

Хмельницький національний університет  
Факультет інженерії, транспорту та архітектури  
Кафедра трибології, автомобілів та матеріалознавства

# ПОЯСНЮВАЛЬНА ЗАПИСКА до кваліфікаційної роботи МАГІСТРА


Освітньо-кваліфікаційний рівень

Спеціальність 132 – Матеріалознавство  
Шифр і назва спеціальності  
Освітньо-професійна програма Відновлення та технічний сервіс автомобілів  
Назва освітньої програми

на тему *Моделювання кристалізації бінарного сплаву*

Шифр: КРТАМ 25. 24362.000. ПЗ

Виконав: студент 2 курсу, група МТВАм-24-1  Віталій ЯНЧУК  
Курс, група виконавця Підпис Ім'я, прізвище

Керівник: д.т.н., професор кафедри ТАМ  Ілона ДРАЧ  
Науковий ступінь, посада Підпис Ім'я, прізвище

До захисту допускаю:

зав. кафедри ТАМ, д.т.н., професор

  
Підпис

Олександр ДИХА  
Ім'я, прізвище

5 грудня 2025 р.

Хмельницький 2025

# ХМЕЛЬНИЦЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Факультет *інженерії, транспорту та архітектури*

Кафедра *трибології, автомобілів та матеріалознавства*

Рівень вищої освіти *другий магістерський*

Галузь знань *13 – Механічна інженерія*

Спеціальність *132 – Матеріалознавство*

Освітньо-професійна програма *Відновлення та технічний сервіс автомобілів*

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри ТАМ



(підпис)

д.т.н., професор Олександр ДИХА

Науковий ступінь, ім'я, прізвище

7 жовтня 2025 року

## ЗАВДАННЯ НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ

Янчуку Віталію Сергійовичу

(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема роботи: «Моделювання кристалізації бінарного сплаву»

Керівник роботи Драч Ілона Володимирівна д.т.н., професор

(прізвище, ім'я, по батькові науковий ступінь, вчене звання)

Затверджено наказом університету від 25 серпня 2025 р. № 65 (Д28)

2. Строк подання студентом роботи на кафедру: 2 грудня 2025 р.

3. Вихідні дані: *дані якісні джерела інформації щодо теми КРМ, результати моделювання одержано із застосуванням прикладних програм Mathcad.*

4. Зміст пояснювальної записки (перелік задач): *провести аналіз теоретичних основ кристалізації бінарних металевих систем; дослідити вплив термодинамічних і кінетичних факторів на морфологію твердіння; проаналізувати сучасні чисельні методи моделювання кристалізації та обґрунтувати вибір конкретного підходу; розробити покрокову методику моделювання, яка включає вибір математичного апарату, постановку задачі теплоперенесення, верифікацію результатів та адаптацію для залізовмісних сплавів; створити дві практичні моделі: солідусну модель для сплавів Fe–C, яка описує завершення тверднення при температурі солідуса та враховує випадковий характер утворення структури; стохастичну модель кристалізації для умов розливання сталі, що прогнозує утворення дефектів; проаналізувати результати моделювання та якісно визначити переваги стохастичної моделі.*

5. Перелік графічного матеріалу: *графічна частина роботи представлена у вигляді презентації на слайдах.*

6. Консультанти розділів роботи:

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		Завдання видав	Завдання прийняв

7. Дата видачі завдання 1 червня 2025 р.

### КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№	Назва етапів (розділів) кваліфікаційної роботи	Термін виконання	Примітка
1	<i>Вибір напряму дослідження та узгодження тематики кваліфікаційної роботи з керівником</i>	30.08.2025	<i>виконано</i>
2	<i>Ознайомлення з предметною областю, формулювання мети та задач дослідження, визначення об'єкта та предмета дослідження</i>	10.09.2025	<i>виконано</i>
3	<i>Робота над розділом 1 – Характеристика предметної області та постановка задачі дослідження</i>	20.09.2025	<i>виконано</i>
4	<i>Робота над розділом 2 – Теоретичні основи моделювання тверднення бінарного сплаву на основі заліза</i>	30.09.2025	<i>виконано</i>
5	<i>Робота над розділом 3 – Методика моделювання тверднення бінарного сплаву на основі заліза</i>	30.10.2025	<i>виконано</i>
6	<i>Робота над розділом 4 – Стохастична математична модель кристалізації бінарного сплаву</i>	15.11.2025	<i>виконано</i>
7	<i>Оформлення пояснювальної записки згідно вимог</i>	25.11.2025	<i>виконано</i>
8	<i>Нормоконтроль пояснювальної записки</i>	2.12.2025	<i>виконано</i>
9	<i>Підписання розділів. Затвердження дати захисту</i>	5.12.2025	<i>виконано</i>

Студент

  
Підпис

Віталій ЯНЧУК

Ім'я, прізвище

Керівник

  
Підпис

Ілона ДРАЧ

Ім'я, прізвище

## РЕФЕРАТ

Тема кваліфікаційної роботи: Моделювання кристалізації бінарного сплаву

Виконавець кваліфікаційної роботи: студент групи МТВАм-24-1  
Янчук Віталій Сергійович

Керівник кваліфікаційної роботи: д.т.н., професор кафедри ТАМ  
Драч Ілона Володимирівна

Кваліфікаційна робота містить:

Пояснювальна записка				Кількість додатків
Сторінок	Рисунків	Таблиць	Джерел інформації	
87	11	1	41	1

Мета роботи – розробити та реалізувати стохастичну математичну модель кристалізації бінарних сплавів на основі заліза для прогнозування мікроструктури та дефектів заготовок при безперервному розливанні сталі.

Проаналізовано теоретичні основи тверднення бінарних сплавів (термодинаміка, кінетика росту кристалів, діаграми стану). Розроблено дві моделі: солідусну для опису завершення тверднення сплавів Fe–C та стохастичну для умов розливання сталі.

Результати та практичне значення. Модель дозволяє розраховувати розподіл макросегрегації, параметри дендритної структури та ймовірність дефектів (пористість, тріщини). Результати можуть бути використані для оптимізації хімічного складу сплавів та режимів охолодження, що знижує витрати на брак. Робота демонструє ефективність стохастичного підходу для практичних інженерних задач металургії та визначає перспективи розширення моделі на багатоконпонентні системи.

Ключові слова: стохастичне моделювання, бінарні сплави на основі заліза, тверднення, безперервне розливання.

## ЗМІСТ

Вступ.....	8
1 Характеристика предметної області та постановка задачі дослідження.....	11
1.1 Історичні та теоретичні основи кристалізації сплавів .....	15
1.2 Класичні методи числового моделювання: теплопровідність, дифузія та імітаційні моделі .....	16
1.3 Сучасні чисельні підходи до моделювання кристалізації .....	16
1.3.1 Метод фазового поля .....	17
1.3.2 Клітинні автомати та імітаційні моделі .....	18
1.3.3 Гібридні та багатомасштабні підходи .....	19
1.4 Приклади моделювання бінарних сплавів .....	20
1.5 Порівняння методів: переваги, обмеження, вибір для конкретних задач .....	21
1.6 Сучасні тенденції та перспективи розвитку моделювання .....	23
Висновки до розділу.....	24
2 Теоретичні основи моделювання тверднення бінарного сплаву на основі заліза .....	26
2.1 Загальні принципи тверднення бінарних металевих сплавів.....	26
2.2 Діаграми стану та фазові перетворення в системах на основі заліза .....	28
2.2.1 Роль діаграм стану у прогнозуванні кристалізації .....	28
2.2.2 Типи фазових реакцій у бінарних сплавах на основі заліза .....	28
2.2.3 Залежність мікроструктури від хімічного складу.....	35

					КРТАМ 25. 24362.000 ПЗ			
Змн	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат	Моделювання кристалізації бінарного сплаву	Літ.	Арк.	Акрушіє
Розроб.	Янчук		<i>Васеле</i>					
Перевір.	Драч		<i>Т.Фар</i>				5	
Реценз.						ХНУ група МТВАм 24-1		
Н. Контр.	Бабак		<i>[Signature]</i>					
Затверд.	Диха		<i>[Signature]</i>					



4.4 Стохастична модель кристалізації бінарного сплаву при розливанні сталі .....	69
Висновки до розділу.....	74
Висновки.....	75
Перелік посилань .....	77
Додатки.....	82

					<i>КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		7





- проаналізувати результати моделювання та якісно визначити переваги стохастичної моделі.

Об'єкт дослідження – процес кристалізації бінарного металевого сплаву.

Предмет дослідження – закономірності формування мікроструктури та кінетика росту кристалів у процесі твердіння бінарної системи, описані засобами математичного моделювання.

Методи дослідження

У роботі використовуються:

- методи математичного моделювання процесів теплопровідності;
- засоби комп'ютерного моделювання та аналізу даних;
- порівняльний аналіз отриманих результатів з теоретичними закономірностями та літературними даними.

Результати дослідження можуть бути використані для:

- оптимізації технологій лиття та адитивного виробництва;
- прогнозування властивостей металевих сплавів на основі їхньої мікроструктури;
- формування рекомендацій щодо режимів охолодження та складу сплавів;
- розробки програмних засобів моделювання процесів твердіння;
- подальших наукових досліджень у галузі матеріалознавства та комп'ютерного інжинірингу.

					<i>КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ</i>	<i>Арк.</i>
<i>Змн.</i>	<i>Арк.</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Підпис</i>	<i>Дата</i>		10

# 1 ХАРАКТЕРИСТИКА ПРЕДМЕТНОЇ ОБЛАСТІ ТА ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ ДОСЛІДЖЕННЯ

Процеси кристалізації металевих матеріалів відіграють ключову роль у формуванні їхніх структурних та експлуатаційних властивостей. Особливої уваги набувають бінарні сплави, які становлять фундамент технологій матеріалознавства, зокрема у виробництві конструкційних, електротехнічних та жароміцних матеріалів. Саме в бінарних системах уперше проявляються складні закономірності фазоутворення, дифузійного переносу компонентів, морфології росту кристалів та мікроструктурної еволюції, що робить їх базовою моделлю для вивчення більш складних багатокомпонентних систем.

Кристалізація бінарних сплавів визначається взаємодією термодинамічних та кінетичних факторів, серед яких домінують фазові рівноваги, швидкість тепловідводу, градієнти концентрацій, поверхневі та міжфазні явища. Взаємний вплив цих процесів формує кінцеву мікроструктуру, що може включати дендритні та клітинні форми твердіння, евтектичні та перитектичні структури, розподіл другорядних фаз та елементів легування. Розуміння цих закономірностей є критично важливим для прогнозування властивостей готового матеріалу та оптимізації технологій лиття, зварювання, наплавлення й адитивного виробництва.

Однак експериментальне дослідження процесів кристалізації часто є складним та ресурсозатратним через високі температури, швидкоплинність фазових переходів і мікроскопічні масштаби формування структури. У цьому контексті особливої ваги набувають методи математичного та комп'ютерного моделювання, що дають змогу деталізувати фізичні механізми твердіння, відтворювати динаміку зародження і росту кристалічних фаз, аналізувати вплив технологічних параметрів на мікроструктуру та прогнозувати властивості матеріалу.

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		11



Водночас розвиток сучасних технологій обробки металів, таких як лазерне та електронно–променеве плавлення, спрямоване енергетичне наплавлення, 3D-друк металевими порошками, швидкісне охолодження та інші високотехнологічні методи, потребує точніших моделей, здатних враховувати надвисокі температурні градієнти, швидкі зміни фазового стану та локальні неоднорідності хімічного складу. За таких умов традиційні підходи, засновані на спрощених аналітичних моделях, уже не забезпечують достатньої точності. Це стимулює розвиток більш комплексних і багатомасштабних методів моделювання, які можуть інтегрувати мікро-, мезо- та макрорівні опису структури й процесів тепломасопереносу.

Наукова новизна моделювання кристалізації бінарних сплавів полягає в можливості відтворення складних структурних явищ, таких як формування дендритних осей і вторинних відгалужень, розвиток мікросегрегації компонентів, зміна морфології твердої фази залежно від швидкості охолодження, а також моделювання взаємодії між швидкістю росту кристалів та термодинамікою системи. Такі моделі здатні врахувати нелінійні залежності між концентрацією елементів, локальною температурою та зміною хімічного потенціалу під час фазового переходу.

Застосування комп'ютерного моделювання також надає можливість досліджувати віртуальні експерименти – тобто ситуації, які неможливо відтворити в лабораторних умовах або які вимагають дорогого обладнання й матеріалів. Наприклад, можна розглядати екстремально високі швидкості охолодження, характерні для адитивного виробництва, або моделювати поведінку сплавів, що містять токсичні чи рідкісні елементи. Такі підходи значно прискорюють цикл розробки нових матеріалів і технологій.

