

# ПРЯМОЕ ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ДЕНДРИТНОЙ СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛА ШВА С ДИСПЕРСНЫМИ ТУГОПЛАВКИМИ ИНОКУЛЯНТАМИ

Д. Ю. ЕРМОЛЕНКО, А. В. ИГНАТЕНКО, В. В. ГОЛОВКО

Институт электросварки им. Е. О. Патона НАН Украины.  
03680, г. Киев-150, ул. Казимира Малевича, 11. E-mail: office@paton.kiev.ua

Исследованы преимущества введения в расплав дисперсных тугоплавких инокулянтов с целью управления и оптимизации первичной структуры металла шва высокопрочных низколегированных сталей. Рассмотрены основные предположения и ограничения предложенной в данной работе модели процесса кристаллизации металла шва. Подробно описана модель кристаллизации расплава с учетом влияния введенных дисперсных тугоплавких инокулянтов. Представлена гипотеза о механизме взаимодействия тугоплавкого инокулянта с движущимся фронтом кристаллизации, которая была принята в расчетах. Описано влияние различных легирующих элементов на поверхностную энергию границы раздела фаз. Описаны граничные условия предложенной модели, реализованной в виде авторского программного обеспечения. Приведены результаты вычислительных экспериментов, показывающие возможность управлять параметрами и морфологией первичной структуры металла шва высокопрочной низколегированной стали путем введения в расплав дисперсных тугоплавких инокулянтов (на примере введения  $TiO_2$ ). Представлено сопоставление экспериментальных и вычислительных результатов измерения параметров первичной структуры. Разработанная математическая модель и программное обеспечение, написанное на ее основе, подходит для прогнозирования размерных параметров и морфологии первичной структуры металла шва с учетом введенных в сварочную ванну тугоплавких инокулянтов. Библиогр. 17, табл. 1, рис. 10.

*Ключевые слова:* дендритная структура, дисперсные тугоплавкие инокулянты, кристаллизация, высокопрочные низколегированные стали, морфология, математическое моделирование

Постоянно возрастающие требования к надежности металлоконструкций вызывают необходимость освоения новых марок сталей с повышенным уровнем механических свойств. В практике металлургического производства постоянно возрастает объем выпуска высокопрочных низколегированных (ВПНЛ) сталей. Основными тенденциями при оптимизации свойств ВПНЛ сталей являются: уменьшение содержания легирующих элементов; увеличение общего числа микролегирующих элементов; уменьшение содержания примесей и остаточных элементов, способствующих деградации металла; улучшение структурной однородности; повышение уровня механических свойств [1].

Введение в расплав тугоплавких инокулянтов является перспективным способом оптимизации структуры и свойств ВПНЛ сталей за счет управления, в первую очередь, параметрами структуры и, соответственно, механическими свойствами металла шва. Известно, что размер зерен первичной структуры оказывает влияние на характер процессов  $\gamma \rightarrow \alpha$ -превращений. Если в дисперсной дендритной структуре зарождение  $\alpha$ -фазы начинается на границах зерен в верхней области бейнитного превращения, то для более крупных дендритов характерным является зарождение феррита внутри первичных зерен на границах с неметаллически-

ми включениями при температурах близких к завершению бейнитного превращения [2].

В работе [3] был рассмотрен ряд моделей развития первичной структуры и проведен их критический анализ с точки зрения возможности их использования для моделирования процесса кристаллизации металла с учетом влияния дисперсных тугоплавких инокулянтов. Предлагаемая в данной работе модель основывается на методе конечных элементов, комбинированном с методом клеточных автоматов.

**Основные предположения и ограничения модели процесса кристаллизации металла.** Рассматриваемая система содержит тугоплавкие инокулянты, распределенные в жидкой фазе и существенно влияющие на процесс кристаллизации.

Процесс кристаллизации металла с учетом влияния тугоплавких инокулянтов можно рассматривать как результат взаимодействия двух конкурирующих процессов: скоростного движения фронта кристаллизации, вызванного локальным неравновесием диффузионных процессов на границе раздела фаз, и влияния инокулянтов на локальное поверхностное натяжение на границе раздела фаз, которое существенно сказывается при формировании первичной структуры металла шва ВПНЛ стали [4].

Для решения этой задачи в настоящей работе за основу взята модель локально неравновесного затвердевания [5], которая была дополнена моделью взаимодействия фронта кристаллизации с тугоплавкими инокулянтами. Принятая за основу модель применима как для малых, так и для высоких скоростей роста кристаллической фазы. Теоретическое обоснование этой модели выполнено в работе [6].

В двумерном пространстве уравнения модели [5] описывают: баланс масс (1), эволюцию границы раздела твердой и жидкой фаз и диффузионный поток примеси (2, 3), прирост твердой фазы (4) и соотношение концентрации примеси в жидкой и твердой фазах (5).

$$\frac{\partial}{\partial t}[(1-G)C_L + kGC_L] + \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial J_x}{\partial t} + J_x + \frac{1-G}{q} \frac{\partial C_L}{\partial x} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial J_y}{\partial t} + J_y + \frac{1-G}{q} \frac{\partial C_L}{\partial y} = 0, \quad (3)$$

$$\frac{\partial G}{\partial t} = \frac{w}{v} V, \quad (4)$$

$$C_S = kC_L. \quad (5)$$

где  $J_x$  и  $J_y$  — проекции вектора  $\mathbf{J}$  диффузионного потока на оси координат;  $C_L$  и  $C_S$  — концентрация в жидкой и твердой фазах соответственно;  $G$  — доля твердой фазы в ячейке [0..1];  $t$  — время;  $w$  — площадь границы раздела фаз в кристаллизующейся системе;  $v$  — объем двухфазной области;  $V$  — скорость движения межфазной границы (раздела границы твердой и жидкой фаз) вдоль вектора нормали, направленного в сторону жидкой фазы;  $k$  — коэффициент неравновесного распределения примеси.

