

ІМІТАЦІЙНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ГОМОГЕННОЇ ТА ГЕТЕРОГЕННОЇ КРИСТАЛІЗАЦІЇ АІ ТА СПЛАВУ Al-Si

Создана имитационная модель кристаллизации, в основу которой положен вероятностный клеточный автомат и которая дает возможность прогнозировать структуру затвердевающего металла при разнообразных условиях охлаждения, исследовать процесс кристаллизации как при гомогенном, так и при гетерогенном образовании зародышей.

The simulation model of a crystallization is created on the base of the probabilistic cell-like automatic unit and which gives the opportunity to forecast the structure of solidifying metal different conditions of cooling and investigate the process of crystallization both at homogeneous, an heterogeneous nucleating.

На сьогодні лабораторний експеримент є практично єдиним ефективним засобом опрацювання оптимальних технологічних режимів для підвищення службових характеристик матеріалів. В той же час використання обчислювального експерименту на ЕОМ дозволяє значно зменшити терміни розробок і матеріальні витрати, дає можливість дослідити технологічні режими і різноманітні варіанти керуючого впливу на структуру, які складно реалізувати в лабораторних умовах.

Відсутність теоретичних моделей, що дозволяють виконати обчислювальний експеримент, пояснюється недоліками традиційних підходів теоретичного опису фазових перетворень, для яких притаманне одночасна поява і зростання великого числа зародків нової фази, їх складна форма і взаємодія. Крім того, фазове перетворення - це комплекс взаємопов'язаних процесів, які розвиваються одночасно. При побудові теоретичних моделей все це значно ускладнює математичну постановку задачі і пошук її рішення.

У даній роботі розроблена імітаційна модель кристалізації, в основу якої покладено поєднання математичних методів моделювання та ідеї імовірного клітинного автомата [1], що дає змогу уникнути значних математичних труднощів та прогнозувати процес формування структури металу при кристалізації за різноманітних умов охолодження, досліджувати його як при гомогенному, так і при гетерогенному утворенні зародків.

Алгоритм моделі будується за допомогою основних прийомів системного аналізу, тобто шляхом декомпозиції системи, що досліджується, на окремі блоки (підсистеми) і визначення зв'язків між ними. Звичайно, вводяться деякі фізичні припущення і спрощення.

Розглядаючи кристалізацію чистого металу або бінарного сплаву можна виділити основні фізичні процеси, що визначають її хід. По-перше, це теплопередача, що відбувається в об'ємі розплаву під впливом зовнішніх чинників. Можна сказати, що саме цей процес є визначальним, тому що одним із найважливіших параметрів при формуванні структури кристалів є температурний градієнт [2]. Тому основним блоком, що задає динаміку роботи моделі, є блок визначення температурного поля упродовж всього процесу. В його основу покладено рівняння теплопровідності Фур'є з граничними умовами третього роду.

Другим найбільш істотним фізичним явищем в даному випадку є процеси, які пов'язані з перерозподілом компонентів сплаву. Тобто зміна концентрації в рідині біля границі розподілу "тверде-рідке" [2] за рахунок різної розчинності другого елемента в рідкому і твердому станах. Виділення другого компоненту можна врахувати шляхом введення характеристичних точок відповідної діаграми стану подвійного сплаву з подальшою апроксимацією ліній ліквідус і солідус. Для опису дифузії другого компонента в рідині зручно використовувати рівняння Фіка, яке з математичної точки зору є аналогічним рівнянню теплопровідності. Граничні умови в цьому випадку припускають відсутність обміну речовиною на межах системи.

З огляду на значну різницю коефіцієнтів дифузії в рідині й у твердому стані, перерозподілом елементів по зерну (дендриту) можна зневажити. Температура і концентрація в кожній точці розплаву визначають розмір локального переохолодження, що розраховується як різниця температури ліквідус для цієї точки і її температури у даний момент часу.

При наявності переохолодження в рідкому стані розплаву з'являються умови утворення кристала або росту вже існуючого зародка. Відомо [3], що зростання кристала відбувається при менших переохолодженнях (ΔT), тобто енергетично ці процеси відрізняються один від одного. З огляду на флуктуаційну природу утворення зародків і росту кристалів по нормальному механізму, характерному для металів [4], має сенс, по-перше, розділити ці процеси, а, по-друге, привнести в них елемент випадку. Для цього вводиться перевірка наявності найближчих "твердих сусідів", тобто сусідніх точок, що знаходяться у твердому стані. Якщо є хоч один "твердий сусід", вважається, що можливим є ріст вже утвореного зародка, у протилежному випадку можливо зародження нового центру. Для підкреслення енергетичних розходжень процесів утворення і росту кристала вводяться деякі "бар'єри", розмір яких визначається переохолодженням у даній точці і розраховується на основі відомих емпіричних співвідношень [3] залежностей кількості центрів в одиницю часу n і швидкості росту кристалів v від переохолодження:

$$n = K_n (\Delta T - \Delta T')^w \quad (1)$$

$$v = K_v \Delta T^\mu, \quad (2)$$

де K_n, K_v, w, μ - емпіричні коефіцієнти, $\Delta T'$ - інтервал метастабільності.