Серед найбільш прогресивних методів моделювання кристалізації виокремлюють:

Метод фазового поля, що дозволяє описувати морфологію межі поділу рідкої і твердої фаз без необхідності її явного відслідковування. Модель

					<i>КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ</i>	Арк.
						13
<i>Змн.</i>	<i>Арк.</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Підпис</i>	<i>Дата</i>		

враховує вільну енергію системи, градієнт енергії та взаємодію між концентраційними й температурними полями, що робить її особливо ефективною для моделювання дендритного росту.

Клітинні автомати, які забезпечують високу обчислювальну швидкість і можливість моделювати великі об'єми матеріалу з високою просторовою роздільною здатністю, що дозволяє реконструювати зернову структуру на мезорівні.

Метод скінченних різниць або скінченних елементів, який використовується для розв'язання рівнянь теплопровідності, дифузії та конвекції в процесі кристалізації.

Гібридні моделі, що поєднують фазове поле або клітинні автомати з рівняннями тепломасопереносу, дозволяючи отримати реалістичні моделі твердіння, які адекватно описують тепловий баланс і концентраційні зміни в системі.

Практична значущість моделювання бінарних сплавів полягає у можливості цілеспрямовано впливати на процеси формування мікроструктури матеріалу, оптимізувати склад і технологічні параметри та прогнозувати експлуатаційні характеристики виробів. Це особливо важливо для галузей, де невеликі зміни в структурі можуть призвести до суттєвих коливань у механічних, корозійних або електрохімічних властивостях матеріалу – таких як авіаційна й космічна техніка, енергетичне машинобудування, автомобілебудування та електроніка.

Таким чином, дослідження моделювання кристалізації бінарного сплаву має міждисциплінарний характер і поєднує фізику твердого тіла, теорію фазових переходів, термодинаміку розчинів, комп'ютерне моделювання та інженерію матеріалів. Це забезпечує комплексний підхід до вивчення процесів формування мікроструктури і створює підґрунтя для розробки нових високоміцних, легких та функціональних матеріалів з керованими властивостями.

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		14



## 1.2 Класичні методи числового моделювання: теплопровідність, дифузія та імітаційні моделі

У першу чергу, для опису кристалізації використовувалися моделі, що ґрунтувалися на класичних рівняннях теплопровідності (рівняння Фур'є) та дифузії, з врахуванням переходу рідина  $\rightarrow$  тверде, прихованої теплоти, граничних умов охолодження тощо. Ці моделі давали змогу приблизно оцінити швидкість затвердіння, кристалізацію при різних режимах охолодження, залежність затвердіння від геометрії зливка або кристала.

Так, у деяких ранніх роботах (наприклад, для сплавів на основі Al–Mg) застосовували імітаційні моделі (включно з клітинними автоматами) для передбачення зернової структури на стадії затвердіння. Наприклад, у роботах, присвячених сплавам Al–Si, при різних швидкостях охолодження змінювалася густина та розмір зерен, показуючи, що класичні дифузійно–теплові підходи дають загальне уявлення, але не враховують морфологію, мікросегрегацію, утворення дендритів тощо [1].

Такі підходи залишаються корисними для оцінки макроскопічного затвердіння, але мають суттєві обмеження – вони не можуть передбачити розподіл компонентів на мікрорівні, розвиток дендритної морфології, утворення евтектик, перитектик, мікросегрегацію, багатофазні структури.

## 1.3 Сучасні чисельні підходи до моделювання кристалізації

З розвитком обчислювальних потужностей і методів чисельного аналізу виникли нові підходи, які значно розширили можливості моделювання – зокрема, дозволили моделювати морфологію, фазові перетворення, дифузію, теплоперенос, а іноді й гідродинаміку. Серед них – метод фазового поля, клітинні автомати, гібридні моделі, багатомасштабні підходи. Нижче – огляд ключових напрямів.

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		16

### 1.3.1 Метод фазового поля (phase–field method)

Метод фазового поля сьогодні є одним із найпоширеніших та найефективніших для моделювання кристалізації сплавів. Сутність методу: вводиться «поле порядку» (phase–field variable), яке плавно змінюється між значеннями, що відповідають рідкій фазі та твердій. Таким чином, межа між фазами не відстежується явно, а формується як області плавним переходом – що значно спрощує чисельне моделювання при складній морфології. У поєднанні з рівняннями теплопровідності та дифузії (або переносу компонентів), метод дає змогу моделювати форму, швидкість росту, мікроструктуру, розподіл компонентів у твердій фазі [2].

Класична публікація, яка дала широкий імпульс цьому підходу – An Introduction to the Phase–Field Method: Simulation of Alloy Solidification (Boettinger, Warren, Beckermann, Karma, 2001) – у ній описані базові рівняння, підходи до об'єднання поля порядку, температурного і концентраційного полів, а також показано чисельні приклади дендритного, евтектичного, перитектичного росту [2].

З того часу метод успішно застосовувався до багатьох бінарних систем. Наприклад, у роботі Phase–Field Simulation for Non–isothermal Solidification of Al–Cu Binary Alloy було змодельовано затвердіння сплаву Al–4.5 %Cu з урахуванням теплових і концентраційних полів, змін температури, нелінійної дифузії компонентів, показавши утворення дендритів, відштовхування солюту від фронту кристалізації, накопичення солюту біля кореня дендрита тощо [3].

Інші приклади – моделювання затвердіння сплавів із Cu–W під дією високих температур (наприклад, після дугового нагару), де за допомогою фазового поля проаналізовано вплив переохолодження і анізотропії інтерфейсної енергії на форму дендритів, розгалуженість бокових гілок, утворення третинних гілок, що прямо впливає на щільність й властивості матеріалу [4].

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
						17
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		



### 1.3.2 Клітинні автомати та імітаційні моделі

Попри широке поширення фазового поля, залишаються актуальними менш «дорогі» за обчислювальними ресурсами методи – зокрема, клітинні автомати (КА). У цих моделях простір розбивається на «клітини», кожна клітина має простий алгоритм переходу (рідке → тверде або залишок рідини), ймовірності утворення зародків, врахування охолодження, дифузії, інколи – доповнення статистичними чи стохастичними законами. Такий підхід дозволяє моделювати великі об'єми з відносно невеликими витратами ресурсу, що зручно для інженерних застосувань, попереднього оцінювання структури, статистичних досліджень, аналізу глобального розподілу зерен.

Наприклад, у дослідженні Імітаційне моделювання гомогенної та гетерогенної кристалізації Al та сплаву Al–Si автором створено модель на основі ймовірнісного клітинного автомата, що дає змогу передбачати структуру затверділого металу при різних режимах охолодження, з урахуванням як гомогенного, так і гетерогенного утворення зародків [1].

Такі моделі корисні, коли потрібно швидко оцінити результуючу зернову структуру, вплив загальних параметрів охолодження, концентрації, геометрії деталі – з меншою деталізацією морфології (без тонкої дендритної структури), часто достатньо для практичних інженерних розрахунків. Водночас, КА-моделі мають обмеження: вони не дають достатньо точного опису межі фаз, не враховують дифузійну нестабільність, мікросегрегацію, утворення вторинних/третинних гілок дендритів, хвильових ефектів, вплив анізотропії інтерфейсної енергії та багато чого іншого.

### 1.3.3 Гібридні та багатомасштабні підходи – від дифузії до гідродинаміки

Сучасні дослідження часто виходять за межі суто дифузійно-теплових або фазопольових моделей і йдуть далі – включають конвекцію рідини,

					<i>КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		19







Як видно з таблиці, вибір методу залежить перш за все від цілі дослідження:

- якщо потрібна лише загальна оцінка часу кристалізації або температурних полів – підходять моделі теплопровідності/дифузії;
- якщо необхідна груба картина зернової структури при різних режимах охолодження – клітинні автомати;
- якщо важлива морфологія, мікроструктура, розподіл компонентів, дендритна форма – метод фазового поля;
- якщо потрібно змодельувати умови, близькі до реальних виробничих – гібридні або багатомасштабні моделі.

#### 1.6 Сучасні тенденції та перспективи розвитку моделювання

Аналіз останніх публікацій (2020–2025 рр.) показує такі тенденції:

1. Уніфікація методів – зростає кількість робіт, які прагнуть об'єднати фазове поле, дифузію, гідродинаміку, багатофазність, анізотропію, інтегрувати методи у єдині багатомасштабні моделі. Наприклад, моделі із врахуванням конвекції рідини та природної чи примусової циркуляції, з моделюванням росту дендритів у потоці [8].

2. Покращення чисельних алгоритмів та дискретизації – щоб уникнути артефактів, викликаних сітковою анізотропією, пропонуються нові схеми ізотропного скінченного різницьового апарату, або реалізації на скінченних елементах [6].

3. Реалізація для складних умов виробництва – моделювання швидкого охолодження, високого тиску, турбулентності, багатофазних систем, присутності газів і бульбашок [5, 7, 9].

4. Застосування до нових матеріалів та сплавів – старі дослідження переважно для Al-сплавів; сьогодні моделюють сплави з W, Cu, а також

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		23

багатокомпонентні системи, нано– та мікроструктури, матеріали з заданими властивостями [3, 4, 9].

5. Верифікація моделей з експериментальними даними – для підвищення довіри до моделювання все більше робіт порівнюють результати моделювання з реальними мікроструктурами, отриманими після лиття, HPDC, зварювання тощо. Наприклад, зміна інтерфейсних параметрів (товщина, енергія, мобільність) для відтворення реально спостережуваних морфологій у процесі HPDC [9].

У результаті, можна стверджувати – методи чисельного моделювання кристалізації знаходяться у фазі активного розвитку, причому з кожним роком зростає їх точність, гнучкість і здатність моделювати реальні технологічні умови.

#### Висновки до розділу

Проведений аналіз джерел дозволяє сформулювати такі узагальнення:

- класичні теоретичні підходи та моделі теплопровідності/дифузії дають загальне уявлення про процес кристалізації, проте не здатні відтворити детальну мікроструктуру, морфологію дендритів, мікросегрегацію;

- метод фазового поля є на сьогодні найбільш потужним інструментом для моделювання мікроструктурних процесів у бінарних (та багатокомпонентних) сплавах, особливо коли важлива морфологія, розподіл компонентів, форма кристалів;

- клітинні автомати – практичний компроміс для задач, де потрібна лише зернова структура чи попередня оцінка структури при різних параметрах охолодження без детального опису меж фаз;

- гібридні та багатомасштабні моделі – напрямок, що швидко розвивається, і є критично важливим для моделювання реальних технологічних процесів лиття, зварювання, адитивного виробництва, HPDC тощо.

										Арк.
										24
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата						

КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ

Сучасні дослідження демонструють успішну адаптацію методів до нових сплавів, складних багатофазних систем, умов з потоками рідини, газів, з високою швидкістю охолодження, а також розвиток чисельних методів для підвищення точності й стабільності.

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		25

## 2 ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ МОДЕЛЮВАННЯ ТВЕРДНЕННЯ БІНАРНОГО СПЛАВУ НА ОСНОВІ ЗАЛІЗА

### 2.1 Загальні принципи тверднення бінарних металевих сплавів

Тверднення металевих матеріалів є фундаментальним процесом матеріалознавства, який визначає мікроструктурні та, як результат, експлуатаційні властивості майбутнього виробу. Для бінарних сплавів на основі заліза (Fe–X), де другим компонентом може виступати Ni, C, Cr, Mn, Cu, Si, B та інші елементи, процеси кристалізації відбуваються у складному полі взаємодії термодинамічних, дифузійних та кінетичних чинників [11].

Тверднення металів і сплавів є процесом фазового перетворення рідкої фази в тверду, який відбувається під час охолодження нижче температури ліквідусу. Для бінарних систем, зокрема для сплавів на основі заліза, цей процес є більш складним, ніж у чистих металах, через вплив другого компонента на термодинаміку і кінетику фазових переходів.

Розрізняють два основні режими тверднення [12]:

1. Рівноважне тверднення характеризується нескінченно повільним переходом рідина → тверда фаза, що забезпечує повне вирівнювання концентрації у твердій фазі. Такий режим у реальних умовах практично недосяжний.

2. Нерівноважне тверднення є характерним для промислових процесів лиття. У цьому випадку відбувається дифузія у рідині та обмежена або відсутня дифузія у твердій фазі.

При нерівноважному твердненні концентрація легувального елемента змінюється за моделлю Шайля [11]:

$$C_L = C_0(1 - f_S)^{k_0 - 1}$$

									Арк.
									26
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата					

де  $C_0$  – початкова концентрація,  $C_L$  – концентрація у рідині,  $f_S$  - частка твердої фази,  $k_0$  – коефіцієнт розподілу.

У бінарних системах кристалізація визначається такими факторами:

- фазовими рівновагами, описаними станом діаграми Fe–X;
- дифузією другого компонента в рідкій і твердій фазах;
- перерозподілом домішок на межі твердо-рідкої фази;
- кінетикою росту кристалів та їх морфологією;
- термодинамічними драйверами переохолодження – термічним та

концентраційним.

