

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ФІЗИКО-ТЕХНОЛОГІЧНИЙ ІНСТИТУТ МЕТАЛІВ ТА СПЛАВІВ

ДОНІЙ ОЛЕКСАНДР МИКОЛАЙОВИЧ



УДК 621.74:669.715:536.421.4:658.012

**КОМП'ЮТЕРНІ МОДЕЛІ ДЛЯ ВИВЧЕННЯ ПРОЦЕСІВ
ФОРМУВАННЯ СТРУКТУРИ У ЛИВАРНИХ АЛЮМІНІЄВИХ
СПЛАВАХ ПРИ ЇХ КРИСТАЛІЗАЦІЇ**

Спеціальність 05.16.04 – Ливарне виробництво

А в т о р е ф е р а т
дисертації на здобуття наукового ступеня
доктора технічних наук

Київ – 2021

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана на кафедрі металознавства та термічної обробки Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського».

Науковий консультант – Член-кореспондент НАН України,
доктор технічних наук
Нарівський Анатолій Васильович,
Фізико-технологічного інституту металів та
сплавів НАН України, директор.

Офіційні опоненти: доктор технічних наук, професор
Лисенко Тетяна Володимирівна,
Одеський національний політехнічний
університет, завідувачка кафедри технології
та управління ливарними процесами;

доктор технічних наук, професор
Наумик Валерій Владиленович,
Національний університет «Запорізька
політехніка», проректор з наукової роботи
та міжнародної діяльності;

доктор технічних наук, професор
Селівьорстов Вадим Юрійович,
Національна металургійна академія,
декан електрометалургійного факультету.

Захист відбудеться «13» травня 2021 року о 10 год. 00 хв. на засіданні спеціалізованої вченої ради Д26.232.01 в Фізико-технологічному інституті металів та сплавів НАН України за адресою: 03142, м. Київ-142, бульв. Вернадського, 34/1.

З дисертацією можна ознайомитися в бібліотеці Фізико-технологічного інституту металів та сплавів НАН України за адресою: м. Київ-142, бульв. Вернадського, 34/1.

Автореферат розісланий «2» квітня 2021 р.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради Д26.232.01,
доктор технічних наук



М.І. Тарасевич

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Одним із шляхів поліпшення конкурентоспроможності продукції ливарного виробництва є розробка нових та удосконалення наявних технологічних процесів. В ливарному виробництві розроблено математичні моделі, які дозволяють розраховувати теплопередачу при формуванні виливків, швидкість переміщення фронту кристалізації тощо. Вагомий внесок в цьому напрямку внесли роботи Вейника А. І., Баландіна Г. Ф. та інших. Однак існуючі моделі не дозволяють досить точно описати процес утворення структури литого металу. Первинна структура, яка формується при кристалізації, суттєво впливає на властивості сплаву в твердому стані. Це пояснюється тим, що процеси твердіння та утворення кристалів залежать від теплофізичних та хімічних взаємодій, які відбуваються майже одночасно. Математичний опис таких процесів надто складний. Тому застосування методів імітаційного моделювання та створення комп'ютерних моделей дозволить досліджувати особливості процесів структуроутворення у виливках при кристалізації та свідомо підійти до удосконалення ливарних технологій.

Сучасні уявлення про зародження і зростання твердої фази здебільшого ґрунтуються на положеннях рівноважної термодинаміки і тому не враховують умови кристалізації сплавів в реальних ливарних процесах. У цьому зв'язку дослідження впливу теплофізичних дій на процеси утворення кристалів та на їх подальше зростання в сплавах, які твердіють при різних умовах охолодження, є вельми важливими.

Для одержання виливків із заданими характеристиками міцності необхідно здійснювати своєчасний контроль стану рідкого металу (температура, наявність в ньому модифікатора, умови охолодження сплаву та ін.). Використання для контролю за станом розплаву термічного аналізу, який ґрунтується на реєстрації типових ефектів твердіння сплавів, є найбільш перспективним. Існують математичні моделі, які зв'язують зміни температури сплаву при твердінні сплаву з процесами кристалізації та формуванням структури у виливках.

Створення наукових основ і розроблення математичних та комп'ютерних моделей кристалізації сплавів з метою управління структурою і властивостями литого металу відповідають вимогам сучасного матеріалознавства та є актуальними.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота відповідає основним науковим напрямкам роботи НТУУ «КПІ» і виконувалась в рамках планів робіт НДЛ «Керування якістю рідких металів і сплавів» кафедри «Металознавства і термічної обробки металів» інженерно-фізичного факультету НТУУ «КПІ» відповідно до програм Міністерства освіти і науки України: «Моделювання фазових перетворень при кристалізації і термічній обробці евтектичних структур та розробка композиційних матеріалів для вузлів тертя» (№ державної реєстрації ДР 0100U000871, 2001–2002 р.); «Розробка методології

технологічного передбачення структуроутворення у функціональних матеріалах для забезпечення якості металовиробів» (№ ДР 0103U000222, 2003–2005 р.); «Наукові і технологічні основи управління структурою та властивостями ливарних багатокомпонентних сплавів системи Al-Mg» (№ ДР 0109U000660, 2009–2011 р.); «Розробка наукових принципів управління фазово-структурним складом та властивостями вторинних ливарних алюмінієвих сплавів (№ ДР 0106U002326, 2010–2012 р.); «Комп'ютерне моделювання та оптимізація технологічних процесів лиття та термічної обробки» (№ ДР 0119U103606, 2019–2020 р.); Ініціативна фундаментальна робота «Дослідження і моделювання фазових перетворень та зміни електронної структури, її впливу на формування нових та модифікацію наявних властивостей матеріалів», 2013–2017 р.).

Мета і завдання дослідження. Розробка наукових принципів створення комп'ютерних моделей кристалізації та комп'ютерного термічного аналізу сплавів для дослідження і визначення оптимальних технологічних режимів одержання виливків із заданими властивостями.

Для досягнення поставленої мети необхідно вирішити такі *завдання*:

- на основі сучасних наукових уявлень проаналізувати основні процеси, що мають місце при зародженні та рості кристалів у сплавах;
- розробити комп'ютерну модель для дослідження кристалізації сплаву за різних умов охолодження і наявності модифікаторів, яка за результатами комп'ютерного експерименту повинна дозволяти розрахувати параметри кристалізації, визначити розмір зерна і розподіл елементів у виливку.
- шляхом порівняльного аналізу результатів моделювання та експериментальних даних перевірити адекватність створеної моделі;
- узагальнити інформацію стосовно застосування комп'ютерного термічного аналізу для дослідження перебігу кристалізації сплавів, означити основні параметри вимірювального каналу та оптимізувати алгоритми математичної обробки кривих охолодження;
- уточнити математичні моделі для прогнозування кінцевих властивостей сплавів за кривою охолодження;
- розробити та перевірити інформаційний комплекс, який поєднує апаратно-програмну систему для експрес-аналізу алюмінієвих розплавів на базі термічного аналізу з підсистемою імітаційного моделювання кристалізації.

Об'єкт дослідження – кристалізація алюмінієвих сплавів.

Предмет дослідження – структуроутворення алюмінієвих виливків.

Методи досліджень. Комп'ютерне і математичне моделювання процесів структуроутворення у сплавах при кристалізації, комп'ютерний термічний аналіз для контролю стану розплавів та прогнозу властивостей металу у виливках, спектральний і макроструктурний аналізи, регресійний та кореляційний аналізи, багатовимірний метод найменших квадратів.

Наукова новизна одержаних результатів.

1. Вперше за результатами аналізу математичних рівнянь, які описують переміщення фронту кристалізації та розповсюдження хвилі переключень в

двовимірному клітинному автоматі, встановлено залежність критичного розміру зародка при кристалізації металів від теплопровідності, питомої теплоємності, густини та швидкості охолодження розплаву.

2. Вперше розроблені наукові принципи створення комп'ютерних моделей кристалізації як чистих металів, так і бінарних сплавів систем евтектичного типу. Зазначені принципи базуються на поєднанні застосування кліткових автоматів з математичними моделями теплопередачі та дифузії і дозволяють в обчислювальному експерименті спостерігати за структуроутворенням, а також досліджувати динаміку утворення центрів кристалізації металу у рідкому, а також у твердо-рідкому станах за різних умов охолодження.

3. Вперше на прикладі чистого алюмінію, а також сплавів Al + 8,2 % Si та Al + 3,8 % Cu за допомогою комп'ютерної моделі кристалізації металів встановлено вплив швидкості охолодження на закономірності та динаміку утворення центрів кристалізації.

4. Отримала подальший розвиток динамічна теорія кристалізації металевих сплавів внаслідок уточнення формул розрахунку за кривою охолодження кількості твердої фази і швидкості її росту, а також створена математична модель кристалізації бінарного сплаву.

5. Вперше доведена можливість створення безконтактного індуктивного термошумового перетворювача для вимірювання температури металів в рідкому та твердому станах.

Практичне значення одержаних результатів. На основі теоретичних та експериментальних досліджень створений інформаційно-технологічний комплекс прогнозування структури і властивостей литих деталей, який складається з системи імітаційного моделювання процесу кристалізації сплавів та комп'ютерного термічного аналізу.

Запропоновано метод визначення режимів процесу твердіння виливків з використанням аналізу структуроутворення в них та комп'ютерної моделі кристалізації сплавів в рамках обчислювального експерименту. Новий метод дає змогу раціонально впливати на структуру виливків шляхом зміни технологічних режимів і керуючих впливів на сплави.

Створений пакет прикладних програм для ЕОМ на основі розробленої методики, яка впроваджена в навчальному процесі інженерно-фізичного факультету Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», і використовується студентами при виконанні лабораторних та курсових робіт за дисциплінами, що пов'язані з процесами кристалізації металів та сплавів.

Для виробничих умов доцільно доповнити засоби контролю за процесами плавлення і формування виливків із Al-Si сплавів створеним інформаційно-технологічним комплексом. Це дозволить оперативно управляти процесом формування литого металу на всіх етапах його одержання за різними технологіями.

Особистий внесок автора.

Основні наукові розробки та результати, які становлять суть дисертації отримані здобувачем особисто. У співавторстві здобувачу належать: формулювання принципів побудови системи комп'ютерного термічного аналізу (КТА) та розробка основи її алгоритму прогнозування стану розплаву та ступеня його модифікованості, побудова математичних моделі для КТА та проведення математичних розрахунків, розробка алгоритму математичної обробки кривих охолодження КТА, розробка методики досліджень та проведення експериментів, проведення аналізу особливостей використання ЕОМ [1, 2, 4, 9, 10, 16, 17, 24, 31, 33, 34,]; аналіз основних параметрів пробовідбірника та вимірювального каналу КТА [8, 33]; формулювання фізичних принципів та конструкції безконтактного термошумового датчика для вимірювання температури [17–19]; чисельна схема розв'язку рівняння дифузії та алгоритми і програмне забезпечення для обробки експериментальних даних [27–30]; принципи побудови багатофункціонального інформаційно-технологічного комплексу для прогнозування структури і властивостей ливарних сплавів, який включає імітаційну модель та підсистему комп'ютерного термічного аналізу, проведення комп'ютерних експериментів [3, 14, 15, 21, 22, 26, 32].

Апробація результатів роботи. Представлені результати є підсумком роботи, що проведена автором особисто і під його керівництвом зі співробітниками та студентами НТУУ «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», а також у співдружності з працівниками інших інститутів і підприємств України. Матеріали роботи докладені та обговорені на наступних заходах: ІХ Міжнародна науково-практична конференція «Нові матеріали і технології в машинобудуванні – 2017» Україна, Київ: НТУУ «КПІ» (30–31 травня 2017 р.); Міжнародна наукова конференція «Матеріали для роботи в екстремальних умовах – 6» Україна, Київ: НТУУ «КПІ» (1–2 грудня 2016 р.); 12-й Міжнародний симпозіум українських інженерів-механіків у Львові. Україна, Львів (28–29 травня 2015 р.); V Международная научно-техническая конференция «Перспективные технологии, материалы и оборудование в литейном производстве» Украина, г. Краматорск ДГМА (21–25 сентября 2015 г.); VII Международная конференция «Стратегия качества в промышленности и образовании». 3–10 июня 2011, г. Варна; IX Международная конференция «Стратегия качества в промышленности и образовании». 31 мая – 7 июня 2013, г. Варна; XI Международная конференция «Стратегия качества в промышленности и образовании». 1–5 июня 2015, г. Варна; Международная научно-практическая конференция-выставка «Литейное производство: технологии, материалы, оборудование, экономика и экология» Украина, Киев (12–14 декабря 2011 г.); X Міжнародна, науково-технічна конференція «Приладобудування 2011: стан і перспективи» Україна, м. Київ (28–29 квітня 2011 р.); ІХ Міжнародна, науково-технічна конференція «Приладобудування 2010: стан і перспективи» Україна, м. Київ (27–28 квітня 2010 р.); VIII Міжнародна науково-технічна конференція «Приладобудування 2009: стан і перспективи» Україна, м. Київ

(28–29 квітня 2009 р.); Міжнародна НТК «Надежность и долговечность механизмов, элементов конструкций и биомеханических систем» Україна, м. Севастопіль (7–11 вересня 2008 р.); Научно-техническая конференция «Современные технологические процессы в литейном производстве» м. Київ, Україна РДЭНТП (1991 г.); III Республиканская НТК «Теория и технология производства отливок из сплавов цветных металлов» г. Владикавказ (1991 г.); III Республиканская НТК «Теория и технология производства отливок из сплавов цветных металлов» г. Владикавказ (1991 г.); Республиканская НТК «Микропроцессорные системы управления технологическими процессами в ГПС» г. Одесса: ОПИ (1990 г.).

Публікації. За матеріалами дисертаційної роботи опубліковано 49 наукових праць, з них 32 статі у наукових виданнях (з них 20 у наукових фахових виданнях України, 10 статей у виданнях іноземних держав, 7 статей у виданнях, які включені до міжнародної наукометричної бази Skopus, 6 включені до міжнародної наукометричної бази Web of Science, 17 статей у виданнях, які включені до міжнародної наукометричної бази Google Scholar), 1 препринт і 16 праць – тези доповідей в збірниках матеріалів міжнародних та республіканських конференцій.

Структура та обсяг дисертації. Дисертаційна робота складається зі вступу, шести розділів, висновків (по розділах та загальних), списку використаних джерел літератури (287 найменувань) та додатків. Робота викладена на 392 сторінках (з яких обсяг основного тексту становить 225 сторінок), містить 83 рисунків, 19 таблиць. Документи про випробовування, впровадження та обговорення наведено в додатку на 15 сторінках.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми дослідження; вказано на зв'язок роботи з науковою тематикою; визначено мету, завдання, об'єкт, предмет, сформульовано методологічну основу дослідження; висвітлено наукову новизну, науково-теоретичне та практичне значення одержаних результатів; наведено відомості про апробацію результатів дослідження, структуру та обсяг дисертації.

У Розділі 1 «Сучасні уявлення про формування структури сплавів під час кристалізації та методи контролю і прогнозування властивостей металів у твердому стані» визначено основні чинники, що впливають на процеси формування первинної структури у сплавах, які забезпечують високу якість металовиробів. На сучасному етапі розвитку промисловості України одним із основних завдань є підвищення конкурентоспроможності металопродукції з міцнішими властивостями на рівні світових стандартів. На структуру та властивості литого металу суттєво впливають умови кристалізації сплавів.

