

**НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»
МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ**

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

ДОНІЙ ОЛЕКСАНДР МИКОЛАЙОВИЧ

УДК 621.74:669.715:536.421.4:658.012

ДИСЕРТАЦІЯ

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

Спеціальність 05.16.04 – «Ливарне виробництво»

Галузь знань 13 – Механічна інженерія

Подається на здобуття наукового ступеня доктора технічних наук
Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей,
результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело
_____Доній О. М.

Науковий консультант – Нарівський Анатолій Васильович, доктор
технічних наук, член-кореспондент НАН України

Київ – 2021

АНОТАЦІЯ

Доній О. М. Комп'ютерні моделі для вивчення процесів формування структури у 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 та комп'ютерного термічного аналізу сплавів для дослідження і визначення оптимальних технологічних режимів одержання виливків із заданими властивостями. На основі сучасних уявлень про процеси зародження та росту кристалів, розроблено комп'ютерну модель кристалізації металів та металевих сплавів за різних умов охолодження і за наявності модифікаторів. Вона (модель) за результатами комп'ютерного експерименту, дає змогу розрахувати параметри кристалізації, визначити розмір зерна і розподіл елементів у виливку. На прикладі кристалізації алюмінію та його сплавів, шляхом порівняльного аналізу результатів моделювання та експериментальних даних, доведена її адекватність. Зокрема, встановлено, що фронт кристалізації не є плоским, а відповідає реальному процесу твердіння металів. З початку кристалізації утворюються невеликі зерна, деякі з яких при подальшому твердінні металу, починають контактувати між собою і припиняють свій зріст. Інші при цьому переходять у довгі зерна, які спрямовані до центру. У кінці кристалізації в центрі виливка утворюються маленькі разорієнтовані зерна з виникненням дисперсної структури. Аналіз структур алюмінію, які одержані за допомогою моделі, показує, що за різних умов кристалізації змінюється структура твердого металу. При цьому можуть утворитися класична тризонна структура, зона транскристалізації або дисперсна структура в литого металу. Доведено, що при підвищенні швидкості охолодження, зменшуються розміри зерен у металі.

У результаті комп'ютерних експериментів з розробленою імітаційною моделлю, встановлено, що крива охолодження алюмінієвого розплаву при швидкості охолодження 0,00025 град/с має ділянку переохолодження і рекалесценцію температури, яка виникає при формуванні осередків твердої фази. Це свідчить про те, що передкристалізаційний стан розплаву, який близький до рівноважного, стає нестійким під час твердіння виливка, навіть за невеликих швидкостей охолодження. За 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 «сходи» 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.

Установлено, що при гомогенній кристалізації доєвтектичних 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.

У доєвтектичних сплавах системи Al-Cu, вміст міді в яких не перевищує її максимальної розчинності у твердому розчині на основі алюмінію, що 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.

У роботі зазначено, що для спрямованого керування структурно-міцнісними 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 можливостей прогнозу 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 ЕОМ. Сучасні ЕОМ дають змогу доповнити системи додатковими функціями, що значно розширює їх практичне використання.

Визначено, 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 формулу для оцінки критичного розміру зародка твердої фази, яка базується на основі фізичних характеристик металу.

Поєднання способу експрес-аналізу стану металевих розплавів на базі термічного аналізу з підсистемою імітаційного моделювання процесу кристалізації розплавів уможливило створення багатофункціонального інформаційно-технологічного комплексу для їх досліджень.

Узагальнено інформацію про розвиток підсистеми комп'ютерного термічного аналізу та її використання для вивчення процесу кристалізації сплавів та прогнозування властивостей сплавів у твердому стані. Визначено основні параметри вимірювального каналу для сплавів на основі алюмінію. З цією метою проведено узагальнення принципів методики побудови підсистеми комп'ютерного термічного аналізу для прогнозу стану металевих розплавів на основі алюмінію. Установлено необхідну точність вимірювання температури сплавів за допомогою комп'ютерного термічного аналізу (КТА).

Для сплавів систем Al-Si, Al-Cu та Al-Mg вона складає 2,0 градусів у діапазоні температур 853–930 К. Роздільна здатність цифрового перетворювача повинна бути не менше 0,3 градуси.

У роботі за результатами аналізу наявних датчиків для систем дослідження стану ливарних розплавів, сформульовано основні вимоги до конструкції відбірника доз металу.

Розглянуто ймовірність розробки термошумового датчика температури, в основу якого покладено закон Найквіста. 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, оцінено чутливість у динамічному діапазоні. Доведено можливість безконтактного вимірювання температури рідкого та закристалізованого сплаву за допомогою термошумового термометра.

Запропоновано принципи математичної обробки кривих охолодження та розроблено математичні моделі для застосування в КТА з метою прогнозування структури і властивостей у литих виробах. Уточнено математичну модель кристалізації чистого металу, яку можна використовувати і для винятково евтектичних сплавів, та розроблено математичні моделі кристалізації сплавів, які утворюють твердий розчин для сплавів з евтектикою.

Проведено випробування підсистеми КТА, які показали доцільність її застосування у лабораторних та промислових умовах. Прогноз властивостей і управління процесом їх формування у сплавах з використанням КТА здійснюється за допомогою математичних моделей, які пов'язують параметри кристалізації, що визначаються по кривій охолодження, зі службовими характеристиками сплавів. Ці моделі є регресійними рівняннями, які створені за експериментальними даними, одержаними

завдяки методу найменших квадратів, адекватність яких перевіряли згідно з таблицею залишків.

Акцентовано, що за допомогою підсистеми КТА, можна визначити також вміст заліза у ливарних сплавах системи Al-Si-Mg за наявності домішків заліза у кількості понад $\sim 0,6$ % за масою.

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.

Для впровадження системи КТА у виробництво, її можна ввести у наявні технології, що створені відповідно до нормативних документів. У роботі наведено варіант включення таких систем у технологічний процес плавлення і розливання алюмінієвих сплавів. На всьому технологічному циклі виділено важливі етапи: початки процесів плавлення, рафінування і модифікація сплавів, розливання металу у форми або в роздавальні печі, та їх закінчення. За допомогою системи КТА можна оперативно визначити склад металу при його плавленні. Також завдяки зануреному у розплав пробовідбірнику, можна контролювати його температуру. При цьому точність вимірювання температури буде вищою, аніж у наявних промислових приладів.

У процесі дослідження запропоновано формулу для визначення критичного радіусу зародка кристалізації, яка отримана методом аналогій між пересуванням фронту розділу «рідке – тверде» і поширенням хвилі перемикань у бістабільному клітинному автоматі тригерного типу. Критичний радіус зародка визначається через фізичні характеристики металу (коефіцієнт теплопровідності, питому теплоємність, щільність), швидкість охолодження та коефіцієнт, який має розмірність градієнта температур.

Характеристики металів, що входять до цієї формули, визначаються експериментально. Зміна їх значень може впливати на критичну величину радіусу зародка твердої фази і на їх кількість, що обумовлює зміну структури

закристалізованого металу. Аналіз цього впливу дасть змогу спростити як пошук нових методів управління структурою металів, так і створення перспективних ливарних технологій. Ця формула враховує швидкість охолодження металу при кристалізації, що суттєво відрізняє її від класичної термодинамічної формули.

Адекватність запропонованої формули було доведено завдяки використанню методики комп'ютерного експерименту з розробленою моделлю кристалізації, встановивши лінійну залежність між кількістю утворених центрів кристалізації і швидкістю охолодження. Моделювання і розрахунки здійснено для 9 чистих металів: Ag, Al, Au, Bi, Cu, Ni, Pb, Sn, Zn. Для кожного з металів швидкості охолодження було прийнято значення: 0,17; 0,33; 0,67; 1,00; 1,67; 2,00; 3,50; 5,00; 6,00; 6,67 град/с. З'ясовано, що 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). Тобто встановлена залежність лінійна, а запропонована формула адекватна.

Констатовано, що для невеликих за розміром систем ($0,03 \times 0,03 \text{ м}^2$) при швидкостях охолодження, більших ніж 1 град/с, переохолодження швидко розповсюджується 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. Наявність такої складної зони переохолодження є результатом нелінійного стану системи і може призводити до появи різних дефектів у структурі закристалізованого сплаву.

Результати промислового випробування системи комп'ютерного термічного аналізу в умовах ДП «Металургія» (м. Київ) та ВАТ «Артемаш» (м. Київ) підтверджують її ефективність для експрес-аналізу стану алюмінієвих розплавів. Система імітаційного моделювання кристалізації включена у навчальний процес Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

(м. Київ) та Сумського державного університету (м. Суми). Результати досліджень доцільно застосовувати у навчально-наукових програмах закладів вищої освіти для підготовки спеціалістів у галузі кристалізації металів.

Ключові слова: кристалізація, центри кристалізації, алюмінієві ливарні сплави, комп'ютерне моделювання, математичне моделювання, комп'ютерний термічний аналіз.

ANNOTATION

Donii O. M. Computer models for studying of the formation of the structure of the cast aluminum alloys during their crystallization. – *Qualifying scientific work as 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 have been developed for creating of computer models of crystallization and computer thermal analysis of alloys in order to research and determine the optimal technological modes for obtaining castings with desired properties. Based on modern ideas about the processes of nucleation and growth of crystals, a computer model of crystallization of metals and metal alloys under various cooling conditions and in the presence of modifiers has been developed. It allows to calculate the parameters of crystallization and to determine the grain's size and distribution of elements in the casting based on the results of a computer experiment. Based on the example of crystallization of aluminum and its alloys, the adequacy of the model was proved by comparative analysis of the results of modeling and of experimental data. So it is shown that front of crystallization is not flat, but corresponds to the real process of metal hardening. Small grains are formed at the beginning of crystallization, some of them begin to contact with others during further hardening of the metal and stop growing. Others turn into long grains, which are directed towards the center. At the end of crystallization small misoriented grains are formed in the center of the casting which form a dispersed structure. Analysis of the aluminum structures obtained using the model shows that the structure of the solid metal changes under different crystallization conditions. At that the following structures could be obtained in the cast metal: a classical three-zone structure, a transcrystallization zone or a dispersed structure. It is shown that with an increase in the cooling rate, the grain size in the metal decreases.

As a result of computer experiments with the developed simulation model, it was found that the cooling curve of an aluminum melt at a cooling rate of 0.00025 deg/sec has a section of supercooling and a temperature recalescence that appears when foci of the solid phase appear. This indicates that the pre-crystallization state of the melt, which is close to equilibrium, becomes unstable during 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 $N = f(t)$ is monotonically increasing, and the time dependence of the rate of their formation has an extremum.

Along with increase of the cooling intensity of the alloy, «steps» appear on the dependence $N = f(t)$. At the same time, the dependence of the rate of formation of solid phase's cells has several peaks. That is, crystallization centers in the melt appear both at the beginning of the alloy's hardening and at the its end. Further increase of the cooling rate leads to the appearance of many «steps». On the time dependence of the rate of formation of solid phase's cells, the number of peaks increases, and the appearance of crystallization centers in the melt becomes almost periodic.

It was found that during homogeneous crystallization of hypoeutectic Al-Si alloys, the crystallization of which is completed by long-focus transformation, all nuclei of a solid solution based on aluminum appear during short time, and the mechanism of their formation is similar to the indicated mechanism during crystallization of pure aluminum. After the completion of the solid solution's crystallization, the crystallization of the eutectic component also begins with the formation of nuclei.

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/sec, crystallization centers are formed in two stages. At the beginning of crystallization, a solid solution is formed. At the second stage, crystallization centers also appear in the liquid-solid alloy ahead of the solid phase's front.

The paper shows that for the directional control of structural and strength characteristics of cast products directly in the process of their manufacturing the method of thermal analysis, which allows to record the dynamics of the process of their crystallization is the most appropriate.

The existing systems for monitoring of the state of liquid metal and forecasting of the structure and properties of metals in crystallized alloys, which are built on the basis of thermal analysis, are analyzed. The generalized block diagram of such systems consists of three main blocks: a sampler of metal with a primary sensor, an analog-to-digital converter (ADC) and a computer. Modern computers allow to supplement the systems with additional functions, which greatly expands their practical use.

It is shown that in order to receive reliable prediction of the structure of a solid metal, it is necessary for the models of crystallization of metals and alloys allow to visualize the process of structure formation during crystallization. A promising area for this is usage of simulation and cellular automata. A formula for estimating the critical size of a solid phase embryo based on the physical characteristics of a metal is proposed.

The combination of the express analysis method of the state of metal melts on the basis of thermal analysis with the subsystem of simulation modeling of the process of melts crystallization allowed to create a multifunctional information technology complex for their research.

The information on the development of the subsystem of computer thermal analysis and its usage for studying the process of crystallization of alloys and forecasting of the properties of alloys in the solid state is generalized. The main parameters of the measuring channel for aluminum-based alloys are determined. To do this, generalization of the principles of the method of construction of the subsystem of computer thermal analysis for forecasting the state of metal melts based on aluminum was performed. The required accuracy for measurement of alloys' temperature by means of computer thermal analysis (KTA) is determined. For alloys of Al-Si, Al-Cu and Al-Mg systems, it is 2,0 degrees in the temperature

range of 853–930 K. The resolution of the digital converter must be at least 0,3 degrees.

Based on the results of the analysis of existing sensors for systems for studying the state of foundry melts, the basic requirements for the design of metal dose selectors are determined.

The possibility of developing a thermal noise temperature sensor based on the Nyquist law is considered. For the KTA system, a non-contact thermal noise sensor for measuring temperature is proposed, which consists of a circuit that is magnetically connected to the metal being investigated, and a noise voltage converter in the circuit.

The transfer characteristic of the sensor and the maximum value of the noise at the output of the measuring circuit are calculated, the sensitivity is estimated in the dynamic range. The possibility of contactless measurement of the temperature of a liquid and crystallized alloy using a thermal noise thermometer is shown.

The principles of mathematical processing of cooling curves are offered and mathematical models are developed for application in KTA for forecasting of structure and properties in cast products. The mathematical model of crystallization of pure metal, which can be used for purely eutectic alloys, has been refined, and mathematical models of crystallization of alloys that form a solid solution and for alloys with eutectic have been developed.

Tests of the KTA subsystem were carried out, which showed the expediency of its application in laboratory and industrial conditions. The forecast of properties and control of the process of their formation in alloys using KTA is carried out with the help of mathematical models that link the crystallization parameters determined by the cooling curve with the performance characteristics of alloys. These models are regression equations, which are based on experimental data obtained using the method of least squares, the adequacy of which was checked by the table of residues.

It is shown that with the help of the KTA subsystem it is also possible to determine the iron content in the cast alloys of the Al-Si-Mg system in the case of presence of iron impurities in the amount above $\sim 0,6$ % of weight.

To predict the mechanical properties of the crystallized AK12 alloy, nonlinear regression equations are constructed, which relate the temporary tensile strength and elongation with the calculated content of silicon, iron and the value of eutectic recolescence.

To determine the capabilities of the KTA system for assessing the level of modifiability of cast aluminum alloys, we studied the effect of strontium on the cooling curve and structure of Al + 9,0–12,0 % Si and Al + 7,0–8,0 % Si + 0,4–0,5 % Mg. On the basis of the results obtained, an algorithm for predicting the structure of cast aluminum alloys with varying levels of their modifiability was created.

To implement the KTA system in production, it can be introduced into existing technologies created in accordance with regulations. The paper presents a variant of including of such systems in the technological process of melting and casting of aluminum alloys. Important stages are identified throughout the technological cycle: the beginnings of processes of melting, refining and modification of alloys, casting of metal in molds or in distribution furnaces, and their completion. With the help of the KTA system, you can quickly determine the composition of the metal during its melting. You can also control its temperature with the help of a sampler immersed in the melt. At that the accuracy of temperature measurement will be higher than that of existing industrial devices.

The paper proposes a formula for determining the critical radius of a crystallization nucleus, obtained by the method of analogies between the movement of the liquid-solid interface and the propagation of a switching wave in a bistable trigger-type cellular automaton. The critical radius of the embryo is determined by the physical characteristics of the metal (coefficient of thermal conductivity, specific heat, density), cooling rate and coefficient that has the dimension of a temperature gradient.

The characteristics of the metals included in this formula are quite simply determined experimentally. Changing of their values can affect the critical value of the radius of the nucleus of the solid phase and their number, which leads to a change in the structure of the crystallized metal. The analysis of this influence will allow to simplify both search of new methods of managing the structure of metals, and creation of perspective foundry technologies. It should be emphasized that this formula takes into account the cooling rate of the metal during crystallization, which significantly distinguishes it from the classical thermodynamic formula.

The adequacy of the proposed formula was proved using the method of computer experiment with the developed model of crystallization by establishing a linear relationship between the number of formed crystallization centers and the cooling rate. Modeling and calculations were performed for 9 pure metals: Ag, Al, Au, Bi, Cu, Ni, Pb, Sn, Zn. For each of the metals, the cooling rate was taken as: 0,17; 0,33; 0,67; 1,00; 1,67; 2,00; 3,50; 5,00; 6,00; 6,67 deg/s. It is established that for all metals the correlation coefficients are positive, and their values exceed 0,98 (at the threshold value $R_{\text{theor.}} = 0,667$ and a confidence probability of 0,95). That is, the established dependence is linear, and the proposed formula is adequate.

It is established that for small systems ($0,03 \times 0,03 \text{ m}^2$) at cooling rates greater than 1 deg/s, supercooling spreads rapidly across the cross section of the casting and only then first centers of the solid phase begin to form, thus indicating the nonlinearity of the crystallization process. Increasing of the geometric dimensions of the system leads to the formation of a supercooling zone, which has a complex shape. The presence of such a complex supercooling zone is the result of a nonlinear state of the system and can lead to various defects in the structure of the crystallized alloy.

The results of industrial testing of the computer thermal analysis system under the conditions of the State Enterprise «Metallurgii» (Kyiv) and JSC «Artemmash» (Kyiv) confirm its effectiveness for express analysis of the state of aluminum melts. The system of imitation modeling of crystallization is included in the educational process at the National Technical University of Ukraine «Igor

Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute» (Kyiv) and at the Sumy State University (Sumi). It is advisable to apply the results of research in educational and scientific programs of universities for training specialists in the field of crystallization of metals.

Key words: crystallization, centers of crystallization, aluminum casting alloys, computer modeling, mathematical modeling, computer thermal analysis.

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 parametrs 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 Celluar 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 кристалування 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 кристалування 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 экспрес-

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». Днепропетровськ; 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». Днепропетровськ; 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. Доний О., Лаврова Т. Автоматизований комплекс прогнозування якості розплавів // 12-й Міжнародний симпозіум українських інженерів-механіків у Львові, 28–29 травня 2015 р. Львів, 2015. С. 109–110.

ЗМІСТ

	Стор
ВСТУП.....	27
 РОЗДІЛ 1 СУЧАСНІ УЯВЛЕННЯ ПРО ФОРМУВАННЯ СТРУКТУРИ СПЛАВІВ ПІД ЧАС КРИСТАЛІЗАЦІЇ ТА МЕТОДИ КОНТРОЛЮ І ПРОГНОЗУВАННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ МЕТАЛІВ У ТВЕРДОМУ СТАНІ	34
1.1 Основні чинники, що впливають на стан металевих виробів, первинна структура яких утворюється в процесі кристалізації	34
1.2 Системи контролю стану рідкого металу та прогнозу структури і властивостей металів у твердому стані на основі термічного аналізу	40
1.3 Експериментальні методи дослідження рідкого стану металевих розплавів та кінетики процесу їх кристалізації	48
1.4 Теоретичні методи дослідження рідкого стану металів та кінетики процесу їх кристалізації	55
1.4.1 Теоретичні дослідження рідкого стану металів	55
1.4.2 Термодинамічний аналіз процесу утворення зародків твердої фази при кристалізації	59
1.5 Математичне моделювання процесів кристалізації	71
1.6 Сінергетика як методологія дослідження процесів кристалізації	78
1.7 Імітаційне моделювання процесу кристалізації	87
1.8 Особливості методики доведення адекватності імітаційної моделі утворення структури твердого металу при кристалізації	90
 РОЗДІЛ 2 АПАРАТНА ПІДСИСТЕМА КОМП'ЮТЕРНОГО ТЕРМІЧНОГО АНАЛІЗУ ДЛЯ КОНТРОЛЮ СТАНУ ЛИВАРНИХ РОЗПЛАВІВ СПЛАВІВ НА ОСНОВІ АЛЮМІНІЮ	95
2.1 Матеріали та методи досліджень	95

2.2 Оцінка точності, роздільної здатності та частоти дискретизації вимірювального каналу підсистеми комп'ютерного термічного аналізу для контролю стану ливарних розплавів на основі алюмінію	96
2.3 Аналіз параметрів первинного перетворювача для виміру температури проби, що кристалізується	106
2.4 Розрахунок похибки вимірювального каналу підсистеми комп'ютерного термічного аналізу для оцінки стану рідких ливарних сплавів	121
2.5 Термошумовий первинний перетворювач з магнітним зв'язком для безконтактного вимірювання температури	125
2.5.1 Математична модель термошумового перетворювача	125
2.5.2 Розробка конструкції первинного термошумового індуктивного перетворювача.....	132
Висновки до Розділу 2.....	138

РОЗДІЛ 3 ОСОБЛИВОСТІ МАТЕМАТИЧНОЇ ОБРОБКИ КРИВОЇ ОХОЛОДЖЕННЯ	140
3.1 Чисельне диференціювання і фільтрація кривої охолодження	140
3.2. Динамічна теорія твердіння металевих виливків	148
3.2.1 Математичні моделі кристалізації чистих металів	148
3.2.2 Математична модель кристалізації сплавів, які утворюють твердий розчин	156
3.2.3 Математична модель кристалізації сплавів з евтектикою	164
3.3 Комп'ютерна імітація диференціального термічного аналізу	170
Висновки до Розділу 3.....	175

РОЗДІЛ 4 ОЦІНКА СТАНУ ЛИВАРНИХ РОЗПЛАВІВ ІЗ ЗАСТОСУВАННЯ ПІДСИСТЕМИ ТЕРМІЧНОГО АНАЛІЗУ.....	176
4.1 Прогноз властивостей ливарних сплавів з використанням комп'ютерного термічного аналізу	176
4.2 Класифікація кривих охолодження	192

4.3 Оцінка ступеня модифікованості алюмінієвих ливарних сплавів з використанням комп'ютерного термічного аналізу	196
4.4 Включення підсистеми комп'ютерного термічного аналізу в технологію плавки ливарних сплавів	203
Висновки до Розділу 4.....	207
РОЗДІЛ 5 ПІДСИСТЕМА ІМІТАЦІЙНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ УТВОРЕННЯ СТРУКТУРИ ПРИ КРИСТАЛІЗАЦІЇ	210
5.1 Теоретичне обґрунтування основних чинників імітаційної моделі кристалізації металів і сплавів	210
5.2 Розробка загального алгоритму імітаційної моделі кристалізації металів і сплавів	216
5.2.1 Математичні моделі для визначення температури в системі і концентрації другого компонента в розплаві	216
5.2.2 Математична модель діаграми стану бінарного сплаву з евтектикою	223
5.2.3 Побудова блок-схеми загального алгоритму імітаційної моделі кристалізації металів і сплавів	224
5.3 Числова схема розв'язку двовірних задач теплопровідності та дифузії для визначення температури розплаву і концентрації його компонентів	236
5.4 Інтерфейс імітаційної моделі кристалізації металів та сплавів	247
5.5 Адекватність імітаційної моделі кристалізації металів і сплавів	255
Висновки до Розділу 5.....	265
РОЗДІЛ 6 КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ КРИСТАЛІЗАЦІЇ МЕТАЛІВ І СПЛАВІВ	267
6.1 Методичні особливості підготовки імітаційної моделі кристалізації металів і сплавів для проведення обчислювального експерименту	268
6.2 Вплив швидкості охолодження при твердінні на утворення осередків твердої фази при гомогенній та гетерогенній кристалізації алюмінію	281

6.3 Вплив модифікатора на утворення осередків твердої фази при кристалізації алюмінію	297
6.4 Комп'ютерний експеримент для перевірки формули критичного зародка твердої фази	305
6.5 Вплив швидкості охолодження при твердінні на утворення зародків твердої фази при кристалізації сплавів Al-Si та Al-Cu	309
6.5.1 Вплив швидкості охолодження при твердінні на утворення зародків твердої фази при кристалізації сплаву Al-Si	310
6.5.2 Вплив швидкості охолодження при твердінні на утворення зародків твердої фази при кристалізації сплаву Al-Cu	317
6.6 Комп'ютерний експеримент для перевірки наявності нерівноважного стану розплаву при його кристалізації	322
Висновки до Розділу 6	324
ВИСНОВКИ	328
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	331
ДОДАТКИ	359

ВСТУП

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 НДІ "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 задачі досліджень. 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 задачі:

- 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 отриманих 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 отриманих 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: IX 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» Україна, 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.); IX 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 тексту становить 223 сторінки), містить 83 рисунків, 19 таблиць. Документи про випробовування, впровадження та обговорення наведено в додатку на 15 сторінках.

РОЗДІЛ 1

СУЧАСНІ УЯВЛЕННЯ ПРО ФОРМУВАННЯ СТРУКТУРИ СПЛАВІВ ПІД ЧАС КРИСТАЛІЗАЦІЇ ТА МЕТОДИ КОНТРОЛЮ І ПРОГНОЗУВАННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ МЕТАЛІВ У ТВЕРДОМУ СТАНІ

1.1 Основні чинники, що впливають на стан металевих виробів, первинна структура яких утворюється в процесі кристалізації

На сучасному етапі розвитку промисловості України важливим завданням є підвищення конкурентоспроможності продукції загалом і металовиробів зокрема. Один із можливих шляхів у цьому напрямі полягає у забезпеченні якості виробництва на рівні світових стандартів. Нині існує чимало тлумачень терміну «якість продукції», зокрема: «Якість продукції – це відповідність певним вимогам» [1]; «Якість продукції – це придатність до використання» [2]; «Якість продукції – це передбачувана ступінь однорідності і надійності при низьких витратах і відповідності потребам ринку» [3]; «Якість продукції – це сукупність властивостей продукції, яка визначає ступінь її придатності для використання за призначенням» [4].

Аналізуючи ці визначення, доречно зосередитися на такому варіанті: якість продукції – це сукупність службових властивостей виробів, яка здатна задовольняти визначені потреби відповідно до призначення. Кількісні характеристики цих властивостей є показниками якості. Стосовно металевих сплавів, якісним вважається матеріал, з якого можливо виготовити вироби, які мають необхідні властивості відповідно до конкретної технології.

Питання якості продукції є важливим і з погляду економіки, адже відомо [5], що витрати на забезпечення необхідного її рівня, зазвичай, складають до 20 % від вартості продукції. Ці витрати складаються з чотирьох великих груп:

– витрати на запобігання браку;

- витрати на перевірку якості і тестування продукції;
- витрати, які пов'язані із внутрішніми чинниками;
- витрати, які пов'язані із зовнішніми чинниками.

Для виробництва найважливішим є запобігання браку продукції. Це, зазвичай, забезпечується контролем якості на всіх технологічних етапах.

Очевидно, що формування якості металопродукції, технологія отримання якої включає фазовий перехід «рідкий стан – твердий стан», є складним і багатоступеневим процесом. На кожному технологічному етапі існують чинники, що впливають на кінцеві властивості виробів. На рисунку 1.1 представлена узагальнена схема, в якій систематизовано основні фактори, що впливають на якість металевої продукції.

Шихтові матеріали можуть бути первинними чи вторинними, що суттєво впливає на процеси плавки та обробки, адже добре відомо про існування ефекту спадковості шихти [6], який позначається на кінцевих властивостях виробів.

Температурні режими плавки, обробки металу у рідкому та у твердому станах, вибір способу лиття та отримання виливків певної конфігурації – все це як на окремих етапах, так і загалом упродовж всього технологічного циклу впливає на функціональні властивості виробів. Саме відповідність цих властивостей заздалегідь заданим вимогам складає якість продукції.

За результатами аналізу технологічного процесу виробництва виливків можна зробити кілька висновків. По-перше, найважливішим чинником, який обумовлює основні службові властивості кінцевого продукту (тобто його якість) є структура металу у твердому стані. По-друге, можна виділити два важливих етапи, які безпосередньо пов'язані із процесом структуроутворення. Це стадія переходу розплаву у твердий стан, тобто кристалізація, та обробка металу вже у твердому стані, після якої його структура може суттєво змінитися. Тобто з цих двох етапів саме кристалізація має визначальне значення для формування властивостей, які повинен мати кінцевий продукт (передусім, це технології ливарного



Рис. 1.1 Узагальнена схема формування якості металопродукції, технологія отримання якої включає фазовий перехід «рідкий стан – твердий стан»

виробництва).

Саме на цьому етапі утворюється «первинна» структура твердого металу. Тому особливого значення набуває можливість оцінки стану розплаву, адже саме він (при сталих умовах охолодження) визначає перебіг переходу рідкого металу у твердий стан. Зокрема, за даними опитування персоналу ливарних цехів приладобудівних підприємств, до 15 % браку виливків з Al-Si сплавів зумовлені невідповідністю саме розплаву необхідним властивостям [7].

У ливарних цехах машинобудівних заводів виплавку сплаву із шихтових матеріалів і доведення його до потрібного стану здійснюють безпосередньо перед заливанням. Комплексні показники розплаву при цьому, зазвичай, не визначаються, що призводить у низці випадків до браку у виливках з його вини. Тобто одним із чинників вирішення проблеми поліпшення якості виливків і підвищення ефективності ливарного виробництва є наявність методів оперативного контролю процесу плавки і оцінки стану розплаву безпосередньо перед розливанням.

Параметрами, що визначають властивості рідких металів та сплавів, вважаються хімічний склад за основними легуючими елементами, вміст домішок, пористість і схильність до осідання, а також додаткові величини, обумовлені технічними умовами. Контроль стану металевих розплавів у промислових умовах передбачає визначення відсоткового вмісту основних легуючих елементів і домішок, які найбільш суттєво впливають на властивості литого металу. Крім того, потрібно мати прогноз макро- і мікроструктури литого металу та рівня його механічних властивостей. Стандартами для ливарних і металургійних виробництв регламентується низка методів, які засновані на відборі проб розплаву (з досить великою дискретністю за часом) і їхнім наступним аналізом, з метою визначення необхідних характеристик.

Хімічний склад за основними компонентами, наприклад, алюмінієвих сплавів, зазвичай, визначають методами хімічного й спектрального аналізу.

Перший метод вирізняється тривалістю (до кількох годин), тому його результати не можуть бути основою оперативного контролю плавки. Спектральний аналіз має більшу експресність (тривалість визначення не перевищує десяти хвилин) і в деяких випадках може слугувати засобом отримання оперативної інформації про плавку. Однак цей метод, порівняно з хімічним аналізом, менш точний і вимагає еталонних зразків, що ускладнює його застосування для широкого спектру сплавів. Окрім цього, застосування обох методів вимагає відбору проб, які заливають у відповідні форми. Експериментальний виливок повинен охолонути до температури, коли його можна обробляти, що також потребує певного часу. Потім пробу передають до лабораторії і досліджують. Саме тут виникають порівняно великі витрати загального часу, який потрібен для досліджень.

Про механічні властивості виливка судять за результатами іспитів проб різної конфігурації, відлитих у піщану або металеву форми. Тимчасовий опір на розрив, відносне подовження і твердість визначають з порівняно невеликою точністю [8]. Результати іспитів характеризують усереднені властивості литого металу і при контролі якості литва, можуть слугувати лише граничними значеннями на рівні «властивості в нормі» або «нижче». Окрім того, ці методи також характеризуються тривалим циклом вимірювань.

Розглядаючи стандартні засоби аналізу якості ливарних сплавів у технологічному циклі, вадливо відзначити два їх суттєві недоліки. По-перше, момент одержання результатів аналізу запізнюється відносно розливання розплаву, і частина ливарного браку з вини металу виявляється лише на наступних етапах технології виготовлення деталей, коли скорегувати властивості вихідного сплаву вже неможливо. І, по-друге, ці методи, визначаючи параметри металу, не дають рекомендацій стосовно додаткової обробки розплаву з метою корекції його властивостей.

Для цілеспрямованого керування властивостями литого металу важливо володіти інформацією щодо необхідних впливів на розплав. Тобто в

кожному конкретному випадку (з урахуванням температурного режиму плавки) визначати та забезпечити оптимальну кількість легуючих компонентів і модифікуючих добавок. Реалізувати цю мету можна з допомогою системи оперативного контролю стану розплаву.

У такий спосіб для одержання литих виробів з гарантованою якістю, необхідно мати змогу безпосередньо у процесі підготовки розплаву визначати комплекс параметрів, які характеризують якість литих виробів (хімічний склад за основними легуючими елементами, механічні властивості тощо) із точністю не гіршою, ніж у стандартних методів, але із набагато більшою швидкістю (експресністю). Також бажано надавати рекомендації стосовно раціональної обробки розплаву (зміни хімічного складу, рафінування, модифікування), з метою оптимізації властивостей до розливання й усунення браку литва з вини металу.

Щоб система експрес-аналізу була бюджетною і надійною в умовах ливарного цеху, методика аналізу повинна бути простою, а її апаратна частина – дешевою й малогабаритною. Проте вона повинна забезпечувати відповідну точність визначення та здійснювати прогноз властивостей з похибкою на рівні похибки стандартних експериментальних методик. Тобто практика виробництва металовиробів потребує наявності експериментальних методик, спроможних фіксувати кінетику процесу структуроутворення в процесі кристалізації. Окрім того, зазначені методики повинні бути відносно простими, працювати у важких умовах ливарних цехів та надавати інформацію в експресному режимі. Тому поки що метод термічного аналізу є, мабуть, найзручнішим. Він постійно удосконалюється і досить широко застосовується в практиці ливарного виробництва, починаючи приблизно із 70-х рр. XX ст. і дотепер [9–34]. Його перевагами є можливість експрес-прогнозу комплексу властивостей литого металу і, за необхідності, змога цілеспрямованого впливу на рідкий метал перед розливкою, а також простота застосування в умовах виробництва. Застосування ЕОМ для збору та аналізу

інформації у методиці термічного аналізу суттєво підвищує експресність методу і розширює його можливості.

Розробку сучасних технологій ливарного виробництва неможливо уявити без використання засобів моделювання. Застосовуються різні способи моделювання: фізичне (на модельних рідинах), математичне, комп'ютерне. Найбільш поширеним методом є математичне моделювання. Проте його застосування має певні обмеження. Передусім, це складність або взагалі неможливість розв'язку нелінійних математичних задач. Така ситуація зумовлює поширене застосування чисельних методів, які зручно реалізовувати на ЕОМ. У такий спосіб за останні роки в дослідженнях, розробках і конструюванні значно поширилося застосування комп'ютерних моделей [35; 36]. У роботах розглянуто переваги та недоліки програмних продуктів та методів комп'ютерного моделювання для вирішення задач ливарного виробництва.

Поєднання методів комп'ютерного термічного аналізу та комп'ютерного моделювання в єдиній системі значно розширює можливості дослідників та технологів для створення сучасної продукції ливарного виробництва.

1.2 Системи контролю стану рідкого металу та прогнозу структури і властивостей металів у твердому стані на основі термічного аналізу

Аналіз літературних даних [37–56] доводить, що апаратура для експрес-контролю якості ливарних сплавів у рідкому стані здолала лабораторний період розвитку ще у 80-х – 90-х рр. минулого століття. У цей період розроблено низку одиничних зразків приладів, зокрема в лабораторії «Управління якістю рідких металів і сплавів» кафедри металознавства та термічної обробки інженерно-фізичного факультету НТУУ «КПІ» під керівництвом д. т. н., проф. Бяліка О. М. [57–64]. Автор має власний досвід

розробки контролю і управління станом ливарних сплавів у рідкому стані [20; 21; 29; 30; 63; 64] у складі цієї лабораторії.

Розглядаючи принципи побудови систем аналізу стану ливарних розплавів, які були створені у 80-х та 90-х рр. минулого століття, можна констатувати, що більшість із них побудовано на основі програмувальних пристроїв: мікроконтролерів або мікро-ЕОМ із програмами в постійній пам'яті чи персональні ЕОМ загального призначення, що працюють на основі вузькоспеціалізованого програмного забезпечення. Алгоритми, що застосовувались у цих системах, досить різноманітні. Методика, апаратура і програмне забезпечення окремих розроблювачів різняться за своїми можливостями.

Перші розробки систем комп'ютерного термічного аналізу використовували апаратні рішення для пошуку характерних параметрів термограм, що визначалось обмеженими можливостями наявної у той час комп'ютерної техніки. Тому ті способи і пристрої для їхньої реалізації визначали один-два параметри металу, мали приладове виконання, яке було орієнтовано на вузьковизначену задачу. Окрім того, у роботах [32–34] викладені лише основні ідеї, тоді як реалізація методу на рівні промислового зразка вимагає розв'язку технічних проблем, про що, на жаль, і досі не висвітлено у науково-технічній літературі.

У кінці 1980-х та початку 1990-х рр. проектуються багатофункціональні прилади і системи. Створено низку лабораторних і дослідно-промислових методик і установок термічного аналізу чавунів [15; 16; 42; 43; 45–49; 52–54], алюмінієвих [40; 44] і мідних [45] сплавів.

Аналізатор якості чавуна, описаний у роботі [46], дає змогу з кривої охолодження, що зафіксована у цифровій формі, виділити сім параметрів, за допомогою яких визначається вміст вуглецю, кремнію і вуглецевий еквівалент. Час циклу одного вимірювання – 140 сек.

Розроблено методику [18] для експрес-аналізу вмісту вуглецю, кремнію і марганцю в сталях за термічними кривими охолодження

нормалізованої і загартованої проб. Очевидно, що недоліком цього способу є необхідність добору двох проб.

Створено комплекс програм, що має відносну універсальність, і який дає змогу обробляти термограми на ЕОМ, з метою одержання хімічного складу і прогнозу міцності та твердості виливків [50].

Система «Експрес» [16; 37], що являє собою апаратно-програмний комплекс, реалізований для стандартної ПЕОМ і вимірювально-перетворюючої апаратури, сприяє визначенню хімічного складу чавунів (вміст C, Si, Mn), вуглецевого еквіваленту, ступеню евтектичності, константи графітизації, прогнозуванню механічних властивостей (межі міцності, твердості) і товщини вибіленого шару виливків із конкретними геометричними параметрами.

Фірма «Heraeus Volkert Inc» випускає прилад «Delta CII», що дає змогу у циклі вимірів до 2,5 хв визначати вміст компонентів Al-Si сплаву з точністю до 0,5 % [42]. Установка «Alu-Delta» фірми «Metallurgical Products & Technologies» (США) уздовж кривої охолодження проби Al-Si сплаву, що заливається у стаціонарний пробовідбірник, визначає температурний інтервал кристалізації і переохолодження, за якими потім розраховується величина зерна. Ступінь модифікованості визначається шляхом порівняння температури евтектичного перетворення з попередньо встановленою границею.

За методикою системи «Thermatest-2000» [41] із кривої охолодження Al-Si сплаву обчислюється низка критеріальних величин і поряд із графіком термограми, видається хімічний склад сплаву за основними компонентами і легуючими добавками (до 12 елементів), визначається тип структури сплаву і фіксуються основні перетворення у процесі кристалізації проби.

Пристрій «Crystaldigraf» [42], який призначено для термічного аналізу чавунів, дає змогу реєструвати термограму у цифровому вигляді, одержувати її похідну, фіксувати температури ліквідус і солідус, визначати вміст C, Si і вуглецевий еквівалент. Він випускається серійно з 1985 року Crystaldigraf-

NC, кілька екземплярів якого встановлені на підприємствах України, являє собою автономний мікропроцесорний пристрій із програмою, яка зберігається в постійній пам'яті. Зміна типу сплаву обумовлена заміною цих мікросхем.

За різниці в часі аналізу розроблені системи відрізняються ще набором параметрів, що аналізуються. Але жодна з них не дає інформації для оперативного керування властивостями розплаву, якщо виникає необхідність корекції хімічного складу чи поліпшення механічних властивостей.

Детальний аналіз основних принципів побудови і алгоритмів цих систем ускладнений у зв'язку з відсутністю технічних подробиць. Зазвичай відсутні дані про методику, що застосовується для відбору проб, про параметри вимірювальної й обчислювальної апаратури, про математичний апарат, за допомогою якого аналізують процес кристалізації проби, про алгоритми програмного забезпечення обробки кривих охолодження. Ця інформація є «know how» і являє собою технологічні секрети фірм і лабораторій. Тому у науковій літературі лише іноді приводяться окремі параметри.

Незважаючи на те, що основні ідеї зі створення систем експресного аналізу стану металевих розплавів були розроблені приблизно 30 років тому, і донині існує науковий та практичний інтерес щодо їх розробки та використання (особливо в умовах малих підприємств та цехів) [28–34].

Тобто розглянуті вище варіанти систем аналізу стану металевих розплавів, на жаль, є морально застарілими. Сучасні ЕОМ широко використовуються у всіх сферах діяльності людини. Спостерігається стрімке зростання їх потужності і можливостей, швидке зниження вартості і габаритів. Сучасні мови програмування (C++, Delphi та інші) дають змогу швидко проводити обчислення, використовуючи складні алгоритми. Все це робить майже безальтернативним вибір сучасної ЕОМ як основи системи аналізу стану металевих розплавів. На рис. 1.2 зображено узагальнену блок-схему сучасного варіанту системи термічного аналізу для дослідження стану

металевих розплавів. Вона складається із трьох основних блоків: пробовідбірника із первинним перетворювачем, аналого-цифрового перетворювача (АЦП) і комп'ютера (ЕОМ).

У пробовідбірнику знаходиться проба рідкого металу, яка досліджується. В об'ємі металу розташовується термопара, що генерує термо е. р. с. у відповідності до температури розплаву. АЦП дає змогу аналоговий сигнал з термопари перетворити у дискретний, який обробляється в комп'ютері.

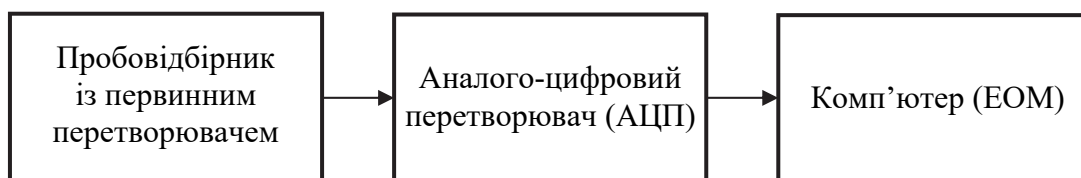


Рис. 1.2 Загальна блок-схема системи термічного аналізу для аналізу стану металевих розплавів

Швидкодія сучасних комп'ютерів уможлиблює використання складних алгоритмів обчислення майже не витрачаючи часу роботи, а це дає змогу доповнити систему різними додатковими функціями, що значно розширює її практичне і наукове застосування.

Проте такий вибір основи системи не розв'язує цілого комплексу питань, які пов'язані з її конкретним проектуванням.

По-перше, це вибір параметрів і геометричної форми пробовідбірника із первинним перетворювачем, яким використовуються термопари різних типів. По-друге, вибір типу АЦП у такий спосіб, щоб підсумки аналізу гарантували певну точність результатів.

Щодо пробовідбору, то в науковій літературі відсутні відомості про розрахунки параметрів пробовідбірників для різних металів і сплавів, за винятком роботи [65], де в першому наближенні було зроблено аналіз деяких певних конструкцій. Такий підхід до розробки методики комп'ютерного

термічного аналізу є досить дивним, адже якщо первинні дані, що фіксуються в пам'яті ЕОМ, отримані не якісно, то похибку, яку вони містять у собі, вже неможливо коректувати. Це буде т. зв. неусувна похибка [66]. У класичних роботах, присвячених термічному аналізу [67; 68], питанням, що пов'язані з коректним одержанням вихідних даних, приділено чимало уваги. Тому необхідно узагальнити наявну інформацію стосовно пробовідбору в системах аналізу стану розплавів, які базуються на термічному аналізі, та оцінити реальність принципово нових, нестандартних ідей.

Для вибору оптимального типу пробовідбірника, доречно сформулювати основні вимоги, яким він повинен відповідати:

- його максимальна температура теплостійкості повинна бути більшою, аніж максимальна температура об'єкту вимірів;
- матеріал, із якого він зроблений, не повинен взаємодіяти із рідким металом;
- бажано, щоб пробовідбірник був багаторазовим і не вимагав калібрування всього приладу при його заміні;
- власна теплоємність пробовідбірника і елементів його конструкції не повинна порушувати термодинамічний стан об'єкту вимірів.

Майже всі пробовідбірники, що зустрічаються в розробках, як первинний перетворювач (датчик), використовують термопари і працюють за контактним принципом, тобто датчик введено у розплав. Очевидно, що такий контакт може суттєво впливати на процес, який досліджується в експерименті (тобто на кристалізацію).

Як безконтактні датчики, використовують пірометри, але їх точність, вкрай низька. До того ж пірометри вимірюють температуру на поверхні системи, але добре відомо (особливо стосовно рідких металів і металевих розплавів), що вона суттєво відрізняється від температури, що всередині.

Водночас існують методи вимірювання температури, які вважаються «екстравагантними», зокрема: індуктивні термометри, ємності, акустичні тощо. Їх також застосовують у галузях, які не є спорідненими з ливарним

виробництвом. Окрім цього, таким є й метод шумової термометрії [64]. В його основу покладено закон Найквіста, зміст якого полягає у тому, що середній за часом квадрат теплових шумів системи пропорційний її термодинамічній температурі. Розглядаючи вхідний опір підсилювача як джерело теплових шумів з інтенсивністю, яка рівномірно розподілена за частотою, [69] показано, що виконується співвідношення:

$$\bar{u}^2 = 4kRT\Delta f, \quad (1.1)$$

де: $\bar{u}^2$ – середній квадрат теплових шумів; k – стала Больцмана; R – опір, що генерує тепловий шум; T – температура; Δf – полоса частот, у якій проводяться вимірювання.

Принципом дії такого термометра є те, що вимірювальний канал, який зосереджує у собі підсилювач з низьким рівнем власних шумів, детектор та інтегратор, по чергово підключають до двох електричних опорів R_1 та R_2 , які знаходяться при температурах T_1 та T_2 . З огляду на те, що всі параметри резисторів R_1 та R_2 повинні бути однаковими, в ідеальному випадку виконується співвідношення:

$$R_1 T_1 = R_2 T_2. \quad (1.2)$$

Знаючи температуру T_2 і відношення опорів R_1 до R_2 , можна визначити невідому температуру T_1 .

Тепловий шум притаманний усім без винятку фізичним об'єктам і має, зазвичай, малу амплітуду. Термошумовий метод використовують при дослідженнях або наднизьких температур, або при вимірюванні температур в умовах високого рівня іонізації [70], тобто там, де інші методи не працюють. Однак чим вища температура, тим вища амплітуда теплового шуму відповідно до закону (1.1). Тому необхідно перевірити можливість застосування цього методу у процесі створення первинного перетворювача для термічного аналізу.

Традиційний шлях розвитку засобів шумової термометрії полягає в удосконаленні електронної схеми вимірників. При цьому конструкція первинного перетворювача залишається майже незмінною: це тонкий дріт із

сплаву вольфраму та платини, або вуглецева нитка. Така конструкція є контактною з усіма притаманними контактності недоліками: первинний перетворювач не завжди витримує тепловий контакт з об'єктом вимірів; після затвердіння металу виникають труднощі з вилученням первинного перетворювача із виливка.

За допомогою шумового термометра, можна реалізувати безконтактність вимірів. Труднощі, що виникають при цьому, пов'язані з підключенням первинного перетворювача до вимірювального тракту. Вирішити цю проблему можна застосуванням магнітного зв'язку. Подібна методика була вперше запропонована у роботі [71] для виміру температури плазми.

Цікавим є також той факт, що середній квадрат теплового шуму лінійно залежить від температури системи, а лінійність первинного перетворювача завжди є суттєвою перевагою [72].

У перших зразках систем аналізу стану ливарних розплавів як прилад, який з'єднував пробовідбірник і ЕОМ, використовували здебільшого цифрові вольтметри. Це було зручно, оскільки стало можливо підібрати прилад з високою точністю вимірів, на виході якого існував уже перетворений дискретний сигнал. Такі прилади є універсальними, розрахованими для вимірювань у широкому діапазоні напруг. Однак у цьому випадку вони є надзвичайно дорогими, і водночас їх широкі можливості майже не використовуються. Нині існують малогабаритні АЦП, які можна розташовувати або в системному блоці комп'ютера, або окремо. Проте для забезпечення точності та надійності системи загалом, необхідно визначити їх основні параметри, зокрема такі, як: точність виміру термо е. р. с., роздільна здатність вимірювального каналу (рис. 1.2) та частота дискретизації при перетворенні аналогового сигналу з термопару у дискретний, який обробляється у ЕОМ.

Отже, огляд літературних даних і власний досвід розробок систем визначення стану розплавів на основі термічного аналізу, довів, що для

розгалуження гами сплавів, які проаналізовано з метою стабілізації роботи системи, потрібно в кожному окремому разі на базі єдиної методики підбирати вимірювально-перетворювальну апаратуру, яка повинна забезпечити реєстрацію кривої охолодження з достатньою точністю, та підбирати параметри пробовідбірника. Тобто постає питання про створення єдиного підходу до методики побудови вимірювального тракту комп'ютерної системи експрес-аналізу і керування якістю ливарних сплавів у рідкому стані на основі термічного аналізу. У його межах необхідно узагальнити інформацію, накопичену за багато років наукової праці у цьому напрямі, а саме: науково обґрунтувати методику вибору параметрів вимірювально-перетворювальної апаратури при цифровій реєстрації кривої охолодження (точність, роздільну здатність, частоту дискретизації), яка є оптимальною для конкретної групи сплавів; методику первинної обробки вимірювального сигналу, з метою відсіювання перешкод і підвищення точності визначення характерних точок термограми. Також потрібно узагальнити та оптимізувати алгоритми математичного забезпечення для прогнозування структури та властивостей металів після кристалізації за даними, отриманими у процесі твердіння проби термічного аналізу. Бажаним є розширення можливостей системи термічного аналізу не тільки з метою прогнозу якості, але і для вирішення наукових та навчальних завдань, шляхом доповнення системи додатковими функціями. Аналіз методів дослідження процесу кристалізації (як експериментальних, так і теоретичних) дасть змогу визначити напрями її вдосконалення.

1.3 Експериментальні методи дослідження рідкого стану металевих розплавів та кінетики процесу їх кристалізації

Початковий, тобто рідкий стан розплаву, безперечно, здійснює суттєвий вплив на процес структуроутворення під час кристалізації [68]. Зокрема, легування рідкого металу, мікролегування, введення модифікаторів

змінює стан рідкого металу, що призводить до зміни структури твердого металу, а отже, і його властивостей. Існує також спадковість шихтових матеріалів [6], коли структура і властивості вилівка залежать від того, які шихтові матеріали (навіть первинні) було використано у такому разі. З огляду на це, використовують попередню обробку шихтових матеріалів. Все це свідчить про те, що рідкий метал (навіть чистий) є досить складною системою, стан якої під час протікання технологічних процесів суттєво впливає на властивості кінцевого продукту.

Серед експериментальних досліджень металевих розплавів важливо зосередитися на структурних, котрі полягають у визначенні інтенсивності когерентного розсіювання рентгенівських променів чи нейтронів розплавом, який досліджується (дифракційні методи, моделі рідини твердих сфер). Знайдені за кривими інтенсивності структурні фактори $I(S)$ і функції радіального розподілу атомів у рідині $g(r)$ є невід'ємною частиною при розрахунку термодинамічних і кінетичних властивостей розплавлених металів та сплавів і дають підстави стверджувати про їхню будову.

Уже перші дослід з розсіювання рентгенівських променів у рідинах показали, що при температурах рідин, близьких до температур твердіння, розташування часток у них не безладно, а дуже подібно розташуванню часток у твердому кристалічному тілі. Тобто виявляються кореляції у розташуванні часток не дуже віддалених одна від одної, і спостерігаються деякі певні відстані між ними. Однак, на відміну від твердого тіла, що має далекий порядок у розташуванні часток, у рідинах упорядкування у розташуванні молекул поширюється не на весь об'єм, а лише на малі його області, т. зв. сиботаксичні групи (або кластери, комплекси, мікрогрупування тощо). Тобто у рідині існує т. зв. ближній порядок, що характеризується, зокрема, радіусом першої координаційної сфери і числом найближчих сусідів (середнє координаційне число) [74].

У роботі [75] проведено розрахунок структурного фактору рідкого алюмінію $I(S)$ при температурі плавлення, який вказує на визначену подібність у будові ближнього порядку між рідким і твердим алюмінієм.

Нинішні досягнення у дослідженні рідкого стану металів докорінно змінили наші уявлення про його структуру. Рідкий метал являє собою досить складну мікронеоднорідну квазікристалічну систему, яка має ближній порядок. Поблизу точки плавлення у цій системі певний час існують групи (сиботаксиси або кластери), що мають атомарну структуру, яка майже не відрізняється від атомарної структури твердого металу. Однак ці уявлення мають важливий теоретичний зміст, утім для практичного використання у прикладних сферах їх недостатньо. Зокрема, наявність у розплаві незначних за масовим складом домішок (мікролегуючих чи модифікуючих) не змінює ближній порядок у розташуванні атомів, але призводить до принципових змін у структурі твердого металу. У контексті цього було здійснено спробу виявити вплив Ti та Sr на розташування атомів у рідкому сплаві Al-Si. Проте експерименти не виявили суттєвих змін у функції радіального розподілу. Тобто на формування структури під час кристалізації впливають інші фактори (наприклад, взаємодія електронних підсистем [76]). Загалом необхідно упереджено ставитися до результатів рентгенівських досліджень структури рідкого металу, адже вони базуються на статистичній обробці даних. А це означає, що отримана інформація відображає середні показники [74; 77] і принципово не може реагувати на незначні («тонкі») зміни, які, можливо, наявні при реалізації різних впливів на систему, що досліджується.

Традиційним засобом з'ясування механізму зростання кристалів є експериментальне вивчення зв'язку між швидкістю зростання кристалу $V_{\text{тф}}$ і переохолодженням ΔT на його поверхні. Під швидкістю зростання кристалу $V_{\text{тф}}$ розуміють або збільшення лінійних розмірів зростаючого кристалу, або кількість твердої фази, яка утворилася за певний час. Накопичено багатий фактичний матеріал щодо визначення виду функції $V_{\text{тф}}=f(\Delta T)$ для поволі зростаючих речовин здебільшого органічної природи (салол, гліцерин,

піперонал тощо). Поволі зростаючими вважаються речовини, максимальна швидкість зростання яких порівняно невелика (не більше 0,00009 м/с [78]).

Один із засобів дослідження кінетики зростання таких речовин полягає у тому [78], що середовище нагрівають до заданої температури T_6 , яка називається температурою «лазні», у ньому розміщують препарат, що досліджується, і вимірюють швидкість зростання кристалу при різноманітних значеннях T_6 . Зазвичай речовина розміщується у тонкому капілярі або між двома пластинками у вигляді тонкого слою, що омивається рідиною фіксованої заданої температури. Такі експерименти дають вид залежності швидкості зростання кількості твердої фази $V_{\text{тф}}$ від переохолодження ΔT_6 «лазні» $V_{\text{тф}} = f(\Delta T_6)$. Тут ΔT_6 визначається як $\Delta T_6 = T_n - T_6$ (де T_n – температура плавлення).

За відомих умов теплообміну препарату з навколишнім середовищем, можна шляхом розрахунку, визначити температуру $T_{\text{ф}}$ на кордоні поділу фаз і виявити, у такий спосіб, залежність швидкості зростання кількості твердої фази $V_{\text{тф}}$ від переохолодження ΔT на фронті $V_{\text{тф}} = f(\Delta T)$, де $\Delta T = T_n - T_{\text{ф}}$. Математична сторона таких задач, що відносяться до теплопровідності в області з рухомими межами, розроблена досить детально [79].

Однак цю методику непрямих вимірів можна застосовувати до металів лише у тому разі, коли кристали ростуть дуже повільно і мають правильне огранювання. Тобто за таких умов, що створюються для вирощування металевих монокристалів [80]. Якщо кристали мають типові для металів голчасті або дендритні форми і ростуть з підвищеною швидкістю, то така методика виявляється малоефективною [78] унаслідок надто незначного переохолодження на фронті кристалізації. Помилки, що пов'язані з перерахунком температури «лазні» на температуру фронту, перевищують значення величини $V_{\text{тф}} = f(\Delta T)$, яка вимірюється.

Інша група експериментальних засобів заснована на прямому вимірі температури фронту кристалізації, що реалізується за допомогою тонкої термопари, введеної у розплав. Ці засоби використовують для вивчення

кристалізації речовин різноманітної природи [81; 82]. Іноді їх застосовують і до металів при малих лінійних швидкостях зростання кристалів, що відповідає умовам вирощування обмежених монокристалів.

Для вимірів параметрів кристалізації при великих швидкостях зростання кристалів, що є характерним для металів, необхідно суттєво підвищити чутливість вимірювальної термопари і зменшити її інерцію. Ці вимоги обумовлені тим, що вимірювання температури потрібно здійснювати за надто короткий проміжок часу, протягом якого фронт кристалізації пересікає ближчу навколишність термопари. Очевидно, що у разі дослідження металів або металевих розплавів, реалізувати такі методики вкрай важко, оскільки, зазвичай, мають місце високі температурні агресивні середовища.

Значна кількість експериментальних досліджень утворення центрів кристалізації та їх подальшого росту була проведена ще у кінці XIX та на початку XX століть. Одержані у той час результати вважаються класичними і ретельно освітлені у монографії М. Фольмера, яка написана у 1934 році, перевидана у 1934 році [78] і є актуальною досі. У теорії кристалізації введено поняття швидкості утворення центрів кристалізації n_c і лінійної швидкості зростання кристалів v_k [83; 84]. Їхню залежність від переохолодження ΔT представлено на рис. 1.3.

Ці залежності мають екстремум, але для металів вважається, що він відсутній [84]. З рис. 1.3 також видно, що існують інтервали метастабільності для утворення центрів кристалізації ΔT_{m2} та для швидкості росту кристалів ΔT_{m1} . У науковій літературі вони мають радше якісний, аніж кількісний характер [83; 85], тому точного значення їх величин немає. Однак інтервал метастабільності ΔT_{m1} для швидкості росту кристалів значно менший, ніж інтервал метастабільності ΔT_{m2} для утворення центрів кристалізації і наближається до нуля (приблизно 0,1 град) [85].

Процес утворення зародків твердої фази при кристалізації поділяють на гомогенний і гетерогенний. Але в експерименті отримати гомогенну

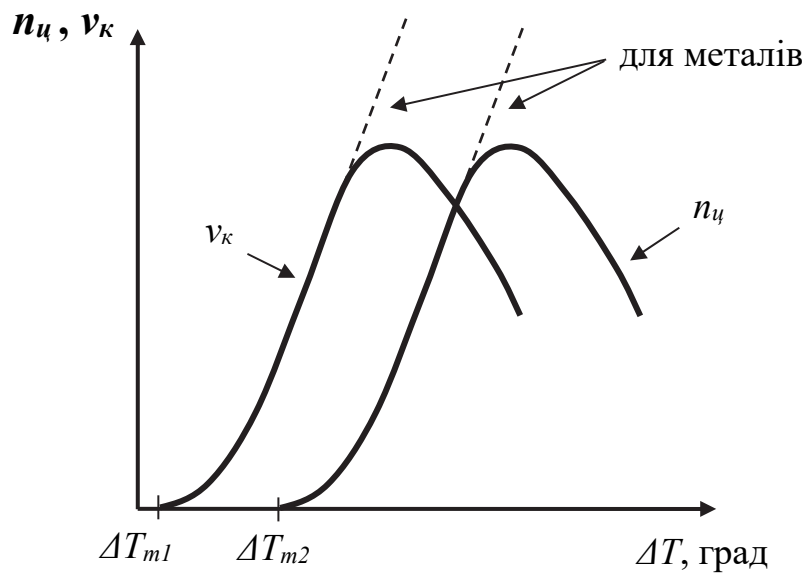


Рис. 1.3 Залежність основних параметрів кристалізації (швидкість утворення центрів кристалізації n_u і лінійна швидкість росту кристалу v_k від величини переохолодження ΔT).

ΔT_{m1} – інтервал метастабільності для швидкості росту кристалу;

ΔT_{m2} – інтервал метастабільності для швидкості утворення центрів кристалізації

кристалізацію майже неможливо, адже неможливо отримати ідеально чистий матеріал. Експериментатори докладають колосальні зусилля для отримання чисто гомогенного процесу утворення зародків, але такі досліді забезпечують чистоту експерименту в дуже малих об'ємах матеріалу і з певною часткою ймовірності [86; 87]. Зокрема, що для металів характерний нормальний механізм зростання кристалів [78], коли збільшення їх розмірів відбувається за рахунок того, що потік атомів із рідини на тверду поверхню перевищує потік атомів з цієї поверхні [73].

Однак майже всі ці результати одержані на модельних, прозорих матеріалах. Для металів характерно те, що вони не прозорі і неможливо зазирнути усередину металевого розплаву. Натомість існують експериментальні співвідношення, які зв'язують швидкість утворення центрів кристалізації $n_{\text{ц}}$ і лінійну швидкість зростання кристалів $v_{\text{к}}$ із величиною переохолодження ΔT [88]:

$$n_{\text{ц}} = K_n (\Delta T - \Delta T_{m2})^w, \quad (1.3)$$

$$v_{\text{к}} = K_v \Delta T^\mu, \quad (1.4)$$

де: K_n – коефіцієнт, що відповідає швидкості $n_{\text{ц}}$ при переохолодженні ΔT , яке на 1 град перевищує ΔT_{m2} ; K_v – коефіцієнт, що відповідає швидкості $v_{\text{к}}$ при переохолодженні $\Delta T = 1$ град перевищує ΔT_{m1} .

Показник ступеня w має значення – для чистих речовин від 2.0 до 3.0. Показник ступеня $\mu = 1$ відповідає механізму нормального росту і $\mu = 2$ – для дендритного росту. Числові значення цих коефіцієнтів показників ступенів отримані експериментально, тобто, щонайменше, досить точно визначений їхній порядок.

Експериментальні засоби дослідження кристалізації характеризуються великою трудомісткістю і одночасно низькою інформативністю, що обмежує їх ефективність при проведенні досліджень у галузі фізики процесу кристалізації. Тому значний інтерес для доповнення системи аналізу стану металевих розплавів новими можливостями становить теоретичний засіб

дослідження процесів фазових перетворень, що базується на побудові моделей різноманітного типу.

1.4 Теоретичні методи дослідження рідкого стану металів та кінетики процесу їх кристалізації

Під теоретичними дослідженнями процесу кристалізації тлумачать побудову моделей різного типу. Найпоширенішою методологією моделювання у науці і технологічних галузях виробництва є математичне моделювання. Чимало математичних моделей використовується при аналізі процесу кристалізації та інших фазових перетворень [89–92]. Використання сучасної електронно-обчислювальної техніки значно спрощує складні математичні розрахунки і дає змогу розвивати нові методи моделювання, наприклад, імітаційне моделювання [93]. Дедалі більше у наукових дослідженнях поширюється використання обчислювального (комп'ютерного) експерименту. Це стосується і досліджень теорії кристалізації, матеріалознавства, ливарного виробництва та інших галузей науки та виробництва [91; 92].

1.4.1 Теоретичні дослідження рідкого стану металів

Наразі для опису будови металевих розплавів використовуються статистичні і модельні способи.

Статистичні способи описують будову металевих розплавів за допомогою функції радіального розподілу $g(r, n, T)$, що є кількісною характеристикою упорядкованості в системі. Ймовірність виявлення центрів двох часток W в об'ємі V на взаємній відстані r з неточністю dr при заданій температурі T і щільністю часток n , може бути визначена за таким виразом [74]:

$$dW(r) = g(r, n, T) \frac{4\pi r^2 dr}{V}. \quad (1.5)$$

Функція радіального розподілу $g(r)$ атомів відображає їхнє середнє число у будь-якому сферичному шарі, що знаходиться на деякій відстані r від центра атома, прийнятого за початковий. Найбільш надійно функція $g(r)$ обчислюється з експериментальних даних розподілу у просторі інтенсивності когерентного розсіювання рентгенівських променів чи нейтронів $I(k)$ рідиною за допомогою рівняння:

$$g(r) = 1 - \frac{1}{2\pi^2 nr} \int_0^\infty \left[\frac{I(K)}{Nf^2} - 1 \right] K \sin(kr) dK, \quad (1.6)$$

де: N – число центрів, що розсіюють; f – атомний фактор розсіювання; K – вектор розсіювання.

Графік функції радіального розподілу (рис. 1.4) дає змогу зобразити характер розміщення часток рідини: положення першого максимуму функції $g(r)$ дає найбільш ймовірні відстані між частками, а через площу під першим максимумом можна розрахувати координаційне число Z рідини. Величини $r_{\max}$ і Z називають параметрами ближнього порядку. Для рідких металів значення $r_{\max}$ і Z у точці плавлення близькі до їхніх значень у твердому стані [74].

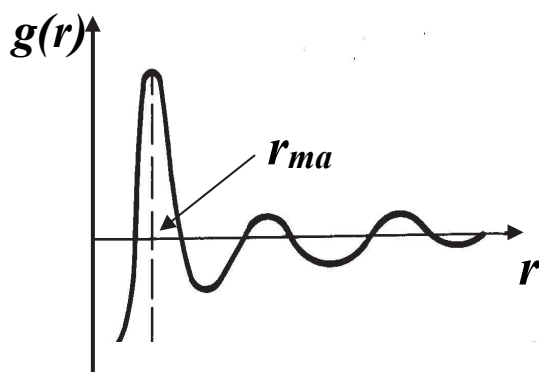


Рис. 1.4 Графік функції радіального розподілу $g(r)$ від радіуса r [74]

Однак для рідини координаційне число Z і радіуси координаційних сфер є лише деякими усередненими характеристиками і їм може відповідати значна кількість різноманітних комбінацій цілком конкретних атомних упакувань [74].

Зокрема, та сама експериментальна залежність інтенсивності розсіювання випромінювання і відповідна їй функція радіального розподілу атомів можуть бути отримані для різних металевих розплавів, що відрізняються як структурою сиботаксичних угруповань, так і їх кількістю. Тому для обґрунтування характеру температурних і концентраційних залежностей металевих розплавів, використовують інші, більш конкретні способи опису їхньої структури.

У модельних способах використовують наближені теорії, що побудовані не тільки на загальних положеннях статистичної механіки, але і на використанні спеціальних моделей та емпіричних допущень [74; 94]. Це сприяє досягненню збігу висновків теорії з досвідом, обчисленню різних термодинамічних функцій і припущенням про структуру металевого розплаву. Зокрема, ґраткова теорія рідини (теорія вільного об'єму) [74] дає змогу, порівняно простим шляхом, у першому наближенні описати термодинамічні властивості розплавлених металів. Відповідно до вихідної моделі цієї теорії кожна молекула рідини рухається в чарунці об'ємом $v = \frac{V}{N}$, який утворено сусідніми частками. Існує припущення [74], що кількість комірок (чарунок) і молекул однакова, чим, звісно, переоцінюють ступінь упорядкування часток у розплаві. У цій моделі також усуваються перескоки часток з однієї комірки в іншу. Крім того, приймають, що кожна частка знаходиться у деякому усередненому полі, що створюється Z найближчими сусідами, рівномірно розподіленими на поверхні кулі. Для визначення термодинамічних властивостей розплаву, визначають повну потенційну енергію системи U [74; 75]:

$$U = \frac{1}{2}NZ\varphi(0) + \sum_{i=1}^N Z\varphi(r_i), \quad (1.7)$$

де: $\varphi(r_i)$ – потенційна енергія частки, що має однакову функціональну залежність для всіх чарунок ($i = 1, 2, 3 \dots N$); $Z\varphi(0)$ – потенційна енергія

частки, що знаходиться в центрі комірки. Після цього, використовуючи статистичний інтеграл, можна одержати рівняння стану системи:

$$p = -\frac{ZN}{2} \left(\frac{\partial \varphi(0)}{\partial V} \right)_T + Nk_B T \left(\frac{\partial \ln v_f}{\partial V} \right)_T, \quad (1.8)$$

де перший член пропорційний «потенційній частині» тиску p , що відповідає потенційній енергії системи молекул об'єму V , а друга частина є «термічним тиском» з температурою T , який зумовлено рухом молекул у своїх комірках.

Зі збільшенням теплового руху, ця модель стає малоефективною для опису властивостей рідин.

Можливі також і інші варіанти моделювання структури ближнього порядку рідких металів у рамках квазікристалічної моделі. Однак квазікристалічні моделі хоча і дають змогу задовільно описувати термодинамічні властивості рідин, але жодна з них обґрунтовує структуру, яка, зазвичай, постулюється заздалегідь.

Утім, що стосується модельних способів опису структури металевих розплавів, вони тлумачать розплав як сукупність атомних утворень (сиботаксичних угруповань) з конкретною структурою у кожній із них. Отже, у модельних способах виходять з мікронеоднорідної будови рідких металів і сплавів, яка складається із мікрообластей, що мають ближній порядок. Підставою для побудови моделі є результати фізико-хімічних і дифракційних досліджень.

Однак теоретичні (математичні) моделі, які застосовуються для опису рідкого стану, ставлять за мету, насамперед, розрахунок основних термодинамічних параметрів матеріалів. Поки що вони є лише приблизними і взагалі не розглядають процеси, що протікають при фазовому переході із рідкого стану у твердий (кристалізацію). Очевидно, що теоретичне дослідження процесу кристалізації, за якого формується структура металів і сплавів, і досі базується на методах класичної

термодинаміки. Наскільки класичний термодинамічний підхід, який обумовлює рівноважні умови протікання процесів, що досліджуються, відповідає реальним умовам багатьох технологічних процесів у ливарному виробництві, потрібно з'ясовувати у кожному конкретному разі.

1.4.2 Термодинамічний аналіз процесу утворення зародків твердої фази при кристалізації

Процес кристалізації у класичних працях М. Фольмера [83], Х. Билоні [87] та Б. Чалмерса [95] прийнято розглядати з позицій рівноважної термодинаміки. Такий підхід свого часу дав змогу встановити основні закономірності комплексу фізико-хімічних явищ, під яким тлумачать твердіння металів. Розвиток самої термодинаміки і сучасні вимоги до задач моделювання формування структури металів у процесі затвердіння призводять до необхідності теоретичного аналізу обґрунтованості передумов, що приймаються при термодинамічному дослідженні кристалізації.

Кристалізацію прийнято трактувати як процес, що складається з двох стадій: а) утворення центрів кристалізації; б) їхнього росту. Причому утворення центрів кристалізації може бути як гомогенним, так і гетерогенним. Існує три механізми росту кристалів: ріст при двовірному утворенні зародків; ріст за допомогою гвинтових дислокацій; безупинний (або нормальний) ріст. Проаналізуємо спершу основні положення гомогенного утворення зародків у розплаві. Це явище розглядають як утворення дрібних кристаликів, здатних рости всередині їхнього власного розплаву.

З урахуванням термодинамічних закономірностей, установити положення границі розділу $S - L$ (тверде – рідке) не просто. Хоча тверда фаза має меншу вільну енергію, малі її частки не обов'язково будуть стабільні через вільну енергію, яка зв'язана з границею розділу $S - L$. Тому, визначаючи зміну вільної енергії, що відповідає переходу "рідина – тверда

фаза", враховують не тільки питому вільну енергію двох фаз, але і вільну енергію межі поділу. Це обумовлено тим, що атоми на поверхні дуже маленького кристала мають більшу енергію, ніж поверхневі атоми великого кристала. У такий спосіб рівноважна температура, за якої атоми приєднуються до поверхні розділу і залишають її з однією і тією самою швидкістю, є меншою саме для маленького кристала. Отже, тверда частка перебуватиме у рівновазі з рідиною тоді, коли її кривизна має визначений критичний радіус. За умови більшого переохолодження, більша енергія компенсує вільну поверхневу енергію, тому критичний радіус зменшуватиметься зі збільшенням переохолодження. Однак вважається, що за будь-якої температури у розплаві будуть існувати кластери, які мають характеристики твердої фази і для яких характерним є статистичний розподіл за розмірами [85; 96].

За будь-якої температури існують зародки максимального розміру, здатні до існування. Цей максимальний розмір збільшується зі зменшенням температури. Гомогенне утворення центрів кристалізації відбувається, коли переохолодження таке, що може існувати кілька зародків з радіусом більш критичного радіуса [85; 96; 97].

Зміну вільної енергії при утворенні об'єму і поверхні зародка сферичної форми радіуса r описують добре відомим співвідношенням [85; 96]:

$$\Delta G = -\frac{4}{3}\pi r^3 L \frac{\Delta T}{T_k} + 4\pi r^2 \gamma_{S-L}, \quad (1.9)$$

де: ΔG – зміна вільної енергії Гіббса; r – радіус зародка; L – прихована питома теплота кристалізації; T_k – температура кристалізації; $\Delta T = T_k - T$ – переохолодження; γ_{S-L} – вільна енергія поверхні розділу $S-L$.

Критичний радіус r^* визначається з умови, яка визначає екстремальну точку залежності (1.9) [85; 96]:

$$\frac{\partial \Delta G}{\partial r} = 0 \quad (1.10)$$

і дорівнює:

$$r^* = 2\gamma_{s-L} \frac{T_k}{L\Delta T} \quad (1.11)$$

Співвідношення 1.9–1.11 отримані з припущенням, що переохолодження ΔT є постійним. У більшості реальних технологічних процесах, в яких відбувається кристалізація, ця умова не виконується. Тому для реальних умов, екстремальну точку потрібно визначати вже за рівністю нулю градієнта функції $\Delta G = f(r, \Delta T(t))$. У такому разі переохолодження ΔT є функцією часу t , а такого параметра у класичній термодинаміці не існує.

Однак, підставляючи оціночні значення для γ_{s-L} і L , [85] одержано вираз для критичного радіусу r^* через атомний діаметр a :

$$r^* = 0.6 \frac{T_k}{\Delta T} a. \quad (1.12)$$

Використовуючи вираз (1.12), можна з'ясувати, у який спосіб змінюється розмір критичного зародка r^* , наприклад, для чистого алюмінію, при різних переохолодженнях (таблиця 1.1). Зокрема, для переохолодження в 1 град (тобто $\Delta T = 1$) зародок r^* складається з 560 атомів. Звичайно, їх може бути і більше. Але формула (1.12) дає оцінку знизу (не менше ніж). Для переохолодження у 10 град зародок критичного розміру складається лише із 56 атомних розмірів a . До того ж при максимально можливому переохолодженні, що визначається як [87; 94]

$$\Delta T = 0,2T_k, \quad (1.13)$$

розмір критичного зародка взагалі становить усього три атоми (що легко розрахувати, підставляючи (1.13) в (1.12)). Такий результат показує, що строгість термодинамічного підходу, і конкретно виразів (1.11) та (1.12), забезпечується тільки за рівноважних умов, коли $\Delta T \rightarrow 0$ (при цьому $R_{кр} \rightarrow \infty$).

Тобто, у будь-якому разі можна стверджувати, що за кількістю атомів зародок критичного розміру є мікроутворенням, бо він має кінцеве значення елементів (атомів). Проте класична фізика і, зокрема, термодинаміка «працюють» з макрооб'єктами, розмір яких може вважатися нескінченно малим, але при цьому, вони містять нескінченну безліч елементів [98]. Так, у

підручнику з термодинаміки можна знайти «... термодинамические системы состоят из громадного числа частиц N ($N \approx 10^{23}$)...» [99, с. 18].

Таблиця 1.1

**Залежність розміру критичного зародка r^* від величини
переохолодження (для чистого алюмінію) з $T_k = 933$ К**

№	ΔT , град	$\frac{T_k}{\Delta T}$	Кількість атомів в r^* , шт.
1.	1	933	560
2.	10	93	56
3.	20	47	28
4.	$\Delta T_{\text{крит}} = 0,2T_k$	5	3

Отже, незважаючи на певні, звичні погляди на процес утворення зародків нової фази, повного його тлумачення поки що досі немає. Макротеорія (класична термодинаміка) за формулами (1.11) або (1.12) дає розрахунки об'єктів мікросвіту. У контексті цього виникає закономірне питання: наскільки обґрунтованим є застосування методів класичної термодинаміки (термостатики) до об'єктів мікросвіту, опис поведінки яких ґрунтується на поняттях і принципах квантової механіки.

У роботі [100] також зазначено, що традиційний підхід термодинаміки (дослідження окремих рівноважних станів) для більшості практично важливих задач сучасного виробництва вже майже вичерпав свої можливості.

Сучасна термодинаміка є феноменологічною польовою теорією загальних закономірностей процесів, які протікають у макроскопічних тілах й обмовлені взаємним перетворенням теплоти й інших форм руху. Вона є узагальненням рівноважної термодинаміки, основні принципи якої відомі як перший і другий початок (закон) термодинаміки, що закладені ще в середині ХІХ ст., і яку часто називають термостатикою, оскільки час у цій теорії, як параметр, відсутній.

Поки що в теоретичній фізиці термодинаміку розділяють на три підрозділи, в залежності від внутрішнього стану фізичної системи, а саме: рівноважну термодинаміку, лінійну нерівноважну термодинаміку та нелінійну нерівноважну термодинаміку [99; 101; 102]. Останні два підрозділи виникли і розвиваються приблизно з середини ХХ ст., але у прикладних науках і досі вони майже не застосовуються. Це зумовлено декількома причинами. По-перше, існує т. зв. «інерція мислення», яка підказує навіть у науці діяти звичними, добре відомими методологіями, забуваючи, при цьому, проводити ретельний аналіз умов їх застосування. По-друге, існує певний розрив між теоретичними, фундаментальними дослідженнями та застосуванням їх доробків у вирішенні конкретних, прикладних задач. Цей розрив є наслідком дефіциту часу та коштів як у «теоретиків», щоб займатися «малоцікавими» задачами прикладного рівня, так і у «практиків», щоб опановувати нові теоретичні надбання. По-третє, досі не існує конкретних критеріїв, які дали б змогу хоча б приблизно визначитися, до якого підрозділу звертатись у певному, конкретному разі. Утім нинішня ситуація, яка вимагає креативного розвитку інноваційних технологій, потребує інтенсивного залучання найсучасніших знань і теорій до модернізації вже наявних технологій та до створення нових. У зв'язку з цим, доречно розглянути процес кристалізації з позицій сучасної термодинаміки.

У термодинамічно рівноважних системах [99; 102] температура T і хімічний потенціал μ постійні уздовж усієї системи:

$$\text{grad}(T) = 0, \quad (1.14)$$

$$\text{grad}(\mu) = 0. \quad (1.15)$$

Якщо ці умови не виконуються ($\text{grad}(T) \neq 0$, $\text{grad}(\mu) \neq 0$), у системі виникають незворотні процеси переносу маси, енергії, електричного заряду тощо.

При узагальненні класичної термодинаміки для нерівноважних процесів, виходять із уявлення про локальну рівновагу. Відомо [99; 101; 102],

що час релаксації зростає зі збільшенням розмірів системи, тому окремі макроскопічно малі частини системи приходять самі собою у рівноважний стан значно раніше, ніж установлюється рівновага між цими частинами. Тому в нерівноважній термодинаміці приймають, що, хоча загалом стан системи є нерівноважним, окремі її малі частини перебувають у рівновазі (точніше вони є квазірівноважними), але мають термодинамічні параметри, які повільно змінюються в часі і від точки до точки.

Розміри цих фізично малих рівноважних частин нерівноважної системи і час зміни термодинамічних параметрів у них визначаються у термодинаміці експериментально. Звичайно, приймається [102], що фізично елементарний об'єм l^3 , з одного боку, містить велику кількість часток ($v_0 \ll l^3$, v_0 – об'єм на одну частку), а з іншого боку, неоднорідності макроскопічних параметрів $a_i(x)$ на довжині l малі, порівняно з величиною цих параметрів:

$$\left(\left| \frac{\partial a_i}{\partial x} \right| l \ll a_i \right), \quad (1.16)$$

тобто

$$v_0^{\frac{1}{3}} \ll l \ll \left| \frac{l}{a_i} \frac{\partial a_i}{\partial x} \right|^{-1}. \quad (1.17)$$

Час t зміни термодинамічних параметрів у фізично малих рівноважних частинах набагато більший за час t_i релаксації у них і набагато менший за час t_l , за якого встановлюється рівновага у всій системі:

$$t_i \ll t \ll t_l. \quad (1.18)$$

Ці міркування мають досить загальний характер і, мабуть, є доволі грубою оцінкою, яку складно застосувати на практиці до конкретних систем.

Для того, щоб з'ясувати, з якою системою доводиться мати справу у тому чи іншому разі, а отже, якими фізичними уявленнями і теоріями можна скористатися, необхідно визначити критерій «рівноважності» або «нерівноважності» системи. Маючи такий об'єктивний, фізично обґрунтований критерій, який придатний до аналізу конкретної системи,

можна безпомилково (принаймні з достатньою надійністю) вибрати метод опису і відповідний математичний апарат. Для обґрунтування такого критерію, потрібно проаналізувати характерні ознаки «рівноважних», «слабо нерівноважних» і «сильно нерівноважних» систем.

Дослідження поведінки рівноважних систем є найбільш розробленим розділом термодинаміки, а історично – її першим етапом. У зв'язку з цим теорії більшості наявних технологічних процесів ґрунтувалися саме на її принципах. У рівноважній області потоки, сили і виробництво ентропії дорівнюють нулю. Хоча реальні технологічні процеси йдуть з кінцевою швидкістю і тому не перебувають у рівновазі, використання рівноважної теорії (зокрема і в металургії), як і раніше, залишається визначальним, що обумовлено тим, що накопичені за багато десятиліть конкретні дані про термодинамічні потенціали різних речовин (ентальпії, ентропії і вільної енергії) отримані саме для рівноважних умов. У рамках цієї теорії для типових термодинамічних систем визначені термодинамічні потенціали, екстремуми яких задають стани – аттрактори, до яких мимоволі прагне система з визначеними граничними умовами. Для ізольованої системи таким потенціалом є ентропія S , для замкнутої ізотермічної системи – вільна енергія F . Аналіз співвідношення $F = U - TS$ показує, що рівновага є результатом конкуренції між внутрішньою енергією U і ентропією S , а температура T виступає в ролі множника, який визначає відносне значення цих факторів. За низьких температур виникають упорядковані, з малою ентропією низько енергетичні (статичні) структури – кристали. Кінетична енергія за таких умов мала, порівняно з потенційною енергією взаємодії між молекулами. За високих температур домінує ентропія і у системі встановлюється молекулярний хаос, серед якого за певних умов (насамперед досить високого ступеня відхилення від рівноваги), можливе виникнення динамічних (дисипативних) структур [103].

У слабо нерівноважних системах (область лінійної нерівноважної термодинаміки) термодинамічні сили (градієнти концентрацій, температур

тощо) невеликі, а потоки лінійно залежать від сил. Виконуються співвідношення взаємності Онсагера. Для області лінійної термодинаміки доведена [102] теорема про мінімальне виробництво ентропії, з якої випливає, що будь-які флуктуації, що з'явилися усередині такої системи або були внесені ззовні, згладжуються. Система завжди прагне до стаціонарного стану, у якому збільшення ентропії dS дорівнює нулю. Зі співвідношення другого закону термодинаміки для відкритої системи маємо:

$$dS = dS_i + dS_l, \quad (1.19)$$

$$dS_i = dS_l < 0, \quad (1.20)$$

або

$$dS_i = -dS_l, \quad (1.21)$$

де: dS_i – зміна ентропії за рахунок процесів усередині системи; dS_l – зміна ентропії за рахунок обміну з навколишнім середовищем.

Тобто така система поставляє ентропію зовнішньому світу, має властивість забувати початкові умови і знищує локальні флуктуації. Єдиним натяком на область її існування є лінійна залежність потоків від сил.

Лінійна термодинаміка відображає стабільне передбачуване поведіння систем, які прагнуть до мінімального рівня активності, що є характерним для технологічних режимів більшості наявних металургійних процесів [102].

Сильно нерівноважні системи описуються законами нерівноважної, нелінійної термодинаміки. Перебування системи у цій нерівноважній області є необхідною, хоча і недостатньою умовою самоорганізації (тобто утворення дисипативних структур). Узагальнити теорему про мінімум виробництва ентропії для нелінійної області [104], на жаль, не вдалося. Стаціонарний стан у цьому разі не визначається однозначно за допомогою обраного у належний спосіб потенціалу. Саме цю область треба виділити насамперед за допомогою критерію, що дає змогу визначити поріг (відстань від рівноваги), за яким флуктуації можуть призводити до нового режиму. Умовно кажучи,

критерій повинен провести межу (поріг), за якої стає можливим вихід у хиткий стан (біфуркацію), за якого однаково ймовірні два результати: або система може залишитися на термодинамічній гілці, або вона перейде у новий структурний і енергетичний стан, необхідним для підтримки цієї динамічної структури. При переході через поріг (точку біфуркації), різко зростає роль флуктуацій і елемента випадковості, тоді як до цього порога переважають елементи детермінованості і передбачуваності [105].

Зокрема, для хімічних систем у сильно нерівноважній області не існує універсального закону, з якого можна було б одержати висновок про поведінку усіх без винятку систем [104]. Однак у теорії отримане співвідношення дає змогу зв'язати умови хімічної нестійкості з параметрами кінетики і термодинаміки [105]:

$$\delta_x P(\lambda_c) = 0 \quad \text{при} \quad t > t_0, \quad (1.22)$$

де: величину $\delta_x P$ можна інтерпретувати як збільшення виробництва ентропії активної частини системи; λ_c – міра далекості від рівноваги.

Визначення умов, за яких може відбуватися втрата термодинамічної стійкості, зводиться до визначення знака величини $\delta_x P$, а в остаточному підсумку – величини [105]:

$$\delta_q P = \delta w \frac{\delta A}{T}, \quad (1.23)$$

де: w – швидкість реакції; A – хімічна спорідненість.

Можна піти іншим шляхом і розробити критерій нерівноважності системи через аналіз експериментальних даних. Очевидним є те, що до можливих варіантів критеріїв, що визначатимуть, до якого із зазначених підходів потрібно звернутися досліднику при математичному описанні конкретної системи, відносяться швидкість процесу, його однорідність [106; 107] і бажаний рівень згоди теоретичних результатів з експериментом. Передусім необхідно зосередитися на питанні про природу розглянутої системи і про необхідність фізичної інтерпретації термодинамічної моделі.

Звичайно, такий критерій не матиме винятково фізико-математичного обґрунтування і не посягатиме на універсальність стосовно усіх фізичних законів.

Своєрідними моделями кристалізації сплавів є їх діаграми стану, тобто графічні залежності стану сплавів цієї системи від їх концентрації (хімічного складу) і температури [108]. З їх допомогою можна встановити, які саме перетворення відбуваються у сплавах при нагріванні та охолодженні; визначити, які фази і які структури формуються при цих перетвореннях та за яких температур. Однак діаграми стану побудовані для винятково рівноважного випадку, коли вважається, що перетворення відбувається нескінченно довго при температурі, яка змінюється також нескінченно довго. Усі дифузійні процеси, при цьому, встигають пройти повною мірою. Звісно, за таких умов немає ані градієнту температури, ані градієнту концентрації. Утім добре відомо, що при збільшенні швидкості охолодження, лінії діаграм зміщуються, з'являються фази, яких не повинно бути за таких концентрацій і температур [107; 109], змінюється структура сплавів. Тобто умови кристалізації у цьому разі перестають бути рівноважними. У такий спосіб критерієм «нестійкості» системи може бути швидкість охолодження, за якої з'являються нерівноважні фази (такі, яких немає на рівноважній діаграмі стану).

Як приклад, доречно розглянути діаграму стану сплаву Al-Si (рис. 1.5).

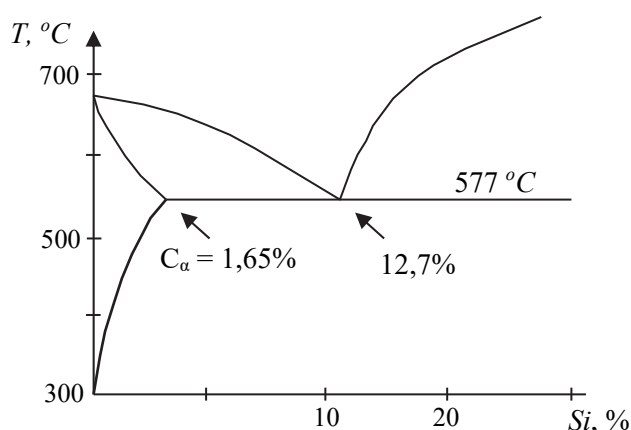


Рис. 1.5 Фрагмент діаграми стану сплаву Al-Si

Рисунок свідчить, що це звичайний бінарний сплав з евтектикою, яка з'являється при концентраціях кремнію Si вище максимальної розчинності у твердому стані $C_a = 1,65\%$. Зазвичай при експериментальній побудові діаграм стану швидкість охолодження – нагріву, обирають

~ 1 град/хв (~ 0,015 град/с) [67; 68].

Було проведено експеримент, за якого охолоджували невелику порцію розплаву Al-Si зі швидкістю 0,5–0,7 град/с. Маса сплаву, який досліджували, була 20–22 г, діаметр мікротігля, в якому знаходився розплав, – 21 мм. Розрахункове значення градієнта температури на перетині проби дорівнювало 3 град. При концентрації кремнію від 0,1 % до 0,3 % розплав кристалізувався як твердий розчин, а починаючи з концентрації другого елемента від 0,3 % і більше, з'являлася нерівноважна евтектика, що добре фіксувалося як на кривій охолодження, так і в структурі твердого сплаву.

Таблиця 1.2

Вплив швидкості охолодження V_{ox} на точку C_a діаграм стану бінарних систем

Система	C_a , %	$C_{евт}$, % при V_{ox} , град/хв		
		(град/с)		
		2 (0,033)	80 – 100 (1,333 - 1,667)	1000 (16,667)
Al-Si	1,65	0,1	0,1	0,2
Al-Cu	5,70	0,1	0,1	0,3
Al-Mg	15,35	4,5	0,5	1,0
Al-Zn	82,2	20,0	2,0	3,0

У роботі [110] проведено експериментальні результати впливу швидкості охолодження на точку C_a діаграм стану різних систем (табл. 1.2). Згідно з таблицею нерівноважна евтектика спостерігається вже при швидкостях 2 град/хв (~ 0,033 град/с) і, очевидно, що більшість технологічних процесів з участю кристалізації, можна вважати нерівноважними. Подальше підвищення швидкості охолодження майже не впливає на зсув точки C_a . Окрім того, зазначено [111], що ступінь ліквідації в алюмінієвих сплавах залежить від швидкості охолодження.