Как известно, при малой скорости затвердевания и малом переохлаждении макроскопически гладкая граница раздела фаз возмущается, становясь морфологически нестабильной по сценарию авторов работы [7]. Это классический пример развития структур ячеисто-дендритного типа, которое управляется диффузионным массопереносом в локально равновесных условиях. Увеличение переохлаждения может привести к отклонению от локального термодинамического равновесия в системе и к инициированию быстрого затвердевания [8].

**Основные допущения используемой модели:**

1. Рассматривается изотермическая двухфазная система при постоянном давлении.
2. Система состоит из химически инертного бинарного сплава, затвердевающего из переохлажденной жидкости.

3. Затвердевание из жидкой фазы может быть настолько быстрым, что скорость  $V$  движения границы раздела фаз сопоставима по величине со скоростью  $V_D$  диффузии примеси.

4. Конвекцией в жидкой фазе и диффузией в твердой кристаллической фазе пренебрегаем.

5. В объеме жидкой фазы существуют тугоплавкие инокулянты.

6. Принято, что тугоплавкие инокулянты распределены равномерно в объеме сварочной ванны с некоторой вероятностью  $\phi$  ( $0 \leq \phi \leq 1$ ).

7. Тугоплавкие инокулянты являются неподвижными в процессе кристаллизации. Все инокулянты имеют одинаковый размер, сопоставимый с размером ячейки вычислительной сетки ( $\approx 0,4$  мкм).

При этих предположениях процесс развития дендритной структуры управляется массопереносом и кинетикой движения фазовой границы. В частности, из допущения 4 следует, что необходимо принять во внимание конечность скорости диффузионного переноса примеси и отклонение от локального равновесия на фазовой границе [9]. Таким образом, модель, описывающая систему, рассматривает локально-неравновесную диффузию примеси и кинетику движения границы раздела фаз.

**Модель процесса кристаллизации металла.**

В начале расчета инициализируется расчетная область (зона кристаллизации), которая состоит из твердой фазы определенной морфологии (это могут быть отдельные сиботаксисы, случайно распределенные в жидкой фазе, единичный зародыш твердой фазы, плоский фронт с неоднородностями или без них, или их комбинации) и жидкой фазы с определенной начальной концентрацией примеси. Степень затвердевания ячейки определяется долей твердой фазы в ячейке  $G$ . Каждая ячейка системы может быть либо жидкой ( $G = 0$ ), либо полностью затвердевшей ( $G = 1$ ), или принадлежать фронту кристаллизации ( $0 < G < 1$ ), т. е. затвердевать в данный момент времени (рис. 1).

Для определения приращения доли  $G$  твердой фазы необходимо рассчитать скорость  $V$  межфазной границы. Это следует сделать с помощью нелинейного кинетического уравнения «скорость-переохлаждение»

$$V = \beta(\Delta T - \Delta T_C(V) - \Delta T_N(V) - \Delta T_\Gamma), \quad (6)$$

где  $\Delta T$  — полное начальное переохлаждение в системе;  $\Delta T_C$  — концентрационное переохлаждение, обусловленное диффузией примеси;  $\Delta T_N$  — переохлаждение, обусловленное изменением наклона кинетического ликвидуса и определяемое разностью между равновесной линией ликвидус  $T_A + m_e C_0$  и кинетическим ликвидусом  $T_A + m C_0$ ;  $\Delta T_\Gamma$  — переохлаждение, обусловленное кривизной поверхности раздела фаз (эффект Гиббса-Томпсона).

Вклады переохлаждений определены в уравнениях:

$$\Delta T = T_A + m_e C_0 - T_0, \quad (7)$$

$$\Delta T_C = m(V)(C_0 - C_L), \quad (8)$$

$$\Delta T_N = (m_e - m(V))C_0, \quad (9)$$

$$\Delta T_\Gamma = -\Gamma(1 - 15\cos(4(\theta_1 - \theta_0)))K. \quad (10)$$

В уравнениях (6–10):  $\beta$  — кинетический коэффициент роста кристаллов;  $T_A$  — температура затвердевания основного компонента системы;  $T_0$  — температура в изотермической системе;  $m_e$  — тангенс угла наклона равновесной линии ликвидус;  $C_0$  — начальная концентрация примеси в расплаве;  $m(V)$  — наклон кинетического ликвидуса;  $\Gamma$  — постоянная капиллярности;  $K$  — кривизна поверхности раздела фаз;  $\theta_1$  — угол ориентации вектора-нормали к поверхности раздела фаз;  $\theta_0$  — угол ориентации главного кристаллографического направления [10].

Константа капиллярности  $\Gamma$  определяется как

$$\Gamma = \frac{\gamma}{\Delta S}, \quad \Delta S = \frac{Q_L}{T_A},$$

где  $\gamma$  — поверхностное натяжение;  $\Delta S$  — изменение энтропии при кристаллизации;  $Q_L$  — скрытая теплота кристаллизации.

В процессе кристаллизации металла в сварочной ванне всегда присутствует некоторый стохастический процесс на границе раздела фаз, обусловленный вероятностными процессами. Для получения результатов, сопоставимых с экспериментальными данными, введем кинетический коэффициент роста кристалла в виде [11]

$$\beta = 1 + \delta\eta(t, x, y), \quad (11)$$

где  $\delta \geq 0$  — амплитуда стохастического шума;  $\eta(t, x, y)$  — вероятностная функция, принимающая значения в интервале  $[-1 \dots 1]$  для различных точек в  $(t, x, y)$ -пространстве.