Для підвищення властивостей міцності виливків та ефективності їх виробництва, необхідно контролювати процеси кристалізації сплавів у різних умовах твердіння.

Для цілеспрямованого керування структурно-міцносними характеристиками литих виробів безпосередньо у процесі їх виготовлення, найбільш доцільно використовувати метод термічного аналізу, який дає змогу фіксувати динаміку процесу їх кристалізації.

Проаналізовано наявні системи контролю стану рідкого металу та прогнозу заданих структури і властивостей металів у закристалізованих сплавах, які побудовані на основі термічного аналізу. Узагальнена блок-схема таких систем складається із трьох основних блоків: відбірник проб металу із первинним датчиком, аналого-цифровий перетворювач (АЦП) і електронно-обчислювальна машина (ЕОМ – комп'ютер). У відбірнику знаходиться рідкий метал, який досліджується. В об'ємі металу розташована термопара, що генерує термо е. р. с. у відповідності до температури розплаву. АЦП перетворює аналоговий сигнал з термопари у дискретний, який обробляється в ЕОМ. Сучасні ЕОМ дають змогу доповнити системи додатковими функціями, що значно розширює їх практичне використання.

Розглянуто можливість розробки термошумового датчика температури, в основу якого покладено закон Найквіста.

Проведено аналіз методів дослідження процесу кристалізації (як експериментальних, так і теоретичних). Показано, що для достовірного прогнозу структури твердого металу необхідно, щоб моделі кристалізації металів і сплавів сприяли візуалізації процесу структуроутворення при кристалізації. У контексті цього перспективним напрямом є використання імітаційного моделювання та клітинних автоматів. Запропоновано співвідношення для оцінки критичного розміру зародка твердої фази на основі фізичних характеристик металу.

Досліджено також математичні моделі кристалізації металів і сплавів, які розроблені на базі динамічної теорії твердіння металевих виливків. Їх використовують для інтерпретації експериментальних даних і прогнозу структури та службових властивостей сплавів методом термічного аналізу. Такі моделі базуються на рівнянні теплового балансу і є досить простими, адже розглядається металева система «малого» розміру, у якій градієнт температур уздовж перерізу виливка можна ігнорувати. Тому одним із завдань цієї роботи є подальше удосконалення моделей у рамках динамічної теорії кристалізації виливок.

Поєднання способу експрес-аналізу стану металевих розплавів на основі термічного аналізу з підсистемою імітаційного моделювання кристалізації розплавів дало змогу створити багатофункціональний інформаційно-технологічний комплекс для досліджень процесів твердіння металів і сплавів. За результатами аналізу наявних систем і способів для вивчення стану розплавленого металу та процесів кристалізації сплавів, визначено мету та завдання у цій роботі.

У **Розділі 2 «Апаратна підсистема комп'ютерного термічного аналізу для контролю стану ливарних розплавів сплавів на основі алюмінію»** проведено узагальнення принципів методики побудови

підсистеми комп'ютерного термічного аналізу для прогнозу стану металевих розплавів на основі алюмінію.

Визначення необхідної точності вимірювання температури сплавів за допомогою комп'ютерного термічного аналізу (КТА) базується на гіпотезі, згідно з якою похибка визначення концентрації компонента, передусім, залежить від похибки виміру температури. За діаграмою стану бінарного сплаву з евтектикою визначено оцінку необхідної точності виміру напруги на термопарі. На вісі концентрацій діаграми точка C_x відповідає вмісту другого компонента у сплаві, який досліджується, а інтервал $\pm\Delta C_x$ – величині помилки стандартного методу визначення C_x . Проекція інтервалу $\pm\Delta C_x$ на лінію ліквідус є інтервалом невизначеності при реєстрації температури ліквідус, тобто визначає максимально припустиму величину похибки.

Відповідно до результатів розрахунків інтервал невизначеності при вимірюванні температури ліквідус для сплавів систем Al-Si, Al-Cu та Al-Mg складає 2,0 градусів у діапазоні температур 853–930 К.

Наявність третього компонента у сплаві зміщує температурні точки на термограмах, а при формуванні нових фаз можуть з'являтися екстремуми на першій похідній за часом кривої охолодження (КО). Присутність магнію у доевтектичному алюмінієвому АК7ч, що містить 6–8 % Si і 0,2–0,4 % Mg за масою призводить до появи фази Mg_2Si , у результаті чого на похідній КО утворюється локальний максимум в кінці кристалізації сплаву при концентрації у ньому Mg 0,17–0,20 % (мас). Збільшення вмісту Mg у сплаві обумовлює ріст амплітуди цього піку майже без зміни температури утворення евтектики. При цьому концентрація Mg у сплаві визначається за наявністю відповідної фази та за амплітудою максимуму, який відповідає її появі. Додаткових вимог щодо точності вимірювання температури не виникає. Можливість фіксації наявності Mg у сплавах системи Al-Si-Mg визначається на рівні 0,17–0,20 %.

Установлено, що найбільш динамічними ділянками на КО при кристалізації сплавів є початок утворення твердого розчину або евтектики, на яких можуть спостерігатися рекалесценції температури. Зміна температури у цих ділянках є важливою при прогнозуванні, наприклад, механічних властивостей сплавів у литому стані.

Для виміру температури за допомогою КТА сплавів систем Al-Si, Al-Cu та Al-Mg з точністю ± 1 градус, роздільна здатність цифрового перетворювача повинна бути не менше, ніж 0,3 градуси, що дасть змогу проводити 15–20 градацій температурних фіксацій на КО нагрітого до 853–930 К металу.

Первинним перетворювачем у системі КТА є термопара, яка генерує неперервний сигнал у відповідності до теплових процесів при кристалізації сплаву. У пам'яті комп'ютера термограма реєструється у вигляді дискретних сигналів, які фіксуються через рівні проміжки часу Δt з частотою дискретизації $F_d = \frac{1}{\Delta t}$. Під час розрахунків за КО проміжні значення температури між зафіксованими дискретними сигналами відновлюються

шляхом інтерполяції. У результаті цього формується похибка відновлення, яка обернено пропорційна частоті дискретизації. Тому частоту дискретизації вимірювального сигналу необхідно визначити у такий спосіб, щоб додаткова похибка відновлення не впливала на результати вимірювання температури. Частоту дискретизації визначили за результатами спектрального складу КО, яка складає $F_{d\ min} \geq 2$ Гц.

За результатами аналізу наявних датчиків для систем дослідження стану ливарних розплавів, визначено основні вимоги до конструкції відбірника доз металу:

1. Матеріал, з якого робиться відбірник, не повинен взаємодіяти з розплавом або його потрібно покривати шаром захисної фарби. Товщина його стінок не має принципового значення, але співвідношення швидкості охолодження проби та її маси визначає ступінь рівноважності процесу кристалізації. Доцільно для кожного типу сплаву експериментально або теоретично підбирати параметри відбірника у такий спосіб, щоб на КО максимально виділялися ті ефекти, які пов'язані зі структурними перетвореннями у розплаві. Також бажано, щоб градієнт температур уздовж перерізу проби був якомога меншим, що сприятиме квазіоб'ємному характеру кристалізації сплаву і полегшуватиме математичний аналіз фізичних процесів, що відбуваються у ньому.

2. Оптимальною геометричною формою відбірника металу є циліндр, у якому вимірювання температури металу можна провести з меншою похибкою. Це обумовлено тим, що термопара розташовується у центрі циліндра, тобто на ізотермі. Температурне поле є симетричним, що дозволяє не враховувати вплив торців на процес твердіння сплаву, якщо висота циліндра значно перевищує його діаметр. У цьому разі стабілізується темп охолодження металу у відбірнику, а інтенсивність процесу кристалізації сплаву залежить тільки від діаметра циліндра. Це зумовлено тим, що збільшення висоти призводить до збільшення як маси (і відповідно теплоємності), так і поверхні, від якої тепло відводиться. Ці процеси компенсують один одного. Тобто час охолодження майже не залежить від того, наскільки рідкий метал заповнив циліндр. Невеликі коливання маси металу у пробовідбірнику не впливають на хід кристалізації, а також на результати аналізу. Показано, що для збереження оптимального режиму охолодження проби, доречно проводити попередній розігрів відбірника металу.

Визначено загальну похибку вимірювального каналу підсистеми КТА, величина якої відповідає розрахунковій.

Для системи КТА запропоновано безконтактний термошумовий датчик для вимірювання температури, який складається з контуру, що магнітно зв'язаний з металом, який досліджується, та з перетворювача напруги шуму у контурі. Розраховано передаточну характеристику датчика та максимальну величину шумів на виході вимірювального контуру, виконано оцінку чутливості у динамічному діапазоні. Показано можливість безконтактного

вимірювання температури рідкого та закристалізованого сплаву за допомогою термошумового термометра.

У Розділі 3 «Особливості математичної обробки кривої охолодження» наведено принципи математичної обробки кривих охолодження та розроблено математичні моделі, які застосовуються у підсистемі КТА інформаційно-технологічного комплексу для прогнозування структури і властивостей у литих виробах.

Особливістю системи КТА є широке застосування різних математичних моделей для інтерпретації теплових ефектів, які спостерігаються на КО. Тому на основі динамічної теорії твердіння виливків, розроблено математичні моделі процесу кристалізації металевої проби, особливістю яких є те, що градієнт температур за її об'ємом не враховували.

Розглянуто математичні моделі, які пов'язують температуру проби металу з кількістю твердої фази у сплаві при кристалізації $V(t) = \frac{m(t)}{m_0}$ (де $m(t)$ – маса твердої фази, m_0 – маса проби). Показано принципову можливість визначення кінетичних параметрів сплавів кристалізації за КО. Зроблено уточнення математичної моделі кристалізації чистого металу, яку можна використовувати і для винятково евтектичних сплавів:

$$V(t) = \frac{T(t) - T_{кр} + \int_{t_{кр}}^t \tilde{k}_1(\xi) [T(\xi) - T_{кр}] d\xi + \int_{t_{кр}}^t \tilde{k}_2(\xi) [T^4(\xi) - T_{кр}^4] d\xi}{T_{тв} - T_{кр} + \int_{t_{кр}}^{t_{тв}} \tilde{k}_1(\xi) [T(\xi) - T_{кр}] d\xi + \int_{t_{кр}}^{t_{тв}} \tilde{k}_2(\xi) [T^4(\xi) - T_{кр}^4] d\xi}, \quad (1)$$

де $T(t)$ – температура металевого зразка (КО); $T_{кр}$, $T_{тв}$ – температури початку та закінчення кристалізації; $T_{кр}$ – температура навколишнього середовища; $\tilde{k}_{1,2}(\xi)$ – лінійна апроксимація значень коефіцієнтів k_1 k_2 , які характеризують темп охолодження і визначаються за КО на ділянках до початку кристалізації ($k_{1,2}$ рідк.) та після її закінчення ($k_{1,2}$ тв.).

Розроблено математичну модель кристалізації сплавів, які утворюють твердий розчин. При цьому вводилося середнє для ливарних алюмінієвих сплавів значення питомої теплоємності \bar{c} . Зміну прихованої теплоти кристалізації сплаву при формуванні твердого розчину апроксимували прямолінійною залежністю $L(T) = p + q \cdot T$, де p , q – коефіцієнти апроксимації.

$$V(t) = \int_{t_{кр}}^t T'(\xi) \frac{\bar{c}}{p + q \cdot T(\xi)} d\xi + \int_{t_{кр}}^t \tilde{k}_1(\xi) \frac{\bar{c} [T(\xi) - T_{кр}]}{p + q \cdot T(\xi)} d\xi + \int_{t_{кр}}^t \tilde{k}_2(\xi) \frac{\bar{c} [T^4(\xi) - T_{кр}^4]}{p + q \cdot T(\xi)} d\xi, \quad (2)$$

де $T'(t)$ – похідна за часом КО.

Розроблено математичну модель процесу кристалізації сплавів з евтектикою при допущеннях, що фази у сплаві кристалізуються послідовно, тобто в момент закінчення кристалізації α -твердого розчину починає

твердіти евтектика, і що питомі теплоємності α -твердого розчину і евтектики є рівними. Створена модель має вид:

$$\frac{L_1}{c} V_1(t) + \Theta(t - t_{кр.евт.}) \frac{L_2}{c} V_2(t) =$$

$$= T(t) - T_{кр} + \kappa_1(t) \int_{t_{кр.}}^t [T(\xi) - T_{сеп}] d\xi + \kappa_2(t) \int_{t_{кр.}}^t [T^4(\xi) - T_{сеп}^4] d\xi, \quad (3)$$

$$\Theta(t - t_{кр.евт.}) = \begin{cases} 0, & t \leq t_{кр.евт.} \\ 1, & t > t_{кр.евт.} \end{cases}, \quad (4)$$

$$V_1(t) = \frac{m_1(t)}{m_0}, \quad V_2(t) = \frac{m_2(t)}{m_0}, \quad (5)$$

$$k_1 = \frac{fS}{cm_0}, \quad k_2 = \frac{\sigma \varepsilon S}{cm_0}, \quad (6)$$

де: L_1, L_2 – питомі теплоти кристалізації α -твердого розчину і евтектики, відповідно; $m_1(t), m_2(t)$ – відносні частини твердої фази, що утворюються у процесі кристалізації α -фази і евтектики, відповідно; $\sigma = 5,56 \cdot 10^{-8}$ Дж/(м \cdot К 4) – постійна Стефана – Больцмана; S – площа поверхні, з якої тепло відводиться; $T(t)$ – зміна у часі температури металу, що досліджується; $t_{кр}, t_{кр.евт}$ – час початку кристалізації α -фази і евтектики відповідно.

Значення відношення питомих теплот кристалізації до загальної теплоємності α -фази $\frac{L_1}{c}$ і евтектики $\frac{L_2}{c}$ визначаються за рівняннями:

$$\frac{L_1}{c} = \frac{N_{евт} - N_\alpha}{N_{евт} - N_0} \left\{ T_{кр.евт} - T_{кр} + \int_{t_{кр.}}^{t_{кр.евт.}} k_1(\xi) [T(\xi) - T_{ср}] d\xi + \int_{t_{кр.}}^{t_{кр.евт.}} k_2(\xi) [T^4(\xi) - T_{ср}^4] d\xi \right\}, \quad (7)$$

$$\frac{L_2}{c} = \frac{N_{евт} - N_\alpha}{N_0 - N_\alpha} \left\{ T_{мв} - T_{кр} + \int_{t_{кр.}}^{t_{мв}} k_1(\xi) [T(\xi) - T_{ср}] d\xi + \int_{t_{кр.}}^{t_{мв}} k_2(\xi) [T^4(\xi) - T_{ср}^4] d\xi \right\} -$$

$$- \frac{L_1}{c} \cdot \frac{N_{евт} - N_0}{N_{евт} - N_\alpha}, \quad (8)$$

де: $t_{кр.евт}, t_{мв}$ – моменти часу початку процесу кристалізації евтектики і кінця кристалізації сплаву; $T_{кр.евт}, T_{мв}$ – температури початку твердіння евтектики і кінця кристалізації сплаву; N_0 – концентрація іншого компонента у сплаві; N_α – максимальна розчинність іншого компонента в α -твердому розчині; $N_{евт}$ – концентрація іншого компонента в евтектиці.

