



УДК 621.74.01:669.71.018

Поступила 04.09.2017

ДИАГНОСТИКА ДЕНДРИТНОЙ СТРУКТУРЫ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ

В. М. ГОЛОД, Л. Ю. ДОБОШ, Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
г. Санкт-Петербург, Россия. E-mail: lpi2015@mail.ru

Рассмотрены этапы системного анализа и математические модели для прогнозирования дендритной структуры многокомпонентных алюминиевых сплавов. Компьютерная диагностика неравновесной кристаллизации реализуется путем совместного использования аппарата вычислительной термодинамики, средств вычислительной теплопередачи для решения задач вычислительного материаловедения. Приведены результаты моделирования эволюции дендритной структуры при изменении интенсивности диффузии в твердой фазе от равновесных условий до полного подавления.

Ключевые слова. Системный анализ, многокомпонентные алюминиевые сплавы, дендритная структура, компьютерное моделирование.

DIAGNOSTICS OF DENDRITE STRUCTURE OF MULTICOMPONENT ALUMINUM ALLOYS

V. M. GOLOD, L. Yu. DOBOSH, Peter the Great St.-Petersburg Polytechnic University, St.-Petersburg,
Russia. E-mail: lpi2015@mail.ru

Stages of system analysis and mathematical models for predicting the dendritic structure of multicomponent aluminum alloys are considered. Computer diagnostics of nonequilibrium crystallization is realized by the joint use of the apparatus of computational thermodynamics and means of computational heat transfer for solving problems of computational materials science. The results of modeling the evolution of the dendritic structure are presented with a change in the diffusion intensity in the solid phase from equilibrium conditions to complete suppression.

Keywords. System analysis, multicomponent aluminum alloys, dendritic structure, computer modeling.

Более 50 лет насчитывают попытки прогнозирования дендритной структуры алюминиевых литейных сплавов, и хотя их результаты впечатляющими не назовешь, этот поиск непрерывно продолжается [1–5]. В отличие от начального этапа, когда весьма важна была любая информация и объектами исследования оказывались преимущественно двойные сплавы (среди них чаще всего Al – 5% Cu как общий «поисковый полигон»), для которых в качестве преобладающего инструмента использовали (правда, без особого успеха) статистические модели [6] типа $\lambda_2 = k\tau_{LS}^n$ или $\lambda_2 = kV^m G^n$ (здесь λ_2 – размер вторичных междоусных промежутков; τ_{LS} – локальная продолжительность дендритной кристаллизации; V , G – скорость движения фронта ликвидуса и градиент температуры в расплаве впереди него; m , n – эмпирические коэффициенты).

В настоящее время научно-технологические интересы исследователей сосредоточены на тройных сплавах, являющихся базой для промышленных алюминиевых сплавов. Их изучение, конечно, существенно усложняет комплекс физико-химических процессов и факторов, влияющих на параметры изучаемой дендритной структуры, и не оставляет перспектив для поиска решений среди статистических конструкций.

Появление и интенсивное развитие *вычислительной термодинамики* [7] открыло возможности компьютерного описания равновесных структурно-фазовых превращений в многокомпонентных сплавах. Активный поиск моделей неравновесной кристаллизации (Шейль, Флемингс, Раппа и др.) [8], ориентированный на решение задач дендритной ликвации, не только выявил важные особенности выделения твердой фазы при различной интенсивности диффузионных процессов, но также способствовал развитию представлений о разномасштабном (макро-, мезо- и микро-) характере кристаллизационных, диффузионных и ликвационных процессов в отливках. Учет их локализации позволяет выделить в качестве

наиболее важного объекта для анализа морфологической эволюции *мезомасштабный* ансамбль дендритных кристаллитов (мезоячейка), образующий *закрытую* систему, в пределах которой распределение *взаимосвязанных* характеристик – температуры, доли твердой фазы, состава жидкой фазы, а также структурных параметров (дендритного λ_2 и эвтектического λ_E) является практически равномерным. Открытие явления коалесценции дендритов при затвердевании металлических сплавов и развитие его теории (Чернов, Флеминг, Стефанеску, Онака и др.) [8] позволило сформировать базовые представления о механизме этого процесса и его разновидностях, проявляющихся при кристаллизации сплавов разного состава.

При затвердевании отливки для системы устанавливается открытый характер макромасштабного внутреннего и наружного теплообмена (с окружающей средой), задачи которого решаются средствами вычислительной теплопередачи [9]. Дискретизация трехмерной геометрической макромоделей при ее генерации обеспечивает возможность численного решения конечно-разностных уравнений теплообмена для мезоячеек в условиях его малой локальной интенсивности $Bi = \alpha R_0 / \lambda_m \ll 1$ ($R_0 = V/F$; V, F – объем и поверхность мезоячейки; λ_m – коэффициент теплопроводности сплава). Мобилизация компьютерных моделей сопряженных физико-химических процессов (диффузионных, капиллярных, кристаллизационных и др.) с использованием арсенала средств вычислительного материаловедения реализует возможности системного анализа фазовых превращений при затвердевании с учетом их индивидуальных термодинамических (эвтектических, перитектических и др.) и морфологических (ячеистых, дендритных и др.) особенностей, присущих промышленным сплавам [10, 11 и др.].

