

На правах рукописи

Кропотин Николай Валентинович

**Математическое моделирование физических
процессов при литейной сварке**

Специальность 01.04.01 – Приборы и методы экспериментальной физики

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Ижевск – 2010

Работа выполнена в Физико - техническом институте УрО РАН, г. Ижевск.

Научный руководитель: доктор физ.-мат. наук
Саламатов Евгений Иванович

Официальные оппоненты: доктор технических наук, профессор
Колодкин Владимир Михайлович

доктор физ.-мат. наук, профессор
Летчиков Андрей Владимирович

Ведущая организация: ОАО НИТИ "Прогресс"

Защита состоится 15 октября 2010 г. в 15.00 часов на заседании диссертационного совета ДМ212.275.03 в ГОУ ВПО "Удмуртский государственный университет" по адресу: 426034, Удмуртская республика, г. Ижевск, ул. Университетская, д.1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ГОУ ВПО "Удмуртский государственный университет", с авторефератом - на официальном сайте ГОУ ВПО "УдГУ": <http://v4.udsu.ru/science/abstract>

Автореферат разослан 14 сентября 2010 г.

Отзывы и замечания по автореферату в двух экземплярах, заверенные печатью, просьба высылать по вышеуказанному адресу на имя ученого секретаря диссертационного совета.

Ученый секретарь
диссертационного совета,

к. ф.-м. н., доцент

Крылов П. Н.

Общая характеристика работы

Актуальность работы Изготовление почти каждого искусственного объекта на некоторой стадии включает в себя процессы затвердевания. Причина заключается в сочетании относительной дешевизны процессов заливки жидких расплавов в формы любой сложности с высоким качеством получающихся после затвердевания изделий. Благодаря этим факторам наблюдается общая тенденция вытеснения технологий механической обработки различными видами точного литья. В этом аспекте для производителя актуальны как улучшение качества продукции, получаемых с помощью процессов затвердевания, так и создание новых материалов с заданными свойствами. Эти задачи являются по своим целям технологическими и металловедческими, но по существу их решение возможно на основе комплексного подхода, включающего в себя создание физико-математических моделей процессов затвердевания, компьютерное моделирование процессов и прогнозирование свойств материалов, разработку контрольно-измерительных средств и методов экспериментального исследования материалов на различных стадиях их затвердевания. Предварительная отладка технологии в виртуальной среде позволяет значительно удешевить создание автоматизированных литейных комплексов, реализующих литейные процессы, отработанные на компьютере. При компьютерном моделировании процесса затвердевания металлических расплавов возникают существенные проблемы из-за большого числа материальных параметров и физических переменных, так как особенно важные для технических приложений сплавы содержат большое количество компонент и могут кристаллизоваться, образуя различные структуры, что приводит к широкому диапазону механических свойств и, следовательно, влияет на качество и долговечность изделия. Свойства изделия, получаемого в результате затвердевания гетерофазной и многокомпонентной системы во многом определяются

перераспределением компонент сплава в присутствующих фазах. Различия в свойствах тем более может быть ощутимо, когда происходит затвердевание не одного расплава, а взаимодействуют сплавы с разным химическим составом. А такие технологии, как изготовление цельной конструкции из инструментальной стали и серого чугуна методом литья, оказались перспективными ввиду удешевления и ускорения производства этих изделий. Например, компания Camito [1] разработала и запатентовала метод отливки заготовок штампов из серого чугуна или чугуна с шаровидным графитом с закладными элементами из инструментальной стали. Использование таких заготовок позволяет резко сократить долю ручного труда в производстве кузнечных штампов, ранее требовавших точной подгонки различных частей и, соответственно, уменьшить время изготовления изделия. Согласно официальным данным, выигрыш по времени составляет 500 часов (30%). Наименее исследованными здесь являются процессы, происходящие на границе сталь-чугун, которые и отвечают за прочность соединения конструкции. В идеальном случае соединение двух материалов литейной сваркой происходит по всей поверхности раздела, чего нельзя добиться обычной сваркой или болтовым креплением. В этом случае качество соединения зависит как от состава соединяемых частей, так и от температурно-временного режима, при котором происходит соединение. Создание условий для получения качественного соединения, желательного одинаковых по всей поверхности раздела также является актуальной задачей. Наиболее эффективным способом выбора оптимального технологического режима можно считать методы математического моделирования. Для определения условий, при которых происходит образование интерфейса с необходимыми свойствами, требуется решение задачи, описывающей эти процессы.

Цель диссертационной работы состоит в исследовании физико-химических процессов в зоне соединения двух материалов при литейной сварке

методами математического моделирования. В соответствии с целью работы поставлены следующие задачи:

- Разработать математическую модель физико-химических процессов литейной сварки стали с чугуном;
- Определить основные закономерности развития физико-химических и гидродинамических процессов при различных режимах кристаллизации сплавов;
- Исследовать зависимость распределения компонентов сплава по твердой жидкой зоне в зависимости от величины параметров в модифицированном уравнении Шейла;
- Исследовать зависимость распределения примеси по сварному шву от температурно-временного режима литейной сварки стали с чугуном.

Научная новизна работы

Впервые исследовано влияние параметра равновесности на кинетику кристаллизации и ликвацию в автомодельном приближении кристаллизации бинарного сплава.

Предложены способы вычисления параметра равновесности и эффективного коэффициента распределения, которые позволяют определять кинетический солидус сплава в зависимости от интенсивности теплоотвода и учитывать эффекты, связанные с размерами отливок и конфигурацией.

Предложен и реализован оригинальный способ численного решения сильно нелинейной системы уравнений неравновесной кристаллизации бинарного сплава.

Разработана модель литейной сварки, которая решает задачу взаимодействия различных по составу материалов в терминах теории двухфазной зоны.

