

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

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени

кандидата технических наук

Москва – 2014

Работа выполнена на кафедре «Материалы, технологии и оборудование литейного производства» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет».

Научный руководитель:

кандидат технических наук, профессор кафедры «Материалы, технологии и оборудование литейного производства» ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет» **Голод Валерий Михайлович**

Официальные оппоненты:

доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой материаловедения и технологии художественных изделий Механического факультета ФГБОУ ВПО «Национальный минерально-сырьевой университет «Горный» **Пряхин Евгений Иванович**

кандидат технических наук, доцент кафедры «Машины и технологии литейного производства» Московского государственного машиностроительного университета (МАМИ)»

Монастырский Валерий Петрович

Ведущая организация:

ОАО «Центральный научно-исследовательский институт материалов» (г. Санкт-Петербург)

Защита состоится «25» декабря 2014 г. в 10:00 на заседании диссертационного совета Д 212.132.02 при Национальном исследовательском технологическом университете «МИСиС» по адресу 119049, Москва, Ленинский проспект, 6, ауд. А-305.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте Национального исследовательского технологического университета «МИСиС» – <http://misis.ru>.

Отзывы на автореферат диссертации (в двух экземплярах, заверенных печатью учреждения) просьба отправлять по адресу: 119049, г. Москва, Ленинский проспект, д. 4, Учёный совет. Копии отзывов можно присылать на e-mail: misistlp@mail.ru

Автореферат разослан «07» ноября 2014 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета Д 212.132.02

кандидат технических наук



Колтыгин Андрей Вадимович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Развитие различных отраслей машиностроения (энергетического, транспортного, судостроительного др.) в значительной степени основывается на производстве литых заготовок. Комплекс механических и эксплуатационных характеристик, определяющих качество литого металла, находится в прямой зависимости от его микроструктуры и микроликвации, формирующихся при первичной кристаллизации. Регулирование дендритной структуры с использованием металлургических (состав стали, рафинирование, модифицирование и др.) и технологических (температура заливки, материал формы и др.) факторов позволяет сформировать требуемые показатели качества металла уже в процессе его затвердевания, минимизируя тем самым затраты на последующую термическую или термо-механическую обработку.

Для технологического прогнозирования влияния того или иного фактора на параметры микроструктуры, как правило, используют статистические модели, полученные на основе обобщения экспериментальных данных. Указанные модели характеризуются существенными расхождениями в оценке воздействия различных факторов и вследствие этого мало пригодны для получения достоверных научных и прикладных результатов. Немногочисленные опубликованные данные о дендритной ликвации сталей, несмотря на использование различных подходов к ее исследованию и анализу, не носят системного характера и их надежное обобщение проблематично.

В целом проблема существенного улучшения качества литой стали может быть разрешена только при сочетании экспериментальных исследований с компьютерным анализом условий формирования отливок. Использование компьютерных моделей благодаря учету широкого круга факторов различной природы позволяет реализовать *системный анализ* взаимосвязанных кристаллизационных процессов для исследования формирования микроструктуры и дендритной ликвации, что является актуальной научно-технической задачей.

Цель работы

Разработка и компьютерная реализация системной модели формирования структурной микронеоднородности и анализ дендритной ликвации при неравновесной кристаллизации сталей с перитектическим превращением.

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

- разработка системы дифференциальных уравнений (системной модели) для анализа взаимозависимых теплофизических, кристаллизационных и диффузионных процессов, реализующихся при неравновесной кристаллизации многокомпонентных сплавов Fe-C- ΣX_i (X_i =Si, Mn, Cr, Ni и др.), а также программного и информационного обеспечения для решения данной системы;
- исследование на основе системной модели условий перитектического превращения в зависимости от интенсивности теплоотвода, химического состава стали, а также объемной плотности зародышей твердой фазы и величины междоусных промежутков ветвей дендритов при кристаллизации;
- исследование на основе системной модели развития равноосной дендритной структуры с целью анализа условий формирования и прогнозирования *мезомасштабной* статистической неоднородности размеров дендритных ячеек;
- исследование на основе системной модели формирования дендритной ликвации при *микромасштабном* перераспределении компонентов сплава по сечению вторичных дендритных ветвей с учетом подвижных границ раздела фаз в двух- ($L+\delta$ или $L+\gamma$) и трехфазных ($L+\delta+\gamma$) кристаллизующихся системах.

Научная новизна работы:

1. Средствами компьютерного моделирования изучено *системное взаимодействие* основных факторов, определяющих изменение температуры металла, состава и переохлаждения расплава, темп выделения твердой фазы, параметры *локальной* дендритной структуры и микро-

масштабной химической неоднородности различных компонентов в процессе неравновесной кристаллизации стали.

2. На основе метода Монте-Карло разработана методика и выявлена кинетика изменения междоусных промежутков вторичных дендритных ветвей в результате их диффузионной коалесценции.

3. Проанализирована вероятность различных механизмов диффузионной коалесценции дендритных ветвей и установлен их вклад в формирование конечной структурной микронеоднородности стали.

4. Разработана модель диффузионно-контролируемой дендритной ликвации в условиях неравновесного характера перитектического превращения и исследованы особенности распределения компонентов стали в зависимости от интенсивности теплоотвода, эволюции размеров дендритных ячеек и неоднородности микроструктуры.

Практическая значимость работы.

На основе системной модели неравновесной кристаллизации разработано программное обеспечение, ориентированное на совместную работу с пакетами моделирования затвердевания литых заготовок «Polycast» и термодинамического моделирования фазовых превращений в многокомпонентных сплавах «Polytherm» с целью технологического анализа структурной и химической микронеоднородности стали в отливках. Для реализации подобного анализа выполнено информационное обеспечение моделирования кристаллизации, включающее необходимые теплофизические, физико-химические и структурные свойства углеродистых и низколегированных сталей.

На защиту выносятся:

1. Базовая детерминированная модель системного анализа мезомасштабной неравновесной кристаллизации сплавов $\text{Fe-C-}\sum X_i$ ($X_i=\text{Si, Mn, Cr, Ni}$ и др.) с перитектическим превращением, описывающая кинетику взаимосвязанных теплофизических, кристаллизационных и диффузионных процессов 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 в условиях перитектического превращения с учетом 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– ΣX_i (X_i =Si, Mn, Cr, Ni и др.) с перитектическим превращением.

Апробация работы

Основные положения диссертации доложены и обсуждены на следующих конференциях, совещаниях и семинарах: XXXIX Неделя науки СПбГПУ, Санкт-Петербург, 6-11 декабря 2010; II Молодежная школа-конференция «Современные проблемы металловедения», МИСИС, Пицунда, Абхазия, 16-20 мая 2011 г.; XL Неделя науки СПбГПУ, Санкт-Петербург, 5-10 декабря 2011 г.; 9-я международная научно-практическая конференция "Литейное производство сегодня и завтра", Санкт-Петербург, 20-22 июня 2012 г.; XLI Неделя науки СПбГПУ, Санкт-Петербург, 3-8 декабря 2012 г.; XLII Неделя науки СПбГПУ, Санкт-Петербург, 2-7 декабря 2013 г.; 10-я международная научно-практическая конференция "Литейное производство сегодня и завтра", Санкт-Петербург, 20-22 июня 2014 г.

Публикации

По результатам работы по теме диссертации опубликовано 16 работ, из них 7 – в рецензируемых журналах, рекомендуемых перечнем ВАК РФ.

Достоверность результатов

Достоверность работы обеспечивается использованием физически обоснованных подходов, алгоритмов и современных средств компьютерного моделирования теплофизических и физико-химических процес-

сов кристаллизации сплавов. Разработка методики и анализ результатов решения задач проведены с использованием аппарата математической статистики и достоверных справочных и экспериментальных данных, полученных на специализированном оборудовании для анализа микро-структуры и МРСА с помощью апробированных и аттестованных методик.

Личный вклад соискателя

Автор участвовал в постановке задач диссертации, разработке алгоритмов моделирования неравновесной дендритной кристаллизации и в их программной реализации, проведении экспериментов по затвердеванию стали, структурный анализ которой представлен в диссертации, в проведении вычислительных экспериментов на разработанном программном комплексе, а также анализе и изложении результатов исследований.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, пяти разделов основного текста, заключения, списка литературы из 112 наименований и 2 приложений. Работа изложена на 178 страницах, содержит 57 рисунков и 28 таблиц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении изложена концепция системного анализа, раскрыта актуальность работы, сформулированы ее цель, научная новизна, практическая значимость и основные положения, выносимые на защиту.

