макроуровня – гидродинамика, теплообмен, деформационные явления) в работе основное внимание уделено моделированию сложных взаимосвязанных процессов формирования дендритной структуры и дендритной ликвации, описание которых базируется на анализе неравновесной кристаллизации, связанной с ускоренным затвердеванием и подавлением диффузии ряда компонентов стали в твердой фазе.

Характер протекающих процессов существенно различается как по своей природе, так и по пространственному масштабу, что обуславливает необходи-



мость создания многоуровневой комплексной модели, включающей развитую систему уравнений.

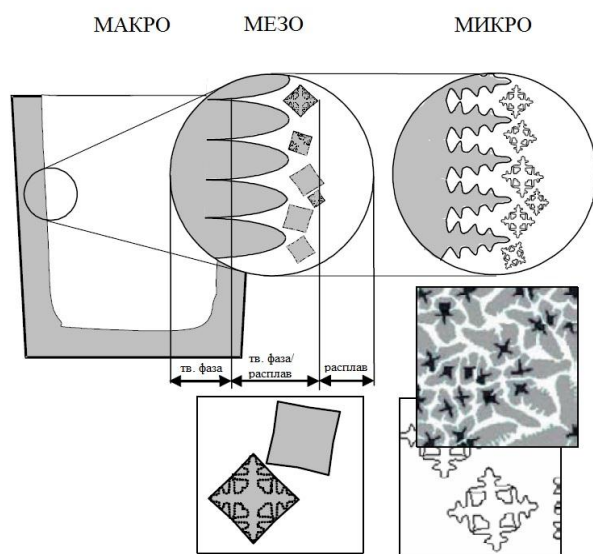


Рисунок 2.1. Схема трехуровневой (макро-, мезо-, микро-) кристаллизационной модели [2].

В зависимости от типа решаемых задач процесс неравновесной кристаллизации литой заготовки реализуется на макро-, мезо- и микроуровне (рис. 2.1). На макроуровне использовали трехмерную модель с распределенными параметрами, формируемую для решения уравнений в частных производных (разд. 5) после разделения объема литой заготовки на мезо-элементы (элементарные ячейки) для анализа пространственной кинетики формирования фасонной отливки (слитка) путем решения конечно-разностной задачи.

Результаты мезо- и микро-масштабного анализа являются базой для выявления соответствующих закономерностей кристаллизации сталей при интеграции в макромасштабную модель затвердевания отливок (слитков).

С точки зрения анализа формирования микроструктуры возникает необходимость исследования неоднородности ее распределения как в масштабе одного дендрита, так и в масштабе всей литой заготовки. В качестве основного механизма эволюции микроструктуры анализируется коалесценция, в результате которой формируется многообразие форм и размеров морфологических элементов дендритного кристаллита благодаря различию кинетики и механизмов коалесценции в различных локальных объемах металла. Результатом моделирования микроструктурной неоднородности является построение гистограммы распределения междудендритных промежутков дендритных ветвей второго порядка  $\lambda_2$ , обобщенно выражаемой через их среднее значение  $(\lambda_2)_{cp}$  и среднеквадратичное отклонение  $\sigma_\lambda ((\lambda_2)_{cp} \pm \sigma_\lambda)$ . Указанные параметры определяются на основе анализа расчетного статистического набора частных значений  $(\lambda_2)_i$ . В связи с этим, расчет неоднородности дендритной струк-

туры сводится к моделированию формирования ансамбля локальных промежутков  $\lambda_2$  с помощью структурного программного модуля «С» (рис. 2.2), который воспроизводит эволюцию реальной микроструктуры в мезо-объеме металла (см. разд. 3.3).

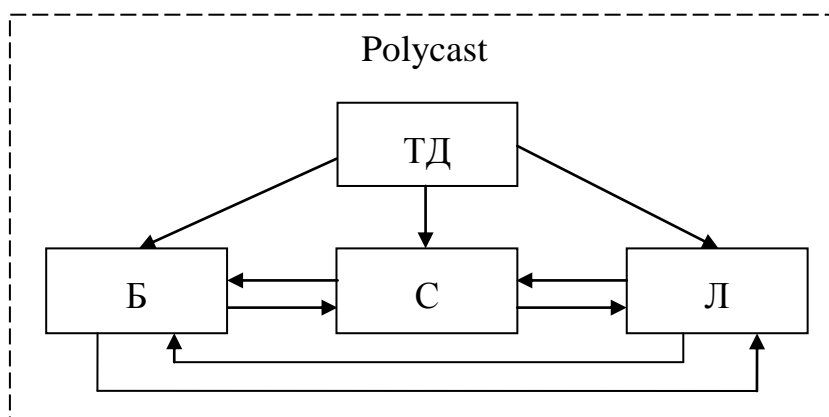


Рисунок 2.2. Модульная блок-схема системного анализа формирования структурной микронеоднородности и дендритной ликвации

Использование структурного «С», либо ликвационного «Л» программного модуля, который моделирует диффузионное перераспределение компонентов сплава в микро-масштабе междоузельного промежутка ( $\lambda_2$ ), предполагает численное моделирование мезо-масштабных процессов неравновесной кристаллизации – кинетики изменения температуры металла  $t$  ( $\tau$ ), термического переохлаждения расплава  $\Delta T$  ( $\tau$ ) и скорости выделения твердой фазы  $m(\tau)$  с помощью базового модуля «Б». При этом расчет необходимых теплофизических и физико-химических параметров сплава выполняется термодинамическим модулем «ТД», входящим в программный пакет «Polytherm». Анализ условий затвердевания мезо-элементов в объеме макро-объекта осуществляется интегрированным программным комплексом «Polycast».

В рамках комплексной модели кристаллизации (рис. 2.2) рассчитываются тепловые условия (скорость охлаждения, величина термического переохлаждения, скорость выделения твердой фазы и др.), эволюция морфологии дендритов (изменение радиуса дендритных ветвей второго порядка  $0 < R_S \leq R_K$  ( $R_K$  – конечный радиус), ширины вторичных междоузельных промежутков  $\lambda_2 = f(\tau, m, C_i, k_i, \dots)$  и др.), а также формирование химической неоднородности по сечению ветви с учетом неравномерного распределения компонентов.

### 2.1.1.Общая структура модели

Для проведения детального анализа сопряженных процессов формирования структурной и химической микронеоднородности была разработана мезо-масштабная комплексная модель неравновесной кристаллизации, включающая двухуровневую структуру моделей на мезо- и микро-уровне, описывающих ансамбль кристаллитов как систему с сосредоточенными параметрами с использованием обыкновенных дифференциальных уравнений.

На *мезо*-уровне рассматривали процесс теплообмена элементарной ячейки с окружающим пространством, решая уравнение теплового баланса, а также считывали скорость выделения твердой фазы  $dm/dt$  (по уравнению Колмогорова) в зависимости от величины термического переохлаждения  $\Delta T$  и, соответственно, локальную продолжительность затвердевания  $\tau_{LS}$ , с учетом *неравновесного характера тепловых процессов* при кристаллизации металла. Для расчета переохлаждения, а также структурной микронеоднородности металла анализировали кристаллизационные процессы на микроуровне (разд. 3).

В *микро*-масштабе рассчитывали перераспределение компонентов сплава между фазами, изменение концентрации жидкой фазы  $C_L$  (по уравнению Онака), а также формирование химической микронеоднородности кристаллитов с учетом *неравновесного характера диффузионных процессов* (разд. 4).

Благодаря вышеуказанному пространственному дроблению модели неравновесной кристаллизации и многофакторному взаимодействию отдельных ее частей между собой, совокупность указанных дифференциальных уравнений использовали как комплексную математическую структуру, ориентированную на *системный анализ* сопряженных процессов при кристаллизации.

#### **Этапы кристаллизации сталей с перитектическим превращением**

Понижение температуры расплава сталей, испытывающих перитектическое превращение, ниже температуры их ликвидуса сопровождается выделением кристаллитов  $\delta$ -фазы, что является первым этапом кристаллизации. При этом проис-

ходит обогащение расплава ликвидирующими компонентами, что приводит к снижению температуры ликвидуса и изменению состава выделяющейся твердой фазы. После понижения температуры ликвидуса до температуры начала перитектического превращения происходит кристаллизация  $\gamma$ -фазы на поверхности  $\delta$ -кристаллитов по реакции  $L(\text{жидкая фаза}) + \delta \rightarrow \gamma$ , благодаря чему наследуется морфология первичной структуры (перитектическая реакция). После завершения перитектической реакции, изолирующей выделения  $\delta$ -фазы от расплава, начинается этап перитектического превращения, когда происходит уменьшение объемной доли первичной  $\delta$ -фазы за счет диффузионного переноса компонентов сплава от фронта кристаллизации расплава ( $L/\gamma$ ) к межфазной границе ( $\gamma/\delta$ ). Для ряда бинарных железоуглеродистых сплавов этот период характеризуется условной перитектической остановкой на температурной кривой вследствие изменившихся термодинамических условий. Завершение перитектического превращения при наличии жидкой фазы обуславливается полным исчезновением  $\delta$ -фазы и формированием  $\gamma$ -фазы из остаточного расплава. В случае, если перитектическое превращение завершается исчерпанием жидкой фазы, начинается этап твердофазного  $\delta \rightarrow \gamma$  превращения.

Таким образом, алгоритм кристаллизации многокомпонентных перитектических сплавов должен включать в себя модель кристаллизации  $\delta$ - и/или  $\gamma$ -фазы из расплава, а также модель перитектического превращения. В случае, если перитектическое превращение заканчивается ранее полного затвердевания мезоэлемента, модель выделения  $\gamma$ -фазы совпадает с моделью кристаллизации  $\delta$ -фазы с поправкой на теплофизические и физико-химические параметры сплава с изменившимся фазовым составом.

Кристаллизация стали в реальных условиях происходит с неравновесностью, характеризуемой величиной переохлаждения металла и микроликвационной неоднородностью, зависящими от состава сплава, условий охлаждения, конфигурации отливки и других факторов.

Затвердевание заготовок в песчаных формах сопровождается относительно низкими скоростями охлаждения и малым отклонением от равновесия, что связа-

но с низкой теплопроводностью формовочных материалов (ПГС, ЖС, ХТС). При затвердевании стали в металлических формах высокая интенсивность теплоотвода вызывает существенное отклонение процесса кристаллизации от равновесных условий, фиксируя метастабильное состояние структуры. Моделирование неравновесной кристаллизации на основе разработанной системы моделей имеет целью анализ кинетики процессов, протекающих при затвердевании заготовок в реальных условиях.

Таким образом, моделирование неравновесной кристаллизации на основе численных моделей позволяет анализировать кинетику процессов, протекающих при затвердевании литых заготовок в реальных условиях.

Представленная в данной главе модель неравновесной кристаллизации низколегированных сталей, испытывающих перитектическое превращение, является базовой для моделирования неоднородности дендритной структуры (разд. 3) и микроликвации в масштабе дендритной ячейки (разд. 4).

Базовая модель ориентирована на анализ и расчет универсальных параметров, описывающих кристаллизацию мезо-ячейки:

- изменения температуры ликвидуса остаточного расплава и текущей температуры металла;
- темпа выделения твёрдой фазы;
- неравновесную концентрацию легирующих элементов в жидкой фазе и выделяющейся твёрдой фазе,

в зависимости от интенсивности теплоотвода, состава сплава, удельной плотности центров кристаллизации и других факторов.

Основные допущения, принятые при формировании математической модели неравновесной кристаллизации, включают:

*в мезо-масштабе*

- равномерное распределение температуры, так как в условном диапазоне анализируемых скоростей охлаждения  $C_R=0.01-10$  К/с, характерном для реальных условий затвердевания стальных заготовок, для кубического мезо-элемента  $1\text{см}^3$  критерий  $Bi \ll 1$  (см. разд. 2.2);

- отсутствие макро-ликвации и конвекции в расплаве;
- равномерное распределение компонентов сплава в жидкой фазе, в связи с высокой подвижностью компонентов сплава в жидкой фазе (диффузионный  $Bi \ll 1$ );
- фиксированная плотность центров кристаллизации;
- равномерное распределение центров кристаллизации в объеме мезо-ячейки;

#### *в микро-масштабе*

- дендритные ветви имеют цилиндрическую морфологию, что близко к реально наблюдаемой морфологии ветвей и, вместе с тем, позволяет применить для анализа эволюции микроструктуры существующие модели коалесценции;
- ветви дендрита распределены в его объеме равномерно и произвольно ориентированы, что позволяет исключить из рассмотрения сложные и малоизученные вопросы конструкции дендритных кристаллитов;
- на межфазной границе твердая фаза/расплав поддерживается локальное равновесие.

### **2.1.2. Модель неравновесной кристаллизации первичной $\delta$ -фазы**

Выделение первичной  $\delta$ -фазы инициируется при снижении температуры металла  $t$  ниже температуры ликвидуса  $t_L$  и сопровождается образованием и ростом зародышей твердой фазы. Движущей силой, определяющей кинетику их развития, является термическое переохлаждение:

$$\Delta T(\tau) = t_L(C_L) - t(\tau).$$

Величина  $\Delta T$  не только определяет скорость роста осей дендрита и радиального утолщения его боковых ветвей, но также является температурным критерием (критериальная структура разработанной модели кристаллизации представлена в разд. 5) степени неравновесности кристаллизации  $\Omega_{\Delta T} = \Delta T \cdot c / L$ .

Увеличение переохлаждения интенсифицирует рост осей дендритов, описанный в разд. 3. Столкновение и срастание вершин дендритов приводит к обра-

зованию непрерывного скелета твердой фазы, изменяет соотношение между междендритным и внутридендритным объемом жидкой фазы.

Моделирование кристаллизации переохлажденного расплава как системы с сосредоточенными параметрами в мезо-объеме металла связано с решением комплекса уравнений, описывающих тепловые, кристаллизационные и диффузионные процессы.

### Тепловая задача

Кинетику изменения текущей температуры металла и, соответственно, термического переохлаждения рассчитывали по уравнению теплового баланса, предложенному Н.Г. Гиршовичем [48] и преобразованному для этапа первичной кристаллизации  $\delta$ -фазы:

$$\frac{d\vartheta}{d\tau} = \frac{-q + H^{\delta} \frac{dm^{\delta}}{d\tau}}{R_0[c^L m^L + c^{\delta} m^{\delta}]}; m^L + m^{\delta} = 1, \quad (2.1)$$

где  $\vartheta$  – относительная температура ( $\vartheta = t - t_c$ , где  $t$  – текущая температура металла;  $t_c$  – температура окружающей среды);  $q$  – тепловой поток из рассматриваемого мезоэлемента в окружающую среду;  $H^j$ ,  $c^j$ ,  $m^j$  – объемная теплота кристаллизации, объемная теплоемкость и доля  $j$ -ой фазы соответственно;  $R_0$  – характерный размер мезо-ячейки, равный отношению ее объема ( $V_{я}$ ) к теплоотводящей поверхности.

В этом случае уравнение соотносит теплоотвод в соседние мезо-элементы  $q d\tau$  и тепловыделение за счет образования твердой фазы внутри анализируемого элемента  $H^{\delta} dm^{\delta}$ . В результате происходит либо охлаждение металла, либо повышение температуры (рекалесценция), если выделение теплоты кристаллизации полностью компенсировало теплоотвод в окружающее пространство. Следует отметить, что уравнение (2.1) указывает на существование отрицательной обратной связи, регулирующей соотношение теплоотвода и скорости кристаллизации  $dm/d\tau$  через изменение переохлаждения  $\Delta T$ .

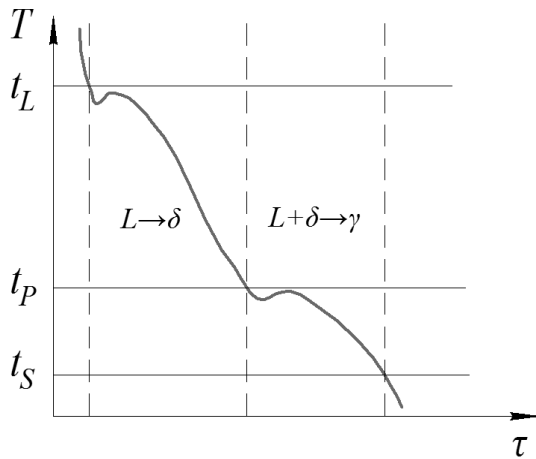


Рисунок 2.3. Характерный график изменения температуры перитектической стали в интервале кристаллизации  $\Delta t_{LS} = t_L - t_S$  ( $t_P$  - температура перитектического превращения;  $t_S$  - температура солидуса)

температуре  $t < t_P$  (вторая рекалесценция), связано с образованием и выделением новой фазы ( $\gamma$ ). Этап выделения  $\delta$ -фазы завершается, когда  $\gamma$ -фаза отделяет ранее сформировавшиеся кристаллиты первичной фазы от расплава.

### Кристаллизационная задача

Кинетика образования твердой фазы описывается следующими базовыми уравнениями [47, 51]:

$$\frac{\partial V_i}{\partial \tau} = \left( 1 - \frac{\sum V_i}{V_{\text{я}}} \right) \frac{\partial V_i^e}{\partial \tau}; \quad i = 1..n, \quad (2.2)$$

$$V_i^e = \xi_i V_{\text{я}} \left[ N_B^i \left( \int_0^{\tau} v_{kp}^i(\tau) d\tau \right)^{\eta} + \int_{\tau_i}^{\tau} N_C^i(\tau_i) \left( \int_0^{\tau} v_{kp}^i(\tau) d\tau \right)^{\eta} d\tau_i \right], \quad i = 1..\psi, \quad (2.3)$$

$$m = \frac{\sum V_i}{V_0} = 1 - \exp \left( - \frac{\sum V_i^e}{V_0} \right). \quad (2.4)$$

где  $V_i$ ,  $V_i^e$  – действительный и «продолженный» объем  $i$ -ой фазы;  $V_{\text{я}}$  – объем мезо-элемента;  $\psi$  – количество совместно выделяющихся фаз;  $N_B$ ,  $N_C$  – количество вынужденно и самопроизвольно образовавшихся зародышей твердой фазы соответ-



ственно;  $\tau_i$  – время зарождения кристаллитов  $i$ -ой фазы;  $\xi$  – коэффициент формы кристаллита (для шара  $\xi=4\pi/3$ ),  $\eta$  – размерность объекта кристаллизации ( $\eta=3$ ).

Данные уравнения описывают ход первичной кристаллизации твердой фазы из множества центров с определенной скоростью движения  $v_{кр}$  межфазной границы  $\delta$ -фаза/расплав. Центрами кристаллизации являются зародыши твердой  $i$ -фазы, появившиеся самопроизвольно и вынужденно. При этом скорость их образования и количество зависят от тепловых условий кристаллизации, теплофизических и физико-химических параметров сплава, а также от природы активных включений.

Различие между действительным и продолженным объемом обуславливается тем, что действительный объем характеризует осредненное количество твердой фазы в объеме мезоэлемента с учетом взаимного смыкания множества кристаллитов твердой фазы, в то время как продолженный объем характеризует свободный рост в расплаве ансамбля кристаллитов без учета взаимного смыкания и ограничений.

Для промышленных сплавов с наличием большого количества разнородных неметаллических включений баланс в уравнении (2.2) смещен в сторону вынужденного зарождения ( $N_B \gg \int N_c d\tau$ ), существенно уменьшающего интервал метастабильности расплава [51]. По этой причине при моделировании рассматривали кристаллизацию на вынужденных зародышах ( $N_c = 0$ ), когда в результате возникновения переохлаждения расплава вызывает формирование и рост зародышей новой фазы со скоростью  $v_{кр}$ .

Как видно из уравнений (2.2-2.4), на кинетику изменения количества твердой фазы влияют переохлаждение расплава, скорость движения фронта кристаллизации и удельная плотность центров кристаллизации.

Для анализа дендритной кристаллизации, характерной для низколегированных сталей, в литературе используются различные геометрические модели кристаллитов (сферическая, цилиндрическая, плоская) [30-31 и др.].

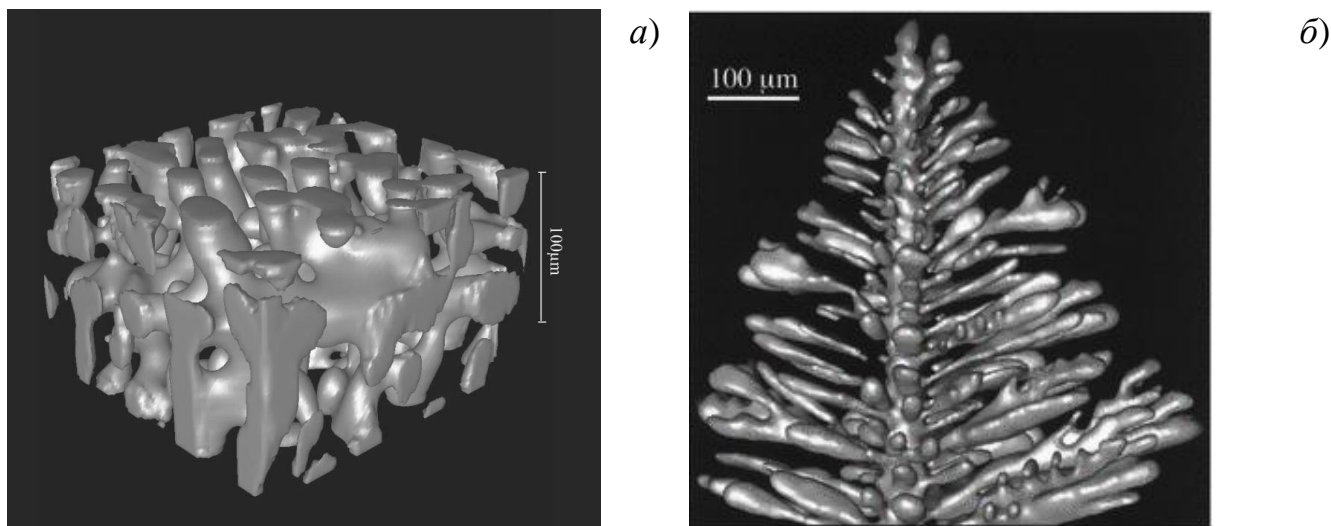


Рисунок 2.4. Экспериментальные исследования морфологии дендритных кристаллитов [44] (а) и [45] (б).

Выбор соответствующей модели, как правило, производится исследователями, исходя из специфики и сложности решаемых задач. Анализ результатов трехмерного исследования морфологии дендритов с помощью методов сканирующей микроскопии [44-45] дает основания предполагать, что преобладающей формой ветвей дендрита является цилиндрическая (рис. 2.4, а-б).

Дифференцирование уравнения (2.4) для системы цилиндрических ветвей, равномерно распределенных в пространстве с удельной объемной плотностью  $N_s$ , с учетом изменения скорости их радиального роста и длины, а также возможности взаимного смыкания, дает уравнение следующего вида:

$$df_s = (1 - f_s) N_s \pi R (2LdR + RdL) \text{ при } dR = K_v \Delta T^2 d\tau, \quad (2.5)$$

где  $f_s$  – доля твердой фазы во внутридендритном пространстве (рис. 2.5);  $R$ ,  $L$  – радиус и длина свободно растущих ветвей второго порядка соответственно;  $K_v$  – коэффициент скорости роста.

Вышеуказанная зависимость (2.5) описывает изменение количества твердой фазы, сосредоточенной в ансамбле разно-размерных и различно-ориентированных свободно растущих цилиндрических первичных стволов и вторичных ветвей.

Как видно из формулы, кинетика кристаллизационного процесса в значительной степени определяется переохлаждением  $\Delta T$ , влияющим также на неоднородность значений геометрических параметров дендритных ветвей ( $\lambda_2$ ,  $L$  и др.) (подробнее

рассмотрено в разд. 3.1). В связи с этим среднестатистическое пространственное расположение вторичных ветвей во внутридендритной области приближенно было принято равномерным с переменной во времени объемной плотностью ветвей ( $N_S$ ) и их длиной ( $L$ ) (см. разд. 3.4), изменяющейся в зависимости от величины среднего междусоснового промежутка  $(\lambda_2)_{cp}$ .

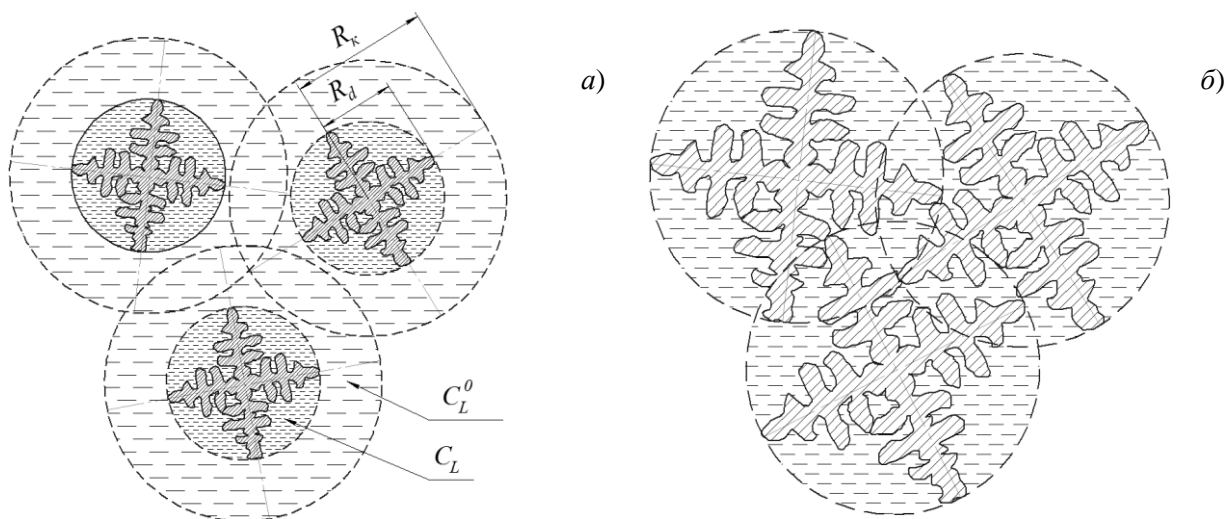


Рисунок 2.5. Морфологическая эволюция равноосного дендрита

а) стадия I:  $R_d < R_k$ , где  $R_d$  – радиус дендритной сферы, описанной по вершинам осей дендритов;  $R_k$  – конечный радиус дендритной сферы;  $C_L^0$  и  $C_L$  – концентрация компонентов сплава в междендритной и внутридендритной жидкой фазе соответственно; б) стадия II:  $R_d = R_k$ .

Увеличение количества твердой фазы в объеме мезо-ячейки определяется не только радиальным утолщением дендритных ветвей, но также появлением новых ветвей за счет продольного роста первичных осей дендритов. Геометрические параметры  $(\lambda_2, L)$  вновь образующихся ветвей зависят от физико-химических параметров сплава и скорости роста вершин. Образование новых ветвей происходит до момента смыкания вершин соседних дендритов ( $f_s \approx 0.05-0.15$ ), после чего изменение длины вторичных ветвей связано с эволюцией микроструктуры под действием коалесценции.

В общем виде суммарная доля твердой фазы в мезо-ячейке определяется соотношением  $m = f_s f_D$ , где  $f_D$  – объемная доля дендритных сфер, описанных по вершинам дендритов (рис. 2.5).

В качестве коэффициента скорости роста  $K_V$  использовали уравнение, предложенное в [2], в котором учитывается многокомпонентность сплава:

$$K_V = \left[ 2\pi^2 \Gamma \left( \sum \frac{p_i (k_i - 1) (C_L)_i}{D_i^L} + \frac{H^j}{c^j a_m} \right) \right]^{-1}, \quad (2.6)$$

где  $\Gamma$  – Коэффициент Гиббса-Томсона;  $a_m$  – температуропроводность расплава;  $H^j$ ,  $c^j$  – теплота кристаллизации и теплоемкость  $j$ -ой фазы соответственно.

Решение кристаллизационной задачи выполняет важную системообразующую роль, устанавливая связь между тепловыми процессами и диффузионным перераспределением компонентов. С одной стороны, термическое переохлаждение, определяемое условиями теплоотвода, диктует скорость выделения твердой фазы (уравнения (2.5) и (3.1)). При этом выделяется теплота кристаллизации, количество которой зависит от доли образовавшейся твердой фазы (уравнение (2.1)) и таким образом учитывается системная взаимосвязь тепловых и кристаллизационных процессов. С другой стороны, скорость выделения твердой фазы и ее состав определяют интенсивность накопления избыточных компонентов сплава в жидкой фазе и, соответственно, изменение ее состава и температуры ликвидуса. Тем самым реализуется системное взаимодействие различных факторов тепловой, кристаллизационной и диффузионной природы.

### Диффузионная задача

В рамках диффузионной модели, включенной в базовый программный модуль «Б», анализ процесса перераспределения компонентов сплава между фазами в микро-масштабе заключается в определении концентрации компонентов в расплаве (рис. 2.6).

Как показано на рисунке, при кристаллизации внутридендритной жидкой фазы в междудендритных промежутках дендритов выделение твердой фазы состава  $(C_s)_i = k_i (C_L)_i$  при  $k_i < 1$  происходит с обогащением жидкой фазы ликвидирующим  $i$ -ым компонентом.

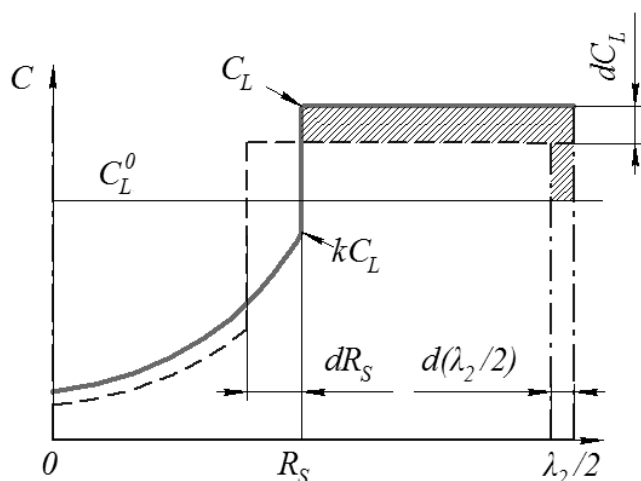


Рисунок 2.6. Схема перераспределения компонентов сплава при дендритной кристаллизации первичной  $\delta$ -фазы (штриховка – избыточное количество компонента, выделившееся в расплав в результате перемещения фронта кристаллизации  $R_s$  на величину  $dR_s$ )

Благодаря высокой диффузионной подвижности компонентов низколегированных сталей в жидкой фазе, заключенной между соседними ветвями дендрита, выравнивающая диффузия в расплаве протекает на несколько порядков быстрее, чем в твердой фазе. С учетом данного обстоятельства подавляющее большинство исследователей [74, 88 и др.] при моделировании дендритной ликвации использует допущение о равномерном распределении компонентов в жидкой фазе согласно упрощенной модели расчета средней концентрации компонентов [74]:

$$(dC_L)_i = \frac{(C_L)_i(1-k_i)}{1-(1-\omega_i k_i)f_s} df_s; \omega_i = \frac{2\alpha_i}{1+2\alpha_i}; \alpha_i = \frac{8D_i^j \tau}{(\lambda_2)_{cp}^2}, \quad (2.7)$$

$$\text{при } 0 \leq \tau \leq \tau_{LS}, (\lambda_2)_0 \leq \lambda_2(\tau) \leq \lambda_2(\tau_{LS})$$

где  $\omega$  – коэффициент обратной диффузии;  $\tau$  – текущее значение локальной продолжительности кристаллизации;  $\tau_{LS}$  – полная локальная продолжительность кристаллизации.

Изменение величины междусоснового промежутка  $\lambda_2$  за счет коалесценции сопровождается, как показано на рис. 2.6, перераспределением избыточной концентрации компонентов в добавленную область микро-ячейки. В рамках базового модуля «Б» (мезо-уровень), коалесценцию ветвей, определяющую длину пути обратной диффузии, при численном решении уравнения Онака (2.7) учитывали при расчете параметра  $\alpha$ , определяющего коэффициент обратной диффузии  $\omega_i$ , путем постоянного обновления текущего значения среднего междусоснового промежутка  $(\lambda_2)_{cp}$ , рассчитываемого с помощью структурного модуля «С».

Анализ уравнения (2.7) показывает, что в зависимости от величины  $\gamma_i$  интенсивность накопления примеси существенно различается. При малых значениях  $D_i^s$  химический состав жидкой фазы  $(C_L)_i$  изменяется в условиях подавленной обратной диффузии компонентов в твердую фазу (модель Шейля); при высоком  $D_i^s$  наблюдается практически равновесное распределение компонента с величиной  $(C_L)_i$  при кристаллизации последних капель расплава, близкой к  $(C_L^0)_i/k_i$ . Следовательно, интенсивность накопления компонентов сплава в жидкой фазе преимущественно определяется двумя параметрами: коэффициентом распределения  $k_i$  – он характеризует величину перепада концентраций в твердой и жидкой фазе на межфазной границе;  $\omega_i$  – характеризует степень диффузионной неравновесности распределения компонентов по сечению дендритной ветви.

Таким образом, модель кристаллизации мезо-объема первичной  $\delta$ -фазы включает в себя этап охлаждения металла в интервале от температуры начала кристаллизации до температуры перитектического превращения. Комплексный подход к решению представленных задач позволяет оценить степень неравновесности процесса в зависимости от величины теплоотвода в окружающие мезо-элементы, объемной плотности центров кристаллизации, физико-химических параметров металла и др.

### **2.1.3. Этап перитектического превращения**

Механизм перитектического превращения в сплавах на основе железа, несмотря на значительное число выполненных ранее и активно проводимых исследований, остается дискуссионным, и для его уточнения в последние годы использованы различные экспериментальные методы [84, 93 и др] и средства компьютерного анализа [85, 93 и др.].

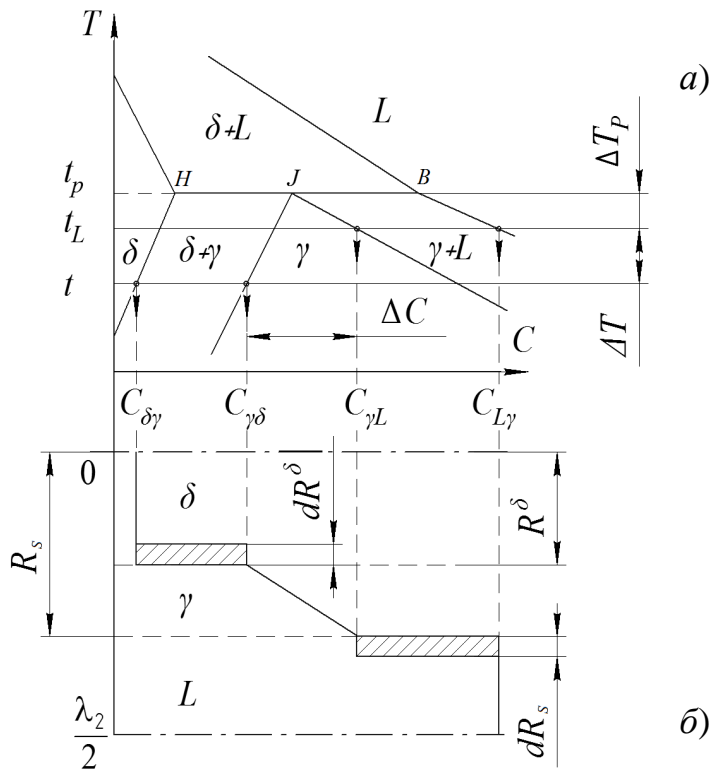


Рисунок 2.7. Схема перитектического превращения в условиях термического переохлаждения сплава (а) при диффузионном перераспределении (б) компонентов в системе

$$\langle \delta\text{-фаза} \rangle / \langle \gamma\text{-фаза} \rangle / \langle \text{расплав } L \rangle$$

### Тепловая задача

При перитектическом превращении уравнение теплового баланса включает в себя скрытую объёмную теплоту кристаллизации вторичной фазы  $H^\gamma$  и теплоту фазового  $\delta \rightarrow \gamma$  перехода  $H^P$ :

$$d\vartheta = \frac{-qd\tau + H^\gamma dm^\gamma - H^P dm^\delta}{R_0 [c^L m^L + c^\delta m^\delta + c^\gamma m^\gamma]},$$

где  $dm^\gamma$  – количество  $\gamma$ -фазы, выделившейся из расплава ( $m^\gamma$  – общее количество  $\gamma$ -фазы);  $dm^\delta$  – доля  $\delta$ -фазы, превратившейся в  $\gamma$ -фазу (определяется в ходе решения диффузионной задачи).

Величина термического переохлаждения на этом этапе  $\Delta T = t_L(C_{L\gamma}) - t(\tau)$  диктует скорость выделения твердой фазы на границе  $\gamma/L$ .

Влияние добавки легирующих элементов отражается на тепловых условиях кристаллизации сложным образом: напрямую – через изменение теплофизических

а) Согласно основной схеме реализации перитектического превращения в сплавах Fe-C-X<sub>i</sub> [80, 83 и др.] вскоре после начала перитектической реакции поверхностная пленка  $\gamma$ -фазы, весьма быстро распространяющаяся на выделениях первичной  $\delta$ -фазы, отделяет их от расплава, после чего формирование  $\gamma$ -фазы сосредотачивается на подвижных границах  $L/\gamma$  (кристаллизация из расплава  $L \rightarrow \gamma$ ) и  $\gamma/\delta$  (превращение  $\delta \rightarrow \gamma$  за счет диффузионно переносимого углерода) (рис. 2.7).

параметров ( $H^i$ ,  $c^i$ ), косвенно – через изменение физико-химических параметров (диаграммы состояния и др.). В частности, в работах [66, 94] продемонстрировано влияние добавки третьего компонента на изменение положения критических точек перитектического участка диаграммы состояния. Результаты работ свидетельствуют о существенном влиянии добавки третьего компонента на все критические точки диаграммы состояния. Учет зависимости теплофизических и физико-химических параметров сплава от его химического состава и температуры производился в работе путем термодинамического моделирования. Результаты моделирования представлены в разд. 2.3.

### Кристаллизационная задача

Согласно прямым наблюдениям [84 и др.], формирующаяся при перитектическом превращении  $\gamma$ -фаза наследует морфологию первичной  $\delta$ -фазы. Исходя из этого, расчет скорости выделения  $\gamma$ -фазы из расплава производили в соответствии с методологией кристаллизации первичной  $\delta$ -фазы, изложенной ранее (см. уравнение (2.5) в разд. 2.1.1). Однако в отличие от более раннего этапа, при анализе перитектического превращения необходимо знать *текущее* положение фронта кристаллизации  $R_S$  для определения интенсивности диффузионного потока компонентов сплава в твердую фазу в направлении градиента концентраций (рис. 2.7). В соответствии с количественным балансом твердой фазы, скорость движения фронта кристаллизации  $v_{kp}=dR_S/d\tau$  определяли по следующему соотношению, учитывающему изменение количества твердой фазы в цилиндрической системе  $f_S=[2R_S/(\lambda_2)_{cp}]^2$  при переменной величине междоусных промежутков  $(\lambda_2)_{cp}$ :

$$\frac{dR_S}{d\tau} = \frac{1}{2} \frac{d(\lambda_2)_{cp}}{d\tau} \sqrt{f_S}.$$

### Диффузионная задача

В масштабе междоусного микроэлемента размером  $\lambda_2/2$ , имеющего вследствие дендритной морфологии цилиндрическую конфигурацию, рассчитывали измене-



ние радиусов областей  $\delta$ -фазы ( $R^\delta$ ) и  $\gamma$ -фазы ( $R_s$ ) в процессе перитектического превращения (см. рис. 2.7).

Особенностью перитектического превращения является его диффузионно-контролируемый характер, в связи с чем кинетика перитектического превращения в низколегированных и углеродистых сталях определяется перераспределением углерода – элемента с наиболее высоким коэффициентом диффузии в  $\gamma$ -фазе, распределение которого в решетке железа обуславливает характер формирующейся кристаллической решетки  $\delta$ - или  $\gamma$ -фазы. Об этом свидетельствует ряд публикаций [86, 88 и др.], представляющих различные модели для расчета хода перитектического превращения.

В случае многокомпонентных систем [88, 95] исследователи используют аппарат термодинамического моделирования для определения относительного количества каждой фазы и равновесных концентраций компонентов сплава на межфазных границах. Однако данный подход игнорирует *неравновесный характер* температурных и концентрационных условий при моделировании кристаллизации и перитектического превращения.

В работе [85] реализована схема аддитивного влияния нескольких компонентов сплава на кинетику *диффузионно-контролируемого* превращения в низколегированных сталях, учитывающая неравновесный характер процесса. При этом выявлено, что влияние углерода в предложенной модели значительно превосходит влияние других компонентов сплава, что также согласуется с результатами исследований для углеродистых сталей [84 и др.]. Поэтому в работе использовали схему перитектического превращения, контролируемого диффузией углерода.

Согласно данной схеме (см. рис. 2.7), перемещение фронта кристаллизации радиусом  $R_s$  приводит к выделению избыточной доли углерода  $(Q_R)_C$ ,

$$(dQ_R)_C = 2\pi R_s [(C_{L\gamma})_C - (C_{\gamma L})_C] dR_s$$

диффундирующего через оболочку  $\gamma$ -фазы  $(Q_D)_C$  под действием градиента концентраций в ней:

$$(dQ_D)_C = 2\pi R_s D_C \frac{(C_{\gamma L})_C - (C_{\gamma\delta})_C}{R_s - R^\delta} d\tau.$$

Приток углерода к межфазной границе  $\gamma/\delta$  вызывает соответствующее изменение ее положения. Термическое переохлаждение  $\Delta T$  определяет величину неравновесных концентраций  $(C_{\delta\gamma})_C$  и  $(C_{\gamma\delta})_C$  на межфазной границе  $(\gamma/\delta)$  (рис. 2.5), от перепада которых зависит интенсивность диффузионного потока и, соответственно, кинетика перитектического превращения. В то же время, реализуемое в условиях локального равновесия движение фронта кристаллизации происходит с выделением твердой фазы состава  $(C_{\gamma L})_i = k_i(C_L)_i$  при условии  $(C_L)_i = (C_{L\gamma})_i$ . Таким образом, перепад концентраций углерода по толщине слоя  $\gamma$ -фазы, с одной стороны, определяется локально-равновесными условиями и характеризуется величиной переохлаждения  $\Delta T_P$  относительно перитектической температуры; с другой стороны – на межфазной  $\gamma/\delta$ -границе – определяется неравновесными условиями и зависит от термического переохлаждения  $\Delta T$ . Данный вывод является важным, так как используемые в литературе модели перитектического превращения [84 и др.] не отражают указанные различия в характере концентрационных условий на межфазных границах. Следствием этих упущений является возможная недооценка (если расчет ведется только по  $\Delta T_P$ ), либо переоценка (если расчет ведется только по  $\Delta T$ ) интенсивности диффузионных потоков в твердой фазе, что естественным образом сказывается также и на развитии дендритной ликвации.

Высокая диффузионная подвижность углерода  $D_C^\delta$  и  $D_C^\gamma$  – компонента внедрения – обеспечивает близкий к равновесному ход его перераспределения внутри фаз. В то же время компоненты замещения в стали, отличающиеся значительно более низкой величиной коэффициентов диффузии в твердой фазе, приобретают весьма неравномерное распределение, характер которого непосредственно связан с кинетикой и полнотой превращения [95].