Мезомасштабные процессы, сопровождающие формирование дендритной структуры, описывает системная модель *ALSYS* [5], включающая дифференциальные уравнения:

$$qd\tau = -R_0 c dt + R_0 L dm, \quad (1)$$

$$\mu = \frac{dm}{dt} = \frac{1}{\sum_{i=1}^K \frac{p_i C_i^L (1 - k_i)}{1 - m(1 - \sigma_i k_i)}}, \quad (2)$$

$$\frac{dC_i^L}{dm} = \frac{C_i^L (1 - k_i)}{1 - m(1 - \sigma_i k_i)}, \quad i = 1, \dots, K, \quad (3)$$

$$\frac{d(\lambda_2^3)}{d\tau} = \frac{1}{\varphi_j \sum_{i=1}^K \frac{p_i (1 - k_i) C_i^L}{\Gamma_i D_i^L}}, \quad (4)$$

где q – эффективный тепловой поток на границах мезоячейки; τ – время; c, L – объемная теплоемкость и скрытая теплота кристаллизации сплава; k_i, p_i – коэффициент распределения и тангенс угла наклона поверхности ликвидуса для i -го компонента K -компонентного сплава; σ_i – параметр обратной диффузии

($0 \leq \sigma_i \leq 1$), учитывающий полноту протекания диффузионных процессов в твердой фазе: $\sigma_i = \frac{2\alpha_i}{1 + 2\alpha_i}$;

$\alpha_i = \frac{8D_i^S \tau}{\lambda_2^2}$; Γ – коэффициент Гиббса-Томсона; D_i^L, D_i^S – коэффициенты диффузии компонентов в жидкой

и твердой фазах; φ – параметр, учитывающий принятую j -ю модель коалесценции.

Системное описание *неравновесной* дендритной кристаллизации многокомпонентного алюминиевого сплава на этапе выделения первичного твердого раствора (α -Al) в объеме мезомасштабной ячейки включает (рис. 1):

- решение уравнения (1) теплового баланса для определения зависимости $t(\tau)$;
- расчет доли твердой фазы $m(\tau)$ на основе уравнения (2) для темпа выделения твердой фазы;
- расчет покомпонентного состава жидкой фазы $C_i^L(m)$ с помощью уравнения (3) для перераспределения компонентов на межфазной границе;
- определение средней ширины $\lambda_2(\tau)$ вторичных междоусных промежутков дендритов при их коалесценции с использованием уравнения (4).

Для решения приведенных уравнений необходимо путем термодинамического моделирования [7] задать изменение параметров $k_i(m), p_i(m)$ диаграммы состояния, значения кинетических параметров (диффузионных $D_i^L(t)$ и капиллярных Γ_i) для всех i -х компонентов, а также теплофизические характеристики сплава (c, L) и интенсивность теплового потока $q(\tau)$, оцениваемую для каждой мезоячейки путем решения макромасштабной тепловой задачи затвердевания фасонной отливки [7].