Адекватність моделей перевіряли шляхом порівняння розрахованих значень $\frac{L_1}{c}$ і $\frac{L_2}{c}$ з табличними даними для сплавів Al-(6–8 %)Si та Al-(10–12 %)Si. Визначили, що похибка складає 10–12 %. У такий спосіб визначено відношення $\frac{L_1}{c}$ і $\frac{L_2}{c}$ та відносні кількості структурних складових $V_1(t), V_2(t)$ у процесі кристалізації сплавів. Це дає змогу експериментально досліджувати і

керувати процесом кристалізації сплавів для одержання заданих властивостей литого металу.

Для визначення кінетичних коефіцієнтів $k_1(t)$ та $k_2(t)$ та підвищення чутливості термічного аналізу використовували удосконалену методику розрахунків на окремих ділянках КО. Ця методика базується на розрахунку теплового балансу і моделює диференційний термічний аналіз при визначенні початку та кінця фазових перетворень (або ендо-, або екзотермічних реакцій) у сплаві при кристалізації.

У Розділі 4 «Оцінка стану ливарних розплавів із застосуванням підсистеми термічного аналізу» наведено результати випробування підсистеми КТА, які показують доцільність її застосування в лабораторних та промислових умовах.

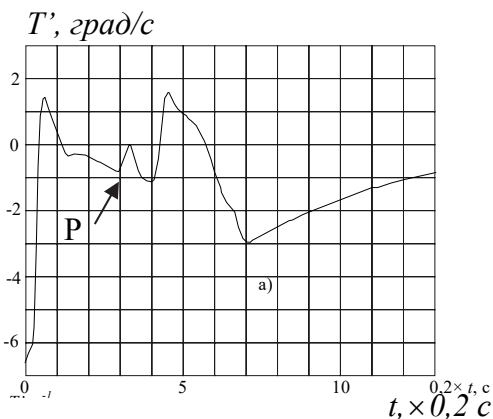


Рис. 1 Перша похідна КО сплаву системи Al-Si-Mg, що містить 1 % Fe
P – локальний максимум, який відповідає формуванню нерівноважної евтектики $\alpha + \text{Al}_3\text{Fe}$

Прогноз властивостей і управління процесом їх формування у сплавах з використанням КТА здійснюється за допомогою математичних моделей, які пов'язують параметри кристалізації, що визначаються за КО із службовими характеристиками сплавів. Ці моделі є регресійними рівняннями, які створені за експериментальними даними, одержаними за допомогою методу найменших квадратів, адекватність яких перевіряли за таблицею залишків.

Для сплавів системи Al-Si розроблено математичну модель для визначення масової частки кремнію у доевтектичних сплавах АК7, АК8, АК9 з використанням їх температури ліквідус і солідус.

Аналіз діаграм стану сплавів системи Al-Si-Mg при малих (до 0,5 %) концентраціях магнію показує, що його наявність майже не зміщує лінію ліквідус. Тому вміст кремнію у сплавах системи Al-Si-Mg можна визначати також за регресійним рівнянням, що представлено у цій роботі, та включає температуру солідус та температуру локального максимуму на кривій першої похідної, який відповідає температурі формування евтектики Al-Mg₂Si-Si у сплаві.

За допомогою підсистеми КТА можна визначити також вміст заліза у ливарних сплавах системи Al-Si-Mg. При швидкості охолодження сплаву 1–3 град/с та температурі $T = 831$ К виділяється потрібна евтектика $\alpha + \text{Si} + \text{Mg}_2\text{Si}$. Домішки заліза у кількості (0,6–1 %) за масою утворюють з кремнієм фазу Al_3Fe . Незважаючи на незначну її кількість, за рахунок нерівноважності процесу кристалізації, евтектика $\alpha + \text{Al}_3\text{Fe}$ відзначається максимумом похідної температури між максимумами, які відповідають утворенню α -фази і евтектики (Рис. 1 екстремум P). Цей температурний

максимум не виявляється при вмісті Fe до 0,60 % і починає формуватися при температурах, більших від евтектичної $T_{евт}$ у сплавах, які містять Fe > 0,60 %. При концентрації Fe ~ 0,70 %, цей максимум досягає свого найбільшого значення і надійно визначається системою КТА. Подальший зріст вмісту заліза зміщує локальний максимум у бік високих температур, не змінюючи його величини. У результаті, в залежності від вмісту Fe, сплав може бути класифікований як придатний чи непридатний для конкретної технології лиття.

Для прогнозу механічних властивостей закристалізованого сплаву АК12 побудовані нелінійні регресійні рівняння, що пов'язують тимчасовий опір розриву і відносне подовження з розрахунковим вмістом кремнію, заліза і величиною евтектичної рекалесценції.

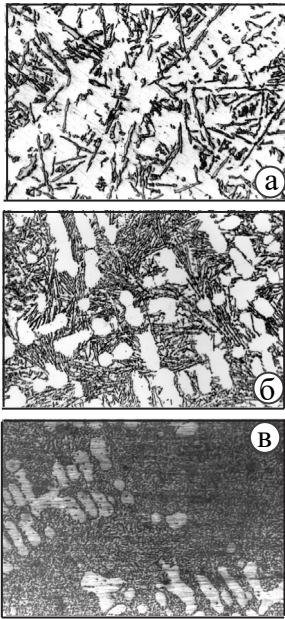


Рис. 2 Структура сплаву Al-Si $\times 200$:

- а) не модифікована;
- б) частково модифікована;
- в) модифікована

похідної, максимум якого підтверджує наявність рекалесценції. З підвищенням ступеня модифікованості величина цього максимуму зменшується до нуля, а потім взагалі переходить в область від'ємних величин. Зміни температури солідус у залежності від вмісту стронцію, виявляються при реєстрації інтервалу між числовими значеннями немодифікованого і модифікованого розплавів ΔT_s . Цей інтервал ΔT_s росте від нуля до 9–10 град при концентрації у сплаві стронцію 0,15–0,20 % за масою.

Температурні зміни на КО та їх похідних підтверджують металографічні дослідження структури сплавів (Рис. 2). У немодифікованому сплаві кремній кристалізується у виді великих пластин і голчастих включень. При частковому модифікуванні (вміст Sr до 0,05 %) утворюється дрібнопластинчата структура, яка при підвищенні концентрації Sr до 0,1 %, поступово руйнується і у сплаві залишається невелика кількість голчастої

Для визначення можливостей системи КТА для оцінки ступеня модифікованості ливарних алюмінієвих сплавів, вивчили вплив стронцію на КО і структуру сплавів Al+9,0–12,0 %Si та Al+7,0–8,0 %Si+0,4–0,5 %Mg. При введенні стронцію у сплав Al+9,0–12,0 %Si, змін на КО та їх перших похідних в області кристалізації α -твердого розчину майже не спостерігалось. При кристалізації евтектики і поступовому збільшенні вмісту в цьому сплаві стронцію до 0,2 % відзначається зниження температури солідус приблизно на 10 градусів: від 850 К до 840 К (577 °С до 567 °С). Одночасно на термограмі зменшуються величини рекалесценції (ΔT_{ep}) при початку формування евтектики від 5,0–6,5 град (при вмісті Sr < 0,05 %). Термограми свідчать про те, що для немодифікованого металу в області кристалізації евтектики існує другий пік першої

фази. При подальшому підвищенні вмісту Sr до 0,15 % у сплаві зникає пластинчаста фаза і значно диспергується кремній.

У такий спосіб для оцінки ступеня модифікованості сплаву Al+9–12%Si необхідно використовувати інтервал між числовими значеннями температур солідус немодифікованого і модифікованого розплавів ΔT_s та величину рекалесценції ΔT_{ep} в початку формування евтектики (або величину другого піку першої похідної КО, що корелює з ΔT_{ep}). Числове значення ΔT_s змінюється в межах від 0 до 9–10 градусів, а числове значення ΔT_{ep} – від 0 до 5–7 градусів. Ураховуючи роздільну здатність вимірювального каналу системи КТА, можна встановити 8–10 рівнів зміни критеріального параметра відповідно до його діапазону. Це складає $\sim 0,1$ градус і відповідає можливостям вимірювального каналу. При введенні стронцію у сплав Al+(7,0–8,0)%Si+(0,4–0,5)%Mg до 0,2 % за масою зменшуються величини рекалесценції ΔT_{ep} , як і в сплаві Al+9–12%Si. При цьому температура солідус в евтектичному сплаві майже не змінюється. На підставі одержаних результатів, створено алгоритм прогнозу структури у литих алюмінієвих сплавах за різного ступеня їх модифікованості.

Для впровадження системи КТА у виробництво, її необхідно ввести у наявні технології, що створені згідно з нормативними документами. У роботі наведено варіант включення таких систем у технологічний процес плавлення і розливання алюмінієвих сплавів. На всьому технологічному циклі виділені важливі етапи: початки процесів плавлення, рафінування і модифікування сплавів, розливання металу в форми або в роздавальні печі та їх закінчення. За допомогою системи КТА, можна оперативно визначити склад металу при його плавленні. Також за допомогою зануреного у розплав пробовідбірника, можна контролювати його температуру. При цьому точність вимірювання температури буде вищою, ніж у наявних промислових приладів.

У Розділі 5 «Підсистема імітаційного моделювання процесу утворення структури при кристалізації» розроблено імітаційну модель процесу структуроутворення при твердінні виливків, яка є алгоритмом, що враховує основні уявлення про кристалізацію металів та сплавів, а також реалізує клітинний автомат ймовірного типу (набір пов'язаних між собою комірок, які можуть перебувати або у рідкому, або у твердому станах).

На підставі аналізу кристалізації чистого металу або бінарного сплаву, виділено основні макрофізичні процеси, що визначають її хід: теплопередачу, що відбувається в об'ємі розплаву під впливом зовнішніх факторів, та дифузійний перерозподіл компонентів розплаву при формуванні твердого розчину. Площина моделі (модель двовимірної) являє собою клітинний автомат, кожна комірка якого відповідає певній точці системи. Температура і концентрація другого компоненту у кожній точці розплаву визначають наявність і розмір локального переохолодження у ній. Переохолодження розраховується як різниця температури ліквідус і температури у даний момент часу у цій самій точці. За наявності переохолодження у будь якій точці системи, у цьому місці з'являються умови виникнення центру кристалізації або росту вже наявного кристалу.

Ураховується, що утворення нового кристалу потребує більшої енергії, ніж зростання вже наявного. При переході розплаву у тверду фазу виділяється тепло кристалізації і змінюється концентрація другого компонента навколо точки фазового перетворення.

Теплопередача в металі моделюється двовірним рівнянням теплопровідності Фур'є для прямокутної проби. Припускали, що сплав є однорідним з постійними коефіцієнтом теплопровідності λ та питомою об'ємною теплоємністю $c' = \frac{c}{\rho}$ (де ρ – густина у розрахунковій області):

$$\frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = a \left(\frac{\partial^2 T(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T(x, y, t)}{\partial y^2} \right) \pm F(x, y, t), \quad (9)$$

де: x, y – просторові координати; t – час; $a = \frac{\lambda}{c'}$ – коефіцієнт температуропровідності; $F(x, y, t)$ – додатковий нелінійний член, який враховує виділення (чи поглинання) теплоти при фазовому перетворенні. Знак «+» буде у разі кристалізації, а «-» – у разі плавлення. Показано, що:

$$F(x, y, t) = \frac{L}{c} \frac{\partial \varepsilon(x, y, t)}{\partial t}, \quad (10)$$

де: L – прихована теплота кристалізації; c – питома теплоємність; $\varepsilon(x, y, t)$ – частка твердої фази у деякому елементарному об'ємі $dx dy$.

З усіх сторін системи встановлено граничні умови 3-го роду. Для такого виду умов, шляхом регулювання коефіцієнта тепловідводу, досить просто моделювати різні варіанти охолодження виливка, які трапляються на практиці. Початкова умова відповідає рівномірному розподілу температури у розплаві на першому етапі охолодження.

Для визначення дифузії другого компонента у розплаві використовували двовірне рівняння Фіка, яке при незалежності коефіцієнта дифузії D від координат та часу має вид:

$$\frac{\partial K(x, y, t)}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 K(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 K(x, y, t)}{\partial y^2} \right), \quad (11)$$

де $K(x, y, t)$ – концентрація другого компонента бінарного сплаву у розплаві.

Граничні умови припускають відсутність міжфазового обміну на межах системи. Початкова умова обновлюється на кожному новому етапі системного часу і має нерівномірний розподіл концентрації другого компонента у розплаві:

$$K(x, y, 0) = K_0(x, y). \quad (12)$$

Для розрахунку кількості другого компонента, що виділяється при фазовому перетворенні, вводяться характерні точки діаграми стану подвійного сплаву і виконується апроксимація ліній ліквідус і солідус. У зв'язку зі значною різницею коефіцієнтів дифузії у сплаві в рідкому та твердому станах, перерозподіл елементів усередині зерна можна ігнорувати.

Для вирішення задачі теплопровідності та дифузії використовували числовий метод кінцевих різниць. З огляду на те, що ці задачі є двовірними,

в роботі обґрунтовано використання числової схеми з розщепленням. При розрахунках перерозподілу другого компонента сплаву у розплаві після фазових перетворень виникає проблема одночасного існування двох фаз – рідкої та твердої. Наприклад, у сплаві системи Al–Si тверді фази, у відповідності до діаграми стану, мають концентрацію другого компонента нижчу, ніж розплав. Тому дифузійний масопереніс другого компонента спрямований від розплаву до твердої фази. Це значно ускладнює рішення дифузійних задач. У зв'язку з цим розроблений оригінальний алгоритм використання числової схеми з розщепленням, в якому числа задача дифузії розбивається на підзадачі, а розрахунки проводяться для напряму масопереносу другого компонента сплаву у розплаві від одного осердка твердої фази до іншого. Це збільшує загальний час обчислень, але дає змогу уникнути впливу концентрації вже наявної твердої фази на розрахунок дифузії другого компонента сплаву у рідкому металі.