При условии, что имеет место термическое переохлаждение  $\Delta T$  и, соответственно, перепад концентраций  $\Delta C = C_{\gamma L} - C_{\gamma\delta}$ , перемещение границы  $\gamma/\delta$  для углерода – элемента, лимитирующего твердофазное слагаемое перитектического превращения, – определяется соотношением:

$$dR^\delta = \frac{(dQ_D)_C}{(C_{\gamma\delta})_C (1 - k_C^{\delta\gamma}) 2\pi R^\delta}, \text{ при } (dQ_R)_C \leq (dQ_D)_C$$

В случае если  $(dQ_R)_i \geq (dQ_D)_i$ , интенсивность перитектического превращения лимитируется диффузионным потоком  $(dQ_D)_i$  и сопровождается меньшей скоростью движения границы  $\gamma/\delta$ :

$$dR^\delta = \left[ \frac{(C_{L\gamma})_i - (C_{\gamma L})_i}{(C_{\gamma\delta})_i (1 - k_i^{\delta\gamma})} \right] \frac{R_S dR_S}{R^\delta}.$$

Если в сплаве помимо углерода имеются дополнительные компоненты, то их избыточная часть  $(Q_R - Q_D)$ , накапливаясь в жидкой фазе, приводит к изменению ее состава:

$$(dC_L)_i = \frac{(dQ_R)_i - (dQ_D)_i}{\pi \left( \frac{\lambda_2^2}{4} - R_S^2 \right)}$$

и, соответственно, температуры ликвидуса:

$$dt_L = \sum p_i (dC_L)_i.$$

Представленная в модель перитектического превращения, учитывающая количественный баланс компонентов, позволяет анализировать интенсивность диффузионных потоков в твердой фазе и накопления избыточного количества примесей в расплаве.

Более подробно и корректно процесс диффузионно-контролируемого углеродом перитектического превращения, развивающегося на фоне малоподвижного распределения компонентов замещения по сечению дендритной ветви, рассмотрен в разд. 4, где вместо локально-равновесных условий анализируется использование пара-равновесной модели для уточненного расчета концентрации углерода  $C_{\gamma\delta}$  на межфазной  $\gamma/\delta$  границе.

## 2.2. Информационное обеспечение модели

Компьютерный анализ литейной технологии в зависимости от уровня решаемых задач ставит определенные требования по информационному обеспечению численных моделей.

Моделирование кристаллизации сплава в элементарной мезо-ячейке, включенной в массив макрообъекта, связано с решением локальных задач, однако, также, как и макро-моделирование, требует тщательного выбора параметров, характеризующих начальные и граничные условия процессов, а также многообразные характеристики участвующих в них материалов. Точность их задания и адекватность реальным (технологическим) условиям определяют достоверность (погрешности) получаемых результатов и формулируемых на их основе выводов.

Для численного определения *внемасштабных* температурно- и концентрационно-зависимых параметров модели (геометрия и критические точки диаграммы состояния, теплоемкость, теплота кристаллизации и т.д.) использовали программный комплекс «Polytherm», позволяющий анализировать кристаллизацию многокомпонентных сплавов железа на основе аппарата термодинамического моделирования равновесных фазовых превращений [66]. Информационное обеспечение модели кристаллизации с помощью пакета термодинамического моделирования позволяет использовать набор взаимосогласованных характеристик необходимой точности в условиях, когда характеристики конкретных сплавов отсутствуют в справочниках [96] или нередко отягощены весьма приближенными или сомнительными цифровыми данными. К моделируемым характеристикам относятся теплофизические и физико-химические параметры низколегированных сталей, необходимые для анализа сложных взаимосвязанных процессов, протекающих при затвердевании литых заготовок. Вместе с тем, результаты термодинамического моделирования равновесной кристаллизации, относящиеся к предельному состоянию системы, служат базовыми параметрами для расчета неравновесных процессов и в то же время являются необходимыми для проверки адекватности моделей неравновесной кристаллизации в условиях, близких к равновесным.

### **2.2.1. Теплофизические параметры сплавов**

Температурные условия кристаллизации мезо-элемента определяются не только интенсивностью теплоотвода, но в значительной степени теплофизиче-

скими параметрами сплава. Изменение этих параметров по ходу кристаллизации сказывается на скорости охлаждения металла и, соответственно, на всем комплексе связанных процессов, что необходимо учитывать при их моделировании и анализе.

В работе использовали следующие теплофизические параметры: объемная теплоемкость фаз  $c^{L,\delta,\gamma}$ , скрытая объемная теплота кристаллизации  $H^{\delta,\gamma}$ , а также теплопроводность  $\lambda_m$ . Указанные параметры сплавов системы Fe-C- $\Sigma X_i$ , где X=Si, Mn, Cr, Ni рассчитывали с помощью программы «POLYTHERM», разработанной на кафедре «Материалы, технологии и оборудование литейного производства» СПбГПУ К.Д. Савельевым.

### Объемная теплоемкость

Значения теплоемкостей различных низколегированных сталей, использованных в работе для исследования и анализа структурной и химической микронегоднородности (разд. 3-4), представлены в табл. 2.2.

Таблица 2.2.

Осредненные значения теплофизических параметров  
исследованных низколегированных сталей

Сталь	Теплота кристаллизации, МДж/м <sup>3</sup>			Теплоемкость, МДж/м <sup>3</sup> ·К								
	$H^\delta$	$H^\gamma$	$H^p$	$c^L$			$c^\delta$			$c^\gamma$		
				$t_L^0$	$t_P$	$t_S$	$t_L^0$	$t_P$	$t_S$	$t_L^0$	$t_P$	$t_S$
10ХГН2	1682	1842	160	5.7	5.4	5.5	6.1	5.2	-	-	5.6	5.0
10Г2	1782	1944	162	5.4	3.9	3.9	5.0	4.2	6.4	-	6.0	6.0
20ХГН	1724	1881	157	5.7	4.6	4.4	5.2	4.7	-	-	4.7	4.2
70Г	—	1946	—	3.9	-	3.4	-	-	-	3.9	-	3.4

Результаты расчета демонстрируют близкие по величине объемные теплоемкости расплава  $c^L$ ,  $\delta$ -фазы  $c^\delta$  и  $\gamma$ -фазы  $c^\gamma$  при критических температурах равновесной диаграммы состояния: начальной температуре ликвидуса  $t_L^0$ , температуре перитектического превращения  $t_P$ , когда появляется вторичная  $\gamma$ -фаза, и при тем-

температуре солидуса  $t_s$ . Первый этап кристаллизации (выделение  $\delta$ -фазы) сопровождается постепенным снижением теплоемкости  $c^L$  и  $c^\delta$  до значений, соответствующих температуре начала перитектического превращения, вследствие понижения температуры и изменения состава выделяющейся твердой фазы.

Ход превращения  $L+\delta\rightarrow\gamma$  характеризуется термодинамически обусловленным повышением теплоемкостей фаз с последующим снижением на последнем этапе кристаллизации.

### **Скрытая теплота кристаллизации**

Результаты расчета выделения скрытой теплоты кристаллизации фаз, а также теплота фазового  $\delta\rightarrow\gamma$  перехода  $H^P$ , добавляющейся к теплоте кристаллизации в период перитектического превращения, указаны в табл. 2.2. Значения параметров  $H^j$  определяются исходным составом сплава. При этом интенсивность выделения теплоты в процессе кристаллизации определяется скоростью затвердевания, зависящей от величины термического переохлаждения  $\Delta T$ .

Как видно из расчетных данных, кристаллизация  $\gamma$ -фазы сопровождается повышением тепловыделения относительно этапа кристаллизации  $\delta$ -фазы. При перитектическом превращении на межфазной границе ( $\gamma/\delta$ ) выделяется относительно небольшое количество тепла, однако оно также участвует в формировании тепловых условий кристаллизации и должно быть учтено при моделировании.

### **Теплопроводность**

Для задания теплопроводности металла использованы результаты обобщения опубликованных экспериментальных данных для различных марок углеродистых и низколегированных сталей, представленные в программе «Polytherm» с помощью статистических моделей. Результаты моделирования показали малую зависимость величины коэффициента теплопроводности исследованных сталей от химического состава сплава и текущей температуры металла в период его кристаллизации. В связи с этим при моделировании для всех сталей использовали постоянное значение расчетного коэффициента теплопроводности (33 Вт/м·К).

## Коэффициент теплоотдачи

Моделирование кристаллизации макро-объектов (отливка, слиток) с помощью разработанной модели основывается на анализе тепловых потоков между мезо-масштабными элементарными ячейками. Нестационарный характер тепловых потоков через каждую грань мезо-ячейки обуславливает формирование сложной картины тепловых полей в охлаждающейся литой заготовке. При этом в объеме макро-объекта можно выделить характерные участки, представляющие наибольший интерес для анализа формирования структурной и химической микронеоднородности. Величина потока тепла через грани элементарной ячейки, принадлежащей такому характерному участку, определяет величину коэффициента теплоотдачи  $\alpha$ , необходимого для моделирования кристаллизации. Оценка осредненной величины эффективного коэффициента теплоотдачи  $\alpha$  для выделенного  $i$ -го мезо-элемента в составе трехмерной геометрической макромоделли после ее разбиения ортогональной сеткой с шагами  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  и  $\Delta z$  по координатным осям производится на основе соотношения:

$$\alpha = \left( \frac{(V_{я})_i}{F_i} \right) \frac{Q_{кр}}{(\tau_{LS})_i \vartheta_i},$$

где  $(V_{я})_i$ ,  $F_i$  – объем и поверхность теплоотвода  $i$ -го мезо-элемента ( $(V_{я})_i = \Delta x \times \Delta y \times \Delta z$ ;  $F_i = 2(\Delta x \times \Delta y + \Delta y \times \Delta z + \Delta x \times \Delta z)$ ;  $Q_{кр}$  – полная теплота кристаллизации сплава;  $\vartheta_i = t_i - t_c$  – эффективная величина перепада температуры  $t_i$  за период кристаллизации  $(\tau_{LS})_i$   $i$ -го мезо-элемента и температуры окружающей среды  $t_c$ , принимаемой равной начальной температуре формы (изложницы); значение  $t_i$  рассчитывается путем осреднения по результатам моделирования процесса затвердевания с использованием макро-масштабной сеточной модели отливки (слитка) при заливке исследуемого сплава в форму (изложницу). Соответствующие оценки для конкретной отливки «Корпус» при заливке стали 30ХМЛ в песчано-жидкостекольную форму в зависимости от локальной продолжительности затвердевания (2800 - 400 с) стенки толщиной 90-35 мм дают значения эффективного коэффициента теплоотдачи  $\alpha = 2-20 \text{ Вт/м}^2 \cdot \text{К}$ . При моделировании процессов формирования дендритной структуры для заданных размеров мезо-элемента и

принятой по условиям моделирования локальной продолжительности кристаллизации значение эффективного коэффициента теплоотдачи  $\alpha$  определяли с помощью приведенной выше формулы.

### **2.2.2. Физико-химические параметры сплавов**

Большое количество решаемых задач при моделировании кристаллизации связано с необходимостью задания физико-химических параметров сплава: исходной температуры ликвидуса  $(t_L)_0$ ; температуры начала перитектического превращения  $(t_P)$ , реализуемого в интервале температур; геометрии диаграммы состояния; коэффициентов диффузии и т.д. Исходная температура  $(t_L)_0$  определяет границу начала кристаллизации, по достижении которой производится расчет выделения первичной  $\delta$ -фазы. При понижении текущей температуры ликвидуса сплава  $(t_L)$  до  $(t_P)$  в расчете использовали диффузионную модель, учитывающую перитектическое превращение. Расчет необходимых для этого параметров и критических точек диаграммы состояния производили с помощью термодинамического моделирования.

#### **Температура ликвидуса и температура перитектического превращения**

По результатам моделирования диаграмм состояния одного из наиболее часто использованных в работе сплавов построены зависимости изменения исходной температуры ликвидуса  $t_L^0$  и  $t_P$ , а также предельной концентрации углерода в  $\delta$ -фазе ( $C_H$ ), в  $\gamma$ -фазе ( $C_B$ ) и концентрации углерода в перитектической точке ( $C_J$ ) от химического состава сплава (табл. 2.3) при последовательном добавлении компонентов.

Из приведенного набора компонентов (C, Si, Mn, Cr, Ni) наиболее сильно изменяют перитектический участок диаграммы состояния такие добавки, как кремний и никель. Введение в сплав кремния увеличивает интервал кристаллизации, значительно понижая при этом температуру перитектического превращения.



Таблица 2.3.

Положение критических точек перитектического превращения  
для бинарной и квазибинарных диаграмм состояния Fe-C

Состав сплава, %	$(t_L)_0$ , °C	$t_P=t_J$ , °C	$C_H$ , %	$C_J$ , %	$C_B$ , %
Fe-0.11C	1529	1494	0.09	0.17	0.54
Fe-0.11C-0.3Si	1525	1486	0.09	0.17	0.54
Fe-0.11C-0.3Si-1.24Mn	1519	1486	0.07	0.13	0.43
Fe-0.11C-0.3Si-1.24Mn-1.06Cr	1516	1481	0.07	0.14	0.44
Fe-0.11C-0.3Si-1.24Mn-1.06Cr-2.0Ni	1508	1491	0.04	0.07	0.25

Добавка никеля приводит к значительному уменьшению концентрации углерода в критических точках  $H$ ,  $J$  и  $B$ , а также к сужению температурного интервала выделения  $\delta$ -фазы с 35 до 17 К. Таким образом химический состав стали является одним из основных, наряду с интенсивностью теплоотвода, факторов прямого и косвенного влияния на кинетику тепловых, кристаллизационных и диффузионных процессов, определяя температурные и концентрационные рамки различных фаз кристаллизующейся системы.

*Расчет температуры ликвидуса* является одной из важных стадий решения кристаллизационной задачи, так как значение  $t_L$  служит для определения величины термического переохлаждения. В работе для расчета температуры ликвидуса использовали следующее аддитивное соотношение:

$$t_L = (t_L)_0 - \sum p_i^L \Delta C_i,$$

где  $(t_L)_0$  – исходная температура ликвидуса;  $\Delta C_i = (C_0)_i - C_i$ . Линия ликвидуса, выраженная в данном уравнении через тангенс угла ее наклона  $(p_i^L)$  (табл. 2.4), представляет собой сечение поверхности ликвидуса многокомпонентной системы плоскостью, отвечающей текущему составу расплава, при постоянной концентрации исследуемого компонента.

*Наклон линии ликвидуса.* Результаты расчета значения параметра  $p_i^L$  для углерода (наиболее значимого компонента) демонстрируют его существенную зависимость от типа кристаллизующейся структуры (табл. 2.4). В то же время колебание значений  $p_i^L$  в пределах интервала кристаллизации составило не более 5-10%,

что для таких компонентов, как марганец и хром, может быть учтено путем использования осредненных значений  $p_i^L$ .

Таблица 2.4.

Зависимость средней величины тангенса угла наклона линии ликвидуса  $p_i^L$  (K/%)

квазибинарных диаграмм состояния от химического состава сплава

Состав сплава, %	$p_C^L$		$p_{Si}^L$		$p_{Mn}^L$		$p_{Cr}^L$		$p_{Ni}^L$	
	$\delta$	$\gamma$	$\delta$	$\gamma$	$\delta$	$\gamma$	$\delta$	$\gamma$	$\delta$	$\gamma$
Бинарные сплавы [66]	-87	-66	-11	-11	-5.1	-4.4	-1.6	-2.5	-3.9	-2.1
Fe-0.11C-0.3Si	-85	-69	-17	-18	-	-	-	-	-	-
Fe-0.11C-0.3Si-1.24Mn	-84	-67	-17	-17	-4.6	-3.0	-	-	-	-
Fe-0.11C-0.3Si-1.24Mn-1.06Cr	-84	-66	-18	-19	-4.5	-3.2	-2.6	-3.4	-	-
Fe-0.11C-0.3Si-1.24Mn-1.06Cr-2.0Ni	-84	-65	-18	-18	-4.8	-3.5	-2.6	-3.4	-4.5	-2.1

Представленные в таблице данные согласуются с известными в литературе значениями для бинарных сплавов [66]. На основании полученных результатов в работе использовали для углерода и кремния температурно-зависимые значения  $p_i^L$ , а для марганца, хрома и никеля – постоянные.

### Коэффициент распределения компонентов между фазами

Одним из наиболее важных физико-химических параметров сплава является коэффициент распределения компонентов между фазами ( $k_i^{jL}$ ), в значительной степени определяющий микроликвацию компонентов.

Таблица 2.5.

Средняя величина коэффициентов распределения  $k_i^{jL}$  компонентов в  $\delta$ - и  $\gamma$ -фазе

в зависимости от химического состава сплава

Состав сплава, %	$k_C^{jL}$		$k_{Si}^{jL}$		$k_{Mn}^{jL}$		$k_{Cr}^{jL}$		$k_{Ni}^{jL}$	
	$j=\delta$	$\gamma$	$\delta$	$\gamma$	$\delta$	$\gamma$	$\delta$	$\gamma$	$\delta$	$\gamma$
Бинарные сплавы [66]	0.19	0.35	0.77	0.52	0.76	0.78	0.95	0.86	0.83	0.95
Fe-0.11C-0.3Si	0.17	0.31	0.60	0.56	-	-	-	-	-	-
Fe-0.11C-0.3Si-1.24Mn	0.16	0.30	0.55	0.54	0.68	0.70	-	-	-	-
Fe-0.11C-0.3Si-1.24Mn-1.06Cr	0.16	0.31	0.55	0.51	0.68	0.71	0.87	0.82	-	-
Fe-0.11C-0.3Si-1.24Mn-1.06Cr-2.0Ni	0.15	0.29	0.57	0.52	0.69	0.71	0.89	0.84	0.80	0.91

В работе использовали температурно-зависимые равновесные коэффициенты распределения на фронте кристаллизации для всех компонентов сплава. С использованием термодинамического моделирования было проанализировано влияние химического состава сплава на величину  $k_i^{jL}$  (табл. 2.5).

Как видно из результатов, распределение углерода и кремния сильнее остальных указанных компонентов подвержено влиянию химического состава.

С учетом того, что углерод, наиболее интенсивно накапливающийся в расплаве, распределяется в силу высокой диффузионной подвижности по сечению дендритной ветви практически равномерно, наиболее значимой становится микроликвация кремния и других элементов замещения с низкой величиной коэффициента распределения. Отличие значений коэффициентов распределения для бинарных сплавов от значений для многокомпонентных сплавов является результатом учета совместного влияния всех компонентов сплава на его физико-химические параметры.

### Коэффициенты диффузии компонентов в сплавах на основе железа

Коэффициенты диффузии для C, Si, Mn, Cr, Ni в железе рассчитывали по уравнению Аррениуса с использованием параметров, указанных в табл. 2.6 [97]:

$$D_i = (D_0)_i \exp \left[ \frac{-(Q_D)_i}{R(t + 273)} \right],$$

где  $D_0$  – предэкспоненциальный множитель;  $R$  – универсальная газовая постоянная;  $Q_D$  – энергия активации;  $t$  – температура.

Таблица 2.6.

Параметры для расчета коэффициентов диффузии

Компонент	Расплав		$\delta$ -фаза		$\gamma$ -фаза	
	$D_0 \cdot 10^{-4}$ , м <sup>2</sup> /с	$Q_D$ , Дж/моль	$D_0 \cdot 10^{-4}$ , м <sup>2</sup> /с	$Q_D$ , Дж/моль	$D_0 \cdot 10^{-4}$ , м <sup>2</sup> /с	$Q_D$ , Дж/моль
C	0.07670	106000	0.013	81400	0.0760	134600
Si	0.00051	38300	8.000	248900	0.3000	251400
Mn	0.00460	70300	0.760	224000	0.4860	276100
Cr	0.00251	66900	2.400	239800	0.0012	219000
Ni	0.01350	89200	1.600	240000	0.3400	282400

Следует отметить, что литературные данные отражают, как правило, коэффициенты диффузии для бинарных систем. Представленные данные свидетельствуют о необходимости учета всех основных компонентов стали при проведении компьютерного анализа кристаллизации. Использование неполной информации приводит к снижению точности расчета, что в программном комплексе, решающем множество сопряженных задач, может привести к критическому снижению адекватности многоплановых результатов.

### 2.2.3. Параметры вычислительной схемы

Процесс теплообмена, в соответствии с конечно-разностной объемной моделью, анализировали в объеме мезо-масштабной ячейки, размер которой обеспечивает практическое выравнивание температуры внутри неё при заданной скорости охлаждения, то есть отвечает условию  $Bi = \alpha R_0 / \lambda_m \ll 1$ . Для реальных скоростей охлаждения ( $C_R \approx 0.1 \div 10$  К/с) при  $\alpha < 300$  Вт/(м<sup>2</sup>К) и  $\lambda_m \approx 30$  Вт/(м·К) характерный размер мезо-элемента принимали равным  $R_0 \approx 0.01$  м.

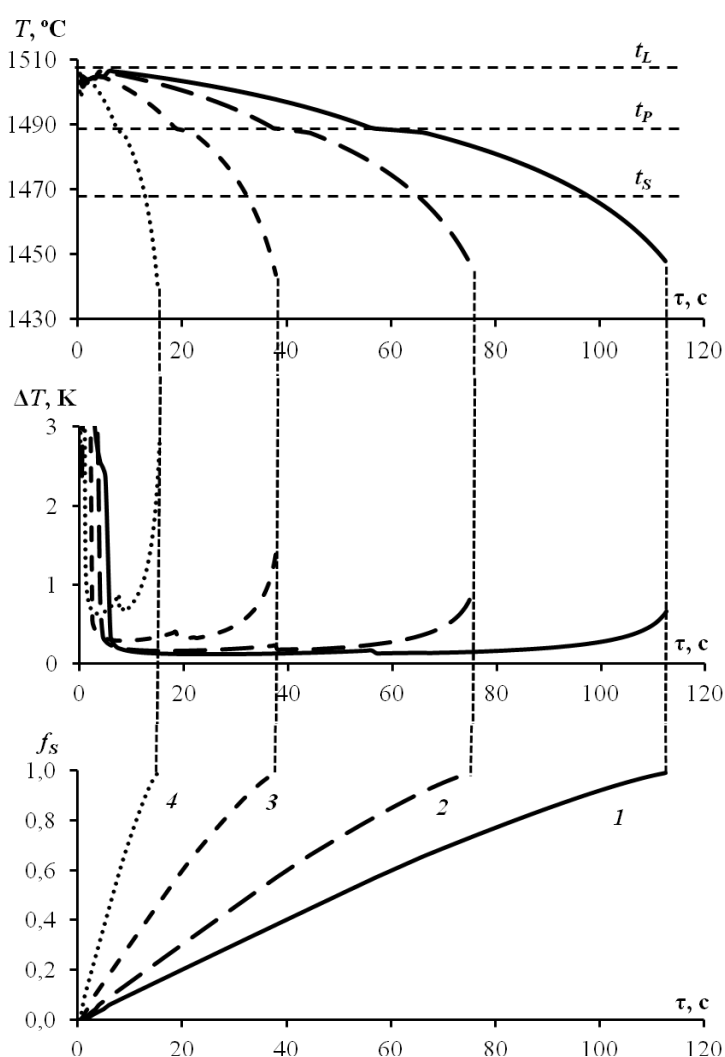
Величина временного шага расчета  $\Delta\tau$ , варьирующаяся в зависимости от характера анализируемых процессов, должна обеспечивать необходимую точность расчета, устойчивость вычислительной схемы при рациональных затратах машинного времени. Устойчивость сеточной задачи для конечно-разностной схемы обеспечивается при условии:  $\Delta\tau \leq \Delta x^2 / 2a_m$  для тепловой задачи (где  $\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta x_3$  - размеры параллелепипеда мезо-ячейки;  $\Delta x = \min(\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta x_3)$  и  $\Delta\tau \leq \Delta x^2 / 2D^s$  для одномерной микроликвационной задачи, где  $\Delta x$  – шаг расчетной сетки).

При моделировании дендритной структуры для расчета тепловой задачи при температуропроводности сплавов железа  $a_m \approx 5.5 \cdot 10^{-5}$  м<sup>2</sup>/с и размере мезо-элемента  $1 \times 1 \times 1$  см (см. разд. 2.3) использовали временной шаг  $\Delta\tau = 10^{-2} - 10^{-4}$  с; при моделировании микроликвации для сетки с шагом  $\Delta x = 0.1 - 1$  мкм (см. разд. 4.3) и задании коэффициентов диффузии в твердой фазе в пределах  $10^{-8} \div 10^{-13}$  м<sup>2</sup>/с временной шаг принимали равным  $\Delta\tau = 10^{-4} - 10^{-7}$  с.

Представленные теплофизические, физико-химические и вычислительные параметры позволяют обеспечить разработанную модель неравновесной кристаллизации необходимыми исходными данными, как для бинарных сплавов, так и для сложных многокомпонентных сплавов.

### 2.3. Результаты численного анализа затвердевания углеродистых и низколегированных сталей

Основной задачей базового модуля «Б» при моделировании кристаллизационных процессов является расчет тепловых условий под действием различных переменных факторов. К числу наиболее значимых из них относятся: величина интенсивности теплоотвода, химический состав сплава, а также объемная плотность центров кристаллизации.



a)

b)

в)

Рисунок 2.9. Изменение температуры (а), термического переохлаждения (б) и доли твердой фазы (в) в зависимости от продолжительности кристаллизации и величины коэффициента теплоотдачи  $\alpha=20$  (1), 30 (2), 60 (3) и 150 (4)  $\text{Вт/м}^2\text{К}$  ( $t_S$ —температура солидуса для равновесных условий)

Величина интенсивности теплоотвода зависит от коэффициента теплоотдачи ( $\alpha$ ) и определяет ход процесса кристаллизации во времени. С помощью разработанного базового программного модуля «Б» произвели моделирование кристаллизации мезо-объема низколегированной стали 20ХГН состава Fe-0.2C-0.25Si-0.9Mn-0.81Cr-1.05Ni при различных значениях коэффициента  $\alpha$ : 20, 30, 60 и 150 Вт/м<sup>2</sup>К. Для расчета кинетики основных процессов использовали уравнения (2.1) (расчет текущей температуры) и (2.5) (расчет доли твердой фазы). Результаты моделирования представлены на рис. 2.9.

На начальном этапе кристаллизации четко выражена рекалесценция, когда интенсивное нарастание термического переохлаждения  $\Delta T$  (рис. 2.9, б) приводит к увеличению скорости образования твердой фазы и, соответственно, выделяющейся теплоты кристаллизации, которая компенсирует теплоотвод в окружающее пространство и вызывает уменьшение переохлаждения.

Выделение твердой фазы (рис. 2.9, в) сопровождается обогащением расплава компонентами стали и, как следствие, снижением температуры ликвидуса остаточной жидкой фазы. В результате термическое переохлаждение проходит пиковое значение и снижается до уровня, обеспечивающего некоторый баланс протекающих процессов. В момент начала перитектического превращения ( $t_L < t_P$ ) наступает этап второй рекалесценции, которая на примере, представленном на рис. 2.9, выражена стабилизацией температурных графиков. Кинетика тепловыделения при затвердевании определяется теплофизическими параметрами сплава, величина которых при смене типа кристаллизующейся структуры меняется, что при сохранении на начальном этапе прежнего переохлаждения приводит к выделению большего количества теплоты.

Заключительный этап кристаллизации происходит с постепенным снижением выделяющейся теплоты кристаллизации вследствие уменьшения скорости выделения твердой фазы. В результате наблюдается увеличение термического переохлаждения до момента полного исчерпания жидкой фазы.

Использованные в расчетном эксперименте значения коэффициента  $\alpha$ , характерные для реальных литых заготовок, обеспечивают полное затвердевание мезо-объема металла при  $\tau_{LS}=15-115$  с.

Как видно из рис. 2.9, с увеличением интенсивности теплоотвода существенно снижается продолжительность кристаллизации при интенсификации кристаллизационных процессов, движущей силой которых является возрастающее термическое переохлаждение, которое определяет скорость роста кристаллов. В то же время, как показывают результаты моделирования, представленные в табл. 2.7, даже при равной интенсивности теплоотвода условия неравновесной кристаллизации для разных сталей могут существенно различаться в зависимости от их положения на диаграмме состояния.

Выбранные для исследования углеродистые и низколегированные стали в зависимости от химического состава, определяющего положение на квази-бинарной диаграмме состояния Fe-C, разделяются на четыре группы: I - перитектические стали ( $C \leq C_H$ ), кристаллизующиеся с выделением  $\delta$ -фазы как твердые растворы (выше температуры перитектического превращения); II - доперитектические стали ( $C_H < C < C_J$ ), которые завершают кристаллизацию при перитектическом превращении с остаточной долей  $\delta$ -фазы; III - заперитектические стали ( $C_J \leq C < C_B$ ), в которых перитектическое превращение протекает полностью до завершения кристаллизации; IV - постперитектические стали ( $C \geq C_B$ ), кристаллизующиеся как твердые растворы с выделением  $\gamma$ -фазы (ниже температуры перитектического превращения) [66].

В сталях I-II групп ( $C_0 < C_J$ ) преобладает выделение  $\delta$ -фазы с ее максимальной долей не менее 0.9, вплоть до концентрации углерода, близкой к перитектической точке  $C_J$  (табл. 2.7). Как показывают результаты расчета, затвердевание происходит при близких для этих сталей значениях термического переохлаждения  $\Delta T$ , максимальная величина которого перед рекалесценцией достигает  $\Delta T \approx 3$  К, а затем снижается до 0.1 К. К концу выделения твердой фазы переохлаждение постепенно увеличивается до  $\Delta T \approx 12$  К.

Таблица 2.7.

Влияние интенсивности теплоотвода и концентрации углерода  
в многокомпонентном сплаве Fe-C-Si-Mn-Cr-Ni на параметры затвердевания

Группа	Концентрация, масс. %				$\alpha=100 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$					$\alpha=200 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$				
	$C_0$	$C_H$	$C_J$	$C_B$	$\tau_{LS}, \text{ с}$	$\Delta T, \text{ К}$	$m_{\max}^{\delta}$	$m_{\text{ост}}^{\delta}$	$C_R, \text{ К/с}$	$\tau_{LS}, \text{ с}$	$\Delta T, \text{ К}$	$m_{\max}^{\delta}$	$m_{\text{ост}}^{\delta}$	$C_R, \text{ К/с}$
<b>I</b>	<b>0.04</b>	0.05	0.11	0.35	19	2.8	1.00	1.00	1.9	10	3.6	1.00	1.00	4.0
<b>II</b>	<b>0.07</b>	0.05	0.11	0.35	22	2.8	0.95	0.35	2.4	11	3.6	0.95	0.14	5.0
	<b>0.11</b>	0.06	0.11	0.37	22	2.8	0.90	0.15	2.6	11	3.6	0.90	0	5.1
<b>III</b>	<b>0.20</b>	0.06	0.12	0.38	19	2.6	0.60	0	4.5	10	3.4	0.55	0	9.0
	<b>0.30</b>	0.06	0.13	0.39	22	3.1	0.30	0	4.5	12	4.7	0.30	0	9.7
<b>IV</b>	<b>0.50</b>	-	-	-	28	4.5	0	0	5.2	14	6.0	0	0	10.8
Примечание: исходный состав сплава Fe-(0.04÷0.50)C-0.25Si-0.90Mn-0.81Cr-1.05Ni														

В сталях II-ой группы частично или полностью протекает перитектическое превращение и доля остаточной  $\delta$ -фазы ( $m_{\text{ост}}^{\delta}$ ) к концу затвердевания оказывается значительно меньше ее максимального значения, достигаемого к началу перитектического превращения ( $m_{\max}^{\delta}$ ). Остаточная доля  $m_{\text{ост}}^{\delta}$  при повышении скорости охлаждения снижается за счет возрастания градиента концентрации углерода по сечению  $\gamma$ -фазы – движущей силы диффузионно-контролируемого перитектического превращения, несмотря на уменьшение длительности этого процесса. Более подробно анализ кинетики перитектического превращения рассмотрен в разд. 4.3.2.

Стали III-IV групп ( $C_J \leq C_0$ ) к концу затвердевания полностью состоят из  $\gamma$ -фазы. При этом увеличение температурного интервала затвердевания приводит к уменьшению темпа выделения твердой фазы ( $dm/dt$ ) и темпа выделения теплоты кристаллизации.

Данные условия сопровождаются повышением скорости охлаждения металла и термического переохлаждения. Однако возрастание переохлаждения не приводит к уменьшению продолжительности затвердевания  $\tau_{LS}$ , следующему из уравнения (2.5), в связи с тем, что влияние переохлаждения нивелируется усилением



микроликвации, учитывающей в уравнении (2.5) коэффициентом скорости роста (2.6).

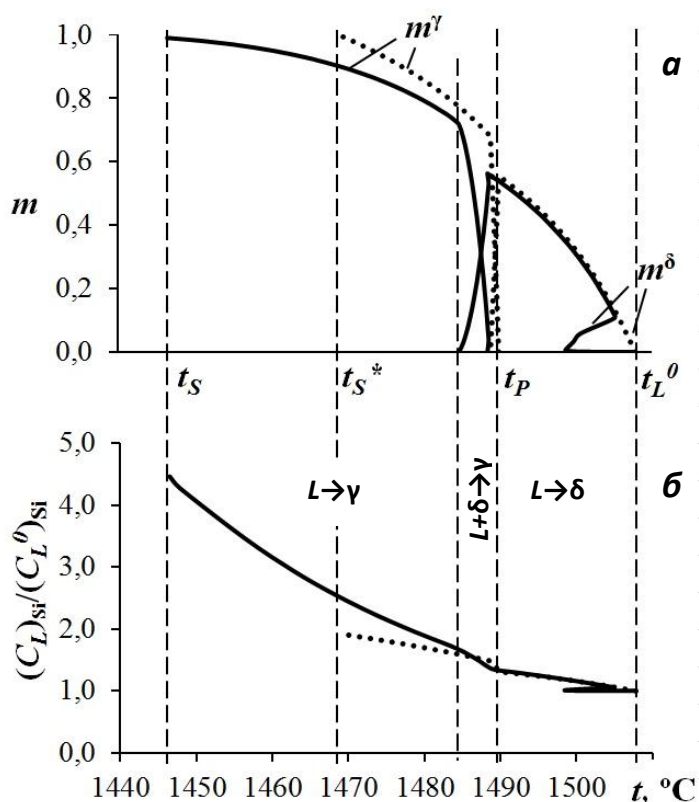


Рисунок 2.10. Зависимость долей  $\delta$ -фазы  $m^{\delta}$  и  $\gamma$ -фазы  $m^{\gamma}$  (а) и относительной концентрации кремния в расплаве  $(C_L)_{\text{Si}} / (C_L^0)_{\text{Si}}$  (б) от текущей температуры  $t$  стали 20ХГН при неравновесных (линия) и равновесных (точки) условиях затвердевания ( $t_S$ ,  $t_S^*$  – температура неравновесного и равновесного солидуса соответственно)

Сплав  
Fe-0.20C-0.25Si-0.90Mn-0.81Cr-1.05Ni,  
( $\tau_{LS} = 26$  с)

Комплексный анализ условий затвердевания стали с помощью базового программного модуля «Б» позволяет учесть при дальнейшем моделировании структурной (разд. 3) и химической (разд. 4) микронеоднородности существенное отклонение процесса затвердевания от термически- и диффузионно-равновесных условий, проиллюстрированное на рис. 2.10.

Сопоставление приведенных на рисунке графиков изменения долей  $\delta$ - и  $\gamma$ -фазы для равновесных и неравновесных условий (рис. 2.10, а) свидетельствует о том, что этап выделения  $\delta$ -фазы реализуется в условиях, близких к равновесным (за исключением периода начального переохлаждения). Однако, начиная от перитектической температуры  $t_P$ , степень неравновесности нарастает, что связано с накоплением избыточных компонентов в расплаве в результате подавления диффузии в твердой фазе. При этом температура неравновесного солидуса  $t_S$  смещается более чем на 20 К ниже температуры равновесного солидуса  $t_S^*$  на фоне, в частности, более чем двукратного различия относительных концентраций кремния в расплаве  $(C_L)_{\text{Si}} / (C_L^0)_{\text{Si}}$  (рис. 2.10, б). Учитывая закономерное влияние тепло-

вых и концентрационных условий на формирование дендритной структуры и микроликвации, использование базовой модели неравновесной кристаллизации «Б» дает возможность в явном виде рассмотреть комплекс сопряженных процессов, реализуемых с помощью модели (рис. 2.11-2.12).

Таблица 2.8.

Параметры процесса кристаллизации трехкомпонентных сплавов ( $\alpha=100 \text{ Вт/м}^2\text{К}$ )

№	Сплав	$\tau_{LS}, \text{ с}$	$\Delta\tau_P, \text{ с}$	$\Delta t_{LS}=t_L-t_S, \text{ К}$	$C_R, \text{ К/с}$
1.	Fe-0.2 C	20.8	2.6	43	2.0
2.	Fe-0.2 C-1.0 Si	25.3	3.1	90	3.6
3.	Fe-0.2 C-1.0 Mn	21.4	4.8	38	1.8

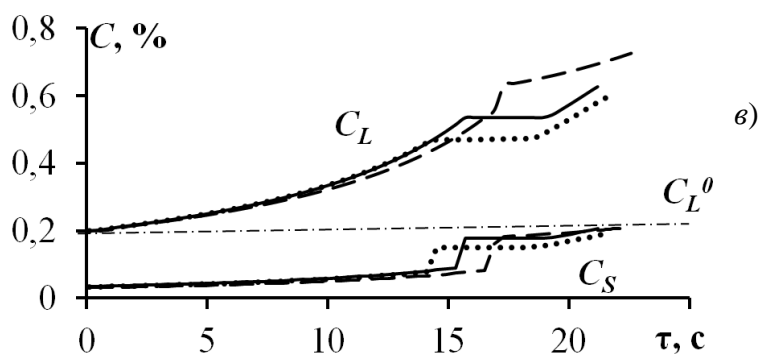
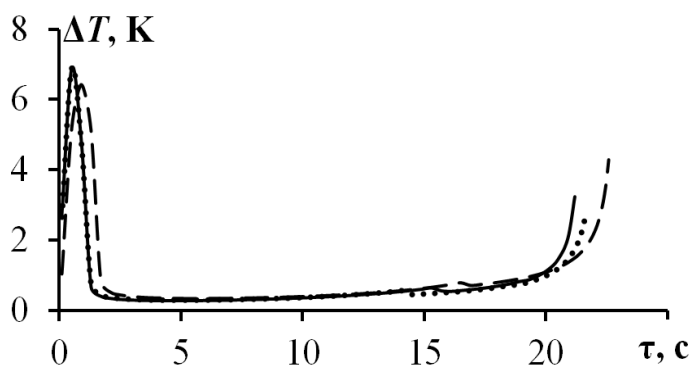
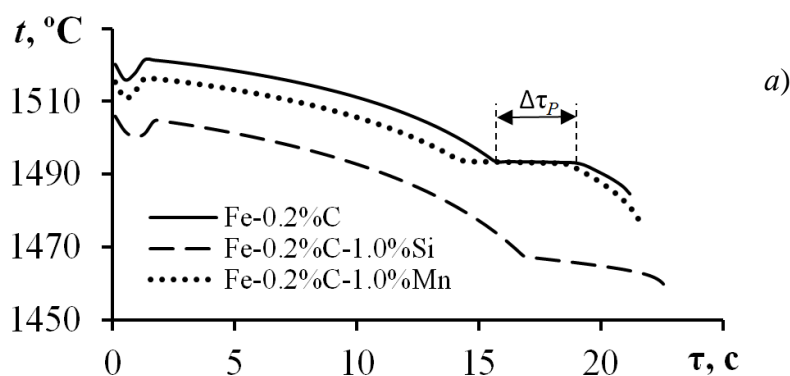


Рисунок 2.11. Влияние добавки третьего компонента на изменение температуры сплава (а), термическое переохлаждение (б) и концентрацию углерода в жидкой ( $C_L$ ) и выделяющейся твердой фазе ( $C_S$ ) (в)

$\Delta\tau_P$  – длительность перитектического превращения

Сравнительный анализ различного влияния добавки третьего компонента стали на ход процесса кристаллизации с перитектическим превращением, длительность которого характеризуется временем  $\Delta\tau_p$ , реализован на примере трехкомпонентных сплавов Fe-0.2%C-1.0% $X_i$ , где  $X_i$  – Si, Mn (рис. 2.11). Как видно из результатов расчета, представленных на рис. 2.14 и в табл. 2.8, введение кремния – компонента, сильно деформирующего перитектический участок диаграммы состояния Fe-C (см. табл. 2.3) – приводит к понижению критических температур и изменению длительности выделения  $\gamma$ -фазы (рис. 2.11, а). При этом на начальном этапе наблюдается небольшое смещение вправо пика термического переохлаждения (рис. 2.11, б) в силу более низкого значения коэффициента скорости роста, величина которого, согласно уравнению (2.6), зависит от комплекса физико-химических параметров сплава.

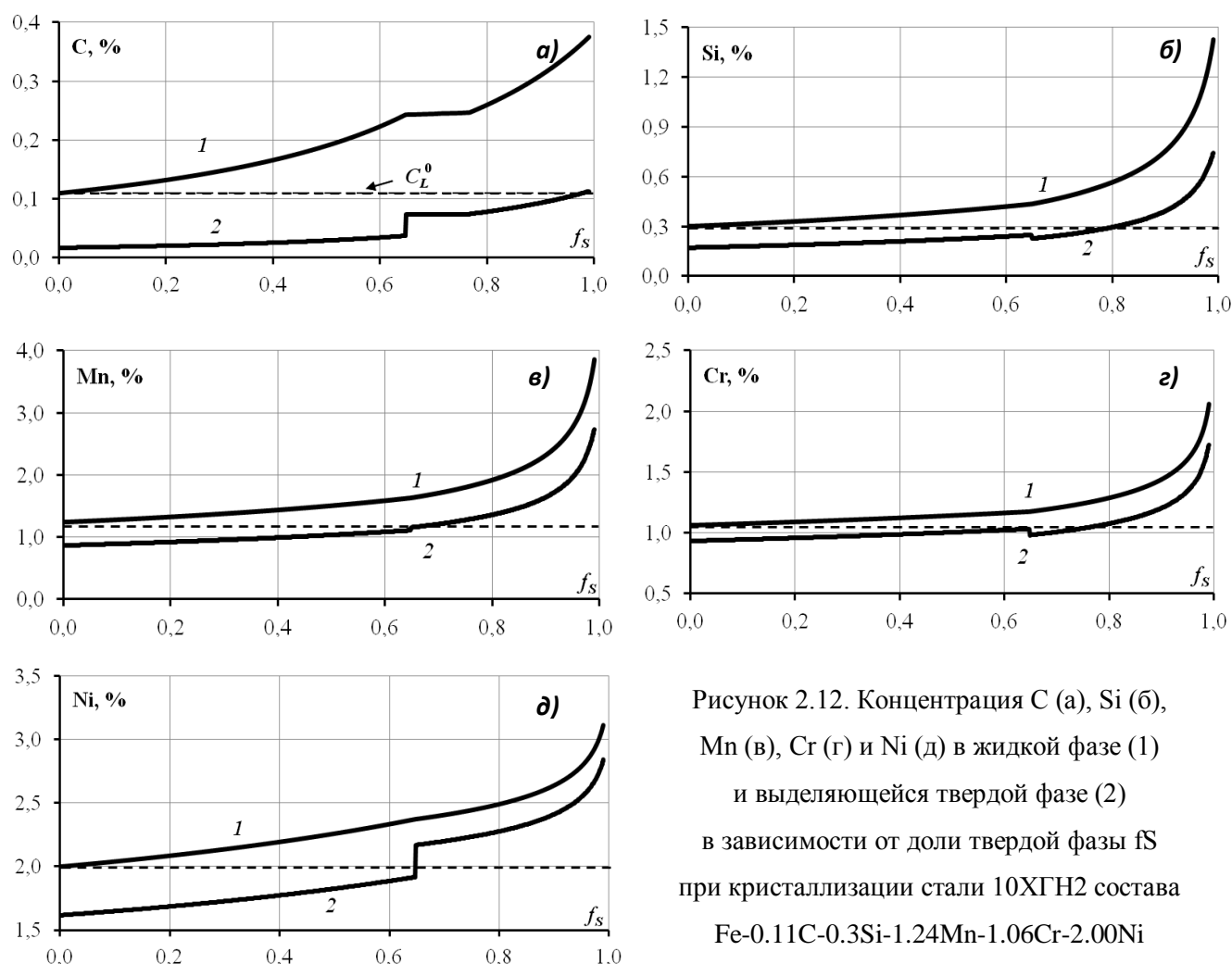
В соответствии с изменением физико-химических параметров проявляются также изменения, связанные с микроликвацией компонентов, проиллюстрированные на примере углерода (рис. 2.11, в). До начала перитектического превращения графики изменения концентрации углерода в жидкой фазе  $(C_L)_C$  и выделяющейся твердой фазе  $(C_s)_C$  практически совпадают.