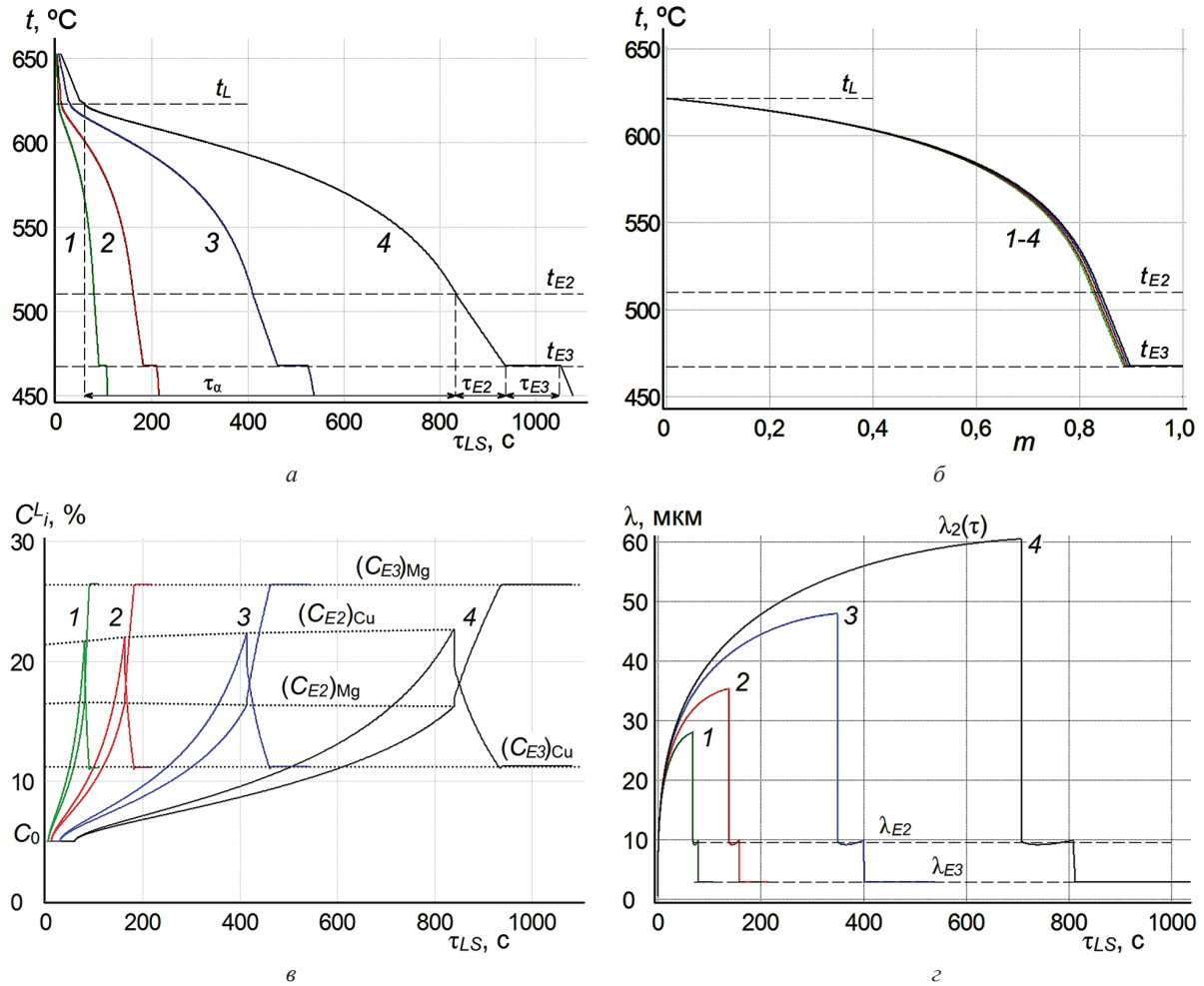


Рис. 1. Влияние условий теплоотвода при затвердевании сплава Al-5% Cu-5% Mg на характер термических кривых (а); долю твердой фазы (б); состав жидкой фазы (в), а также на размеры параметров дендритной λ_2 и эвтектической (вторичной λ_{E2} и третичной λ_{E3}) микроструктуры (г) для локальной продолжительности кристаллизации: $\tau_{LS} = 100$ с (1); 200 (2); 500 (3); 1000 с (4)

Приведенная системная модель *ALSYS* [5] при описании процесса неравновесного выделения твердой фазы и перераспределения компонентов между фазами в объеме мезоэчейки базируется на принципе *независимого действия* внутрифазовой и разделительной диффузии компонентов сплава – при расчете $C_i^L(m)$ и принципе *аддитивного влияния* компонентов на темп выделения твердой фазы – при расчете $m(t)$ в условиях локального равновесия на межфазных границах [10–12].

Адекватность модели *ALSYS* надежно контролируется путем прямого сопоставления результатов численного моделирования $m(t)$ и $C_i^L(m)$ с данными термодинамического расчета при $\sigma = 1$ (равновесные условия, $D_i^L = D_i^S = \infty$) и $\sigma = 0$ (полное подавление диффузии в твердой фазе, $D_i^L = \infty$; $D_i^S = 0$) (рис. 2) и обеспечивает возможность ее использования во *всем диапазоне* значений интенсивности диффузии в твердой фазе ($1 \geq \sigma_i \geq 0$) [13].

Для тройных сплавов уравнения (2) и (3) преобразуются к виду:

$$\left\{ \begin{aligned} (dC_1^L)_\alpha &= \frac{(C_1^L)_\alpha (1 - k_1^{\alpha/L})}{1 - m_\alpha (1 - \sigma_1 k_1^{\alpha/L})} dm_\alpha, \\ (dC_2^L)_\alpha &= \frac{(C_2^L)_\alpha (1 - k_2^{\alpha/L})}{1 - m_\alpha (1 - \sigma_2 k_2^{\alpha/L})} dm_\alpha, \\ dm_\alpha &= \frac{dt}{\frac{p_1^\alpha (C_1^L)_\alpha (1 - k_1^{\alpha/L})}{1 - m_\alpha (1 - \sigma_1 k_1^{\alpha/L})} + \frac{p_2^\alpha (C_2^L)_\alpha (1 - k_2^{\alpha/L})}{1 - m_\alpha (1 - \sigma_2 k_2^{\alpha/L})}}, \end{aligned} \right. \quad (5)$$