Все це реалізує клітинний автомат, який є частиною загального алгоритму імітаційної моделі. Його блок-схема представлена на рис. 1. Робота клітинного автомату починається з огляду найближчих сусідів чарунки, в якій є переохолодження і можливе фазове перетворення (блок 1). Після цього приймається рішення: або з'являється новий центр кристалізації, або зростає вже існуючий кристал (блок 2). В блоках 3, 4 визначаються умовні "пороги" перетворення, величини яких залежать від переохолодження, відповідно для випадків появи нових зародків та зростання вже існуючих кристалів.

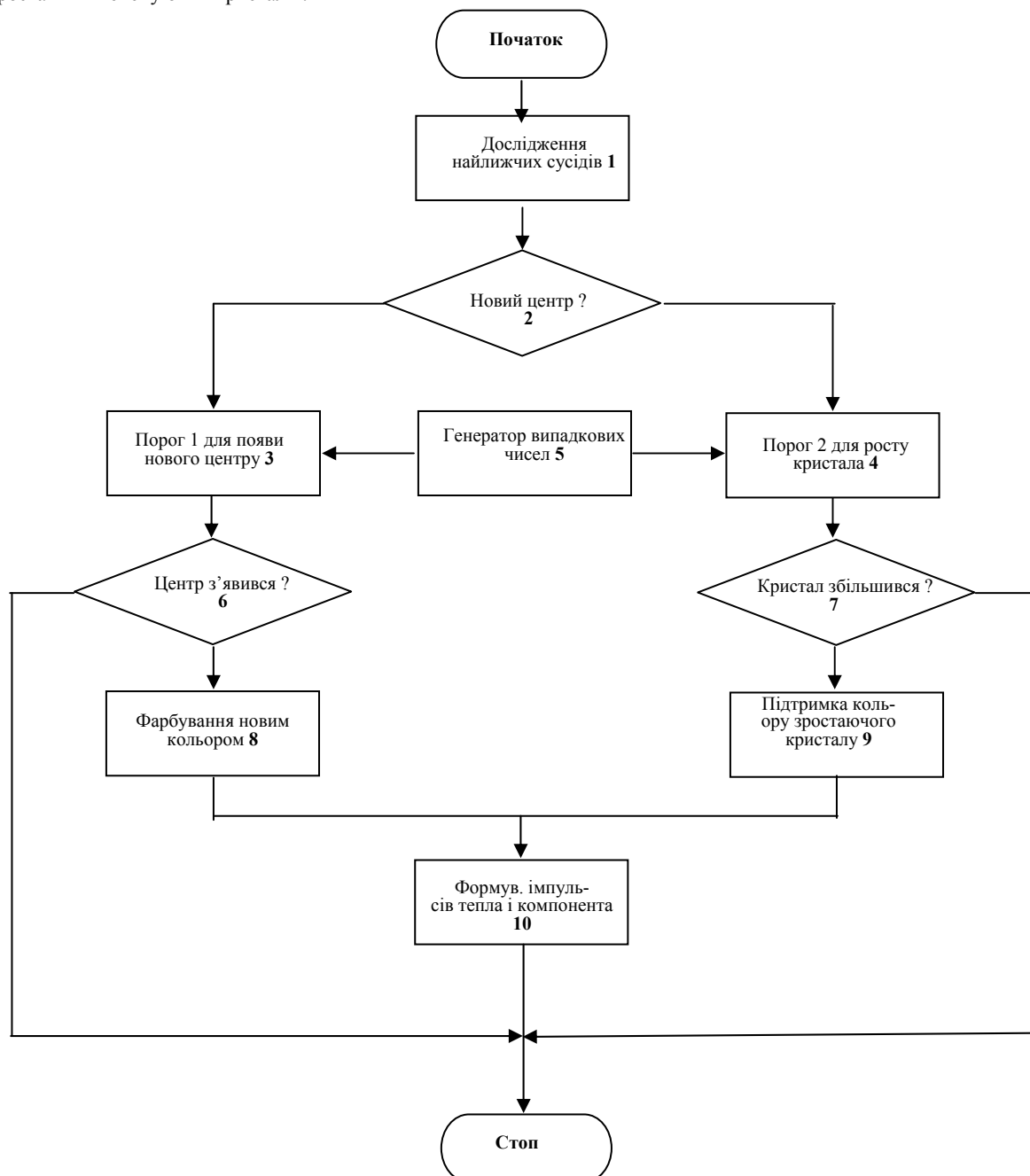


Рис. 1. Загальна структура ймовірного клітинного автомата імітаційної моделі кристалізації

Використання генератора випадкових чисел (блок 5), що є характерною рисою імітаційної моделі [5], дозволяє підкреслити флуктуаційний характер процесу. Після розрахунку відповідного бар'єра в блок 3 або в блок 4 потрапляє

випадкове число і якщо воно перевищує цей порог, відбувається фазове перетворення, тобто перехід даної точки зі стану "рідке" у стан "тверде".