Серьезное влияние на результаты расчетов роста дендритов оказывает искусственная анизотропия, созданная геометрией расчетной сетки [12]. Для того, чтобы уменьшить это влияние, при расчете кривизны поверхности учитывается влияние не только ближайших клеток, но и более дальних соседей. В данной работе учитывалось влияние клеток, находящихся в радиусе трех ячеек (рис. 2) с некоторым весовым коэффициентом. Весовой коэффициент зависит от площади клетки, которая попала в окружность радиуса  $3,5h$  ( $h$  — размер одной клетки в расчетной сетке), центр которой находится в центре рассматриваемой клетки. Таким образом, при расчете кривизны поверхности в каждой отдельно взятой ячейке учитывается влияние 44 соседних точек. Матрица весовых коэффициентов  $M$  рассчитывается один раз и является постоянной для всех ячеек системы. Числа,

показанные на рисунке, это и есть значения весовых коэффициентов клеток-соседей.

Для формализации расчета кривизны поверхности введем вектор кристаллизации  $\vec{F}_S$  [10]. Значение этого вектора соответствует сумме твердой фазы в окружности радиуса  $3,5h$  вокруг ячейки с учетом матрицы  $M$  весовых коэффициентов, определенной выше.

$$|\vec{F}_S| = \sum_{i,j=-3}^3 G_{i,j} M_{i,j}. \quad (12)$$

Направление вектора  $\vec{F}_S$  соответствует линии, соединяющей центр масс всей твердой фазы и центр рассматриваемой ячейке. Координаты центра масс относительно рассматриваемой клетки в декартовой системе координат легко рассчитать по формулам:

$$\Delta x = \sum_{i,j=-3}^3 i G_{i,j} M_{i,j}, \quad \Delta y = \sum_{i,j=-3}^3 j G_{i,j} M_{i,j}. \quad (13)$$

Вектор нормали границы раздела фаз можно определить по формуле

$$\vec{n} = \frac{\vec{F}_S}{|\vec{F}_S|}. \quad (14)$$

Таким образом, угол ориентации вектора-нормали к поверхности раздела фаз  $\theta_1$  в формуле (10) рассчитывается по формуле

$$\theta_1 = \arctan\left(\frac{\Delta x}{\Delta y}\right). \quad (15)$$

Кривизна поверхности в рассматриваемой ячейке, содержащей некоторую долю твердой фазы  $G$ , рассчитывается исходя из полуэмпирической зависимости:

$$K = \frac{A + BG - |\vec{F}_S|}{S} \cdot \frac{2}{h}, \quad (16)$$

где

$$S = \sum_{i,j=-3}^3 M_{i,j} = 38,484,$$

$$A = \sum_{i=-3}^{-1} \sum_{j=-3}^3 M_{i,j} = 15,754,$$

$$B = \sum_{j=-3}^3 M_{0,j} = 6,976,$$

где  $S, A, B$  — это константы, определенные из матрицы весовых коэффициентов;  $h$  — размер ячейки в расчетной сетке.

Геометрически эти константы определяются, как разные части круга радиусом  $3,5h$  (рис. 3);  $S$  — площадь всего круга ( $S = 2A + B = 3,5^2\pi$ );  $A$  — площадь сектора «*cde*», а  $B$  — площадь домена «*abcd*». Легко увидеть, что уравнение (16) прини-

мает нулевое значение коэффициента кривизны поверхности  $K$ , независимо от доли твердой фазы  $G$  в рассматриваемой ячейке при плоском фронте кристаллизации. Когда модуль вектора  $\vec{F}_S$  меньше суммы  $A + BG$ , то поверхность выпуклая, в противном случае поверхность вогнута, что видно на рис. 3.

Формула (16) является модификацией метода определения кривизны поверхности, предложенного в работе [13]. Данный метод накладывает ограничения на размер ячеек и радиус матрицы весовых коэффициентов, которые должны быть достаточно малы в сравнении с характерными масштабами моделируемой структуры.

Для расчета доли примеси, которая выталкивается новообразованной твердой фазой в расплав, определяем коэффициент неравновесного распределения примеси, который зависит от локальной скорости кристаллизации и вычисляется по уравнению

$$k(V) = \begin{cases} \frac{(1-V^2)k_e + Vr}{1-V^2 + Vr}, & V < 1, r = \frac{V_D}{V_{DI}}, \\ 1, & V \geq 1, \end{cases} \quad (17)$$

где  $k_e$  — равновесный коэффициент распределения;  $V_D$  — скорость диффузии примеси в объеме жидкой фазы;  $V_{DI}$  — скорость диффузии примеси на границе раздела фаз.

Наклон  $m(V)$  кинетического ликвидуса для расчета переохлаждения  $\Delta T_N$  и  $\Delta T_C$  определяется коэффициентом неравновесного распределения  $k(V)$  (17) и скоростью  $V$

$$m(V) = \frac{m_e(1-k + \ln(\frac{k}{k_e}) + (1-k)^2V)}{1-k_e}. \quad (18)$$

Обновление поля концентраций происходит для каждой ячейки расчетной области исходя из баланса масс и диффузионного потока примеси. Концентрация примеси  $C_S$  в полностью твердых ячейках ( $G = 1$ ) остается неизменной.