Введение марганца оказывает меньшее влияние по сравнению с кремнием и выражается в небольшом смещении расчетных температур при сохранении участка с перитектической остановкой на температурном графике (рис. 2.11, а), который начинается ранее, чем у других представленных на рис. 2.11 сплавов.

Изменение концентрации  $(C_L)_i$  и  $(C_s)_i$  компонентов стали 10ХГН2 (C, Si, Mn, Cr, Ni), являющейся объектом экспериментального исследования и последующего компьютерного анализа дендритной структуры (разд. 3), представлено на рис. 2.12.

Как видно из рис. 2.12, на этапе перитектического превращения высокая диффузионная подвижность углерода обеспечивает стабильное значение его концентрации в расплаве вследствие полного прохождения диффузии выделившегося из расплава углерода через слой  $\gamma$ -фазы к границе  $\gamma/\delta$ . Диффузионная подвижность других компонентов в  $\gamma$ -фазе ( $D_i^\gamma \approx 10^{-13}$  м<sup>2</sup>/с) значительно ниже, чем в  $\delta$ -

фазе ( $D_i^{\delta} \approx 10^{-11} \text{ м}^2/\text{с}$ ), что приводит к интенсивному обогащению расплава этими компонентами во время кристаллизации  $\gamma$ -фазы, особенно при затвердевании последних долей жидкой фазы ( $m > 0.9$ ).



Анализ кинетики роста вершин дендритов, образования начальных боковых ветвей и их последующей эволюции, которая связана с объемной плотностью дендритных кристаллитов  $N_3$  и объемной плотностью непрерывно возникающих дендритных ветвей  $N_S$ , является предметом исследования структурных изменений с помощью программного модуля «С», представленного в разд. 3.

Правомерность использования базовой модели кристаллизации («Б») для анализа взаимосвязанных процессов теплообмена, выделения твердой фазы и переохлаждения расплава при неравновесном перераспределении компонентов между фазами применительно к условиям формирования литых заготовок подтверждается путем качественного и полуквантитативного сопоставления приведенных результатов моделирования (скорость и характер изменения температуры

и переохлаждения, темп выделения твердой фазы, концентрация компонентов сплава в жидкой и выделяющейся твердой фазе) с данными опубликованных работ [1, 51, 66, 83-86, 98 и др.] по выявленному характеру и степени влияния исследованных факторов в зависимости от интенсивности теплоотвода, состава сплавов, положения на диаграмме состояния и др.

### **3. Компьютерный анализ структурной микронеоднородности при неравновесной кристаллизации многокомпонентных сплавов**

#### **3.1. Модель свободного роста дендритов**

Затвердевание литой заготовки сопровождается образованием в теле отливки зон с различной морфологией кристаллитов. Для поверхностных слоев характерны столбчатые дендриты, в то время как в осевой зоне, как правило, наблюдаются равноосные дендриты. Между этими зонами имеется переходный участок, включающий кристаллиты обоих типов.

Преобладание одного типа кристаллизации над другим традиционно оценивается отношением градиента температур в расплаве к скорости движения фронта кристаллизации  $G_L/v_{кр}$  [1]. Так, повышение  $G_L$  приводит к преимущественному росту тех осей дендрита, направление которых совпадает с направлением теплоотвода. В то же время, интенсивное увеличение переохлаждения металла в периферийных слоях отливки способствует увеличению скоростей самопроизвольного и вынужденного зародышеобразования. В результате, зона столбчатых кристаллов представляет структуру с близко расположенными первичными осями дендритов, вытянутыми, как правило, по нормали к поверхности отливки.

По мере удаления фронта кристаллизации от поверхности отливки снимается перегрев металла и одновременно повышается температура литейной формы, что способствует уменьшению  $G_L$ . На некоторой дистанции от периферийных слоев нестационарные тепловые и конвекционные потоки приводят к формированию равноосных дендритов. Развитие как столбчатых, так и равноосных дендритов сопровождается коалесценцией их боковых ветвей, которая приводит к значительному росту междоосных промежутков  $\lambda_2$ . Применительно к теории коалесценции [32-39 и др.], разделение на столбчатые и равноосные дендриты является условным, так как различаются лишь тепловые условия при идентичности механизмов коалес-

ценции вторичных ветвей. При этом степень влияния того или иного механизма морфологической эволюции обуславливается локальными условиями кристаллизации, теплофизическими и физико-химическими параметрами сплава. Следует отметить, что в проанализированной литературе морфологическая эволюция дендритных ветвей рассматривается схематично. Исследователи, как правило, прибегают к использованию приближенных зависимостей [1], либо к численному моделированию методом фазовых полей (ячеистых автоматов) [98].

В работе анализировали дендритную кристаллизацию с учетом следующих допущений:

- центры кристаллизации возникают мгновенно при достижении термического переохлаждения;
- дендриты имеют равноосную морфологию;
- твердая фаза распределена только по ветвям второго порядка;
- коалесценция протекает лишь между двумя соседними ветвями.

В ряде работ [99-101 и др.], где исследован начальный этап формирования микроструктуры, установлено, что образование твердой фазы в сталях сопровождается интенсивным ветвлением дендритных кристаллитов на фоне подавленной коалесценции, когда имеется энергетический стимул к росту всех ветвей. В результате происходит преимущественный рост осей и ветвей дендритов в междендритной жидкой фазе до момента смыкания с ветвями соседних дендритов и образования непрерывного скелета твердой фазы. Затем интенсивно протекает коалесценция, укрупняя одни ветви за счет утонения и растворения других.

В соответствии с данными положениями для описания процесса развития дендритных кристаллитов была разработана модель, отражающая их условную двухстадийную морфологическую эволюцию [66]:

*I стадия:* свободный рост разветвленных дендритов до их взаимного смыкания при уменьшении доли *междендритной* жидкой фазы за счет продольного роста осей первого порядка (см. рис. 2.2), а также появления и развития ветвей второго порядка;

*II стадия:* развитие ветвей второго порядка при затвердевании *внутридендритной* жидкой фазы после остановки продольного роста вершин дендритов в результате исчерпания междендритной жидкой фазы.

Внешние размеры  $R_d$  дендритного кристаллита (см. рис. 2.2) определяются ростом первичных осей, а внутреннее строение – формированием боковых ветвей второго порядка.

Оси первого порядка, вершины которых отвечают поверхности дендритной сферы, формируют непрерывный скелет твердой фазы при доле дендритных сфер относительно объема мезо-элемента  $f_d$ , равной 1. Расчёт  $f_d$  производили по уравнению Колмогорова для растущих кристаллитов сферической формы:

$$df_d = (1 - f_d) 3\varphi N_3 v_d^3 \tau^2 d\tau, \quad (3.1)$$

где  $\varphi$  – коэффициент формы ( $\varphi=4\pi/3$ );  $N_3$  – объемная плотность центров кристаллизации;  $v_d$  – скорость роста вершин дендрита.

Скорость роста вершин дендрита, как показано в [2], зависит от: состава сплава, его физико-химических параметров, переохлаждения и геометрии диаграммы состояния. Исходя из этого, расчёт скорости роста дендрита  $v_d$  производили с учетом изменения радиуса кривизны его вершины  $R_{tip}$  по уравнениям, учитывающим тепловые и диффузионные процессы [66]:

$$v_d = \frac{dR_d}{d\tau} = \frac{2P_t a_m}{R_{tip}} \quad (3.2)$$

$$R_{tip} = \frac{\Gamma}{\sigma^*} \left[ P_t \frac{H^j}{c^j} + \sum \frac{2(P_c)_i p_i (C_L^0)_i (1 - k_i)}{(1 - (1 - k_i)) I\nu((P_c)_i)} \right]^{-1}, \quad (3.3)$$

где  $\sigma^*$  – коэффициент стабильности ( $\sigma^*=1/4\pi^2$ );  $R_d$  – радиус дендритной сферы (см. рис. 2.4). Для условий свободного роста дендрита значения чисел Пекле определяли по уравнениям:

$$P_t = I\nu^{-1} \left( \frac{c^j}{L^j} \Delta T^* \right); \quad (P_c)_i = P_t \frac{a_L}{D_i},$$

где  $\Delta T^*$  – переохлаждение на вершине дендрита, на первом этапе  $\Delta T^*=t_L(C_L^0)-t(\tau)$ .

Рост вершин дендрита происходит до исчерпания междендритной жидкой фазы состава  $(C_L^0)_i$ . По мере роста перед ними скапливаются компоненты расплава



с концентрацией  $(C_L^*)_i$ . Толщина зоны накопления компонентов  $\delta_i$  для плоского фронта кристаллизации приближенно оценивается уравнением [1]:

$$\delta_i = \frac{2D_i^L}{v_d};$$

В связи с тем, что отношение толщины зоны  $\delta_i$  к конечному радиусу вершин дендрита  $R_k$  составляет  $\sim 1\%$  для углерода и  $< 1\%$  для Cr, Mn, Ni и др. элементов замещения, в модели использовали схему «жесткого» стыка дендритов, при которой накопление примеси на вершине не учитывали и переохлаждение  $\Delta T^*$  рассчитывали относительно начальной температуры ликвидуса  $\Delta T^* = t_L(C_L^0) - t(\tau)$ .

Окончание продольного роста вершин дендрита способствует активизации радиального утолщения появившихся боковых ветвей и одновременной их коалесценции действием капиллярных и диффузионных сил.

### **3.2. Формирование структурной микронеоднородности дендритных кристаллитов твердой фазы**

Структурная микронеоднородность, связанная с неоднородностью значений междущих промежутков в масштабе отдельного дендрита и его ближайших соседей, обусловлена тем, что процесс формирования боковых ветвей в большинстве случаев имеет нестационарный характер (по термическим и концентрационным условиям на вершине и боковой поверхности первичного ствола) и приводит к возникновению массива разно-ориентированных и неравномерно распределенных *начальных* боковых ветвей  $(\lambda_0)_i$  [1, 73]. Наблюдение роста дендритов (с использованием прозрачных препаратов - хлористого аммония и др.) показывает, что неоднородность значений  $(\lambda_0)_i$ , порождает интенсивную конкуренцию и остановку роста многих из них (так называемый «геометрический отбор» [1, 101], что отмечено также многими исследователями при закалке металлических сплавов в окрестности вершин дендритов.

Впоследствии сложная морфология дендритного кристаллита, отличающегося разнообразной по знаку и неоднородной по величине кривизной межфазной по-

верхности [101], вызывает развитие ряда механизмов диффузионной коалесценции боковых ветвей, связанных с их растворением/утолщением и слиянием под действием капиллярного эффекта Гиббса-Томсона (рис. 3.1) [32-39 и др.].

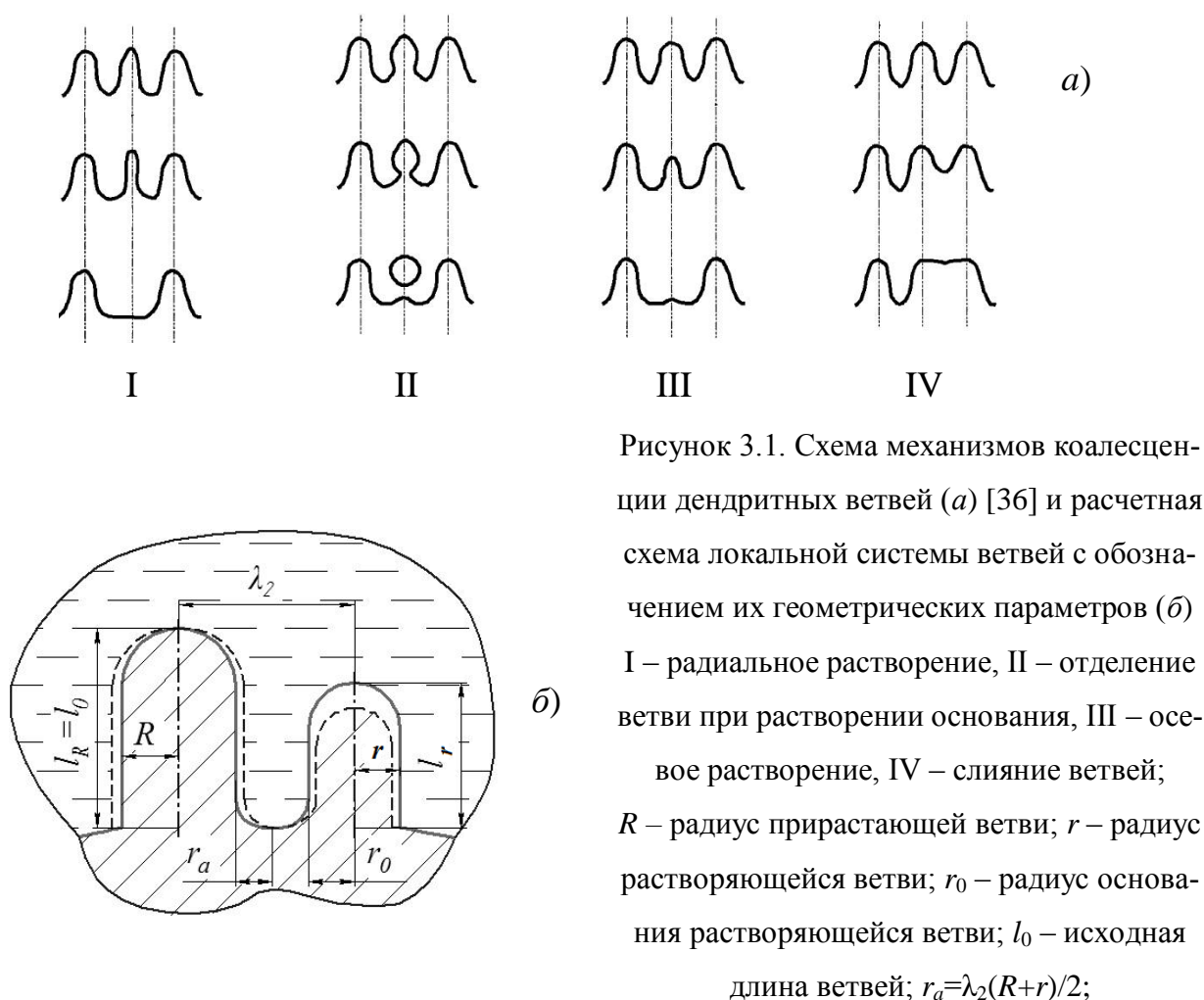


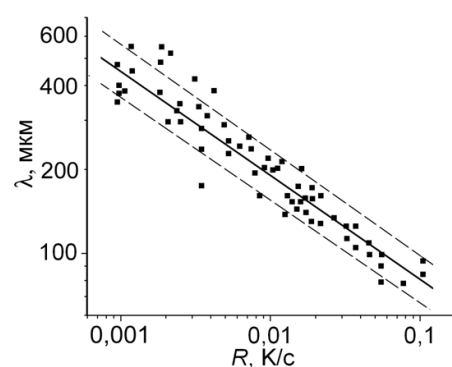
Рисунок 3.1. Схема механизмов коалесценции дендритных ветвей (а) [36] и расчетная схема локальной системы ветвей с обозначением их геометрических параметров (б)  
 I – радиальное растворение, II – отделение ветви при растворении основания, III – осевое растворение, IV – слияние ветвей;  
 $R$  – радиус прирастающей ветви;  $r$  – радиус растворяющейся ветви;  $r_0$  – радиус основания растворяющейся ветви;  $l_0$  – исходная длина ветвей;  $r_a = \lambda_2(R+r)/2$ ;

Использование теории коалесценции для описания процесса переноса твердой фазы от растворяющейся по толщине и по длине дендритной ветви  $a$  к прирастающей по толщине ветви  $R$  позволяет прогнозировать скорость изменения размеров ветвей  $R$ ,  $a$  и междущих промежутков  $\lambda_2$  в зависимости от условий кристаллизации, геометрии ветвей и др. (рис. 3.1, б).

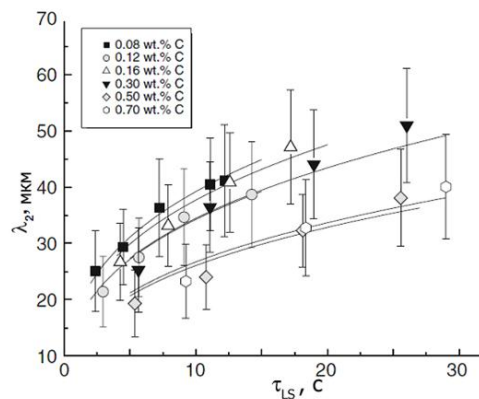
Рисунок 3.2 дает наглядное представление о характере разброса экспериментальных значений величины вторичных междущих промежутков относительно осредняющих их статистических моделей. Данные для стали с 0.14 % C (число точек 62,  $(\lambda_2)_{cp} = 237$  мкм;  $(\lambda_2)_{max} = 552$  мкм;  $(\lambda_2)_{min} = 78$  мкм) [13], описываемые уравнением  $(\lambda_2)_{cp} = 146C_R^{-0.386}$  (сплошная линия на рис. 3.3, а;  $\sigma_\lambda = \pm 104$  мкм; коэффициент

корреляции  $R^2=0.946$ ), образуют гистограмму распределения для отклонений опытных данных относительно линии регрессии  $\Delta\lambda$  (рис. 3.2, б) со среднеквадратичным размахом  $\sigma_{\Delta\lambda} = \pm 45$  мкм (пунктирные линии на рис. 3.2, а) в пределах от 80 до 440 мкм, что дает стандартный относительный разброс  $\sigma_{\Delta\lambda}/(\lambda_2)_{cp}$  около  $\pm 20$  %..

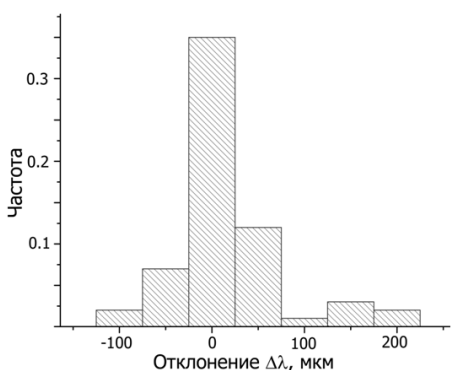
Разброс опытных значений для сплавов с содержанием углерода  $C=0.08-0.70$  % [11] на рис. 3.2, б относительно частных линий регрессии  $\lambda_2=K_2(\tau_{LS})^{1/3}$ , полученных с использованием 80-100 опытных точек (сводный коэффициент корреляции  $R^2=0.975$ ), характеризуется величиной  $\sigma_\lambda = \pm 8.1$  мкм при  $\lambda_{cp}= 32.7$  мкм, что составляет  $\pm 25$  %.



а)



б)



б) Рисунок 3.2. Распределение экспериментальных данных о величине междоусных промежутков (точки) относительно линий регрессии в зависимости от скорости охлаждения (а) [13] и продолжительности кристаллизации (б) [11] в сопоставлении с гистограммой отклонений  $\Delta\lambda$  (б) по данным [13]

На рис. 3.3 приведена микроструктура поперечного сечения цилиндрической заготовки  $\varnothing 80$  мм из стали 10ХГН2, залитой в кокиль. Для проведения металлографического анализа из данной заготовки были изготовлены образцы размером  $10 \times 10$  мм, располагавшиеся в трех характерных зонах: периферийной (примыкает к поверхности), осевой и промежуточной.

С помощью комплекса ТИХОМЕТ на специально подготовленных микрошлифах были измерены междусосные промежутки дендритных ветвей второго порядка  $\lambda_2$  (темные области), которые были сведены в гистограммы их распределения (рис. 3.3).

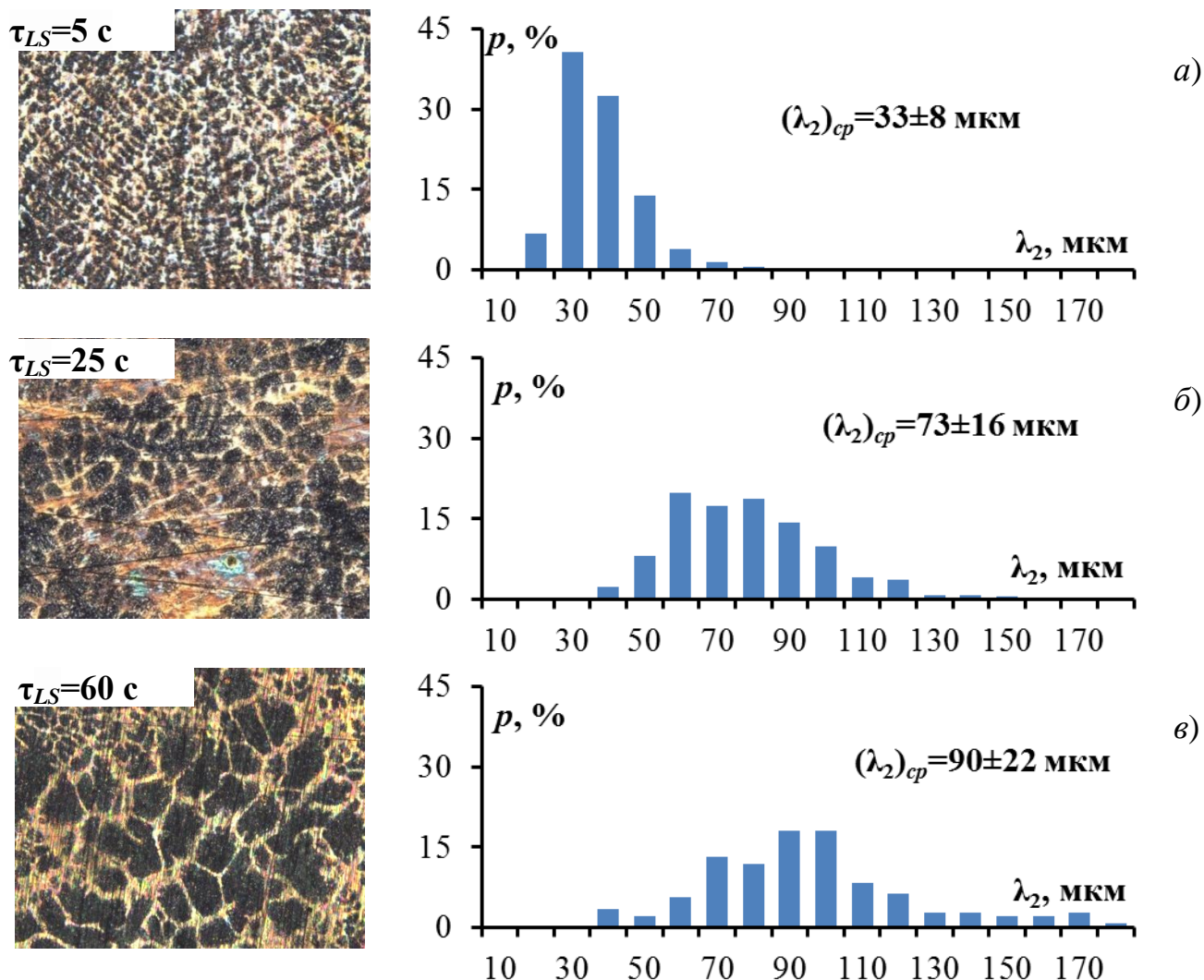


Рисунок 3.3. Результаты измерения междусосных промежутков в поверхностной (а), промежуточной (б) и осевой зоне (в) литой заготовки из стали 10XГН2.

При исследовании микрошлифов количество измерений составило: для зоны (а), близкой к поверхности, – 380; для промежуточной зоны (б) – 250; для осевой зоны (в) – 150. Как видно из представленных результатов, при увеличении соответствующей локальной продолжительности затвердевания  $\tau_{LS}$  с 5 до 60 с (определено путем компьютерного моделирования с помощью программного комплекса POLYCAST [66]) возрастает не только  $(\lambda_2)_{cp}$ , но и разброс экспериментальных значений, достигающий 140 мкм при  $(\lambda_2)_{cp} = 85$  мкм (в).

Приведенные результаты металлографических исследований демонстрируют значения коэффициента вариации  $V=\sigma_{\lambda}/(\lambda_2)_{\text{ср}}=\pm 0.20-0.25$ , характеризующие существенное отклонение экспериментальных данных от среднего значения. В связи с этим, рассмотренные ранее эмпирические (статистические) модели дендритной структуры (см. табл. 1.5-1.6), не отражающие реальную картину *структурной микронеоднородности*, должны быть дополнены математическим аппаратом, который позволяет сделать объектом анализа механизм ее развития и дать количественную оценку ее реальных масштабов.

### 3.3. Компьютерное моделирование структурной микронеоднородности при кристаллизации многокомпонентных сплавов

В соответствии с методом Монте-Карло [8-9] процесс коалесценции моделировали для локальной системы из двух соседних ветвей (рис. 3.1, б), исходную морфологию которых варьировали случайным образом. Это приводит к разнохарактерной эволюции  $(\lambda_2)_i$  различных систем с активизацией конкурирующих механизмов. Многократная компьютерная реализация процесса коалесценции для значительного количества локальных систем ( $\sim 10^3$ ) позволяет сформировать массив данных, совокупность которых описывает полученную дендритную структуру с помощью ее статистических параметров – среднего значения  $(\lambda_2)_{\text{ср}}$ , среднеквадратичного отклонения  $\sigma_{\lambda}$  и распределения плотности вероятности  $P$  (частоты) в форме гистограммы  $P(\lambda_2)$ .

Для моделирования основных *мезо-* и *микро-*масштабных параметров процесса коалесценции использовали базовую систему уравнений, описывающих неравновесную кристаллизацию многокомпонентных сплавов, представленную в разд. 2. На основе ранее указанных зависимостей в *мезо-*масштабе рассматривали процесс теплообмена металла с окружающей средой и выделения твердой фазы  $dm=f_S df_d + f_d df_S$  (по уравнениям (2.5) и (3.1)). В *микро-*масштабе рассчитывали изменение концентраций  $(C_L)_i$  в жидкой фазе по уравнению Онака (2.7). Данные параметры необходимы для дальнейшего анализа формирования структурной микро-

неоднородности, так как определяют температурные и концентрационные условия ее развития.

Компьютерное моделирование микроструктуры основывается на детерминированном решении задачи ее формирования с использованием следующего уравнения [66]:

$$d(\lambda_2^3)_K = \frac{\Gamma\tau}{\varphi_K} \frac{df_s}{\sum \frac{p_i(C_L)_i(1-(1-\omega_i k_i)f_s)}{D_i^L}}, \quad (3.4)$$

где  $\varphi$  – коэффициент вида модели (рис. 3.1, а);  $K$ – индекс механизма коалесценции.

Уравнение (3.4) позволяет учесть как прямое (физико-химические факторы, геометрия диаграммы состояния и др.), так и косвенное (теплофизические параметры процесса) влияние на междоусные промежутки  $\lambda_2$  кинетики изменения состава жидкой фазы  $(C_L)_i$  с учетом аддитивного вклада каждого  $i$ -го компонента.

Анализ атласа дендритных микроструктур стали [23] и результатов моделирования дендритного роста с использованием аппарата фазового поля [40-43] позволяет рассматривать представленные выше схемы механизмов коалесценции (рис. 3.1, а) как базовые при их возможном *раздельном и/или совместном* применении с учетом статистического распределения геометрических параметров дендритных ветвей (рис. 3.1, б), определяющих их локальную морфологию. Уравнения для расчета коэффициента  $\varphi_K$  для четырех представленных механизмов коалесценции выглядят следующим образом [36]:

$$\begin{aligned} \varphi_I &= (f_s)^2 \left[ \ln \left( 1 - \frac{r}{R} \right) + \frac{r}{R} \right]; & \varphi_{II} &= (f_s)^3 \left[ \ln \left( 1 - \frac{r_0}{r} \right) + \frac{r_0}{r} + \frac{1}{2} \left( \frac{r_0}{r} \right)^2 \right]; \\ \varphi_{III} &= \frac{1}{4} \left( \frac{r}{\lambda_2} \right)^2 \frac{l_0}{\lambda_2}; & \varphi_{IV} &= \frac{1}{2} \left( \frac{l_0}{\lambda_2} \right)^2 \frac{r_a}{\lambda_2} \left( 1 - \frac{r_a}{R} \right)^{-1}; \end{aligned} \quad (3.5)$$

где обозначения для набора геометрических параметров дендритной структуры  $F=(r, R, r_0, l_0, r_a \text{ и } \lambda_2)$  приведены на рис. 3.1.

Таким образом, алгоритм определения локального значения  $\lambda_2$  в процессе моделирования затвердевания мезо-элемента с определением количества твердой фазы  $m$  и покомпонентного состава жидкой фазы  $(C_L)_i$  включает:

1. задание нормального закона распределения исходных геометрических параметров  $F=(r, R, r_0, l_0, r_a \text{ и } \lambda_2)$  на основе реальных, либо вычислительных экспериментов;
2. выбор вероятных сопряженных механизмов коалесценции;
3. расчет коэффициентов  $\phi_K$  на основе формул (3.5) с последующим вычислением  $\lambda_2(\tau)$  на основе уравнения (3.4).

Поскольку исходные геометрические соотношения  $F$  принимают случайные значения  $F^*$  в определенном допустимом диапазоне  $F_{min} < F^* < F_{max}$ , можно рассчитать для выбранного механизма коалесценции и условий кристаллизации ( $\tau_{LS}$ ,  $C_L$ ,  $p$ ,  $k$ ,  $\omega$  и т.д.) соответствующий диапазон значений  $\lambda_2(F_{min}) < \lambda_2(F^*) < \lambda_2(F_{max})$ . Поскольку вероятность той или иной комбинации геометрических соотношений различна, то поставленные ей в соответствие значения из полученного диапазона  $\lambda_2$  образуют гистограмму  $P(\lambda_2)$ .

Данный подход к построению гистограммы  $P(\lambda_2)$  распределения  $\lambda_2$ , который включает расчет параметра  $\phi_K$ , зависящего от геометрии ветвей дендрита [36], был применен для решения *обратной задачи*. При решении задачи такого типа исходным пунктом для моделирования дендритной микронеоднородности является *конечная гистограмма* распределения междоузельных промежутков (рис. 3.3), известная по результатам исследования микроструктуры. Решение *обратной задачи* позволяет проанализировать влияния различных механизмов коалесценции на формирование гистограммы распределения промежутков  $\lambda_2$ .

Исходя из этого, компьютерную модель формирования микроструктуры дополнили путем отдельного учета возможных механизмов коалесценции дендритных ветвей в уравнении (3.6) за счет выбора *определенного* коэффициента  $\phi_K$ . Установление оптимальной величины данного коэффициента позволяет оценить адекватность используемой модели в связи с тем, что коэффициент  $\phi_K$  имеет ограниченный диапазон допустимых значений (разд. 3.4), выход за которые является

маловероятным. При этом если существенная часть гистограммы междоусных промежутков  $\lambda_2$  построена с использованием маловероятных значений коэффициента  $\phi_K$ , следует произвести коррекцию расчетной системы.

Анализ эффективности различных механизмов коалесценции связан с оценкой их конкурентного характера. Независимое влияние каждого из указанных механизмов оценивается (в соответствии с аппаратом нечетких множеств [102]) с помощью определения значения *коэффициентов принадлежности*  $\mu_K$ , которые соответствуют относительной величине вклада  $K$ -го механизма коалесценции в интегральную гистограмму. Определение  $\mu_K$  производится путем минимизации суммы квадратов отклонения частоты  $P$  расчетных значений  $(\lambda_2)_i^P$ , отвечающих  $K$ -му механизму коалесценции, от экспериментальных  $(\lambda_2)_i^Э$ :

$$F = \sum_N \left( \sum_n \mu_K P_K (\lambda_2)_i^P - P(\lambda_2)_i^Э \right)^2 \rightarrow \min ,$$

где  $N$  – число экспериментальных значений  $(\lambda_2)_i$ ;  $n$  – число учитываемых механизмов коалесценции.

При построении расчетной гистограммы  $(\lambda_2)_i^P$  для рассматриваемого  $K$ -го механизма коалесценции задавали морфологию дендритных ветвей с помощью базовых средних значений [36] безразмерных геометрических параметров  $F_K$ , в частности  $F_I(r/\lambda_2 \text{ и } r_0/r)$ ;  $F_{II}(r_0/\lambda_2 \text{ и } l_0/\lambda_2)$ ;  $F_{III}(l_0/\lambda_2 \text{ и } r/\lambda_2)$ ; соотношение  $F_{IV}=R/\lambda_2$  рассчитывали, исходя из текущего количества твердой фазы), указанных на рис. 3.1, б-в, и их вероятных предельных отклонений ( $\pm \Delta F_K$ ). Ввиду сложности и пока малой изученности *эволюции* морфологии дендритных ветвей в процессе коалесценции [36, 100 и др.] эти безразмерные геометрические параметры для всего периода кристаллизации принимали неизменными.

Частоту случайным образом выбранного геометрического параметра дендритных ветвей  $P(F_K)$  рассчитывали на основе *нормального закона распределения вероятностей* (рис. 3.4) [103]. Вероятность парной комбинации геометрических параметров определяли путем перемножения двух частных вероятностей; для модели IV, где используются три геометрических параметра, величину отношения  $r_r/R$  условно принимали постоянной. Набор частот  $P(F_K)$ , полученных для случайной



выборки геометрических соотношений, определяет значения частоты  $P(\varphi_K)$  для коэффициентов  $\varphi_K$  (рис. 3.5), вычисляемых согласно формулам (3.3), а также частоты  $P(\lambda_2)^P$  для расчетных значений  $(\lambda_2)_i^P$  (рис. 3.6), соответствующих уравнению (3.2).

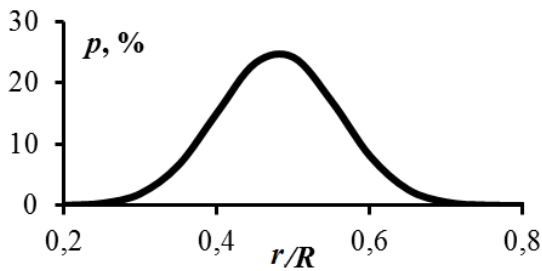


Рисунок 3.4. Нормальное распределение частоты геометрического параметра  $r/R$  ( $r/R=0.48\pm0.08$ )

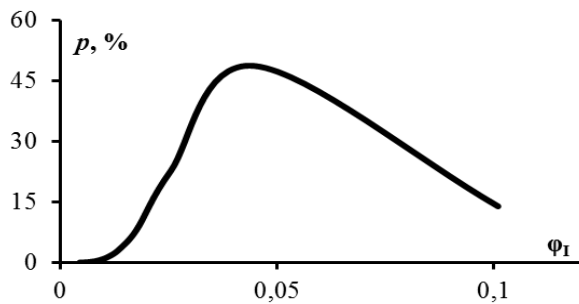


Рисунок 3.5. Гистограмма распределения коэффициента  $\varphi_1$  на основе нормального распределения частоты геометрических соотношений  $r/\lambda_2$  (рис. 3.4) и  $r_0/r$  (при  $r/\lambda_2=0.48\pm0.08$  и  $r_0/r=0.48\pm0.08$ )

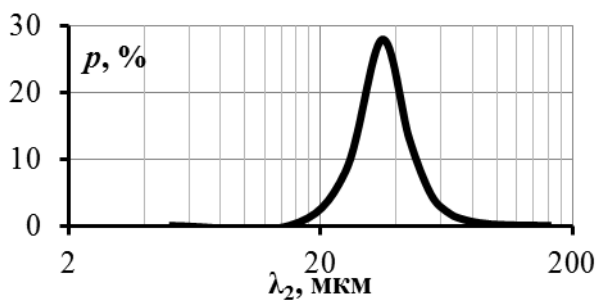


Рисунок 3.6. Гистограмма распределения  $\lambda_2$  для I-го механизма коалесценции (на основе рис. 3.5).

На рис. 3.7-3.9 представлен характерный набор частных гистограмм  $P(\lambda_2)_K$ , рассчитанных согласно изложенной методике, для I-IV моделей коалесценции с соответствующими диапазонами  $(\lambda_2)_i^P$  изменения, отвечающими условиям их независимой реализации. Совмещение частных гистограмм распределения  $(\lambda_2)_i^P$  (рис. 3.7-3.9) образует широкую неразрывную зону вероятных значений частоты, зависящих от геометрических параметров ветвей дендрита, определяемых условиями кристаллизации, теплофизическими и физико-химическими параметрами сплава, при различных значениях  $(\lambda_2)_{cp}^P$  и соответствующего размаха  $\sigma_\lambda$  для каждого механизма коалесценции.

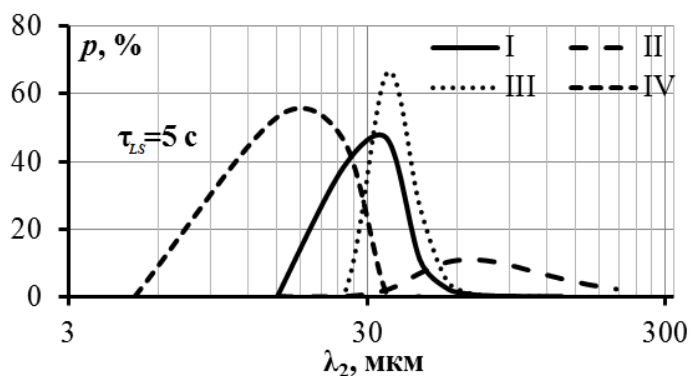


Рисунок 3.7. Расчетные гистограммы распределения  $\lambda_2$  для механизмов I-IV в поверхностной зоне испытательного образца (рис. 3.3) при  $r/R=0.55\pm0.08$ ;  $r_0/r=0.52\pm0.07$ ;  $l_0/\lambda_2=2.00\pm0.30$ ;  $r_r/\lambda_2=0.05\pm0.01$ ;  $R/r_a=6.00$ .

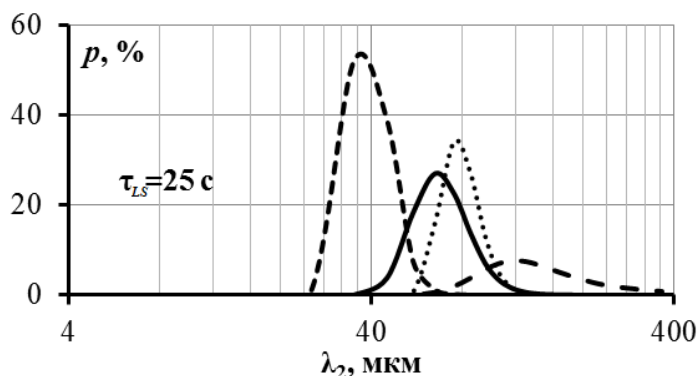


Рисунок 3.8. Расчетные гистограммы распределения  $\lambda_2$  для механизмов I-IV в промежуточной зоне испытательного образца (рис. 3.3) при  $r/R=0.50\pm0.09$ ;  $r_0/r=0.50\pm0.09$ ;  $l_0/\lambda_2=2.00\pm0.13$ ;  $r_r/\lambda_2=0.05\pm0.01$ ;  $R/r_a=6.00$ .

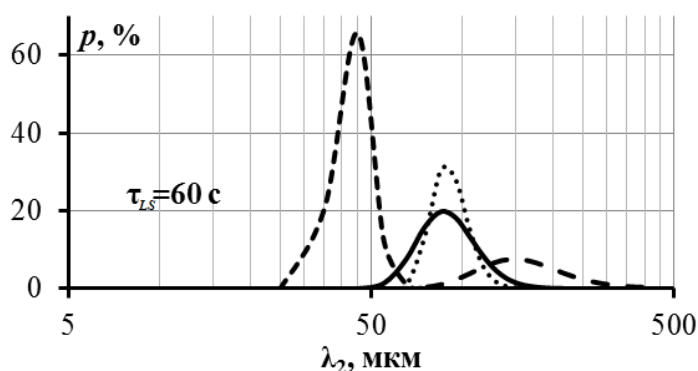


Рисунок 3.9. Расчетные гистограммы распределения  $\lambda_2$  для механизмов I-IV для осевой зоны испытательного образца (рис. 3.3) при  $r/R=0.55\pm0.11$ ;  $r_0/r=0.52\pm0.09$ ;  $l_0/\lambda_2=3.00\pm0.40$ ;  $r_r/\lambda_2=0.05\pm0.03$ ;  $R/r_a=6.00$ .

Переход от набора частных гистограмм  $P(\lambda_2)_K$  (рис. 3.7-3.9) к сводной (комбинированной)  $\sum_{(K)} P(\lambda_2)_K$ , максимально близко описывающей экспериментальную гистограмму  $P(\lambda_2)$  (см. рис. 3.3), связан с оценкой совместного и конкурентного характера протекания различных механизмов коалесценции на основе вычисления коэффициентов принадлежности  $\mu_K$  во всем измеренном диапазоне значений  $\lambda_2$ . Полученные значения этих коэффициентов, осредненные за период кристаллизации ( $\bar{\mu}_I = 0.8-0.9$ ;  $\bar{\mu}_{II} \approx \bar{\mu}_{III} = 0.05$ ;  $\bar{\mu}_{IV} = 0.05-0.15$ ) [102], показывают, что для исследованных образцов определяющую роль играет радиальное растворение при вто-

ростепенном вкладе других механизмов коалесценции (без учета осевого растворения).

