

© А.Г. ИВАШКО, И.Ю. КАРЯКИН

ivashco@mail.ru, Ivan_NYC@mail.ru

УДК 669.017.03;51-72

МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ $\gamma \rightarrow \alpha$ ПРЕВРАЩЕНИЙ В СПЛАВЕ 05X9*

АННОТАЦИЯ. В работе рассмотрено моделирование кинетики $\gamma \rightarrow \alpha$ превращений. Приведены результаты сравнительного анализа данных компьютерного моделирования и данных, представленных в литературе.

SUMMARY. The given article considers the modelling of kinetics $\gamma \rightarrow \alpha$ transformations. Results of the comparative analysis of the data of computer modeling and the data presented in the literature are given.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА. $\gamma \rightarrow \alpha$ превращения, компьютерное моделирование, метод Нелдера-Мида, изотермическая диаграмма.

KEY WORDS. $\gamma \rightarrow \alpha$ transformations, computer modelling, method of Nelder-Mid, isothermal diagram.

Моделирование кинетики $\gamma \rightarrow \alpha$ превращений в сплаве 05X9 осуществляется на основе имитационной модели.

В работе [1] описана модель фазовых превращений с применением теории систем массового обслуживания. Эта модель представляет собой событийную модель структурных превращений. С течением времени в случайной точке пространства, не занятой объектом (аустенитом), создается новый объект (структурная составляющая) — шар с радиусом заданной величины. Радиус шара со временем растет линейно. Через определенные промежутки времени в свободной области таким же образом создаются новые структурные составляющие.

При возникновении события зарождения или распада объекта вычисляется объем области, занятый структурными составляющими. Выбранная модель массового обслуживания является многоканальной системой с моментальным временем обслуживания и двумя типами потоков заявок — на создание и уничтожение зерен аустенита. При поступлении заявки на распад зерен проверяются все структурные составляющие на критический размер. Если зерно меньше критического размера, то оно распадается. Процесс моделирования завершается в момент заполнения аустенитом всей исследуемой области.

Кинетические параметры модели в работах определялись на основе экспериментально построенных изотермических диаграмм путем решения оптимизационной задачи методом Нелдера-Мида [2], [3]:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_N) \rightarrow \min \quad (1)$$

* Работа выполнена в рамках АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы» (2009-2011 гг.), НИР «Прогнозирование кинетики распада аустенита в порошковых сталях при непрерывном охлаждении» (№74-04).

$$f(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_{i,j=1}^{n,m} (V_m(x_1, x_2, \dots, x_N, t_{i,j}) - V(T_i, t_{i,j}))^2 \quad (2)$$

где n — число экспериментальных точек;

m — количество температурных режимов;

T_i — температура (С);

$\tau_{i,j}$ — время после начала выдержки стальной детали (сек);

V — доля распавшегося аустенита после времени $\tau_{i,j}$, полученная в результате натурального эксперимента (%);

x_1, x_2, \dots, x_N — параметры модели, характеризующие $\lambda_{create}(T)$ (интенсивность возникновения зерен α фазы), $\lambda_{распада}(T)$ (интенсивность появления событий проверки на уничтожения зерен α фазы, имеющих размер зерна меньше критического), R_0 (начальный радиус зародыша), R_{krit} (критический радиус).

$V_m(x_1, x_2, \dots, x_N, \tau_{i,j})$ — доля превращенной γ — фазы после времени $\tau_{i,j}$, полученная в результате компьютерного эксперимента.

Для решения задачи минимизации использовалась модификация метода Нелдера-Мида [2], [3].

В то же время полученные кинетические параметры модели не дают возможность оценить скорость роста фазовых составляющих. В данной работе предлагается для оценки скорости роста использовать физическую модель [4], [5]:

$$\omega = M \cdot \frac{\Delta F - \Delta F_s}{RT} \cdot e^{-U/RT}, \quad (2)$$

где M — константа;

ΔF — разность свободных энергий γ - и α -фаз (Дж/моль);

ΔF_s — сопротивление кристалла движению межфазной границы (Дж/моль);

$R = k \cdot Na$ (Дж/(К·моль)), где k — постоянная Больцмана, Na — число Авогадро;

T — температура (К);

U — энергия активации роста α -фазы (кДж/моль).