Для прояву на екрані ЕОМ структури, що формується, передбачається колірна диференціація перетворення, що відбулося. Якщо утворюється новий зародок, він фарбується новим кольором. Зростання існуючого кристала підтримується фарбуванням кольором "твердого сусіда". Передбачено і чорно-білий варіант картинки, при якому за спеціально розробленим алгоритмом фіксуються границі зерен у цифровому вигляді.

Фазовий перехід супроводжується виділенням тепла кристалізації і підвищенням концентрації другого компонента в осередку даної точки. Формування відповідних "імпульсів" враховується при розрахунку теплового поля і концентрації другого компонента сплаву.

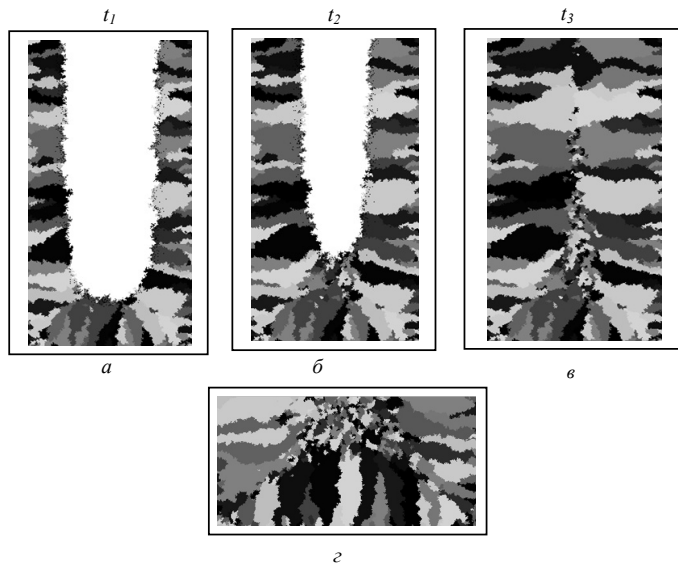


Рис. 2. Змодельована структура, що формується при кристалізації алюмінію в різні моменти часу: $t_1 < t_2 < t_3$, та при зміні конфігурації виливка

У якості вихідних даних надаються:

- файли, в яких в процесі роботи програми записується температура в центральній точці на кожному кроці розрахунків, кількість центрів кристалізації, що з'явилися, та лінійна швидкість росту кристала, кількість твердої фази та швидкість її зростання, величина градієнту температур по перетину системи;
- картинка, що моделюється клітинним автоматом, яка являє собою вікно виводу, що із часом заповнюється кольоровими точками, причому колір говорить про належність до певного покоління;
- кількісна оцінка розміру зерна;
- наявність переохолодження по площині системи, та розподіл концентрації другого елементу по перетину виливка (для подвійного сплаву).

Адекватність імітаційної моделі кристалізації може бути доведена шляхом порівняння даних, які отримані в натурному експерименті, з результатами роботи програми, що побудована на основі запропонованого алгоритму.

На рис. 2 показано змодельований процес формування структури алюмінію при кристалізації. Видно, що фронт кристалізації має не плоский, а дифузійний характер, що притаманно нормальному типу кристалізації. В кутах та на стінках з початку кристалізації виникають порівняно невеликі зерна, які при подальшому рості починають взаємодіяти між собою, і деякі з них припиняють свій ріст, а інші переходять у довгі зерна, спрямовані до центру. В кінці кристалізації в центрі виливка з'являються маленькі дезорієнтовані зерна. Зміна конфігурації виливка при тих же самих параметрах моделі призводить до зміни конфігурації температурного поля і відповідної зміни структури твердого металу (рис. 2 г).

На рис. 3 показані змодельовані структури алюмінію, які отримані при різних умовах кристалізації (змодельовані структури ілюструються як з кольоровою, так і з цифровою диференціацією зерен). Видно, що варіювання умовами приводить до відповідних змін структури твердого металу. Може з'явитись класична трьохзонна структура (рис. 3 б, в), або зона, що складається з довгих орієнтованих до центру кристалітів (рис. 3 а), або мілко зерниста структура (рис. 3 г).