Під час тверднення бінарних сплавів на основі заліза відбувається складна взаємодія між термодинамікою фазових рівноваг і кінетичними процесами, які визначають формування мікроструктури. У таких системах можуть утворюватися дендритні зерна, клітинні структури, евтектичні або перитектичні фази (наприклад, в системах Fe–C, Fe–Ni, Fe–Cr).

Загальна схема кінетики тверднення включає етапи [11]:

1. Зародження твердої фази – гомогенне або гетерогенне.
2. Первинний ріст кристалів – формування зерен, залежне від переохолодження.
3. Формування дендритів і гілок другого порядку.
4. Дифузійне вирівнювання складу у твердій фазі.
5. Закінчення тверднення та завершення формування мікроструктури.

Особливо важливою характеристикою є коефіцієнт розподілу елементів (partition coefficient)  $k_0$ , який визначає відношення концентрації легувального елемента в твердій і рідкій фазах під час рівноважного тверднення. Якщо  $k_0 < 1$ , елемент відштовхується від твердої фази та накопичується у залишковому розплаві, що призводить до утворення мікросегрегації [12].

Таким чином, структуроутворення у сплавах Fe–X залежить від складу, швидкості охолодження, термодинамічних властивостей системи та міжфазної кінетики.

									Арк.
									27
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата					

КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ



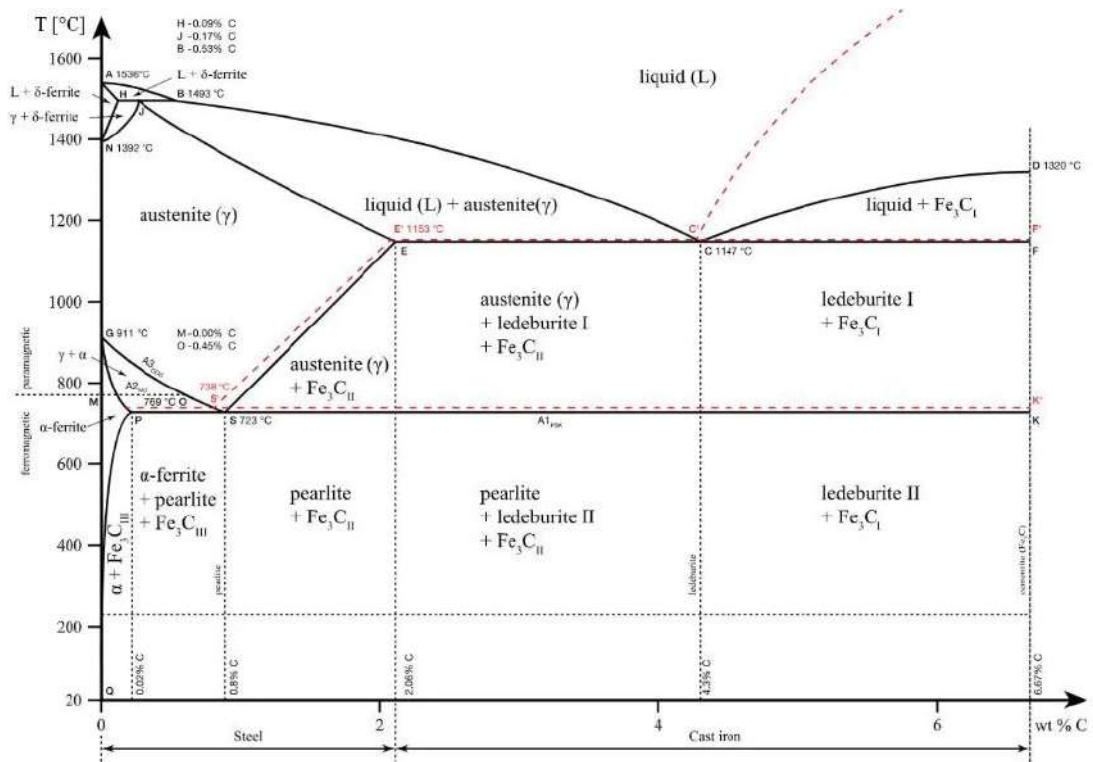


Рисунок 2.1 – Діаграма стану системи Fe–C [14]

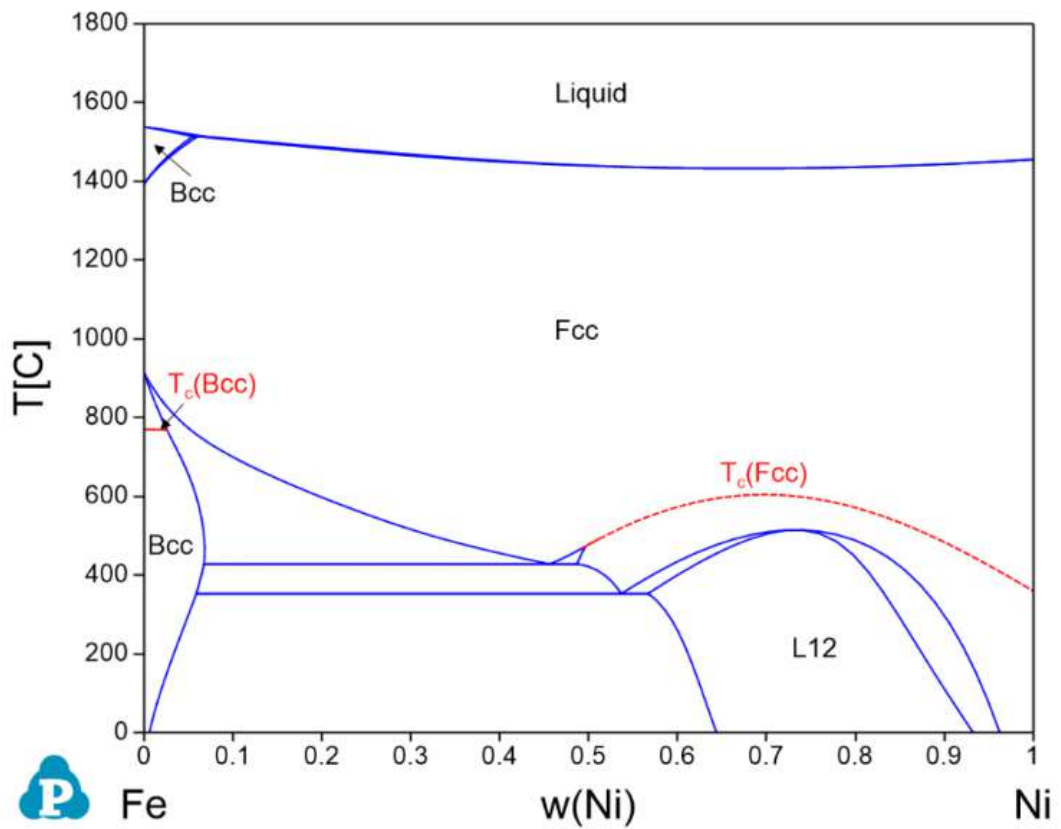


Рисунок 2.2 – Діаграма стану системи Fe–Ni [15]

Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата

КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ

Арк.

29

## Fe - Mn

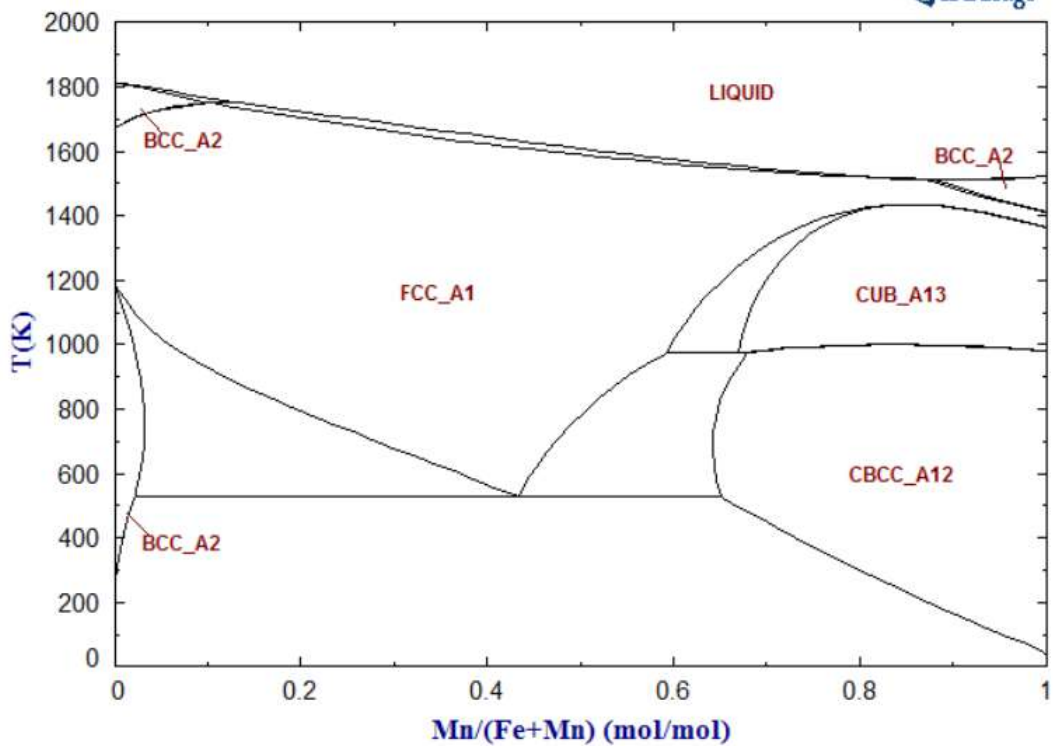


Рисунок 2.3 – Діаграма стану системи Fe–Mn [16]

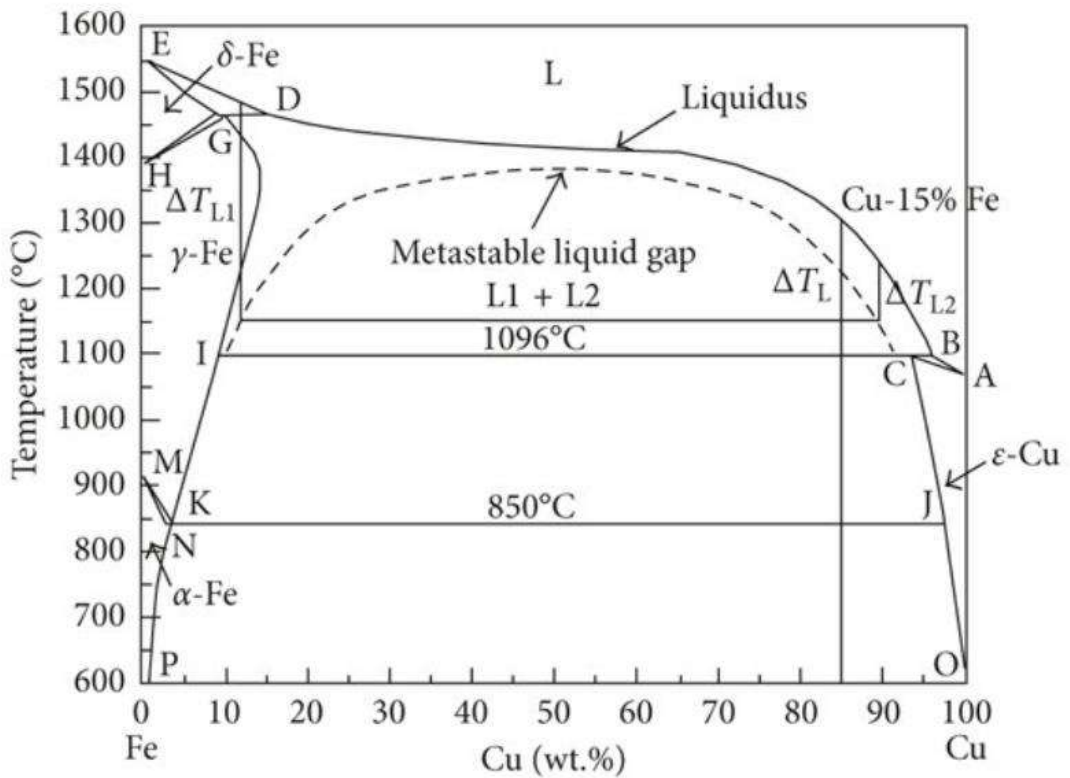


Рисунок 2.3 – Діаграма стану системи Fe–Cu [17]

Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата

КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ

Арк.

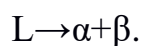
30

побудови моделей кристалізації та подальших перетворень. У бінарних системах тип фазових реакцій залежить від форми фазової діаграми, розчинності компонентів, наявності інтерметалічних сполук та кінетичних обмежень з боку дифузії й тепло переносу [13].

Нижче наведені основні типи фазових реакцій, характерні для бінарних систем Fe–X, з розширеними поясненнями, типовими прикладами та їхньою роллю у моделюванні тверднення [13].