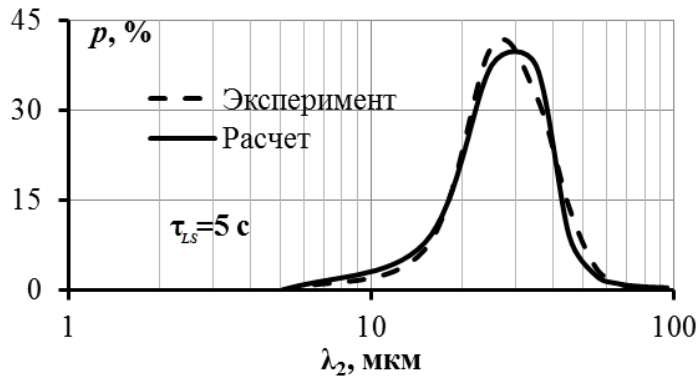


Рисунок 3.10. Экспериментальная (пунктир) и комбинированная (линия) гистограммы распределения  $\lambda_2$  в поверхностной зоне опытного образца  
(см. рис. 3.3, а)  
 $\bar{\mu}_I = 0.8$ ;  $\bar{\mu}_{II} = 0.05$ ;  $\bar{\mu}_{IV} = 0.15$

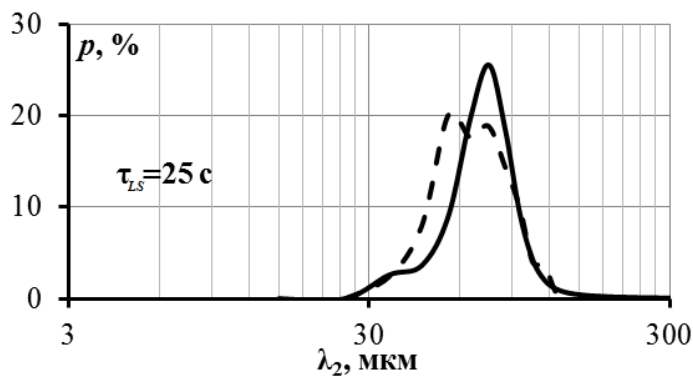


Рисунок 3.11. Экспериментальная (пунктир) и комбинированная (линия) гистограммы распределения  $\lambda_2$  в промежуточной зоне опытного образца  
(см. рис. 3.3, б)  
 $\bar{\mu}_I = 0.9$ ;  $\bar{\mu}_{II} = 0.05$ ;  $\bar{\mu}_{IV} = 0.05$

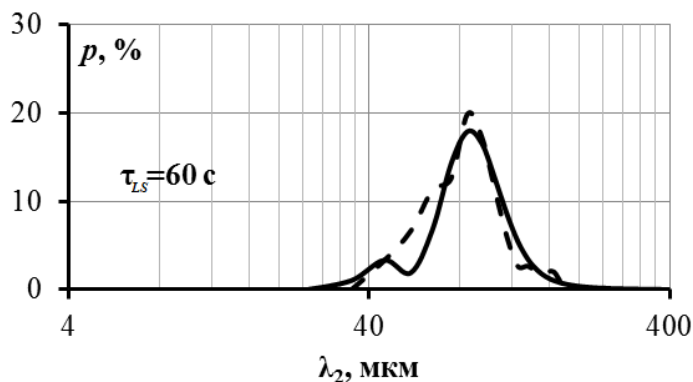


Рисунок 3.12. Экспериментальная (пунктир) и комбинированная (линия) гистограммы распределения  $\lambda_2$  в осевой зоне опытного образца  
(см. рис. 3.3, в)  
 $\bar{\mu}_I = 0.9$ ;  $\bar{\mu}_{II} = 0.05$ ;  $\bar{\mu}_{IV} = 0.05$

Полученные результаты (рис. 3.10-3.12) свидетельствуют о правомерности изложенной модели для расчета величины  $\lambda_2$  с использованием коэффициентов  $\phi_K$ , отражающих влияние преобладающих геометрических параметров дендритных ветвей.

Как видно на рис. 3.7-3.9, формирование широких междусных интервалов связано с реализацией I-III механизмов, при этом механизм II выполняет лишь вспомогательную функцию, так как растворение основания ветви приводит к появлению дополнительной вершины, коалесценция которой протекает уже по меха-

низмам I, III или IV. Малые значения  $\lambda_2$  возникают при реализации IV механизма, что свидетельствует об условиях, затрудняющих перенос вещества с одного участка дендрита на другой.

### Прогнозирование структурной микронеоднородности

При решении *прямой задачи* моделирования дендритной микронеоднородности методом Монте-Карло исходным пунктом является расчетный массив значений начальных междуосных промежутков  $(\lambda_0)_i$ , возникших на I этапе формирования дендритной структуры. Его превращение в конечное распределение междуосных промежутков  $(\lambda_2)_i$  моделировали на последующем этапе путем анализа кинетики диффузионного переноса углерода – наиболее подвижного компонента, описываемого уравнениями, предложенными в [36-37, 68], для локальной расчетной системы, образуемой соседними вторичными ветвями (см. рис. 3.1, б):

$$\text{механизмы I-IV:} \quad \frac{dR}{d\tau} = \frac{rl_r}{R} \frac{dr}{d\tau} + \frac{r^2}{2R} \frac{dl_r}{d\tau}; \quad \frac{dl_R}{d\tau} = 0; \quad (3.6)$$

$$\text{механизм I:} \quad \frac{dr}{d\tau} = - \frac{\Gamma D_C^L}{p_c(C_L)_c(1-k_c^j)\lambda_2} \left( \frac{1}{r} - \frac{1}{R} \right); \quad (3.7)$$

$$\text{механизм II:} \quad \frac{dr_0}{d\tau} = - \frac{\Gamma D_C^L}{p_c(C_L)_c(1-k_c^j)r_0} \left( \frac{1}{r_0} - \frac{1}{r} \right); \quad (3.8)$$

$$\text{механизм III:} \quad \frac{dl_r}{d\tau} = - \frac{2\Gamma D_C^L}{p_c(C_L)_c(1-k_c^j)r} \left( \frac{2}{r} - \frac{1}{R} \right); \quad (3.9)$$

$$\text{механизм IV:} \quad \frac{dl_r}{d\tau} = \frac{2\Gamma D_C^L}{p_c(C_L)_c(1-k_c^j)r} \left( \frac{2}{r} - \frac{1}{R} \right); \quad (3.10)$$

Их начальные морфологические характеристики задавали на основе *случайного* набора, включающего параметр  $(\lambda_0)_i$  и средние значения безразмерных геометрических параметров  $F_K(r/R$  и  $r_0/r$ ;  $r_0/\lambda_2$  и  $l_0/\lambda_2$ ;  $l_0/\lambda_2$ ,  $r_r/\lambda_2$  и  $R/r_a$ ), а также их вероятные предельные отклонения (при нормальном законе распределения). Для каждой из более  $2-3 \cdot 10^3$  подобных расчетных систем определяли длительность полного осевого и/или радиального растворения одной из ветвей с наибольшей

кривизной с учетом последовательного выделения твердой фазы и вызванного этим изменения геометрии ветвей.

Таким образом, моделирование статистического ансамбля междоусных промежутков дендритных ветвей второго порядка основывается на параллельном анализе морфологической эволюции большого количества пар ветвей (локальных систем) при одинаковых для всех систем температурных, кристаллизационных и концентрационных условиях, изменяющихся по ходу кристаллизации.

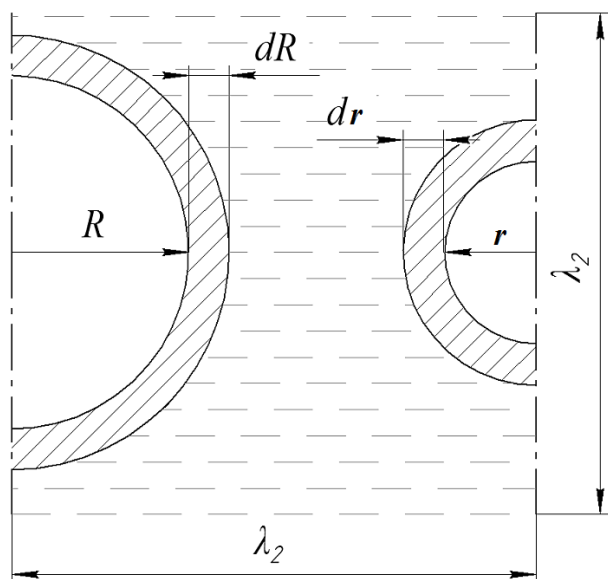


Рисунок 3.13. Кристаллизационный прирост твердой фазы в локальной системе

Исходное состояние отдельной локальной системы определяется текущей температурой ( $t$ ), относительным количеством твердой фазы ( $m$ ), средней концентрацией компонентов сплава в жидкой фазе  $(C_L)_i$ , начальными геометрическими параметрами ветвей (длины  $l_R$ ,  $l_r$ ; радиусы  $R$ ,  $r$ ; междоусное расстояние  $\lambda_2$ ). Прирост твердой фазы  $df_s$  при кристаллизации расплава для каждой локальной системы учитывали путем пересчета  $df_s$  в изменение радиусов ветвей  $dR$  и  $dr$  (рис. 3.13) по следующему соотноше-

нию: 
$$dR = dk = \frac{\lambda_2^2}{\pi(R + \kappa)} df_s.$$

Если значения  $t$ ,  $m$ , и  $C_L$  поддаются расчету в ходе моделирования с помощью базового модуля кристаллизационной задачи (см. разд. 2), то используемые при решении уравнений (3.5-3.10) геометрические параметры дендритных ветвей, несмотря на актуальность их исследования, до сих пор не имеют должной количественной оценки и задаются весьма приближенно [36-37, 68].

Данное обстоятельство связано с техническими сложностями измерения формы, длины, радиусов кривизны поверхности ветвей второго порядка. Для количественного определения величин геометрических параметров ветвей были про-

ведены исследования фотографий микроструктуры низколегированных сталей (разд. 3.4 – рис. 3.14), представленных в [23].

С помощью вышеизложенной методики моделирования структурной микroneоднородности рассчитывали коалесценцию ветвей для каждой отдельной локальной системы с учетом для всех систем тепловых, кристаллизационных и диффузионных процессов. Посредством решения системы уравнений (3.1-3.10) анализировали эволюцию массива значений  $(\lambda_2)_i^P$ . При этом в качестве локальной продолжительности процесса в уравнении (3.4) использовали полученную продолжительность коалесценции  $\tau$  для того механизма, с помощью которого осуществлено растворение соответствующей ветви. Проверка адекватности разработанной модели и анализ закономерностей формирования структурной микroneоднородности реализованы в разд. 3.5.

### **3.4. Исследование параметров дендритной структуры**

Одной из центральных проблем информационного обеспечения модели структурной микroneоднородности является задание геометрических параметров дендритных ветвей, которые определяют характер и динамику их коалесценции и, соответственно, геометрию гистограммы распределения междуветевых промежутков  $P(\lambda_2)$ . Чем разнообразнее начальная морфология ветвей, тем более неоднородной становится конечная дендритная структура закристаллизовавшегося металла. Следовательно, при анализе формирования микроструктуры необходимо использовать достоверные значения геометрических параметров дендритных ветвей (разд. 3.3), единичные значения которых в литературе приведены весьма редко [36] и какие-либо статистические оценки не публиковались.

С целью получения соответствующих данных были проанализированы фотографии микрошлифов низколегированных сталей с перитектическим превращением (рис. 3.15 – сплавы № 1-5) и без превращения (рис. 3.15 – сплавы № 6-7), представленные в сводном атласе микроструктур сталей [23]. Для минимизации по-

грешности измерений исследовали дендритные ветви второго порядка, оси которых находятся в плоскости шлифа.

В качестве основных геометрических параметров микроструктуры измеряли (рис. 3.14): радиус ветви в центральной части ( $R$ ); радиус основания ( $r_0$ ); длину ветвей ( $L$ ); величину междоосных промежутков ( $\lambda_2$ ). Величину радиуса растворя-

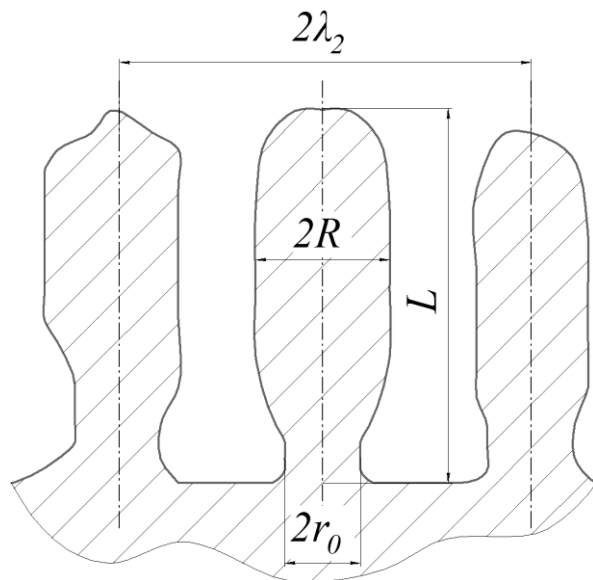


Рисунок 3.14. Схема измерения и обозначения геометрических параметров дендритных ветвей

ющейся ветви ( $r$ ) определяли на основе сопоставления радиусов ( $R$ ) двух близкорасположенных друг к другу ветвей. При этом в качестве радиуса ( $r$ ) брали наименьшее значение из ( $R$ ). Величину  $\lambda_2$  определяли как половину расстояния между осями близлежащих ветвей по разные стороны от исследуемой центральной ветви. Сводные результаты определений представлены в табл. 3.1.

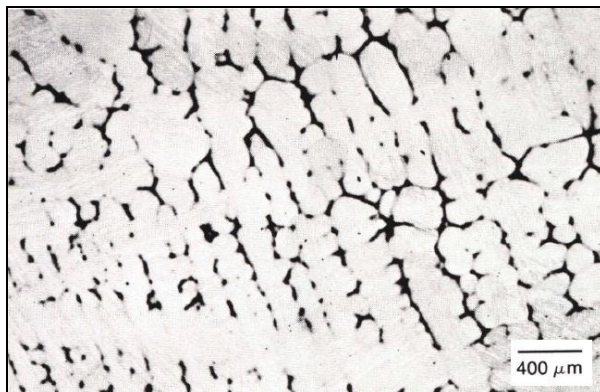
Для определения температуры ликвидуса, доли твердой фазы и локальной продолжительности затвердевания

от температуры ликвидуса до температуры закалки  $T_q$  (при известной скорости охлаждения перед закалкой  $C_R=0.5$  K/c) для указанных сплавов проведено термодинамическое моделирование с помощью программы «POLYTHERM». Как видно из результатов, представленных в табл. 3.2, полученные данные о величине вторичных междоосных промежутков  $\lambda_2$  коррелируют с химическим составом сплава, что выражено в табл. 3.2 через кинетический коэффициент  $K_2$ .

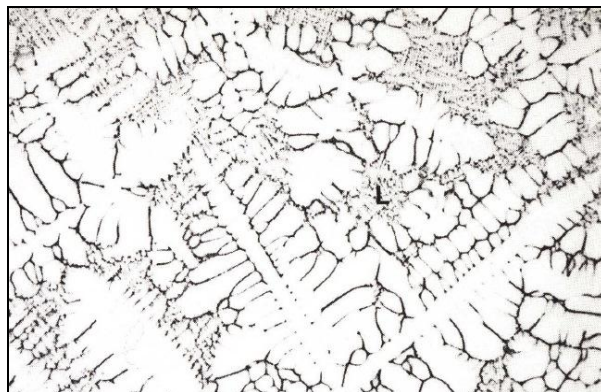
Изменение величины данного коэффициента в уравнении вида  $\lambda_2=K_2\tau^{0.33}$  для разных сплавов свидетельствует о существенной зависимости кинетики коалесценции от скрытых в вышеуказанном уравнении для  $\lambda_2$  факторов, в первую очередь – от состава стали (см. табл. 1.7).



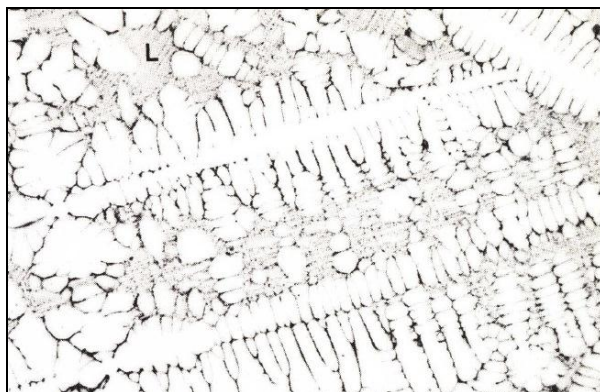
**№1 – 10XH3M**



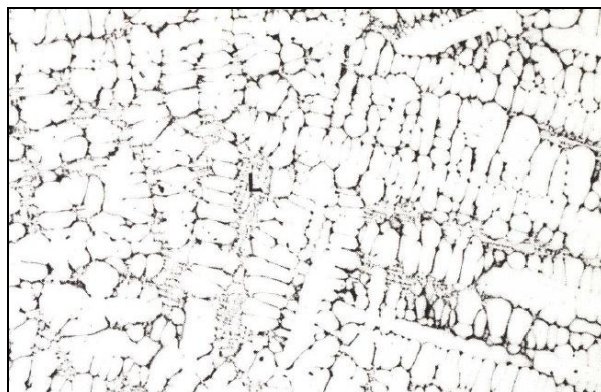
**№2 – 10Г2**



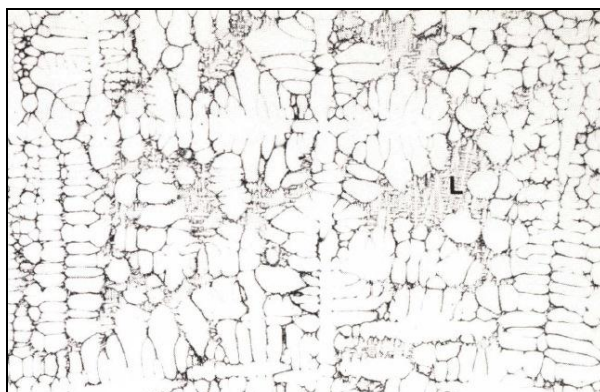
**№3 – 20Г2**



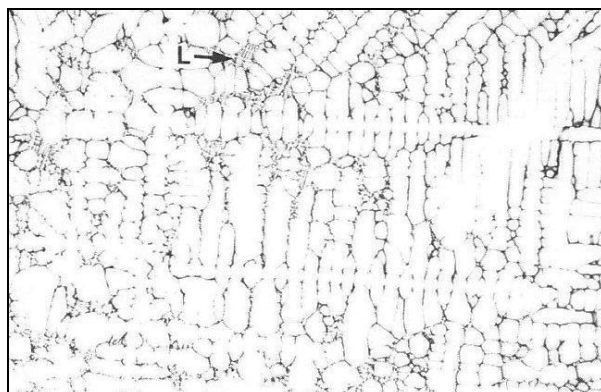
**№4 – 20Г2**



**№5 – 20ХГН**



**№6 – 30ХГНМ**



**№7 – 70Г**



Рисунок 3.15. Микрофотографии дендритной структуры низколегированных сталей, закаленных на заключительной стадии кристаллизации (при  $m > 0.7$ ) [23]  
(состав сталей указан в табл. 3.1).



Таблица 3.1.

## Результаты металлографического исследования дендритной структуры низколегированных сталей

№ стали	Марка стали	Исходные данные [23]				Измеренные параметры ( $X$ )								
		Состав, масс. %	Температура заковки, $T_q, ^\circ\text{C}$	Скорость охлаждения, К/с	Фазовый состав	Кол-во измерений	Доля твердой фазы, $m(T_q)^*$	$\lambda_2$ , мкм	$R$ , мкм	$r/R$	$r_0/r$	$L$ , мкм	$L/\lambda_2$	$L/R$
№1	10ХНЗМ	0.10C-0.28Si-0.57Mn-1.14Cr-3.3Ni-0.14Mo	1495	0.5	$L+\delta$	34	0.67	171±30	63±17	0.80±0.10	0.79±0.18	386±210	2.7±1.1	5.5±2.0
			1400	0.5	$\gamma$	22	1.00	209±28	86±23	0.75±0.14	0.77±0.16	534±202	2.3±1.2	4.9±1.7
			1400	2.0	$\gamma$	68	1.00	93±29	42±12	0.85±0.09	0.89±0.18	329±144	2.4±1.5	5.9±3.4
№2	10Г2	0.11C-0.12Si-1.25Mn	1510	0.5	$L+\delta$	49	0.82	120±28	54±20	0.76±0.15	0.71±0.20	272±85	2.3±0.9	5.0±1.4
№3	20Г2	0.18C-0.44Si-1.26Mn	1500	0.5	$L+\delta$	82	0.41	91±18	47±14	0.72±0.15	0.86±0.23	320±139	3.3±1.3	6.6±1.9
№4	20Г2	0.19C-0.40Si-1.42Mn	1498	0.5	$L+\delta$	151	0.42	96±21	47±15	0.75±0.14	0.71±0.19	229±67	2.4±0.7	4.9±1.4
№5	20ХГН	0.20C-0.25Si-0.90Mn-0.81Cr-1.05Ni	1495	0.5	$L+\delta$	135	0.45	89±20	47±14	0.73±0.15	0.76±0.17	240±75	2.6±0.9	5.1±1.5
№6	30ХГНМ	0.29C-0.22Si-0.52Mn-1.02Cr-3.2Ni-0.25Mo	1480	0.5	$L+\delta$	84	0.52	96±20	53±15	0.79±0.17	0.75±0.22	302±171	2.7±1.7	5.4±2.4
№7	70Г	0.69C-0.23Si-0.72Mn	1455	0.5	$L+\gamma$	127	0.44	97±20	47±13	0.79±0.14	0.82±0.18	205±56	2.3±0.6	4.6±1.3

Примечание: для измеренных параметров  $X_i$  приведены средние значения  $(X_{cp})_i$  и среднеквадратичные отклонения от среднего  $\sigma(X_i)$ ;

\* - рассчитано с помощью программы POLYTHERM.

Таблица 3.2.

Расчетные и эмпирические данные для оценки кинетики коалесценции  
в исследованных сплавах

Марка стали	Температура ликвидуса	Температура закалки	$t_L(C_L^0) - t_q, \text{ К}$	Междоосные промежутки	Продолжитель- ность кристалли- зации до закалки	Коэффициент эмпирического уравнения
	$t_L(C_L^0), ^\circ\text{C}$	$t_q, ^\circ\text{C}$		$(\lambda_2)_{cp}, \text{ мкм}$	$\tau = \frac{t_L(C_L^0) - t_q}{C_R}, \text{ с}$	$K_2 = \frac{(\lambda_2)_{cp}}{\tau^{0.33}},$
10ХНЗМ	1506	1495	11	171	22	62
10Г2	1521	1510	11	120	22	43
20Г2	1510	1500	10	91	20	34
20Г2	1509	1498	11	96	22	35
20ХГН	1507	1495	12	86	24	31
30ХГНМ	1493	1480	13	96	26	33
70Г	1476	1455	21	97	44	28

Одним из наиболее важных параметров геометрии дендритных ветвей является их длина  $L$ , которая определяет длительность коалесценции по III и IV механизму (рис. 3.1, а). Сравнительный анализ результатов металлографического исследования длины ветвей (табл. 3.1) показывает, что увеличение скорости охлаждения (сталь №1) в 4 раза приводит снижению среднестатистической длины на 40 % и снижению среднеквадратичного отклонения  $\sigma(L)$  на 30 %. В то же время влияние химического состава на длину ветвей  $L$  обнаружить не удалось, что может быть следствием зависимости этого параметра от таких факторов, как объемная плотность центров кристаллизации, макроликвация, механическое воздействие расплавленного металла и др.

При расчете коалесценции по III и IV механизму используется отношение длины коалесцирующей ветви к междоосному промежутку  $L/\lambda_2$ , которое в работе [36] принималось равным  $L/\lambda_2=3$ . По результатам измерения обобщенное для всех исследованных сплавов среднестатистическое отношение для твердо-жидкого состояния составило  $L/\lambda_2=2.6$  при  $\sigma(L/\lambda_2)=\pm 1.3$ . Таким образом, длина ветвей по отношению к их междоосным промежуткам может принимать значения в очень ши-

роком диапазоне (Приложение 1). Данный результат важен, так как использование фиксированного значения  $L/\lambda_2$  является очень условным и накладывает на модель существенные ограничения.

Не менее значимы при анализе коалесценции радиальные размеры ветвей. Радиус центральной части ветви  $R$  определяет скорость радиального растворения ее ствола по I механизму. Радиус основания  $r_0$  влияет на скорость отделения основной части ветви от ствола дендрита по II механизму, являясь вспомогательным по отношению к остальным механизмам.

При анализе фотографий микрошлифов исследованных сталей возникает вопрос об адекватности использованной модели радиального утолщения дендритных ветвей в период кристаллизации, так как при наличии большого количества жидкой фазы ( $m^L \approx 0.6 \div 0.2$ ) многие ветви уже смыкаются с соседними ветвями ( $2R/\lambda_2 \approx 1$ ) и продолжают продольный рост в сторону жидкой фазы.

Использованная цилиндрическая модель роста ветвей в комплексе с уравнением Колмогорова (2.5) (см. разд. 2.1) позволяет с допустимой погрешностью учесть всю статистическую неоднородность реальных ветвей с неравномерной кривизной поверхности и различной пространственной ориентацией.

### **3.5. Компьютерный анализ структурной микронеоднородности**

#### **Скорость смыкания осей дендритов**

На примере стали 20ХГН проанализирована кинетика роста вершин дендритов до их взаимного смыкания в зависимости от интенсивности теплоотвода. Согласно уравнению (3.2), скорость  $v_d$  зависит от переохлаждения металла относительно температуры ликвидуса междендритной жидкой фазы.

Как видно из рис. 3.16 и табл. 3.3, рост осей дендритов происходит с переменной скоростью и радиусом кривизны вершин  $R_{tip}$ , что приводит, в соответствии с уравнением (3.11) [65], к появлению неоднородно распределенных по оси дендрита боковых ветвей  $(\lambda_2)_0$ .

$$\sqrt{2\xi} \left( \frac{\kappa^2 - 1}{2\xi} + \left( \frac{2\pi}{\xi} \right)^2 \right) = \frac{v_d R_{tip}^2}{\Gamma} \sum \frac{p_i (1 - k_i) ((C_L^0)_i)}{D_i^L}, \quad \xi = \frac{(\lambda_2)_0}{R_{tip}}, \quad (3.11)$$

где  $\kappa$  – волновое число ( $\kappa=4$  для решетки с кубической симметрией).

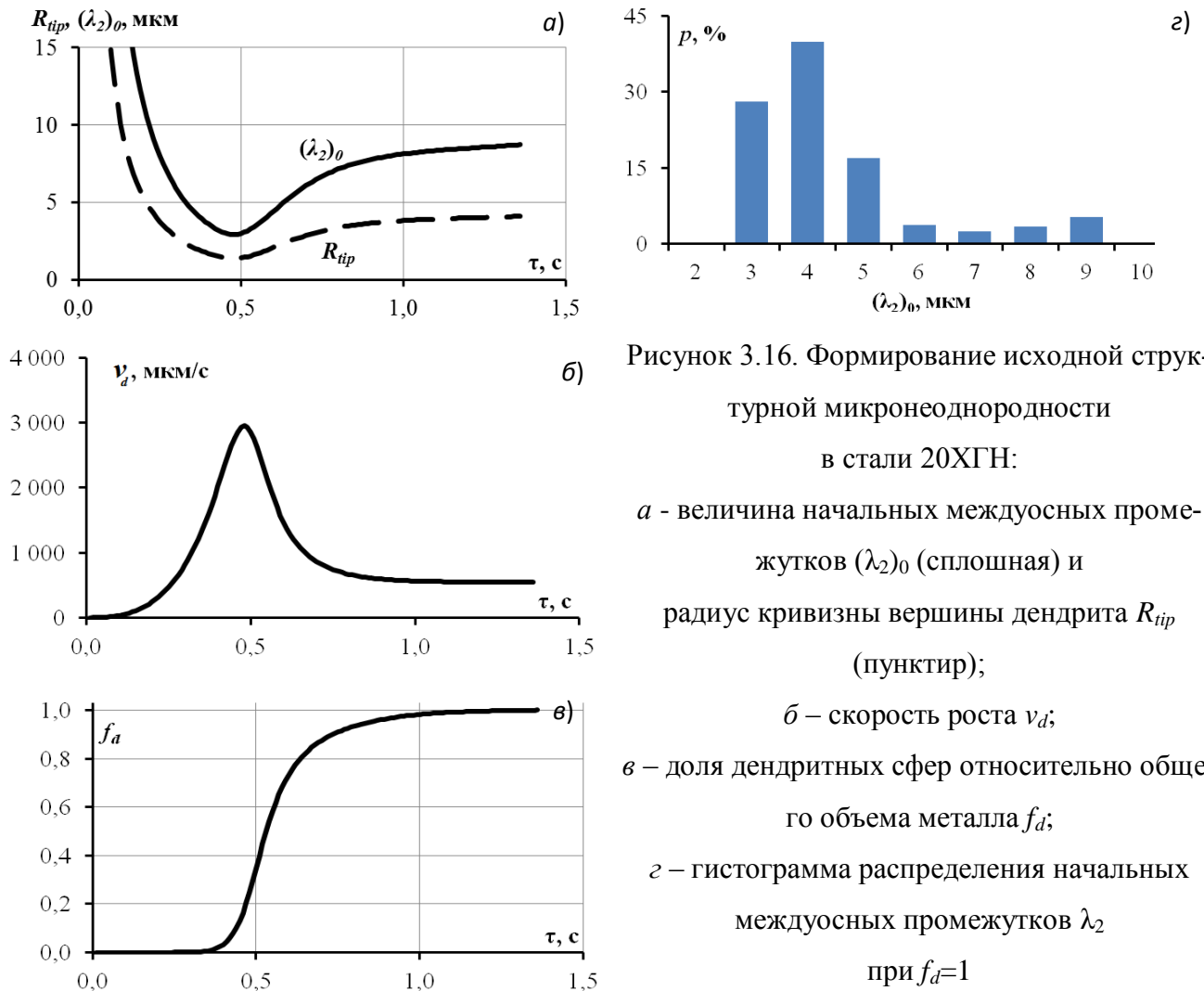


Рисунок 3.16. Формирование исходной структурной микронеоднородности в стали 20ХГН:

*a* – величина начальных междусных промежутков  $(\lambda_2)_0$  (сплошная) и радиус кривизны вершины дендрита  $R_{tip}$  (пунктир);

*б* – скорость роста  $v_d$ ;

*в* – доля дендритных сфер относительно общего объема металла  $f_d$ ;

*г* – гистограмма распределения начальных междусных промежутков  $\lambda_2$  при  $f_d=1$

В условиях неравновесной кристаллизации, когда скорость роста вершин дендрита зависит от термического переохлаждения, до наступления рекалесценции происходит интенсивное увеличение скорости роста вершин (рис. 3.16, б), сопровождающееся уменьшением радиуса кривизны вершины дендрита (рис. 3.16, а). Вместе с тем, начальные междусные промежутки находятся в пропорциональной зависимости от радиуса кривизны вершины дендрита, что приводит к появлению большого количества малых по  $(\lambda_2)_0$  дендритных ветвей второго порядка.

Таким образом, скорость смыкания вершин является одним из факторов, обуславливающих дисперсность исходной дендритной структуры.

Таблица 3.3.

Параметры кристаллизации на момент образования  
непрерывного скелета твердой фазы

$\alpha$ , Вт/м <sup>2</sup> К	$\Delta T$ , К	$\tau(f_d=1)$ , с	$f_s$	$(\lambda_2)_{cp}$ , мкм
20	1.0	16.4	0.16	10.6
40	1.3	7.7	0.15	8.1
80	1.5	3.3	0.12	7.8
150	2.0	1.3	0.08	5.2
300	2.8	0.5	0.04	4.5

Учитывая зависимость размера междоузных промежутков  $(\lambda_2)_0$ , влияющих на объемную плотность дендритных ветвей  $N_S$  от скорости роста  $v_d$ , можно заключить, что этап рекалесценции начинается в тот момент, когда суммарная площадь поверхности дендритов достигает такой величины, при которой суммарное выделение скрытой теплоты кристаллизации за счет выделения твердой фазы может полностью компенсировать теплоотвод.

### Эволюция микроструктуры

Для анализа эволюционного развития дендритной неоднородности произведено моделирование изменения статистических характеристик ансамбля дендритных ветвей при кристаллизации стали 20ХГН (рис. 3.15) при неизменной величине коэффициента теплоотдачи. Результаты расчета приведены на рис. 3.17 и в табл. 3.4.

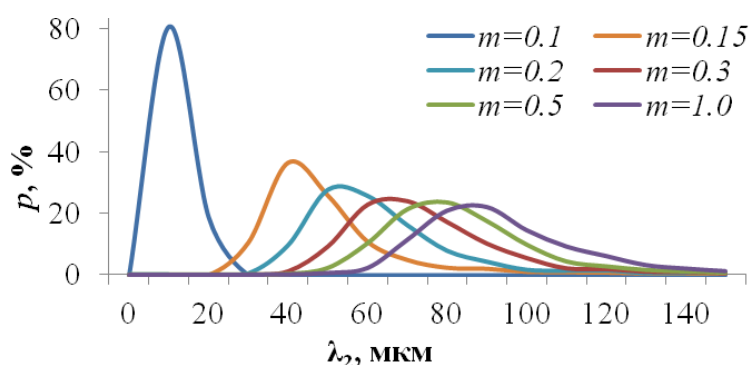


Рисунок 3.17. Эволюция гистограммы распределения междоузных промежутков  $(\lambda_2)$  при различных долях твердой фазы ( $m$ )

Таблица 3.4.

Изменение параметров структурной микронеоднородности  
в процессе кристаллизации мезо-объема стали 20ХГН

Параметр	Доля твердой фазы, $m$					
	0.1	0.15	0.2	0.3	0.5	1
$\tau$ , с	2.4	3.5	4.7	7.0	11.8	27
$(\lambda_2)_{cp}$ , мкм	8.5	52.1	65.1	79.1	87.9	98.2
$\sigma_\lambda$ , мкм	1.9	21.7	22.3	26.2	25.8	27.0

Характер представленной эволюции гистограммы распределения междоусных промежутков  $\lambda_2$  свидетельствует о существенном различии в интенсивности увеличения средних междоусных промежутков по ходу кристаллизации.

Согласно расчету, наибольшая интенсивность характерна для начального этапа коалесценции после смыкания осей дендритов ( $f_d=1$ ), поскольку влияние капиллярных сил существеннее проявляется при малой величине радиуса дендритных ветвей и их междоусного промежутка, определяющего путь диффузии. Соответственно этот процесс обладает затухающей кинетикой, что подтверждается теоретическим анализом кинетики в модели Лифшица-Слезова-Вагнера [104] и результатами численных экспериментов на моделях сферической формы [105].

#### Конечные междоусные промежутки ветвей второго порядка

Сопоставление обобщенной зависимости средних промежутков  $(\lambda_2)_{cp}$  как с уравнениями эмпирического типа (см. разд. 1.1.3, табл. 1.6), так и аналитическими решениями теории коалесценции [38, 68 и др.], показывает хорошее совпадение.

Как видно по результатам моделирования неоднородности микроструктуры в стали 20ХГН (рис. 3.18), экспериментальные данные для которой представлены в табл. 3.1, расчетные значения междоусных промежутков  $(\lambda_2)_{cp}$  аппроксимируются степенной зависимостью с коэффициентом  $p$  в уравнении  $(\lambda_2)_{cp}=K\tau_{LS}^f$  близким к теоретически обоснованной величине 0.33 и коэффициентом корреляции  $R^2$  более 0.99.

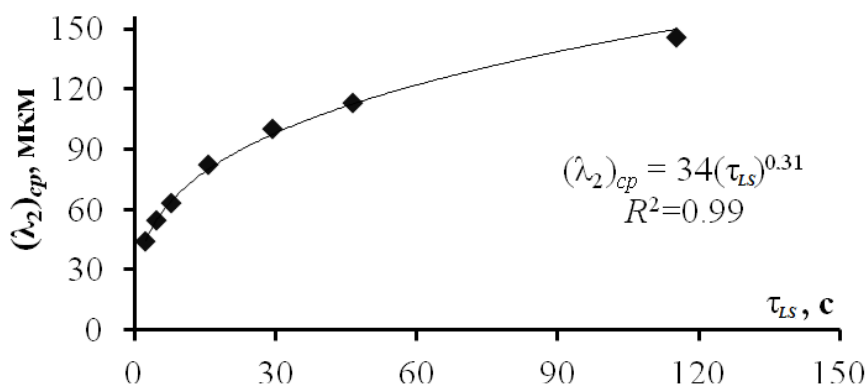


Рисунок 3.18. Зависимость средних междуосных промежутков  $(\lambda_2)_{cp}$  от локальной продолжительности кристаллизации  $\tau_{LS}$  по расчетным данным (табл. 3.5)

Таблица 3.5.

Влияние коэффициента теплоотдачи  $\alpha$  при кристаллизации стали 20ХГН на величину конечных междуосных промежутков  $(\lambda_2)_{cp}$

$\alpha, \text{Вт/м}^2\text{К}$	$\tau_{LS}, \text{с}$	$t_L(C_L^0) - t_S, \text{К}$	$C_R, \text{К/с}$	$(\lambda_2)_{cp}, \text{мкм}$
20	115	81	0.7	145
50	46	87	1.9	113
80	29	90	3.1	100
150	16	94	6.0	82
300	8	97	12.3	63
500	5	98	20.7	54
1000	2	101	42.6	44

С увеличением интенсивности теплоотвода в термически и концентрационно неравновесных условиях (табл. 3.5) возрастание переохлаждения приводит к увеличению температурного интервала кристаллизации  $\Delta t_{LS} = t_L(C_L^0) - t_S$ , что на фоне ускорения кристаллизации значительно усиливает скорость охлаждения  $C_R$ . При этом полученные на основе расчетных данных (табл. 3.5) значения коэффициентов  $K_1=135$  и  $n=0.30$  в альтернативном уравнении вида  $(\lambda_2)_{cp} = K_1 C_R^{-n}$  близки к их средним значениям для большого набора низколегированных сталей -  $K_1=150$ ,  $n=0.34$  [3], что подтверждает правомерность разработанной модели формирования микроструктуры литых заготовок. Адекватность характера эволюции средних междуосных промежутков в большой степени зависит от адекватности информационного обеспечения модели, которое в перспективе должно быть уточнено по результатам более глубоких экспериментальных исследований.

### Влияние добавки третьего компонента

Анализ влияния на конечную структурную микронеоднородность добавки дополнительного компонента к бинарному сплаву Fe-C при C=0.2 % реализовали на примере добавки кремния и марганца. При моделировании использовали соотношение (3.4), в котором отражен вклад различных компонентов стали аддитивной суммой параметров вида  $\frac{pC_L(1-(1-\omega k)f_s)}{D^L}$ , а также следующие геометрические соотношения, полученные на основе экспериментальных статистических данных (Приложение 1):  $r/R=0.5\pm0.2$ ;  $L/r=3.0\pm1.0$ . Результаты расчета при введении 1 % кремния и марганца представлены на рис. 3.19 и в табл. 3.6.

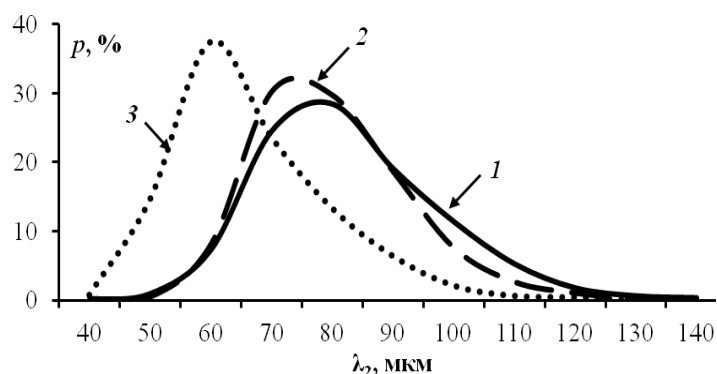


Рисунок 3.19. Влияние химического состава сплава на характер гистограммы распределения конечных междусосных промежутков  $\lambda_2$   
1 – Fe-0.20C; 2 – Fe-0.20C-1.00Mn; 3 – Fe-0.20C-1.00Si.

Таблица 3.6.

Параметры гистограмм распределения междусосных промежутков  $\lambda_2$

Состав сплава	$\tau_{LS}$ , с	$(\lambda_2)_{cp}$ , мкм	$\sigma_\lambda$
Fe-0.20C	21	79	13
Fe-0.20C-1.00Mn	21	77	12
Fe-0.20C-1.00Si	25	63	11

Приведенные в табл. 3.6 данные свидетельствуют о снижении величины средних междусосных промежутков при добавке обоих из указанных легирующих элементов при практически равной величине среднеквадратичного отклонения, поскольку введение дополнительных компонентов, как было показано в работах [66, 4], усиливает накопление примесей как на вершине дендритных стволов и ветвей, так и междусосных промежутках, вследствие чего диффузионный перенос компонентов в расплаве замедляется и интенсивность коалесценции снижается. При этом увеличение содержания кремния приводит к формированию более мелкой дендритной структуры, что согласуется с более высокой величиной характеристиче-



ского комплекса  $K_2 = \frac{pC_L(1-k)}{D^L}$  [66], контролирующего ход коалесценции, по сравнению с марганцем, несмотря на заметное увеличение продолжительности кристаллизации.

### Сравнение экспериментальных и расчетных данных

В качестве объектов исследования были выбраны стали 10Г2, 20ХГН и 70Г (рис. 3.15), относящиеся к широкому спектру сталей с содержанием углерода  $0.11 \div 0.69\%$ , а также легирующих элементов (Si, Mn, Cr, Ni) в пределах  $0.12 \div 1.25\%$ . В связи с тем, что в основе модели коалесценции лежат геометрические параметры дендритных ветвей, получение адекватных соотношений экспериментальных и расчетных данных связано с уточнением (калибровкой) модели. Результаты моделирования структурной микронеоднородности до и после проведения калибровки модели представлены в табл. 3.7. и на рис. 3.20.

Таблица 3.7.

#### Уточнение информационного обеспечения модуля «С»

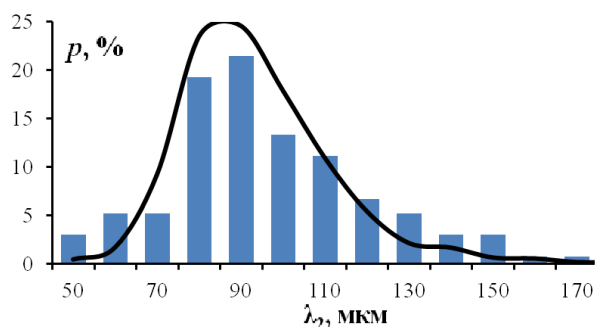
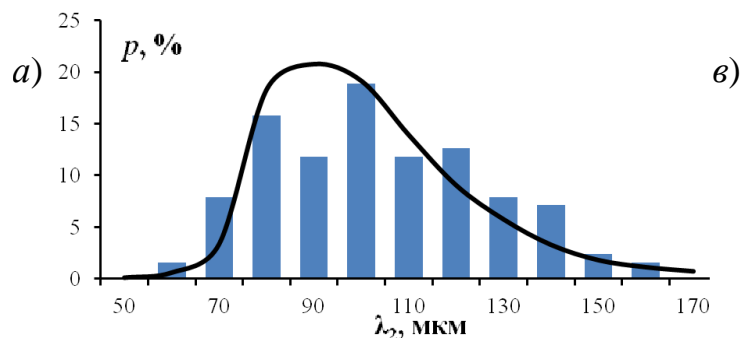
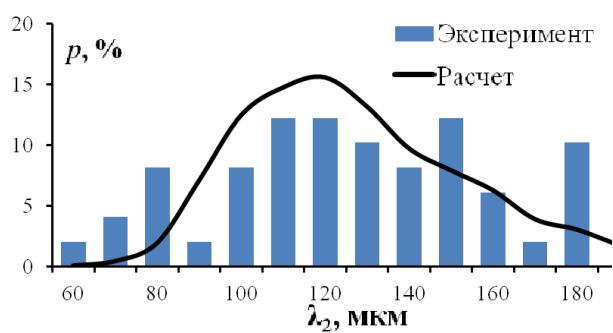
Сталь	Параметр	Эксперимент		Расчет			
		Среднее значение	среднекв. откл. $\sigma_\lambda$	До калибровки		После калибровки	
				Среднее значение	среднекв. откл. $\sigma_\lambda$	Среднее значение	среднекв. откл. $\sigma_\lambda$
20ХГН	$r/R$	0.73	$\pm 0.15$	0.73	$\pm 0.15$	0.35	$\pm 0.30$
	$L/r$	5.10	$\pm 1.50$	5.10	$\pm 1.50$	3.00	$\pm 1.50$
	$\lambda_2$ , мкм	<b>94</b>	<b><math>\pm 20</math></b>	<b>67</b>	<b><math>\pm 6</math></b>	<b>93</b>	<b><math>\pm 20</math></b>
70Г	$r/R$	0.79	$\pm 0.14$	0.79	$\pm 0.14$	0.60	$\pm 0.21$
	$L/r$	4.58	$\pm 1.31$	4.58	$\pm 1.31$	4.50	$\pm 1.30$
	$\lambda_2$	<b>99</b>	<b><math>\pm 20</math></b>	<b>77</b>	$\pm 9$	<b>100</b>	<b><math>\pm 21</math></b>
10Г2	$r/R$	0.76	$\pm 0.15$	0.76	$\pm 0.15$	0.12	$\pm 0.10$
	$L/r$	5.00	$\pm 1.50$	5.00	$\pm 1.50$	1.50	$\pm 0.50$
	$\lambda_2$ , мкм	<b>122</b>	<b><math>\pm 28</math></b>	<b>48</b>	<b><math>\pm 4</math></b>	<b>129</b>	<b><math>\pm 28</math></b>
Примечание: калибровка модели производилась путем изменения параметров $r/R$ и $L/r$ .							