У такий спосіб одним із можливих критеріїв можна обрати швидкість охолодження. З її допомогою зручно поділяти процеси на рівноважні і нерівноважні.

У рівноважних системах температура T постійна уздовж усієї системи ($grad(T)=0$). Ураховуючи цю умову, логічною є побудова одного з варіантів критерію нерівноважності системи через градієнти температури, застосовуючи, наприклад, відомий з теплофізики критерій Біо (Bi):

$$Bi = \frac{\alpha r_0}{\lambda}, \quad (1.24)$$

де: r_0 – характерний розмір системи; α – коефіцієнт тепловіддачі з поверхні тіла, яке охолоджується; λ – коефіцієнт теплопровідності матеріалу системи.

Відомо [112], що при виконанні умови $Bi \ll 1$, градієнт температури у системі наближається до нуля. При $Bi \cong 1$, його величина має суттєве значення і при $Bi \gg 1$ – різниця між температурою в центрі системи і на її границі дуже велика. Виникає аналогія:

- 1) $Bi \ll 1$ – систему можна вважати рівноважною (область рівноважної термодинаміки);
- 2) $Bi \cong 1$ – систему можна вважати слабо нерівноважною (область лінійної нерівноважної термодинаміки);
- 3) $Bi \gg 1$ – систему можна вважати сильно нерівноважною (область нелінійної нерівноважної термодинаміки).

За таких умов варіант $Bi \cong 1$ є достатньо умовним. Проте очевидно, що такий критерій не може бути самостійним, оскільки він не має інформації відносно швидкості процесу. А згідно з прикладом сплаву Al-Si за малого градієнта температур уздовж перерізу мікротігця, процес кристалізації при цьому є нерівноважним (формується нерівноважна евтектика) за рахунок швидкості охолодження. Тому можливо розглядати (або оцінювати) сумісно величину градієнта температур у системі та швидкість фізичного (хімічного) процесу, що відбувається у ній.

Тобто варіантами критеріїв для визначення термодинамічного стану системи при твердінні може бути:

- швидкість охолодження, за якої з'являються нерівноважні фази;
- величина градієнта температури у системі, яка характеризується критерієм Біо (Bi);
- сумісна комбінація швидкості охолодження та величини градієнта температур у системі.

З'ясувати практичну придатність цих варіантів критерію нерівноважності системи, яка досліджується, можна тільки експериментально. Відповідно до літературних джерел на формування структури сплавів, передусім, впливають саме швидкість охолодження та величина градієнта температур.

1.5 Математичне моделювання процесів кристалізації

Моделлю, яку широко використовують при математичному описі процесу кристалізації чистих металів, є класична задача промерзання ґрунту, запропонована Й. Стефаном ще у 1889 р. [113; 114]. Основними фізичними припущеннями при її формулюванні є:

- температурне поле у рідкій та твердій фазах описується рівнянням теплопровідності з відповідними характеристиками;
- кристалізація (плавлення) відбувається на межі поділу фаз, яка визначається рівнянням:

$$Z = j(x, y, t), \quad (1.25)$$

$$j(x, y, 0) = j_0, \quad (1.26)$$

при цьому припускається існування однозначно гладкої поверхні розділу фаз;

- фазовий перехід відбувається в рівноважних умовах, тобто на межі розділу фаз задана рівноважна температура кристалізації $T_{кр}$ (або температура плавлення $T_{пл}$):

$$T = T_{кр} \quad (1.27)$$

при $Z = j(x, y, t)$;

– швидкість проходження межі розділу фаз визначається умовою теплопроводу прихованої теплоти фазового переходу (умова Стефана):

$$\lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial Z} - \lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial Z} = L\rho \frac{\partial Z}{\partial t}, \quad (1.28)$$

де: T_1, T_2 – температури рідкої та твердої фаз відповідно; λ_1, λ_2 – коефіцієнти теплопроводності рідкої та твердої фаз відповідно; Z – координати межі поділу «рідке – тверде»; L – питома теплота кристалізації; ρ – густина; t – час.

Умова (1.28) доповнює рівняння у часткових похідних параболічного типу [113], які описують процес теплопередачі в рідині (індекс 1) та у твердій фазі (індекс 2):

$$\frac{\partial T_1}{\partial t} = a_1^2 \frac{\partial^2 T_1}{\partial Z^2}, \quad (1.29)$$

$$\frac{\partial T_2}{\partial t} = a_2^2 \frac{\partial^2 T_2}{\partial Z^2}, \quad (1.30)$$

де a_1 та a_2 – відповідні коефіцієнти температуропроводності.

Задача Стефана в класичній постановці теоретично добре досліджена. Є чимало літератури, присвяченої цьому питанню. Проте така постановка задачі не в усіх випадках задовільно описує процес кристалізації [114]. Зокрема, вона не пристосована до опису кристалізації об'єму розплаву, переохолодженого у початковий момент часу з зовнішньої поверхні за умови відсутності запалу. Якщо в розплав, що переохолоджений в початковий момент часу, введено запал (тобто задано початкове положення межі розділу фаз), то такий процес кристалізації можна описати в рамках задачі Стефана, хоча він вважається незадовільним [115]. Справді, коли фронт кристалізації (тобто поверхня поділу фаз) рухається, то в об'ємі розплаву зберігається переохолодження, причому температурний градієнт перед фронтом від'ємний. Але у такому разі можливе або зростання дендритів з причини втрати стійкості плоского фронту, або спонтанне об'ємне зародження

кристалів [116; 117]. Очевидно, що задачі в класичній постановці не можуть описувати вказані ефекти, бо вони пропонують розв'язок, який описує пересування плоского фронту кристалізації. Однак існує випадок, коли вони призводять до розв'язку з переохолодженням в об'ємі розплаву, яке виникає при кристалізації. Зокрема, дослідження модельних задач спрямованої кристалізації зливка у квазістаціонарному випадку засвідчило, що при швидкості кристалізації, яка перевищує деяку критичну, в об'ємі розплаву виникає переохолодження, причому із зростанням швидкості кристалізації збільшується зона, що переохолоджена [114].

Інший приклад, що показує можливість появи переохолодження перед фронтом кристалізації, є автомодельний розв'язок термодифузійної задачі в постановці Стефана, яке було проаналізовано у праці [118].

Перелічені приклади вказують на необхідність більш точного, адекватного фізичному процесу описання кристалізації, при цьому у постановці задачі необхідно враховувати фізичні чинники, що зменшують переохолодження. Узагальнення постановки задачі Стефана з переліком зазначених чинників запропоновано у роботах [119–121]. Однак зазначений підхід цілком успішно використовується для дослідження процесів кристалізації чистих металів, бінарних сплавів, формування пористості у металевих матеріалах [122–127].

У роботах [78; 128] запропоновано теорію квазірівноважної двофазної зони. Основна передумова цієї теорії полягає у тому, що якщо в об'ємі розплаву виникає переохолодження, то воно миттєво знімається зростаючими дендритами. У такий спосіб виникає двофазна зона – дисперсна область, яка зайнята дендритами. Переохолодження у ній повинно дорівнювати нулю. Класичними засобами досліджено розв'язок цієї задачі на модельних прикладах квазістаціонарних і автомодельних задач. При додатковому припущенні відсутності дифузії у двофазній зоні, вони зводяться до відомої задачі – розв'язок рівняння теплопровідності із заданими нелінійними коефіцієнтами. А у роботі [129] запропоновано засіб

чисельного розв'язання поставленої задачі, який засновано на використанні явної різницевої схеми задачі теорії двофазної зони. Ці розв'язки задовільно описують процеси масової кристалізації бінарних розплавів і досить широко використовуються для опису різноманітних процесів одержання зливків і відливок.

У працях [130, 131] запропоновано інший підхід до узагальнення задачі Стефана: замість умови рівноваги (1.28), на межі розділу фаз задається кінетичне рівняння:

$$u = f(\Delta T), \quad (1.31)$$

де: u – швидкість розповсюдження межі розділу фаз; ΔT – переохолодження.

Тобто, така зміна постановки задачі не знімає жодного з недоліків постановки задачі Стефана. Швидкість кристалізації обмежується умовою тепловідводу прихованої теплоти фазового переходу (1.28), а не кінетичною умовою (1.31) і, здебільшого, визначається саме умовою (1.28) на фронті кристалізації. Переохолодження можна визначити з (1.31) за вже знайденим значенням u . Існує припущення [114], що у практично важливих випадках швидкість кристалізації невелика і переохолодження на фронті кристалізації не переважає сотих і навіть тисячних часток градусу. Зокрема, якщо задати нормальний механізм зростання кристалу $u = K_u \Delta T$ [88], то для металів коефіцієнт $K_u \geq 0,1\text{--}0,4$ м/(с·град) і переохолодження ΔT на фронті кристалізації не переважатиме 10^{-2} град при $u \leq 10^{-3}$ м/с. Очевидно, що умова (1.31) майже не впливатиме на розв'язок задачі. Згідно з оцінками авторів роботи [130] розв'язок задачі з умовою (1.31) відрізняється від відповідного автомодельного розв'язку задачі Стефана у класичній постановці лише протягом 10^{-6} с.

Особливі труднощі виникають при спробі побудови узагальненої теорії задачі кристалізації бінарного розплаву (термодифузійна задача). По-перше, немає робіт, у яких було б запроваджено поняття узагальненого розв'язку для системи термодифузійних рівнянь. По-друге, узагальнена постановка задачі

призводить до сильно нелінійної системи, яка не досліджувалася у літературі [114].

Одержані узагальнені рівняння описують кристалізацію як суцільне середовище без виділення границь двофазної області. Узагальнений розв'язок поставленої задачі знайдено шляхом введення параметра, що має простий фізичний зміст, який приводить систему рівнянь до параболічної системи [114]. Одержані апріорні оцінки дають змогу обґрунтувати ефективні стійкі різницеві засоби розв'язків подібної задачі.

Відомо, що структура закристалізованого матеріалу, його мікро- і макронеоднорідність значною мірою залежать від первинної структури двофазної зони. Для того, щоб розв'язок поставленої задачі якісно описував елементи структури двофазного середовища, при її постановці необхідно враховувати кінетику об'ємної кристалізації. Така постановка задачі повинна містити додаткові дані про швидкість виникнення кристалів (рівноважних зерен, осей дендритів) у динаміці їх зростання у залежності від переохолодження у двофазному середовищі.

Залежність швидкості об'ємного зародження кристалів від переохолодження запропоновано знаходити експериментально [114]. Швидкість зміни сумарного об'єму твердої фази визначається швидкістю зростання окремих зародків кристалів, з урахуванням обмежуючого впливу тепловідводу і дифузії. При описі процесів кристалізації для обчислення відносного об'єму твердої фази $\eta(t)$, часто використовують формулу Колмогорова [130; 132; 133]:

$$\eta(t) = 1 - \exp\left(-\int_0^t J(\tau) \nu(t-\tau) d\tau\right), \quad (1.32)$$

де: $J(t)$ – швидкість зародження кристалів; $\nu(t - \tau)$ – об'єм одиничного зародка кристалу, що з'явився в момент часу τ .

Саме ця формула повністю описує кінетику об'ємної кристалізації [130]. Однак щодо металів та сплавів на їх основі, це не так. Формулу (1.32) виведено для постійно заданого переохолодження і в ній враховано лише

геометричний чинник при утворенні зародків кристалів і при їх майбутньому зростанні. Йдеться і про те, що зі зростанням окремих кристалів, не може бути зайнятий об'єм, який вже зайнятий твердою фазою. Згідно з формулою (1.32) урахування геометричного чинника починає впливати при $\eta \geq 0,35$ [134], тоді як урахування тепловідводу і дифузії суттєво впливає на швидкість зростання окремих зародків кристалу, коли їх радіус $r = 10^{-6}$ м. Тобто практично цей вплив відчувається, починаючи з $\eta = 0$. Формула (1.32) приводить до якісно неправильного визначення частки твердої фази особливо наприкінці процесу твердіння, адже при постійному заданому переохолодженні η ніколи не досягає значення 1.

Формула Колмогорова (1.32) отримана за певними припущеннями, які введені для спрощення математичної постановки задачі (наприклад, Пуассонівський закон швидкості утворення центрів кристалізації) [135]. Поки що не має їх доскональної експериментальної перевірки. Хоча ця формула широко застосовується при теоретичних дослідженнях і здебільшого себе виправдовує [136–143].

Розглянуті математичні моделі загалом задовільно описують процес кристалізації. Їх основною перевагою є можливість дослідження зв'язку зовнішніх умов при затвердінні металів з макропараметрами кристалізації. Проте жодна із розглянутих моделей не має принципової можливості для детального опису структури, що формується при кристалізації (наприклад, дендритної). Зокрема, у роботі [144] запропоновано математичну модель зростання ізольованого дендриту, що заснована на сумісному розв'язуванні задачі теплопровідності і дифузії. Математичні проблеми, що виникають при рішенні системи рівнянь у частинних похідних, обумовлюють необхідність введення чималих спрощень фізичної картини процесу, що досліджується. Окрім того, проаналізовано зростання ізольованого дендриту при постійному переохолодженні та в необмеженому просторі. Очевидно, що подібна модель дає прийнятні результати тільки для початкової стадії кристалізації. Ураховуючи те, що в більшості технологічних процесів структура

складається із безлічі кристалів, подібні задачі майже не матимуть розв'язку, бо в такому разі для кожного зростаючого кристалу необхідно записати свою систему рівнянь. До того ж взаємодія кристалів один з одним, що виникає в середньому за наявності 40–60 % твердої фази, ніяк не може бути описано у рамках цієї моделі. Вимога постійної величини переохолодження є достатньо штучною і майже не дає змоги врахувати реальні зовнішні умови охолодження розплаву, що є найважливішим чинником управління структурою, яка формує полікристал.

У працях [145–147], в яких запропоновано моделі дендритної кристалізації, зберігається та сама тенденція. Вводяться спрощення у постановку задачі, метою яких є отримання її математичного розв'язку. Але ці спрощення ускладнюють практичне використання одержаних результатів.

Окремо необхідно виділити математичні моделі кристалізації металів і сплавів, які використовують для інтерпретації даних термічного аналізу [26; 28; 148; 149]. По-перше, вони значно простіші за ті, що розглянуті вище, бо як фізична модель, розглядається металева система «малого» розміру. Тобто така, де градієнтом температур на перетині вилівка можна знехтувати. Така умова дає змогу побудувати одновимірну модель без урахування внутрішніх координат системи (математична модель із зосередженими параметрами). Звісно, математичний апарат у такому разі також набагато простіший, тому що розглядається т. зв. «глобальний» тепловий баланс [88]. Математична задача зводиться до розв'язку звичайного диференційного рівняння першого порядку. У роботах [65; 148] у рамках динамічної теорії твердіння металевих виливок, наведено основні підходи до створення математичних моделей такого типу. Використовуючи ці моделі, можна за кривою охолодження розрахувати кількість твердої фази у будь-який момент процесу кристалізації та швидкість її зростання. Ці параметри та формальні ознаки, які фіксуються на кривій охолодження (кути нахилу до осей координат, температурні точки, різниці температур, часові інтервали), та значення службових властивостей металу у твердому стані, які визначають за

стандартними зразками, досліджуються на взаємозв'язок із засобами статистичної математики (кореляційний аналіз). З них вибираються найбільш значущі для оцінки тієї чи іншої властивості металу. Ці дані і є вихідними для побудови регресійних рівнянь, які дають змогу за даними термічного аналізу прогнозувати структуру і властивості литого металу.

Отже, фізично обґрунтовані детерміновані математичні моделі, що створюються у рамках динамічної теорії твердіння металевих виливок, є перспективнішими для аналізу термограм, прогнозу структури та службових властивостей металевих розплавів. Тому важливим завданням є узагальнення поглядів та підходів до побудови цих математичних моделей та подальше розвинення динамічної теорії твердіння металевих виливок.

У науковій літературі зустрічаються моделі, які побудовані на основі теорії ймовірності та методі Монте-Карло [150–152]. Однак вони, зазвичай, мають ілюстративний характер і майже не пристосовані до практичного використання. Хоча останнім часом з'являються роботи, в яких здійснюються спроби поєднати метод Монте-Карло із клітковими автоматами для моделювання кристалізації металів [153], кластерної структури рідини [154]. Проте ці спроби не прив'язують процеси, які досліджуються, до реальних умов їх протікання.

У такий спосіб для опису процесу структуроутворення при кристалізації, необхідно створювати теоретичні моделі, які базуються на інших принципах, аніж класичне математичне моделювання.

1.6 Синергетика як методологія дослідження процесів кристалізації

Цілком інший підхід до утворення структур у складних системах проаналізовано в науці, що одержала назву «синергетика» [155]. Одним із основних об'єктів досліджень у цій сфері є розподілені активні середовища або однорідні сітки, що збудовані із однакових елементів, які локально взаємодіють один з одним. Крізь кожний із цих елементів проходить струм

енергії, який надходить від зовнішнього джерела. Хоча різноманітність активних фізичних, хімічних і біологічних середовищ надзвичайно велика, кількість математичних моделей, що використовуються для опису процесів утворення і розвитку структур у таких системах, не настільки значна. Навіть коли окремі елементи системи мають складну внутрішню структуру, ця їхня внутрішня складність не має прояву у взаємодіях між ними і, з погляду макросистеми, вони функціонують як достатньо прості об'єкти з малим числом ефективних ступенів вільності. За інших умов жодних упорядкованих структур у системі зазвичай не виникає.

Відкриті (з погляду термодинаміки) системи, в яких утворюються структури, називають дисипативним [104; 105]. Часто дослідження подібних об'єктів, зокрема і в матеріалознавстві та металургії [156–158], призводить до формування структур фрактального типу [158; 159].

В активних середовищах виділяють три найпростіших типи активних елементів: бістабільні, збудливі і автоколивальні [155]. Бістабільний (або тригерний) елемент, що володіє двома стаціонарними станами (наприклад, 0 і 1), в кожному з яких він може знаходитися безкінечно довго. Зовнішній вплив може призводити до переходу з одного стану в інший. Такий варіант збудливого елемента цікавий тим, що можна провести аналогію його із розплавом, який кристалізується. За цією аналогією розплав (або рідкий метал) можна тлумачити як активне середовище, що складається із бістабільних елементів, кожний із яких може перебувати або в рідкому, або в твердому стані. Розповсюдження фронту кристалізації візуально дуже схоже на рух хвилі переключення, яка розповсюджується в активному середовищі. Така аналогія вже використовується при теоретичному дослідженні процесів кристалізації [161–164], рекристалізації [165–167] та поліморфних перетвореннях в сталях [168; 169].

Розглянемо лінійний ланцюжок з бістабільних елементів (рис. 1.6). Можна припустити, що у ньому лише сусідні елементи впливають один на одного [155]. Тобто, у найпростішому випадку, елементи, що знаходяться в

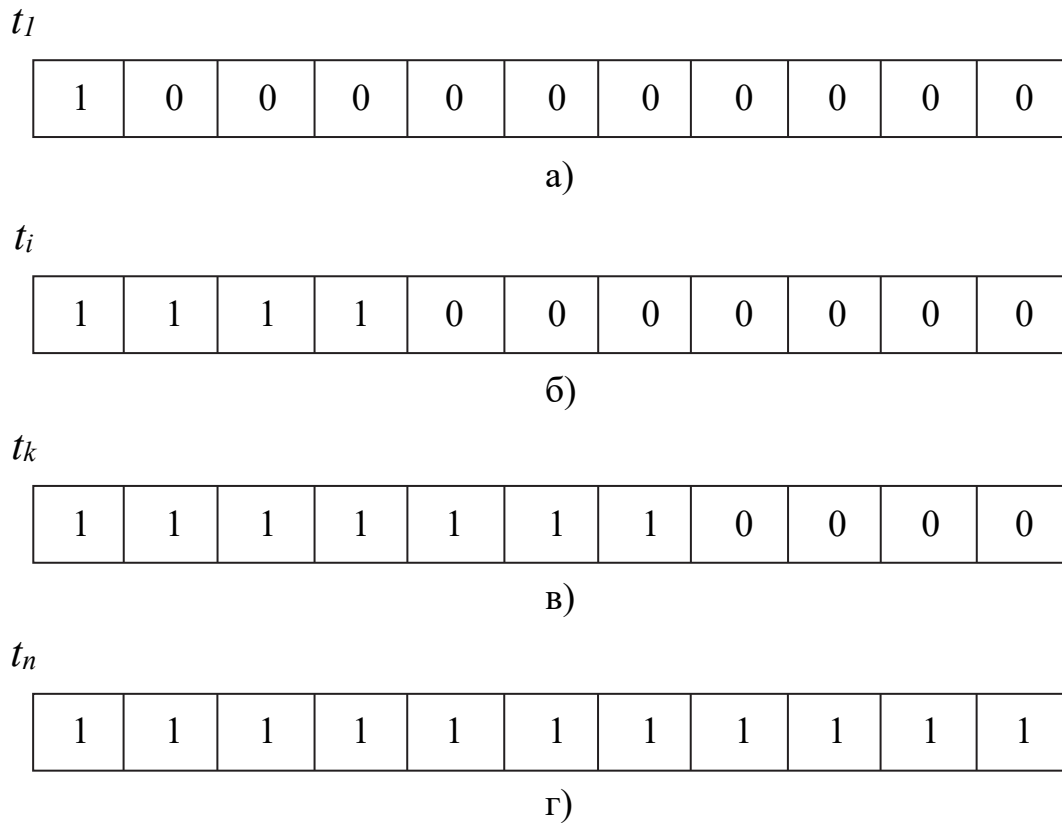


Рис. 1.6 Схема поширення хвилі переключень в одновимірному ланцюжку з бістабільних елементів активного середовища:

а, б, в, г – стани елементів ланцюжка в різні моменти часу t_1 , t_i , t_k , t_n [155]

однакових станах, не впливають один на одного. Якщо ж стани двох сусідніх елементів різні, вони взаємодіють. Елемент, що знаходиться в менш стійкому (метастабільному) стані, переходить у більш стійкий (стаціонарний) стан – такий самий, що й у його сусіда. Неважко переконатися, що коли з'являється перший елемент (рис. 1.6 а) в більш стійкому стані (наприклад із станом 1), то він впливає на сусідній елемент, який, в свою чергу, змінює свій стан і починає здійснювати вплив на “сусіда”. У результаті за ланцюжком бістабільних елементів поширюється хвиля переключення з метастабільного в абсолютно стійкий стан (рис. 1.6 г). У такий самий спосіб «працює» і двовимірний активний елемент, який також складається із бістабільних елементів (рис. 1.7). У такому разі аналогія із поширенням фронту кристалізації ще більш очевидна: система знаходиться або в рідкому

(метастабільному при наявності переохолодження), або в твердому (стаціонарному) стані і перехід з одного стану в інший стає можливим під дією зовнішніх умов.

Тобто згідно з формальною аналогією розплав, що кристалізується, можна розглядати (моделювати) як активне середовище, що складається з бістабільних елементів, кожний з яких може знаходитися або в рідкому, або у твердому стані. Поширення фронту кристалізації відповідає руху хвилі переключення, яка поширюється у просторі. За такого підходу розплав можна тлумачити як бістабільне середовище, тобто як систему т. зв. клітинних (чарункових) автоматів, тобто об'єктів із дискретним набором станів і деяких правил переходів між ними.

Клітковий автомат складається із безлічі однакових компонент. Кожна компонента розвивається відповідно до простого набору правил, проте у комплексі ці компоненти ведуть себе вкрай складно. Компонентами кліткового автомату є математичні «клітини» (або чарунки), які в одновимірному випадку розміщені у послідовності точок на прямій, що розташовані на однаковій відстані один від одного. У двовимірному разі вони утворюють правильні решітки з квадратів чи шестикутників [155; 161]. Кожна клітка приймає значення з невеликої кількості можливих значень, часто лише 0 або 1. Значення всіх кліток кліткового автомату одночасно оновлюються при кожному «тіканні годинника» (один крок розрахунків) відповідно до певного правила. Правила визначають нове значення клітки, якщо відоме її попереднє значення і попередні значення її ближчих сусідів, або будь-яких інших кліток в її околиці. Тобто, якщо існує деякий набір з N елементів, пронумерованих послідовно числами $j = 1, 2, \dots, N$, потрібно вказати зв'язки між елементами. Для цього необхідно для кожного j -го елемента задати ту групу елементів, що є його ближчими сусідами, стан яких впливає на нього. Стан окремо взятого j -го елемента у момент часу t характеризується деякою змінною. Ця змінна може бути цілим числом, дійсним чи комплексним, або являти собою набір з деяких чисел [155].

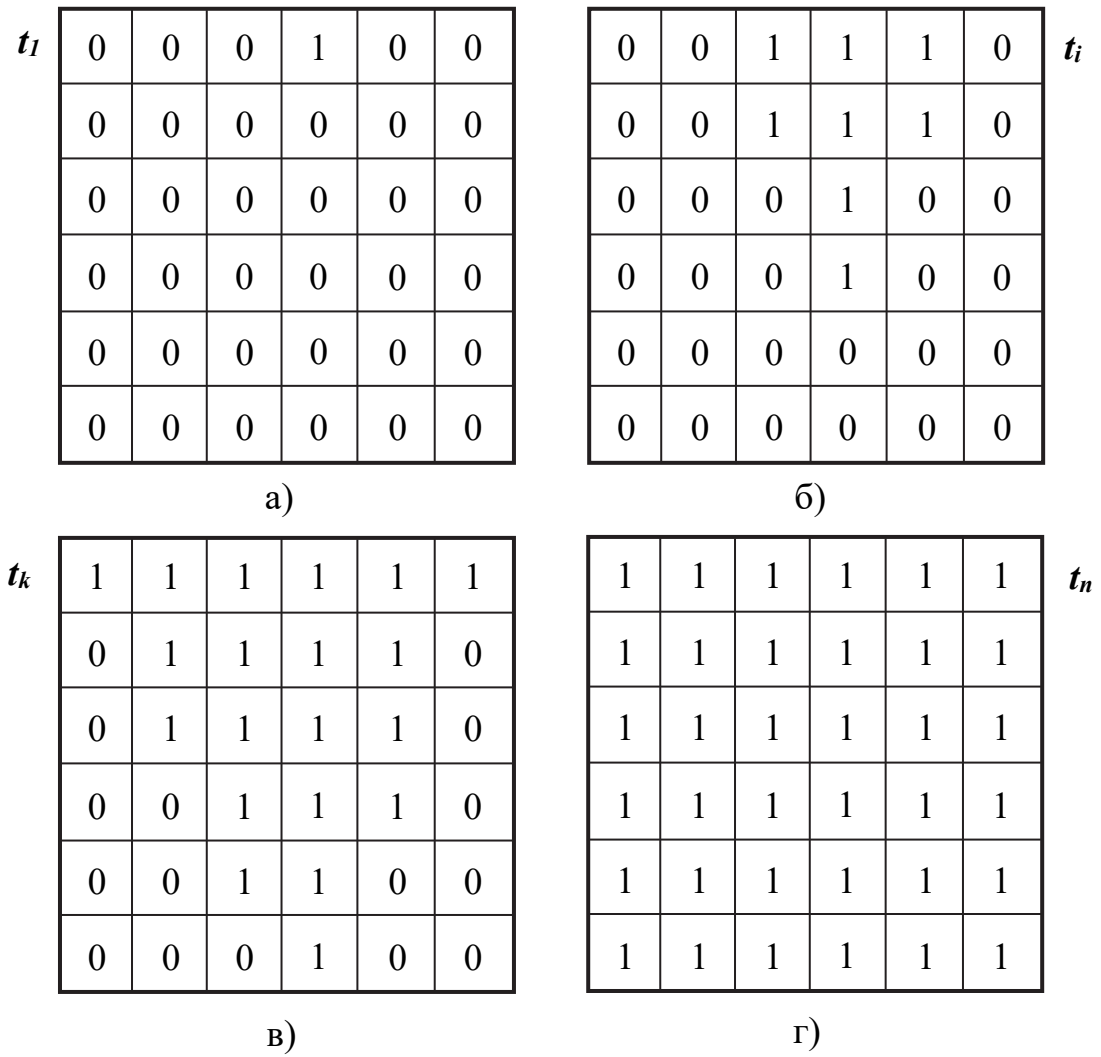


Рис. 1.7 Схема поширення хвилі переключень у двовимірному активному середовищі, що складається з бістабільних елементів: а, б, в, г – стани кліткового автомата в різні моменти часу t_1 , t_i , t_k , t_n

Якщо правила переходу між станами елементів однозначно визначені, клітковий автомат називають детермінованим. За наявності певної ймовірності у правилах переходів, клітинні автомати називають ймовірнісними [155; 162; 165].

Для визначення найближчих сусідів вибирають околицю, яку така клітка вивчає при з'ясуванні свого стану. У такому разі можливі різні варіанти: той чи інший набір сусідніх чарунків (околиці Фон Неймана, в якій у двовимірному варіанті існує чотири сусіди, або Мура, в якій у двовимірному варіанті існує уже вісім сусідів (рис. 1.8) [155]. Також чарунки, що безпосередньо не контактують із діючою клітиною, або стан чарунок на попередніх часових шарах тощо.

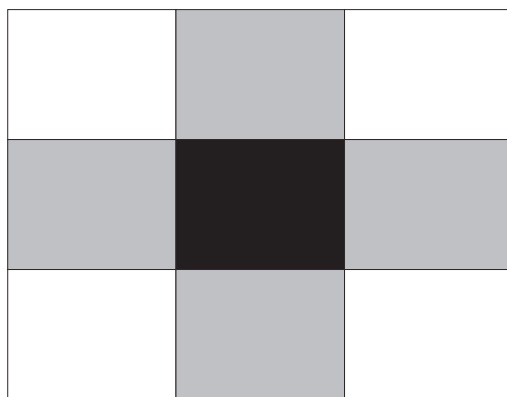
Якщо різні області перетинаються, то така клітка входить одразу в декілька областей. Інколи вважають, що центральна клітка сама входить у свою область.

Ураховуючи те, що переохолоджений розплав можна тлумачити як активне середовище, застосуємо до його аналізу поняття та методики синергетики і визначимо критичний розмір зародка нової фази. У роботі [155] показано, що ланцюжок зв'язаних між собою бістабільних елементів (у наближенні безперервного середовища) описується рівнянням в частинних похідних параболічного типу [113]:

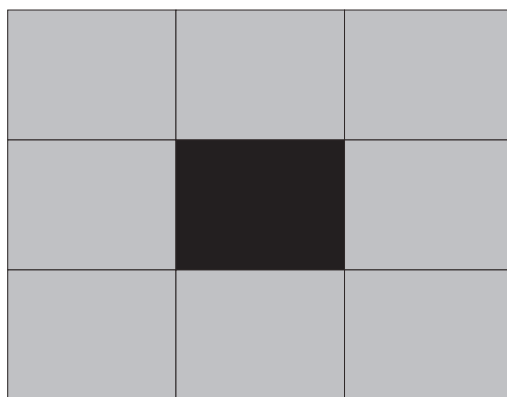
$$\frac{\partial U(r,t)}{\partial t} = a\Delta U(r,t) + F(r,t), \quad (1.33)$$

де: U – деяка потенційна функція; r – координата; t – час; F – функція джерела; a – коефіцієнт.

Однак таке саме рівняння лежить в основі багатьох математичних моделей кристалізації. До того ж це рівняння застосовують для опису нелінійних дисипативних систем, у яких відбуваються процеси самоорганізації (теорія горіння, хімічна реакція Білоусова-Жаботинського, різні екологічні моделі тощо [155; 170]). Якщо коефіцієнт a є константою, то



а)



б)

Рис. 1.8 Околиці центральної чарунки (виділена чорним кольором):
 а) фон Неймана; б) Мура.
 Сусідів виокремлено сірим кольором [155]

його лінійність визначається виглядом функції джерела $F(r,t)$, яка є другим доданком у правій частині.

У роботі [155] рівняння (1.25) записують у полярних координатах і аналізують хвилю переключення у двовимірному збудливому середовищі,

після чого отримують вираз для швидкості її кругового фронту $v(R)$ через швидкість плоского фронту V_p :

$$v(R) = V_p - \frac{a}{R}, \quad (1.34)$$

де R – радіус кривизни кругового фронту хвилі переключення у полярних координатах.

Аналіз виразу (1.34) засвідчив, що опуклий фронт рухається повільніше, ніж плоский [155]. До того ж області достатньо малих розмірів не зростають, а скорочуються. Критичний розмір області, за якого вона не зростає і не скорочується, дорівнює [155]:

$$R_{кр} = \frac{a}{V_p}. \quad (1.35)$$

Тобто область з радіусом $R = R_{кр}$ являє собою критичний зародок нової фази: якщо радіус області трошки збільшити, вона починає зростати, якщо ж навпаки зменшити, – область скорочується і зникає.

Однак, якщо як функцію $U(r, t)$, застосувати температуру $T(r, t)$ [171], то рівняння (1.33) стає добре відомим рівнянням теплопровідності [112; 113]. Коефіцієнт a набуває змісту коефіцієнту температуропровідності. Швидкість плоского фронту V_p очевидно залежить, у такому разі, від умов охолодження, які визначають швидкість охолодження системи V_{ox} . Зазначивши їх зв'язок як деяке умовне співвідношення:

$$V_{ox} = K_f \cdot V_p, \quad (1.36)$$

вираз (1.35) можна переписати у такий спосіб:

$$R_{кр} = \frac{a}{V} = K_f \frac{\lambda}{c\rho V_{ox}}, \quad (1.37)$$

де: λ – коефіцієнт теплопровідності; c – питома теплоємність; ρ – густина; K_f – деякий умовний коефіцієнт, який можна визначити експериментально. Розмірність коефіцієнта K_f є [град/м], яку визначаємо за допомогою теорії розмірності [172], відповідає розмірності градієнта температур у системі.

Для рідкого алюмінію біля температури кристалізації коефіцієнт a має значення приблизно $30 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$, тобто при швидкості плоского фронту $v \approx 10^{-2} \frac{\text{м}}{\text{с}}$ критичний розмір зародка дорівнює $3 \cdot 10^{-5} \text{ м}$.

Отже, застосування синергетичного підходу до розгляду процесу кристалізації дає змогу визначити критичний розмір зародка через добре відомі фізичні характеристики макрооб'єкту: параметри матеріалу (теплопровідності λ , питомої теплоємності c , густини ρ або коефіцієнта температуропровідності a) і зовнішні умови охолодження, які проявляються через швидкість руху плоского фронту v , яка пропорційна швидкості охолодження.

Автори праць [155; 170; 173] наводять чимало прикладів, у яких для імітації поведінки деяких складних систем були застосовані кліткові автомати. Подібні підходи було використано для опису кристалізації і, зокрема, для моделювання утворення сніжинки.

Проте моделі, що базуються на основі кліткових автоматів, мають один суттєвий недолік: правила переходу для кліток визначаються засобом підбору. Тому картинка, яку одержують унаслідок еволюції кліткового автомату, насправді лише схожа з реальною картиною протікання того чи іншого фізичного процесу. Постає питання, наскільки точно клітковий автомат імітує реальний процес і чи в усіх випадках можна «довіряти» утвореній ним картині. Крім того, еволюція кліткового автомату розвивається без зв'язку із зовнішніми умовами, в яких функціонує система, що моделюється. Зокрема, при моделюванні сніжинки [173] клітковий автомат імітує лише зовнішню схожість і у жодний спосіб не відображає вплив фізичного стану вихідної системи та зовнішніх умов охолодження. Тому необхідно створити такі правила зміни станів окремої чарунки, за яких вона би «відчувала» зовнішні умови, за яких існує система. Це можливо, якщо поєднати підходи, які застосовують при математичному моделюванні процесу кристалізації, та підходи, які застосовують при синергетичному

аналізі дисипативних систем. Створити це зручно у рамках комп'ютерної моделі кристалізації. Аналіз літературних джерел [1554 170; 173] стосовно застосування методів синергетики у наукових дослідженнях вказує на тенденцію переходу від цифрових розрахунків та універсальних ЕОМ до прямої імітації різноманітних процесів з використанням паралельно діючих комп'ютерів.

1.7 Імітаційне моделювання процесу кристалізації

Розглядаючи процес формування полікристалічної структури металів при кристалізації, можна стверджувати, що математичне формулювання математичної задачі, яка б давала змогу описати процес саме структуроутворення, є неможливим. Якщо у розплаві виникло, наприклад, 100 центрів кристалізації (що не є такою значною кількістю), то зростання кожного із них у рамках класичної задачі Стефана, потрібно описати рівняннями (1.29) та (1.30). Також потрібно додати початкову умову, умову на границі всієї системи та умови на границях «рідке – тверде» (1.25) для всіх зростаючих кристалів. Якщо розглядається кристалізація сплавів, то потрібно додати рівняння дифузії знову ж таки з відповідними початковими та граничними умовами. Математична задача, у такому разі, зростає до декількох сотень рівнянь у частинних похідних та ще кількох сотень додаткових умов. Причому тут не передбачається урахування механічної взаємодії зростаючих кристалів, фільтрації рідкої фази, тобто ефектів, що мають місце на останніх етапах процесу. Тобто, при бажанні, таку математичну систему сформулювати можна, але розв'язати її майже неможливо.

Ураховуючи те, що при дослідженні процесу структуроутворення при кристалізації, ми маємо справу із системою, яка характеризується великою кількістю критеріальних параметрів, а також складністю взаємозв'язків між ними і наявністю нелінійних обмежень, то її потрібно розглядати як складну систему. Складні системи вивчаються в науці, яка має назву «системний

аналіз» [174]. У системному аналізі впроваджено порівняно новий метод моделювання, що отримав назву «імітаційне моделювання» (від англійського «simulation modeling»). Сутність засобу імітаційного моделювання, як визначено у [175], полягає в тому, що процес функціонування складної системи – це певний алгоритм, який і реалізується на ЕОМ. За результатами реалізації можуть бути зроблені ті чи інші висновки щодо вихідного процесу.

Імітаційна модель принципово відрізняється від математичної. Це можна спостерігати, якщо виділити основні етапи її побудови [176]. На першому етапі формуються основні питання про поведінку складної системи, відповіді на які необхідно одержати. Безліч цих питань дає змогу задати безліч параметрів, що характеризують стан системи (т. зв. вектори стану).

На другому етапі здійснюється декомпозиція системи на більш прості частини – блоки. В один блок об'єднуються «споріднені», тобто перетворені за близькими правилами компоненти вектору стану і процеси, що їх перетворюють.

Третій етап присвячено формулюванню законів і гіпотез щодо поведінки як системи загалом, так і окремих її частин. При цьому важливо зазначити, що в кожному блоці для їх опису можна використовувати різний математичний апарат (алгебраїчні і диференціальні рівняння, математичне програмування тощо). Саме блоковий принцип дає змогу при побудові імітаційної моделі, встановлювати необхідні пропорції між точністю опису кожного блоку, забезпеченістю його інформацією і необхідністю досягнення мети моделювання.

Залежно від поставлених перед дослідником завдань, вводиться параметр, який називається системний час. Він моделює хід часу у реальній системі, що досліджується.

На четвертому етапі у формалізований спосіб задаються необхідні феноменологічні властивості системи і окремих її частин. Іноді ці властивості взагалі не можуть бути обґрунтовані на сучасному рівні знань. У

такому варіанті спираються на інформацію, яка отримана при тривалому спостереженні над системою (саме таку ситуацію спостерігаємо при вивченні процесу кристалізації).

Оскільки здійснення двох останніх із перелічених вище етапів найбільш просто реалізується на ЕОМ, то під імітаційною моделлю системи зазвичай тлумачать комплекс програм для ЕОМ, описання функціонування окремих блоків системи і правил взаємодії між ними. Тобто імітаційна модель – це комп'ютерна модель.

При достатньо глибокому знанні поведінки реальної системи і правильному поданні феноменологічної інформації, імітаційні моделі характеризуються більшою близькістю до реальності, аніж математичні моделі [176]. Значною мірою така близькість обумовлена тим, що блоковий принцип побудови імітаційної моделі (принцип розщеплення) дає змогу верифікувати кожний блок до його включення у загальну модель, а також тим, що вона може включати залежності більш складного характеру, ніж ті, що описують простими математичними співвідношеннями.

У такий спосіб для створення моделі кристалізації металів та сплавів, яка уможлиблювала би дослідження процесу утворення структури, бажано використати методологію імітаційного моделювання (комп'ютерного моделювання). Для розробки такої моделі доцільно розглянути процес кристалізації як деяку систему, що характеризується складним поведінням і наявністю великої кількості компонентів, що взаємодіють. Відтворення імітаційною моделлю поведінки цих компонентів і їх взаємного впливу дасть змогу «поглянути» на систему зсередини, прогнозувати поведінку як окремих її компонентів, так і системи загалом.

Імітаційні моделі і клітинні автомати, як засіб їх реалізації, нині є одним із найбільш перспективних напрямів у розвитку моделювання різноманітних процесів і систем [177–180], адже вони значною мірою сприяють дослідженню їх поведінки, шляхом широкого використання

можливостей числового експерименту і цифрових обчислювальних машин [181; 182].

При дослідженні процесу кристалізації як в теоретичному плані, так і для розробки різноманітних технологічних заходів, значний науковий і практичний інтерес становить саме визначення оптимальних шляхів управління зростанням кристалів. Таку змогу надає моделювання структуроутворення при кристалізації і прогноз властивостей майбутнього виливка. Під засобами управління течією фазового перетворення (тобто кристалізацією) тлумачать, передусім, зміну вихідного стану розплаву та зовнішніх умов охолодження. З огляду на це, необхідно «підпорядкувати» еволюцію клітинного автомату класичним тепловим законам.

Отже, об'єднання комплексно підсистеми термічного аналізу і підсистеми імітаційного моделювання структуроутворення при кристалізації суттєво розширює можливості загальної системи не тільки з метою прогнозу стану розплавів, але і для вирішення наукових та навчальних задач, шляхом її доповнення додатковими функціями.

1.8 Особливості методики доведення адекватності імітаційної моделі утворення структури твердого металу при кристалізації

Під терміном «модель» у науці тлумачать об'єкт (явище, установку, знакове утворення), який знаходиться у відношенні подоби до об'єкта, який моделюється [93]. Подобою у цьому разі є взаємооднозначна відповідність між двома об'єктами. Цю взаємооднозначну відповідність або адекватність моделі необхідно довести, щоб одержані при її дослідженні результати, можна було б перенести на сам об'єкт.

Доведення адекватності є заключним і, мабуть, найважливішим етапом побудови моделі. Причому досить часто це дуже складний процес, що потребує від дослідника не менших зусиль, аніж для розробки самої моделі. Для математичних моделей, що побудовані як регресійні рівняння,

визначення адекватності моделі майже стандартизовано і базується на статистичних критеріях Фішера або Ст'юдента [183]. У тому разі, коли створено модель іншого типу, потрібно розробити нестандартні методи, які повинні довести однозначну відповідність системи «об'єкт – модель». Зокрема, це стосується т. зв. детермінованих математичних моделей, які будуються із застосуванням фундаментальних та феноменологічних законів фізики.

Імітаційні моделі будуються дещо на інших принципах, аніж математичні. Їхня структура, зазвичай, значно складніша. Тому і доведення їх адекватності потребує значних зусиль та використання нестандартних прийомів. Мабуть, єдиний логічний шлях у цьому разі – це порівняння даних, отриманих у натурному експерименті, з результатами роботи програми, що побудована на основі запропонованого алгоритму. Для моделі, яка повинна моделювати процес формування структури при кристалізації, потрібна, передусім візуальна подібність результатів моделювання. Крім цього, адекватність моделі можна показати шляхом відтворення вже відомих результатів досліджень процесу кристалізації. Доведення адекватності моделі, яка імітує кристалізацію, зручно здійснити на прикладі чистого металу.

Наукові праці свідчать [84; 184], що кристалізація металів протікає унаслідок переходу до більш стійкого термодинамічного стану і процес розвивається, якщо має місце різниця вільних енергій Гібсса. Отже, процес кристалізації протікає лише за наявності переохолодження металу нижче рівноважної температури перетворення. Величина переохолодження обумовлює основні кінетичні параметри кристалізації: швидкість зародження центрів кристалізації та лінійну швидкість росту кристалу. Вона залежить від природи і чистоти металу. Чим чистіший рідкий метал, тим більше він схильний до переохолодження.

Процес кристалізації починається з утворення кристалічних зародків і триває при їх зростанні. Зростання зародка відбувається внаслідок переходу

атомів з переохолодженого розплаву до кристалів. Розрізняють два послідовних елементарних процеси зростання кристалів: утворення зародка і його зростання за рахунок атомів, що надходять з переохолодженої рідини.

Спонтанне (гомогенне) зародження кристалів у рідкому металі майже неможливе, адже в реальних металах завжди присутні домішки. Більш ймовірним джерелом утворення зародків є тверді частки, які присутні у розплаві. Швидкість зростання кристалів визначається величиною переохолодження та зовнішніми умовами. Швидкість процесу кристалізації і будова металу після затвердіння залежать від числа зародків (центрів кристалізації), що виникають за одиницю часу, об'єму і швидкості зростання зародків, тобто від швидкості збільшення лінійних розмірів зростаючого кристалу за одиницю часу.

Іноді розчинені в рідкому металі домішки, які частіше називають модифікаторами, можуть зменшувати зерно і змінювати його форму. При модифікуванні у розплав вводять невелику кількість модифікаторів, які майже не змінюють його хімічного складу, але викликають зміни у процесі кристалізації, що обумовлює зменшення зерна у структурі твердого металу, що, водночас, сприяє поліпшенню механічних властивостей металевих виробів. При литті злитків і фасонних відливок, модифікування частіше проводять введенням у розплави домішок, що утворюють тугоплавкі з'єднання (карбіди, нітриди, оксиди), які при кристалізації виділяються у вигляді дрібних часток і слугують зародками кристалів.

Кристалізація рідкого металу починається біля поверхні холодної форми і спершу йде, здебільше, у тонкому шарі сильно переохолодженої рідини, який прилягає до неї. Унаслідок великої швидкості охолодження, на граничних поверхнях зливка у дуже вузькій зоні утворюються порівняно дрібні рівноважні кристали. За першою розташована друга зона витягнутих дендритів. Зростання цих кристалів відбувається у напрямі відводу тепла, тобто нормально до стінок виливниці. Послідовне зростання дендритів від стінок виливниці відбувається завдяки руху вглиб розплаву гілок першого

порядку і їх розгалуженню. У разі сильного перегріву металу, швидкого охолодження його, високої температури лиття і повільного заповнення форми, зона витягнутих дендритів може повністю заповнити весь об'єм.

За низької температури лиття і повільного охолодження, наприклад, у середніх шарах відливок, також створюються умови для виникнення зародків кристалів. Це призводить до утворення у внутрішній частині відливки структурної зони, що складається з рівноважних дезорієнтованих дендритів. Розміри цих кристалів залежать від міри перегріву рідкого металу, швидкості охолодження, хімічного складу, наявності домішок тощо.

Тугоплавкі частки, що знаходяться у рідкому металі, сприяють розвитку зони дрібних рівноважних кристалів.

Зазначені відомості про процес кристалізації металів загальновідомі і входять до підручників з металознавства. Однак у цій роботі вони мають стати критерієм, порівняно з яким можна довести адекватність імітаційної моделі.

У такий спосіб імітаційна модель структуроутворення при кристалізації чистого металу повинна:

- відтворювати візуальну подібність реальних і змодельованих структур;
- змінювати змодельовану структуру при зміні умов охолодження (тобто швидкості охолодження);
- змінювати змодельовану структуру за наявності запалів (твердих часток у рідині) або при впливі холодних стінок виливниці;
- передавати характерний хід кривих охолодження, залежностей кількості твердої фази і швидкості її росту під час кристалізації, які отримуються підсистемою комп'ютерного термічного аналізу у натурному експерименті.

За наявності перелічених умов, імітаційну модель можна вважати адекватною і застосовувати для проведення обчислювальних експериментів. Причому на цьому етапі може бути достатньо якісних порівнянь.

У контексті цього можна сформулювати мету та завдання цієї роботи.

Мета і задачі досліджень. 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 задачі:

- 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.

РОЗДІЛ 2

АПАРАТНА ПІДСИСТЕМА КОМП'ЮТЕРНОГО ТЕРМІЧНОГО АНАЛІЗУ ДЛЯ КОНТРОЛЮ СТАНУ ЛИВАРНИХ РОЗПЛАВІВ СПЛАВІВ НА ОСНОВІ АЛЮМІНІЮ

Під терміном «вимірювальний канал» тлумачать послідовно поєднані: первинний перетворювач (або датчик, сенсор), вторинний перетворювач (або підсилювач), лінію передачі сигналу та реєстратор [185]. Вимірювальний канал у підсистемі термічного аналізу додатково має перетворювач «напруга – код».

Основними характеристиками вимірювального каналу підсистеми термічного аналізу є: точність, роздільна здатність та частота дискретизації. Вони значною мірою й визначають загальну похибку вимірювань за допомогою цієї підсистеми. Для коректної побудови вимірювального тракту підсистеми термічного аналізу необхідно, передусім, з'ясувати значення цих основних характеристик.

2.1 Матеріали та методи досліджень

У процесі роботи було застосовано комп'ютерне і математичне моделювання перебігу структуроутворення у сплавах при кристалізації, комп'ютерний термічний аналіз для контролю стану розплавів та прогнозування властивостей металу у виливках, спектральний і макроструктурний аналізи, регресійний та кореляційний аналізи, багатовимірний метод найменших квадратів. Експериментальні похибки обчислювали за стандартною методикою.

Комп'ютерні експерименти здійснювали для чистого алюмінію та сплавів Al-8,2%Si, і Al-3,8%Cu. Табличні значення показників фізичних властивостей металів і сплавів вводили в імітаційну модель як параметри.

З метою доведення адекватності комп'ютерної моделі, відливали зразки із первинного алюмінію А99 та сплаву Al-8,2%Si. Метал виплавляли в печі опору СШОЛ-1.1.6/12-МЗ-У4.2 у графітових тиглях місткістю 1,5 кг. Температуру контролювали за допомогою хромель-алюмелевих термопар. Температура відбору проб складала 730–740 °С. Криві охолодження проб реєстрували на комп'ютері за допомогою спеціально сконструйованого аналого-цифрового перетворювача. Отримані дані застосовували для подальшого комп'ютерного термічного аналізу. Експериментально отримані криві охолодження та макроструктури зразків досліджували за стандартними методиками і порівнювали з результатами моделювання.

В експериментах для побудови регресійних рівнянь, які дають змогу визначати за кривими охолодження вмісти Si та Mg у силумінах і розробки рівнянь прогнозування механічних властивостей сплаву АК7ч як шихтові матеріали, застосовували первинний алюміній марки А95 та сплав АК12. Магній, залізо та стронцій вводили у вигляді лігатур.

2.2 Оцінка точності, роздільної здатності та частоти дискретизації вимірювального каналу підсистеми комп'ютерного термічного аналізу для контролю стану ливарних розплавів на основі алюмінію

Можна припустити, що загальна похибка визначення концентрації компонентів у сплаві та прогнозу службових властивостей литого металу методом термічного аналізу, передусім, залежить від похибки виміру температури твердіючого розплаву. Це обумовлено тим, що основою методу є реєстрація температур фазових перетворень, які відбуваються при затвердінні. Її складовими є статична похибка виміру температури, похибка первинного перетворювача, похибка цифрового вимірювального приладу, динамічна похибка виміру температури.

Статична похибка виміру температури формується первинним термоперетворювачем [186–188] і цифровим вимірювальним

перетворювачем «напруга – код». При цьому вона залежить від типу сплаву, який аналізується, діапазону вимірюваних температур і рівня вихідного сигналу первинного перетворювача [187].

Похибка первинного перетворювача залежить від його класу точності [188; 189] і для промислових вимірів із застосуванням серійних термопарних зондів може досягати 5–10 %. Підвищити точність первинного перетворювача без суттєвого підвищення вартості експерименту, можна шляхом застосування структурних методів [190; 191], які дають додаткову інформацію про датчик, на основі чого можлива корекція його характеристик.

Похибка цифрового вимірювального приладу, крім інших факторів, визначається розрядністю його аналого-цифрового перетворювача. Її потрібно оптимізувати до підсистеми термічного аналізу, яка призначена для роботи із сплавами на основі алюмінію. Невиправдане збільшення розрядності призводить до різкого подорожчання вимірювального приладу, а недооцінка її ролі у підсистемі знижує точність вимірів, що ставить під сумнів доцільність застосування всієї системи.

Динамічна похибка виміру температури формується за рахунок викривлення термограми внаслідок теплової інерції первинного термоперетворювача і його арматури [188], а також унаслідок неадекватного відновлення аналогового сигналу термограми, який вимірюється цифровим приладом через дискретні проміжки часу [192]. Дані про інерційність термопар, зазвичай [47; 193], не наводяться. Також не наводяться й дані про узгодження термопар зі швидкісними характеристиками приладів, які використовуються для вимірювання термо-електрорушійної сили (т. е. р. с.).

Проаналізуємо складові похибки виміру температури. Щоб результати аналізу вмісту компонентів у сплаві, які одержані на підставі вимірювання т. е. р. с., були значущими, необхідно, аби похибка визначення концентрації основних легуючих компонентів методом термічного аналізу не перевищувала похибку стандартних методів. Наприклад, гранична похибка

для визначення кремнію у діапазоні 5,0...13,0 % в алюмінієвих сплавах спектральним методом складає 0,3 % (за масою) [194].

На підставі припущення про те, що похибка визначення концентрації компонента в сплаві методом термічного аналізу передусім залежить від похибки виміру температури, можна здійснити оцінку необхідної точності виміру т. е. р. с, використовуючи для цього аналіз діаграми стану.

У [195] зазначено, що алюмінієві сплави серед ливарних сплавів кольорових металів знайшли найбільш широке застосування (≈ 70 % від загального випуску кольорового литва). За ДСТУ 2839 – 94 [196], ливарні алюмінієві сплави поділяються на п'ять груп. Сплави систем: Al-Si-Mg, Al-Si-Cu, Al-Cu, Al-Mg та сплави алюмінію з іншими компонентами (Zn – 3,5...12 %, Mg – 1,5...2,0 %, Si – 6...10 %).

Оцінку точності вимірювання температури у підсистемі термічного аналізу зробимо за методикою, яка описана в [65]. Для цього розглянемо діаграму стану подвійного сплаву з евтектикою системи (рис. 2.1). На осі концентрацій точці C_x відповідає вміст другого компонента (В) сплаву, який досліджується, а інтервал $\pm \Delta C_x$ визначає помилку стандартного методу при визначенні C_x . Проекція точки C_x на лінію ліквідус (точка 2) дає значення відповідної температури ліквідус, що реєструється на кривій охолодження. Отже, можна припустити, що проекція інтервалу $\pm \Delta C_x$ на лінію ліквідус (точки 1 і 3) і визначатиме можливий інтервал невизначеності при реєстрації температури ліквідус, тобто максимально припустиму абсолютну похибку виміру температури.

Проведемо чисельну оцінку максимально припустимої похибки виміру температури ліквідус T_L за діаграмами Al-Si, Al-Cu, Al-Mg [197]. Для сплавів Al-Si лінію ліквідус діаграми у діапазоні концентрацій кремнію від 6,0 % до 12,6 % можна апроксимувати поліномом першого або другого ступеня. Згідно з власними оцінками [198] достатньо лінійного наближення (температура в градусах Цельсія):

$$T_L = 660,5 - K \times B, \quad (2.1)$$

де: K – коефіцієнт; B – другий компонент. Значення коефіцієнтів для основних груп бінарних ливарних сплавів наведені у таблиці 2.1. Похибка апроксимації складає 0,1 %.

Результати розрахунків абсолютних і відносних значень інтервалів невизначеності при вимірі температури ліквідус, які зроблені за допомогою рівняння (2.1) і коефіцієнтів із таблиці 2.1, наведені в таблиці 2.2.

Таблиця 2.1

**Коефіцієнти апроксимації ліній ліквідус
основних ливарних сплавів на основі алюмінію**

Компонент B	Коефіцієнт K
Si	-6,626
Cu	-3,423
Mg	-5,831

Відповідно до розрахункових значень оцінка необхідної точності вимірювання температури ліквідус у системі термічного аналізу для аналізу рідкого стану основних груп ливарних сплавів на основі алюмінію складає в середньому $2,0^{\circ}$. Причому вища точність потрібна при вищій температурі. Отже, для ливарних сплавів на основі алюмінію вибираємо інтервал невизначеності, який дорівнює 2° (тобто $\Delta T_L = \pm 2^{\circ}$, де відносна похибка близька до 0,33 %).

У цих розрахунках було використано рівноважні діаграми стану. Однак на практиці у більшості випадків при твердінні виливків швидкості охолодження досить високі і кристалізація відбувається у нерівноважних умовах. Це призводить до деякого зсуву ліній діаграми стану [199]. При цьому кут нахилу α лінії ліквідус до лінії солідус (рис. 2.1) збільшується і збільшується інтервал невизначеності ΔT_L . Тобто оцінка необхідної точності виміру температури ліквідус стає менш «жорсткою» і отриману оцінку необхідної точності виміру температури ліквідус $\pm 2^{\circ}$ для сплавів Al-Si, Al-Cu

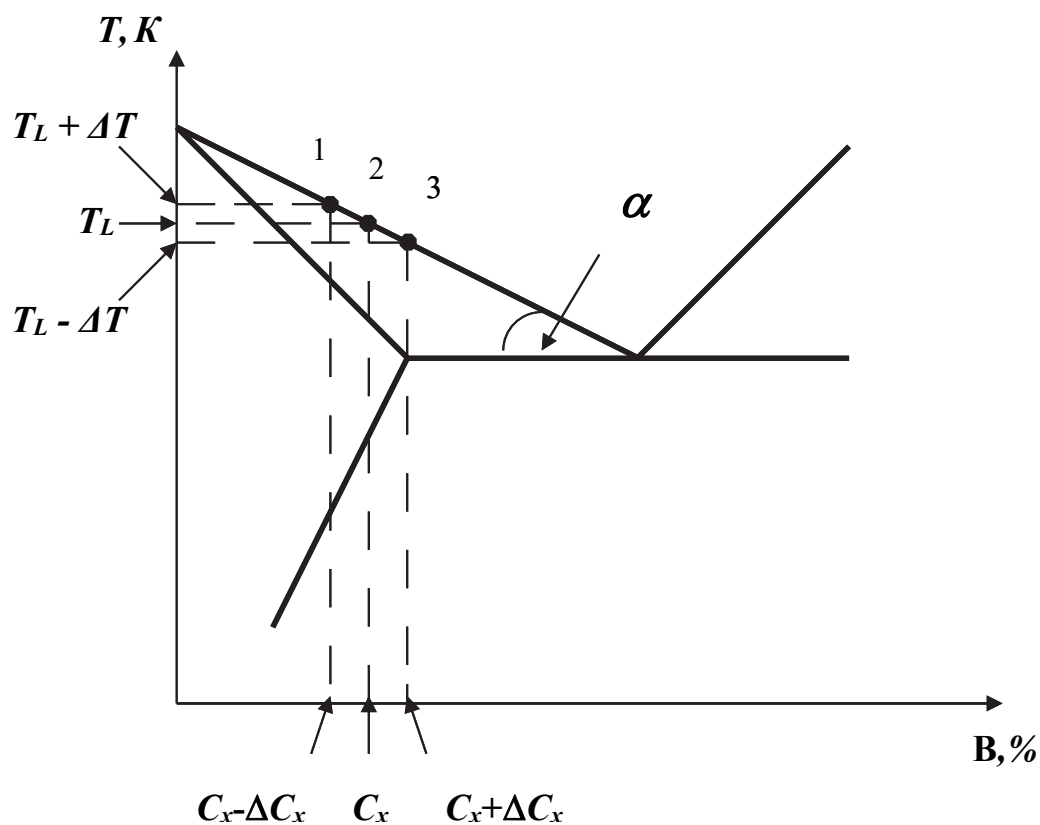


Рис. 2.1 Оцінка точності вимірювання температури при визначенні концентрації другого компонента сплаву методом термічного аналізу [65].

C_x – концентрація другого компонента В; $\pm \Delta C_x$ – необхідна точність визначення вмісту елемента В; T_L – температура ліквідус для концентрації C_x ; $\pm \Delta T$ – максимальна похибка виміру температури при заданій точності аналізу компонента В; α - кут нахилу лінії ліквідус до лінії солідус.

Оцінка припустимої похибки вимірювання температури при визначенні вмісту вуглецю у сплаві Al-Si за температурою ліквідус

Група сплавів	Вміст компоненту, % (за масою)	T_L , град. С	Абсолютна похибка ΔT_L , град.
Al-Si	6	620,7	$\pm (1,2... 2,0)$
	12	581,0	
Al-Cu	1	657,0	$\pm (1,0... 2,4)$
	5	643,4	
Al-Mg	1	654,1	$\pm (1,2... 4,1)$
	5	631,3	

та Al-Mg можна вважати базовою при проектуванні підсистеми термічного аналізу для експрес-аналізу якості відповідних ливарних сплавів.

Наведені розрахунки виконані для двохкомпонентних сплавів. Однак ливарні сплави, зазвичай, мають багато компонент. Водночас вміст третього компонента у сплавах, наприклад, системи Al-Si складає частки відсотка і його наявність несуттєво зміщує температурні точки діаграми стану. Зокрема, у сплаві АК7 (6–8 % Si і 0,2–0,4 % Mg) в області температур ліквідус-солідус утвориться α -твердий розчин, евтектика Al-Si і наприкінці кристалізації відбувається виділення фази Al-Mg₂Si-Si. Дослідження підтвердили, що евтектика Al-Si утвориться при температурі 847 К (574 °С), що фактично відповідає температурі 850 К солідус подвійного сплаву Al-Si (577 °С). Поява фази Al-Mg₂Si-Si проявляється на похідній кривій охолодження у вигляді локального максимуму, який знаходиться в області кінця кристалізації. Формування цього максимуму починається при концентрації магнію 0,17–0,20 % (рис. 2.2). Тобто, починаючи з цих концентрацій, можна методом термічного аналізу зафіксувати наявність Mg у

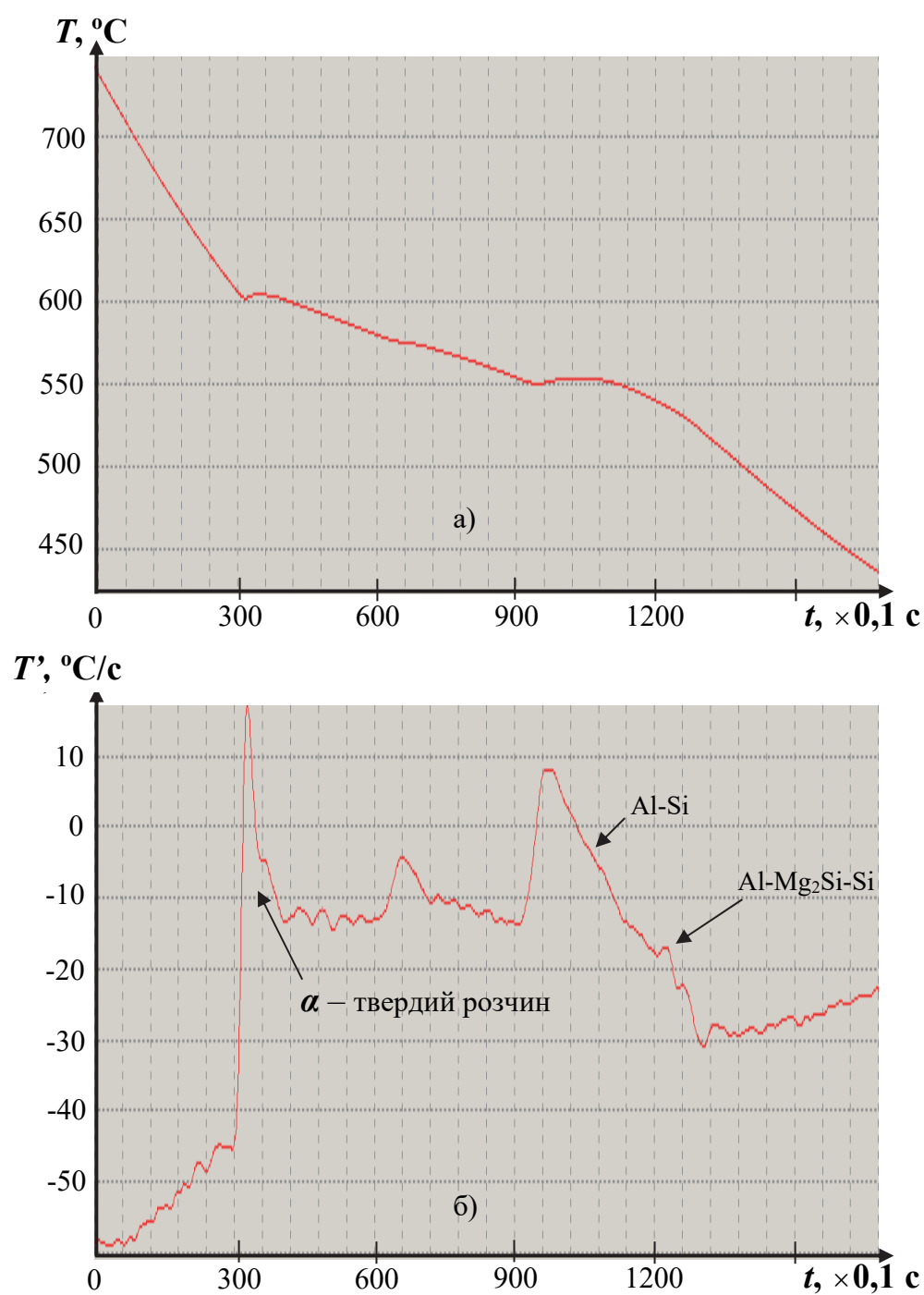


Рис. 2.2 Крива охолодження (а) сплаву Al-Si-Mg (6–8 % Si і 0,2–0,4 % Mg) та її перша похідна (б)

цьому сплаві. Збільшення кількості Mg призводить до росту амплітуди максимуму, майже без зміни температури утворення евтектики.

Отже, по-перше, чутливість цього методу щодо визначення змісту магнію у сплаві Al-Si-Mg можна визначити як 0,20 % Mg. По-друге, приведену вище методику визначення похибки вмісту кремнію у ливарних Al-Si сплавах можна вважати коректною і у сплавах системи Al-Si-Mg.

Величиною, що характеризує можливість розпізнавати окремий вимір на термограмі, є роздільна здатність вимірювального каналу. Вона залежить від точності вимірювального приладу [200]. Точність виміру температури, яка установлена вище, для ливарних алюмінієвих сплавів дорівнює $\pm 2^{\circ}$. Отже, мінімальна роздільна здатність цифрового вимірювального пристрою повинна бути не менше, ніж у тричі вища за граничну точність вимірів, тобто не менше, ніж 0,6–0,7 градусів.

На кривій охолодження є ділянки з різними швидкостями зміни температури. Найбільш динамічними є області початку утворення фаз (твердого розчину або евтектики), які можуть мати ділянки рекалесценції температури. Вони важливі при прогнозуванні, наприклад, механічних властивостей сплавів у литому стані [12; 200; 201]. Величина рекалесценції на кривій охолодження змінюється у межах 5–6 градусів. Тобто вимірювальний канал із роздільною здатністю $0,7^{\circ}$ дасть змогу ввести 8–10 її градацій, що є достатнім для надійної фіксації змін на кривій охолодження.

Важливим чинником, який може впливати на точність визначення складу сплаву в основних легуючих компонентах, є наявність ліквіації. Зокрема, це стосується сплавів системи Al-Cu, де з часом нижні шари розплаву збільшуються міддю. У цьому разі доречним є відбір декількох паралельних проб із визначенням середнього вмісту другого компонента за їх результатами. Можливим є також застосування попереднього перемішування розплаву перед відбором проби. Раціональною також може виявитися комбінація цих прийомів.

Особливістю саме комп'ютерного термічного аналізу є те, що термограма реєструється у пам'яті комп'ютера у вигляді дискретних відліків, узятих через рівні проміжки часу Δt (з частотою дискретизації $F_d = \frac{1}{\Delta t}$). Під час розрахунків за кривою охолодження проміжні значення температури між зафіксованими дискретними відліками відновлюються шляхом інтерполяції, у результаті чого формується похибка відновлення (або похибка квантування), величина якої обернено пропорційна частоті дискретизації. Очевидно, що частота дискретизації вимірювального сигналу має бути достатньо великою, щоб похибка квантування була мінімальною. Проте занадто велике значення F_d може призвести до надлишкової кількості відліків. У такий спосіб потрібно обрати оптимальне її значення.

Для вибору частоти дискретизації підсистеми комп'ютерного термічного аналізу можна застосувати аналіз спектрального складу типової кривої охолодження [65]. Мінімальну частоту дискретизації $F_{d \min}$ можна оцінити за допомогою теореми Котельникова [203]:

$$F_{d \min} \geq 2,56 F_{\max}, \quad (2.2)$$

де $F_{\max}$ – деяка частота зрізу фільтру низьких частот (ФНЧ). Перехід від неперервного сигналу до дискретного і потім його відновлення можна розглядати як проходження сигналу через ФНЧ з частотою зрізу $F_{\max}$.

Для визначення частоти зрізу $F_{\max}$ умовного ФНЧ в роботі [65] за участю автора, реєстрували криву охолодження сплаву Al+10,0%Si. Виміри проводилися за допомогою цифрового мультиметра Щ-68003 із частотою дискретизації 25 Гц і роздільною здатністю 10 мкВ. Початкова температура розплаву 1023 К. Криву охолодження реєстрували до 723 К. Час існування сигналу (термограми) за швидкості охолодження приблизно 2 град/с складає в середньому 140–145 секунд. У результаті дискретного перетворення Фур'є [204; 205], отримано частотний спектр кривої охолодження. Установлено, що основна енергія термограми зосереджена в діапазоні до 10-ої гармоніки,

тобто $F_{max} = 0,07$ Гц. Отже, згідно з (2.2) частота дискретизації при реєстрації кривої охолодження повинна бути не нижче 0,2 Гц.

З іншого боку, частоту дискретизації можна вибирати з тих міркувань, щоб похибка відновлення сигналу була мінімальною. Для цього необхідно реєструвати ті гармоніки, амплітуда яких перевищує половину роздільної здатності приладу (10 мкВ або $0,6^0$). Аналіз огинаючої спектра показує, що таку амплітуду мають гармоніки з частотами до 0,5 Гц. У цьому разі значення F_{dmin} , що розраховано відповідно до (2.2), складає приблизно 1,3 Гц.

У такий спосіб значення F_{dmin} знаходиться в інтервалі від 0,2 до 1,3 Гц (0,56 Гц). Тобто частота дискретизації $F_{dmin} = 1,3 - 1,4$ Гц забезпечує (із запасом) реєстрацію кривої охолодження без пошкодження її ділянок. Оскільки при цифрових вимірах частоти дискретизації встановлюються, зазвичай, кратно цілим числам, то як оцінку F_{dmin} , можна прийняти найближче ціле – 2,0 Гц [206].

Для більшого зменшення похибки квантування, у роботі [198] запропоновано збільшувати частоту дискретизації на порядок, щоб уникнути відбиття високочастотної частини спектра перешкоди на корисний сигнал. Тобто, з урахуванням цієї пропозиції, частоту дискретизації треба довести до 10–20 Гц (при цьому бажаним є одночасне застосування цифрового фільтра). У деяких випадках можна розділити частоту реєстрації даних і частоту їх запису у пам'ять комп'ютера. Тобто при фіксації даних зробити їх стиск (децимацію), понизивши частоту запису в пам'ять ЕОМ після реєстрації до 5–6 Гц.

Отже, встановлено, що для виміру температури в комп'ютерному термічному аналізі ливарних алюмінієвих сплавів, мінімально необхідною точністю є $\pm 2^0$ із роздільною здатністю $0,6^0$ у діапазоні температур 853–933 К (580–660 °С) та з частотою дискретизації $F_{dmin} = 3,0$ Гц. Наведені розрахунки можна проводити і для інших ливарних сплавів.

2.3 Аналіз параметрів первинного перетворювача для виміру температури проби, що кристалізується

Термопара, що встановлена у пробовідбірнику, є первинним перетворювачем системи аналізу стану розплавів. Для термічного аналізу алюмінієвих сплавів, зазвичай, використовують термopари «хромель-алюмель» (ХА-68) [72; 207]. Для відбору проби використовують пробовідбірник з термопарою, який можна або заливати з ковша, або занурювати безпосередньо в розплав у залежності від умов конкретного виробництва.

На рис. 2.3 приведено конструкцію пробовідбірників, що використовуються у системах аналізу стану ливарних розплавів, і які зверху заповнюються розплавом. Пробовідбірником є мікротигель 1, який зачинено вогневідpornим ковпаком 2, скрізь отвір у якій проходить двоканальна алундова соломка 3, що направляє та ізолює електроди термopари 4. Щоб усунути небажане перемикання електродів термopари рідким металом, вимірювальний спай 5 покривається захисним покриттям (вогневідpornою та ізолюючою пастою або закривається ковпачком 6). Для підтримки температури розплаву, при його заливанні у пробовідбірник використовується зовнішній нагрівач 7.

Якщо застосовується пробовідбірник, який занурюють у розплав, то на його боковій поверхні роблять отвір, через який метал попадає у середину мікротигля [65]. У цьому разі нижній край отвору фіксує рівень металу, що залишається при вилученні пробовідбірника з ванни.

На підставі аналізу наявних зразків датчиків для системи аналізу якості ливарних сплавів та власного досвіду розробок, можна сформулювати основні вимоги до конструкції пробовідбірника [65].

Вибираючи конструкцію пробовідбірника для системи аналізу стану ливарних розплавів, потрібно враховувати технологічність її форми, тобто

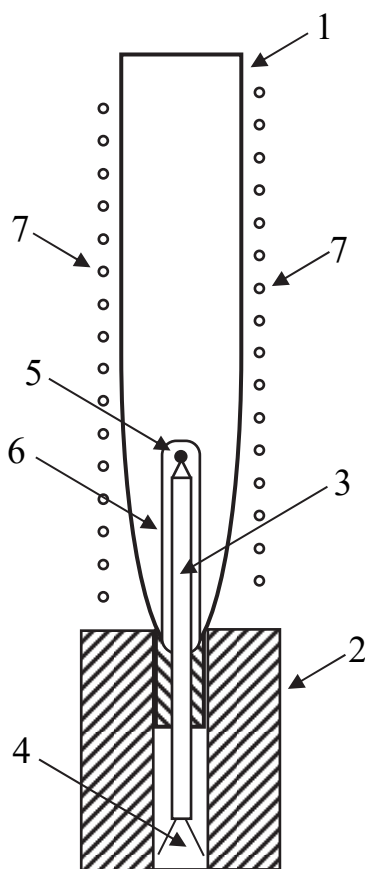


Рис. 2.3 Конструкція пробовідбірника для комп'ютерних систем аналізу стану розплавів на основі термічного аналізу:

- 1 – графітовий мікротигель;
- 2 – вогневідпорна пробка;
- 3 – двоканальна алундова соломка;
- 4 – термопарні електроди;
- 5 – вимірювальний спай;
- 6 – захисний ковпачок;
- 7 – зовнішній нагрівач

умови заповнення розплавом, розташування вимірювальної термопари, віддалення відливки, яка вже затверділа.

Матеріал, з якого робиться мікротигель, не повинен взаємодіяти з розплавом, або його потрібно додатково зсередини покрити шаром захисної фарби. Це може бути відповідна формовочна суміш, яка використовується у ливарному виробництві, металевий стакан із шаром захисної фарби, скляний або графітовий ковпачок тощо. Товщина стінок не має принципового значення, але потрібно мати певне співвідношення швидкості охолодження проби і її маси, від яких залежить ступінь рівноважності процесу кристалізації при дослідженні [199]. В ідеалі для кожного типу сплаву потрібно експериментальним або теоретичним шляхом підбирати параметри пробовідбірника у такий спосіб, щоб на кривій охолодження максимально виділялись ефекти, які відбивають кінетику структурних перетворень у твердіючому розплаві. Крім цього, бажано, щоб градієнт температур уздовж перерізу форми був якомога меншим. У такому разі характер кристалізації буде квазіоб'ємним [88] і полегшується математичний аналіз фізичних процесів, що відбуваються в пробі.

На виконання бажаної умови квазіоб'ємності кристалізації суттєво впливає форма пробовідбірника. Вона повинна бути простою, а температурне поле уздовж її перерізу – симетричним. Можливими варіантами можуть бути основні прості фігури: паралелепіпед, циліндр та шар. У паралелепіпеді температура у внутрішньому просторі мікротигля значно відрізняється від температури на перетинах граней (а особливо в кутах) за рахунок підвищеного тепловідводу у цих місцях. Щоб усунути вплив цього градієнта температури на загальний хід кристалізації, місце розташування термопари потрібно віддалити від цих місць. Тобто відношення довжини та ширини паралелепіпеда до його висоти повинно бути значно більше одиниці. У фізиці та техніці «умова значно більше» означає перевищення у 10 і більше разів. Ураховуючи розміри термопари (приблизно 0,002–0,01 м), висота тиглю повинна бути близько 0,03–0,04 м, тоді як довжина й висота не менші

за 0,3–0,4 м. Об'єм проби $V = 0,027 \text{ м}^3$, а її маса, наприклад, для алюмінію, від 23 кг та більше. Тобто очевидно, що ця величина занадто велика. До того ж, враховуючи саму форму, можна очікувати труднощі при заливці розплаву й віддалення відливки, яка вже затверділа. Зменшувати висоту фігури не бажано, бо в такому разі сама термопара може впливати як на вимірювання температури, так і на процес кристалізації.

При циліндричній формі пробовідбірника легко вирішуються проблеми, що пов'язані з заливкою розплаву й віддаленням відливки, яка вже затверділа. Вимірювання температури можна провести з меншою похибкою, бо термопара розташовується уздовж вісі циліндра, тобто на ізотермі [208]. Температурне поле осесиметричне, відсутні місця з підвищеним тепловідводом, а впливом торців можна знехтувати, якщо зробити висоту циліндра (h) значно більшою, ніж його діаметр (d). Такий циліндр можна розглядати як «нескінченний». За таких умов стабілізується темп охолодження, усувається вплив літникової системи (якщо вона є), усадочну раковину легко вивести туди, де вона не впливатиме на вимірювання температури. Температура металу вимірюється фактично для об'єму, який має висоту, порівняну з діаметром циліндра.

Сферична форма пробовідбірника також симетрична, але з'являються технологічні труднощі, обумовлені наявністю літникової системи, адже діаметр сфери не може бути дуже великим унаслідок того, що збільшується градієнт температури. Крім цього, термопара завжди знаходитиметься перпендикулярно до ізотермічної поверхні, що не бажано, тому що градієнт температури уздовж неї здійснює вклад в методичну складову похибки вимірювань. Також у місці контакту термопари з поверхнею форми тепловідвід завжди буде вищим, що також спотворює температурне поле і впливає на точність визначення температури.

У такий спосіб найбільш прийнятою формою пробовідбірника для проведення термічного аналізу ливарних розплавів із метою визначення їх якості, є циліндр, у якого висота перевищує його діаметр. На рис. 2.4



а)



б)

Рис. 2.4 Пробовідбірники циліндричної форми, що застосовуються для проведення термічного аналізу ливарних розплавів із метою визначення їх стану:

- а) пробовідбірники, які заповнюються розплавом ззовні;
- б) пробовідбірник, який занурюється у розплав

представлено різні варіанти пробовідбірників зазначеної форми, що застосовувалися у цій роботі як в лабораторних, так і в промислових умовах.

Якщо визначення стану рідкого металу бажано проводити в експресному режимі, потрібно на сам аналіз витратити якомога менше часу. Зазвичай, це декілька хвилин [20; 21]. Циліндрична форма пробовідбірника зручна тим, що час охолодження залежить значною мірою, від діаметра і майже не залежить від співвідношення «висота – діаметр». Це можна показати оціночним розрахунком часу охолодження проби циліндричної форми з пропорцією $\frac{h}{d} \gg 1$.

Час охолодження t складатиметься з часу t_1 , за який проба масою m та початковою температурою T_0 досягне температури T_1 , та часу t_2 , за який здійснюється відвід теплоти, що виділяється при кристалізації, у навколишнє середовище.

Отже:

$$t = t_1 + t_2. \quad (2.3)$$

Якщо врахувати те, що температура металу вимірюється фактично для об'єму, який має висоту, порівняну з діаметром циліндра, та знехтувати градієнтом температури уздовж перерізу, то пробовідбірник можна розглядати як матеріальну точку. Вона має масу, поверхню, але не має внутрішніх розмірів. У такому разі для неї можна записати рівняння глобального теплового балансу [65; 88; 148]:

$$dQ_c = dQ, \quad (2.4)$$

де: dQ_c – тепло, що віддає тіло за рахунок теплоємності; dQ – тепло, що відводиться у навколишній простір за рахунок конвекції (закон Ньютона – Ріхмана).

Скористаємося відомим [65; 148] калориметричним співвідношенням:

$$dQ_c = cm[-dT(t)], \quad (2.5)$$

та законом конвективної теплопередачі Ньютона – Ріхмана (вважаємо, що тепло відводиться тільки за рахунок конвекції):

$$dQ = \alpha S (T - T_{cp}) dt, \quad (2.6)$$

де: c – питома теплоємність, яка припускається сталою; m – маса металу, яка досліджується; α – коефіцієнт тепловіддачі; S – площа поверхні пробовідбірника.

Підставляючи (2.5) та (2.6) у вираз (2.4), після нескладних перетворень, отримаємо звичайне диференціальне рівняння першого порядку:

$$\frac{d[T(t) - T_{ch}]}{T(t) - T_{cp}} = -\frac{\alpha S}{cm} dt. \quad (2.7)$$

Розв'язуючи його при початковій умові $T(0) = T_0$, отримаємо:

$$T(t) - T_{cp} = (T_0 - T_{cp}) \exp\left(-\frac{\alpha S}{cm} t\right). \quad (2.8)$$

З цього виразу можна знайти час t_1 охолодження проби від температури T_0 до заданої температури T_1 :

$$t_1 = \frac{\alpha S}{cm} \ln\left(\frac{T_0 - T_{cp}}{T_1 - T_{cp}}\right). \quad (2.9)$$

Для оцінки часу t_2 введемо ще деякі спрощення. Уважатимемо, що кристалізується чистий метал. Тоді кристалізація проходить при сталій температурі T_{kp} і за час t_2 вся маса металу повинна з рідкого стану перейти у твердий, виділивши при цьому кількість теплоти, яка дорівнює mL , де L – питома прихована теплота кристалізації [209]. Ураховуючи закон (2.16), отримаємо:

$$mL = \alpha S (T_{kp} - T_{cp}) t_2. \quad (2.10)$$

Виділяючи t_2 з (2.10) і підставляючи його (2.9) у (2.3), отримуємо:

$$t = \frac{m}{S} \left[\frac{c}{\alpha} \ln\left(\frac{T_0 - T_{cp}}{T_1 - T_{cp}}\right) + \frac{L}{\alpha (T_{kp} - T_{cp})} \right]. \quad (2.11)$$

У рівнянні (2.11) коефіцієнт $\frac{m}{S} \sim \frac{V}{S}$ відображає геометрію форми пробовідбірника. Перетворимо його у такий спосіб, щоб увійшов геометричний параметр – відношення висоти до діаметра, який позначимо G :

$$G = \frac{h}{d}. \quad (2.12)$$

Маса проби m виражається через густину металу ρ і його об'єм V . Поверхня, з якої здійснюється відвід теплоти, складається з бокової поверхні й поверхонь торців. Тобто отримаємо:

$$m = \frac{\pi}{4} \rho G d^3, \quad (2.13)$$

$$S = \pi d^2 (G + 0,5). \quad (2.14)$$

Підставляючи (2.13) та (2.14) у (2.11), остаточно отримаємо оцінку часу охолодження пробовідбірника циліндричної форми [199]:

$$t = \frac{G}{G + 0,5} \frac{\rho d}{4} \left[\frac{c}{\alpha} \ln \left(\frac{T_0 - T_{cp}}{T_1 - T_{cp}} \right) + \frac{L}{\alpha(T_{кр} - T_{cp})} \right]. \quad (2.15)$$

Звертає на себе увагу коефіцієнт $\frac{G}{G + 0,5}$, який вже при $G = 5$ дорівнює 0,91. Якщо врахувати що, зазвичай, один із торців теплоізований, то коефіцієнт уже буде $\frac{G}{G + 0,25}$ і при $G = 5$ він дорівнюватиме 0,95.

У такий спосіб час охолодження проби металу у пробовідбірнику циліндричної форми фактично залежить тільки від його діаметра d , що видно з (2.15), і не залежить від висоти. Це обумовлено тим, що збільшення висоти призводить до збільшення маси, а значить і теплоємності металу. Це гальмує процес тепловідводу. Однак збільшення висоти збільшує поверхню, з якої здійснюється тепловідвід, що вже прискорює його.

Цей висновок перевіряли експериментально. Досліджували час охолодження проб чавуну, які заливали у циліндричні пробовідбірники з діаметром 0,04 м і висотами 0,100 м, 0,125 м і 0,150 м. Криві охолодження майже не відрізнялись одна від одної.

Така властивість пробовідбірника циліндричної форми дає змогу застосовувати широкий набір конструктивних рішень при його створенні. І,

що є дуже важливим, час охолодження майже не залежить від того, наскільки рідкий метал, який досліджується, заповнив поверхню циліндра. Тобто незначні коливання маси металу, що завжди виникають при заливанні пробовідбірника, не впливають на хід процесу кристалізації і результати аналізу.

Але при застосуванні пробовідбірника, який заповнюється розплавом з зовні, спотворюється початок кривої охолодження за рахунок його власної теплоємності. Це призводить до появи перехідних процесів на початку охолодження, які, водночас, ускладнюють (а іноді й роблять неможливим) аналіз кінетики процесу на початку кристалізації. Тому необхідно з'ясувати як змінюється температура системи «пробовідбірник – розплав» у момент часу, коли пробовідбірник заповнюється рідким металом.

Вважатимемо, що нагрів здійснюється досить швидко (майже миттєво) і можна знехтувати теплом, яке відводиться з поверхні пробовідбірника (це значно спрощує розрахунки і як показує дослід, майже не впливає на їх точність) [206]. За цієї умови виконується тепловий баланс:

$$Q_z = Q_m + Q_{np}, \quad (2.16)$$

де: Q_z – загальне тепло системи «пробовідбірник – розплав»; Q_m – тепло металу, Q_{np} – тепло матеріалу пробовідбірника.

Вираз (2.15) можна записати в інший спосіб, використовуючи для цього визначення теплоємності (2.5):

$$T_z = \frac{T_m c_m m_m + T_{np} c_{np} m_{np}}{c_m m_m + c_{np} m_{np}}, \quad (2.17)$$

де: T_z – загальна температура системи «пробовідбірник – розплав»; T_m, T_{np} – температури; c_m, c_{np} – питомі теплоємності; m_m, m_{np} – маси, відповідно, металу та пробовідбірника.

Визначимо масу металу та пробовідбірника через характерні конструктивні параметри пробовідбірника: його діаметра d , співвідношення

висоти к діаметру G та товщини стінки δ . З урахуванням густин металу ρ_m та матеріалу, з якого зроблено пробовідбірник, ρ_{np} , отримаємо:

$$m_m = \pi \rho_m G \frac{d^3}{4} \quad (2.18)$$

$$m_{np} = \pi \rho_{np} G \delta d (\delta + d) \quad (2.19)$$

Підставляючи (2.27) та (2.28) в (2.26), отримаємо:

$$T_z = \frac{T_m c_m \rho_m d^3 + 4 T_{np} c_{np} \rho_{np} \delta d (\delta + d)}{c_m \rho_m d^3 + 4 c_{np} \rho_{np} \delta d (\delta + d)} . \quad (2.20)$$

Використовуючи вираз (2.20), визначимо як для алюмінію (або сплаву на його основі) залежить загальна температура системи «пробовідбірник – розплав» T_z (тобто фактично початкова температура охолодження) від температури пробовідбірника, який виготовлено з графіту за умов:

- температура металу $T_m = 700$ °С або 973 К;
- $c_m = 1200 \frac{\text{Дж}}{\text{кг} \cdot \text{К}}$ (середнє значення для сплавів);
- $c_{np} = 670 \frac{\text{Дж}}{\text{кг} \cdot \text{К}}$;
- $\rho_m = 2400 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ (середнє значення для сплавів);
- $\rho_{np} = 2300 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$;
- $d = 0,020$ м;
- $\delta = 0,001$ м.

Розрахунки показують, що при температурі пробовідбірника $T_{np} = 293$ К (20°С) після заливки в нього металу із температурою T_m 973 К, загальна температура системи стає $T_z = 903$ К (630 °С) і потім починає охолоджуватись. Згідно з експериментом для зберігання початкової ділянки кривої охолодження, початкове значення загальної температури системи T_z повинно бути не менше за 923 К (650 °С). Обчислення показують, що для цього потрібно розігріти пробовідбірник до 573 К (300 °С).

Одержані результати дають підстави зробити висновок, що у разі використання пробовідбірників, що заповнюються розплавом без занурення у металеву ванну, бажано заздалегідь передбачити їх розігрів.

Розглянемо та проаналізуємо складові методичної та випадкової похибок виміру температури проби, що твердіє.

Методичну похибку у системі «пробовідбірник – арматура термопари» дає тепловідвід через арматуру термопари. Її можна стабілізувати застосуванням у пробовідбірниках високотемпературних термоізолюючих матеріалів із низькою теплопровідністю (азбоцемент і кремній-склобентоніт – КСБ), доповнених тепловими екранами.

Кондуктивна теплопередача термоелектродами також відноситься до методичної похибки. Вона зменшується до мінімуму при використанні термопарних дротів малого діаметра (до 0,0002 м).

Параметри пробовідбірника після прогріву й у процесі виконання серії вимірів залишаються сталими. Тому частину складових методичної похибки можна віднести до систематичних похибок і врахувати їх коефіцієнтами регресійних рівнянь, які зв'язують характеристики термограм з хімічним складом та службовими властивостями сплавів. До таких похибок можна віднести [182; 207; 210]: похибку, яка вноситься розділовими елементами у системі «метал – обмазка – захисна трубка – термопара»; похибку, що обумовлена теплопередачею елементами конструкції пробовідбірника.