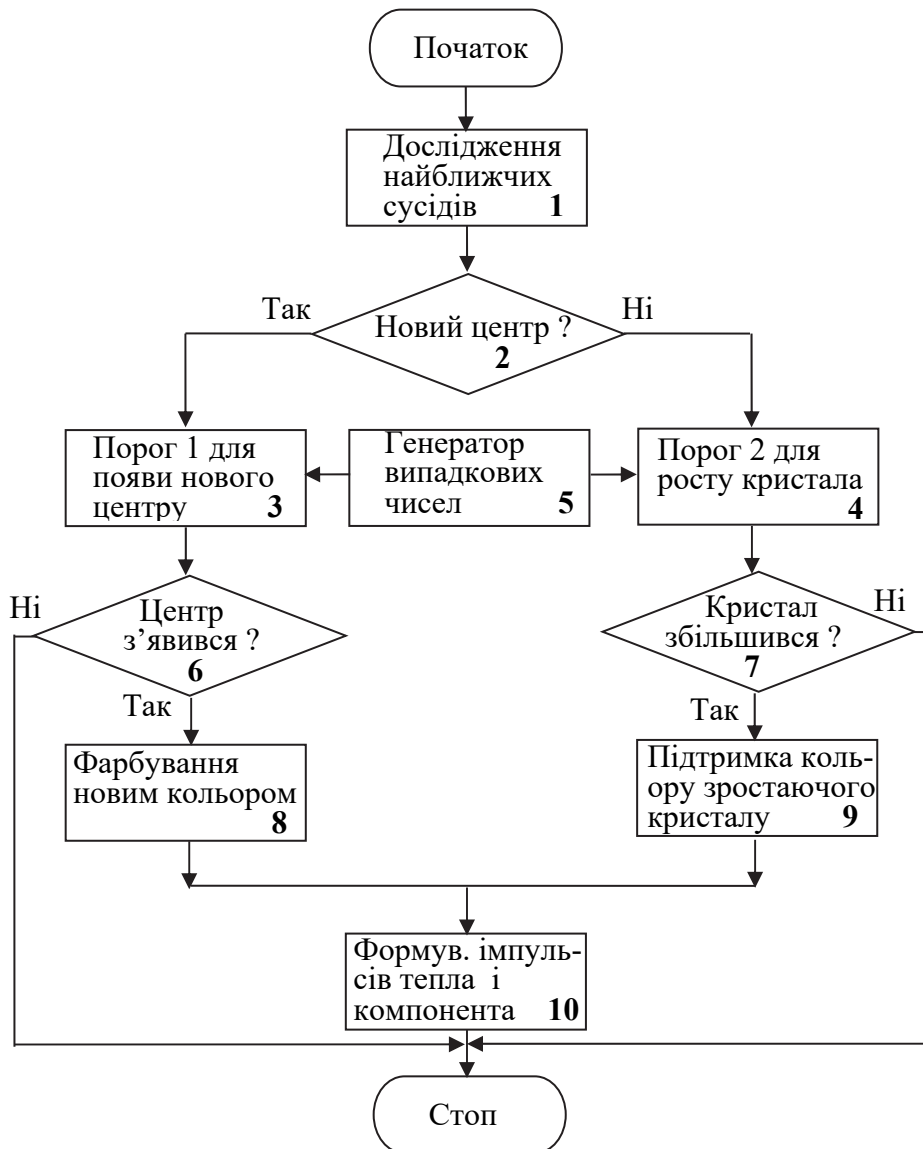


Рис. 3 Схема кліткового автомата імітаційної моделі процесу кристалізації сплавів

Робота алгоритму імітаційної моделі починається з уведення в систему необхідних даних: теплофізичних характеристик матеріалу; параметрів, що характеризують умови охолодження; основних точок діаграми стану дослідного сплаву; параметрів числової схеми розв'язку рівнянь та інших важливих величин. Після цього розраховують температури і концентрації другого компонента сплаву в усіх точках системи. За їх значеннями визначається величина переохолодження у даній момент часу у цих точках. За наявності переохолодження в точці (якій відповідає певна комірка клітинного автомату) у сплаві може відбутися фазовий перехід і до розрахунків залучають двовимірний ймовірнісний клітинний автомат, алгоритм якого показано на рис. 3. Перевіряється стан найближчих сусідніх комірок і приймається рішення щодо можливості зміни стану сплаву у цій точці. У разі можливості зміни стану комірки, визначається, яка саме можливість ймовірно матиме місце: може з'явитися у розплаві новий центр кристалізації, або зрости наявний кристал (блоки 1 та 2).

Окремо визначаються умовні бар'єри перетворень (блоки 3 та 4) для випадків появи нових зародків та зростання вже наявних кристалів. При цьому значення цих порогів різні та пропорційно залежать від величини переохолодження. Ураховуючи флуктуаційний характер процесу кристалізації, використовують генератор випадкових чисел (блок 5). Після розрахунку відповідного бар'єру в блок 3 або в блок 4 потрапляє випадкове число і якщо воно перевищує розрахунковий бар'єр, відбувається фазове перетворення з переходом цієї точки зі стану «рідке» у стан «тверде». Такий фазовий перехід супроводжується виділенням тепла кристалізації і підвищенням концентрації другого компонента біля цієї точки. Формування температурних «імпульсів», наявність котрих враховується при розрахунках теплового поля і концентрації другого компонента сплаву, виконується у блоці 10.

Після того, як всі комірки дослідили, на монітор комп'ютера виводиться інформація про уже сформовану структуру сплаву, який кристалізується. Водночас необхідні розрахункові величини заносяться у відповідні файли.

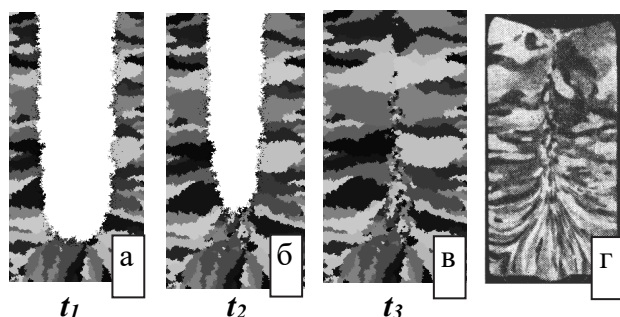


Рис. 4 Змодельована структура (а, б, в), що формується при кристалізації алюмінію в різні моменти часу: $t_1 < t_2 < t_3$ та реальна структура чистого алюмінію (г)

У такий спосіб вперше розроблена імітаційна модель процесу структуроутворення у бінарних сплавах при їх кристалізації з використанням клітинного автомату, робота якого керується зовнішніми умовами охолодження, вилівка.

Після розробки моделі показано, що імітаційна модель процесу структуроутворення при кристалізації алюмінію за візуальною схожістю реальних

структур з модельними характерними ознаками процесу кристалізації є адекватною.

Процес кристалізації алюмінію у різний час, який одержано за допомогою моделі при допущенні, що тепловідвід відсутній зверху та є однаковим з інших трьох сторін, наведено на рис. 4. Тобто фронт кристалізації не є плоским, а відповідає реальному процесу твердіння металів. У кутах та на стінках з початку кристалізації утворюються невеликі зерна, деякі з яких при подальшому твердінні металу, починають контактувати між собою і припиняють свій ріст. Інші, при цьому, переходять у довгі зерна, що спрямовані до центру. У кінці кристалізації в центрі виливка утворюються маленькі різноорієнтовані зерна з виникненням дисперсної структури.

Аналіз структур алюмінію (рис. 5), які одержані за допомогою моделі, показує, що за різних умов кристалізації змінюються структури твердого металу. При цьому можуть утворитися класична тризонна структура (рис. 5, б), зона транскристалізації (рис. 5, а), або дисперсна структура литого металу (рис. 5, в).

При підвищенні швидкості охолодження з 0,1 до 4,5 град/с зменшуються розміри зерен у металі приблизно утричі (з $22,2 \cdot 10^{-7}$ до $6,93 \cdot 10^{-7}$

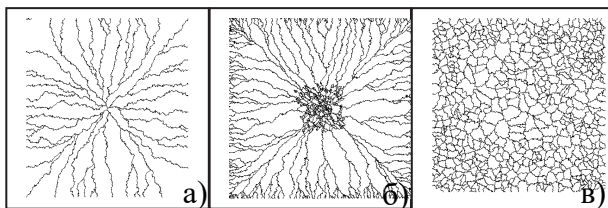


Рис. 5 Структури алюмінію, що одержані з використанням імітаційної моделі у різних умовах кристалізації:

- а) орієнтовані до центру кристаліти;
- б) класична тризонна структура;
- в) дисперсна структура литого металу

зерен у структурі твердого металу. При цьому на КО, які отримані з використанням моделі, змінюється часовий інтервал кристалізації.

При модифікуванні розплаву кристалізація сплавів має об'ємний характер. Це зумовлено появою нових твердих частинок у рідкому металі, які є центрами кристалізації сплаву. Стінки виливниці або форми є підкладками для зародження кристалів.

На кривій охолодження, яка розрахована за допомогою імітаційної моделі, для немодифікованого алюмінію (без урахування впливу стінок виливниці на процес кристалізації) існує рекалесценція температури, яка відповідає початку утворення центрів кристалізації у металі. За наявності у розплаві центрів кристалізації, рекалесценція зникає і криві охолодження майже не змінюються. У такий спосіб результати досліджень підтверджують адекватність імітаційної моделі процесів структуроутворення у сплавах при кристалізації.

м). Це обумовлено тим, що теплота кристалізації, яка виділяється при фазовому перетворенні, швидко відводиться у навколишнє середовище. У результаті цього переохолодження у розплаві знімається повільніше і довше зберігаються умови для появи нових центрів кристалізації. Центрів з'являється більше, що призводить до диспергування

зерен у структурі твердого металу. При цьому на КО, які отримані з використанням моделі, змінюється часовий інтервал кристалізації.

У Розділі 6 «Комп'ютерне моделювання кристалізації металів і сплавів» розроблено методику підготовки моделі для проведення обчислювального експерименту та представлено результати дослідження процесів структуроутворення у сплавах при їх кристалізації з допомогою імітаційного моделювання.

Підготовка імітаційної моделі для проведення досліджень починається з експериментів з реальним металом (сплавом). Потім параметри моделі підбирають так, щоб розрахункові результати корегували з експериментальними. У натурному експерименті фіксують КО з використанням системи КТА і проводять металографічні дослідження структури закристалізованого металу або сплаву. Регулюванням параметрів моделі досягається подібність КО та структур сплавів.

За допомогою імітаційної моделі, досліджували вплив швидкості охолодження вилівка на процес утворення центрів кристалізації у рідкому алюмінію та сплавах систем Al-Si та Al-Cu. Спершу проводили обчислювальний експеримент для умов кристалізації алюмінію, які були максимально наближені до рівноважних. Приймали, що відвід тепла з усіх сторін вилівка однаковий (як і в усіх подальших експериментах) з коефіцієнтом тепловіддачі $0,1 \text{ Дж}/(\text{м}\cdot\text{с}\cdot\text{К})$ при швидкості $V_{ox} \approx 0,00025 \text{ град/с}$. Змодельована КО має ділянку переохолодження і рекалесценцію температури. Ураховуючи повільну швидкість охолодження, можна аргументувати появу рекалесценції при охолодженні чистого алюмінію ідеальними умовами, які відтворює числовий експеримент. У такому разі метал є абсолютно чистим (не містить домішок) і утворюються умови для гомогенної кристалізації. Перші центри кристалізації у розплаві з'являються при зменшенні його температури нижче, ніж температура кристалізації $T_{кр}$ на інтервал метастабільності для утворення центрів ΔT_{m2} . Поява твердих часток супроводжується виділенням у рідкому алюмінії теплоти кристалізації. Температура металу підвищується до $\sim T_{кр}$ і спостерігається лише ріст кристалів, що вже утворилися. Усі зародки у центрі вилівку виникають стрибкоподібно за короткий інтервал ($\sim 0,2 \text{ с}$) часу, що свідчить про нестійкість процесу в момент початку кристалізації навіть при низькій швидкості охолодження.

Досліджено вплив швидкості охолодження на вид КО (рис. 6). Установлено, що при невеликих значеннях V_{ox} (до $1,67 \text{ град/с}$) КО майже не відрізняється від кривої, яка розрахована при наближених до рівнозначних умов. При збільшенні швидкості охолодження вигляд кривих змінюється. Поступово зникає рекалесценція температури на початку процесу кристалізації (рис. 6, б), а потім криві набувають вигляду із майже постійною температурою (рис. 6, в). Обґрунтувати зміни вигляду кривих охолодження алюмінію можна на основі аналізу залежностей кількості центрів кристалізації та швидкості їх утворення (рис. 7) від часу при кристалізації. При невеликій швидкості охолодження рідкого металу ($V_{ox} = 0,17 \text{ град/с}$) крива залежності кількості центрів кристалізації від часу $n = f(t)$ плавно зростає (рис. 7, а), а швидкість утворення центрів має один екстремум

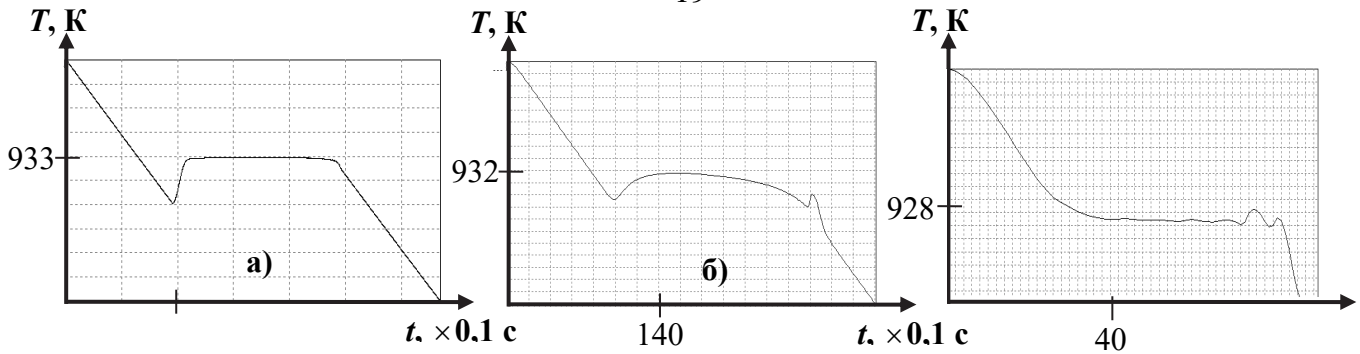


Рис. 6 Криві охолодження алюмінію при різних швидкостях охолодження V_{ox} : а) 0,17 град/с; б) 3,33 град/с; в) 6,67 град/с

(рис. 7, г). Тобто центри утворилися за короткий (0,3 с) інтервал часу, який збігається з часом появи центрів при повільному охолодженні. Після утворення центрів кристалізації, у розплаві виділяється теплота кристалізації і переохолодження зменшується до мінімального, що сприяє появі рекалесценції. Далі відбувається поступовий ріст кристалів, якому відповідає пряма на КО алюмінію. Структура закристалізованого металу при цьому складається з великих неорієнтованих зерен (рис. 7, ж).