Как показывают результаты расчета, путем калибровки значений геометрических параметров (в пределах  $40 \div 70\%$ ) получено хорошее совпадение расчетных распределений (рис. 3.20) и средних междуосных промежутков  $(\lambda_2)_{cp}$ , а также

среднеквадратичного отклонения  $\pm\sigma_\lambda$  (табл. 3.7), характеризующих неоднородность дендритной структуры, с разбросом, не превышающим 6 %.

Как отмечено в табл. 3.7, для двух из трех сплавов корректировки геометрических параметров ( $r/R$ ,  $L/r$ ) были незначительными. При этом для стали 10Г2 отклонение оказалось более существенным, что, возможно, связано с погрешностями экспериментальной техники и точности металлографического исследования.

Результаты расчета показывают, что уменьшение параметров  $r/R$  и  $L/r$  приводит к увеличению коэффициента  $\phi_K$ , что проявляется в смещении гистограммы в область более высоких значений  $(\lambda_2)_{cp}$  вместе с увеличением ширины  $\sigma_\lambda$  вероятностного диапазона.



б) Рисунок 3.20. Сравнение расчетных и экспериментальных (по данным [23]) гистограмм распределения междусосных промежутков  $\lambda_2$  для стали 10Г2 (а), 20ХГН (б) и 70Г (в) (рис. 3.15)

Таблица 3.8.

Экспериментальные и расчетные параметры дендритной структуры стали 10ХГН2

$\tau_{LS}$ , с	Эксперимент		Расчет			
	$(\lambda_2)_{cp}$ , МКМ	$\sigma_\lambda$ , МКМ	$r/R$	$L/r$	$(\lambda_2)_{cp}$ , МКМ	$\sigma_\lambda$ , МКМ
5	33	8	$0.8 \pm 0.5$	$3.5 \pm 2.5$	36	7
25	73	16			75	17
60	90	22			96	20

Анализ возможности использования уточненных значений геометрических параметров для цилиндрической отливки из стали 10ХГН2, залитой в кокиль и

подвергнутой металлографическому анализу (см. рис. 3.3), проведен для условий различной продолжительности кристаллизации. Сводные результаты моделирования приведены в табл. 3.8.

Сравнение расчетных и экспериментальных гистограмм распределения междоусных промежутков представлено на рис. 3.21. Приведенные гистограммы показывают, что в результате реализации расчетных процедур, получено хорошее совпадение расчетных и экспериментальных данных. Данный результат свидетельствует о правомерности использования I и III механизмов для моделирования конкурентной коалесценции (рис. 3.1) при скоростях охлаждения  $C_R \approx 1-10$  К/с.

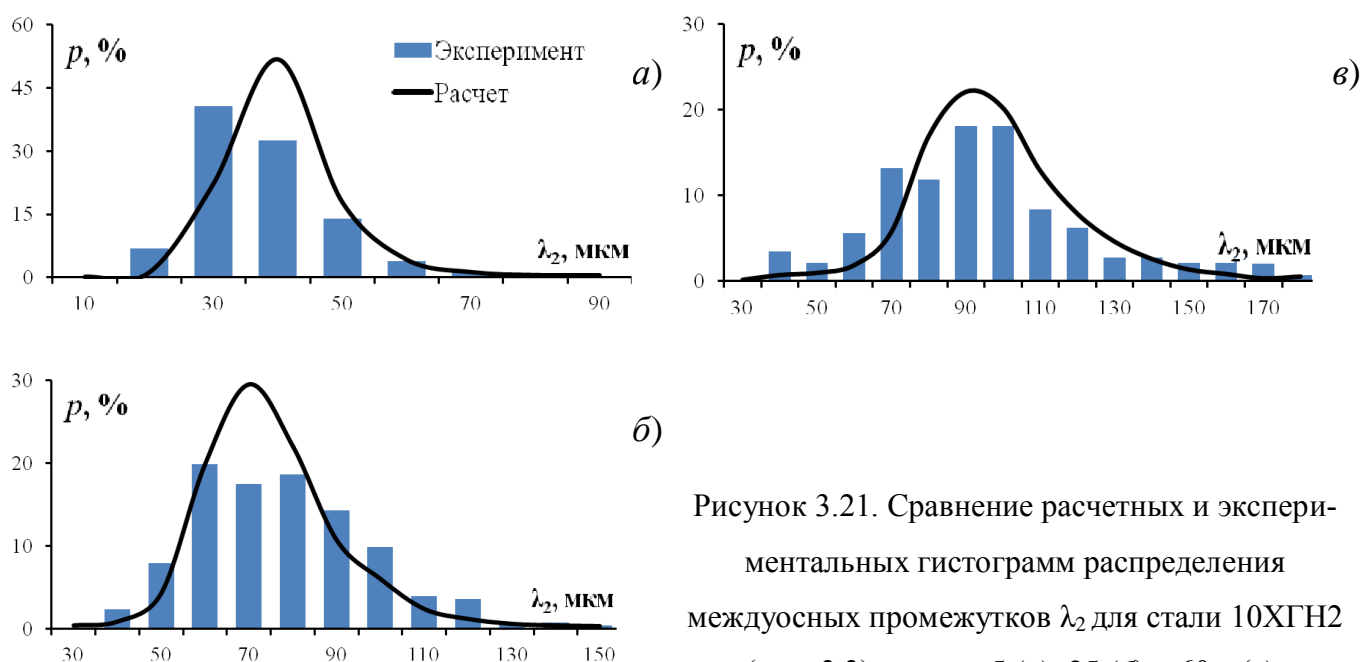


Рисунок 3.21. Сравнение расчетных и экспериментальных гистограмм распределения междоусных промежутков  $\lambda_2$  для стали 10XГН2 (рис. 3.3) при  $\tau_{LS}=5$  (а), 25 (б) и 60 с (в).

Компьютерный анализ эволюции дендритной структуры на основе расчета коалесценции ветвей второго порядка в условиях неравновесной кристаллизации дает возможность количественной оценки влияния на эволюцию различных факторов (состава сплава, интенсивности теплоотвода, физико-химических и теплофизических параметров и др.). Использование метода Монте-Карло позволяет решить задачу о конечном распределении междоусных промежутков  $\lambda_2$  в локальной области литой заготовки с помощью моделирования коалесценции дендритных ветвей со статистически неоднородными геометрическими параметрами.

Обширная статистическая информация о структурных характеристиках твердо-жидкой фазы в форме безразмерных геометрических параметров дендритных

кристаллитов и промежутков между их ветвями), получаемая при использовании метода Монте-Карло в рамках системного анализа развития дендритной структуры, открывает возможности последующего исследования условий эволюции возникшего при срастании дендритов непрерывного скелета твердой фазы для количественной оценки процессов фильтрации расплава, развития газоусадочной пористости, формирования пластических свойств и проявления линейной усадки в процессе кристаллизации.

Повышение качества и унификация разработанной модели связаны с дальнейшим накоплением и обобщением экспериментальных данных о морфологии дендритов и их эволюции с использованием современных средств компьютерной томографии, синхротронного излучения, а также моделирования методом фазового поля.

## **4. Компьютерное моделирование дендритной ликвации в условиях неравновесной кристаллизации**

### **4.1. Физическая модель дендритной ликвации**

Формирование твердой фазы при кристаллизации сталей происходит в условиях неоднородной микроструктуры при неравномерном распределении химических элементов в микро-масштабе. При этом процессы образования разветвленных дендритных кристаллитов и развития химической неоднородности расплава и твердой фазы сопряжены и взаимообусловлены. В связи с этим независимое рассмотрение отдельных сторон развития дендритной ликвации (влияние коалесценции, накопление примеси на фронте кристаллизации, перитектическое превращение и др.) без учета многофакторного воздействия на нее различных процессов будет носить лишь приближенный характер. Для количественного анализа перераспределения компонентов сплава в микро-масштабе дендритных ветвей необходимо совместное решение комплекса уравнений, сочетающего модели, описывающие изменение температуры металла, морфологию и кинетику движения фронта кристаллизации, диффузию компонентов, изменение фазового состава сплава и др. Необходимость подобного системного подхода обусловлена невыполнимостью адекватного описания ряда сложных взаимосвязанных процессов без реализации численного анализа с использованием компьютерных средств.

Основой численного моделирования дендритной ликвации является алгоритм, который описывает формирование неоднородности химического состава по сечению дендритных ветвей на фоне последовательного перехода металла от расплава к полностью закристаллизовавшейся твердой фазе. Развитие дендритной ликвации при кристаллизации низколегированных сталей с перитектическим превращением происходит трехстадийно, при этом смена стадий (этапов кристаллизации  $\delta$ -фазы, перитектического превращения, кристаллизации  $\gamma$ -фазы) протекает

последовательно и непрерывно, что формирует наследственный характер распределения компонентов.

Микроликвация компонентов сплава развивается в масштабе вторичных междоусных промежутков  $\lambda_2$ , которые изменяются во времени вследствие коалесценции, а также различаются между собой пространственно, поскольку междоусные промежутки в пределах дендритного кристаллита варьируются в широком диапазоне (см. разд. 3.5), в связи с чем возникает более сложная постановка задачи анализа диффузионного перераспределения компонентов сплава между фазами в условиях статистического ансамбля вторичных дендритных ветвей.

Традиционный анализ формирования дендритной ликвации [1, 2 и др.] связан с решением задачи диффузии атомов вещества под действием градиента концентраций по сечению дендритной ячейки. При этом граничные условия на фронте кристаллизации расплава являются термодинамически локально-равновесными, в то время как в твердой фазе, а также в расплаве, имеется неравновесное и неравномерное распределение компонентов. Степень химической неоднородности данного локального объема характеризуется величиной отклонения текущей концентрации  $i$ -го компонента  $C_i$  в исследуемой области по сечению дендритной ветви от исходного состава расплава  $(C_L^0)_i$ .

В работе при анализе микроликвации рассматривали изолированную микро-ячейку, занимающую пространство от оси дендритной ветви второго порядка до половины ширины ее междоусного промежутка ( $\lambda_2/2$ ) (симметричная схема). Изменение состава жидкой фазы за счет фильтрации расплава из соседних областей не учитывали, принимая условия в этих областях идентичными по химическому составу.

### **Этап кристаллизации $\delta$ -фазы**

Микроликвация компонентов сплава в условиях формирования дендритных кристаллитов первичной  $\delta$ -фазы с ОЦК кристаллической решеткой при относительно высоких температурах имеет существенные особенности. К ним относятся: малая растворимость углерода в твердой фазе ( $k^{\delta L}_C \approx 0.17$ ), относительно высокое значение коэффициен-

тов диффузии компонентов сплава ( $D_i^\delta > D_i^\gamma$ ) (см. разд. 2.2.2), а также интенсивное развитие коалесценции (см. рис. 3.17, б).

Граничные условия на фронте кристаллизации  $\delta/L$  (рис. 4.1) задаются как термодинамически локально–равновесные. Движение фронта происходит за счет выделения твердой фазы состава  $(C_S)_i = k_i(C_L)_i$  из расплава с равномерно распределенной концентрацией компонентов в области от  $R_S$  до  $R_\lambda = \lambda_2/2$ .

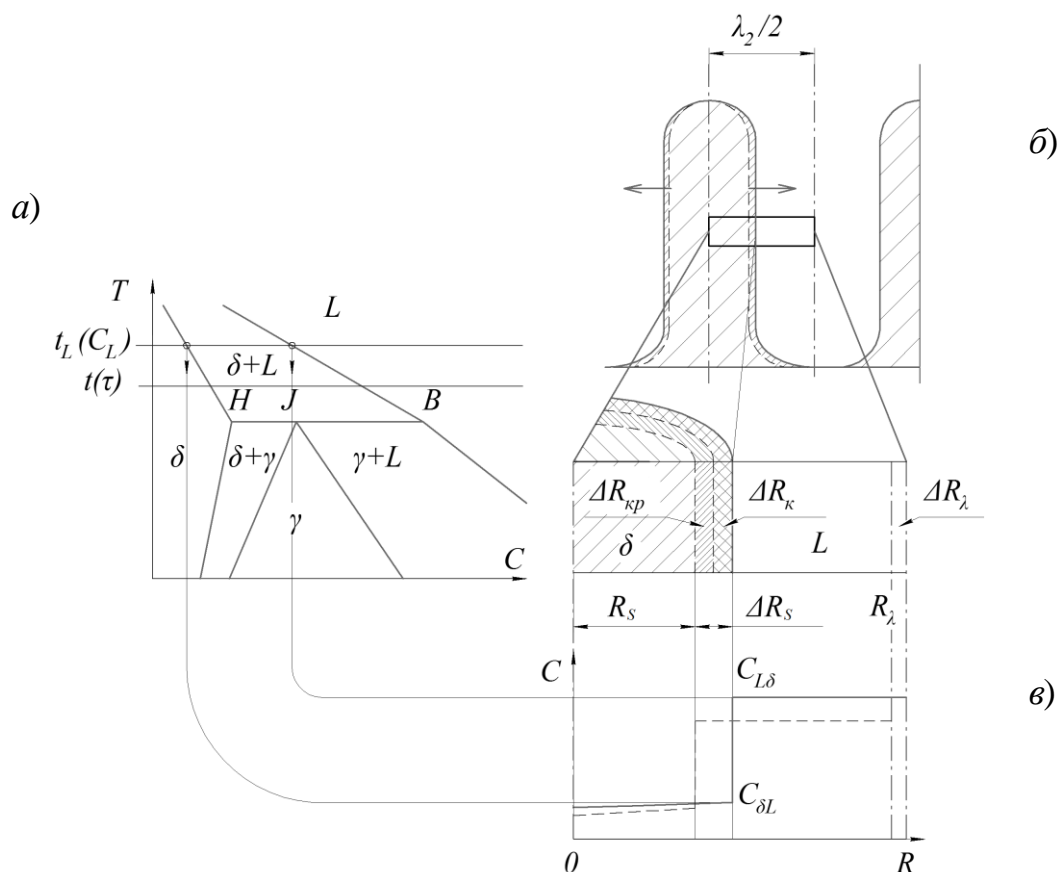


Рисунок 4.1. Схема развития микроликвации на этапе кристаллизации  $\delta$ -фазы

*a* – фрагмент перитектического участка диаграммы состояния Fe-C;

*б* – фрагмент сечения дендритной ветви цилиндрической морфологии

( $\Delta R_{кр}$ ,  $\Delta R_k$  – прирост радиуса ветви за счет кристаллизации и коалесценции соответственно;

$\Delta R_\lambda$  – прирост  $\lambda_2/2$  за счет коалесценции);

*в* – распределение углерода по сечению дендритной ветви (пунктир – до изменения радиуса

( $R=R_S$ ); сплошная линия – после ( $R=R_S+\Delta R_S$ ))

Увеличение междоусного промежутка за счет коалесценции сопровождается добавлением в исследуемую микро-область дополнительных слоев жидкой фазы  $\Delta R_\lambda$ . В связи с тем, что коалесценция не приводит к изменению количества

твёрдой фазы ( $m^\delta$ ), добавление новых слоев жидкой фазы производили с химическим составом, соответствующим текущему составу расплава.

В силу малой растворимости углерода в  $\delta$ -фазе на фронте кристаллизации достигается значительный перепад его концентраций. В то же время интенсивная диффузия в  $\delta$ -фазе обеспечивает практически полное выравнивание концентрации углерода по сечению дендритной ветви. Жидкая фаза ( $L$ ), находящаяся между поверхностями двух соседних дендритных ветвей, растворяет выделяющийся при кристаллизации избыточный углерод, который практически равномерно распределяется по всему объёму, поскольку выполняется соотношение  $2D^L/[v_d\lambda_2(1-m^\delta)] \gg 1$ , где  $v_d = (\Delta R_{\text{кр}} + \Delta R_{\text{к}})/\Delta\tau = \Delta R_S/\Delta\tau$  – скорость движения межфазной границы твёрдая фаза/расплав. Это позволяет анализировать развитие дендритной ликвации с использованием осредненной величины состава жидкой фазы  $C_L = C_{L\delta}$ .

Похожая ситуация в жидкой фазе прослеживается и для других компонентов сплава, так как они имеют близкие значения коэффициента диффузии в расплаве ( $D_i^L \sim 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$ ). Однако характер их распределения в  $\delta$ -фазе существенно отличается от распределения углерода и зависит от комплекса физико-химических параметров ( $k^{\delta L}$ ,  $p^\delta$ ,  $D^\delta$ ). В связи с тем, что изменение содержания компонентов в расплаве, либо введение дополнительных, сказывается на его физико-химических параметрах разнохарактерно, при разработке численной модели дендритной ликвации использовали данные термодинамического моделирования для многокомпонентных сплавов (см. разд. 2.2).

Как показано в разд. 2.1 и 3.1, кинетика движения фронта кристаллизации диктуется термическим переохлаждением  $\Delta T(\tau) = t_L(C_L) - t(\tau)$ , зависящим от ряда факторов, наиболее значимым из которых является теплоотвод. В то же время коалесценция (увеличение  $\lambda_2/2$ ) имеет физико-химическую основу и сопровождается переносом твёрдой фазы от растворяющейся ветви к прирастающей ветви под действием капиллярного эффекта. Различия в природе движущих сил этих процессов обуславливают необходимость учета всего комплекса тепловых, кристаллизационных и диффузионных факторов при задании граничных условий для анализа микроликвации на протяжении всего периода кристаллизации.



Длительность выделения первичной фазы определяется условиями теплоотвода и исходным составом сплава. В доперитектических углеродистых и низколегированных сталях при концентрации углерода, близкой к предельному содержанию в  $\delta$ -фазе, этап выделения первичной фазы составляет основную часть процесса кристаллизации, что обеспечивает длительные условия для интенсивной диффузии в твердой фазе.

Стадия первичной кристаллизации  $\delta$ -фазы заканчивается в момент появления более термодинамически выгодных условий для выделения вторичной  $\gamma$ -фазы. Особенностью перехода кристаллизации от одного типа кристаллической решетки к другому является их структурно- и концентрационно-наследственный характер [84].

### **Этап перитектического превращения**

Решение задачи прогнозирования дендритной ликвации при перитектическом превращении основывается на анализе кинетики перераспределения компонентов сплава по сечению дендритной ветви с учетом неоднородного фазового состава закристаллизовавшегося металла (рис. 4.2).

Присутствие контактирующих между собой стабильной ( $\gamma$ ) и метастабильной ( $\delta$ ) фаз предполагает наличие подвижной межфазной границы  $\gamma/\delta$  ( $R^\delta$ ). Кинетику перемещения данной границы, как было показано в разделе (2.1.2), диктует диффузия углерода от фронта кристаллизации расплава  $\gamma/L$  ( $R_S$ ) с более высокой концентрацией  $C_{\gamma L}$  к границе  $\gamma/\delta$  ( $R^\delta$ ) с меньшей концентрацией  $C_{\gamma\delta}$ . При этом наиболее сложным этапом решения данной задачи является анализ диффузионно-контролируемого движения межфазной границы  $\gamma/\delta$  при уменьшении количества  $\delta$ -фазы.

Как показано на рис. 4.2, в исследуемой микро-области происходит одновременное перемещение трех границ ( $R^\delta$ ,  $R_S$  и  $\lambda_2/2$ ). В отличие от фронта кристаллизации  $\gamma/L$ , который перемещается в химически однородном расплаве, межфазная граница  $\gamma/\delta$  движется на фоне неравномерного распределения компонентов замещения (Mn, Cr, Ni и др.) в ранее закристаллизовавшейся  $\delta$ -фазе.



мическое  $\Delta T = t_L(C_L) - t(\tau)$ . Различная природа переохлаждений  $\Delta T$  и  $\Delta T_p$  обуславливает сложный характер взаимосвязи диффузионных и кристаллизационных процессов. Термическое переохлаждение  $\Delta T$  определяет кинетику кристаллизации расплава на межфазной границе ( $L/\gamma$ ) с выделением  $\gamma$ -фазы, концентрация которой соответствует значению  $C_{\gamma L}$ , в то время как перемещение межфазной границы ( $\gamma/\delta$ ) обусловлено диффузией углерода через слой  $\gamma$ -фазы и непосредственно связано с величиной перепада концентраций ( $C_{\gamma L} - C_{\gamma \delta}$ ). Представленный анализ граничных условий показывает, что исключение из рассмотрения какого-либо сопряженного процесса будет вносить в расчетную модель существенные погрешности, что сказывается на точности прогнозирования дендритной ликвации. Следовательно, при анализе кинетики перитектического превращения необходима реализация системного подхода к моделированию совокупности взаимосвязанных тепловых, кристаллизационных и диффузионных процессов.

Окончание перитектического превращения связано с исчерпанием либо  $\delta$ -фазы, либо расплава  $L$ . При полном превращении  $\delta$ -фазы в  $\gamma$ -фазу ( $m^\delta = 0$ ,  $m^\gamma > 0$ ,  $m^L > 0$ ), характерном для *заперитектических* сталей, начинается завершающий этап кристаллизации остаточной жидкой фазы  $L \rightarrow \gamma$ . При превращении с избыточным количеством  $\delta$ -фазы ( $m^\delta > 0$ ,  $m^\gamma > 0$ ,  $m^L = 0$ ), характерном для *доперитектических* сталей, после окончания кристаллизации расплава начинается этап твердофазного  $\delta \rightarrow \gamma$  превращения.

### Этап кристаллизации $\gamma$ -фазы

Появление  $\gamma$ -фазы с более плотноупакованной ГЦК решеткой кристаллизующейся твердой фазы сопровождается значительным изменением ее теплофизических и физико-химических свойств по сравнению с  $\delta$ -фазой, что сказывается на развитии микроликвации. Изменение удельной теплоемкости и теплоты кристаллизации оказывает влияние на термическое переохлаждение расплава и, следовательно, кинетику движения фронта  $\gamma/L$ . Свойство  $\gamma$ -фазы растворять существенно большее, по сравнению с  $\delta$ -фазой, количество примесей ( $k^{\gamma L} > k^{\delta L}$ ) обуславливает уменьшение перепада равновесных концентраций ( $C_{L\gamma} - C_{\gamma L}$ ) на границе с распла-

вом для всех компонентов, включая и углерод. В то же время коэффициенты диффузии в  $\gamma$ -фазе значительно (для компонентов замещения – на несколько порядков) меньше соответствующих коэффициентов в  $\delta$ -фазе (см. разд. 2.2.2), что существенно снижает диффузионную подвижность компонентов и изменяет условия их перераспределения между фазами. В результате создаются разные условия формирования дендритной ликвации при «орто-равновесном» распределении углерода и «пара-равновесном» распределении остальных компонентов сплава (рассмотрено в разд. 4.2.2).

#### 4.2. Компьютерный анализ дендритной ликвации

Алгоритм расчета дендритной ликвации, учитывающего фазовый состав затвердевающего металла, диффузию компонентов сплава, движение границ раздела фаз  $\gamma/L$  и  $\gamma/\delta$  в условиях перитектического превращения, основывается на вычислении кинетики кристаллизации посредством решения тепловой и кристаллизационной задачи (см. разд. 2.1), а также расчета диффузионного перераспределения компонентов сплава между кристаллизующимися фазами в микро-масштабе дендритной ячейки.

Кристаллизация двухфазной системы характеризуется наличием одной межфазной границы ( $\delta/L$  или  $\gamma/L$ ), перемещающейся в условиях локального равновесия. Протекание перитектического превращения характеризуется наличием в сечении дендритной ветви двух межфазных границ –  $\gamma/L$  и  $\gamma/\delta$  и создает сложную трехфазную систему диффузионных потоков.

Для проведения компьютерного моделирования химической микронеоднородности низколегированных сталей с перитектическим превращением была разработана соответствующая численная модель «Л», интегрированная в систему комплексного анализа «Б»+«С»+«Л» (см. разд. 2.1 и 3.3). Это дает возможность совместного анализа тепловых, кристаллизационных и диффузионных процессов как в двухфазных ( $\delta+L$  или  $\gamma+L$ ), так и в трехфазных ( $\delta+\gamma+L$ ) системах в зависимости от тепловых условий кристаллизации, теплофизических и физико-химических параметров сплава, а также ряда других факторов.

С целью анализа микроликвации в сталях, расположенных левее перитектической точки  $J$  диаграммы состояния, комплексная модель была расширена путем включения расчета охлаждения металла после окончания кристаллизации расплава до температуры конца твердофазного превращения  $\delta \rightarrow \gamma$ . В этом случае решали тепловую и диффузионную задачу при постоянной конфигурации дендритных ветвей.

#### **4.2.1. Численная модель анализа ликвации для двухфазных систем $(\delta+L)$ и $(\gamma+L)$**

Программная реализация численной модели перераспределения компонентов сплава в микро-масштабе по сечению дендритной ветви была осуществлена поэтапно, включая формулировку физической модели (уравнение Фика, задание граничных условий) и разработку вычислительной схемы (расчетная сетка, разностные уравнения, преобразование граничных условий).

Интеграция разработанной модели микроликвации «Л» с базовой моделью неравновесной кристаллизации «Б» обеспечивается включением ее в сопряженный анализ температурных условий и скорости выделения твердой фазы, диктующих кинетику движения фронта кристаллизации; развитие коалесценции, определяющей эволюцию междуосных промежутков  $\lambda_2$  и перенос массы от одной дендритной ветви к другой, а также других процессов. Таким образом, моделирование микроликвации производили при известных граничных условиях (температура, текущий радиус ветви, концентрация компонентов в расплаве) путем численного расчета диффузионного перераспределения компонентов на межфазных границах и по сечению однофазных областей.

#### **Диффузионная модель**

Расчет концентрации компонентов в расплаве. В связи с тем, что диффузионная подвижность компонентов сплава в жидкой фазе достаточно велика, численная модель микроликвации была упрощена путем введения осредненной кон-

центрации  $(C_L)_i$  компонентов сплава, рассчитываемой по балансовому соотношению:

$$(Q_L)_i = (Q_0)_i - (Q_S)_i; (C_L)_i = (Q_L)_i \left[ \pi \left( \frac{\lambda_2}{2} \right)^2 - \pi R_S^2 \right]^{-1},$$

где  $Q_0$ ,  $Q_L$ ,  $Q_S$  – количество  $i$ -го компонента в дендритной ячейке, расплаве и твердой фазе соответственно.

Расчет диффузии компонентов сплава в твердой фазе. Расчет дендритной ликвации по сечению ветвей цилиндрической морфологии как в  $\delta$ -, так и в  $\gamma$ -фазе производили с помощью численного анализа на основе разностной модификации уравнения Фика (рис. 4.3):

$$\frac{\Delta(C_N)_i}{\Delta\tau_D} = D_i^{\delta,\gamma} \left[ \frac{(C_{N+1})_i - 2(C_N)_i + (C_{N-1})_i}{\Delta R^2} + \frac{1}{R_N} \frac{(C_{N+1})_i - (C_{N-1})_i}{2\Delta R} \right], \quad (4.1)$$

где  $C_N$  – концентрация компонента сплава в  $N$ -ом узле расчетной сетки с радиусом  $R_N$ ;  $\Delta R$  – пространственный шаг расчетной сетки;  $\Delta\tau_D$  – временной шаг диффузионного расчета по явной схеме. Уравнение (4.1) применимо для анализа перераспределения компонентов в узлах сетки от  $1 \leq N \leq Z-1$ , где  $Z$  – ближайший к фронту кристаллизации узел (рис. 4.3).

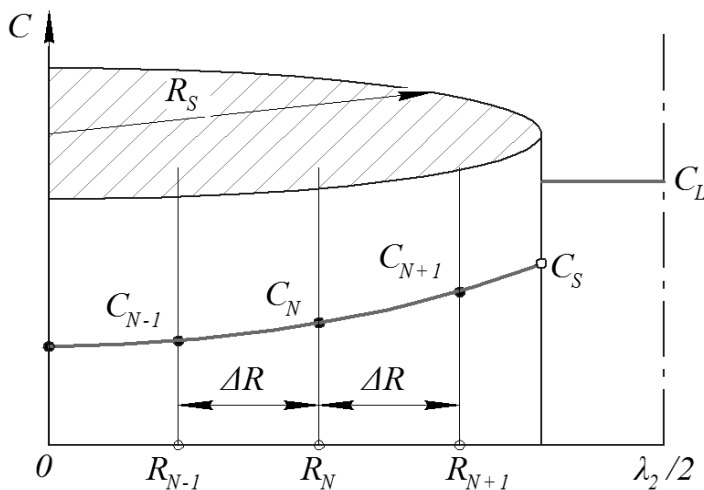


Рисунок 4.3. Расчетная сетка для моделирования распределения компонентов сплава в масштабе  $\lambda_2/2$  при подвижной границе фронта кристаллизации с радиусом  $R_S$

На каждом временном шаге расчета  $\Delta\tau$  происходит последовательное движение фронта кристаллизации ( $R_S$ ), положение которого не совпадает с узлами расчетной сетки  $R_N$ , поэтому уравнение (4.1) модифицировали для решения задачи с подвижной границей (рассмотрено далее).

Моделирование эволюции междуосного промежутка  $\lambda_2$ . Одновременно с движением фронта кристаллизации происходит увеличение  $\lambda_2$  за счет коалесценции соседних ветвей. В связи с этим в расчете использовали модель непрерывного увеличения  $\lambda_2$  от начального значения  $(\lambda_2)_0$  [66] в соответствии с принятой моделью эволюции микроструктуры (см. разд. 3, уравнение (3.2)).

### Вычислительная схема

Одним из важных этапов при численном моделировании микроликвации является разработка вычислительной схемы, которая реализуется на компьютере для полного учета системного характера рассматриваемых взаимосвязанных явлений. В рамках диффузионной задачи вычислительная схема включает в себя задание расчетной сетки и граничных условий для системы уравнений типа (4.1).

Как было показано ранее (разд. 1), в зависимости от масштаба исследуемых процессов используются сетки различной размерности. В связи с тем, что использование двумерной и трехмерной сетки накладывает на модель серьезные ограничения по затратам вычислительных ресурсов, в работе использовали одномерную сетку.

Размер шага расчетной сетки  $\Delta R$  выбирали с учетом следующих требований:

- результаты расчета должны обеспечивать получение допустимой по величине погрешности;
- вычислительная схема должна обеспечивать устойчивость расчета при минимальных затратах вычислительных ресурсов.

Следовательно, математическая конструкция модели – аппроксимация геометрии дендритной ячейки (см. разд. 1, табл. 1.9) и выбор характера проектируемой сетки – играет важную роль в принятии того или иного подхода. Использование сетки с фиксированным количеством узлов и определенным шагом, как правило, применяется для систем с постоянной величиной  $\lambda_2$ , в которых коалесценция дендритов не учитывается [85, 86, 88 и др.]. Сетки с переменным шагом обладают универсальностью в плане постоянного соответствия количества узлов сетки (объем расчета) и их размера величине  $\lambda_2$  (чем выше интенсивность диффузии, тем меньше должно быть расстояние между узлами сетки  $\Delta R$ ), однако требуют

постоянного пересчета текущего положения узлов сетки и концентраций компонентов в них [87].

Принцип задания величины  $\Delta R$  реализовали в модели микроликвации посредством гибкого совмещения вышеуказанных подходов путем обеспечения равенства  $\Delta R$  для всех узлов сетки при его переменной величине в зависимости от  $\lambda_2$ . Использование подобной схемы позволяет с заданной периодичностью сокращать затраты вычислительных ресурсов при сохранении точности расчета, так как при этом пространственное положение и концентрация компонентов в новом узле укрупненной сетки, полученном за счет объединения нескольких мелких узлов, известны и не требуют определения.

Устойчивость вычислительной схемы. В качестве критерия устойчивости явной вычислительной схемы используется следующее соотношение:

$$\Delta\tau_D \leq \Delta R^2 / [2 \min(D_i^S)]. \quad (4.2)$$

Как видно из уравнения (4.2), для сохранения устойчивого расчета при увеличении интенсивности диффузионного потока необходимо корректировать параметры вычислительной схемы. Актуальность данного приема связана с выбором временного шага расчета по диффузионной задаче  $\Delta\tau_D$  для заданного  $\Delta R$ . Пространственный масштаб анализируемых процессов и величина коэффициентов диффузии  $D_i^y$  обуславливают выбор величины  $\Delta\tau_D$  ( $\Delta\tau_D \sim 10^{-7}$  с), которая должна быть многократно меньше временного шага по тепловой задаче ( $\Delta\tau \sim 10^{-3}$  с), для которой условие устойчивости сформулировано в разд. 2.2.3.

Микроликвация компонентов сплава с относительно малой величиной коэффициента распределения  $k$  при кристаллизации остаточного расплава ( $m^L < 0.05$ ) характеризуется их интенсивным накоплением как в жидкой, так и в твердой фазе (см. разд. 2, рис. 2.5). В этих условиях при относительно больших значениях  $\Delta R$  в случае цилиндрической морфологии дендритной ветви параметры численной модели затрудняют получение корректных результатов. В связи с этим модель дендритной ликвации предусматривала измельчение межузлового расстояния расчетной сетки на заключительном этапе кристаллизации.



## Задание граничных условий

Определяемое в рамках решения кристаллизационной задачи текущее положение фронта кристаллизации фиксируется в диффузионной схеме путем выделения подвижного узла расчетной сетки, принадлежащего межфазной границе. Данный граничный узел может занимать любое промежуточное положение в интервале от оси ветви до  $\lambda_2/2$ . В отличие от применяемой «ступенчатой» (дискретной) схемы (рис. 4.4, а), при которой включение нового узла в расчетную сетку производится при выполнении условия  $R_S \geq R_{N+1} + \Delta R/2$ , особенностью принятого в работе способа решения задач с подвижной границей (рис. 4.4, б) является возможность учета текущего положения межфазной границы путем модификации сеточного аналога уравнения Фика.

С целью нахождения второй производной по концентрации в уравнении (4.1) в окрестности межфазной границы определяли неизвестную концентрацию  $(C_Z)_i'$  (рис. 4.4, б) для ближайшего к межфазной границе узла расчетной сетки (Z) с помощью следующего интерполяционного соотношения:

$$(C_Z)_i' = (C_Z)_i - [(C_Z)_i - (C_{Z-1})_i] \frac{R_S - R_Z}{R_Z - R_{Z-1}}.$$

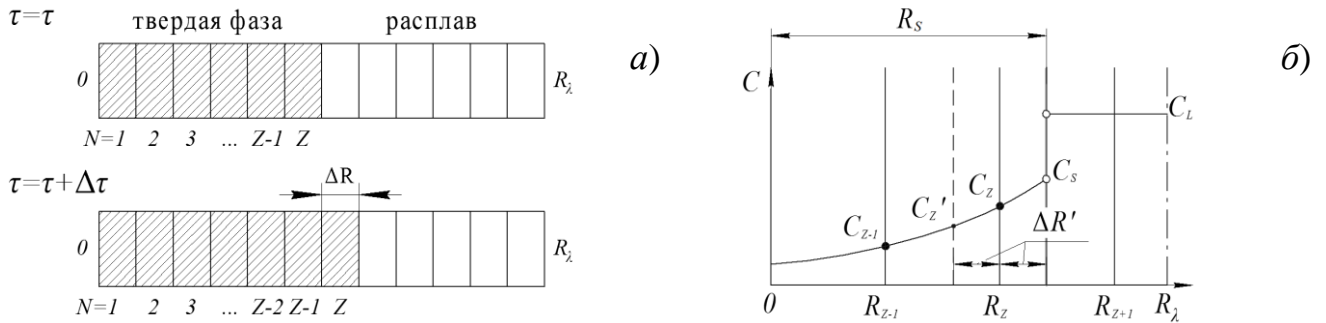


Рисунок 4.4. а – схема со ступенчатым движением фронта кристаллизации;

б – схема диффузионного расчета с подвижной границей  $R_S$

Полученное значение  $(C_Z)_i'$  и расчетную концентрацию  $(C_S)_i$  подставляли в уравнение (4.1) в качестве концентраций  $C_{N-1}$  и  $C_{N+1}$  соответственно, что позволило использовать для расчета  $(C_Z)_i$  (рис. 4.4, б) разностную модификацию уравнения Фика при  $N=Z$  (рис. 4.3).

#### 4.2.2. Моделирование перитектического превращения

При моделировании неравновесной кристаллизации использовали общепринятую схему диффузионно-контролируемого перитектического превращения [84-86 и др.]. В отличие от ранее рассмотренных подходов при задании граничных условий для расчета микроликвации (см. разд. 1.2), распределение компонентов замещения в твердой фазе рассчитывали с учетом их «пара-равновесия» на межфазной границе ( $\gamma/\delta$ ) [92]. В этом случае *локально-равновесная* концентрация на  $\gamma/\delta$  границе поддерживается лишь для углерода, в то время как все остальные компоненты при перемещении межфазной границы  $\gamma/\delta$  наследуют концентрацию, сформировавшуюся на этапе кристаллизации  $\delta$ -фазы:  $(C_{\gamma\delta})_i = (C_{\delta\gamma})_i$ , с последующей диффузией в направлении градиента концентраций. В связи с тем, что использование принципа паравравновесия при анализе дендритной ликвации вносит существенные изменения относительно традиционно применяемого орто-равновесного (термодинамически - равновесного) распределения [2, 88 и др.], дополнительно был выполнен их сравнительный анализ (см. разд. 4.3.2).

##### Анализ скорости перитектического превращения при равновесном распределении компонентов на межфазной границе $\gamma/\delta$

Скорость движения  $v^{\gamma\delta}$  межфазной границы  $\gamma/\delta$  в локально-равновесных условиях при термическом переохлаждении  $\Delta T$  рассчитывается по уравнению [66]:

$$v^{\gamma\delta} = \frac{2D^{\gamma}(C_{\gamma L} - C_{\gamma\delta})}{\lambda_2 m^{\gamma}(C_{\gamma\delta} - C_{\delta\gamma})}, \quad (4.3)$$

где  $D^{\gamma}$  – коэффициент диффузии в  $\gamma$ -фазе,  $C_j$  – концентрация компонента на  $j$ -ой межфазной границе (в соответствии с рис. 4.2). Для углеродистых и низколегированных сталей компонентом, определяющим кинетику перитектического превращения, является углерод [83-84, 86 и др.], диффузия которого как в  $\gamma$ -, так и в  $\delta$ -фазе происходит намного интенсивнее других компонентов стали (см. разд. 2.2.2, табл. 2.7). С использованием уравнения (4.3) можно оценить соотношение скоро-

сти движения межфазной границы  $\gamma/\delta$  при диффузии углерода  $v_C^{\gamma\delta}$  или, например, марганца  $v_{Mn}^{\gamma\delta}$ , что позволяет проверить адекватность реальным условиям обычно используемой расчетной схемы, основанной на локально-равновесных граничных условиях. Соотношение скоростей описывается коэффициентом  $K = \frac{v_C^{\gamma\delta}}{v_{Mn}^{\gamma\delta}}$ , который в результате преобразований формулы (4.3) принимает вид:

$$K = \frac{(C_P^{Mn} p_{Mn}^{\gamma\delta} - \Delta T) p_C^{\gamma\delta}}{(C_P^C p_C^{\gamma\delta} - \Delta T) p_{Mn}^{\gamma\delta}} \frac{D_\gamma^C \left( \frac{1}{p_C^\gamma} + \frac{1}{p_C^{\gamma\delta}} \right) (1 - k_{Mn}^{\delta\gamma})}{D_\gamma^{Mn} \left( \frac{1}{p_{Mn}^\gamma} + \frac{1}{p_{Mn}^{\gamma\delta}} \right) (1 - k_C^{\delta\gamma})}, \quad (4.4)$$

где  $k^{\delta\gamma}$  – коэффициент распределения на  $\delta/\gamma$  границе ( $k^{\delta\gamma} = C_{\delta\gamma}/C_{\gamma\delta}$ );  $C_P$  – концентрация компонента в перитектической точке диаграммы состояния.

Ориентировочный расчет путем подстановки числовых значений в уравнение (4.4) позволяет оценить степень различия кинетических параметров  $v_C^{\gamma\delta}$  и  $v_{Mn}^{\gamma\delta}$  в зависимости от величины переохлаждения (рис. 4.5).

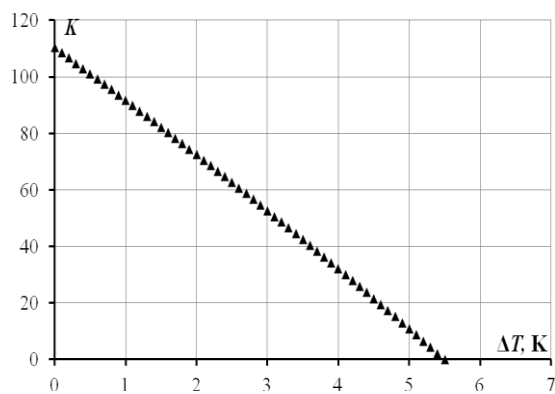


Рисунок 4.5. Влияние переохлаждения  $\Delta T$  на соотношение скорости движения межфазной  $\gamma/\delta$  границы при диффузии углерода и марганца

Исходные данные:

$$(D_\gamma)_C = 7.8 \cdot 10^{-10} \text{ м}^2/\text{с}; (D_\gamma)_{Mn} = 3.3 \cdot 10^{-13} \text{ м}^2/\text{с};$$

$$(C_P)_C = 0.14 \text{ \%}; (C_P)_{Mn} = 1.1 \text{ \%}; k^{\delta\gamma}_C = 0.57; k^{\delta\gamma}_{Mn} = 0.85;$$

$$p^\gamma_C = 180 \text{ К/\%}; p^\gamma_{Mn} = 5 \text{ К/\%}; p^{\gamma\delta}_C = 680 \text{ К/\%}; p^{\gamma\delta}_{Mn} = 5 \text{ К/\%}$$

Как видно из рис. 4.5, в зависимости от переохлаждения  $\Delta T$  соотношение скоростей перитектического превращения существенно изменяется и при  $\Delta T \approx 5.5 \text{ К}$  достигается их равенство  $v_C^{\gamma\delta} = v_{Mn}^{\gamma\delta}$ . В этих условиях как по углероду, так и по марганцу на межфазной границе  $\gamma/\delta$  соблюдается принцип локального равновесия концентрации. При этом перепад концентраций марганца в слое  $\gamma$ -фазы достигает величины  $\Delta C_{Mn} = 2.15 \text{ \%}$ , а по углероду всего  $\Delta C_C = 0.038 \text{ \%}$ . Однако при малых переохлаждениях (см. разд. 2.3, рис. 2.8), характерных для промыш-

ленных условий кристаллизации, различия в кинетике диффузионного переноса при перитектическом превращении достигают нескольких десятков раз.