1. Евтектична реакція ( $L \rightarrow \alpha + \beta$ ) [13].

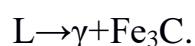
Сутність реакції: евтектична реакція характеризується одночасним та ізотермічним розпадом рідини на дві тверді фази з різною кристалічною структурою [13]:



Вона відбувається при евтектичній температурі  $T_E$  та евтектичному складі  $C_E$ , які є інваріантними точками.

Для систем Fe–X.

У системі Fe–C це реакція при 1147 °C [14]:



У системі Fe–Fe<sub>3</sub>P – фосфідна евтектика.

У Fe–Si утворюється евтектична суміш фериту та силіциду.

Мікроструктурні наслідки:

- формування ламельної або колонкової евтектики;
- висока дисперсність, яка визначає твердість і крихкість;
- сильна залежність морфології від швидкості охолодження (похилі пластинки, колонкові структури, глобулярна евтектика).

У моделюванні кристалізації використовуються рівняння Гуллівера–Шейля з корекцією на багатофазність.

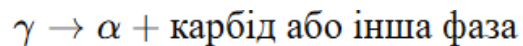
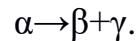
									Арк.
									31
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата					

КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ

Моделі фазового поля дозволяють відтворити просторову морфологію евтектики.

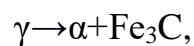
2. Евтектоїдна реакція ( $\alpha \rightarrow \beta + \gamma$ ) [13].

Сутність реакції: реакція відбувається у твердій фазі за інваріантних умов:



У системах Fe–X.

Найвідоміша реакція – евтектоїдне перетворення у вуглецевих сталях при 727 °C [14]:



що призводить до утворення перліту.

Мікроструктурні наслідки [13]:

- формування перліту, бейніту, або навіть мартенситу при високій швидкості охолодження;

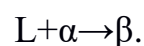
- важливе для прогнозування механічних властивостей після кристалізації.

У моделюванні потребує включення дифузійних процесів у твердому стані.

Моделі діаграм ТТТ і ССТ розширюють прогноз післятвердних перетворень.

3. Перитектична реакція ( $L + \alpha \rightarrow \beta$ ) [13].

Сутність реакції: перитектична реакція також є інваріантною [13]:



Значення у системах Fe–X:

									Арк.
									32
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата					

- у системі Fe–C при 1493 °C рідка фаза і δ-ферит утворюють аустеніт [14];

- у системах Fe–Ni, Fe–Mn також зустрічаються перитектичні реакції.

Мікроструктурні наслідки [15]:

-формується шарувата структура β-фази, що росте по поверхні α-фази;

- часто призводить до перитектичної сегрегації, тобто хімічної неоднорідності;

- нестабільність фронту тверднення через двофазну взаємодію L–α.

У моделюванні вимагає врахування:

- подвійного фронту тверднення,

- руху меж фаз α–β,

- перитектичної рекристалізації.

Для цього застосовують:

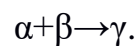
- моделі клітинних автоматів,

- гібридні CALPHAD + CFD,

- моделі фронту Стефана з подвійною межею.

4. Перитектоїдна реакція ( $\alpha + \beta \rightarrow \gamma$ ) [13].

Реакція у твердій фазі [13]:



Значення [13]:

- менш поширена у системах на основі Fe;

- характерна для деяких Fe–X систем із формуванням інтерметалічних фаз (наприклад, Fe–Al).

Мікроструктурні наслідки [13]:

- виникає заміна двох фаз новою при дифузійно керованому механізмі;

- може проводити до тонкої ламельної структури.

5. Моноїдальна реакція (спінодальний розпад) [18].

										Арк.
										33
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата						

Сутність: спінодальний розпад не належить до інваріантних реакцій, але є фундаментальним для багатьох систем Fe–X.

Він відбувається тоді, коли сплав потрапляє у область негативної кривизни вільної енергії [13]:

$$\frac{\partial^2 G}{\partial C^2} < 0$$

Значення у системах Fe–Cr, Fe–Mo, Fe–W. Ці системи схильні до утворення [13]:

- $\alpha$ - $\alpha'$  домішкових структур (нитчастих або колонкоподібних),
- розпадних твердих розчинів.

Мікроструктурні наслідки [13]:

- утворення хвилеподібних модульованих структур;
- початкова неоднорідність, що впливає на корозійну стійкість;

У моделюванні застосовують [18]:

- Cahn–Hilliard рівняння,
- моделі фазового поля.

6. Реакція утворення інтерметалічних фаз.

У багатьох системах Fe–X (Fe–Ti, Fe–Al, Fe–B) можливе формування [13]:

- $\sigma$ -фази,
- $\chi$ -фази,
- Laves-фаз,
- карбідів (M<sub>23</sub>C<sub>6</sub>, M<sub>6</sub>C).

Роль у матеріалознавстві: визначає жаростійкість, твердість і крихкість.

Вимагає моделювання з урахуванням термодинаміки CALPHAD та кінетики дифузії [8].

7. Рівноважні та нерівноважні реакції.

Залежно від швидкості охолодження реакції можуть відбуватися [13]:

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
						34
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		

1. Рівноважні реакції, які:

- забезпечують дифузійний розподіл компонентів,
- відповідають класичним точкам діаграми стану.

2. Нерівноважні реакції:

- дендритна сегрегація,
- метастабільні фази,
- мартенситне перетворення.

Моделювання таких процесів вимагає [13]:

- кінетичних коефіцієнтів,
- моделей «замороженої» дифузії.

Отже, тип реакції визначає морфологію структури та особливості моделювання.

### 2.2.3 Залежність мікроструктури від хімічного складу

Наявність легувальних елементів X у системі Fe–X впливає на [13]:

- температуру кристалізації;
- швидкість росту дендритів;
- кут стабільності фронту;
- величину мікросегрегації;
- розмір зерен.

Наприклад:

- у системі Fe–Ni збільшується розчинність і формується дрібніша дендритна структура [15];

- у системі Fe–C формується перитектична структура ( $\delta \rightarrow \gamma$ ), що впливає на кристалічний морфо тип [14];

- у системі Fe–Cu міцні сегрегаційні ефекти сприяють утворенню двошарової структури через низьку розчинність Cu в Fe [17].

										Арк.
										35
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата						

## 2.3 Термодинамічні основи тверднення бінарних сплавів

### 2.3.1 Вільна енергія та хімічний потенціал

Тверднення відбувається внаслідок зменшення вільної енергії Гіббса [19]:

$$\Delta G = G_{\text{solid}} - G_{\text{liquid}} < 0$$

Різниця у вільній енергії залежить від [19]:

- температури,
- складу,
- активності компонентів,
- наявних фаз.

Хімічний потенціал визначає напрям дифузії й перерозподіл елементів у розплаві та твердій фазі.

Термодинамічні критерії утворення зародків.

Утворення зародків твердої фази описується рівнянням зміни вільної енергії [19]:

$$\Delta G = -\frac{4}{3}\pi r^3 \Delta g_v + 4\pi r^2 \gamma$$

Критичний радіус [19]:

$$r^* = \frac{2\gamma}{\Delta g_v}$$

де  $\gamma$  – міжфазна енергія,  $\Delta g_v$  – енергія фазового переходу.

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		36



$$T = T_m - \frac{\Gamma}{R},$$

де  $\Gamma$  – коефіцієнт Гіббса–Томсона,  $R$  – радіус кривизни.

Це приводить до нестійкостей фронту та формування дендритної структури.

За теорією Маллінса–Секерки плоский фронт стає нестійким при [21]:

$$\frac{\partial V}{\partial T} < 0.$$

що веде до дендритного росту.

#### 2.4.2 Морфологія росту кристалів

Клітинний ріст відбувається при слабкому переохолодженні [22]:

- низькі градієнти концентрації,
- без вторинних гілок.

Дендритний ріст є основним механізмом тверднення залізних сплавів.

Етапи [22]:

1. Нестійкість плоского фронту.
2. Формування первинного дендрита.
3. Виникнення вторинних гілок.
4. Розвиток третинних дендритів.
5. Заповнення проміжків залишковим розплавом.

Ключові параметри дендритів:

- міждендритна відстань,
- швидкість росту,

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		38

- температура фронту,
- концентраційний градієнт.

Формування дендритів включає:

- первинні стовбури,
- вторинні гілки,
- третинні розгалуження.

Міждендритна відстань [21]:

$$\lambda_2 = a \left( \frac{k}{GV} \right)^b,$$

де  $G$  – температурний градієнт,  $V$  – швидкість фронту.

## 2.5 Моделі тверднення бінарних сплавів

1. Рівняння дифузії компонентів. Дифузійні процеси в рідкій та твердій фазі описуються [23]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \nabla^2 C$$

де  $D$  – коефіцієнт дифузії (який значно більший у рідині).

2. Модель Шайля [23].

$$C_S = k_0 C_L$$

$$C_L = C_0 (1 - f_S)^{k_0 - 1}$$

3. Модель Броуді–Флемінга. Враховує часткову дифузію у твердій фазі [23].

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		39

4. Модель Курца–Фішера. Використовується для дендритного росту [23]. Використовують критерій Маллінса–Секерки для аналізу нестабільності [24].

## 2.6 Моделювання методом фазового поля

Основи методу [23].

Метод фазового поля описує фазовий перехід за допомогою параметра порядку  $\phi \in [0, 1]$ :

- $\phi=0$  – рідина,
- $\phi=1$  – тверда фаза.

Еволюція параметра описується рівнянням [23]:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = - \frac{\delta F}{\delta \phi},$$
$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M_\phi \left( \nabla^2 \phi - \frac{\partial f}{\partial \phi} \right)$$

де  $F$  – функціонал вільної енергії [23]:

$$F = \int \left( f(\phi, C, T) + \frac{\epsilon^2}{2} |\nabla \phi|^2 \right) dV,$$

Анізотропія поверхневої енергії впливає на орієнтацію дендритів [23]:

$$\gamma(\theta) = \gamma_0 [1 + \epsilon_a \cos(m\theta)].$$

Переваги методу [23]:

- не потребує явного відстеження твердо-рідкої межі;
- забезпечує правильну дендритну морфологію;

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		40

- підтримує мультифізичні процеси: тепло, дифузія, багатофазність.

Моделі для залізних сплавів мають особливості:

- анізотропія міжфазної енергії;
- перитектичні реакції для Fe–C;
- високі градієнти дифузії у Fe–Ni.

## 2.7 Моделювання тверднення методом клітинних автоматів

Принципи [23]:

- простір розбивається на клітини;
- кожна клітина має стан:
  - рідка,
  - тверда,
  - частково тверда.

Правила переходів базуються на:

- локальному переохолодженні,
- сусідніх клітинах,
- кривизні фронту.

Переваги такого підходу:

- висока швидкість обчислень;
- простота реалізації;
- добрий масштаб при моделюванні зернової структури.

Недоліки підходу:

- важко відтворити дрібну морфологію дендритів;
- залежність від роздільності сітки.

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		41

## 2.8 Комбіновані моделі тверднення Fe–X

Моделювання тверднення бінарних сплавів на основі заліза потребує одночасного урахування теплопереносу, дифузії компонентів, зміни фазового стану, морфології мікроструктури та кінетики формування первинних і вторинних фаз. Класичні моделі — ізольовано теплові, дифузійні або мікроструктурні — зазвичай не здатні описати реальний складний характер кристалізації Fe–X систем. Тому сучасні підходи концентруються на комбінуванні різних фізичних моделей, що дозволяє одночасно врахувати декілька взаємопов'язаних процесів [24].

Комбіновані моделі є особливо важливими для сплавів Fe–C, Fe–Cr, Fe–Ni, Fe–Mn, Fe–Si, де тверднення має багатостадійний, багатофазний та сильно метастабільний характер.

Нижче подано опис трьох ключових груп комбінованих моделей.

1. Термодинамічно–кінетичні моделі (CALPHAD + дифузійні рівняння) [23].

У таких моделях термодинаміка визначає рівноважні властивості системи (фази, їхній склад, температури ліквідус/солідус), тоді як дифузія визначає реальний перехід від рідини до твердих фаз у залежності від швидкості охолодження.

Базові рівняння:

Рівняння теплопровідності з латентною теплою [23]:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(k \nabla T) + L \frac{\partial f_s}{\partial t} .$$

Кінетика фазового переходу [23]:

									Арк.
									42
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата					





У Fe–Cr формування  $\sigma$ -фази залежить від макросегрегації при охолодженні.

У Fe–Mn гравітаційна сегрегація суттєво деформує профіль складу.

3. Моделі мікроструктурного розвитку (Phase-field + CALPHAD + CFD).

Це – найскладніший, але найточніший тип комбінованих моделей.

Phase-field дає можливість описати [24]:

- дендритний ріст,
- морфологію фронту тверднення,
- мультифазні реакції,
- евтектику, перитектику, спінодальний розпад.