В процессе локально неравновесного переноса примеси в объеме жидкой фазы возникает скачок концентраций на фронте диффузионной волны « $DF$ » (передний край диффузионного профиля, который движется со скоростью  $V_D$ ) [5]. Подробный анализ этого эффекта можно найти в работе [11]. Граничные условия на фронте диффузионной волны задаются как граничные условия первого рода и выглядят следующим образом

$$J_{DF}^- = \exp\left(-\left(\frac{\xi}{4}\tau\right)^{1/2}\right)(C_F - C_0)\mathbf{n},$$

где  $J_{DF}^-$  — исходящий поток примеси;  $C_F - C_0$  — концентрационный скачок на диффузионном фронте;  $\mathbf{n}$  — вектор нормали диффузионного фронта;

$\xi$  — параметр устойчивости вычислительной схемы;  $\tau$  — шаг во времени.

**Влияние тугоплавких инокулянтов на процесс кристаллизации.** На основе анализа ряда экспериментальных данных [2, 4] для расчетов была принята гипотеза, предполагающая, что инокулянт поглощается фронтом кристаллизации, а в момент контакта изменяет поверхностное натяжение в зоне контакта.

Для учета влияния тугоплавких инокулянтов на движение фронта кристаллизации необходимо вычислить величину межфазного натяжения между инокулянт и расплавом ( $\sigma_{12}$ ), используя табличные данные [14].

$$\sigma_{12} = \sigma_1 + \sigma_2 - W_a,$$

где  $\sigma_{12}$  — величина межфазного натяжения между тугоплавким инокулянт и расплавом;  $\sigma_1$  — поверхностное натяжение инокулянта;  $\sigma_2$  — поверхностное натяжение сплава;  $W_a$  — работа адгезии.

Поверхностное натяжение расплава рассчитываем, исходя из методики предложенной С. Попелем [15]:

$$\sigma_2 = \sigma_{Fe} - 2000 \lg \sum F_i x_i,$$

где  $\sigma_{Fe}$  — поверхностное натяжение чистого железа;  $F_i$  — параметр, характеризующий капиллярную активность легирующей добавки;  $x_i$  — атомная доля  $i$ -того компонента сплава.

Граничные условия не задаются в привычном понимании (рис. 4). Снизу расчетной области изначально находятся полностью твердые ячейки, расчет в которых не проводится. Справа и слева расчетная область замыкается в «цилиндр» путем создания областей виртуальных данных, в которые копируются данные из наиболее близких к границе расчетной области ячеек. Это сделано для эмуляции положения расчетной области в сварочной ванне, где на развитие первичной структуры в ней также возможно влияние роста дендритов в прилегающих объемах металла. Сверху расчетная область ограничена слоем ячеек, расчет в которых не производится. Это создает слой не препятствующий распространению диффузионной волны, что физически соответствует большим размерам сварочной ванны.

На основе описанной выше модели разработана программа для отслеживания движения поверхности раздела фаз при кристаллизации металла шва ВПНЛ сталей во времени в зависимости от начальных условий (начальная скорость кристаллизации, начальная морфология твердой фазы, угол наклона вектора наиболее интенсивного отвода тепла к поверхности кристаллизации) и физических параметров сплава (температура кристаллизации основного компонента сплава, кинетический коэффициент роста, тангенс угла

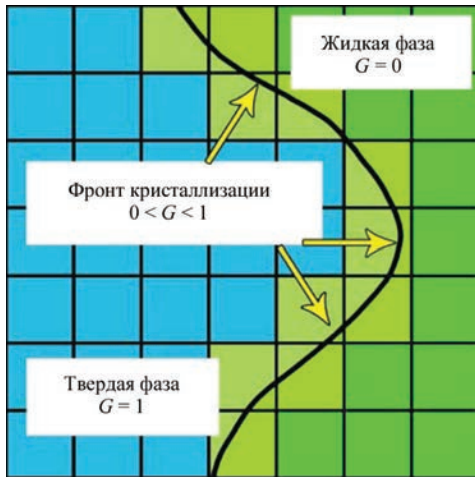


Рис. 1. Значение доли твердой фазы  $G$  для жидкости, твердой фазы и фронта кристаллизации

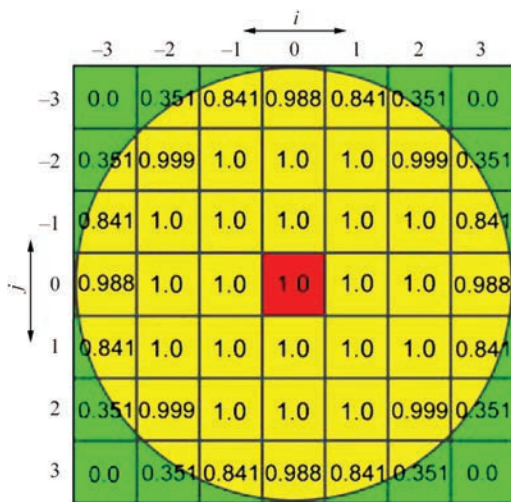


Рис. 2. Матрица весовых коэффициентов для определения кривизны поверхности [10]

наклона равновесной линии ликвидус, равновесный коэффициент распределения примеси, коэффициент диффузии примеси, скрытая теплота кристаллизации, скорости диффузии примеси в объеме и на поверхности раздела фаз, амплитуда стохастического шума).