Випадкова складова похибки виміру у зазначених умовах складається з похибок, які виникають за рахунок [203]: зміни температури холодних кінців термопари; неоднорідності матеріалу уздовж дроту термоелектродів; відхилення т. е. р. с. термопар від номінальної статичної характеристики.

Похибка, яка обумовлена зміною температури холодних кінців, для термопар із благородних металів (платина – платинородій) несуттєва внаслідок низької чутливості у діапазоні до 473 К [211]. Для ХА термопари її потрібно зменшити до величини, що на порядок нижча за роздільну здатність

приладу, і звести до систематичної за рахунок ретельної термостабілізації холодних кінців термопари.

Неоднорідність матеріалу проводів термопари також призводить до випадкової похибки, яку можна зменшити або усунути, шляхом зменшення довжини термоелектродів, перевіркою їх на термонеоднорідність методом точкової печі з наступним видаленням ділянок з неоднорідністю, що перевищує певну величину, яка задається в довідниках (наприклад, 20,0 мкВ для ХА термопари [211]). Залишкову похибку, за необхідності, можна врахувати калібруванням термопари.

У такий спосіб основним компонентом випадкової складової методичної похибки є похибка, яка зумовлена відхиленням параметрів первинного перетворювача від НСХ (номінальна статистична характеристика). Ступінь цього відхилення характеризується збіжністю вимірів на різних термопарах одного типу [212].

У роботі [65] з'ясували збіжності вимірів на різних термопарах, дослідили 52 ХА термопари з довжиною електродів приблизно 0,05 м, які виготовлялися з однієї партії електродного дроту, в якому термоелектричні неоднорідності було усунуто. Відбиралися проби алюмінію А999 масою $0,022 \pm 0,001$ кг, пробовідбірником, основні елементи конструкції якого відповідають рис. 2.3 «б». Фіксувалася температура фазового переходу. Збіжність серії вимірів обчислювалася за формулою [203]:

$$S = \pm \sqrt{\frac{\sum_{i=2}^n (t_i - t_{i-1})^2}{\frac{n}{2} - 1}}, \quad (2.21)$$

де: S – збіжність серії [град]; n – кількість вимірів (обов'язково парне); $t(i)$, $t(i-1)$ – показання двох сусідніх у серії термопар.

В експерименті показано, що похибка вимірювання температури кристалізації алюмінію складає $\pm 3,0$ град. Для сплавів системи Al-Si це перевищує гранично припустиму похибку, визначену вище. Тому для

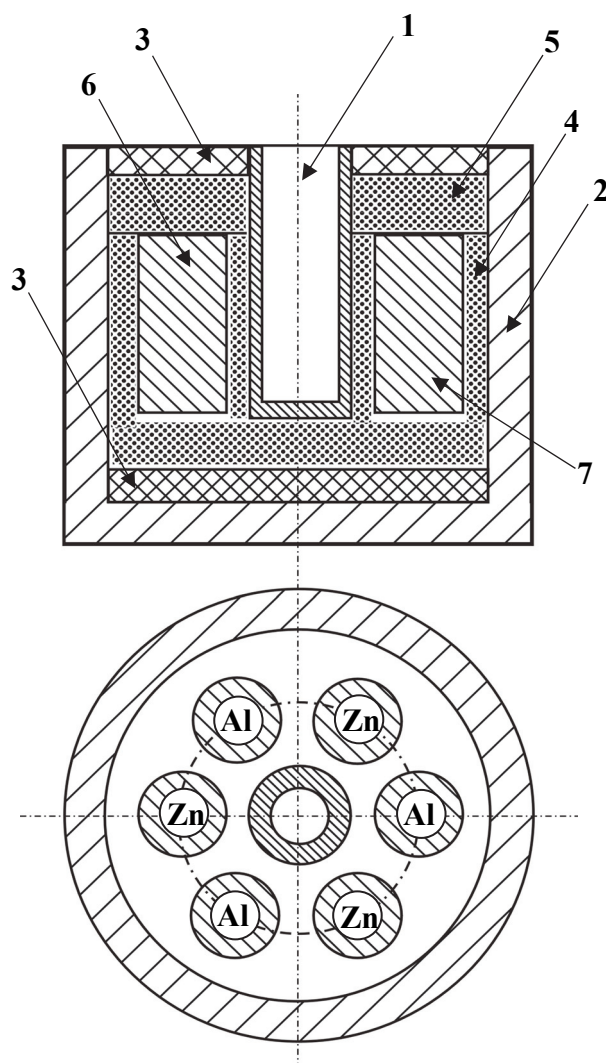


Рис. 2.5 Пристрій для калібрування ХА термопар для комп'ютерних систем аналізу стану розплавів на основі термічного аналізу [65]:

- 1 – канал для термопари;
- 2 – захисний корпус;
- 3 – теплоізолятор;
- 4 – графітовий блок з каналами для реперних металів;
- 5 – графітова заглушка;
- 6 – вкладиші з цинку;
- 7 – вкладиші з алюмінію

підвищення збіжності показань ХА термопар, бажано використовувати калібратор, варіант конструкції якого приведено на рис. 2.5. Термопара у направляючій і ізолюючій двоканальній соломці з оксиду алюмінію і захисній трубці вводиться в канал 1, а сам калібратор – в середину пробовідбірника. У каналах графітового блоку 4 калібратора розміщені чисті метали (цинку й алюмінію), що відтворюють температури плавлення (692,5 К та 933,1 К) відповідно до МПТШ-68 [213]. Блок 4 закритий графітовою кришкою 5 і теплоізований захисною прокладкою 3 із КСБ.

Процес калібрування термопар зводиться до розігріву пробовідбірника, з установленим у ньому калібратором, у ванні розплавленого металу до температури вище точки плавлення реперних речовин, а потім вільного охолодження системи в повітрі при невинній реєстрації т. е. р. с. термопар, що калібрується. Відхилення показань термопар від НСХ у реперних точках фіксуються (як при нагріванні, так і при охолодженні), і відповідно до них формується рівняння, за допомогою якого характеристика робочої термопар приводиться до стандартної. Експерименти показують, що для приведення характеристики робочої термопар до НСХ із точністю не гірше 0,3 град., досить застосування лінійного рівняння. Параметри калібратора попередньо визначаються термопарою 1-го класу точності. Після калібрування похибка робочої ХА термопар, яка не перевищує похибку калібратора, враховується як систематична.

З метою підвищення технологічності термографічного експерименту в промислових умовах і для додаткової стабілізації результатів вимірів у пробовідбірниках, використовують термопар з одноразовими захисними чохлами. Це дає змогу однією термопарою здійснювати аналіз декількох проб. За тривалості циклу вимірів до 10 хвилин, температурний дрейф термопар дуже малий, а термін служби обмежений лише їхніми механічними властивостями [189; 208]. Однак елементи захисту гарячого спаю термопар

впливають на динамічну складову методичної похибки вимірів, яку необхідно оцінити й мінімізувати.

Динамічна похибка виміру температури з'являється за рахунок інерційності, яка вноситься елементами захисту термопари, що працюють як фільтр нижніх частот (ФНЧ), і можуть бути представлені аперіодичною ланкою першого порядку [198]. Смуга пропускання такого фільтру, що обмежена частотою зрізу f_z , обумовлена часом перехідного процесу t_z системи «термопара – захист» співвідношенням [188]:

$$t_z = \frac{5}{2\pi f_z}. \quad (2.22)$$

Отже, необхідно оцінити f_z для різних конструкцій елементів захисту термопар і вибрати ті, котрі забезпечують смугу пропускання ширше встановленого при аналізі спектру кривої охолодження частотного діапазону (0,7 Гц).

Частота зрізу може бути оцінена за часом реакції системи на східчастий сигнал. У роботі [65] описано експеримент, в якому використовується тепловий сигнал типу «сходінка». Термопара миттєво занурюється у рідкий метал за допомогою системи пружин. Т. е. р. с. термопари реєструється з частотою, яка значно вища за попередньо встановлену при визначенні частоти дискретизації, і фіксується в пам'яті ЕОМ. При дії вхідного сигналу на термопару, елементи її захисту нагріваються не миттєво, а за певний час t_z . Тому форма вихідного сигналу змінюється. Його фронт наростання «запізнюється» на час перехідного процесу t_z . У залежності від інерційних властивостей захисних елементів термопар, змінюється і величина t_z .

Установлено, що оптимальним захистом термопари у пробовідбірнику підсистеми комп'ютерного термічного аналізу може бути трубка з латуні з товщиною стінки 0,2 мм без обмазки і з обмазкою на основі оксиду алюмінію, товщиною до 0,1 мм. Вона забезпечує захист термопари та має граничну частоту ФНЧ порядку 2,0 Гц, що перевищує установлений частотний діапазон кривої охолодження 0,7 Гц.

Перевіримо частотну похибку ΔT_f первинного перетворювача, за рахунок його інерційності. Оберемо середній час існування сигналу величиною у $t = 150$ с. Час перехідного процесу t_3 для захисної трубки з обмазкою товщиною 0,1 мм дорівнює 1,99 с [65].

Використовуючи співвідношення [188]:

$$\Delta T_f = 200\pi^2 \frac{t_3^2}{T^2} [\%], \quad (2.23)$$

одержимо $\Delta T_f = 0,014$ %, що на порядок менше припустимої основної відносної похибки виміру температури, визначеної вище. Згідно з [188], ця величина не здійснює суттєвого внеску у загальну похибку первинного перетворювача.

2.4 Розрахунок похибки вимірювального каналу підсистеми комп'ютерного термічного аналізу для оцінки стану рідких ливарних сплавів

Вимірювальний канал – це сукупність послідовно поєднаних первинного та вторинного перетворювачів, лінії передачі сигналу та реєстратора, яким у цьому разі виступає ЕОМ. Кожен з окремих блоків має свою похибку, а в сукупності вони формують загальну похибку вимірювального каналу [188]. Сюди можна додати ще джерело живлення, що також впливає на точність вимірювання всієї системи загалом. Проведемо розрахунок похибки вимірювального каналу установки комп'ютерного аналізу стану розплавів на прикладі Al-Si сплаву.

Блок-схему вимірювального каналу представлено на рис. 2.6. Вона складається з датчика (Д), лінії зв'язку (ЛЗ), аналого-цифрового перетворювача (АЦП) і цифрового реєстратора, що містить у собі інтерфейс і ЕОМ. На результуючу похибку вимірювального каналу впливають такі фактори: похибка від наведення напруги на лінію зв'язку; похибка вимірювального приладу; основна похибка датчика; температурна похибка

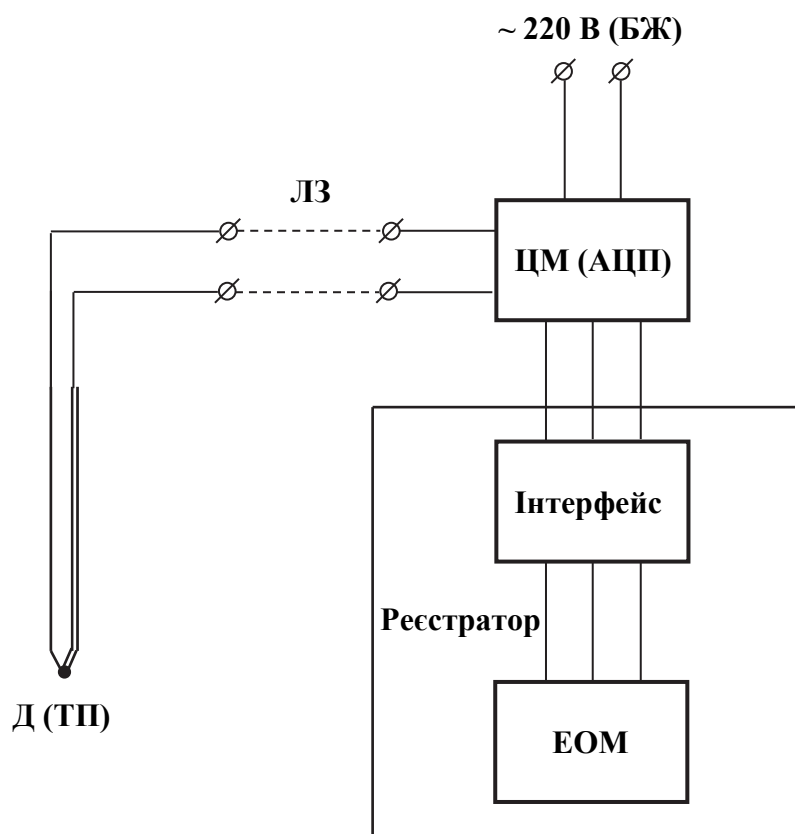


Рис. 2.6 Блок-схема вимірювального каналу:
Д – датчик (термопара); ЛЗ – лінія зв’язку; ЦМ – цифровий мультиметр; БЖ – блок живлення, ЕОМ – комп’ютер

датчика. Оскільки перераховані складові похибки є випадковими величинами, найбільш повно вони можуть бути описані своїми законами розподілу, а результуюча похибка – багатомірним законом розподілу. Розрахунок сумарної похибки проведемо за методикою [188], за якої її складові є середніми квадратичними відхиленнями і всі операції підсумовування виконуються тільки над ними.

Напруга наводки між заземленим проводом лінії й однією з ізолюваних жил склала 0,1 В (вхідний струм 0,0033 мкА). При замиканні цього струму на датчик і лінію зв'язку опором 0,4 Ом, спадання напруги складає 0,132 мкВ. При максимальному сигналі з датчика в 35 мВ приведена похибка від наводки складає 0,0038 %, вона також є її середнім квадратичним відхиленням (с. к. в.).

Оскільки визначено діюче значення напруги, то максимальне значення похибки складає 0,0054 %. Закон розподілу похибки – арксинусоїдальний з ентропійним коефіцієнтом $K_e = 1,11$, ексцесом $e = 1,5$ і контрексцесом $\kappa = 0,816$. Тип похибки – адитивна.

Похибка вимірювального приладу δ_0 нормована двочленною формулою [214; 215]:

$$\delta_0 = \pm \left[0,06 + 0,02 \left(\left| \frac{U_k}{U} \right| - 1 \right) \right] [\%], \quad (2.24)$$

де: U_k – кінцеве значення границі вимірів (максимальне значення шкали приладу); U – поточне значення величини, що вимірюється.

У такому разі кінцеве значення границі вимірів $U_k = 100$ мВ, початкове значення величини, що вимірюється, – 18 мВ, кінцеве – 35 мВ. Розподіл похибки для цифрових мультиметрів – експонентне з ентропійним коефіцієнтом приладу $K_{e\text{ пр}} = 1,35$, ексцесом $e = 25,2$ і контрексцесом $\kappa = 0,2$. Згідно з (2.32) с. к. в. похибки на початку діапазону складе 0,15 %, а в його кінці – 0,1 %.

Датчик – термопара типу ХА (опір 0,4 Ом), що підключений до вимірювального приладу лінією з компенсаційних дротів мідь-константан

перетином 0,001 м і довжиною 5 м. Установка живиться від мережі змінного струму 220 В 50 Гц із нестабільністю напруги $\pm 15\%$. Апаратура розміщена у приміщенні з температурою навколишнього середовища, що змінюється від 18 до 25°С.

Основна похибка датчика, як уже з'ясовано, обумовлена невідповідністю характеристики робочого термоперетворювача номінальній статичній характеристиці (НСХ). Для ХА термопар допускається відхилення ΔE від НСХ у діапазоні температур 573–1573 К, що обчислюється за такою формулою [72]:

$$\Delta E = \pm 0,16 + 2 \times 10^{-4} (t - 300) [\text{мВ}]. \quad (2.25)$$

Для верхньої границі діапазону вимірів (800° С або 1073 К, 34,4 мВ) максимальна похибка датчика складе 0,21 мВ або 0,6 %. Похибка носить випадковий характер, тип її розподілу – нормальний. Середньоквадратичне відхилення на рівні 0,98 буде удвічі чи тричі меншим, що складе $\pm 0,26\%$, більше, ніж $\pm 2,0^0$. Однак застосуванням калібратора, який описано вище, абсолютна похибка датчика знижена до 0,1 град. (порядку 0,004 мВ) в усьому діапазоні вимірів, що відповідає с. к. в. у 0,005 %. Ентропійний коефіцієнт $K_{\text{од}} = 2,066$, ексцес $e = 3,0$, контрексцес $\kappa = 0,577$.

При зміні температури навколишнього середовища у приміщенні від 291 до 298,5° К випадковим образом (тип розподілу – нормальний) температурна похибка від нестабільності температури холодного спаю, приведена до верхньої границі діапазону виміру, складає $\frac{7}{800} \times 100 = 0,875\%$. Її с. к. в. на рівні 0,98 дорівнює 0,38 %. Цю складову загальної похибки можна зменшити, наприклад, шляхом термостабілізації затискних клем вимірювального приладу до рівня $\pm 0,5$ град. (с. к. в. приведеної похибки 0,028 %).

Похибками від наведення на лінію зв'язку й основною температурною похибкою каліброваного датчика (унаслідок їх малості), можна знехтувати. Усі похибки некорельовані й підсумовуються алгебраїчно.

Для кінця діапазону с. к. в. похибки складається з температурної похибки датчика, яка дорівнює 0,028 % (нормальний розподіл), і похибки цифрового вимірювального приладу, що дорівнює 0,1 % (експонентний розподіл), і складає 0,1038 %. При сумуванні величин з нормальним ($K_e = 2,066$) і експонентним ($K_e = 1,135$) розподілами, відносна вага експонентної складової у повній дисперсії буде 0,724, ентропійний коефіцієнт сумарного розподілу похибки складе 2,0. Тоді ентропійне значення приведеної похибки вимірювального каналу дорівнює 0,2 % або 1,6 град.

Для початку діапазону вимірів ентропійне значення приведеної похибки буде рівним 0,3 % чи 1,2 град.

Тобто похибка вимірювального каналу задовольняє граничній величині, що визначена вище.

2.5 Термошумовий первинний перетворювач з магнітним зв'язком для безконтактного вимірювання температури

2.5.1 Математична модель термошумового перетворювача

Термошумовий первинний перетворювач, запропонований автором [216], для безконтактного вимірювання температури складається з високочастотного контура, який магнітно зв'язаний з металом, що досліджується, та перетворювача напруги шуму, що наводиться у контурі. Останній також робить квадратичне усереднення вхідного сигналу (рис. 2.7).

Для визначення основних параметрів індуктивного термошумового термометра, таких, як чутливість та динамічний діапазон, потрібно визначити його передаточну функцію. Вона нелінійно зв'язана з параметрами вимірювального пристрою і може бути визначена експериментально. Однак, з огляду на малість сигналу, такий спосіб не можна вважати оптимальним. До того ж він усуває можливість проектування вимірювальної системи, виходячи із заданого динамічного діапазону та чутливості перетворювача.

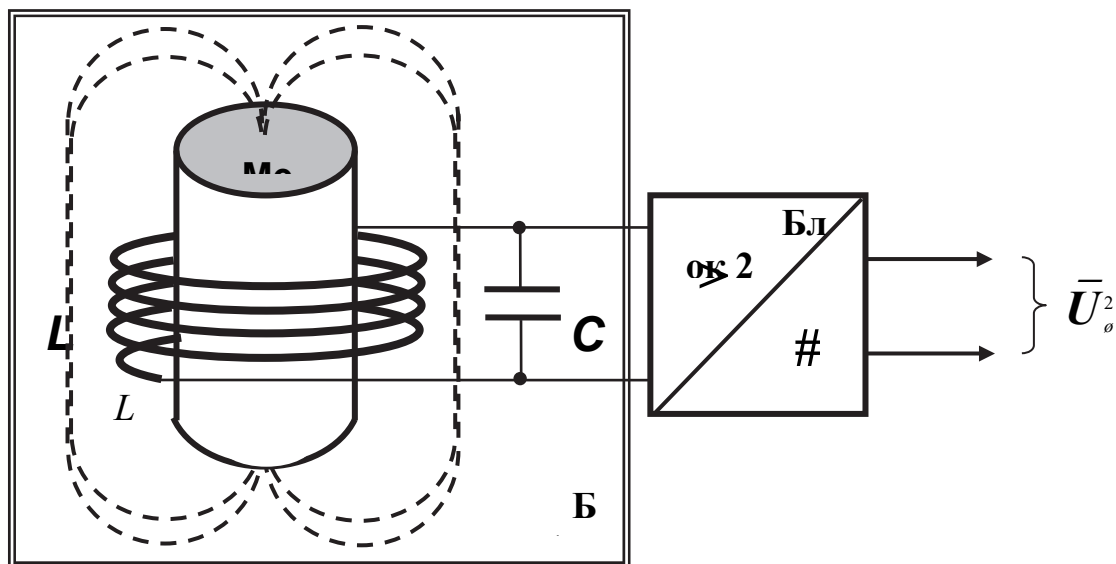


Рис. 2.7 Блок-схема термошумового первинного перетворювача з індуктивним зв'язком:

блок 1 – високочастотний контур, який магнітно зв'язаний з металом, що досліджується; блок 2 – перетворювач напруги шуму, що наводиться у контурі; $\bar{U}_o^2$ – середній квадрат шуму; L – індуктивність контуру; C – ємність контуру; Me – проба металу, що досліджується

Для теоретичного розрахунку передаткової функції шумового термометру з індуктивним перетворювачем, необхідно знати розподіл електромагнітного поля в циліндрі, який створено з електропровідного матеріалу (металу) та нагрітого до певної температури. Загалом розподіл температури у ньому є нелінійним. Градієнт температури визначається теплопровідністю матеріалу, геометричними розмірами тіла, умовами тепловідводу на його поверхні і характеризується критерієм Ві [112]. У роботі [217] теоретично розраховано вплив нерівномірного розподілення температури на густину електромагнітного поля в циліндрі, що охолоджується (при довільній глибині проникнення поля).

Наступні викладки виконуються за припущеннями, що температура розподілена рівномірно уздовж об'єкта досліджень, а сам він розміщений коаксіально у котушці коливального контуру.

Якщо є гальванічний зв'язок вимірювального ланцюгу з об'єктом досліджень, результуюче значення інформативного параметру U (напруга шумів), яке отримано перетворювачем, описується співвідношенням Найквіста – Хонсона [69]:

$$\overline{U}^2 = 4kT_s R_s \Delta f, \quad (2.24)$$

де: $\overline{U}^2$ – середній квадрат напруги шуму; k – константа Больцмана; T_s – абсолютна температура об'єкту, що досліджується; R_s – електричний опір об'єкту, що досліджується; Δf – полоса частот, у яких робиться перетворювання.

Зміна гальванічного зв'язку магнітним призводить до трансформації теплового шуму об'єкту вимірювань зв'язаною системою контурів, один з яких утворений індуктивністю та опором втрат металевого циліндру, а другий є вимірювальним контуром перетворювача. Блок-схема термошумового первинного перетворювача та його еквівалентна схема для цього випадку показані на рис. 2.7 та рис. 2.8.

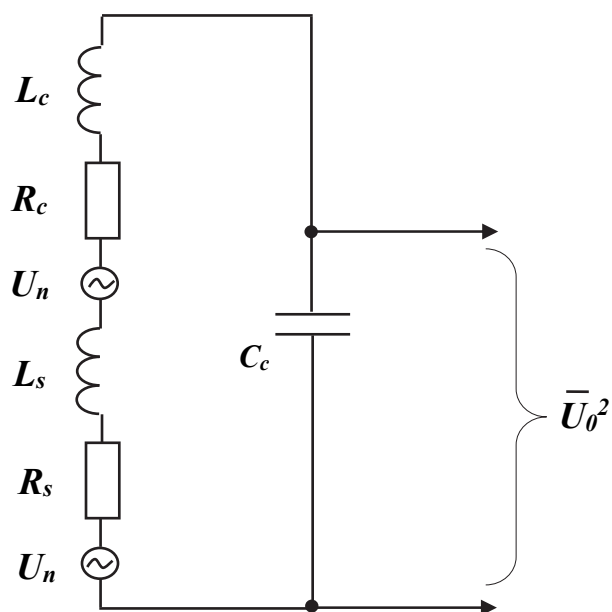


Рис. 2.8 Еквівалентна схема термошумового первинного перетворювача з індуктивним зв'язком:
 U_{nc} , L_c , R_c – відповідно напруга, індуктивність та опір контуру;
 U_{ns} , L_s , R_s – відповідно напруга, індуктивність та опір шумів;
 $\bar{U}_\theta^2$ – середній квадрат шумів

Середній квадрат напруги шуму $\bar{U}^2$ можна визначити як розв'язок рівняння контурних струмів. Тепловий шум об'єкту вимірювань зосереджено на схемі у генераторі напруги U_{ns} , а шум контуру, відповідно, у U_{nc} [218]:

$$U_{nc} = R_{11} - j\omega M I_c, \quad (2.25)$$

$$U_{ns} = -j\omega M I_s + R_{22} I_s, \quad (2.26)$$

$$R_{11} = R_s + j\omega L_s, \quad (2.27)$$

$$R_{22} = R_c + j\omega L_c - \frac{j}{\omega C_c}, \quad (2.28)$$

де: I_s – поверхневий струм у зразку; I_c – струм вимірювального контуру; M – величина магнітного зв'язку між контурами; ω – резонансна частота вимірювального контуру; R_{11} – повний опір зразку; R_{22} – повний опір вимірювального контуру; R_s, L_s – опір втрат та індуктивність зразку; R_c, L_c, C_c – опір, індуктивність та ємність вимірювального контуру відповідно; j – корінь з мінус одиниці (уявна одиниця).

Із рівнянь (2.25) і (2.26) визначається контурний струм I_c та потім напруга на конденсаторі U_c :

$$U_c = -\frac{j}{\omega C_c} I_c = \frac{U_{ns} - jU_{nc} \frac{R_{11}}{\omega}}{C_c (R_{11} R_{22} - \omega^2 M^2)^2}. \quad (2.29)$$

Середній квадрат напруги U_c знаходимо з урахуванням того, що U_{ns} і U_{nc} – не корельовані випадкові процеси:

$$\bar{U}^2 = \frac{\bar{U}_{ns}^2 M^2 - \bar{U}_{nc}^2 \frac{R_{11}^2}{\omega^2}}{C_c^2 (R_{11} R_{22} - \omega^2 M^2)^2}. \quad (2.30)$$

Зміна змінних у виразі (2.30) дає змогу отримати компактну форму запису напруги на виході термошумового перетворювача:

$$\bar{U}^2 = C_1 (C_2 T_s - C_3), \quad (2.31)$$

де:

$$C_1 = \frac{4k\Delta f}{C_c^2 (R_c R_s - \omega^2 L_c L_s (1 + k_l^2) + j(\omega R_c R_s L_c + \omega R_c L_s - \frac{R_c}{\omega C_c}))}, \quad (2.32)$$

$$C_2 = k_l^2 L_c L_s R_s, \quad (2.33)$$

$$C_3 = R_c \left(\frac{R_s^2}{\omega^2} - L_s^2 + j2R_s \frac{L_s}{\omega} \right), \quad (2.34)$$

$$k_l = \frac{M}{\sqrt{L_c + L_s}}, \quad (2.35)$$

де k_l – коефіцієнт магнітного зв'язку вимірювального контуру із об'єктом.

Опір втрат R_s та індуктивність L_s металевого циліндру визначаються як компоненти його повного внутрішнього опору. Їх розрахунок проведено у роботі [219] за участю автора:

$$R_s = \frac{\pi \omega \mu \int_0^{R_0} M_1^2 (R \sqrt{\omega \mu \sigma_s}) R dR}{l_0 \left[1 - \text{ber}(R_0 \sqrt{\omega \mu \sigma_s}) \right]^2 + \text{bei}^2 (R_0 \sqrt{\omega \mu \sigma_s})}, \quad (2.36)$$

$$L_s = \frac{\pi \omega \mu j \int_0^{R_0} M_0^2 (R \sqrt{\omega \mu \sigma_s}) R dR}{l_0 \left[1 - \text{ber}(R_0 \sqrt{\omega \mu \sigma_s}) \right]^2 + \text{bei}^2 (R_0 \sqrt{\omega \mu \sigma_s})}, \quad (2.37)$$

де: σ_s , μ – провідність та магнітна проникність матеріалу; R_0 , та l_0 – відповідно радіус та довжина зразку; **ber** та **bei** – функції Кельвіна нульового та першого порядку відповідно; M_0 та M_1 – модулі функцій Кельвіна нульового та першого порядку.

Для конкретних розрахунків на практиці залежність величини σ_s від абсолютної температури зразку T апроксимують функцією виду [218]:

$$\sigma(T) = \frac{1}{\sum_{i=0}^3 a_i T^i}. \quad (2.38)$$

Зокрема, для чистого алюмінію коефіцієнти апроксимації a_i наведені у таблиці 2.3, де температурний інтервал розділений на два піддіпазони: вище

та нижче точки плавлення (кількість знаків після коми забезпечує потрібну точність апроксимації).

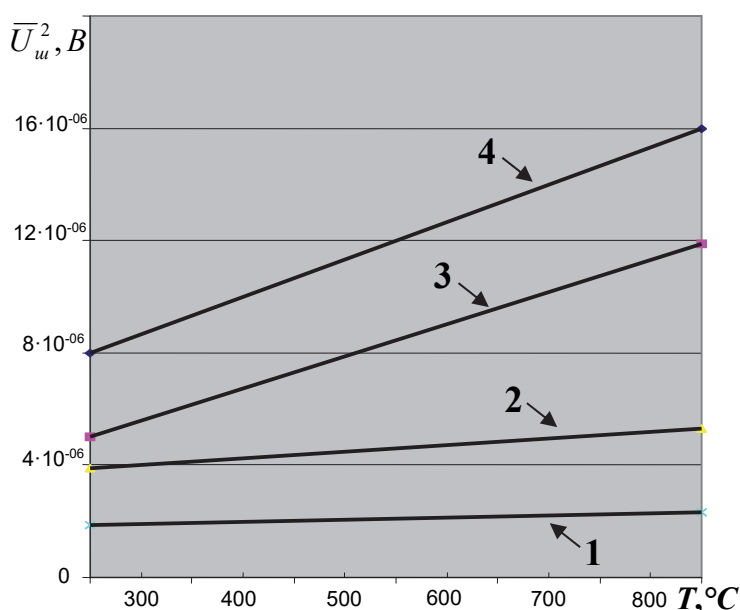


Рис. 2.9 Розрахункові залежності $\overline{U}_{ui}^2$ від температури зразку T за умов:
 $R_o = 0,005$ м; $l_o = 0,030$ м; $L_c = 100$ мкГн; $\Delta f = 200$ кГц; $R_c = 0,3$ Ом, $k_l = 0,03$.
 1. $f = 1$ МГц; 2. $f = 2$ МГц; 3. $f = 3$ МГц; 4. $f = 4$ МГц

Розрахуємо відгук системи $\overline{U}_{ui}^2$ на заданий вплив Ts за допомогою виразів (2.31) – (2.37) та апроксимованої залежності $\sigma_s(T)$ при наступних значеннях параметрів системи: $R_o = 0,005$ м; $l_o = 0,030$ м; $L_c = 100$ мкГн; $\Delta f = 200$ кГц; $R_c = 0,3$ Ом, $k_l = 0,03$. Результати розрахунків у вигляді графічних залежностей наведено на рис. 2.9. Вони дають змогу оцінити чутливість та динамічний діапазон зміни

інформаційного параметру $\overline{U}_{ui}^2$ пристрою при певних заданих характеристиках системи. Зокрема, для частот 1, 2, 3, 4 МГц (товщина скін-слою 0,18; 0,13; 0,11; 0,09 мм) динамічний діапазон перетворювача складає $1.9\text{E-}8$; $4.1\text{E-}8$; $6.4\text{E-}8$; $8.7\text{E-}8$ В відповідно. Нелінійність характеристики не перевищує 3 % [220].

У такий спосіб розроблена математична модель термошумового перетворювача дає змогу зробити оцінку чутливості та динамічного діапазону, розрахувати передаточну характеристику, а також параметри системи для заданого температурного впливу на вході. Це уможливорює моделювання різних варіантів приладів для безконтактного вимірювання температури та у належний спосіб добір їхніх параметрів.

Таблиця 2.3

**Коефіцієнти апроксимації залежності величини σ_s від
абсолютної температури зразку T**

i	a_i при $T < 933,61$ K	a_i при $T > 933,61$ K
0	-1,0821 507118789E- 8	3,47056222601306E-8
1	1,46380738167991E- 10	3,03406032733250E-10
2	-8,00462046309290E-14	-9,70209757663964E-14
3	6,06666819873672E-17	1,76295469055019E-17

2.5.2 Розробка конструкції первинного термошумового індуктивного перетворювача

Вище показано, що вимірюванням середнього квадрату напруги на коливальному контурі можна визначити температуру металу, що досліджується, і який знаходиться усередині цього контуру. Віднайдемо умови, за яких ця напруга досягає максимуму, оскільки це важливо, враховуючи малість сигналів.

З погляду фізики зрозуміло, що при наближенні дослідного металу до вимірювальної котушки, додані до контуру втрати будуть зростати, так як більшу кількість ліній магнітного поля буде замкнено на металі. При зростанні втрат добротність контуру падатиме, а селективні властивості погіршуватимуться. У такому разі контур стане непридатним для підсилювання термошумів металу. Якщо ж віддалити дослідний метал від контуру, то додані металом втрати знижуються. Однак при цьому за рахунок

зменшення зв'язку, контур стає нечутливим до металу і власні шуми контуру починають перевищувати шуми металу.

Ймовірно, існує якийсь оптимальний зв'язок, за якого втрати, що додаються до контуру, ще не призводять до значного погіршення його добротності, а термешуми металу в контурі вже перевищують його власні шуми.

Знайдемо додані до контуру втрати, що відповідають оптимальному зв'язку ($R_s = R_{sonm}$), за якого $\bar{U}_{u}^2$ на виході контуру досягає свого максимального значення.

Формулу (2.31) з урахуванням опору зв'язку і опору контуру, можна записати у вигляді:

$$\bar{U}_{u}^2 = 4k\Delta f (TR_s + T_k R_k) Q_k^2, \quad (2.39)$$

де: Q_k^2 – добротність вимірювального контуру; T_k та R_k – відповідно температура та опір контуру.

Для визначення максимального значення $\bar{U}_{u}^2$, знайдемо нуль його похідної за R_s :

$$\frac{d\bar{U}_{u}^2}{dR_s} = 0. \quad (2.40)$$

Ураховуючи, що

$$Q_k^2 = \frac{\omega^2 L_k^2}{(R_s + R_k)^2}, \quad (2.41)$$

після нескладних перетворювань, отримуємо:

$$R_{soon} = R_k \left(1 - 2 \frac{T_k}{T}\right). \quad (2.42)$$

За високих температур, коли $T \rightarrow \infty$, співвідношення $\frac{T_k}{T} \rightarrow 0$ і вираз (2.42) можна записати як:

$$R_{soon} = R_k. \quad (2.43)$$

Тобто за цієї умови можна визначити максимальну потужність шумів. Підставляючи (2.43) та (2.41) в (2.39), отримуємо:

$$\overline{U}_{u\max}^2 = 4k\Delta f\omega^2 L_k^2 \frac{T + T_k}{R_k}. \quad (2.44)$$

Рівняння (2.44) дає змогу розрахувати максимальну потужність шумів на виході вимірювального контуру у разі оптимально дібраних параметрів вимірювальної котушки. Відповідно до нього при зниженні втрат у котушці, потужність шумів зростає. Зниження втрат досягається конструкційно – збільшенням діаметру дроту котушки індуктивності.

Конструктивно термошумовий перетворювач з індуктивним датчиком представлено на рис. 2.10 та рис. 2.11 [221]. Він являє собою високочастотну водоохолоджувальну котушку індуктивності, всередині якої розташовується зразок, який досліджується, і спеціальний прилад, який перетворює наведений в котушці термошум в електричний сигнал.

Для запобігання перегріву індукційної котушки передбачено її водяне охолодження (рис. 2.10, рис. 2.11). Для економії води і запобігання забруднення застосовується замкнутий цикл охолодження. У зв'язку з тим, що при реєстрації теплових шумів необхідно точне значення їх показників, установка потребує екранування електричних і магнітних полів. Для екранування вибрано холоднокатану мідь, як матеріал з найбільшою питомою провідністю. Для з'єднання листів екрану застосовано пайку, що забезпечує хороший контакт і зменшує вплив електромагнітних полів, які знижують точність виміру шумів металу, який досліджується (рис. 2.11).

Для створення макету безконтактного термошумового термометра, підібрали вимірювальні прилади, що входять до схеми виміру. Підсилення наведених теплових шумів можна виконати застосуванням вимірювальних комплексів на основі селективного мікровольтметра типу SMV-6.5, SMV-11. Також можуть бути використані селективні мікровольтметри типу В6-10 та універсальний вимірювач рівнів MV-6.

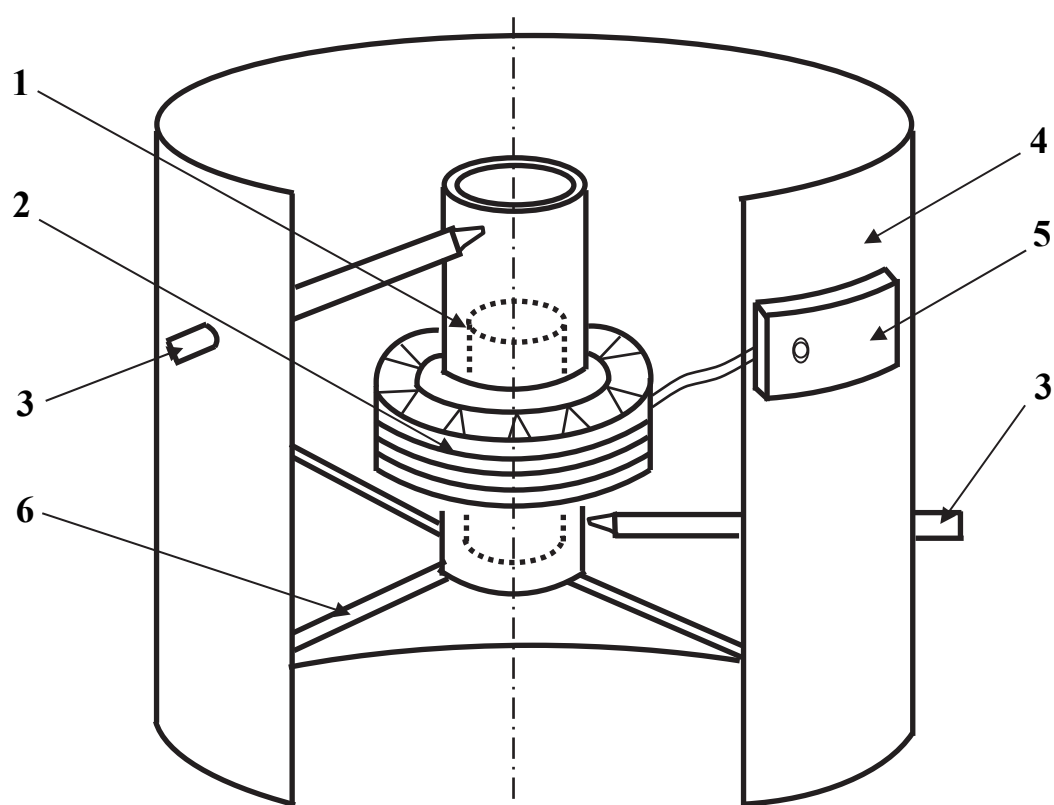
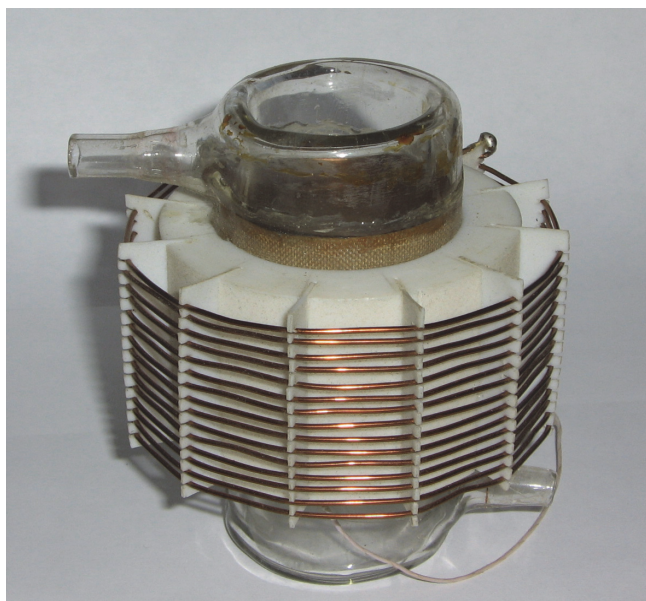


Рис. 2.10 Конструкція термошумового індуктивного перетворювача для виміру температури металів у твердому та рідкому станах:

1 – проба металу, що досліджується; 2 – вимірювальна котушка індуктивності; 3 – система водяної термостабілізації котушки індуктивності; 4 – електромагнітний екран; 5 – підсилювач; 6 – елементи кріплення



а)



б)

Рис. 2.11 Макети вимірювального контуру (а) та термошумового індуктивного перетворювача (б) для виміру температури металів у твердому та рідкому станах

У нашому випадку термошумовий перетворювач температури металів з індукційним зв'язком змакетовано на базі оригінального термошумового датчика, селективного мікровольтметра SMV-11 і комбінованого вимірювального приладу Щ300. Результати вимірів реєструються і оброблюються ЕОМ.

Макет безконтактного термошумового термометра являє собою два конструктивно незалежних блоки зв'язаних між собою коаксіальним кабелем (рис. 2.7). Перший блок включає вхідний коливальний контур та підсилювач. Другий блок складається з АЦП та ЕОМ.

Для підвищення термостабільності котушка індуктивності забезпечена охолоджуючою «сорочкою» із кварцу, крізь яку подається вода. Ємнісний зв'язок котушки з рідким металом усувається електромагнітним екраном, який зроблено із мідної фольги, товщиною 0,05 мм. Він розташований на внутрішній стороні тефлонового каркасу котушки. Підсилювач також встановлено в електромагнітний екран, що забезпечує сталість його параметрів.

Калібровка термошумового датчика з індуктивним зв'язком проводиться у такий спосіб: розплавлений метал або сплав після плавлення виливають у пробовідбірник. Для вимірювання й порівняння температури використовують термопару і термошумовий датчик. При вимірюванні температури термопарою, яка вміщується у розплавлений рідкий метал, використовують цифровий вольтметр. Виходи вольтметрів, які вимірюють термошумовий сигнал та сигнал з термопари за допомогою узгоджуючого пристрою, підключено до ЕОМ.

Метал, що досліджується, вміщується в індукційну котушку вимірювальної термошумової установки. Значення теплового шуму фіксуються селективним мікровольтметром SMV-11. Цей мікровольтметр має канал загального користування, що і дає змогу фіксувати й обробляти значення температури з використанням ЕОМ.

Перед використанням безконтактного шумового термометра його потрібно прокалібрувати. Для цього одночасно вимірюються термопарою температура металу і шумовим термометром середній квадрат теплових шумів. За одержаними результатами будується калібровочна крива.

Проведені експериментальні вимірювання температури металу підтвердили принципову можливість використання розробленої системи. Однак необхідно акцентувати досить високу вартість використаного прецизійного обладнання та складність екранування первинного перетворювача у цехових умовах.

Висновки до Розділу 2

1. На підставі рівноважних діаграм стану ливарних сплавів на основі алюмінію, визначено необхідну точність вимірювання температури у підсистемі комп'ютерного термічного аналізу. Установлено, що абсолютна похибка вимірювання повинна бути не більшою, ніж 2,0 град. при роздільній здатності, не гіршій, ніж 0,3 град. Частота дискретизації при реєстрації термограм визначається частотним складом термограм на ділянках з максимальним прискоренням зміни температури і, як визначено, повинна бути не меншою, ніж 3,0 Гц. Частоту дискретизації можна довести до 20–30 Гц. При цьому бажаним є одночасне застосування цифрового фільтра для частот вище 0,7 Гц.

2. З'ясовано, що оптимальною геометричною формою пробовідбірників, що застосовуються у системах аналізу стану ливарних розплавів на основі термічного аналізу, є циліндр зі співвідношенням висоти і діаметра $G = \frac{h}{d} = 4-5$. При цьому час охолодження проби металу фактично залежить тільки від діаметра d і майже не залежить від висоти h .

3. Установлено, що при використанні пробовідбірника, який заповнюється розплавом ззовні, перед заливкою, необхідно здійснювати його попередній розігрів.

4. Розроблено математичну модель термошумового перетворювача, яка дає змогу здійснити оцінку чутливості та динамічного діапазону, розрахувати передаточну характеристику, а також параметри системи для заданого температурного впливу на вході. Розраховано максимальну потужність шумів на виході вимірювального контуру у разі оптимально дібраних параметрів вимірювальної котушки. Змакетовано конструкцію термошумового термометра і показано принципову можливість безконтактного вимірювання температури за його допомогою.

РОЗДІЛ 3

ОСОБЛИВОСТІ МАТЕМАТИЧНОЇ ОБРОБКИ КРИВОЇ ОХОЛОДЖЕННЯ

Характерною особливістю комп'ютерного термічного аналізу є використання т. зв. «часових рядів» [222], тобто даних у вигляді дискретного числового ряду. Математичні перетворення у такому разі виконуються за допомогою чисельних методів [61], які мають деякі особливості, що не притаманні методам класичної математики.

Математична обробка кривих охолодження складається з двох етапів. На першому етапі виконується первинна обробка експериментальних даних КТА, яка полягає у фільтрації та чисельному диференціюванні кривої охолодження. Другий етап полягає у застосуванні математичних моделей підвищення точності визначення температур початку та закінчення кристалізації та для розрахунку її параметрів.

3.1 Чисельне диференціювання і фільтрація кривої охолодження

Диференціювання функції дає змогу виявити незначні її зміни, що майже (або взагалі) непомітні на її графіку. Чисельне диференціювання кривих охолодження сприяє виявленню температурних точок, що характеризують кінетику фазового перетворення (або хімічної реакції), які є важливими при аналізі всього процесу загалом. Однак відомо [223], що чисельне диференціювання є операцією дуже нестійкою і, при цьому, можна отримати безглузді результати. Це, передусім, обумовлено існуванням більш або менш сильного шуму, який притаманний експериментальним даним. Наприклад, у виробничих умовах ливарних цехів індукційні і дугові печі є потужними енергоспоживачами. Вони аперіодично переключаються і створюють електромагнітні перешкоди, що впливають на слабкий

термоелектричний сигнал. Якщо такий сигнал чисельно диференціювати, то шумова компонента різко зростає [223], маскуючи, при цьому, дійсну залежність. Завади такого типу можуть суттєво впливати на аналіз кривих охолодження у системах комп'ютерного аналізу, особливо в тих, які працюють у ливарних цехах. Зменшити вплив електромагнітних перешкод у таких системах можна застосуванням перетворення сигналів напруги у сигнали струму або світла. Однак це призводить до ускладнення апаратної частини та її подорожчання.

У сучасних системах КТА, де використовуються цифрові перетворювачі сигналу з термопар, характерним є наявність стрибків на кривій охолодження. Вони виникають за рахунок квантування неперервного сигналу з термопар при його перетворенні в дискретний вид. При подальшій обробці кривої охолодження, яка зводиться до чисельного диференціювання, ці стрибки призводять до значного збільшення шумової складової на похідній температури за часом. Збільшення шуму маскує наявні теплові ефекти, необхідні для аналізу проходження процесу кристалізації.

Для боротьби зі зростанням шумової компоненти експериментальних даних залежності $T = f(t)$, використовують спеціальні формули для числового диференціювання, що базуються на інтерполяційних поліномах [223]. Найчастіше чисельну похідну розраховують за двома, трьома, п'ятьма та сімома точками. Ці формули розрізняються між собою складністю та, що важливо, характером згладжування результату чисельного диференціювання.

Стрибки при реєстрації кривої охолодження у пам'яті комп'ютера особливо помітні на ділянках кривої охолодження з постійною температурою або з температурою, яка повільно змінюється.

На рисунках 3.1 та 3.2 показані змодельовані варіанти стрибків температури, які можуть виникати при реєстрації кривої охолодження, та результати їх диференціювання. Очевидно, що більш складні формули краще згладжують похідну. Формули за п'ятьма та сімома точками дають майже однакові результати.

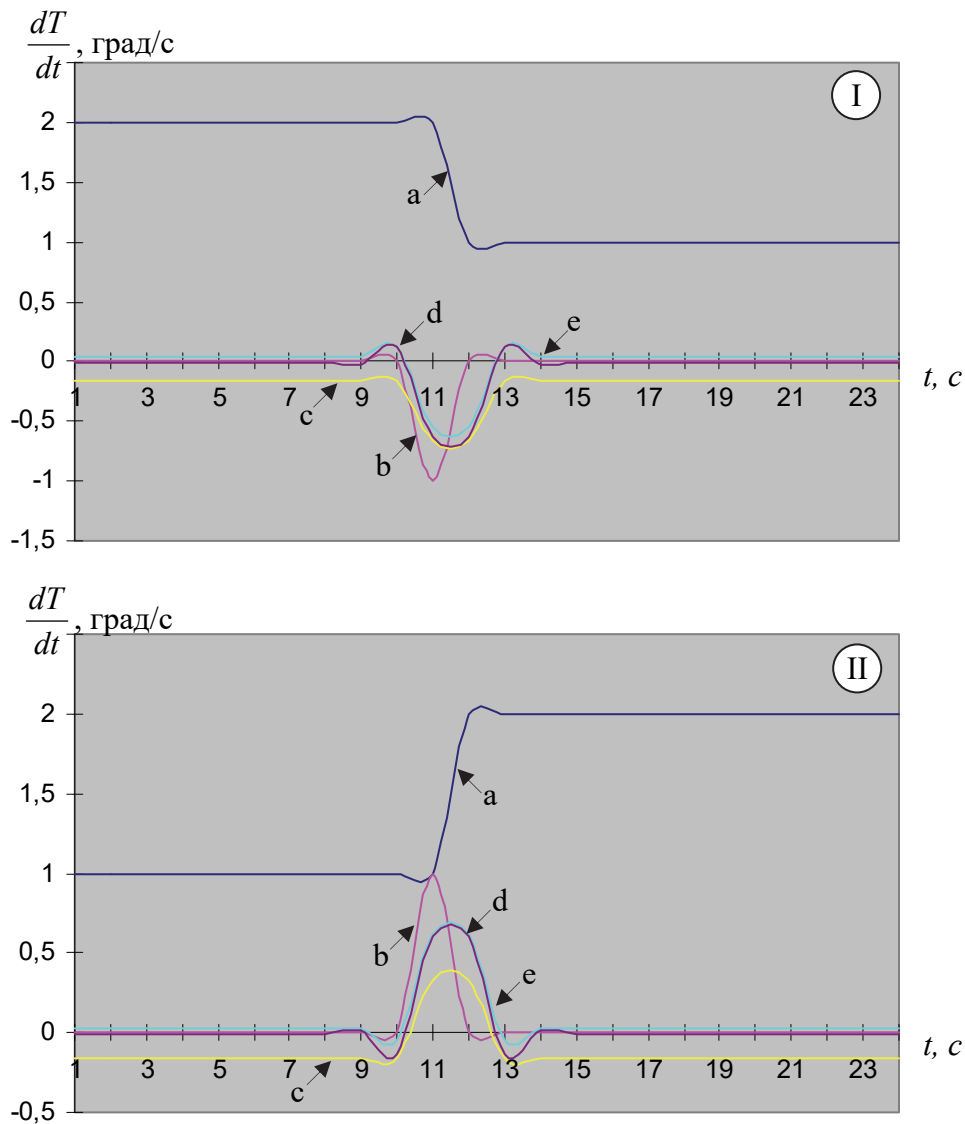


Рис. 3.1 Змодельовані стрибки температури, які виникають при фіксації кривої охолодження у цифровому вигляді в пам'яті комп'ютера, та результати їх чисельного диференціювання:

I – сходинка вгору;

II – сходинка вниз;

a – модель ділянки температурної кривої;

b – чисельна похідна температури за часом, яка розрахована за двома точками;

c – чисельна похідна температури за часом, яка розрахована за трьома точками;

d – чисельна похідна температури за часом, яка розрахована за п'ятьма точками;

e – чисельна похідна температури за часом, яка розрахована за сімома точками

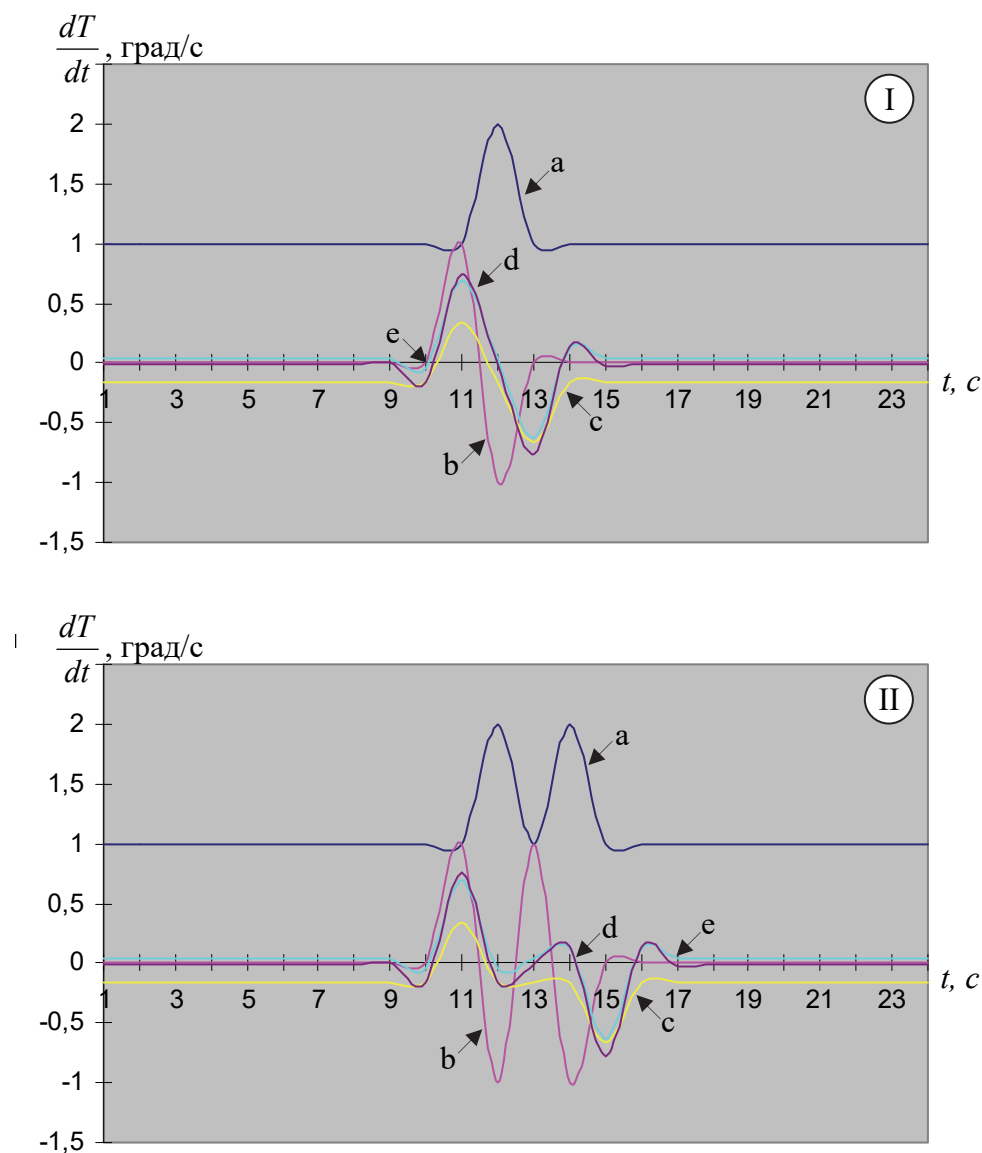


Рис. 3.2 Змодельовані стрибки температури, які виникають при фіксації кривої охолодження у цифровому вигляді в пам'яті комп'ютера, та результати їх чисельного диференціювання:

I – стрибок вверх;

II – два стрибки вверх;

a – модель ділянки температурної кривої;

b – чисельна похідна температури за часом, яка розрахована за двома точками;

c – чисельна похідна температури за часом, яка розрахована за трьома точками;

d – чисельна похідна температури за часом, яка розрахована за п'ятьма точками;

e – чисельна похідна температури за часом, яка розрахована за сімома точками

Тому оптимальними можна обрати формули чисельного диференціювання за п'ятьма точками [223]:

$$T'_i = \frac{1}{12\tau}(-3T_{i+4} + 16T_{i+3} - 36T_{i+2} + 48T_{i+1} - 25T_i), \quad (3.1)$$

$$T'_i = \frac{1}{12\tau}(-T_{i+2} + 8T_{i+1} - 8T_{i-1} + T_{i-2}), \quad (3.2)$$

$$T'_i = \frac{1}{12\tau}(25T_i - 48T_{i-1} + 36T_{i-2} - 16T_{i-3} + 3T_{i-4}), \quad (3.3)$$

де: $\tau = const$ – крок часового ряду (тобто час між двома відліками); i – номер точки часового ряду.

Вирази (3.1), (3.3) застосовуються відповідно для розрахунку значень похідної на початку і в кінці кривої охолодження. Формула (3.2) є основною для розрахунків.

Проте застосування відносно стійких формул чисельного диференціювання не вирішує повністю проблему первинної обробки кривої охолодження.

На рис. 3.3 приведено криву охолодження сплаву Al-Si-Mg та її першу похідну, що розрахована з використанням формул (3.1) – (3.3). Тобто шумова складова на чисельно розрахованій за формулами (3.1) – (3.3) похідній повністю маскує ефект виділення теплоти при формуванні евтектики Al-Mg₂Si-Si в кінці кристалізації. Тобто для підвищення точності аналізу якості і надійності прогнозу властивостей металу у твердому стані, бажано використовувати цифрові фільтри, які зменшують шумову складову на термограмі ще до початку розрахунків першої похідної. Процедура фільтрації можна сполучити з пошуком і видаленням значень даних, що мають велику похибку («збої»), і які можуть з'являтися у промислових умовах через провалля сигналу, збоїв у перетворювачі аналог-код, після імпульсної перешкоди.

Цифрові фільтри можна розробляти різної складності і якості фільтрації. Найпростіший цифровий фільтр будується на базі методу найменших квадратів, алгоритм якого показаний на рис. 3.4.

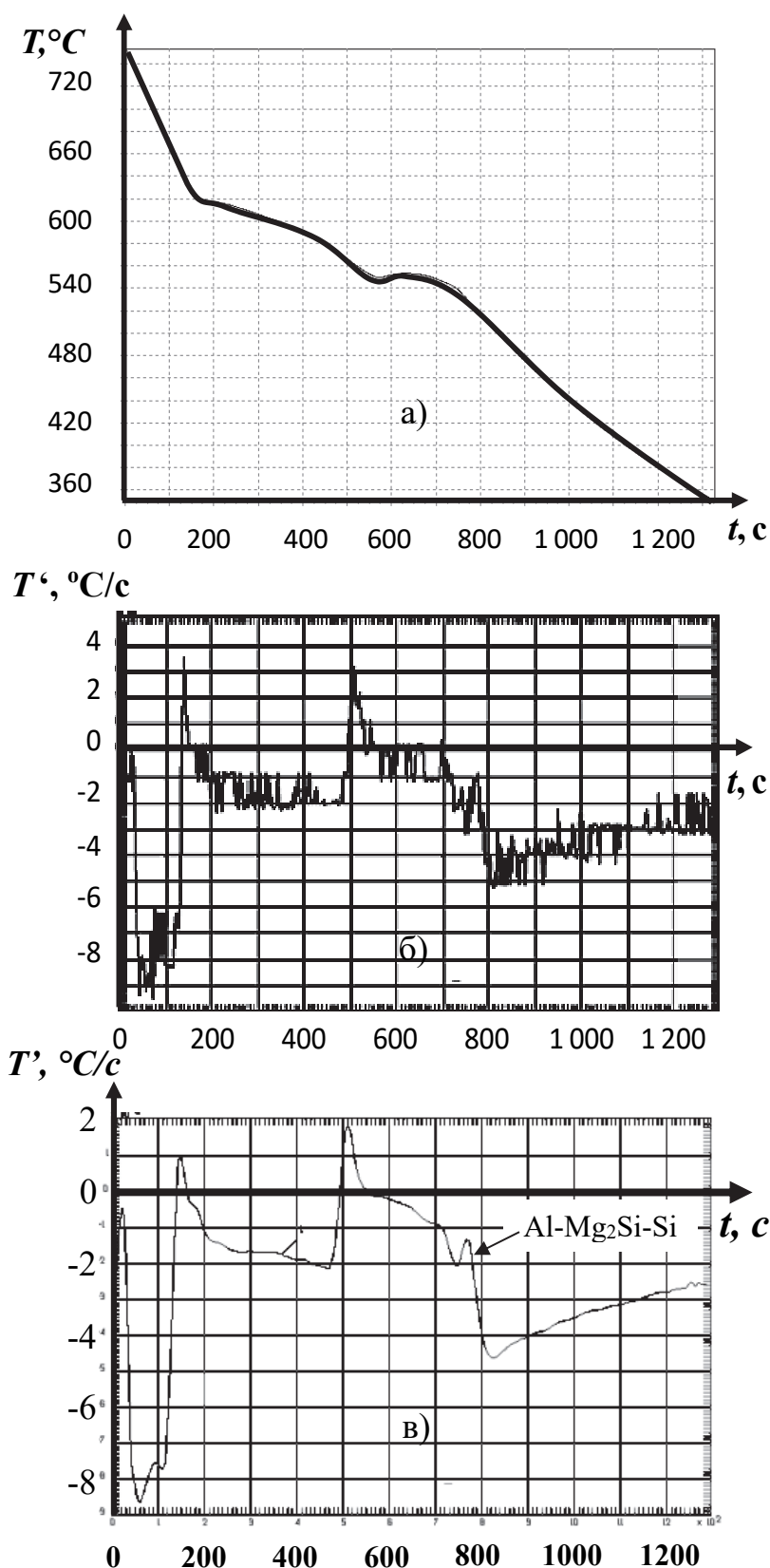


Рис. 3.3 Крива охолодження (а) сплаву Al-Si-Mg та її перша похідна, що розрахована за допомогою числового диференціювання [65]:
 б – без попередньої фільтрації;
 в – з попереднім використанням цифрового фільтру



Рис. 3.4 Алгоритм цифрового фільтру на основі методу найменших квадратів

Задається окремий масив розмірністю $N = 10\text{--}20$ елементів, в який вводиться частинами крива охолодження, починаючи з її першої точки (блоки 1 та 2). Методом найменших квадратів виконується апроксимація цієї частини кривої поліномом другого ступеня (блок 3), з допомогою якого розраховуються скоректовані значення точок цифрової кривої охолодження (блок 4). Потім номери точок зміщуються на одиницю (блок 5), і якщо вихідна крива не завершилася (блок 6), операція повторюється.

Більш складний цифровий фільтр можна виконати на основі методу «Тьюкі 53Х» [222] з кінцевою імпульсною характеристикою і віконною функцією, яку підбирають для такого виду сплаву [203]. Сутність його полягає в тому, що за вихідною послідовністю часового ряду термограми T_i , будується часовий ряд з медіан за п'ятьма точками T_i^* , узятих зі зрушенням згідно з термограмою праворуч на одну точку. Тут i – номер відліку. Потім послідовність T_i^* піддається такій самій процедурі, але медіани розраховують за трьома точками. У результаті формується часовий ряд другого порядку T_i^{**} . Остаточна процедура полягає у згладжуванні медіан другого порядку цифровим фільтром і формуванні вихідної послідовності T_i^{***} . Як показує досвід, задовільні результати дає фільтр Хеннінга з ваговою функцією у три точки.

При цьому метод має високу надійність відсіювання збійних значень, просту обробку даних і високу швидкодію. Однак смуга пропускання цього фільтра іноді буває ширшою за спектр кривої охолодження, що згладжується. Тому для підвищення ефективності фільтру можна використовувати віконну функцію Кайзера – Бесселя, яка дає змогу регулювати форму частотної характеристики і має високу (до 82 дБ) ступінь зменшення перешкоди [215]. Налаштування фільтру (тобто вибір його параметрів для даного конкретного сплаву) проводиться у такий спосіб, щоб максимально правильно передати найбільш «швидкі» ділянки термограми, якими є місця рекалесценції температури [224; 225].

На рис. 3.3 (в) наведено криву охолодження сплаву Al-Si-Mg та її першу похідну, яка розрахована після попередньої фільтрації кривої охолодження. Характерний локальний максимум при формуванні евтектики Al-Mg₂Si-Si стає добре помітним.

3.2 Динамічна теорія твердіння металевих виливків

Для інтерпретації теплових ефектів, які спостерігаються на кривих охолодження при проведенні термічного аналізу, необхідне теоретичне описання процесу кристалізації, що відбувається у пробі. У загальній математичній постановці це завдання досить складне і досі не вирішене у такому вигляді, який задовольнив би дослідників. Однак математичні труднощі можна значно зменшити, якщо розглядати випадок затвердіння тіла, у якого градієнтом температур за його об'ємом можна знехтувати. Саме такий підхід використовується при визначенні параметрів кристалізації за кривими охолодження у комп'ютерній підсистемі контролю якості ливарних сплавів за методом термічного аналізу [148].

3.2.1 Математичні моделі кристалізації чистих металів

Вважатимемо, що проба металу при термічному аналізі має невеликий розмір. Тобто реалізується випадок затвердіння при малій величині критерію Біо ($Bi \ll 1$). При цьому градієнт температури малий і ним можна знехтувати [107], що дає змогу перейти до аналізу рівняння теплового балансу для усього виливка загалом [148; 226–230].

Рівняння теплового балансу, у такому разі, представляється у вигляді [148]:

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{dQ_c}{dt} + \frac{dQ_L}{dt}, \quad (3.4)$$

де: $\frac{dQ}{dt}$ – зміна кількості теплоти в металі через виділення її у навколишнє середовище; $\frac{dQ_L}{dt}$ – зміна кількості теплоти, що виділяється у результаті утворення твердої фази; $\frac{dQ_c}{dt}$ – зміна кількості теплоти при зміні температури металу.

Використовуючи визначення теплоємності, можна записати [148]:

$$dQ_c = -cm_0 dT(t), \quad (3.5)$$

де: c – питома теплоємність металу, що досліджується; m_0 – його загальна маса; $T(t)$ – зміна температури металу в часі t .

Для теплоти, що виділяється у результаті утворення твердої фази dQ_L , існує калориметричне співвідношення [231]:

$$dQ_L = Ldm(t), \quad (3.6)$$

де: L – питома прихована теплота кристалізації металу, що досліджується; $m(t)$ – маса металу, що затвердів до моменту часу t .

Для спрощення математичної задачі, вважатимемо, що тепло від проби металу відводиться винятково конвективно. Підставляючи (3.5), (3.6) та закон тепловіддачі Ньютона – Ріхмана:

$$\frac{dQ}{dt} = fS[T(t) - T_{cp}] \quad (3.7)$$

у (3.4), одержимо диференціальне рівняння:

$$\frac{d}{dt}[\Delta T(t)] + \alpha \Delta T(t) = \frac{L}{c} \cdot \frac{d}{dt} \left[\frac{m(t)}{m_0} \right], \quad (3.8)$$

де: $\Delta T(t) = T(t) - T_{cp}$; $\alpha = \frac{fS}{m_0 c}$; T_{cp} – температура навколишнього середовища; f – коефіцієнт тепловіддачі; S – площа поверхні, з якої тепло відводиться у навколишнє середовище.

Цей вираз отримано за припущеннями, що теплофізичні константи матеріалу й умови охолодження сталі, тобто $f, S, m_0, c, L = const$.

Рівняння (3.8) можна розв'язати відносно невідомої функції $T(t)$, або навпаки, відносно невідомої функції $m(t)$. Для інтерпретації даних термічного аналізу, безумовно, цікавішим є другий випадок, однак розглянемо обидва, як це зроблено у роботі [148].

Розв'язком рівняння (3.8) за початкової умови

$$\Delta T(0) = \Delta T_0 = T(0) - T_{cr} \quad (3.9)$$

буде

$$\Delta T(t) = e^{-\alpha t} \left\{ \Delta T_0 + \theta(t - t_{кр}) \int_{t_{кр}}^t e^{\alpha \xi} \frac{L}{c} \frac{d \left[\frac{m(\xi)}{m_0} \right]}{d \xi} d \xi \right\}, \quad (3.10)$$

$$\theta(t - t_{кр}) = \begin{cases} 1, & \text{при } t - t_{кр} \geq 0 \\ 0, & \text{при } t - t_{кр} < 0 \end{cases}, \quad (3.11)$$

де $t_{кр}$ – час початку кристалізації.

У разі малого часу кристалізації ($\alpha \xi \ll 1$), вираз (3.10) спрощується і має вигляд:

$$\Delta T(t) = \left[\Delta T_0 + \frac{L}{c} \frac{m(t)}{m_0} \right] e^{-\alpha t}. \quad (3.12)$$

У такий спосіб рівняння (3.12) зв'язує температуру проби металу, що твердіє, зі зміною відносної кількості твердої фази при кристалізації $\frac{m(t)}{m_0}$. На відміну від подібної формули, яка наведена у [148], експонента $e^{-\alpha t}$ впливає на обидва члени рівняння, які стоять у дужках, що має більший фізичний сенс. Проте вираз (3.12) та запропонований у [148] показують принциповий зв'язок між кінетичними параметрами кристалізації та кривою охолодження.

Якщо враховувати залежність $\alpha = \alpha(T)$, рівняння (3.8) краще розв'язувати щодо невідомої $\frac{m(t)}{m_0}$. За початкової умови

$$m(t_{кр}) = 0 \quad (3.13)$$

розв'язок одержимо у вигляді:

$$\frac{m(t)}{m_0} = \frac{c}{L} \left\{ \int_{t_{кр}}^t \alpha(T) [T(\xi) - T_{кр}] d\xi + [T(t) - T_{кр}] \right\}, \quad (3.14)$$

де $T_{кр}$ – температура початку кристалізації.

Вираз (3.14) є зручним для розрахунків тому, що при використанні ЕОМ, чисельне інтегрування не викликає ускладнень. Практична реалізація такого методу аналізу кривих охолодження дає змогу визначити кінетичні параметри росту твердої фази. Застосування цієї моделі у комп'ютерному термічному аналізі дозволяє теоретично обґрунтувати критерії, що характеризують якість розплавів.

У цій математичній моделі затвердіння невеликої порції рідкого металу для опису теплового потоку з поверхні проби використовується закон Ньютона – Ріхмана (3.7). Це, в залежності від температурного діапазону твердіння проби, може бути досить грубим припущенням для рідких металів. Згідно з [65], при використанні пробовідбірників, про які йшлося у Розділі 2 (рис. 2.7, 2.8), суттєву частину теплового потоку при температурах понад 573°K (300 °C) може складати випромінювання, інтенсивність якого визначається законом Стефана – Больцмана:

$$\frac{dQ}{dt} = \sigma \varepsilon S [T(t)^4 - T_{кр}^4], \quad (3.15)$$

де ε – ступінь чорноти поверхні охолодження (вважаємо її *const*); $\sigma = 5,56 \cdot 10^{-8}$

⁸ Дж/(м·К)) – стала Стефана – Больцмана.

Тобто необхідно в рівнянні теплового балансу (3.4) замість закону Ньютона – Ріхмана (3.7) використовувати повний закон тепловідводу, який має вигляд:

$$\frac{dQ}{dt} = fS [T(t) - T_{кр}] + \sigma \varepsilon S [T^4(t) - T_{кр}^4]. \quad (3.16)$$

Знову використаємо калориметричні співвідношення (3.5), (3.6) і одержимо рівняння теплового балансу (3.4) у вигляді:

$$fS[T(t) - T_{cp}] + \sigma \varepsilon S [T^4(t) - T_{cp}^4] = -cm_0 \frac{dT(t)}{dt} + L \frac{dm(t)}{dt}. \quad (3.17)$$

Розділивши обидві частини рівняння (3.17) на cm_0 і перегрупувавши члени, одержимо:

$$\frac{L}{c} \cdot \frac{dV(t)}{dt} = \frac{dT(t)}{dt} + k_1 [T(t) - T_{cp}] + k_2 [T^4(t) - T_{cp}^4], \quad (3.18)$$

де
$$V(t) = \frac{m(t)}{m_0}, \quad (3.19)$$

$$k_1 = \frac{fS}{cm_0}, \quad (3.20)$$

$$k_2 = \frac{\sigma \varepsilon S}{cm_0}. \quad (3.21)$$

Рівняння (3.18) справедливо тільки на ділянці кристалізації $t_{кр} < t < t_{мс}$ (де $t_{кр}$, $t_{мс}$ – відповідно моменти часу початку і кінця кристалізації).

Зважаючи на те, що при $t < t_{кр}$ і $t > t_{мс}$; $V(t) = const$ і $\frac{dV(\tau)}{d\tau} = 0$, процес охолодження проби до і після кристалізації описуватиметься виразом:

$$\frac{dT(t)}{dt} + k_1 [T(t) - T_{cp}] + k_2 [T^4(t) - T_{cp}^4] = 0. \quad (3.22)$$

Доречно акцентувати увагу на певних нюансах з приводу вихідних припущень. Рівняння (3.18) отримано за припущень: $f, \varepsilon, S, m_0, c, L = const$. Очевидно, що площа S , з якої відбувається тепловідвід, і маса металу m_0 практично не змінюються. У такому разі нехтуємо різними усадками і розширеннями.

Питома теплоємність c входить у рівняння (3.17), (3.20) та (3.21) як константа, незважаючи на те, що вона є функцією температури і неоднакова для рідкого і твердого станів. Як показано у [148], корегування, що враховує стрибок теплоємності при фазовому переході, можна ввести в рівняння (3.17), однак згідно з практикою, це якісних змін не дає.

Складні процеси, що відбуваються на границях розділу «розплав – стінка форми», «стінка форми – навколишнє середовище», визначають залежність коефіцієнтів f і ε (що входять у k_1 , k_2) від температури і стану рідкого металу. Вони проаналізовані у працях [65; 148].

Зокрема, при передачі тепла через плоску стінку, коефіцієнт тепловіддачі f визначається сумарним тепловим опором прикордонних шарів «розплав – стінка», «стінка – навколишнє середовище», а також коефіцієнтом тепловіддачі матеріалу стінки [112]. Якщо вони не змінні, то інтенсивність сумарного теплового потоку з поверхні форми визначається потоком тепла через границю «метал – стінка», а за наявності гідродинамічних конвективних течій, залежить від в'язкості розплаву і параметрів приграничного шару, який формується біля стінки форми.

Також значний вплив на f і ε може здійснювати контакт «метал – форма», що має досить складну структуру [87]. Сумарний тепловий потік за таких умов визначається як теплопередачею на границі «метал – форма», так і конвективним та радіаційним теплообміном у порожнинах. Отже, у залежності від стану рідкого металу (його складу, температури тощо), можна чекати змін величин коефіцієнтів k_1 , k_2 , що містять f і ε .

Теоретичне визначення $f(T)$ і $\varepsilon(T)$ не є можливим, а їхнє практичне визначення у кожному конкретному разі не завжди доцільно. Тому або їх можна вважати постійними і використовувати середні значення f і ε , бо експериментально за кривою охолодження розраховувати величини коефіцієнтів k_1 , k_2 (у яких вони є складовими) для металу у металевій пробі в рідкому стані $k_{1ж}$, $k_{2ж}$ і у твердому стані $k_{1т}$, $k_{2т}$. Після чого апроксимувати їх, наприклад, прямою залежністю [65]:

$$\tilde{k}_{1,2} = \frac{1}{t_{мс} - t_{кр}} [k_{1,2ж}(t_{мс} - t) + k_{1,2т}(t - t_{кр})]. \quad (3.23)$$

Якщо при розрахунках це уточнення потрібно врахувати, то у рівнянні (3.18) коефіцієнти k_1 і k_2 вводяться як функції температури [225]:

$$\frac{L}{c} \cdot \frac{dV(t)}{dt} = \frac{dT(t)}{dt} + \tilde{k}_1(t)[T(t) - T_{cp}] + \tilde{k}_2(t)[T^4(t) - T_{cp}^4]. \quad (3.24)$$

Величина питомої теплоти кристалізації L залежить, передусім, від складу металу, що досліджується [232], і для чистого металу чи сплаву евтектичного складу є константою. У разі дослідження сплавів типу твердого розчину, для підвищення адекватності моделі і точності розрахунків можна використовувати у моделі апроксимацію L за експериментальними даними, або провести розрахунки її залежності від температури [233; 234], що зроблено нижче.

Доповнюючи рівняння (3.24) та (3.19) – (3.21) умовою:

$$V(t_{kp}) = 0, \quad (3.25)$$

одержуємо математичну модель затвердіння рідкого металу, тепловідвід від якого здійснюється конвекцією і випромінюванням, у диференціальному вигляді.

Для визначення невідомої величини $V(t)$, інтегруємо (3.24) у межах від t_{kp} до t . З урахуванням умови (3.25), одержимо:

$$V(t) = \frac{c}{L} \left\{ T(t) - T_{kp} + \int_{t_{kp}}^t \tilde{k}_1(\xi)[T(\xi) - T_{cp}]d\xi + \int_{t_{kp}}^t \tilde{k}_2(\xi)[T^4(\xi) - T_{cp}^4]d\xi \right\}, \quad (3.26)$$

де $T_{kp} = T(t_{kp})$ – температура початку кристалізації.

Наприкінці кристалізації ($t = t_{mv}$) значення $V(t)$ стає рівним одиниці. Тоді з (3.26) одержимо:

$$\frac{L}{c} = T_{mv} - T_{kp} + \int_{t_{kp}}^{t_{mv}} \tilde{k}_1(\xi)[T(\xi) - T_{cp}]d\xi + \int_{t_{kp}}^{t_{mv}} \tilde{k}_2(\xi)[T^4(\xi) - T_{cp}^4]d\xi, \quad (3.27)$$

де $T_{mv} = T(t_{mv})$ – температура кінця кристалізації.

Підставляючи (3.27) у (3.26), одержимо вираз, який зв'язує температуру металу, що кристалізується, з величиною відносної кількості твердої фази, яка утворилася у процесі кристалізації до моменту часу t :

$$V(t) = \frac{T(t) - T_{кр} + \int_{t_{кр}}^t \tilde{k}_1(\xi) [T(\xi) - T_{cp}] d\xi + \int_{t_{кр}}^t \tilde{k}_2(\xi) [T^4(\xi) - T_{cp}^4] d\xi}{T_{тв} - T_{кр} + \int_{t_{кр}}^{t_{тв}} \tilde{k}_1(\xi) [T(\xi) - T_{cp}] d\xi + \int_{t_{кр}}^{t_{тв}} \tilde{k}_2(\xi) [T^4(\xi) - T_{cp}^4] d\xi} \cdot (3.28)$$

Рівняння (3.26) і (3.28) являють собою інтегральний вид математичної моделі твердіння рідкого металу, тепловідвід від якого здійснюється конвекцією і випромінюванням.

Вираз (3.28), як і (3.14), є зручним для розрахунків тому, що в комп'ютерному термічному аналізі чисельне інтегрування не зумовлює ускладнень, а функції $\tilde{k}_{1,2}(t)$ визначаються за виразом (3.23).

У такий спосіб можна за залежністю температури від часу $T(t)$ (тобто за кривою охолодження), визначити кінетичні параметри росту твердої фази $V(t)$, $V'(t)$, а також відношення питомої теплоти кристалізації металу до питомої теплоємності $\frac{L}{c}$. Вони є усередненими за об'ємом характеристиками затвердіння металу, що можуть використовуватися як критеріальні величини при аналізі стану рідких металів та, з певними обмеженнями, і для ливарних розплавів [235; 236].

Як показано у роботах [88; 133; 148] та у розділі 1, теоретичний і практичний інтерес становлять математичні моделі, що зв'язують температуру металу, який твердне, з основними параметрами кристалізації – кількістю зародків, що утворюються, і лінійною швидкістю росту кристалів. Як було зазначено, для цього використовують модель Колмогорова. Однак необхідно визначити, наскільки виконуються припущення, які задавалися при виводі моделі Колмогорова. Тобто наскільки адекватною є модель Колмогорова стосовно кристалізації металів за реальних умов. Проте, як показано у працях [237; 238], з певними обмеженнями її можна використовувати і при кристалізації сплавів. При цьому у кожному конкретному разі бажано провести дослідження для підтвердження цієї можливості.

3.2.2 Математична модель кристалізації сплавів, які утворюють твердий розчин

У підпункті 3.2.1 розроблено математичні моделі кристалізації для чистих металів, для яких питома теплоємність і питома теплота кристалізації вважаються незалежними від температури. Проте для сплавів, які кристалізуються з утворенням твердого розчину у широкому температурному інтервалі, ці припущення можуть бути занадто грубими. Ступінь достовірності таких моделей значною мірою може визначатися точністю температурних залежностей теплових ефектів, пов'язаних із охолодженням металу. Проблема доступності таких залежностей особливо актуальна, коли йдеться про кристалізації сплавів, оскільки перетворення у багатокомпонентних системах відбуваються здебільшого в діапазоні температур, коли система знаходиться у гетерофазному стані. А для більшості сплавів зазвичай доступні тільки дані теплоємності, усереднені за температурою і складом [233].

Водночас у літературі наведено дані про температурно-концентраційні залежності вільних енергій Гіббса фаз, що утворюють дану систему для багатьох металевих систем. Наприклад, для випадку двокомпонентної системи молярна вільна енергія і ентальпія фази визначаються як [239]:

$$G(x, T) = G_A(T) \cdot (1 - x_B) + G_B(T) \cdot x_B + \\ + G_{mix}(x, T) + RT \cdot (x_A \ln x_A + x_B \ln x_B), \quad (3.29)$$

$$H(x, T) = H_A(T) \cdot x_A + H_B(T) \cdot x_B + H_{mix}(x, T), \quad (3.30)$$

де: $G_A(T)$, $G_B(T)$ – молярна вільна енергія чистих компонентів А і В в фазі при температурі T ; $x_A = (1 - x_B)$, x_B – вміст компонентів А і В у фазі (молярні частки); $G_{mix}(x, T)$ – надлишкова молярна вільна енергія змішування у фазі композиції x при температурі T ; $H_A(T)$, $H_B(T)$ – молярні ентальпії чистих компонентів А і В у фазі при температурі T ; $H_{mix}(x, T)$ – молярна ентальпія змішування у фазі композиції x при температурі T .

Температурно-концентраційні залежності надлишкових енергій перемішування у фазах ($G_{mix}(x, T)$) широко наведені в літературних джерелах (вони використовуються для розрахунку діаграм станів). Крім того, якщо фазова структура збігається зі структурою чистого компонента у такому агрегатному стані, то його молярна ентальпія у фазі ($H_A(T)$ або $H_B(T)$) може бути визначена за даними температурної залежності теплоємності ($H = \int C_p dT$). Певна складність полягає у визначенні теплоємності компонентів у фазах, структура яких відрізняється від структури компоненту в чистому вигляді. Наприклад, у системі Al-Si кремній (який у чистому вигляді не має ГЦК ґратки) входить до складу твердотілого розчину на основі алюмінію. Тому завдання зводиться до визначення ентальпії змішування і ентальпій чистих компонентів у фазах за допомогою відомих залежностей надлишкової вільної енергії змішування і параметрів стійкості решіток компонентів. Вирішення цієї проблеми ускладнюється тим, що у виразах для вільних енергій ентропійні і ентальпійні члени, зазвичай, не розділяються.

Водночас величини ентальпії, ентропії та ізобарно-ізотермічного потенціалу взаємопов'язані через теплоємність C_p :

$$H = \int C_p dT, \quad (3.31)$$

$$S = \int \frac{C_p}{T} dT, \quad (3.32)$$

$$G = H - TS = \int C_p dT - T \int \frac{C_p}{T} dT. \quad (3.33)$$

Якщо температурно-концентраційна залежність надлишкової молярної теплоємності перемішування ($C_{pmix}(x, T)$) у фазі виражається як многочлен,

$$\begin{aligned} C_p^{mix}(x, T) = m_3^{mix}(x) + m_4^{mix}(x)T + \\ + \frac{m_5^{mix}(x)}{T^2} + m_6^{mix}(x)T^2 + m_7^{mix}(x)T^3 + \dots, \end{aligned} \quad (3.34)$$

то відповідно до (3.31 – 3.33), вирази для молярних ентальпій та надлишкової

вільної енергії змішування будуть приймати форму [240; 241]:

$$H_{mix}(x, T) = m_1^{mix}(x) + m_3^{mix}(x)T + \frac{m_4^{mix}(x)T^2}{2} - \frac{m_5^{mix}(x)}{T} + \frac{m_6^{mix}(x)T^3}{3} + \frac{m_7^{mix}(x)T^4}{4} + \dots, \quad (3.35)$$

$$G_{mix}(x, T) = m_1^{mix}(x) - m_2^{mix}(x)T + m_3^{mix}(x)T(1 - \ln T) - \frac{m_4^{mix}(x)T^2}{2} - \frac{m_5^{mix}(x)}{2T} - \frac{m_6^{mix}(x)T^3}{6} - \frac{m_7^{mix}(x)T^4}{12} + \dots, \quad (3.36)$$

де $m_1(x)$ і $m_2(x)$ – константи інтегрування.

Залежність питомої теплоти перемішування від складу може бути врахована, шляхом введення кожного з коефіцієнтів у (3.34) у вигляді многочленів:

$$m_k^{mix}(x) = m_{k,1}^{mix}(x) + m_{k,2}^{mix}(x)x + m_{k,3}^{mix}(x)x^2 + \dots \quad (3.37)$$

Аналогічно, вносячи зміни теплоємності компонентів при переході від стандартного стану до стану, що розглядається, у вигляді поліномів,

$$\Delta C_p^i(T) = m_3^i + m_4^iT + \frac{m_5^i}{T^2} + m_6^iT^2 + m_7^iT^3 + \dots, \quad (3.38)$$

можна отримати вирази температурних залежностей змін молярної ентальпії та вільних енергій чистих компонентів під час фазових переходів:

$$\Delta H^i(T) = m_1^i + m_3^iT + \frac{m_4^iT^2}{2} - \frac{m_5^i}{T} + \frac{m_6^iT^3}{3} + \frac{m_7^iT^4}{4} + \dots \quad (3.39)$$

$$G^i(T) = m_1^i - m_2^iT + m_3^iT(1 - \ln T) - \frac{m_4^iT^2}{2} - \frac{m_5^i}{2T} - \frac{m_6^iT^3}{6} - \frac{m_7^iT^4}{12} + \dots \quad (3.40)$$

Ідея запропонованого способу ґрунтується на тезі про те, що за наявності аналітичних виразів щодо температурно-концентраційної залежності надлишкової вільної молярної енергії перемішування у фазі та температурних залежностей параметрів стійкості ґраток компонентів, їх значення можна визначити для довільно великої кількості значень

температур і композицій з фазової області існування. А цікаві для нас значення коефіцієнтів m_{mix} і m_i можна визначити, розв'язуючи систему рівнянь, отриману шляхом рівняння виразів (3.34) та (3.40) з обчисленими значеннями вільної енергії фази та параметрів стійкості решітки компонентів. У результаті отримуємо температурно-концентраційні залежності ентальпії та теплоємності перемішування, а також температурні залежності зміни ентальпії компонентів та теплоємностей при фазових переходах.

Ентальпія гетерогенної системи визначається як сума ентальпій окремих фаз. Тому зміна ентальпії при переході багатофазної системи з одного стану в інший визначається як різниця сум ентальпій фаз у цих станах. При розрахунку змін ентальпії гетерогенної системи, обумовлених зміною температури, необхідно також враховувати зміни складу та кількості фаз, що залишаються у рівновазі (відповідно до діаграми стану).

Ці розрахунки дають підстави для розрахунку температурних залежностей теплових впливів, що супроводжують охолодження та нагрівання багатокомпонентних сплавів. Їх наявність дає змогу розробити адекватні математичні моделі, що описують кристалізацію сплавів металевих систем.

Проте можна зробити розрахунки більш простими. У роботі [232] наведено значення питомої теплоємності для 19 основних ливарних сплавів на основі алюмінію. Її середні арифметичні значення для розплавів складає 1249 ± 8 Дж/(кг·К) та 1057 ± 7 Дж/(кг·К) для сплавів у твердому стані для температурного діапазону 830–920 К. Відносні похибки мають значення 0,6 % та 0,7 % відповідно. Окрім цього, там наведені також значення питомої теплоємності для чистого алюмінію та основних груп сплавів на основі алюмінію (з Si, Cu, Zn та Mg), середні арифметичні значення для яких у рідкому та твердому стані дорівнюють 1247 ± 22 Дж/(кг·К) та 1054 ± 24 Дж/(кг·К) відповідно з відносними похибками 2 % та 1,9 %. Тобто результати майже співпадають.

У роботі [242] наведено залежність питомої теплоємності від температури для алюмінію (табл. 3.1) та міді (табл. 3.2).

За даними таблиці 3.1, розраховано коефіцієнт кореляції R між температурою T та питомою теплоємністю алюмінію c , який складає 0,994.