Таким образом, модель перитектического превращения в *равновесных* и близких к ним концентрационных условиях, обеспечиваемых диффузией углерода, существенно не согласуется с кинетикой диффузионного перераспределения компонентов (на примере марганца), вследствие чего в работе использовали схему паравравновесного перитектического превращения [92]. В рамках данной схемы характер перераспределения компонентов сплава по сечению дендритной ветви, с одной стороны, согласуется с представленными в литературе [83-85 и др.] вариантами реализации численной модели дендритной ликвации, базирующимися на следующих принципах:

- на фронте кристаллизации реализуется принцип локального равновесия;
- в твердой фазе перераспределение компонентов осуществляется в неравновесных условиях путем диффузионного переноса под действием градиента концентраций.

Вместе с тем, реализованный в работе подход имеет важные отличительные особенности, согласно которым:

- на межфазной  $\gamma/\delta$  границе локально-равновесная концентрация поддерживается только углеродом, при этом его концентрация учитывает выполнение паравравновесных условий для компонентов замещения [106];
- остальные компоненты не имеют жесткой привязки к равновесной концентрации на границе  $\gamma/\delta$  и распределяются в соответствии с естественным ходом диффузионного перераспределения.

### **Анализ кинетики перитектического превращения**

Как было отмечено ранее, перемещение границы  $\gamma/\delta$  происходит на расстояние, определяемое количеством продиффундировавшего углерода (рис. 4.6):

$$\Delta(Q_D)_C = \pi D_C^\gamma [(C_{N\delta+1})_C - (C_{N\delta})_C] \frac{R_{N\delta+1} + R_{N\delta}}{\Delta R} \Delta \tau_D, \quad (4.5)$$

где  $\Delta\tau_D$  – временной шаг диффузионного расчета,  $\Delta R$  – шаг расчетной сетки;  $N\delta$  – индекс узла расчетной сетки, расположенного в  $\gamma$ -фазе наиболее близко к межфазной  $\gamma/\delta$  границе.

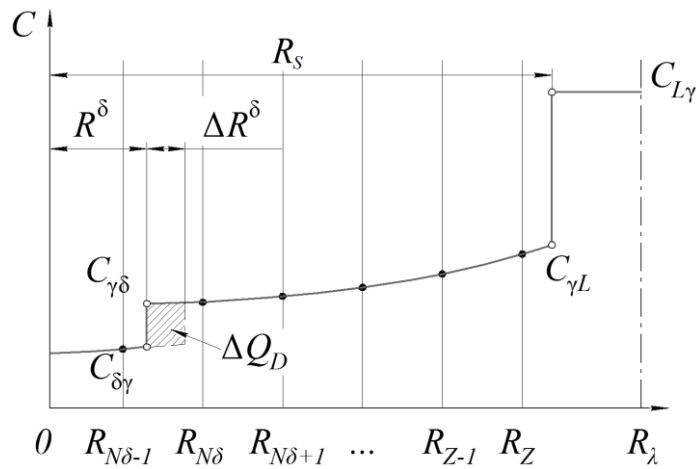


Рисунок 4.6. Схема распределения углерода при диффузионно-контролируемом перитектическом превращении

Влияние диффузионного потока углерода в слое  $\gamma$ -фазы к границе  $\gamma/\delta$  на скорость изменения области  $\delta$ -фазы  $R^{\gamma\delta}$  рассчитывали по следующему уравнению:

$$\frac{\Delta R^{\delta}}{\Delta \tau_D} = \frac{1}{2R^{\delta} \pi (C_{N\delta})_C (1 - k_C^{\delta\gamma})} \frac{\Delta(Q_D)_C}{\Delta \tau_D}, \quad (4.6)$$

где  $k_C^{\delta\gamma}$  – коэффициент распределения углерода на межфазной  $\delta/\gamma$ -границе;  $k_C^{\delta\gamma} = (C_{\delta\gamma})_C / (C_{\gamma\delta})_C$ .

Как видно из уравнения (4.6), кинетика перитектического превращения в рамках разработанной модели зависит от перепада концентраций на межфазных границах, физико-химических параметров сплава ( $D_C^{\gamma}$ ,  $p_C^{\gamma\delta}$ ,  $k_C^{\delta\gamma}$ ), определяющих скорость диффузии углерода к межфазной границе ( $\gamma/\delta$ ) и толщины слоя  $\gamma$ -фазы.

### 4.3. Результаты моделирования дендритной ликвации

#### Сравнительный анализ ликвации компонентов стали

Сложность интеграции программных модулей в едином блоке, позволяющем вести параллельное моделирование структурной и химической микронеоднородности, обуславливает необходимость использования некоторых упрощений. На первой стадии расчета (моделирование микроструктуры) ликвационный

аспект кристаллизации рассматривается приближенно с помощью дифференциального уравнения Онака (2.7) (см. разд. 2.1).

Применение аналогичного подхода для определения граничных условий при моделировании дендритной ликвации вносит заметные отклонения (рис. 4.7.).

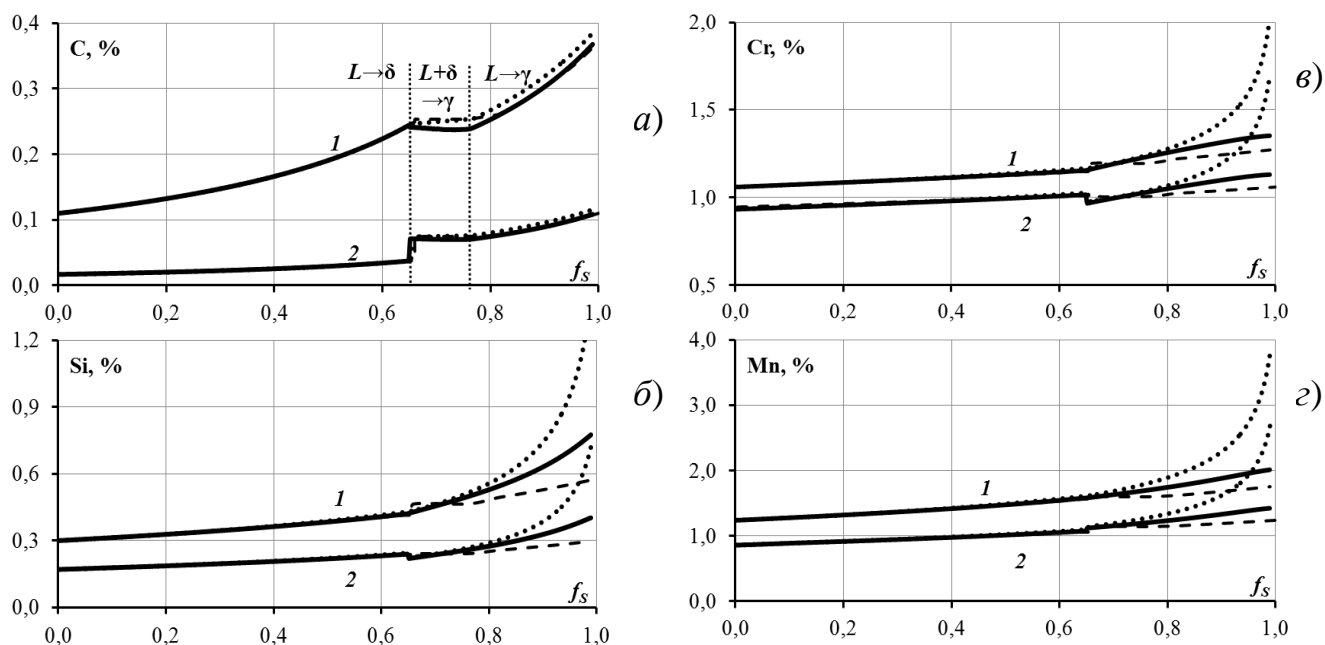


Рисунок 4.7. Изменение концентрации C (а), Si (б), Cr (в) и Mn (г) в жидкой фазе (1)

и выделяющейся твердой фазе (2) в зависимости от доли твердой фазы  $f_s$ ,

полученное по уравнению Онака (точки), при численном моделировании неравновесной кристаллизации (сплошная линия- модуль «Л») и термодинамическом моделировании (пунктир – равновесные условия) при кристаллизации сплава 10ХГН2

На этапе выделения  $\delta$ -фазы графики изменения концентрации  $(C_L)_i$  и  $(C_S)_i$  достаточно близки к равновесной концентрации как при моделировании с помощью ликвационного модуля «Л», так и по уравнению Онака (2.7), как следствие интенсивной диффузии в  $\delta$ -фазе. На этапе выделения  $\gamma$ -фазы появление новой межфазной  $\delta/\gamma$  границы приводит к изменению термодинамических и кинетических условий ( $p$ ,  $k$ ,  $D$ ) обратной диффузии, которая реализуется при наличии двух подвижных границ ( $\delta/\gamma$  и  $\gamma/L$ ), что сопровождается изменением характера микроликвации компонентов, в частности, интенсивным повышением концентрации жидкой и твердой фазы в результате возросшего подавления диффузии в твердой фазе.

Результаты сравнительного расчета условий ликвации отдельных компонентов стали (табл. 4.1) демонстрируют прямую зависимость неоднородности их распределения  $\beta_i = [(C_i)_{max} - (C_i)_{min}] / (C_L^0)_i$  от величины и соотношения их физико-химических параметров. Минимальные значения  $k_C^{\delta L}$  и  $k_C^{\gamma L}$  для углерода обеспечивают его активное накопление в расплаве, что создает предпосылки для формирования значительного перепада концентрации в твердой фазе. В то же время интенсивная диффузия углерода в  $\delta$ - и  $\gamma$ -фазе, скорость которой зависит от соотношения величин  $\tau_{LS}$  и  $\lambda_2$ , приводит к его практически равномерному распределению ( $\beta < 0.1$ ) по сечению дендритных ветвей вне зависимости от положения сплава на диаграмме состояния.

Наибольшая относительная степень дендритной ликвации  $\beta_i$ , полученная для условий затвердевания, соответствующих охлаждению в кокиле и в песчаной форме, характерна для кремния и молибдена (табл. 4.1), которые имеют наименьшие по сравнению с другими компонентами замещения коэффициенты распределения в  $\gamma$ -фазе.

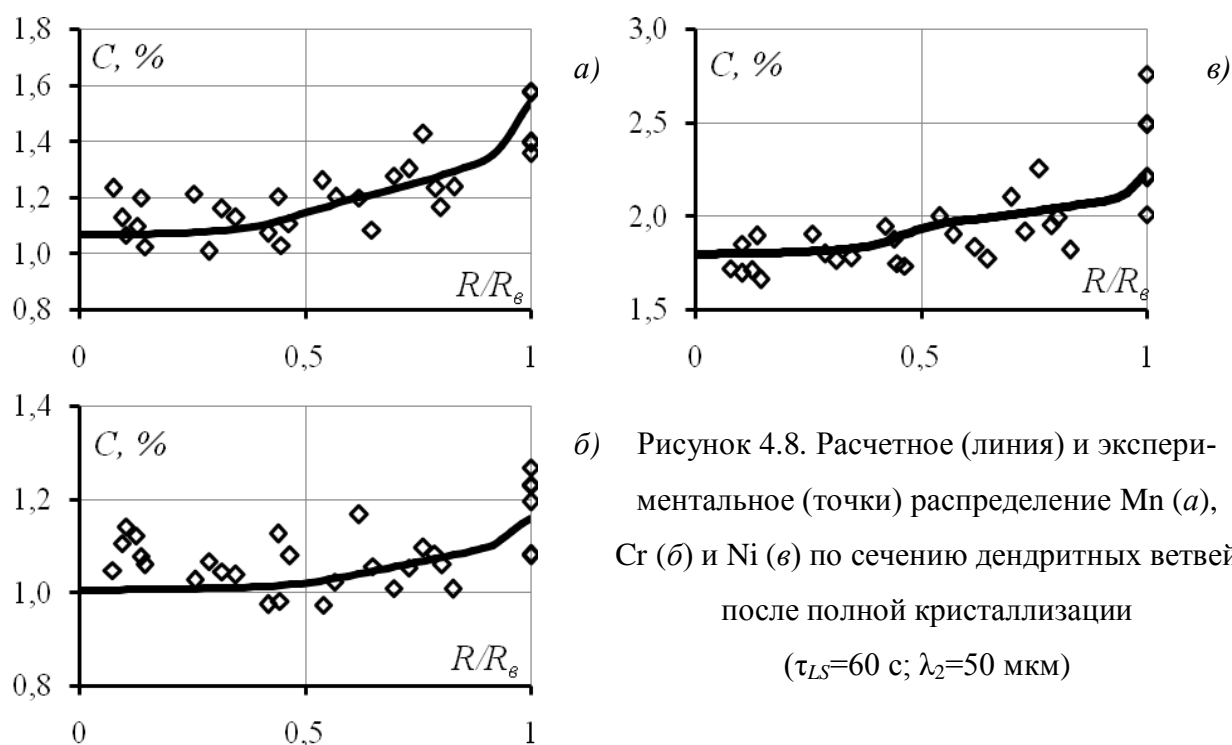
Таблица 4.1.

Физико-химические условия ликвации компонентов сплавов Fe-X<sub>i</sub>

X <sub>i</sub>	Коэффициент диффузии в твердой фазе, 10 <sup>-11</sup> м <sup>2</sup> /с		$k^{\delta L}$	$k^{\gamma L}$	Расчетное значение $\beta = \frac{C_{max} - C_{min}}{(C_L)_0}$	Экспериментальное значение $\beta^*$
	$D_S^{\delta}$	$D_S^{\gamma}$				
C	<b>485</b>	<b>73.5</b>	<b>0.19</b>	<b>0.34</b>	<b>0.01..0.1</b>	-
Si	3.03	0.096	0.77	0.52	0.4..0.8	-
Mn	1.59	0.029	0.76	0.78	0.3..0.5	0.48
Cr	1.70	0.004	0.95	0.86	0.1..0.2	0.22
Ni	1.23	0.014	0.83	0.95	0.2..0.3	0.40
Mo	2.20	0.030	0.80	0.58	0.8..1.0	-
Примечание: $(C_i)_{max}$ , $(C_i)_{min}$ – конечная концентрация компонентов по сечению дендритных ветвей; *) данные экспериментального исследования микроликвации с помощью аналитического автоэмиссионного растрового электронного микроскопа SUPRA 55VP фирмы Carl Zeiss						

Для хрома, в свою очередь, свойственна наименьшая степень ликвации, что связано с благоприятным соотношением коэффициентов распределения и диффузии, подтверждается также экспериментальными данными, полученными микро-

рентгеноспектральным анализом образцов исследуемой стали марки 10ХГН2 в осевой зоне отливки диаметром 80 мм, залитой в стальной кокиль (рис. 4.8) [107].



Исследованные компоненты сплава имеют значения коэффициентов распределения меньше единицы ( $k < 1$  – см. табл. 4.1), что приводит к их накоплению в расплаве и, соответственно, к увеличению концентрации по сечению дендритных ветвей. Немонотонный характер кривых, наблюдаемый на графиках, объясняется количественным различием характера перераспределения компонентов при формировании  $\gamma$ -фазы на завершающем этапе перитектического превращения из первичной  $\delta$ -фазы на межфазной границе ( $\delta/\gamma$ ) и из расплава — на границе ( $L/\gamma$ ). В результате на графиках распределения концентрации по сечению дендритных ветвей наблюдается перегиб кривых, отмечающий границу начала выделения  $\gamma$ -фазы.

Результаты сравнительного расчета ликвации (табл. 4.2) демонстрируют увеличение неоднородности распределения  $\beta$  всех компонентов сплава при увеличении интенсивности теплоотвода. В табл. 4.2 представлены расчетные данные о продолжительности перитектического превращения  $\Delta\tau_p$  и химической микронеоднородности на момент конца кристаллизации заперитектической стали 20Г (Fe-



0.18C-0.44Si-1.26Mn) при изменении продолжительности кристаллизации от 20 до 0.5 с, что вызывает соответствующее изменение дендритной структуры  $\lambda_2$ .

Таблица 4.2.

Влияние интенсивности теплоотвода на длительность перитектического превращения и дендритную ликвацию в стали 20Г

$\alpha$ , Вт/м <sup>2</sup> К	$\lambda_2$ , мкм	$\tau_{LS}$ , с	$\Delta\tau_P$ , с	$\frac{\Delta\tau_P}{\tau_{LS}}$	Кремний, %			Марганец, %		
					$C_{min}$	$C_{max}$	В	$C_{min}$	$C_{max}$	В
100	67	21.9	3.50	0.16	0.34	0.65	<b>0.72</b>	1.02	1.60	<b>0.46</b>
500	39	4.41	0.75	0.17	0.33	0.66	<b>0.77</b>	1.00	1.60	<b>0.48</b>
1500	28	1.49	0.27	0.18	0.32	0.67	<b>0.81</b>	0.98	1.60	<b>0.50</b>
4000	20	0.57	0.10	0.18	0.31	0.68	<b>0.84</b>	0.96	1.61	<b>0.51</b>

В результате при изменении продолжительности кристаллизации от 20 до 0.5 с. доля времени перитектического превращения ( $\Delta\tau_P$ ) в локальной продолжительности кристаллизации ( $\tau_{LS}$ ) сохраняется неизменной и составляет 16-18 %, что указывает на реализацию в разработанной модели микроликвации системных обратных связей, обеспечивающих взаимное соответствие диффузионно-контролируемого процесса перитектического превращения условиям теплоотвода за счет изменяющегося градиента концентрации углерода по сечению прослойки  $\gamma$ -фазы.

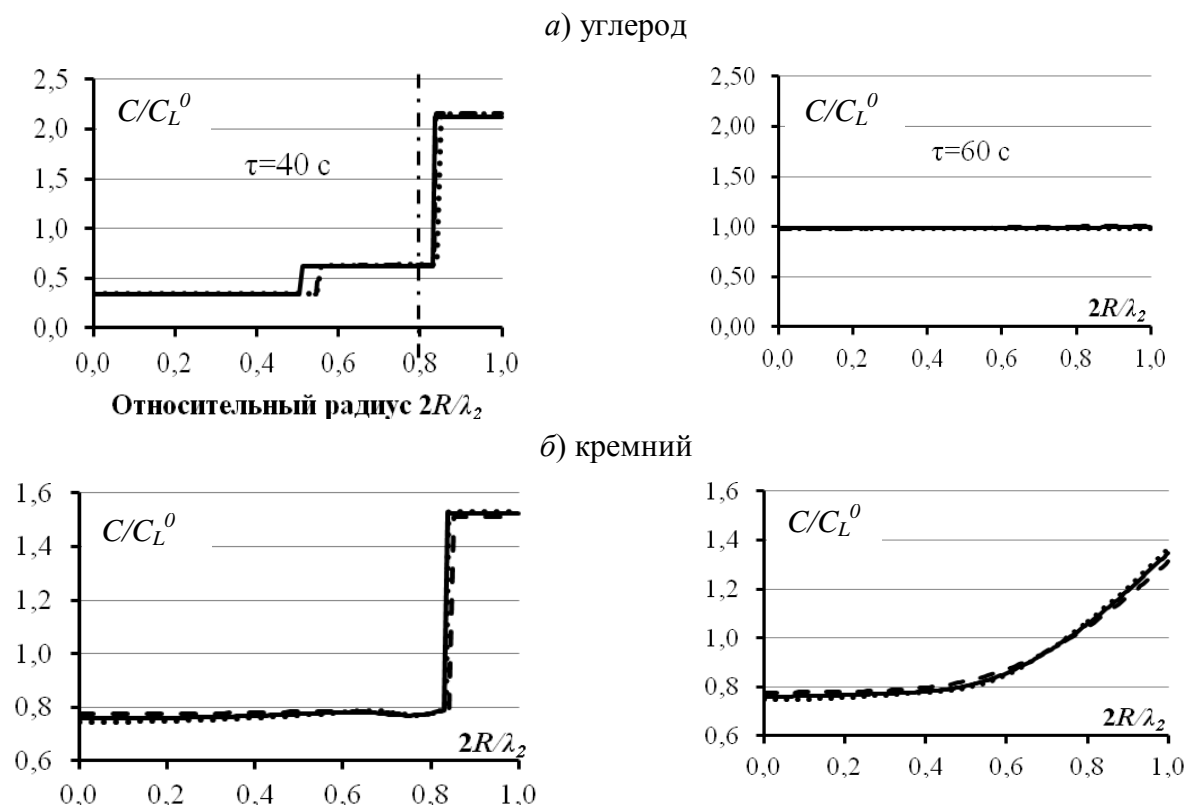
Как следует из сопоставления экспериментальных данных с результатами расчета, разработанная модель диффузионного перераспределения компонентов сплава показывает их хорошее соответствие, что позволяет использовать ее для анализа ранее не отмеченных особенностей дендритной ликвации.

## Влияние структурной микронеоднородности на развитие дендритной ликвации

Для анализа развития дендритной ликвации в условиях локальной неоднородности дендритной структуры в качестве объекта исследования использовали отливку из стали 10ХГН2. Была проанализирована эволюция химической микронеоднородности при одинаковой продолжительности кристаллизации ( $\tau_{LS}$ ) в осевой зоне отливки для различных значений междусосных промежутков в пределах изменения  $\lambda_2 = (\lambda_2)_{cp} \pm \sigma_\lambda$ , составляющего, как отмечено в разд. 3.2,  $\pm 20-25\%$  при  $(\lambda_2)_{cp} = 90$  мкм (рис. 3.3).

На рис. 4.9 продемонстрированы расчетные профили распределения легирующих элементов на стадии перитектического превращения при  $\tau = 40$  с (слева), а также после окончания затвердевания исследуемого сплава при  $\tau_{LS} = 60$  с (справа).

Первые выделения твердой фазы, имеющие состав  $(C_s)_i = k_i(C_L^0)_i$ , в дальнейшем изменяют его за счет диффузионного переноса в твердой фазе вследствие градиента концентрации по сечению дендритных ветвей, поскольку кристаллизация при  $k < 1$  сопровождается обогащением жидкой фазы компонентами сплава.



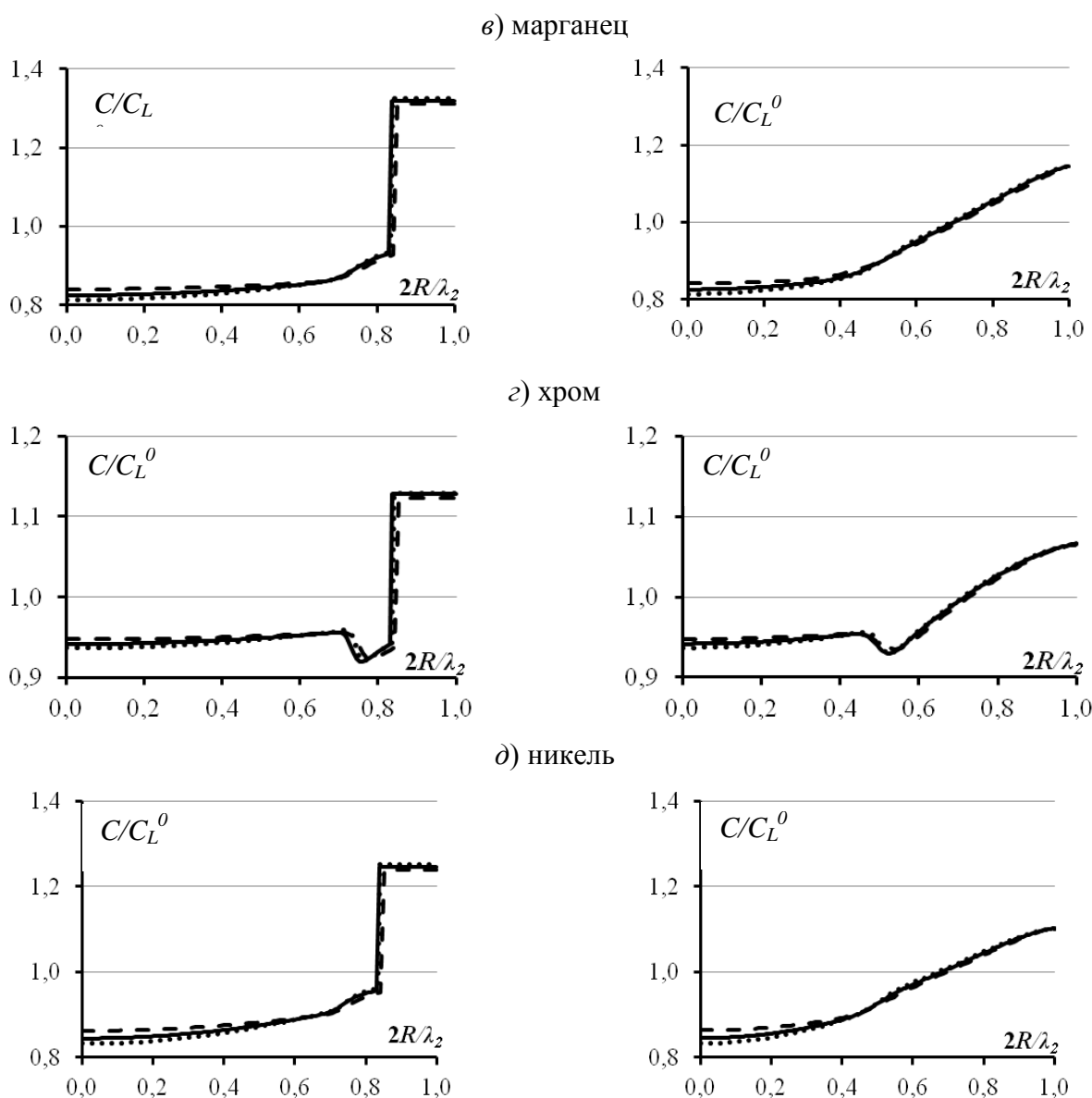


Рисунок 4.9. Расчетное распределение относительной концентрации  $C_i/C_0$  компонентов стали 10XГН2 (а-д) на этапе перитектического превращения ( $\tau=40$  с,  $m=0.7$ ) и финальной ( $\tau_3=60$  с) стадии кристаллизации в осевой зоне отливки при варьировании значений  $\lambda_2$  в пределах:  $\lambda_2=(\lambda_2)_{cp}-\sigma_\lambda$  (пунктир);  $\lambda_2=(\lambda_2)_{cp}$  (линия);  $\lambda_2=(\lambda_2)_{cp}+\sigma_\lambda$  (точки) при  $(\lambda_2)_{cp}=100$  мкм;  $\sigma_\lambda=30$  мкм; штрих-пунктир отмечает положение межфазной границы  $L/\delta$  в момент начала перитектического превращения

Локальное увеличение скорости коалесценции (прироста величины  $\lambda_2$ ) в пределах внутридендритного ансамбля вторичных ветвей приводит к увеличению протяженности пути диффузии, что понижает градиент концентрации (при одинаковой скорости выделения твердой фазы и, соответственно, продолжительности кристаллизации). По этой причине в осевой зоне дендритной ветви концентрация

$C_{min}$ , которая находится в пределах  $kC_L^0 < C_{min} < C_L^0$ , становится тем выше, чем менее интенсивно протекает коалесценция и соответствующее увеличение  $\lambda_2$ . Вместе с тем, как подтверждается результатами компьютерного моделирования, повышение интенсивности коалесценции (увеличение  $\lambda_2$ ) приводит к более интенсивному накоплению компонентов в расплаве и возрастанию их концентрации  $C_{max}$  в периферийных слоях дендритных ветвей.

Перитектическое превращение в центральной части опытного образца из стали 10ХГН2 (рис. 3.3, в) начинается после появления первых устойчивых зародышей  $\gamma$ -фазы ( $\tau \approx 37$  с) (рис. 4.9), что соответствует объемной доле твердой фазы  $m \approx 0.65$  (относительный радиус  $2R/\lambda_2 \approx 0.8$ ). Этот момент отмечен на графиках более интенсивным увеличением концентрации компонентов сплава в прослойке вторичной  $\gamma$ -фазы, что связано с ростом их концентраций в аустените. Однако быстрого выравнивания концентрации, характерного для высокоподвижного углерода (рис. 4.10, а), у элементов замещения (Si, Mn, Cr, Ni) не наблюдается, и существенное изменение их концентрации происходит лишь в зоне, близкой к положению фронта кристаллизации в начале перитектического превращения (рис. 4.9, б-г).

Таблица 4.3.

Зависимость концентрации компонентов сплава по сечению дендритных ветвей от величины локального междоусного промежутка  $\lambda_2$

$\lambda_2$ , мкм	Si, %			Mn, %			Cr, %			Ni, %		
	$C_{min}$	$C_{max}$	$\beta$	$C_{min}$	$C_{max}$	$\beta$	$C_{min}$	$C_{max}$	$\beta$	$C_{min}$	$C_{max}$	$\beta$
43	0,24	0,37	0,44	1,06	1,41	0,29	1,01	1,13	0,12	1,76	2,21	0,22
70	0,23	0,39	0,54	1,04	1,42	0,30	1,01	1,13	0,12	1,73	2,21	0,24
100	0,23	0,41	0,59	1,02	1,42	0,32	1,00	1,13	0,12	1,69	2,21	0,26
110	0,23	0,41	0,60	1,02	1,42	0,32	1,00	1,13	0,13	1,68	2,20	0,26
130	0,22	0,41	0,62	1,01	1,42	0,33	0,99	1,13	0,13	1,67	2,20	0,27

Зависимость степени дендритной ликвации от развития структурной микро-неоднородности представлена на рис. 4.10 и в табл. 4.3, где приведены расчетные данные об изменении значений минимальной и максимальной концентрации ком-

понентов стали 10ХГН2 по сечению дендритных ветвей, имеющих в исследуемом мезо-объеме различные значения  $\lambda_2$  при одинаковой продолжительности кристаллизации – за счет различной кинетики коалесценции.

В табл. 4.3 сопоставлено конечное распределение компонентов сплава (Si, Mn, Cr, Ni), достигаемое при формировании ветвей, разделенных различными по величине междоузлиями промежутками (в пределах от  $\lambda_{min}$  до  $\lambda_{max}$ ).

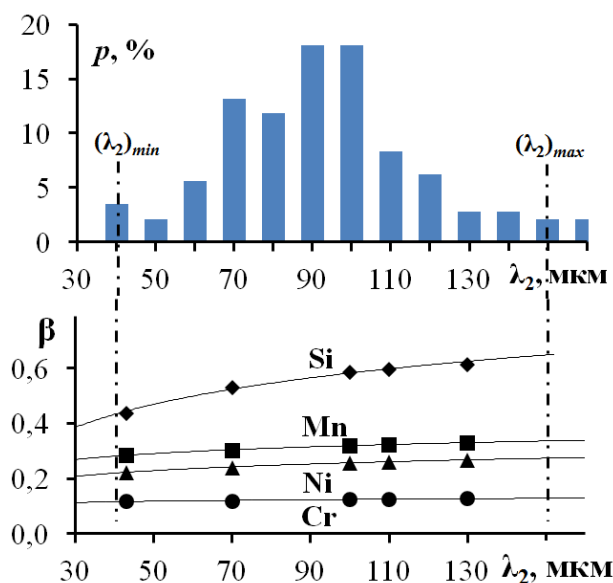


Рисунок 4.10. Изменение степени дендритной ликвации компонентов ( $\beta$ ) в зависимости от структурной микронеоднородности (сталь 10ХГН2,  $\tau_{LS}=60$  с)

( $D^\delta$  и  $D^\gamma$ ) определяется различием величины их коэффициентов распределения ( $k^{\delta L}$  и  $k^{\gamma L}$ ) (табл. 4.1).

Как видно из приведенных результатов (рис. 4.10, табл. 4.3), при увеличении интенсивности коалесценции (повышение  $\lambda_2$ ) усиление микроликвации кремния в достаточной степени выражено, чего нельзя заключить о характере микроликвации марганца, хрома и никеля. При этом основной прирост параметра  $\beta$  приходится на область кристаллизации последних долей жидкой фазы, в то время как для основного участка по сечению дендритной ветви профили распределения компонентов мало зависят от неоднородности дендритной структуры.

Анализ взаимосвязи процессов формирования микроструктурной неоднородности и дендритной ликвации показывает, что локальное уменьшение величины  $\lambda_2$  в процессе коалесценции (при равенстве  $\tau_{LS}$  в мезо-масштабе) вызывает за-

С ростом конечной величины  $\lambda_2$  при небольшом снижении концентрации компонентов сплава  $C_{min}$  на оси ветви наблюдается увеличение  $C_{max}$  в периферийных слоях, связанное с усилением неравновесного характера процесса кристаллизации. При этом неравномерность распределения различных компонентов при соизмеримых коэффициентах диффузии ( $D^\delta$  и

кономерное снижение микроликвации (рис. 4.11) в результате повышения концентрации  $C_{min}$  на оси ветвей и уменьшения  $C_{max}$  в их периферийных слоях.

Этот эффект является следствием уменьшения диффузионного потока компонентов между осевой и периферийной зонами ветвей в силу снижения градиента концентрации компонентов в твердой фазе – движущей силы обратной диффузии.

В результате степень микроликвации, возникающей в первую очередь вследствие отклонения коэффициентов распределения от единицы, усиливается/снижается под действием масштабного фактора ( $\lambda_2$ ), определяющего протяженность пути обратной диффузии и величину градиента концентрации.

Дальнейшее накопление и обобщение расчетных и экспериментальных данных открывает перспективы углубленного анализа механизмов взаимного влияния микроликвации и локальной микроструктурной неоднородности в зависимости от факторов различной природы (физико-химических, теплофизических, диффузионных и др.).

## 5. Использование результатов работы для анализа неравновесной кристаллизации литых заготовок

### 5.1. Возможности и перспективы развития

Компьютерный анализ затвердевания литых заготовок с развитием программного обеспечения получает все большее распространение. На многих предприятиях используются специализированные компьютерные программы (ProCast, Magma, Полигон и др.), которые моделируют различные кристаллизационные процессы, выполняя диагностическую функцию для разрабатываемых и имеющих технологических решений.

Для фасонного литья наиболее важным аспектом является формирование дендритной структуры, которая определяет размеры и расположение газовых и неметаллических включений, газоусадочной микропористости, проницаемость дендритного скелета для фильтрующегося сквозь него расплава, развитие микроликвации, переохлаждение, кинетику движения фронта кристаллизации, кинетику перитектического превращения и др.

Процесс кристаллизации металла и развития его дендритной структуры сопровождается существенным изменением условий фильтрационного питания и формирования усадочных пустот. При этом расход питающего расплава, описываемый уравнением Козени [108]:

$$q_{\Phi} = \frac{k_{\Pi}}{\mu} \frac{\partial P}{\partial x} \quad \text{при} \quad k_{\Pi} = k_0 \frac{\lambda_2^2 (1-m)^3}{m^2}, \quad (5.1)$$

резко сокращается по мере выделения твердой фазы  $m$  до полного прекращения питания при  $m = (m_0)_{\Pi}$  [66, 108, 109], когда достигается состояние непрерывного скелета твердой фазы, непроницаемой для потока расплава, при сопряженном увеличении междудосных промежутков  $\lambda_2$ , влияющих на коэффициент проницае-

мости  $k_n$  в результате прогрессирующей коалесценции дендритных ветвей (здесь  $\mu$  – динамическая вязкость расплава;  $\partial P/\partial x$  – градиент давления в зоне затвердевания;  $k_0$  – константа Козени).

Учитывая статистическую неоднородность распределения междудендритных промежутков  $\lambda_2$  и широкий диапазон их вероятных значений, описанные в разд. 3, использование при расчете коэффициента проницаемости средней величины  $(\lambda_2)_{\text{ср}}$ , получаемой в результате полного затвердевания, приводит к погрешности. В качестве эффективного значения площади фильтрационного канала  $(\lambda_2)^2$  в формуле (5.1) с учетом известного распределения вероятности  $p_i$  значений  $(\lambda_2)_i$  необходимо использовать соотношение  $(\lambda_2)_{\text{эфф}}^2 = \sum p_i (\lambda_2^2)_i$ , что позволяет внести соответствующую поправку, достигающую согласно предварительным оценочным расчетам (на основе экспериментальных гистограмм) ~20 %.

Анализ фильтрационного течения расплава с учетом изменения его давления позволяет решить задачу возникновения газоусадочной пористости, определяемую следующим условием:  $P_p - 2\sigma/r_p \cos\theta \geq P$ , где  $P_p$  – давление выделяющегося в порах газа;  $\sigma$ ,  $\theta$  – межфазное натяжение расплав-газ и угол смачивания на границе расплав-газ-твердая фаза;  $r_p$  – минимальный радиус поры, определяемый размерами междудендритных промежутков:  $r_p = \lambda_2(1-m^L)/2m^L$  [110]. Таким образом, прогнозирование статистической неоднородности междудендритных промежутков в макро-масштабе литой заготовки позволяет решить ряд трудностей, связанных с анализом влияния морфологических особенностей дендритной структуры на ряд сопряженных процессов, определяющих появление вышеуказанных дефектов.

Эволюция микроструктуры сопряжена с развитием микроликвации, являющейся одним из важных аспектов качества металла. На данный момент активно ведется поиск и анализ связей структурной и химической микрон неоднородности с размерами и расположением неметаллических включений [111], а также их наследственного влияния на качество готовой детали даже после термомеханической обработки.

Результаты выполненной работы ориентированы на комплексный анализ затвердевания литых заготовок из углеродистых и низколегированных сталей сов-



местно с программными пакетами «Polycast» (в части моделирования макромасштабных процессов) и «Polytherm» (термодинамическое моделирование). Сопряженное решение многоуровневых (макро-, мезо- и микро-) задач, рассмотренных в разд. 2-4, позволяет производить компьютерный анализ процессов формирования структурной микронеоднородности и дендритной ликвации в литых заготовках сложной конфигурации.

Пакет термодинамического моделирования «Polytherm», возможности которого частично раскрыты в разд. 2.2, позволяет рассчитывать значения теплофизических и физико-химических параметров железо-углеродистых сплавов (объемной теплоемкости жидкой и твердой фазы, теплоты кристаллизации, температуры ликвидуса и др.), необходимых для компьютерного анализа затвердевания отливок.

## **5.2. Компьютерный анализ затвердевания отливки «Корпус»**

Методика системного анализа формирования структурной и химической микронеоднородности, которая разработана в разд. 2-4, является основой для анализа характера дендритной структуры и ликвации, а также расчета усадочных дефектов на ее базе при компьютерном моделировании затвердевания фасонных отливок. Решение подобных задач для конкретной отливки «Корпус» массой 560 кг представлено ниже на рис. 5.1-5.6.

Для расчета теплообмена отливки с формой методом конечных разностей использована сеточная трехмерная геометрическая модель отливки, насчитывающая  $160 \times 160 \times 160 = 4.1 \cdot 10^6$  элементов. Информационное обеспечение расчета кристаллизации отливки «Корпус» из стали 30ХМЛ (C=0.30 %; Si=0.35%; Mn=0.65 %; Cr=1.00 %; Mo=0.25 % ) в песчано-жидкостекольной форме представлено в Приложении 2.

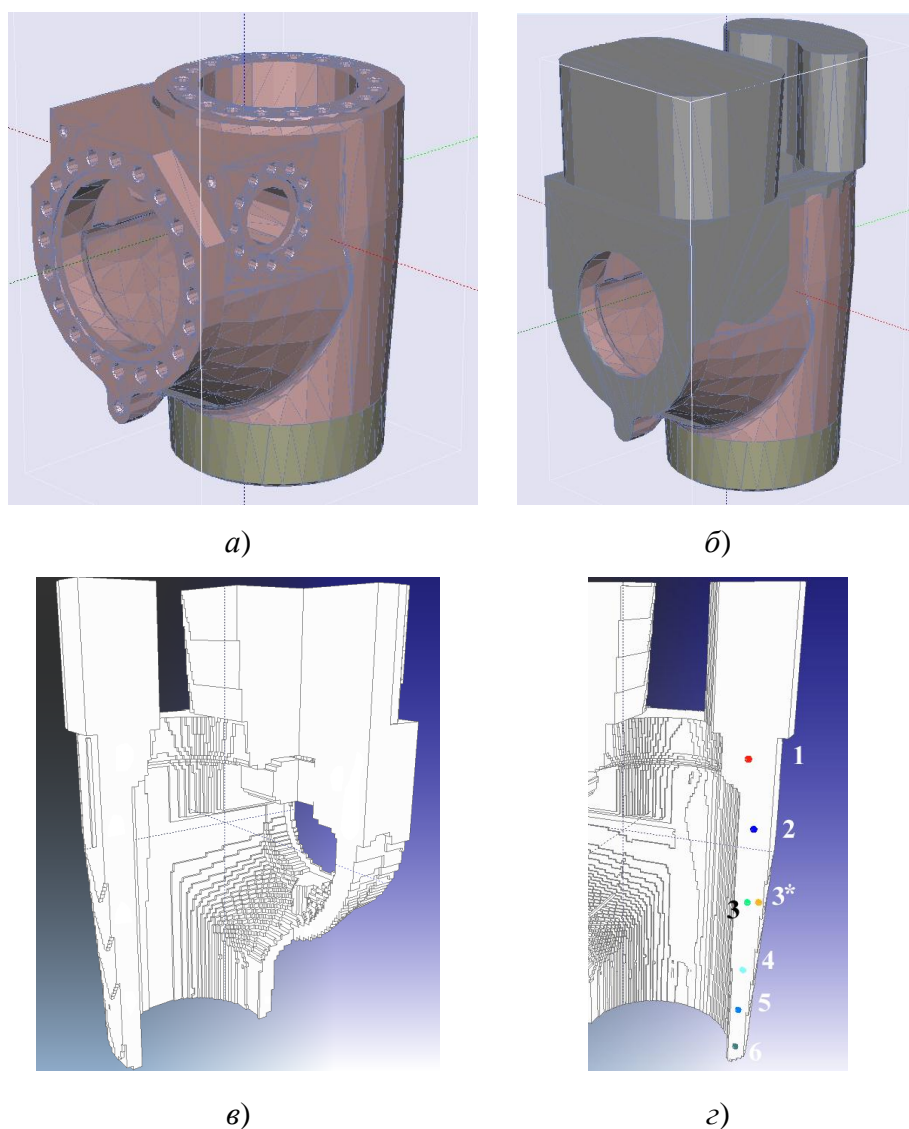


Рисунок 5.1. Макро-  
моделирование  
затвердевания отливки  
«Корпус»  
*а* – деталь (геометриче-  
ская модель); *б* – отливка  
(геометрическая мо-  
дель);  
*в* – сеточная  
макромодель отливки из  
мезо-элементов  
(4.16×3.19×5.92 мм);  
*г* – схема расположения  
контрольных точек при  
анализе локальной  
дендритной структуры  
и ликвации

В качестве локальных объектов для анализа формирования дендритной структуры и микроликвации с использованием представленных в разд. 2-4 системных компьютерных моделей рассмотрены мезо-объемы металла ( $V \approx 80 \text{ мм}^3$ ), находящиеся в вертикальной стенке отливки на различном расстоянии от ее нижней плоскости (рис. 5.1, *г*). Расположение точек и локальная продолжительность кристаллизации металла в них указаны в табл. 5.1.