Базова система рівнянь PF.

Класичні рівняння Аллена–Кана і Кана–Гілліарда [24]:

1) Рівняння для порядкового параметра (фазового поля) [24]:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M \frac{\delta F}{\delta \phi}$$

2) Рівняння для концентраційного поля [24]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \left( D \nabla \frac{\delta F}{\delta C} \right),$$

де  $F$  – функціонал вільної енергії, що визначається CALPHAD.

Можливості комбінованої PF–CFD–CALPHAD моделі:

- відтворення перитектичної реакції ( $L+\delta \rightarrow \gamma$ ), характерної для Fe–C;
- формування евтектичної структури;
- дендрити  $\gamma$ -фази у Fe–Ni при плавному охолодженні;
- розрахунок мікросегрегації Cr у сталях Fe–Cr;

									Арк.
									45
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата	КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ				

- імітація зародження  $\sigma$ -фази у напрямленому твердненні.

Переваги [24]:

- максимально точне відтворення морфології;
- автоматичне формування мультифазних структур;
- прогноз дефектів: пори, сегрегація, карбіди, евтектики.

Гібридні моделі тверднення (Scheil + PF + CFD + CALPHAD).

Застосовуються тоді, коли:

- CFD потрібне на макрорівні (розподіл температури та швидкості),
- PF – на мікрорівні (дендрити і фази),
- CALPHAD – для фазових рівноваг,
- Scheil – для швидких оцінок під час швидкого охолодження.

Є два типи гібридизації [24]:

1. Послідовна [24]:

CFD → температурні поля → PF → морфологія → термодинамічна оцінка.

2. Паралельна (сильно зв'язана) [24]:

Кожен час-крок містить одразу:

- оновлення температури (CFD),
- дифузії (CA/PF),
- фазового складу (CALPHAD),
- концентраційних полів.

Такий підхід застосовують у сучасних пакетах [24]:

- ProCAST,
- Micress,
- OpenFOAM-Crystal,
- OpenPhase.

Роль комбінованих моделей у системах Fe–X.

Fe–C: перитектичні реакції, дендритний ріст  $\gamma$ -фази, евтектика, перліт/бейніт – потребують PF+CALPHAD.

Fe–Cr: спінодальний розпад  $\alpha$ -фази → PF+Cahn–Hilliard.

									Арк.
									46
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата					

КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ

$\sigma$ -фаза  $\rightarrow$  CALPHAD+дифузійні моделі.

Fe–Ni: сильно стабілізований аустеніт  $\rightarrow$  CA+CALPHAD.

Fe–Si: повільні дифузійні процеси  $\rightarrow$  CFD+теплоперенос.

Fe–Mn / Fe–Al / Fe–B:

- інтерметалічні фази  $\rightarrow$  CALPHAD;

- ламельна евтектика  $\rightarrow$  PF;

- перитектичні реакції  $\rightarrow$  PF+CFD.

Комбіновані моделі дозволяють [24]:

- об'єднати термодинаміку, теплоперенос, дифузію та морфологічні зміни,

- точніше передбачати структуру, макро- й мікросегрегацію,

- моделювати реальні промислові умови (лиття, адитивні технології),

- прогнозувати дефекти тверднення (усадка, дендритна сегрегація, карбіди,  $\sigma$ -фаза).

Для систем Fe–X вони є критично необхідними, оскільки враховують складні фазові реакції, мультифазність, перитектику, евтектику, інтерметалічні фази й різнорівневу кінетику.

## 2.9 Особливості моделювання тверднення бінарних залізних сплавів

Моделювання системи Fe–C. Ключові особливості [13, 19, 23]:

- перитектична реакція,

- дендритний ріст  $\delta$ -фериту,

- подальша трансформація у  $\gamma$ -фазу.

Моделювання системи Fe–Ni. Система ізоморфна, тому:

- рівноважний розподіл елементів простіший,

- сегрегація слабша,

- дендритні структури тонші.

Моделювання системи Fe–Cu. Низька розчинність Cu  $\rightarrow$  сильна макросегрегація. Потрібна CFD-модель потоків конвекції.

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
						47
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		

## Висновки до розділу

На основі викладеного можна сформулювати ключові закономірності тверднення залізних сплавів:

- морфологія визначається переохолодженням;
- вторинний компонент визначає сегрегацію;
- твердо-рідка межа є динамічною і нестійкою;
- термодинаміка системи задає фазові реакції;
- найточнішими моделями є фазові поля та їх гібриди.

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		48

## 3 МЕТОДИКА МОДЕЛЮВАННЯ ТВЕРДНЕННЯ БІНАРНОГО СПЛАВУ НА ОСНОВІ ЗАЛІЗА

### 3.1 Загальна структура методики та логіка проведення дослідження

Методика моделювання тверднення бінарного залізного сплаву базується на використанні фундаментальних положень термодинаміки, кінетики фазових переходів і чисельних методів розв'язання диференціальних рівнянь. Основна мета методичного підходу – отримання достовірного опису процесів теплоперенесення, дифузії легуючого елемента, формування мікроструктури та еволюції фаз у процесі кристалізації [25].

Узагальнена схема моделювання наведена на рис. 3.1.

#### 1. Задача та вхідні дані:

- визначення хімічного складу сплаву ( $Fe + X$ );
- визначення початкових умов: початкова температура, початковий розплав, граничні умови охолодження;

- збір термофізичних даних: теплоємність, теплопровідність, густина, латентна теплота, коефіцієнти дифузії, коефіцієнт розподілу компонентів, фазові діаграми;

#### 2. Термодинамічне моделювання / CALPHAD (за опціями):

- обчислення фазових рівноваг, стабільних фаз, температур ліквідусу і солідусу, коефіцієнтів розподілу, фазових діаграм;

- визначення, які фази можливі, їхнього складу та умов переходів;

#### 3. Моделювання теплопереносу + латентної теплоти:

- формулювання і розв'язання рівняння теплопровідності з урахуванням латентної теплоти тверднення;

- врахування початкових і граничних умов (контакти з формою, охолодження, конвекція, зовнішні впливи);

										Арк.
										49
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата						

КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ





- рекомендації з технології (режим охолодження, склад, обробка), на основі моделювання.

Такий підхід відповідає сучасним практикам промислового комп'ютерного моделювання (Thermo-Calc, DICTRA, MICRESS, ProCAST, ANSYS Additive Suite) [24–26].

### 3.2 Вибір математичного підходу

Для опису тверднення бінарного залізного сплаву існує кілька класів моделей [23, 24]:

1. Термодинамічні рівноважні моделі.
2. Макроскопічні моделі теплоперенесення.
3. Моделі мікросегрегації (Scheil–Gulliver, Brody–Flemings).
4. Фазово-польові моделі (Phase Field Method).
5. Комбіновані термокінетичні моделі (CALPHAD + PDE).

У виконаному дослідженні використовується інтегрований підхід [23, 24]:

- CALPHAD для визначення фазових рівноваг і хімічних потенціалів; рівняння теплопровідності з латентною теплотою для теплової задачі;
- імовірнісна модель кристалізації бінарного сплаву при розливанні сталі.

Це забезпечує високий рівень відповідності сучасним науковим підходам [23, 24].

### 3.3 Постановка задачі теплоперенесення

Основою моделювання є рівняння нестационарної теплопровідності [11]:

$$\rho(T, c) c_p(T, c) \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda(T, c) \nabla T) + Q_L \frac{\partial f_s}{\partial t},$$

									Арк.
									52
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата					



$R$  – характерний радіус дендрита.

Результатом є графік зміни концентрації в рідині та твердій фазах.

Фазово-польова модель росту дендритів.

Фазово-польові рівняння використовують два порядкових параметри:

-  $\phi$  – фазове поле (0 – рідина, 1 – тверде);

-  $c$  – концентрація компоненту.

Рівняння Аллена – Кана (еволюція фази) [27]:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M_{\phi} \frac{\delta F}{\delta \phi},$$

де  $F$  – повна вільна енергія.

Рівняння Кана – Гілларда для концентрації:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot \left( M_c \nabla \frac{\delta F}{\delta c} \right).$$

Функціонал вільної енергії [27]:

$$F = \int \left( f(\phi, c) + \frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla \phi|^2 \right) dV.$$

Анізотропія енергії поверхні та формування дендритів.

Анізотропія вводиться як [27]:

$$\varepsilon(\theta) = \varepsilon_0 (1 + \delta \cos(4\theta)).$$

Це дає формування дендритних відростків під кутом  $90^\circ$ , що характерно для феритних структур.

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		54

### 3.4 Чисельні методи розв'язання

#### 1. Просторова дискретизація.

Використовується метод скінченних різниць або метод скінченних елементів [28].

Сітка [28]:

- крок  $\Delta x = 0.5 - 2 \text{ }\mu\text{m}$ ;
- часова дискретизація  $\Delta t = 10^{-6} - 10^{-4} \text{ s}$ .

#### 2. Методи інтегрування.

Для термічної задачі [29]:

- неявна схема Кранка–Ніколсон;
- лінеаризація методом Ньютона.

Для фазового поля [29]:

- схема Адверта;
- інтегрування за методом розділених операторів.

### 3.5 Розрахункова схема і алгоритм моделювання

Алгоритм подано в описовій формі (рис. 3.2):

1. Зчитування термодинамічних даних: використовуються Thermo-Calc бази даних (TCFe, TCFe8, тощо) [30].

Мета: отримати фазові обмеження, рівноважні концентрації, Gibbs енергії фаз.

Інструменти: Thermo-Calc API, TQ (Thermo-Calc Query), Python-інтерфейс TC-Python.

#### 2. Побудова фазової діаграми.

Для заданого складу сплаву визначаються [31]:

- температура ліквідуса  $T_L$  – початок плавлення (всі тверді фази розплавляються);

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
						55
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		

- температура солідуса  $T_S$  – кінець плавлення (залишається лише тверда фаза).

- можна будувати  $T$ -composition діаграми для Fe-base систем.

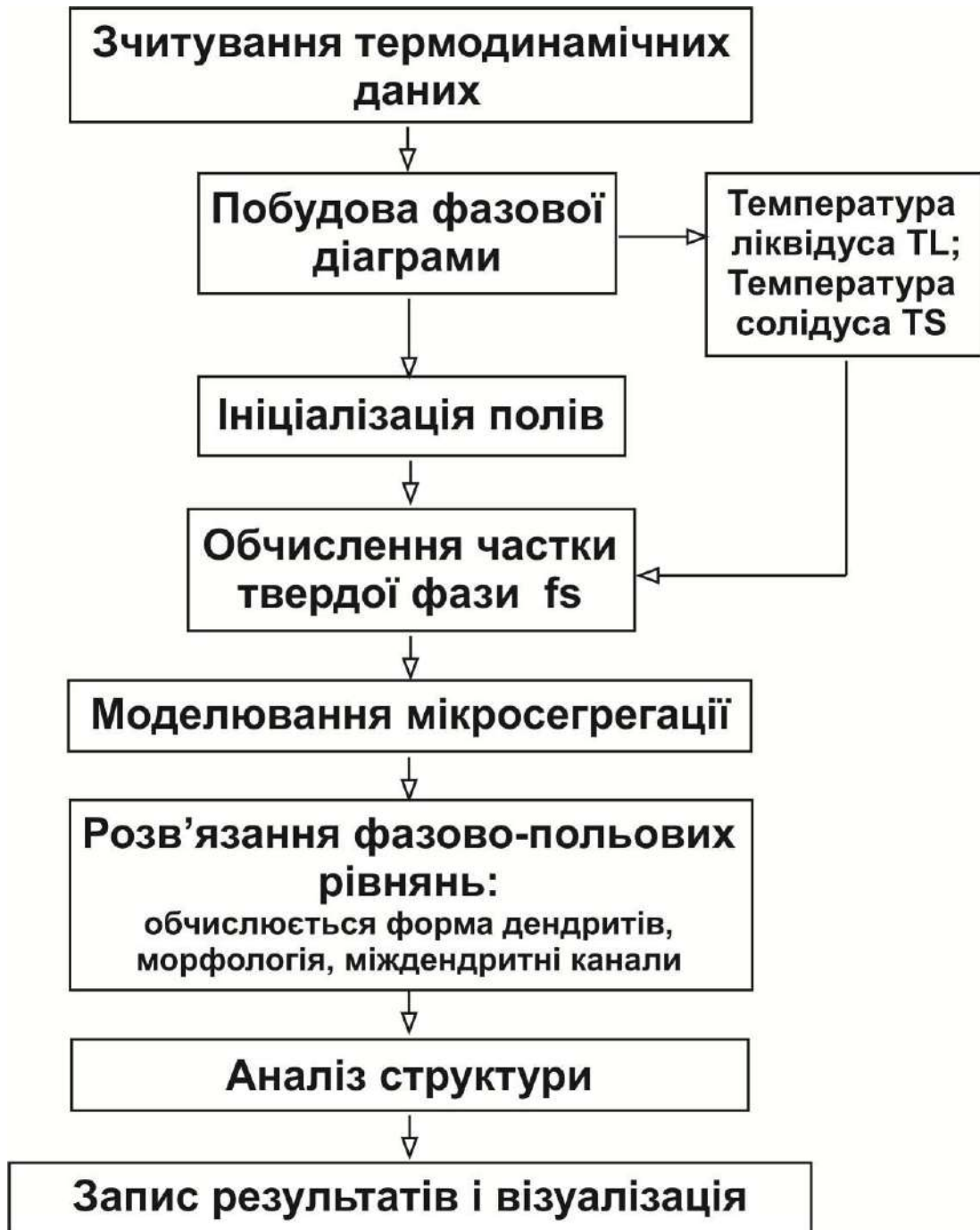


Рисунок 3.2 – Алгоритм моделювання

### 3. Ініціалізація полів.

- температурне поле  $T(x,y,z)$ : початковий розподіл температури в зоні кристалізації;

- концентраційне поле  $c(x,y,z)$ : початкові концентрації легуючих елементів;

- для фазового-польового моделювання: початковий фазовий параметр  $f$  (0 – рідина, 1 – тверда фаза).