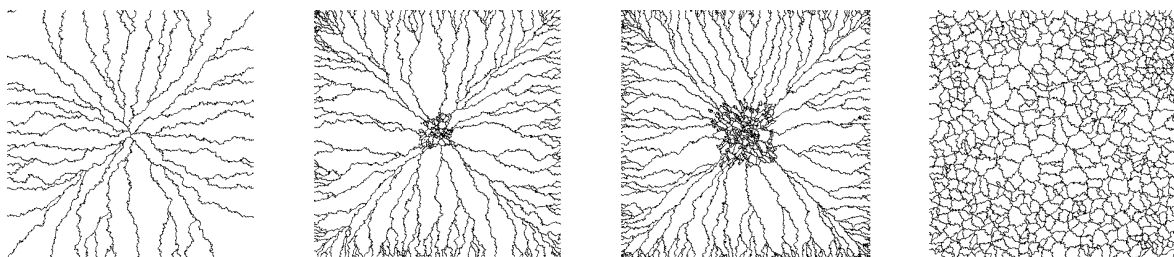


Рис. 3. Моделювання впливу умов кристалізації на структуру алюмінію. а) структура, яка складається з довгих орієнтованих до центру кристалітів; б) та в) класична трьохзонна структура; г) мілко зерниста структура

Таким чином, можна стверджувати, що імітаційна модель передає основні закономірності процесу формування структури металів, тобто вона адекватна і придатна для проведення досліджень.

Розглянемо вплив наявності твердих частинок в рідкому металі на структуроутворення при кристалізації чистого алюмінію в різних варіантах: без наявності модифікатора та з ним; без врахування впливу стінок та з врахуванням їх впливу.

Як видно з рис. 4, при відсутності модифікатора центри кристалізації утворюються біля стінок виливниці і зростають у напрямку до центру системи (тобто в напрямку градієнта температур). Фронт кристалізації має дифузійний характер, що притаманно нормальному механізму росту кристалів. За наявності модифікатора кристалізація набуває об'ємного характеру, що просто пояснюється наявністю твердих частинок, які є запалами

кристалізації, в об'ємі рідкого металу. Очікуваним є зменшення розмірів зерна твердого алюмінію при введенні та збільшенні кількості модифікатора (рис. 4 д та рис. 4 е).

В разі впливу стінок виливниці на процес кристалізації, які є запалами для рідкого металу і полегшують утворення зародків, кристалізація також починається від стінок форми (рис. 4 ж), але поблизу стінок з'являється зона дрібних кристалів (рис. 4 к). Така ж зона формується на початку кристалізації при наявності впливу стінок виливниці і вводу невеликої кількості модифікатора (рис. 4 з). Збільшення модифікатора повністю маскує дію стінок як запалів кристалізації (рис. 4 л та рис. 4 и, м).