Таблиця 3.1

**Залежність питомої теплоємності алюмінію
від температури [242]**

№	T, K	c , Дж/(кг·К)
1	300	903,7
2	400	951,3
3	500	991,8
4	600	1036,7
5	700	1090,2
6	800	1153,8
7	900	1228,2

Ці значення R дає підставу для апроксимації залежності прямою $c = a_0 + a_1 T$. Застосовуючи метод найменших квадратів (МНК) [183], отримуємо:

$$c = 734.3 + 0.527 \cdot T. \quad (3.41)$$

За таблицею 3.2 для міді розраховано коефіцієнт кореляції R між температурою T та питомою теплоємністю, який складає 0,995. У такий спосіб можна застосувати лінійну апроксимацію:

$$c = 356.4 + 0.0986 \cdot T. \quad (3.42)$$

Апроксимації (3.40) та (3.41) дають змогу оцінити вплив урахування залежності питомої теплоємності від температури на прикладі алюмінію та міді. Для цього використаємо математичні моделі нагріву металевого зразка, які наведені у Розділі 2 (2.8) та в [243]:

$$T(t) = T_p - (T_p - T_0) \exp(-kt), \quad (3.43)$$

де
$$k = \frac{\alpha S}{cm}, \quad (3.44)$$

та

$$\frac{dT(t)}{dt} = \frac{k_1 [T_p - T(t)] + k_2 [T_p^4 - T^4(t)]}{a_0 + a_1 T(t)}, \quad (3.45)$$

де $k_1 = \frac{\alpha S}{m}, \quad (3.46)$

$$k_2 = \frac{\sigma \varepsilon S}{m}. \quad (3.47)$$

Таблиця 3.2

**Залежність питомої теплоємності міді
від температури [242]**

№	T, K	c, Дж/(кг·К)
1	300	385,0
2	400	397,7
3	500	408,0
4	600	416,9
5	700	425,1
6	800	432,9
7	900	441,7
8	1000	451,4
9	1100	464,3
10	1200	480,8

Рівняння (3.43) являє собою розв’язок рівняння глобального теплового балансу при постійному значенні питомої теплоємності [88; 243] для випадку нагріву, коли градієнтом уздовж перетину зразка можна знехтувати. Вираз (3.45) є диференціальним рівнянням глобального теплового балансу, яке враховує залежність $c = a_0 + a_1 T$. Рівняння (3.45) не є лінійним, тому його розв’язок виконується чисельним методом (метод Ейлера [243]). Результати розрахунків температур (T^* – с постійним значенням питомої теплоємності) та (T^{**} – з урахуванням залежності питомої теплоємності від температури) в однакові моменти часу t для зразків Al та Cu масою 0,042 кг та 0,138 кг відповідно наведені в таблицях 3.3 та 3.4.

Згідно з наведеними обчисленнями різниця між (T^*) та (T^{**}) мала як для алюмінію, так і для міді. Тому враховуючи дані обчислень, а також майже однакові значення питомої теплоємності для алюмінію і для ливарних сплавів на його основі, можна вважати їх питому теплоємність і брати для обчислень середнє значення, наприклад, 1150 Дж/(кг·К), як для розплаву, так і для сплаву у твердому стані.

Таблиця 3.3

Графік розрахунку нагріву зразка з Al при постійному значенні питомої теплоємності (T^*) та з урахуванням залежності (3.41) (T^{**})

№	t , с	T^* , К	T^{**} , К	Δ , %
1	0	293	293	—
2	60	563	585	7,6
3	120	724	738	3,1
4	180	821	827	1,1
5	240	880	881	0,2
6	300	916	914	0,2
7	317	923	923	0

За необхідності у розрахунках можна використовувати залежність $c = a_0 + a_1 T$, якщо вони виконуються у широкому температурному інтервалі. Питома прихована теплота кристалізації L є другим важливим параметром, який входить у математичні моделі кристалізації (3.26) та (3.28) та припускався константою. Однак [232] він суттєво залежить від складу сплавів. Тому припущення стосовно його незалежності від вмісту другого компоненту сплаву, є достатньо грубим. Отже, для побудови математичної моделі кристалізації сплавів, які утворюють твердий розчин (без евтектики або перітектики), потрібно врахувати зміну теплоти, яка виділяється при кристалізації. Недостатня кількість наявної інформації стосовно зміни теплоти кристалізації при зміні складу сплаву, дає підставу, у першому наближенні, зробити лінійну її апроксимацію. Ураховуючи те, що при зміні складу сплаву змінюється температура початку кристалізації у відповідності

до лінії ліквідус діаграми стану, а у термічному аналізі фіксується саме температура, то можна побудувати залежність $L = p + q \cdot T$.

Таблиця 3.4

Графік розрахунку нагріву зразка з Си при постійному значенні питомої теплоємності (T^*) та з урахуванням залежності (3.42) (T^{**})

№	t , с	T^* , К	T^{**} , К	Δ , %
1	0	293	293	-
2	120	549	558	3,3
3	240	709	714	1,2
4	360	809	809	0
5	480	871	868	-0,5
6	600	909	906	-0,5

Зокрема, для чистого алюмінію питома теплота кристалізації складає 390 000 Дж/кг [232] при температурі 933,61 К [242]. А для евтектичного ливарного сплаву АК12 (Al-Si) вона складає 160 000 Дж/кг [232] при евтектичній температурі 850 К. Рівняння лінійної залежності питомої теплоти кристалізації для сплавів на основі алюмінію має вигляд:

$$L = (-2195 + 2,77 \cdot T) \cdot 10^3 \text{ Дж/кг}, \quad (3.48)$$

де температура T вимірюється в градусах Кельвіна, а L – у Дж/кг.

Залежність $L = p + q \cdot T$ вставимо у математичну модель (3.24) і отримуємо:

$$\frac{dV(t)}{dt} = \frac{\bar{c}}{p + q \cdot T(t)} \left[\frac{dT(t)}{dt} + \tilde{k}_1(t)(T(t) - T_{cp}) + \tilde{k}_2(t)(T^4(t) - T_{cp}^4) \right]. \quad (3.49)$$

Розв'язок цього рівняння із додатковою умовою (3.25), який отримано шляхом безпосереднього інтегрування, має вигляд:

$$V(t) = \int_{t_{кр}}^t T'(\xi) \frac{\bar{c}}{p + q \cdot T(\xi)} d\xi + \int_{t_{кр}}^t \tilde{k}_1(\xi) \frac{\bar{c}[T(\xi) - T_{cp}]}{p + q \cdot T(\xi)} d\xi + \int_{t_{кр}}^t \tilde{k}_2(\xi) \frac{\bar{c}[T^4(\xi) - T_{cp}^4]}{p + q \cdot T(\xi)} d\xi. \quad (3.50)$$

Інтеграли, які входять у (3.50) розраховуються при здійсненні комп'ютерного термічного аналізу при використанні чисельного інтегрування.

3.2.3 Математична модель кристалізації сплавів з евтектикою

При твердінні сплавів, кристалізація яких відбувається в кілька етапів (спочатку кристалізується твердий розчин, а потім ряд евтектик), за аналогією з чистими металами, рівняння теплового балансу можна записати у такий спосіб [65; 148]:

$$\frac{dQ}{d\tau} = \frac{dQ_c}{d\tau} + \sum_{i=1}^n \frac{dQ_{Li}}{d\tau}, \quad (3.51)$$

де: i – порядковий номер фази, що кристалізується; Q_{Li} – тепло, яке виділяється при кристалізації відповідної фази.

Підставляючи у (3.51) формули (3.16), (3.5) і (3.6) з відповідними індексами, та враховуючи (3.23), після нескладних перетворень одержимо:

$$\sum_{i=1}^n \frac{L_i}{c} \cdot \frac{dV_i(t)}{dt} = \frac{dT(t)}{dt} + \tilde{k}_1(t)[T(t) - T_{cp}] + \tilde{k}_2(t)[T^4(t) - T_{cp}^4], \quad (3.52)$$

$$V_i(t) = \frac{m_i(t)}{m_0}, \quad (3.53)$$

$$m_0 = \sum_{i=1}^n m_{0i}, \quad (3.54)$$

де: $m_i(t)$ – маса металу i -ої фази, що кристалізувався до моменту часу t ; m_{0i} – повна маса i -ої фази.

При вільному охолодженні розплаву кристалізація має нерівноважний характер і відбувається часткове накладення стадії кристалізації. Однак зменшення об'єму рідкого металу знижує градієнт температур уздовж його перетину, додає кристалізації квазіоб'ємний характер. Перекриття фаз у часі зменшується. Тому для невеликого об'єму можна припустити сувору послідовність затвердіння фаз і ввести умову:

При побудові математичної моделі твердіння бінарного сплаву з евтектикою, приймаємо такі припущення:

– вважаємо, що фази кристалізуються послідовно, тобто в момент закінчення кристалізації α -фази починає кристалізуватися евтектика;

– зважаючи на те, що питома теплоємність твердих розчинів металевих систем змінюється незначною мірою (як показано вище) [230; 242], можна допустити рівність питомих теплоємностей альфа-фази і евтектики $c_1=c_2=\hat{c}=const$ (тут і далі індекс 1 відповідатиме α -твердому розчину, а індекс 2 – евтектиці);

– коефіцієнт тепловіддачі (f) і ступінь чорноти поверхні проби (ε) вважаються сталими.

Тоді тепло, що виділяється у процесі кристалізації, можна записати у такий спосіб:

$$dQ_i = L_1 dm_1(t) + L_2 dm_2(t), \quad (3.58)$$

де: L_1, L_2 – питомі приховані теплоти кристалізації α -фази і евтектики відповідно; $dm_1(t), dm_2(t)$ – відносні частини твердої фази, що утворюються у процесі кристалізації α -фази і евтектики відповідно.

Підставляючи вираз (3.58) у (3.51), одержимо рівняння теплового балансу для проби бінарного сплаву, який твердіє при вільному охолодженні, у такому вигляді:

$$L_1 dm_1(t) + L_2 dm_2(t) =, \\ = \hat{c} m_0 dT(t) + f \cdot S \cdot [T(t) - T_{cp}] dt + \sigma \cdot \varepsilon \cdot S [T^4(t) - T_{cp}^4] dt, \quad (3.59)$$

$$m_0 = m_{10} + m_{20}, \quad (3.60)$$

де: m_0 – маса проби металу, що досліджується; m_{10}, m_{20} – загальна кількість α -фази і евтектики відповідно.

Введемо позначення:

$$V_1(t) = \frac{m_1(t)}{m_0}, \quad (3.61)$$

$$V_2(t) = \frac{m_2(t)}{m_0}. \quad (3.62)$$

Функції $V_1(t)$ і $V_2(t)$ визначають відносну кількість α -фази і евтектики у будь-який момент кристалізації проби, що досліджується.

З моменту початку охолодження і до початку кристалізації $t_{кр}$ тверда фаза відсутня і в рівнянні (3.59) ліва частина дорівнює нулю. З моменту початку кристалізації $t_{кр}$ утвориться α -твердий розчин, відносна кількість якого в момент початку кристалізації евтектики $t_{кр.ев.}$ складатиме:

$$\frac{m_{10}}{m_0} = M_1 = const. \quad (3.63)$$

При цьому, до моменту часу $t_{кр.ев.}$ виділиться кількість теплоти, що дорівнює $L_1 \cdot m_{01}$, після чого починає кристалізуватися евтектика, остаточно частка якої в момент $t_{ме}$ складатиме:

$$\frac{m_{20}}{m_0} = M_2 = const. \quad (3.64)$$

Очевидно, що

$$M_1 + M_2 = 1. \quad (3.65)$$

Величини M_1 і M_2 можна визначити з діаграми стану сплаву за правилом відрізків:

$$M_1 = \frac{N_{ев} - N_0}{N_{ев} - N_\alpha}, \quad (3.66)$$

$$M_2 = \frac{N_0 - N_\alpha}{N_{ев} - N_\alpha}, \quad (3.67)$$

де: N_0 – концентрація другого компонента в сплаві; N_α – максимальна розчинність другого компонента в α -фазі; $N_{ев}$ – концентрація другого компонента в евтектиці.

З огляду на характер функцій $V_1(t)$ і $V_2(t)$, можна ввести в другий член лівої частини рівняння (3.59) θ -функцію, що відображає перше допущення при розробці математичної моделі:

$$\Theta(t - t_{кр.ев}) = \begin{cases} 0, & t \leq t_{кр.ев} \\ 1, & t > t_{кр.ев} \end{cases}, \quad (3.68)$$

де $t_{кр.ев}$ – час початку кристалізації евтектики.

Тоді рівняння (3.59) набуває вигляду:

$$\begin{aligned} \frac{L_1}{\hat{c}} dV_1(t) + \Theta(t - t_{кр.ев}) \frac{L_2}{\hat{c}} dV_2(t) = \\ = dT(t) + \tilde{k}_1(t) [T(t) - T_{cp}] dt + \tilde{k}_2(t) [T^4(t) - T_{cp}^4] dt, \end{aligned} \quad (3.69)$$

де $\tilde{k}_1$, $\tilde{k}_2$ – коефіцієнти, які визначені (3.19) і (3.20), і є функціями, що апроксимовані лінійною залежністю (3.23).

Інтегруємо (3.69) за t за умови, що в момент початку кристалізації тверда фаза відсутня і $V_1(t_{кр})=0$:

$$\begin{aligned} \frac{L_1}{\hat{c}} V_1(t) + \Theta(t - t_{кр.ев}) \frac{L_2}{\hat{c}} V_2(t) = \\ = T(t) - T(t_{кр}) + \int_{t_{кр}}^t \tilde{k}_1(\xi) [T(\xi) - T_{cp}] d\xi + \int_{t_{кр}}^t \tilde{k}_2(\xi) [T^4(\xi) - T_{cp}^4] d\xi. \end{aligned} \quad (3.70)$$

Для практичного використання математичної моделі (3.70) потрібно знати числові значення відношення питомої теплоти кристалізації до питомої теплоємності α -фази $\frac{L_1}{\hat{c}}$ і евтектики $\frac{L_2}{\hat{c}}$. Для їх обчислення інтегруємо (3.69)

у межах від $t_{кр}$ до $t_{кр.ев}$:

$$\frac{L_1}{\hat{c}} = \frac{T_{кр.ев} - T_{кр} + \int_{t_{кр}}^{t_{кр.ев}} \tilde{k}_1(\xi) [T(\xi) - T_{cp}] d\xi + \int_{t_{кр}}^{t_{кр.ев}} \tilde{k}_2(\xi) [T^4(\xi) - T_{cp}^4] d\xi}{M_1}, \quad (3.71)$$

де $T_{кр.ев}=T(t_{кр.ев})$ – температура початку кристалізації евтектики.

Підставляючи (3.66) у (3.71), одержимо:

$$\frac{L_1}{\hat{c}} = \frac{N_{ев} - N_{\alpha}}{N_{ев} - N_0} \times \left\{ T_{кр.ев} - T_{кр} + \int_{t_{кр}}^{t_{кр.ев}} \tilde{k}_1(\xi) [T(\xi) - T_{cp}] d\xi + \int_{t_{кр}}^{t_{кр.ев}} \tilde{k}_2(\xi) [T^4(\xi) - T_{cp}^4] d\xi \right\}, \quad (3.72)$$

Для визначення $\frac{L_2}{\hat{c}}$ інтегруємо (3.69) у межах від початку ($t_{кр}$) до кінця кристалізації ($t_{ме}$):

$$\begin{aligned} \frac{L_1}{\hat{c}} M_1 + \frac{L_2}{\hat{c}} M_2 = \\ = T_{ме} - T_{кр} + \int_{t_{кр}}^{t_{ме}} \tilde{k}_1(\xi) [T(\xi) - T_{cp}] d\xi + \int_{t_{кр}}^{t_{ме}} \tilde{k}_2(\xi) [T^4(\xi) - T_{cp}^4] d\xi, \end{aligned} \quad (3.73)$$

де $T_{ме} = T(t_{ме})$ – температура кінця кристалізації. Звідси з урахуванням (3.66) і (3.67), одержимо:

$$\begin{aligned} \frac{L_2}{\hat{c}} = \frac{N_{ев} - N_{\alpha}}{N_0 - N_{\alpha}} \times \\ \times \left\{ T_{ме} - T_{кр} + \int_{t_{кр}}^{t_{ме}} \tilde{k}_1(\xi) [T(\xi) - T_{cp}] d\xi + \int_{t_{кр}}^{t_{ме}} \tilde{k}_2(\xi) [T^4(\xi) - T_{cp}^4] d\xi \right\} - \\ - \frac{L_1}{\hat{c}} \cdot \frac{N_{ев} - N_0}{N_{ев} - N_{\alpha}}, \end{aligned} \quad (3.74)$$

де $\frac{L_1}{\hat{c}}$ визначається з (3.72).

у такий спосіб, доповнюючи рівняння (3.69) характеристичними точками діаграми стану подвійного сплаву з евтектикою, після його інтегрування одержуємо вирази (3.70), (3.72) і (3.74), що в сукупності являють собою інтегральну математичну модель кристалізації об'єму бінарного розплаву, що досліджується. З її допомогою за температурою, що вимірюється при твердінні проби розплаву, можна визначити відношення $\frac{L_1}{\hat{c}}$

і $\frac{L_2}{\bar{c}}$, які пропорційні теплотам утворення α -фази і евтектики відповідно, а також відносні кількості структурних складових $V_1(t)$, $V_2(t)$ у кожен момент часу у процесі кристалізації.

У разі, коли потрібно враховувати залежність прихованої теплоти кристалізації від складу твердого розчину, можна використати підхід, запропонований у підпункті 3.2.2 [245]. Для цього інтегруємо (3.69) у межах від $t_{кр}$ до $t_{кр.ев}$, з урахуванням залежності $L = p + q \cdot T$, і отримаємо:

$$L_1(T(t)) = \int_{t_{кр}}^{t_{кр.ев}} T'(\xi) \frac{\bar{c}}{p + q \cdot T(\xi)} d\xi + \int_{t_{кр}}^{t_{кр.ев}} \tilde{k}_1(\xi) \frac{\bar{c}[T(\xi) - T_{cp}]}{p + q \cdot T(\xi)} d\xi + \\ + \int_{t_{кр}}^{t_{кр.ев}} \tilde{k}_2(\xi) \frac{\bar{c}[T^4(\xi) - T_{cp}^4]}{p + q \cdot T(\xi)} d\xi. \quad (3.75)$$

3.3 Комп'ютерна імітація диференціального термічного аналізу

Для того, щоб розрахувати параметри кристалізації за допомогою запропонованих вище математичних моделей з експериментальних даних, отриманих при реєстрації температури металу, який твердне, необхідно спершу визначити значення коефіцієнтів k_1 і k_2 , а також моменти часу початку $t_{кр}$ і кінця кристалізації $t_{мс}$ [65].

Коефіцієнти k_1 і k_2 можна визначити, користуючись даними з довідників для питомої теплоємності c , оцінки величини коефіцієнта тепловіддачі α , ступеня чорноти ε і площі поверхні форми S , у якій твердіє розплав, включаючи їх у співвідношення (3.20), (3.21). Однак, з огляду на наявність складних процесів у приграничному шарі контакту «метал – форма», можна припустити, що стан розплаву (не контрольовані домішки, неметалеві включення, гази тощо) впливає на реальні значення k_1 і k_2 (про що вже йшлося). Тому для підвищення точності розрахунків бажано визначати їхні величини в кожному конкретному випадку. Причому як для рідкого, так і

для твердого стану. Для цього [65] запропоновано використати ділянки кривої охолодження до початку процесу кристалізації та після неї. На цих етапах процес охолодження розплаву можна описати рівнянням теплового балансу:

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{dQ_c}{dt}, \quad (3.76)$$

яке відрізняється від (3.4) тільки відсутністю частки тепла, що виділяється при фазовому перетворенні. Якщо підставити в (3.65) відповідно (3.16) та (3.5), отримуємо:

$$T'(t) + k_1[T(t) - T_{cp}] + k_2[T^4(t) - T_{cp}^4] = 0. \quad (3.77)$$

Порівнюючи між собою (3.18) і (3.77), то видно, що їх можна об'єднати та записати у такий спосіб:

$$\frac{dT(t)}{dt} + k_1[T(t) - T_{cp}] + k_2[T^4(t) - T_{cp}^4] = Z(t), \quad (3.78)$$

де

$$Z(t) = \begin{cases} 0, & \text{при } t \leq t_{кр}, \quad t \geq t_{мв} \\ \frac{L}{c} \frac{m(t)}{m_0}, & \text{при } t_{кр} \leq t \leq t_{мв} \end{cases} \quad (3.79)$$

Права частина $Z(t)$ виразу (3.78) до кристалізації та після її закінчення дорівнює нулю. Тобто на відповідних ділянках кривої охолодження тепловий баланс описується виразом (3.77). Як показано у [65], рівняння (3.77) зводиться до рівняння прямої, шляхом лінеаризації його членів і методом найменших квадратів [183] можна визначити коефіцієнти k_1 і k_2 .

Моменти часу початку $t_{кр}$ і кінця кристалізації $t_{мв}$ визначаються за кривою охолодження. Для підвищення точності їх визначення можна використовувати особливості рівняння теплового балансу (3.78), права частина якого $Z(t)$ відмінна від нуля тільки на етапі кристалізації. Тобто в момент часу $t_{кр}$ тепловий баланс (3.77) порушується за рахунок виділення

тепла кристалізації, а в точці t_{me} він знову встановлюється, тому що виділення «зайвого» тепла припиняється. Зафіксувавши криву охолодження зразка, що досліджується, в пам'яті ЕОМ нескладно розрахувати числовим методом першу похідну температури в часі $T'(t)$. На рис. 3.5, як приклад, наведена похідна температури від часу для подвійного сплаву Al+10-12%Si (AK12). Видно, що добре виділяються ділянки кривої охолодження до початку кристалізації та після її кінця. Перший мінімум (точка 1) відповідає початку т. зв. регулярного режиму охолодження [112], коли перехідний процес утворення профілю розподілу температури уздовж перерізу проби завершився. Тобто саме з цього моменту починають «працювати» математичні моделі кристалізації невеликої проби металу (3.26) – (3.28) і (3.70), (3.72), (3.74), оскільки при їх створенні градієнтом температури нехтували. Кінець цієї ділянки приблизно відповідає різкому перегину і підйому першої похідної температури (точка 2). Саме ця точка і є точкою початку перетворення $t_{кр}$. Перший максимум похідної $T'(t)$ (точка 3) відповідає приблизно середині рекалесценції при утворенні α -твердого розчину. Як показано у [10], величина цього екстремуму корелює з характеристиками структури, що формується при кристалізації, і механічними властивостями сплавів. Наступний мінімум (точка 4) є моментом, коли закінчилося формування твердого розчину та почалося формування евтектики $t_{кр.евт}$. Підйом та другий максимум (точка 5) відбивають формування евтектики та відповідну рекалесценцію температури на цьому етапі. Малість цієї ділянки та відповідні температури вказують на те, що сплав, який досліджується, за хімічним складом наближається до евтектичного. Величини підйомів температур та протяжності «лунок» у часі майже не залежать від складу кремнію, а залежать від співвідношення маси проби і швидкості охолодження, також від «стану» розплаву, тобто від кількості домішок у ньому, від шихти і її попередньої обробки тощо. Останній мінімум (точка 6) свідчить про закінчення кристалізації загалом, тобто це точка кінця фазового перетворення t_{me} .

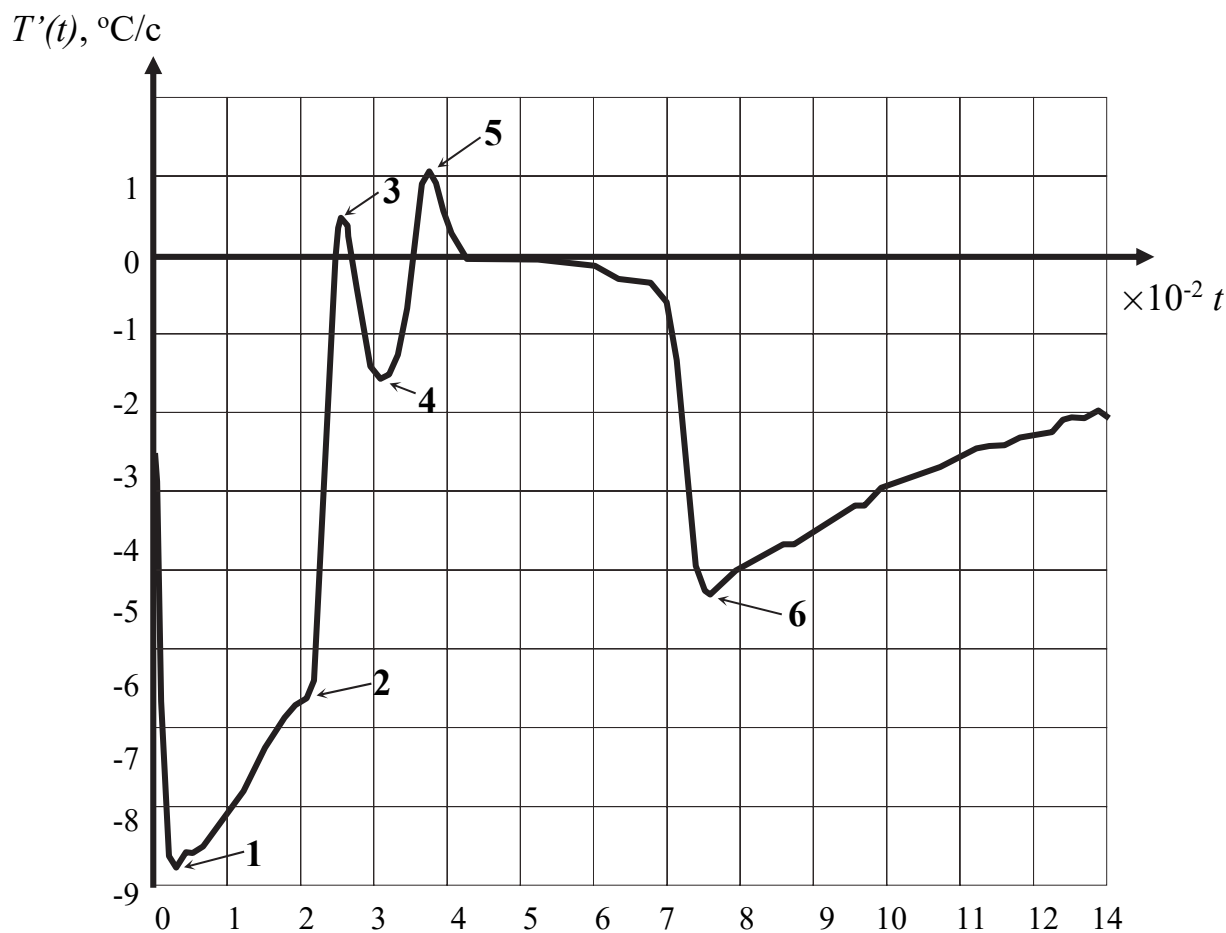


Рис. 3.5 Похідна $T'(t)$ кривої охолодження сплаву АК12:

- 1 – початок регулярного режиму охолодження;
- 2 – точка початку кристалізації $t_{кр}$;
- 3 – середина ділянки рекалесценції при утворенні α -твердого розчину;
- 4 – точка $t_{кр.евт}$ закінчення утворення твердого розчину та початок формування евтектики;
- 5 – середина ділянки рекалесценції при утворенні евтектики;
- 6 – кінець кристалізації $t_{ме}$

Графічне визначення точок $t_{кр}$ і t_{mv} не є достатньо точним, тому для їх уточнення можна залучити рівняння (3.78). На ділянці кривої охолодження (рис. 3.5) від першого мінімуму (точка 1) до моменту часу, який дещо менше за приблизне значення $t_{кр}$ (тобто трохи раніше точки 2), визначаються коефіцієнти k_1 і k_2 (для рідкого стану). Значення температури, її четвертого ступеня і похідної, значення коефіцієнтів k_1 і k_2 підставляємо у рівняння (3.78), фізичний зміст якого – це тепловий баланс металу, що охолоджується. Чим точніше проведено вимірювання температури та чим точніше розраховані відповідні параметри, тим точніше значення $Z(t)$ у (3.78) дорівнюватиме нулю. Початок фазового перетворення призводить до порушення теплового балансу за рахунок прихованої теплоти кристалізації. У такий спосіб, спостерігаючи за величиною $Z(t)$, яка до $t_{кр}$ з високою точністю дорівнює нулю, можна надійно зафіксувати початок кристалізації та відповідну температуру $T_{кр}$.

Аналогічно фіксується кінець перетворення з тією лише різницею, що розрахунки відбуваються на ділянці кривої охолодження від точки, яка відповідає останньому мінімуму $T'(t)$ (точка 6), та далі. Відповідно коефіцієнти k_1 і k_2 визначаються для твердого стану.

Відомо [67; 68], що недоліком термічного аналізу є низька чутливість до визначення саме початку та кінця фазових перетворень ендо- або екзотермічних реакцій. У такому разі фактично моделюється методика диференційного термічного аналізу, який і має високу чутливість саме до змін на кривих охолодження, і принципом якого є порушення теплового балансу між зразком та еталоном. Ураховуючи специфіку цієї методики, що складається з комплексного використання ЕОМ, математичних моделей (зокрема, фактично моделі диференційного термічного аналізу) має сенс ввести термін **комп'ютерний термічний аналіз (КТА)**, який не є поширеним, але використовується у цій роботі.

Висновки до Розділу 3

1. Проаналізовано причини виникнення шуму на похідною за часом від кривої охолодження, яка отримується при кристалізації металевого зразка у системі комп'ютерного термічного аналізу. Запропоновано обов'язкове застосування цифрової фільтрації кривої охолодження під час фіксації кривої охолодження або перед застосуванням чисельного диференціювання.

2. Відповідно до положень теорії твердіння виливків запропоновано математичні моделі процесів кристалізації для чистого металу, бінарних сплавів та сплавів, якій утворюють твердий розчин. За допомогою моделей за кривими охолодження комп'ютерного термічного аналізу, можна визначити відношення теплоти кристалізації до питомої теплоємності для чистого металу і зазначених сплавів ($\frac{L}{c}$, $\frac{L_1}{c}$ і $\frac{L_2}{c}$), а також кількість твердої фази у процесі кристалізації. Такі дані дають змогу керувати твердінням виливків для формування у них певної структури і властивостей.

3. Модифіковано методику, яка сприяє підвищенню чутливості термічного аналізу, а саме визначенню часу та температури початку та кінця фазових перетворень ендо- або екзотермічних реакцій. Вона базується на підрахунку теплового балансу за кривою охолодження і моделює диференційний термічний аналіз. Ураховуючи специфіку цієї методики, що складається з комплексного використання ЕОМ, математичних моделей, введено термін комп'ютерний термічний аналіз.

РОЗДІЛ 4

ОЦІНКА СТАНУ ЛИВАРНИХ РОЗПЛАВІВ ІЗ ЗАСТОСУВАННЯМ ПІДСИСТЕМИ ТЕРМІЧНОГО АНАЛІЗУ

4.1 Прогноз властивостей ливарних сплавів з використанням комп'ютерного термічного аналізу

Прогноз властивостей і управління станом ливарних сплавів на основі комп'ютерного термічного аналізу (КТА) здійснюється за допомогою математичних моделей, які зв'язують параметри, що визначаються при кристалізації за кривими охолодження, та елементи термограм із службовими властивостями сплавів. Ці математичні моделі являють собою багатовимірні регресійні рівняння, зазвичай другого або третього порядку, які побудовані з використанням багатовимірного методу найменших квадратів. Параметри, що входять до моделі як фактори, відбираються за допомогою кореляційного аналізу [183]. У такому разі розраховувалися парні коефіцієнти кореляції, за величинами яких робилися висновки стосовно вагомості того чи іншого фактора. Потім будувалися регресійні рівняння з поступовим додаванням факторів та парних ефектів взаємодії, що мають найбільші парні коефіцієнти кореляції. Доцільність додавання кожного елемента математичної моделі, яка створювалась, оцінювалась за величиною сумарних квадратів залишків (тобто сумарного квадрату різниць між початковими експериментальними даними та результатами, що розраховувалися за рівнянням, у такому разі). Якщо суттєвого зменшення у залишках не спостерігалось, то регресія припинялася. Бажаним результатом при цьому було, по-перше, отримати похибку моделі на рівні похибки, з якою отримувалися експериментальні дані, а по-друге, отримати рівняння якомога простішого виду. Ці вимоги сформульовані на основі багаторічного досвіду автора у галузі математичного моделювання. Як показує практика, чим простіший вид регресійного рівняння, тим надійніше воно «працює».

Якщо в дослідах була змога отримати достатньо дубльованих експериментальних точок, то адекватність моделей доводили за допомогою критерію Фішера [183]. Однак в умовах виробництва майже неможливо отримати експериментальні значення у паралельних дослідах. Тому частіше адекватність моделі перевіряли за таблицею залишків – різницями між експериментальними точками та точками, що розраховувалися за допомоги збудованої математичної моделі, які відображені у відсотках.

Такий підхід до побудови регресійного рівняння є модифікованим варіантом покрокової регресії. З теоретичного погляду ця методика не є суворо обґрунтованою, але власний досвід її застосування у різних галузях науки та виробництва [246–248] доказує її працездатність.

Зокрема, ця методика застосовувалася при побудові комп'ютерних підсистем прогнозу властивостей рідких металів та сплавів.

Для комп'ютерного термічного аналізу використовували пробовідбірники, представлені на рис. 4.1, а також пробовідбірники, що показані на рис. 2.3. При цьому для пробовідбірників, які показано на рис. 2.3 а, було передбачено їх попередній підігрів (рис. 4.2). Апаратна частина складалася з декількох варіантів вимірювальних приладів. У початкових варіантах підсистем термічного аналізу використовували цифрові вольтметри типу Щ68000, Щ68003, Щ300 (рис. 4.3 а, б) або спеціалізовані аналогово-цифрові перетворювачі (рис. 4.3 в). Обчислення виконувалися за допомогою пакету прикладних програм, розробленого автором.

Умовна крива охолодження бінарного сплаву, її перша похідна та температурні точки, що можна формально внести до кореляційного та регресійного аналізів, приведені на рис. 4.4. Точки T_k та T_{mv} відповідають початку та кінцю кристалізації. Вони визначаються за методикою, яка описана в пункті 3.3, і внаслідок нерівноважності процесу та наявності у розплаві домішок, майже ніколи не співпадають з температурами ліквідус і солідус.



а)

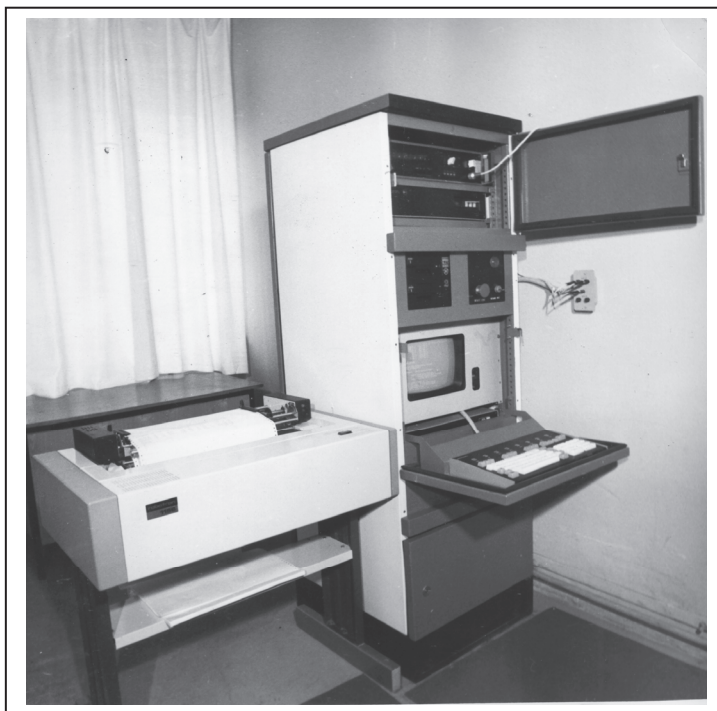


б)

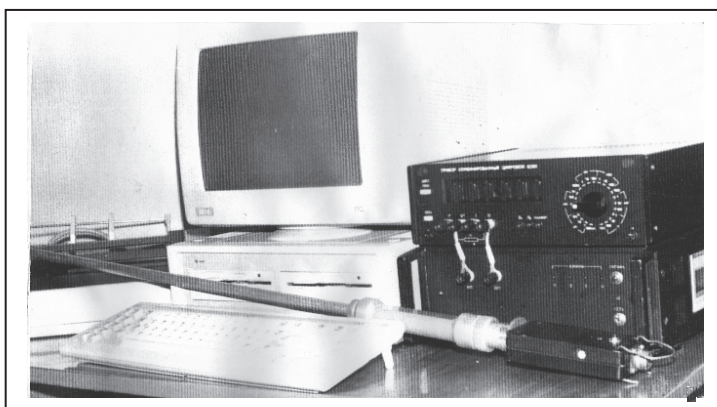
Рис. 4.1 Пробовідбірники, які використовували для прогнозу властивостей ливарних розплавів:
а) пробовідбірник зі сталі;
б) пробовідбірник зі спеціальної суміші (виробництво Польщі)



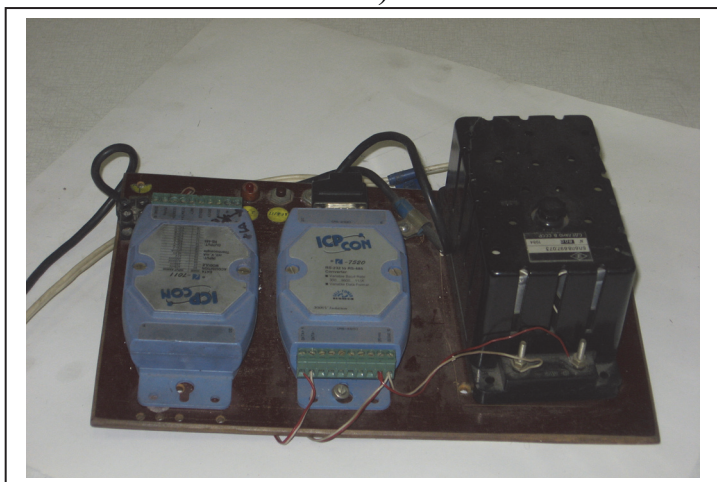
Рис. 4.2 Пробовідбірний стенд з додатковим підігрівом пробовідбірника підсистеми комп'ютерного термічного аналізу для прогнозу стану сплавів на основі алюмінію



а)



б)



в)

Рис. 4.3 Вимірювальні прилади підсистеми термічного аналізу:

а) цифровий вольтметр Щ68003; б) цифровий вольтметр Щ300; в) спеціалізований АЦП

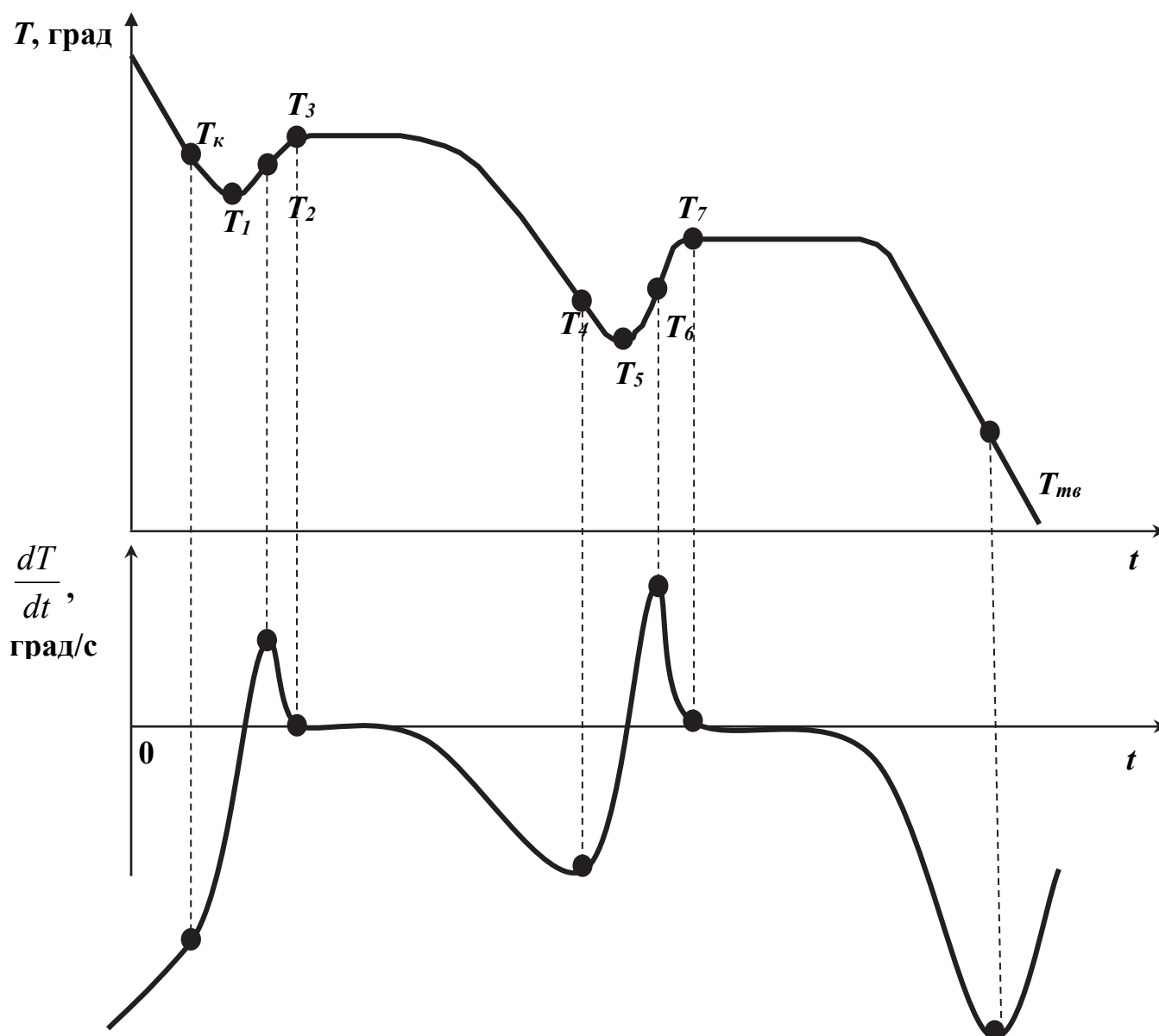


Рис. 4.4 Умовна крива охолодження бінарного сплаву, її перша похідна та температурні точки, що можна розглядати як характерні і включати в кореляційний аналіз:

T_k – температура початку кристалізації;

T_1 – мінімальна температура рекалесценції для α -фази;

T_2 – температура, що відповідає максимуму похідної для області утворення α -фази;

T_3 – температура, що фактично відповідає ліквідусу;

T_4 – температура початку утворення евтектики;

T_5 – мінімальна температура рекалесценції для евтектики;

T_6 – температура, що відповідає максимуму похідної для області утворення евтектики;

T_7 – температура, що фактично відповідає солідусу;

T_{me} – температура кінця кристалізації.

Температури T_3 і T_7 , зазвичай, з достатньою точністю відповідають діаграмним значенням температур ліквідус і солідус. Температури T_1 та T_5 – мінімальні температури рекалесценції для α – фази та для евтектики. Різниці температур $\Delta_1 = (T_3 - T_1)$ і $\Delta_2 = (T_7 - T_5)$ характеризують величини рекалесценцій в області формування твердого розчину та евтектики відповідно, і сильно корелюють зі структурою та механічними властивостями сплавів у твердому стані [65; 148]. Як показує досвід, їх можна замінити температурами T_2 і T_6 , які співпадають з максимальними значеннями похідної для відповідних стадій процесу кристалізації. Температура, що відповідає початку утворення евтектики, зазначена як T_4 .

При побудові прогнозуючих рівнянь для сплавів системи Al-Si діапазон концентрацій кремнію складав 6,0–12,0 %, що відповідає сплавам АК7, АК8, АК9 і частково АК12.

Оскільки основним легуючим елементом зазначених сплавів є кремній, який присутній у відносно великих кількостях, для визначення його вмісту, як показує досвід, досить з термограми виділити температуру ліквідус. Оскільки вплив інших компонентів на температуру солідус незначний, то також як фактор, можна вибрати температурний інтервал $T_l - T_s$. У такому разі визначення вмісту кремнію буде більш надійним, адже за постійних умов кристалізації проби і фіксованих параметрах вимірювальної апаратури, обидві температури вимірюються за однією і тією самою систематичною похибкою, яка компенсується при визначенні температурного інтервалу. Цим підвищується точність визначення фактора.

Після проведення експериментів, у яких кремній у Al-Si сплаві фіксувався на рівнях 7,4 %, 9,5 % і 11,3 %, у результаті статистичного аналізу був установлений коефіцієнт лінійної парної кореляції між вмістом кремнію і температурним інтервалом рівний -0,99 при теоретичному нижньому

граничному $R_{Si,T} = 0,37 < |R_{Si,T}| = |-0,99|$ і довірчої ймовірності 0,95. Отримане регресійне рівняння має вигляд:

$$Si[\%] = 12,56 - 0,114 \cdot (T_l - T_s).$$

(4.1)

Згідно з рівнянням при нульовому температурному інтервалі ($T_l - T_s$) вміст кремнію дорівнює евтектичному складу сплаву системи Al-Si, тобто 12,6 %. Хоча різні джерела визначають евтектичну точку для сплаву Al-Si у діапазоні 11,6–13,0 % кремнію (наприклад [249]).

У діапазоні вмісту кремнію 7,0 % – 11,0 % абсолютна похибка між рівнянням (4.3) та величиною, що отримана спектральним методом, не перевищує 0,08 % (за масою). Тобто рівняння (4.1) забезпечує визначення вмісту кремнію методом КТА з абсолютною похибкою $\Delta = 0,2$ %.

Аналіз діаграм стану сплавів системи алюміній-кремній-магній при малих концентраціях магнію [197] показує, що наявність магнію у межах до 0,5 %, майже не впливає на положення лінії ліквідус. Тому вміст кремнію у сплавах системи Al-Si-Mg можна визначити у припущенні відсутності магнію за рівнянням (4.1).

Для перевірки цього припущення були проведені експерименти зі сплавом Al+5,5–8,5%Si+Mg, коли вміст магнію змінювали від 0,17 % до 0,50 %. Коефіцієнт кореляції між вмістом магнію і температурним інтервалом ($T_l - T_s$) склав 0,055 при його критичній межі 0,422 і довірчої ймовірності 0,95. У такий спосіб взаємозв'язок не значущий, і використання рівняння (4.1) є припустимим.

При кристалізації Al-Si-Mg сплаву на останній стадії процесу магній утворює евтектику Al-Mg₂Si-Si [17]. На першій похідній термограми $T'(t)$ утворення цієї фази виявляється у вигляді невеликого екстремуму (піка) після другого локального максимуму. Причому на самій термограмі суттєвих змін у відповідній області не спостерігається (рис. 4.5). При зміні вмісту магнію змінюється інтенсивність піку і відбувається його зсув в область

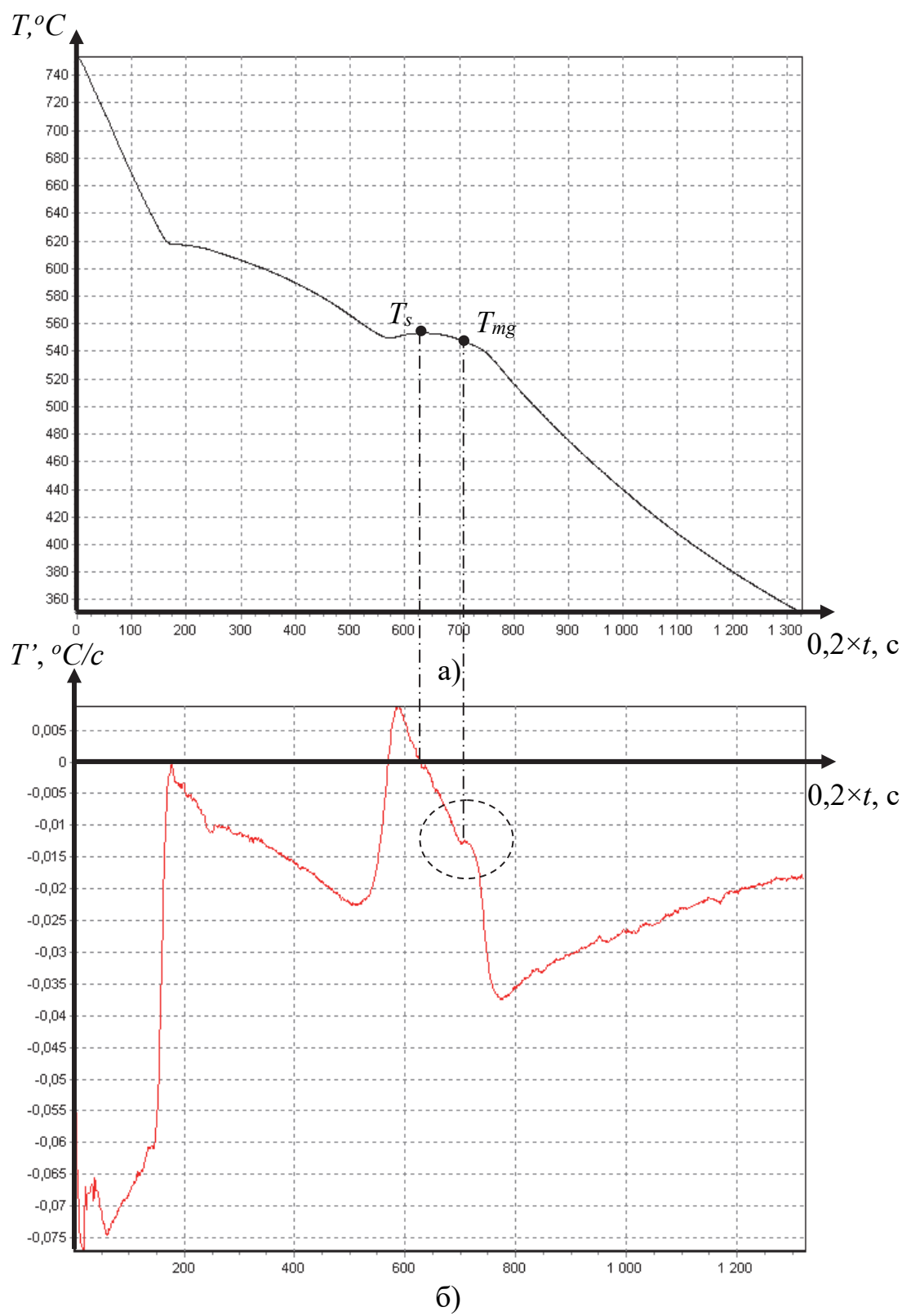


Рис. 4.5 Крива охолодження сплаву $\text{Al}+5,5\%\text{Si}+0,2\%\text{Mg}$ (а) та її перша похідна в часі (б)

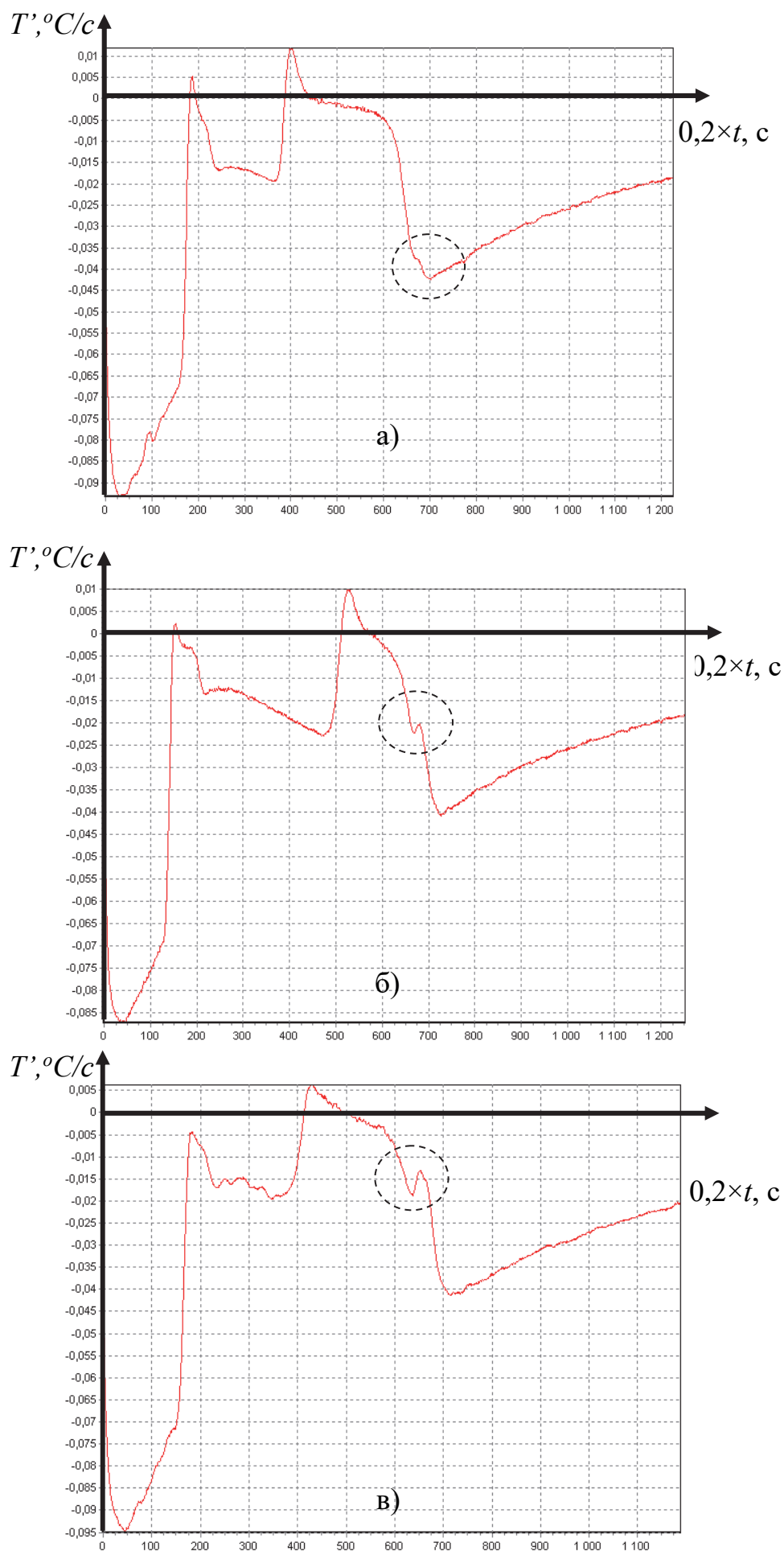


Рис. 4.6 Перші похідні в часі кривих охолодження сплаву $\text{Al}+5,5\%\text{Si}+\text{Mg}$. Вміст магнію: а) - 0,17–0,20 %; б) - 0,20 – 0,25 %; в) - 0,50 %

більш високих температур (рис. 4.6). Дослідження показали, що цей локальний екстремум починає формуватися при вмісті магнію 0,15–0,17 % (рис. 4.6, а). Це дає підставу припустити наявність межі чутливості методу стосовно визначення вмісту домішок, що, ймовірно, обумовлено інерційними характеристиками пробовідбірника за певного співвідношення між масою металу, який досліджується, та швидкості охолодження. Для розширення дії методу у сторону виявлення менших концентрацій магнію підсистемою КТА параметри пробовідбірника, мабуть, варто переглянути.

Незалежною перемінною для визначення вмісту магнію також обраний інтервал між температурою солідус T_s і температурою T_{mg} , яка обумовлена зазначеним локальним максимумом (рис. 4.5). У результаті статистичного аналізу встановлено коефіцієнт лінійної парної кореляції між вмістом магнію і температурним інтервалом $(T_s - T_{mg})$, величина якого дорівнює – 0,75 при його значеннєвому рівні 0,36 і довірчій ймовірності 0,95. Отримане регресійне рівняння має вигляд:

$$Mg[\%] = 0,6933 - 0,0297 \cdot (T_s - T_{mg}). \quad (4.2)$$

Коефіцієнти рівняння значущі, а отримана модель адекватна експериментальним даним. Абсолютне значення залишків за вибіркою не перевищує 0,02 %. Тестування підсистеми КТА у промислових умовах показало, що рівняння забезпечує визначення вмісту магнію у діапазоні 0,20–0,55 % з абсолютною похибкою 0,05 %.

За допомогою підсистеми КТА можна, як показали дослідження, визначити вміст заліза в алюмінієвих ливарних сплавах, що для практики литва є дуже важливим, адже для більшості цих сплавів залізо являє собою шкідливу домішку.

Зазвичай у сплавах системи Al-Si може міститися до 0,5–0,7 % заліза, а у деяких випадках – 1,5 % і більше. При вмісті заліза до 0,7 % після виділення первинних кристалів α -фази, кристалізується подвійна евтектика $\alpha + Si$, а потім потрійна евтектика $\alpha + Si + \beta(Al-Fe-Si)$. При збільшенні вмісту

заліза до 1 % після невеликої кількості первинних кристалів $\beta(\text{Al-Fe-Si})$, виділяється подвійна евтектика $\alpha+\beta(\text{Al-Fe-Si})$, а далі та сама потрійна евтектика $\alpha+\text{Si}+\beta(\text{Al-Fe-Si})$. Подальше збільшення вмісту заліза збільшує кількість первинних і евтектичних кристалів проміжної фази $\beta(\text{Al-Fe-Si})$ [249]. У такий спосіб прояв формування залістистої фази на кривій охолодження може бути виявлено на термограмі між ділянками кристалізації α -фази і евтектики $\alpha+\text{Si}$.

Експерименти зі сплавами Al-Si-Mg показали, що при швидкості охолодження 1–3 град/с при $T = 831$ К, виділяється потрійна евтектика $\alpha+\text{Si}+\text{Mg}_2\text{Si}$. Домішки заліза (0,6–1 %) утворюють із кремнієм (Al, Fe, Si)-складову і, зокрема, фазу Al_3Fe [250]. Незважаючи на незначну її кількість, за рахунок нерівноважності процесу кристалізації проби, нерівноважна евтектика $\alpha+\text{Al}_3\text{Fe}$ відзначається максимумом похідної температури між максимумами, що відповідають утворенню α -фази і евтектики (рис. 4.7). Цей локальний максимум не виявляється при вмісті Fe до 0,60 % (рис. 4.7, а), а починає формуватися в районі температур більших евтектичної $T_{\text{евт}}$ при вмісті Fe, понад 0,60 % (рис. 4.7, б). При вмісті Fe 0,70 % цей пік досягає своєї найбільшої амплітуди (рис. 4.8, а) і надійно визначається в автоматичному режимі підсистемою комп'ютерного термічного аналізу. Подальше підвищення вмісту заліза у сплаві зміщує цей локальний максимум убік більш високих температур, не змінюючи його величини (рис. 4.8, б). У результаті в залежності від вмісту Fe, сплав може бути класифікований як придатний чи непридатний для конкретної технології лиття.

Підставою для прогнозу механічних властивостей у литому стані сплавів систем AL-Si і Al-Si-Mg є те, що тимчасовий опір розриву σ_b і відносне подовження δ в основному визначаються хімічним складом сплавів за головними легуючими компонентами (Si, Mg) і домішками, які суттєво впливають на механічні властивості цих сплавів (наприклад, Fe). Але це є

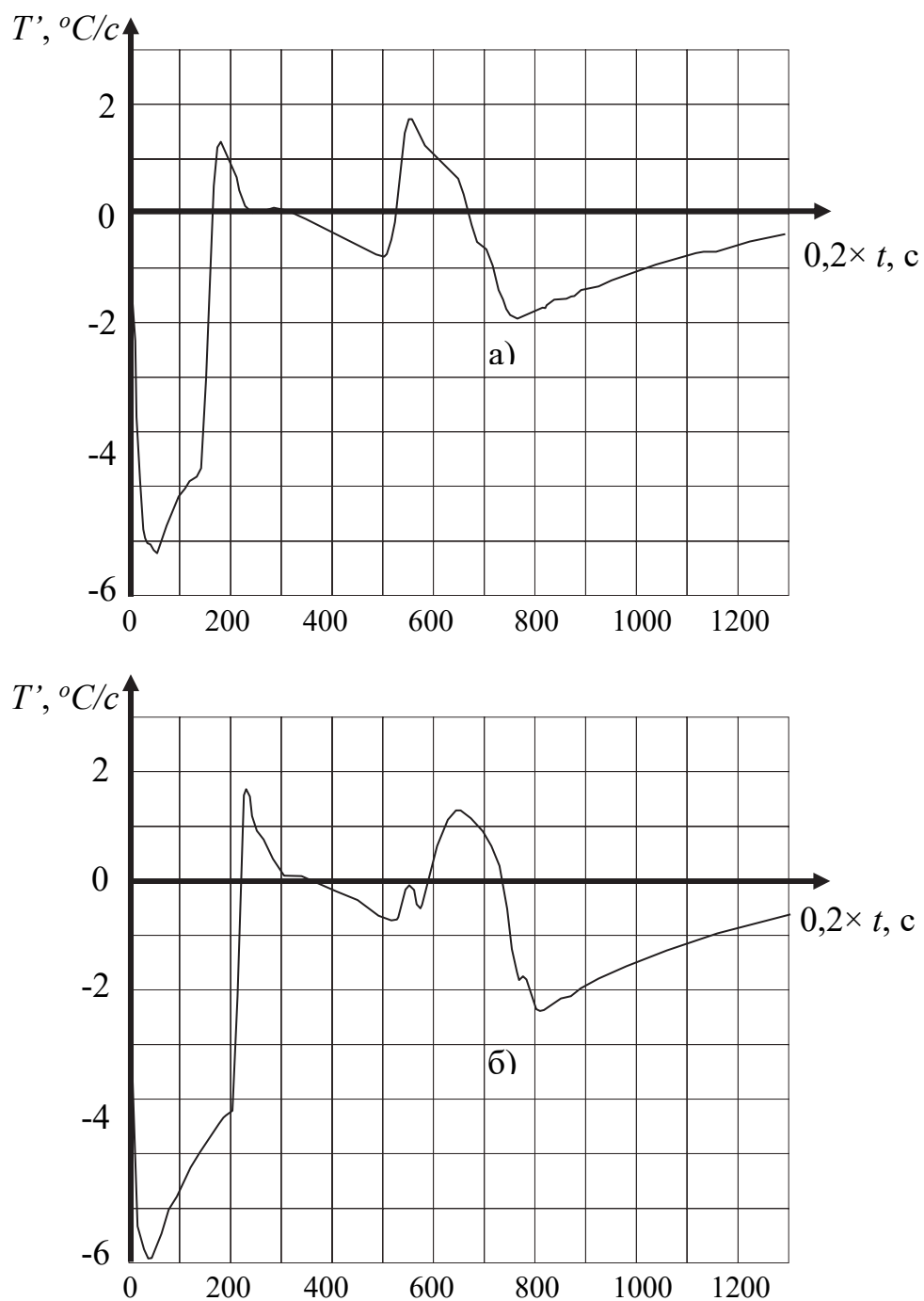


Рис. 4.7 Перші похідні кривих охолодження сплаву $\text{Al}+7\%\text{Si}+0,5\%\text{Mg}+\text{Fe}$
Вміст заліза: а) - 0,15 %; б) - 0,60 %

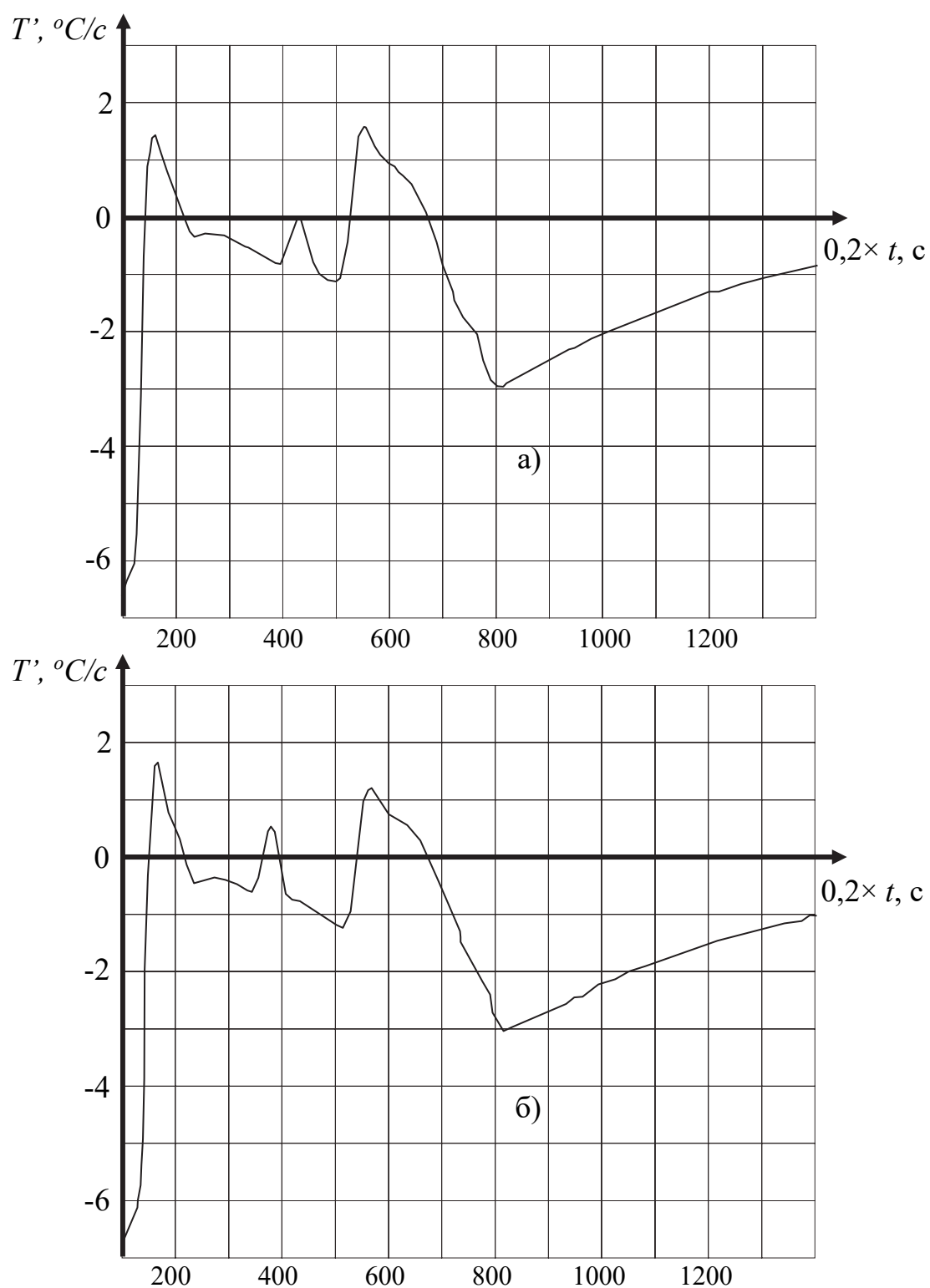


Рис. 4.8 Перші похідні кривих охолодження сплаву $\text{Al}+7\%\text{Si}+0,5\%\text{Mg}+\text{Fe}$
Вміст заліза: а) – 0,70 %; б) – 1,40 %

дійсним за додатковою умовою, що сплав не піддавався додатковій обробці (наприклад, модифікуванню) [249; 252].

Крім того, спадкоємні властивості металу та фактори технології, які важко контролювати (наприклад, перегрів), можуть також змінювати середній рівень механічних властивостей. Сумарний вплив цих факторів виявляється за термограмою у вигляді зміни величин рекалесценцій при формуванні α -фази і евтектики. Як показано у праці [65], ці параметри, особливо евтектична рекалесценція ($\Delta T_{ep} = T_7 - T_5$), корелюють з рівнем механічних властивостей. Тому її величину доцільно ввести в рівняння прогнозу механічних властивостей як додатковий параметр.

При побудові рівнянь для прогнозу тимчасового опору розриву і твердості за кривою охолодження і параметрами кристалізації після кореляційного аналізу як незалежні змінні (фактори), обрані температури ліквідус T_l (точка T_3) і солідус T_s (точка T_7), температура, що відповідає максимуму швидкості кристалізації евтектики T_m (точка T_6), яка пов'язана зі швидкістю росту твердої фази на етапі кристалізації евтектики, відношення схованої теплоти кристалізації евтектики до теплоємності проби. Усі змінні мають стійку кореляцію з тимчасовим опором на розрив σ_k і твердістю HB з коефіцієнтами парної кореляції $R = 0,51 - 0,64$ при теоретичному нижньому граничному $|R_T| = 0,2$ і довірчої ймовірності $P = 0,95$.

Для створення відповідних регресійних рівнянь проводилися експерименти, в яких вміст кремнію для сплаву АК12 змінювали від 7,15 % до 11,3 %, а для сплаву АК7ч розрахункове значення кремнію змінювали у межах 6,1 % – 7,8 % і магнію – у межах 0,15 % – 0,40 %.

Для сплаву АК12 отримані рівняння, що зв'язують тимчасовий опір розриву і відносне подовження з розрахунковим вмістом кремнію, заліза і величиною евтектичної рекалесценції, що мають такий вигляд:

$$\sigma_a = 14,37145 + 0,31076 \cdot Si - 13,1125 \cdot Fe - \\ - 9,3304 \cdot Fe^2 + 0,2431 \cdot \Delta T_{ep}, \quad (4.3)$$

$$\delta = 4,4195 - 0,16663 \cdot Si - 1,7786 \cdot Fe - \\ - 1,06714 \cdot Fe^2 + 0,0283 \cdot \Delta T_{ep}. \quad (4.4)$$

Тобто зменшення температури евтектичної рекалесценції відбиває здрібнювання евтектики, за рахунок чого відбувається деяке підвищення рівня механічних властивостей.

Подібні рівняння отримані і для сплаву АК7ч:

$$\sigma_a = 51,01231 + 4,13723 \cdot Si + 8,05964 \cdot Mg - \\ - 4,6346 \cdot Fe + 0,01782 \cdot \Delta T_{ep}, \quad (4.5)$$

$$\delta = -2,1175 - 1,3332 \cdot Si - 0,2143 \cdot Mg - 5,60762 \cdot Fe + \\ + 0,0171 \cdot \Delta T_{ep}. \quad (4.6)$$

У такому разі введення магнію підвищує тимчасовий опір розриву міцності, а залізо призводить до формування більш тендітної структури і знижує цей параметр. Відносно подовження у литому стані формується більш складно – від базового рівня при збільшенні вмісту магнію і заліза воно знижується. Параметр ΔT_{ep} діє так само, як і для сплаву АК12. Адекватність моделі доведена за таблицею залишків.

Стосовно отриманих рівнянь, то потрібно необхідно зосередитися на певних аспектах. По-перше, це досить велика кількість знаків після коми в коефіцієнтах. Це обумовлено тим, що у такому разі організувати планований експеримент важко, адже принципово неможливо варіювати у заданих межах температурними точками, що входять до рівнянь як параметри. Тобто коефіцієнти регресії корельовані між собою і навіть невелике їх округлення може призвести до значних неточностей і різкого зростання дисперсії адекватності. Досвід показує, що краще залишати максимальну кількість знаків, тобто стільки, скільки отримано при побудові математичної моделі.

Значна кількість знаків дробової частини коефіцієнтів не є незручністю, бо всі розрахунки для прогнозу властивостей виконуються на ЕОМ.

По-друге, побудовані рівняння є регресійними (статистичними) математичними моделями, тому вони цілком очевидно не відображають фізику процесу кристалізації, а лише формально передають експериментально встановлені зв'язки.

По-третє, ці математичні моделі одержані для пробовідбірника циліндричної форми, швидкість охолодження металу в якому приблизно 1–3 град/с. При його заміні на пробовідбірник іншого типу або іншої форми, вид рівнянь може суттєво змінитися як кількісно, так і якісно.

При іспиті підсистеми КТА в промислових умовах рівняння, що описані вище, показали збіжність результатів і точність прогнозу властивостей на рівні стандартних методів механічних іспитів.

4.2 Класифікація кривих охолодження

Збільшення точності та надійності прогнозу рівня службових властивостей сплавів у литому стані можна домогтися використанням допоміжних засобів та алгоритмів. Одним із таких засобів є класифікатор кривих охолодження [253]. Він дає змогу здійснити попередній аналіз виду термограм, віднести її до певного класу. Для кожного класу термограм будуються свої окремі регресійні рівняння, що забезпечить їх більш високу точність і надійність.

Для сплавів Al+Si, Al+Si+Mg, чавунів, а також для низки інших ливарних сплавів [65], після модифікування розплаву на кривих охолодження рекалесценції температури або значно зменшуються, або зникають узагалі. При цьому такий ефект може бути створеним штучно (введенням певних мікродобавок), а може являти собою спадкові властивості шихти. Тобто відсутність рекалесценцій уже свідчить про модифікацію структури і зміну властивостей литого металу. Тому є сенс розділити термограми на декілька

видів, а потім для кожного з них створювати свої регресійні рівняння для прогнозу властивостей сплавів у твердому стані. Це зменшить інтервали, на яких «працюють» регресійні рівняння, що, відповідно, суттєво підвищить їх надійність.

Розглянемо уявну криву охолодження сплаву, в якому, наприклад, кристалізується спочатку α -твердий розчин, а потім послідовно дві евтектики (рис. 4.9). Така термограма теоретично може мати три рекалесценції температури, які, відповідно, можна описати як:

$$\Delta_1 = (T_B - T_A), \quad (4.7)$$

$$\Delta_2 = (T_D - T_C), \quad (4.8)$$

$$\Delta_3 = (T_E - T_F). \quad (4.9)$$

де: T_A, T_C, T_E – температури початку рекалесценцій; T_B, T_D, T_F – температури кінця рекалесценцій.

Кожна з трьох рекалесценцій Δ_j (де $j = 1, 2, 3$) або дорівнює нулю, або ні. Тобто у такому разі для сплавів з різними складами може бути чотирнадцять типів (або класів) термограм (табл. 4.1).

Якщо досліджується чистий метал або сплав евтектичного складу, то можливо тільки два типи кривих: 1 або 2. Відсутність рекалесценції Δ_1 (тип 2) вже дає підстави стверджувати, що структура такого сплаву буде більш дрібною в порівнянні зі сплавом, який має рекалесценцію (тип 1).

Для бінарного сплаву за наявності однієї евтектики, кількість можливих типів буде чотири (номери класів 3–6 у табл. 4.1). Наявність чи відсутність рекалесценції Δ_1 в області твердого розчину надає інформацію про умови його формування, а Δ_2 , яка дорівнює або ні нулю, свідчить про динаміку формування евтектичної складової.

Для більш складного сплаву, який складається з твердого розчину та двох евтектик, теоретично можна передбачити існування восьми варіантів або типів кривих (номери класів 7–14 у табл. 4.1).

Збільшення кількості регресійних рівнянь збільшує надійність прогнозу структури і властивостей сплавів у твердому стані, але їх створення

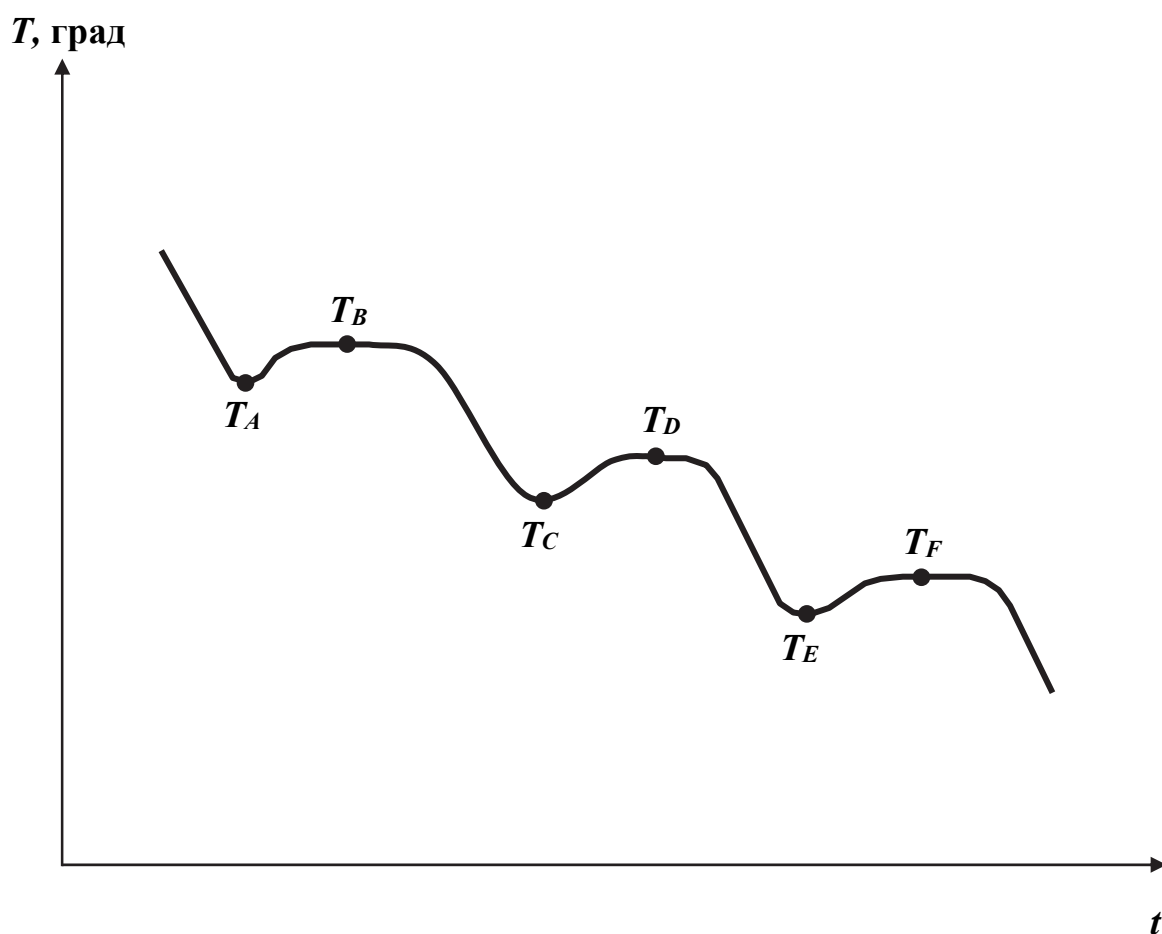


Рис. 4.9 Умовна крива охолодження з характеристичними температурами, що використовуються для класифікатора термограм:

T_A, T_C, T_E – температури початку рекалесценцій;

T_B, T_D, T_F – температури кінця рекалесценцій

Таблиця 4.1

Умовні типи термограм

№ типу термограми	Δ_1	Δ_2	Δ_3
1	Δ_1	—	—
2	0	—	—
3	Δ_1	Δ_2	—
4	0	Δ_2	—
5	Δ_1	0	—
6	0	0	—
7	Δ_1	Δ_2	Δ_3
8	0	Δ_2	Δ_3
9	Δ_1	0	Δ_3
10	Δ_1	Δ_2	0
11	Δ_1	0	0
12	0	Δ_2	0
13	0	0	Δ_3
14	0	0	0

потребує значно більшої підготовчої роботи як експериментальної, так і теоретичної.

Отже, таке ускладнення алгоритму прогнозування має сенс, якщо потрібна підвищена точність та надійність прогнозу.

4.3 Оцінка ступеня модифікованості алюмінієвих ливарних сплавів з використанням комп'ютерного термічного аналізу

Для з'ясування можливостей підсистеми КТА для оцінки ступеня модифікованості ливарних алюмінієвих сплавів, необхідно дослідити вплив стронцію на криві охолодження, їх перші похідні, які визначають динаміку структуроутворення при кристалізації, і структуру сплаву Al+9,0–12,0%Si. Крива охолодження сплаву без модифікатору та її перша похідна представлені на рис. 4.10.

Модифікування здійснювали шляхом введення лігатури Al+3,5%Sr послідовно з таким розрахунком, щоб вміст стронцію у розплаві змінювався від 0,01 % до 0,20 %.

При введенні стронцію в сплав Al+9,0-12,0%Si змін на кривих охолодження та їх перших похідних в області кристалізації альфа-твердого розчину майже не спостерігалось (рис. 4.11, а і б). В області кристалізації евтектики при поступовому збільшенні вмісту стронцію до 0,2 % відзначається зниження температури солідус приблизно на 10 градусів: від 850 К до 840 К (577 °С до 567 °С).

Більш контрастно і надійно зміни температури солідус у залежності від вмісту стронцію, виявляються при реєстрації температурного інтервалу між її числовими значеннями температур солідус не модифікованого T_s і модифікованого T_{sm} розплавів $\Delta T_s = T_s - T_{sm}$. У цьому разі інтервал ΔT_s росте від нуля до 9–10 град при введенні стронцію до 0,15–0,20 %. Паралельно на термограмі відбувається зменшення величини рекалесценції ΔT_{ep} (рис. 4.11, а) в області початку формування евтектики від 5,0–6,5 град (при

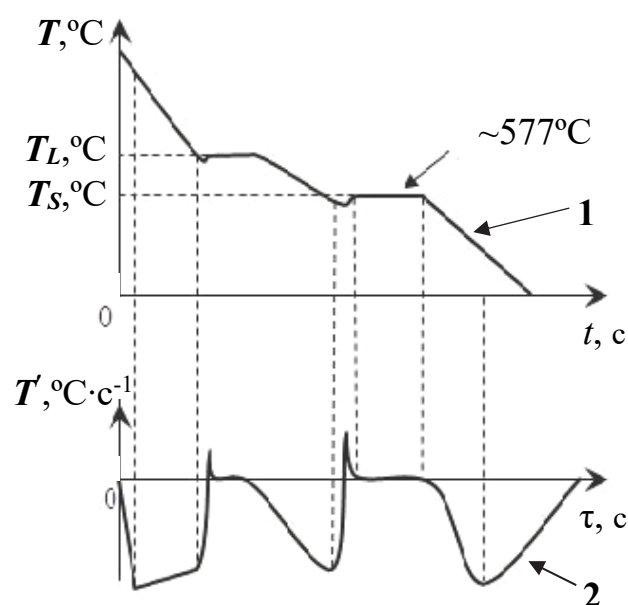


Рис. 4.10 Крива охолодження немодифікованого сплаву (1) Al + 9,0 – 12,0 % Si та її перша похідна (2)

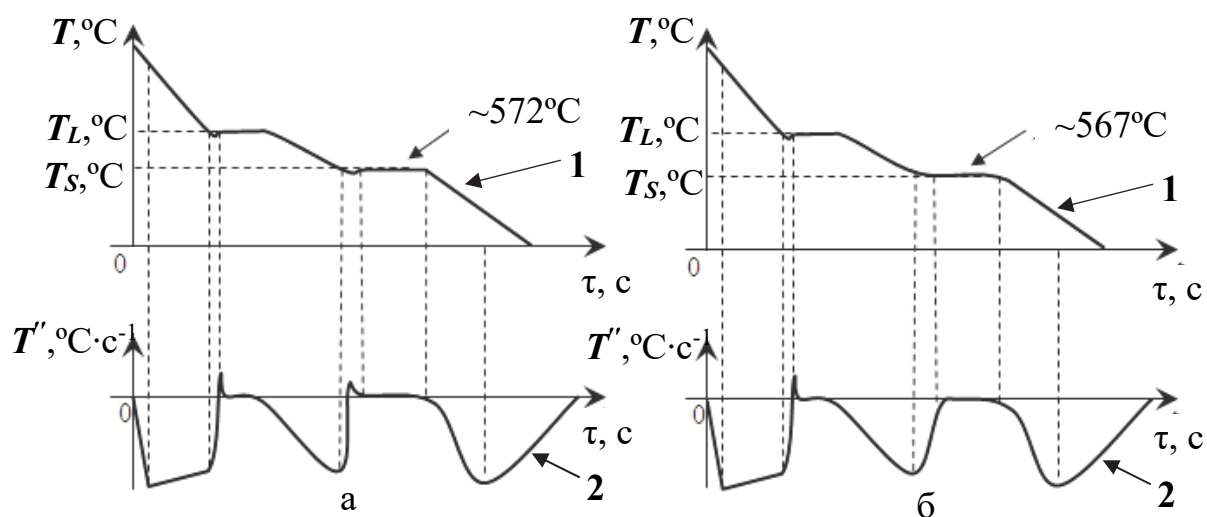


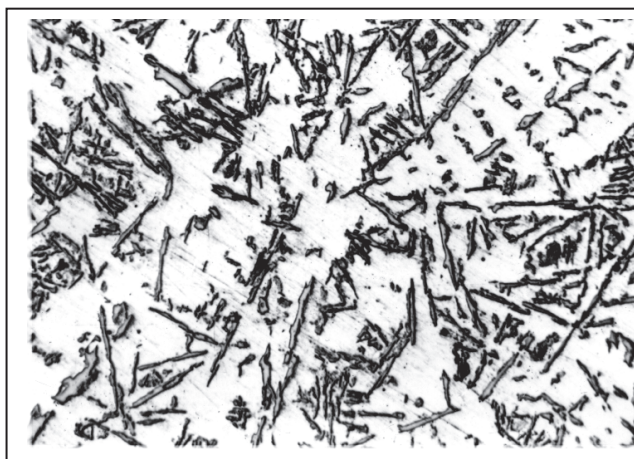
Рис. 4.11 Криві охолодження модифікованого сплаву (1) Al + 9,0 – 12,0 % Si та їх перші похідні (2):
а – вміст Sr 0,1 %; б – вміст Sr 0,2 %

вмісті $Sr < 0,05 \%$) аж до повного виродження «лунки» на термограмі (рис. 4.11, б) в області утворення евтектики (при вмісті $Sr > 0,15 \%$). Тобто змінюється вид кривої охолодження. Похідні термограм підтверджують це: для немодифікованого металу в області кристалізації евтектики існує явно виражений другий пік першої похідної, максимум якого має додатне значення, що свідчить про наявність рекалесценції. З підвищенням ступеня модифікованості величина цього максимуму зменшується до нуля (рис. 4.11, а і б), а потім взагалі може переходити в область від'ємних величин.

Відзначені зміни на кривих охолодження та їх похідних підтверджуються металографічним аналізом структур сплавів (рис. 4.12).

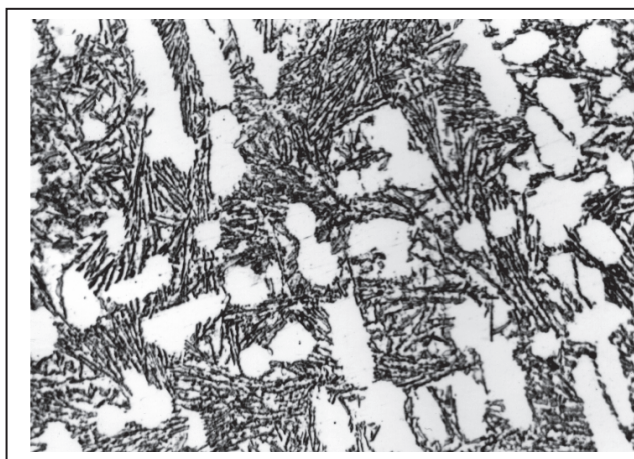
Немодифікований метал характеризується структурою з кремнієм у вигляді великих пластин і в голчастій формі (рис. 4.12, а). За часткового модифікування (вміст Sr до $0,05 \%$), утворюється дрібнопластинчата структура, що при підвищенні вмісту Sr до $0,1 \%$, поступово руйнується і залишається невелика кількість голчастої фази (рис. 4.12, б). Подальше підвищення вмісту Sr до $0,15 \%$ призводить до повного зникнення пластинчастої фази і переходу кремнію у «волокнисту» форму (рис. 4.12, в).

У такий спосіб маємо два параметри, які можна використовувати для оцінки ступеня модифікованості сплаву $Al+9-12\%Si$ [254]. Це температурний інтервал між числовими значеннями немодифікованого і модифікованого розплавів ΔT_s та величина рекалесценції ΔT_{ep} в області початку формування евтектики (або величина другого піку першої похідної кривої охолодження, що тісно корелює з ΔT_{ep}). Числове значення ΔT_s змінюється у межах від 0 до 9–10 градусів, а числове значення ΔT_{ep} – від 0 до 5–7 градусів. Ураховуючи розраховану величину роздільної здатності вимірювального каналу підсистеми термічного аналізу, можна зробити певні висновки. По-перше, критеріальним параметром у такому разі допустимо вибрати як інтервал між числовими значеннями немодифікованого і модифікованого розплавів ΔT_s , так і величину рекалесценції ΔT_{ep} в області початку формування евтектики.



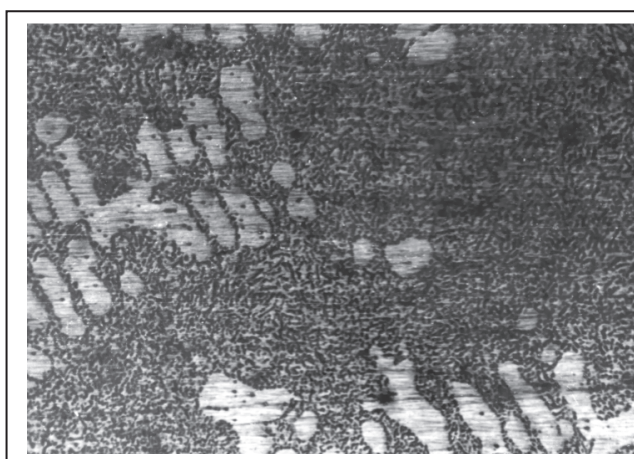
× 200

а)



× 200

б)



× 200

в)

Рис. 4.12 Мікроструктури сплаву Al+10-11%Si початкового (а) та модифікованого 0,1 % *Sr* (б) і 0,2 % *Sr* (в) [65]

Можна також враховувати їх значення одночасно (що, мабуть, матиме більшу надійність). По-друге, потрібно встановити 8–10 рівнів зміни критеріального параметра відповідно до діапазону його зміни. Це, у такому разі, складає не менше, ніж $0,1^0$ і відповідає можливостям вимірювального каналу. Тобто, для кількісного визначення ступеня ефекту, що модифікує, з урахуванням його зниження з часом витримки розплаву, представляється зручним вираження його у величині температурного інтервалу ΔT_s або у величині рекалесценції ΔT_{ep} , виражених в умовних балах (Bl).

На основі одержаних результатів, на прикладі сплаву Al+9-12%Si, створено алгоритм прогнозу структури литого металу при зміні ступеня його модифікованості [30]. У найпростішому випадку достатньо прийняти три градації структури: структуру немодифікованого, слабomodифікованого і модифікованого металу (рис. 4.12). Відповідно до цієї класифікації виділені діапазони модифікуючого ефекту стронцію в UA можуть складати:

- 1–3 бали – вміст Sr до 0,05 % – не модифікований метал (рис. 4.12, а);
- 4–6 балів – вміст Sr до 0,1 % – слабomodифікований метал (рис. 4.12, б);
- понад 6 балів – вміст Sr до 0,2 % – модифікований метал (рис. 4.12, в).

У результаті обробки експериментальних даних, отримані зворотні рівняння зв'язку залежності значень умовних одиниць дії стронцію від величини ΔT_{ep} (розраховані значення округлюються до цілих):

$$Bl_{\Delta T_{ep}} = \text{int}(8 - \Delta T_{ep}), \quad (4.9)$$

та залежності значень умовних одиниць дії стронцію від температурного інтервалу ΔT_s :

$$Bl_{\Delta T_s} = \text{int}(0,7\Delta T_s + 1). \quad (4.10)$$

Згідно з (4.9) сплав можна вважати немодифікованим при значенні ΔT_{ep} понад $5,0^0$ і модифікованим при значенні цього параметра $1,0^0$ і нижче аж до його відсутності. За рівнянням (4.10) сплав можна вважати немодифікованим

при значенні інтервалу ΔT_s нижче $2,0^0$ і модифікованим при значенні цього параметра понад $6,0^0$. Значення критеріальних параметрів для слабомодифікованого металу лежать усередині зазначених границь.