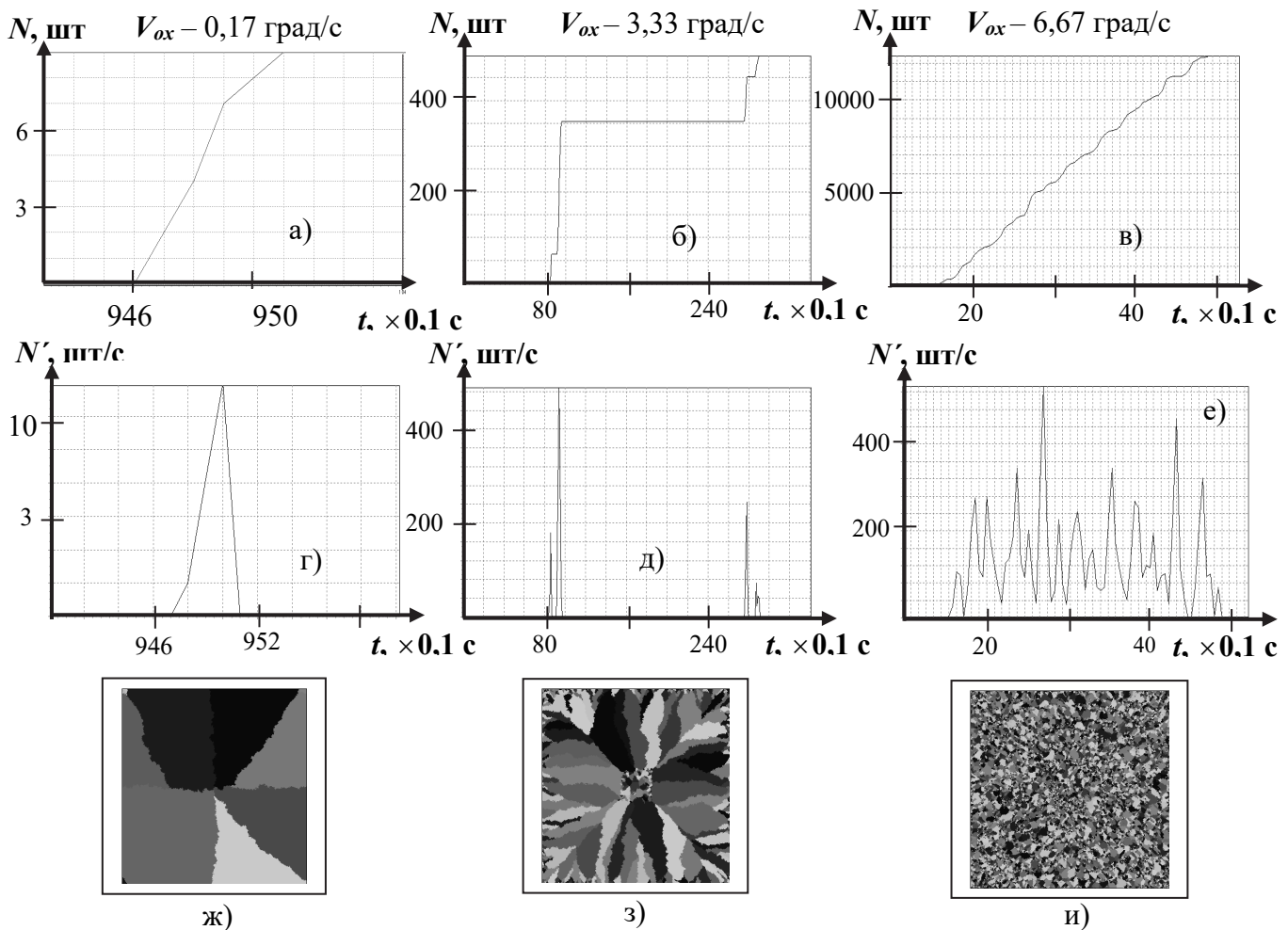


Рис. 7 Кількість часток твердої фази (а–в), швидкість їх утворення (г–е) та структури (ж–и), що розраховані для гомогенної кристалізації алюмінію в різних умовах охолодження

При збільшенні швидкості охолодження вилівка з'являються «сходинки» на кривій $n = f(t)$ (рис. 7, б), а швидкість утворення центрів має декілька екстремумів (рис. 7, д). Тобто процес утворення центрів кристалізації стає багатостадійним. При цьому відбуваються суттєві зміни КО: зменшується величина рекалесценції, температурна горизонтальна пряма зникає, спадає температура в кінці кристалізації алюмінію і з'являється невеликий пік (рис. 6, б). Структура закристалізованого алюмінію стає трizonною (рис. 7, з). Потім утворюється зона подовжених і орієнтованих до центру кристалів. У центрі існує невелика зона неорієнтованих зерен. При суттєвому збільшенні V_{ox} залежність $n = f(t)$ має «хвилястий» характер (рис. 7, в). Швидкість утворення центрів кристалізації стає періодичною у часі (рис. 7, е). При великій швидкості охолодження вилівка (рис. 6, в) структура алюмінію стає дисперсною (рис. 7, и).

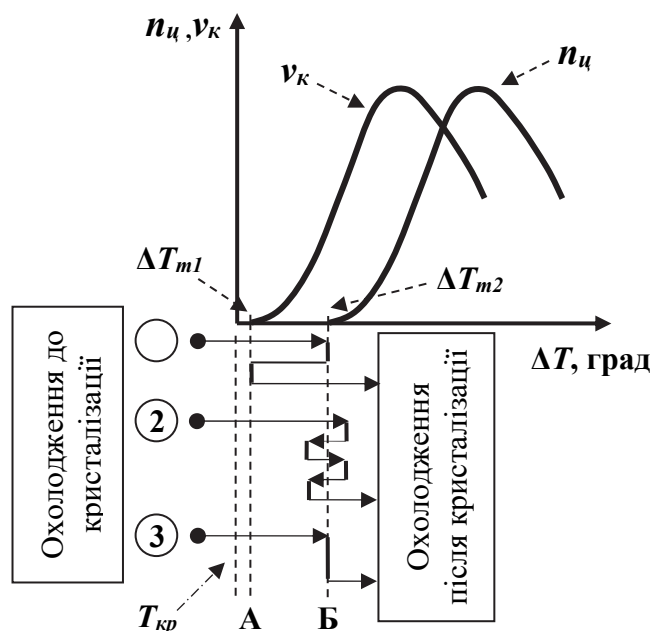


Рис. 8 Схематичне зображення процесів гомогенного утворення зародків твердої фази і їх росту при різних швидкостях охолодження:

ΔT – переохолодження; $n_{ц}$ – швидкість утворення центрів кристалізації; $v_{к}$ – лінійна швидкість росту кристалу; ΔT_{m1} – інтервал метастабільності для швидкості росту кристалу; ΔT_{m2} – інтервал метастабільності для швидкості утворення центрів кристалізації; $T_{кр}$ – теоретична температура кристалізації; А, Б – умовні лінії температури металу.

- 1 – низька швидкість охолодження;
- 2 – «середня» швидкість охолодження;
- 3 – висока швидкість охолодження

температура металу стає нижчою за температуру кристалізації $T_{кр}$ на інтервал метастабільності для утворення центрів кристалізації ΔT_{m2} (лінія Б). При цьому виділяється тепло кристалізації зі швидкістю, яка значно перевищує інтенсивність тепловідводу. У результаті цього температура розплаву підвищується до температури, яка нижча $T_{кр}$ на інтервал метастабільності росту кристалів ΔT_{m1} (лінія А). За таких умов нові центри кристалізації не

зникає, спадає температура в кінці кристалізації алюмінію і з'являється невеликий пік (рис. 6, б). Структура закристалізованого алюмінію стає трizonною (рис. 7, з). Потім утворюється зона подовжених і орієнтованих до центру кристалів. У центрі існує невелика зона неорієнтованих зерен. При суттєвому збільшенні V_{ox} залежність $n = f(t)$ має «хвилястий» характер (рис. 7, в). Швидкість утворення центрів кристалізації стає періодичною у часі (рис. 7, е). При великій швидкості охолодження вилівка (рис. 6, в) структура алюмінію стає дисперсною (рис. 7, и).

Зміни форми КО, в залежності від кількості центрів кристалізації і швидкості їх утворення від часу та структури закристалізованого металу, які спостерігаються в обчислювальному експерименті, обумовлені процесами, що показані на рис. 8. У разі повільного охолодження (рис. 8, поз. 1), поява часток твердої фази починається після того, як

з'являються, тільки ростуть кристали, які вже утворилися. У разі більш швидкого охолодження вилівка (рис. 8, поз. 2, 3) температура у розплаві знижується до лінії Б і з'являються умови для утворення нових центрів та їх росту. У результаті цього зменшується переохолодження в металі, що сприяє росту вже наявних кристалів. Такі процеси можуть відбуватися декілька разів, після цього кристалізація вилівка закінчується і метал просто охолоджується. Тобто швидкість охолодження сплаву є основним чинником, який впливає на процес утворення центрів при гомогенній його кристалізації.

Досліджено вплив швидкості охолодження на утворення центрів твердої фази у чистому алюмінії, який модифікований 0,1 %, 0,3 % та 0,5 % введених твердих елементів. Установлено, що при введенні 0,1 % модифікатора та невеликих швидкостях охолодження (до V_{ox} 5,00 град/с), центри кристалізації починають виникати (завдяки наявності переохолодження) у невеликій кількості в кінці кристалізації алюмінію. При

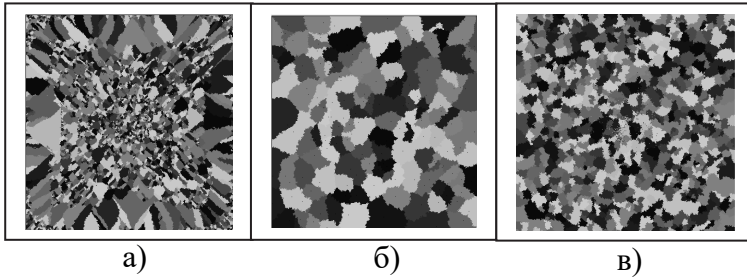


Рис. 9 Структури Al, які змодельовані при $V_{ox} = 5,00$ град/с: а) без модифікатора; б) 0,1 % модифікатора; в) 0,5 % модифікатора

коли швидкість охолодження алюмінію достатньо велика – $V_{ox} = 5,00-6,67$ град/с. При цьому диспергується структура закристалізованого алюмінію з утворенням компактних зерен у ньому (рис. 9). Тобто структура металу при його модифікуванні шляхом введення твердих часток, подрібнюється практично за рахунок їх наявності. Мимовільно завдяки наявності переохолодження, центри твердої фази можуть виникати у невеликій кількості і за великих швидкостей охолодження.

На прикладі кристалізації алюмінію за допомогою комп'ютерного експерименту, дослідили вплив зміни зовнішніх умов охолодження вилівка під час кристалізації на формування його структури. На рис. 10 показана структура алюмінію, яка була отримана багаторазовою зміною інтенсивності відведення тепла під час кристалізації вилівка. Спочатку дрібні зерна формувалися на границях вилівка в умовах високої швидкості охолодження. Потім інтенсивність відведення тепла з усіх боків симетрично зменшувалася, а розмір зростаючих зерен збільшувався. Через деякий час швидкість охолодження збільшувалася, потім зменшувалася, а потім знову збільшувалася. У результаті кінцева структура складається з декількох ділянок з різними формами та різним середнім розміром зерен у них (рис. 10).

збільшенні швидкості охолодження ($V_{ox} \sim 6,67$ град/с), утворення нових центрів кристалізації спостерігається упродовж всього періоду твердіння металу. При введенні у розплав модифікатора у кількості 0,3 % та 0,5 %, нові центри твердої фази утворюються самостійно,

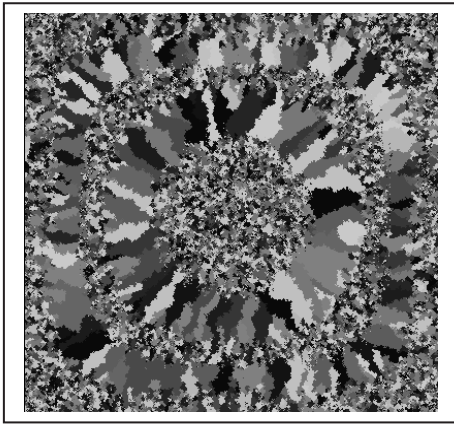


Рис. 10 Макроструктура алюмінію, що отримана зміною коефіцієнтів тепловіддачі у процесі кристалізації

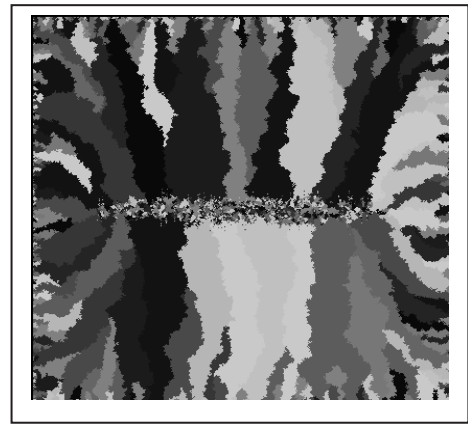
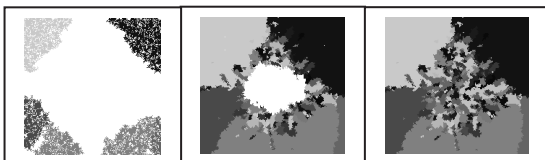


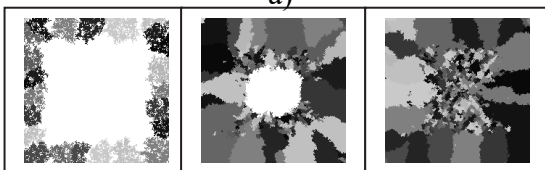
Рис. 11 Макроструктура алюмінію, яка змодельована асиметричною зміною коефіцієнтів тепловіддачі

Шляхом підбору параметрів моделі, також отримано складну алюмінієву структуру, в якій спостерігаються зерна різної форми, розмірів та орієнтації (рис. 11). Така структура алюмінію є результатом зміни швидкості охолодження та асиметричними величинами коефіцієнтів відведення тепла з різних сторін, значення яких також змінювались у процесі експерименту. Ймовірно, у цьому разі властивості реального металу матимуть анізотропію. Такі режими кристалізації складно реалізувати на практиці, але ці експерименти демонструють можливості цієї моделі. Тобто вона надає змогу в рамках комп'ютерного експерименту розробити методи

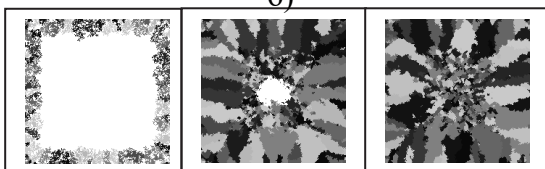
Початок кристалізації У процесі кристалізації Після кристалізації



а)



б)



в)

Рис. 12 Макроструктури сплаву Al-8,2%Si, які змодельовані при різних швидкостях охолодження V_{ox} : а) 0,17 град/с; б) 1,67 град/с; в) 6,67 град/с

управління процесом кристалізації для отримання необхідних властивостей литих виробів або уникнути зайвих витрат при реалізації реального експерименту, якщо кінцевий результат у ньому за допомогою моделі, передбачений негативним.

Процеси формування структури у сплаві Al-8,2%Si при різних швидкостях охолодження наведено на рис. 12. При зміні V_{ox} від 0,17 до 1,67 град/с на початку кристалізації сплаву утворюється невелика кількість великих зерен твердого розчину. Потім на границях цих зерен починає формуватися евтектика, яка заповнює центральну зону виливка при закінченні процесу його твердіння.

При підвищенні V_{ox} від 1,67 до 6,67 град/с, на початку кристалізації у сплаві формується більше зерен твердого розчину. Розмір таких зерен зменшується і вони утворюють безперервний фронт кристалізації. При цьому розподіл евтектичної складової у сплаві майже не змінюється протягом усього процесу кристалізації вилівка (рис. 12).

Отримані зміни у процесі формування макроструктури сплаву Al-8,2%Si обумовлені залежностями кількості центрів твердої фази N та швидкості їх появи $\frac{dN}{dt}$ від часу t (рис. 13 та рис. 14).