Локальные значения коэффициента теплоотдачи ( $\alpha$ ) (см. разд. 2.2.1) в контрольных точках отливки для моделирования дендритной структуры и ликвации были определены на основе расчетной продолжительности кристаллизации ( $\tau_{LS}$ ), полученной в ходе численного решения трехмерной макромасштабной задачи (рис. 5.1-5.3, табл. 5.1).

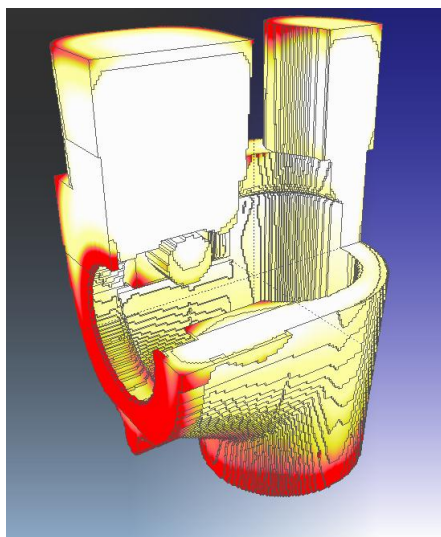


Рисунок 5.2. Распределение температур на поверхности и в сечении отливки «Корпус» при затвердевании ( $\tau=800$  с)

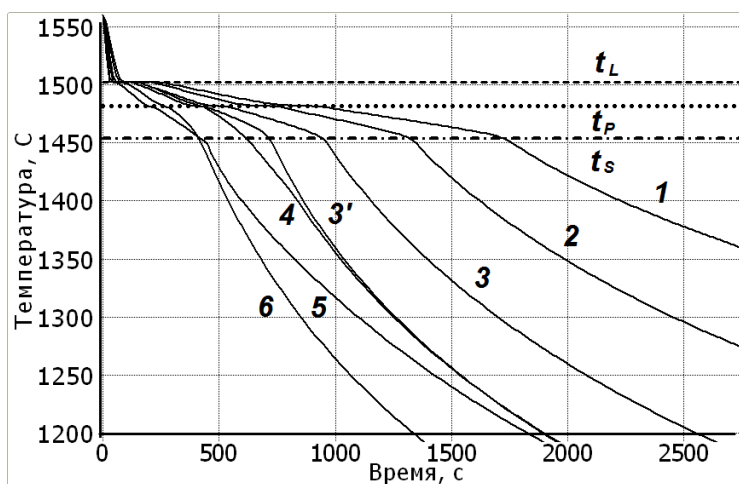


Рисунок 5.3. Расчетные термические кривые затвердевания стали 30ХМЛ в контрольных точках (1- 6) отливки «Корпус»

Таблица 5.1.

Условия затвердевания в контрольных точках

Контрольная точка (рис. 5.1, з)	Высота, мм	Толщина стенки, мм	Локальная продолжительность этапа, с			$\alpha$ , Вт/м <sup>2</sup> К
			$\tau_L$	$\tau_S$	$\tau_{LS}=\tau_S-\tau_L$	
1	560	91.0	200	2830	2630	0.40
2	440	58.4	90	1795	1705	0.66
3	310	54.5	85	1375	1290	0.85
3*	310	54.5/6.0	75	1290	1215	0.90
4	180	46.0	60	975	915	1.20
5	100	37.3	58	750	692	1.60
6	20	32.7	40	435	395	2.60

Примечание: точки 1-6 расположены в осевой зоне по высоте стенки; точка 3\* – на расстоянии 6.0 мм от поверхности;  $\tau_L$ ,  $\tau_S$  – продолжительность охлаждения мезо-элемента расплава от температуры заливки до температуры ликвидуса (солидуса);  $\tau_{LS}$  – локальная продолжительность затвердевания;  $\alpha$  – локальное значение коэффициента теплоотдачи

По высоте стенки отливки ее толщина сверху вниз постепенно уменьшается с 90 до 30 мм, что создает благоприятные условия для формирования твердой фазы без усадочных дефектов по всей высоте. Продолжительность кристаллизации контрольных мезо-объемов, расположенных на оси сечения стенки, составила от

2800 до 400 сек. при величине коэффициента теплоотдачи от 0.4 до 2.6 Вт/м<sup>2</sup>К. Полученные данные использованы в качестве информационного обеспечения базового программного модуля «Б» для расчета процессов, описанных в разд. 2 и необходимых для моделирования дендритной структуры.

**Прогноз структурной микронеоднородности.** Путем моделирования формирования микроструктуры с помощью модулей «Б» и «С», разработанных в разд. 2 и 3 соответственно, осуществлен расчет локальных гистограмм распределения вторичных междоусных промежутков  $\lambda_2$  (рис. 5.4) в контрольных точках 1-6 отливки «Корпус», образовавшихся в условиях неравновесной кристаллизации стали 30ХМЛ.

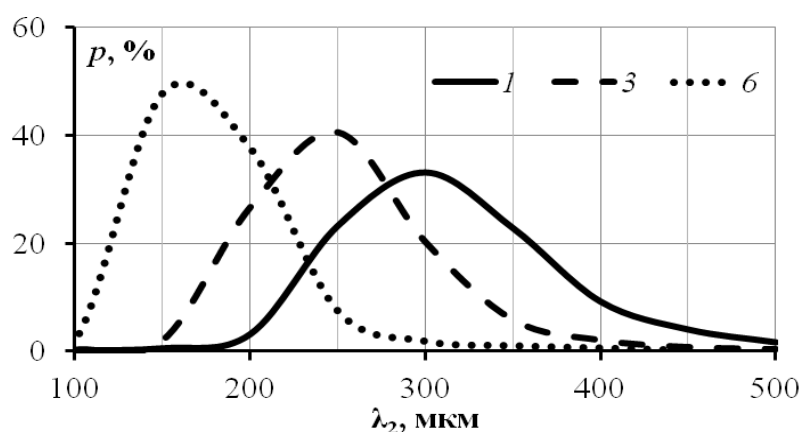
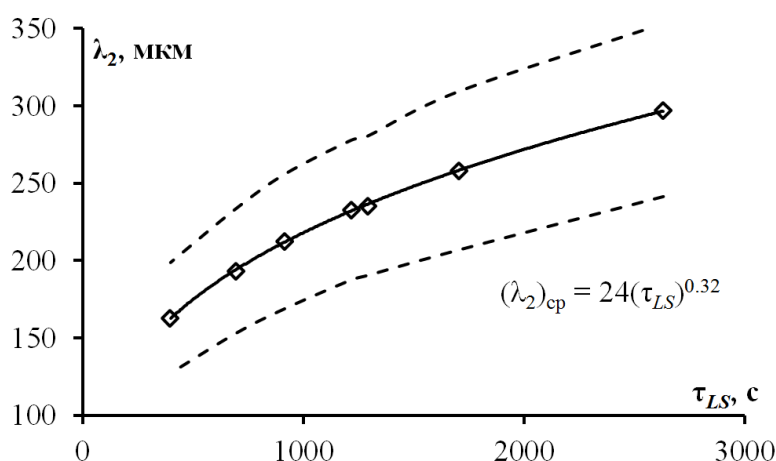


Рисунок 5.4. Структурная микронеоднородность в контрольных точках отливки «Корпус»

а) — гистограммы распределения междоусных промежутков  $\lambda_2$  в точках 1, 3 и 6;



б) — зависимость средней величины вторичных междоусных промежутков  $(\lambda_2)_{cp}$  (точки) и их размаха  $\pm\sigma_\lambda$  (пунктир) от локальной продолжительности затвердевания  $\tau_{LS}$

Анализ результатов моделирования, представленных на рис. 5.4 и в табл. 5.2, показывает, что с уменьшением продолжительности кристаллизации по направлению от прибыли к нижней части отливки происходит уменьшение как

средней величины междоусных промежутков, так и величины среднеквадратичного отклонения ( $\sigma_\lambda$ ), описываемое статистическими уравнениями (5.1):

$$(\lambda_2)_{cp}=24(\tau_{LS})^{0.32}; (\lambda_2)_{cp}+\sigma_\lambda=32(\tau_{LS})^{0.30}; (\lambda_2)_{cp}-\sigma_\lambda=17(\tau_{LS})^{0.34}. \quad (5.1)$$

Таблица 5.2.

Параметры микроструктуры  
в контрольных точках

Контрольная точка	$(\lambda_2)_{cp}$ , мкм	Среднекв. откл. $\sigma_\lambda$ , мкм
1	295	56
2	260	50
3	235	45
3*	233	45
4	210	43
5	195	40
6	165	36

По высоте постепенно сужающейся книзу стенки отливки «Корпус» (рис. 5.1, з) происходит значительное сокращение величины междоусных промежутков и их разброса. В связи с малой интенсивностью теплоотвода в песчано-жидкостекольной форме перепад температур и продолжительность затвердевания  $\tau_{LS}$  по сечению отливки (точки 3 и 3\*) отличаются незначительно, вследствие чего близки и характеристики дендритной структуры (табл. 5.2). При этом полученные зависимости количественно согласуются с результатами экспериментальных исследований (см.

табл. 1.6), что подтверждает адекватность разработанных моделей.

**Прогноз дендритной ликвации.** Моделирование дендритной ликвации в произвольных точках отливки опирается на многоэтапный анализ взаимосвязанных процессов различного уровня (макро-, мезо-, микро-) в рамках их системного взаимодействия, описанного в разд. 2-4. Анализ развития дендритной ликвации производили с помощью модуля «Л», описанного в разд.4.

На рис. 5.5 продемонстрировано конечное распределение компонентов стали 30ХМЛ по сечению микро-ячейки среднего размера  $R_k=(\lambda_2)_{cp}/2 \approx 150$  мкм для условий затвердевания и формирования дендритной структуры в контрольной точке № 1 (см. табл. 5.1-5.2). Сопоставление относительных данных показывает, что дендритная ликвация компонентов стали носит существенно различный характер.

Распределение углерода является равномерным при развитой микронеоднородности компонентов замещения, обусловленной, как отмечено в разд. 4.3, значительным отличием величины их коэффициентов диффузии  $D$  и коэффициентов распределения  $k$  от соответствующих параметров для компонента внедрения - углерода.

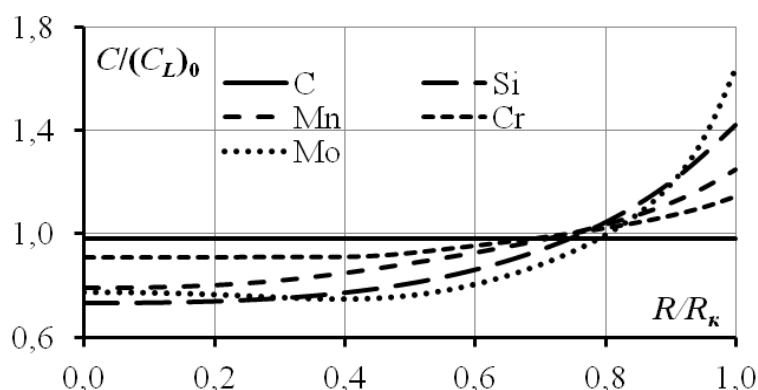


Рисунок 5.5. Распределение относительной концентрации компонентов стали 30ХМЛ в контрольной точке 1 по сечению дендритных ветвей

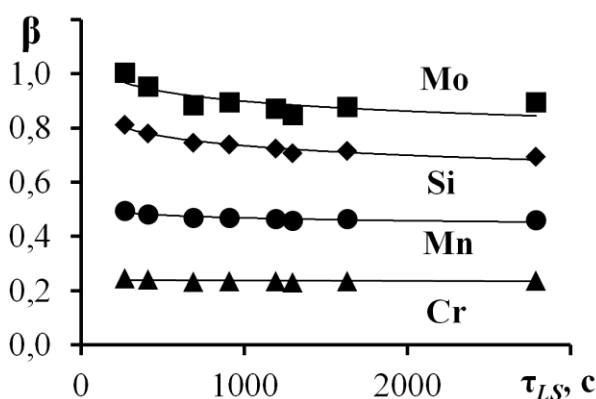


Рисунок 5.6. Зависимость индекса дендритной ликвации компонентов  $\beta$  от локальной продолжительности кристаллизации  $\tau_{LS}$

Наиболее сильно ликвация проявляется в неравномерном распределении молибдена и кремния ( $\beta=0.7-1.0$ ) при существенном отличии от таких компонентов, как марганец и хром ( $\beta=0.30-0.45$ ), что необходимо учитывать при прогнозировании механических свойств как литого, так и пластически деформированного металла, поскольку ликвационная неоднородность без проведения длительной гомогенизации сохраняется неизменной [112].

Зависимость степени дендритной ликвации от продолжительности кристаллизации по высоте отливки носит сходный характер: для хрома и марганца, отличающихся малой склонностью к ликвации, также незначительно и изменение индекса  $\beta$ , в то время как молибден и кремний при уменьшении продолжительности кристаллизации ликвируют сильнее (рис. 5.6).

Учитывая, что к усилению микроликвации приводит как повышение интенсивности коалесценции, так и увеличение скорости охлаждения  $C_R$ , находящиеся между собой в обратной зависимости ( $\lambda_2 \sim C_R^{-n}$ ), в рассматриваемых условиях кристаллизации отливки результирующий эффект увеличения индекса  $\beta$  обусловлен преобладающим действием тепловых факторов.

Таким образом, представленные результаты прогнозирования дендритной структуры и микроликвации по сечению фасонной отливки демонстрируют эффективность системного подхода при моделировании затвердевания стальных отливок и открывают перспективу развития комплексной модели, структура которой в критериальном виде представлена ниже.

### Заключение

Применение системного подхода для анализа неравновесной кристаллизации сплавов в работе основано на моделировании сопряженных процессов различной природы (термодинамических, тепловых, кристаллизационных, диффузионных, капиллярных и т.д.), происходящих в объектах разного пространственного масштаба (мезо-ячейки, ветви дендритов), путем решения соответствующих систем дифференциальных уравнений, представленных в разд. 2-4. Реализованные при этом численные модели, ориентированные на изучение дендритной кристаллизации, позволили выявить дополнительные закономерности формирования дендритной структуры в силу неполноты учета физико-химических взаимосвязей кристаллизационных и диффузионных процессов и их статистической природы.

Определяющими этапами дендритной кристаллизации являются:

**этап 1** – формирование начального мезомасштабного ансамбля дендритных кристаллитов и массива их вторичных ветвей, микро-морфологические параметры которых (длина, диаметр, междоусные промежутки и др.) образуются в условиях максимального термического переохлаждения расплава и его рекалесценции; вследствие этого начальный набор ветвей  $[\lambda_0 \pm \Delta\lambda_0]$  характеризуется значительной статистической неоднородностью этих параметров, в том числе – междоусных промежутков  $\Delta\lambda_0$  относительно среднего значения  $\lambda_0$ ;

**этап 2** – эволюционное преобразование морфологических параметров начального ансамбля вторичных ветвей  $[\lambda_0 \pm \Delta\lambda_0]$  в результате их совместной диффузионной коалесценции под влиянием капиллярных сил; результатом этого является формирование конечного неоднородного набора междусосных промежутков  $[\lambda_2 \pm \Delta\lambda_2]$ , параметры которого значительно превышают исходные ( $\lambda_2 \gg (\lambda_2)_0$ ;  $\Delta\lambda_2 > \Delta(\lambda_2)_0$ ).

Начальное термическое переохлаждение  $\Delta T$  кристаллизующегося мезообъема сплава (масштаба  $R_2$ ) и кинетика его изменения зависят от соотношения локальных условий теплообмена с окружающей средой ( $Bi$ ) и интенсивности тепловыделения при возникновении дендритных кристаллитов ( $\Omega_N$ ) и росте их стволов и ветвей ( $\Omega_V$ ) со скоростью  $V$ , выражаемых обобщенными соотношениями между определяющими и определяемыми критериальными параметрами (термодинамическими, теплофизическими, диффузионными, капиллярными и т.д.):

$$\Omega_{\Delta T} = \Delta T(c/L) = F_1(Fo, Bi, \Omega_m); \quad (5.2)$$

$$\Omega_m = F_2(Fo, \Omega_{\Delta T}, \Omega_N, \Omega_V, \Omega_{R_d}); \quad (5.3)$$

$$\Omega_V = F_3(\Omega_{DL}, \Omega_P, \Omega_\Gamma, \Omega_{CL}); \quad (5.4)$$

$$\Omega_R = F_3(Fo, \Omega_{\Delta T}, \Omega_V), \quad (5.5)$$

где  $Fo = a_m \tau_{кр} / R_2^2$ ;  $Bi = \alpha R_2 / \lambda_m$ ;  $\Omega_{DL} = D_L / a_m$ ;  $\Omega_N = (\phi N_S)^{1/3} R_2$ ;  $\Omega_V = V R_2 / (2a_m)$ ;  $\Omega_{R_d} = R_d / R_2$ ;  $\Omega_P = p C_0 (1-k)(c/L)$ ;  $\Omega_\Gamma = \Gamma / R^*(c/L)$ .

Система критериальных уравнений, определяющих *исходные* значения вторичных междусосных промежутков  $(\lambda_2)_0$ , отражает в обобщенной форме взаимосвязи между определяющими их факторами, которые учитываются при моделировании:

$$\Omega_0 = \lambda_0 / R_2 = F_5(\Omega_V, \Omega_{R_d}, \Omega_{DL}, \Omega_P, \Omega_\Gamma); \quad (5.6)$$

$$\Omega_{R^*} = F_6(\Omega_{DL}, \Omega_P, \Omega_\Gamma, \Omega_{CL}, P_T, P_C); \quad (5.7)$$

$$\Omega_{CL} = C_L / C_0 = F_7(k, \Omega_m, \Omega_{DS}), \quad (5.8)$$

где критерии  $\Omega_{DS} = D^S \tau_{LS} / \lambda_2^2$ ;  $P_T = V R_b / (2a_m)$ ;  $P_C = V R_b / (2D_L)$ , критериальные уравнения (5.6-5.8), а также (5.3) описывают изменение во времени радиуса дендритной сферы  $R_d$  и радиуса кривизны вершины дендритного ствола  $R_b$ , а также состава жид-



кой фазы ( $\Omega_{CL}$ ) в зависимости от условий затвердевания, доли твердой фазы ( $\Omega_m$ ) и величины ряда физико-химических параметров.

Основной этап формирования дендритной структуры описывает критериальное уравнение

$$\Omega_2 = \lambda_2 / R_2 = F_8(Fo, \Omega_0, \Omega_\phi, \Omega_{DL}, \Omega_P, \Omega_\Gamma, \Omega_{CL}), \quad (5.9)$$

начальные условия для которого заданы морфологическими характеристиками  $[(\lambda_2)_0 \pm \Delta(\lambda_2)_0]$  исходного ансамбля вторичных ветвей ( $\Omega_0$ ) и соответствующими параметрами ( $\Omega_\phi$ ), определяющими кинетику и вклад различных механизмов конкурентной коалесценции. Конечное распределение вторичных междоузлов промежутков  $[\lambda_2 \pm \Delta\lambda_2]$  является результатом совместного действия тепловых факторов ( $\Omega_m$ ,  $\tau_{LS}$  и др.), влияния покомпонентного состава сплава и его термодинамических характеристик ( $\Omega_P$ ), а также ряда кинетических, диффузионных и капиллярных параметров ( $\Omega_{DL}$ ,  $\Omega_P$ ,  $\Omega_\Gamma$ ,  $\Omega_{CL}$ ).

Системный характер используемой модели ориентирован на корректный учет взаимного влияния зависимых друг от друга переменных исследуемого процесса кристаллизации. Это отражено в системе приведенных критериальных уравнений (5.1-5.9) «перекрестным» характером таких эффектов, когда в правой части уравнений (наряду с определяющими) также определяемые критерии. Их значения изменяются в зависимости от текущей температуры, доли твердой фазы или продолжительности процесса кристаллизации ( $Fo$ ,  $\Omega_m$ ), что обусловлено эволюцией структурной неоднородности формирующегося дендритного ансамбля.

Эти изменения непосредственно отражаются на кинетике и характере сопряженных структурно-зависимых литейных процессов – течении жидко-твердой смеси, проницаемости скелета для фильтрующейся жидкой фазы, образовании газо-усадочной пористости, развитии предусадочного расширения и линейной усадки отливки, а также формировании дендритной химической неоднородности, исследованной в работе. Результаты этого анализа свидетельствуют о непосредственной взаимосвязи хода и масштабов дендритной ликвации с характером локальной микроструктурной неоднородности.

## Выводы

1. Для системного анализа процесса кристаллизации стали сформирована двухэтапная модель эволюции первичной структуры, включающая формирование и продольный рост первичных осей центров дендритной кристаллизации в *междендритном* расплаве до их смыкания (первый этап), после чего на втором этапе дальнейшее выделение твердой фазы из *внутридендритного* расплава происходит преимущественно в результате радиального утолщения ансамбля разнородных вторичных боковых ветвей, возникших на первом этапе и испытывающих диффузионную коалесценцию вследствие взаимного растворения (утолщения) ветвей малого (большого) радиуса под действием капиллярных сил.

Компьютерная реализация этой модели подтвердила ее количественное согласие с известными обобщенными данными эмпирических исследований дендритной кристаллизации на макро-, мезо- и микроуровне и сделала возможным количественное прогнозирование структурной и химической неоднородности дендритной структуры, согласующееся с полученными в работе экспериментальными данными.

2. Программный комплекс, разработанный для компьютерного анализа эволюции дендритной структуры на основе представленной в п. 1 модели, реализует совместное решение системы дифференциальных уравнений, описывающих сопряженное протекание тепловых, кристаллизационных, и диффузионных процессов в многофазной системе из жидкой фазы,  $\delta$ - фазы и  $\gamma$ -фазы при формировании первичной структуры стали в результате *неравновесного* перитектического превращения. Анализ решаемой системы уравнений дает возможность выявить базовые термодинамические, теплофизические и физико-химические факторы, определяющие темп (по температуре) и скорость (по времени) исследуемых процессов и выявить их основные системные взаимосвязи для прогнозирования хода и ко-

нечных результатов кристаллизации – дендритной структуры и дендритной ликвации.

3. Неравновесный характер кристаллизации стали, количественно выявленный в результате моделирования, обусловлен различной кинетикой теплоотвода и тепловыделения при формировании твердой фазы и проявляется в термическом переохлаждении расплава относительно равновесной диаграммы состояния, что определяет скорость роста дендритных стволов и ветвей, а также в существенном подавлении диффузии компонентов замещения в твердой фазе по сравнению с диффузией углерода, перенос которого диктует соотношение концентраций на межфазных границах и скорость их движения. Результатом неравновесного характера кристаллизации является возникновение дендритной ликвации в микро-масштабе вторичных ветвей и возникновение на межфазной границе  $\delta/\gamma$  близких к паравравновесным условий, когда соотношение концентраций углерода и его переход через границу следует условиям локального равновесия при отсутствии перераспределения компонентов замещения ввиду их весьма малой диффузионной подвижности.

4. Средствами компьютерного моделирования исследовано влияние интенсивности теплоотвода, состава стали и объемной плотности центров кристаллизации на темп выделения твердой фазы, кинетику переохлаждения расплава и изменение концентрации его компонентов, зарождение и формирование вторичных мезо-масштабных междоосных промежутков и микро-масштабную дендритную ликвацию различных компонентов. Установлено, что отклонение от равновесного хода кристаллизации, которое в зависимости от ряда факторов может достигать значительных величин, обусловлено торможением диффузии компонентов внедрения в твердой фазе  $D^S$  и находится в прямой зависимости от локального значения комплексного параметра  $D^S/\nu_S\lambda$ , где  $\nu_S=dR/d\tau$ , величина которого связана с термическим переохлаждением  $\Delta T$  соотношением  $\nu_S(\Delta T)$  для скорости кристаллизации  $\nu_S$  и шириной вторичных междоосных промежутков  $\lambda_2$ , изменение которых в процессе коалесценции связано с величиной ряда термодинамических и капиллярных параметров. Результаты расчета демонстрируют наличие от-

рицательной обратной связи между объемной плотностью центров кристаллизации и величиной термического переохлаждения, поскольку увеличение скорости образования твердой фазы при повышении плотности дендритных ветвей приводит к увеличению тепловыделения, и, как следствие, снижению переохлаждения, определяющего кинетику их роста кристаллизации.

5. С использованием метода Монте-Карло в работе выполнен анализ статистической эволюции дендритной структуры на этапе возникновения ансамбля вторичных ветвей и в процессе их диффузионной коалесценции при конкурентной реализации различных механизмов их протекания. Полученные гистограммы распределения вторичных междусосновых промежутков дендритов свидетельствуют о значительной структурной неоднородности дендритных систем как при первоначальном их формировании, так и в результате дальнейшего развития на этапе коалесценции. Эта неоднородность, характеризующаяся высокими значениями коэффициентов вариации междусосновых промежутков ( $\pm 20-25\%$ ), выявлена при статистическом анализе исследованной микроструктуры стали и, как установлено путем моделирования, оказывает значительное влияние на ход сопряженного процесса дендритной ликвации, а также важна для оценки условий возникновения различных литейных дефектов.

6. На основе результатов, полученных методом Монте-Карло при моделировании диффузионной коалесценции дендритных ветвей, проведено сопоставление и статистический анализ роли различных механизмов коалесценции (I-IV) при их конкурентном прохождении. На основе метода нечетких множеств при сопоставлении экспериментальных и расчетных гистограмм распределения вторичных междусосновых промежутков установлена количественная оценка их относительного вклада, которая для исследованной низкоуглеродистой стали указывает на преобладающее значение (до 90 %) механизма радиального растворения ветвей. Этот результат позволяет существенно упростить расчетную методику оценки структурной неоднородности дендритных систем.

7. С помощью статистического анализа металлографических данных по дендритной структуре стали в сочетании с компьютерным моделированием раз-

личных механизмов процесса коалесценции установлены базовые безразмерные соотношения между геометрическими параметрами вторичных ветвей и пределы их случайного разброса, отличающие дендритную структуру исследованных сплавов и обеспечивающие построение гистограмм распределения вторичных междоусных промежутков, характеристики которых (среднее, медиана и др.) согласуются с экспериментальными оценками.

8. По результатам численного расчета затвердевания фасонной отливки произвольной конфигурации из исследуемого сплава с учетом технологических условий ее изготовления реализован прогноз дендритной структуры и дендритной ликвации с использованием характеристик структурной и химической микронегоднородности, определяемых путем компьютерного моделирования мезо- и микромасштабных процессов для заданной величины локальной интенсивности теплоотвода.

## Список литературы

1. Курц У., Фишер Д. Фундаментальные основы затвердевания. – М.-Ижевск: Институт Компьютерных исследований, 2013. – 300с.
2. Stefanescu D. Science and engineering of casting solidification. – New York.: Springer, 2009. – 413 с.
3. Голод В., Емельянов К., Орлова И. Дендритная микронеоднородность литой стали: обзор проблем и их компьютерный анализ (Часть I) // Черные металлы, 2013, № 8. – С. 9-16.
4. Голод В. М., Емельянов К. И., Орлова И. Г. Дендритная микронеоднородность литой стали: обзор проблем и их компьютерный анализ (Часть 2) // Черные металлы, 2013, № 9. – С. 25-32.
5. Волкова В.Н., Денисов А.А. Основы теории систем и системного анализа. – СПб.: Изд-во «СПбГТУ», 2001. – 512 с.
6. Козлов В.Н. Системный анализ, оптимизация и принятие решений. – М.: Изд-во «Проспект», 2010. – 176 с.
7. Самойлович Ю.А. Системный анализ кристаллизации слитка. – Киев: Изд-во «Наук. думка», 1983. – 248 с.
8. Биндер К. и др. Методы Монте-Карло в статистической физике. – М.: Изд-во «Мир», 1982. – 400 с.
9. Соболев И.М. Численные методы Монте-Карло. – М.: Наука, 1973. – 311 с.
10. Weisgerber B., Hecht M., Harste K. Investigations of the solidification structure of continuously slabs // Steel Res., 1999, v. 70, No. 6. – PP. 403-411.
11. Pierer R., Bernhard C. On the influence of carbon on secondary dendrite arm spacing in steel // J. Mater. Sci., 2008, v. 43, No. 21. – PP. 6938-6943.
12. Hanao M., Kawamoto M., Yamanaka A. Growth of solidified shell just below the meniscus in continuous casting mold // ISIJ Int., 2009, v. 49, No. 3. – PP. 365-374.

13. Suzuki A., Suzuki T., Nagaoka Y., Iwata Y. On secondary dendrite arm spacing in commercial carbon steels with different carbon content // J. Jpn. Inst. Metall., 1968, v. 32, No. 12.– PP. 1301-1305.
14. Schwerdtfeger K. Einfluß der erstarrungsgeschwindigkeit auf die mikroseigerung und die interdendritischeausscheidung von Mangansulfideinschlüssen in cinemangan und kohlenstoffenthaltendenstahl // Arch. Eisenhüttenwes., 1970, v.41, No. 9.– PP. 923-937.
15. Schwerdtfeger K. Einfluß der erstarrungsgeschwindigkeit und des schwefegchaltes auf die durchschnittlichegröße von Mangansulfideinschlüssen in cinemangan und kohlenstoffenthaltendenstahl // Arch. Eisenhüttenwes., 1972, v. 43, No. 3.– PP. 201-205.
16. Edvardsson T., Fredriksson H., Svensson I. A study of the solidification process in low-carbon manganese steels // Metal Science, 1976, No.9.– PP. 298-306.
17. Jacobi H., Schwerdtfeger K. Dendrite morphology of steady state unidirectionally solidified steel // Metall. Trans., 1976, v. 7A, No. 6.– PP. 811-820.
18. Taha M.A., Jacobi H., Imagumbai M., Schwerdtfeger K. Dendrite morphology of several steady state unidirectionally solidified iron base alloys // Metall. Trans., 1982, v. 13A, No. 12.– PP. 2131-2141.
19. Steffen R., Thielmann R. Entwicklungen zum bandgießen von stahl // Stahl und Eisen, 1986, v. 106, No. 11.– PP. 631-640.
20. Imagumbai M. Relationship between primary- and secondary – dendrite arm spacing of C-Mn steel uni-directionally solidified in steady state // ISIJ Int., 1994, v. 34, No. 12.– PP. 986-991.
21. Cabrera-Marrero J.M. et al. Macro-micro modeling of the dendritic microstructure of steel billets processed by continuous casting // ISIJ Int., 1998, v. 38, No. 3.– PP. 812-821.
22. Jacobi H., Wunnenberg K. Solidification structure and micro-segregation of uni-directionally solidified steels // Steel Res., 1999, v. 70, No. 8+9.– PP. 362-367.
23. A guide to the solidification of steels. – Jernkontoret, Stockholm, 1977. – 162 p.

24. El-Bealy M., Thomas B. Prediction of dendrite arm spacing for low alloy steel casting processes // Metall. Mater. Trans., 1996, v. 27B, No. 4.– PP. 689-693.
25. Louhenkilpi S., Miettinen J., Holappa L. Simulation of microstructure of as-cast steels in continuous casting // ISIJ Int., 2006, v. 46, No. 6.– PP. 914-920.
26. Won Y. M., Thomas B. Simple model of microsegregation during solidification of steels// Metall. Mater. Trans., 2001, v. 32A, No. 7.– PP. 1755-1767.
27. Cicutti C., Boeri R. Development of an analytical model to predict the microstructure of continuously cast steel slab // Steel Res., 2000, v. 71, No. 8.– PP. 288-294.
28. Volkova O., Heller H.P., Janke D. Microstructure and cleanliness of rapidly solidified steels // ISIJ Int., 2003, v. 43, No. 11.– PP. 1724-1732.
29. Karlinski de Barcellos V. et al. Modelling of heat transfer, dendrite microstructure and grain size in continuous casting of steels // Steel Res. Int., 2010, v. 81, No. 6.– PP. 461-471.
30. Kahlweit M. On the ageing of dendrites// Scripta Metallurgica, 1968, v.2.– PP. 251-254.
31. Reeves J., Kattamis T. A model for isothermal dendritic coarsening// Scripta Metallurgica, 1971, v.5.– PP. 223-230.
32. Whisler N., Kattamis T. Dendritic coarsening during solidification// J. Cryst. Growth, 1972, v.15.– PP. 20-24.
33. Whisler N., Kattamis T. Ostwald ripening during solidification of nondendritic spherical structure// J. Mater. Sci., 1972, v.7.– PP. 888-894.
34. Wilson P., Kattamis T. Coarsening during solidification of aluminium-copper alloys// J. Mater. Sci., 1988, v.23.– PP. 2882-2892.
35. Kraft T., Rettenmayr M., Exner H. An extended numerical procedure for predicting microstructure and microsegregation of multicomponent alloys// Modelling Simul. Mater. Sci. Eng., 1996, v.4.– PP. 161-177.
36. Han Q., Hu H., Zhong X. Models for the isothermal coarsening of secondary dendrite arms in multicomponent alloys // Metall. Mater. Trans. B, 1997, v. 28B, No. 6.– PP. 1185-1187.



37. Chen M., Kattamis T. Dendrite coarsening during directional solidification of Al-Cu-Mn alloys// Mater. Sci. Engin., 1998, v.A247.– PP. 239-247.
38. Flemings M. Coarsening in solidification processing// Mater. Trans., 2005, v.46, No.5.– PP. 895-900.
39. Terzi S. et al. Coarsening mechanisms in a dendritic Al-10% Cu alloy // Acta Mater., 2010, v. 58.– PP. 20–30.
40. Zhu M. et al. Numerical simulation of microstructure evolution during alloy solidification by using cellular automaton method// ISIJ Int., 2010, v.50, No.12.– PP. 1851-1858.
41. Chen Y. et al. Phase-field modeling of the initial transient in directional solidification of Al–4wt%Cu alloy// ISIJ Int., 2010, v.50, No.12.– PP. 1895-1900.
42. Wang J., Inatomi I. Three-dimensional phase field modeling of the faceted cellular growth// ISIJ Int., 2010, v.50, No.12.– PP. 1901-1907.
43. Yutuo Z. et al. Phase field modeling of dendritic coarsening during isothermal solidification// Res. Dev., 2011, No.8.– PP. 313-315.
44. Alkemper J., Voorhees P. Three-dimensional characterization of dendritic microstructures// Acta Mater., 2001, v.49.– PP. 897-902.
45. Mendoza R., Alkemper J., Voorhees P. The morphological Evolution of dendritic microstructures during coarsening// Metall. Mater. Trans., 2003, v. 34A, No 3.– PP. 481-489.
46. Чернов А.А. и др. Современная кристаллография, т.3. Образование кристаллов. – М.: «Наука», 1980.
47. Кристиан Д. Теория превращений в металлах и сплавах. – М.: «Мир», 1978.
48. Гиршович Н.Г. Кристаллизация и свойства чугуна в отливках. – М.-Л.: «Машиностроение», 1966.
49. Каменецкая Д.С. Железо высокой степени чистоты. – М.: «Металлургия», 1978.
50. Turnbull D. Kinetics of solidification of supercooled liquid mercury droplets// J. Chem. Phys., 1952, v.20.– p. 411.

51. Баландин Г.Ф. Формирование кристаллического строения отливок. Кристаллизация в литейной форме. – М.: «Машиностроение», 1973.– 288 с.
52. Мартюшев Л.М., Селезнев В.Д. Принцип максимального производства энтропии в физике и смежных областях. – Екатеринбург: ГОУ ВПО УГТУ-УПИ, 2006.– 83 с.
53. Young K., Kirkwood D. The dendrite arm spacing of aluminium-copper alloys solidified under steady-state conditions// Metall. Trans. A., 1975, v. 6A.– PP. 197-205.
54. Okamoto T., Kishitake K. Dendritic structure in unidirectionally solidified cyclohexanol// J. Cryst. Growth, 1975, v. 29.– PP. 131-136.
55. Turkeli A. Primary arm spacing in unidirectionally solidified low alloy steels// Modeling of casting, welding and advanced solidification processes – XI, 2006.– PP. 585-592.
56. Hunt J., Lu S. Numerical modelling of cellular/dendritic array growth: spacing and structure predictions// Metall. Trans. A., 1996, v. 27A.– PP. 611-623.
57. Ma D., Sahm P. Primary spacing in directional solidification// Metall. Trans. A., 1998, v. 29A.– PP. 1113-1119.
58. Kaya H. et al. Dependency of the dendritic arm spacings and tip radius on the growth rate and composition in the directionally solidified succinonitrile–carbon tetrabromide alloys// J. Cryst. Growth, 2005, v.276.–PP. 583-593.
59. Liu S., Lu S., Hellawell A. Dendritic array growth in the systems  $\text{NH}_4\text{Cl-H}_2\text{O}$  and  $[\text{CH}_2\text{CN}]_2\text{-H}_2\text{O}$ : the detachment of dendrite side arms induced by deceleration// J. Cryst. Growth, 2002, v.234.–PP. 740-750.
60. Berkdemir A., Gündüz M. Effect of growth rate and Mg content on dendrite tip characteristics of Al-Cu-Mg ternary alloys// APPL. Phys. A, 2009, v.96.– PP. 873-886.
61. Seetharaman V., Fabietti L., Trivedi R. Dendritic growth in the carbon tetrabromide and hexachlorethane system// Metall. Trans. A, 1989, v.20, No.11.–PP. 2567-2570.
62. Hunt J. Solidification and casting of metals. – London., The Metals society, 1979. – 192 p.

63. Trivedi R. Interdendritic spacing: II. A comparison of theory and experiments // *Metall. Trans. A*, 1984, v.15A.–PP. 977-982.
64. Rappaz M., Boettinger W. On dendritic solidification of multicomponent alloys with unequal liquid diffusion coefficients// *Acta Mater.*, 1999, v.47, No.11.–PP. 3205-3219.
65. Yoshioka H., Tada Y., Hayashi Y. Crystal growth and its morphology in the mushy zone// *Acta Mater.*, 2004, v. 52.– PP. 1515-1523.
66. Голод В.М., Савельев К.Д., Басин А.С. Моделирование и компьютерный анализ кристаллизации многокомпонентных сплавов на основе железа. – СПб., Изд-во Политехн. ун-та, 2008. – 372 с.
67. Чернов А.А. Оценка времени преобразования включений и дендритных кристаллов // *Кристаллография*, 1956, т. 1, вып. 5.–С. 589-593.
68. Kattamis T.Z., Coughlin J.C., Flemings M.C. Influence of coarsening on dendrite arm spacing of aluminium-copper alloys // *Trans. AIME*, 1967, v.239, No. 10.– PP. 1504-1511.
69. Roosz A., Exner H.E. Numerical modeling of dendritic solidification in aluminium-rich Al-Cu-Mg alloys // *Acta Metall. Mater.*, 1990, v. 38, No. 2.– PP. 375-380.
70. Nastac L., Stefanescu D.M. Macrotransport - solidification kinetics modeling of equiaxed dendritic growth: Part. 1. Model development and discussion // *Metall. Mater. Trans.*, 1996, v. 27A, No. 12.– PP. 4061-4074.
71. Tensi H.M., Fuchs H. Dendritenarmvergroberung bei binaren und ternaren Aluminium-Legierungen // *Zeitschrift für metallkunde*, 1983, Bd. 74, H. 6.– S. 351-357.
72. Ronto V., Roosz A. Numerical simulation of dendrite arm coarsening in case of ternary Al alloys // *Mater. Sci. Forum*, 2003, v. 414-415.– PP. 483-490.
73. Флемингс М. Процессы затвердевания. – М.: Мир, 1977. – 423 с.
74. Ohnaka I. Mathematical analysis of solute redistribution during solidification with diffusion in solid phase // *Trans. ISIJ*, 1986, v.26, No. 12.– PP. 1045-1051.
75. Kobayashi S. A mathematical model for solute redistribution during dendritic solidification// *Trans. ISIJ*, 1988, v. 28.– PP. 535-542.

76. Himemiya T., Umeda T. Solute redistribution model of dendritic solidification considering diffusion in both the liquid and solid phases// ISIJ Int., 1998, No. 7.– PP. 730-738.
77. Shin Y. et.al. An analytical model of microsegregation in alloy solidification// ISIJ Int., 2001, v. 41, No. 2.– PP. 158-163.
78. Liu Z., Wei J., Cai K. A coupled mathematical model of microsegregation and inclusion precipitation during solidification of silicon steel// ISIJ Int., 2002, Vol. 42, No. 9.– PP. 958-963.
79. Cicutti C., Boeri R. Analysis of solute distribution during the solidification of low alloyed steels // Steel Res. Int., 2006, v.77, No. 3.– PP. 194-201.
80. Fredriksson H., Stjerndahl J. Solidification of iron-base alloys // Metal Sci., 1982, v. 16.– PP. 575-585.
81. Matsumiya T. et. al. Mathematical analysis of segregation in continuously-cast slabs//Trans. ISIJ, 1984, v. 24.– PP. 873-881.
82. Ohsasa K., Nakaue S., Kudoh M., Narita T. Analisis of solidification path of Fe-Cr-Ni ternary alloy// ISIJ Int., 1995, Vol. 35, No. 6.– PP. 629-636.
83. El-Bealy M., Fredriksson H. Modeling of peritectic reaction and macrosegregation in casting of low carbon steel // Metall. Mater. Trans., 1996, v. 27B, No 6.– PP. 999-1014.
84. Shibata H. et. al. Kinetics of peritectic reaction and transformation in Fe-C alloys // Metall. Mater. Trans., 2000, v. 31B.– PP. 981-991.
85. Ueshima Y. et al. Analysis of solute  $\delta/\gamma$  transformation during solidification // Met. Mater. Trans., 1986, v. 17B, No 6.– PP. 845-859.
86. Natsume Y., Shimamoto M., Ishida H. Numerical modeling of microsegregation for Fe-base multicomponent alloys with peritectic transformation coupled with thermodynamic calculations// ISIJ Int., 2010, v. 50, No. 12.– PP. 1867-1874.
87. Thuinet L., Combeau H. A new model of microsegregation for macrosegregation computation in multicomponent steels. Part I: theoretical calculation and algorithm // Computational Materials Science, 2009, v. 45.– PP. 294-304.

88. Koseki T. et. al. Numerical modeling of solidification and subsequent transformation of Fe-Cr-Ni alloys // Metall. Mater. Trans., 1994, v. 25A.– PP. 1309-1321.
89. Schuh C. Modeling gas diffusion into metals with a moving-boundary phase transformation // Metall. Mater. Trans., 2000, v. 31A.– PP. 2411-2421.
90. Thuinet L., Combeau H., Lesoult G. Microsegregation in steels during columnar growth and peritectic reaction. Part II: modeling and numerical simulation. Comparison with results // Mater. Sci. Forum, 2006, v.508.– PP. 367-372.
91. Aminorroaya S., Reid M.,Dippenaar R. Simulation of microsegregation and the solid/liquid interface progression in the concentric solidification technique// Modelling Simul. Mater. Sci. Eng., 2011, v. 19.– PP. 1-16.
92. Ghosh G., Olson G. Simulation of paraequilibrium growth in multicomponent systems// Metall. Mater. Trans. A, 2001, v. 32A, No. 3.–PP. 455-467.
93. Phelan D. et al. Kinetics of the peritectic phase transformation: *in-situ* measurements and phase field modeling // Metall. Mater. Trans., 2006, v. 37A, No. 3.– PP. 985-994.
94. Kagawa A., Okamoto T. Influence of alloying elements on temperature and composition for peritectic reaction in plain carbon steels// Mater. Sci. Tech. 1986, v. 2.– PP. 997-1008.
95. Fredriksson H. The mechanism of the peritectic reaction in iron-base alloys// Met. Sci.- march 1976.– PP. 621-635.
96. Зиновьев В.Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. Справочник.- М.: Металлургия, 1989.– 384 с.
97. Miettinen J. Thermodynamic-kinetic simulation of constrained dendrite growth in steels// Metall. Mater. Trans B, 1994, v.31B, № 2.–PP.365-379.
98. Nastac L. Modeling and simulation of microstructure evolution and solidifying alloys.-Boston: Kluwer Academic Publishers, 2004.– 304 p.
99. Хворинов Н. Кристаллизация и неоднородность стали. – М.: Изд-во машиностроительной литературы, 1958. – 392 с.