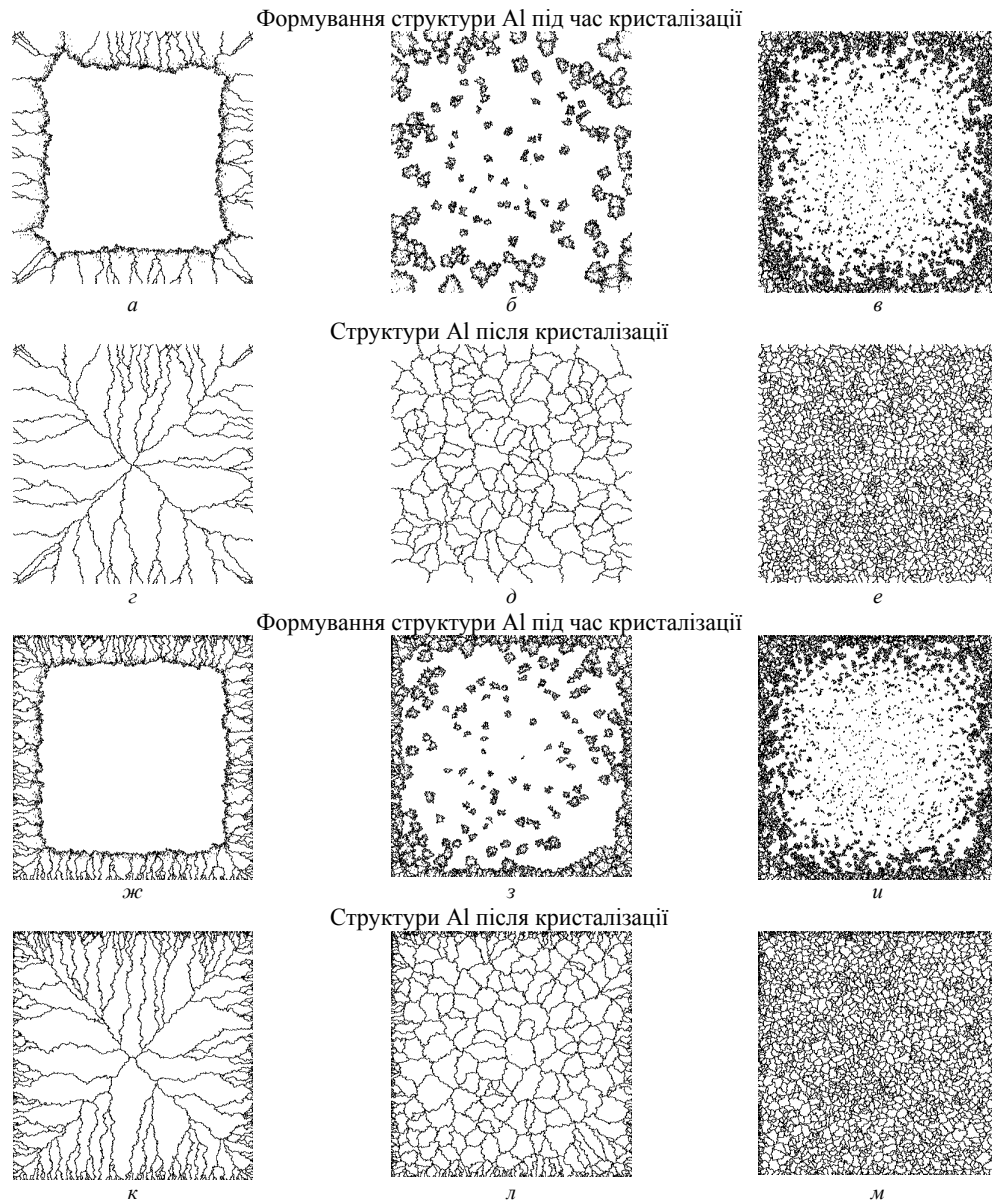


Рис. 4. Структури чистого алюмінію під час кристалізації та в твердому стані, що змодельовані підсистемою імітаційного моделювання:

а, г – без урахування стінок виливка та без модифікатора; б, д – без урахування стінок виливка та з 0,1% модифікатора; в, е – без урахування стінок виливка та з 1% модифікатора; ж, к – з урахуванням стінок виливка та без модифікатора; з, л – з урахуванням стінок виливка та з 0,1% модифікатора; и, м – з урахуванням стінок виливка та з 1% модифікатора

На кривій охолодження, яка змодельована за допомогою імітаційної моделі, для чистого алюмінію без наявності модифікатора і без врахування стінок виливниці на початку кристалізації існує рекалесценція температури (так звана “лунка”). Її формування неодноразово фіксувалось в експериментах [6] і є результатом утворення центрів кристалізації та їх зростання у нерівноважних умовах. При наявності запалів кристалізації (наявність модифікатора або вплив стінки) рекалесценція зникає і криві охолодження практично не змінюються. Ефект зникнення рекалесценції при вводиті модифікаторів запальної дії також добре відомий [6].

Змін в залежностях кількості твердої фази від часу кристалізації при введенні модифікатора та при урахуванні впливу стінок практично не зафіксовано.

Залежність швидкості зросту твердої фази під час кристалізації має яскраво виражений пік на початку процесу коли відбувається поява основної кількості центрів кристалізації. Цей пік співпадає з середньою величиною рекалесценції (тобто із серединою “лунки”). Введення модифікатора або вплив стінок виливниці зменшує величину цього піку, зводячи його, практично, до нуля. Це повністю відповідає факту кореляції величини рекалесценції температури (отже і піку швидкості зросту твердої фази) з механічними властивостями, а отже і з структурою твердого металу [6].

В даній роботі розроблена методика підготовки (настройки) імітаційної моделі для обчислювального експерименту з металами і сплавами, які потрібно дослідити, що базується на досягненні подібності модельованих та експериментальних кривих охолодження та структурних елементів макро зерна.

Перед початком роботи з моделлю вводяться у відповідні блоки початкові дані у вигляді фізично обумовлених параметрів та параметрів, що мають евристичний характер. Ці дані згруповано у три логічно обумовлені групи.

Перша група параметрів задає швидкість охолодження та лінійні розміри системи, а також теплофізичні характеристики металу. Варіювання ними дає можливість відтворювати умови охолодження майже всіх типів лиття (в кокілі, в землю тощо). При цьому головною характеристикою є швидкість охолодження, яка розраховується в моделі і повинна відповідати реальним умовам. Такий підхід дає можливість не вводити в математичну задачу теплопровідності наявності ливарної форми (матеріал, з якого вона зроблена, особливості її геометричних параметрів і тому подібне).