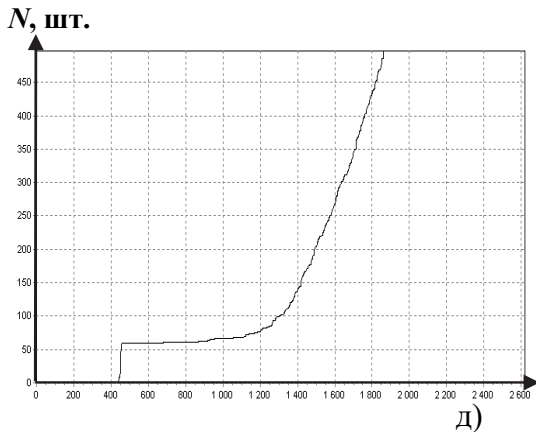


Рис. 13 Кількість центрів твердої фази у сплавi Al-8,2%Si при швидкості охолодження 3,33 град/с

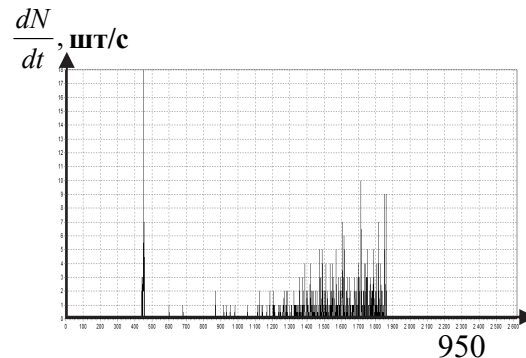


Рис. 14 Швидкість процесу утворення центрів твердої фази при кристалізації сплаву Al-8,2%Si, що охолоджується з інтенсивністю 3,33 град/с

Згідно з рис. 13 на першому етапі кристалізації сплаву спостерігається стрибок кількості центрів твердої фази N , який співпадає з початком утворення твердого розчину. Через деякий час t центри кристалізації у розплаві знову утворюються і цей процес повторюється майже до кінця твердіння вилівка. Другий етап появи центрів кристалізації твердої фази на залежності $N = f_1(t)$ відповідає початку формування евтектики у сплавi. Залежності швидкості утворення центрів кристалізації твердої фази від часу $\frac{dN}{dt} = f_2(t)$ (рис. 14) показують, що початковому етапу кристалізації сплаву відповідає перший пік. Другий етап починається з моменту утворення евтектики і продовжується до закінчення кристалізації вилівка. Тобто на першому етапі всі центри у сплавi з'являються за короткий час (декілька секунд). Такий стрибок при появі центрів кристалізації підтверджує, що процес стає нестійким на початку кристалізації сплаву навіть при низьких швидкостях охолодження. При різних швидкостях охолодження вилівку форма кривих $N = f_1(t)$ та $\frac{dN}{dt} = f_2(t)$ не порушується, а змінюються лише кількісні величини.

Розроблена комп'ютерна модель кристалізації здійснена для бінарних сплавів з евтектикою. Сплав Al-3,8%Cu має складну діаграму стану. Тому

при моделюванні його кристалізації, використовували окрему її частину до утворення сполуки Cu-Al₂.

Процес структуроутворення у сплаві Al-3,8%Cu при різних швидкостях його охолодження, наведено на рис. 15. Тобто при V_{ox} 0,17 ÷ 0,67 град/с на

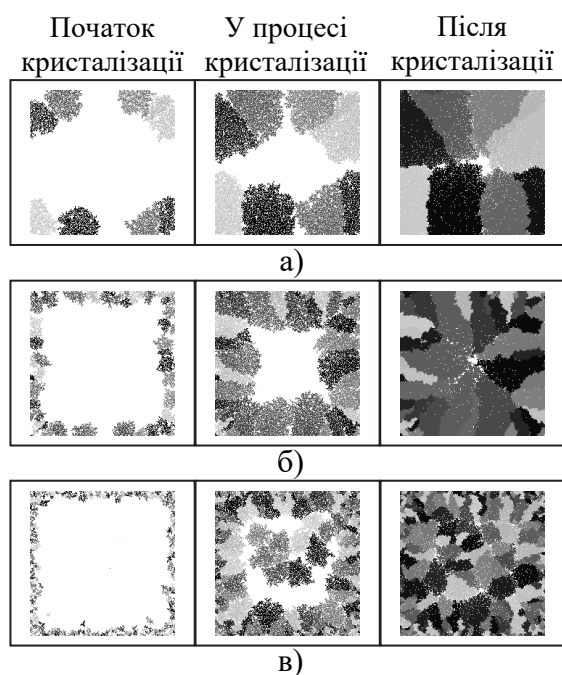


Рис. 15 Макроструктури сплаву Al-3,8%Cu, які твердіють при різних швидкостях охолодження:

а) 0,17 град/с; б) 1,67 град/с; в) 6,67 град/с

спочатку спостерігається інтенсивна поява у металі центрів твердої фази, а потім з'являється горизонтальна ділянка (рис. 16, б), що свідчить про зупинку процесу утворення нових центрів. Потім частки твердої фази починають знову утворюватися з формуванням у центрі виливка зерен твердого розчину.

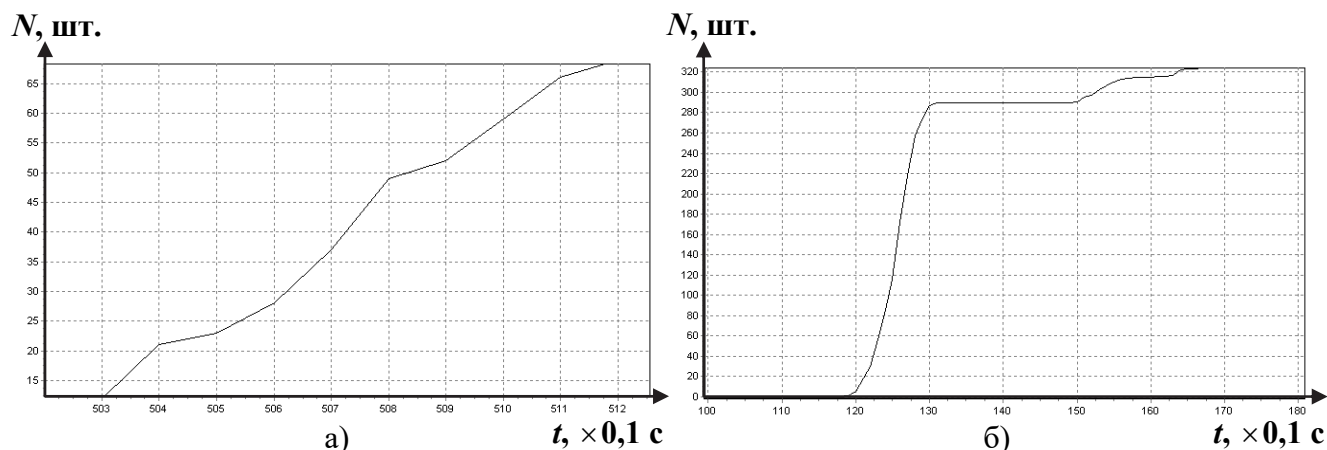


Рис. 16 Залежність кількості центрів твердої фази, що утворюються у сплаві Al-3,8%Cu при швидкостях охолодження: а) 1,67 град/с; б) 6,67 град/с

початку кристалізації утворюється відносно мало великих зерен твердого розчину. При підвищенні швидкості охолодження виливка (понад 1,00 град/с), зерна зменшуються і формується дисперсна структура з невеликими зернами біля стінок ливарної форми. При швидкостях охолодження 5,00 ÷ 6,67 град/с під час кристалізації спостерігається формування у розплаві окремих об'ємів твердої фази (рис. 15, в), що зумовлено нелінійністю процесу.

Залежності $\frac{dN}{dt}$ від часу t

(рис. 16) свідчать про те, що на початку кристалізації у розплаві утворюється багато центрів твердої фази, які потім формують зерна твердого розчину. При швидкостях охолодження 5,00 ÷ 6,67 град/с

У першому розділі цієї роботи запропонована формула для визначення критичного радіуса зародка кристалізації. Вона отримана методом аналогій між пересуванням фронту розділу «рідке – тверде» і поширенням хвилі перемикачів у бістабільному клітинному автоматі тригерного типу:

$$r^* = K_f \frac{\lambda}{c\rho V_{cul}}, \quad (13)$$

де: λ – коефіцієнт теплопровідності; c – питома теплоємність; ρ – щільність; $V_{охл}$ – швидкість охолодження у досліджуваній системі; K_f – коефіцієнт, який має розмірність градієнта температур.

Характеристики металів, що входять до (13), досить просто визначаються експериментально. Зміна їх значень може впливати на критичну величину радіуса зародка твердої фази і на кількість центрів, що приводить до зміни структури закристалізованого металу. Аналіз цього впливу дасть змогу спростити як пошук нових методів управління структурою металів, так і створення перспективних ливарних технологій. Формула (13) враховує швидкість охолодження металу при кристалізації, що суттєво відрізняє її від класичної термодинамічної формули.

Імітаційну модель формування структури металів у процесі кристалізації доцільно залучити для підтвердження адекватності виразу (13), шляхом встановлення лінійності залежності між $R_{кр}$ та $V_{ох}$, що у натурному експерименті із реальним металом зробити неможливо. Така модель не дає змоги безпосередньо визначити критичний розмір зародка кристалізації. Це обумовлено тим, що мінімальний розмір частки твердої фази, яка з'явилася у результаті моделювання, дорівнює розміру елемента клітинного автомата. Водночас його розмір визначається геометричними розмірами системи і розмірністю масивів, що задаються при програмуванні алгоритму моделі. Геометричні розміри системи задаються при налаштуванні моделі, а розмірність масивів визначається обчислювальними можливостями комп'ютера (об'ємом пам'яті, швидкодією тощо). При цьому важливим є те, що при налаштуванні моделі, її параметри вибиралися у такий спосіб, щоб розмір елемента клітинного автомата відповідав порядку критичного розміру зародка у розплаві поблизу температури кристалізації (10^{-6} – 10^{-5} м). з огляду на те, що чим менший розмір критичного зародка твердої фази, тим більше центрів кристалізації повинно утворитися у рідкому металі, адекватність рівняння (13) можна довести, встановивши лінійність між кількістю утворених центрів кристалізації і швидкістю охолодження.

Моделювання і розрахунки здійснювали для дев'яти металів: Ag, Al, Au, Bi, Cu, Ni, Pb, Sn, Zn. Для кожного з металів швидкості охолодження ($V_{ох}$) приймали значення: 0,17; 0,33; 0,67; 1,00; 1,67; 2,00; 3,50; 5,00; 6,00; 6,67 град/с. Кристалізацію чистих металів моделювали для зразка розміром $0,025 \times 0,025$ м. Розмірність використаних у комп'ютерній моделі числових масивів становила 400×400 . Тобто порядок розміру елемента клітинного автомата становив 10^{-5} .

Особливістю цієї імітаційної моделі є застосування генератора випадкових чисел, тому кожен результат моделювання має ймовірнісний

характер. Унаслідок цього для кожної швидкості охолодження розрахунки повторювали 11 разів і потім визначали середнє арифметичне значення кількості утворених центрів кристалізації.

За результатами розрахунків визначали коефіцієнти парної кореляції ($R_{x,y}$) між кількістю утворених центрів кристалізації і швидкістю

Таблиця 1

**Значення коефіцієнтів кореляції між швидкістю охолодження
виливка і кількістю утворених центрів кристалізації**

Метал	Ag	Al	Au	Bi	Cu	Ni	Pb	Sn	Zn
$R_{x,y}$	0,998	0,999	0,988	0,992	0,994	0,997	0,998	0,998	0,999

охолодження (табл. 1). Для всіх металів коефіцієнти кореляції позитивні, а їх величини перевищують 0,98 (при пороговому значенні $R_{\text{теор.}} = 0,667$ і довірчій ймовірності 0,95). Це свідчить про те, що при збільшенні швидкості охолодження збільшується кількість центрів кристалізації і подрібнюється структура металу у твердому стані. Крім цього, такі значення коефіцієнтів кореляції свідчать про те, що для всіх дев'яти металів залежність між швидкістю охолодження і кількістю утворених центрів кристалізації є лінійною, а адекватність формули (13) можна вважати доведеною.

Аналіз результатів досліджень показує, що при гомогенній кристалізації сплаву внаслідок наявності інтервалу метастабільності, центри кристалізації твердої фази починають утворюватися у розплаві з деяким запізненням відносно температури ліквідус. Переохолодження у металі зростає і весь його об'єм стає переохолодженим.

Для невеликих за розміром систем ($0,03 \times 0,03 \text{ м}^2$) при швидкостях охолодження $V_{\text{охл}} \geq 1$ град/с переохолодження швидко розповсюджується

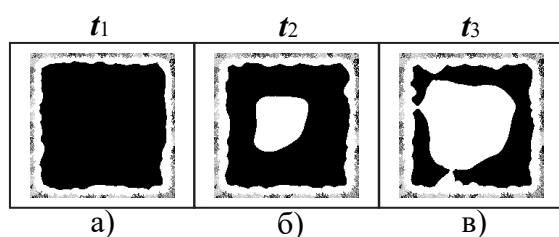


Рис. 17 Процес формування переохолодження у сплаві Al-Si в різні моменти часу

уздовж перетину виливка і тільки потім починають утворюватися перші центри твердої фази, що свідчить про нелінійність процесу кристалізації. Збільшення геометричних розмірів системи призводить до формування зони переохолодження, яка має складну форму (рис. 17). На початку кристалізації сплаву біля стінок форми виникає переохолоджена область (білий колір) і появляються частки твердої фази (різнокольорові ділянки). Потім у центрі виливка виникає переохолоджена зона (рис. 17, б), яка розповсюджується на всьому об'ємі розплаву (рис. 17, в). Наявність такої складної зони переохолодження є результатом нелінійного стану системи і

може призводити до появи різних дефектів у структурі закристалізованого сплаву.

Величина градієнту температур при геометричних розмірах системи $0,025 \times 0,025$ м складає 0,5–3,5 град. для сплаву Al – 8,2%Si та 0,1–2,0 град. для сплаву Al – 3,8%Cu. Малі температурні градієнти у розплаві свідчать, що ступінь нерівноважності системи визначається насамперед швидкістю її охолодження.

Отже, обчислювальний експеримент за допомогою системи імітаційного моделювання структуроутворення у сплавах дає змогу визначати кількісні параметри процесу кристалізації, що зробити у реальних умовах виробництва литих виробів майже неможливо.

ВИСНОВКИ

1. Розроблено наукові принципи побудови багатофункціонального інформаційно-технологічного комплексу для прогнозування структури і властивостей ливарних сплавів, який передбачає імітаційну модель, яка поєднує дію клітинного автомату з класичними уявленнями про теплопередачу та дифузію у металічних розплавах, та підсистему комп'ютерного термічного аналізу. Запропонований комплекс дає змогу досліджувати перебіг кристалізації металів та сплавів за різних умов.

2. Установлена залежність критичного радіуса зародка твердої фази при гомогенній кристалізації ($R_{кр}$) від коефіцієнта теплопровідності (λ), питомої теплоємності (c), густини (ρ) та швидкості охолодження металу ($V_{ох}$).

3. Розроблено імітаційні моделі кристалізації, які дають змогу досліджувати перебіг структуроутворення при твердінні сплавів, динаміку кристалізації виливків за різних умов охолодження, а також вплив модифікування розплавів.

4. На прикладі кристалізації алюмінію та його сплавів, доведено адекватність імітаційної моделі структуроутворення. Створена модель дає підстави розраховувати температурні криві охолодження вилівка та визначати такі параметри його кристалізації, як кількість твердої фази та швидкість її утворення при фазових взаємодіях.

5. Установлено, що крива охолодження алюмінієвого розплаву при швидкості охолодження 0,00025 град/с має ділянку переохолодження і рекалесценцію температури, яка з'являється при появі осередків твердої фази. Це свідчить про те, що передкристалізаційний стан розплаву, який близький до рівноважного, стає нестійким під час твердіння вилівка навіть за невеликих швидкостей охолодження. При малих швидкостях охолодження залежність кількості утворених центрів кристалізації у розплаві від часу $N = f(t)$ є монотонно зростаючою, а часова залежність швидкості їх утворення має екстремум. При збільшенні інтенсивності охолодження сплаву з'являються «сходьки» на залежності $N = f(t)$. Водночас залежність швидкості утворення осередків твердої фази має кілька піків. Тобто центри кристалізації у розплаві виникають як на початку твердіння сплаву, так і в кінці. Подальше

збільшення швидкості охолодження призводить до появи багатьох «сходинок». На часовій залежності швидкості утворення осередків твердої фази кількість піків збільшується, а поява центрів кристалізації у розплаві стає майже періодичною.