Практическая значимость

Проведенные исследования могут быть использованы при создании программного обеспечения для моделирования процесса литейной сварки.

Предложен способ управления процессом формированием сварного шва с заданными параметрами, основанный на разработанной физико-математической модели формирования сварного соединения.

На защиту выносятся

- Результаты исследования влияния перераспределения примеси между фазами в двухфазной зоне на кинетику кристаллизации доэвтектического бинарного сплава.
- Способ определения эффективного коэффициента распределения при неравновесной кристаллизации бинарного сплава.
- Алгоритм численного решения сильно нелинейной системы уравнений задачи кристаллизации.
- Физико-математическая модель литейной сварки стали с чугуном.

Апробация работы Материалы диссертации опубликованы в 11 печатных работах, из них 6 статей и 5 тезисов в сборниках докладов и трудов конференций. Основные положения диссертации докладывались на

XII Национальной конференции по росту кристаллов (НКРК-2006), Москва

XIII Национальной конференции по росту кристаллов (НКРК-2008), Москва

Конференции Молодых Ученых (КоМУ 2006), Ижевск

Конференции Молодых Ученых (КоМУ 2008), Ижевск

V Международной научной конференции "Кинетика и механизм кристаллизации. Кристаллизация для нанотехнологий, техники и медицины", Иваново (2008)

Личный вклад автора

Все результаты, представленные в работе получены лично автором. Самостоятельно проведены численные расчеты. Постановка задачи, выбор методов решения и обсуждение результатов проводились совместно с научным руководителем и соавторами.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка публикаций и списка цитируемой литературы из 80 наименований. Общий объем работы составляет 138 страниц

Содержание работы

Во Введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

В первой главе приводится обзор литературных источников по современному состоянию проблемы математического моделирования формирования сварного соединения. Проведен анализ существующих физико-математических моделей процессов сварки и показано, что проблема моделирования литейной сварки недостаточно изучена. Представленные модели не охватывают весь спектр задач, необходимых для описания процесса литейной сварки. Основной проблемой моделирования этого процесса в реальных условиях металлургического производства является его «многогранность». В связи с этим, модель должна давать корректное описание процессов тепло-массопереноса, учитывая микро и макроуровни, то есть давать четкое представление как происходит диффузия, конвекция и собственно кристаллизация изготавливаемого изделия. На основании проведенного анализа сформулирована

цель работы и задач исследования.

Во второй главе изложены основные принципы теории двухфазной зоны [2, 3] и изучается влияние диффузии в твердой фазе на динамику процесса кристаллизации. Основными уравнениями системы, описывающей процесс кристаллизации отливки, являются уравнения переноса энергии, массы и импульса (1-4). Дополнив их уравнениями неразрывности (5), кинетики процесса (6) и уравнением состояния (7), получаем полную систему уравнений, которая в терминах двухфазной зоны будет выглядеть следующим образом:

$$c\rho \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (V\nabla)T \right) = \nabla(\lambda\nabla T) + q_\phi \frac{\partial S^\phi}{\partial t}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(LC^L) + \sum_{\phi} \left(\frac{\partial}{\partial t} (S^\phi C^\phi) \right) = \nabla \cdot J - (VL\nabla) C^L, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(LC^L) - kC^L \frac{\partial L}{\partial t} + (1-L)k\varepsilon \frac{\partial C^L}{\partial t} = \nabla (D_L L \nabla C^L) - (VL\nabla) C^L, \quad (3)$$

$$\rho \frac{\partial V}{\partial t} + \rho (V\nabla) V + \rho R V = -\nabla p - \rho\nu \Delta V - \rho g, \quad (4)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V) = 0, \quad (5)$$

$$\frac{\partial S^\phi}{\partial t} = \beta \left(T_{LS}^\phi - T \right), \quad (6)$$

$$T_{LS}^\phi = \begin{cases} T_L(C^L) \\ T_S(C^\phi) \end{cases}. \quad (7)$$

В выражениях (1-7) и ниже приняты следующие обозначения: T - температура, L - концентрация примеси в расплаве, S - концентрация примеси в твердой фазе, T_L - температура ликвидуса, T_S - температура солидуса, L - доля жидкой фазы, S - доля твердой фазы, c - теплоемкость, ρ - плотность, q - теплота кристаллизации, λ - теплопроводность, k - коэффициент распределения, D_L - коэффициент диффузии в расплаве, V - конвективная скорость, ν - кинематическая вязкость, g - ускорение свободного падения, p - давление,

β - анизотропный кинетический коэффициент роста. В классической постановке модели двухфазной зоны переохлаждение расплава считается малым и вместо уравнения (6) используется уравнение $T = T_L(C^L)$. Кроме того, в исходной модели, диффузия в твердой фазе не учитывается, и в равновесии находится только граница раздела фаз [2]. Такое приближение недостаточно, так как диффузия в твердой фазе в литейной сварке является одним из ключевых процессов. Учет влияния диффузии в твердой фазе на процесс кристаллизации обычно осуществляется модифицированием уравнения Шейла — за счет введения параметра «равновесности» ε [4]. Этот параметр можно представить в виде $\varepsilon = 8D_S t_f / d_1^2$, где D_S — коэффициент диффузии в твердой фазе, t_f — локальное время затвердевания и d_1 — расстояние между первичными ветвями дендритов. Единственной известной величиной в этом выражении является коэффициент диффузии, поэтому ε при феноменологическом рассмотрении, можно считать подгоночным параметром, позволяющим учитывать концентрационную неравновесность процесса затвердевания. Модифицированное уравнение Шейла выглядит следующим образом:

$$L(C) = \left((C_0/C)^{\frac{1-k\varepsilon}{1-k}} - k\varepsilon \right) / (1 - k\varepsilon), \quad (8)$$