Визначені у такий спосіб граничні значення структурно чутливих параметрів, які реєструються за термічними кривими охолодження та їх похідними першого порядку, покладені в основу загального алгоритму оцінки ступеня модифікованості Al-Si сплаву, блок-схема якого приведена на рис. 4.13. Спочатку відбирається проба металу перед модифікуванням і отримана крива охолодження зберігається в пам'яті ЕОМ. Потім, за необхідності оцінки ступеня модифікованості розплаву, відбирається друга проба розплаву, який було модифіковано. Ця крива охолодження також фіксується в пам'яті комп'ютера (блок 1). Далі (блок 2) на кривій охолодження за наступною схемою визначаються представлені на рис. 4.4 характерні температурні точки. Спочатку за методикою, яка описана у Розділі 3, розраховуються точки T_k та $T_{m\phi}$, які відповідають початку та кінцю кристалізації. Потім фіксують максимальні та мінімальні значення на першій похідній кривої охолодження. Для сплаву Al+11%Si перша похідна кривої охолодження має два максимуми та один мінімум (рис. 4.4). Перший максимум похідної визначає температурну точку T_2 , а другий – температурну точку T_6 . Мінімум відповідає температурі T_4 . Точку T_1 знаходять як мінімальну температуру в діапазоні між T_k і T_2 , а точку T_3 – як максимальну температуру в діапазоні між T_2 і T_4 . Натомість точка T_5 є мінімальною температурою в діапазоні між T_4 і T_6 , а точка T_7 – максимальна температура в діапазоні між T_6 та T_m . У блоці 3 (рис. 4.13) визначаються ΔT_{ep} та ΔT_s як:

$$\Delta T_{ep} = T_7 - T_5, \quad (4.11)$$

$$\Delta T_s = T_3 - T_7. \quad (4.12)$$

Потім за формулами (4.9) та (4.10) визначають $Bl_{\Delta T_{ep}}$ та $Bl_{\Delta T_s}$ (блок 4). У блоці 5 відповідно до вищезазначеної класифікації формують прогноз структури сплаву у твердому стані за трьома градаціями: не модифікована,

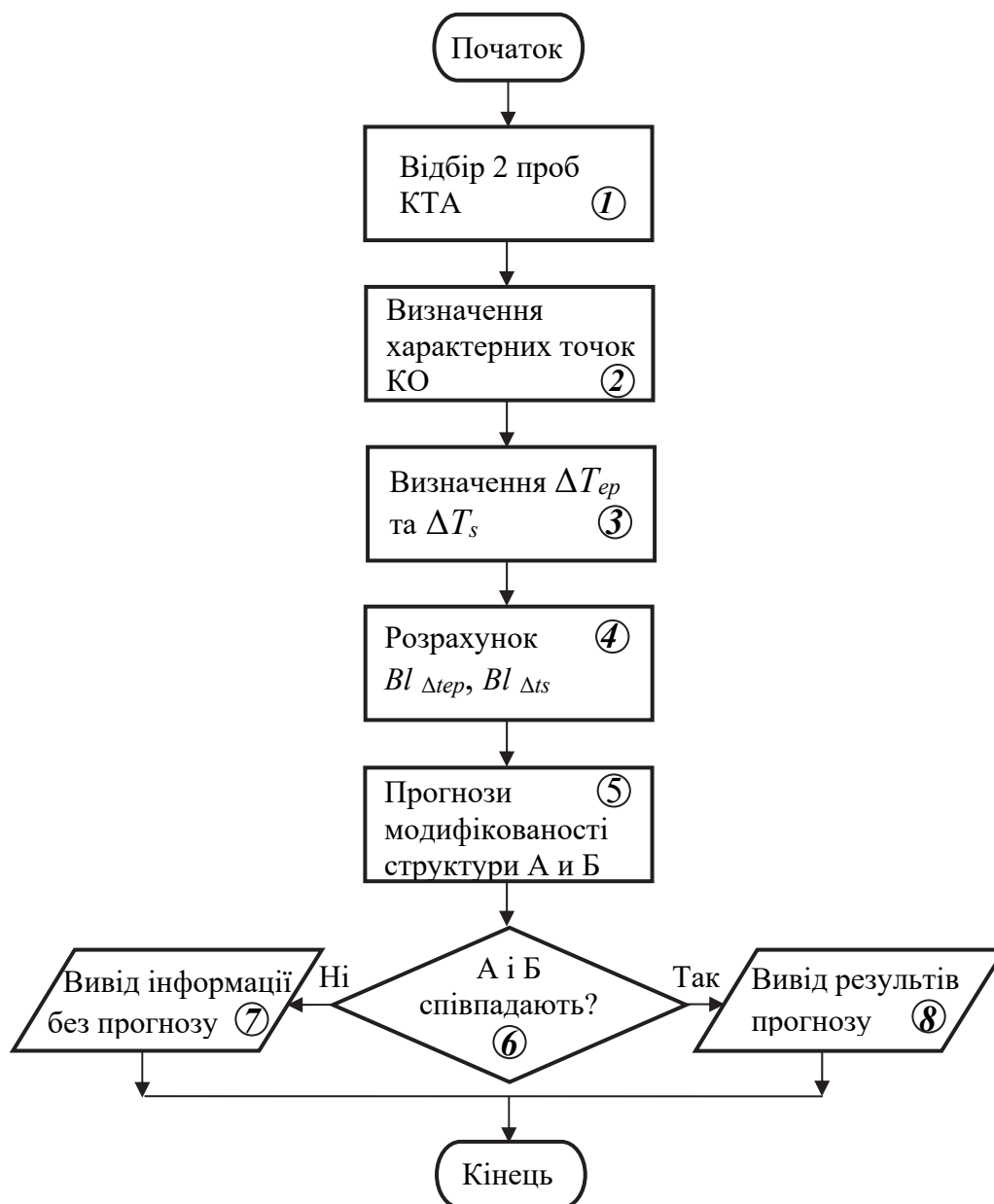


Рис. 4.13 Блок-схема загального алгоритму оцінки ступеня модифікованості сплаву Al + 9–12 % Si

слабомодифікована і модифікована, як за ΔT_{ep} (прогноз А), так і за ΔT_s (прогноз Б). Якщо прогнози співпадають, то система виводить ці результати (блок 8), а якщо ні, то система видає повідомлення про це (блок 7) і рішення про стан металу приймає персонал цеху, з урахуванням передісторії його обробки.

Тобто на прикладі сплаву системи Al-Si розроблено алгоритм, який дає змогу здійснювати найпростішу класифікацію ступеня модифікованості розплаву. Також у такий спосіб показано, що параметри вимірювального каналу підсистеми КТА уможливлюють реєстрацію на термограмі елементів, за допомогою яких можна прогнозувати зміни структури і властивостей металу у твердому стані, що обумовлені його модифікуванням.

4.4 Включення підсистеми комп'ютерного термічного аналізу в технологію плавки ливарних сплавів

Підсистема КТА дає змогу оперативної корекції властивостей металу у процесі його плавки, тобто сприяє здійсненню керування якістю рідкого металу. Тому важливим питанням упровадження подібних систем у виробництво є включення їх у традиційну технологію, що обговорена нормативними документами. Здійснювати це необхідно у такий спосіб, щоб доповнити технологію новими функціями, що надає підсистема КТА і, при цьому, не порушити її. Включення системи експрес-контролю на базі КТА у технологічний процес плавки і розливання Al-Si сплавів можна зробити у певний спосіб [65].

На всьому технологічному циклі можливо виділити моменти критичних подій: початок технологічного процесу, плавлення, рафінування, модифікування, розливання в форми або в роздавальні печі, кінець технологічного процесу.

Відповідно до традиційної технології за типовою інструкцією підприємства після розрахунку ваги компонентів, підготовки печі і шихти,

розплавлення і нагрівання металу до 983–1003 К (710–730 °С), проводиться рафінування дегазером чи гексахлоретаном у кількості 0,3 % від ваги плавки в два або в три прийоми, в залежності від забруднення вихідної шихти (етап 4). Потім температура металу знову доводиться до 993–1003 К (710–730 °С), і відбувається відбір проби на хімічний аналіз складу розплаву. Після доведення температури металу до величини на 40⁰ вище температури заливання, проводиться модифікування сплаву універсальним флюсом у кількості 1,2–1,5 % від ваги плавки і витримка протягом 10–15 хвилин. Потім, після перемішування розплаву і витримки протягом 10 хвилин, заливаються проби для випробувань на механічні властивості. Контроль на газонасичення проводиться методом вакуум-проби за формою поверхні зразка, який кристалізувався. У випадку опуклої поверхні, потрібне повторне рафінування і перевірка на газонасиченість.

Після цих етапів починається розливання або у підготовлені форми, або у роздавальні печі. Наприклад, при литті під тиском метал у роздавальних печах опору витримується при температурі вищій за ту, яка була під час запресовування, на 20–40⁰. При цьому метал може зберігатися не більше 1,5 години, після чого роблять його заміну. Для інших видів лиття (при вмісті металу в печі 30–200 кг) розливка для відповідальних деталей може тривати 2–3 години, а для невідповідальних – до доби.

Цій технології притаманна велика часова затримка – одержання результатів хімічного аналізу металу (іноді підвищений вміст заліза в плавці стає відомим тільки наступного дня). У такому разі вся партія деталей бракується і йде на переплав. Тривалий цикл вимірів відноситься і до проб на механічні властивості. Водночас, якщо маються відхилення від хімічного складу, а механічні властивості в нормі, головний металург чи головний технолог мають право дозволити прийняти плавку за механічними властивостями, але і у цьому разі передача виливків на подальшу обробку затримується.

При розгляді запропонованого технологічного циклу, можна спостерігати низку етапів, де можлива його оптимізація, з метою підвищення якості металу, прискорення видачі плавки, економії матеріалів і енергії за рахунок використання комп'ютерного термічного аналізу.

При використанні підсистеми КТА можна провести експрес-визначення складу, коли здійснюється плавка повернення. Після чого, за необхідності, після можливого рафінування, дані про хімічний склад і вагу плавки повернення включаються в загальний розрахунок шихти основної плавки (цю дію підсистема може робити у сервісному режимі, включаючи, наприклад, оптимізацію складу розплаву за мінімальною його вартістю).

У процесі розплавлювання шихти і перегріву сплаву підсистема КТА з постійно зануреним у розплав пробовідбірником, може переключатися в режим виміру температури. Це сприятиме стабілізації технологічного процесу, тому що у такому разі точність виміру температури буде більш високою, аніж у наявних промислових приладів.

Підсистема КТА після добору й аналізу проби (після перегріву), може суттєво скоротити технологічний цикл і усунути можливий брак з невідповідності хімічному складу (наприклад, підвищеному вмісту заліза). У цьому випадку виробляється розрахунок підшихтовки, і після її здійснення, за результатами повторної проби, виконується оцінка необхідності модифікування та прогноз механічних властивостей. Процедура модифікування у випадку високої якості металу, може бути виключеною, після чого плавка може бути видана на розливання. Етапи відбору проб із технологічного процесу не усуваються. Однак, спираючись на результати, які надає підсистема КТА, можна прийняти рішення про розливання розплаву, не чекаючи результатів стандартних аналізів. Тобто за наявності всіх операцій традиційної технології, виграш в часі отримується за рахунок високої швидкості одержання результатів прогнозу стану розплаву, який здійснюється підсистемою КТА.

Після розливу рідкого металу у роздавальні печі підсистема КТА може сприяти підтримці якості литва на певному рівні. Зокрема, у процесі його вистоювання неважко здійснювати періодичний контроль стану розплаву і оцінювати необхідність модифікування або підшихтовки за компонентами, які вигоряють. Наприклад, при тривалих циклах розливання можуть вигорати компоненти сплаву (наприклад, магній у сплавах Al-Si-Mg). Плавильник у такому разі приймає рішення або злити метал, або дошихтувати його в роздавальній печі. Своє рішення він може обґрунтувати, зокрема, і за результатами КТА. При використанні модифікаторів тривалої дії контроль на модифікованість, який виконано за допомогою підсистеми КТА, заощаджує модифікуючі речовини, гарантує якість лиття.

Описане з'єднання традиційної технології, що затверджена нормативними документами, з можливостями КТА вимагає рішення низки організаційних завдань. Основним з-поміж них є включення підсистеми КТА у технологічну інструкцію плавки того чи іншого сплаву як нестандартизованого засобу вимірів (НЗВ). Оскільки стандарт на підсистеми не розроблений, його потрібно піддати метрологічній атестації як НЗВ згідно з ДСТУ із вибором як контрольного, одного зі стандартних способів аналізу.

Друге, не менш важливе завдання, – визначення особи (фахівця), яка приймає рішення (ОПР) для виконання дій, які рекомендуються підсистемою КТА (дошихтовка, модифікування, розливання без технологічних етапів, обов'язкових у нормованій технології). ОПР приймає рішення і несе відповідальність за результати його прийняття. Очевидно, що таким ОПР може бути технолог цеху. Природно, що при прийнятті рішення ОПР-ом бажано залучення професійних знань плавильника.

У процесі впровадження підсистеми також необхідно розробити доповнення до типової технологічної інструкції, де були б передбачені варіанти технологічного процесу із застосуванням КТА, права і відповідальність ОПР при виборі варіанту технологічного процесу. Підсистема КТА у такий спосіб, не руйнує стандартну технологію, а за

рахунок своїх можливостей керування якістю розплаву, оптимізує її і забезпечує підвищення продуктивності виробництва і зниження браку.

Висновки до Розділу 4

1. Побудовані рівняння для визначення прогнозу тимчасового опору розриву і відносного подовження уздовж кривої охолодження і параметрами кристалізації для сплавів Al+Si та Al+Si+Mg (відповідно АК12 та АК7ч), в яких незалежними змінними обрані температура евтектичної рекалесценції та складові основних легуючих компонентів. Для сплаву АК12 отримані рівняння мають вигляд:

$$\begin{aligned}\sigma_a &= 14,37145 + 0,31076 \cdot Si - 13,1125 \cdot Fe - \\ &\quad - 9,3304 \cdot Fe^2 + 0,2431 \cdot \Delta T_{ep}, \\ \delta &= 4,4195 - 0,16663 \cdot Si - 1,7786 \cdot Fe - \\ &\quad - 1,06714 \cdot Fe^2 + 0,0283 \cdot \Delta T_{ep}.\end{aligned}$$

а для сплаву АК7ч:

$$\begin{aligned}\sigma_a &= 51,01231 + 4,13723 \cdot Si + 8,05964 \cdot Mg - \\ &\quad - 4,6346 \cdot Fe + 0,01782 \cdot \Delta T_{ep}, \\ \delta &= -2,1175 - 1,3332 \cdot Si - 0,2143 \cdot Mg - 5,60762 \cdot Fe + \\ &\quad + 0,0171 \cdot \Delta T_{ep}.\end{aligned}$$

Побудовано математичні моделі для визначення уздовж кривої охолодження відсоткового вмісту основних легуючих компонентів.

2. Показано, що за допомогою підсистеми КТА можна визначити вміст заліза в Al-Si і Al-Si-Mg ливарних сплавах. На першій похідній кривої охолодження фіксується пік, який відображає формування евтектики $\alpha + Al_3Fe$. Його виділення стало можливим тільки при застосуванні числового фільтру для обробки первинних експериментальних даних. Цей локальний

максимум не виявляється при вмісті $\text{Fe} \leq 0,60 \%$, починає формуватися при вмісті $\text{Fe} > 0,60 \%$, а при $\text{Fe} \geq 0,70 \%$ цей пік досягає своєї найбільшої амплітуди і надійно визначається в автоматичному режимі підсистемою комп'ютерного термічного аналізу.

3. На прикладі впливу стронцію на криві охолодження і їх перші похідні за часом, показано можливість підсистеми комп'ютерного термічного аналізу для оцінки ступеня модифікованості ливарних алюмінієвих сплавів $\text{Al}+9,0-12,0\%\text{Si}$ та $\text{Al}+7,0-8,0\%\text{Si}+0,4-0,5\%\text{Mg}$. Визначено два параметри, які можна використовувати для оцінки ступеня модифікованості зазначених сплавів. Це інтервал між числовими значеннями немодифікованого і модифікованого розплавів ΔT_s та величина рекалесценції ΔT_{ep} в області початку формування евтектики (або величина другого піку першої похідної кривої охолодження). Для них запропоновані умовні бали (Bl) і створені відповідні регресійні рівняння:

$$Bl_{\Delta T_{ep}} = 7,881 - 3,036\Delta T_{ep} + 0,3365\Delta T_{ep}^2,$$

$$Bl_{\Delta T_s} = 0,70093 + 1,0351\Delta T_s - 0,03267\Delta T_s^2.$$

Запропоновано загальний алгоритм оцінки ступеня модифікованості розплавів на прикладі сплаву $\text{Al}+9,0-12,0\%\text{Si}$.

4. Для збільшення точності та надійності прогнозу рівня службових властивостей сплавів у литому стані, запропоновано класифікатор кривих охолодження, який складається з чотирнадцяти типів або класів термограм. Класифікація здійснюється за рекалесценціями температур, які можуть існувати на початку формування тих або інших структур. Два класи відповідають чистому металу або винятково евтектичному складу. Для бінарного сплаву за наявності однієї евтектики, кількість можливих типів – чотири. Для більш складного сплаву, який складається з твердого розчину та двох евтектик, теоретично можна передбачити існування восьми варіантів або типів кривих.

5. На прикладі технологічного процесу плавки і розливання Al-Si сплавів, розроблено пропозицію включення підсистеми КТА у традиційну технологію, яка обговорена нормативними документами. Зроблено це так, щоб доповнити її

новими функціями, які надає підсистема і, при цьому, не порушити основні технологічні операції.

РОЗДІЛ 5

ПІДСИСТЕМА ІМІТАЦІЙНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ УТВОРЕННЯ СТРУКТУРИ ПРИ КРИСТАЛІЗАЦІЇ

Імітаційна модель є певним алгоритмом, який відображає уявлення розробників цієї моделі стосовно функціонування складної системи, що моделюється. Для того, щоб побудувати адекватну модель, необхідно проаналізувати фізичну сутність процесів, сукупність яких визначає об'єкт моделювання. Це є найбільш важливим і найбільш складним етапом побудови імітаційної моделі.

5.1 Теоретичне обґрунтування основних чинників імітаційної моделі кристалізації металів і сплавів

Кристалізація – це процес, який складається з елементарних актів взаємодії атомів, але при цьому формується макроструктура металів або їх сплавів, яка суттєво впливає на їх властивості. Тобто цей процес можна розглядати на двох рівнях: макро- і мікрорівнях. Вибір рівня розгляду визначає характер фізичних законів і вид математичних рівнянь, які потрібно застосовувати для опису системи. Ураховуючи той факт, що у цій роботі одним із її завдань є розробка моделі, яка повинна відображати вплив зовнішніх умов (передусім швидкості охолодження) на процес кристалізації, з метою визначення оптимальних технологічних заходів при опрацюванні реальних технологій, доречно зосередитися на макрорівні фізичного опису процесу формування макроструктури при кристалізації.

Розглядаючи кристалізацію чистого металу або бінарного сплаву, можна виділити основні макрофізичні процеси, що визначають її хід (рис. 5.1). По-перше, це тепловіддача з поверхні системи та теплопередача, що відбувається в об'ємі розплаву під впливом зовнішніх чинників. Під тепловіддачею тлумачать тепловий потік з поверхні тигля із розплавом, який

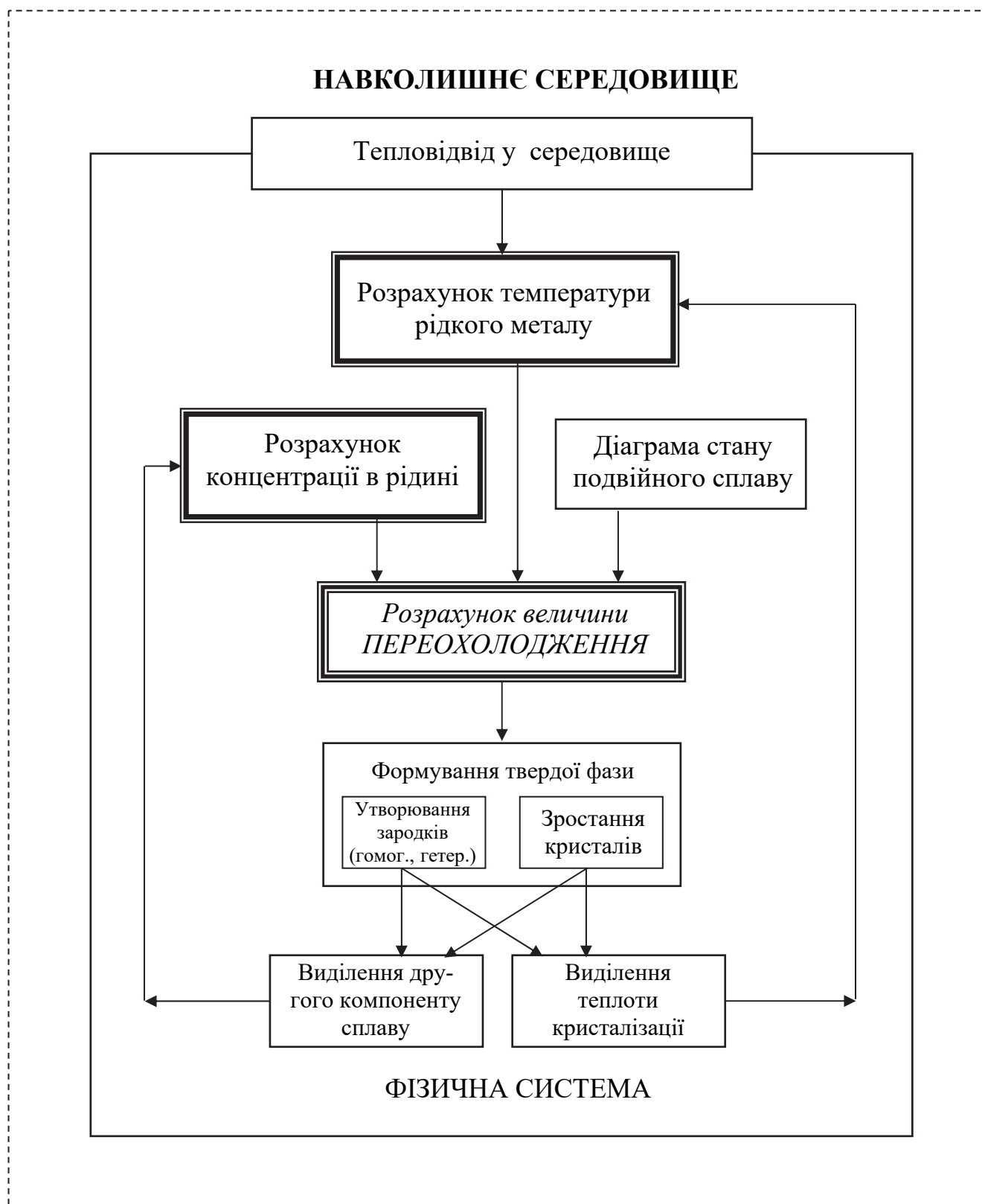


Рис. 5.1 Схематичне зображення взаємодії фізичних процесів, які є базовими при створенні алгоритму імітаційної моделі кристалізації [254]

направлений від нагрітого тіла в оточуюче середовище. Саме він обумовлює певну швидкість охолодження у системі і температурний градієнт у ній. Тобто саме цей процес визначальний, тому що одним із найважливіших параметрів при формуванні структури кристалів є температурний градієнт [95; 256; 257]. Відповідно початковим блоком, що задає динаміку роботи моделі, має бути блок визначення температурного поля розплаву (тобто значення температури у довільній точці простору системи у довільний час) упродовж усього процесу. У його основу доцільно покласти рівняння теплопровідності Фур'є [128; 258; 259]. При формулюванні граничних умов, незважаючи на відносно високі температури, характерні для промислових розплавів, для спрощення математичного формулювання задачі радіаційною складовою тепловідводу з поверхні системи можна зневажити, при цьому дещо збільшивши коефіцієнт тепловідводу з поверхні тіла, яке кристалізується [260].

Другим найбільш суттєвим фізичним явищем, за таких умов, є дифузійний перерозподіл компонентів у розплаві. Тобто зміна концентрації у рідині біля межі розподілу «тверде – рідке» [84; 95] за рахунок різної розчинності другого елемента в рідкому і твердому станах та її подальший перерозподіл у просторі системи при кристалізації сплаву. З огляду на значну різницю коефіцієнтів дифузії у рідині й у твердому стані, зміною концентрації другого компоненту сплаву у твердій фазі можна зневажити [261].

Кількісні значення зміни концентрації у рідкій фазі при виділенні другого компоненту сплаву можна визначити шляхом введення відповідної діаграми стану з її характеристичними точками. Подальша апроксимація ліній ліквідус і солідус дасть змогу обчислити необхідні зміни концентрації рідини після локальних фазових перетворень.

Для опису дифузії другого компоненту в рідині зручно використовувати рівняння Фіка, яке з математичного погляду, є аналогічним рівнянню теплопровідності Фур'є (обидва є рівняннями у часткових

похідних параболічного типу [113; 128]). Граничні умови у такому разі, повинні припускати відсутність обміну речовиною на границях системи. Нерівномірність концентрації другого компонента у рідині, що обумовлена «розділювальною дифузією», можна врахувати зміною початкових умов при кожному новому "тику" системного часу, тобто на кожному дискретному часовому етапі обчислень. Системний час, який є загальним для всіх блоків моделі (алгоритму), синхронізує роботу всього алгоритму і має дискретний характер, тому що розрахунки виконуються на ЕОМ.

Температура і концентрація другого компоненту у кожній точці розплаву визначають розмір локального переохолодження, що розраховується як різниця температури ліквідус для цієї точки і її температури у даний момент часу (рис. 5.1).

Як відомо [95], переохолодження у рідкому стані є основною рушійною силою кристалізації. За його наявності, з'являються умови утворення кристалу або росту вже наявного зародка. Тому на рис. 5.1 розрахунок величини переохолодження є центральним моментом роботи алгоритму моделі.

Також відомо [85; 88], що зростання кристала відбувається при менших переохолодженнях, ніж зріст уже наявного кристалу (рис. 1.3), тобто енергетично ці процеси відрізняються один від одного. Тому може йтися, по-перше, про те, щоб розділити ці процеси, що підкреслено на рис. 5.1 існуванням двох окремих блоків при формуванні твердої фази. А по-друге, з огляду на флуктуаційну природу утворення зародків і росту кристалів за нормальним механізмом, який є характерним для металів [83], бажано привнести у ці процеси елемент випадку. Блок «Формування твердої фази» на рис. 5.1 являє собою клітковий автомат, який управляється блоками «Розрахунок температури рідкого металу», «Розрахунок концентрації в рідині» та «Діаграма стану подвійного сплаву» через блок «Розрахунок величини переохолодження».

Фазовий перехід, якщо він відбувся у певному місці системи, супроводжується виділенням тепла кристалізації і зміною концентрації другого компонента в осередку цієї точки. Ці зміни у системі умовно можна назвати «імпульсами тепла і речовини». Вони формуються у відповідних блоках (рис. 5.1) і враховуються при розрахунках температури і концентрації.

У такий спосіб на рис. 5.1 показана умовна схема взаємодії основних фізичних процесів, які в сукупності являють собою кристалізацію металевих розплавів. Ця схема є основою імітаційної моделі утворення макроструктури при кристалізації.

Наступним кроком при створенні імітаційної моделі є розробка її «внутрішньої структури». Клітинні автомати, що запропоновані в синергетиці для розгляду складних систем з активним середовищем, дають змогу досліджувати розвиток формування структур, які формуються з цих автоматів. Типи структур визначаються прийнятими правилами функціонування кліткових автоматів.

Вибір типу кліткового автомату потрібно здійснювати у такий спосіб, щоб модель (у цьому разі алгоритм) відбивала основні фізичні риси системи, що досліджується [132]. Для цього на якісному рівні розглянемо початкову стадію процесу кристалізації і, знову ж таки застосуємо метод аналогій.

В початковому стані температура рідкого металу або розплаву перевищує температуру кристалізації або температуру ліквідус (далі для спрощення будемо розглядати розплав і, відповідно, говорити про температуру ліквідус). Завдяки тепловіддачі у навколишнє середовище, температура системи (розплаву) зменшується і досягає точки ліквідус. Для початку кристалізації повинно з'явитися переохолодження, яке і з'являється при подальшому охолодженні розплаву. Класична теорія кристалізації розглядає подальшу течію цього процесу при певному сталому переохолодженні. Але за реальних умов для більшості технологічних процесів швидкість охолодження значна. І у цьому разі система знаходиться у нестационарному стані. З одного боку, тепло від об'єкта, в якому

відбувається кристалізація, продовжує відводитися у навколишнє середовище. А з іншого, – починає виділятися прихована теплота кристалізації. Зазвичай, загальний тепловідвід у навколишнє середовище перевищує тепловий потік, який з’являється завдяки утворенню твердої фази. Тобто переохолодження, щонайменше, не зникає, а навпаки – збільшується. Формується відносно значна зона простору, в якій існує переохолодження, величина якого змінюється як у просторі, так і в часі. Цю зону з переохолодженням за аналогією (про що йшлося у Розділі 1) можна розглядати як активне середовище. Справді, рідка фаза у цьому місці знаходиться в хитливому стані і будь-яка флуктуація може змінити фазовий стан довільного елементу простору – сформувати початковий кристал (або зародок). При цьому умови його подальшого росту зберігаються внаслідок наявного переохолодження, яке також зберігається. Можна (і, мабуть, потрібно) зазначити про принципову нелінійність цього процесу, адже точка простору, в якій здійснився фазовий перехід, є точкою біфуркації, тобто точкою втрати стійкості, а це явище є типово нелінійним [129; 155].

Ураховуючи принциповий вплив флуктуацій на процес кристалізації кліткового автомата, у цьому випадку, має бути ймовірнісним [155], і це потрібно відбити в умовах функціонування його елементів.

Найближчими сусідами будь-якої чарунки кліткового автомату виберемо околицю Мура. Такий вибір є більш універсальним і не має сприятливої просторової орієнтації.

Визначившись із основними фізичними явищами, що являють собою кристалізацію металевих розплавів, необхідно розробити загальний алгоритм імітаційної моделі.

5.2 Розробка загального алгоритму імітаційної моделі кристалізації металів і сплавів

Алгоритм моделі будується за допомогою основних прийомів системного аналізу, тобто шляхом декомпозиції системи, що досліджується, на окремі блоки (підсистеми) і визначення зв'язків між ними [174]. Звичайно, при цьому потрібно буде ввести деякі фізичні припущення і спрощення, тому що будь-яка модель відбиває основні, суттєві ознаки об'єкта, що моделюється.

У такому разі перед побудовою загального алгоритму імітаційної моделі, необхідно здійснити математичну постановку теплової та дифузійної задач. Потім визначити методи їх розв'язку та апроксимувати характеристичні лінії діаграми стану відповідного сплаву. Необхідно також визначити механізми утворення зародків твердої фази та їх подальшого росту. Після цього – скласти блок-схему самого алгоритму, у якій було б реалізовано математичні моделі теплової, дифузійної задач та формалізовані лінії діаграми стану відповідного сплаву, встановлені правила функціонування кліткового автомату, з урахування специфіки процесів утворення і росту кристалів. У цій блок-схемі алгоритму потрібно розробити і реалізувати метод ідентифікації окремих макрозерен, що утворюються в процесі кристалізації. І зрештою, визначити вихідну інформацію, яку можна отримати у процесі подальшої дослідної роботи з розробленою моделлю та сформулювати її зручний інтерфейс.

5.2.1 Математичні моделі для визначення температури в системі і концентрації другого компоненту в розплаві

Розглянемо постановку задачі теплообміну, що виникає при розрахунку охолодження прямокутної проби. Вважатимемо, що тіло є однорідним і воно характеризується постійними у всій розрахунковій

області значеннями питомої об'ємної теплоємності $c' = \frac{c}{\rho}$ Дж/(м·град) (тобто відношення питомої теплоємності до густини) і коефіцієнта теплопровідності q Вт/(м·град В).

В основі математичного формулювання задачі, що аналізується, лежить закон зберігання енергії, який виражається рівнянням:

$$c' \frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = \operatorname{div}(q(x, y, t)), \quad x, y \in G, \quad (5.1)$$

де: $q(x, y, t)$, $T(x, y, t)$ – щільність теплового потоку та його температура в точці з координатами x, y в момент часу t ; G – розрахункова область простору.

З огляду на зазначені вище допущення і застосовуючи закон Фур'є

$$q(x, y, t) = -\lambda \cdot \operatorname{grad}(T(x, y, t)), \quad (5.2)$$

одержимо рівняння теплопровідності, яке описує зміну температурного поля в часі [113; 265]:

$$c' \frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = \operatorname{div}(\lambda \operatorname{grad}(T(x, y, t))). \quad (5.3)$$

При постановці крайових умов для рівняння теплопровідності (5.3) потрібно задати розподіл температури в початковий момент часу $T(x, y, 0)$:

$$T(x, y, 0) = T(x, y), \quad x, y \in G \quad (5.4)$$

і сформулювати граничну умову, що виражає особливості теплообміну на поверхні, яка відокремлює область G від навколишнього середовища. При цьому передбачається співвідношення між температурою $T_w(x, y, t)$ і щільністю теплового потоку $q(x, y, t)$ на поверхні тіла (тобто гранична умова 3 роду [113; 128]):

$$q = f(T_w), \quad (5.5)$$

що описується законом Ньютона-Ріхмана. Тобто тепловідвід у навколишнє середовище відбувається винятково за рахунок конвекції.

Розглянемо постановку двовірної задачі теплопровідності, що виникає при розрахунку температури прямокутної заготовки [265] та враховує

виділення теплоти при фазових перетвореннях. Охолодження тіла відбувається з усіх чотирьох сторін площини, а температурне поле змінюється лише у площині, перпендикулярній осі тіла. Тобто розглядаємо нескінченно тонкий поперечний зріз прямокутного тіла.

Введемо у цій площині систему координат OXY і визначимо через δ_x довжину тіла, а через δ_y – його ширину.

Припускаючи, що теплофізичні характеристики металу, що охолоджується, не залежать від температури (тобто $c, \rho, \lambda = const$), запишемо в області $0 \leq x \leq \delta_x, 0 \leq y \leq \delta_y$ рівняння теплопровідності (5.3) у такому вигляді:

$$\frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = a \left(\frac{\partial^2 T(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T(x, y, t)}{\partial y^2} \right) \pm F(x, y, t), \quad (5.6)$$

де: $a = \frac{\lambda}{c}$ – коефіцієнт температуропровідності; $F(x, y, t)$ – нелінійний додатковий член, який враховує виділення (чи поглинання) теплоти при фазовому перетворенні.

Фізичний зміст $F(x, y, t)$ досить зрозумілий. Це «імпульс» тепла, який існує один «тік» системного часу в точці або в декількох точках, де пройшло фазове перетворення [263]. Тобто загальний вид функції $F(x, y, t)$ постійно змінюється. Знак «+» буде у випадку кристалізації, а «–» у разі плавлення. У праці [148] показано, що цей додатковий член може мати вигляд:

$$F(x, y, t) = \frac{L}{c} \frac{\partial \varepsilon(x, y, t)}{\partial t}, \quad (5.7)$$

де $\varepsilon(x, y, t)$ – частка твердої фази в деякому елементарному об'ємі $\delta x \cdot \delta y$.

Граничні умови з усіх сторін є граничними умовами 3-го роду (5.5), що відповідає постійним значенням температури навколишнього середовища $T_0 = const$ і коефіцієнтів тепловідводу з чотирьох боків $\alpha_1 - \alpha_4$:

$$\frac{\partial T(0, y, t)}{\partial x} = -\alpha_1 [T(0, y, t) - T_c], \quad (5.8)$$

$$\frac{\partial T(\delta_x, y, t)}{\partial x} = -\alpha_2 [T(\delta_x, y, t) - T_c], \quad (5.9)$$

$$\frac{\partial T(x, 0, t)}{\partial y} = -\alpha_3 [T(x, 0, t) - T_c], \quad (5.10)$$

$$\frac{\partial T(x, \delta_y, t)}{\partial y} = -\alpha_4 [T(x, \delta_y, t) - T_c], \quad (5.11)$$

де: T_c – температура навколишнього середовища; $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$ – коефіцієнти тепловіддачі з чотирьох сторін системи.

Саме для такого виду граничних умов досить просто моделювати різні варіанти охолодження тіла, які трапляються на практиці. Наприклад, охолодження розплаву може відбуватися у кокіль чи у піщаній формі, з усіх боків чи з одного або декількох тощо. Досить великий набір практично цікавих випадків можна отримати регулюванням коефіцієнтів тепловідводу $\alpha_1 - \alpha_4$.

Припускаючи, що в початковий момент часу тіло є рівномірно прогрітим до температури T_n , запишемо більш детально початкову умову (5.4):

$$T(x, y, 0) = T_0 = \text{const}. \quad (5.12)$$

Отже, математична постановка задачі для розрахунку температури у довільний момент часу в кожній точці системи (тобто математична модель теплопровідності) складається з виразів (5.6)–(5.12) і в сукупності вони складають задачу (5.13):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = a \left(\frac{\partial^2 T(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T(x, y, t)}{\partial y^2} \right) \pm \frac{L}{c} \frac{\partial \varepsilon(x, y, t)}{\partial t}, \\ T(x, y, 0) = T_0 = \text{const}, \\ \frac{\partial T(0, y, t)}{\partial x} = -\alpha_1 [T(0, y, t) - T_c], \\ \frac{\partial T(\delta_x, y, t)}{\partial x} = -\alpha_2 [T(\delta_x, y, t) - T_c], \end{array} \right. \quad (5.13)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial T(x, 0, t)}{\partial y} &= -\alpha_3 [T(x, 0, t) - T_c], \\ \frac{\partial T(x, \delta_y, t)}{\partial y} &= -\alpha_4 [T(x, \delta_y, t) - T_c]. \end{aligned} \right\}$$

Математичну модель процесу дифузії можна побудувати майже аналогічно [264]. Це обумовлено тим, що рівняння теплопровідності Фур'є та рівняння дифузії Фіка розрізняють тільки за назвами процесів, що досліджуються (і, мабуть, радше за історичним принципом). Згідно з математичною класифікацією це єдине рівняння, яке належить до рівнянь у часткових похідних параболічного типу [113; 128]. Тобто за умови незалежності коефіцієнта, дифузії D від координат та часу можна записати:

$$\frac{\partial K(x, y, t)}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 K(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 K(x, y, t)}{\partial y^2} \right), \quad (5.14)$$

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

Відомо [265], що коефіцієнт дифузії значною мірою залежить від температури, в рази змінюючи своє значення. Водночас температуропровідність також залежить від хімічного складу сплаву. Але на цьому етапі ефектами взаємовпливу знехтуємо, що значно спрощує математичне формулювання задачі. За потреби, зробити відповідні корективи принципово можливо.

Як і в задачі теплопровідності, необхідно задати граничні умови, що визначають поведінку системи на межах розрахункової області. На відміну від температурної задачі, де враховується тепловідвід від поверхні, у дифузійній задачі обміну речовиною на межах області, що досліджується, немає. Тому граничні умови запишемо у такому вигляді:

$$\frac{\partial K(0, y, t)}{\partial x} = 0, \quad (5.15)$$

$$\frac{\partial K(\delta_x, y, t)}{\partial x} = 0, \quad (5.16)$$

$$\frac{\partial K(x, 0, t)}{\partial y} = 0, \quad (5.17)$$

$$\frac{\partial K(x, \delta_y, t)}{\partial y} = 0. \quad (5.18)$$

Початкова умова має на увазі деякий початковий (рівномірний або нерівномірний) розподіл концентрації другого компонента в розплаві:

$$K(x, y, 0) = K_0(x, y). \quad (5.19)$$

Щодо цієї умови є деякі зауваження. Середню концентрацію за об'ємом розплаву з високою точністю можна вважати сталою до початку кристалізації. Тобто, доти, доки не відбудеться фазове перетворення (кристалізація) якогось початкового мікрооб'єму, дифузії у рідкій фазі немає. Поява першої кількості твердої фази призводить до виділення або поглинання другого компонента, змінюється концентрація $K_0(x, y)$ і дифузія відбувається у локальних мікрообластях рідкої фази. У твердій фазі дифузійний процес майже не відбувається за рахунок значно меншого коефіцієнта дифузії [261]. Загалом можна підрахувати вирівнювання концентрації за макрозерном, але при цьому, враховуючи швидкості такого процесу у рідкій і в твердій фазі, це немає сенсу.

У такий спосіб загальна математична постановка задачі для визначення концентрації другого компонента сплаву об'єднує рівняння (5.14)–(5.19):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial K(x, y, t)}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 K(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 K(x, y, t)}{\partial y^2} \right), \\ K(x, y, 0) = K_0(x, y) \\ \frac{\partial K(0, y, t)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial K(\delta_x, y, t)}{\partial x} = 0, \end{array} \right. \quad (5.20)$$

$$\frac{\partial K(x, 0, t)}{\partial y} = 0,$$

$$\frac{\partial K(x, \delta_y, t)}{\partial y} = 0.$$

Тобто задача (5.20) майже подібна до задачі (5.13), і якщо в останній вважати рівними нулю коефіцієнти теплопроводу $\alpha_1 - \alpha_4$, то (5.13) стане аналогічною до (5.20). Ця обставина спрощує практичну реалізацію алгоритму.

Залишилася ще одна обставина, що не була врахована задачею (5.20). Вона складена для всього простору, в якому відбувається твердіння розплаву. Але при кристалізації сплаву з'являються області, де є тверда фаза, в якій другого компоненту менше (або більше, що залежить від конкретної діаграми стану) за рахунок розділової дифузії. Дані області твердої фази впливатимуть на розрахунки концентрації в рідині тому, що в ці місця, передусім, буде прагнути «перерозподілитися» другий компонент, чого не відбувається у реальному процесі. Тобто потрібно у якийсь спосіб «заборонити» другому компоненту «входити» у тверду фазу (або «виходити» з неї). У теоретичних посібниках такі задачі не розглядалися, тому необхідно у залежності від конкретного шляху розв'язку задачі (5.20), розробити потрібні заходи.

З огляду на те, що в імітаційній моделі кристалізації передбачене використання кліткового автомата, зручно задачі теплопередачі та дифузії вирішувати чисельно. Ураховуючи необхідність вводу системного часу у моделі, порядок розрахунків має бути таким: передусім чисельно розв'язується задача (5.13), в якій крок за часом i задає системний час роботи імітаційної моделі. Один крок системного часу є часом розрахунку дифузійної задачі (5.20), на якому щоразу змінюється $K_0(x, y)$ у початковій умові відповідно до перетворень у локальних областях та за діаграмою стану бінарного сплаву.

5.2.2 Математична модель діаграми стану бінарного сплаву з евтектикою

Аналіз літературних даних [197; 266; 267] стосовно діаграм стану подвійних сплавів з евтектикою свідчить, що в багатьох випадках для приблизного математичного опису відповідних ліній можна використовувати лінійну апроксимацію [261] (рис. 5.2). у такому разі зручно використати рівняння прямої, яка проходить через дві точки. Для ліній ліквідус лінійні рівняння мають вигляд:

$$T_{L1,2} = T_{кр1,кр2} - (T_{кр1,кр2} - T_e) \frac{C_l}{C_e}, \quad (5.21)$$

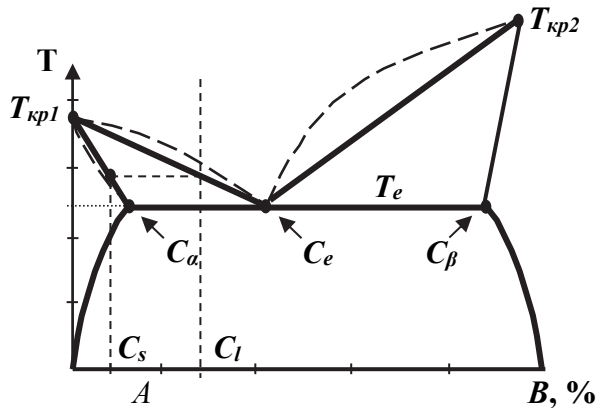


Рис. 5.2 Діаграма стану бінарного сплаву з евтектикою:

$T_{кр1}, T_{кр2}$ – температури початку кристалізації чистих компонентів A і B ;
 T_e – температура кристалізації евтектики;

C_α, C_β – максимальні розчинності в α - і β - твердих розчинах, відповідно, компонентів A і B ;

C_e – евтектична концентрація;

C_l – концентрація компонента B в розплаві;

C_s – концентрація компонента B у твердому розчині

де: $T_{кр1}, T_{кр2}$ – температури початку кристалізації чистих компонентів A і B ; T_e – температура кристалізації евтектики; C_l – концентрація компонента B в розплаві; C_e – евтектична концентрація.

Концентрацію твердого розчину при температурі $T(t)$ також можна визначити за допомогою рівняння прямої (5.21). Для α -твердого розчину

$$C_{s1} = C_\alpha \frac{T_{кр1} - T(t)}{T_{кр1} - T_e}, \quad (5.22)$$

та для β -твердого розчину

$$C_{s2} = C_\beta \frac{T_{кр2} - T(t)}{T_{кр2} - T_e}, \quad (5.23)$$

де: C_α , C_β – максимальні розчинності в α - і β -твердих розчинах, відповідно, компонентів A і B ; C_{s1} – концентрація компонента B в α -твердому розчині; C_{s2} – концентрація компонента A в β -твердому розчині.

У такий спосіб, маючи інформацію про характеристичні точки діаграми стану конкретного подвійного сплаву з евтектикою та знаючи температуру розплаву у цій точці, можна розрахувати переохолодження у цій точці, використовуючи рівняння (5.21)–(5.23).

Згідно з досвідом розрахунків, які виконував автор у різноманітних наукових дослідженнях, помилками, що дає лінійна апроксимація ліній ліквідус, зазвичай, можна знехтувати. За необхідності підвищення точності, можна зробити їх апроксимацію другого порядку. Хоча на прикладі діаграми Al-Si потрібно зауважити, що розбіжності у різних літературних джерелах для неї значні [197; 266; 267].

5.2.3 Побудова блок-схеми загального алгоритму імітаційної моделі кристалізації металів і сплавів

Зазвичай будь-який алгоритм, який призначений для проведення розрахунків, починається з вводу початкових даних. У такому разі необхідно ввести: параметри для теплової та дифузійної задач; характеристичні точки діаграми стану відповідного сплаву; теплофізичні характеристики металу або сплаву; параметри числової схеми; геометричні розміри; наявність і кількість модифікатору (твердих часток) у розплаві; вплив (або його відсутність) стінок форми; різні емпіричні параметри. Тому загальна блок-схема (рис. 5.3, а, б) алгоритму імітаційної моделі кристалізації бінарного сплаву, що відбиває фізичні процеси появи і росту кристалів у розплаві під впливом зовнішніх умов, починається з блоку 1, у якому здійснюється ввід початкової інформації, до якої відносяться:

- 1) початкова температура усередині розплаву;
- 2) температура навколишнього середовища ліворуч;

- 3) температура навколишнього середовища праворуч;
- 4) температура навколишнього середовища знизу;
- 5) температура навколишнього середовища зверху;
- 6) коефіцієнт тепловіддачі ліворуч;
- 7) коефіцієнт тепловіддачі праворуч;
- 8) коефіцієнт тепловіддачі знизу;
- 9) коефіцієнт тепловіддачі зверху;
- 10) коефіцієнт дифузії;
- 11) температура кристалізації чистого металу;
- 12) температура кристалізації евтектики;
- 13) початкова концентрація;
- 14) концентрація евтектики;
- 15) концентрація максимальної розчинності;
- 16) густина;
- 17) питома теплоємність;
- 18) питома прихована теплота кристалізації;
- 19) коефіцієнт теплопровідності;
- 20) довжина об'єкта, що досліджується;
- 21) ширина об'єкта, що досліджується;
- 22) час спостереження;
- 23) інтервал метастабільності для утворення центрів кристалізації;
- 24) інтервал метастабільності для швидкості росту кристалів;
- 25) максимальне переохолодження для утворення центрів кристалізації;
- 26) максимальне переохолодження для швидкості росту кристалів;
- 27) емпіричний коефіцієнт адаптації;
- 28) температура закінчення розрахунків;
- 29) вміст модифікатора (запального типу) в рідкому металі;
- 30) «вплив» стінок виливниці.

Розмірність усіх вхідних даних алгоритму імітаційної моделі відповідає

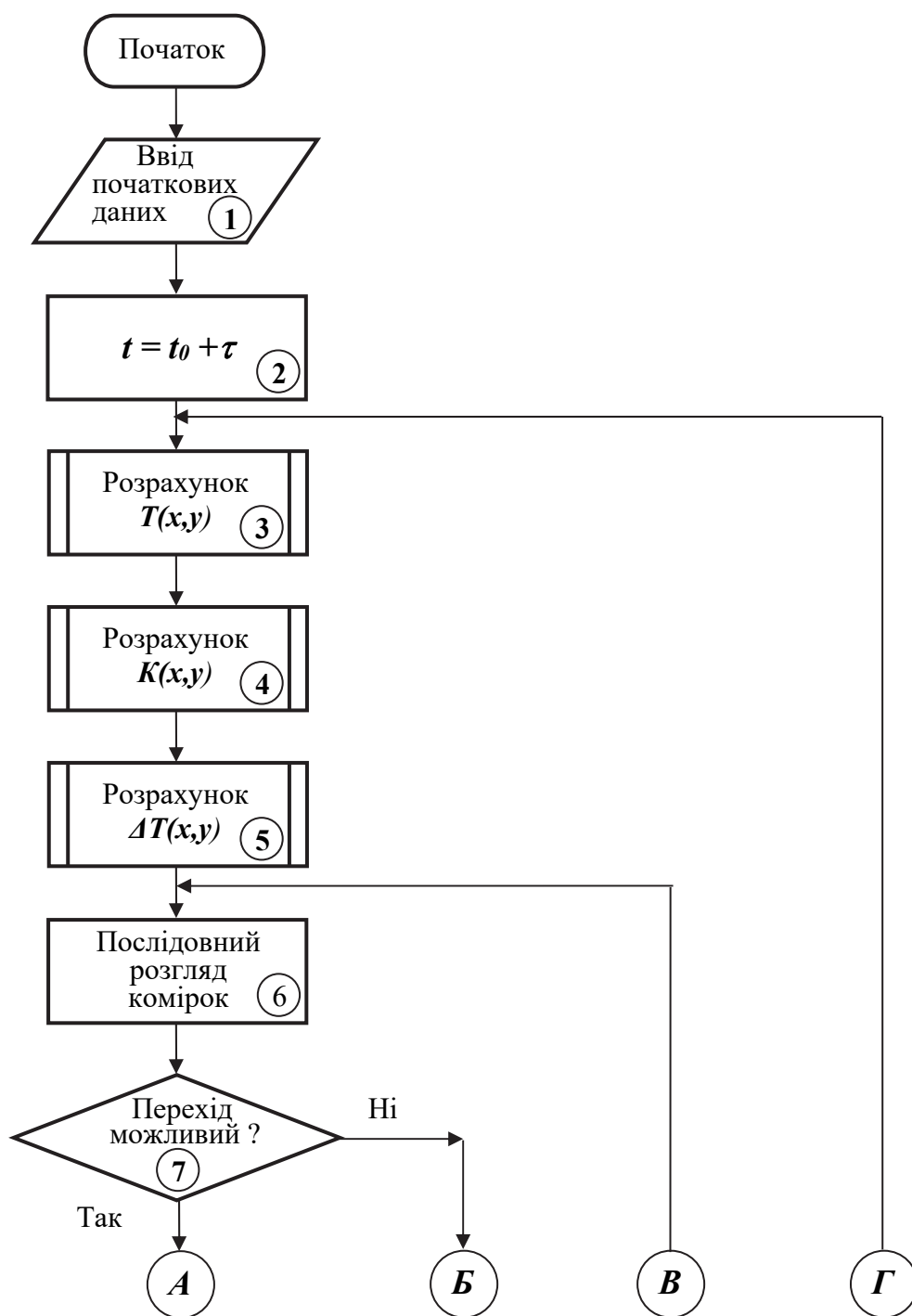


Рис. 5.3 а – Блок-схема загального алгоритму імітаційної моделі утворення структури при кристалізації

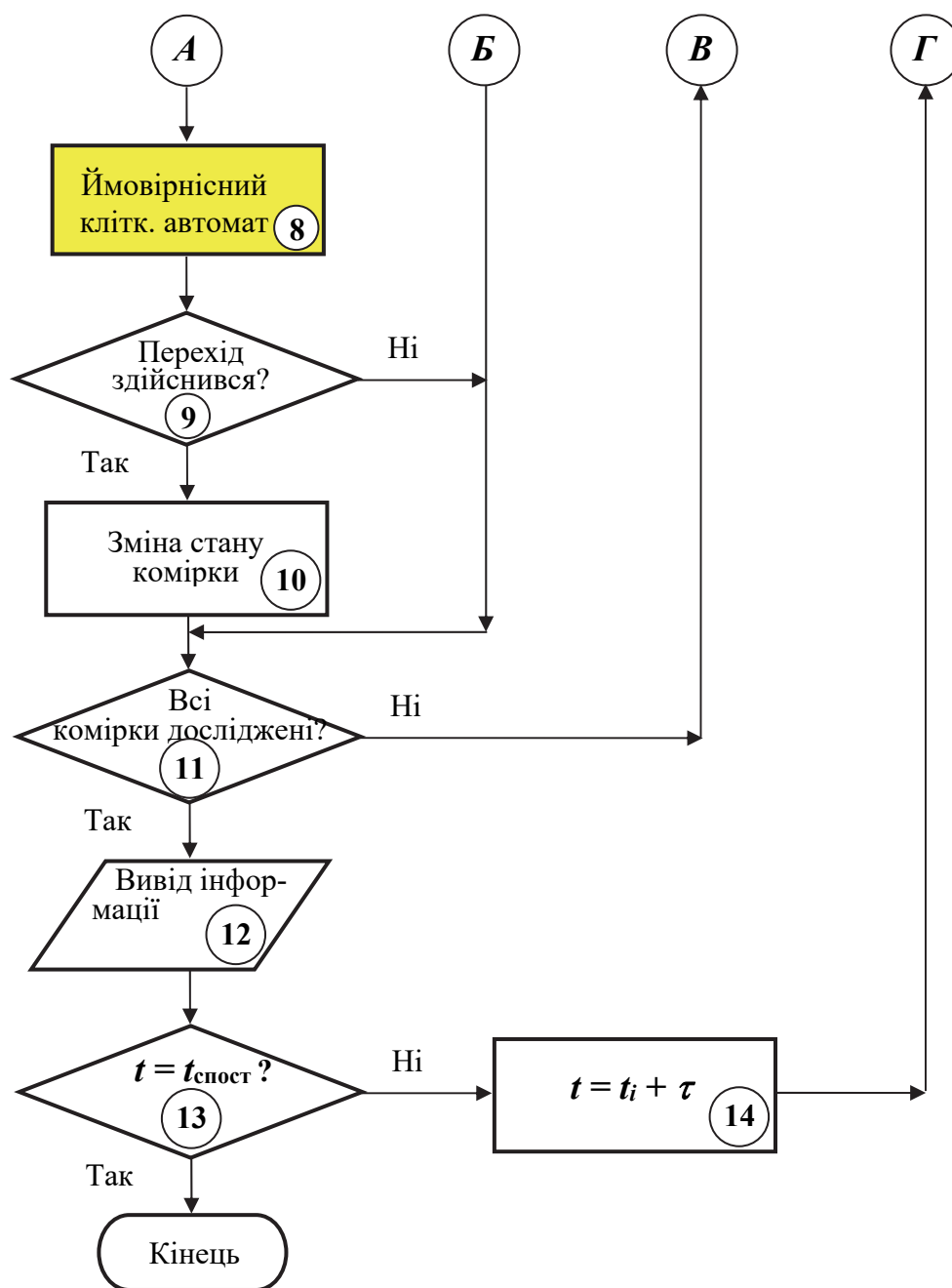


Рис. 5.3 б – Блок-схема загального алгоритму імітаційної моделі утворення структури при кристалізації

Розмірність усіх вхідних даних алгоритму імітаційної моделі відповідає системі СІ.

У блоці 2 починається розрахунок і до початкового часу t_0 додається перший часовий інтервал τ зміщення у системному часі моделі (або перший «тік» системного часу). Потім послідовно розраховуються температура розплаву $T(x,y)$ (блок 3), концентрація другого компонента у розплаві $K(x,y)$ (блок 4) та величина переохолодження $\Delta T(x,y)$ (блок 5). Тут використовуються підпрограми, які являють собою реалізації числових схем, розраховуються математичні задачі (5.13), (5.20) та використовується апроксимація діаграми стану (5.21–5.23). Визначивши температуру і концентрацію компонента сплаву B , можна розрахувати величину переохолодження в даний момент часу у цій точці.

У межах цієї моделі метал, що твердіє, розглядається як двовимірний масив, кожен з елементів якого може бути або в рідкому, або у твердому станах. Блок 6 виконує певні диспетчерські функції, тобто послідовно організує перегляд усіх точок. Переохолодження є «рушійною силою» процесу кристалізації. Тому за його наявності виникає можливість фазового переходу «рідина – тверде тіло». У блоці 7 здійснюється керування напрямом роботи алгоритму. Якщо фазовий перехід може відбутися, то залучається до розрахунків клітковий автомат (блок 8), якщо ні, то продовжується перегляд комірок (блоки 6 та 11).

У блоці 9 перевіряється стан комірки, яка є центральною у клітковому автоматі (блок 8), і якщо фазове перетворення здійснилося, то воно фіксується у блоці 10. Там само формується інформація про виділення прихованої теплоти кристалізації і зміну концентрації другого компонента в локальній області біля точки, в якій метал кристалізувався. Після того, як всі комірки будуть досліджені (блок 11), на монітор комп'ютера виводиться інформація щодо сформованої на цей момент часу структури металу, що кристалізується, а необхідні розрахункові величини заносяться у відповідні файли (блок 12). Розрахунки на даному інтервалі системного часу

закінчилися. Перевіряється умова загального припинення обчислювань (блок 13). Якщо обчислювання потрібно продовжити, то системний час моделі збільшується на один інтервал τ або на один «тік» (блок 14), і виконання розрахунків передається на блок 3, з урахуванням інформації, що сформована в блоці 10.

Розглянемо детальніше структуру блоку 8, який реалізує клітковий автомат. У загальному вигляді вона представлена на рис. 5.4. Його робота починається з огляду найближчих сусідів чарунки, в якій є переохолодження і можливе фазове перетворення (блок 8-1), тобто сусідів з околиці Мура. Після цього приймається рішення: або з'являється новий центр кристалізації, або зростає уже наявний кристал (блок 8-2). Вище зазначалося, що зростання кристала відбувається при менших переохолодженнях, ніж утворення нового центру кристалізації. Тобто енергетично ці процеси відрізняються один від одного і тому вони розділені. Якщо є хоч один «твердий сусід» в околиці Мура, то можливим є зріст вже утвореного кристала. За інших умов можливе зародження нового центру. Для підкреслення енергетичних розходжень процесів утворення і росту кристалу, вводяться деякі «бар'єри», розмір яких визначається переохолодженням у цій точці і розраховується на основі співвідношень (1.3) та (1.4) (розділ 1).

Для визначення цих бар'єрів, введемо поняття максимального переохолодження для швидкості утворення центрів кристалізації (n_c) ΔT_{max2} і для швидкості росту наявного кристалу (v_k) ΔT_{max1} (рис. 5.5). Тоді залежності основних параметрів кристалізації від переохолодження ΔT , про які йшлося у Розділі 1 (рис. 1.3), і які загалом вважаються зростаючою функцією параболічного типу, можна апроксимувати лінійними функціями (рис. 5.5). При $\Delta T = \Delta T_{m2}$ або $\Delta T = \Delta T_{m1}$ ймовірність появи нового центру кристалізації чи зростання вже наявного кристалу, дорівнює одиниці. При $\Delta T \leq \Delta T_{m2}$ і $\Delta T \geq \Delta T_{m1}$ ймовірність утворення зародка твердої фази дорівнює нулю, але може зростати вже наявний кристал. За умови $\Delta T \leq \Delta T_{m2}$ і $\Delta T \leq \Delta T_{m1}$ фазові перетворення не відбуваються.

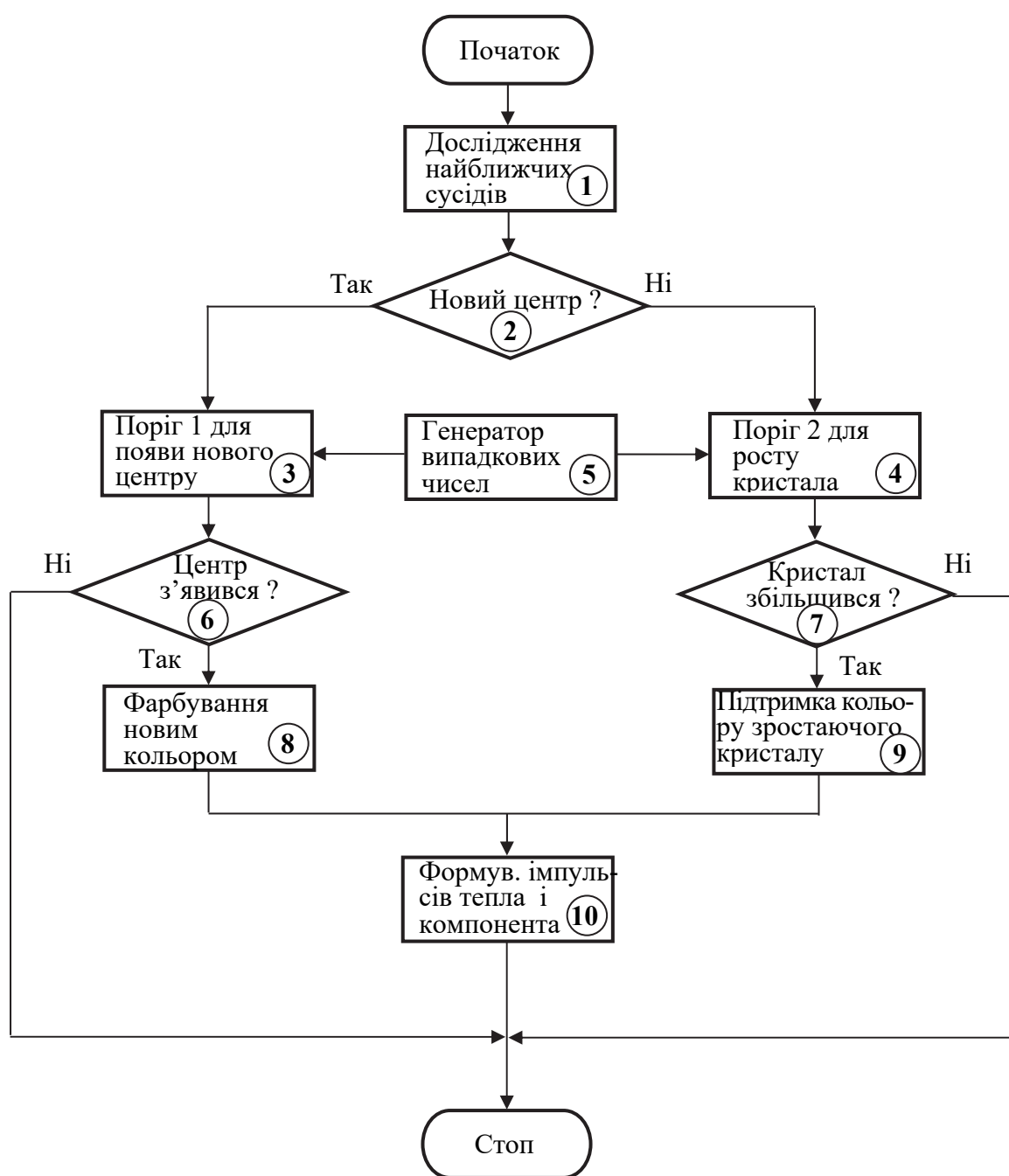


Рис. 5.4 Блок-схема ймовірнісного кліткового автомата імітаційної моделі кристалізації

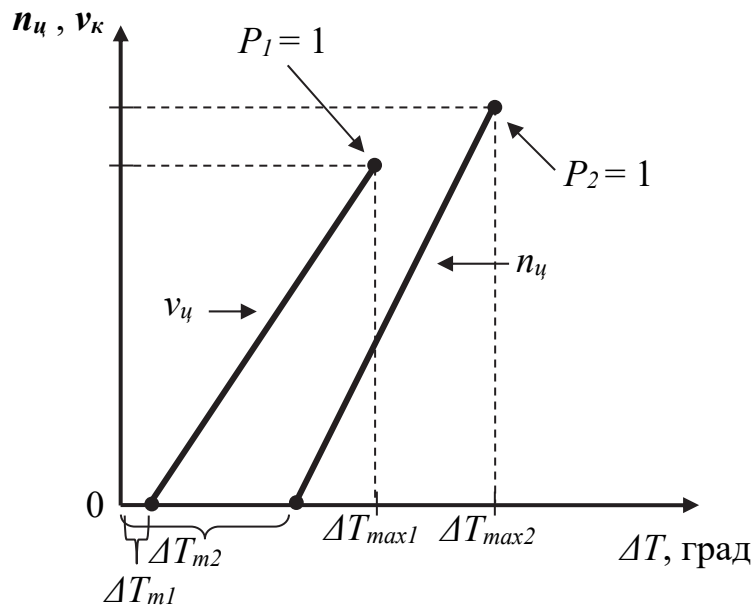


Рис. 5.5 Апроксимація залежностей основних параметрів кристалізації (швидкість утворення центрів кристалізації n_u і лінійна швидкість росту кристалу v_k) від величини переохолодження ΔT :

ΔT_{m1} – інтервал метастабільності для швидкості росту кристалу; ΔT_{m2} – інтервал метастабільності для швидкості утворення центрів кристалізації;

ΔT_{max1} – максимальне переохолодження для швидкості росту кристалу;

ΔT_{max2} – максимальне переохолодження для швидкості утворення центрів кристалізації;

P_1 – умовний поріг перетворення для лінійної швидкості росту кристалу;

P_2 – умовний поріг перетворення для утворення центрів кристалізації

Аналітично ймовірнісні пороги для утворення центрів кристалізації P_2 та для зростання вже наявного кристала P_1 можна записати у такий спосіб:

$$P_1 = 1 - \frac{\Delta T}{\Delta T_{m1}}, \quad (5.24)$$

$$P_2 = 1 - \frac{\Delta T}{\Delta T_{m2}}. \quad (5.25)$$

У блоках 8-3, 8-4 (рис. 5.4) визначаються ці умовні «пороги» (або «бар'єри») для кожної точки системи, в якій існує переохолодження. Після розрахунку відповідного бар'єра у блок 8-3 або у блок 8-4 потрапляє випадкове число від генератора випадкових чисел (ГВЧ). Якщо це число перевищує розрахований бар'єр, відбувається фазове перетворення, тобто перехід цієї точки зі стану «рідке» у стан «тверде». Використання генератора випадкових чисел (блок 8-5) є характерною рисою імітаційної моделі [178]. У цій моделі у такий спосіб підкреслюється флуктуаційний характер процесу.

Для прояву на екрані ЕОМ структури, що формується, передбачається колірна диференціація перетворення, що відбулося. Якщо утворюється новий зародок, він має новий колір (блок 8-8). Зростання наявного кристалу підтримується фарбуванням кольором «твердого сусіда» (блок 8-9).

Фазовий перехід супроводжується виділенням тепла кристалізації і підвищенням концентрації другого компонента в осередку цієї точки. Формування відповідних «імпульсів» виконується у блоці 8-10, наявність котрих враховується у блоці 3 загального алгоритму при розрахунках теплового поля і концентрації другого компонента сплаву.

Вихідними даними (блок 12) є:

– файли, в яких у процесі роботи програми записується:

* температура та її похідна у центральній точці на кожному кроці розрахунків для порівняння з реальною кривою охолодження, що потрібно для доведення адекватності моделі та контролю реального експерименту;

* градієнт температур уздовж перетину системи;

- * кількість центрів кристалізації, що з'являються при кристалізації;

- * швидкість утворення центрів кристалізації у процесі кристалізації;

- * кількість твердої фази у процесі кристалізації;

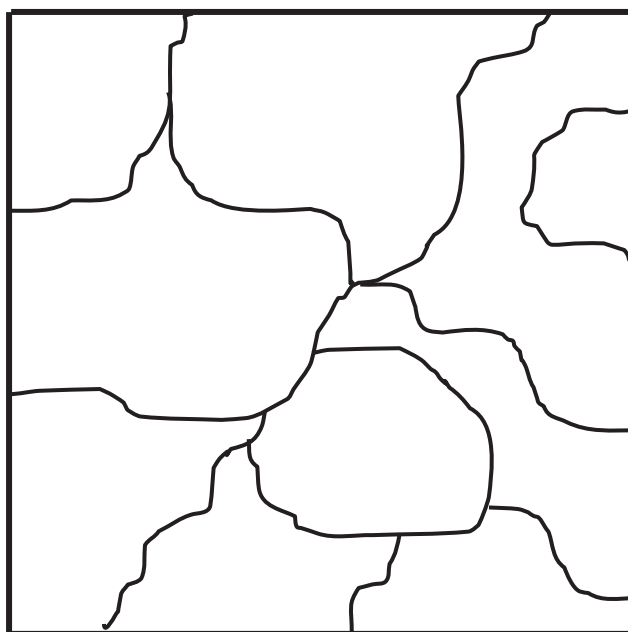
- * швидкість зростання кількості твердої фази під час процесу кристалізації;

- кольорова картинка структури твердого металу, що моделюється клітковим автоматом та чорно-білий її варіант, який дає змогу контрастно виділити границі зерен металу у твердому стані;

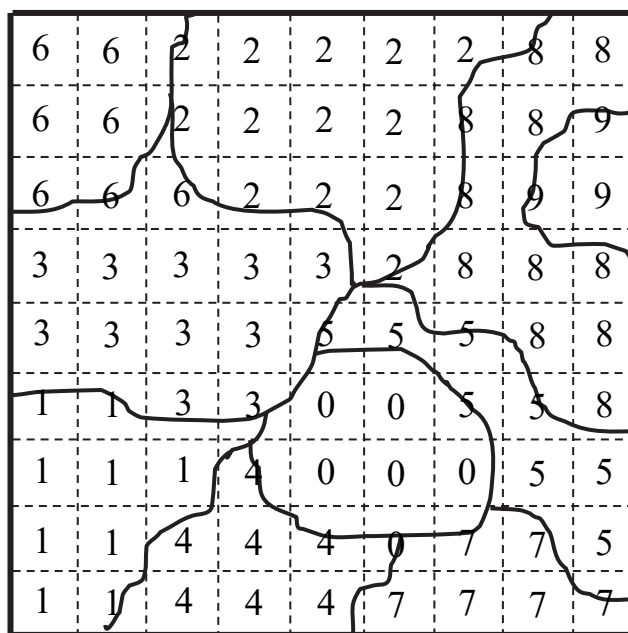
- кількісна оцінка розміру зерна твердого металу.

Кольорова картинка являє собою вікно виводу, що з часом заповнюється кольоровими точками. Кожна точка на моніторі ЕОМ (піксель) являє собою одну чарунку. Чорний колір точки свідчить про те, що цей осередок знаходиться у рідкому (розплавленому) стані. Кольорова точка вказує на те, що цей осередок закристалізувався, причому колір вказує про належність до визначеного покоління клітин, тобто кожна нова чарунка (у кожному поколінні) відзначається своїм кольором. Окремий кристал, що росте, зберігає колір першої точки-центра.

Однак для реалізації функції моделі стосовно визначення розмірів зерна за методикою, яка є стандартною у металографічному аналізі, потрібне більш чітке «бачення» зерна. Кольоровий спосіб визначення меж зерен у цьому випадку не дуже вдалий. Тому було розроблено інший спосіб визначення границь зерен, сутність якого полягає в тому, що при переході чарунки у твердий стан за відсутності твердих сусідів, їй надається свій (новий) номер (рис. 5.6). За наявності для неї «твердих» сусідів, які існують в області Мура, номер випадково вибирається із їх номерів. Завдяки цьому, в пам'яті ЕОМ формується структура зерна так, як представлено на рис. 5.6 «б». Тобто можна спостерігати за еволюцією структури металу і,



а)



б)

Рис. 5.6 Вигляд структури твердого металу на екрані комп'ютера
(а) та в його пам'яті (б)

проаналізувавши її, стверджувати про якість і службові властивості і стан металу, що кристалізується.

Середній розмір зерна Z розраховується за формулою:

$$Z = \frac{\sum_{i=1}^N L_i}{N}, \quad (5.26)$$

де: L_i – довжини відрізків при перетинанні зерен; N – кількість перетин границь зерен.

Для одержання залежності швидкості утворення центрів кристалізації від часу на кожному кроці системного часу, підраховується кількість центрів, які з'явилися.

При роботі програми додатково виводиться інформація про наявність переохолодження у площині системи. Якщо температура розплаву є меншою за температуру ліквідус, то ця ділянка позначається білим кольором. Це дає змогу слідкувати за станом рідкого металу і визначати наявність концентраційного переохолодження попереду фронту «рідке – тверде», якщо воно існує [268; 269].

В окремому файлі зберігається інформація про зміну температури в центральній точці системи. Також зарезервована можливість додаткового виводу інформації щодо температури у системі у довільних точках, тобто моделюється розташовування додаткових «термопар». Це, за необхідності, допомагає аналізувати інформацію, яка отримується в реальному експерименті за допомогою термічного аналізу.

При створенні програми, що реалізує цей алгоритм, використовувалися принципи об'єктно-орієнтованого програмування, які полягають у тому, що дані об'єднуються з властивими їм операціями опрацювання в деякі об'єкти, причому властивості одних об'єктів можуть передаватися іншим (переноситися на інші класи об'єктів).

На першому етапі програмування основну задачу розділили на дві підзадачі. Перша – полягає у написанні основної програми обходу даних, а

друга – у створенні розрахункових блоків-підпрограм: блок запровадження вихідних даних, блоки розрахунку температурного і концентраційного полів, блока переходу чарунки в інший стан і блоку виводу результату на екран.

На другому етапі проводилося почергове розв’язання поставлених задач, тобто створювались вихідні тексти і виконувалось налагодження зазначених частин програм.

Специфічною особливістю даних програм є те, що для розрахункових змінних потрібно використовувати великі об’єми пам’яті. Згадані змінні, а саме розрахункові масиви, мають розміри порядку 400×400 (або 200×200 для сплаву) елементів типу *double* (щонайменше), що спричиняє значні витрати часу на перегляд і особливо, на обчислення елементів цих масивів. У зв’язку з цим, доцільно прийняти низку заходів для оптимізації і прискорення процесу розрахунку моделі.

При побудові самої моделі відповідно до фізики процесу, враховується така властивість металів і сплавів: жодна чарунка не може перейти у твердий стан, тобто кристалізуватися, доки вона не досягне температури початку фазового перетворення, тобто температури ліквідус. З огляду на це, перед переходом до розрахунку концентрації, переохолодження і подальших розрахунків параметрів кристалізації відбувається перевірка температурного поля на рівність поточної температури у кожній точці температурі ліквідус, що дає змогу заощадити час розрахунку моделі кристалізації на декількох десятках перших кроків. Керуючись логікою, розрахунок концентрації проводиться тільки після появи хоча б одного твердого осередку.

5.3 Числова схема розв’язку двовірних задач теплопровідності та дифузії для визначення температури розплаву і концентрації його компонентів

Для числового розв’язку задачі теплопровідності (5.13), використовуємо метод кінцевих різниць. Його основною перевагою є

простота для систем із проста геометрія [270]. Ураховуючи, що ця задача у просторі є двовимірною, використовуємо, безумовно, стійку неявну схему. Задача чисельного розрахунку двовимірного теплового поля (5.13) без додаткового члену $F(x,y,t)$ у рівнянні (5.6), яке відображає виділення теплоти при кристалізації, була розглянута у праці [262]. Модифікацію цієї задачі, яка враховує наявність $F(x,y,t)$, зроблено нижче.

У роботі [262] замість неперервної області просторових змінних $0 \leq x \leq \delta_x$, $0 \leq y \leq \delta_y$, введено кінцеву сукупність дискретно розташованих вузлових точок, що мають координати:

$$x_i = i\Delta x, \quad y_j = j\Delta y, \quad (5.27)$$

де: $i = 0, 1, \dots, N_x$, $j = 0, 1, \dots, N_y$ (номери вузлових точок); Δx , Δy – величини кроків за x і y ; N_x , N_y – кількість елементарних інтервалів на відповідних координатах.

Введено також крок за часом Δt і T_{ij}^k – сіткове значення температурного поля у вузловій точці з координатами (x_i, y_j) у момент часу t_k . Для пошуку дискретного температурного поля T_{ij}^k , необхідно замінити вихідну диференціальну задачу теплопровідності неявною різницевою схемою.

Для побудови різницевої схеми, що апроксимує задачу теплопровідності (5.13), застосовано метод балансу [262], який базується на законах зберігання енергії і переносу тепла, застосованих до дискретного температурного поля.

У такий спосіб отримано систему $(N_x+1)(N_y+1)$ різницевих лінійних алгебраїчних рівнянь щодо невідомих значень сіткових температур T_{ij}^{k+1} :

$$\left(\begin{aligned} T_{i,j}^{k+1} - T_{i,j}^k &= f_x(T_{i+1,j}^{k+1} - 2T_{i,j}^{k+1} + T_{i-1,j}^{k+1}) + f_y(T_{i,j+1}^{k+1} - 2T_{i,j}^{k+1} + T_{i,j-1}^{k+1}), \\ i &= 1, \dots, N_x-1, \quad j = 1, \dots, N_y-1 \\ T_{0,j}^{k+1} - T_{0,j}^k &= f_y(T_{0,j+1}^{k+1} - 2T_{0,j}^{k+1} + T_{0,j-1}^{k+1}) - 2f_x(T_{1,j}^{k+1} - T_{0,j}^{k+1}) - \\ &\quad - 2f_x b_{x_1}(T_{0,j}^{k+1} - T_s), \\ i &= N_x, \quad j = 1, \dots, N_y-1 \\ T_{N_x,j}^{k+1} - T_{N_x,j}^k &= f_y(T_{N_x,j+1}^{k+1} - 2T_{N_x,j}^{k+1} + T_{N_x,j-1}^{k+1}) - 2f_x(T_{N_x,j}^{k+1} - T_{N_x-1,j}^{k+1}) + \end{aligned} \right.$$

$$\begin{aligned}
& + 2f_x b_{x_2} (T_{N_x, j}^{k+1} - T_s), \\
& i = N_x, \quad j = 1, \dots, N_y - 1 \\
T_{i, 0}^{k+1} - T_{i, 0}^k &= f_x (T_{i+1, 0}^{k+1} - 2T_{i, 0}^{k+1} + T_{i-1, 0}^{k+1}) - 2f_y (T_{i, 1}^{k+1} - T_{i, 0}^{k+1}) - \\
& - 2f_y b_{y_3} (T_{i, 0}^{k+1} - T_s), \\
& i = 1, \dots, N_x - 1, \quad j = 0 \\
T_{i, N_y}^{k+1} - T_{i, N_y}^k &= f_x (T_{i+1, N_y}^{k+1} - 2T_{i, N_y}^{k+1} + T_{i-1, N_y}^{k+1}) - 2f_y (T_{i, N_y}^{k+1} - T_{i, N_y-1}^{k+1}) + \\
& + 2f_y b_{y_4} (T_{i, N_y}^{k+1} - T_s), \\
& i = 1, \dots, N_x - 1, \quad j = N_y \tag{5.28} \\
T_{0, 0}^{k+1} - T_{0, 0}^k &= 2f_y (T_{0, 1}^{k+1} - T_{0, 0}^{k+1}) + 2f_x (T_{1, 0}^{k+1} - T_{0, 0}^{k+1}) + \\
& + (2f_x b_{x_1} - 2f_y b_{y_4}) (T_{0, 0}^{k+1} - T_s), \\
& i = 0, \quad j = 0 \\
T_{0, N_y}^{k+1} - T_{0, N_y}^k &= -2f_y (T_{0, N_y}^{k+1} - T_{0, N_y-1}^{k+1}) + 2f_x (T_{1, N_y}^{k+1} - T_{0, N_y}^{k+1}) + \\
& + (2f_x b_{x_1} + 2f_y b_{y_3}) (T_{0, N_y}^{k+1} - T_s), \\
& i = 0, \quad j = N_y \\
T_{N_x, 0}^{k+1} - T_{N_x, 0}^k &= 2f_y (T_{N_x, 1}^{k+1} - T_{N_x, 0}^{k+1}) - 2f_x (T_{N_x, 0}^{k+1} - T_{N_x-1, 0}^{k+1}) - \\
& - (2f_x b_{x_2} + 2f_y b_{y_3}) (T_{N_x, 0}^{k+1} - T_s), \\
& i = N_x, \quad j = 0 \\
T_{N_x, N_y}^{k+1} - T_{N_x, N_y}^k &= -2f_y (T_{N_x, N_y}^{k+1} - T_{N_x, N_y-1}^{k+1}) - 2f_x (T_{N_x, N_y}^{k+1} - T_{N_x-1, N_y}^{k+1}) - \\
& - (2f_x b_{x_2} - 2f_y b_{y_4}) (T_{N_x, N_y}^{k+1} - T_s), \\
& i = N_x, \quad j = 0. \text{ та } T_{i, j}^0 = T_0 = \text{const.}
\end{aligned}$$

Тут введено позначки:

$$f_x = a \frac{\Delta t}{\Delta x^2}, \tag{5.29}$$

$$f_y = a \frac{\Delta t}{\Delta y^2}. \tag{5.30}$$

$$b_{x_1} = \frac{\alpha_1 \Delta x}{\lambda}. \tag{5.31}$$

$$b_{x_2} = \frac{\alpha_2 \Delta x}{\lambda}, \tag{5.32}$$

$$b_{y_3} = \frac{\alpha_3 \Delta y}{\lambda}, \quad (5.33)$$

$$b_{y_4} = \frac{\alpha_4 \Delta y}{\lambda}, \quad (5.34)$$

де: Δt – крок за часом (крок системного часу моделі); a – коефіцієнт теплопровідності; $\alpha_{1,2,3,4}$ – коефіцієнти тепловіддачі з чотирьох сторін.

Для її розв'язку було застосовано ітераційний метод розв'язання систем лінійних рівнянь. Однак проведені обчислення виявили низьку ефективність розрахунків цієї схеми. Аналіз показує, що це є наслідком використання достатньо великих масивів даних (400×400), розміри яких обумовлюються клітковим автоматом. Тобто неефективність числової схеми (5.28) зумовлена значним часом розрахунків та збільшенням похибки «округлення – усікання», яка є характерною для обчислень з використанням ЕОМ, за рахунок зростання обсягу обчислень. Похибка на останніх кроках розрахунків складає понад 50 %. Тобто система алгебраїчних рівнянь (5.28) виявилася, у такому разі, невдалою.

Аналіз спеціальної літератури показав [262; 270], що можна випробувати спеціальні засоби розв'язку цієї задачі, засновані на зведенні двовірної різницевої схеми до сукупності одновірних різницевих схем. Ідея одного з таких засобів полягає у розкладанні двовірної задачі на кожному з координатних напрямків [262; 270]. При цьому розрахунок на кожному кроці за часом проводиться у два етапи. На першому етапі знаходяться деякі проміжні, допоміжні значення $\tilde{T}_{i,j}$, які одержують при заданому вихідному розподілі температури $T_{i,j}^k$, з урахуванням теплопереносу тільки уздовж вісі X . На другому етапі за проміжними значеннями $\tilde{T}_{i,j}$ розраховуються $T_{i,j}^{k+1}$, з урахуванням теплопереносу уздовж вісі Y . Ця схема має назву «схема з розщепленням» [262]. Двовірна задача для розрахунку $\tilde{T}_{i,j}$ за $T_{i,j}^k$ у кінцевих різницях має такий вигляд:

$$\left\{ \begin{array}{l} -f_x \tilde{T}_{i+1,j} + (1 + 2f_x) \tilde{T}_{i,j} - f_x \tilde{T}_{i-1,j} = T_{i,j}^k, \\ i = 1, \dots, N_x - 1, \\ -2f_x \tilde{T}_{1,j} + [1 + 2f_x(1 + b_{x_1})] \tilde{T}_{0,j} = T_{0,j}^k + 2f_x b_{x_1} T_{s_1}, \\ -2f_x \tilde{T}_{N_x-1,j} + [1 + 2f_x(1 + b_{x_2})] \tilde{T}_{N_x,j} = T_{N_x,j}^k + 2f_x b_{x_2} T_{s_2} \end{array} \right. \quad (5.35)$$

та

$$\left\{ \begin{array}{l} -f_y T_{i,j+1}^{k+1} + (1 + 2f_y) T_{i,j}^{k+1} - f_y T_{i,j-1}^{k+1} = \tilde{T}_{i,j}, \\ j = 1, \dots, N_y - 1, \\ -2f_y T_{i,1}^{k+1} + [1 + 2f_y(1 + b_{y_3})] T_{i,0}^{k+1} = \tilde{T}_{i,0} + 2f_y b_{y_3} T_{s_3}, \\ -2f_y T_{i,N_y-1}^{k+1} + [1 + 2f_y(1 + b_{y_4})] T_{i,N_y}^{k+1} = \tilde{T}_{i,N_y} + 2f_y b_{y_4} T_{s_4}. \end{array} \right. \quad (5.36)$$

У наведених рівняннях введено різні температури навколишнього середовища $T_{s_1}, T_{s_2}, T_{s_3}, T_{s_4}$ з різних сторін тіла, яке охолоджується (індекси відповідають тим, що введені вище, тобто: ліворуч, праворуч, знизу і зверху). Це зроблено для того, щоб мати більш гнучку систему моделювання умов охолодження. Вихідна постановка задачі суттєво не змінюється, лише у рівняннях, що мають T_s , біля неї потрібно розставити відповідні індекси.

Як потребує схема з розщепленням, на першому етапі необхідно для кожного $j=0, \dots, N_y$ знайти $\tilde{T}_{i,j}$, шляхом розв'язку системи рівнянь (5.35), що являє собою неявну чотириточкову різницеву схему для одномірної задачі теплопровідності, а на другому етапі визначаємо для $i=0, \dots, N_y$ значення сіткової температури $T_{i,j}^{k+1}$, шляхом розв'язку аналогічної системи рівнянь (5.36).

Отримані системи рівнянь (5.35) та (5.36) є тридіагональними. Для їх розв'язку застосовують метод прогонки [113; 262].

Розв'язок (5.35) знаходять у вигляді:

$$\tilde{T}_{i,j} = \tilde{\alpha}_{i+1} \tilde{T}_{i+1,j} + \tilde{\beta}_{i+1}, \quad (5.37)$$

де $\tilde{\alpha}_{i+1}, \tilde{\beta}_{i+1}$ – прогоночні коефіцієнти у вигляді рекурсивних співвідношень:

$$\tilde{\alpha}_{i+1} = \frac{A_i}{B_i + C_i \tilde{\alpha}_i}, \quad (5.38)$$

$$\tilde{\beta}_{i+1} = -\frac{C_i \tilde{\beta}_i + D_i}{B_i + C_i \tilde{\alpha}_i}. \quad (5.39)$$

тут введено позначки:

$$A_i = -f_x, \quad (5.40)$$

$$B_i = -(1 + 2f_x), \quad (5.41)$$

$$C_i = f_x, \quad (5.42)$$

$$D_i = T_{i,j}^k. \quad (5.43)$$

Граничні умови задачі (5.13) визначають початкові значення прогоночних коефіцієнтів та температуру в точці $\tilde{T}_{N_x,j}$:

$$\tilde{\alpha}_1 = \frac{2f_x}{1 + 2f_x(1 + b_{x_1})}, \quad (5.44)$$

$$\tilde{\beta}_1 = \frac{T_{0,j}^k + 2f_x b_{x_1} T_{s_1}}{1 + 2f_x(1 + b_{x_1})}, \quad (5.45)$$

$$\tilde{T}_{N_x,j} = \frac{T_{N_x,j}^k + 2f_x(\tilde{\beta}_{N_x} + b_{x_2} T_s)}{1 + 2f_x(1 + b_{x_2} - \tilde{\alpha}_{N_x})}. \quad (5.46)$$

У такий спосіб розв'язок системи рівнянь (5.35) шукаємо спершу вираховуючи прогоночні коефіцієнти, потім обчислюємо температуру в останній точці N за формулою (5.46). Врешті знаходимо проміжні температури $\tilde{T}_{i,j}$ уздовж вісі X , починаючи з передостанньої точки $N-1$ і до початкової з номером 0 за виразом (5.37).

На другому етапі обчислень за проміжними значеннями $\tilde{T}_{i,j}$ розраховуються $T_{i,j}^{k+1}$, з урахуванням теплопереносу уздовж вісі Y . Чисельна схема для розрахунку $T_{i,j}^{k+1}$ за $\tilde{T}_{i,j}$ має такий вигляд:

$$T_{i,j}^{k+1} = \alpha_{j+1} T_{i,j+1}^{k+1} + \beta_{j+1}, \quad (5.47)$$

$$\alpha_{j+1} = \frac{A_j}{B_j + C_j \alpha_j}, \quad (5.48)$$

$$\beta_{j+1} = -\frac{C_j \beta_j + D_j}{B_j + C_j \alpha_j}. \quad (5.49)$$

$$\alpha_1 = \frac{2f_y}{1 + 2f_y(1 + b_{y_3})}, \quad (5.50)$$

$$\beta_1 = \frac{\tilde{T}_{i,0} + 2f_y b_{y_3} T_{s_3}}{1 + 2f_y(1 + b_{y_3})}. \quad (5.51)$$

$$T_{i,N_y}^{k+1} = \frac{\tilde{T}_{i,N_y} + 2f_y(\beta_{N_y} + b_{y_4} T_{s_4})}{1 + 2f_y(1 + b_{x_4} - \alpha_{N_y})}. \quad (5.52)$$

Проведені розрахунки показали, що числова схема з розщепленням досить економічна навіть для масивів даних розміром 600×600 , і похибка не перевищує 0,5 %.