Первый раздел диссертации содержит аналитический обзор работ, выполненных в области экспериментального исследования и численного моделирования параметров дендритной структуры и диффузионного перераспределения компонентов в масштабе дендритной ячейки. Рассмотрены модели, описывающие рост дендритов от момента образования до смыкания их вершин, появление на стволах дендритов регулярных боковых ветвей, характеризующихся величиной их вторичных междущих промежутков (λ_2).

В разделе изложены существующие модели развития микроликвации, описывающие процесс перераспределения компонентов. Рассмотрены результаты исследований перитектического превращения, а также различные подходы, ориентированные на численное моделирование кинетики этого процесса.

Анализ литературных данных показывает, что для прогнозирования влияния химического состава, интенсивности теплоотвода и других факторов на микроструктуру и химическую микронеоднородность литой стали необходимо применение системного анализа кристаллизационных процессов, так как имеющиеся на данный момент изыскания в силу своей разобщенности и несогласованности не позволяют решить поставленные в работе задачи.

Второй раздел посвящен разработке и программной реализации базовой модели неравновесной кристаллизации, которая включает двухуровневую (мезо- и микро-масштабную) систему сопряженных уравнений, описывающих тепловые, кристаллизационные и диффузионные процессы, анализ которых является необходимым для прогнозирования локальной неоднородности дендритной структуры и микроликвации.

На *мезо*-уровне рассмотрен процесс теплообмена элементарной ячейки с окружающим пространством, описываемый уравнением теплового баланса (1). Сопоставление теплоотвода ($qd\tau$) и тепловыделения (Hdm), зависящего от скорости выделения твердой фазы $dm/d\tau$, определяет локальное изменение температуры dt сплава:

$$\frac{dt}{d\tau} = \frac{-q + R_0 H (dm/d\tau)}{R_0 [c^L (1-m) + c^S m]}, \quad (1)$$

где $q = \alpha(t(\tau) - t_0)$ – удельный тепловой поток из рассматриваемого мезо-элемента в окружающую среду; α – коэффициент теплоотдачи; t_0 – температура окружающей среды; m – доля твердой фазы; H , c^L , c^S – объемная теплота кристаллизации, теплоемкость жидкой и твердой фазы; R_0 – характерный размер мезо-ячейки, равный отношению ее объема к теплоотводящей поверхности.

Скорость выделения твердой фазы $dm/d\tau$, определяемого кинетикой движения границы раздела фаз $\delta(\gamma)/L$ при кристаллизации и, соответственно, величиной термического переохлаждения расплава (ΔT), рассчитывали по уравнению Колмогорова, которое в работе было модифицировано для описания роста дендритных ветвей, имеющих цилиндрическую морфологию:

$$dm = (1 - m)N_s \pi R (2LdR + RdL), \quad (2)$$

где N_s – объемная плотность центров кристаллизации (ветвей); $L = k_L R$ – соотношение длины L и радиуса R растущих в расплаве ветвей. Значение радиальной скорости роста определено выражением

$$v = dR/d\tau = K_v \Delta T^2 \text{ при } K_v = \left[2\pi^2 \Gamma \left(\frac{p(k-1)C_L}{D^L} + \frac{H}{a^L c} \right) \right]^{-1}, \quad (3)$$

где p , k , C_L , D^L , a^L – тангенс угла наклона линии ликвидуса, коэффициент распределения, концентрация, коэффициент диффузии и температуропроводность расплава.

Для расчета переохлаждения ΔT анализировали микро-масштабное перераспределение компонентов сплава между фазами, приводящее к изменению покомпонентного состава жидкой фазы, изменению температуры ликвидуса $t_L(\tau)$ и величины термического переохлаждения $\Delta T(\tau) = t_L(\tau) - t(\tau)$. Базовую систему уравнений замыкает уравнение Онака, в котором учитывается эволюционное изменение параметров σ_i , k_i , D_i^S , λ_2 в процессе кристаллизации внутридендритной жидкой фазы:

$$dC_L^i = \frac{C_L^i(1 - k_i)}{1 - (1 - \sigma_i k_i)m} dm; \quad \sigma_i = \frac{2\varepsilon_i}{1 + 2\varepsilon_i}; \quad \varepsilon_i = \frac{8D_i^S \tau_{LS}}{\lambda_2^2}, \quad (4)$$

где D_i^S , σ_i – коэффициент диффузии i -го компонента в твердой фазе и параметр диффузионной неравновесности соответственно ($0 \leq \sigma_i \leq 1$); τ_{LS} – локальная продолжительность затвердевания мезо-ячейки; λ_2 – размер междоусного промежутка вторичных дендритных ветвей (дендритная ячейка).

Путем численного решения системы уравнений (1)-(4) исследован ход неравновесной кристаллизации многокомпонентных сплавов Fe-C- ΣX_i ($X_i = \text{C, Si, Mn, Cr, Ni}$) в зависимости от состава стали и ее положения на диаграмме состояния в условиях различной интенсивности теплоотвода и термического переохлаждения с учетом

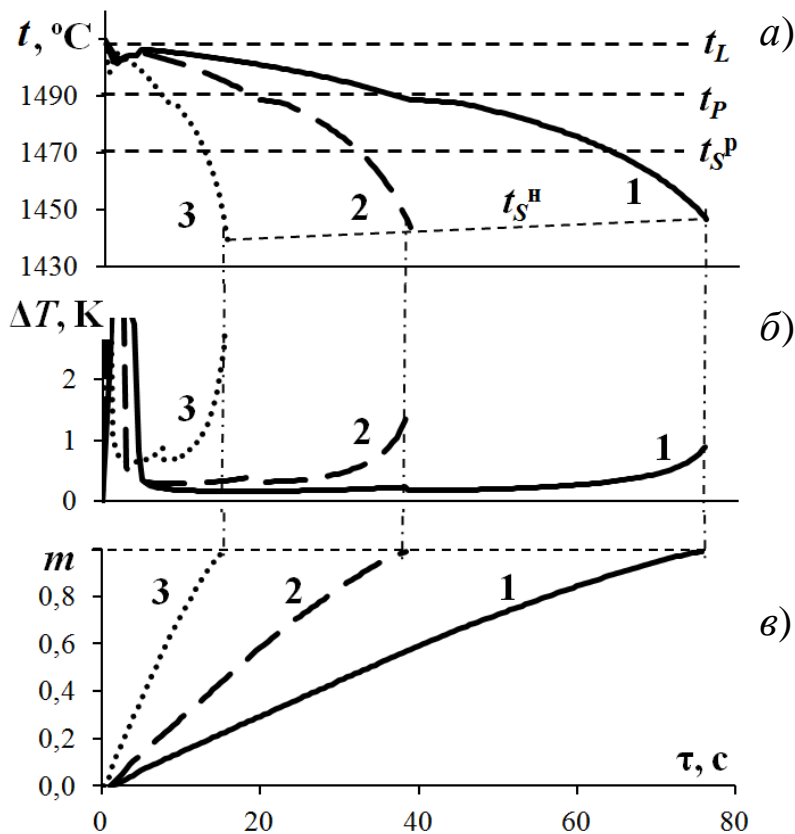


Рисунок 1. Изменение температуры t (а),
переохлаждения ΔT (б) и доли твердой фазы m (в)
при неравновесной кристаллизации стали 20ХГН
Коэффициент теплоотдачи $\alpha=35$ (1), 80 (2)
и 150 (3) Вт/м²·К при $R_0=1$ см
 t_L , t_P , t_S^p , t_S^h – температуры ликвидуса, перитектики,
равновесного (р) и неравновесного (н) солидуса

изменения плотности центров кристаллизации и подавления диффузии в твердой фазе, что является базой для последующего анализа процессов коалесценции дендритных ветвей и неравномерного распределения компонентов в микромасштабе. Увеличение интенсивности теплоотвода q за счет роста коэффициента теплоотдачи α (рис. 1), а также повышение концентрации углерода (табл. 1), приводящее к уменьшению коэффициента K_V и соответствующей скорости выделения твердой

фазы $dm/d\tau$ (рис. 1, в), вызывает увеличение скорости охлаждения металла $dt/d\tau$ (рис. 1, а) и повышение переохлаждения ΔT (рис. 1, б). Возрастание переохлаждения, как следствие системной отрицательной обратной связи, интенсифицирует выделение твердой фазы dm и тепловыделение Hdm .