где C_0 — начальная концентрация. Параметр ε можно рассматривать как относительную долю твердой фазы, находящейся в равновесии с жидкой частью двухфазной зоны. При $\varepsilon = 1$ вся твердая фаза находится в равновесии с жидкостью, а уравнение (8) сводится к традиционному “правилу рычага”. Значение $\varepsilon = 0$ соответствует классической постановке квазиравновесной модели двухфазной зоны, для которой в равновесии находится только граница раздела фаз. Выбор значения ε при моделировании конкретной задачи существенно зависит от скорости теплоотвода и от степени развитости дендритной структуры. Для верификации ε рассмотрено автомодельное решение. Известно, что автомодельные решения адекватно описывают процессы затвердева-

ния на малых интервалах времени и дают не только качественное, но и количественное описание процессов затвердевания [5], то это приближение может служить основой для выбора параметра равновесности при моделировании реальных процессов. Для проведения анализа зависимости результатов расчетов от выбора значения ε в автомодельном приближении была решена задача кристаллизации бинарного сплава $Al - Si$. Рассмотрена квазиравновесная модель, поскольку для неравновесной автомодельного решения не существует. Сплав $Al - Si$ выбран по причине того, что доэвтектический ликвидус с хорошей точностью может быть аппроксимирован уравнением $T = T_L - \alpha C$, где T_L – температура плавления чистого алюминия, α – наклон линии ликвидус. Для учета локального баланса примеси между твердой и жидкой фазами (для эффективного учета диффузии по твердой фазе с помощью параметра "равновесности" ε) использовано соотношение:

$$(1 + n(1 - L)) \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla v T = \nabla (\bar{L} \nabla T) - Q(1 + n) \frac{\partial L}{\partial t}. \quad (9)$$

Для характеристики различных состояний металла введены объемные доли (сечения) твердой S и жидкой L фаз, сумма которых равна единице $S + L = 1$. Вводя автомодельную переменную $\xi = x/2\sqrt{t}$ и считая, что $L \equiv L(\xi)$, $T \equiv T(\xi)$, $C \equiv C(\xi)$, $C_S \equiv C_S(\xi)$, $p_L \equiv p_L(\xi)$, $v \equiv v(\xi)/2\sqrt{t}$, приходим к краевой задаче для системы нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений. Принималось $\xi = \xi_1$ ($\xi = \xi_2$) - граница между двухфазной зоной и областью с твердой (жидкой) фазой. Из решения было определено поведение солидуса и ликвидуса при затвердевании рассматриваемого бинарного сплава. Показано, что кристаллизация начинается на равновесном ликвидусе, а поведение солидуса является неравновесным и зависит от выбора ε - с увеличением неравновесности процесса (уменьшением ε) увеличивается длина «траектории» по фазовой диаграмме.

Обнаружено, что с увеличением начальной концентрации примеси в рас-

плаве влияние ε на состав отливки уменьшается. На рис. 1 представлены графики температур конца затвердевания и ширины двухфазной зоны. При малых концентрациях температура в конце затвердевания повышается при уменьшении неравновесности. Поведение ширины зоны является обратным - зона сужается при увеличении равновесия в системе, как и можно было ожидать. При больших концентрациях зависимость обоих параметров от ε исчезает, так как состав сплава приближается к эвтектическому.

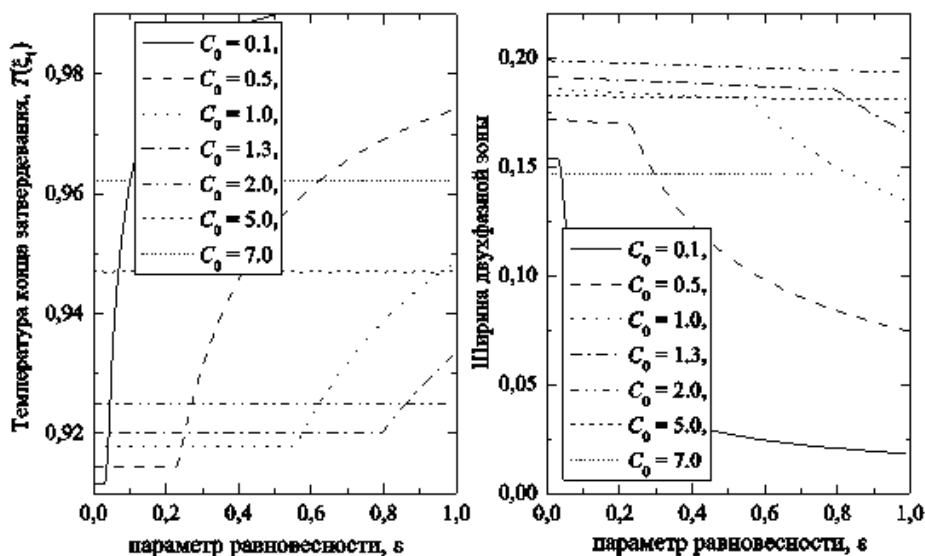


Рис. 1. Зависимость температуры конца затвердевания $T(\xi_1)$ и ширины двухфазной зоны от ε при различных C_0 .

Зависимости концентрации примеси в твердой фазе и в жидкой фазе в момент затвердевания от ε приведены на рис. 2. Видно (рис. 2а), что при повышении концентрация твердой фазы меняется до тех пор, пока не достигает своего равновесного значения при данных условиях. Кроме того, существует некоторая предельная начальная концентрация $C_0 = kC_e$, при которой возможно затвердевание без образования эвтектики. Причем, это значение, равное $kC(\xi_1)$, несколько выше, чем предсказываемое формулой Шейла, как это видно из рис. 2б, иллюстрирующего зависимость концентрации примеси в расплаве в момент затвердевания. Сплошные линии соответствуют автономному решению, а пунктирные получены с помощью формулы Шейла (8).