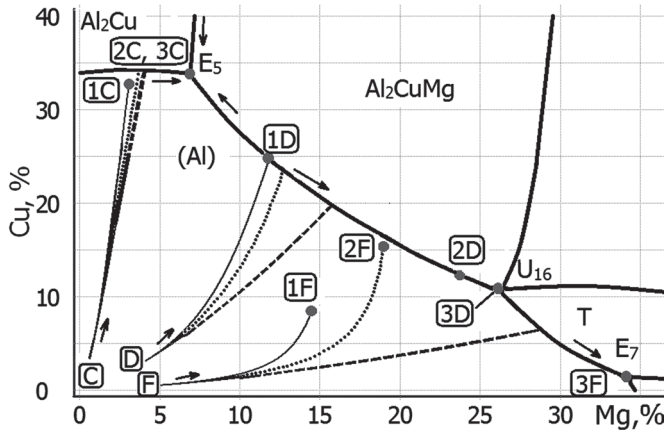


Рис. 2. Изменение состава кристаллизующейся жидкой фазы сплавов C , D и F на поверхности ликвидуса системы $\text{Al}-\text{Mg}(\text{C}_1)-\text{Cu}(\text{C}_2)$ при различной интенсивности подавления диффузии в твердой фазе: $D_i^S = \infty$; $\sigma_i = 1$ (1) – линии; $\infty > D_i^S > 0$; $1 > \sigma_i > 0$ (2) – точки; $D_i^S = 0$; $\sigma_i = 0$ (3) – пунктир

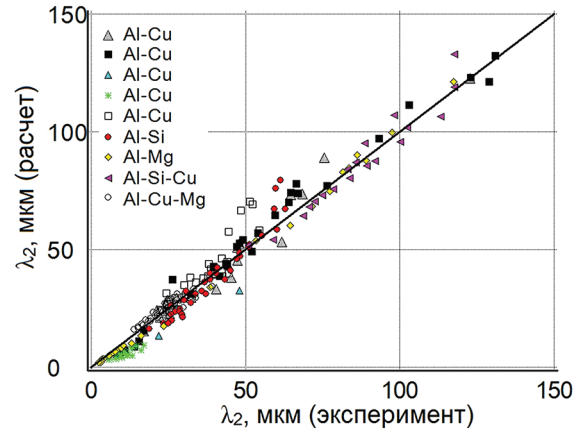


Рис. 3. Сопоставление расчетных значений вторичных междоусных промежутков дендритов λ_2 с экспериментальными данными для двойных ($\text{Al}-\text{Cu}$; $\text{Al}-\text{Si}$; $\text{Al}-\text{Mg}$) и тройных ($\text{Al}-\text{Si}-\text{Cu}$; $\text{Al}-\text{Cu}-\text{Mg}$) сплавов при использовании различных моделей коалесценции [13]

где индекс α – использование параметров, относящихся к первичному этапу кристаллизации сплава с выделением твердого раствора α -(Al) при $m = m_\alpha$; индексы 1 и 2 – принадлежность параметров соответствующим компонентам (0 – основа сплава).

Результатом совместного решения системы уравнений (5) является определение траектории изменения состава жидкой фазы при выделении α -фазы $(C_1^L)_\alpha = F(C_2^L)_\alpha$ (рис. 2, линии 1C, 1D, 1–2F), по которой происходит изменение температуры ликвидуса $(t_L)_\alpha = F[(C_1^L)_\alpha, (C_2^L)_\alpha]$, доли $m_\alpha(t)$ и покомпонентного состава $(C_1^S)_\alpha$ и $(C_2^S)_\alpha$ образующейся твердой α -фазы.

Эволюция дендритов первичной α -фазы в ходе капиллярно-диффузионной коалесценции прерывается в момент τ_α при достижении составом остаточной жидкой фазы эвтектической концентрации, т. е. в точке пересечения траектории $(C_1^L)_\alpha = F(C_2^L)_\alpha$ с линией тальвега эвтектического превращения $(C_1^L)_E = F(C_2^L)_E$. На этапе неравновесного выделения ($0 \leq \sigma_{1,2} < 1$) двойной эвтектики ($\alpha + \beta$) вдоль тальвега происходит изменение ее температуры ликвидуса $dt_E = p_1^E (dC_1^L)_E + p_2^E (dC_2^L)_E$ при выделении двойной эвтектики dm_E и система уравнений баланса компонентов 1 и 2 приобретает вид:

$$\begin{cases} (dC_1^L)_E = \frac{C_1^L (1 - k_1^{\alpha/L})_E f_\alpha}{1 - m(1 - \sigma_1^L k_1^{\alpha/L})_E} dm_E + \frac{C_1^L (1 - k_1^{\beta/L})_E f_\beta}{1 - m(1 - \sigma_1^L k_1^{\beta/L})_E} dm_E, \\ (dC_2^L)_E = \frac{C_2^L (1 - k_2^{\alpha/L})_E f_\alpha}{1 - m(1 - \sigma_2^L k_2^{\alpha/L})_E} dm_E + \frac{C_2^L (1 - k_2^{\beta/L})_E f_\beta}{1 - m(1 - \sigma_2^L k_2^{\beta/L})_E} dm_E, \end{cases} \quad (6)$$

где индекс E отмечает параметры, относящиеся к этапу кристаллизации двойной эвтектики.

Эвтектическая кристаллизация завершается при условии $m = m_\alpha + m_E = 1$ (на линии тальвега рис. 2, точка 2D) или при достижении точки тройной эвтектики (рис. 2, точки 2–3C, 3D и 3F), температурно-концентрационные параметры α -, β - и γ -фаз которой устанавливаются на основе данных термодинамического моделирования.