Вместе с тем сокращение локальной продолжительности затвердевания τ_{LS} вызывает подавление диффузии в твердой фазе, характеризуемой параметром диффузионной неравновесности компонента σ , что оказывает влияние на изменение состава жидкой фазы C_L , условия роста дендрита и на распределение компонентов в твердой фазе.

Выбранные для исследования стали в зависимости от положения на диаграмме состояния в соответствии с присущими им особенностями кристаллизации разделяются на четыре группы: I–предперитектические стали ($C_0 \leq C_H$), кристаллизующиеся с выделением δ -фазы как твердые растворы; II–доперитектические стали ($C_H < C_0 < C_J$), в которых кристаллизация завершается перитектическим превращением с остаточной долей δ -фазы; III–заперитектические стали ($C_J \leq C_0 < C_B$), в которых перитектическое превращение протекает полностью до завершения кристаллизации; IV–постперитектические стали ($C_0 \geq C_B$, где C_H , C_J , C_B – концентрация углерода в критических точках H , J и B диаграммы состояния Fe-C), кристаллизующиеся как твердые растворы с выделением γ -фазы.

Таблица 1. Влияние интенсивности теплоотвода и концентрации углерода на параметры затвердевания многокомпонентных сплавов Fe-C-Si-Mn-Cr-Ni

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	$\tau_{LS}, \text{с}$	$\Delta T_{max}, \text{К}$	m_{max}^δ	$m_{ост}^\delta$	$C_R, \text{К/с}$	$\tau_{LS}, \text{с}$	$\Delta T_{max}, \text{К}$	m_{max}^δ	$m_{ост}^\delta$	$C_R, \text{К/с}$
I	0.04	0.05	0.11	0.35	19	2.8	1.00	1.00	1.9	10	3.6	1.00	1.00	4.0
II	0.07	0.05	0.11	0.35	22	2.8	0.95	0.35	2.4	11	3.6	0.95	0.14	5.0
	0.11	0.06	0.11	0.37	22	2.8	0.90	0.15	2.6	11	3.6	0.90	0	5.1
III	0.20	0.06	0.12	0.38	19	2.6	0.60	0	4.5	10	3.4	0.55	0	9.0
	0.30	0.06	0.13	0.39	22	3.1	0.30	0	4.5	12	4.7	0.30	0	9.7
IV	0.50	-	-	-	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; $R_0=0.01 \text{ м}$; C_0 – исходная концентрация углерода; C_R – средняя скорость охлаждения при кристаллизации; $C_R=(t_L-t_S)/\tau_{LS}$, $R_0=1 \text{ см}$

В сталях I-II групп ($C_0 < C_J$) преобладает выделение δ -фазы с ее максимальной долей m_{max}^δ не менее 0.9 вплоть до концентрации углерода, близкой к перитектической точке C_J (табл. 1). Как показывают результаты моделирования, затвердевание происходит при близких для этих сталей значениях термического переохлаждения ΔT , максимальная величина которого перед рекалесценцией достигает $\approx 3 \text{ К}$, затем снижается вследствие выделения теплоты кристаллизации до 0.1 К и к концу кристаллизации постепенно увеличивается до $\approx 12 \text{ К}$ (рис. 1).

В сталях II-ой группы частично или полностью протекает перитектическое превращение и доля остаточной δ -фазы ($m_{\text{ост}}^{\delta}$) к концу затвердевания оказывается значительно меньше ее максимальной величины, достигаемой к началу перитектического превращения (m_{max}^{δ}). Остаточная доля $m_{\text{ост}}^{\delta}$ при повышении скорости охлаждения снижается за счет возрастания градиента концентрации углерода по сечению γ -фазы – движущей силы диффузионно-контролируемого перитектического превращения, несмотря на уменьшение длительности этого процесса.

Стали III-IV групп ($C_f \leq C_0$) к концу затвердевания полностью состоят из γ -фазы. При этом с повышением содержания углерода увеличение температурного интервала затвердевания приводит к уменьшению темпа выделения твердой фазы (dm/dt) и теплоты кристаллизации (Hdm/dt). Данные условия сопровождаются повышением скорости охлаждения и термического переохлаждения. Однако возрастание переохлаждения не приводит к уменьшению продолжительности затвердевания τ_{LS} в связи с тем, что влияние роста переохлаждения компенсируется дополнительным неравновесным накоплением компонентов в расплаве и понижением температуры солидуса.

В третьем разделе представлена разработка и программная реализация *вероятностной* модели прогнозирования дендритной структуры, характеризуемой неравномерным распределением вторичных междоусных промежутков дендритных ветвей λ_2 в мезомасштабе.

Основная схема эволюции дендрита включает двухстадийную модель его морфологических изменений, протекающих при следующих допущениях: центры кристаллизации возникают однократно при достижении термического переохлаждения расплава; дендриты имеют равноосную морфологию; твердая фаза преимущественно сосредоточена во вторичных ветвях; коалесценция протекает между соседними ветвями, объединенными в локальную расчетную систему (рис. 2, в).

Внешние размеры дендритного кристаллита определяются ростом его стволов, а внутреннее строение – формированием вторичных (боковых) ветвей (рис. 2, а). Дендритные сферы, поверхность которых отвечает вершинам растущих стволов, смыкаются и формируют непрерывный скелет твердой фазы при доле дендритных сфер f_d в объеме мезо-элемента, равной 1 (рис. 2, б).

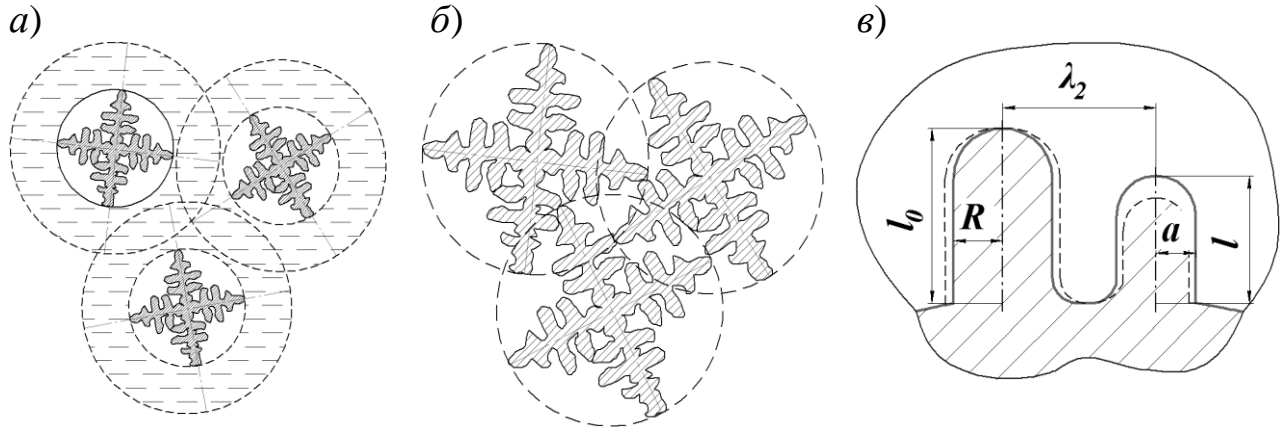


Рисунок 2. Схема морфологической эволюции равноосного дендрита

а) стадия I – рост дендритов до смыкания;

б) стадия II – коалесценция дендритных ветвей;

в) расчетная локальная система ветвей; R , a – радиус прирастающей и растворяющейся ветви; l_0 , l – исходная и текущая длина ветвей

Расчёт f_d производили по уравнению Колмогорова для растущих кристаллитов сферической формы:

$$\frac{df_d}{d\tau} = 4\pi N_d R_d^2 v_d, \quad (5)$$

где N_d – объемная плотность центров кристаллизации (дендритов); R_d – радиус дендритной сферы; v_d – скорость роста вершин дендрита, определяемая моделью Курца-Триведи.