У другій групі параметрів моделі вводяться температура кристалізації чистого металу та наявність і кількість модифікатора, якщо він є. В варіанті імітаційної моделі, яка розроблена для бінарних сплавів, додаються значення характерних точок діаграми стану подвійного сплаву з обмеженим твердим розчином та з евтектикою, коефіцієнт дифузії та концентрація другого компоненту.

Третю групу параметрів складають так звані евристичні параметри, які характеризують основні параметри кристалізації: швидкість утворення зародків твердої фази та лінійна швидкість її росту. Це: інтервал метастабільності для утворення центрів кристалізації; максимальне переохолодження для утворення центрів кристалізації; інтервал метастабільності для швидкості росту кристалів; максимальне переохолодження для швидкості росту кристалів. Потрібно зазначити, що в науковій літературі вони мають більш якісний, ніж кількісний, характер. Тому точного їх визначення немає і вони підбираються емпірично. Можна сказати лиш те, що інтервал метастабільності для швидкості росту кристалів значно менший ніж інтервал метастабільності для утворення центрів кристалізації і наближається до нуля.

У цій групі даних є ще емпіричний коефіцієнт адаптації, урахування впливу стінок виливниці та геометричних пропорцій виливка. Емпіричний коефіцієнт адаптації використовується для “підстройки” кількості тепла, яке виділяється при кристалізації та компенсації впливу інших наближень.

Настройка імітаційної моделі проходить у три етапи, на кожному з яких використовуються свої групи параметрів моделі. При цьому результати обчислень, що отримані на моделі, на кожному етапі порівнюються з натурним експериментом, який, попередньо, виконується з відповідним металом або сплавом. В натурному експерименті фіксується крива охолодження, для чого використовується підсистема комп’ютерного термічного аналізу [6], і виробляється шліф з макроструктурою твердого металу або сплаву.

На першому етапі підбирається швидкість охолодження при твердінні рідкого металу. Для цього використовується перша група параметрів, які визначають зовнішні умови охолодження. Найбільш зручно робити це змінюючи коефіцієнти тепловіддачі з різних сторін, попередньо встановивши температуру оточуючого середовища 293 °K (20 °C). Але, якщо моделюється, наприклад, структуроутворення у попередньо підігрітому кокілі, то, звичайно, є сенс встановити відповідну температуру оточуючого середовища. Коефіцієнти тепловіддачі корегуються до тих пір, поки не співпадуть початкові ділянки експериментальної та розрахованої кривих охолодження, тобто ті, що знаходяться до початку кристалізації і відповідають рідкому стану системи.

На рис. 5 а та 5 б для чистого Al показані реальні та змодельовані початкові ділянки кривих охолодження. З рисунків видно, що після підбору коефіцієнтів тепловіддачі, вони співпадають майже ідеально. При збіганні цих ділянок кривих охолодження перша стадія настройки моделі вважається завершеною.

Другий етап настройки складається з вибору величини коефіцієнта адаптації таким чином, щоб співпадали ділянки кристалізації експериментальної та розрахованої кривих охолодження (рис. 5 в та рис. 5 г). З рисунків видно, що збігання кривих охолодження добре, але є деякі розбіжності.

Після збігання кривих охолодження починається третій, останній етап настройки моделі, на якому потрібно добитися збігання структур, які сформувалися в процесі кристалізації. В цьому випадку порівнюється макроструктура, що отримана на експериментальному шліфі, з структурою, яка змодельована за допомогою підсистеми імітаційного моделювання (рис. 5 д та рис. 5 е). Параметрами, що підлягають визначенню, є основні параметри кристалізації: інтервал метастабільності для утворення центрів кристалізації, максимальне переохолодження для утворення центрів кристалізації; інтервал метастабільності для швидкості росту кристалів; максимальне переохолодження для швидкості росту кристалів.

Таким чином, завершивши третій етап настройки імітаційної моделі структуроутворення при кристалізації, можна проводити обчислювальний експеримент, результати якого будуть мати не тільки якісний, але і кількісний характер.

Потрібно зауважити, що особливості моделювання (широке застосування спрощень та апроксимацій) дозволяє досліджувати структуроутворення при кристалізації не тільки чистих металів або бінарних сплавів, а також деяких складно легованих сплавів, які умовно можна розглядати як чистий метал, або як подвійний сплав. Якщо в розплаві знаходиться досить мало другого компоненту або сумарний вміст легуючих компонентів незначний, то досить очевидно, що його кристалізацію можна умовно розглядати як кристалізацію чистого металу. Трьох- або чотирьохкомпонентний сплав, який має окрім основного компонента ще один компонент із більшою концентрацією

ніж інші, також, для спрощення, можна вважати подвійним сплавом. Наприклад в сплаві АК7М5 кремній складає 6–8%, а магній до 0,5% і він утворює евтектику Al-Mg₂Si-Si наприкінці процесу затвердіння. На кривій охолодження ця евтектика проявляється у вигляді невеликого піка у кінці кристалізації.

