



The critical analysis of some modifications of quasi-equilibrium model, which gained ground in computing practice at calculations of ingots consolidation, is carried out. Probability model of crystallization of binary alloy at pouring of steel is offered.

Ю. А. САМОЙЛОВИЧ, НПП «Платан»,  
В. И. ТИМОШПОЛЬСКИЙ, С. М. КАБИШОВ, БНТУ

УДК 621.746

## ВЕРОЯТНОСТНАЯ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ БИНАРНОГО СПЛАВА ПРИ РАЗЛИВКЕ СТАЛИ

При создании и совершенствовании технологических режимов непрерывной разливки стали, базирующихся на математическом моделировании температурного поля затвердевающей заготовки, одним из основных показателей является скорость охлаждения, для определения которой необходимо обеспечить достаточно точное решение задачи теплопроводности для заготовки в целом.

Использование компьютеров для расчетов затвердевания слитков в течение последних четырех десятилетий позволило разработать разнообразные математические модели для описания процесса кристаллизации бинарного сплава. При этом наибольшее распространение получила так называемая квазиравновесная модель кристаллизации бинарного сплава, которая реализуется в нескольких различающихся модификациях.

В настоящей статье выполнен критический анализ нескольких модификаций квазиравновесной модели, получивших распространение в вычислительной практике при расчетах затвердевания слитков, а также предложена вероятностная модель кристаллизации бинарного сплава при разливке стали.

**Двухфазная зона и темп кристаллизации расплава.** В подавляющем большинстве практических задач кристаллизация стального слитка происходит при наличии двухфазной зоны, образованной переплетением дендритных ветвей и остаточного жидкого сплава. При этом теплота агрегатного превращения выделяется не у четкой границы раздела фаз (как принято в идеализированной, классической задаче Стефана), а в пространстве, заполненном двухфазной зоной.

Теоретическое описание данного эффекта осуществляется путем ввода в уравнение нестационарной теплопроводности источника теплоты, мощность которого прямо пропорциональна интенсивности процесса кристаллизации, т.е. скорости

выделения твердой фазы в пределах двухфазной зоны:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\lambda \text{grad} T) + \rho L \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (1)$$

где  $\psi$  — относительная доля твердой фазы, т.е. отношение  $V_{\text{тв}}/V_{\Sigma}$  ( $V_{\text{тв}}$  и  $V_{\text{ж}}$  — объемы твердой и жидкой фаз в двухфазной системе затвердевающего сплава,  $V_{\Sigma} = V_{\text{тв}} + V_{\text{ж}}$ );  $\rho$ ,  $c_p$ ,  $\lambda$  — коэффициенты массовой плотности, удельной теплоемкости, теплопроводности;  $L$  — удельная теплота (энтальпия) агрегатного превращения затвердевающего сплава;  $T$  — локальная температура сплава, К;  $t$  — время.

Используя подстановку

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial \psi}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t},$$

запишем уравнение (1) в виде

$$\rho c_{\text{эфф}}(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\lambda \text{grad} T), \quad (2)$$

где используется выражение эффективной удельной теплоемкости сплава

$$c_{\text{эфф}} = \begin{cases} c_{\text{ж}} & \text{при } T > T_{\text{лик}}, \\ c_{\text{тв}} - L \frac{d\psi}{dT} & \text{при } T_{\text{сол}} \leq T \leq T_{\text{лик}}, \\ c_{\text{тв}} & \text{при } T < T_{\text{сол}}. \end{cases} \quad (3)$$

Здесь  $T_{\text{лик}}$  и  $T_{\text{сол}}$  — границы интервала кристаллизации бинарного сплава.

Выражение  $I = -\frac{d\psi}{dT}$  называют темпом кристаллизации сплава.

Отдельные модификации математических моделей процесса кристаллизации бинарного сплава различаются способом выражения «темпа кристаллизации» в зависимости от температуры и физических параметров сплава.

**Квазиравновесная модель.** В том случае, если линии солидуса и ликвидуса на равновесной диаграмме состояния изучаемого сплава можно выразить аналитическими функциями  $\Gamma_1(T)$  и  $\Gamma_2(T)$ , удастся выразить темп кристаллизации с использованием известного «правила рычага» формулой [1]:

$$-\frac{d\psi}{dT} = \{-C_0[\Gamma_2'(T) - \Gamma_1'(T) + \Gamma_2(T)\Gamma_1' - \Gamma_1(T)\Gamma_2'(T)] / [\Gamma_2(T) - \Gamma_1(T)]^2\}, \quad (4)$$

где  $C_0$  – исходная концентрация компонента (примеси к базовому элементу сплава); штрих означает производную по температуре от аналитических функций  $\Gamma_1(T)$  и  $\Gamma_2(T)$ .