Рост стволов дендрита до их смыкания сопровождается появлением боковых ветвей с начальными междуосными промежутками $(\lambda_2)_0$, величина которых определяется изменением термического переохлаждения ΔT в период его нарастания и рекалесценции (рис. 3,а), а также соответствующего радиуса кривизны вершины ствола дендрита R_{tip} :

$$\sqrt{2\xi} \left(\frac{\kappa^2 - 1}{2\xi} + \left(\frac{2\pi}{\xi} \right)^2 \right) = \frac{v_d R_{tip}^2}{\Gamma} \sum \frac{p_i (1 - k_i) C_0^i}{D_i^L}; \quad \xi = \frac{(\lambda_2)_0}{R_{tip}}, \quad (6)$$

где Γ – коэффициент Гиббса-Томсона; D_i^L – коэффициент диффузии i -го компонента в жидкой фазе; κ – волновое число ($\kappa=4$ для решетки с ку-

бической симметрией). На этом этапе увеличение (уменьшение) переохлаждения ΔT приводит к повышению (понижению) скорости роста вершин v_d и появлению неравномерно (более часто или редко) расположенных ветвей различного радиуса (рис.3, а).

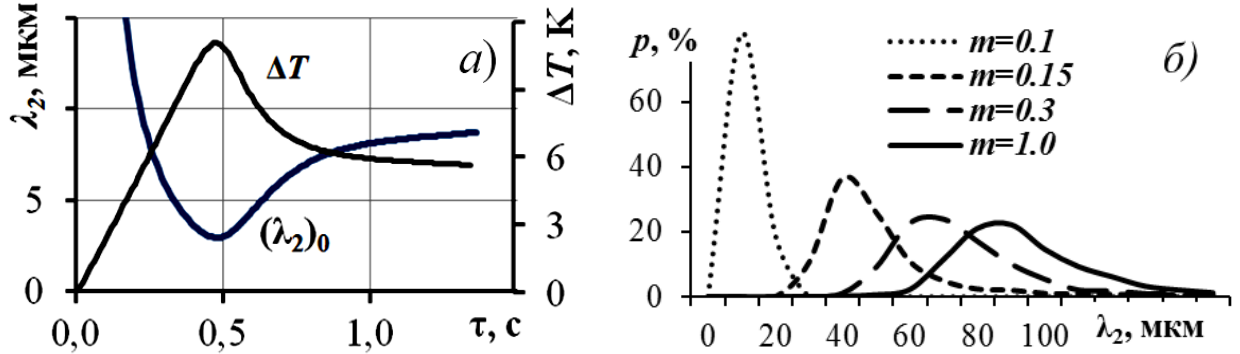


Рисунок 3. Формирование исходной микроструктуры стали 10XГН2:
а – изменение переохлаждения ΔT и начальных междусосных промежутков $(\lambda_2)_0$ во времени на этапе свободного роста дендритных стволов;
б – эволюция гистограммы $p(\lambda_2)$ в процессе кристаллизации ($m=0.1 \div 1.0$)

К моменту смыкания вершин (при $m \approx 0.1$) дендриты обладают ансамблем боковых ветвей, которые характеризуются набором различных междусосных промежутков, исходная гистограмма которых приведена на рис. 3, б. Под действием капиллярных сил развивается диффузионная коалесценция дендритных ветвей с их растворением и/или утолщением, приводящая к укрупнению междусосных промежутков (рис. 2, б), кинетика которого описывается уравнением:

$$d(\lambda_2^3)_j = \frac{\Gamma \tau}{\varphi_j} \frac{dm}{\sum \frac{p_i(C_L)_i (1 - (1 - \sigma_i k_i) m)}{D_i^L}},$$

$$\varphi_I = m^2 \left[\ln \left(1 - \frac{a}{R} \right) + \frac{a}{R} \right]; \varphi_{II} = m^3 \left[\ln \left(1 - \frac{r_0}{a} \right) + \frac{r_0}{a} + \frac{1}{2} \left(\frac{r_0}{a} \right)^2 \right]; \quad (7)$$

$$\varphi_{III} = \frac{1}{4} \left(\frac{a}{\lambda_2} \right)^2 \frac{l_0}{\lambda_2} \varphi_{IV} = \frac{1}{2} \left(\frac{l_0}{\lambda_2} \right)^2 \frac{r_a}{\lambda_2} \left(1 - \frac{r_a}{R} \right)^{-1};$$

где φ_j – коэффициенты вида модели (j), представленные для различных механизмов коалесценции I-IV: I – радиальное растворение (см. рис. 2), II – растворение основания ветви, III – осевое растворение, IV – сращивание ветвей; r_0 – радиус основания дендритной ветви; $r_a = (\lambda_2 - R + a)/2$.

Исследование эволюции статистической микронеоднородности дендритной структуры в процессе кристаллизации (рис. 3, б) реализовано с помощью метода Монте-Карло путем расчета изменения величины междущих промежутков $\lambda_2(\tau)$ для значительного числа N ($N \approx 3 \cdot 10^3$) локальных систем, состоящих из двух дендритных ветвей с заданными геометрическими параметрами a/R , a/λ_2 , l_0/λ_2 (см. рис. 2, в).

Статистические данные по характерным параметрам морфологии дендритных ветвей для ряда низкоуглеродистых сталей были определены при обработке результатов исследования микрофотографий (более 600 измерений), опубликованных в атласе дендритных структур при их закалке в твердо-жидком состоянии.

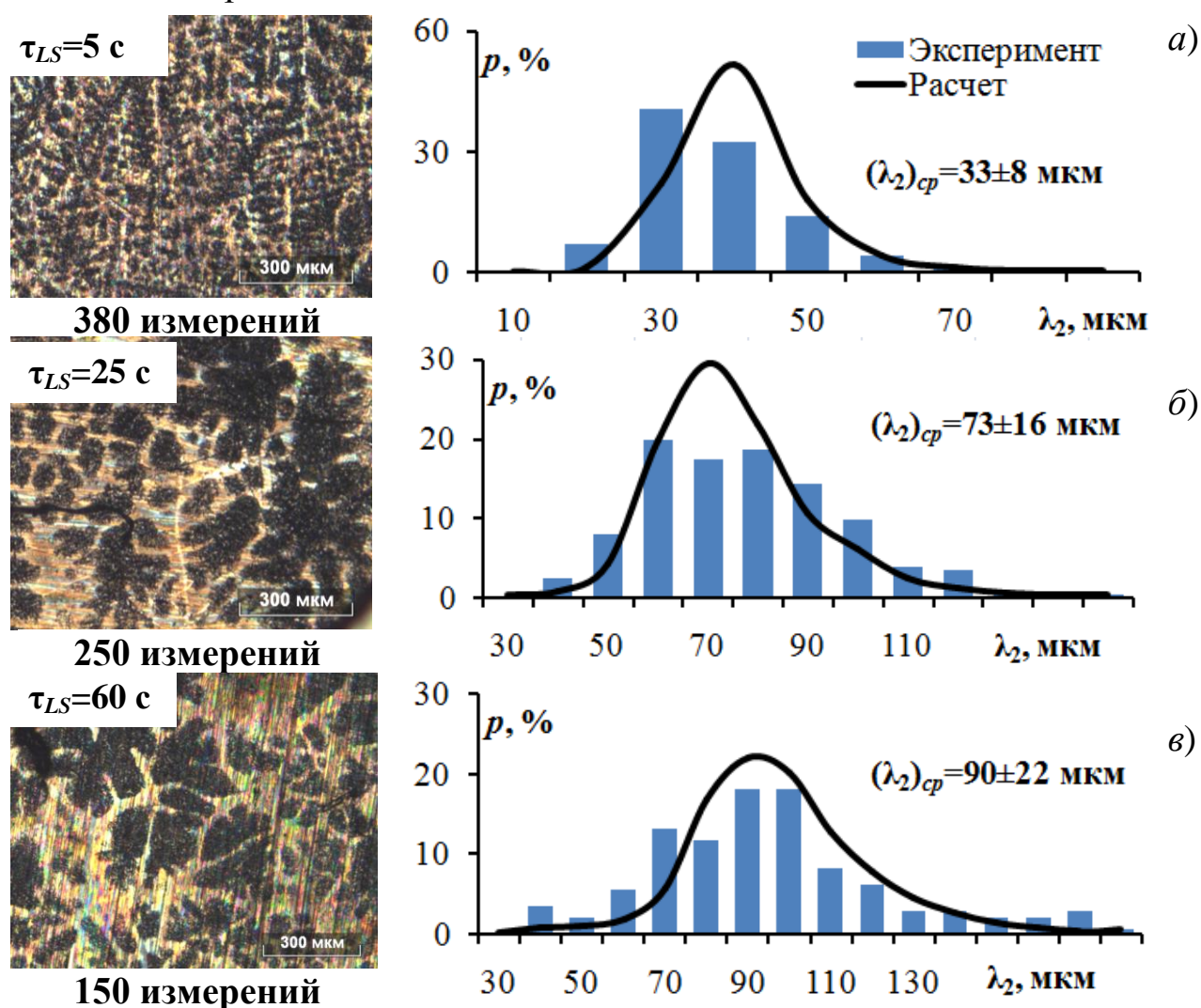


Рисунок 4. Результаты металлографического исследования слитка Ø 80 мм из стали 10ХГН2 в поверхностной (а), промежуточной (б) и осевой зоне (в)

Значения τ_{LS} определены с помощью пакета «Polycast»

Компьютерная реализация изложенного подхода обеспечивает последовательное формирование массива данных, описывающих полученную дендритную структуру с помощью ее статистических параметров – среднего значения $(\lambda_2)_{\text{ср}}$, среднеквадратичного отклонения σ_λ и распределения плотности вероятности $p(\lambda_2)$ в виде гистограммы. Адекватность разработанной модели, отражающей эволюцию мезо-масштабной неоднородности дендритной структуры, подтверждена путем сопоставления расчетных и экспериментальных гистограмм распределения $p(\lambda_2)$ (рис. 4), фиксируемых на момент окончания кристаллизации в различных сечениях макро-заготовки (рис. 4).