При кристалізації відбувається виділення тепла. Це тепло потрібно враховувати при чисельному розрахунку температурного поля. Вважатимемо, що зростання твердої фази в елементарному об'ємі $\partial \varepsilon(x, y, z)$ відбувається миттєво (формула (5.7)). Тобто вибирається достатньо малий крок за часом і достатньо малий об'єм простору. Тоді за цей крок за часом чисельного розрахунку весь елементарний об'єм стає твердим (або рідким, якщо йдеться про плавлення). Функцію теплового джерела $F(x, y, t)$ можна записати у вигляді:

$$Z = \pm \theta_{i,j}^k \frac{LZ^*}{c\Delta t}, \quad (5.53)$$

де: Z^* – емпіричний коефіцієнт адаптації; $\theta_{i,j}^k$ – одинична сходинка, властивістю якої є умова:

$$\theta_{i,j}^k = \begin{cases} 0, & \text{якщо фазове перетворення на } \mathbf{k}\text{-му кроці не відбулося,} \\ 1, & \text{якщо фазове перетворення на } \mathbf{k}\text{-му кроці відбулося.} \end{cases} \quad (5.54)$$

Одиничну сходинку введено для зручності. З її допомогою тепловий імпульс, що з'являється на попередньому k -му кроці за часом, якщо фазовий перехід відбувся, «прив'язується» до координат системи. На роботу загального алгоритму числової схеми вона не впливає.

Емпіричний коефіцієнт адаптації Z^* з'являється за рахунок того, що у «тепловому імпульсі» (5.7), який входить в праву частину рівняння (5.6), присутня похідна за часом від частки твердої фази $\partial \varepsilon(x, y, z)$, яка відповідає елементарному об'єму $\Delta x \times \Delta y$. Вид функції $\partial \varepsilon(x, y, z)$ невідомий. Зважаючи на малість $\Delta x \times \Delta y$, доцільно використати її лінійну апроксимацію і тоді відповідна похідна буде константою, значення якої має сенс підбирати під час налаштування імітаційної моделі в залежності від розмірів тіла, що досліджується, та від конкретних значень Δx та Δy . До того ж, у цьому випадку доречно зазначити, що кількість тепла, що виділяється при кристалізації у довільній точці простору, загалом неважлива. Це обумовлено тим, що процес кристалізації відбувається у тривимірному просторі і відповідне тепло властиве об'єму, а така математична модель «працює» з площиною (двовимірний випадок). Однак уведення допоміжного коефіцієнта є досить поширеним і характерним прийомом імітаційного моделювання [178; 271].

Знак «+» праворуч (5.54) перед останнього члену відповідає процесу кристалізації, а «-» – процесу плавлення.

Уведення у чисельну схему обчислення рівняння теплопровідності функції джерела у вигляді (5.53), призводить до деяких змін у коефіцієнтах. Зокрема, коефіцієнти D_i та D_j набувають вигляду:

$$D_i = T_{i,j}^k \pm \theta_{i,j}^k \frac{L}{c} Z^*, \quad (5.55)$$

$$D_j = \tilde{T}_{i,j} \pm \theta_{i,j}^k \frac{L}{c} Z^*. \quad (5.56)$$

Прогоночні коефіцієнти $\tilde{\alpha}_1$ та α_1 не змінюються, а $\tilde{\beta}_1$ та β_1 будуть відповідно:

$$\tilde{\beta}_1 = \frac{T_{0,j}^k + 2f_x b_{x_1} T_{s_1} \pm \theta_{i,j}^k \frac{L}{c} Z^*}{1 + 2f_x (1 + b_{x_1})}, \quad (5.57)$$

$$\beta_1 = \frac{\tilde{T}_{i,0} + 2f_y b_{y_3} T_{s_3} \pm \theta_{i,j}^k \frac{L}{c} Z}{1 + 2f_y (1 + b_{y_3})}. \quad (5.58)$$

Змінюються і значення граничних температур:

$$\tilde{T}_{N_x,j} = \frac{T_{N_x,j}^k + 2f_x (\tilde{\beta}_{N_x} + b_{x_2} T_s \pm \theta_{i,j}^k \frac{L}{c} Z)}{1 + 2f_x (1 + b_{x_2} - \tilde{\alpha}_{N_x})}, \quad (5.59)$$

$$T_{i,N_y}^{k+1} = \frac{\tilde{T}_{i,N_y} + 2f_y (\beta_{N_y} + b_{y_4} T_{s_4}) \pm \theta_{i,j}^k \frac{L}{c} Z^*}{1 + 2f_y (1 + b_{x_4} - \alpha_{N_y})}. \quad (5.60)$$

У рівняннях (5.55) – (5.60) знаки «+» та «-» відповідають кристалізації та плавленню відповідно. Чисельний розрахунок залишається таким самим і виконується за схемою прогонки.

Числова схема для математичної моделі процесу дифузії працює аналогічно розглянутій вище для розрахунку температур. Особливістю є те, що зміна концентрації у процесі кристалізації задається зміною початкових умов на кожному кроці системного часу. Тобто крок за часом у тепловій задачі є повним часом спостереження для дифузійної задачі або за 1 інтервал системного часу робиться низку ітерацій для розрахунку зміни концентрацій.

Проте при розрахунках перерозподілу другого компоненту сплаву, у рідині після локальних фазових перетворень виникла проблема внаслідок існування одночасно двох фаз. Дифузійна задача (5.20) розглядає всю систему (тобто розплав) загалом. Але, наприклад, для сплаву Al–Si, ділянки системи, які знаходяться у твердому стані, відповідно до діаграми стану мають концентрацію другого компонента, нижче ніж розплав. І вони суттєво

впливають на розрахунки дифузійної задачі, створюючи потік другого компонента у напрямі «рідке – тверде», чого у реальному розплаві не існує.

Спроба ввести розривний коефіцієнт дифузії D , який у місцях розташування твердої фази дорівнює нулю, призвела до повного руйнування всієї числової схеми. Як визначилося у процесі аналізу, такий прийом зводить задачу (5.20) до нелінійного рівняння у часткових похідних, яке, на жаль, нині розв'язку не має [272].

Просте зменшення значень коефіцієнта дифузії у місцях, в яких вже існує тверда фаза (наприклад, на порядок або на два), призводило до «просочування» другого компонента крізь тверду ділянку, якщо її довжина була невелика. У місцях, в яких мали місце відносно довгі укралення твердої фази, «просочування» не спостерігалось, але утворювалися значні похибки в розрахунках, особливо на краях відрізка. Дослідження показали, що ці ефекти є наслідком особливостей самої числової схеми, в якій при обчисленнях у деякій k -тій точці використовується інформація про $k+1$ та $k-1$ -ші точки.

У зв'язку з цим, був розроблений оригінальний алгоритм використання числової схеми з розщепленням, пояснення якого показано на рис. 5.7.

Двомірна задача розкладається за кожним з координатних напрямків X та Y . Розрахунок на кожному кроці за часом проводиться у два етапи: на першому етапі знаходяться деякі проміжні, допоміжні значення шуканої функції для i – тих точок при постійному значенні j (рис. 5.7, а). На другому етапі за проміжними значеннями, що отримані на першому етапі, розраховуються значення уздовж осі Y (рис. 5.7, б). Це є числова схема з розщепленням. У запропонованому варіанті розрахунки також виконуються у два етапи (рис. 5.7 «в» та рис. 5.7 «г»). Однак за наявності на i -ому номері (для вісі X) або j -ому номері (для вісі Y) осередку, який знаходиться у твердому стані, числова задача розбивається на підзадачі. Розрахунки проводяться від «твердого» до «твердого», як показано на рис. 5.7 «в» та рис. 5.7 «г». При цьому виконуються граничні умови, аналогічні (5.15–5.18).

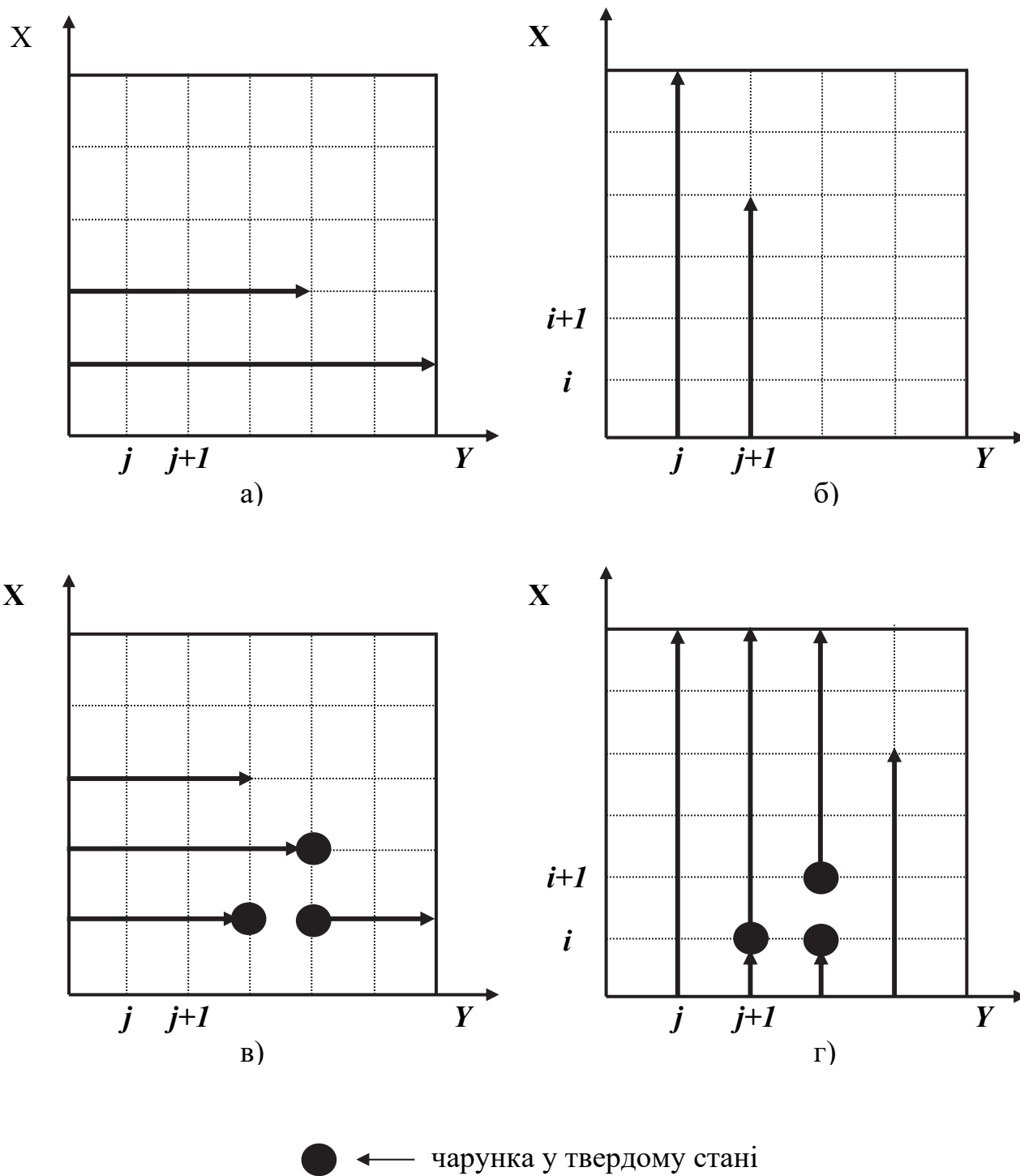


Рис. 5.7 Схематичне зображення алгоритму розрахунків числової схеми з розщепленням для дифузійної задачі (5.20) за наявності осередків у твердому стані

Загальна схема з розщепленням зберігається, проте суттєво збільшується кількість викликів підпрограми, в якій реалізовано числову схему за відповідним напрямом (уздовж X або Y). Це збільшує загальний час обчислень, але дає змогу відсторонити вплив твердих осередків на розрахунки перерозподілу другого компоненту сплаву в рідині.

5.4 Інтерфейс імітаційної моделі кристалізації металів та сплавів

Інтерфейс імітаційної моделі кристалізації металів та сплавів повинен бути зручним і інформативним, а також передбачати можливість вводу початкової інформації та виводу результатів моделювання.

Для зручності розрахунків і користування моделлю, розроблено два її варіанти: кристалізація чистого металу (модель «А») та кристалізація сплаву (модель «Б» для сплавів з твердим розчином та з евтектикою).

Вхідні параметри моделі, враховуючи їх кількість, зручно розбити на декілька частин. У першій частині параметри також розбиті на чотири групи.

Перша група складає початкову температура та температуру закінчення розрахунків (рис. 5.8, а):

- початкова температура («Начальная температура»);
- температура закінчення розрахунків («Конечная температура»).

У другій групі знаходяться параметри, які передбачають умови охолодження:

- температура навколишнього середовища ліворуч («Температура слева»);
- температура навколишнього середовища праворуч («Температура справа»);
- температура навколишнього середовища знизу («Температура снизу»);
- температура навколишнього середовища зверху («Температура сверху»);
- коефіцієнт тепловіддачі ліворуч («Коэф. теплоотдачи слева»);
- коефіцієнт тепловіддачі праворуч («Коэф. теплоотдачи справа»);
- коефіцієнт тепловіддачі знизу («Коэф. теплоотдачи снизу»);

а)

Параметр	Значение	Параметр	Значение
Начальная температура [K]	1031	Теплота кристаллизации	397000
Конечная температура [K]	940	Кэф. теплопроводности	213
Температура слева	298	Плотность	2700
Температура справа	298	Время наблюдения []	0,1
Температура сверху	298	Размер тела по X [м]	0,025
Температура снизу	298	Размер тела по Y [м]	0,07
Кэф. теплоотдачи слева	310		
Кэф. теплоотдачи справа	310		
Кэф. теплоотдачи сверху	310		
Кэф. теплоотдачи снизу	310		
Удельная теплоемкость	1255		

б)

Параметр	Значение
Темп. кристал. компон. А [K]	933
Концентрация модификатора [%]	0,2

в)

Параметр	Значение
Интервал метастаб. для центров [K]	6
Мах. переохла. для центров [K]	50
Интервал метастаб. для роста [K]	0,1
Мах. переохла. для роста [K]	70
Кэф. пропорциональности	10500
☒ Учитывать пропорции образца	
☐ Учитывать стенки отливки	

Рис. 5.8 Параметры імітаційної моделі структуроутворення при кристалізації чистого металу (Al):

а) які характеризують умови охолодження та властивості металу;

б) що зазначає стан рідкого металу;

в) евристичні параметри

– коефіцієнт тепловіддачі зверху («Коэф. теплоотдачи сверху»).

Варіювання цими параметрами дає змогу відтворювати умови охолодження майже всіх типів лиття (в кокіль, в землю тощо). При цьому головною характеристикою є швидкість охолодження, яка розраховується в моделі і повинна відповідати реальним умовам.

Такий підхід дає змогу не вводити в математичну задачу теплопровідності наявність ливарної форми (матеріал, з якого вона зроблена, товщину стінок тощо).

У третій групі задаються теплофізичні характеристики металу:

- питома теплоємність («Удельная теплоемкость»);
- питома прихована теплота кристалізації («Теплота кристаллизации»);
- коефіцієнт теплопровідності («Коэф. теплопроводности»);
- густина («Плотность»);

Четверта група складає геометричні розміри системи і часовий інтервал, який є одним «тіком» системного часу всієї імітаційної моделі:

- розмір системи за X («Размер тела по X (м)»);
- розмір системи за Y («Размер тела по Y (м)»);
- часовий інтервал («Время наблюдения»).

У другій частині знаходяться (для моделі «А») (рис. 5.8, б):

- температура кристалізації чистого металу («Темп. кристал. компон. А [K]»);
- наявність і кількість модифікатора, якщо він є («Концентрація модифікатора [%]»).

Якщо в останній позиції введено «0», то рідкий метал не модифіковано. Будь-яке інше число показує скільки у відсотковому відношенні твердих частинок знаходиться у рідкому металі у момент початку охолодження.

У варіанті імітаційної моделі для сплавів, який умовно названо «Б», у другій частині вхідних параметрів, окрім температури кристалізації чистого металу та наявності і кількості модифікатора, добавлено характерні точки відповідної діаграми стану та коефіцієнт дифузії (рис. 5.9):

- максимальна розчинність другого елементу « B » в « A » (Мак. розчинність AB [%]);
- максимальна розчинність елементу « A » в « B » (Мак. розчинність BA [%]);
- температура кристалізації евтектики (Темп. кристал. евтектики [K]);
- температура кристалізації другого компонента (Темп. кристал. компон. B [K]);
- евтектичний склад сплаву (Концентрація евтектики [%]);
- склад сплаву, для якого проводиться моделювання (Концентрація сплаву [%]);
- коефіцієнт дифузії другого компонента « B » в основному компоненті « A » (Коеф. диф.).

У третій частині знаходяться (рис. 5.8, в) т. зв. евристичні параметри, які характеризують основні параметри кристалізації: швидкість утворення зародків твердої фази та лінійну швидкість її росту [84; 273] (рис. 5.8, в), зокрема:

- інтервал метастабільності для утворення центрів кристалізації («Інтервал метастаб. для центрів [K]»);
- максимальне переохолодження для утворення центрів кристалізації («Максимальное переохл. для центрів [K]»);
- інтервал метастабільності для швидкості росту кристалів («Інтервал метастаб. для росту [K]»);
- максимальне переохолодження для швидкості росту кристалів («Максимальное переохл. для росту [K]»);
- емпіричний коефіцієнт адаптації («Коэффициент пропорциональности»).

Емпіричний коефіцієнт адаптації використовується для «підлаштування» моделі. Він корегує неточності моделі, які обумовлені наявністю спрощень, здійснених при її розробці. Також суттєвим є те, що така модель двовимірною, а реальний процес тривимірний. Тому кількість

тепла, яке виділяється при кристалізації, у такій постановці математичної задачі точно підрахувати неможливо.

У цій групі даних є ще дві позиції (рис. 5.8, в):

- урахування впливу стінок виливниці («Учитывать стенки отливки»);
- урахування геометричних пропорцій вилівка («Учитывать пропорции образца»).

Редактирование данных			
TabSheet1 TabSheet2 TabSheet3			
GroupBox1			
Темп. кристал. компонент. А [K]	933	Темп. кристал. компонент. В [K]	1414
Мак. растворимость АВ [%В]	1.65	Мак. растворимость ВА [%В]	100
Темп. кристал. эвтектики [K]	850		
Концентрация эвтектики [%В]	12.6		
GroupBox2			
☒ Константа	Концентрация сплава [%]	8.2	
☐ Диапазон	Концентрация сплава [%]	0	30
GroupBox3			
	Концентрация модификатора [%]	0	
	Козф. диф	1E-5	
		Да	Нет

Рис. 5.9 Додаткові параметри імітаційної моделі структуроутворення при кристалізації сплаву з евтектикою

Їхня сутність досить проста. Якщо в реальному експерименті стінки виливниці добре пофарбовані, то їхнім впливом на процес утворення зародків можна знехтувати. В іншому разі стінки «працюють» як запал. Друга позиція пов'язана з геометрією вилівка. У цій моделі його форма може бути або квадратною, або прямокутною. В останньому випадку потрібно додатково зробити відповідне повідомлення. Ця необхідність обумовлюється особливостями алгоритму імітаційної моделі. Створення округлої геометричної форми системи, яка досліджується, не є принципово неможливою. Проте це потребує зміни системи координат та відповідного математичного формулювання задач теплопровідності та дифузії.

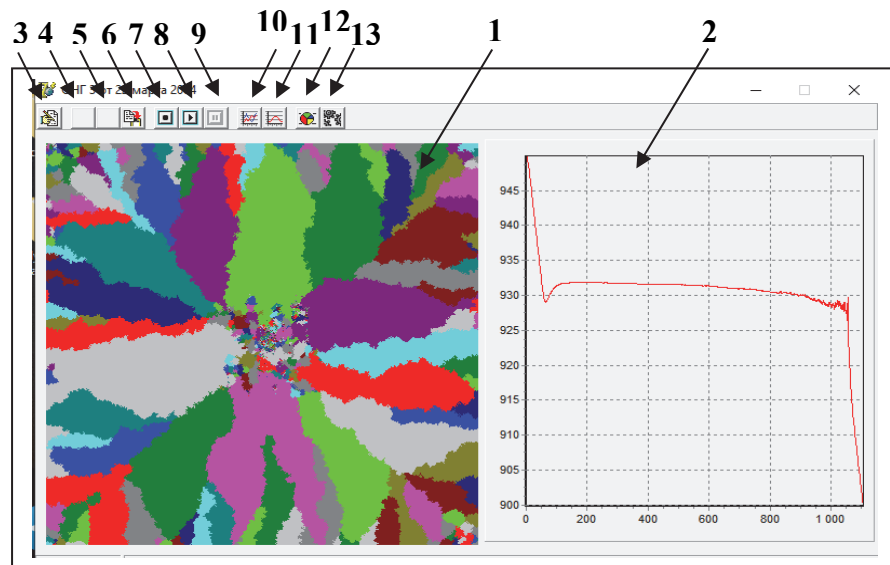


Рис. 5. 10 Вихідна частина інтерфейсу комп'ютерної моделі кристалізації чистого металу

- 1 – вікно, в якому відображається формування структури металу
- 2 – вікно, в якому відображається змодельована крива охолодження
- 3 – вхід в налаштування моделі
- 4, 5, 6 – кнопки фіксації результатів розрахунків (структура, крива охолодження, кількість центрів кристалізації та швидкість їх утворення, кількість твердої фази та швидкість її утворення)
- 7, 8 – початок роботи
- 9 – зупинка роботи
- 10, 11 – підключення експериментальної кривої охолодження
- 12, 13 – кнопки перемикання зображення структури (кольорове або чорно-

Вивід графічної інформації також розрізняється для двох варіантів інтерфейсів (рис. 5.10 та 5.11). У варіанті імітаційної моделі, який умовно названо «А» (рис. 5.10), де змодельовано структуроутворення при кристалізації чистого металу, «картинка» на екрані комп'ютера складається з 400×400 пікселей (тобто 160 000 елементів). Тобто у такому разі значення кількості модифікатора, наприклад, 0,2 % означає, що у площині системи $(X \times Y)$ $0,002 \times 160000 = 320$ частинок є твердими.

У варіанті імітаційної моделі, який умовно названо «Б» (рис. 5.11), де змодельовано структуроутворення при кристалізації сплаву, «картинка» на екрані комп'ютера складається з 200×200 пікселей (тобто 40 000 елементів). Для сплавів зменшення розмірів системи обумовлено значним зростанням часу розрахунків за рахунок додавання дифузійної задачі, яка, водночас, розпадається на значну кількість підзадач. У такий спосіб ця модель у процесі моделювання дає змогу візуально спостерігати розвиток процесу кристалізації (ніби «зазирнути» усередину розплаву) та наявність переохолодження у розплаві як різницю між поточною температурою та температурою-ліквідус у цій точці.

Вихідними параметрами моделі, які, за необхідності, можна зберігати у файлах з розширенням «txt», є:

- змодельована в геометричному центрі система кривої охолодження;
- градієнт температур протягом усього процесу;
- кількість центрів кристалізації та швидкість їх появи;
- кількість твердої фази та швидкість її зростання у процесі структуроутворення;
- змодельований розподіл другого компоненту сплаву уздовж перетину системи.

Окрім цього, комп'ютерний експеримент, який можна проводити з розробленою імітаційною моделлю кристалізації, дає змогу: фіксувати наявність нерівноважної евтектики; визначати середній розмір зерна; досліджувати формування структури при зміні умов охолодження під час

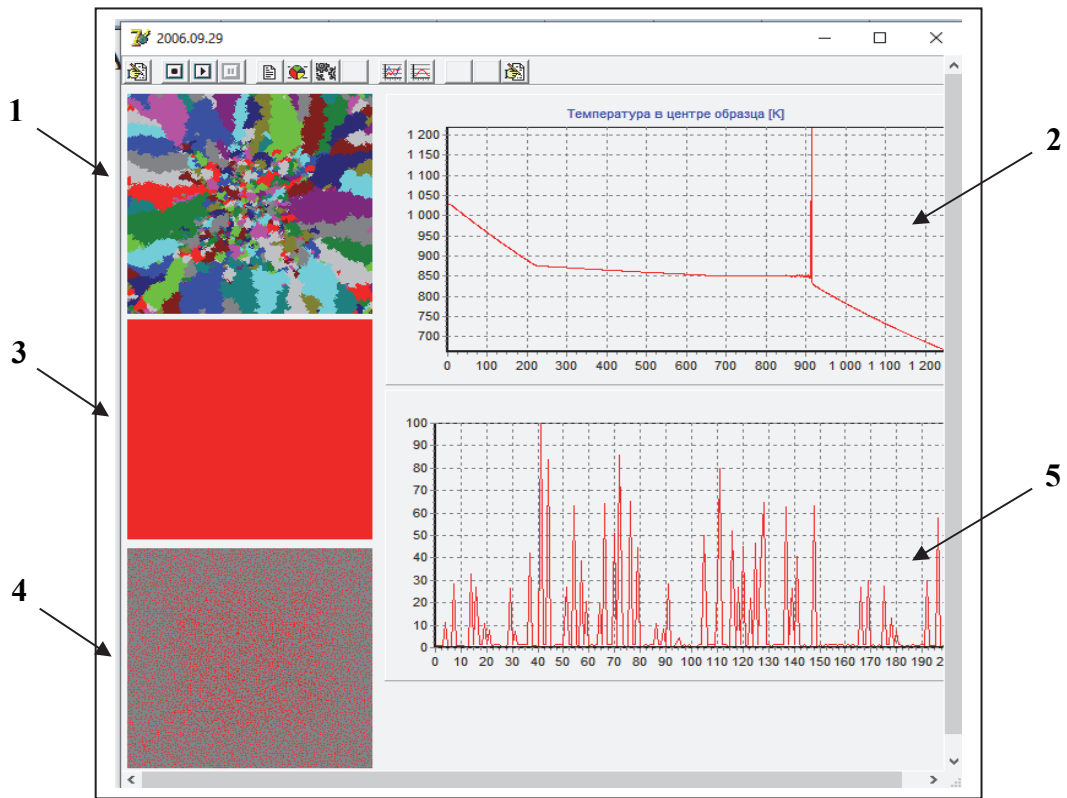


Рис. 5. 11 Вихідна частина інтерфейсу комп'ютерної моделі кристалізації чистого металу

- 1 – вікно, в якому відображається формування структури сплаву
- 2 – вікно, в якому відображається змодельована крива охолодження
- 3 – вікно, в якому відображається стан системи у цій точці («рідке – тверде»)
- 4 – вікно, в якому відображається доєвтектичний або заєвтектичний склад сплаву у цій точці
- 5 – вікно, в якому відображається розподіл другого компоненту уздовж перетину системи

процесу кристалізації; «фотографування» структури та кривої охолодження у будь-який момент процесу.

5.5 Адекватність імітаційної моделі кристалізації металів і сплавів

Доведення адекватності моделі є останнім і принциповим етапом у процесі її побудови. Його зручно виконати, шляхом порівняння результатів моделювання із результатами, які одержані у реальному експерименті. Перед перевіркою адекватності моделі, потрібно у відповідні блоки її налаштування ввести початкові дані, у вигляді фізично обумовлених параметрів та параметрів, що мають евристичний характер.

Перевірку адекватності імітаційної моделі можна виконати за допомогою оцінки візуальної подібності результатів моделювання із результатами реальних експериментів. Виконаємо цю перевірку на прикладі чистого алюмінію. Параметрами слугували середні значення теплофізичних характеристик для алюмінію:

- питома теплоємність $c = 1255 \left[\frac{\text{Дж}}{\text{кг} \cdot \text{К}} \right]$;
- питома прихована теплота кристалізації $L = 397000 \left[\frac{\text{Дж}}{\text{кг}} \right]$;
- коефіцієнт теплопровідності $\lambda = 213 \left[\frac{\text{Дж}}{\text{кг} \cdot \text{с} \cdot \text{К}} \right]$;
- густина $\rho = 2700 \left[\frac{\text{кг}}{\text{м}^3} \right]$;
- температура кристалізації 933 К (660 °С).

Умови охолодження добиралися у такий спосіб, щоб швидкість охолодження складала приблизно 1 град/с для прямокутної системи з геометричними параметрами $0,025 \times 0,025 \text{ м}^2$. Температура навколишнього середовища вводилася з усіх сторін 293 К (20 °С). Шляхом підбору коефіцієнтів тепловіддачі, регулювали швидкість охолодження, яку контролювали на початковій ділянці змодельованої кривої охолодження.

Інші параметри мали такі значення: початкова температура рідкого

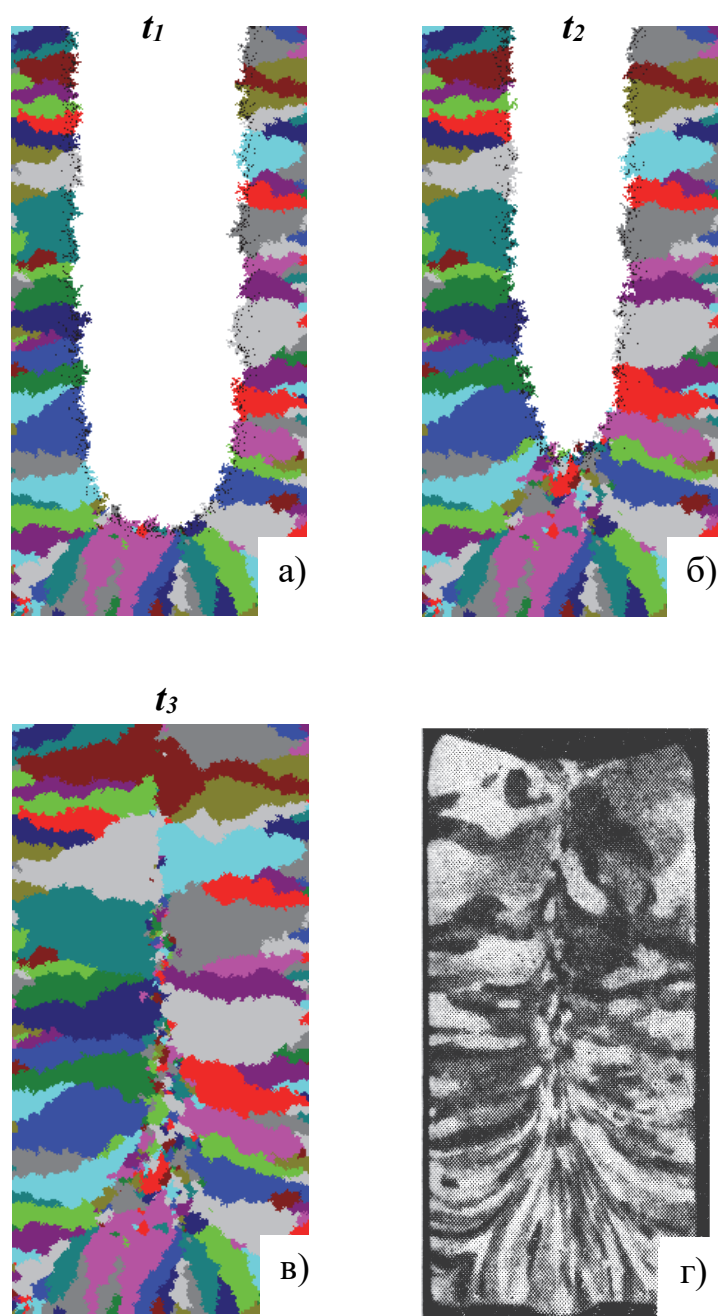


Рис. 5.12 Змодельована структура (а, б, в), що формується при кристалізації алюмінію у різні моменти часу: $t_1 < t_2 < t_3$ та реальна структура чистого алюмінію [273]

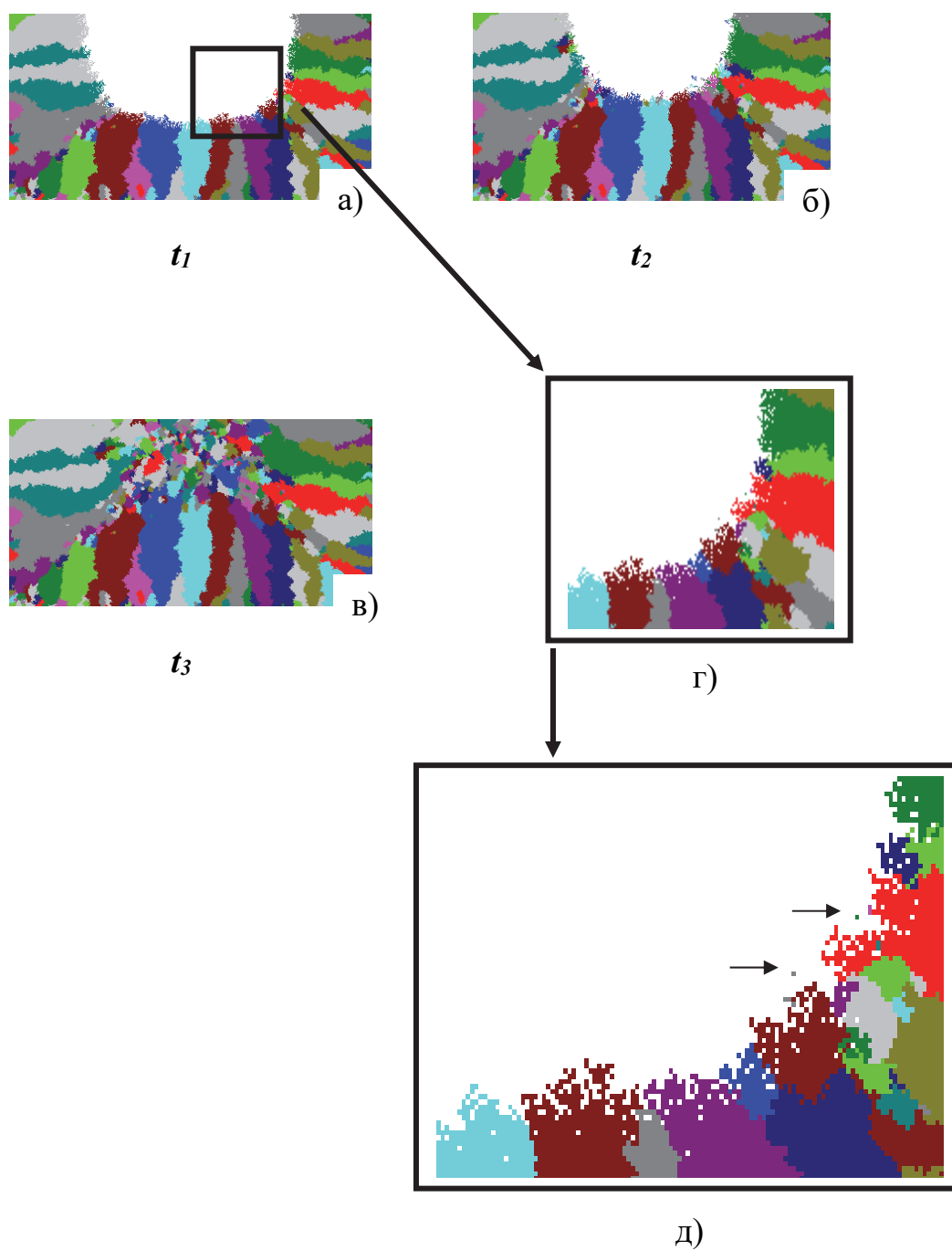


Рис. 5.13 Вплив зміни геометрії системи на змодельовану структуру (а, б, в), що формується при кристалізації алюмінію у різні моменти часу: $t_1 < t_2 < t_3$; г) та д) – виділений фрагмент фронту кристалізації у момент часу t_1 при різних збільшеннях

металу 993 К (720 °С), кінцева температура розрахунків 773 К (550 °С), модифікатор був відсутній, а інтервалами метастабільності та максимальними переохолодженнями на цьому етапі варіювали довільно.

На рис. 5.12 та рис. 5.13 зображено змодельований процес кристалізації чистого алюмінію у різні моменти часу. У цьому експерименті коефіцієнти тепловіддачі встановлювали однакові з трьох сторін, а зверху він дорівнював нулю. Згідно з рис. 5.13 фронт кристалізації має не плоский, а дифузійний характер, що притаманно нормальному типу кристалізації. У кутах та на стінках спочатку кристалізації виникають порівняно невеликі зерна, які при подальшому рості починають взаємодіяти між собою, і деякі з них припиняють свій ріст, а інші переходять у довгі зерна, спрямовані до центру. У кінці кристалізації в центрі вилівка з'являються маленькі дезорієнтовані зерна. Тобто формується структура вилівка, яка добре відома і описана у підручниках з ливарного виробництва і металознавства [84; 275] та у науковій літературі [274]. Запропонована підсистема імітаційного моделювання дає змогу мовби «зазирнути» вглиб металу, що кристалізується, і візуально спостерігати процеси, які там відбуваються.

Зміна конфігурації вилівка при тих самих параметрах моделі призводить до зміни конфігурації температурного поля і відповідної зміни структури твердого металу (рис. 5.13). На рис. 5.13 «г» та 5.13 «д» показані збільшені фрагменти частини фронту кристалізації, який представлено на рис. 5.13 «а». Тобто фронт кристалізації являє собою двофазну зону, яка має складний характер. Існують окремі маленькі області твердої фази, які з'явилися перед основним фронтом і позначені на рис. 5.13 «д» стрілочками. Їх розмір можна підрахувати. Довжина однієї сторони – 0,025 м, а сторона поділена на 400 ділянок. Тобто розмір цієї області складає $6,25 \cdot 10^{-5}$ м. Це за порядком величини співпадає з розрахунковими значеннями розміру критичного зародка [95; 130].

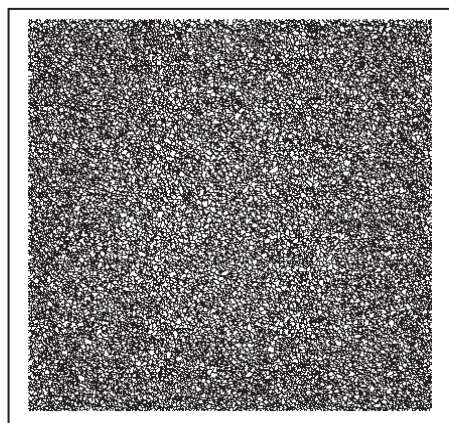
На рис. 5.14 показані змодельовані структури алюмінію, які отримані за різних умов кристалізації. Змодельовані структури ілюструються як з

кольоровою, так і за цифровою диференціацією зерен. Тобто видно, що варіювання параметрами моделі призводить до відповідних змін у структурі твердого металу. Може виникнути класична тризонна структура (рис. 5.14, б, в), або зона, що складається з довгих орієнтованих до центру кристалітів (рис. 5.14, а), або дрібнозерниста структура (рис. 5.14, в). Існує близько 15 теорій формування структури металевого зливка [88], але жодна з них не вкладена в алгоритм імітаційної моделі структуроутворення. Проте алгоритм моделі побудовано на найзагальніших уявленнях про процес кристалізації. Ці результати дають підстави висунути припущення, що описати процес формування тризонної структури зливка за допомогою загальноприйнятих методів математичного моделювання кристалізації, з достатньою точністю неможливо. Тобто одержані результати підкреслюють високу свою продуктивність саме імітаційного моделювання.

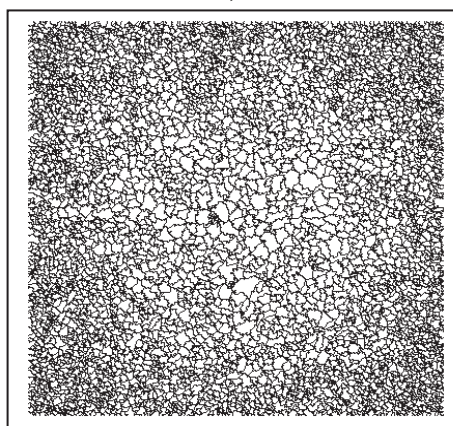
У наведених результатах роботи імітаційної моделі формування структури при кристалізації, її параметри змінювалися довільно. Кристалізація мала гомогенний характер утворювання осередків твердої фази (тобто налаштування «Концентрація модифікатора [%]» дорівнювала нулю). Основний вплив на формування структури твердого металу здійснювала швидкість охолодження та «стан» рідкого металу (йдеться про налаштування «Інтервал метастаб. для центрів [K]», «Максимальное переохла. для центрів [K]»), «Інтервал метастаб. для росту [K]», «Максимальное переохла. для росту [K]»). При цьому, незважаючи на попередній характер експериментів, вони показали реальність одержаних результатів.

Отже, імітаційна модель візуально передає відомі закономірності процесу формування структури металів, що свідчить про її адекватність.

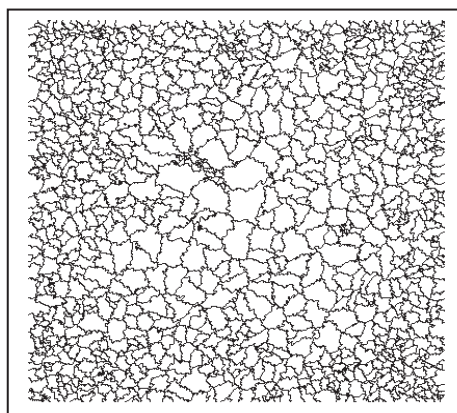
Відомо, що одним із основних чинників, які впливають на структуру металу при його кристалізації, є швидкість охолодження. На рис. 5.15 показано структури чистого алюмінію, які змодельовані при різних швидкостях охолодження. Після вводу початкової інформації у модель, її параметри вибиралися у такий спосіб, щоб отримати неорієнтовані зерна, в



а)



б)



в)

Рис. 5.15 Вплив швидкості охолодження на розмір зерна алюмінію в обчислювальному експерименті з імітаційною моделлю кристалізації:

а) $V_{\text{охл}} = 4,5$ град/с, $d = 6,93 \cdot 10^{-7}$ м;

б) $V_{\text{охл}} = 0,8$ град/с, $d = 11,7 \cdot 10^{-7}$ м;

в) $V_{\text{охл}} = 0,1$ град/с, $d = 22,2 \cdot 10^{-7}$ м

середньому однакові за розміром. Як слід було очікувати, збільшення швидкості охолодження з 0,1 град/с до 4,5 град/с призводить до зменшення розмірів зерен приблизно втричі (з $22,2 \cdot 10^{-7}$ м до $6,93 \cdot 10^{-7}$ м).

Тобто експерименти з імітаційною моделлю кристалізації підтверджують добре відомий факт, що швидкість охолодження впливає на структуру металу [276] (у цьому разі – алюмінію), яка формується у процесі кристалізації, причому її підвищення зменшує величину зерна.

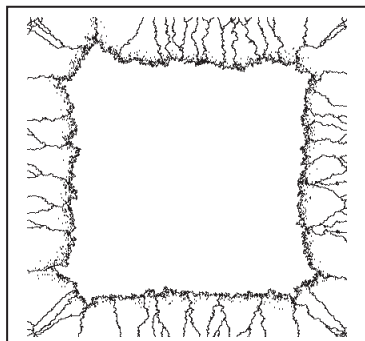
Розглянемо вплив наявності твердих частинок у рідкому металі на структуроутворення при кристалізації чистого алюмінію у різних варіантах: без наявності модифікатора та з ним; без урахування впливу стінок та з урахуванням їх впливу.

Початковими даними налаштування імітаційної моделі були:

- початкова температура – 960 К;
- кінцева температура розрахунків – 920 К;
- тепловіддача з усіх сторін – 25 Дж/(м·с·К);
- температура з усіх сторін – 298 К;
- розмір системи – $0,025 \times 0,025$ м; інтервал метастабільності для утворення центрів кристалізації – 5 К;
- максимальне переохолодження для утворення центрів – 50 К;
- інтервал метастабільності для швидкості росту кристалів – 1 К;
- максимальне переохолодження для лінійної швидкості росту кристалів – 50 К;
- коефіцієнт адаптації – 4500.

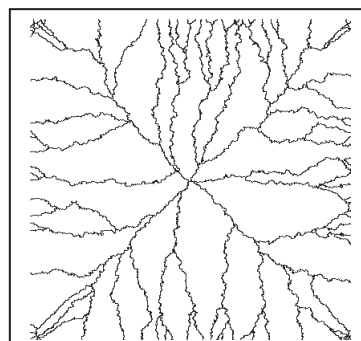
Згідно з рис. 5.16 при заданих параметрах моделі центри кристалізації утворюються біля стінок виливниці і зростають у напрямку до центру системи (тобто у напрямку градієнта температур). Фронт кристалізації має дифузійний характер, що притаманно нормальному механізму зросту кристалів. За наявністю модифікатора, кристалізація набуває об'ємного характеру, що обумовлено наявністю твердих частинок, які є запалами кристалізації, в об'ємі рідкого металу. Очікуваним є і зменшення розмірів

Формування структури
Al під час кристалізації

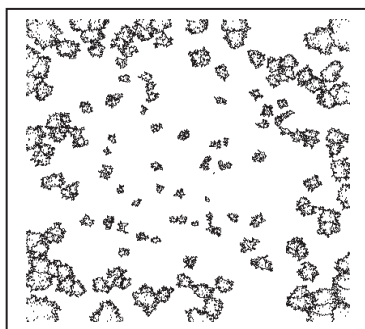


а)

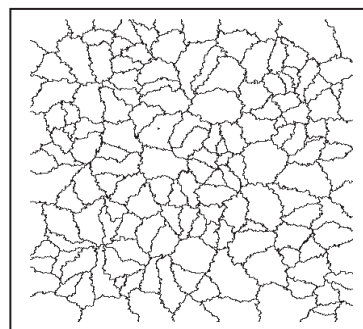
Структури Al після
кристалізації



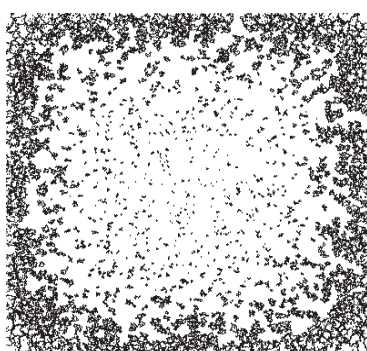
б)



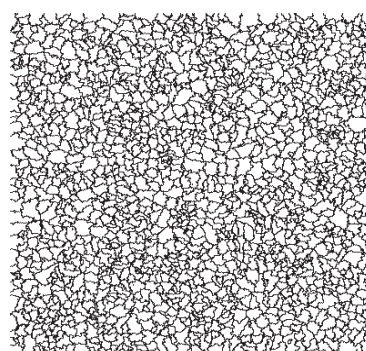
в)



г)



д)

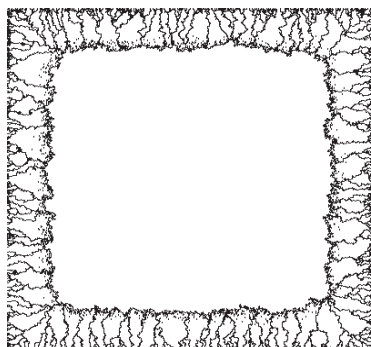


е)

Рис. 5.16 Структури чистого алюмінію під час кристалізації та у твердому стані, що змодельовані підсистемою імітаційного моделювання:

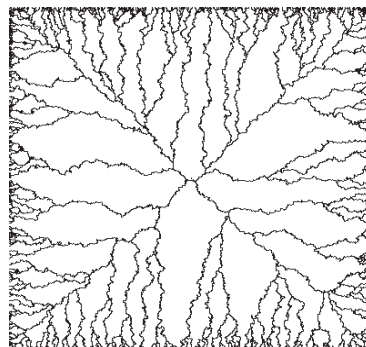
а, б – без урахування стінок виливка та без модифікатору;
в, г – без урахування стінок виливка та з 0,1 % модифікатору;
д, е – без урахування стінок виливка та з 1 % модифікатору

Формування структури
Al під час кристалізації

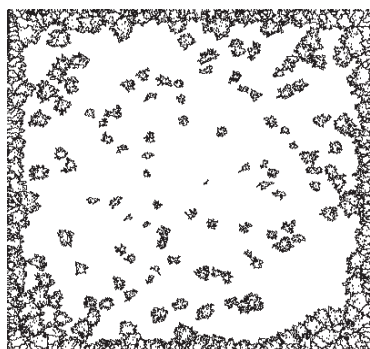


а)

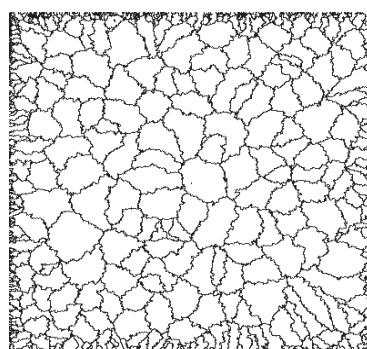
Структури Al після
кристалізації



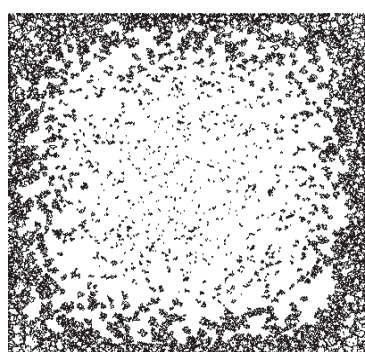
б)



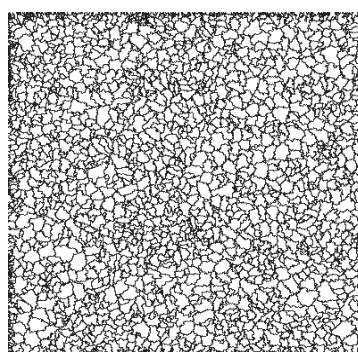
в)



г)



д)



е)

Рис. 5.17 Структури чистого алюмінію під час кристалізації та в твердому стані, що змодельовані підсистемою імітаційного моделювання:

а, б - з урахуванням стінок виливка та без модифікатору;
в, г – з урахуванням стінок виливка та з 0,1% модифікатору;
д, е – з урахуванням стінок виливка та з 1% модифікатору

зерна твердого алюмінію при введенні та збільшенні кількості модифікатора (рис. 5.16 «г» та рис. 5.16 «е»).

У разі впливу стінок виливниці на процес кристалізації, які є запалами для рідкого металу і полегшують утворення зародків, кристалізація також починається від стінок форми (рис. 5.17, а), але поблизу стінок з'являється зона дрібних кристалів (рис. 5.17, б). Така сама зона формується на початку кристалізації за наявності впливу стінок виливниці і вводу невеликої кількості модифікатора (рис. 5.17, в). Збільшення модифікатора повністю маскує дію стінок як запалів кристалізації (рис. 5.16, д, е та рис. 5.17, д, е).

Отже, обчислювальний експеримент за допомогою підсистеми імітаційного моделювання структуроутворення при кристалізації адекватно відтворює структуру алюмінію, дає змогу досліджувати вплив стінок виливниці та кількості модифікатора на процес фазового перетворення. Проведені обчислювальні експерименти демонструють високу реальність та якість результатів імітаційного моделювання і підтверджують адекватність імітаційної моделі формування макроструктури при кристалізації.

Висновки до Розділу 5

1. Розроблено загальний алгоритм імітаційної моделі кристалізації, який уможливорює моделювання формування структури твердого металу, і являє собою клітковий автомат у вигляді двовимірного масиву бістабільних елементів. Робота цього кліткового автомату підпорядковується зовнішнім умовам охолодження та взаємодії елементів між собою за аналогією із появою центрів кристалізації та їх подальшим зростанням.

2. Сформульовано математичні задачі теплопровідності та дифузії, які задіяні в імітаційній моделі кристалізації та які дають змогу визначити наявність і величину переохолодження у довільній точці розплаву. Вибрано і

реалізовано чисельні схеми для розв'язку двовимірної задачі теплопровідності, з урахуванням виділення теплоти кристалізації та двовимірної задачі дифузії. Розроблено оригінальний алгоритм розрахунків перерозподілу другого компонента у розплаві після розподільчої дифузії, з урахуванням наявності вкраплень твердої фази.

3. Розроблено інтерфейс комп'ютерної реалізації імітаційної моделі, який дає змогу вводити параметри моделі і реєструвати результати моделювання візуально та у вигляді файлів. Вихідною інформацією є:

- файли, в яких фіксується: температура у центральній точці на кожному кроці розрахунків; переохолодження розплаву; кількість центрів кристалізації, що з'являються у процесі твердіння; швидкість утворення центрів кристалізації під час процесу твердіння; кількість твердої фази у процесі кристалізації; швидкість зростання кількості твердої фази під час процесу кристалізації;
- картинка структури твердого металу, що моделюється клітковим автоматом в кольоровому та в чорно-білому варіанті;
- розподіл другого компоненту уздовж перетину системи;
- величина градієнту температури уздовж перетину системи під час кристалізації.

4. На прикладі кристалізації чистого алюмінію, доведено адекватність імітаційної моделі утворення структури при кристалізації, шляхом порівняння розрахованих макроструктур твердого металу із тими, які формуються у реальному експерименті. Показано, що варіювання умовами кристалізації та її параметрами призводить до відповідних змін структури твердого металу.

РОЗДІЛ 6

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ КРИСТАЛІЗАЦІЇ МЕТАЛІВ І СПЛАВІВ

Найбільшою перевагою розробленої імітаційної моделі кристалізації є змога проведення обчислювального експерименту, в якому можна:

- візуально спостерігати розвиток процесу кристалізації, мовби «зазирнувши» усередину рідкого металу;
- розраховувати переохолодження у розплаві як різницю між поточною температурою та температурою-ліквідус у цій точці;
- розраховувати кількість утворених центрів кристалізації та визначати швидкість їх появи;
- розраховувати кількість твердої фази та швидкість її росту у процесі кристалізації;
- визначати температуру в центрі системи (моделювати криву охолодження) та різницю температур між центральною та крайньою точками, що дає змогу зіставляти результати обчислювального експерименту з реальним термографічним експериментом;
- досліджувати вплив модифікаторів та стінок виливниці на утворення структури під час кристалізації;
- визначати розподіл другого компонента сплаву уздовж перетину системи;
- фіксувати наявність нерівноважної евтектики;
- змінювати умови охолодження безпосередньо під час кристалізації;
- визначати середній розмір зерна твердого металу.

Використання в обчислювальному експерименті перерахованих можливостей цієї моделі має як науковий, так і практичний інтерес. Імітаційна модель дає змогу проводити наукові дослідження безпосередньо на ЕОМ, а також розробляти нові технологічні прийоми, перевіряючи при цьому різні гіпотези і положення стосовно процесу кристалізації. Деякі з цих

можливостей (безпосереднє дослідження гомогенного та гетерогенного утворення центрів кристалізації, дослідження розповсюдження переохолодження у просторі системи під час нерівноважної кристалізації) узагалі неможливо відтворити з достатньою точністю в реальному експерименті. Важливою особливістю таких експериментів є також те, що системи, яка є об'єктом дослідження, виступає алгоритм імітаційної моделі. Це потребує від моделі особливо точного її налаштування. Якщо модель «налагоджена» під конкретний метал або сплав, то результати досліджень у числовому експерименті, що одержані за її допомогою, можна вважати надійними. Тому потрібно розробити методику підбору її параметрів для реалізації обчислювального експерименту.

6.1 Методичні особливості підготовки імітаційної моделі кристалізації металів і сплавів для проведення обчислювального експерименту

Методика підготовки імітаційної моделі для металів і сплавів, які потрібно дослідити, базується на підборі параметрів моделі у такий спосіб, щоб досягти максимального збігу змодельованих кривих охолодження та структурних елементів макрозерна, із тими, що отримані у реальному експерименті [278; 279]. Йдеться як про зовнішню схожість термограм, так і про розмір зерна.

Особливості моделювання (широке застосування спрощень та апроксимацій) дають змогу досліджувати утворення структури при кристалізації не тільки чистих металів або бінарних сплавів, а також деяких складнолегованих сплавів, які умовно можна розглядати як чистий метал, або як подвійний сплав. Якщо у розплаві знаходиться досить мало другого компоненту або сумарний вміст легуючих компонентів незначний, то можна припускати, що його кристалізацію можна умовно розглядати як кристалізацію чистого металу. Три- або чотирьох компонентний сплав, який

має окрім основного компонента, ще один компонент із більшою концентрацією, ніж інші, також для спрощення, можна вважати подвійним сплавом. Наприклад, у сплаві АК7М5 кремній складає 6–8 %, а магній – до 0,5 % і він утворює евтектику Al-Mg₂Si-Si наприкінці процесу затвердіння. На кривій охолодження ця евтектика проявляється у вигляді невеликого піка у кінці кристалізації. Очевидно, що у такому разі введення точок діаграми стану Al – Si у параметри налаштування імітаційної моделі при дослідженні сплаву АК7М5, є логічним.

Окрім цих випадків, необхідно відзначити ще один, коли діаграма стану сплаву є складною, але у певному діапазоні концентрацій її можна звести до подвійної. Прикладом такого випадку є система Al–Cu, діаграма стану якої показана на рис. 6.1. Точка *Q* відповідає 46,5 % вмісту міді в алюмінії і є точкою утворення хімічної сполуки CuAl₂. Однак, якщо обмежитися лише цією частиною діаграми (тобто ввести умову $Cu \leq 46,5 \%$), то сплав можна розглядати як бінарний із звичайною діаграмою обмеженої розчинності з евтектикою. Вочевидь, у такому разі потрібно перерахувати відсотковий склад сплаву. Зокрема, 46,5 % міді у реальному сплаві відповідатимуть 100 % компоненту *B* еквівалентного сплаву. Значення температур залишаються незмінними. Фактично створюється «еквівалентна» діаграма стану, в якій реальний сплав, наприклад, Al – 5%Cu, має «еквівалентний» склад $\frac{5\% \times 100\%}{46,5\%} = 10,8\%$. Такий підхід є достатньо логічним і не заперечує основних уявлень про умови переходу із рідкого стану в твердий, але значно розширює можливості моделі.

Настройка імітаційної моделі для проведення обчислювальних експериментів проходить у три етапи, на кожному з яких використовуються свої групи параметрів моделі. При цьому результати обчислень, що отримані за моделлю, порівнюються з натурним експериментом, який завчасно виконується з відповідним металом або сплавом.

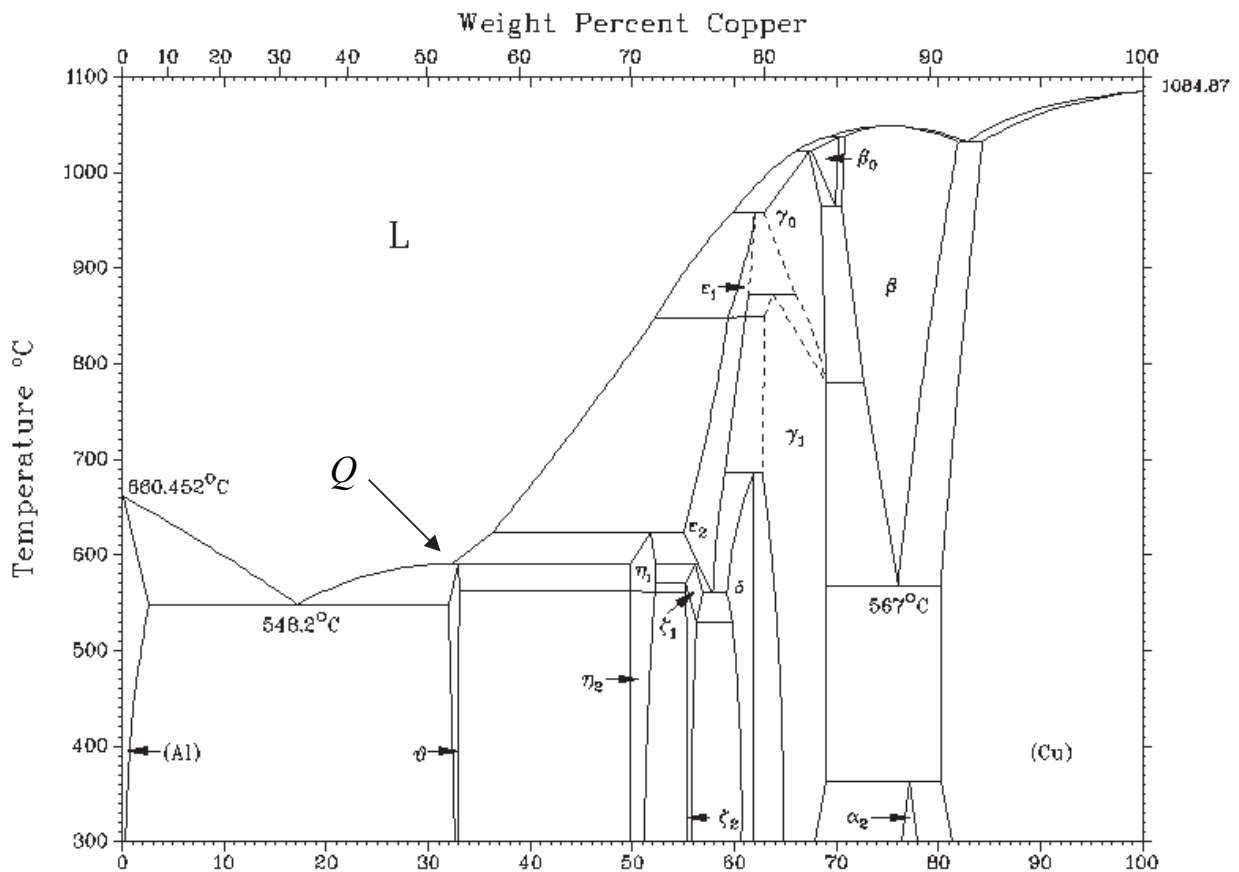


Рис. 6.1 Діаграма стану системи Al – Cu [267]

У натурному експерименті фіксується крива охолодження, для чого використовується підсистема комп'ютерного термічного аналізу, і виробляється шліф з макроструктурою твердого металу або сплаву.

Перед налаштуванням вводяться теплофізичні характеристики матеріалу, тобто густина, питома теплоємність, питома теплота кристалізації та коефіцієнт теплопровідності. Відомо [232], що низка характеристик матеріалу мають різні значення у твердому та рідкому станах. Однак у математичній задачі теплопровідності, яка використовується у моделі, ця різниця не враховується. Тому при вводі початкової інформації, використовуються середні значення цих характеристик.

На першому етапі налаштування моделі також підбирається швидкість охолодження при твердінні рідкого металу. Для цього використовується підбір коефіцієнтів тепловіддачі з різних сторін. Встановлюється також температура навколишнього середовища. Зазвичай використовується її значення 293 K (20 °C). Однак якщо моделюється, наприклад, утворення структури у спочатку підігрітому кокilі, то, звісно, є сенс встановити відповідну температуру середовища. Коефіцієнти тепловіддачі корегуються доти, допоки не співпадуть початкові ділянки експериментальної та розрахованої кривих охолодження. При збіганні цих ділянок кривих охолодження, швидкість охолодження в обчислювальному експерименті дорівнює швидкості охолодження у натурному експерименті і перший етап налаштування моделі вважається завершеним.

Другий етап налаштування полягає у виборі величини коефіцієнта адаптації у такий спосіб, щоб співпадали експериментальні та розраховані характерні ділянки кривої охолодження (горизонтальні полички).

На рис. 6.2 та рис. 6.3 показані реальні та змодельовані криві охолодження відповідно для чистого Al та сплаву Al+8,2%Si [280]. Відповідно до рисунків після підбору коефіцієнтів тепловіддачі, початкові ділянки кривих охолодження співпадають майже ідеально як для чистого алюмінію, так і для сплавів. Проте невеликі розбіжності спостерігаються при охолодженні вже після закінчення кристалізації. Це обумовлено тим, що в реальному експерименті після твердіння об'єм твердого металу зменшується внаслідок осаду і погіршується його контакт із стінкою форми. Унаслідок цього, реальний коефіцієнт тепловіддачі зменшується і температура зменшується повільніше.

Крім того, як для чистого алюмінію, так і для сплавів на реальних кривих охолодження на початку кристалізації рекалесценція температури або менша, або зовсім відсутня. У кінці кристалізації відповідна ділянка термограми спадає з меншою швидкістю, ніж на змодельованій. Ці припущення, які робилися при побудові моделі сплавів, більше впливають на

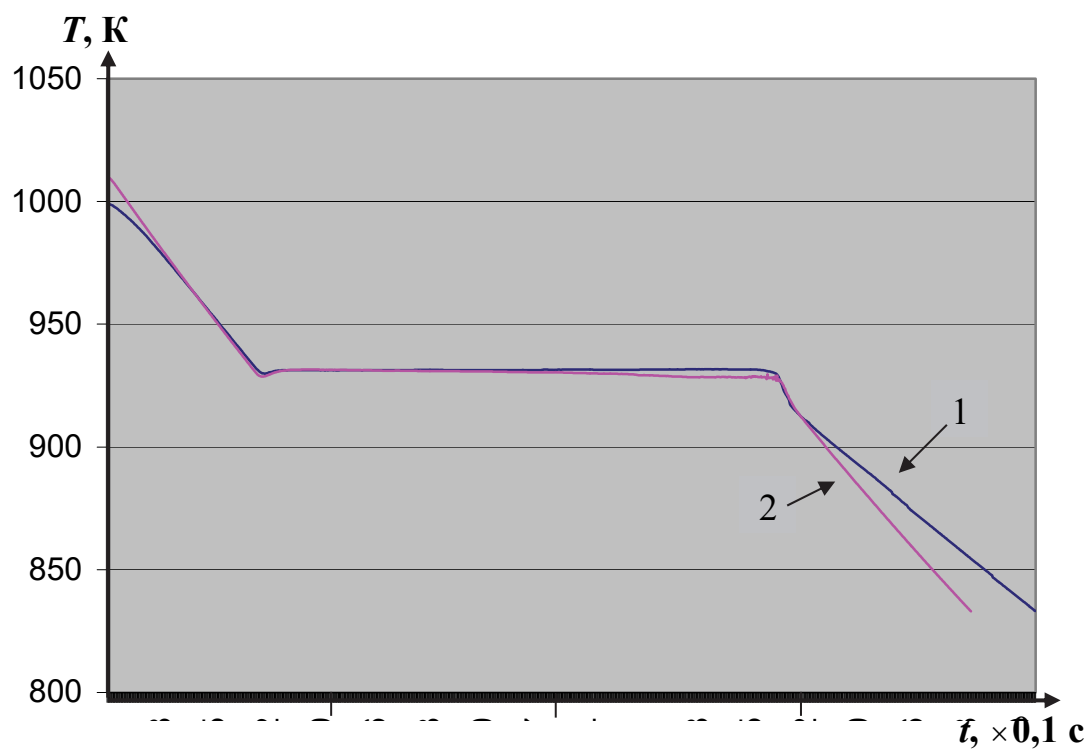


Рис. 6.2 Порівняння реальної кривої охолодження сплаву Al-Si (1) та кривої охолодження, яка змодельована імітаційною моделлю (2)

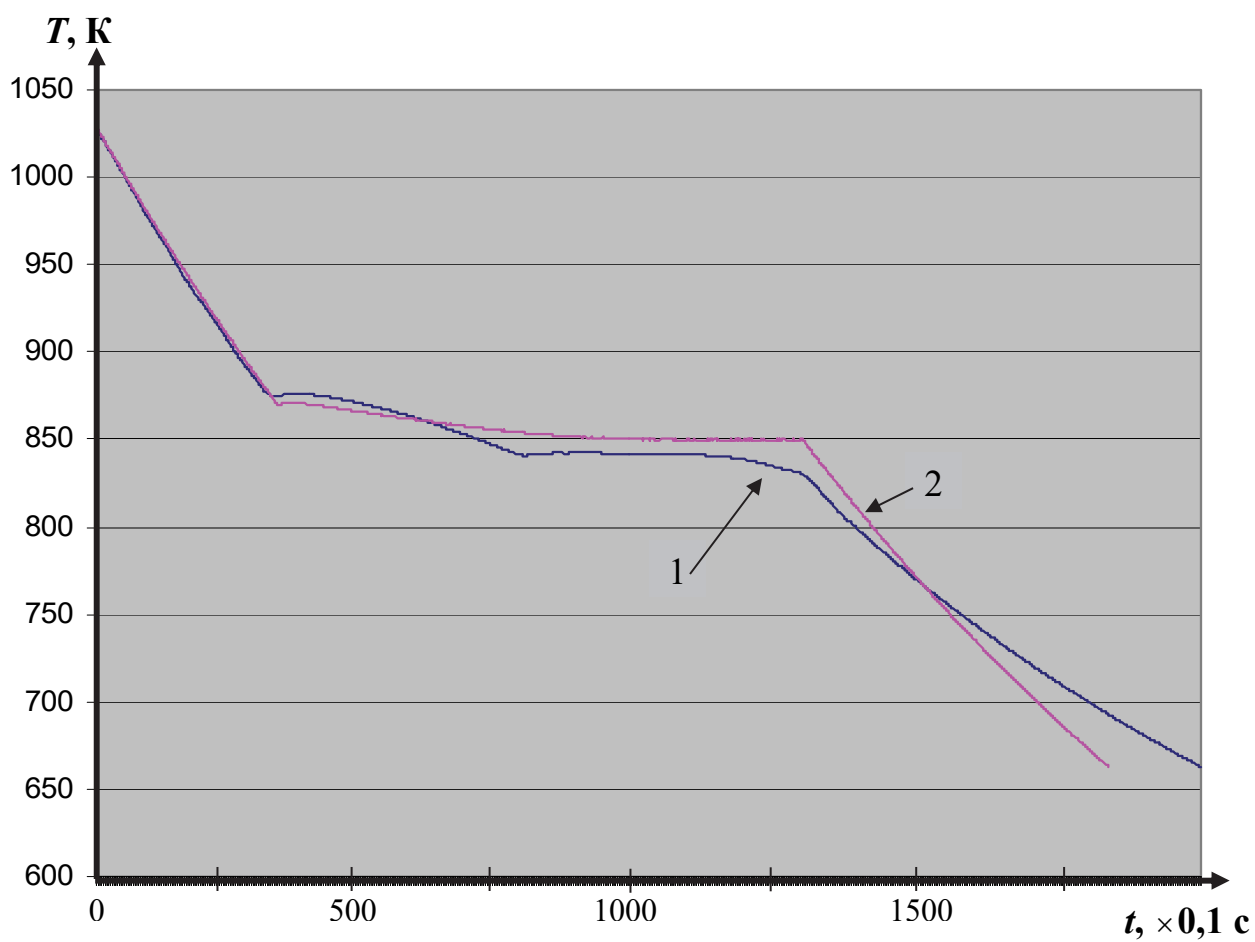


Рис. 6.3 Порівняння реальної кривої охолодження сплаву Al - 8,2% Si (1) та кривої охолодження, яка змодельована імітаційною моделлю (2)

результати розрахунків. Зокрема, при постанові математичного формулювання задачі теплопровідності, прихована теплота кристалізації вважалася постійною і при налаштуванні моделі вводилося значення, що відповідає сплаву АК9 (9–11% Si) із таблиці, яка наведена у роботі [231]. Проте при формуванні твердого розчину, вміст другого компонента в рідині постійно змінюється (у цьому разі – збільшується). Тобто величина прихованої теплоти кристалізації під час кристалізації не є сталою величиною, а змінюється. Аналізуючи дані щодо величин прихованої теплоти кристалізації основних ливарних сплавів системи алюміній-кремній, які наведені у [232], можна стверджувати про нелінійну її залежність від вмісту кремнію (табл. 6.1). Цим обумовлені й певні розходження між реальною та змодельованою кривими охолодження на ділянках, які відповідають області формування твердого розчину сплаву $Al + 8,2\%Si$.

Невелика різниця температури евтектики у $5-7^{\circ}$ (рис. 6.3) зумовлена знову ж таки наявністю домішок, які завжди існують у реальному сплаві. За їх наявності можуть утворюватися складні евтектики $((\alpha + Si) + FeAl_3$ та $(\alpha + Si) + Al_xFe_9Si_2$ [257]), температура формування яких трохи менша за відповідну температуру евтектики $(\alpha + Si)$.

Після збігання кривих охолодження починається третій, останній етап налаштування моделі, на якому потрібно домогтися візуального збігання структур, які сформувалися у процесі кристалізації. У такому разі порівнюємо макроструктуру, що отримана на реальному експерименті, із структурою, яка змодельована. На цьому етапі підлягають підбору евристичні параметри третьої групи: інтервал метастабільності для утворення центрів кристалізації, максимальне переохолодження для утворення центрів кристалізації; інтервал метастабільності для швидкості росту кристалів; максимальне переохолодження для швидкості росту кристалів. У науковій літературі зазначені параметри мають значною мірою якісний, ніж кількісний характер. Тому їх підбір здійснюється, з огляду на те, що інтервал метастабільності для

швидкості росту кристалів є досить малим, порівняно з інтервалом метастабільності для утворення центрів кристалізації [85].

Таблиця 6.1

**Значення прихованої теплоти кристалізації в залежності від
вмісту кремнію у сплавах системи Al-Si**

№	Марка сплаву	Вміст кремнію, %	Прихована теплота кристалізації, $\times 10^3$ Дж/кг
1	Al (чистий)	0	390–397
2	АЛ5 (АК5М)	4,5–5,5	322
3	АЛ9 (АК7)	6–8	281
4	АЛ4 (АК9ч)	8–10,5	172
5	АЛ2 (АК12)	10–13	208

На прикладі чистого алюмінію визначимо, як на величини цих параметрів впливають його структурні характеристики. Швидкість охолодження $V_{охл}$ була встановлена 1 град/с. У комп'ютерному експерименті змінювалися інтервал метастабільності і максимальне переохолодження для виникнення нових центрів кристалізації та інтервал метастабільності і максимальне переохолодження для лінійної швидкості росту кристалів.

У таблиці 6.2 наведено результати дослідження впливу інтервалів метастабільності для утворення центрів кристалізації (ΔT_3) і лінійної швидкості їх росту ($\Delta T_{ш}$), а також максимальних значень переохолоджень. Згідно з таблицею максимальні переохолодження майже не впливають на структуру алюмінію. Найбільший вплив на структуру металу, яка формується у процесі кристалізації, має інтервал метастабільності для утворення центрів кристалізації ΔT_3 . На рис. 6.4 показано результати моделювання структури чистого алюмінію і видно, що збільшення інтервалу метастабільності для утворення зародків кристалізації ΔT_3 призводить до збільшення величини зерна. Це зумовлено тим, що за досить «легкої» появи центрів кристалізації теплота кристалізації, яка супроводжує процес твердіння і починає

Таблиця 6.2

**Вплив параметрів кристалізації на розмір зерна чистого
алюмінію (результати моделювання)**

№	Для зародків		Для лінійної швидкості росту		Середній розмір зерна за зливком, 10^{-6} м
	Інтервал метаста- більності, град К	Макси- мальне значення град К	Інтервал метаста- більності град К	Макси- мальне значення град К	
1	1	60	0,5	5	3,02
2	1	60	0,5	10	2,2
3	1	60	0,5	20	1,71
4	1	60	0,5	30	1,15
5	1	20	0,5	10	2,27
6	1	30	0,5	10	2,17
7	1	40	0,5	10	2,22
8	1	50	0,5	10	2,23
9	0	60	0	30	0,71
10	2	62	0	30	2,3
11	4	64	0	30	2,9
12	6	66	0	30	3,7
13	6	66	2	32	3,1
14	6	66	4	34	2,4
15	6	66	6	36	0,71
16	10	70	10	40	0,71

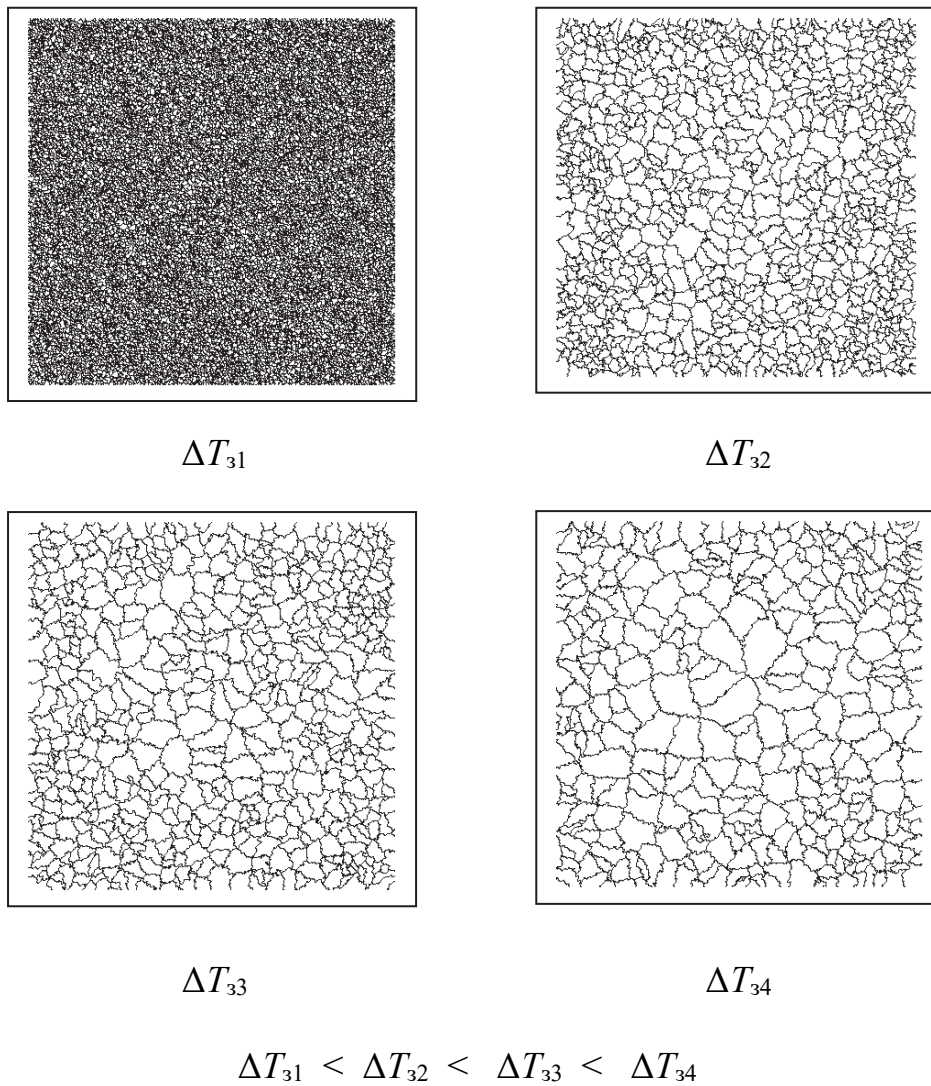


Рис. 6.4 Вплив інтервалу метастабільності для утворення зародків центрів твердої фази ΔT_3 на структуру алюмінію

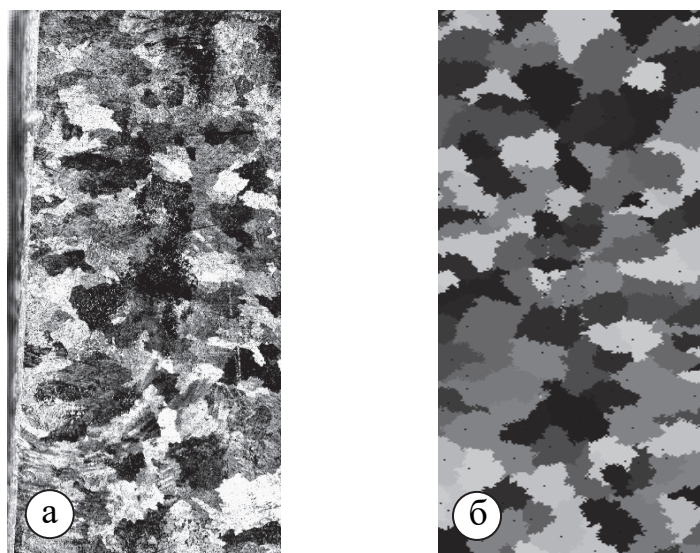


Рис. 6.5 Порівняння макроструктури чистого алюмінію:
а – реальна, б – змодельована

Таблиця 6.3

**Параметри налаштування імітаційної моделі кристалізації для чистого
алюмінію і сплавів Al-Si, Al-Cu**

№	Параметр моделі	Al	Al-Si	Al-Cu
1	2	3	4	5
1	Температура початку розрахунків, град. К	1010	1028	996
2	Температура кінця розрахунків, град. К	830	663	737
3	Температура навколишнього середовища, град. К	298	298	298
4	Коефіцієнт тепловіддачі, Дж/(с·м ² ·К)	135*)	12,5*)	*)
5	Питома теплоємність, Дж/(кг·К)	1 200	1 185	1 100
6	Густина, кг/м ³	2 700	2 350	3 000
7	Теплота кристалізації, Дж/кг	397 000	160 000	360 000
8	Коефіцієнт теплопровідності, Дж/(м ² ·К)	210	94	200
9	Розміри системи, м×м	0,025×0,025	0,025×0,025	0,025×0,025
10	Температура кристалізації чистого компоненту <i>A</i> , град. К	933	933	933
11	Температура утворення евтектики, град. К	—	850	821
12	Температура кристалізації чистого компоненту <i>B</i> , град. К	—	1414	864
13	Концентрація евтектики, %	—	12,6	71(33)
14	Максимальна розчинність компоненту <i>B</i> , %	—	1,65	12,3(5,7)
15	Концентрація компоненту <i>B</i> у сплаві, %	—	8,2*)	4,3(2,0) *)

1	2	3	4	5
16	Максимальна розчинність компоненту <i>A</i> , %	—	100	97
17	Коефіцієнт дифузії компоненту <i>B</i> у розплаві, м ² /с	—	10 ⁻⁵	10 ⁻⁵
18	Вміст модифікатора, у. о.	0	0	0
19	Інтервал метастабільності для утворення центрів кристалізації, град. К	5...6	5	5
20	Максимальне переохолодження для утворення центрів кристалізації, град. К	50	50	50
21	Інтервал метастабільності для росту кристалів, град. К	0,1...1,0	0,1	0,1
22	Максимальне переохолодження для росту кристалів, град. К	50	50	50
23	Коефіцієнт адаптації, у. о.	75 000*)	76 000*)	*)
24	Урахування пропорцій системи	—	—	—
25	Урахування впливу стінок форми	—	—	—

*) – значення підбиралися у процесі налаштування

виділяться, швидко зменшує переохолодження, і у такий спосіб заважає виникненню нових запалів. Ті кристалики, що з'явилися з самого початку, продовжують свій зріст. Їх кількість відносно мала і величина зерна зростає. Перевірка цих висновків на сплавах Al+7-11%Si і Al+3-5%Cu засвідчила, що ці тенденції зберігаються, а змінюються тільки кількісні показники.

Регулюючи, передусім, величину інтервалу метастабільності для утворення зародків кристалізації ΔT_z , підбираємо таке його значення, щоб співпадали середні значення макрозерна реальної структури алюмінію і сплавів із тими, які отримані у результаті моделювання. Одержані результати

наведені на рис. 6.5. Згідно з рисунками збіг задовільний і різниця у значеннях не перевищує 10 %.

У такий спосіб, завершивши третій етап налаштування імітаційної моделі утворення структури при кристалізації, можна проводити обчислювальний експеримент, результати якого матимуть не тільки якісний, але і кількісний характер. Результати підбору параметрів моделі для чистого алюмінію, сплавів Al-Si та Al-Cu наведені у таблиці 6.3.

Звичайно, що підвищуючи точність моделі за рахунок зменшення спрощень при математичному формулюванні задач дифузії та теплопровідності, за допомогою урахування залежності теплофізичних характеристик металу від температури, можна значно підвищити надійність одержаних в обчислювальному експерименті результатів. Але значною перевагою синергетичного підходу до моделювання складних систем є те, що навіть за досить значних спрощень вихідної системи (тобто у такому разі процесу кристалізації), можна отримувати надійні результати як на якісному, так і на кількісному рівнях [281].

6.2 Вплив швидкості охолодження при твердінні на утворення центрів твердої фази при гомогенній та гетерогенній кристалізації алюмінію

Дослідження впливу швидкості охолодження на кінетику утворення центрів кристалізації чистого алюмінію проводилося при параметрах імітаційної моделі, які зазначені у таблиці 6.3.

Спершу проводився обчислювальний експеримент, умови якого були максимально наближені до рівнозначних. Коефіцієнт тепловіддачі з усіх сторін задавався величиною $0,1 \text{ Дж}/(\text{м} \cdot \text{с} \cdot \text{К})$. Швидкість охолодження V_{ox} набувала значення $0,00025 \text{ град/с}$. Інтервалом метастабільності для утворення центрів кристалізації у такому разі вибирали 6 градусів . Результати розрахунків представлено на рис. 6.6. Класичні уявлення про хід кривої

охолодження обумовлюють наявність трьох ділянок: охолодження до температури початку кристалізації; постійне значення температури, що дорівнює температурі початку кристалізації; охолодження до температури навколишнього середовища [199]. Однак згідно з рис. 6.6 «а» змодельована крива охолодження має ще ділянку переохолодження і рекалесценцію температури.

Ураховуючи дуже малу швидкість охолодження, можна стверджувати, що рекалесценція виникає не за рахунок нерівноважності процесу. Зумовлений такий хід кривої охолодження ідеальними умовами, які відтворює числовий експеримент. У такому разі метал є абсолютно чистим і відтворюються умови гомогенної кристалізації без наявності жодних домішок. Перші центри кристалізації з'являються лише після того, коли температура системи зменшиться за температуру кристалізації $T_{кр}$ на інтервал метастабільності для утворення центрів кристалізації ΔT_{m2} (рис. 5.5). Поява твердих часток супроводжується виділенням теплоти кристалізації. Температура системи підвищується майже до $T_{кр}$ і спостерігається лише зростання кристалів, що вже сформувалися. Такий механізм процесу підтверджується розрахунком кількості твердої фази (рис. 6.6, б). На початку кристалізації стрибкоподібно з'являються декілька твердих осередків, а потім вони зростають із постійною швидкістю. Відповідно до рис. 6.6 «в», усі зародки виникли за короткий інтервал часу (0,2 с). Такий стрибок при появі центрів кристалізації, свідчить, що процес стає нестійким у момент початку кристалізації навіть при дуже низькій швидкості охолодження, а ця температурна точка (температура дійсної кристалізації, яка дорівнює $T_{кр} - \Delta T_{m2}$) є точкою біфуркації. Відповідна структура твердого алюмінію, яка складається із п'яти субзерен, зображена на рис. 6.6 «б».

При проведенні наступної групи експериментів, коефіцієнти тепловіддачі з усіх сторін вибирали однаковими і вони мали значення: 5; 10; 20; 50; 100, 150 та 200 Дж/(м·с·К) [282; 283]. При цих параметрах швидкість охолодження, яка розраховувалася за змодельованою кривою охолодження,

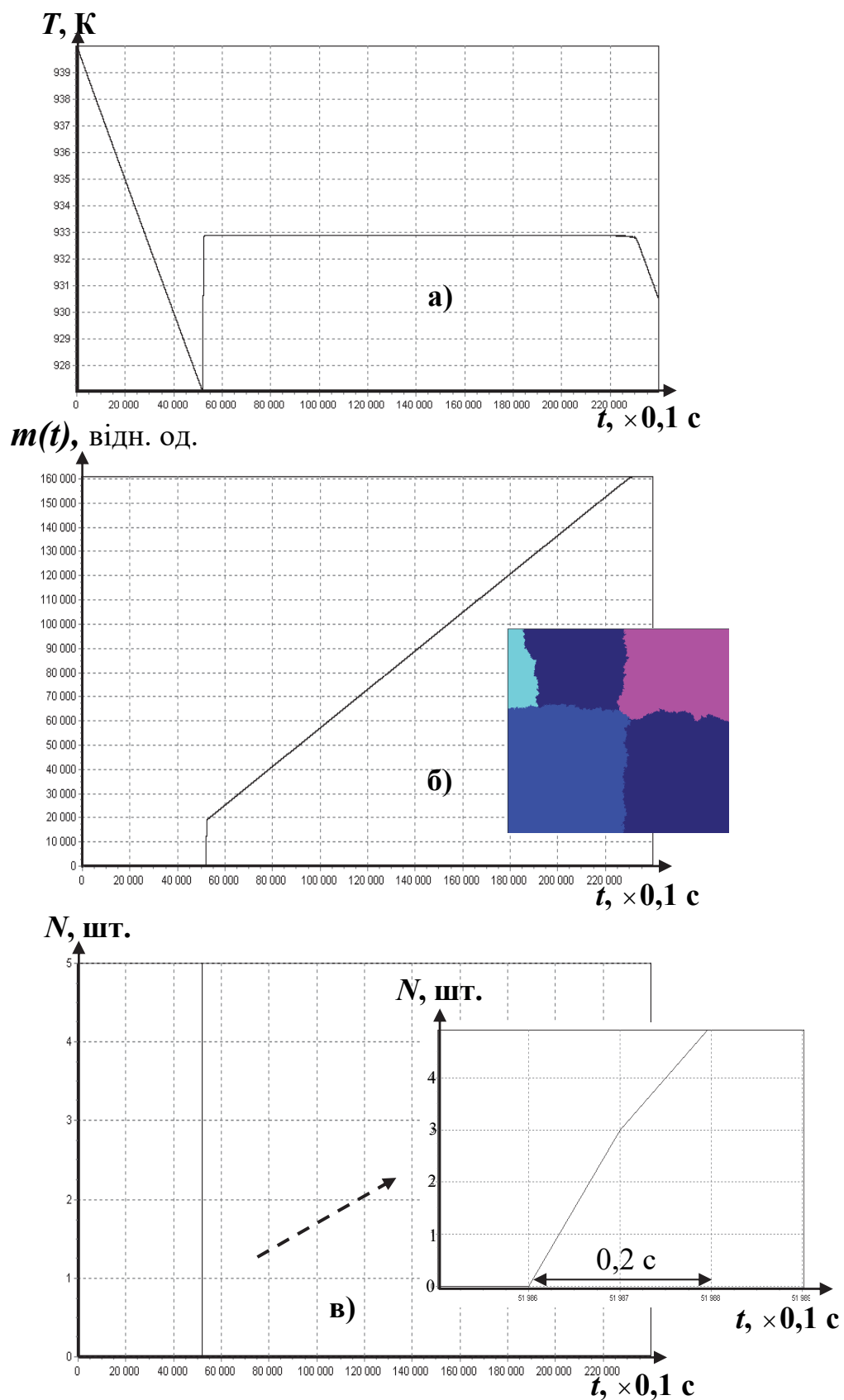


Рис. 6.6 Крива охолодження (а); структура твердого Al та кількість твердої фази (б); кількість зародків, які утворилися в рідкому металі (в), при швидкості охолодження $V_{ox} = 0,00025$ град/с

набувала значення: 0,17; 0,33; 0,67; 1,67; 3,33; 5,00 та 6,67 град/с. Модифікатор був відсутній. Інтервал метастабільності для утворення центрів кристалізації у такому разі, вибирали 5 градусів, а інтервал метастабільності для зростання кристалів – 0,1 градус.