Как видно, формула Шейла в данной задаче дает существенно заниженное значение, так как в ней не учитывается движение расплава внутри двухфазной зоны.

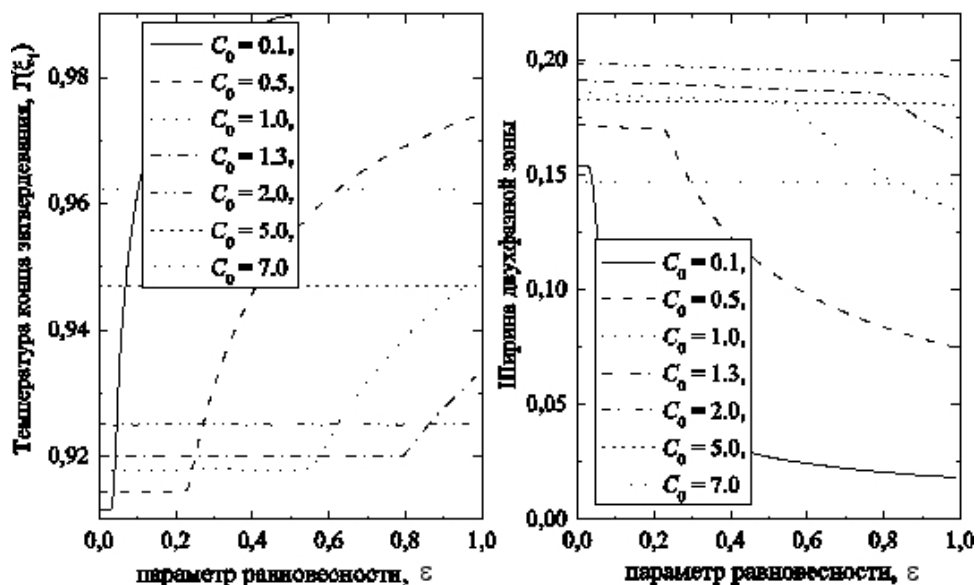


Рис. 2. Зависимости концентрации примеси в твердой фазе и концентрации примеси в жидкой фазе на границах двухфазной зоны от параметра “равновесности” ε при различных начальных значениях концентрации C_0 в момент затвердевания. На рис. б сплошные линии соответствует расчетным значениям, пунктир - значениям, полученным по формуле Шейла при $L(\xi_1)$.

Таким образом, в главе получены и численно проанализированы автономные решения квазиравновесной теории кристаллизации с учетом параметра «равновесности» ε , феноменологически учитывающего степень равновесия в процессах перераспределения примеси между жидкой и твердой фазами при затвердевании бинарного сплава. Полученные решения дают качественное представление о влиянии этого параметра на режим кристаллизации бинарного сплава, в частности на сегрегацию примеси в процессе затвердевания. Приведено сравнение с предсказаниями формулы Шейла (8). Расчеты проводились в предположении медленного охлаждения, поэтому коэффициент распределения соответствовал своему равновесному значению, соответственно, параметр ε определяет ликвационную картину. В условиях интен-

сивного теплоотода, равенство реального k и равновесного не соблюдается.

Результаты второй главы опубликованы в работе [A1].

В третьей главе изучено поведение примеси в зависимости от скорости кристаллизации. Рассмотрена одномерная задача затвердевания перегретого расплава. Решается система уравнений (1-6), ликвидус задан линейной функцией: $T_L(C^L) = T_L^0 - \alpha C^L$, где α — наклон линии ликвидус. Определение равновесного коэффициента распределения для бинарного сплава по известной фазовой диаграмме не составляет труда. При затвердевании реальных отливок с конечными скоростями кристаллизации должно наблюдаться отклонение от равновесия жидкой и твердой фаз, которое и является движущей силой процесса. Многочисленные эксперименты показывают, что реальный коэффициент распределения увеличивается с ростом скорости движения фронта, если равновесный коэффициент распределения меньше единицы, и уменьшается, если равновесный коэффициент больше единицы.

В данной модели коэффициент распределения рассчитывается как отношение концентрации на солидусе при температуре фронта кристаллизации к концентрации в приграничном слое расплава. При этом коэффициент распределения не превышает единицы.

$$k = \frac{C^S(T)}{C^L}. \quad (10)$$

Для того, чтобы показать различие в решении задачи кристаллизации, моделировалось два варианта (с равновесным и «неравновесным» коэффициентом распределения) затвердевания одномерного стержня тепло от которого отводилось через торцевые поверхности. Интенсивность теплоотода определялась физическими свойствами формы, в которой охлаждался стержень. Данная одномерная задача, как и последующие многомерные задачи не могут быть решены аналитически, поэтому они решались численно. Вообще уравнения теплопроводности и диффузии содержат как операторы диффузии

онного, так и конвективного переноса, в одномерных задачах скорости движения расплава определяются только усадкой, поэтому ими можно пренебречь и не решать задачу конвекции. Для решения дифференциальных уравнений в частных производных применялся разностный метод. Непрерывные искомые функции аппроксимировались сеточными функциями на равномерной прямоугольной разностной сетке. Для построения неявной консервативной разностной схемы использовался интегро-интерполяционный метод. Уравнения параболического типа исходной системы имеют разностный аналог полностью неявный вид которых:

$$\kappa_i \frac{y_i^{n+1} - y_i^n}{\tau} = \frac{1}{h} \left(a_{i+1/2} \frac{y_{i+1}^{n+1} - y_i^{n+1}}{h} - a_{i-1/2} \frac{y_i^{n+1} - y_{i-1}^{n+1}}{h} \right) + \varphi(y_i^{n+1}). \quad (11)$$