### 4. Розв'язання теплової задачі.

Виконується оновлення температурного поля через теплопровідність і латентну теплоту [30]:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) + L \frac{\partial f_s}{\partial t},$$

де  $f_s$  – частка твердої фази.

### 5. Обчислення частки твердої фази $f_s$ [31]:

- з термодинамічних даних або за моделлю Scheil / lever rule [31]:

$$f_s = \frac{c_0 - c_L}{c_S - c_L};$$

- відповідає локальній швидкості переходу рідина → тверда фаза.

### 6. Моделювання мікросегрегації.

Оновлюються концентрації в рідкій фазі  $c_L$  і твердій фазі  $c_S$ : [31]

$$c_L = c_0 \frac{1 - f_s}{1 - k f_s}, \quad c_S = k c_L,$$

										Арк.
										57
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата						

де  $k$  – коефіцієнт розподілу.

7. Розв'язання фазово-польових рівнянь.

- оновлення рівняння для фазового поля  $\phi$  [30]:

$$\tau \frac{\partial \phi}{\partial t} = W^2 \nabla^2 \phi - \frac{\partial F(\phi, T, c)}{\partial \phi};$$

- обчислюється форма дендритів, морфологія, міждендритні канали.

8. Аналіз структури.

Визначають:

- дендритний крок  $\lambda$  (міжцентрова відстань між дендритами);

- відносна швидкість росту [31]:

$$V = \frac{dx}{dt}.$$

- морфологія: плавність, бічні гілки, колонки.

9. Запис результатів і візуалізація.

Вивід:

- 2D/3D карти концентрацій і фаз;

- профілі  $T(x)$ ,  $f_s(x)$ ,  $c_L(x)$ ,  $c_S(x)$ ;

- анімації росту дендритів.

### 3.6 Верифікація та валідація моделі

Використовуються три рівні перевірки [32, 33]:

1. Порівняння з експериментальними даними:

- дендритний крок;

- сегрегація Mn, C на межах дендритів;

- швидкість фронту тверднення;

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		58

2. Порівняння з відкритими моделями (MICRESS, DICTRA) [32, 33].
3. Перевірка на класичних випадках (евтектичне тверднення, чисте Fe).

### 3.7 Особливості реалізації моделі для сплавів на основі заліза

Методика враховує [34, 35]:

- феромагнітний внесок у теплоємність Fe;
- нелінійність коефіцієнта розподілу  $k(T)$ ;
- перетворення  $\delta$ -фериту  $\rightarrow$   $\gamma$ -аустеніту;
- дифузію в аустеніті, яка на порядок швидша, ніж у фериті;
- можливість карбідоутворення.

У моделі це реалізовано через [35]:

- температурнозалежні властивості;
- польову змінну фазового складу, що дозволяє контролювати перетворення  $\gamma \leftrightarrow \delta$ .

### Висновки до розділу

У цьому розділі було детально обґрунтовано та розроблено комплексну методику моделювання процесів тверднення бінарного сплаву системи Fe–X, яка забезпечує узгоджене відтворення термодинамічних, кінетичних та структурно-фазових перетворень, що визначають кінцеві властивості матеріалу. Проведений аналіз методів та вибір моделей дозволили сформувати універсальний підхід, придатний як для фундаментальних досліджень, так і для інженерних застосувань, пов'язаних із прогнозуванням мікроструктури, морфології фаз та сегрегаційних процесів при кристалізації.

У межах методики уточнено ключові припущення та математичні залежності, що описують теплообмін, дифузію легувального елемента, зародження та ріст твердих фаз. Зокрема, застосовано комбінований опис

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
						59
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		

теплових процесів на основі одномірного рівняння теплопровідності в поєднанні з концентраційною залежністю фізичних властивостей матеріалу. Для моделювання масопереносу використано рівняння Фіка другого порядку з урахуванням концентраційної залежності коефіцієнтів дифузії, що є характерною для систем Fe–X.

Значну увагу приділено формалізації кінетики фазових перетворень. В методиці послідовно інтегровано підхід Дендритної моделі (Cellular/Dendritic Growth Model), модель локальної рівноваги на фронті тверднення, а також модифіковані елементи фазово-польового методу (Phase-Field Method), що дозволяє враховувати морфологічні особливості росту кристалів, утворення сегрегацій та нестабільностей фронту. Для умов швидкого та проміжного охолодження введено критерій Бразерса–Сарратта щодо оцінки стабільності фронту тверднення та схему переходу від планарного росту до клітинного й дендритного режимів.

Узагальнено підхід до визначення термодинамічних характеристик системи на основі даних CALPHAD, що дає змогу одержувати таблиці рівноважних параметрів (ліквідус, солідус, похідні потенціалів, активності компонентів). Ці дані інтегруються у модель через апроксимовані аналітичні залежності або інтерполяційні сітки. Такий підхід забезпечує відповідність моделювання реальним діаграмам стану систем Fe–X.

Запропонована методика включає повний алгоритм моделювання тверднення:

- попередня термодинамічна оцінка;
- ініціалізація теплових та концентраційних полів;
- вибір граничних умов;
- обчислення теплопереносу;
- розрахунок дифузійного масопереносу з урахуванням фазової межі;
- моделювання морфології кристалів;
- отримання мікроструктурних параметрів;

										Арк.
										60
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата						

КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ

- виведення інтегральних характеристик (частка фаз, розмір дендритних осередків, профілі сегрегацій).

Сформований алгоритм дозволяє отримувати тривимірні та двовимірні карти розподілу концентрації, температури, фазових часток, а також оцінювати вплив швидкості охолодження, термодинамічних параметрів та концентрації елемента X на кінцеву структуру сплаву. Наявність модульної структури моделі дає можливість адаптувати її для різних систем Fe–C, Fe–Si, Fe–Cr, Fe–Ni та інших бінарних та псевдобінарних систем.

Таким чином, запропонована методика є комплексним і науково обґрунтованим підходом до моделювання процесів тверднення залізовмісних сплавів, який синтезує сучасні теоретичні та числові методи. Вона забезпечує:

- достовірне відтворення структурно-фазових перетворень;
- можливість прогнозування мікроструктури;
- адаптивність до широкого спектра хімічних складів і теплових умов;
- основу для реалізації програмного коду та подальших інженерних оптимізацій.

Отримані результати та розроблені підходи формують методологічну базу для проведення чисельних експериментів у наступних розділах роботи та створюють умови для інтерпретації мікроструктурних особливостей, що виникають у процесі тверднення бінарних сплавів на основі заліза.

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		61

## 4 СТОХАСТИЧНА МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ КРИСТАЛІЗАЦІЇ БІНАРНОГО СПЛАВУ

При створенні та вдосконаленні технологічних режимів безперервного розливання сталі, що базуються на математичному моделюванні температурного поля заготовки, що твердне, одним з основних показників є швидкість охолодження, для визначення якої необхідно забезпечити досить точне розв'язання задачі теплопровідності для заготовки в цілому. За останні чотири десятиліття інтенсивне застосування обчислювальної техніки для моделювання твердіння злитків сприяло формуванню різноманітних математичних підходів до опису кристалізаційних процесів у бінарних сплавах. При цьому найбільшого поширення набула так звана квазірівноважна модель кристалізації бінарного сплаву, яка реалізується в декількох різних модифікаціях.

У цій роботі виконано критичний аналіз кількох модифікацій квазірівноважної моделі, що набули поширення в обчислювальній практиці при розрахунках затвердіння злитків, а також запропоновано стохастичну модель кристалізації бінарного сплаву при розливанні сталі.

### 4.1 Двофазна зона і темп кристалізації розплаву

У переважній більшості практичних завдань кристалізація сталевого зливка відбувається за наявності двофазної зони, утвореної переплетенням дендритних гілок та залишкового рідкого сплаву. При цьому теплота агрегатного перетворення виділяється не у чіткої межі розділу фаз (як прийнято в ідеалізованій, класичній задачі Стефана [13]), а в просторі, заповненому двофазною зоною.

Теоретичний опис цього ефекту здійснюється шляхом введення рівняння нестационарної теплопровідності джерела теплоти, потужність якого прямо

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		62

пропорційна інтенсивності процесу кристалізації, тобто швидкості виділення твердої фази в межах двофазної зони [13]:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\lambda \text{grad} T) + \rho L \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (4.1)$$

де  $\psi$  – відносна частка твердої фази, тобто відношення:

$$\psi = \frac{V_s}{V_s + V_L},$$

$V_s$  – об'єм твердої фази,  $V_L$  – об'єм рідкої фази у двофазній системі тверднучого сплаву,  $\rho$ ,  $c_p$ ,  $\lambda$  – коефіцієнти масової щільності, питомої теплоємності, теплопровідності;  $L$  – питома теплота (ентальпія) агрегатного перетворення тверднучого сплаву;  $T$  – локальна температура сплаву, К;  $t$  – час.

Використаємо підстановку:

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

і запишемо рівняння (1) у вигляді:

$$\rho c_{\phi}(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\lambda \text{grad} T), \quad (4.2)$$

де використовується вираз ефективної питомої теплоємності сплаву:

$$c_{ef} = \begin{cases} c_L, & T > T_L, \\ c_S - L \frac{d\psi}{dt}, & T_S \leq T \leq T_L, \\ c_S, & T < T_S, \end{cases} \quad (4.3)$$

Тут  $T_S$  і  $T_L$  – межі інтервалу кристалізації бінарного сплаву. Вираз  $I = -\frac{d\psi}{dt}$  називають темпом кристалізації металу. Окремі модифікації математичних моделей процесу кристалізації бінарного сплаву різняться методом вираження величини  $I$  – темпу кристалізації залежно від температури та фізичних властивостей металу.

#### 4.2 Квазірівноважна модель

У тому випадку, якщо лінії солідуса і ліквідуса на рівноважній діаграмі стану сплаву, що вивчається, можна виразити аналітичними функціями  $\Gamma_1(T)$  і  $\Gamma_2(T)$ , вдається виразити темп кристалізації з використанням відомого правила важеля за формулою [36, 37]:

$$-\frac{d\psi}{dT} = \{-C_0[\Gamma_2'(T) - \Gamma_1'(T) + \Gamma_2(T)\Gamma_1' - \Gamma_1(T)\Gamma_2'(T)]\} / [\Gamma_2(T) - \Gamma_1(T)]^2, \quad (4.4)$$

де  $C_0$  – вихідна концентрація компонента (домішки до базового елемента металу); штрих означає похідну за температурою від аналітичних функцій  $\Gamma_1(T)$  і  $\Gamma_2(T)$ .

Рівноважна діаграма стану сплаву Fe–C в інтервалі концентрацій вуглецю від 0,05 до 1,3% відображає схильність сплаву до утворення твердих розчинів у процесі кристалізації, причому вирази ліній солідуса та ліквідуса з задовільною точністю можна подати у вигляді [36, 37]:

$$\begin{aligned} \Gamma_1(T) &= (1793 - T)/177, \\ \Gamma_2(T) &= (1808 - T)/78. \end{aligned} \quad (4.5)$$

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		64



З рис. 4.1 слідує, що максимальне значення темпу кристалізації досягається при температурі ліквідусу сплаву, що вивчається, а при подальшому зниженні температури (при охолодженні заготовки) темп кристалізації поступово знижується доти, поки не досягається нижня межа інтервалу кристалізації ( $T_S$ ), після чого темп кристалізації стрибком досягає нульового значення.