6. З'ясовано, що при гомогенній кристалізації доевтектичних Al-Si сплавів, кристалізація яких завершується евтектичним перетворенням, усі зародки твердого розчину на основі алюмінію з'являються за короткий час, а механізм їх утворення аналогічний зазначеному механізму при кристалізації чистого алюмінію. Після завершення кристалізації твердого розчину, кристалізація евтектичної складової також починається з утворення зародків.

7. У доевтектичних сплавах системи Al-Cu, вміст міді в яких не перевищує її максимальної розчинності у твердому розчині на основі алюмінію, які охолоджуються зі швидкістю 5,0–6,67 град/с, центри кристалізації утворюються в два етапи. На початку кристалізації утворюється твердий розчин. На другому етапі у рідко-твердому сплаві перед фронтом твердої фази також з'являються центри кристалізації.

8. На основі узагальнення результатів дослідження, встановлено, що у системі комп'ютерного термічного аналізу Al-Si, Al-Cu і Al-Mg ливарних сплавів абсолютна похибка вимірювання температури не повинна перевищувати 2,0 град. при роздільній здатності 0,3 град. та частоті дискретизації термограми 3,0 Гц. Запропоновано застосування безконтактного термошумового термометра. Розрахована його передаточна характеристика та розроблено макет конструкції.

9. Запропоновано математичні моделі кристалізації чистого металу та бінарних сплавів, що є внеском у подальший розвиток теорії твердіння металів та сплавів. Ці моделі дають змогу за кривими охолодження визначати відношення теплоти кристалізації до питомої теплоємності, а також кількість твердої фази у будь-який момент кристалізації.

10. Створено математичні моделі, які дають підстави визначати вміст легуючих компонентів сплавів за кривою охолодження, а також прогнозувати механічні властивості (σ_b , δ) сплавів систем Al-Si та Al-Si-Mg. Адекватність математичних моделей перевірена теоретично та у промислових умовах. Підтверджено, що за допомогою підсистеми КТА, можна визначати вміст заліза в алюмінієвих ливарних сплавах за піком на першій похідній кривій охолодження.

11. Розроблено методику оцінки ступеня модифікованості евтектичної складової у ливарних алюмінієвих сплавах Al+(9,0–12,0)%Si та Al+(7,0–8,0)%Si+(0,4–0,5)%Mg за допомогою системи комп'ютерного термічного аналізу. Запропоновано алгоритм для визначення ступеня модифікованості розплавів. З метою збільшення точності прогнозування службових властивостей литого металу, створено класифікатор кривих охолодження.

12. Результати промислового випробування системи комп'ютерного термічного аналізу в умовах ДП «Металургія» (м. Київ) та ВАТ «Артеммаш» (м. Київ) підтверджують її ефективність для експрес-аналізу стану алюмінієвих розплавів. Система імітаційного моделювання кристалізації

включена в освітній процес у Національному технічному університеті України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського» (м. Київ) та у Сумському державному університеті (м. Суми). Результати досліджень доцільно застосовувати у навчально-наукових програмах закладів вищої освіти для підготовки спеціалістів у галузі кристалізації металів.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Видання, що включені до міжнародних наукометричних баз даних

1. Donii O., Khristenko V., Omelko L., Kotliar S. Mathematical models of calculations of parameters of crystallization of binary alloys by means of computer thermal analysis // *Mathematical modeling*. 2018. Vol. 3. P. 99–101. (Web of Science, Google Scholar).
2. Khristenko V., Omelko L., Donii O. Calculation of Temperature Dependence of Thermal Effects at Cooling of Metal Alloys // *Machines. Technologies. Materials*. 2018. Vol. 9. P. 374–377. (Web of Science, Google Scholar).
3. Donii O., Narizhna T., Voron M., Berest D. Influence of the External Magnetic Field on the Structure and Properties of the Hypereutectic Aluminum-Silicon Alloy // *Materials Science. Non-equilibrium Phase Transformations*. 2018. Vol. 3. P. 79–82. (Web of Science, Google Scholar).
4. Donii O., Kulinich A., Khristenko V. Computer System for the Predicting the Structure and Properties of Cast Metal Products // *International scientific journal Mathematical Modeling*. 2017. P. 180–183. (Web of Science, Google Scholar).
5. Donii O. Modeling of Metal Crystallization by Means of Cellular Automation // *Materials science. Non-equilibrium Phase Transformations*. 2017. Vol. 4. P. 150–153. (Web of Science, Google Scholar).
6. Доний А.Н. Физические принципы построения имитационной модели кристаллизации // *Вісник СевНТУ. Вип. 148: Механіка, енергетика, екологія: зб. наук. пр. / Севастоп. нац. техн. ун-т. Севастополь: Вид-во СевНТУ, 2014. С. 112–116. (Google Scholar).*
7. Доний А.Н. Критический радиус зародыша твердой фазы при гомогенной кристаллизации металлов // *Вісник СевНТУ. Вип. 137: Механіка, енергетика, екологія: зб. наук. пр. / Севастоп. нац. техн. ун-т. Севастополь: Вид-во СевНТУ, 2013. С. 230–234. (Google Scholar).*
8. Доний А.Н., Шпак Д.Е., Шаповал А.И. Анализ параметров пробоотборника для системы оценки качества расплавов с помощью компьютерного термического анализа // *Вісник СевНТУ. Вип. 133: Механіка, енергетика, екологія: зб. наук. пр. Севастополь: Вид-во СевНТУ, 2012. С. 156–165. (Google Scholar).*
9. Доній О.М., Кулініч А.А., Морозова Г.О. Алгоритм оцінки ступеню модифікованості алюмінієвих ливарних сплавів з використанням комп'ютерного термічного аналізу // *Металознавство та обробка металів*. 2011. № 3 (59). С. 39–43. (Google Scholar).

10. Доній О.М. Імітаційне моделювання гомогенної та гетерогенної кристалізації Al та сплаву Al-Si // Вісник НТУУ «КПІ» Машинобудування. 2011. № 61. Том 2. С. 72–78. (Google Scholar).

11. Доній О.М. Математичні моделі твердіння сплавів з евтектикою для розрахунків параметрів кристалізації по кривій охолодження у комп'ютерному термічному аналізі // Вісник СевНТУ. Вип. 110: Механіка, енергетика, екологія: зб. наук. пр. / Севастоп. нац. техн. ун-т. Севастополь: Вид-во СевНТУ, 2011. С. 126–131. (Google Scholar).

12. Доній О.М. Математичні моделі для розрахунків параметрів кристалізації та попередньої фільтрації кривої охолодження при комп'ютерному термічному аналізі // Вісник СевНТУ. Вип. 110: Механіка, енергетика, екологія: зб. наук. пр. / Севастоп. нац. техн. ун-т. Севастополь: Вид-во СевНТУ. 2010. С. 193–197. (Google Scholar).

13. Доній О.М. Теоретичне визначення критичного розміру зародка при гомогенній кристалізації з використанням синергетики // Металознавство та обробка металів. 2010. № 3 (55). С. 17–20. (Google Scholar).

14. Бялік О.М., Доній О.М., Кулініч А.А., Рябініна О.О., Котляр С.М. Вплив параметрів кристалювання на структуру та механічні властивості ливарних сплавів системи Al-Mg-Zn // Фізико-хімічна механіка матеріалів. 2004. Том 40. № 1. С. 118–119. (Skopus, Google Scholar).

15. Byalik O.M., Donii O.M., Kulinich A.A., Ryabinina O.O., Venikov S.O. Simulation Model of Crystallization and Structuring of Aluminum Alloys // Materials Science. 2003. Vol. 39 (6). P. 863–868. Передруковано з Бялік О.М. Імітаційна модель кристалювання та структурування алюмінієвих сплавів / Бялік О.М., Доній О.М., Кулініч А.А., Рябініна О.О., Веніков С.О. // Фізико-хімічна механіка матеріалів. 2003. Том 39. № 6. С. 88–91. (Skopus, Web of Science, Google Scholar).

16. Бялик О.М., Доний А.Н., Шаповал А.И., Кулинич А.А. Система компьютерного термоанализа силуминов // Литейное производство. 1998. № 7. С. 41–42. (Skopus).

17. Бялик О.М., Голуб Л.В., Доний А.Н., Шаповал А.И. Применение компьютерной системы контроля качества расплавов // Литейное производство. 1996. № 2. С. 28–30. (Skopus).

18. Бялик О.М., Доний А.Н., Алексеев В.Ю. Моделирование термошумовых индуктивных преобразователей для измерения температур металлов // Электричество. 1994. № 1. С. 68–70. (Skopus, Google Scholar).

19. Доний А.Н., Алексеев В.Ю. Расчет сопротивления потерь и индуктивности металлического цилиндра в продольном магнитном поле // Электричество. 1992. № 1. С. 60–62. (Skopus).

20. Бялик О.М., Доний А.Н., Алексеев В.Ю. Переменное магнитное поле в проводящем цилиндре с нелинейным распределением температуры по радиусу // Электричество. 1991. № 9. С. 82–83. (Skopus, Google Scholar).

Фахові видання України

21. Кулинич А.А., Доний А.Н., Христенко В.В. Моделирование влияния параметров структуры на механические свойства сплава АМгбл // Процессы литья. 2018. № 1. С. 42–48.

22. Кулініч А.А., Доній О.М., Котляр С.М. Вплив параметрів кристалізації на структуру і механічні властивості сплавів АМгбл та АМг10 // Вісник інженерної академії України. 2012. Випуск № 1. С. 196–200.

23. Доній О.М. Комп'ютерне моделювання утворення зародків твердої фази // Машинознавство. 2012. № 7–8. С. 57.

24. Доній О.М., Кулініч А.А., Морозова Г.О., Котляр С.М. Прогноз властивостей ливарних сплавів на основі алюмінію за допомогою комп'ютерного термічного аналізу // Вестник ДГМА. 2011. № 4 (25). С. 71–77.

25. Доній О.М. Імітаційна модель структуроутворення при кристалізації // Вісник Донбаської державної машинобудівної академії. Збірник наукових праць. 2009. № 1 (15). С. 116–120.

26. Доній О.М., Кулініч А.А., Янов О.М., Рябініна О.О. Комп'ютерне моделювання структуроутворення при кристалізації металів та сплавів // Фізика і хімія твердого тіла. 2003. Том 4. № 3. С. 585–588.

27. Телющенко И.Ф., Огородник И.В., Доний А.Н. Оптимизация процессов структурообразования керамических масс системы монтмориллонитовая глина–некондиционное сырьё природного и техногенного происхождения // Строительные материалы и изделия. 2003. № 7. С. 42–45.

28. Телющенко И.Ф., Огородник И.В., Доний А.Н., Крупа А.А. Разработка математической модели взаимодействия компонентов керамической массы // Строительные материалы и изделия. 2002. № 5. С. 3–6.

29. Чернега С.М., Доний А.Н., Лоскутов В.Ф. Критерии оценки и прогнозирование работоспособности защитных покрытий в микроударных условиях кавитации // Металлофизика, новейшие технологии. 2001. Том 23. № 11. С. 1473–1482.

30. Петухова А.А., Доний А.Н., Чайковский А.А., Сыропоршнев Л.Н., Сёмик А.П. Процессы диффузии углерода деструкции пенополистирола в металл при литье по газифицируемым моделям // Процессы литья. 1997. № 2. С. 40–44.

Інші видання

31. Бялик О.М., Доний А.Н., Голуб Л.В., Шаповал А.И., Пиковский В.С. Математическая модель затвердевания пробы для экспресс-анализа качества литейных сплавов методом термического анализа // Литейное производство. 1989. № 10. С. 12–13.

32. Доний А.Н., Алексеев В.Ю. Фрактальные имитационные модели эволюции структуры материалов в процессе фазовых превращений // Сборник научных и методических трудов КПИ (к 50-летию инженерно-физического факультета). 1994. Ч. II. С. 47–51.

33. Бялік О.М., Доній О.М., Голуб Л.В. Прогнозування властивостей металів і сплавів методом комп'ютерного термічного аналізу // Препринт. Київ: Політехніка, 2005. 114 с.

Тези доповідей

34. Доній О.М., Фон Прус М.А., Стрілець Т.А. Інформаційно-технологічний комплекс прогнозування структури і властивостей металів і сплавів // IX Міжнародна науково-практична конференція «Нові матеріали і технології в машинобудуванні. 2017» (30–31 травня 2017 р.). Київ: НТУУ «КПІ», 2017. С. 55–56.

35. Доній О.М., Фон Прус М.А. Моделювання структуроутворення при кристалізації сплаву Al-8,2%Si // Міжнародна наукова конференція «Матеріали для роботи в екстремальних умовах – 6» (1–2 грудня 2016 р.). Київ: НТУУ «КПІ», 2017. С. 373–375.

36. Доній О.М., Кулініч А.А. Розрахунок кінетичних параметрів кристалізації сплавів типу твердого розчину на основі даних термічного аналізу // V Международная научно-техническая конференция «Перспективные технологии, материалы и оборудование в литейном производстве» 21–25 сентября 2015 г. Краматорск ДГМА 2015 г. С. 56–59.

37. Доний А.Н. Компьютерная модель кристаллизации металлов и сплавов // Международный научный журнал «Acta Universitatis Pontica Euxinus». Дніпропетровськ; Варна, 2015. Том 2. С. 388–393.

38. Доній О.М. Термошумовий вимірювач температури для системи управління якістю ливарних розплавів на основі термічного аналізу // Международный научный журнал «Acta Universitatis Pontica Euxinus». Дніпропетровськ; Варна, 2013. Том III. С. 463–465.

39. Доній О.М. Система контролю і управління якістю ливарних розплавів на основі комп'ютерного термічного аналізу // Международный научный журнал «Acta Universitatis Pontica Euxinus». Дніпропетровськ; Варна. 2011. Том III. С. 84–87.

40. Доний А.Н. Особенности вычислительного эксперимента с имитационной моделью кристаллизации металлов и сплавов // Международная научно-практическая конференция-выставка «Литейное производство: технологии, материалы, оборудование, экономика и экология», 12–14 декабря 2011 г. Киев, 2011. С. 84–85.

41. Доній О.М., Кулініч А.А., Шпак Д.Ю. Особливості математичної обробки кривої охолодження в системі контролю якості на основі КТА // X Міжн. наук.-техн. конференція «Приладобудування 2011: стан і перспективи» 28–29 квітня 2011 р., м. Київ, збірник тез доповідей. Київ, 2011. С. 133.

42. Доній О.М., Шпак Д.Ю., Кулініч А.А. Методика оцінки основних параметрів вимірювального каналу для комп'ютерного термічного аналізу // IX Міжнародна науково-технічна конференція «Приладобудування 2010: стан і перспективи» 27–28 квітня 2010 р., м. Київ, збірник тез доповідей. Київ, 2010. С. 124–125.

43. Доній О.М., Кулініч А.А., Шпак Д.Ю. Конструкція термошумового перетворювача з магнітним зв'язком для безконтактного вимірювання температури // VIII Міжнародна науково-технічна конференція «Приладобудування 2009: стан і перспективи» 28–29 квітня 2009 р. , м. Київ, збірник тез доповідей. Київ, 2009. С. 109–110.