Уравнения тепло-массопереноса содержат источники, связанные с выделением тепла и ликвацией компонент при фазовых превращениях. Это делает уравнения нелинейными и приводит к необходимости решать задачу итерационно. Для обеспечения сходимости итерации необходимо наложить ограничения на шаг интегрирования по времени τ . С уменьшением τ скорость сходимости увеличивается, однако, увеличивается и общее число шагов интегрирования. Для достижения точности $\sim 10^{-6}$ оптимально выбрать $\tau = \frac{2c\rho}{3Q\beta}$. С применением этой математической модели были проведены вычислительные эксперименты, по которым видно отличие ликвации, получаемой при расчете с равновесным и «неравновесным» коэффициентом распределения. Условия охлаждения стержня были приближены к условиям затвердевания реальной отливки. Таким образом, на одном эксперименте можно проследить влияние скорости затвердевания на положение кинетического солидуса (температуры конца затвердевания сплава). Поведение коэффициента распределения и параметра «равновесности» в зависимости от скорости теплоотвода (переохлаждения) совместно с диффузией в расплаве формируют ликвационную картину затвердевшего стержня. При теплоотводе в форму с низкой

теплопроводностью k практически равен своему равновесному значению, поэтому оба варианта расчетов приводят к одному и тому же результату — монотонному убыванию температуры конца затвердевания. Для рассматриваемой диаграммы состояния это эквивалентно увеличению концентрации примеси последних порций расплава (конца двухфазной зоны), обусловленного исключительно диффузией. При интенсивном теплоотводе, в случае равновесного k , на границе стержня конец кристаллизации наступает при концентрации в расплаве $C = C_0 \left(\frac{k\varepsilon(1-k\varepsilon)}{1+k\varepsilon/(1-k\varepsilon)} \right)^{-\frac{1-k}{1-k\varepsilon}}$. Так как ε при высоких скоростях охлаждения стремится к нулю, $k < 1$, $C \gg C_0$, то данный расчет показывает расширение двухфазной зоны. Расчеты с коэффициентом распределения, являющимся функцией переохлаждения, при высоких скоростях теплоотвода дали на границе $k = 1$, $C = C_0$. Выделение тепла, вызванное кристаллизацией, снижает переохлаждение. После середины стержня концентрации расплава конца двухфазной зоны выравниваются, соответственно можно предположить, что в обоих решениях структуры средней области будут примерно одинаковы. Структуры же поверхностей отливок различаются радикально. Таким образом, пренебрежение зависимостью коэффициента распределения от переохлаждения (или скорости кристаллизации) может привести к ошибочным результатам расчетов. Таким образом, в данной главе было изучено влияние основных параметров, отвечающих за перераспределение примеси. Предельный случай медленного теплоотвода совпадает с равновесной моделью кристаллизации, а экстремально высокая скорость охлаждения приводит к быстрой закалке из расплава. Показано, что в условиях интенсивного теплоотвода основным фактором, отвечающим за микросегрегацию, является коэффициент распределения, а при медленном охлаждении параметр «равновесности» играет ключевую роль. При моделировании реальных отливок, необходимо учитывать не только параметры, отвечающие за микроликвацию, но и рассматривать процессы макропереноса (конвекцию).

В четвертой главе рассмотрена задача переноса примеси конвективными потоками. Скорость конвекционного перемешивания зависит от многих факторов (скорость и направление движения фронта кристаллизации, зависимость плотности расплава от температуры и химического состава, градиенты температуры и концентрации в расплаве). В данной главе было рассмотрено затвердевание отливки с простой геометрией в условиях направленной кристаллизации. Решалась система феноменологических уравнений, описывающих процесс кристаллизации бинарного сплава в модели двухфазной зоны (1-6), дополненная линейным уравнением ликвидуса. Эта система уравнений решалась численно на ортогональной разностной сетке. Расчеты проводились в прямоугольной области. Принималось, что на всей поверхности тигля выполнено условие прилипания жидкости $V(x, y, t) = 0$ и отсутствует диффузионный поток $\frac{\partial C(x, y)}{\partial n} = 0$. Теплообмен с окружающей средой, имеющей температуру T^* осуществляется излучением

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = \sigma (T^4 - T^{*4}), \quad (12)$$

где σ — постоянная Стефана-Больцмана. Создание направленной кристаллизации, имитирующей равномерное вытягивания слитка из печи обеспечивают граничные условия для уравнения теплопроводности

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = H (T - T^*), \quad H = \sigma(T + T^*)(T^2 + T^{*2}), \quad (13)$$

где T^* — температура окружающей среды, представляет собой кусочно-линейную функцию, зависящую от y . Так как задача решалась в системе координат, связанной со слитком, то граничные условия являются функцией от $y - v_0 t$ и приобретают вид

$$T^* = \begin{cases} T_1, & y - v_0 t \geq 0, \\ T_1 + \frac{(T_1 - T_2)(y - v_0 t)}{\delta}, & -\delta < y - v_0 t < 0, \\ T_2, & y - v_0 t \leq 0. \end{cases} \quad (14)$$

В качестве начальных условий было выбрано равномерное распределение примеси и температуры в объеме расплава. $C = C_0$, $T = T_0$, $\vec{V}(x, y) = 0$

При решении уравнений гидродинамики применялась стандартная схема решения. Решаем систему уравнений Навье-Стокса с добавочной силой трения в двухфазной зоне, где мы считаем, что сила трения пропорциональна скорости. Для того, чтобы расщепить это уравнение представим давление в расплаве системы как $p_0 = \bar{\rho}gz +$ корректировочное давление δp . Тогда система, которую предстоит решить, выглядит так:

$$\frac{\tilde{V} - V^n}{\tau} = -(V^n \nabla) \tilde{V} + \nu \Delta \tilde{V} - \frac{1}{\rho} \nabla p_0 \quad (15)$$

$$\frac{V^{n+1} - \tilde{V}}{\tau} = -RV^{n+1} + g - \frac{1}{\rho} \nabla \delta p. \quad (16)$$