Равновесная диаграмма состояния сплава «железо – углерод» в интервале концентраций углерода от 0,05 до 1,3% отражает склонность сплава к образованию твердых растворов в процессе кристаллизации, причем выражения линий солидуса и ликвидуса с удовлетворительной точностью можно представить формулами

$$\begin{aligned} \Gamma_1(T) &= (1793 - T)/177, \\ \Gamma_2(T) &= (1808 - T)/78. \end{aligned} \quad (5)$$

Использование формулы Вигдоровича (4) для расчетов затвердевания отливок, кристаллизующихся в интервале температур, впервые было предложено в работе [2], а впоследствии в развернутом виде приведено в [3, 4].

Используя линейные соотношения (5), можно выразить темп кристаллизации формулой

$$-\frac{d\psi}{dT} = \frac{0,00717C_0 - 0,0012}{(13,05 - 0,00717T)^2}. \quad (6)$$

На рис. 1 показано изменение темпа кристаллизации при нескольких значениях исходной концентрации углерода ( $C=C_0$ ) в соответствии с формулой (6).

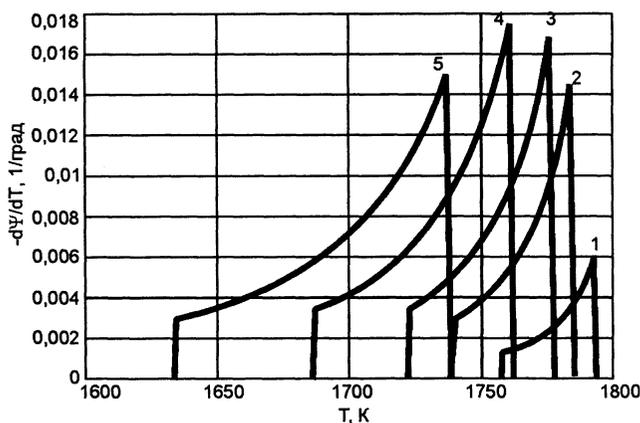


Рис. 1. Зависимость темпа кристаллизации сплава «железо–углерод» от температуры для квазиравновесной модели процесса кристаллизации при нескольких значениях исходной концентрации углерода: 0,2% (1), 0,3% (2), 0,4% (3), 0,6% (4) и 0,9% (5)

Из рисунка следует, что максимальное значение темпа кристаллизации достигается при температуре ликвидуса изучаемого сплава, а при последующем снижении температуры (при остывании заготовки) темп кристаллизации постепенно снижается до тех пор, пока не достигается нижняя граница интервала кристаллизации ( $T_{\text{сол}}$ ), после чего темп кристаллизации скачком достигает нулевого значения.

**Соллидусная модель.** В работах К. Швердтфегера [5, 6] обращается внимание на то, что при определении объемной доли твердой фазы в пределах двухфазной зоны затвердевающего стального слитка необходимо учитывать эффект микросегрегации углерода в дендритной сетке и предлагается соотношение

$$\psi = \frac{C_s - C_0 k_0}{C_s(1 - k_0)}, \quad (7)$$

где  $k_0$  – равновесный коэффициент распределения углерода, значение которого в области  $\gamma$ -Fe (при  $C_0 \geq 0,15 - 0,2\%$ ) принимается равным 0,35. Используя зависимость концентрации углерода в твердой фазе от температуры в виде  $C_s = (1793 - T)/177$  (см.  $\Gamma_1(T)$  в формуле (5)), получаем выражение темпа кристаллизации затвердевающей стали:

$$-\frac{d\psi}{dT} = \frac{k_0 m C_0}{(1 - k_0)(T_0 - T)^2}, \quad (8)$$

где  $m=177$  град/%;  $T_0=1793$  К.