Совместное решение уравнений (1)–(4) дает возможность получить представление о кинетике формирования дендритной (λ_2) и эвтектической (λ_E) структуры и ее локальных конечных значениях, приобретаемых за счет вклада различных компонентов, а также оценить интенсивность подавления диффузии в твердой фазе с помощью параметров σ_i , определяющих неравновесный характер кристаллизации (рис. 1–3).

При использовании разработанной системной модели *ALSYS* и реализованного на ее основе лицензионного программно-информационного комплекса [14] для прогнозирования дендритной структуры получено убедительное подтверждение адекватности его применения (рис. 3) для большого количества опубликованных экспериментальных данных [13]. Выявленная системная взаимосвязь основных факторов формирующейся дендритной структуры [5] диктует необходимые и достаточные условия, игнорирование которых приводит к некорректному использованию ряда применяемых полуэмпирических и теоретических формул, что особенно важно в случае многокомпонентных промышленных сплавов. Актуальной областью перспективных исследований подобного рода являются работы, в которых рассматри-

вается формирование структуры алюминиевых сплавов, содержащих от 3 до 8 компонентов (Si, Fe, Cu, Mg, Mn, Cr и др.) [3–4, 15]. Их авторы ставят своей целью оценку возможностей прогнозирования дендритной структуры сплавов, в частности с применением расчетных формул, базирующихся на описании механизма капиллярно-диффузионной коалесценции [4]:

$$\lambda_2 = 5,5 (M\tau_{LS})^{0,33} \text{ при } M = \frac{-\Gamma}{\sum_{i=1}^K p_i(1-k_i)(C_{f,i}^L - C_{0,i}^L) / D_i^L} \ln \left[\frac{\sum_{i=1}^K p_i(1-k_i)C_{f,i}^L / D_i^L}{\sum_{i=1}^K p_i(1-k_i)C_{0,i}^L / D_i^L} \right], \quad (7)$$

где нижние индексы – значения концентрации компонентов в начальный (0) и конечный (f) моменты выделения первичной твердой фазы.

Исследование прогностических характеристик этого уравнения имеет многолетнюю предысторию. Его авторы [2] взяли за основу аналитическое решение, предложенное для двойных сплавов [8], с сохранением набора принятых в раннем первоисточнике (1977 г.) важных допущений, в частности, постоянства при его выводе величины всех термодинамических и кинетических параметров (p_i , k_i , D_i , Γ) при линейном изменении во времени только концентрации всех компонентов – от начального ($C_{0,i}$) до конечного ($C_{f,i}$) момента. Отличительной чертой уравнения (7) является возможность при расчете λ_2 учитывать взаимодействие различных компонентов литейных сплавов [4].

При исследовании серии сплавов, содержащих от двух до пяти компонентов (Si – до 1,1%; Cu и Mg – до 5; Fe, Cr и Mn – от 0,17 до 1,4%) [4], было выявлено значительное различие между ними как по средней величине $(\lambda_2)_\Sigma$ (от 51 до 111 мкм при равной скорости охлаждения расплава $V_0 = 1$ К/с), так и по величине расчетного температурного интервала затвердевания Δt_{LS} (от 18 до 59 К при равновесных условиях), а также экспериментальной продолжительности затвердевания $(\tau_{LS})_\Sigma$ (от 117 до 230 с при $V_0 = 1$ К/с). Полученный разброс экспериментальных значений $(\lambda_2)_\Sigma$ относительно расчетных величин $(\lambda_2)_p$, как указывают авторы, находится в пределах $\pm 20\%$ и оценивают как «удивительно» («surprisingly») точный прогноз.

При более детальном анализе становится ясно, что применение уравнения (7), описывающего равновесную кристаллизацию первичного твердого раствора α -Al, не дает адекватной картины коалесценции, сопровождающейся выделением в интервале от ликвидуса до солидуса набора интерметаллидных фаз, вид и массовая доля которых весьма различны и зависят от состава сплава и условий затвердевания. С использованием приведенных в работе [4] экспериментальных значений $(\lambda_2)_\Sigma$ (20–180 мкм) и продолжительности затвердевания $(\tau_{LS})_\Sigma$ сплавов при различных условиях охлаждения (15–900 с), а также табличных значений [16] коэффициентов диффузии в твердой фазе D_i^S , 10^{-12} м²/с (0,15–0,30 для Fe и 1,2–3,5 для Si, Mg и др. вблизи температуры ликвидуса), непосредственная оценка величины параметра обратной диффузии $\sigma_j = 0,02(\text{Fe})\text{--}0,40(\text{Si, Mg}) \ll 1$ фиксирует не учитываемое уравнением (7) значительное подавление диффузии в твердой фазе, при котором происходит интенсивное повышение концентрации компонентов в расплаве, а также снижение темпа выделения твердой фазы и значительное расширение температурного интервала кристаллизации.