Находим в поле известного давления p_0 функцию \tilde{V} . Требуем, чтобы $\nabla \cdot V^{n+1} = 0$ (в данной работе усадкой пренебрегаем) тогда, переписав (16) как

$$V^{n+1} = \frac{\tilde{V} + \tau g}{1 + \tau R} - \frac{\tau}{\rho(1 + \tau R)} \nabla \delta p, \quad (17)$$

запишем уравнение на δp

$$0 = \nabla \cdot \frac{\tilde{V} + \tau g}{1 + \tau R} - \nabla \cdot \frac{\tau}{\rho(1 + \tau R)} \nabla \delta p. \quad (18)$$

с граничными условиями для δp на твердой поверхности $\frac{\partial \delta p}{\partial n} = 0$ и $\delta p = 0$ на свободной. Определив δp , подставляем в (17) и находим скорости движения расплава V^{n+1} .

Рассматривались случаи с легкой (плотность расплава уменьшается с ростом концентрации примеси) и тяжелой примесью. При проведении компьютерных экспериментов рассматривались два варианта извлечения тигля из печи — по направлению силы тяжести и против нее. Зависимость плотности расплава от концентрации примеси задавалась линейной функцией

$\rho(C) = \rho_0(1 + aC)$. Для легкой примеси $a = -0.0005$, для тяжелой $a = 0.0005$. Ниже приведены результаты моделирования.

При опускании тигля из печи легкая примесь увлекается конвективными потоками вверх, что не позволяет сформироваться широкой двухфазной зоне. В процессе кристаллизации концентрация примеси в нижней части слитка оказывается меньше исходной концентрации в расплаве, и большая часть примеси затвердевает вместе с последними порциями расплава (рис. 3 а).

При поднятии тигля, легкая примесь конвекционными потоками увлекается вверх, где, оттесняемая фронтом кристаллизации, расширяет двухфазную зону. В начале процесса примесь успевает отводиться от фронта кристаллизации, и затвердевший расплав имеет концентрацию, близкую к равновесной. В дальнейшем расплав кристаллизуется с постепенно возрастающей концентрацией, не образуя ярко выраженную зону ликвации внизу слитка (рис. 4 а).

При моделировании кристаллизации расплава с тяжелой примесью (плотность расплава увеличивается с обогащением примесью) были рассмотрены те же направления роста, что и с легкой. Наблюдается обратная картина зависимости распределения примеси от направления кристаллизации. Широкая двухфазная зона образуется при опускании тигля, поскольку тяжелая примесь плохо увлекается конвективными потоками и оседает вниз (рис. 3 б). Расплав кристаллизуется с монотонно возрастающей концентрацией, не приводя к образованию четко выраженных ликвационных зон.

При поднятии тигля из печи тяжелая примесь, не вовлеченная в конвекционные потоки, быстро оседает внизу в расплаве, не позволяя образоваться широкой двухфазной зоне. Концентрация примеси в большей части закристаллизовавшегося слитка оказывается меньше исходной концентрации, и ликвационные зоны с большим содержанием примеси образуются только при кристаллизации последних порций расплава (рис. 4 б).

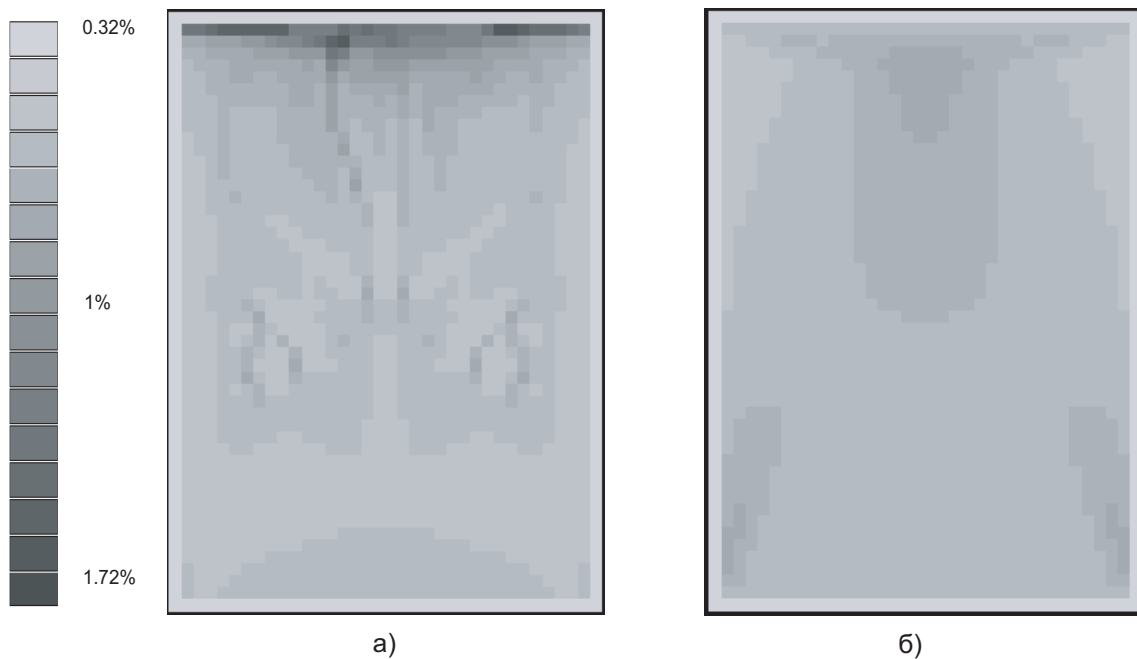


Рис. 3. Распределение примеси в сечении тигля в случае а) легкой, б) тяжелой примеси