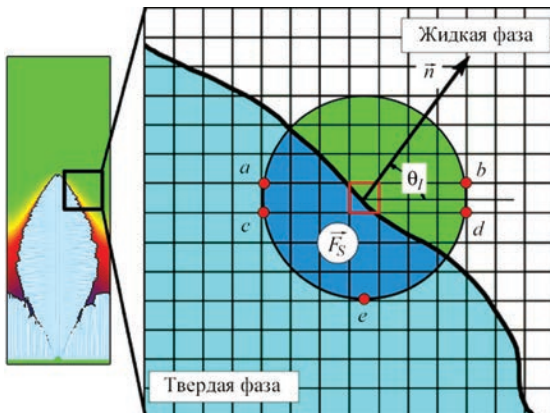


Рис. 3. Определение вектора кристаллизации и расчет кривизны поверхности [16]

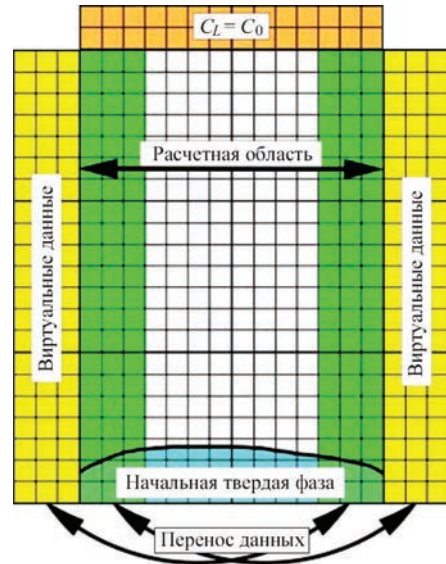


Рис. 4. Правила на границах расчетной области [10]

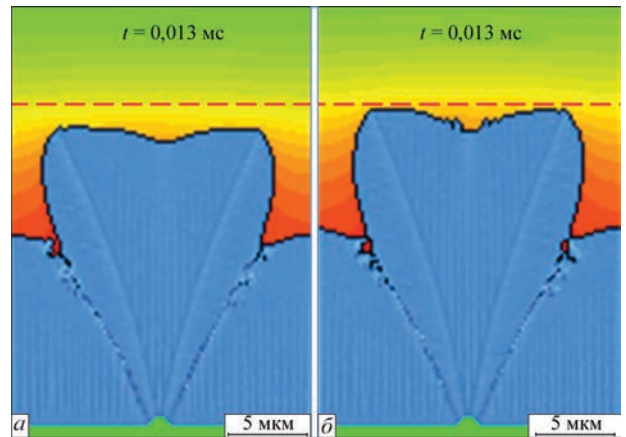


Рис. 5. Результаты расчетов начала кристаллизации:  $a$  — без учета влияния легирующих элементов;  $b$  — с учетом влияния легирующих элементов

На основе разработанного программного обеспечения был проведен ряд вычислительных экспериментов, результаты которых приведены ниже.

**Оценка влияния химического состава расплава на процесс кристаллизации.** Для проведения вычислительных экспериментов за основу был взят химический состав металла шва ВПНЛ стали (мас. %): 0,049 C; 0,298 Si; 1,39 Mn; 0,023 S; 0,015 P; 0,15 Cr; 2,26 Ni; 0,25 Mo; 0,039 Al; 0,008 Ti. Начальная скорость кристаллизации была принята  $0,27V_D$ . Физические параметры сплава приведены в таблице. На рис. 5 видно разницу в размерах и морфологии дендритов, развившихся одинаковый промежуток времени, без учета влияния легирующих элементов на поверхностное натяжение сплава (рис. 5,  $a$ ) и с учетом влияния легирующих элементов (рис. 5,  $b$ ).

**Результаты вычислительных экспериментов влияния введенных тугоплавких иноксулянтов на дендритную структуру металла.** При расчетах в качестве вводимого иноксулянта был

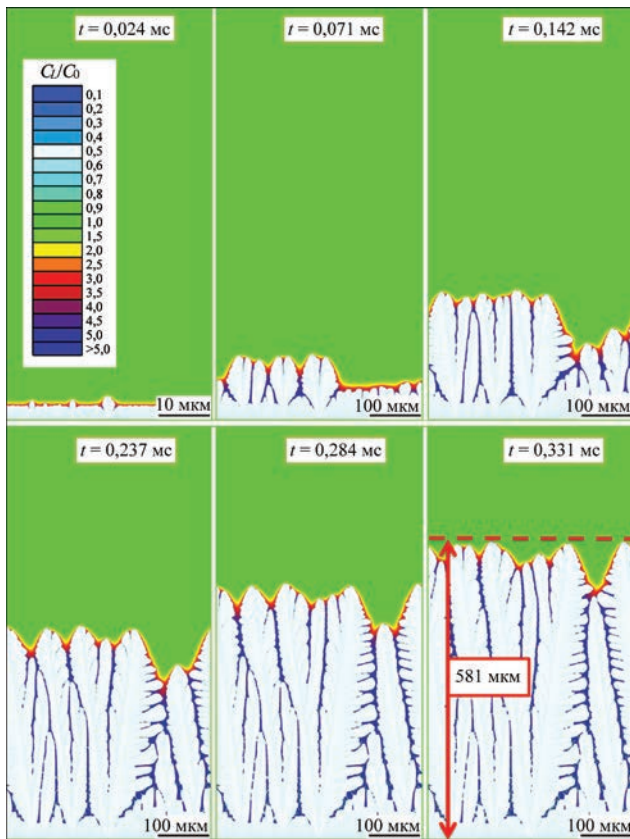


Рис. 6. Эволюция дендритной структуры во времени с учетом влияния тугоплавких инокулянтов ( $\varphi = 0$ )