Путем термодинамического моделирования выделения первичной твердой фазы α -Al в исследованных сплавах [17, 18] в период до начала образования интерметаллидов ($m_\alpha = 0,58\text{--}0,97$) показано, что эффективная коалесценция дендритных ветвей происходит в относительно узком температурном интервале $\Delta t_\alpha = 10\text{--}44$ К, т. е. при $\Delta t_\alpha = (0,39\text{--}0,83)\Delta t_{LS}$, а ее длительность составляет от 40 до 85% от $(\tau_{LS})_\Sigma$, что непосредственно отражается на величине вторичных междоусных промежутков $(\lambda_2)_\Sigma$, о чем свидетельствует высокий уровень коэффициента корреляции ($R = 0,904$) регрессионного уравнения:

$$(\lambda_2)_\Sigma [\text{мкм}] = 0,101 m_\alpha L_\alpha [\text{МДж/м}^3], \quad (8)$$

где учтена различная величина скрытой теплоты кристаллизации α -Al ($L_\alpha = 950\text{--}1085$ МДж/м³). Чем меньше доля m_α , при которой активизируется формирование интерметаллидов в междендритном расплаве сложного состава, тем раньше по времени τ_α прерывается свободная коалесценция первичных дендритов при меньших размерах вторичных междоусных промежутков λ_2 . Наиболее интенсивный вклад в их совместное капиллярно-диффузионное увеличение при коалесценции вносят кремний и особенно магний, отличающиеся более высокими значениями D_i^L и повышенной концентрацией C_i^L в литейных сплавах. Регрессионная модель (8) выполняет функции критериального параметра (criteria functions [18, 19]) при диагностике литейных процессов путем установления надежной статистической за-

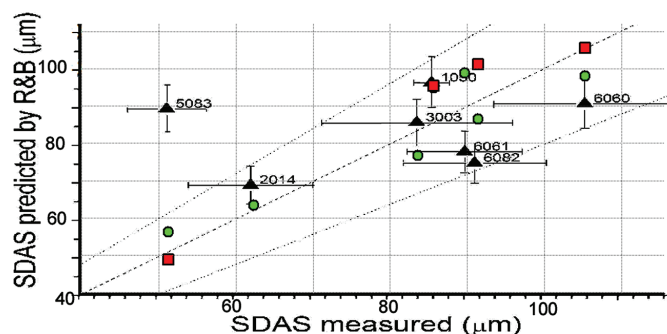


Рис. 4. Соотношение экспериментальных (абсцисса) и расчетных (ордината) значений вторичных междоусных промежутков λ_2 , согласно уравнению (7), по данным [4] (▲), системной модели *ALSYS* (■) и статистической модели (8) (●)

висимости для прогнозирования качества отливки на основе эмпирически выявленных предикторов (G , V , критерий Ниямы и др.).

На рис. 4 приведены результаты прогнозирования размеров λ_2 , полученных в работе [4] экспериментально и расчетом с помощью уравнения (7) с указанием соответствующих пределов среднеквадратичного разброса σ_λ ($\pm 20,1$ мкм) и пунктирных границ ($\pm 20\%$ для шести исследованных сплавов), а также данные моделирования λ_2 в период выделения первичной фазы α -Al с применением модели *ALSYS* (для приведенных в публикации значений τ_α) и эмпирической модели (8), использующей для прогноза λ_2 параметры, полученные путем термодинамического моделирования. Взаимное расположение точек на сводном графике (рис. 4) свидетельствует о предпочтительности альтернативного подхода, позволившего при анализе структурно-фазовых превращений получить существенное уточнение результатов ($\sigma_\lambda = \pm 7,8$ мкм или $\pm 8,9\%$).

Приведенные выше краткие комментарии работы [4] приводят к двум важным выводам. Используемое уравнение и его интерпретация не дают возможности корректно анализировать *неравновесную* кристаллизацию многокомпонентных сплавов, структура которых формируется в результате *многоэтапного* процесса, состоящего из первичного дендритного этапа и последующих этапов выделения серии интерметаллидных фаз. В качестве актуальной и малоизученной проблемы выдвигается исследование таких сложных ситуаций, которые требуют комплексного использования средств *вычислительной термодинамики* в сочетании с системным применением инструментария *вычислительного материаловедения* для решения задач структурно-фазовых превращений.