С учетом (8) удельная эффективная теплоемкость сплава в пределах интервала кристаллизации имеет вид

$$c_{\text{эфф}}(T) = c_{\text{тв}}(T_{\text{сол}}) + \frac{\lambda_0 m L C_0}{(1 - \lambda_0)(T_0 - T)^2}. \quad (9)$$

На рис. 2 показана зависимость эффективной теплоемкости стали от температуры при исходном содержании углерода 0,6% и задании следующих значений физических параметров сплава:

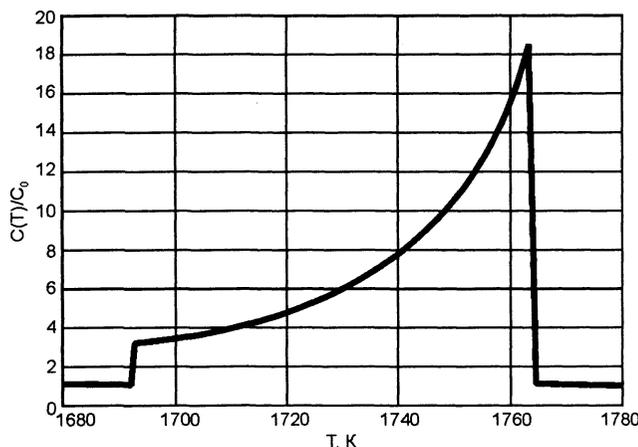


Рис. 2. Зависимость относительной эффективной теплоемкости сплава Fe+0,6%С от температуры при использовании «соллидусной» модели Швердтфегера [6]:  $C_0 = 0,6\%$ ;  $k_0=0,35$ ;  $m=1796$  град/%

$c_{\text{TB}}(T_{\text{сол}}) = 650 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$ ,  $m = 111 \text{ град}/\%$ ,  $L = 2,65 \cdot 10^5 \text{ Дж}/\text{кг}$ ,  $k_0 = 0,35$ .

Предложенный в работах [5, 6] способ определения темпа кристаллизации сплава основан на использовании характеристик окончания процесса при температуре солидуса, в связи с чем данная модель называется нами «солидусной». При сравнении зависимостей эффективной теплоемкости для квазиравновесной модели (рис. 3) и солидусной модели (см. рис. 2) обнаруживается их определенное сходство: максимум теплоемкости в обеих моделях достигается при температуре ликвидуса. Вместе с тем, абсолютные значения эффективной теплоемкости при одинаковых температурах и равных значениях параметров  $L$  и  $c_{\text{TB}}(T_{\text{сол}})$  различаются весьма существенно: при  $T = T_{\text{лик}}$  эффективная теплоемкость по солидусной модели более чем в 2 раза превышает соответствующее значение теплоемкости для квазиравновесной модели.

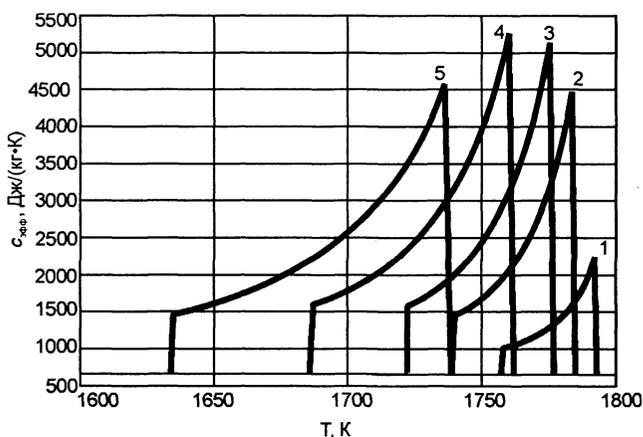


Рис. 3. Зависимость удельной эффективной теплоемкости сплава «железо–углерод» для квазиравновесной модели процесса кристаллизации при нескольких значениях исходной концентрации углерода: 0,2% (1), 0,3% (2), 0,4% (3), 0,6% (4) и 0,9% (5)

**Вероятностная модель.** Реальное существование экстремума эффективной теплоемкости сплава при температуре ликвидуса, обнаруженное при использовании обеих указанных выше моделей процесса кристаллизации бинарного сплава, вызывает определенные сомнения. Действительно, при исследовании динамики затвердевания сплавов, кристаллизующихся в интервале температур, методом выливания жидкого остатка обнаружено существенное различие структурной прочности двухфазной зоны, что дает исследователям право разделять двухфазную зону на две части – «жидкотвердую» и «твердожидкую» в отношении прочности связей между дендритными кристаллами, растущими в пределах двухфазной зоны [7]. В связи с повышенной мобильностью расплава в окрестности температуры ликвидуса можно предположить, что полученный в расчетах острый пик удельной эффективной теплоемкости в точке ликвидуса неизбежно будет размываться, так что

выделение наибольшего количества теплоты агрегатного превращения распространится в пределах некоторого интервала температур вблизи от точки ликвидуса.