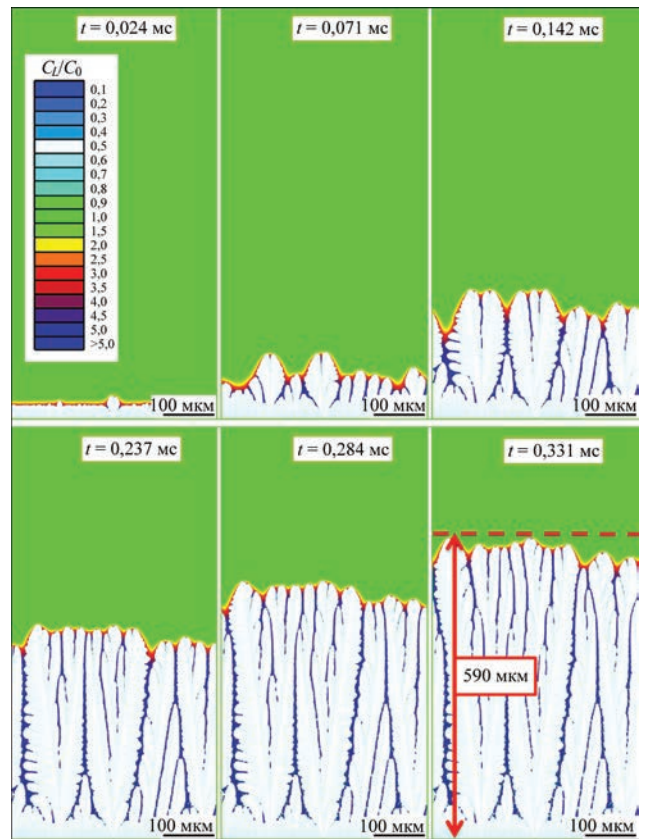


Рис. 7. Эволюция дендритной структуры во времени с учетом влияния тугоплавких инокулянтов ( $\varphi = 0,1$ )

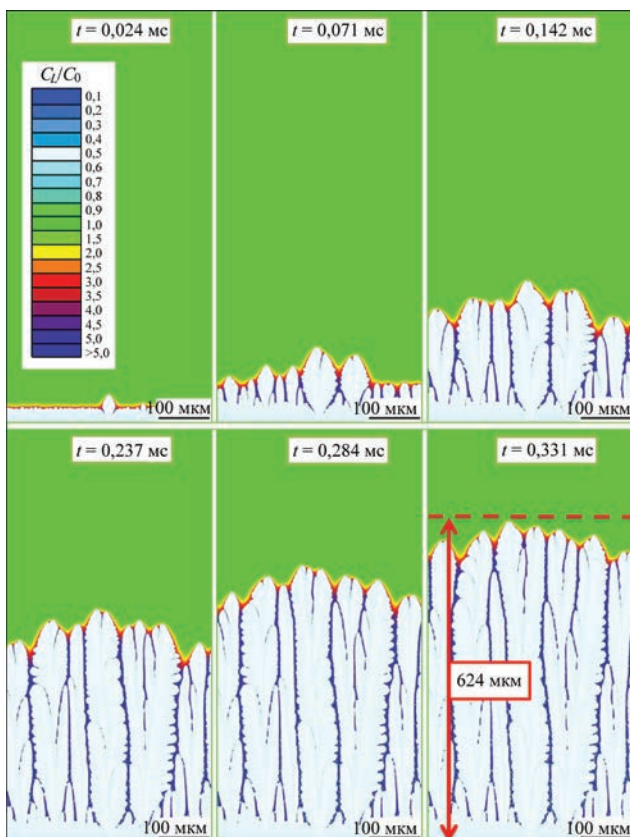


Рис. 8. Эволюция дендритной структуры во времени с учетом влияния тугоплавких инокулянтов ( $\varphi = 0,2$ )

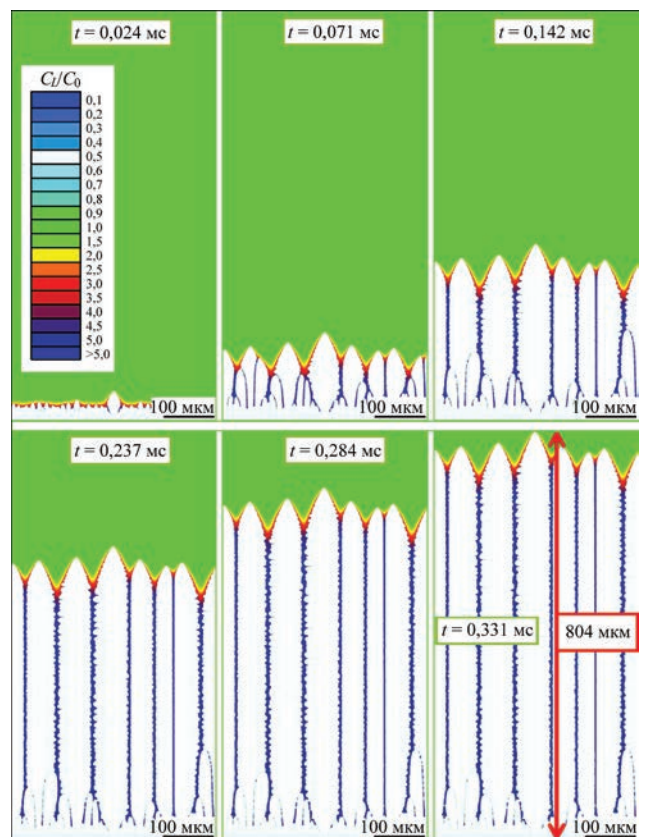


Рис. 9. Эволюция дендритной структуры во времени с учетом влияния тугоплавких инокулянтов ( $\varphi = 0,3$ )

Значения физических параметров, принятых в расчетах

Физический параметр	Обозначение	Размерность	Значение
Температура затвердевания основного компонента	$T_A$	К	1809
Кинетический коэффициент роста	$\beta$	м/(с·К)	0,4
Тангенс угла наклона равновесной линии ликвидус	$m_e$	К/мас. %	-80
Равновесный коэффициент распределения	$k_e$	-	0,1
Коэффициент диффузии примеси	$D$	м <sup>2</sup> /с	$6 \cdot 10^{-8}$
Скрытая теплота кристаллизации	$Q_L$	Дж/м <sup>3</sup>	$10^9$
Скорость диффузии в объеме	$V_D$	м/с	17
Скорость диффузии на границе раздела фаз	$V_{Di}$	м/с	17
Амплитуда стохастического шума	$\delta$	-	0,07