Корректный *прогноз* дендритной структуры многокомпонентных промышленных сплавов обеспечивается путем анализа взаимосвязанных термодинамических, теплофизических, диффузионных и капиллярных явлений при неперенном условии информационного обеспечения компьютерных вычислений в части изменения соответствующих параметров в зависимости от температуры, доли твердой фазы и состава жидкой фазы, а также учета эволюции неравновесного характера процесса кристаллизации с изменением морфологии выделяющейся твердой фазы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Bäckcrud L., Króll E., Namminen J. Solidification Characteristics of Aluminium Alloys. Vol. 1: Wrought Alloys. University of Stockholm, 1986. 156 p.
2. Rappaz M., Boettinger W. J. On dendritic solidification of multicomponent alloys with unequal liquid diffusion coefficients // Acta Mater., 1999. Vol. 47. No 11. P. 3205–3219.
3. Anyalebechi P. N. Effects of alloying elements and solidification conditions on secondary dendrite arm spacing in aluminum alloys // EPD Congress 2004. TMS. 2004. P. 217–233.
4. Easton M. A., Davidson C. J., StJohn D. H. Effect of alloy composition on the dendrite arm spacing of multicomponent aluminum alloys // Metall. Mater. Trans. 2010. Vol. 41A. No 9. P. 1528–1538.
5. Golod V. M., Dobosh L. Yu. Computational materials science of structural – phase transformations in casting aluminum alloys // Int. Conf. «Structural and Phase Transformations in Materials: Theory, Computer Modelling and Experiment», 23–27 March 2017, Ekaterinburg, Russia. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 192(2017), 012027.
6. Добош Л. Ю., Голод В. М. Оценка погрешностей и уточнение параметров эмпирических зависимостей для междоусных промежутков дендритов // Сб. «Литейное производство сегодня и завтра». Тр. IX Всерос. науч.-техн. конф. СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2012. С. 442–448.
7. Голод В. М., Савельев К. Д. Вычислительная термодинамика в материаловедении. СПб.: Изд-во политехн. ун-та, 2010. 218 с.
8. Курц В., Фишер Д. Д. Фундаментальные основы затвердевания. М.; Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Ижевский ин-т компьютер. исследований, 2011. 300 с.

9. Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Вычислительная теплопередача. М.: Едиториал УРСС, 2003. 784 с.
10. Голод В. М., Емельянов К. И. Системный анализ морфологической эволюции дендритной структуры стали // Черные металлы. 2014. № 4 (988). С. 49–54.
11. Добош Л. Ю., Голод В. М. Прогноз параметров микроструктуры алюминиевых сплавов на основе моделирования их неравновесной кристаллизации // Тр. XII съезда литейщиков России. Н. Новгород: НГТУ им. Р. Е. Алексеева, 2015. С. 230–237.
12. Голод В. М., Добош Л. Ю., Савельев К. Д. Оценка адекватности модели аддитивного влияния компонентов на кристаллизацию алюминиевых сплавов // Сб. «Литейное производство сегодня и завтра». Тр. X Междунар. науч.-практ. конф. СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2014. С. 366–376.
13. Добош Л. Ю., Голод В. М. Влияние состава многокомпонентных алюминиевых сплавов на величину вторичных междоусных промежутков дендритов // Литейщик России. 2013. № 3. С. 35–39.
14. Голод В. М., Добош Л. Ю. Программный комплекс «NON/EQUILIBR. KRIST. Modeling» // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016616169 от 07.06.2016 г.
15. Sivarupan T., Caceres C. H., Taylor J. A. Alloy composition and dendrite arm spacing in Al-Si-Cu-Mg-Fe alloys // Metall. Mater. Trans., 2013. Vol. 44A. No 9. P. 4071–4080.
16. Dy Y. et al. Diffusion coefficients of some solutes in fcc and liquid Al: critical evaluation and correlation // Mater. Sci. Eng., 2003. Vol. 363A. No 1–2. P. 140–151.
17. Савельев К. Д., Голод В. М. Программный комплекс для определения температурно-зависимых характеристик литейных сплавов на основе алюминия при моделировании литейных процессов // Сб. «Литейное производство сегодня и завтра». Тр. 8-й Всерос. науч.-практ. конф. СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2010. С. 373–386.
18. Савельев К. Д., Голод В. М. Программный комплекс «Polytherm-TD» // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2013661257 от 03.12.2013 г.
19. Stefanescu D. M., Pang H. Modeling of casting solidification stochastic or deterministic? // Canad. Metall. Quarterly, 1998. Vol. 37. No 3–4. P. 229–239.
20. Голод В. М., Савельев К. Д., Басин А. С. Моделирование и компьютерный анализ кристаллизации многокомпонентных сплавов на основе железа. СПб.: Изд-во политехн. ун-та, 2008. 372 с.