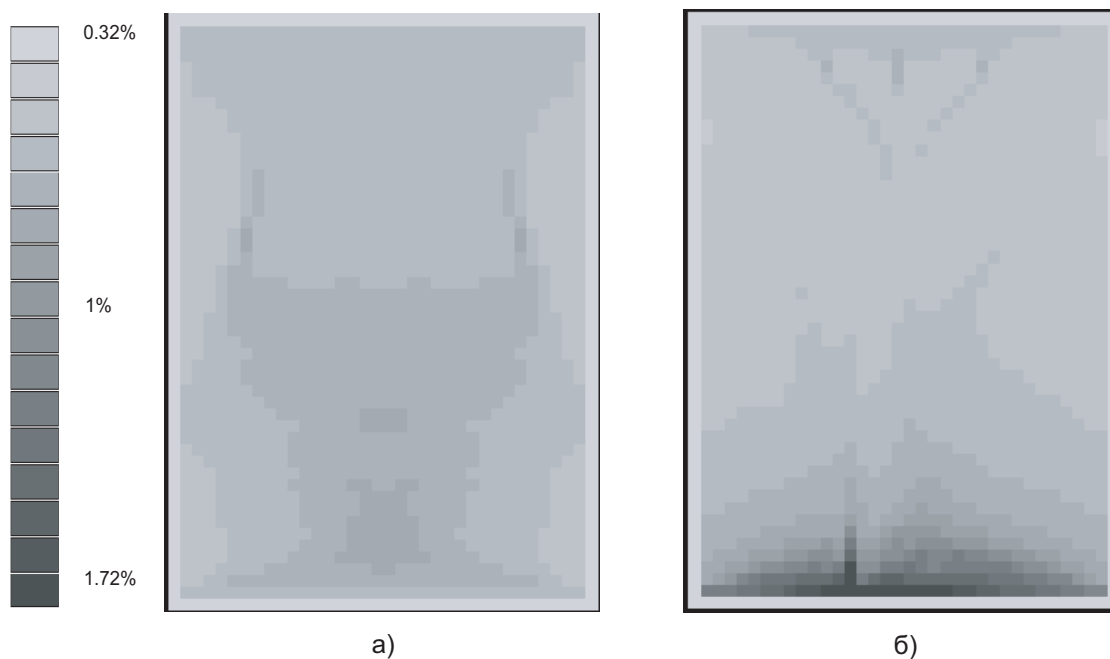


Рис. 4. Распределение примеси в сечении тигля в случае а) легкой, б) тяжелой примеси

Построена модель направленной кристаллизации бинарного сплава вертикальным методом Бриджмана, учитывающая влияние конвективного переноса на перераспределение примеси. Показано, что направление вытягивания контейнера с расплавом существенно влияет на химическую неоднородность в слитке. Результаты проведенных вычислительных экспериментов подтвер-

ждают факт того, что перераспределение примеси связано с подавлением или усилением конвекции гравитацией.

Результаты четвертой главы опубликованы в [A2].

На основе полученных результатов о процессах макро и микроликвации, была разработана физико-математическая модель литейной сварки. Эта модель изложена в **пятой главе**. И в рамках данной модели была решена задача кристаллизации расплава, находящегося в контакте с твердой фазой для системы $Fe - C - Si - Cr$, в предположении псевдобинарности фазовой диаграммы. Математическая модель процесса основана на теории квазиравновесной двухфазной зоны и использует те же термины. Однако, классическая постановка этой теории не учитывает диффузию в твердой фазе, что не позволяет описать литейную сварку. В связи с этим, отсутствие переохлаждения на фронте кристаллизации в исходной модели заменено кинетическими уравнениями роста фаз, и диффузия компонент сплавов считается как в расплаве, так и в твердом растворе. Вследствие того, что диффузионные процессы идут не только внутри фаз, но и на их интерфейсе, диффузионные потоки записывались не в концентрациях, а через активности компонент. Представляя расплав в виде раствора с активностью $a = c$, полагаем, что активность затвердевшего расплава равна $a = \gamma c$. Коэффициенты активности выбирались таким образом, чтобы в условиях равновесия межфазная диффузия отсутствовала. Кроме того, в поставленной задаче присутствует еще одна фаза – графит, в котором уравнение диффузии не считалось. Эта фаза постоянного состава и ее взаимодействие с растворами ограничивалось балансом углерода при изменении фазового состава. Посредством численного решения уравнений этой модели (1-7) были проведены вычислительные эксперименты, имитирующие получение монолита сталь – чугун методом литейной сварки. Для подтверждения результатов моделирования были проведены натурные эксперименты по диффузионному свариванию стали состава 0,6% углерода, 4,5%

хрома, 0,8% марганца и 0,35% кремния с чугуном, состав которого 3,6% углерода, 0,7% марганца и 2,4% кремния. Сваренная в тигле сталь была охлаждена до температуры, большей температуры ликвидуса чугуна, после чего на поверхности затвердевшего металла был расплавлен чугун. Эксперименты проводились на небольших отливках (~ 300 г). Для формирования области соединения необходимой протяженности (~ 50 мкм) необходимо было увеличить время диффузии на интерфейсе. Для достижения этой цели система выдерживалась при постоянной температуре в течение 10 минут, затем тигель был извлечен из печи, и система сталь–чугун кристаллизовалась и охлаждалась до температуры окружающей среды.