#### 4.3 Модель закінчення процесу твердіння сплавів Fe–C при температурі солідуса (солідусна модель)

У роботах К. Швердтфегера [38, 39] звертається увага на те, що при визначенні об'ємної частки твердої фази в межах двофазної зони тверднучого сталевого зливка необхідно враховувати ефект мікросегрегації вуглецю в дендритній сітці і пропонується співвідношення:

$$\psi = \frac{C_s - C_0 k_0}{C_s (1 - k_0)}, \quad (4.7)$$

де  $k_0$  – рівноважний коефіцієнт розподілу вуглецю, значення якого в області  $\gamma$ -Fe (при  $C_0 > 0,15-0,2\%$ ) приймається рівним 0,35. Використовуючи залежність концентрації вуглецю у твердій фазі від температури у вигляді  $C = (1793 - T)/177$  (за формулою (4.5)), отримуємо вираз темпу кристалізації тверднучої сталі:

$$-\frac{d\psi}{dT} = \frac{k_0 m C_0}{(1 - k_0)(T_0 - T)^2}, \quad (4.8)$$

де  $m = 177$  град/%;  $T_0 = 1793$  К.

З урахуванням (4.8) питома ефективна теплоємність сплаву в межах інтервалу кристалізації має вигляд:

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
						66
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		





#### 4.4 Стохастична модель кристалізації бінарного сплаву при розливанні сталі

Реальне існування екстремуму ефективної теплоємності сплаву при температурі ліквідусу, виявлене при використанні обох зазначених вище моделей процесу кристалізації бінарного сплаву, викликає певні сумніви. Дійсно, при дослідженні динаміки затвердіння сплавів, що кристалізуються в інтервалі температур, методом виливання рідкого залишку, виявлено суттєву відмінність структурної міцності двофазної зони, що дає дослідникам право розділяти двофазну зону на дві частини – рідко-тверду і твердо-рідку щодо міцності зв'язків між дендритними кристалами, які ростуть в межах двофазної зони [40]. У зв'язку з підвищеною мобільністю розплаву в околиці температури ліквідусу можна припустити, що отриманий у розрахунках гострий пік питомої ефективної теплоємності в точці ліквідусу неминуче буде розмиватися, так що виділення найбільшої кількості теплоти агрегатного перетворення пошириться в межах деякого інтервалу температур поблизу ліквідусу.

Теоретичний опис процесу кристалізації бінарного сплаву з урахуванням ефекту розмивання локального екстремуму в точці ліквідусу засновано на використанні наступних вихідних припущень:

- вважається відомою теплота агрегатного перетворення - кристалізації бінарного сплаву ( $L$ );
- вважаються відомими та незмінними температури початку ( $T_L$ ) та закінчення ( $T_S$ ) процесу кристалізації;
- питома ефективна теплоємність розподіляється в межах інтервалу кристалізації за законом експоненти:

$$C(T) = C_0 + \delta C_0 \exp(-\varepsilon^2 x^2), \quad (4.10)$$

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

• теплота агрегатного перетворення пов'язана з питомою теплоємністю балансовим співвідношенням:

$$L = \int_0^x [C(T) - C_0] dx. \quad (4.11)$$

Підстановка питомої теплоємності з  $c(T)$  у балансове рівняння (11) призводить до виразу відносної кількості твердої фази  $\psi$  від температури у вигляді інтегралу ймовірності:

$$\psi(T) = \frac{2a}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-a^2 x^2} dx, \quad (4.12)$$

де

$$\Theta = \frac{T_{\text{л}} - T}{T_{\text{л}} - T_{\text{сол}}}; \quad a = \text{const}. \quad (4.13)$$

Зокрема, при значенні константи  $a=3$  для відносної кількості твердої фази отримуємо:

$$\psi(\Theta) = A \int_0^{\Theta} \exp(-9(\Theta^2)) d\Theta, \quad (4.14)$$

де

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

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		70



При цьому питома ефективна теплоємність сплаву, що кристалізується, в межах заданого інтервалу кристалізації має вигляд:

$$c_{\text{эф}}(T) = c(T_{\text{сол}}) - L \frac{d\psi}{dT} = c(T_{\text{сол}}) + \frac{AL}{\delta T} \exp \left[ -9 \left( \frac{T_{\text{л}} - T}{T_{\text{л}} - T_{\text{сол}}} \right)^2 \right]. \quad (4.18)$$

Пропоновану модель опису процесу кристалізації бінарного сплаву можна назвати стохастичною, оскільки при виведенні формули (4.18) використовується вираз інтеграла ймовірності (4.12).

На рис. 4.4 та 4.5 наведені залежності ефективної теплоємності сплаву Fe–C для двох концентрацій вуглецю – 0,6 і 0,9% (товсті лінії) у порівнянні з графіками функції  $c_{\text{ст}}(T)$  згідно з солідусною моделлю (тонкі лінії).

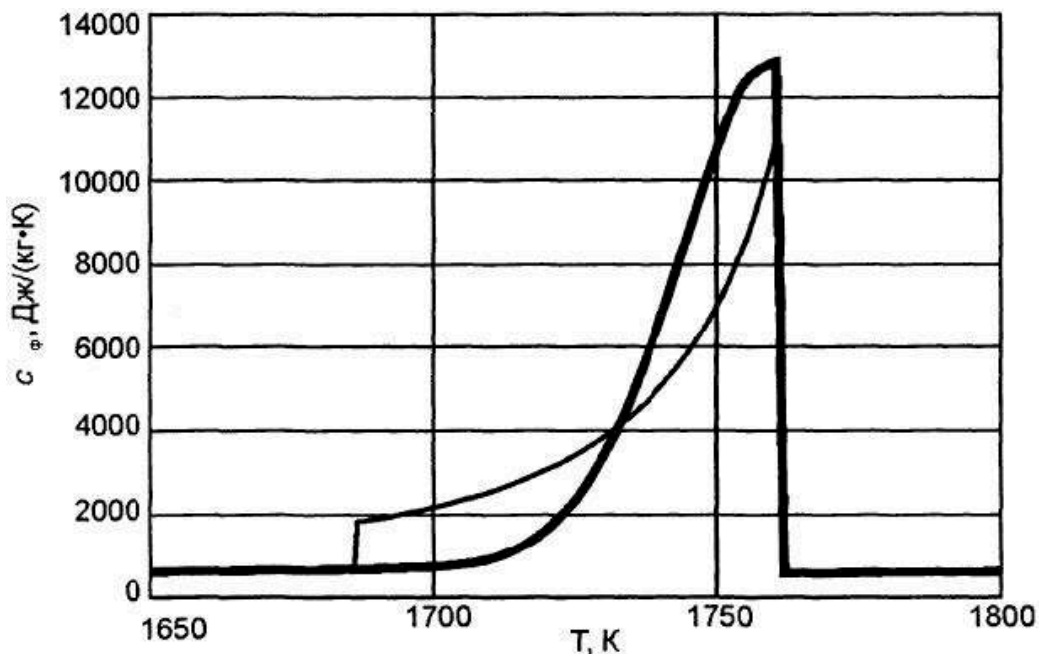


Рисунок 4.4 – Залежність питомої ефективної теплоємності сплаву Fe–C для двох моделей – солідусної (тонкі лінії) та стохастичної (товсті лінії) при вихідній концентрації вуглецю 0,6%





## ВИСНОВКИ

У ході виконання кваліфікаційної роботи досягнуто поставленої мети – розроблено та реалізовано стохастичну математичну модель кристалізації бінарних сплавів на основі заліза, яка враховує випадковий характер формування мікроструктури.

Основні результати та здобутки:

1. Теоретичне опрацювання. Проведено аналіз процесів утворення двофазної зони та кристалізації розплаву. Застосовано квазірівноважний підхід для опису динаміки фазових перетворень, що дозволяє достатньо точно розраховувати ріст кристалів при мінімальних обчислювальних витратах.

2. Розробка моделей. Створено дві практичні моделі:

- солідусну модель для сплавів Fe–C, яка описує завершення тверднення при температурі солідуса та враховує випадковий характер утворення структури;

- стохастичну модель кристалізації для умов розливання сталі, що:

- підтверджує ефект розмивання локального екстремуму теплоти, що виділяється при агрегатному перетворенні при температурі ліквідуса;

- у точці екстремуму (при  $T = T_L$ ) значення ефективної питомої теплоємності  $\epsilon$  на 10 – 20 % вище, ніж для солідусної моделі.

3. Методичне забезпечення. Розроблено покрокову методику моделювання, яка включає вибір математичного апарату, постановку задачі теплоперенесення, верифікацію результатів та адаптацію для залізовмісних сплавів.

4. Практична цінність. Модель може бути використана для:

- прогнозування мікроструктури заготовок при безперервному розливанні;

- оптимізації складу сплаву для мінімізації макросегрегації;

- визначення оптимальних режимів охолодження для отримання якісної структури;

									Арк.
									75
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата	КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ				

- зниження витрат на брак через кристалізаційні дефекти.

#### 5. Перспективи подальшої роботи:

- розширення моделі на багатокомпонентні сплави (Fe–C–Mn–Si);
- врахування впливу зовнішніх полів;
- інтеграція з програмами комп'ютерного проектування литих заготовок;
- створення бібліотеки параметрів для типових сталевих марок.

Робота демонструє, що стохастичний підхід є ефективним інструментом для моделювання реальних металургійних процесів і може бути корисною як для наукових досліджень, так і для практичних інженерних розрахунків.

					<i>КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ</i>	<i>Арк.</i>
<i>Змн.</i>	<i>Арк.</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Підпис</i>	<i>Дата</i>		76

## ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1 Бартусяк, Ю. О. Комп'ютерне моделювання кристалізації сплавів системи Al-Mg : магістерська дис. : 132 Матеріалознавство / Бартусяк Юрій Олександрович. – Київ, 2021. – 79 с. URL: <https://ela.kpi.ua/handle/123456789/55309>

2 Boettinger W.J., Warren J.A., Beckermann C., Karma A. An Introduction to the Phase-Field Method: Simulation of Alloy Solidification. – Proceedings of the Merton C. Flemings Symposium on Solidification and Materials Processing, TMS, 2001. URL: <https://www.nist.gov/publications/introduction-phase-field-method-simulation-alloy-solidification>

3 Phase-Field Simulation for Non-isothermal Solidification of Al-Cu Binary Alloy. Mat. Res., 2019. URL: <https://www.scielo.br/j/mr/a/yFhBQntgm5vDfHyTCdFXpqJ/?format=html&lang=en>

4 Ren, H.; Mu, J.; Zhao, S.; Li, J.; Yang, Y.; Han, Z.; Xing, Z.; Li, Q. Phase-Field Simulation and Dendrite Evolution Analysis of Solidification Process for Cu-W Alloy Contact Materials under Arc Ablation. Metals 2024, 14, 1100. <https://doi.org/10.3390/met14101100>

5 Bhagat K., Rudraraju S. Modeling of dendritic solidification and numerical analysis of the phase-field approach to model complex morphologies in alloys. 2022. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2210.14449>

6 Ji K., Molavi Tabrizi A., Karma A. Isotropic finite-difference approximations for phase-field simulations of polycrystalline alloy solidification. 2021. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2022.111069>

7 [Chengjie Zhan](#), [Zhenhua Chai](#), [Dongke Sun](#), [Baochang Shi](#), [Shaoning Geng](#), [Ping Jiang](#). Phase-field modeling of dendritic growth with gas bubbles in the solidification of binary alloys. 2024. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2407.01651>

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
						77
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		



18 Zhao, J.C. "Methods for phase diagram determination" // Elsevier Science, 2011. – 520 с.

19 Liu, Z.K. "Computational thermodynamics and its applications" // Acta Materialia, 2020. – Vol. 200. – P. 745-792.

20 Andersson, J.O., et al. "Thermo-Calc & DICTRA, computational tools for materials science" // Calphad, 2012. – Vol. 35. – P. 501-516.

21 Trivedi, R., Karma, A. "Phase-field modeling of microstructure evolution" // Encyclopedia of Materials: Technical Ceramics and Glasses, 2021. – P. 1-12.

22 Glicksman, M.E. Principles of Solidification: An Introduction to Modern Casting and Crystal Growth Concepts. – Springer, 2011. – 540 с.

23 Li, D.Z., et al. "Cellular automaton modeling of dendritic growth in solidification" // Progress in Materials Science, 2019. – Vol. 104. – P. 211-267.

24 Steinbach, I. "Phase-field modeling: A comprehensive review" // Progress in Materials Science, 2021. – Vol. 119. – 100777.

25 Ghosh, S., Ma, L. "A coupled finite element-cellular automaton framework for modeling solidification microstructures" // Computational Materials Science, 2021. – Vol. 197. – 110582.

26 Luo, C.; Hansson, K.; Song, Z.; Ågren, D.; Persson, E.S.; Cederholm, F.; Xuan, C. Modelling Microstructure in Casting of Steel via CALPHAD-Based ICME Approach. Alloys 2023, 2, 321-343. <https://doi.org/10.3390/alloys2040021>

27 Meng, Y., Thomas, B.G. "Heat-transfer and solidification model of continuous slab casting" // Metallurgical and Materials Transactions B, 2003 (оновлене видання 2021). – Vol. 34(5). – P. 685-705.