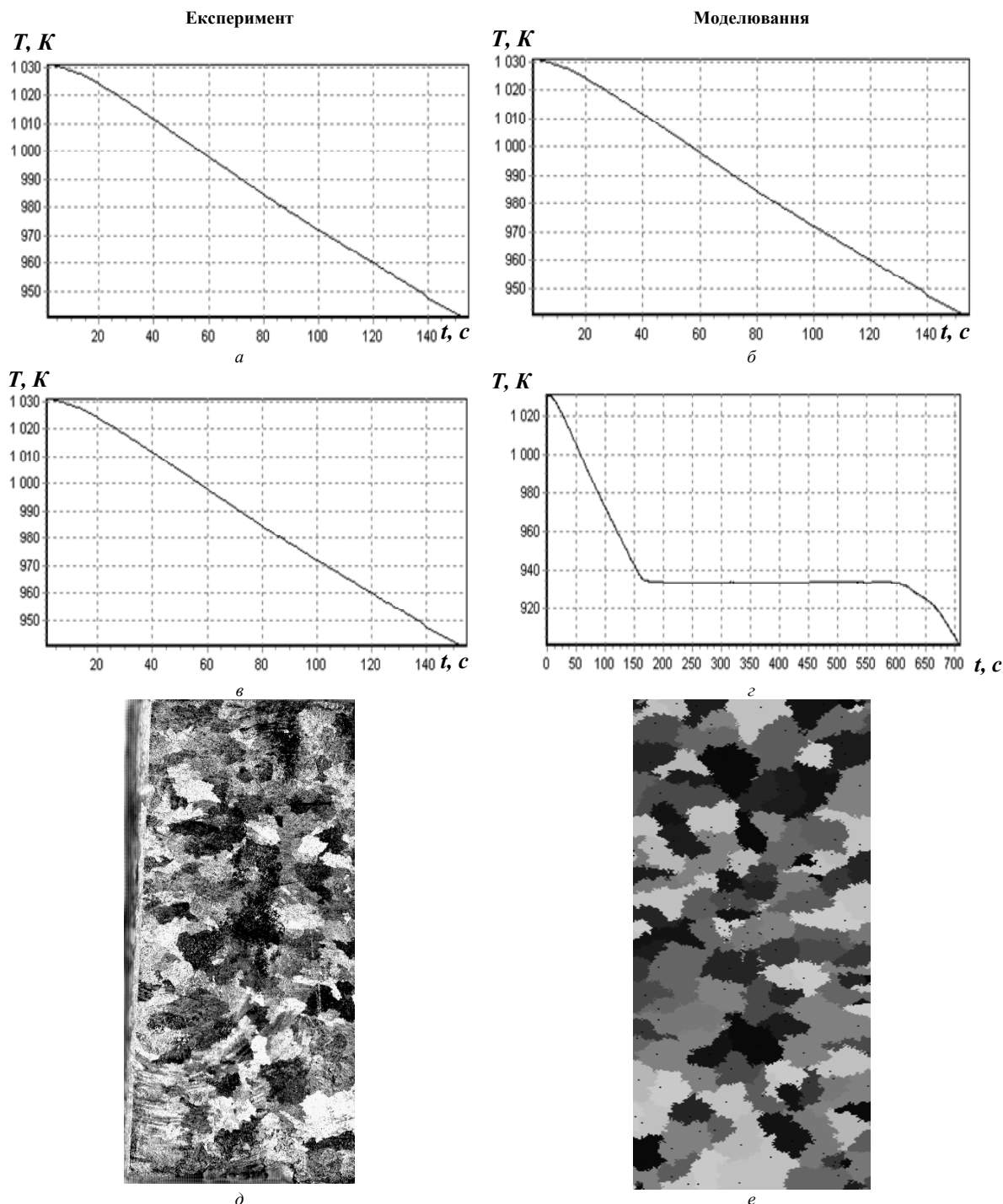


Рис. 5. Налаштування імітаційної моделі структуроутворення при кристалізації Al: а) початок реальної кривої охолодження, б) початок змодельованої, в) вся крива охолодження (в – реальна крива, г – змодельована), д) реальна структура, е – змодельована

Очевидно, що в цьому випадку введення точок діаграми стану Al – Si в параметри налаштування імітаційної моделі при дослідженні сплаву АК7М5 є логічним.