Введение в сталь дополнительных компонентов приводит к уменьшению средней величины междоусных промежутков $(\lambda_2)_{\text{ср}}$ в локальном мезо-объеме и его среднеквадратичного отклонения σ_λ , что обусловлено интенсивным накоплением компонентов в расплаве (при $k_i < 1$), способствующим возникновению неустойчивости межфазной границы раздела и формированию ветвей с меньшим междоусным шагом.

Результаты моделирования показывают, что наибольшее влияние на $(\lambda_2)_{\text{ср}}$ и σ_λ из компонентов замещения оказывает кремний, введение 1 % которого в сплав Fe-0.2 %C приводит к уменьшению $(\lambda_2)_{\text{ср}}$ и σ_λ соответственно на 20 и 15 %; введение 1 % марганца сказывается не столь значительно (3 % и 7%). Влияние, которое оказывают компоненты, характеризуется значением комплексного параметра $\frac{p_i C_0^i (1 - k_i)}{D_i^L}$, определяющего условия перераспределения компонентов между коалесцирующими ветвями, при этом наиболее эффективным компонентом является углерод, отличающийся наибольшим значением p_i и минимальной величиной k_i .

В четвертом разделе изложена методология построения и реализации системной модели формирования дендритной ликвации, включающей этапы выделения δ -фазы ($L \rightarrow \delta$), перитектического превращения ($L + \delta \rightarrow \gamma$) и выделения γ -фазы ($L \rightarrow \gamma$) в условиях термической и диффузионной неравновесности.

Моделирование микроликвации при известных граничных условиях (температура и доля твердой фазы, текущий радиус дендритной вет-

ви, концентрация компонентов во внутридендритном расплаве и т.д.) производили путем численного расчета диффузионного перераспределения компонентов с временным шагом $\Delta\tau_D$ по сечению однофазных областей (δ и γ) и концентрации на межфазных границах L/δ , L/γ и δ/γ (рис. 5) на основе разностной модификации уравнения Фика:

$$\frac{\Delta(C_N)_i}{\Delta\tau_D} = D_i^{\delta,\gamma} \left[\frac{(C_{N+1})_i - 2(C_N)_i + (C_{N-1})_i}{\Delta R^2} + \frac{1}{R_N} \frac{(C_{N+1})_i - (C_{N-1})_i}{2\Delta R} \right]. \quad (8)$$

Кристаллизационные процессы моделировали с помощью базовой модели кристаллизации (1) – (4), согласно которой значение $t(\tau)$ определяет величину физико-химических параметров k_i , D_i^S и концентрацию углерода на межфазных границах (L/δ , L/γ и δ/γ); $\Delta T(\tau)$ диктует кинетику движения фронтов кристаллизации L/δ и L/γ ; $d\lambda_2/d\tau$ задано интенсивностью коалесценции.

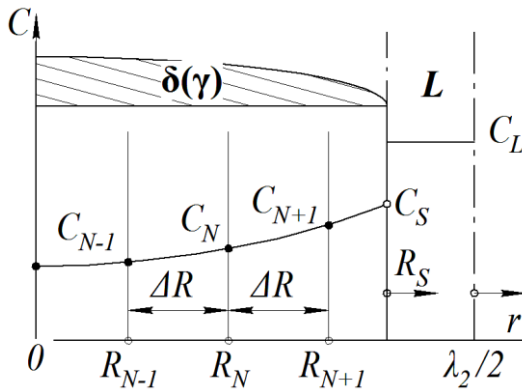


Рисунок 5. Расчетная схема моделирования микроликвации

$$0 \leq \tau \leq \tau_{LS}; \quad 0 \leq R_S \leq \lambda_2/2; \quad 0 \leq r_S \leq R_S; \\ R_S \leq r_L \leq \lambda_2/2; \quad C_S^i(\tau) = k_i C_L^i(\tau); \quad D^S \ll D^L$$

При анализе кинетики перитектического превращения использована схема диффузионно-контролируемого углеродом движения межфазных границ.

Минимальные значения $k_c^{\delta/L}$ и $k_c^{\gamma/L}$ для углерода (табл. 2) 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 δ - и γ -фазе, скорость которой зависит от величины λ_2 , приводит к его практически равномерному распределению (индекс ликвации $\beta = \frac{C_{\max} - C_{\min}}{(C_L)_0} < 0.1$, где

$(C_i)_{\max}, (C_i)_{\min}$ – конечная концентрация компонентов по сечению дендритных ветвей) по сечению дендритных ветвей (рис. 6, табл. 2) вне зависимости от положения сплава на диаграмме состояния и локальной продолжительности кристаллизации τ_{LS} .

Таблица 2. Физико-химические условия дендритной ликвации
компонентов сплавов Fe- X_i

X_i	Коэффициент диффузии в твердой фазе, $10^{-11} \text{ м}^2/\text{с}$		Коэффициент распределения		Индекс микроликвации	
	D_S^δ	D_S^γ	$k^{\delta/L}$	$k^{\gamma/L}$	Расчетное значение	Экспериментальное значение ^{*)}
C	485	73.5	0.17	0.32	0.01÷0.1	-
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: ^{*)} данные экспериментального исследования микроликвации получены с помощью аналитического автоэмиссионного растрового электронного микроскопа SUPRA 55VP Carl Zeiss.

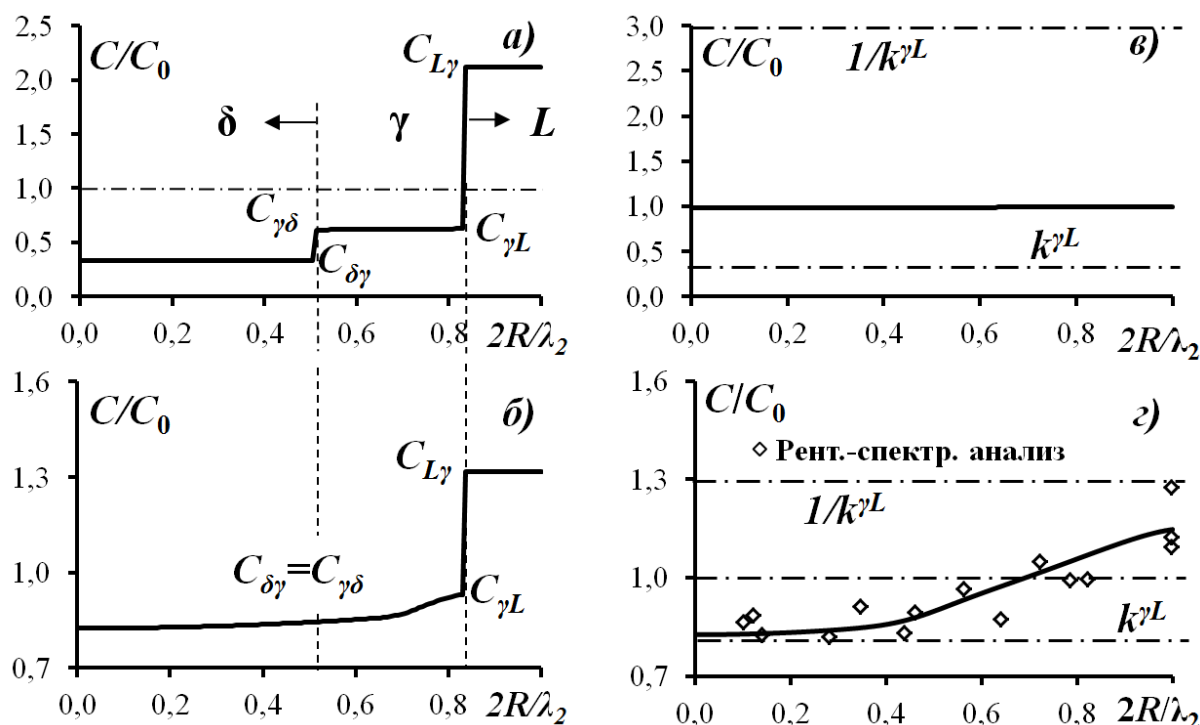


Рисунок 6. Расчетное распределение углерода (а, в) и марганца (б, з) по относительному радиусу $2R/\lambda_2$ дендритной ветви (линии) на этапе перитектического превращения (а-б) и по окончании кристаллизации (в-з) в сопоставлении с экспериментальными данными МРСА (точки) и равновесными относительными концентрациями (штрих-пунктир)