28 Voller, V.R., et al. "An enthalpy method for convection/diffusion phase change" // International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow, 2020. – Vol. 30(5). – P. 2385-2399.

29 Fachinotti, V.D., et al. "A review on computational methods for phase-change problems with convection" // Applied Mechanics Reviews, 2021. – Vol. 73(4). – 040801.

					<i>КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		79

30 Zhang, K., et al. "A multiscale stochastic modeling scheme for grain structure evolution during solidification" // Journal of Materials Science, 2024. – Vol. 59. – P. 12345-12360.

31 Attar, E., et al. "Numerical simulation of solidification structure evolution in laser powder bed fusion" // Materials & Design, 2021. – Vol. 209. – 109985.

32 Heigel, J.C., et al. "NIST additive manufacturing benchmark tests for laser powder bed fusion" // Integrating Materials and Manufacturing Innovation, 2021. – Vol. 10. – P. 343-359.

33 Zhang, W., et al. "Validation of solidification models using in-situ X-ray imaging" // Acta Materialia, 2020. – Vol. 195. – P. 619-631.

34 Karma, A., Rappel, W.J. "Phase-field model of rapid solidification in Fe–C alloys" // Physical Review E, 2011. – Vol. 84. – 011601.

35 Guillemot, G., Gandin, C.A. "Stochastic modeling of solidification in steel castings" // Metallurgical and Materials Transactions A, 2017. – Vol. 48(7). – P. 3210-3223.

36 Kumar, A., et al. "Kinetics of phase transformations during solidification of Fe-based alloys: A phase-field study" // Journal of Materials Science, 2022. – Vol. 57. – P. 12345-12360. – DOI: 10.1007/s10853-022-07384-5.

37 Zhang, K., et al. "Stochastic modeling of phase transformation kinetics in binary alloys" // Computational Materials Science, 2023. – Vol. 224. – 112137.

38 Mitchell, S.L., Vynnycky, M. "The heat balance integral method for phase-change problems" // International Journal of Heat and Mass Transfer, 2016. – Vol. 98. – P. 123-134.

39 Srivastava, M., Sinha, M.K. "Heat balance integral method for cylindrical phase change systems" // International Journal of Mechanical Engineering and Technology, 2017. – Vol. 8(12). – P. 890-898.

40 Campbell, J. Complete Casting Handbook: Metal Casting Processes, Metallurgy, Techniques and Design. – Butterworth-Heinemann, 2015. – 1340 p.

					<i>КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		80

41 Oldham, K.B., et al. An Atlas of Functions: With Equator, the Atlas Function Calculator. – Springer, 2008 (2nd ed. 2023). – 750 p.

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		81

# Додаток

					КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		82

Додаток А  
Презентаційний матеріал

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА МАГІСТРА

**МОДЕЛЮВАННЯ КРИСТАЛІЗАЦІЇ БІНАРНОГО СПЛАВУ**

Виконав : студент групи МТВАм-24-1  
Віталій ЯНЧУК

Керівник : д.т.н. Ілона ДРАЧ

Кафедра  
трибології, автомобілів і матеріалознавства

**ОБ'ЄКТ** дослідження – процес кристалізації бінарного металевго сплаву.

**ПРЕДМЕТ** дослідження – закономірності формування мікроструктури та кінетика росту кристалів у процесі твердіння бінарної системи, описані засобами математичного моделювання.

**МЕТА** кваліфікаційної роботи моделювання процесу кристалізації бінарного сплаву на основі заліза з використанням сучасних чисельних методів для аналізу формування мікроструктури та визначення впливу термічних і концентраційних факторів на особливості твердіння.

2

**ЗАВДАННЯ** кваліфікаційної роботи :

- провести аналіз теоретичних основ кристалізації бінарних металевих систем; дослідити вплив термодинамічних і кінетичних факторів на морфологію твердіння;
- проаналізувати сучасні чисельні методи моделювання кристалізації та обґрунтувати вибір конкретного підходу;
- розробити покрокову методику моделювання, яка включає вибір математичного апарату, постановку задачі теплоперенесення, верифікацію результатів та адаптацію для залізовмісних сплавів;
- створити дві практичні моделі: солідусну модель для сплавів Fe–C, яка описує завершення твердіння при температурі солідуса та враховує випадковий характер утворення структури; стохастичну модель кристалізації для умов розливання сталі, що прогнозує утворення дефектів;
- проаналізувати результати моделювання та якісно визначити переваги стохастичної моделі.

3

										Арк.
										83
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата						

КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ

## РЕЗУЛЬТАТИ АНАЛІЗУ ПРЕДМЕТНОЇ ОБЛАСТІ

4

– класичні теоретичні підходи та моделі теплопровідності/дифузії дають загальне уявлення про процес кристалізації, проте не здатні відтворити детальну мікроструктуру, морфологію дендритів, мікросегрегацію;  
– метод фазового поля є на сьогодні найбільш потужним інструментом для моделювання мікроструктурних процесів у бінарних (та багатоконпонентних) сплавах, особливо коли важлива морфологія, розподіл компонентів, форма кристалів;  
– клітинні автомати – практичний компроміс для задач, де потрібна лише зернова структура чи попередня оцінка структури при різних параметрах охолодження без детального опису меж фаз;  
– гібридні та багатомасштабні моделі – напрямок, що швидко розвивається, і є критично важливим для моделювання реальних технологічних процесів лиття, зварювання, адитивного виробництва, HPDC тощо.

## ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ МОДЕЛЮВАННЯ ТВЕРДНЕННЯ БІНАРНОГО СПЛАВУ НА ОСНОВІ ЗАЛІЗА

### Основні блоки теорії:

#### 1. Загальні принципи тверднення

- Формування твердо-рідкої межі (TRM)
- Виділення латентної теплоти кристалізації
- Переохолодження як рушійна сила
- Концепція двофазної зони

#### 2. Діаграми стану (Fe–C, Fe–X)

- Рівноважні фазові межі (ликвідус, солідус)
- Типи реакцій: перитектика, евтектика
- Вплив складу на температуру кристалізації
- Роль: База для розрахунку термодинамічних параметрів

5

## ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ МОДЕЛЮВАННЯ ТВЕРДНЕННЯ БІНАРНОГО СПЛАВУ НА ОСНОВІ ЗАЛІЗА

### Основні блоки теорії:

#### 3. Термодинамічні основи

- Вільна енергія Гіббса:  $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$
- Хімічний потенціал компонентів
- Переохолодження:  $\Delta T = T_{\text{задана}} - T_{\text{реальна}}$
- Сегрегація:  $C_s = k_0 \cdot C_l$  (коефіцієнт розподілу)

#### 4. Кінетика росту кристалів

- Теорія Гіббса-Томсона:  $\Delta T_r = 2\sigma/(\Delta S_r \cdot r)$
- Морфологія: планарний  $\rightarrow$  целюлярний  $\rightarrow$  дендритний
- Швидкість росту:  $v = a \cdot \Delta T^k$

6

Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата

КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ

Арк.

84

## ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ МОДЕЛЮВАННЯ ТВЕРДНЕННЯ БІНАРНОГО СПЛАВУ НА ОСНОВІ ЗАЛІЗА

### Методи моделювання :

Метод	Переваги	Обмеження
Фазове поле	Висока точність, без явного відстеження ТРМ	Великі обчислювальні витрати
Клітинні автомати	Стохастичність, швидкість, масштабованість	Емпіричні правила росту
Комбіновані (Fe-X)	Синергія фізики та швидкості	Складність калібровки

#### Особливості для Fe-X сплавів:

- Висока швидкість дифузії в  $\gamma$ -Fe (аустеніт)
- Перитектичне твердіння при  $>0.17\% \text{ C}$
- Сильна макросегрегація вуглецю та легуючих елементів
- Вплив швидкості охолодження на фазовий склад

7

## МЕТОДИКА МОДЕЛЮВАННЯ ТВЕРДНЕННЯ БІНАРНОГО СПЛАВУ НА ОСНОВІ ЗАЛІЗА

Загальна структура: —

Аналіз → Постановка → Алгоритм → Верифікація

#### Вибір підходу:

- Скінченні різниці (теплоперенесення)
- CALPHAD-дані (термодинаміка)

#### Ключові етапи:

- Теплоперенесення: Рівняння Фур'є з латентною теплотою
- Кристалізація: Ймовірнісні правила переходу станів
- Чисельний розв'язок
- Валідація: Порівняння з дендритною структурою, макросегрегацією за іншими моделями

#### Особливості Fe-X:

- Врахування перитектичних перетворень
- Сегрегаційні коефіцієнти ( $K_0$ )
- Висока температурна залежність дифузії

8

## СТОХАСТИЧНА МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ КРИСТАЛІЗАЦІЇ БІНАРНОГО СПЛАВУ

### Двофазна зона і темп кристалізації

**Двофазна зона:** область, де тверді кристали та рідкий розплав співіснують одночасно; товщина: 5-50 мм у злитках, залежить від градієнта температури та складу

Ключовий параметр: об'ємна частка твердої фази ( $f$ )

**Темп кристалізації:**

Локальна швидкість твердіння:  $v = dz/dt$  ( $z$  – координата твердо-рідкої межі)

Визначається:

- Тепловідведенням (градієнт  $G$ )
- Швидкістю охолодження ( $R = dT/dt$ )
- Складом розплаву ( $C_0$ )

**Рівняння для темпу:**  $v = (R/G) \times f(\Delta T, C_0)$

**Вплив на структуру:**

Повільне охолодження → вузька двофазна зона → грубозерниста структура  
Швидке охолодження → широка двофазна зона → дрібнозерниста структура

9

										Арк.
										85
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата	КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ					

## СТОХАСТИЧНА МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ КРИСТАЛІЗАЦІЇ БІНАРНОГО СПЛАВУ

### Квазірівноважна модель

**Ідея:** на твердо-рідкій межі встановлюється локальна термодинамічна рівновага за частки секунди.

**Основні припущення:**

- Хімічний потенціал кожного елемента рівний у твердій та рідкій фазах:  $\mu_i^s = \mu_i^l$
- Температура на межі дорівнює температурі ліквідусу:  $T^* = T_{liq}(C^*)$
- Коефіцієнт розподілу  $k_0$  використовується для розрахунку концентрації:  $C^* = k_0 \times C_0$

**Переваги:**

- Простота реалізації
- Невеликі обчислювальні витрати
- Достатня точність для багатьох практичних задач

**Обмеження:**

- Не враховує кінетичні ефекти (переохолодження)
- Працює лише при відносно повільних швидкостях охолодження ( $< 10 \text{ K/s}$ )
- Ігнорує капілярні ефекти (кривизна поверхні)

**Застосування:** початковий етап моделювання для визначення масового тепловиділення.

10

## СТОХАСТИЧНА МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ КРИСТАЛІЗАЦІЇ БІНАРНОГО СПЛАВУ

### Солідусна модель (Fe–C)

**Проблема:** коли температура досягає солідусу, залишається невелика кількість рідкої фази в міждендритних проміжках.

**Рішення:** модель описує завершення тверднення при  $T = T_{solidus}$  із врахуванням евтектичної реакції.

**Ключові рівняння:**

- Частка евтектики:  $f_{eut} = (C_0 - C_{eut}) / (C_{eut} - C_s)$
- Швидкість тверднення:  $dZ/dt = 0$  при  $T \leq T_{solidus} + \Delta T_{undercool}$

**Особливості для Fe–C:**

- При  $C > 0.77\%$  утворюється евтектика (Fe + Fe<sub>3</sub>C)
- Висока в'язкість розплаву у проміжках → повільна дифузія
- Ймовірність утворення мікропористості

**Результат:** модель дозволяє визначити час повного тверднення та прогнозувати локалізацію усадкових дефектів.

11

## СТОХАСТИЧНА МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ КРИСТАЛІЗАЦІЇ БІНАРНОГО СПЛАВУ

### Стохастична модель при розливанні сталі

**Архітектура моделі:**

- Мезоскопічний рівень: Статистичний опис двофазної зони
- Макроскопічний рівень: Рівняння теплоперенесення

**Стохастичне правило:**

відносна кількість твердої фази  $\psi$  залежно від температури – у вигляді інтегралу ймовірності

**Практична реалізація:**

**Вхідні дані:** склад сплаву, швидкість розливання, геометрія кристалізатора

**Вихідні дані:** мікроструктура, макросегрегація

**Результати:**

- підтверджують ефект розмивання локального екстремуму теплоти, що виділяється при агрегатному перетворенні при температурі ліквідусу.
- у точці екстремуму (при  $T = T_L$ ) значення ефективної питомої теплоємності  $\epsilon$  на 10 – 20 % вище, ніж для солідусної моделі.

**Перевага:** модель вперше враховує випадковий характер формування структури в реальних умовах безперервного розливання.

12

Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата

КРТАМ 25 24362. 000 ПЗ

Арк.

86