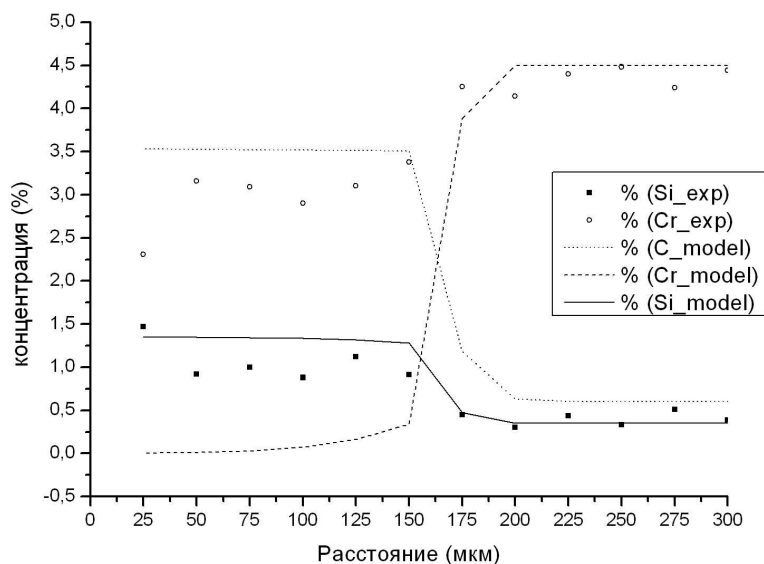


Рис. 5. Сравнительный график распределения компонент по области около шва.

Достоверность результатов, полученных с помощью численного моделирования, подтверждается экспериментально. Концентрационные кривые элементов представлены на рис. 5. Проведенная работа показывает, что низкие температуры и малые времена выдержки не меняют состава исходных фаз, что свидетельствует об отсутствии области соединения. Вообще заметная область соединения образуется при подплавлении интерфейсной области стали. Возникновение подплавления обусловлено тем, что углерод, коэффициент

диффузии которого в твердом растворе на основе железа значительно больше коэффициентов диффузии кремния и хрома, проникнув в приграничную стальную область, понизил температуру солидуса стали ниже температуры в печи. Образовавшийся жидкий раствор обогащен хромом и обеднен кремнием, что создает благоприятные условия для диффузии этих компонентов сплава. Кроме этого, несмотря на то, что плотность вновь образовавшегося расплава выше плотности жидкого чугуна, конвективное перемешивание жидкостей возникло, о чем свидетельствует наличие хрома в чугуне вдали от интерфейса. Увеличение времени выдержки в печи, а так же увеличение температуры печи приводят к вполне очевидному результату – увеличению ширины области соединения. Таким образом, видно, что основным процессом, влияющим на создание сварного соединения, является диффузия не в жидкой, а в твердой фазе. Состав области соединения определяется как макропроцессами (конвекция), так и микропроцессами (диффузия). Предложенная модель позволяет прогнозировать ширину шва по температурно-временному режиму в области контакта свариваемой пары материалов. Это позволяет заменить моделирование литейной сварки на реальных многотонных изделиях, где для решения задачи необходимы чрезвычайно мощные компьютерные ресурсы, на определение температурно-временного режима в свариваемой области, который может быть рассчитан в пакетах программ, моделирующих литейные процессы.

Результаты пятой главы опубликованы в [А3, А4, А5, А6].

Основные результаты и выводы

- Создана физико-математическая модель литейной сварки стали с чугуном, в которой концентрационное равновесие между жидкой и твердой фазами устанавливается с конечной скоростью.
- Реализованы новые методы вычисления эффективного коэффициента

распределения и параметра равновесности в системе уравнений плавления-кристаллизации.

- Разработан и реализован алгоритм численного решения сильно нелинейной системы уравнений неравновесной кристаллизации.
- Написаны программы, реализующие численное решение данной модели и визуализирующие результаты компьютерных экспериментов.
- Проведен натурный эксперимент получения биметалла сталь-чугун литейной сваркой.

Список публикаций

- A1. Кропотин Н. В., Лебедев В. Г., Федосимов Д. А. Исследование процесса кристаллизации бинарного сплава в автомодельном приближении // Химическая физика и мезоскопия. 2008. Т. 10, № 4. С. 436–448.
- A2. Кропотин Н. В., Кропотин В. В., Лебедев В. Г., Саламатов Е. И. Влияние направления роста на химическую неоднородность кристалла // Вестник Удмуртского университета. 2007. № 4. С. 43–50.
- A3. Кропотин Н. В., Саламатов Е. И., Кропотин В. В. Математическая модель сваривания стали с чугуном при литье // Литейное производство. 2009. № 5. С. 17–19.
- A4. Кропотин Н. В., Кропотин В. В., Лебедев В. Г. К вопросу о компьютерном моделировании затвердевания многофазных систем // Вестник Удмуртского университета. 2008. № 4. С. 141–150.
- A5. Кропотин Н. В., Кропотин В. В., Лебедев В. Г., Саламатов Е. И. Влияние температурно-временного режима на формирование области соединения

биметалла на примере системы сталь-чугун // Вестник Удмуртского университета. 2007. № 4. С. 151–158.

А6. Кропотин Н. В. Компьютерное моделирование литейной сварки // Химическая физика и мезоскопия. 2010. Т. 12, № 2. С. 179–187.

Цитированная литература

1. Camito, Part of the NovaCast Technologies Group. [Электронный ресурс]. URL: <http://www.camito.se>(01.05.2007).
2. Борисов В. Т. Теория двухфазной зоны металлического слитка. Москва, Металлургия, 1987. С. 224.
3. Журавлев В. А. Затвердевание и кристаллизация сплавов с гетеропереходами. Москва-Ижевск: Изд-во РХД, 2006. С. 557.
4. Флемингс М. Процессы затвердевания. Мир, 1977. С. 424.
5. Журавлев В. А., Колодкин В. М., Васькин В. В. Динамика двухфазной зоны металлических сплавов с химическими реакциями // Изв. АН СССР. Металлы. 1983. № 4. С. 64–68.