Згідно з рис. 6.7 при збільшенні швидкості охолодження починає змінюватися форма кривої охолодження. Для V_{ox} у діапазоні від 0,17 до 1,67 град/с (рис. 6.7 а, б, в) термограми дуже мало відрізняються від кривої яка розрахована при умовах, наближених до рівноважних (рис. 6.6, а). При більшому охолодженні ($V_{ox} = 3,33; 5,00$ та 6,67 град/с) вигляд кривих суттєво змінюється. Спочатку з'являється пік в кінці кристалізації (рис. 6.7, г), а потім зникає рекалесценція температури на початку процесу і криві набувають вигляду із майже постійною температурою (рис. 6.7 д, е).

Температурні ефекти, які спостерігаються на термограмах при підвищенні швидкості охолодження (рис. 6.7 г, д, е), мають місце і в реальних експериментах, але в значно менших розмірах. Це зменшення можна пояснити інерційністю реальної термопари із захисними елементами, яка "працює" як фільтр низьких частот і згладжує ці ефекти.

Пояснити зміни вигляду кривих охолодження можна проаналізувавши залежності кількості центрів кристалізації (рис. 6.8.1 і 6.8.2) та швидкості їх утворення (рис. 6.9.1 і 6.9.2) від часу в процесі кристалізації.

За невеликої швидкості охолодження рідкого металу $V_{ox} = 0,17$ град/с крива залежності утворених центрів кристалізації від часу ($N = f(t)$) є зростаючою (рис. 6.8.1, а), швидкість їх утворення має один екстремум (рис. 6.9.1, а). Але всі зародки виникли за короткий інтервал часу 0,3 с. Він майже співпадає із часом появи центрів при дуже повільному охолодженні (рис. 6.6, в), незважаючи на те, що швидкості охолодження розрізняються на три порядки. Після появи центрів переохолодження зникає, на термограмі з'являється рекалесценція і далі відбувається поступове зростання кристалів, якому відповідає пряма («полиця») кривої охолодження. Структура твердого

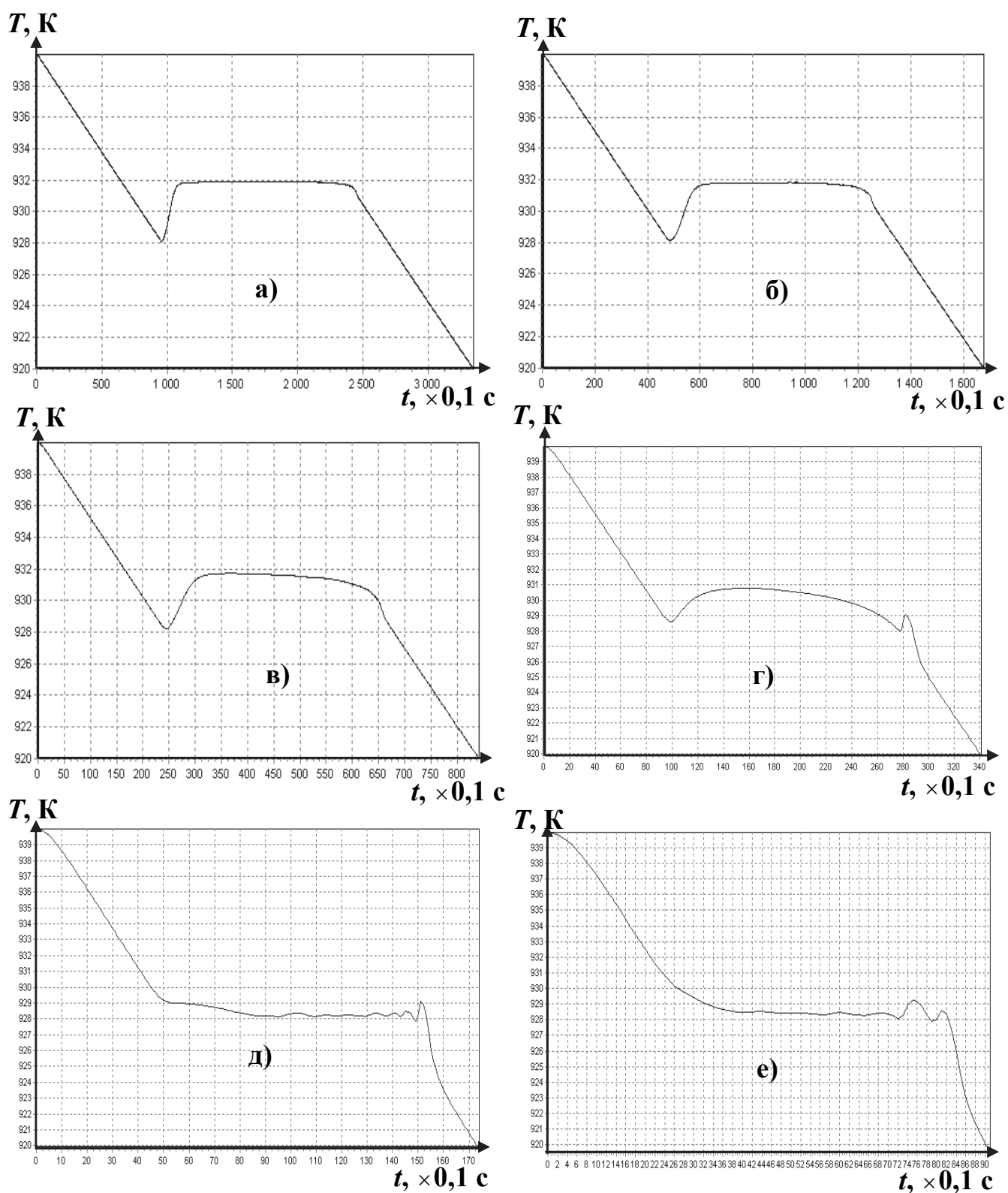


Рис 6.7 Криві охолодження чистого алюмінію, що змодельовані при різних швидкостях охолодження V_{ox} : а – 0,17 град/с; б – 0,67 град/с; в – 1,67 град/с; г – 3,33 град/с; д – 5,00 град/с; е – 6,67 град/с

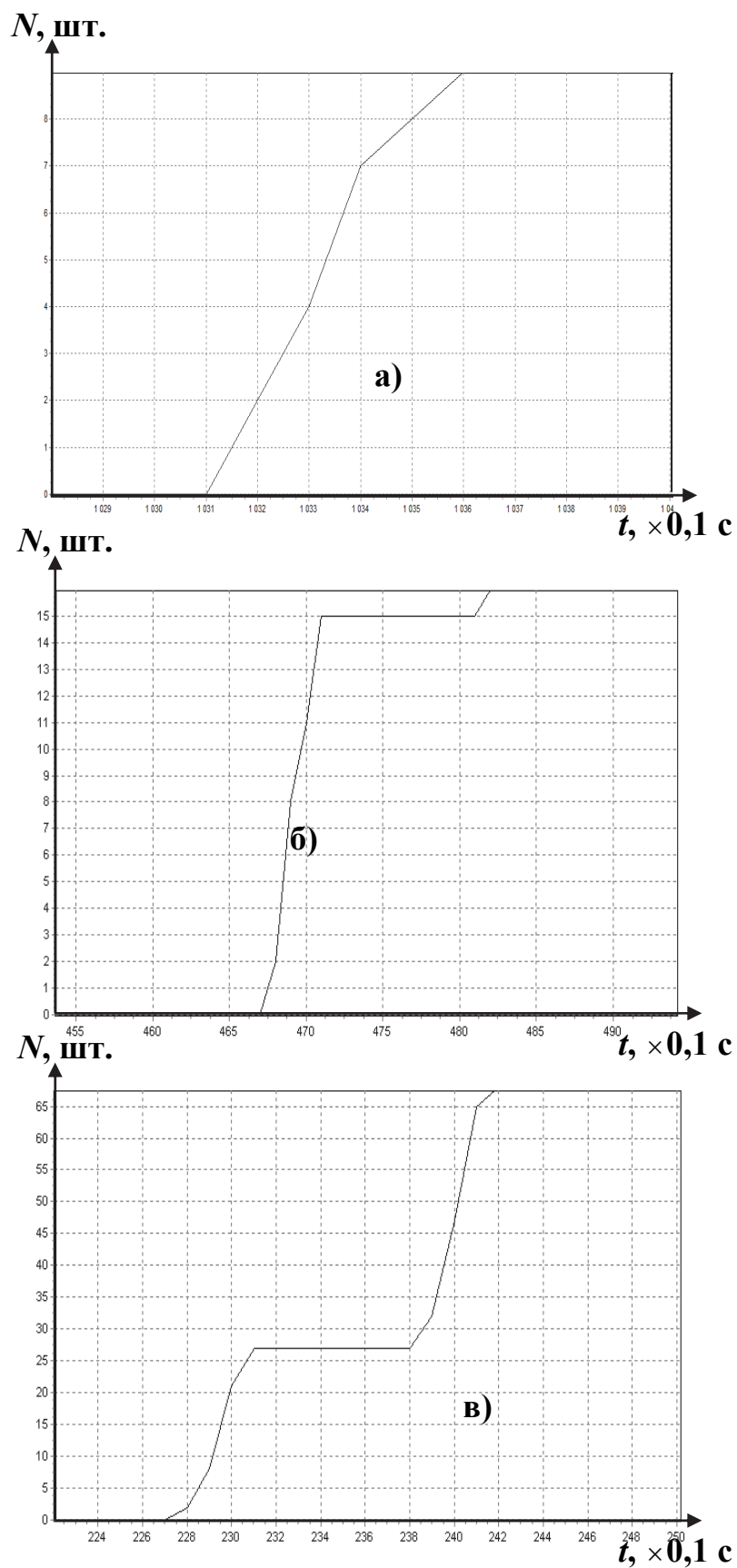


Рис 6.8.1 Кількість центрів твердої фази, що утворилися при гомогенній кристалізації алюмінію при різних швидкостях охолодження V_{ox} : а – 0,17 град/с; б – 0,67 град/с; в – 1,67 град/с

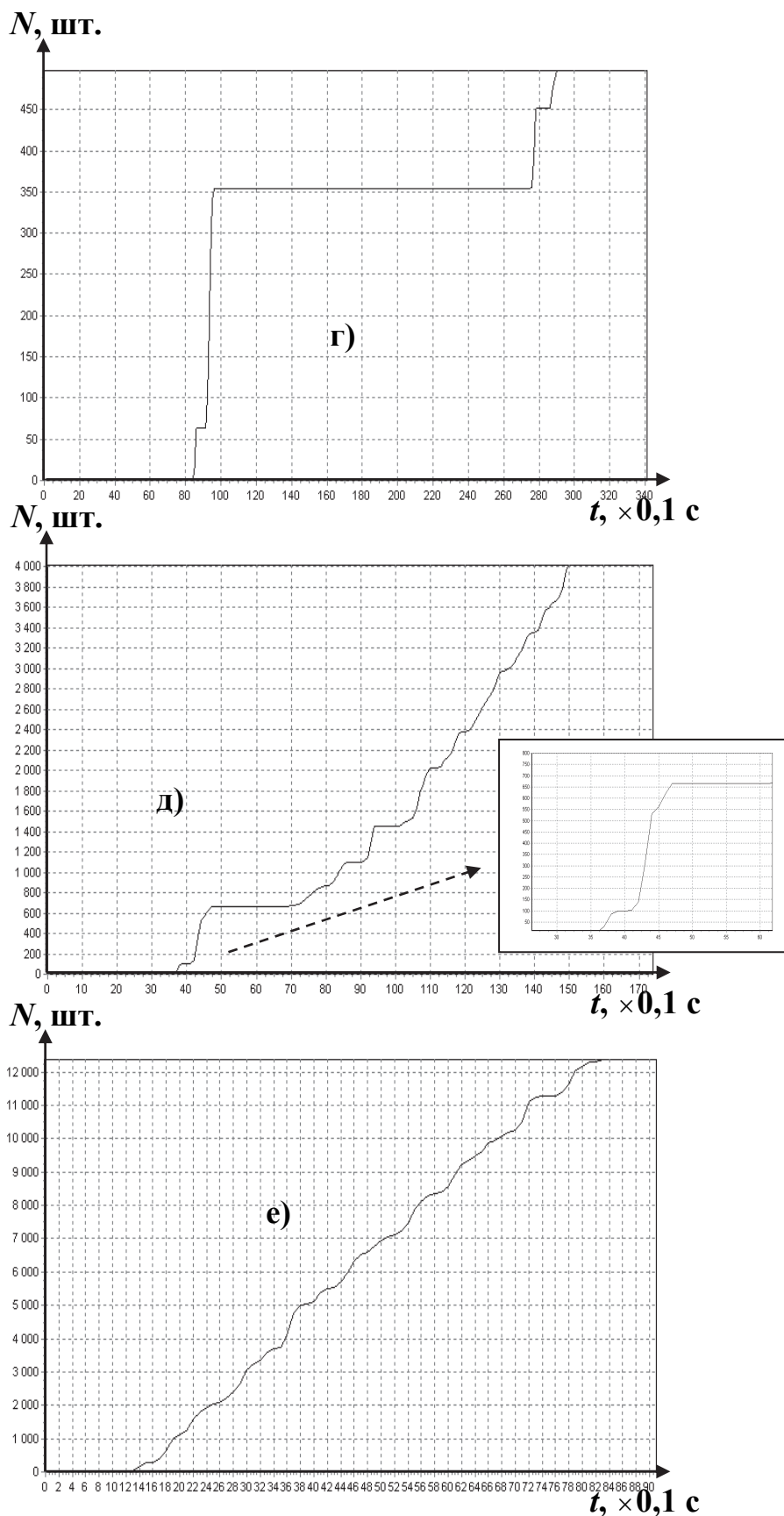


Рис 6.8.2 Кількість центрів твердої фази, що утворилися при гомогенній кристалізації алюмінію при різних швидкостях охолодження $V_{ох}$: г – $3,33$ град/с; д – $5,00$ град/с; е – $6,67$ град/с

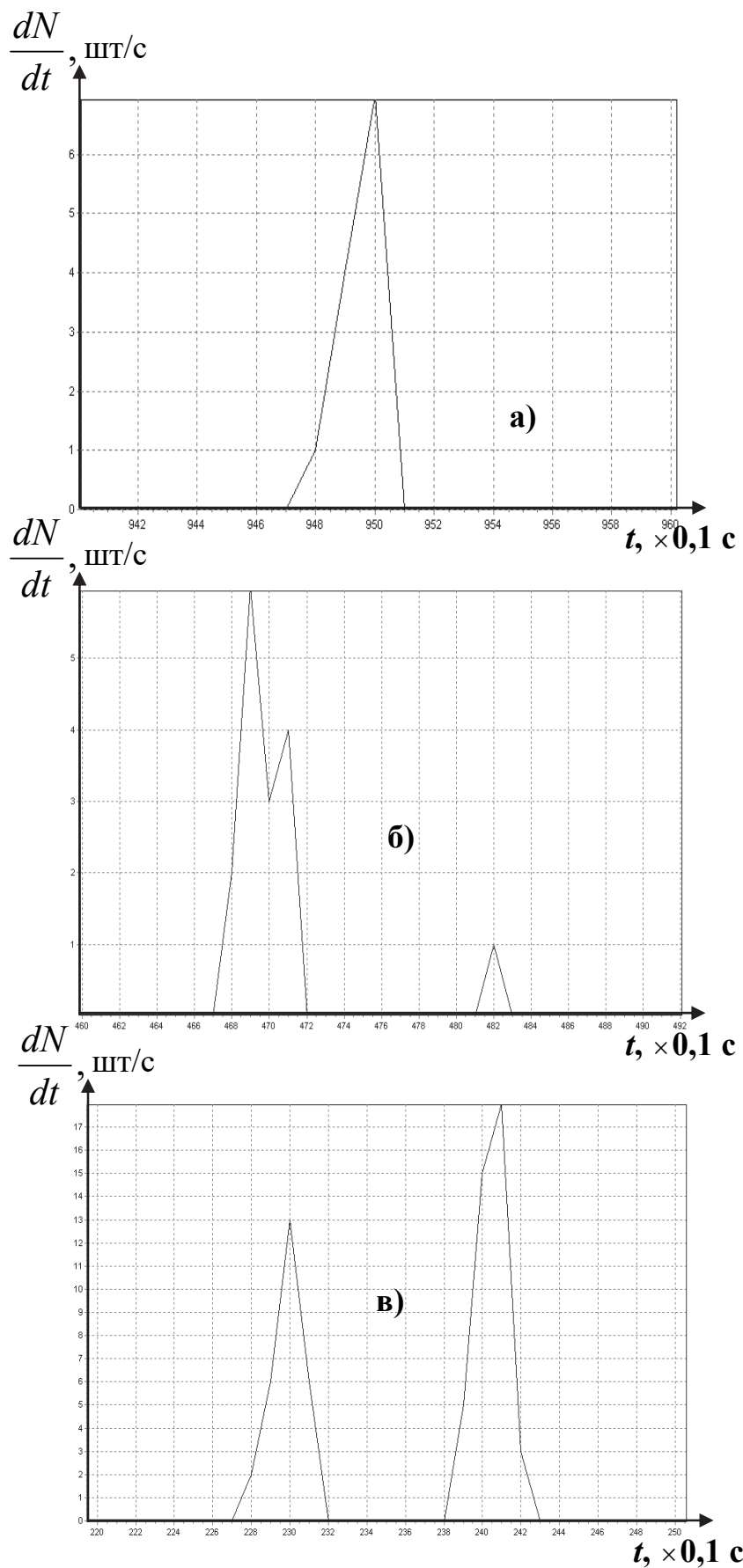


Рис 6.9.1 Швидкість гомогенного утворення центрів твердої фази в процесі кристалізації алюмінію при різних швидкостях охолодження $V_{ох}$: а – 0,17 град/с; б – 0,67 град/с; в – 1,67 град/с

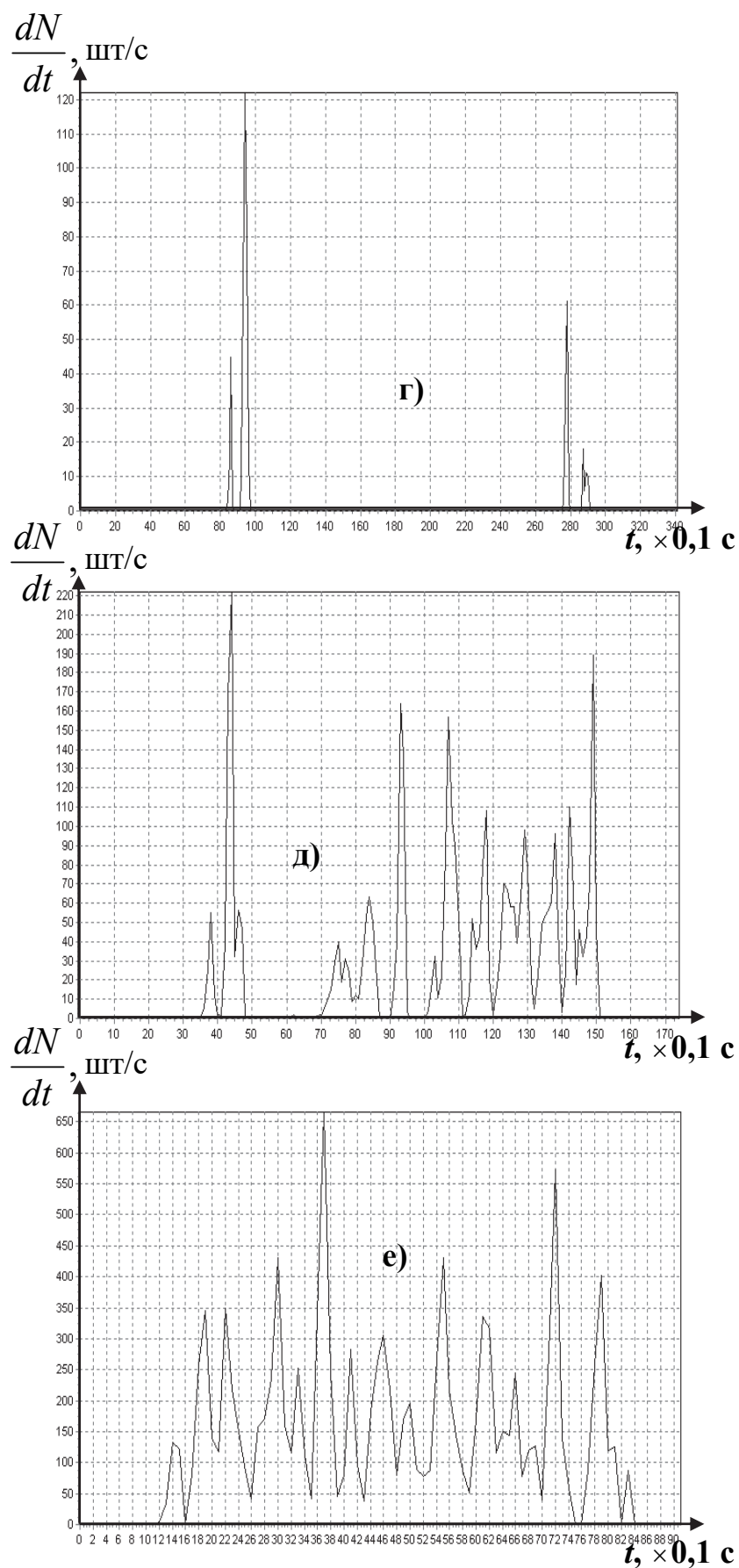


Рис 6.9.2 Швидкість гомогенного утворення центрів твердої фази у процесі кристалізації алюмінію при різних швидкостях охолодження V_{ox} : г – 3,33 град/с; д – 5,00 град/с; е – 6,67 град/с

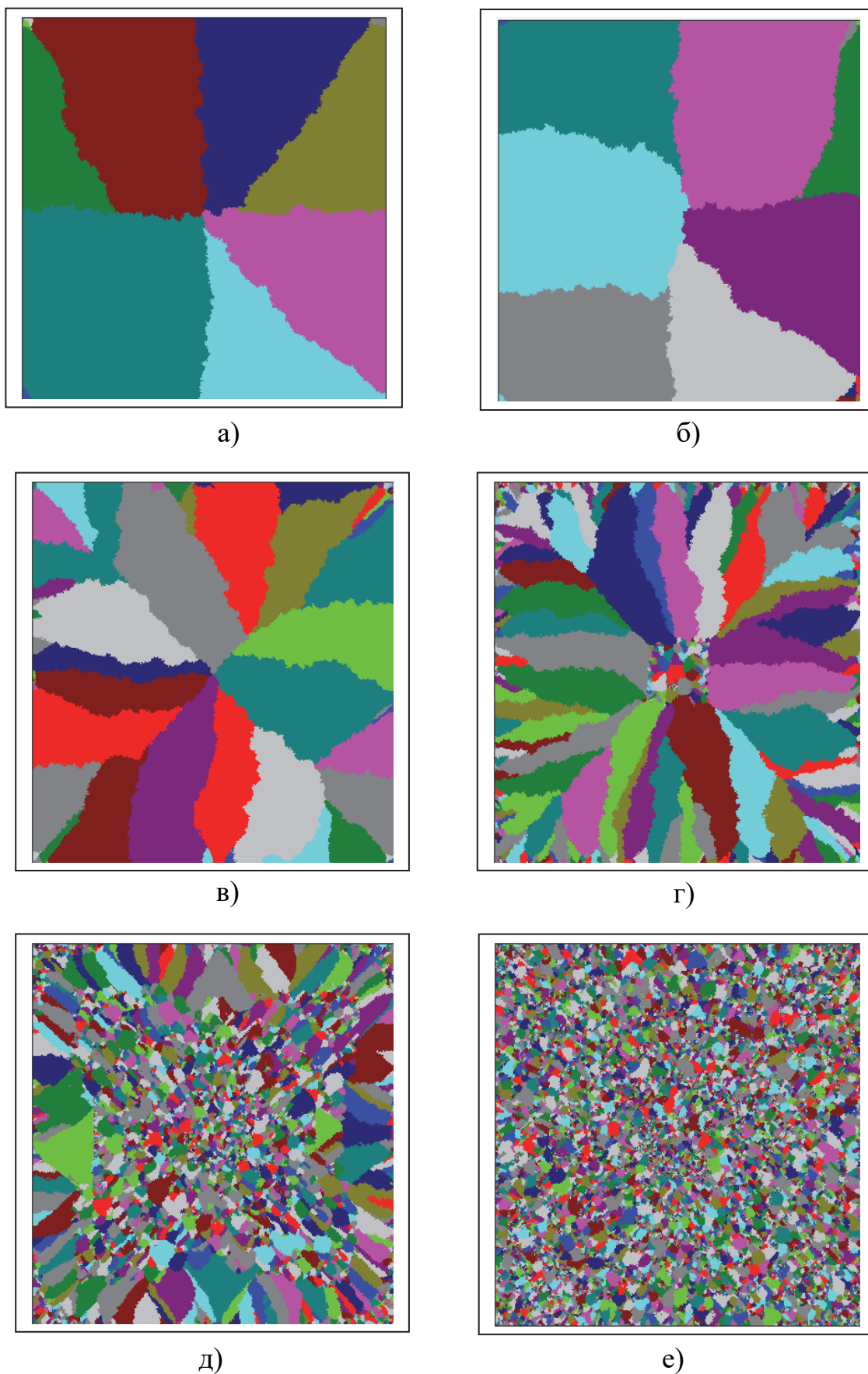


Рис. 6.10 Макроструктури чистого алюмінію, що змодельовані при різних швидкостях охолодження V_{ox} : а – 0,17 град/с; б – 0,67 град/с; в – 1,67 град/с; г – 3,33 град/с; д – 5,00 град/с; е – 6,67 град/с

металу, при цьому, складається із великих, майже не орієнтованих зерен (рис. 6.10, а).

Збільшення швидкості охолодження удвічі ($V_{ox} = 0,67$ град/с) призводить до появи «сходинки» на кривій $N = f(t)$ (рис. 6.8.1, б), а швидкість їх утворення має вже два піки (рис. 6.9.1, б). Тобто центри кристалізації виникають в два етапи: як на початку процесу, так і через певний проміжок часу. При цьому зміни на кривій охолодження незначні. Дещо знижується температура «полиці» (на десяті долі градуса) і трохи швидше спадає температура перед закінченням кристалізації (рис. 6.7, б). Структура твердого металу майже не змінюється (рис. 6.10, б).

При наступному підвищенні V_{ox} до 1,67 град/с «сходинки» на кривій залежності центрів кристалізації стають добре вираженими (рис. 6.8.1, в). Їх загальна кількість зростає, а швидкість утворення має вже два чітко виражені піки (рис. 6.9.1, в). Зміни на кривій охолодження більш помітні. Помітним стає і зниження температури «полиці» перед закінченням кристалізації (рис. 6.7, в). Структура твердого металу суттєво подрібнюється (рис. 6.10, б) і зерна стають більш видовженими до центру системи.

Подальше зростання швидкості охолодження ($V_{ox} = 3,33$ град/с) призводить до появи декількох «сходинок» на кривій $N = f(t)$ (рис. 6.8.2, г). На залежності швидкості утворення центрів два піки, які спостерігалися у попередньому випадку, починають розділятися і на рис. 6.9.2 «г» видно вже чотири екстремуми. Тобто процес утворення центрів кристалізації стає багатостадійним. Зміни на кривій охолодження суттєві: зменшується величина рекалесценції, температурна «полиця» майже зникає, ще швидше спадає температура перед закінченням кристалізації і в кінці кристалізації з'являється невеликий пік (рис. 6.7, г). Структура твердого металу стає тризонною (рис. 6.10, г). Біля умовних стінок форми спостерігаються невеликі зерна, частина з яких пригнічується іншими кристалітами. Потім утворюється зона подовжених і орієнтованих до центру кристалів. У центрі існує невелика зона неорієнтованих зерен.

Суттєве збільшення швидкості охолодження ($V_{ox} = 5,00$ град/с) призводить до появи багатьох «сходинок» на кривій $N = f(t)$ (рис. 6.8.2, д). Фактично ця залежність набуває «хвилястого» характеру. Це добре видно і на залежності швидкості утворення центрів (рис. 6.9.2, д). Піків утворюється багато і процес утворення центрів кристалізації стає майже періодичним. Хоча на початку кристалізації утворення центрів має, як і раніше, вибуховий характер. Форма кривої охолодження змінюється принципово: зникає рекалесценція, температурна «полиця» з'являється знову, але її температура зменшується і фактично дорівнює температурі кристалізації мінус інтервал метастабільності для утворення зародків (рис. 6.7, д). Структура твердого металу стає різнозернистою (рис. 6.10, д). Ближче до умовних стінок форми спостерігаються більш великі зерна, а в центрі виливка – достатньо малі.

Наступне підвищення V_{ox} до 6,67 град/с підкреслює ефекти, які спостерігалися у попередньому випадку. Залежність $N = f(t)$ має «хвилястий» характер (рис. 6.10.2, е). Процес утворення центрів кристалізації стає майже періодичним і неперервним у часі (рис. 6.9.2, е). Форма термограми має майже пряму ділянку, що відповідає кристалізації рідкого металу. Але на початку кристалізації хід кривої охолодження стає більш плавним, що обумовлено впливом градієнту температур уздовж перерізу системи при вже достатньо великій швидкості охолодження (рис. 6.7, е). Структура твердого металу стає дрібнозернистою (рис. 6.10, е).

Пояснення змін на кривих охолодження, залежностях кількості центрів кристалізації і швидкості їх утворення від часу та структури твердого металу, які спостерігаються в обчислювальному експерименті, зумовлено процесами, що схематично показані на рис. 6.11.

У разі повільного охолодження, який на рис. 6.11 позначено 1, кристалізація починається з появи центрів кристалізації після того, як температура металу стане нижчою, ніж температура кристалізації $T_{кр}$ на інтервал метастабільності для появи центрів кристалізації ΔT_{m2} (лінія Б). При цьому виділяється тепло кристалізації. У такому разі швидкість, з якою це

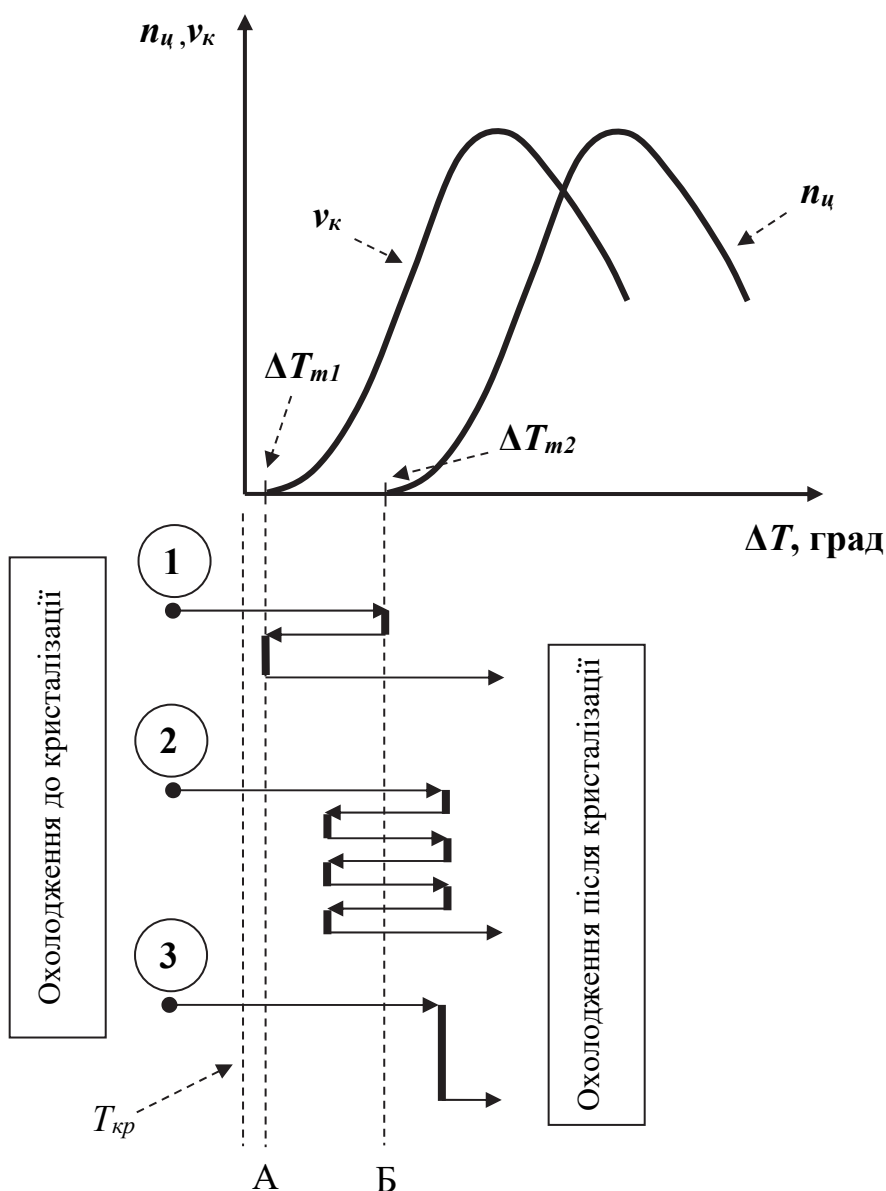


Рис. 6.11 Схематичне зображення процесів гомогенного утворення центрів кристалізації і їх росту при різних швидкостях охолодження: ΔT – переохолодження; n_u – швидкість утворення центрів кристалізації; v_k – лінійна швидкість росту кристалу; ΔT_{m1} – інтервал метастабільності для швидкості росту кристалу; 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

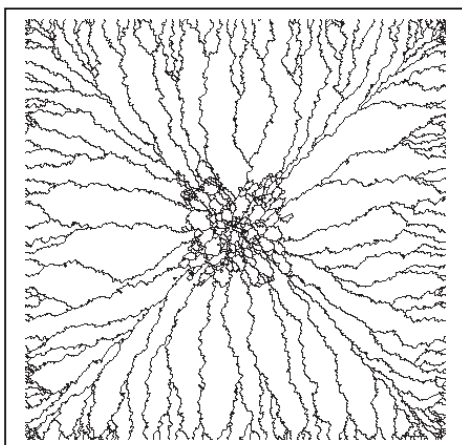
тепло виділяється, значно перевищує швидкість тепловідводу. У результаті чого температура системи підвищується до температури, яка нижче $T_{кр}$ на інтервал метастабільності росту кристалів ΔT_{ml} , який близький до нуля (лінія А). Нові центри кристалізації не з'являються і відбувається зріст кристалів, які вже утворилися. Після закінчення фазового перетворення метал просто охолоджується і його температура поступово знижується. За умови більш швидкого охолодження, який на рис. 6.11 позначений 2, центри кристалізації починають утворення після досягнення лінії Б. Однак за рахунок достатньо швидкого охолодження, температура у всій системі або в окремих її частинах, знову знижується до лінії Б і з'являються умови для утворення нових зародків твердої фази. Їх поява зменшує величину переохолодження і продовжується зростання вже існуючих кристалів,

Такі процеси можуть відбуватися або один, або декілька разів, після чого кристалізація закінчується і метал просто охолоджується. Коли система охолоджується з високою швидкістю і досягає лінії Б, знову ж таки починається кристалізація. Але швидкий тепловідвід не дає температурі металу підвищуватись і вона залишається на рівні лінії Б.

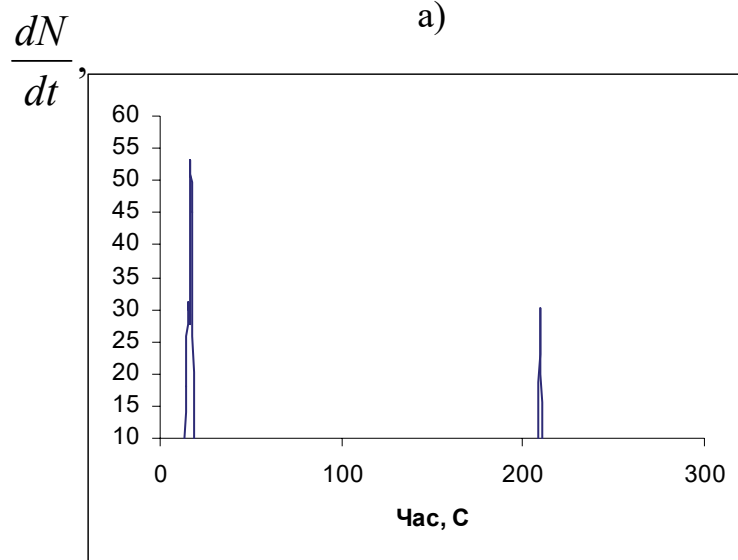
Створюються умови одночасного утворення центрів кристалізації і їх росту. Після закінчення процесу кристалізації метал охолоджується.

Виникнення кількостапного утворення зародків обумовлено утворенням класичної тризонної структури виливка (рис. 6.12). Центри кристалізації з'являються на двох етапах: на початку кристалізації та на стадії, що відповідає формуванню центральної зони рівновісних кристалів.

Використання клітинних автоматів значно спрощує математичні розрахунки при використанні моделі та дає принципову можливість моделювання нової полікристалічної структури металевих матеріалів. Вплив зовнішніх умов охолодження досліджуваної системи (розплаву) на функціонування клітинного автомата дає змогу встановити технологічні методи отримання різних структур твердого металу. Прикладом можливостей розробленої імітаційної моделі в комп'ютерному експерименті



а)



б)

Рис. 6.12 Змодельована тризонна структура алюмінію (а) та залежність швидкості утворення центрів кристалізації від часу (б) в обчислювальному експерименті з імітаційною моделлю кристалізації

гомогенної кристалізації алюмінію варіюванням швидкості охолодження були отримані модельні структури, які наведено на рис. 6.13 та 6.14 [284].

За однакової швидкості відведення тепла з усіх боків і швидкості охолодження 5 град/с утворюється різноманітна зерниста структура чистого алюмінію (рис. 6.10, д). У центрі є дрібні зерна, а з боків розміри зерен значно більші. Окрім того, структура твердого металу взаємопов'язана з формою температурного поля всередині системи. На рис. 6.13 показана структура алюмінію, яка була отримана багаторазово зміною інтенсивності відведення тепла. Спочатку дрібні зерна формувалися на межах системи 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 формою та середнім розміром зерен (рис. 6.13).

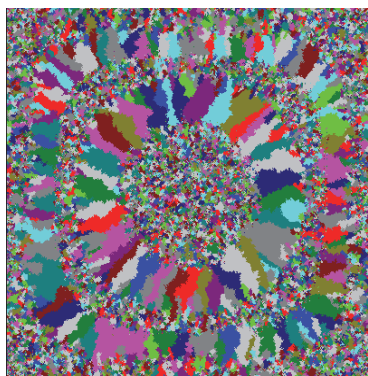


Рис 6.13 Макроструктура чистого алюмінію, змодельована черговою зміною коефіцієнтів тепловіддачі в процесі кристалізації

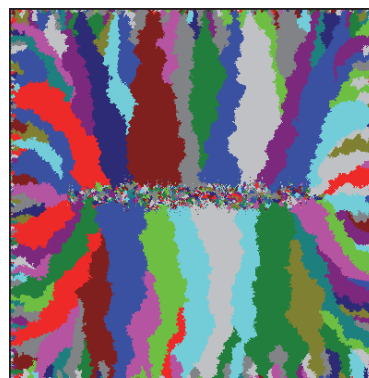


Рис. 6.14 Макроструктура з чистого алюмінію, яка змодельована асиметричними варіаціями коефіцієнтів теплопередачі

Шляхом підбору параметрів моделі, отримано складну алюмінієву структуру, в якій спостерігаються зерна різної форми, розмірів та орієнтації (рис. 6.14). Така структура алюмінію є результатом зміни швидкості

охолодження та асиметричними величинами коефіцієнтів відведення тепла з різних сторін, значення яких також змінювалися у процесі експерименту.

Ймовірно, у цьому випадку властивості реального металу матимуть анізотропію.

Такі режими кристалізації складно реалізувати на практиці, але експерименти демонструють можливості цієї модельної підсистеми. Імітаційна модель кристалізації дає змогу візуалізувати процес утворення макроструктури металів за різних умов кристалізації. А це, натомість, дає змогу у рамках комп'ютерного експерименту, розробити методи управління процесом кристалізації для отримання необхідних властивостей литих виробів.

Окрім цього, імітаційна модель сприятиме моделюванню складних процесів впливу силових полів різної природи на формування структури ливарних розплавів. А їх вплив [285] суттєво впливає на кристалізацію металевих сплавів.

6.3 Вплив модифікатора на утворення осередків твердої фази при кристалізації алюмінію

При проведенні наступної групи експериментів коефіцієнти тепловіддачі з усіх сторін та швидкості охолодження залишалися такими, як і в попередніх експериментах. Модифікатор додавали у кількості 0,1; 0,3 та 0,5 умовних відсотка. Інтервал метастабільності для утворення центрів кристалізації та інтервал метастабільності для росту кристалів було встановлено 5 градусів і 0,1 градус відповідно.

Обчислювальний експеримент показав, що при введенні 0,1 % модифікатора гомогенного утворення центрів кристалізації не відбувається при невеликих і середніх швидкостях охолодження. При V_{ox} 5,00 град/с вони починають з'являтися у невеликій кількості в кінці кристалізації (рис. 6.15).

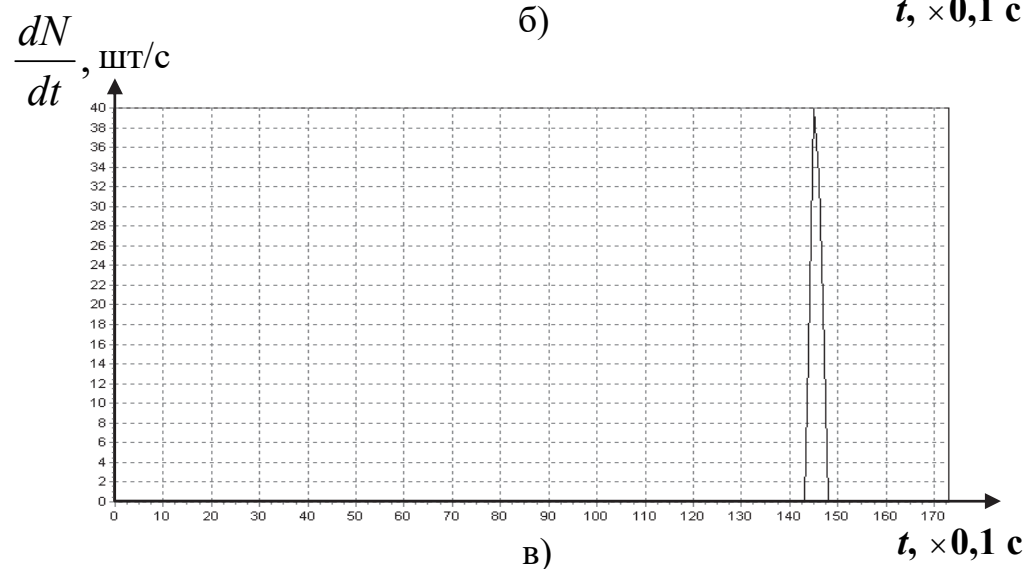
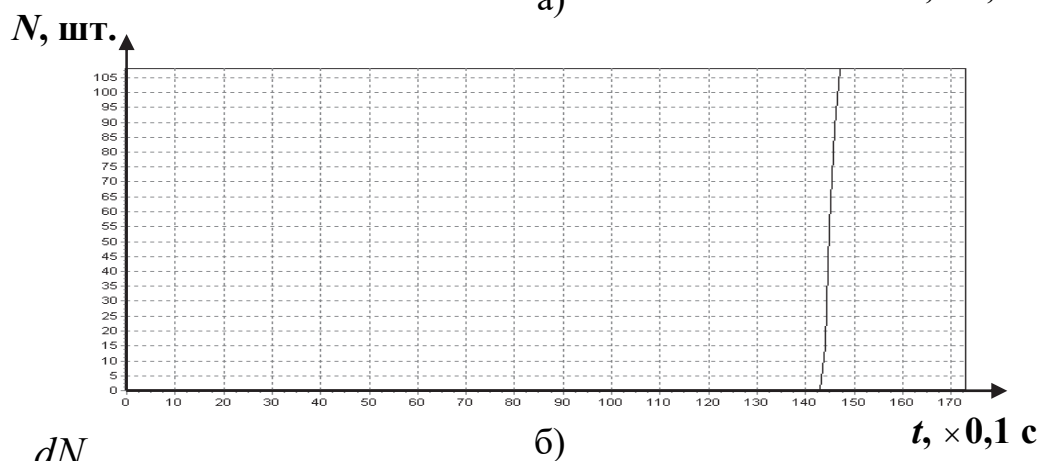
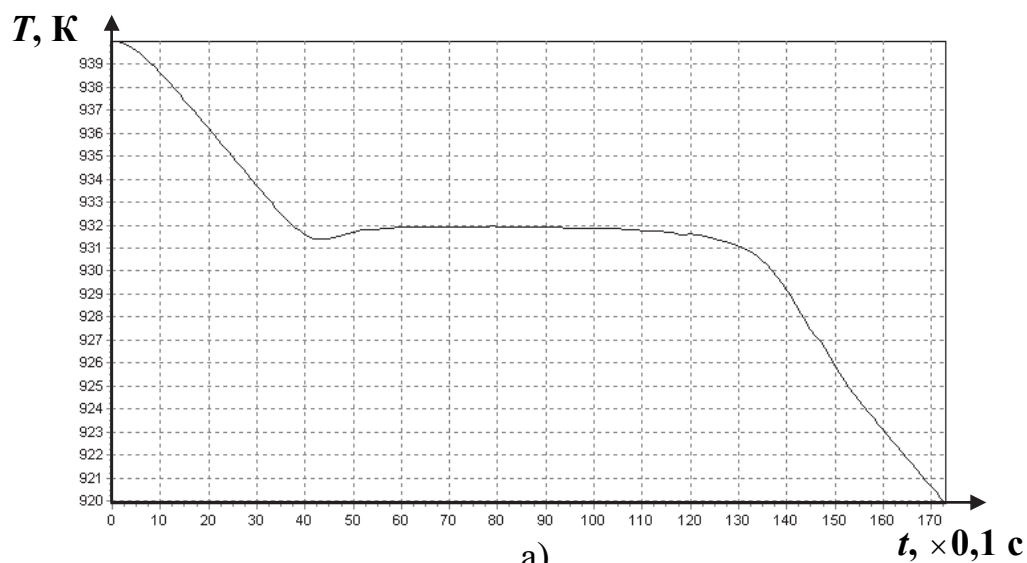


Рис. 6.15 Крива охолодження (а), кількість утворених центрів твердої фази (б) та швидкість їх утворення (в) при кристалізації чистого алюмінію, які розраховані в обчислювальному експерименті з допомогою імітаційної моделі:
швидкість охолодження – 5,00 град/с; кількість модифікатора – 0,1 %

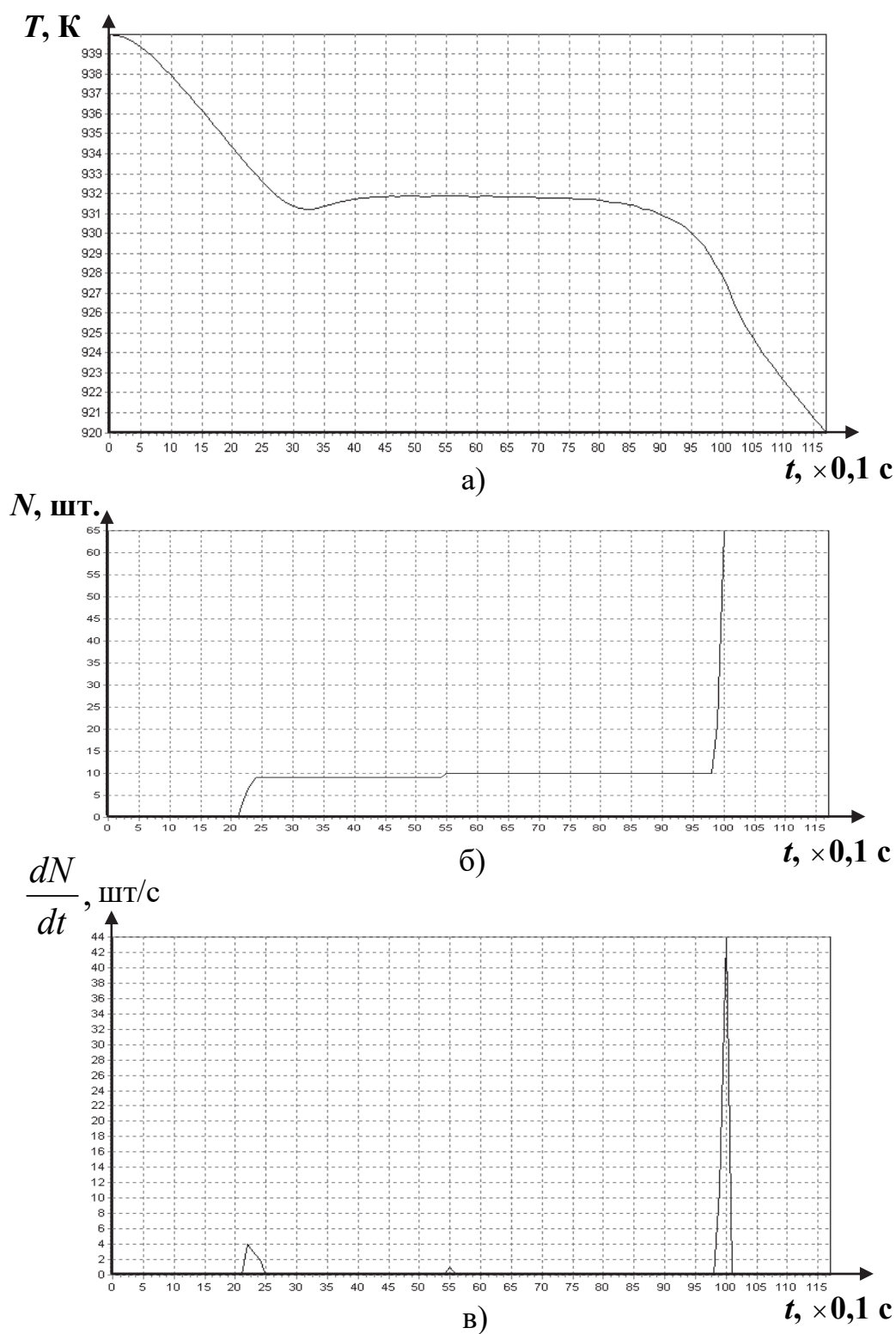


Рис. 6.16 Крива охолодження (а), кількість утворених центрів твердої фази (б) та швидкість їх утворення (в) при кристалізації чистого алюмінію, які розраховані в обчислювальному експерименті з допомогою імітаційної моделі:

швидкість охолодження – 6,67 град/с; кількість модифікатора – 0,1 %

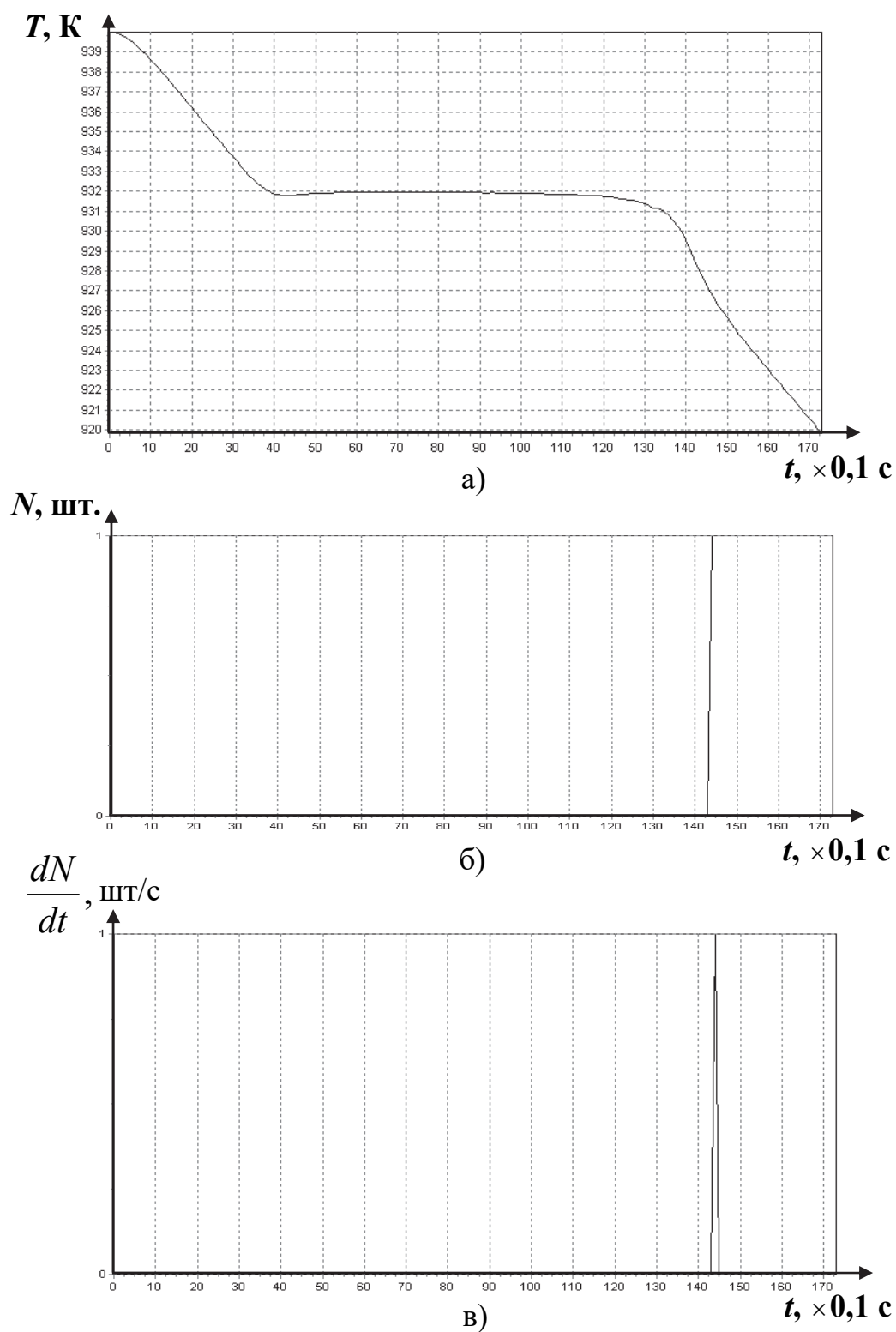


Рис. 6.17 Крива охолодження (а), кількість утворених центрів твердої фази (б) та швидкість їх утворення (в) при кристалізації чистого алюмінію, які розраховані в обчислювальному експерименті з допомогою імітаційної моделі:
швидкість охолодження – 5,00 град/с; кількість модифікатора – 0,3 %

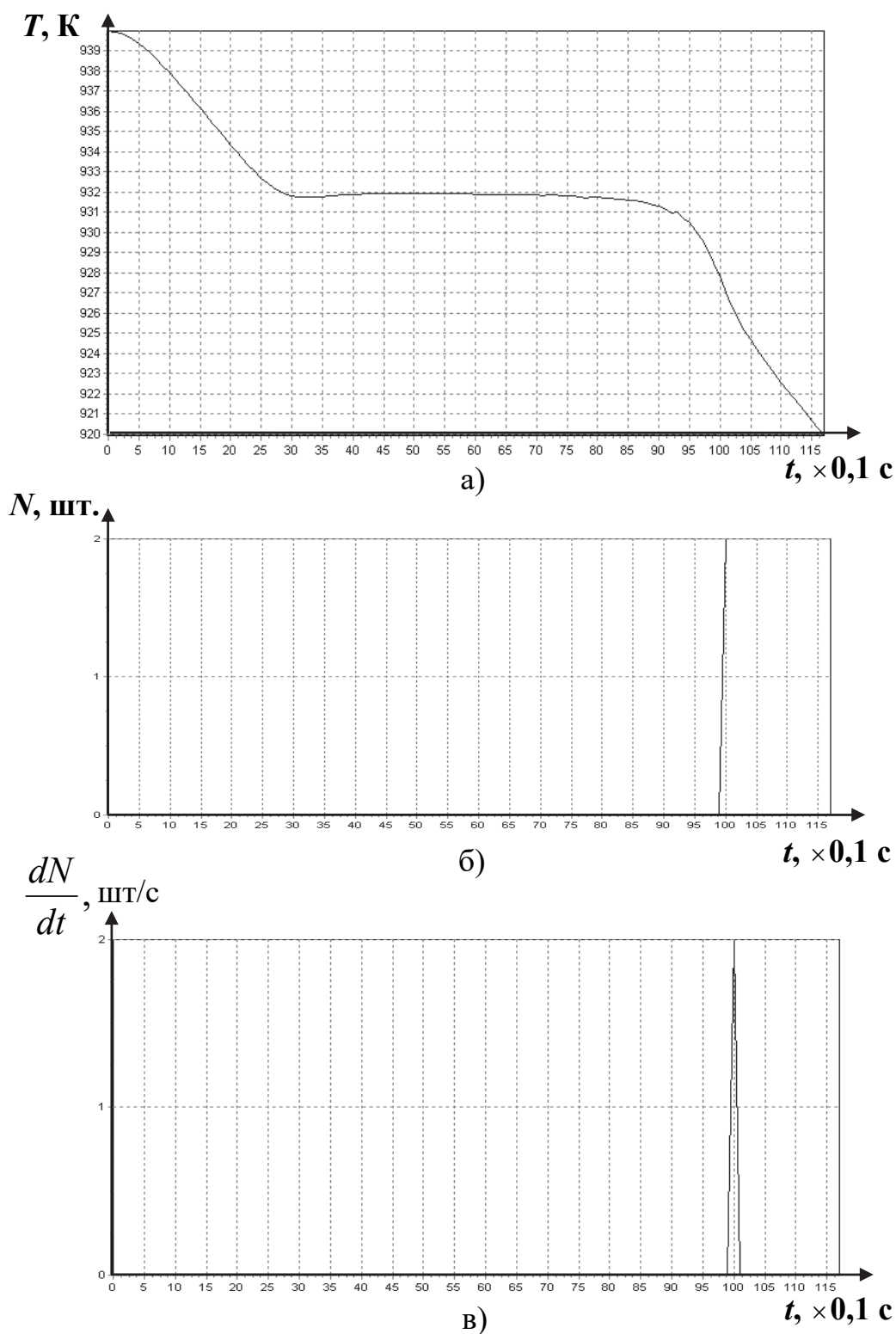


Рис. 6.18 Крива охолодження (а), кількість утворених центрів твердої фази (б) та швидкість їх утворення (в) при кристалізації чистого алюмінію, які розраховані в обчислювальному експерименті з допомогою імітаційної моделі:

швидкість охолодження – 6,67 град/с; кількість модифікатора – 0,3 %

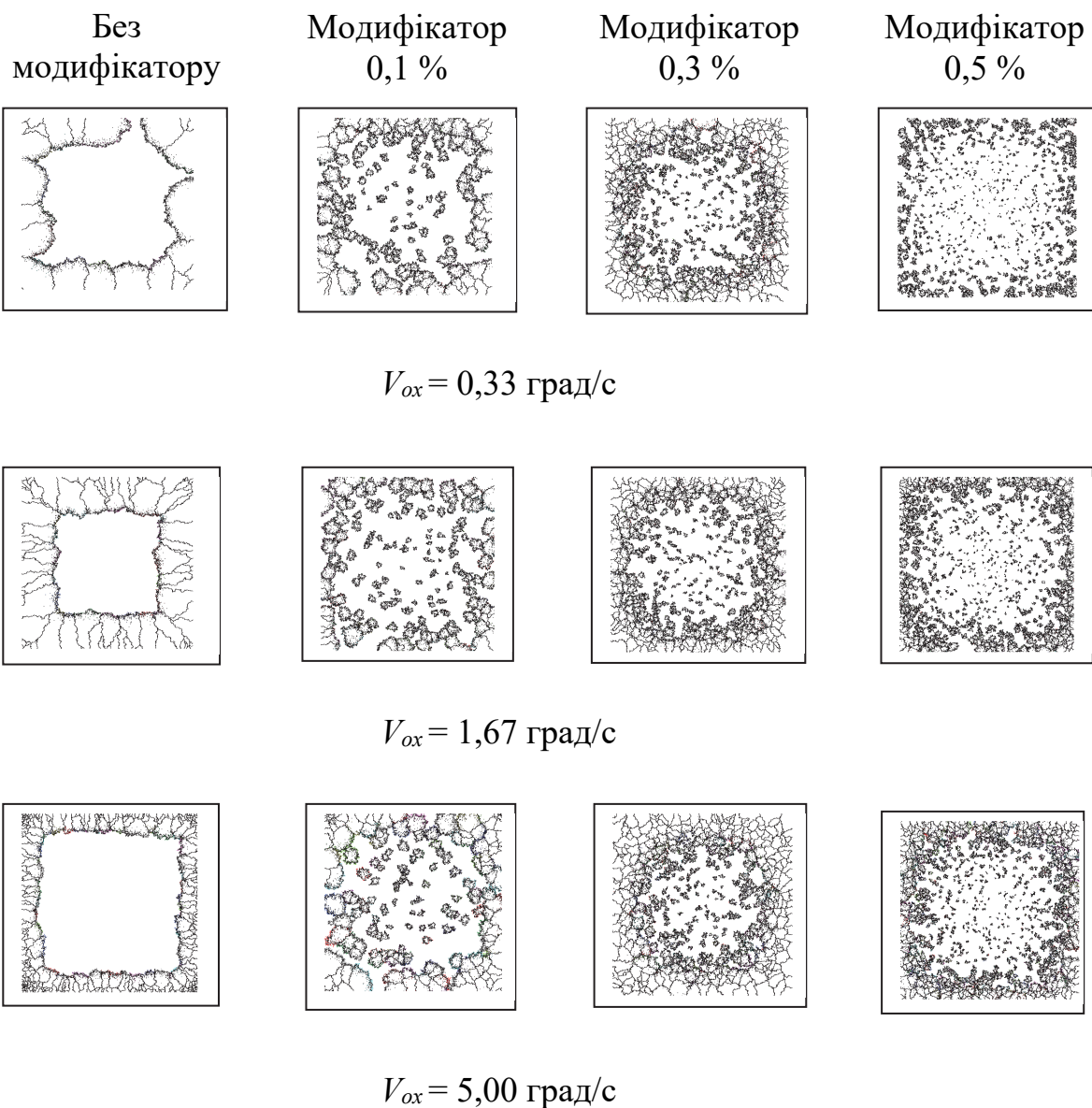


Рис. 6.19 Формування структури Al під час кристалізації, яка змодельована на різних етапах кристалізації при різних швидкостях охолодження без модифікатора і за його наявності

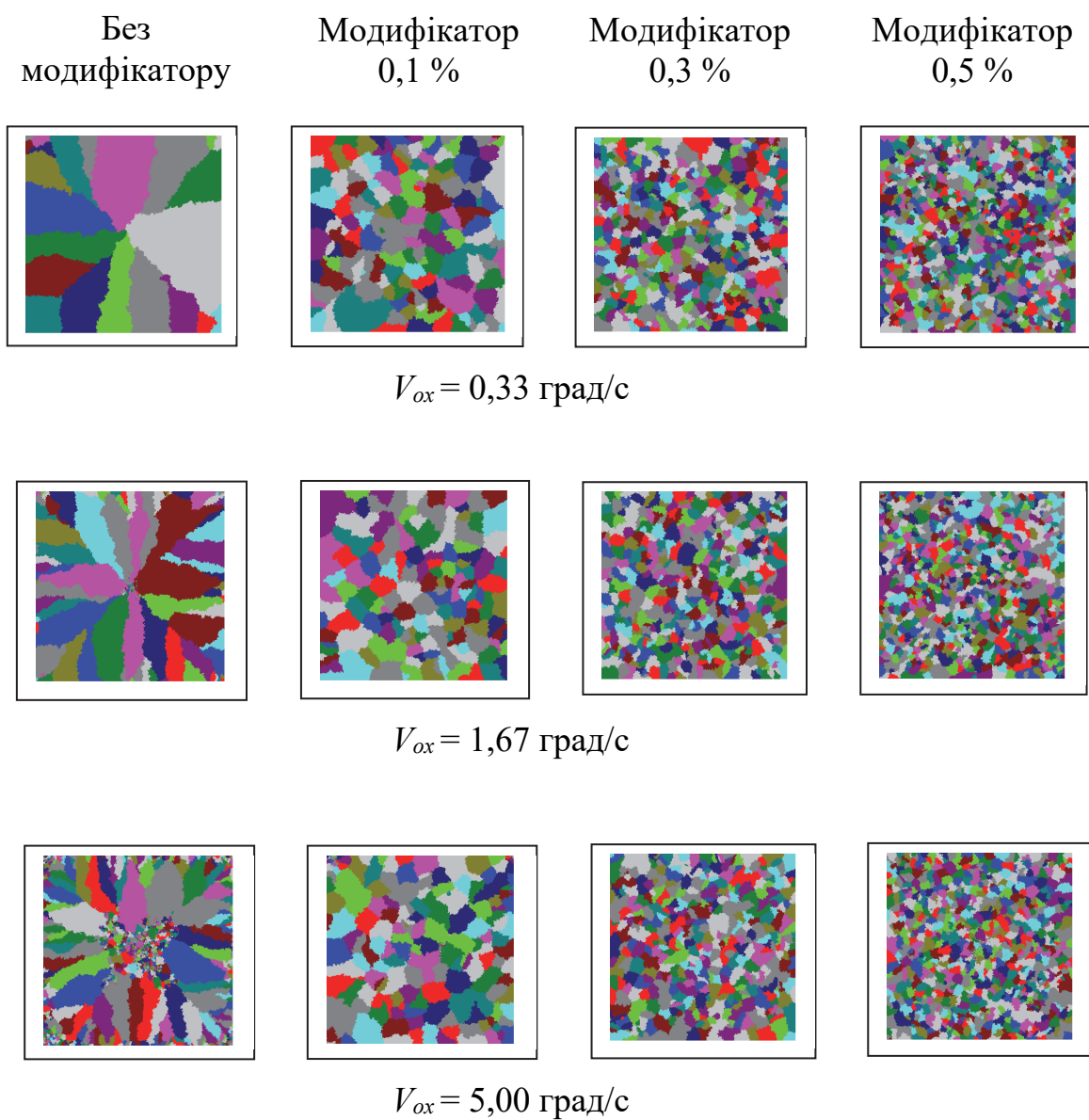


Рис. 6.20 Структури Al, які змодельовані при різних швидкостях охолодження без модифікатора і за його наявності

Причому залежність швидкості їх появи від часу відповідає гомогенному варіанту кристалізації при низькій швидкості охолодження (рис. 6.9.1, а).

Збільшення швидкості охолодження ($V_{ox} = 6,67$ град/с) призводить до самовільної появи нових центрів кристалізації, але вже у декілька етапів (рис. 6.16 б, в). У цьому разі спостерігається відповідність із чисто гомогенною кристалізацією при середніх швидкостях охолодження (рис. 6.9.1, в). У кількісному співвідношенні при обох швидкостях охолодження центрів кристалізації, що виникли самі собою, приблизно однаково. Причому криві охолодження за формою подібні, а різниця полягає у зменшенні часу кристалізації, що природно. При введенні модифікатора у кількості 0,3 %, нові центри твердої фази самі собою утворюються, коли швидкість охолодження достатньо велика – $V_{ox} = 5,00\text{--}6,67$ град/с (рис. 6.17 та 6.18). В обох випадках вони виникають в кінці кристалізації у кількості декількох штук.

На рис. 6.19 та рис. 6.20 показані структури алюмінію, що формуються у процесі кристалізації та після її закінчення за наявності запалів твердої фази у розплаві. За відсутності модифікатора, кристали утворюються біля стінок форми незалежно від швидкості охолодження. Їх розміри пов'язані із V_{ox} . Чим меншою вона є, тим розміри кристалітів більші. Введення модифікатора призводить до об'ємного характеру кристалізації. Тобто центри кристалізації розташовуються уздовж всього об'єму.

У твердому стані також спостерігається зменшення розміру зерен при збільшенні V_{ox} . Проте структура металу, в який вводили модифікатор, майже не залежить від швидкості охолодження, розрізняється тільки розмірами зерен.

У такий спосіб комп'ютерний експеримент дає змогу оцінювати вплив запалів твердої фази на формування структури литого металу. Проведені експерименти з чистим алюмінієм показують можливості імітаційної моделі кристалізації.

6.4 Перевірки адекватності формули критичного розміру зародка твердої фази

У Розділі 5 було представлено розробку імітаційної моделі кристалізації металів і сплавів, в основу якої покладено поєднання математичних методів моделювання з ймовірнісним клітинним автоматом. Таке поєднання дає змогу уникнути значних математичних труднощів і прогнозувати процес формування структури металу при кристалізації за різних умов охолодження, досліджувати його як при гомогенному, так і при гетерогенному утворенню зародків твердої фази. Цю імітаційну модель можна використати для підтвердження адекватності виразу (1.27), який визначає критичний розмір зародка твердої фази (Розділ 1). Таку змогу надає тільки комп'ютерний експеримент. У натурному експерименті з реальним металом зробити такі дослідження неможливо, оскільки в металах завжди присутні домішки.

У цій моделі безпосередньо визначити критичний розмір зародка твердої фази ($R_{кр}$) неможливо. У ній надається інформація тільки про кількість центрів кристалізації, які утворилися при зазначених умовах охолодження. Мінімальний розмір твердої частинки в моделі дорівнює мінімальному елементу клітинного автомата, який визначається геометричними розмірами системи, яка досліджується, і розмірністю масивів, які задіяні при програмуванні алгоритму моделі. Однак, можна припустити, що чим менше $R_{кр}$, тим більше буде кількість утворених частинок твердої фази N . Тоді якщо формула (1.27) адекватна, то залежність $N=f(V_{ox})$ повинна бути лінійною.

Розрахунки проводилися для чистих металів: Ag, Al, Au, Bi, Cu, Ni, Pb, Sn, Zn при швидкостях охолодження 0,17; 0,33; 0,67; 1,00; 1,67; 2,00; 3,50; 5,00; 6,00; 6,67 град/с [286]. В імітаційній моделі кристалізації розрахунки проводяться у двовимірній області, розміри якої становили 0,025×0,025 м. У таблиці 6.4 представлено значення фізичних характеристик металів, які

Таблиця 6.4

**Значення фізичних характеристик металів,
які використовувались в розрахунках**

№	Метал	T_k , К	ρ , кг/м ³	c , Дж/(кг·К)	λ , Вт/(м·К)	L , кДж/кг
1	Al	933	2700	1290	210	397
2	Bi	544	9900	145	10	52
3	Au	1338	17720	169	255	205
4	Cu	1358	8180	520	250	214
5	Ni	1728	7850	680	74	308,5
6	Sn	505	7080	255	45	60,2
7	Pb	600,6	10900	144	24	26,5
8	Ag	1235	9600	305	260	105
9	Zn	693	6920	470	80	112

Таблиця 6.5

**Залежність кількості центрів твердої фази при гомогенній
кристалізації алюмінію від швидкості їх охолодження**

№	Швидкість охолодження, град/с									
	0,17	0,33	0,67	1,00	1,67	2,00	3,50	5,00	6,00	6,67
1	9	24	40	69	115	151	226	374	416	453
2	14	28	54	76	103	126	242	366	452	477
3	15	24	32	85	117	133	214	374	419	461
4	17	15	49	61	113	143	248	377	433	488
5	16	24	40	75	98	140	253	347	455	476
6	13	26	46	76	101	138	214	352	438	475
7	14	30	44	74	111	154	220	315	470	477
8	16	26	36	55	99	131	253	365	441	454
9	11	26	40	62	100	111	247	383	419	453
10	14	21	48	64	113	137	208	341	436	416
11	16	21	40	70	101	135	235	347	443	479
Σ	14±1	24±1	43±2	70±3	106±2	136±4	233±5	358±6	438±5	464±6
δ , %	7,4	4,17	4,65	4,29	1,89	2,94	2,15	1,68	1,14	1,29

Таблиця 6.6

**Залежність кількості центрів твердої фази при гомогенній
кристалізації міді від швидкості їх охолодження**

№	Швидкість охолодження, град/с									
	0,17	0,33	0,67	1,00	1,67	2,00	3,50	5,00	6,00	6,67
1	7	14	17	21	46	59	75	129	157	208
2	12	4	16	22	36	53	76	122	263	181
3	5	7	10	17	42	64	68	123	126	193
4	8	8	16	32	51	52	92	124	189	193
5	7	8	23	25	41	44	80	118	154	163
6	7	11	16	29	33	40	69	144	235	156
7	8	25	12	27	38	48	88	115	154	182
8	12	7	16	21	30	48	94	115	130	195
9	6	11	15	19	28	43	73	126	158	163
10	5	7	18	46	36	42	124	93	163	174
11	8	8	22	22	47	52	73	99	148	199
Σ	8 ± 1	10 ± 2	16 ± 1	26 ± 2	39 ± 2	50 ± 2	83 ± 5	119 ± 4	171 ± 1 3	182 ± 5
δ, %	12,5	20,0	6,3	7,69	5,1	4,0	6,0	3,4	7,6	2,8

Таблиця 6.7

**Залежність кількості центрів твердої фази при гомогенній
кристалізації від швидкості їх охолодження для різних металів**

Метал	Швидкість охолодження, град/с									
	0,17	0,33	0,67	1,00	1,67	2,00	3,50	5,00	6,00	6,67
Ag	8	12	21	31	49	59	99	139	157	166
Al	14	24	43	70	106	136	233	358	438	464
Au	6	7	10	11	15	19	41	63	70	92
Bi	5	10	20	29	37	60	102	113	150	167
Cu	8	10	16	26	39	50	83	119	171	182
Ni	5	7	16	27	50	56	105	139	176	213
Pb	6	8	19	32	57	75	108	166	204	235
Sn	6	8	21	33	52	72	113	174	192	226
Zn	5	10	22	34	58	75	130	191	237	269

використовувалися в розрахунках. Наведені значення є середніми між теплофізичними параметрами металів у рідкому і твердому станах.

З огляду на те, що в імітаційній моделі використовується генератор випадкових чисел і кожен результат моделювання має випадковий характер, то для кожної швидкості охолодження розрахунки виконувалися по 11 разів і визначалося середнє арифметичне значення N для кожної швидкості.

З огляду на те, що в імітаційній моделі використовується генератор випадкових чисел і кожен результат моделювання має випадковий характер, то для кожної швидкості охолодження розрахунки виконувалися по 11 разів і визначалося середнє арифметичне значення N для кожної швидкості охолодження. Потім розраховувалося середнє значення кількості утворених кристалів і середня квадратична помилка середнього арифметичного значення N . Приклади розрахунків для алюмінію і міді наведені в таблиці 6.5 і 6.6.

Одержані результати моделювання наведено в таблиці 6.7. За цими результатами визначалися коефіцієнти парної кореляції, значення яких наведено в таблиці 6.8.

Таблиця 6.8

**Значення коефіцієнтів парної кореляції між швидкістю
охолодження і кількістю центрів твердої фази**

№	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Метал	Al	Bi	Au	Cu	Ni	Sn	Pb	Ag	Zn
$R_{x,y}$	0,999	0,992	0,988	0,994	0,997	0,998	0,998	0,998	0,999

Згідно з таблицею коефіцієнти кореляції для всіх дев'яти металів позитивні і знаходяться у межах 0,997–0,999 при пороговому значенні $R_{\text{теор}} = 0,76$ і довірчій ймовірності 0,99. Це свідчить, по-перше, про те, що при збільшенні швидкості охолодження збільшується кількість центрів кристалізації і подрібнюється структура твердого металу. А це добре відомий експериментально отриманий факт. І, по-друге, залежність між швидкістю

охолодження і кількістю центрів твердої фази, що утворилися, є фактично функціональною лінійною для всіх дев'яти металів. Лінійність залежності кількості центрів кристалізації підтверджує адекватність формули (1.27).

6.5 Вплив швидкості охолодження при твердінні на утворення зародків твердої фази при кристалізації сплавів Al-Si та Al-Cu

При проведенні досліджень сплавів Al-8,2%Si та Al-3,8%Cu, враховуючи зміну їх теплофізичних параметрів у порівнянні із чистим алюмінієм, підбиралися коефіцієнти тепловіддачі у такий спосіб, щоб забезпечити однакову швидкість охолодження порівняно з умовами охолодження попередніх експериментів (0,17; 0,33; 0,67; 1,67; 3,33; 5,00 та 6,67 град/с).

Таблиця 6.9

Коефіцієнти тепловіддачі для сплавів Al-Si та Al-Cu

№	Швидкість охолодження, град/с	Коефіцієнт тепловіддачі, Дж/(град·с·м ²)	
		Al-8,2%Si	Al-3,8%Cu
1	0,17	4,00	5
2	0,333	8,75	10
3	0,667	17,60	20
4	1,667	46,70	50
5	3,333	96,00	100
6	5,000	130	150
7	6,667	192	200

Визначені коефіцієнти тепловіддачі для сплавів наведено в таблиці 6.9.

6.5.1 Вплив швидкості охолодження при твердінні на утворення зародків твердої фази при кристалізації сплаву Al-Si

Результати моделювання формування структури сплаву Al-8,2%Si залежно від швидкості охолодження [287], наведено на рис. 6.21. Вони показують, що при V_{ox} , значення якої знаходиться у межах від 0,17 до 0,67 град/с, на початку кристалізації утворюються невеликій кількості великі зерна твердого розчину. Потім на границях цих зерен починає формуватися евтектика, яка являє собою зону невеликих за розміром зерен. Вона заповнює собою центральну зону виливка після закінчення кристалізації.

При збільшенні V_{ox} від 1,67 до 6,67 град/с, на початку кристалізації формується більше зерен твердого розчину. Їх розмір зменшується і вони формують неперервний (без проміжків) фронт кристалізації. Розподіл евтектичної складової майже не змінюється як у процесі кристалізації, так і після її закінчення (рис. 6.21).

Отримані зміни при формуванні макроструктури сплаву Al-8,2%Si можна пояснити, аналізуючи залежності кількості зародків твердої фази N та швидкості їх появи $\frac{dN}{dt}$ від часу t . Ці залежності наведено на рис. 6.22 та 6.23.

Згідно з рис. 6.22 форма кривих залежності $N = f_I(t)$ не змінюється зі зміною швидкості охолодження. На початковому етапі кристалізації спостерігається певний стрибок у кількості зародків твердої фази N , який відповідає формуванню твердого розчину. Потім через певний час центри кристалізації починають знову утворюватися і цей процес продовжується майже до кінця твердіння. Другий етап при утворенні центрів кристалізації на залежності $N = f_I(t)$ відповідає стадії формування евтектики. Є підстави стверджувати, що всі центри кристалізації при утворенні твердого розчину, з'явилися за дуже короткий інтервал часу. Такий стрибок при появі центрів кристалізації є аналогічним процесу їх появи при кристалізації чистого

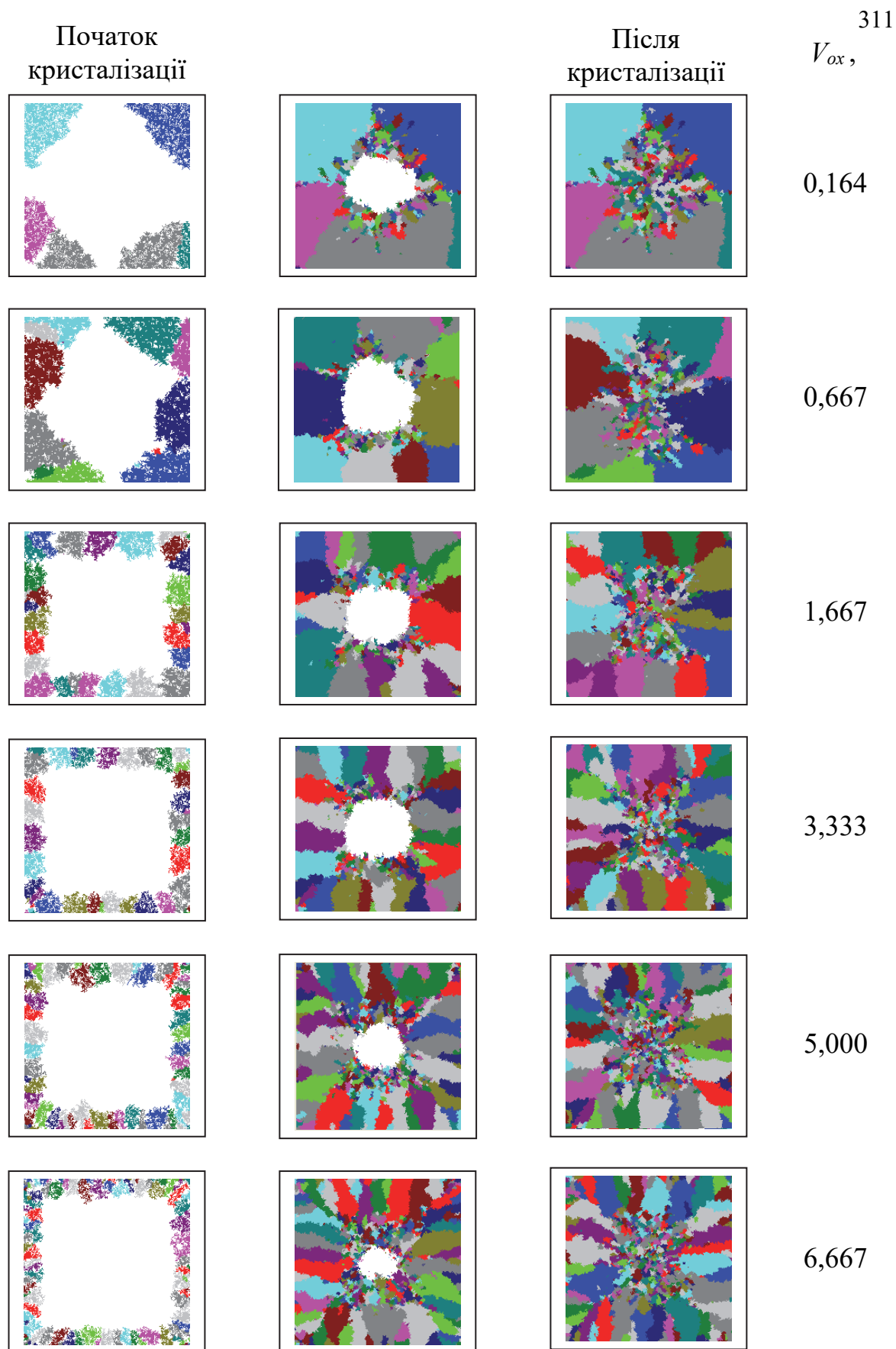


Рис. 6.21 Макроструктури сплаву Al-8,2%Si, які змодельовано при різних швидкостях охолодження V_{ox}

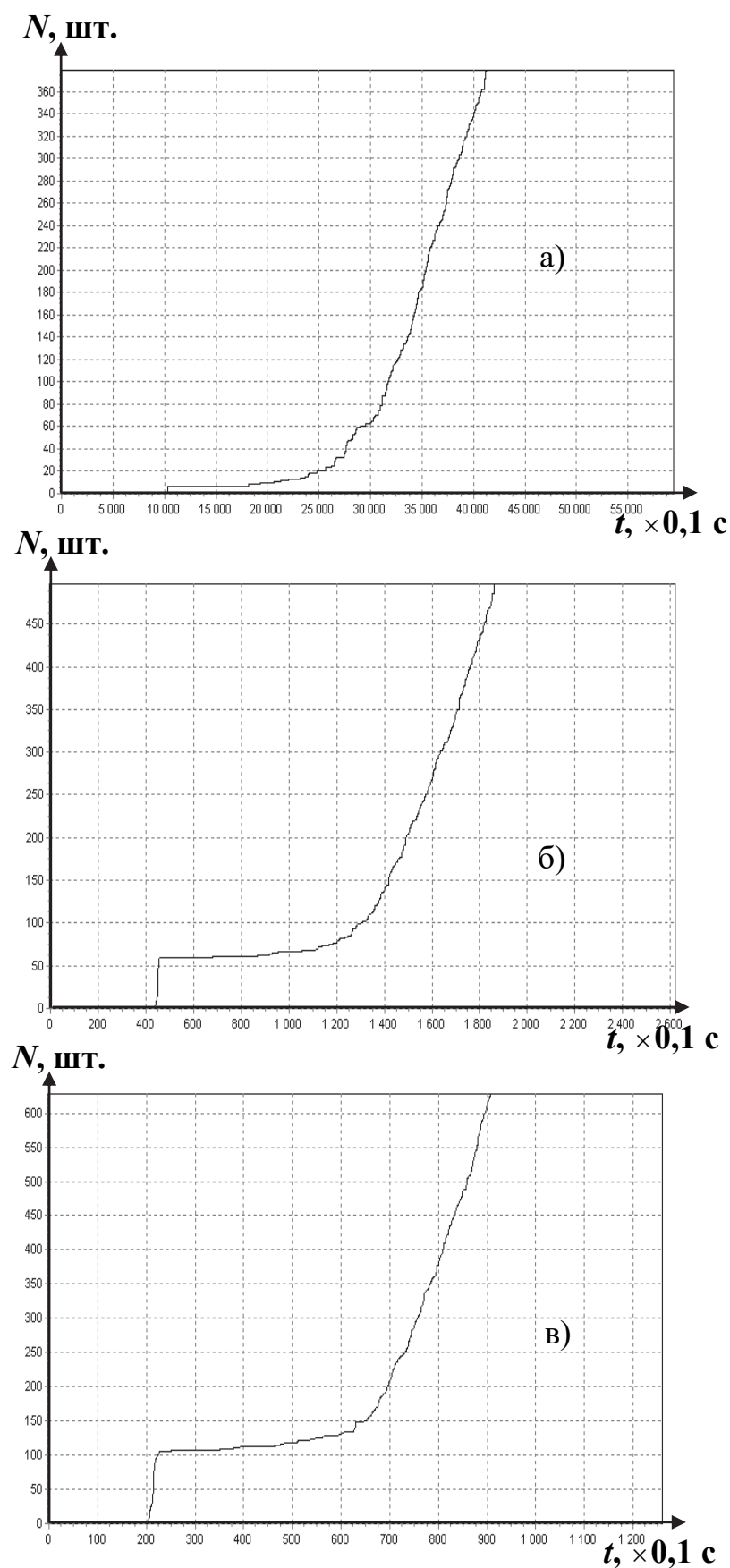


Рис. 6.22 Кількість осередків твердої фази, що утворилися при гомогенній кристалізації сплаву Al-8,2%Si при різних швидкостях охолодження V_{ox} : а – 0,33 град/с; б – 3,33 град/с; в – 6,67 град/с

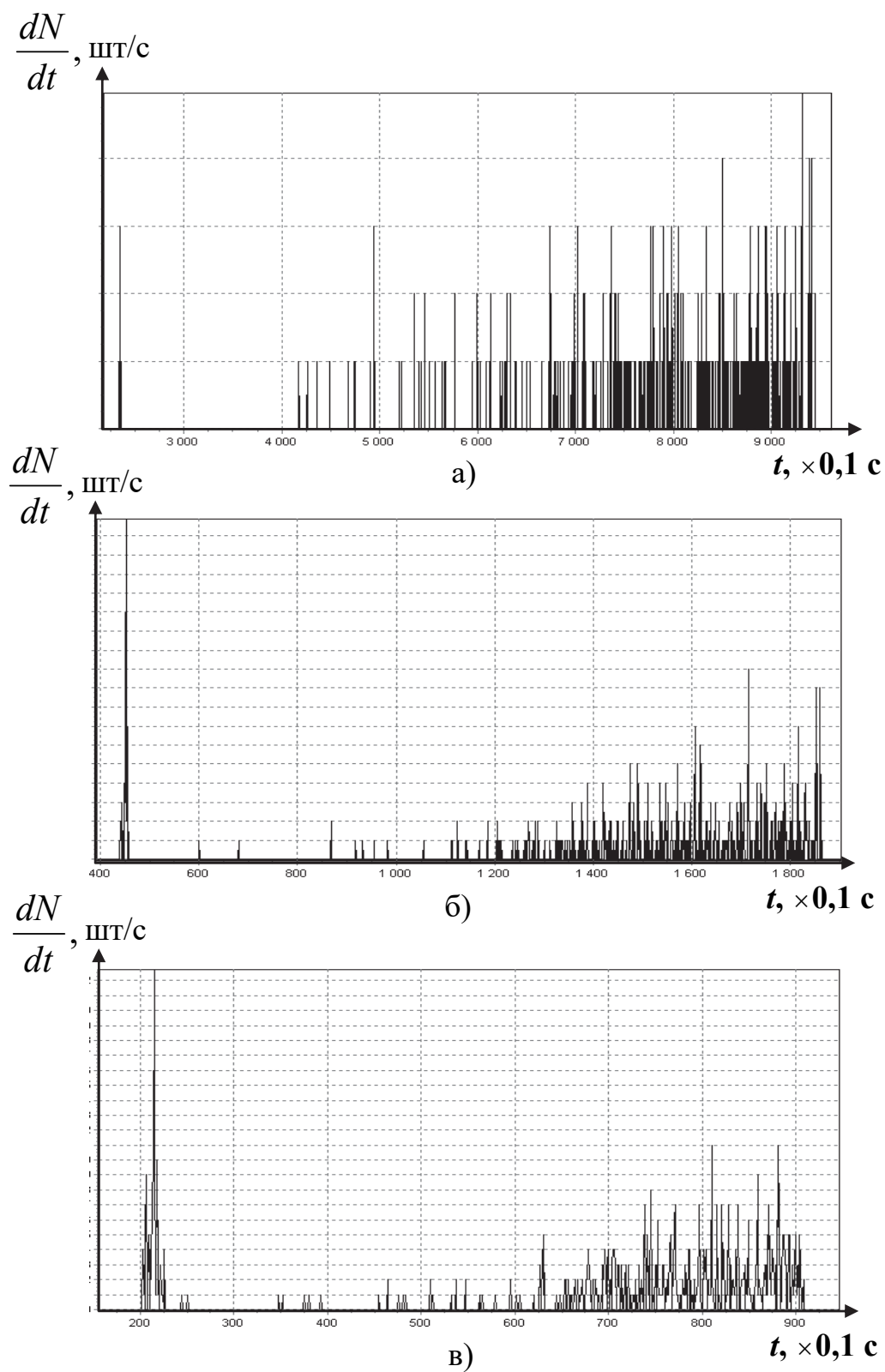


Рис 6.23 Швидкість гомогенного утворення осередків твердої фази у процесі кристалізації сплаву Al-8,2%Si при різних швидкостях охолодження V_{ox} : а – 0,33 град/с; б – 3,33 град/с; в – 6,67 град/с

алюмінію і свідчить, що цей процес нестійкий у момент початку кристалізації незалежно від швидкості охолодження, а ця часова точка також є точкою біфуркації.