Сталь 10ХГН2; $k_C^{\gamma/L}=0.34$; $k_{Mn}^{\gamma/L}=0.78$; $\tau_{LS}=60 \text{ с}$; $\lambda_2=100 \text{ мкм}$

Исследование дендритной ликвации низколегированных сталей (Fe-C-Si-Mn-Cr-Ni-Mo) в широком интервале значений τ_{LS} (см. рис. 7) показывает, что при увеличении интенсивности теплоотвода изменение

индекса ликвации β (параметра неоднородности распределения компонентов по сечению дендритных ветвей) определяется соотношением накопления и переноса компонентов в твердой фазе по сечению междоусного промежутка, которое диктует коэффициент распределения k_i (см. табл. 2) и параметр $\sigma_i = f(D_i^S, \tau_{LS}, \lambda_2)$ соответственно.

Профиль распределения различных компонентов в дополнение к указанным факторам зависит от фазового состава кристаллизующейся стали. Начало перитектического превращения сопровождается изменением коэффициентов распределения k_i на межфазных границах и многократным снижением коэффициентов диффузии в твердой фазе ($D_i^\delta \gg D_i^\gamma$, $\sigma_i \approx 0.3-0.4$ и менее), что способствует усилению микроликвации. В этих условиях определяющими для величины индекса микроликвации β являются различия в величине коэффициентов распределения, о чем свидетельствуют результаты моделирования (табл. 2), в соответствии с которыми наибольшая величина β выявлена для кремния и молибдена, которые обладают минимальными значениями $k_i^{\gamma/L}$.

Распределение компонентов в слое γ -фазы, разделяющем расплав и δ -фазу при перитектическом превращении, рассчитывали с учетом *на-ра-равновесия* на границе γ/δ , согласно которому концентрация углерода на межфазной границе отвечает *локально-равновесным условиям*, в то время как при перемещении межфазной границы γ/δ вследствие соотношения $D_C^S \gg (D_{X_i}^S)_\delta \gg (D_{X_i}^S)_\gamma$ наследуется концентрация компонентов замещения, сформировавшаяся ранее на этапе выделения δ -фазы (рис. 6). По этой причине положение границы γ/δ отмечается перепадом локально-равновесных концентраций углерода (рис. 6, а), в то время как марганец (рис. 6, б), кремний и другие компоненты замещения сохраняют профиль распределения, возникший при выделении δ -фазы на межфазной границе L/δ .

Адекватность реализованной модели дендритной ликвации подтверждена путем сопоставления результатов моделирования с экспериментальными данными для стали 10ХГН2, полученными с помощью МРСА для ряда компонентов (рис. 6, в).

Анализ взаимосвязи процессов формирования микроструктурной неоднородности и дендритной ликвации показывает, что локальное уменьшение величины λ_2 в процессе коалесценции (при равенстве τ_{LS} в мезо-масштабе) вызывает закономерное снижение микроликвации (рис. 7) в результате повышения концентрации C_{min} на оси ветвей и уменьшения C_{max} в их периферийных слоях. Этот эффект является следствием увеличения диффузионного потока компонентов между осевой и периферийной зонами ветвей в силу возрастания градиента концентрации компонентов в твердой фазе.

В результате степень микроликвации, возникающей в первую очередь вследствие отклонения коэффициентов распределения от единицы, усиливается/снижается под действием масштабного фактора (λ_2),

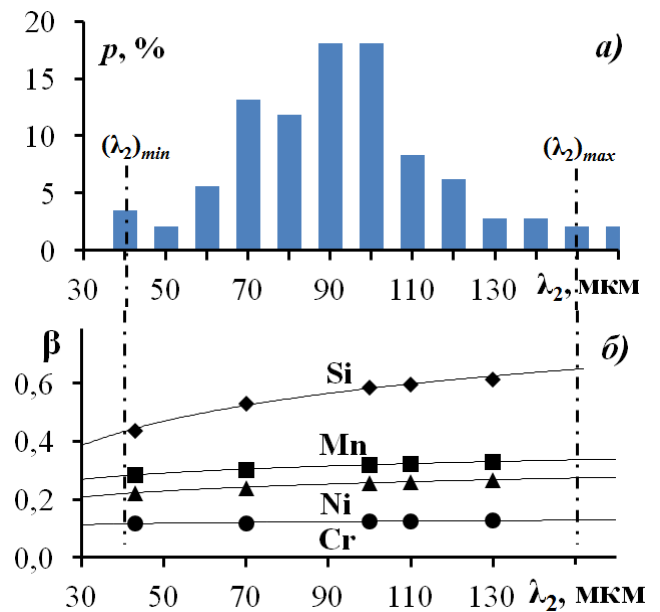


Рисунок 7. Влияние локальной неоднородности микроструктуры (а) на степень дендритной ликвации компонентов (б) в стали 10ХГН2 ($\tau_{LS}=60$ с)

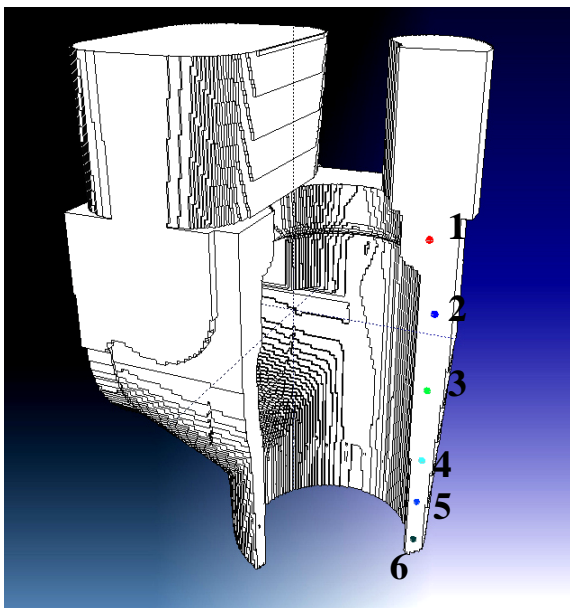


Рисунок 8. Трехмерная модель отливки «Корпус»

определяющего длительность пути обратной диффузии и величину градиента концентрации.

В пятом разделе рассмотрено использование системной модели для анализа формирования структурной и химической микронеоднородности при кристаллизации литой заготовки массой 560 кг из стали 30ХМЛ (рис. 8). В качестве контрольных точек для анализа были выбраны мезо-элементы (объемом $V \approx 80$ мм³) в вертикальной стенке от-

ливки на различном расстоянии от ее нижней плоскости.

По результатам макро-масштабного моделирования затвердевания отливки с помощью программы «Polycast» была определена средняя величина коэффициента теплоотдачи ($\alpha=0.4\div 2.6$ Вт/м²·К) для каждого контрольного мезо-элемента, что в сочетании с термодинамическим моделированием по программе «Polytherm» необходимых теплофизических и физико-химических параметров позволило реализовать полное информационное обеспечение разработанных моделей для прогнозирования структурной и химической микронеоднородности.