принят оксид титана (TiO<sub>2</sub>), параметры поверхностного взаимодействия с расплавом железа которого следующие: температура плавления ( $T_{пл}$ ) 1843 °С; поверхностное натяжение жидкой фазы ( $\sigma_1$ ) 1780 мДж/м<sup>2</sup>; краевой угол смачивания ( $\theta$ ) 0 град; работа адгезии ( $W_a$ ) 3560 мДж/м<sup>2</sup>. Параметр распределения тугоплавких инокулянтов в металле сварочной ванны  $\phi$  был принят равным 0, 0,1, 0,2, 0,3. Результаты расчетов, показывающие эволюцию дендритной структуры во времени с различной плотностью распределения инокулянтов в металле сварочной ванны, показаны на рис. 6–9 соответственно.

Таким образом, при отсутствии (рис. 6) тугоплавких инокулянтов в сварочной ванне можно наблюдать ветвистую кристаллизационную структуру с широкими ветвями дендритов (вплоть до 100 мкм).

При введении в сварочную ванну тугоплавких инокулянтов, влияющих на поверхностное натяжение между твердой фазой и расплавом, дендритная структура сменяется от ветвистой к полностью столбчатой морфологии (рис. 7–9). Такое существенное изменение характера первичной структуры металла шва обусловлено только процессами, происходящими на поверхности контакта тугоплавкого инокулянта с растущим дендритом.

В данном случае TiO<sub>2</sub> хорошо смачивается расплавом железа, что способствует увеличению локальной скорости кристаллизации в зоне контакта растущего дендрита с инокулянтом. Это происходит за счет увеличения величины переохлаждения в зоне контакта (эффект Гиббса–Томпсона,  $\Delta T_G$ ). Увеличение скорости роста дендрита за счет эффекта Гиббса–Томпсона приводит к увеличению концентрационного переохлаждения ( $\Delta T_C$ ) за счет выталкивания большего количества примеси перед фронтом кристаллизации. Также изменение скорости роста на кончике дендрита способствует дальнейшему отклонению процесса от равновесного и увеличению переохлаждения за счет отклонения от равновесной линии ликвидус ( $\Delta T_M$ ).

Предположительное описание характера развития физических процессов, заложенных в предложенную модель кристаллизации, позволяет моделировать качественные изменения дендритной структуры металла шва в зависимости от количества и свойств вводимых инокулянтов. В случае отсутствия тугоплавких инокулянтов в сварочной ванне фронт кристаллизации за 0,331 мс, продвинулся на 581 мкм (рис. 6), а при их равномерном распределении с вероятностью  $\phi = 0,3$  — на 802 мкм (рис. 9), при всех прочих равных условиях (включая начальную скорость кристаллизации). Следует отметить существенное изменение морфологии дендритной структуры от сильно вет-

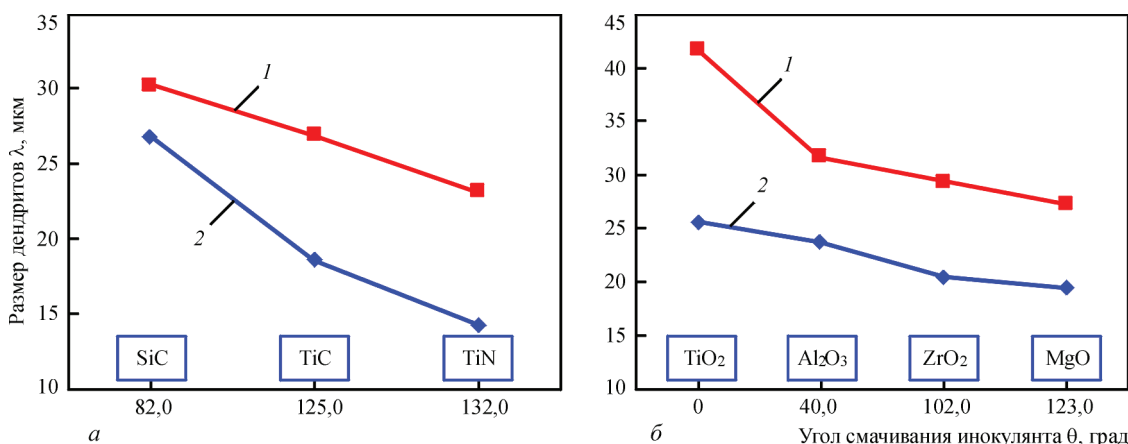


Рис. 10. Сопоставление экспериментальных результатов измерения и расчетных данных параметров первичной структуры металла образцов первой (а) и второй (б) серии экспериментов: 1 —  $\lambda_{1эксп.}$ ; 2 —  $\lambda_{1расч.}$

вистой, образовавшейся в результате конкурирующего роста отдельных кристаллов, до полностью столбчатых дендритов. При снижении угла смачивания в локальных точках контакта растущего дендрита с расплавом металла можно получить значительное качественное изменение дендритной структуры, что, в свою очередь, влияет на дальнейшие твердофазные преобразования в металле, а как следствие — на конечную микроструктуру и механические свойства металла шва ВПНЛ стали.