Окрім цих випадків слід зауважити ще один, коли діаграма стану сплаву є складною, але в певному діапазоні концентрацій її можна звести до подвійної. Прикладом такого випадку є система Al – Cu. Точка відповідної діаграми стану з вмістом міді в алюмінії приблизно 32 – 33% є точкою утворення хімічної сполуки. Але якщо обмежитись лише цією частиною діаграми (тобто ввести умову $Cu \leq 32 - 33\%$), то сплав можна розглядати як бінарний із звичайною діаграмою обмеженої розчинності з евтектикою. Вочевидь в такому випадку потрібно перерахувати процентний склад сплаву. Так 33% міді в реальному сплаві будуть відповідати 100% компоненту B

еквівалентного сплаву. Значення температур лишаються незмінними. Фактично створюється “еквівалентна” діаграма стану, в якій реальний сплав, наприклад, Al – 5%Cu має “еквівалентний” склад $\frac{5\% \times 100\%}{33\%} = 15,2\%$. Такий підхід є достатньо логічним і не заперечує основним уявленням про умови переходу із рідкого стану в твердий, але значно розширює можливості моделі.

В даній роботі на прикладі чистого алюмінію визначено, як впливає вибір параметрів кристалізації на структурні характеристики металу в твердому стані. Швидкість охолодження витримували приблизно $1 \text{ град} \cdot \text{с}^{-1}$. Змінювали інтервал метастабільності і максимальне переохолодження для виникнення нових центрів кристалізації (n) та інтервал метастабільності і максимальне переохолодження для лінійної швидкості росту кристалів (v). Зміною максимальних переохолоджень фактично регулюється нахил прямих.

Як показали дослідження нахил функцій n і v майже не впливає на структуру чистого алюмінію. А найбільший вплив на структуру металу, яка формується в процесі кристалізації, має інтервал метастабільності для утворення центрів кристалізації. Це можна пояснити тим, що за досить “легкої” появи центрів кристалізації починає виділятися теплота кристалізації, яка супроводжує процес твердіння, що швидко зменшує переохолодження, і тим самим заважає виникненню нових запалів. Ті кристаліки, що з’явилися з самого початку, продовжують свій зріст. Їх кількість відносно мала і величина зерна зростає. Перевірка даних висновків на сплаві Al+10-11%Si показала, що ці тенденції зберігаються, а змінюються тільки кількісні показники.

Висновки

На прикладі кристалізації чистого алюмінію доведено адекватність імітаційної моделі структуроутворення при кристалізації шляхом порівняння розрахованих макро структур твердого металу із тими, які формуються в реальному експерименті. Змодельовані структури алюмінію, які отримані при різних умовах кристалізації з задовільною точністю співпадають з експериментальними. Показано, що варіювання умовами кристалізації та її параметрами приводить до відповідних змін структури твердого металу. При певних умовах формується або класична трьохзонна структура, або зона, що складається з довгих орієнтованих до центру кристалітів, або мілко зерниста структура.

Показано, що обчислювальний експеримент за допомогою підсистеми імітаційного моделювання структуроутворення при кристалізації надає можливість досліджувати вплив стінок виливниці та кількості модифікатора на процес фазового перетворення, а саме на зміну основних параметрів кристалізації. Причому ці дослідження мають кількісний характер, що зробити в натурному експерименті з рідким металом практично неможливо.

Показано, що при наявності модифікатора кристалізація невеликої за розмірами системи набуває об’ємного характеру за рахунок наявності твердих частинок в об’ємі рідкого металу, які є запалами кристалізації. Введення модифікатора призводить до зменшення розмірів зерна твердого алюмінію, та зменшує величину температурної рекалесценції на початку кристалізації. Вид залежності росту твердої фази під час кристалізації практично не змінюється.

В разі впливу стінок виливниці на процес кристалізації утворення твердої фази починається від стінок форми і поблизу стінок з’являється зона дрібних кристалів. Рекалесценція температури на початку кристалізації і, відповідно, пік на кривій залежності швидкості росту твердої фази під час кристалізації в цьому випадку практично відсутні. Центри кристалізації утворюються як на стінках виливниці, так і в об’ємі рідкого металу.

Проведені обчислювальні експерименти з імітаційною моделлю структуроутворення при кристалізації демонструють високу реальність та якість результатів моделювання.

Список літератури

1. Лоскутов А.Ю., Михайлов А.С. Введение в синергетику. – М.: Наука. – 1990. – 376 с.
2. Чалмерс Б. Теория затвердевания. – М.: Металлургия. – 1968. – 288 с.
3. Баландин Г.Ф. Формирование кристаллического строения отливок. – М.: Машиностроение. – 1973. – 287 с.
4. Фольмер М. Кинетика образования новой фазы. – М.: Наука. – 1986. – 208 с.
5. Горстко А.Б. Познакомьтесь с математическим моделированием. – М.: Знание. – 1991. – с. 117 – 123.
6. Бялик О.М., Доний О.М., Голуб Л.В. Прогноз властивостей металів і сплавів методом комп’ютерного термічного аналізу. Препринт.- Київ.- “Політехніка”.- 2005.- 116 с.