Для контрольных мезо-элементов при $\tau_{LS}=400\div 2800$ с прогнозируется изменение параметров дендритной структуры в пределах 150÷300 мкм (рис. 9), аппроксимируемое уравнениями:

$$(\lambda_2)_{cp}=24(\tau_{LS})^{0.32}; (\lambda_2)_{cp}+\sigma_\lambda=32(\tau_{LS})^{0.30}; (\lambda_2)_{cp}-\sigma_\lambda=17(\tau_{LS})^{0.34}, \quad (9)$$

близость параметров которых к опубликованным эмпирическим зависимостям типа $\lambda_2=K\tau_{LS}^p$ ($K=29\pm 7$ мкм; $n=0.40\pm 0.06$) свидетельствует об адекватности разработанных компьютерных моделей.

На основе полученных результатов была выполнена модернизация модели фильтрационного течения расплава, являющейся основой для компьютерного прогнозирования дефектов усадочного характера.

В качестве параметра, определяющего фильтрационное развитие усадочных

пустот в отливках, обычно используют коэффициент проницаемости k_{Π} , величина которого согласно формуле Козени пропорциональна площади сечения λ_2^2 фильтрационного канала.

Учитывая статистическую неоднородность распределения междуосных промежутков $p_i(\lambda_2)_i$ и широкий диапазон их вероятных значений $\pm\sigma_\lambda$ (рис. 9), при расчете коэффициента проницаемости необходимо ис-

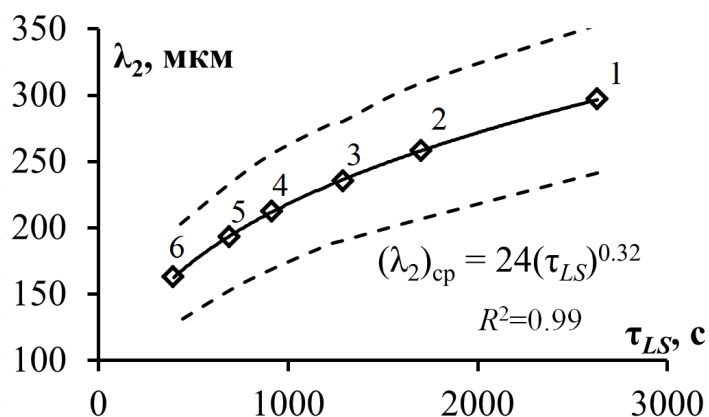


Рисунок 9. Структурная микронеоднородность по высоте отливки «Корпус»

пользовать вместо средней величины дендритных ячеек $(\lambda_2)_{\text{ср}}$ эффективное среднеквадратичное значение $(\lambda_2)_{\text{эфф}} = \sqrt{(\sum p_i \times (\lambda_2)_i^2)}$.

Это позволяет учесть существенное различие в величине коэффициента проницаемости по высоте отливки и приводит, как показано для рассматриваемого сечения отливки, к корректировке локальных значений потока фильтрующегося расплава на 8-16%.

Представленные на рис.10 относительные данные по микроликвации в отливке показывают, что распределение углерода является практически равномерным, в то время как для молибдена и кремния индекс ликвации $\beta > 0.6$ -0.8 и менее 0.45 для хрома и марганца. Это обусловлено значительным различием величины их физико-химиче-

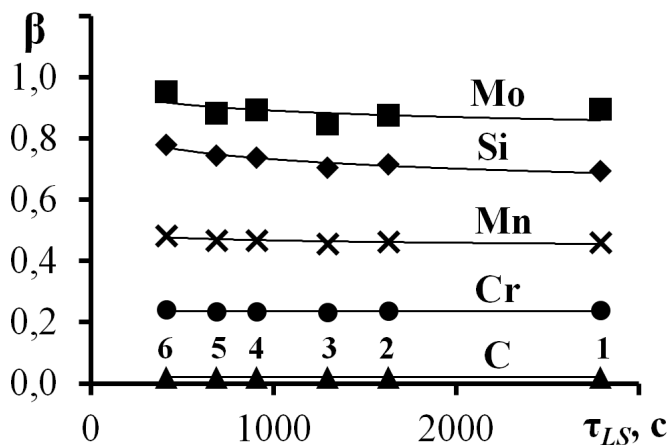


Рисунок 10. Влияние локальной продолжительности кристаллизации τ_{LS} на индекс дендритной ликвации β компонентов стали 30ХМЛ

ских параметров (коэффициента диффузии в твердой фазе, коэффициента распределения, склонности к коалесценции – см. табл. 2).

Зависимость степени дендритной ликвации от продолжительности кристаллизации τ_{LS} по высоте отливки носит сходный характер: для хрома и марганца, отличающихся малой склонностью к ликвации, изменение β также незначительно, в то время как для молибдена и кремния индекс дендритной ликвации заметно снижается при увеличении локального времени затвердевания τ_{LS} и, соответственно, величины λ_2 в верхней части отливки (рис. 10).

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

Результаты прогнозирования дендритной структуры и микроликвации по сечению фасонной отливки демонстрируют возможности использования реализованного в работе системного подхода при моделировании процессов формирования стальных отливок для проведения многофакторного анализа технологических условий затвердевания литых заготовок.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ И ВЫВОДЫ

1. Для системного анализа процесса кристаллизации стали сформирована двухэтапная физическая и математическая модель эволюции первичной структуры, включающая рост стволов дендрита 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 вторичных ветвей. Компьютерная реализация этой модели подтвердила ее количественное согласие с литературными данными и возможность количественного прогнозирования на ее основе структурной и химической неоднородности дендритной структуры стали.

2. Программный комплекс, разработанный для анализа кристаллизации, реализует совместное решение системы дифференциальных уравнений, описывающих сопряженное протекание тепловых, кристаллизационных и диффузионных процессов в многофазной системе в результате *неравновесных* фазовых превращений. Анализ решаемой системы уравнений дает возможность выявить основные факторы, определяющие ход исследуемых процессов, и их системные взаимосвязи.

3. Неравновесный характер кристаллизации стали, количественно выявленный в результате системного моделирования, обусловлен торможением диффузии компонентов замещения в твердой фазе и находится в прямой зависимости от локального значения комплексного параметра $D^S/v\lambda_2$, где скорость роста дендритных ветвей v обусловлена термическим переохлаждением ΔT остаточного расплава, а ширина вторичных междудендритных промежутков λ_2 — локальной продолжительностью кристаллизации τ_{LS} .

4. С использованием метода Монте-Карло в работе выполнен *вероятностный* анализ развития дендритной структуры на этапе возникновения вторичных ветвей и в процессе их диффузионной коалесценции. Полученные расчетным и экспериментальным путем гистограммы мезо-масштабного распределения вторичных междuosных промежутков дендритов свидетельствуют о значительной структурной неоднородности, характеризуемой высокими значениями коэффициентов вариации междuosных промежутков ($\pm 20-25\%$). Выявленная неоднородность, как установлено путем моделирования, оказывает значительное влияние на развитие дендритной ликвации.

5. С помощью металлографического анализа микрофотографий дендритной структуры стали в сочетании с компьютерным моделированием различных механизмов процесса коалесценции установлены базовые безразмерные соотношения между геометрическими параметрами вторичных ветвей и пределы их статистического разброса.

6. При анализе различных механизмов коалесценции (I-IV) путем сопоставления экспериментальных и расчетных гистограмм распределения вторичных междuosных промежутков установлен преобладающий вклад (до 90 %) механизмов радиального и осевого растворения ветвей, что позволяет существенно упростить расчетную методику оценки структурной неоднородности дендритных систем.

7. С помощью разработанной микро-масштабной модели формирования дендритной ликвации выявлены основные механизмы, определяющие остаточное распределение различных компонентов стали в результате их накопления в твердой фазе (при $k_i < 1$) и диффузионного перераспределения по сечению дендритных ячеек при интенсивной коалесценции вторичных ветвей и паравравновесных условиях на межфазной границе δ/γ при перитектическом превращении.

8. По результатам численного расчета затвердевания фасонной отливки с учетом технологических условий ее изготовления реализован прогноз дендритной структуры и микроликвации с оценкой характеристик структурной и химической микронеоднородности, определяемых путем компьютерного моделирования мезо- и микромасштабных процессов для заданной величины локальной интенсивности теплоотвода.