Теоретическое описание процесса кристаллизации бинарного сплава с учетом эффекта размывания локального экстремума в точке ликвидуса основано на использовании следующих исходных предположений:

- считается известной теплота агрегатного превращения – кристаллизации бинарного сплава ( $L$ );
- считаются известными и неизменными температуры начала ( $T_{\text{лик}}$ ) и окончания ( $T_{\text{сол}}$ ) процесса кристаллизации;
- удельная эффективная теплоемкость распределяется в пределах интервала кристаллизации по закону экспоненты

$$C(T) = C_0 + \delta C_0 \exp(-\varepsilon^2 x^2), \quad (10)$$

где  $\delta C_0 = C_{\text{max}} - C_0$ ;  $x = T_0 - T$ ,  $\varepsilon = \text{const}$ ;

- теплота агрегатного превращения связана с удельной теплоемкостью балансовым соотношением

$$L = \int_0^x [C(T) - C_0] dx. \quad (11)$$

Подстановка удельной теплоемкости  $c(T)$  в балансовое уравнение (11) приводит к выражению относительного количества твердой фазы  $\psi$  от температуры в виде интеграла вероятности:

$$\psi(T) = \frac{2a}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-a^2 x^2} dx, \quad (12)$$

где

$$\Theta = \frac{T_{\text{лик}} - T}{T_{\text{лик}} - T_{\text{сол}}}; \quad a = \text{const}. \quad (13)$$

В частности, при задании константы  $a=3$  для относительного количества твердой фазы получаем

$$\psi(\Theta) = A \int_0^{\Theta} \exp(-9(\Theta^2)d\Theta), \quad (14)$$

где  $A = \frac{6}{\sqrt{\pi}} = 3,3852 = \text{const}$ .

Для интеграла вероятности, относящегося к числу специальных функций [8, 9], известно соотношение

$$\frac{d[\text{erf}(z)]}{dz} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-z^2}. \quad (15)$$

Принимая  $z=3\Theta$ , получаем в соответствии с формулой (15) выражение производной

$$\frac{d\psi}{d\Theta} = A \exp(-9\Theta^2). \quad (16)$$

Используя подстановку  $\frac{d\psi}{dT} = \frac{d\psi}{d\Theta} \frac{\partial\Theta}{\partial T}$  и выра-

жение производной  $\frac{\partial\Theta}{\partial T} = \frac{1}{T_{лик} - T_{сол}}$ , получаем выражение темпа кристаллизации сплава:

$$-\frac{d\psi}{dT} = \frac{d\psi}{d\Theta} / (T_{лик} - T_{сол})$$

или с учетом соотношения (16)

$$-\frac{d\psi}{dT} = \frac{A}{\delta T} \exp \left[ -9 \left( \frac{T_{лик} - T}{T_{лик} - T_{сол}} \right)^2 \right], \quad (17)$$

где  $\delta T = T_{лик} - T_{сол}$  (интервал кристаллизации сплава). При этом удельная эффективная теплоемкость кристаллизующегося сплава в пределах заданного интервала кристаллизации имеет вид

$$c_{эфф}(T) = c(T_{сол}) - L \frac{d\psi}{dT} = c(T_{сол}) + \frac{AL}{\delta T} \exp \left[ -9 \left( \frac{T_{лик} - T}{T_{лик} - T_{сол}} \right)^2 \right]. \quad (18)$$

Предлагаемую модель описания процесса кристаллизации бинарного сплава можно именовать «вероятностной», поскольку при выводе формулы (18) используется выражение интеграла вероятности (12).

На рис. 4, а, б приведены зависимости эффективной теплоемкости сплава «железо – углерод» для двух концентраций углерода – 0,6 и 0,9% (толстые линии) в сопоставлении с графиками функции  $c_{эфф}(T)$  согласно «солидусной» модели (тонкие линии).

Расчеты по формулам (9) и (18) выполнены при задании следующих границ интервала кристаллизации сплава:  $T_{лик} = 1761$  К,  $T_{сол} = 1687$  К при содержании 0,6% С;  $T_{лик} = 1738$  К,  $T_{сол} = 1634$  К при содержании 0,9% С в сплаве.

Для обеих моделей использованы теплофизические показатели сплава:  $L = 2,65 \cdot 10^5$  Дж/кг,  $c_{тв}(T) = 650$  Дж/(кг·К).