100. Горемыкина С., Костылева Л., Ильинский В. Исследование роста дендритных ветвей крупных столбчатых кристаллов// Материаловедение, №12, 2007. – С. 32-34.
101. Костылева Л., Габельченко Н., Ильинский В. Исследование факторов, определяющих дисперсность дендритных структур сталей// Металлы, №5, 2008. – С.33-38.
102. Заде Л. Понятие лингвистической переменной и его применение к принятию приближенных решений. – М.: «Мир», 1976. – 163 с.
103. Емельянов К., Голод В. Компьютерное моделирование структурной микрон неоднородности при кристаллизации многокомпонентных сплавов// Литейщик России, 2013, №2.–С. 28-33.
104. Лифшиц И., Слезов В. О кинетике диффузионного распада//ЖЭТФ, т.35, вып. 2 (8), 1958. – С. 479-492.
105. Ratke L., Voorhees P. Growth and coarsening: Ostwald ripening in material processing: Springer, 2002.- 295 p.
106. Емельянов К.И., Савельев К.Д., Голод В.М. Сравнительный анализ характера перитектического превращения в условиях орто- и параравновесия// Матер. науч.-практ. конф. с межд. уч. Инст. метал., маш. и тр. СПбГПУ. Ч. 2. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2014. – С.12-14.
107. Голод В.М., Емельянов К.И. Влияние структурной микрон неоднородности на развитие дендритной ликвации при кристаллизации стали. – Научно-техн. ведомости СПбГПУ, № 3(178). – СПб., 2013.– С. 163-168.
108. Аэров М.Э., Тодес О.М., Наринский Д.А. Аппараты со стационарным зернистым слоем.- Л.: «Химия», 1979. – 176 с.
109. Голод В.М., Денисов В.А. Теория, компьютерный анализ и технология стального литья. – СПб.: ИПЦ СПГУТД, 2007. – 610 с.
110. Carlson K. et al. Modeling of porosity formation in aluminium alloys / – Modeling of casting, welding and advanced solidification processes XI, 2006. – PP. 627-634.

111. Казаков А. и др. Исследование природы неметаллических включений в стали с помощью автоматического анализатора частиц// Черные металлы, 2014, Спец. вып. – С. 85-90.
112. Казаков А., Пахомова О., Казакова Е. Исследование эволюции литой структуры при пластической обработке феррито-перлитой стали// Черные металлы, 2013, № 9. – С. 15-20.

### **Гистограммы распределения геометрических параметров дендритных ветвей второго порядка**

Статистические данные о геометрических параметрах дендритных ветвей второго порядка, приведенные в табл. П1.1-П1.4 и представленные ниже в форме гистограмм, получены путем исследования микрофотографий образцов стали различного состава, опубликованных в [23].

*Условные обозначения исследованных геометрических параметров:*

$L$  – длина ветви;

$R$  – радиус средней части ветви;

$a$  – радиус средней части коалесцирующей ветви (меньшей в сравнении с соседними ветвями);

$\lambda_2$  – величина междуетвенного промежутка;

$f_S$  – количество твердой фазы при закалке образцов;

$C_R$  – скорость охлаждения металла в интервале кристаллизации.

Для всех сталей, кроме отмеченных особо,  $f_S=1.0$ ,  $C_R=0.5$  К/с.

*Условные обозначения и химический состав исследованных сталей:*

1 – 10ХНЗМ (0.10 %С-0.28 %Si-0.57 %Mn-1.14 %Cr-3.3 %Ni-0.14 %Mo);

2 – 10Г2 (0.11 %С-0.12 %Si-1.25 %Mn);

3 – 20Г2 (0.18 %С -0.44 %Si-1.26 %Mn);

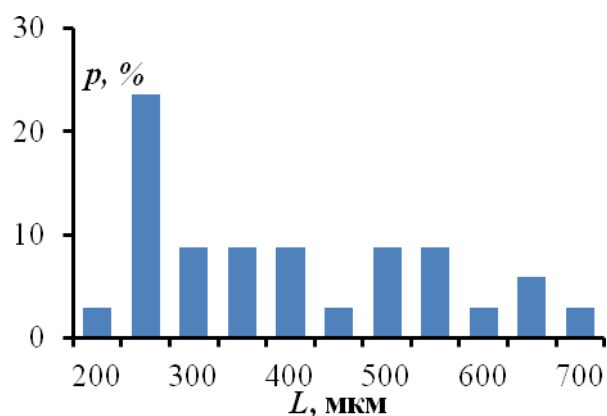
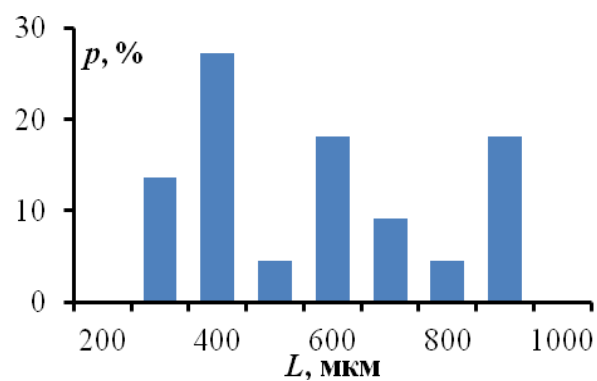
4 – 20Г2 (0.19 %С-0.40 %Si-1.42 %Mn);

5 – 20ХГН (0.20 %С-0.25 %Si-0.90 %Mn-0.81 %Cr-1.05 %Ni);

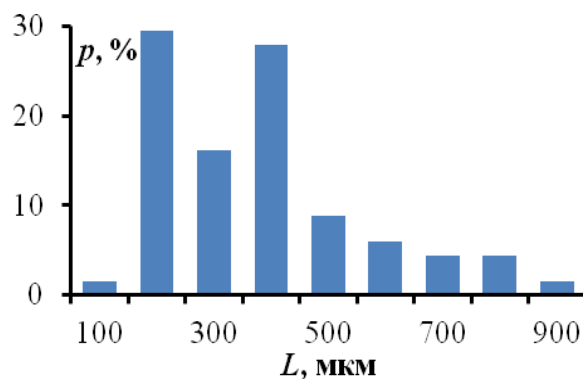
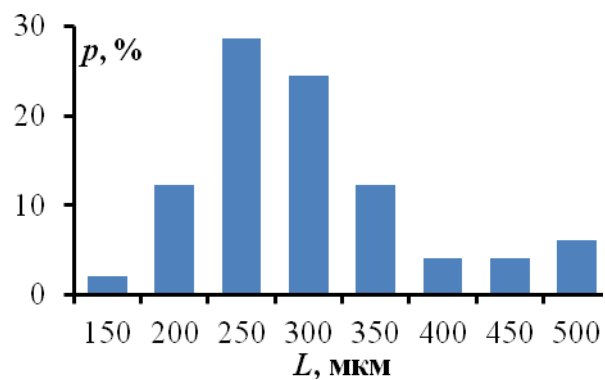
6 – 30ХГНМ (0.29 %С-0.22 %Si-0.52 %Mn-1.02 %Cr-3.2 %Ni-0.25 %Mo);

7 – 70Г (0.69 %С-0.23 %Si-0.72 %Mn).

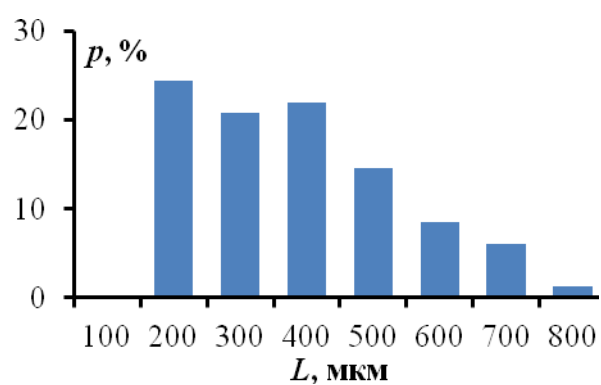


Гистограммы распределения длины ветвей ( $L$ )Сталь 1 ( $f_S=0.67$ ,  $C_R=0.5$  К/с)

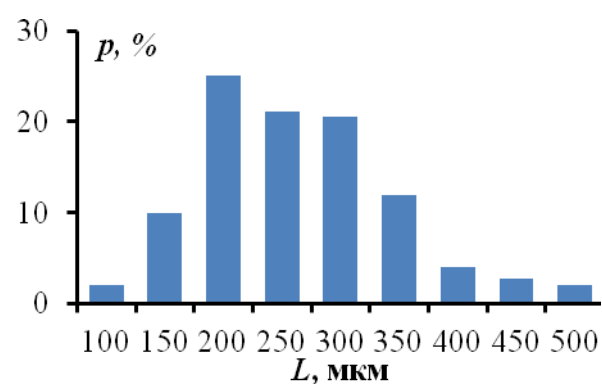
Сталь 1

Сталь 1 ( $f_S=1.0$ ,  $C_R=2.0$  К/с)

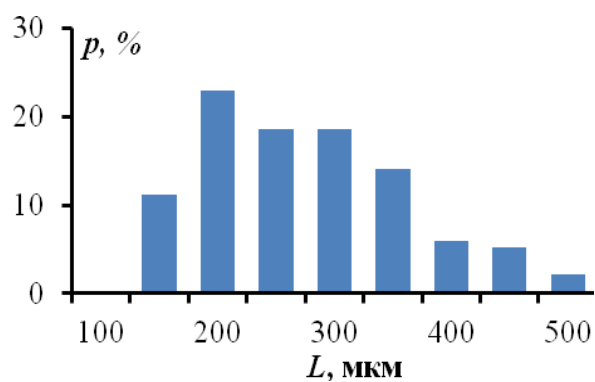
Сталь 2



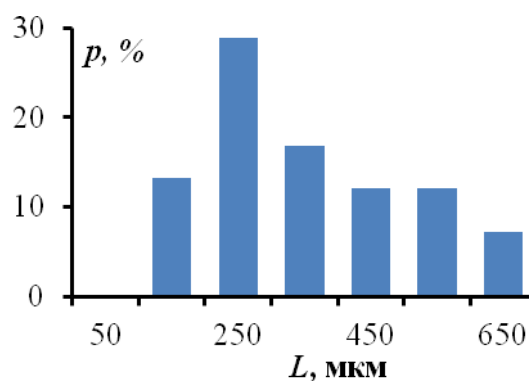
Сталь 3



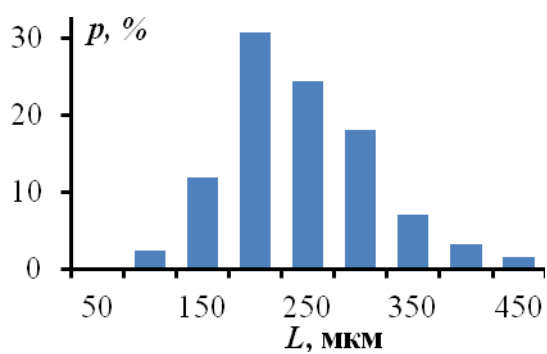
Сталь 4



Сталь 5



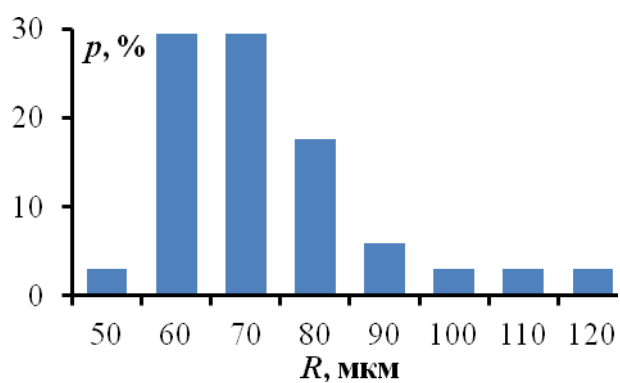
Сталь 6



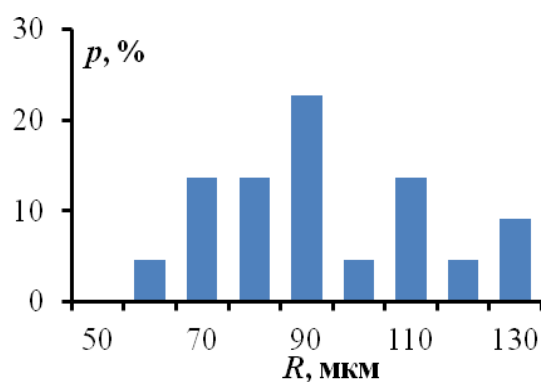
Сталь 7

Таблица П1.2.

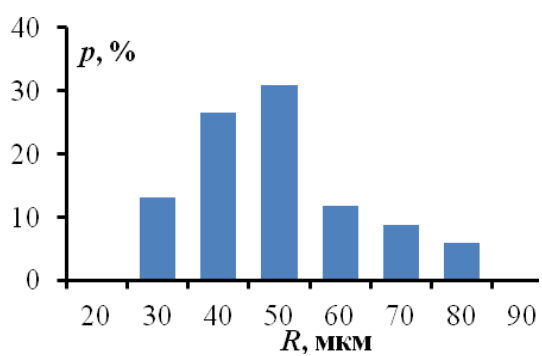
### Гистограммы распределения радиуса ветвей ( $R$ )



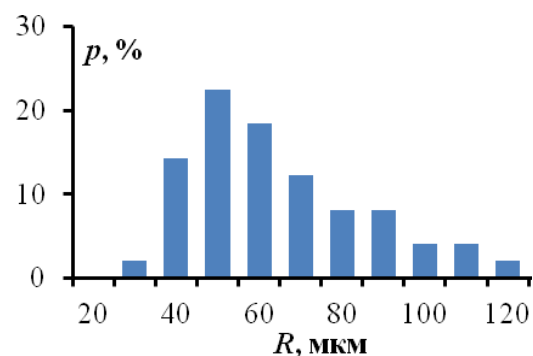
Сталь 1 ( $f_s=0.67$ ,  $C_R=0.5$  К/с)



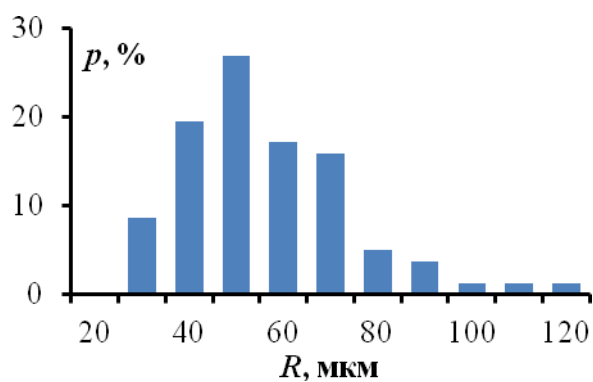
Сталь 1



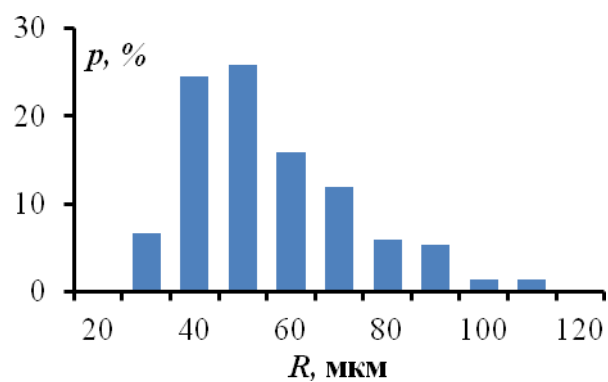
Сталь 1 ( $f_s=1.0$ ,  $C_R=2.0$  К/с)



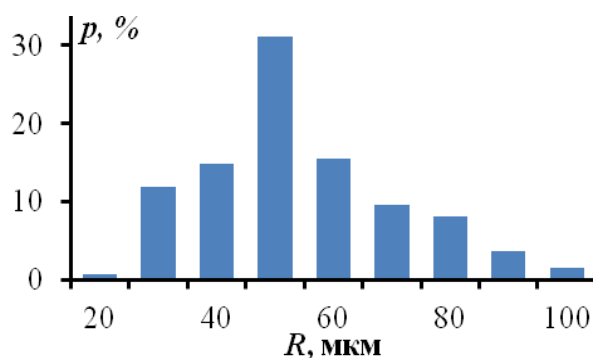
Сталь 2



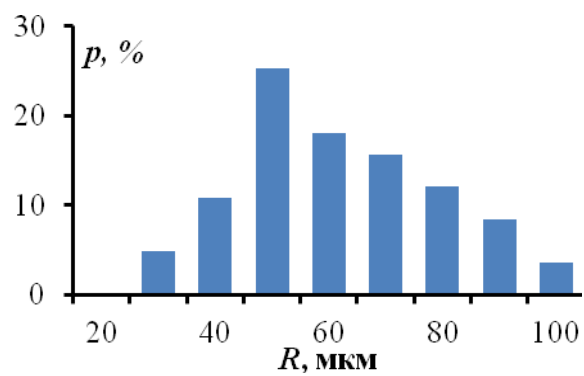
Сталь 3



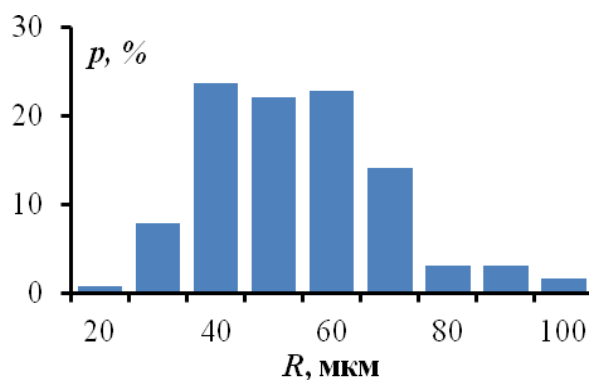
Сталь 4



Сталь 5



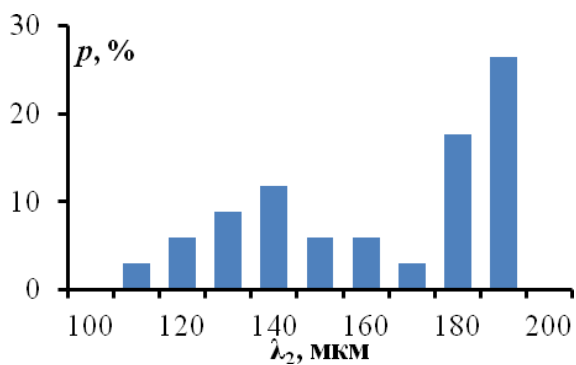
Сталь 6



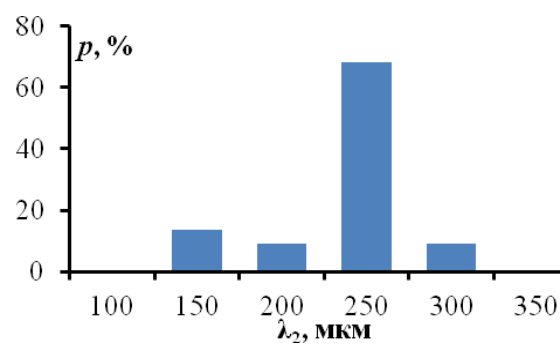
Сталь 7

Таблица П1.3.

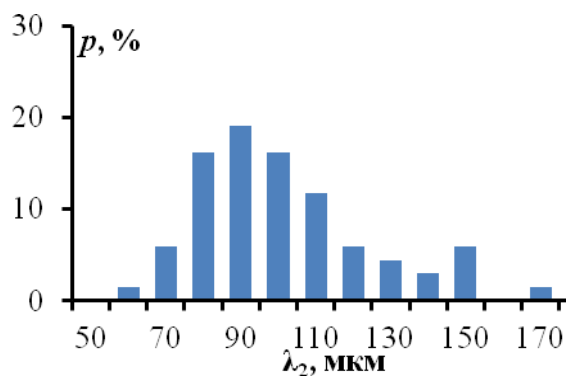
Гистограммы распределения междоусных промежутков ( $\lambda_2$ )



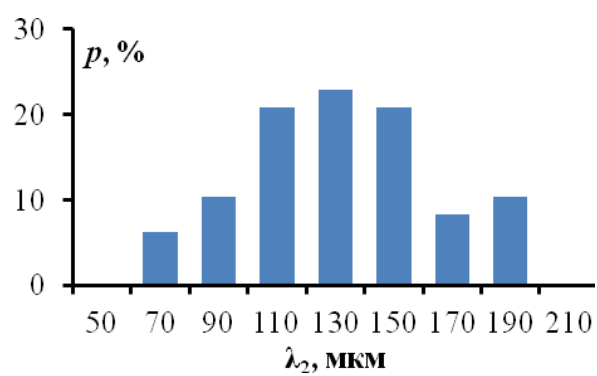
Сталь 1 ( $f_S=0.67$ ,  $C_R=0.5$  К/с)



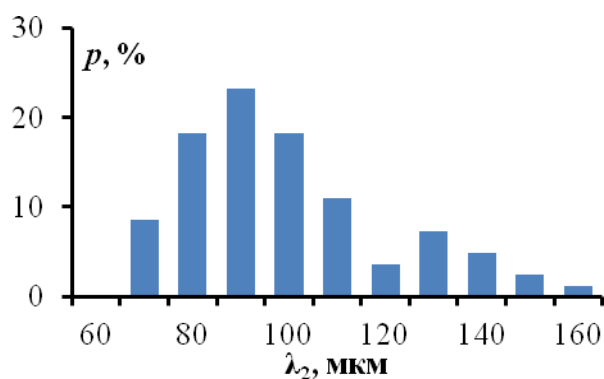
Сталь 1



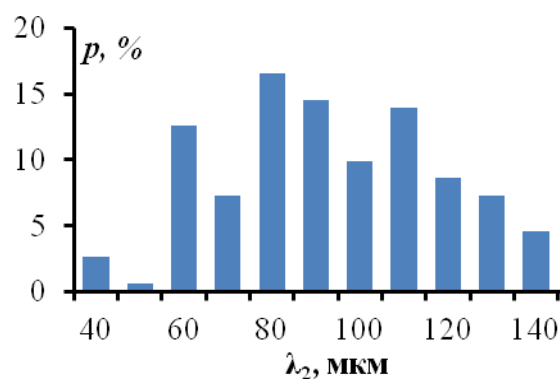
Сталь 1 ( $f_s=1.0$ ,  $C_R=2.0$  K/c)



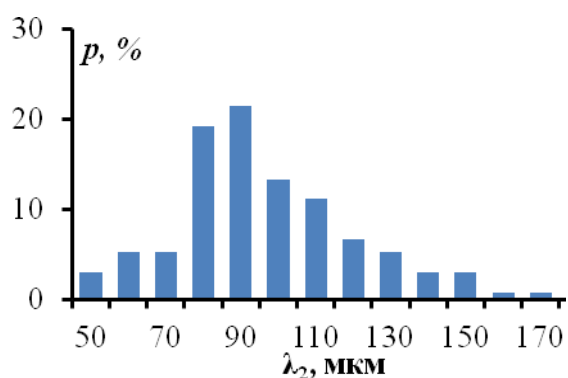
Сталь 2



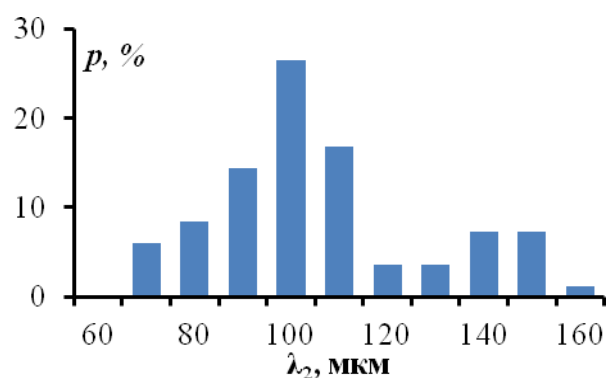
Сталь 3



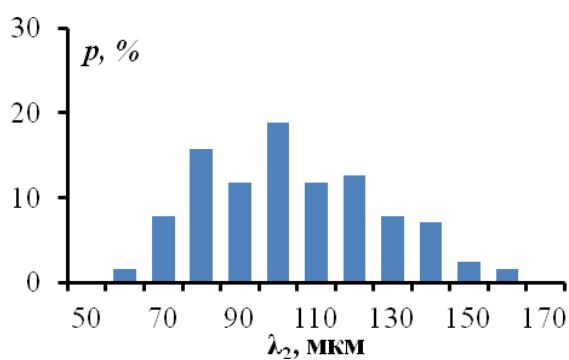
Сталь 4



Сталь 5

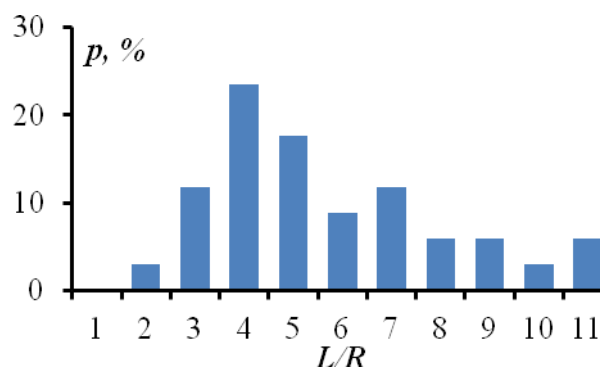
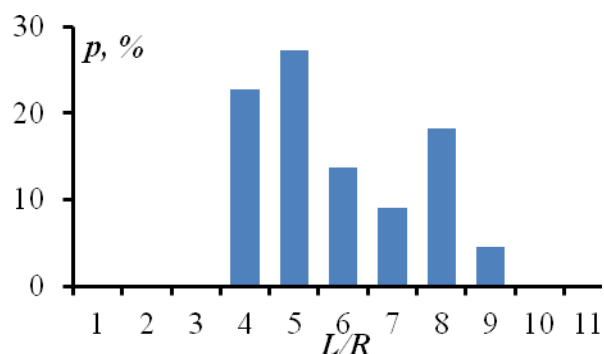


Сталь 6

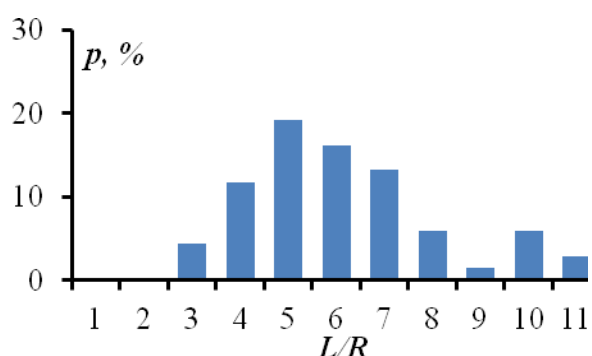
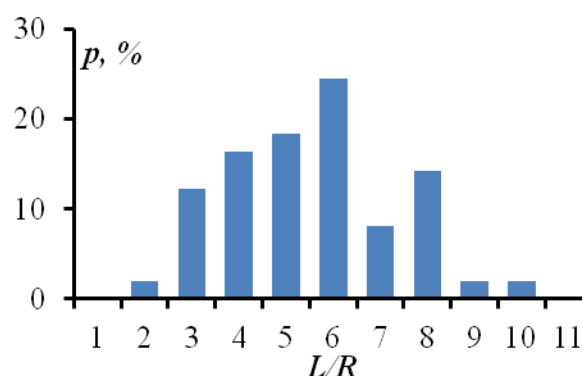


Сталь 7

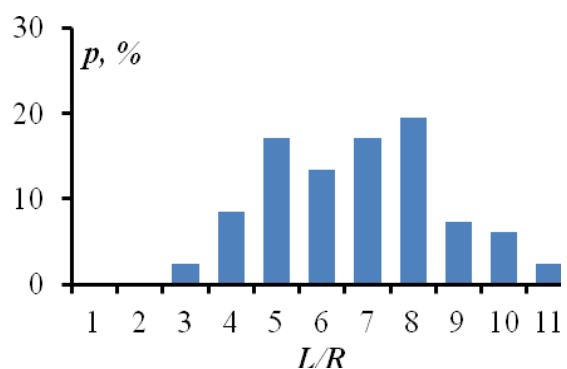
Таблица П1.4.

Гистограммы распределения отношения длины ветви ( $L$ ) к ее радиусу ( $R$ )Сталь 1 ( $f_s=0.67$ ,  $C_R=0.5$  К/с)

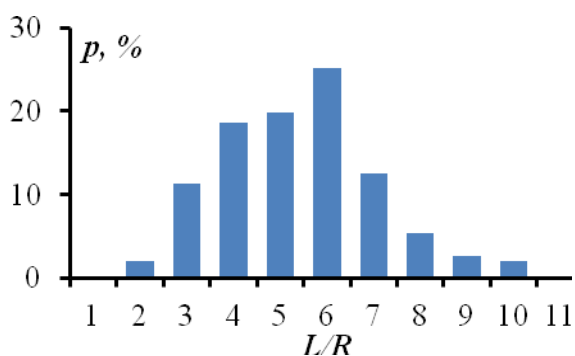
Сталь 1

Сталь 1 ( $f_s=1.0$ ,  $C_R=2.0$  К/с)

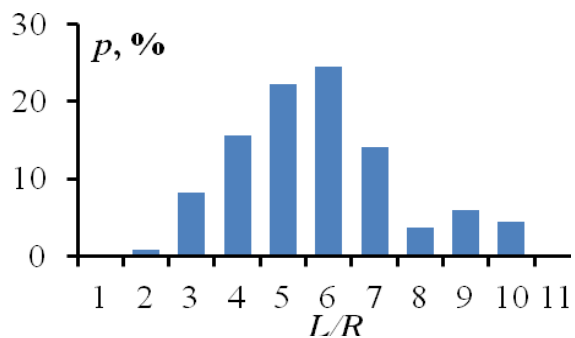
Сталь 2



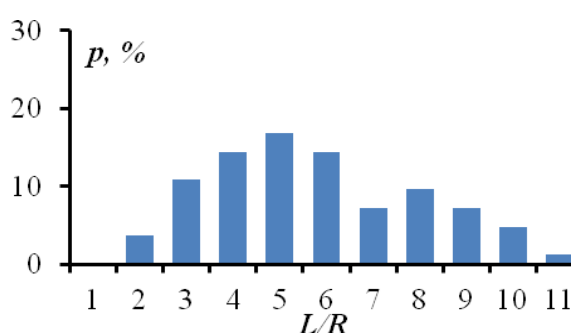
Сталь 3



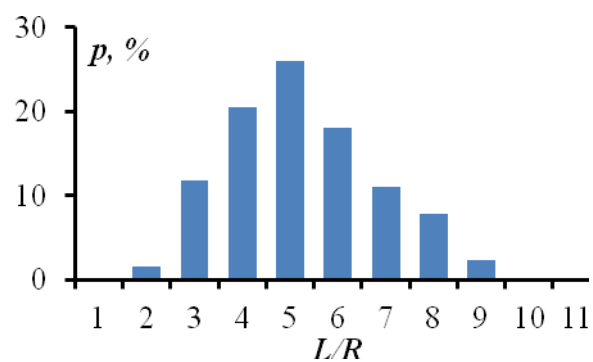
Сталь 4



Сталь 5



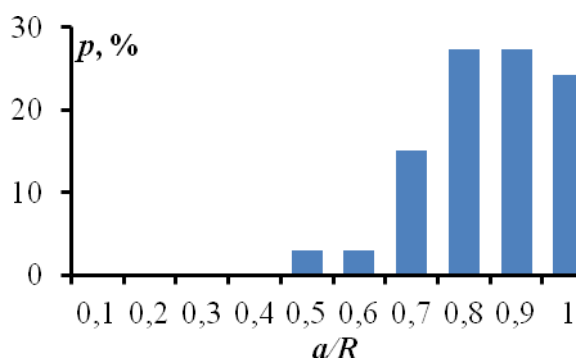
Сталь 6



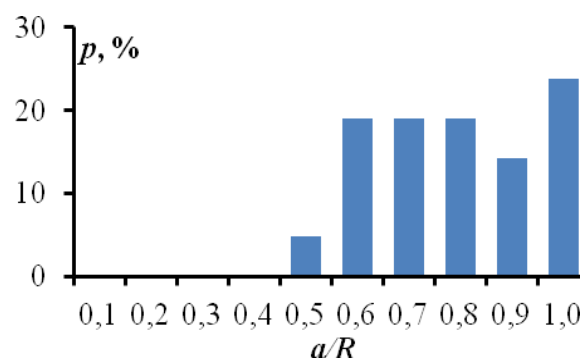
Сталь 7

Таблица П1.5.

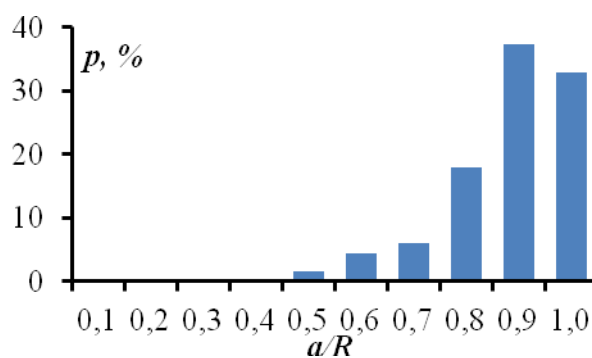
Гистограммы распределения отношения радиусов соседних ветвей  $a/R$   
(меньшего  $a$  к большему  $R$ )



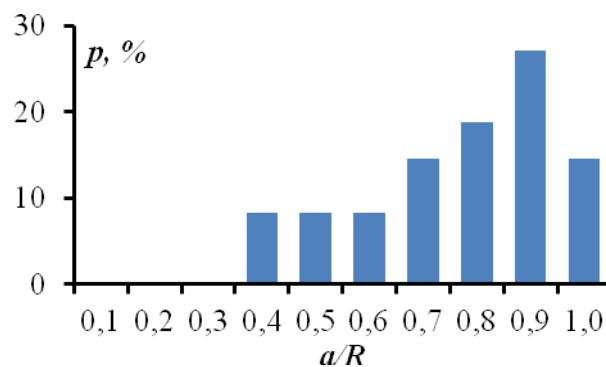
Сталь 1 ( $f_s=0.67$ ,  $C_R=0.5$  К/с)



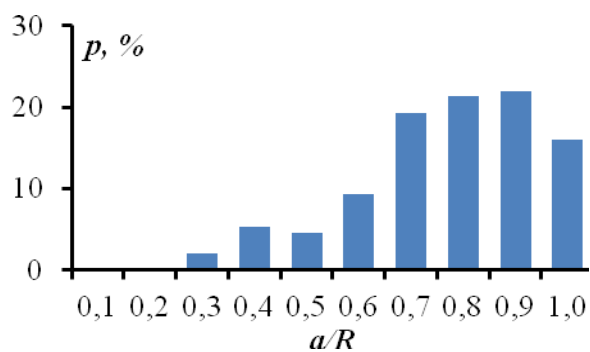
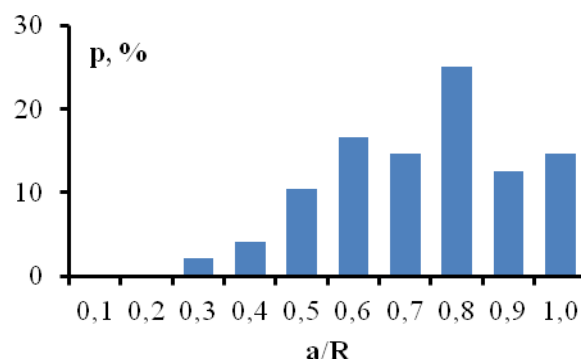
Сталь 1

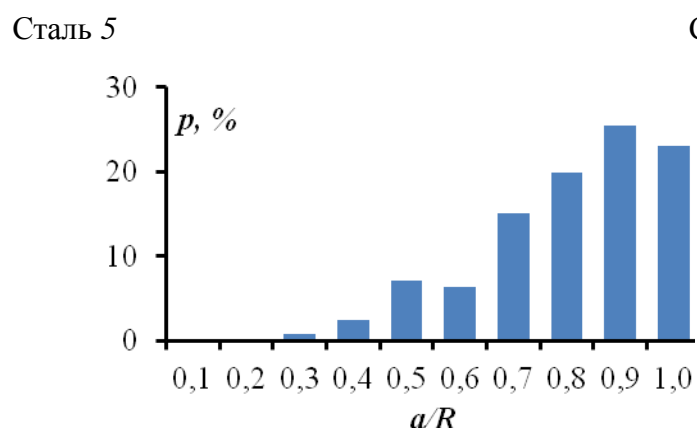
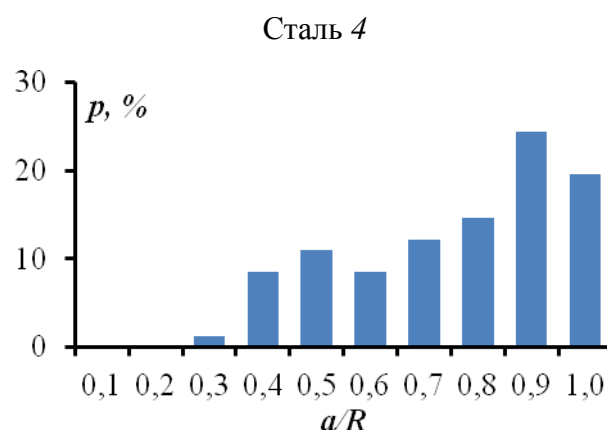
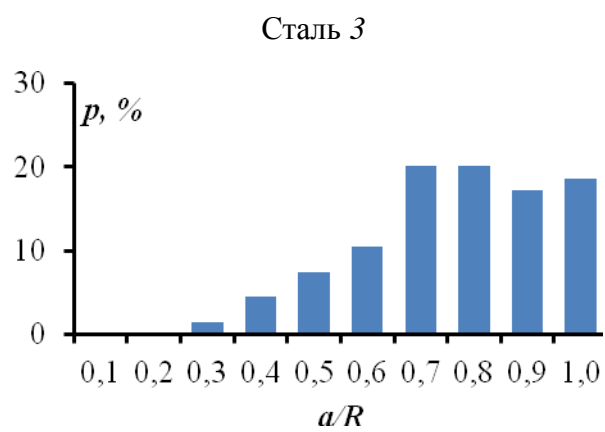


Сталь 1 ( $f_s=1.0$ ,  $C_R=2.0$  К/с)



Сталь 2





Сталь 7

## Информационное обеспечение моделирования кристаллизации отливки «Корпус»

### Условия затвердевания отливки «Корпус»

#### Параметры среды

Начальная температура формы, °C:	15.00
Температура среды, °C:	15.00
Коэфф. внешнего конвективного теплоотвода, Вт/м <sup>2</sup> К:	6.365
Коэфф. внешнего лучистого теплоотвода, Вт/м <sup>2</sup> К <sup>4</sup> :	4.630

#### Параметры зазора

Коэффициент термического расширения формы, 1/К	15·10 <sup>-6</sup>
Коэффициент термического расширения твердого металла, 1/К	15·10 <sup>-6</sup>
Коэффициент лучистого теплообмена в зазоре, Вт/м <sup>2</sup> К <sup>4</sup>	4.630
Коэффициент теплопроводности газа в зазоре, Вт/мК	0.0650
Толщина слоя краски, мм	0.8000
Коэффициент теплопроводности краски, Вт/мК	0.2500

#### Геометрия

	x	y	z	всего
Узлов:	161	161	161	4173281
Размеры с формой, мм:	669.60	513.80	952.50	
Размеры отливки, мм:	561.40	411.70	846.00	

#### Параметры заливки

Температура осн. заливки, град. С:	1560.0
Количество доливок:	0
Относительный уровень основной заливки	0.000
Послойное заполнение	Мгновенная заливка



## Теплофизические и физико-химические параметры стали 30ХМЛ

№	Параметр	Значение	Параметр	Значение	Параметр	Значение
Углерод						
1.	$(C_L^0)_C$	0.30	$p^{\delta L}$	84÷90	$k^{\delta L}$	0.16
			$p^{\gamma L}$	67÷73	$k^{\gamma L}$	0.33
			$p^{\gamma/\delta}$	400÷550	—	—
Кремний						
2.	$(C_L^0)_{Si}$	0.35	$p^{\delta L}$	16÷17	$k^{\delta L}$	0.58
			$p^{\gamma L}$	18÷21	$k^{\gamma L}$	0.52
Марганец						
3.	$(C_L^0)_{Mn}$	0.65	$p^{\delta L}$	5	$k^{\delta L}$	0.67
			$p^{\gamma L}$	3	$k^{\gamma L}$	0.69
Хром						
4.	$(C_L^0)_{Cr}$	1.00	$p^{\delta L}$	3	$k^{\delta L}$	0.85
			$p^{\gamma L}$	3	$k^{\gamma L}$	0.81
Молибден						
5.	$(C_L^0)_{Mo}$	0.25	$p^{\delta L}$	3	$k^{\delta L}$	0.67
			$p^{\gamma L}$	4	$k^{\gamma L}$	0.49
6.	$(t_L)_0$	1502	$c^L$	5	$H^\delta$	1728
7.	$t_P$	1480	$c^\delta$	5	$H^\gamma$	1854
8.	$\lambda_M$	34	$c^\gamma$	4	$H^P$	126
Примечание: $(C_L^0)_i$ – исходная концентрация $i$ -го компонента, масс. %; $p^{mn}$ – тангенс угла наклона линии $mn$ диаграммы состояния, К/%; $k^{mn}$ – коэффициент распределения компонента на межфазной границе ( $m/n$ ); $(t_L)_0$ – начальная температура ликвидуса, °C; $t_P$ – температура начала перитектического превращения, °C; $\lambda_M$ – теплопроводность металла, Вт/мК; $c^j$ , $H^j$ – объемная теплоемкость и теплота кристаллизации $j$ -ой фазы соответственно, МДж/м³К и МДж/м³.						

Таблица П2.2.

Объемная теплоемкость ( $C_f$ ) и теплопроводность ( $\lambda_f$ ) материала формы

№	$t, ^\circ\text{C}$	$C_f, \text{МДж/м}^3\text{К}$	$\lambda_f, \text{Вт/мК}$
1.	20	-	0.733
2.	200.0	1.371	0.640
3.	400.0	1.544	0.586
4.	600.0	1.647	0.590
5.	800.0	1.714	0.640
6.	1000.0	1.770	0.703
7.	2000.0	1.850	1.600

Дополнительные свойства сплава

Марка сплава:	30ХМЛ
Коэффициент объемной усадки в жидком состоянии, ( $\cdot 10^{-4}$ ) 1/К	3.6500
Плотность металла в жидком состоянии, кг/м <sup>3</sup>	6961.0
Количество твердой фазы при нулевой жидкотекучести	0.40000