44. Доній О.М., Кулініч А.А. Синергетика при кристалізації // Міжнародна НТК «Надежность и долговечность механизмов, элементов конструкций и биомеханических систем». Севастополь, 2008. С. 341–344.

45. Бялик О.М., Доний А.Н., Шаповал А.И., Алексеев В.Ю., Янов А.Н. Персональные ЭВМ в системах контроля качества литейных сплавов на основе термического анализа // Тез. докл. НТК «Современные технологические процессы в литейном производстве». Киев: РДЭНТП, 1991. С. 12–13.

46. Доний А.Н., Алексеев В.Ю., Янов А.Н. Автоматизированная система научных исследований для термического анализа жидких металлов и сплавов // III Республиканская НТК «Теория и технология производства отливок из сплавов цветных металлов». Владикавказ, 1991. С. 38–39.

47. Доний А.Н., Духно Л.А. Детализация алгоритма оценки качества расплавов методом термического анализа путем классификации кривых охлаждения // III Республиканская НТК «Теория и технология производства отливок из сплавов цветных металлов». Владикавказ, 1991. С. 23–24.

48. Доний А.Н., Шаповал А.И., Янов А.Н. Опыт применения локальной системы экспресс-контроля качества цветных сплавов в литейных цехах машиностроительных заводов // Тез. докл. Респ. НТС «Микропроцессорные системы управления технологическими процессами в ГПС». Одесса: ОПИ, 1990. С. 162–164.

49. Доній О., Лаврова Т. Автоматизований комплекс прогнозування якості розплавів // 12-й Міжнародний симпозиум українських інженерів-механіків у Львові, 28–29 травня 2015 р. Львів, 2015. С. 109–110.

АНОТАЦІЯ

Доній О.М. Комп'ютерні моделі для вивчення процесів формування структури в ливарних алюмінієвих сплавах при їх кристалізації. – *Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.*

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора технічних наук зі спеціальності 05.16.04 – ливарне виробництво. – Фізико-технологічний інститут металів та сплавів НАН України. – Київ, 2021.

У роботі розроблено наукові принципи створення комп'ютерних моделей кристалізації і комп'ютерного термічного аналізу сплавів, з метою дослідження і визначення оптимальних технологічних режимів отримання виливків із заданими властивостями і створені комп'ютерні моделі для отримання виливків з алюмінієвих сплавів з необхідними структурою і властивостями. На основі сучасних уявлень про процеси зародження і росту кристалів, розроблено комп'ютерну модель кристалізації металевих сплавів

при різних умовах охолодження і способах їх модифікації. Така система дає змогу розраховувати параметри кристалізації сплавів, визначати розмір зерна і розподіл елементів у литві. На прикладі кристалізації алюмінію і його сплавів, шляхом порівняння результатів моделювання і експериментальних даних, доведено адекватність створених комп'ютерних методів дослідження.

Дослідженнями, які виконані запропонованим методом з розробленою імітаційною моделлю, встановлено, що крива охолодження чистого алюмінію при швидкості охолодження 0,00025 град/с, має ділянку переохолодження і рекалесценцію температури при появі частинок твердої фази у рідкому металі. Це свідчить про те, що передкристалізаційний стан металу, який близький до рівноважного, стає нестійким при затвердінні вилівка навіть за невеликих швидкостей охолодження. При малих швидкостях охолодження залежність кількості центрів кристалізації, що утворилися в розплаві, від часу $N = f(t)$, монотонно зростає, а часова залежність швидкості їх утворення має екстремум. При збільшенні інтенсивності охолодження сплаву на залежності $N = f(t)$ з'являються «сходинок», а часова залежність швидкості утворення часток твердої фази має кілька піків. Це свідчить про те, що центри кристалізації у розплаві виникають як на початку затвердіння металу, так і в кінці. При подальшому збільшенні швидкості охолодження на залежності $N = f(t)$ з'являється багато «сходинок», а на залежності швидкості утворення часток твердої фази збільшується кількість піків з періодичною появою центрів кристалізації у розплаві.

Установлено, що при гомогенній кристалізації доєвтектичних Al-Si сплавів, центри кристалізації твердого розчину на основі алюмінію з'являються протягом короткого часу, а механізм їх утворення аналогічний процесу кристалізації чистого алюмінію. Після завершення процесу утворення твердого розчину кристалізація евтектичної складової починається з появи центрів кристалізації у ній.

У доєвтектичних сплавах системи Al-Cu, вміст міді в яких не перевищує її максимальної розчинності у твердому розчині на основі алюмінію і які охолоджуються зі швидкістю 5,0–6,67 град/с, центри кристалізації утворюються в два етапи. На початку кристалізації утворюється твердий розчин. На другому етапі у рідко-твердому сплаві перед твердою фазою також з'являються центри кристалізації.

Узагальнено інформацію про доцільність використання систем комп'ютерного термічного аналізу для вивчення процесів кристалізації і формування властивостей у сплавах. Визначено основні параметри її вимірювального каналу і оптимізовано алгоритми математичної обробки кривих охолодження сплавів на основі алюмінію.

Запропоновано методи дослідження процесів кристалізації чистого металу і бінарних сплавів, які дають змогу за кривими охолодження визначати співвідношення теплоти кристалізації до питомої теплоємності і кількість твердої фази у вилівках у будь-який час їх затвердіння, що є подальшим розвитком теорії затвердіння металів і сплавів.

Складено алгоритм для визначення ступеня модифікування евтектики у ливарних алюмінієвих сплавах $Al + (9,0-12,0)\% Si$ і $Al + (7,0-8,0)\% Si + (0,4-0,5)\% Mg$ з використанням системи комп'ютерного термічного аналізу їх розплавів.

Результати промислового випробування у виробничих умовах ДП «Металургія» (м. Київ) та ВАТ «Артеммаш» (м. Київ) підтверджують ефективність систем комп'ютерного термічного аналізу для експрес-аналізу стану алюмінієвих розплавів. Відомості про системи імітаційного моделювання кристалізації металів і сплавів включено у навчальний процес Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського» (м. Київ) та Сумського державного університету (м. Суми). Результати досліджень також доцільно використовувати у навчально-наукових програмах закладів вищої освіти для підготовки фахівців з ливарного виробництва, металургії і матеріалознавства.

Ключові слова: кристалізація, алюмінієві ливарні сплави, комп'ютерне та математичне моделювання, термічний аналіз, процеси охолодження.

SUMMARY

Donii O. M. Computer models for studying of the formation of the structure of the cast aluminum alloys during their crystallization. – *Qualifying scientific work on the manuscript.*

Dissertation for the degree of doctor of technical sciences in specialty 05.16.04 – foundry. – Physics and technology Institute of metals and alloys of the National Academy of Sciences of Ukraine. – Kyiv, 2021.

Scientific principles for creating computer models of crystallization and computer thermal analysis of alloys in order to study and determine the optimal technological modes for obtaining castings with given properties have been developed, and computer models have been created for producing castings from aluminum alloys with the required structure and properties. Based on modern ideas about the processes of nucleation and growth of crystals, a computer model of crystallization of metal alloys under various cooling conditions and different methods of their modification has been developed. Such system allows to calculate the parameters of crystallization of alloys, to determine the grain size and distribution of elements in the casting. The adequacy of the created computer research methods is proved based on the example of crystallization of aluminum and its alloys, by comparing the results of modeling and experimental data.

The studies which were carried out by the proposed method with the developed simulation model have established that the cooling curve of pure aluminum at a cooling rate of 0.00025 deg/s has a supercooling section and temperature recalescence when solid phase particles appear in the liquid metal. This indicates that the pre-crystallization state of the metal, which is close to equilibrium, becomes unstable during the solidification of the casting even at low cooling rates. At low cooling rates, the dependence of the number of crystallization

centers formed in the melt on time $N = f(t)$ increases monotonically, and the time dependence of the rate of their formation has an extremum. With an increase of the cooling intensity of the alloy, «steps» appear on the dependence $N = f(t)$, and the time dependence of the rate of formation of solid phase particles has several peaks. This indicates that crystallization centers in the melt arise both at the beginning of metal solidification and at the end. With a further increase of the cooling rate, many «steps» appear on the dependence $N = f(t)$, and number of peaks increases on the dependence of the rate of formation of solid phase particles, with periodic appearance of crystallization centers in the melts.

It was found that during homogeneous crystallization of hypoeutectic Al-Si alloys, crystallization centers of a solid solution based on aluminum appear within a short time, and the mechanism of their formation is similar to the crystallization process of pure aluminum. After completion of the process of solid solution formation, crystallization of the eutectic component begins starting with the appearance of crystallization centers in it.

In hypoeutectic alloys of the Al-Cu system, the content of copper in which does not exceed its maximum solubility in a solid solution based on aluminum and which are cooled at a rate of 5.0–6.67 deg/s, crystallization centers are formed in two stages. At the beginning of crystallization, a solid solution forms. At the second stage, crystallization centers also appear in the liquid-solid alloy before the solid phase.

Information on the advisability of using computer thermal analysis systems for studying processes of crystallization and formation of properties in alloys is generalized. The main parameters of its measuring channel have been determined, and algorithms for mathematical processing of cooling curves for aluminum-based alloys have been optimized.

Methods for studying the processes of crystallization of pure metal and binary alloys are proposed, which make it possible to determine by cooling curves the ratio of the heat of crystallization to the specific heat capacity and the amount of solid phase in castings at any time of their solidification, and this is a further development of the theory of solidification of metals and alloys.

An algorithm is proposed for determining the degree of modification of the eutectic in aluminum casting alloys Al + (9.0–12.0) % Si and Al + (7.0–8.0) % Si + (0.4–0.5) % Mg using a computer thermal analysis system of their melts.

The results of industrial testing in production conditions of the State Enterprise «Metallurgy» (Kiev) and OJSC «Artemmash» (Kiev) confirm the effectiveness of the computer thermal analysis systems for express analysis of the state of aluminum melts. Information about the systems of imitation modeling of crystallization of metals and alloys is included in the educational process of the National Technical University of Ukraine «Igor Sikorsky Kiev Polytechnic Institute» (Kiev) and Sumy State University (Sumy). It is also advisable to use the research results in educational and scientific programs of higher educational institutions for training of specialists in foundry, metallurgy and materials science.

Key words: crystallization, aluminum casting alloys, computer and mathematical modeling, thermal analysis, cooling processes.

АННОТАЦИЯ

Доний А. Н. Компьютерные модели для изучения процессов формирования структуры в литейных алюминиевых сплавах при их кристаллизации. – *Квалификационный научный труд на правах рукописи.*

Диссертация на соискание ученой степени доктора технических наук по специальности 05.16.04 – литейное производство. – Физико-технологический институт металлов и сплавов НАН Украины. – Киев, 2021.

Разработаны научные принципы создания компьютерных моделей кристаллизации и компьютерного термического анализа сплавов с целью исследования и определения оптимальных технологических режимов получения отливок с заданными свойствами и созданы компьютерные модели для получения отливок из алюминиевых сплавов с требуемыми структурой и свойствами. На основе современных представлений о процессах зарождения и роста кристаллов, разработана компьютерная модель кристаллизации металлических сплавов при различных условиях охлаждения и способах их модификации. Такая система позволяет рассчитывать параметры кристаллизации сплавов, определять размер зерна и распределение элементов в отливке. На примере кристаллизации алюминия и его сплавов, путем сравнения результатов моделирования и экспериментальных данных, доказана адекватность созданных компьютерных методов исследования.

Исследованиями, которые выполнены предложенным методом с разработанной имитационной моделью, установлено, что кривая охлаждения чистого алюминия при скорости охлаждения 0,00025 град/с, имеет участок переохлаждения и рекалесценцию температуры при появлении частиц твердой фазы в жидком металле. Это свидетельствует о том, что предкристаллизационное состояние металла, которое близко к равновесному, становится неустойчивым при затвердевании отливки даже при небольших скоростях охлаждения. При малых скоростях охлаждения зависимость количества центров кристаллизации, образовавшихся в расплаве, от времени $N = f(t)$, монотонно возрастает, а временная зависимость скорости их образования имеет экстремум. При увеличении интенсивности охлаждения сплава на зависимости $N = f(t)$ появляются «ступеньки», а временная зависимость скорости образования частиц твердой фазы имеет несколько пиков. Это свидетельствует о том, что центры кристаллизации в расплаве возникают как в начале затвердевания металла, так и в конце. При дальнейшем увеличении скорости охлаждения на зависимости $N = f(t)$ появляется много «ступенек», а на зависимости скорости образования частиц твердой фазы увеличивается количество пиков с периодическим появлением центров кристаллизации в расплаве.

Установлено, что при гомогенной кристаллизации доэвтектических Al-Si сплавов, центры кристаллизации твердого раствора на основе алюминия появляются в течение короткого времени, а механизм их образования аналогичен процессу кристаллизации чистого алюминия. После завершения

процесса образования твердого раствора начинается кристаллизация эвтектической составляющей с появления центров кристаллизации в ней.

В доэвтектических сплавах системы Al-Cu, содержание меди в которых не превышает ее максимальной растворимости в твердом растворе на основе алюминия и которые охлаждаются со скоростью 5,0–6,67 град/с, центры кристаллизации образуются в два этапа. В начале кристаллизации образуется твердый раствор. На втором этапе в жидко-твердом сплаве перед твердой фазой также появляются центры кристаллизации.

Обобщена информация о целесообразности использования систем компьютерного термического анализа для изучения процессов кристаллизации и формирования свойств в сплавах. Определены основные параметры ее измерительного канала и оптимизированы алгоритмы математической обработки кривых охлаждения сплавов на основе алюминия.

Предложено методы исследования процессов кристаллизации чистого металла и бинарных сплавов, которые позволяют по кривым охлаждения определять отношение теплоты кристаллизации к удельной теплоемкости и количество твердой фазы в отливках в любое время их затвердевания, что является дальнейшим развитием теории затвердевания металлов и сплавов.

Составлен алгоритм для определения степени модифицирования эвтектики в литейных алюминиевых сплавах Al + (9,0–12,0) % Si и Al + (7,0–8,0) % Si + (0,4–0,5) % Mg с использованием системы компьютерного термического анализа их расплавов.

Результаты промышленного испытания в производственных условиях ГП «Металлургия» (г. Киев) и ОАО «Артеммаш» (г. Киев) подтверждают эффективность систем компьютерного термического анализа для экспресс-анализа состояния алюминиевых расплавов. Сведения о системах имитационного моделирования кристаллизации металлов и сплавов включено в учебный процесс Национального технического университета Украины «Киевский политехнический институт имени Игоря Сикорского» (г. Киев) и Сумского государственного университета (г. Сумы). Результаты исследований также целесообразно использовать в учебно-научных программах высших учебных заведений для подготовки специалистов по литейному производству, металлургии и материаловедению.

Ключевые слова: кристаллизация, алюминиевые литейные сплавы, компьютерное и математическое моделирование, термический анализ, процессы охлаждения.

Наклад 100. Папір офсетний. Ум.-др. арк. 1,9.
Підписано до друку 25.03.2021. Замовлення 146.

Надруковано в «МП Леся».
Свідоцтво про внесення до Державного реєстру
суб'єктів видавничої справи серія ДК № 892 від 08.04.2002.

«МП Леся»
03148, Київ, а/с 115.
Тел./факс: (066) 60-50-199, (068) 126-49-26
E-mail: lesya3000@ukr.net