Два етапи утворення центрів кристалізації добре видно на графіку залежності швидкості утворення центрів кристалізації від часу $\frac{dN}{dt} = f_2(t)$.

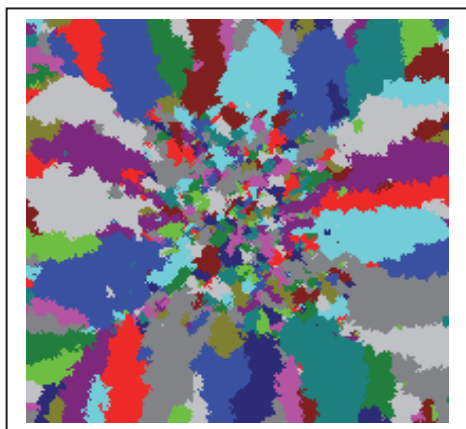
Результати її розрахунків показали, що першому етапу кристалізації відповідає перший пік. Другий етап починається з моменту утворення евтектики і продовжується до закінчення кристалізації. Причому швидкість

$\frac{dN}{dt}$ має не монотонний характер. Окрім того, на першому етапі всі зародки з'являються за короткий інтервал часу (декілька секунд). Такий стрибок при появі центрів кристалізації підтверджує, що процес стає нестійким у момент початку кристалізації навіть за низької швидкості охолодження, а ця часова точка є точкою біфуркації. Зміна швидкості $N = f_1(t)$ та $\frac{dN}{dt} = f_2(t)$, а змінювалися лише кількісні величини.

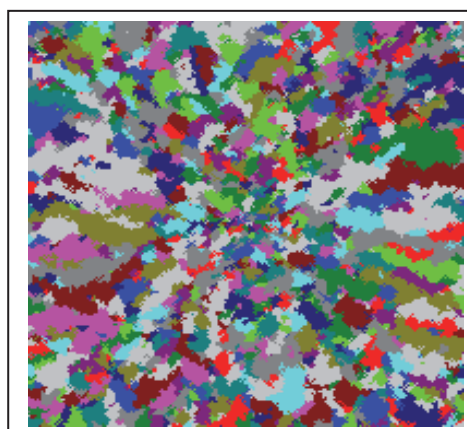
Для порівняння особливостей утворення центрів при гомогенній кристалізації доевтектичного та чисто евтектичного сплаву, провели комп'ютерний експеримент із сплавом Al-12,6%Si при швидкості охолодження 6,67 град/с. На рис. 6.24 наведені змодельовані структури та криві охолодження до- та евтектичного сплаву Al – Si. Криві охолодження відповідають класичним уявленням. Сплав Al-8,2%Si має ділянку, що відповідає формуванню твердого розчину та ділянку (рис. 6.24, в), яка відповідає формуванню евтектики із постійною температурою 850 К (577 °С). Сплав Al-12,6%Si має майже постійну температуру перетворення (рис. 6.24, г). Змодельовані макроструктури також мають відповідний вигляд – сплав доевтектичного складу має відносно довгі орієнтовані до центру зерна твердого розчину (рис. 6.24, а), які при чисто евтектичному складі відсутні.

Al-8,2%Si

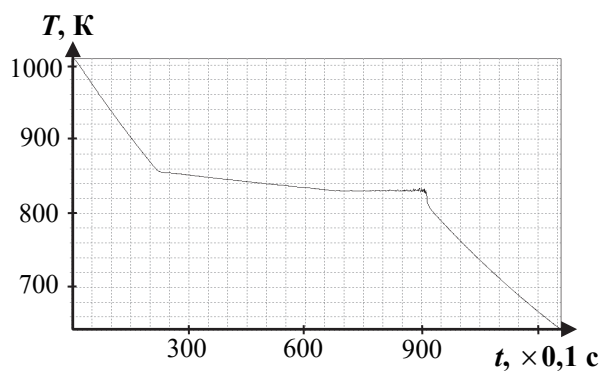
Al-12,6%Si



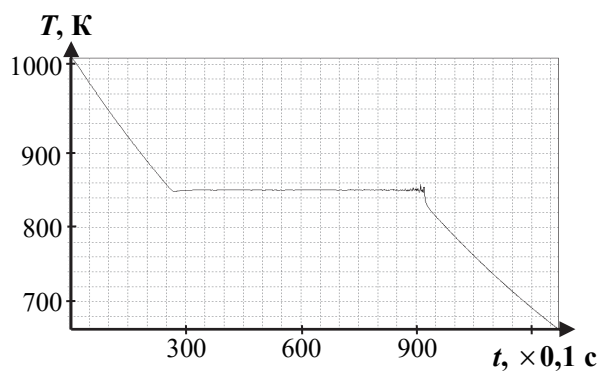
а)



б)



в)



г)

Рис. 6.24 Порівняння структур та кривих охолодження сплавів Al-8,2%Si та Al-12,6%Si, які охолоджувалися з однаковою швидкістю – 6,67 град/с:

а, б – змодельовані структури;

в, г – змодельовані криві охолодження

Al-8,2%Si

Al-12,6%Si

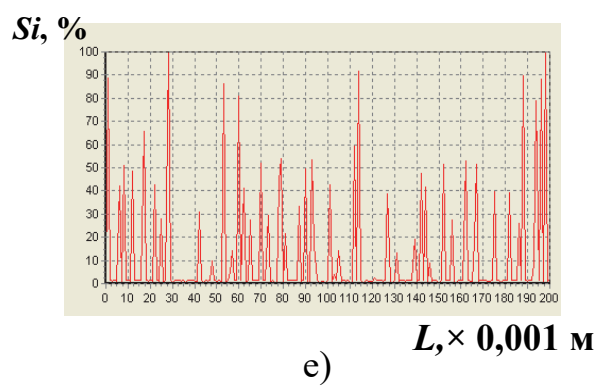
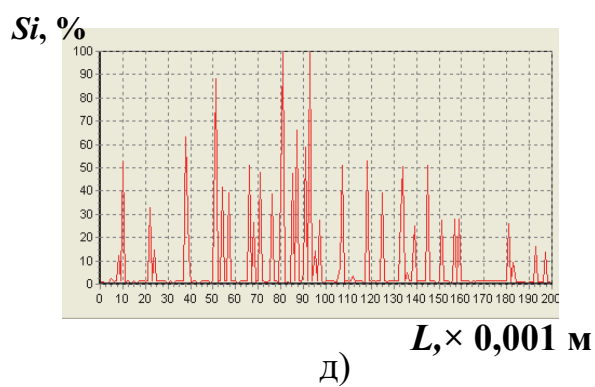
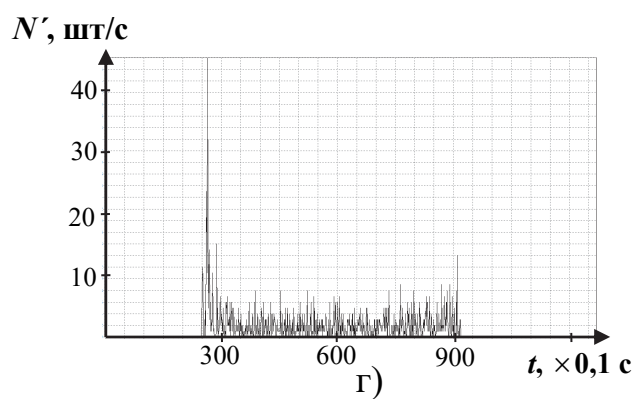
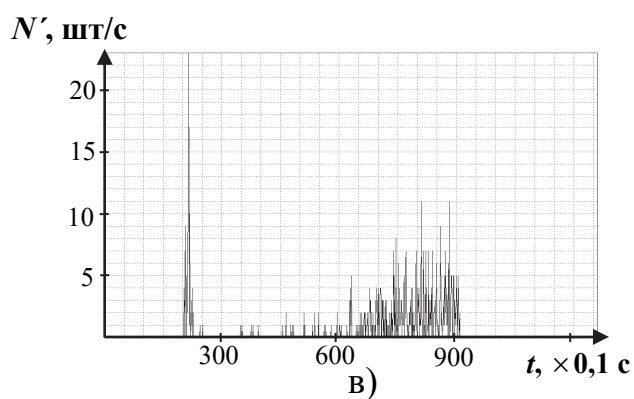
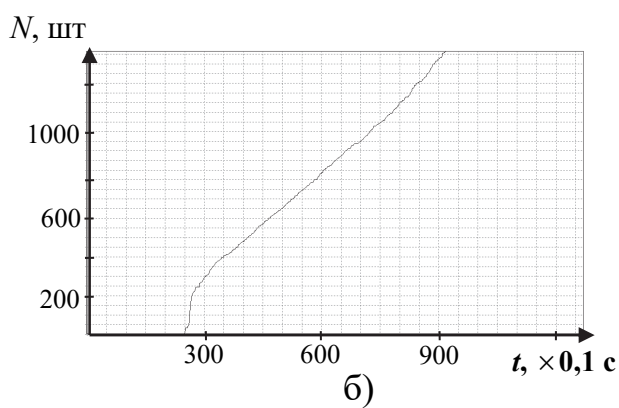
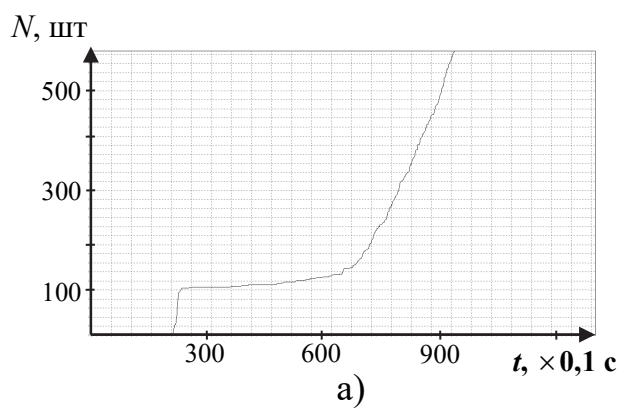


Рис. 6.25 Порівняння параметрів кристалізації сплавів Al-8,2%Si та Al-12,6%Si, які охолоджувалися з однаковою швидкістю – 6,67 град/с:

- а, б – кількість зародків твердої фази;
- в, г – швидкість утворення зародків твердої фази;
- д, е – розподіл Si уздовж перетину зразка

Залежності появи центрів кристалізації від часу мають невеликий стрибок на початку їх утворення (рис. 6.25, а, б). Але для сплаву евтектичного складу ця залежність має надалі зростаючий характер, проте як у доевтектичному сплаві спочатку з'являються тверді частки, що відповідає формуванню твердого розчину, а потім починається їх інтенсивне утворення, яке фіксує утворення евтектики. Різниця в кінетиці утворення центрів твердої фази добре видна на залежностях швидкості появи зародків від часу (рис. 6.25, в, г). Для доевтектичного сплаву спостерігається перша ділянка появи центрів кристалізації. Потім вони практично не утворюються, а надалі їх інтенсивність значно збільшується при утворенні евтектики (рис. 6.25, в). Натомість у сплаві евтектичного складу має місце перший стрибок швидкості, що співпадає з початком кристалізації. Далі, без проміжку у часі, утворюються центри кристалізації і загальний графік являє собою відображення фактично неперервного процесу появи зародків твердої фази (рис. 6.25, г).

На рисунках рис. 6.25 «д», «е» представлено порівняння змодельованого розподілу кремнію уздовж перетину зразка для сплавів Al-8,2%Si та Al-12,6%Si.

Тобто у сплаві евтектичної концентрації кремній розподілено більш щільно, ніж у доевтектичному сплаві.

6.5.2 Вплив швидкості охолодження при твердінні на утворення зародків твердої фази при кристалізації сплаву Al-Cu

При моделюванні процесу кристалізації сплаву Al-3,8%Cu, використовували перерахунок вмісту другого компоненту, що було запропоновано в описі методики налаштування моделі. Тобто в параметрах імітаційної моделі, зважаючи на результати перерахунку, встановлювалася концентрація міді 8,2 %.

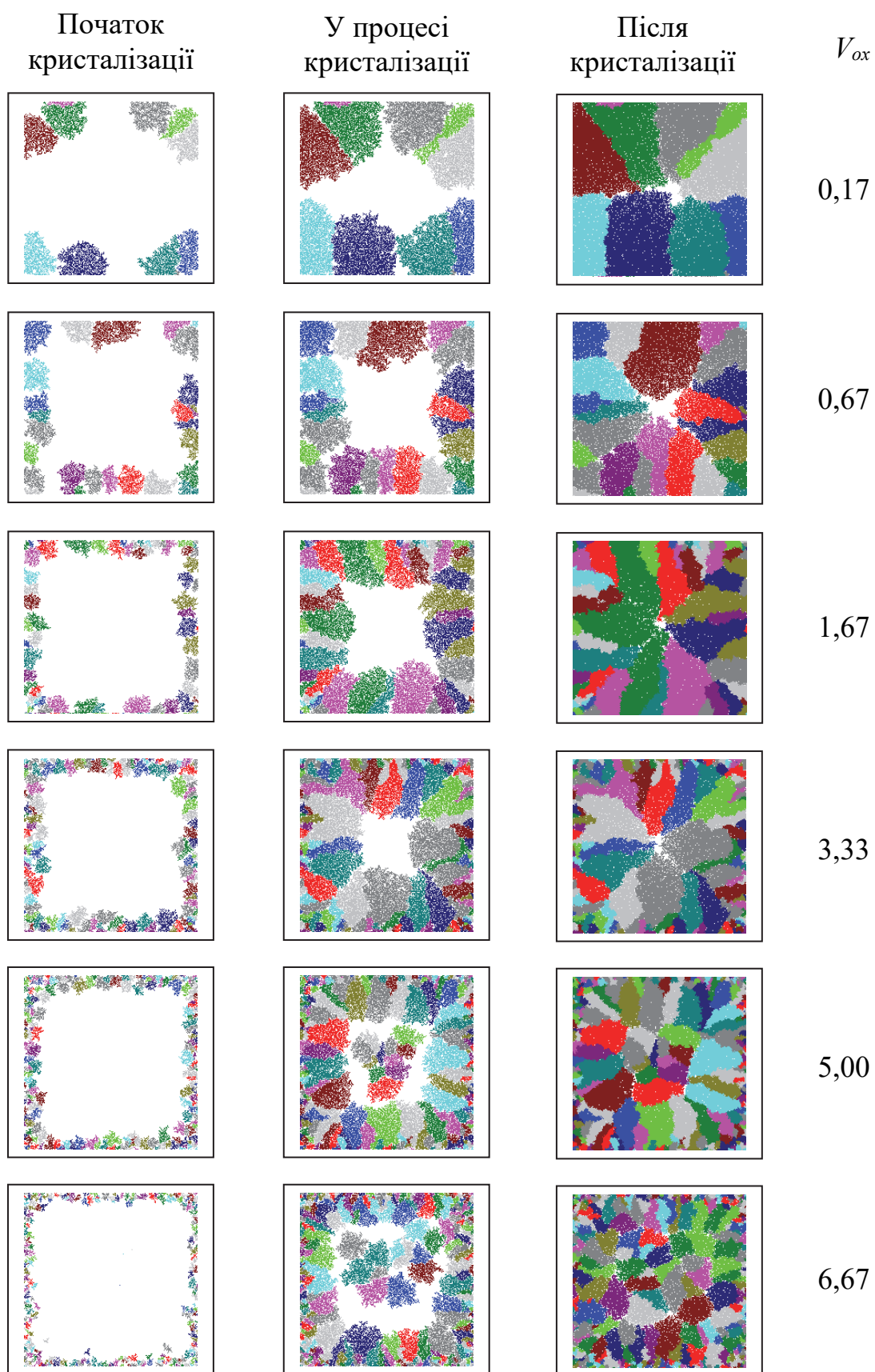


Рис. 6.26 Макроструктури сплаву Al-3,8%Cu, що змодельовані при різних швидкостях охолодження V_{ox} [град/с]

Результати моделювання формування структури сплаву Al-3,8%Cu в залежності від швидкості охолодження наведено на рис. 6.26. Вони показують, що при V_{ox} , значення якої знаходиться у межах від 0,17 до 0,67 град/с, на початку кристалізації утворюються у невеликій кількості великі зерна твердого розчину. Потім при збільшенні швидкості охолодження, зерна починають зменшуватись і далі (при V_{ox} від 3,33 град/с і більше) і формується різнозерниста структура з невеликими за розмірами зернами біля умовних стінок форми.

При швидкостях охолодження 5,00 град/с та 6,67 град/с у процесі кристалізації спостерігається формування ізольованого фрагменту твердої фази, який не торкається первинно утвореної частини твердого розчину (рис. 6.26). Цей ефект обумовлений складною формою області переохолодження, яка формується за рахунок нелінійності процесу переходу із рідкого стану в твердий.

Отримані зміни у процесі формування макроструктури сплаву Al-3,8%Cu можна пояснити, аналізуючи залежності кількості зародків твердої фази N та швидкості їх появи $\frac{dN}{dt}$ від часу t . Ці залежності наведено на рис. 6.27 та рис. 6.28.

Згідно з рис. 6.27 а, б, в, г залежності $N = f_1(t)$ майже монотонно зростають за короткий часовий відрізок. Тобто на початку кристалізації спостерігається певний стрибок у кількості часток твердої фази N , які потім зростають і формують зерна твердого розчину.

При швидкостях охолодження 5,00 град/с та 6,67 град/с спочатку, за короткий проміжок часу, спостерігається поява центрів кристалізації, потім з'являється ділянка, яка паралельна вісі часу (тобто відсутність утворення нових центрів). Потім зародки твердої фази починають знову утворюватися і цей процес проходить у центрі зразка, утворюючи зерна твердого розчину попереду фронту кристалізації з прошарком рідини (рис. 6.26).

Усі центри при утворенні твердого розчину, виникли за короткий

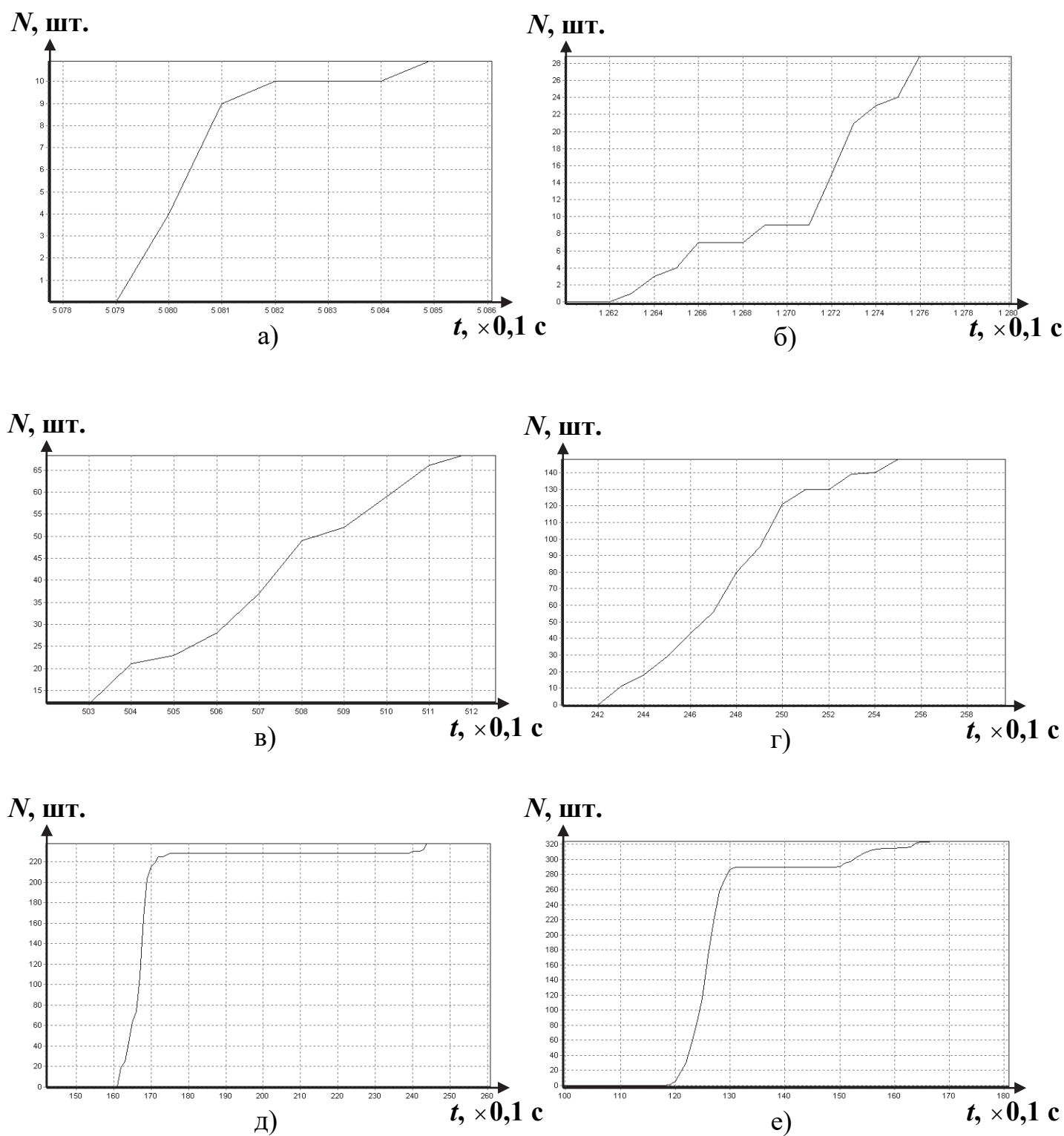


Рис. 6.27 Кількість центрів кристалізації, що утворилися при гомогенній кристалізації сплаву Al-3,8%Cu при різних швидкостях охолодження V_{ox} : а – 0,17 град/с; б – 0,67 град/с; в – 1,67 град/с; г – 3,33 град/с; д – 5,00 град/с; е – 6,67 град/с

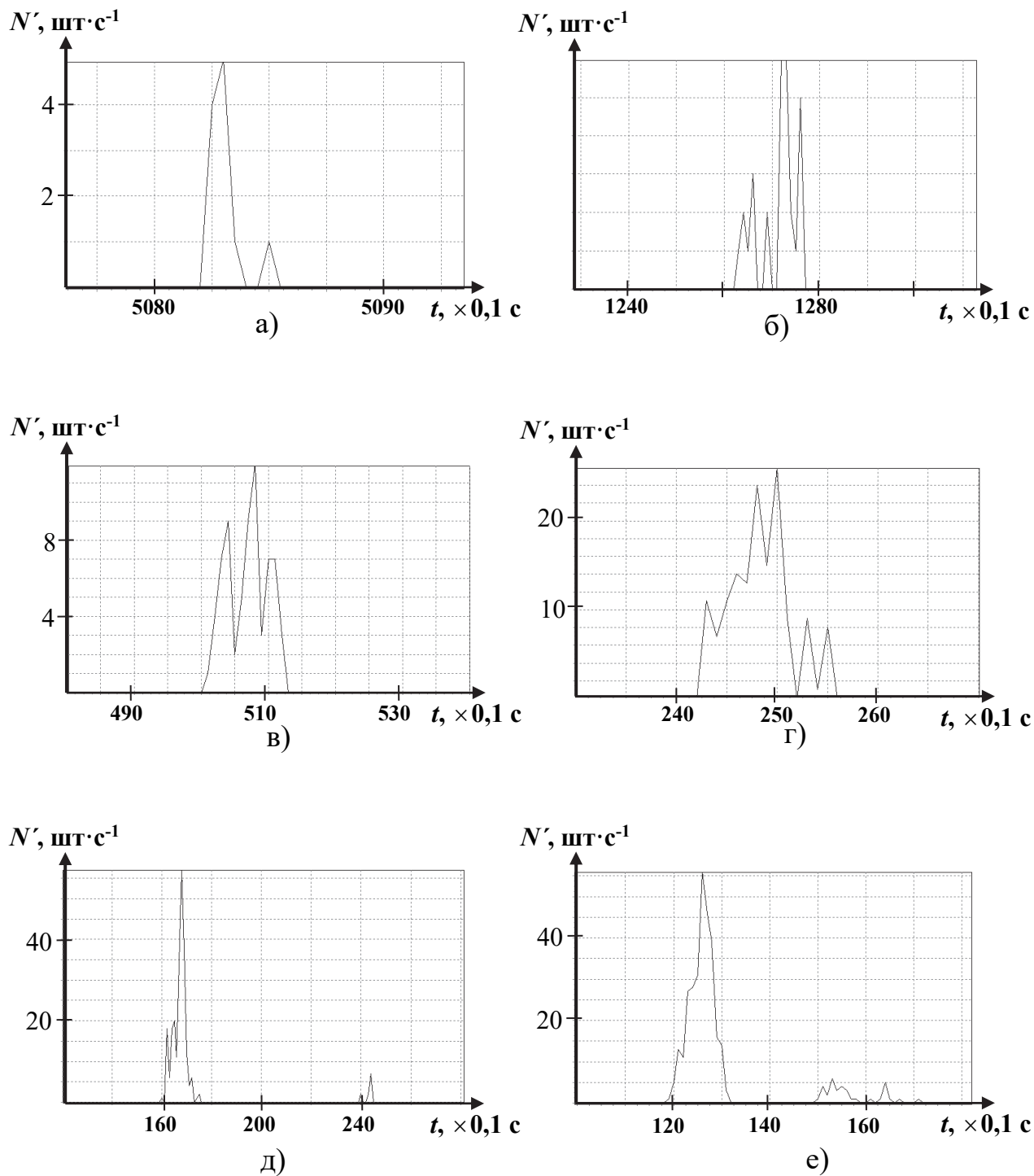


Рис. 6.28 Швидкість гомогенного утворення центрів кристалізації у процесі кристалізації сплаву Al-3,8%Cu при різних швидкостях охолодження V_{ox} : а – 0,17 град/с; б – 0,67 град/с; в – 1,67 град/с; г – 3,33 град/с; д – 5,00 град/с; е – 6,67 град/с

інтервал часу, що є аналогічним процесу їх появи при кристалізації чистого алюмінію і сплаву Al-8,2%Si.

Два етапи утворення центрів кристалізації добре видно на графіку залежності швидкості утворення центрів кристалізації від часу $\frac{dN}{dt} = f_2(t)$ (рис. 6.28). Результати її розрахунків показали, для низьких та середніх швидкостей охолодження ($V_{ох}$ від 0,17 град/с до 3,33 град/с) швидкість утворення зародків твердої фази майже відтворює аналогічну залежність для чистого алюмінію. З'являється один пік, потім він починає множитись і залежність стає не монотонною. Проте всі ці зміни відбуваються на невеликій за часом ділянці.

При швидкостях охолодження 5,00 град/с та 6,67 град/с, згідно з рис. 6.28 «д», «е», виникає другий етап, який починається перед закінченням кристалізації. Його наявність зумовлює формування ізольованого фрагменту твердої фази, який не торкається первинно утвореної частини твердого розчину.

6.6 Комп'ютерний експеримент для перевірки наявності нерівноважного стану розплаву при його кристалізації

Для визначення ступеня нерівноважності процесу кристалізації змодельовали процес формування переохолодження в перетині зразка та дослідили величину градієнту температур під час переходу «рідкий стан – твердий стан».

Для невеликих за розміром систем ($0,025 \times 0,025 \text{ м}^2$) і за малих швидкостях охолодження $V_{охл} \geq 0,67$ град/с, переохолодження швидко розповсюджується уздовж перетину зразка і тільки потім починають утворюватися перші зародки. Це свідчить, що ділянки системи з наявністю переохолодження знаходяться у хиткому стані і будь-які флуктуації призведуть до зміни фазового стану, що підтверджує нелінійність процесу

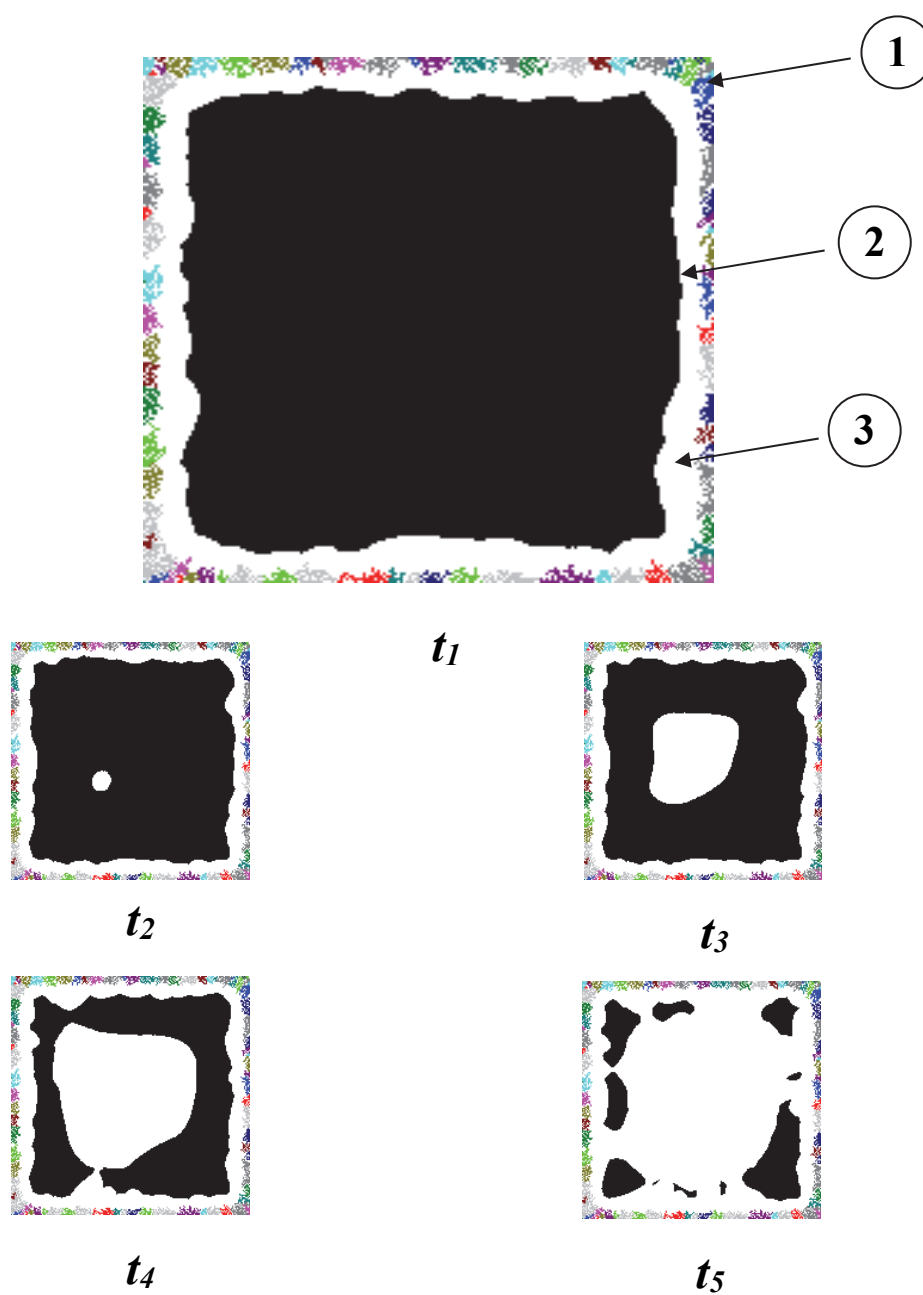


Рис. 6.29 Формування переохладження в різні моменти часу ($t_1, t_2 \dots t_5$) процесу твердіння сплаву Al-Si (розмір системи $0,25 \times 0,25$ м):

- 1 – формування твердої фази;
- 2 – рідка фаза (чорний колір);
- 3 – переохладження (білий колір)

кристалізації. Збільшення геометричних розмірів системи ($0,20 \times 0,20 \text{ м}^2$) призводить до формування області переохолодження, яка має складну форму (рис. 6.29). Тобто на початку кристалізації біля стінок виникає переохолодження (білий колір) і виникають осередки твердої фази (рис. 6.29) у момент часу t_1 . А потім у центрі системи виникає окрема переохолоджена зона (момент часу t_2), яка розповсюджується (момент часу t_3) і поступово поширюється уздовж усього перетину (моменти часу t_4 та t_5). Наявність такої складної зони переохолодження є результатом нелінійного стану системи і може зумовлювати появу різних дефектів та нерівномірностей у структурі твердого металу.

Гradient температур у моделі визначається як різниця температур у центрі і на границі системи. Згідно з обчислювальним експериментом величина gradienta температур під час кристалізації коливається за величиною, що обумовлено відсутністю інерції віртуальної термопари в моделі. Але величина при геометричних розмірах системи $0,025 \text{ м} \times 0,025 \text{ м}$ його невелика: $0,5\text{--}3,5$ град для сплаву Al – 8,2%Si та $0,1\text{--}2,0$ град для сплаву Al – 3,8%Cu. Gradient температур до та після кристалізації вищий при більш високій швидкості охолодження. Проте у будь-якому разі його величина досить низька. Тобто ступінь нерівноважності для такої системи визначається передусім швидкістю її охолодження.

Висновки до Розділу 6

1. Розроблено методику налаштування імітаційної моделі формування структури при кристалізації, яка складається з трьох етапів і базується на порівнянні результатів моделювання з реальними результатами експерименту. На першому етапі на початковій ділянці кривої охолодження підбираються коефіцієнти тепловіддачі у такий спосіб, щоб швидкість охолодження в моделі відповідала експериментальній. На другому етапі підбирається тривалість процесу кристалізації, яка регулюється коефіцієнтом адаптації. І на третьому етапі досягається збігом змодельованої структури

металу із реальною, шляхом регулювання інтервалу метастабільності для утворення центрів кристалізації та інтервалу метастабільності для швидкості росту кристалів.

2. У комп'ютерному експерименті дослідили вплив швидкості охолодження на кінетику утворення центрів твердої фази чистого алюмінію при гомогенній кристалізації. При повільному охолодженні ($V_{ox} = 0,00025$ град/с) змодельована крива охолодження має ділянку переохолодження із рекалесценцію температури, яка з'являється за абсолютної відсутності домішок. Такий стрибок при появі центрів кристалізації свідчить, що незважаючи на майже рівноважні умови охолодження, стан рідкого металу нижче температури кристалізації є нестабільним. І температурна точка початку кристалізації є точкою біфуркації.

3. У комп'ютерному експерименті досліджено вплив швидкості охолодження на кінетику утворення центрів твердої фази чистого алюмінію при гомогенній кристалізації. Установлено, що при невисоких швидкостях охолодження залежність кількості утворених центрів кристалізації від часу $N = f(t)$ є стрибкоподібною, а швидкість їх утворення має один екстремум. Усі осередки твердої фази з'являються за короткий інтервал часу – 0,3 с. Структура твердого металу, при цьому, складається із великих майже не орієнтованих зерен. Збільшення швидкості охолодження призводить до появи «сходинок» на кривій $N = f(t)$, а швидкість появи центрів кристалізації має вже декілька піків. Тобто центри кристалізації виникають стрибкоподібно на різних етапах процесу з розривами у часі. Подальше зростання швидкості охолодження призводить до появи багатьох «сходинок». На залежності швидкості утворення зародків кількість піків зростає і процес утворення центрів кристалізації стає майже періодичним. Структура твердого металу стає тризонною, а потім різнозернистою.

4. У комп'ютерному експерименті з допомогою імітаційної моделі кристалізації, доведена адекватність запропонованої формули критичного радіусу зародка твердої фази при гомогенній кристалізації, в якій критичний

радіус зародка визначається через теплофізичні характеристики металу: коефіцієнт теплопровідності, питому теплоємність, густину і швидкість охолодження при кристалізації.

5. З'ясовано, що за наявності модифікатора, гомогенне утворення центрів кристалізації в чистому алюмінії стає можливим при швидкості охолодження від 5,00 град/с і вище. Вони починають з'являтися в невеликій кількості в кінці кристалізації.

6. Результати моделювання засвідчили, що в рідкому алюмінії за відсутності модифікатора, кристали утворюються біля стінок форми незалежно від швидкості охолодження. Введення модифікатора призводить до об'ємного характеру кристалізації. У твердому стані спостерігається зменшення розміру зерен при збільшенні $V_{ох}$.

7. Досліджено вплив швидкості охолодження на кінетику утворення осередків твердої фази сплаву Al-8,2%Si при гомогенній кристалізації. Форма кривих залежності $N = f_1(t)$ не змінюється зі зміною швидкості охолодження. Центри кристалізації утворюються у два етапи: перший відповідає утворенню твердого розчину, а другий – формуванню евтектики. Установлено, що всі зародки при утворенні твердого розчину, з'явилися за короткий інтервал часу. Такий стрибок при появі центрів кристалізації є аналогічним процесу їх появи при кристалізації чистого алюмінію і свідчить, що цей процес нестійкий у момент початку кристалізації незалежно від швидкості охолодження.

8. Установлено вплив швидкості охолодження на кінетику утворення осередків твердої фази сплаву Al-3,8%Cu при гомогенній кристалізації. З'ясовано, що при швидкостях охолодження 5,00 град/с та 6,67 град/с, центри кристалізації утворюються у два етапи. Перший відповідає утворенню твердого розчину на початку кристалізації. У кінці кристалізації зародки твердої фази починають знову з'являтися і утворюють в рідко-твердому стані зерна твердого розчину попереду фронту кристалізації з прошарком рідини.

9. У комп'ютерному експерименті показано, що у процесі кристалізації сплавів можуть виникати умови формування несуцільної зони переохолодження складної форми з окремими ділянками у центрі системи. Наявність таких зон є результатом нелінійного стану системи і може призводити до появи різних дефектів та нерівномірностей у структурі твердого металу.

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 виливка 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 виливка 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

«сходинки» 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 доєвтектичних 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 доєвтектичних 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 , 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 $\text{Al}+(9,0-12,0)\%\text{Si}$ та $\text{Al}+(7,0-8,0)\%\text{Si}+(0,4-0,5)\%\text{Mg}$ 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 «Артемаш» (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 ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Philip B. Crosby Quality, Is Still Free. New York: McGraw-Hill, 1996.
2. Joseph M. Juran, F.M. Gryna, Quality Planning and Analysis, 2nd ed. New York: McGraw-Hill, 1980.
3. Walter E. Deming, Quality, Productivity, and Competitive Position. Cambridge, MA: MIT Center for Advanced Engineering Study, 1982.
4. Введенский Б.А. гл. ред. Большая советская энциклопедия. Москва: Государственное научное издательство «Большая советская энциклопедия», 1953. Т. 20. 644 с.
5. Ричард Б. Чейз, Николас Дж. Эквилайн, Роберт Ф. Якобс. Производственный и операционный менеджмент. Москва, Санкт-Петербург, Киев: Издательский дом «Вильямс», 2004. 691 с.
6. Никитин В.И., Никитин К.В. Наследственность в литых сплавах. Москва: Машиностроение – 1, 2005. 476 с.
7. Шаповал А.И. Система экспресс-контроля жидких металлов и сплавов на основе термического анализа: дисс. на соискание степени канд. техн. наук: 05.16.04. Киев, 1996. 160 с.
8. Золоторевский В.С. Механические испытания металлов. Москва: Металлургия, 1974. 303 с.
9. Green L.G. Thermal analysis for quality control of molten metal // Temp. Meas. And Control Pap. 4-th Annu. Confer. Inst. Met. Techn. Sheffield. 1978. P. 53.
10. Бялик О.М., Смульский А.А., Иванчук Д.Ф. Определение качества металла термическим анализом // Литейное производство. 1981. № 5. С. 4–9.
11. Argyropoulos S., Closset B., Gruzelski J.E., Oger H. The quantitative control of modification in Al-Si foundry alloys using thermal analysis technique // Transact. Amer. Foundrymen's Soc. 1983. Vol. 91. P. 351–358.

12. Apelian D., Sigworth G.K., Whaler K.R. Assessment of grain refinement and modification of Al-Si foundry alloys by thermal analysis // Trans. Amer. Foundrymen's Soc. 1984. Vol. 92. P. 297–307.

13. Шумихин В.С., Витусевич В.Т., Корниенко Г.Л. Комплексный контроль качества чугуна методом термического анализа // Литейное производство. 1984. № 2. С. 3–5.

14. Argyropulos S., Closset B., Gruzelski J.E., Oger H. Quantitative Kontrolle der verdellung von Al-Si gublegierungen unter anwendung eine thermoanalysetechnik // Giesser. Prax. 1985. № 11. S. 173–180.

15. Файнзильберг Л.С., Власенко Ю.В., Тухин Э.Х., Шелковый Э.А. Автоматическое определение в цифровой форме химического состава жидкого чугуна // Литейное производство. 1985. № 8. С. 23–24.

16. Шелковый Э.А. Система экспресс-контроля качества жидкого чугуна // Тракторы и сельхозмашины. 1987. № 1. С. 51–52.

17. Gruzleski J., Closset B. The Treatment of Liquid Aluminium-Silicon Alloys. The AFS Inc. 1990. 256 p.

18. Арысов Ж.А., Беркун М.Н. Термоэлектрический анализатор химического состава стали: Тез. докл. Всес. научн.-техн. семин. «Повыш. качества отливок и снижение вредного влияния литейн. пр-ва на окруж. Среду». Запорожье, 1990. С. 32–33.

19. Sparkman D., Kearney A. Breakthrough in Aluminium Alloy Thermal Analysis Technology for Process Control. Submitted to AFS, 1993, 28 p.

20. Бялик О.М., Доний А.Н., Пиковский В.С., Шаповал А.И. Применение компьютерной системы контроля качества расплавов // Литейное производство. 1996. № 2. С. 28–30.

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

22. Kuang-Oscar Yu. Modelling for Casting and Solidification Processing. CRC Press, 2001. 703 p.

23. Stefanescu D.M. Science and Engineering of Casting Solidification. Springer, 2002. 342 p.

24. Emadi D., Whiting L., Djurdjevic M., Kierkus W.T., Sokolowski J.Y. Comparison of Newtonian calculation of latent heat and solid fraction of aluminium alloys / Metalurgija. MjOM, 2004. P. 91–106.

25. Беленький А.М., Шелковый Э.А., Дмитриева Е.Э. Термоэлектрический метод оперативного контроля параметров металла. Обзор докладов на VI съезде литейщиков России // Литейное производство. 2004. № 2. С. 37.

26. Рафальский И.В., Киселев С.В., Довнар Г.В. Термический анализ модельных силуминов с различными модификаторами эвтектики // Литейное производство. 2006. № 3. С. 21–22.

27. Rafalski I., Arabey A., Lushchik P., Chaus A.S. Computer modelling of cast alloys solidification by Computer-Aided Cooling Curve Analysis (CA-CCA) / International Doctoral Seminar, Proceedings. Trnava: AluminiPress, 2009. P. 291–301.

28. Рафальский И.В., Арабей А.В., Лущик П.Е. Применение компьютерного термического анализа для моделирования процесса затвердевания отливок из алюминиевых сплавов // Литье и металлургия. 2010. 2 (55). С. 115–121.

29. 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.

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

31. Лущик П.И., Рафальский И.В. Расчет двухфазной зоны в интервале кристаллизации алюминиевых сплавов с использованием термического анализа // *Литье и металлургия*. 2012. № 1. С. 79–83.
32. Лущик П.И. Термосенсорная диагностика процесса затвердевания АК9ч при разработке технологии получения отливок // *Литье и металлургия*. 2012. № 3 (67). С. 281–287.
33. Svido J.T., Dioszegi A., Toth J. The novel application of thermal analysis in foundry technologies // *J. Therm. Anal. Calorim.* 2014. Vol. 115. P. 331–338.
34. Doru M. Stefanescu. Thermal Analysis – Theory and Application in Metalcasting // *International Journal of Metalcasting*. V. 9, Issue 1, January 2015. P. 7–22.
35. Тарасевич Н.И., Корниец И.В., Тарасевич И.Н., Дудченко А.В. Сравнительный анализ систем компьютерного моделирования металлургических и литейных процессов // *Металл и литье Украины*. 2010. № 5. С. 20–25.
36. Токова О.В. Огляд методів та засобів комп'ютерного моделювання процесів ливарного виробництва // *Індуктивне моделювання складних систем*. 2017. Випуск 9. С. 204–213.
37. Ryntz E., Janovak J., Hochtein A., Wargel C. Prediction of nodular iron microstructure using thermal analysis // *Transact. Amer. Foundrymen's Soc.* 1973. Vol. 79. P. 141–144.
38. Патент ФРГ, G01K 1/02, МКИ G01N 33/20, 25/06, №2825624, публ. от 16.10.1980, № 42, Устройство для определения температуры начала кристаллизации расплава металла.
39. Патент Великобритании, G01J 5/02, МКИ G01N 25/02, №1597149, публ. от 03.09.1981, № 4822, Способ и устройство для дифференциального теплового анализа охлаждающегося металла.

40. Патент США, МКИ G01N 25/00, НКИ 374–34 №4381154, публ. от 24.06.1983, т. 1029, № 4. Способ и устройство для неразрушающего определения состава пробы неизвестного вещества.

41. Apelian D., Walker N.G., Monitoring the cooling curve during solidification of aluminium castings helps to minimize scrap // 6th World conf. Investment Sast., Washington, D.C., 1984. Oct. 10–13, S.I., s.a., 4A/01–4A/06.

42. Nowinski M. Aparatura CRYSTALDIGRAF do realizacji metody ATD. // Inst. Odl. Polytechniki Slackej, Gliwice, 1985. S. 1–4.

43. Krohn B.R. Thermal analysis: metallurgical thumb printing // Mod. Cast. 1985. Vol. 75. № 3. P. 21–25.

44. Снигирь А.Н. Использование данных термического анализа для прогнозирования первичной структуры чугуна с помощью ЭВМ // Литейное производство. 1987. № 10. С. 3–4.

45. Yen C.M., Evans W.J., Nowicki R.M., Cole G.S. Qualitatsmessung vo aluminium-Gublegierungen mit mikroprozessorgestutzter Thermoanalyse // Giesserei-Prak. 1987. № 8. S. 122–127.

46. Richard M., Soubrier C. Analyse thermique des alliages cuirreux. Aplication au controle d'un laiton a bas point de fusion. // Foundrie: Foundeur Anjourd'hui. 1987. № 68. P. 22–28.

47. Шелковый Э.А. Приборы контроля качества расплава чугуна // Тракторы и сельхозмашины. 1989. № 8. С. 37–38.

48. Yang Ming, Jiang Zongwen, Xu Shuhong Методы контроля жидкого металла // Чжуцзо = Foundry. 1989. № 9. С. 28–32.

49. Arnold B.K., Sare I.R A thermal analysis study of alloy with sast irons // Foundryman. 1989. Vol. 82. № 2. P. 71–76.

50. Cui Donghuan Применение термического анализа для контроля качества чугуна // Чжуцзо = Foundry. 1989. № 9. С.1–4.

51. Адишев В.В., Гиниятуллин Н.Н. и др. Расширение метода термо-ЭДС при использовании микро-ЭВМ: Тезисы зон. НТК «Разработка технол.

процессов литья, проектир. оснастки и анализ качества отливок с использованием ЭВМ». Ярославль, 1990. С. 81–82.

52. RADUGA AG 1.1990 Catalog.

53. Овчинников В.В., Куприянов Ю.В., Шелковый Э.А. Разработка компьютерной системы термического анализа качества чугуна // Матер. НТК «Соврем. литейн. матер. и технол. получ. отливок». «Знание» РСФСР ЛДНТП Ленинград, 1991. С. 14–16.

54. Косников Г.А., Куценко А.И., Аруса Д. Термический анализ процессов структурообразования в чугуне // Матер. НТК «Совр. литейн. матер. и технол. получения отливок». ЛДНТП. Ленинград, 1991. С. 16–17.

55. MeltLab Systems. Operations Manual, Version 2.0, Foundry Information Systems. 1992, 134 p.

56. Sparkman D., Kearney A. Breakthrough in Aluminium Alloy Thermal Analysis Technology for Process Control. Submitted to AFS, 1993, 28 p.

57. Шаповал А.И. Прибор для управления качеством жидких литейных алюминиевых сплавов // Тезисы докладов. Респ. НТК «Современная технология получения мелкопористых отливок и слитков из цветных металлов». Киев: РДЭНТП, 1983. С. 172–174.

58. Бялик О.М., Шаповал А.И. Анализатор качества жидких литейных алюминиевых сплавов: Проспект. Киев: Реклама. 1983. 2 с.

59. Куракса В.В., Смульский А.А., Шаповал А.И. Применение микропроцессорных информационно-управляющих систем на плавильных участках литейных цехов // Тезисы докладов. Респ. НТК «Повышение эффективности литейного производства и качества литья». Орджоникидзе, 1985. С. 19–20.

60. Бялик О.М., Шаповал А.И. Применение микро-ЭВМ в системах контроля качества литейных сплавов на основе термоанализа // Тезисы докладов. Респ. НТК «Применение ЭВМ для разработки технологических процессов литья, проектирования оснастки и анализа качества отливок». Ярославль, 1987. С. 103–104.

61. Термометрическая установка для экспресс-анализа качества алюминиевых сплавов: Проспект международной выставки «Интерлитмаш-88». Москва: ВНИИТЭМР, 1988. 4 с.

62. Голуб Л.В., Шаповал А.И., Копыткова И.В., Бобров В.А. Применение локальных систем экспресс-контроля качества сплавов в технологическом процессе плавки // Тезисы докладов. Отраслевой семинар «Технология и оборудование для получения тонкостенных отливок из цветных сплавов для изделий гражданской продукции и товаров народного потребления». Москва: НИАТ, 1990. С. 11–12.

63. 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.

64. 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.

65. 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.

66. Калиткин Н.Н. Численные методы. Москва: Наука, 1978. 512 с.

67. Берг Л.Г. Введение в термографию. Москва: Наука, 1969. 395 с.

68. Уэндлант У. Термические методы анализа. Москва: Мир, 1978. 526 с.

69. Саватеев А.В. Шумовая термометрия. Ленинград: Энергоатомиздат, 1987. 132 с.

70. Орлова М.П., Погорелова О.Ф., Улыбин С.А. Низкотемпературная термометрия. Москва: Энергоатомиздат, 1987. 279 с.

71. Ю. С. Иваненко, Ю. Р. Коробченко, Бондаренко Т.С. Измерение шумовой температуры плазмы индуктивным преобразователем // Теплофізика высоких температур. 1976. Т.14. №4. С. 111–117.
72. Геращенко О.А., Гордов А.Н., Лах В.И., Стадник Б.И., Ярышев Н.А. Температурные измерения. Справочник. Киев: Наукова думка, 1984. 494 с.
73. Семенов В.И., Монахов И.А. Самопроизвольные процессы и строение расплава вблизи равновесной температуры кристаллизации // Металлургия машиностроения. 2005. № 2. С. 26–31.
74. Харьков Е. И., Лысов В. И., Федоров В. Е. Физика жидких металлов. Киев: «Выща школа», 1979. 248 с.
75. Казимиров В. П., Сажина Н. В., Баталин Г. И. О моделировании жидких металлов // Известия АН УССР «Металлы». 1980. № 1. С. 82–85.
76. Чичко А.Н., Юркевич Н.П. Об электронном механизме структурных превращений в расплавах системы Al-Si // Расплавы. 1994. № 4. С. 18–22.
77. Романова А.В. Структура реальных металлов. Киев: Наукова думка. 1988. 204 с.
78. Борисов В.Т. Теория двухфазной зоны металлического слитка. Москва: Металлургия, 1987. 224 с.
79. Баум Б.А. Металлические жидкости. Москва: Наука, 1979. 120 с.
80. Стойчев Н.В., Овсиенко Д.Е., Алфинцев Г.А. Кристаллография, 1975. Т. 20, № 4. С. 823–828.
81. Данилов В.И. Строение и кристаллизация жидкости. Киев: Изд-во АН УССР, 1956. 566 с.
82. Болховитинов Ю.Б. В кн.: Механизм и кинетика кристаллизации. Минск: Наука и техника, 1969. 182 с.
83. Фольмер М. Кинетика образования новой фазы. Москва: Наука, 1986. 208 с.
84. Бялік О.М., Черненко В.С., Писаренко В.М., Москаленко Ю.Н. Металознавство. Київ: Політехніка, 2001. 374 с.

85. Овсиенко Д.Е. Зарождение и рост кристаллов из расплава. Киев: Наукова думка, 1994. 254 с.
86. Turndull D. Formation of Crystal Nuclei in Liquid Metals // *Journal of Applied Physics*. Volume 21. Issue 10. P. 1022–1028.
87. Билони Х. Затвердевание // *Физическое металловедение* / под ред. Р.У. Кана, П. Хазена. Москва: Металлургия, 1987. Т. 2. С. 178–276.
88. Баландин Г.Ф. Формирование кристаллического строения отливок. Москва: Машиностроение, 1973. 287 с.
89. Тихомиров М.Д. Основы моделирования литейных процессов. Системы синтеза литейной технологии и их отличие от систем моделирования литейных процессов // *Литейное производство*. 2004. № 2. С. 28–31.
90. Тихомиров М.Д. Основы моделирования литейных процессов. Важные особенности систем моделирования // *Литейное производство*. 2004. № 5. С. 24–32.
91. Злыгостев С.Н. Система компьютерного моделирования литейных процессов (СКМ ЛП): состояние и перспективы. Обзор докладов на VI съезде литейщиков России // *Литейное производство*. 2004. № 2. С. 37.
92. Вольнов И.Н. Компьютерное моделирование кинетики кристаллизации отливки из чугуна с шаровидным графитом // *Литейное производство*. 2004. № 2. С. 31–36.
93. Дьячко А.Г. Математическое и имитационное моделирование производственных систем. Москва: МИСИС, 2007. 529 с.
94. Берлин Ал. Ал., Балабаев Н. К. Имитация свойств твердых тел и жидкостей методами компьютерного моделирования // *Соросовский образовательный журнал*. 1997. № 11. С. 87–92.
95. Чалмерс Б. Теория затвердевания. Москва: Металлургия, 1968. 288 с.
96. Френкель Я. И. Введение в теорию металлов. Москва: Наука, 1972. 424 с.

97. Самойлович Ю.А. Системный анализ кристаллизации слитка. Киев: Накова думка, 1983. 246 с.
98. Астахов А.В. Курс физики. I. Механика. Кинетическая теория материи. Москва: Гл. редакция физ.-мат. литературы, 1977. 384 с.
99. Базаров И.П. Термодинамика. Москва: Высшая школа. 1991. 376 с.
100. Приходько Э.В. О перспективах развития методов моделирования физико-химических систем // Известия ВУЗов. Черная металлургия. 1991. № 12. С. 7–13.
101. Петров Н., Бранков Й. Современные проблемы термодинамики. Москва: Мир, 1986. 285 с.
102. Базаров И.П., Геворкян Э.В., Николаев П.Н. Неравновесная термодинамика и физическая кинетика. Москва: Изд-во московского университета, 1989. 240 с.
103. Цымбал В.П. О механизме и циклы самоорганизации применительно к металлургическим процессам // Материалы всесоюзного совещания «Моделирование физико-химических систем и технологических процессов в металлургии». Известия ВУЗов. Черная металлургия. 1991. № 12. С. 1–7.
104. Пригожин И., Стенгерс И. Порядок з хаосу. Новий діалог людини з природою. Москва: Прогрес, 1986. 432 с.
105. Пригожин И., Кондепуди. Д. Современная термодинамика. Москва: Мир, 2002. 461 с.
106. Семенов В.И. Трудности кинетической теории кристаллизации металлов и сплавов // Металлургия машиностроения. 2005. № 1. С. 16–21.
107. Семенов В.И. Влияние температуры и скорости охлаждения на изменение строения расплава // Металлургия машиностроения. 2005. № 3. С. 24–27.
108. Rappaz M., Dantzig J.A. Solidification // Eapl Press. 2009. 621 p.

109. Каржавин В.К. Тепловые эффекты и концентрирование примесей магматического расплава при формировании интрузий // Вестник МГТУ. 2002. Том. 5. № 1. С. 133–140.
110. Эскин Д.Г. Структурные факторы дендритной ликвации в алюминиевых сплавах // Известия ВУЗов. Цветная металлургия. 2008. № 5. С. 53–59.
111. Золоторевский В.С. Структура и прочность литых алюминиевых сплавов. Москва: Металлургия, 1981. 192 с.
112. Юдаев Б.Н. Теплопередача. Москва: высшая школа, 1973. 359 с.
113. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. Москва: Наука, 1977. 735 с.
114. Авдонин Н.А. Математическое описание процесса кристаллизации. Рига: Зинатне, 1980. 178 с.
115. Ландау А.И. К вопросу о волнообразном характере и распределении примеси вдоль длины растущего кристалла // Физика металлов и металловедение. 1958. Т. 6. С. 148–155.
116. Секерка Р., Маллиз В. Устойчивость плоской поверхности раздела фаз при кристаллизации разбавленного бинарного сплава. В кн.: Проблемы роста кристалла. Москва: Мир, 1968. С. 106–126.
117. Иванцов Г.П. «Диффузионное» переохлаждение при кристаллизации бинарного сплава // ДАН. 1951. Т. 81. № 2. С. 179–181.
118. Иванцов Г.П. Кристаллизация бинарного сплава при сохранении устойчивости // ДАН. 1961. Т. 136. № 3. С. 583–586.
119. Борисов В.Т. Двухфазная зона при кристаллизации в нестационарном режиме // ДАН. 1962. Т. 142. № 3. С. 581–583.
120. Лихт М.К., Кузминская С.Б. Затвердевание бинарных сплавов в интервале температур // Физика металлов и металловедение. 1961. Т. 11. Вып. 6. С. 878–882.
121. Любов Б.Я. Рост и дефекты металлических кристаллов. Киев: Наукова думка, 1972. С. 9–23.

122. Magnin P., Kurz W. An Analitical Model of Irregular Eutectic Growth and Its Application to Fe-C // *Acta Metall. Mater.* 1987. V. 35. № 5. P. 1119–1128.
123. Stefanescu D.M., Upadhy G., Bandyopadhyay D. Heat Transfer-Solidification Kinetic Modelling of Solidification of Casting // *Metallurgical Transactions A*. V. 1990. 21A. P. 997–1005.
124. Kimio Kubo, Pehlke. R.D. Mathematical Modelling of Porosity Formation in Solidification // *Metallurgical Transactions B*. V. 1985. 16B. P. 359–366.
125. Swaminathan C.R., Voller V.R. A General Enthalpy Method for Modelling Solidification Processes // *Metallurgical Transactions B*. V. 1992. 23B. P. 653–664.
126. Албу А.Ф., Зубов В.И. Математическое моделирование и исследование процесса кристаллизации металлов в литейном деле // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 2007. Том. 47. № 5. С. 882–902.
127. Миненко А.С. Математическое моделирование процессов кристаллизации металлов // *Искусственный интеллект*. 2010. № 2. С. 37–43.
128. Борисов В.Т., Виноградов В.В., Духин А.И. и др. О применении теории квазиравновесной двухфазной зоны к описанию кристаллизации слитка // *Изв. АН СССР. Металлы*. 1971. № 6. С. 71–82.
129. Борисов В.Т. Виноградов В.В. и др. Математическое описание кристаллизации слитков с учетом фазовых превращений // *Известия ВУЗов. Черная металлургия*. 1975. Вып. 3. С. 87–98.
130. Любов Б.Я. Теория кристаллизации больших объемов Москва: Наука, 1975. 255 с.
131. Олейник О.А. Об одном методе решения задачи Стефана // *ДАН*. 1960. Том 135. № 5. С. 1054–1057.
132. Колмогоров А.Н. К статистической теории кристаллизации металлов // *Изв. АН СССР*. 1937. Т. 3. С. 355–361.

133. Голод В.М. Исследование механизма и кинетики выделения твердой фазы при неравновесной кристаллизации сплавов. В кн.: Структура фаз, фазовые превращения и диаграммы состояния металлических систем. Москва: Наука, 1974. С. 84–89.

134. Кашчиев Д.Б. О дисперсности новой фазы на начальных стадиях суммарной кристаллизации. В кн.: Механизм и кинетика роста кристаллов. Ереван, 1972. Ч. 1. С. 82–85.

135. Беленький В. 3. Геометрико-вероятностные модели кристаллизации. Москва: Наука, 1980. 84 с.

136. Жвавый С.П. Моделирование процессов плавления и кристаллизации монокристаллического кремния при воздействии наносекундного лазерного излучения // Журнал технической физики. 2000. Том 70. Вып. 8. С. 58–62.

137. Вольнов И.Н. К использованию кинетического уравнения А.Н. Колмагорова для описания кристаллизации сплавов // Металловедение и термическая обработка металлов. 2000. № 6. С. 6–10.

138. Elizabeth A. Holm, Corbett C. Battaile The computer Simulation of Microstructural Evolusion // JOM. 2001. Vol. 53 (9). P. 20–23.

139. Сибирёв Н.В., Дубровский В.Г. Модифицированная модель Колмогорова и скорость роста кристаллической грани произвольного размера // Письма в ЖТФ. 2004. Том 30. Вып. 18. С. 79–86.

140. Ананин С.И., Асташинский В.М., Емельяненко С.М. и др. Динамика плавления и кристаллизации монокристаллического кремния при воздействии компрессионных плазменных потоков // Журнал технической физики. 2006. Том 76. Вып. 7. С. 34–40.

141. Петухов Б.В. Кинетика распада метастабильных состояний разупорядоченной линейной системы // Физика твердого тела. 1999. Том 41. Вып. 11. С. 1989–1993.

142. Farjas J., Roura P. Modification of the Kolmogorov – Johnson – Mehl – Avrami rate equation for non-isothermal experiments and its analytical solution // *Acta Materialic*. 2006. Vol. 54. P. 5573–5579.

143. Prokhorov E., Trapaga G., Kovalenko Yu. Crystallization kinetic in materials with a two-phase formation from an amorphous phase // *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*. 2006. V. 8. № 6. P. 2066–2069.

144. Самойлович Ю.А. Системный анализ кристаллизации слитка. Киев: Наукова думка, 1983. 246 с.

145. Zhang Y.T., Li D., Li Y., Pang W. Numerical simulations of equiaxed dendrite growth using phase field method // *J. Mater. Sce. Technol*. 2002. Vol. 18. P. 51–53.

146. Zhao D.P., Jing T., Liu B.C. Simulating the three-dimensional dendrite growth of Al alloy using phase-field method // *Acta Phys. Sin*. 2003. Vol. 52. P. 1337–1342.

147. Saito Y., Goldbeck-Wood G., Muller-Krumbhaar H. Numerical simulation of dendritic growth // *Physical Review A. Numerical simulations of dendrite growth*. 1988. Vol. 38. P. 2148–2157.

148. Бялик О.М., Ментковский Ю.Л. Вопросы динамической теории затвердевания металлических отливок. Киев: Вища школа, 1983. 111 с.

149. 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.

150. Mulheran P., Harding J.H. A Simple Statistical Model for Grain Growth in Materials // *Acta Metall. Mater*. 1991. V. 10. № 10. P. 2251–2254.

151. . Guo J.Y., Hong Z.K., Chen M., Gun Z.Y. A Monte Carlo simulation on solidification and crystal growth of metals // *J. Engineering Thermophysics*. 2001. Vol. 22. P. 725–728.

152. Zhu P., Smith R.W. Dynamic simulation of crystal growth by Monte Carlo method // *Acta Metall Mater*. 1992. Vol. 40. P. 3369–3379.

153. Wang Wei, Chen Ju-hua, Guo Pei-quan, Zhao Ping. Combining cellular automata and Monte Carlo algorithm to simulate three-dimensional grain growth // Trans Nonferrous Metals Soc. China. 2006. Vol. 16. Spec. issue 2. P. 104–106.

154. Овруцкий А. М., Расщупкина М. С., Рожко А. А. Моделирование спонтанной кристаллизации металлов // Металлофиз. и нов. технол. 2006. Vol. 28. № 3. С. 281–293.

155. Лоскутов А.Ю., Михайлов А.С. Введение в синергетику. Москва: Наука, 1990. 376 с.

156. Иванова В.С., Баланкин А.С., Бунин И.Ж., Оксогоев А.А. Синергетика и фракталы в материаловедении. Москва: Наука, 1994. 384 с.

157. Хмелевская В.С., Куликова Н.В., Бондаренко В.В. Фрактальные структуры в металлических материалах после ионного облучения и лазерного воздействия // Письма в ЖТФ. 2005. Том 31. Вып. 14. С. 77–82.

158. 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.

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

160. Иванов А.И., Дубов А.В. Применение фрактальной параметризации для моделирования процессов формирования первичной кристаллической структуры металлов // Металлы. Москва: ЭЛИЗ, 2005. № 4. С. 17–25.

161. Zhang L., Zhang C. Two-dimensional cellular automation model for simulating structural evolution of binary alloys during solidification // Trans. Nonferrous Met. Soc. China. 2006. Vol. 16. P. 1410–1416.

162. Rappaz M., Gandin C.A. Probabilistic modelling of microstructure formation in solidification processes // Acta Metall Mater. 1993. Vol. 41. P. 345–360.

163. Yao Xiangdong, Dahle Arne K., Davidson Cameron J., StJohn D. Modelling of grain size transition with alloy concentration in solidified Al-Si alloys // H. J. Mater. Sci. 2007. Vol. 42. № 23. P. 9756–9764.

164. Zhu Mihg-fang, Cao Wei-sheng, Chen Shuang-lin, Xie Fan-you, Hong Chun-pyo, Chang Y. Austin. Modified cellular automaton model for modelling of microstructure and microsegregation in solidification of ternary alloys // Trans. Nonferrous Metals Soc. China. 2006. Vol. 16. Spec. issue 2. P. 180–185.

165. Raabe D. Introduction of scalable three-dimensional cellular automation with a probabilistic switching rule for the discrete mesoscale simulation of recrystallization phenomena // Philo. Mag. A. 1999. Vol. 79. P. 2339–2358.

166. Raabe D. Cellular automata in materials science with particular reference to recrystallization simulation // Annu. Rev. Mater. Res. 2002. Vol. 32. P. 39–52.

167. Hesselbarth H.W., Gobel I.R. Simulation of recrystallization by cellular automata // Acta Metall Mater. 1991. Vol. 39. P. 2135–2143.

168. Zhang L., Wang Y.M., Zhang C.B., Wang S.Q., Ye H.Q. A cellular automation model of the transformation from austenite in low carbon steels // Modelling Simul. Mater. Sci. Tech. 2003. Vol. 11. P. 791–801.

169. Zhang L., Zhang C.B., Wang Y.M., Wang S.Q., Ye H.Q. A cellular automation investigation of the transformation from austenite to ferrite during continuous cooling // Acta Mater. 2003. Vol. 51. P. 5519–5527.

170. Ахромеева Т.С., Курдюмов С.П., Малинецкий Г.Г. Парадоксы мира нестационарных структур. В кн.: Компьютеры и нелинейные явления. Москва: Наука, 1988. С. 44–122.

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

172. Александров П.С., Пасынков Б.А. Введение в теорию размерности. Москва: Наука, 1973. 576 с.

173. Хэйс Б. Клеточный автомат создает модель мира и мир вокруг себя // В мире науки. 1984. № 5. С. 97–104.
174. Згуровский М.З., Панкратова Н.Д. Системный анализ: проблемы, методология, приложения; НАН Украины; НТУУ «КПИ»; Ин-т прикладного системного анализа. Киев: Наукова думка, 2005. 743 с.
175. Советов Б.Я., Яковлев С.А. Моделирование систем. Москва: Высшая школа, 1985. 271 с.
176. Горстко А.Б. Познакомьтесь с математическим моделированием. Москва: Знание, 1991. 157 с.
177. Галагаев С.В., Севастьянов П.В., Кульчицкий Н.Г. Имитационная модель чугунолитейного цеха // Литейное производство. 1991. № 10. С. 19–20.
178. Иванов А.И., Дубов А.В. Имитационная модель процесса пенообразования в алюминиевом расплаве // Металлы. Москва: ЭЛИЗ, 2006. № 6. С. 60–55.
179. Доний А.Н. Имитационное моделирование кристаллизации металлов и его особенности // Вісник СевНТУ. Вип. 133: Механіка, енергетика, екологія: зб. наук. пр. / Севастоп. нац. техн. ун-т. Севастополь: Вид-во СевНТУ, 2012. С. 165–173.
180. Rappaz M. Numerical Modeling in Materials Science and Engineering / Springer. 2010. 551 p.
181. Vernede S., Rappaz M. A simple and efficient model for mesoscale solidification simulation of globular grain structures // Acta mater. 2007. Vol. 55. № 5. P. 1703–1710.
182. Mao Y., Gokhale A. M., Harris J. Computer simulations of realistic microstructures of coarse constituent particles in a hot-rolled aluminium alloy // Comput. Mater. Sci. 2006. Vol. 37. № 4. P. 543–556.
183. Львовский Е.Н. Статистические методы построения эмпирических формул. Москва: Высшая школа, 1988. 239 с.

184. Кузін О.А., Яцюк Р.А. Металознавство та термічна обробка металів. Київ: Основа, 2005. 324 с.
185. Древс Ю.Г. Системы реального времени: технические и программные средства. Москва: МИФИ, 2010. 320 с.
186. Городов А.Н. и др. Точность контактных методов измерения температуры. Москва: Изд-во стандартов, 1976. 232 с.
187. Кунце Х.-И. Методы физических измерений: пер. с нем. Москва: Мир, 1989. 216 с.
188. Новицкий П.В., Зограф И.А. Оценка погрешностей результатов измерений. Ленинград: Энергоатомиздат, 1991. 304 с.
189. Рогельберг И.Л., Бейлин В.М. Сплавы для термопар. Справочное издание. Москва: Металлургия, 1983. 360 с.
190. Саченко А.А., Мильченко В.Ю., Коган В.В. Измерение температуры датчиками со встроенными калибраторами. Москва: Энергоатомиздат, 1986. 96 с.
191. Туз Ю.М. Структурные методы повышения точности измерительных устройств. Киев: Вища школа, 1976. 256 с.
192. Книжников Ю.Ф., Гельман Р.Н. Компьютерная система для измерения цифровых стереопар при решении нетопографических задач и научных исследованиях // Геодезия и картография. 1999. № 2. С. 136–149.
193. Krohn B.R. Thermal analysis: metallurgical thumb printing // Mod. Cast. 1985. Vol. 75. № 3. P. 21–25.
194. ДСТУ 3054–95. Чугун и сталь. Методы анализа. Термины и определения. Государственный комитет стандартизации, метрологии и сертификации Украины. 1995. 42 с.
195. Дусанюк Ж.П., Шиліна О.П., Репінський С.В., Дусанюк С.В. / Проектування та виробництво заготовок деталей машин. Литі заготовки. Навчальний посібник. Вінниця: ВНТУ, 2009. 199 с.
196. ДСТУ 2839–94. Сплавы алюминиевые литейные. Технические условия. 1994.

197. Диаграммы состояния систем на основе алюминия и магния: Справочник / М.Е. Дриц, Н.Р. Бочвар, Э.С. Каданер и др. Москва: Наука, 1977. 228 с.
198. 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»: збірник тез доповідей, м. Київ, 27–28 квітня 2010 р. Київ, 2010. С. 124–125.
199. Кан Р.У. Физическое металловедение. Т. 2: Фазовые превращения в металлах и сплавах с особыми физическими свойствами. Москва: Наука, 1987. 621 с.
200. Орнатский П.П. Автоматические измерения и приборы: учебник для ВУЗов. 4-е изд., перераб. и доп. Киев: Вища школа, 1980. 560 с.
201. Dopp R. Beitrag zur Beurteilung der eutektischen Graphitisierung von Gubeisen durch thermische Analyse // Giesserei. 1989. Vol. 76. № 2. S. 47–53.
202. Chen H.-G., Engler S. Untersuchung des kristallisationsablaufs von überveredelten Aluminium-Silicium-Legierungen mit Hilfe der thermischen Analyse // Giesserei. 1990. Vol. 77. № 2. S. 49–54.
203. Макс Ж. Методика и техника обработки сигналов при физических измерениях: в 2-х томах. Москва: Мир, 1983. Т. 1. 312 с.
204. Маделунг Э. Математический аппарат физики. Москва: Государственное изд-во физико-математической литературы, 1960. 618 с.
205. Дьяконов В.П. Справочник по алгоритмам и программам на языке бейсик для персональных ЭВМ. Москва: Наука, 1987. 240 с.
206. 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.

207. Куритнык И.П., Бурханов Г.С., Стадник Б.И. Материалы высокотемпературной термометрии. Москва: Металлургия, 1986. 264 с.
208. Самсонов Г.В., Киц А.И., Кюздени О.А. Датчики для измерения температуры в промышленности. Киев: Наукова думка, 1972. 223 с.
209. Яворский Б.М., Детлаф А.А., Лебедев А.К. Справочник по физике для инженеров и студентов. Москва: ООО «Издательство «Оникс», 2006. 531 с.
210. Куритнык И.П., Добровенский И.Е., Фединец В.А., Донин В.М. Средства измерения температуры в металлургии. Обзорная информация, выпуск 1 ТС-6 «Приборы и устройства для контроля и регулирования технологических процессов». Москва, 1988. 48 с.
211. Гордов А.Н., Жагулло О.М., Иванов А.Г. Основы температурных измерений. Москва: Энергоатомиздат, 1992. 304 с.
212. ДСТУ 2681–94. Метрология. Термины и определения. Государственный комитет стандартизации, метрологии и сертификации Украины. 1994. 72 с.
213. Куинн Т. Температура. Москва: Мир, 1985. 448 с.
214. Вольтамперметр электронный цифровой Щ68003. Техническое описание и инструкция по эксплуатации. ГБ2.728.004 ТО. Альбом 1. Невинномысск, 1974. 104 с.
215. Дорофеев П., Руднев П. Современные быстродействующие АЦП с большим динамическим диапазоном // Электроника: Наука. Технология. Бизнес. 2006. № 4. С. 23–25.
216. Доній О.М. Термшумовий вимірювач температури для системи управління якістю ливарних розплавів на основі термічного аналізу // Международный научный журнал Acta Universitatis Pontica Euxinus. Днепропетровск, Варна. 2013. Том III. С. 463–465.
217. 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. 82–84.

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

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

220. Доній О.М., Кулініч А.А., Шпак Д.Ю. Математична модель термошумового перетворювача з магнітним зв'язком для безконтактного вимірювання температури // VIII Міжнародна науково-технічна конференція «Приладобудування 2009: стан і перспективи», м. Київ, 28–29 квітня 2009 р.: збірник тез доповідей. Київ, 2009. С. 108–109.

221. 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», м. Київ, 28–29 квітня 2009 р.: збірник тез доповідей. Київ, 2009. С. 109–110.

222. Отнес Р., Эноксон Л. Прикладной анализ временных рядов. Основные методы: Москва: Мир, 1982. 482 с.

223. Шуп Т. Решение инженерных задач на ЭВМ. Практическое руководство. Пер. с англ. Москва: Мир, 1982. 236 с.

224. 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», м. Київ, 28–29 квітня 2011 р.: збірник тез доповідей. Київ, 2011. С. 133.

225. 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. Севастополь: Вид-во СевНТУ, 2010. С. 193–197.

226. Вейник А.И. Теория затвердевания отливки. Москва: Металлургия, 1960. 435 с.
227. Feurer U., Wunderlin R. Zisteming to solidification – observation of porosity formation during solidificasions of alumini alloys beg acoustic emission measurements // Shefild Int. Consf. Solidific. And Cast. 1977. Vol. 2. P. 1.
228. Chen I. G., Stefanescu D.M. Computer – aided differential thermal analysis of spheroidal and compact graphite cast irons // Transact. Amer. Foundrymens Soc. 1984. Vol. 92. P. 947–964.
229. Fredriksson H., Rogberg B. Thermal analysis for interpretation of solidification cycle // Metal Science. 1979. Vol. 13. N 12. P. 685–690.
230. Jura S. Istota metody ATD // Prz. odlew. 1985. Vol. 35. № 4–5. S. 5–10.
231. Кухлинг Х. Справочник по физике. Москва: Мир, 1985. 519 с.
232. Баландин Г. Ф. Основы формирования отливки. Москва: Машиностроение, 1976. Ч. 1. 328 с.
233. 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.
234. Доній О.М., Кулініч А.А. Розрахунок кінетичних параметрів кристалізації сплавів типу твердого розчину на основі даних термічного аналізу // V Международной научно-технической конференции «Перспективные технологии, материалы и оборудование в литейном производстве», Краматорск, 21–25 сентября 2015 г. Краматорск: ДГМА, 2015. С. 56–59.
235. Голуб Л. В., Иванчук Д. Ф., Смольский А. А. Влияние Электрического тока на процессы кристаллизации алюминиево-кремниевых сплавов // Исследование процессов с участием окисных и металлических расплавов. Москва: Металлургия, 1983. С. 127–130.

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

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

238. 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.

239. Даркен Л.С., Гурри Р.В. Физическая химия металлов. Москва: Металлургиздат, 1960. 581 с.

240. Lukas H. L., Weiss J., E.–Th. Hanig. Strategies for calculation of phase diagrams // CALPHAD. 1982. V. 6, № 3. P. 229–251.

241. Okamoto H. Revaluation of Thermodynamic Models For Phase Diagram Evaluation // Journal of Phase Equilibria. 1991. Vol. 12, № 6. P. 623–664.

242. Зиновьев В.Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. Справочник. Москва: Металлургия, 1989. 383 с.

243. Доній О.М., Кулініч А.А., Котляр С.М., Дудка О.І. Математичне моделювання матеріалів та технологічних процесів в матеріалознавстві / Методичні вказівки. До виконання комп'ютерного практикуму для студентів спеціальності «Металознавство». Київ, 2016. 102 с.

244. 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. Севастополь: Вид-во СевНТУ, 2011. С. 126–131.

245. Donii O., Khristenko V., Omelko L., Kotliar S. Mathematical models of calculations of parameters of crystallization of binary alloys by means computer thermal analysis // Mathematical modelling. 2018. Vol. 3. P. 99–101.

246. 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.

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

248. 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.

249. Алюминиевые сплавы. Металловедение алюминия и его сплавов. Справ. руководство. Москва: Металлургия, 1971. 352 с.

250. Алюминиевые сплавы. Промышленные деформируемые, спеченные и литейные сплавы. Справочное руководство. Москва: Металлургия, 1972. 552 с.

251. 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.

252. Ершов Г.С., Бычков Ю.Б. Высокопрочные алюминиевые сплавы на основе вторичного сырья. Москва: Металлургия, 1979. 192 с.

253. 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.

254. 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.

255. 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.

256. 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.

257. Кузін О.А., Яцюк Р.А. Металознавство та термічна обробка металів. Київ: Основа, 2005. 324 с.

258. 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.

259. Voller V. R. A numerical method for the Rubinstein binary-alloy problem in the presence of an under-cooled liquid // Int. J. Heat and Mass Transfer. 2008. Vol. 51. № 3–4. P. 696–706.

260. Бялик О.М., Доній О.М., Кулініч А.А., Рябініна О.О., Веніков С.О. Імітаційна модель кристалування та структуровання алюмінієвих сплавів // Фізико-хімічна механіка матеріалів. 2003. Том 39. № 6. С. 88–91.

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

262. Пикунов М.В., Пилецкая Е.Г. Количественное описание неравновесной кристаллизации двойных сплавов с учетом начального

переохлаждения // Известия ВУЗов. Цветная металлургия. 2004. № 2. С. 45–51.

263. Артюнов В.А., Бухмиров В.В., Крупенников С.А. Математическое моделирование тепловых промышленных печей. Москва: Металлургия, 1990. 239 с.

264. Chen L., Wang P. L., Song P. N., Zhang J. Y. Finite element numerical simulation of temperature field in metal pattern casting system and «reverse method» of defining the thermal physical coefficient // Acta met. sin. 2007. Vol. 20. № 3. P. 217–224.

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

266. Лариков Л.Н., Исайчев В.И. Диффузия в металлах и сплавах. Структура и свойства металлов и сплавов. Справочник. Киев: Наукова думка, 1987. 510 с.

267. Мондольфо Л.Ф. Структура и свойства алюминиевых сплавов. Москва: Металлургия, 1979. 640 с.

268. Лякишев Н.П. Диаграммы состояния двойных металлических систем. Москва: Машиностроение. 1996. Том. 1. 992 с.

269. Эскин Д.Г. Структурные факторы дендритной ликвации в алюминиевых сплавах // Известия ВУЗов. Цветная металлургия. 2008. № 5. С. 53–59.

270. Ковтун Г.П., Щербань А.П., Кондрик А.И. Влияние условий направленной кристаллизации на глубокую очистку металлов // Вопросы атомной науки и техники. 2007. № 4. С. 19–23.

271. Тихомиров М.Д., Комаров И.А. Основы моделирования литейных процессов. Что лучше – метод конечных элементов или метод конечных разностей // Литейное производство. 2002. № 5. С. 22–28.

272. Ситник В.Ф., Орленко Н.С. Імітаційне моделювання. Київ: КНЕУ, 1998. 232 с.
273. Шарин Е.Ф. Краевые задачи для параболических уравнений с разрывными коэффициентами: дисс. на соискание степени канд. физ.-мат. наук: 01.01.02. Якутск, 2010. 118 с.
274. Оно А. Затвердевание металлов. Москва: Металлургия, 1980. 149 с.
275. Косников Г.А. Основы литейного производства. Санкт-Петербург: Издательство СПбГПУ, 2002. 203 с.
276. Чернышов Е.А., Евстигнеев А.И. Теоретические основы литейного производства. Теория формирования отливки. Москва: Машиностроение, 2015. 480 с.
277. Елагин В.И., Федоров В.М. Влияние скорости кристаллизации на структуру слитков модифицированных алюминиевых сплавов // Металловедение и термическая обработка металлов. 2001. № 4. С. 21–23.
278. 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», Киев, 12–14 декабря 2011 г. Киев, 2011. С. 84–85.
279. Доний А.Н. Компьютерная модель кристаллизации металлов и сплавов // Международный научный журнал Acta Universitatis Pontica Euxinus. Дніпропетровськ; Варна, 2015. Том 2. С. 388–393.
280. Доний О.М. Імітаційне моделювання гомогенної та гетерогенної кристалізації Al та сплаву Al-Si // Вісник НТУУ «КПІ» Машинобудування. 2011. № 61. Том 2. С. 72–78.
281. Доний 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.

282. Donii O. Modeling of metal crystallization by means of cellular automation // Materials science. Non-equilibrium phase transformations. 2017. Vol. 4. P. 150–153.

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

284. Donii O., Kulinich A., Khristenko V. Computer system for the predicting the structure and properties of cast metal products // International scientific journal Mathematical Modelling, 2017. P. 180–183.

285. Donii O., Narizhna T., Voron M., Berest D. Influence of the external magnetic field on the structure and properties of the hypereutectic aluminium-silicon alloy // Materials science. Non-equilibrium phase transformations. 2018. Vol. 3. P. 79–82.

286. 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.

287. 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.

ДОДАТКИ

Додаток А

Список публікацій 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 parametrs 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 Celluar 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 кристалування 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 кристалування 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». Днепропетровськ; 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». Днепропетровськ; 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. Доний О., Лаврова Т. Автоматизований комплекс прогнозування якості розплавів // 12-й Міжнародний симпозіум українських інженерів-механіків у Львові, 28–29 травня 2015 р. Львів, 2015. С. 109–110.

Додаток Б

**Відомості про апробацію результатів дисертації на міжнародних та
всеукраїнських конференціях**

№	Назва конференції	Місце проведення	Дата прведення	Форма участі
1	2	3	4	5
Міжнародні науково-практичні конференції				
1	IX Міжнародна науково-практична конференція «Нові матеріали і технології в машинобудуванні - 2017»	Україна, Київ: НТУУ «КПІ»	30 – 31 травня 2017 р.	Очна
2	Міжнародна наукова конференція «Матеріали для роботи в екстремальних умовах - 6»	Україна, Київ: НТУУ «КПІ»	1 – 2 грудня 2016 р.	Очна
3	12-й Міжнародний симпозіум українських інженерів-механіків у Львові	Україна, Львів	28 – 29 травня 2015 р.	Очна
4	V Международная научно-техническая конференция «Перспективные технологии, материалы и оборудование в литейном производстве»	Україна, г. Краматорск ДГМА	21-25 серпня 2015 г.	Заочна
5	XI Международная конференция «Стратегия качества в промышленности и образовании».	Болгария, г.Варна	1 – 5 июня 2015	
6	IX Международная конференция «Стратегия качества в промышленности и образовании».	Болгария, г.Варна	31 мая – 7 июня 2013	
7	Международная научно-практическая конференция-выставка «Литейное производство: технологии, материалы, оборудование, экономика и экология»	Украина, Киев	12 – 14 декабря 2011 г.	Очна
8	VII Международная конференция «Стратегия качества в промышленности и образовании».	Болгария, г.Варна	3 – 10 июня 2011 г.	

1	2	3	4	5
9	X Міжнародна, науково-технічна конференція «Приладобудування 2011: стан і перспективи»	Україна, м. Київ	28 – 29 квітня 2011 р.	Очна
10	IX Міжнародна, науково-технічна конференція «Приладобудування 2010: стан і перспективи»	Україна, м. Київ	27 – 28 квітня 2010 р.	Очна
11	VIII Міжнародна науково-технічна конференція «Приладобудування 2009: стан і перспективи»	Україна, м. Київ	28 – 29 квітня 2009 р.	Очна
12	Міжнародна НТК «Надежность и долговечность механизмов, элементов конструкций и биомеханических систем»	Україна, м. Севастопіль	7 - 11 вересня 2008 р.	Очна
Науково-практичні конференції				
13	Научно-техническая конференция "Современные технологические процессы в литейном производстве"	м. Київ, Україна РДЭНТП	1991 г.	Очна
14	III Республиканская НТК «Теория и технология производства отливок из сплавов цветных металлов»	г. Владикавказ	1991 г.	Очна
15	III Республиканская НТК «Теория и технология производства отливок из сплавов цветных металлов»	г. Владикавказ	1991 г.	Очна
16	Республиканская НТК "Микропроцессорные системы управления технологическими процессами в ГПС"	г. Одесса: ОПИ	1990 г.	Очна

Додаток В

Артеммаш - 1 стор

Додаток Г

Лк-Металургія - стор

Додаток Д

Суми 1 випробування - 1 стор

Додаток Е

Суми 2 впровадження - 1 стор

Додаток Ж

Міністерство освіти і науки України
Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут»

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ МАТЕРІАЛІВ ТА
ТЕХНОЛОГІЧНИХ
ПРОЦЕСІВ У МАТЕРІАЛОЗНАВСТВІ

Методичні вказівки
до виконання комп'ютерного практикуму

Київ – 2015

Міністерство освіти і науки України
Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут»

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ МАТЕРІАЛІВ ТА
ТЕХНОЛОГІЧНИХ
ПРОЦЕСІВ У МАТЕРІАЛОЗНАВСТВІ

Методичні вказівки
до виконання комп'ютерного практикуму

Затверджено Методичною радою НТУУ «КПІ»

Київ
НТУУ «КПІ»
2015

Математичне моделювання матеріалів та технологічних процесів в матеріалознавстві [Текст] : методичні вказівки до виконання комп'ютерного практикуму для студ. спец. Металознавство / Уклад.: О.М.Доній, А.А.Кулініч, С.М. Котляр, О.І. Дудка. – К.: НТУУ «КПІ», 2015. - *** с.

*Гриф надано Методичною радою НТУУ «КПІ»
(Протокол № *** від ***.***.2015 р.)*

Навчальне видання

Математичне моделювання матеріалів та технологічних процесів в матеріалознавстві

Методичні вказівки
До виконання комп'ютерного практикуму
для студентів спеціальності
«Металознавство»

Укладачі: Доній Олександр Миколайович, канд. техн. наук, доц.
Кулініч Андрій Альбертович, канд. техн. наук, доц.
Котляр Сергій Миколайович.
Дудка Олександр Іванович, канд. техн. наук, доц.

Відповідальний
Редактор – Зауличний Ярослав Васильович докт. фіз.-мат. наук, доц.

Рецензент – Степанов Олег Васильович, канд. техн. наук, доц.

*За редакцією укладачів
Надруковано з оригінал-макета замовника*

Зміст

Вступ	
Комп'ютерний практикум № 1	Нагрівання металевого виробу в печі для наступної термічної обробки – 1
Комп'ютерний практикум № 2	Нагрівання металевого виробу в печі для наступної термічної обробки – 2
Комп'ютерний практикум № 3	Нагрівання металевого виробу в печі для наступної термічної обробки – 3
Комп'ютерний практикум № 4	Ідентифікаційні математичні моделі. Метод найменших квадратів
Комп'ютерний практикум № 5	Сімплекс-решитчастий плановий експеримент для побудови моделі «склад-властивості» сплаву системи Al-Mg-Zn
Комп'ютерний практикум № 6	Оптимізація режимів зміцнюючої обробки сталі з використанням факторних планів першого та другого порядків
Комп'ютерний практикум № 7	Оптимізація режимів термічної обробки нержавіючої мартенситно-старіючої сталі з використанням планів Бокса-Бенкена
Комп'ютерний практикум № 8	Багатокритеріальна оптимізація методом послідовних поступок
Комп'ютерний практикум № 9	Імітаційне моделювання складних систем. Імітаційна модель кристалізації чистого металу
Комп'ютерний практикум № 10	Імітаційне моделювання складних систем. Імітаційна модель кристалізації бінарних сплавів
Додатки	

Додаток 3

Витяг ІІМ 1 - 3 стор

----- 2

----- 3

Додаток І

Витяг ІІМ 2 - 4 стор

----- 2

----- 3

----- 4