Зависимости на рис. 4 подтверждают эффект размывания локального экстремума выделяемой теплоты агрегатного превращения при температуре ликвидуса. Вместе с тем, в точке экстремума (при  $T - T_{лик}$ ) для обеих рассмотренных концентраций углерода при использовании вероятностной модели значения эффективной удельной теплоемкости оказались на 10–20% выше, чем для «солидусной» модели Швердтфегера. Имеются определенные основания отдать предпочтение вероятностной модели расчета параметра  $c_{эфф}(T)$ , прежде всего, в связи с использованием балансового соотношения (11), соблюдение которого обеспечивает отсутствие неоправданных потерь теплоты превращения при разнообразном виде конкретной

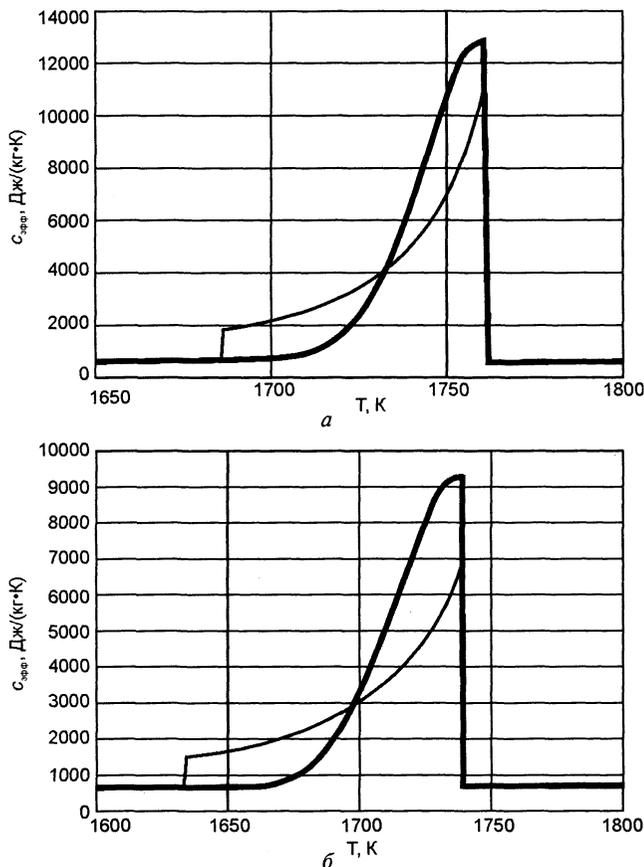


Рис. 4. Зависимость удельной эффективной теплоемкости сплава «железо–углерод» для двух моделей – солидусной (тонкие линии) и вероятностной (толстые линии) при двух исходных концентрациях углерода: 0,6% (а) и 0,9% (б)

зависимости  $c=c(T)$ , составляющей основу подынтегральной функции.

### Литература

1. Вигдорович В.Н., Розин К.М., Крестовников А.Н. Исследование темпа интенсивности фазовых превращений // Журн. физ. химии. 1961. Т. 35. №8. С. 1752–1758.
2. Самойлович Ю.А., Чесницкая Е.А. Приближенные методы расчета затвердевания отливки // Сб. тр. Всесоюз. НИИ металлургической теплотехники: Обжиг руд, плавильные печи, нагрев и охлаждение стали. Свердловск: Изд-во ВНИИМТ. 1967. Вып. 17. С. 97–118.
3. Самойлович Ю.А. Формирование слитка. М.: Металлургия, 1977.
4. Стальной слиток. В 3-х т. Т.2: Затвердевание и охлаждение / Ю.А. Самойлович, В.И. Тимошпольский, И.А. Трусова, В.В. Филиппов; Под общ. ред. В.И. Тимошпольского, Ю.А. Самойловича. Мн.: Белорусская наука, 2000.
5. Chuang Y.K., Schwerdtfeger K. Experimental and theoretical investigation of solidification of an iron-carbon alloy with 0.6% // Archiv f.d. Eisenhütten-wessen. 1973. Bd. 44. N. 5. S. 341–347.
6. Schwerdtfeger K. The application of the heat-balance integral for calculation the solidification rate of iron - carbon alloys // Archiv f.d. Eisenhüttenwessen. 1973. Bd. 44. N. 6. S. 411–417.
7. Гуляев Б.Б. Литейные процессы. М.; Л.: Машгиз, 1960.
8. Бронштейн И.Н., Семендяев К.А. Справочник по математике. М.: Гостехиздат, 1957. Изд. 7.
9. Янке Е., Эмде Ф., Леш Ф. Специальные функции. М.: Физматгиз, 1968. Изд. 2.