Для проверки адекватности предлагаемой имитационной модели были проведены компьютерные эксперименты для стали 05Х9, характеристика которой приведена в табл. 1.

Таблица 1

Химический состав и режим аустенизации стали 05Х9

Содержание элементов, мас. %			Режим аустенизации
С	Сг	Другие	
0,05	8,5	0,06 Si, 0,39 Mn	950 °С, 3 мин

Для нахождения параметров модели и построения кинетических кривых использовались экспериментальные данные из [6]. Графическое изображение этих данных представлено на рис. 1.

На рис. 2 приведены данные компьютерного эксперимента в сравнении с реальными данными, которые показывают хорошую сопоставимость полученных результатов с данными реальных экспериментов.

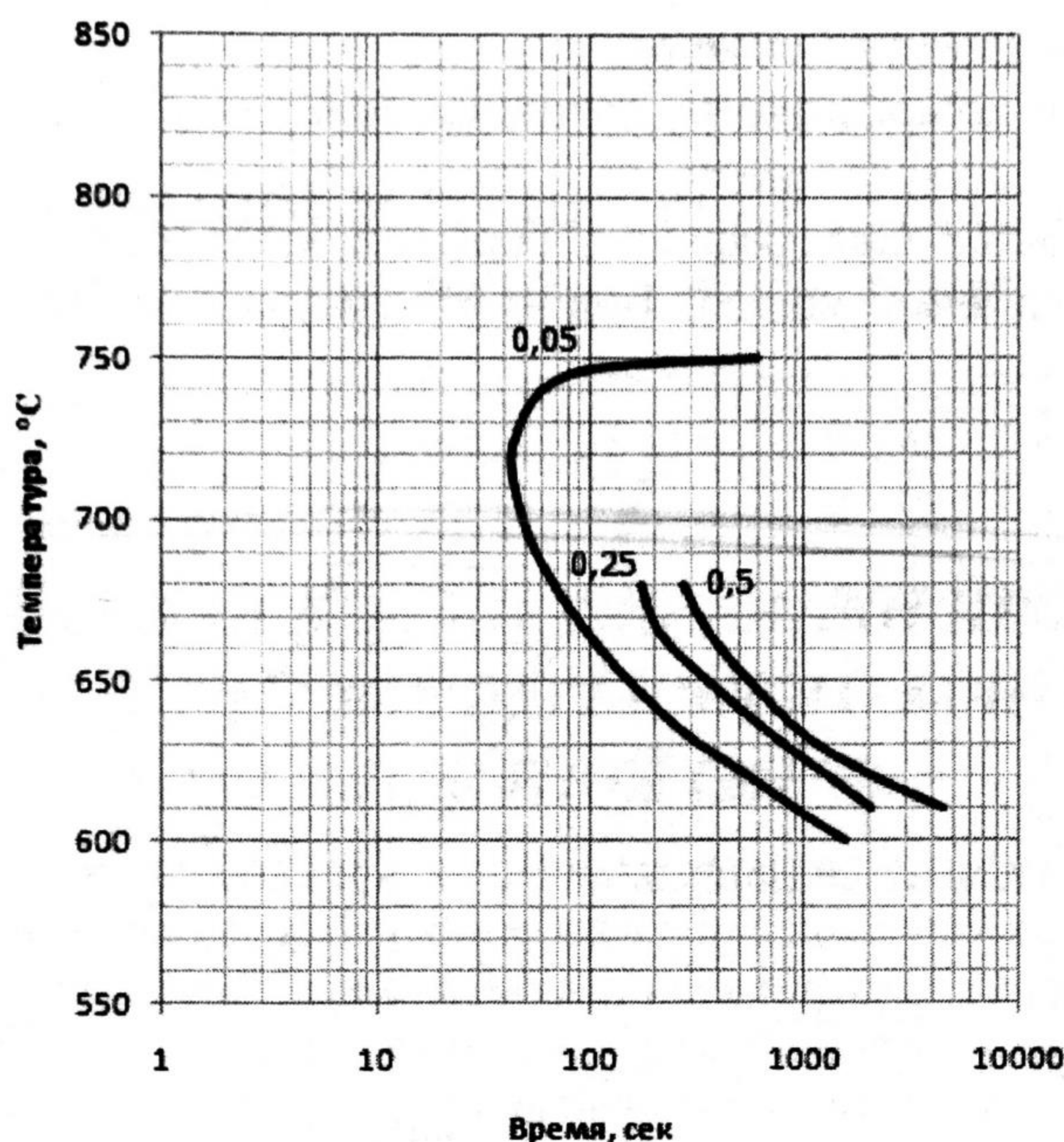


Рис. 1. Изотермическая диаграмма распада γ -фазы сплава O5X9

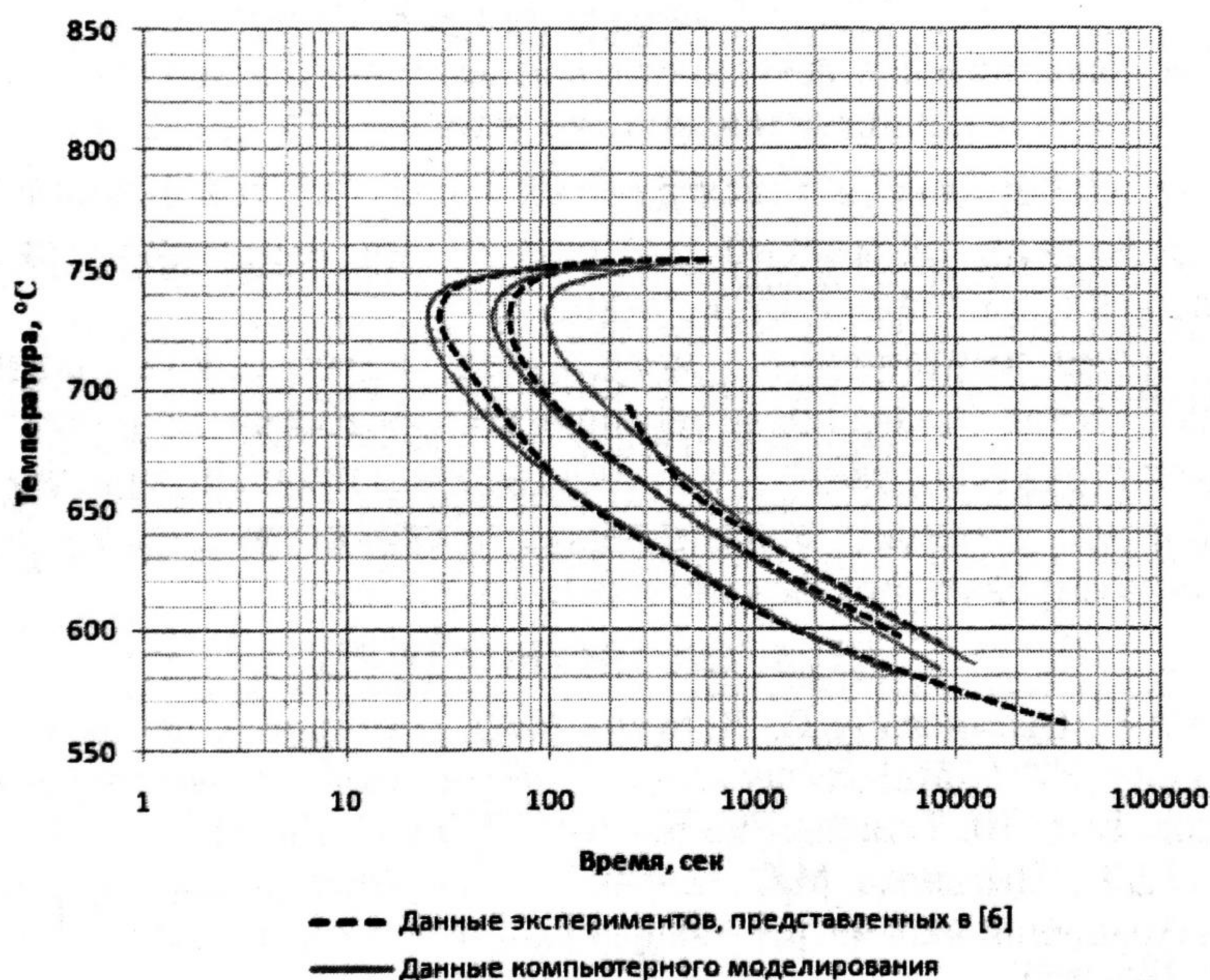


Рис. 2. График сопоставления результатов компьютерного моделирования и данных, представленных в [6]

Помимо этого, данные, полученные в ходе компьютерного моделирования рассматриваемого процесса, были сопоставлены с данными представленными в работе [7], где С-образные изотермические кривые описываются следующей формулой:

$$(f) = \lambda (-\ln(1-f))^{1/n} \cdot \frac{RT}{\Delta F - \Delta F_s} \cdot e^{-U/RT}, \quad (3)$$

где ΔF — разность свободных энергий γ - и α -фаз (Дж/моль);
 ΔF_s — сопротивление кристалла движению межфазной границы (Дж/моль);
 $R = k \cdot Na$ (Дж/(К·моль)), где k — постоянная Больцмана, Na — число Авогадро;

f — доля превращенного объема;
 n — постоянный коэффициент, вычисляемый на основе теории Кана;
 λ — постоянный коэффициент.

На рис. 3 представлены графики С-образных кривых по данным [7] и полученных с помощью предлагаемой модели. Видно, что графики разнятся незначительно.