Основные результаты диссертационной работы представлены в публикациях:

Журналы из перечня ВАК

1. Голод В.М., Емельянов К.И. Компьютерный анализ кинетики и полноты перитектического превращения.— Научно-техн. ведомости СПбГПУ, № 2(123). – СПб, 2011. – С. 205-211.
2. Емельянов К.И., Голод В.М. Компьютерное моделирование структурной микронеоднородности при кристаллизации многокомпонентных сплавов // Литейщик России, 2013, № 2.— С. 28-33.
3. Голод В.М., Емельянов К.И. Влияние структурной микронеоднородности на развитие дендритной ликвации при кристаллизации стали. – Научно-техн. ведомости СПбГПУ, № 3(178). – СПб., 2013.— С. 163-168.
4. Голод В. М., Емельянов К. И., Орлова И. Г. Дендритная микронеоднородность литой стали: обзор проблем и их компьютерный анализ (Часть I) // Черные металлы, 2013, № 8. – С. 9-16.
5. 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.
6. Голод В. М., Емельянов К. И., Орлова И. Г. Дендритная микронеоднородность литой стали: обзор проблем и их компьютерный анализ (Часть 3) // Черные металлы, 2013, № 11. – С. 18-25.
7. Голод В. М., Емельянов К. И. Системный анализ морфологической эволюции дендритной структуры стали // Черные металлы, 2014, № 4 (988). – С. 49-54.

Прочие публикации

8. Емельянов К.И., Голод В.М. Анализ полноты перитектического превращения в зависимости от кинетики затвердевания железоуглеродистых сплавов // XXXIX неделя науки СПбГПУ. Матер. межд. науч.-практ. конф. Ч. VI. – СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2010. – С.15-17.
9. Емельянов К.И., Голод В.М. Факторы, определяющие полноту перитектического превращения железоуглеродистых сплавов // Материалы лучших докладов XXXIX недели науки СПбГПУ. – СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2011. – С.170-172.

10. Емельянов К.И., Голод В.М. Критериальный анализ полноты перитектического превращения при кристаллизации сплавов // Материалы XVIII междунар. науч.-практ. конференции «Высокие интеллектуальные технологии и инновации в национальных исследовательских университетах». – СПб.: Изд-во СПбГПУ. – Т.1 – 2011. – С.141-144.

11. Емельянов К.И., Голод В.М. Компьютерный анализ кинетики и полноты перитектического превращения в многокомпонентных сплавах // Сб. тр. II-ой Всеросс. молодежной школы-конф. «Современные проблемы металловедения». – М.: Изд-во МИСиС, 2011. – С.71-79.

12. Емельянов К.И., Голод В.М. Моделирование дендритной неоднородности при кристаллизации стали с учетом теплофизических и физико-химических характеристик // XL неделя науки СПбГПУ. – Матер. межд. науч.-практ. конф. Ч. VI. – СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2011.– С. 14-15.

13. Голод В.М., Емельянов К.И., Орлова И.Г. Дендритная микронеоднородность стальных отливок: обзор исследований и компьютерный анализ // Сб. тр. IX Всеросс. науч.-практ. конф. «Литейное производство сегодня и завтра». – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2012.– С. 436-455.

14. Емельянов К.И., Голод В.М. Моделирование локальной микроструктурной неоднородности многокомпонентных сплавов // Сб. тр. IX Всеросс. науч.-практ. конф. «Литейное производство сегодня и завтра». – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2012. – С. 461-471.

15. Емельянов К.И., Савельев К.Д., Голод В.М. Сравнительный анализ характера перитектического превращения в условиях орто- и параравновесия // Матер. науч.-практ. конф. с междунар. участием. – Ин-т металл., машиностр. и трансп. Ч. 2. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2014. – С. 12-14.

16. Емельянов К.И., Голод В.М. Прогнозирование микроструктурной неоднородности на основе модели коалесценции дендритных ветвей // Матер. лучших докладов науч.-практ. конф. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2014. – С. 164-168.

Отзыв научного руководителя

на диссертационную работу **Емельянова Константина Игоревича**

«Системный анализ неравновесной кристаллизации углеродистых и низколегированных сталей для прогнозирования их структурной и химической микронеоднородности»

Емельянов Константин Игоревич поступил в аспирантуру на кафедру физико-химии литейных сплавов и процессов (ныне – кафедра материалов, технологии и оборудования литейного производства) СПбГПУ в 2010 г. после окончания магистратуры в Пермском техническом университете по кафедре «Технология литейного производства» (по профилю «Технологические машины и оборудование»). Тема работы аспиранта является продолжением многолетних исследований, проводимых в СПбГПУ по компьютерному анализу процесса кристаллизации литейных сплавов, и ориентирована на многоуровневое моделирование совокупности процессов, определяющих формирование дендритной структуры сплавов в условиях, отличных от равновесных.

Перед К.И.Емельяновым была поставлена сложная задача освоения современных представлений и методов в области неравновесной кристаллизации, получивших значительное развитие в последние десятилетия, включая активное и многообразное использование математического аппарата и средств компьютерного моделирования для описания системы сопряженных теплофизических, кристаллизационных и диффузионных процессов. Аспирант проявил глубокий интерес к решению поставленной задачи, успешно проделал поиск и критический анализ обширного круга публикаций, в основном зарубежных, в которых рассматриваются различные проблемные аспекты теории кристаллизации многокомпонентных сплавов, получив объемную картину современных достижений и нерешенных задач.

Накопленная при этом информация позволила К.И.Емельянову осуществить масштабный аналитический обзор публикаций по теме диссертации (объемом более 20 стр., представленный в трех выпусках журнала «Черные металлы» за 2013 г.) и на его основе сформировать эффективную концепцию системного анализа при разработке алгоритма решения задачи формирования структуры, реализованного для одного из наиболее востребованных машиностроением и вместе с тем сложных объектов материаловедения – многокомпонентных сплавов системы Fe-C с перитектическим превращением. При его программной реализации аспирант успешно использовал аппарат вычислительной математики для численного решения системы сопряженных уравнений поэтапного теплообмена, выделения твердой фазы при наличии термического переохлаждения в системе с подвижными межфазными границами и перераспределением

компонентов между фазами в условиях частичного подавления диффузии в твердой фазе.

Наиболее эффективное и плодотворное исследование закономерностей кристаллизации достигнуто К.И.Емельяновым при моделировании зарождения и последующей морфологической эволюции дендритной структуры в процессе диффузионной коалесценции вторичных ветвей дендритов, для чего в работе использован метод Монте-Карло, с помощью которого – в отличие от традиционной схемы шаровой морфологии первичных кристаллитов – выявлен механизм возникновения структурной микронеоднородности. Впервые на основе полученных экспериментальных данных аспирантом сформулирована и успешно решена прямая и обратная задача построения гистограммы распределения вторичных междоусных промежутков, выполнен сравнительный анализ различных механизмов коалесценции и дана количественная статистическая оценка их вклада на основе аппарата нечетких множеств.

В рамках диссертационной работы К.И. Емельяновым получены важные результаты, развивающие современные представления о закономерностях фазовых превращений при перитектической кристаллизации сплавов железа, разработан оригинальный программный комплекс системного анализа многоэтапной перитектической кристаллизации и с использованием аппарата вычислительной термодинамики осуществлено его информационное обеспечение для моделирования дендритной структуры и микроликвации в стали.

Практическая ценность диссертационной работы К.И. Емельянова убедительно представлена в работе при анализе локальной структурной и химической микронеоднородности стали по сечению фасонной стальной отливки. Основой подобного подхода, применяемого на этапе разработки литейной технологии, является использование численного моделирования условий затвердевания в сочетании с разработанной аспирантом программной оценкой параметров дендритной структуры и микроликвации литого металла.

Результаты диссертации представлены в 19 публикациях (в том числе – в 7 статьях, опубликованных в журналах, входящих в перечень ВАК). Основные положения диссертации доложены и обсуждены на ряде общероссийских конференций и совещаний.

Диссертация К.И. Емельянова является законченным научным исследованием и соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям.

Научный руководитель:



канд. техн. наук Голод В.М.,
проф. кафедры МТиОЛП

Объявление о защите диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

Диссертационный совет Д 212.132.02 при Национальном исследовательском технологическом университете «МИСиС», 119049, Москва, Ленинский проспект, 6, объявляет, что **Емельянов Константин Игоревич** представил диссертацию на соискание ученой степени кандидата технических наук «Системный анализ неравновесной кристаллизации углеродистых и низколегированных сталей для прогнозирования их структурной и химической микронеоднородности» по специальности 05.16.04 «Литейное производство».

Защита диссертации состоится 25 декабря 2014 г.

Текст объявления о защите диссертации и полный текст диссертации размещены на сайте НИТУ «МИСиС» 24 октября 2014 г. по адресу:

<http://www.misis.ru/tabid/176/ArticleID/1963/>