На рис. 10, а, б представлено сравнение размеров дендритов первичной структуры, полученных расчетным и экспериментальным путем [2, 17] для образцов первой и второй серии соответственно. Средняя ошибка данных, полученных путем вычислительного эксперимента, составляет около 25 % и увеличивается с увеличением угла смачивания тугоплавкого индуктора металлом сварочной ванны. Такую разницу в полученных результатах следует связать с выбором параметра распределения тугоплавких индукторов в металле сварочной ванны  $\phi$  равным 0,3, что, видимо, не соответствует условиям проведенных экспериментальных исследований. В будущих исследованиях следует учесть этот фактор и более подробно исследовать влияние параметра распределения на развитие первичной структуры металла шва. Также ошибку внес неточный химический состав и ограничения модели.

### Выводы

Модель, основанная на методе конечных элементов, комбинированном с методом клеточных автоматов, хорошо подходит для моделирования процесса кристаллизации металла сварочной ванны с учетом влияния тугоплавких индукторов. Это связано с тем, что в основную модель развития кристаллической структуры легко ввести дополнительные правила и законы взаимодействия движущегося фронта кристаллизации с введенными в объем жидкого металла включениями. Также преимуществом такого подхода является возможность отслеживания любых параметров дискретных ячеек клеточного автомата (концентрация примеси, величина переохлаждения, коэффициент кривизны поверхности и других) во времени.

Вычислительные эксперименты, проведенные с помощью разработанного программного обеспечения, показали возможность управления параметрами и морфологией первичной структуры металла путем введения в расплав тугоплавких дисперсных индукторов. Разработанная математическая модель и программное обеспечение, написанное на ее осно-

ве, подходят для прогнозирования размерных параметров и морфологии первичной структуры металла шва с учетом введенных в сварочную ванну тугоплавких индукторов.

1. Sandeep J. Issues in welding of hsla steels / J. Sandeep, R. Chhibber, N. P. Mehta // *Advanced Materials Research*. – 2012. – Vol. 365. – P. 44–49.
2. Головки В. В. Влияние неметаллических включений на формирование структуры металла сварных швов высокопрочных низколегированных сталей / В. В. Головки, И. К. Походня // *Автоматическая сварка*. – 2013. – № 6. – С. 3–11.
3. Ермоленко Д. Ю. Численное моделирование и прогнозирование микроструктуры металла сварных швов при сварке высокопрочных сталей (Обзор) / Д. Ю. Ермоленко, В. В. Головки // *Автоматическая сварка*. – 2014. – № 3. – С. 3–12.
4. Головки В. В. Влияние введения в сварочную ванну титаносодержащих индукторов на структуру и свойства металла швов высокопрочных низколегированных сталей / В. В. Головки, С. Н. Степанюк, Д. Ю. Ермоленко // *Автоматическая сварка*. – 2015. – № 2. – С. 16–20.
5. Галенко П. К. Изотермический рост кристаллов в переохлажденных бинарных сплавах / П. К. Галенко, М. Д. Кривилев // *Математическое моделирование*. – 2000. – Т. 12, № 11. – С. 17–37.
6. Galenko P., Danilov D. Local nonequilibrium effect on rapid dendritic growth in a binary alloy melt / P. Galenko, D. Danilov // *Physics Letters A*. – 1997. – 235, № 3. – P. 271–280.
7. Mullins W. W. Stability of the planar interface during crystallization of a dilute binary alloy / W. W. Mullins, R. F. Sekerka // *J. Applied Physics*. – 1964. – V. 35. – P. 444–459.
8. Kurz W. Fundamentals of solidification / W. Kurz, D. J. Fisher // *Trans Tech Publications Ltd*. – 1992. – 305 p.
9. Galenko P. Local nonequilibrium effect on undercooling in rapid solidification of alloys / P. Galenko, S. Sobolev // *Physical Review E*. – 1997. – V. 55, № 1. – P. 343–352.
10. Pavlyk V. Modeling and direct numerical simulation of dendritic structures under solidification conditions during fusion welding / V. Pavlyk. – Aachen: Shaker Verlag GmbH, 2004. – 147 p.
11. Галенко П. К. Конечно-разностная схема для моделирования кристаллического структурообразования в переохлажденных бинарных сплавах / П. К. Галенко, М. Д. Кривилев // *Математическое моделирование*. – 2000. – Т. 12, № 12. – С. 11–23.
12. Guillemot G. Modeling of macrosegregation and solidification grain structures with a coupled cellular automaton-finite element model / G. Guillemot, C.-A. Gandin, H. Combeau // *ISIJ International*. – 2006. – vol. 46, № 6. – P. 880–895.
13. Sasikumar R. 2-dimensional simulation of dendrite morphology / R. Sasikumar, R. Sreenivasan // *Acta Metallurgica et Materialia*. – 1994. – № 2(7). – P. 2381–2386.
14. Панасюк А. Д. Стойкость неметаллических материалов в расплавах / А. Д. Панасюк, В. С. Фоменко, Г. Г. Глебова. – К.: Наукова думка, 1986. – 351 с.
15. Попель С. И. Теория металлургических процессов / С. И. Попель. – М.: ВИНТИ, 1971. – 132 с.
16. Дилтей У. Компьютерное моделирование формирования микроструктуры металла шва при сварке плавлением / У. Дилтей, В. Павлик, Т. Райхель // *Автоматическая сварка*. – 1997. – № 3. – С.3–9.
17. Головки В. В. Технология сварки высокопрочных низколегированных сталей с введением титаносодержащих индукторов / В. В. Головки, С. Н. Степанюк, Д. Ю. Ермоленко // *Наноразмерные системы и наноматериалы: исследования в Украине* / [Коллективная монография; под ред. А. Г. Наумовца]. – НАН Украины. – К.: Издательский дом «Академперіодика», 2014. – 768 с.

Поступила в редакцию 09.09.2016