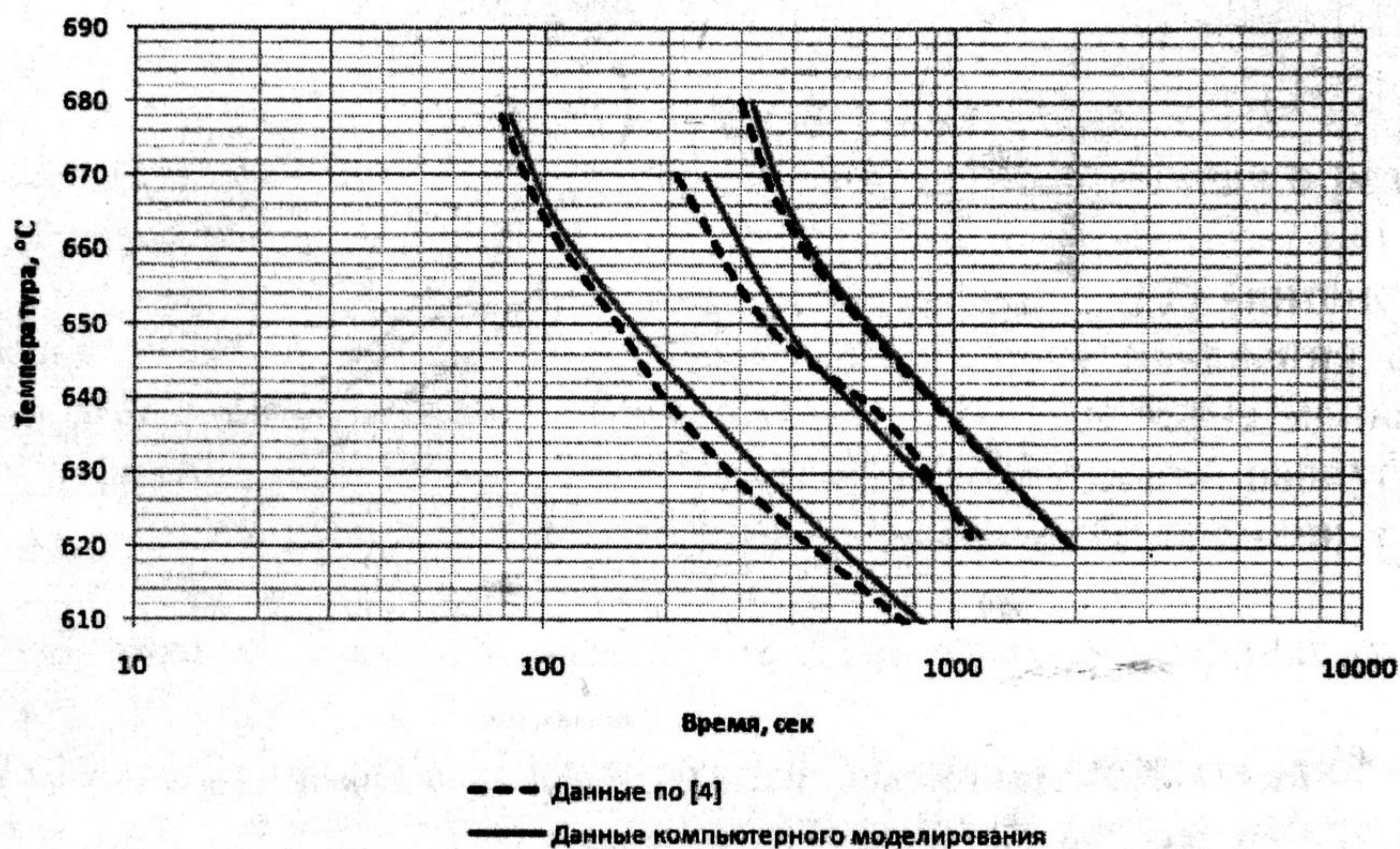


Рис. 3. График сопоставления результатов компьютерного моделирования с данными, представленными в работе [4]

Сравнение экспериментальных данных и результатов вычислительных экспериментов показали адекватность применения имитационной модели для описания фазовых превращений в стали.

В то же время имитационная модель дает возможность прогнозировать не только фазовый состав сплава после термической обработки, но и стереометрические характеристики структуры, такие как размер зерна и площадь межзеренных границ, что в свою очередь позволит визуализировать структуру сплава после термообработки и прогнозировать его механические свойства.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ивашко А.Г., Цыганова М.С., Карякин И.Ю. Имитационное моделирование фазовых превращений // Математическое и информационное моделирование. Сборник научных трудов. Вып. 10. Тюмень: Вектор Бук, 2008. С. 106-113.
2. Ивашко А.Г., Цыганова М.С., Карякин И.Ю. Модифицированный метод Хука-Дживса для нахождения параметров модели фазовых превращений // Вестник ТюмГУ. 2009. № 6. С. 197-202.
3. Ивашко А.Г., Карякин И.Ю., Зюркалов А.А. Анализ методов Хука-Дживса и Нелдера-Мида применительно к задаче нахождения параметров модели фазовых превращений // Вестник ТюмГУ. 2009. № 6. С. 197-202.
4. Мирзаев Д.А. и др. Превращение аустенита в феррит в «Классическом» сплаве Fe-9%Сг. I. Анализ литературных данных // Известия Челябинского научного центра. 1998. Вып. 2. С. 27-32.
5. Hillert M. Diffusion and Interface Control of Reactions in Alloys // Met. Trans., 1975. V. 6A. № 1. Pp. 8-18.
6. Коган Л.И., Энтин Р.И. О кинетике полиморфного превращения легированного железа: в сб. «Проблемы металловедения и физики металлов». М.: Metallurgia, 1951. С. 204-216.
7. Любов Б.Я. Кинетическая теория фазовых превращений. М.: Metallurgia, 1969. С. 25