REFERENCES

1. Bäckerud L., Kröll E., Namminen J. *Solidification Characteristics of Aluminium Alloys*. Vol. 1. Wrought Alloys. University of Stockholm, 1986. 156 p.
2. Rappaz M., Boettinger W. J. On dendritic solidification of multicomponent alloys with unequal liquid diffusion coefficients // *Acta Mater.*, 1999. Vol. 47. No 11. P. 3205–3219.
3. Anyalebechi P. N. Effects of alloying elements and solidification conditions on secondary dendrite arm spacing in aluminum alloys. *EPD Congress* 2004. TMS. 2004. P. 217–233.
4. Easton M. A., Davidson C. J., StJohn D. H. Effect of alloy composition on the dendrite arm spacing of multicomponent aluminum alloys. *Metall. Mater. Trans.*, 2010. Vol. 41A. No 9. P. 1528–1538.
5. Golod V. M., Dobosh L. Yu. *Computational materials science of structural – phase transformations in casting aluminum alloys*. – Int. Conf. «Structural and Phase Transformations in Materials: Theory, Computer Modelling and Experiment», 23–27 March 2017, Ekaterinburg, Russia. – IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 192(2017), 012027.
6. Dobosh L. Ju., Golod V. M. Оценка погрешностей и уточнение параметров эмпирических зависимостей для междоусных промежутков дендритов [Estimation of errors and refinement of the parameters of empirical dependencies for the dendrite arm spaces]. *Sb. tr. IX Vseros. nauchn.-tehn. konf. «Litejnoe proizvodstvo segodnja i zavtra» = Proc. IX All-Russia scientific.-techn. Conf. «Foundry production today and tomorrow»*. SPb, SPbGPU Publ., 2012, pp. 442–448.
7. Golod V. M., Savel'ev K. D. *Vychislitel'naja termodinamika v materialovedenii* [Computational thermodynamics in materials science]. SPb, Politehn Publ. University, 2010. 218 p.
8. Kurz V., Fisher D. D. *Fundamental'nye osnovy zatverdevaniya* [Fundamentals of solidification]. Moscow, Izhevsk, SRC «Regular and chaotic dynamics», Izhevsk Institute of computer researches, 2011. 300 p.
9. Samarskij A. A., Vabishchevich P. N. *Vychislitel'naja teploperedacha* [Computational heat transfer]. Moscow, Editorial URSS, 2003. 784 p.
10. Golod V. M., Emel'yanov K. I. Sistemyj analiz morfoloicheskoy jevoljucii dendritnoj struktury stali [System analysis of the morphological evolution of dendritic structure of steel]. *Chernye metally = Ferrous metals*, 2014, no. 4 (988), pp. 49–54.
11. Dobosh L. Yu., Golod V. M. Prognost parametров mikrostruktury aluminievых splavov na osnove modelirovaniya ih neravnovesnoj kristallizacii [Prediction of aluminum alloys microstructure on the basis of simulation of their nonequilibrium]. *Trudy XII s'ezda litejshhikov Rossii = Proc. XII congress of foundrymen of Russia*. N. Novgorod, NGTU of R. E. Alekseev Publ., 2015, p. 230–237.
12. Golod V. M., Dobosh L. Yu., Savel'ev K. D. Ocenka adekvatnosti modeli additivnogo vlijaniya komponentov na kristallizaciju aluminievых splavov [Estimation of the model adequacy for the additive influence of components on the crystallization of aluminum alloys]. *Sb. tr. X mezhdunar. nauchn.-prakt. konf. «Litejnoe proizvodstvo segodnja i zavtra» = Proc. X Intern. scientific.-pract. Conf. «Foundry production today and tomorrow»*. SPb, SPbGPU Publ., 2014, pp. 366–376.
13. Dobosh L. Yu., Golod V. M. Vlijanie sostava mnogokomponentnyh aluminievых splavov na velichinu vtorichnyh mezhduosnyh promezhutkov dendritov [The influence of multicomponent aluminum alloys composition on the value of the secondary dendrite arm spacing]. *Liteyschik Rossii = Russian Foundryman*, 2013, no. 3, pp. 35–39.
14. Golod V. M., Dobosh L. Yu. Programmyj kompleks «NON/EQUILIBR. KRIST. Modeling» [The program complex «NON/EQUILIBR. KRIST. Modeling»]. *Svidetel'stvo o gosudarstvennoj registracii programmy dlja EVM* [Certificate of state registration of the computer program]. No. 2016616169 dated June 7, 2016.
15. Sivarupan T., Caceres C. H., Taylor J. A. Alloy composition and dendrite arm spacing in Al-Si-Cu-Mg-Fe alloys. *Metall. Mater. Trans.*, 2013, vol. 44A, no. 9, pp. 4071–4080.

15. **Dy Y.** et al. Diffusion coefficients of some solutes in fcc and liquid Al: critical evaluation and correlation. *Mater. Sci. Eng.*, 2003, Vol. 363A, no. 1–2, pp. 140–151.
16. **Savel'ev K. D., Golod V. M.** Programmnyy kompleks dlya opredeleniya temperaturno-zavisimykh kharakteristik liteynykh splavov na osnove alyuminiya pri modelirovanii liteynykh protsessov [Program complex for determining the temperature-dependent characteristics of cast aluminum-based alloys in the modeling of casting processes]. *Trudy 8 Vseros. nauch.-prakt. konf.* [Proc. 8 All-Russia scientific-pract. conf. «Foundry production today and tomorrow»]. SPb, SPbGPU Publ., 2010, pp. 373–386.
17. **Savel'ev K. D., Golod V. M.** Programmnyy kompleks «Polytherm-TD» [The program complex «Polytherm-TD»]. Svidetel'stvo o gosudarstvennoy registratsii programmy dlja EVM [Certificate of state registration of the computer program]. No. 2013661257 dated December 3, 2013.
18. **Stefanescu D. M., Pang H.** Modeling of casting solidification stochastic or deterministic? *Canad. Metall. Quarterly*, 1998, Vol. 37, no. 3–4, p. 229–239.
19. **Golod V. M., Savel'ev K. D., Basin A. S.** *Modelirovaniye i komp'yuternyy analiz kristallizatsii mnogokomponentnykh splavov na osnove zheleza* [Modeling and computer analysis of the crystallization of multicomponent iron-based alloys]. SPb, Politechn. University Publ., 2008. 372 p.