

УДК 669

С.М. КАБИШОВ, канд. техн. наук,
И.А. ТРУСОВА, д-р техн. наук,
П.Э. РАТНИКОВ, канд. техн. наук (БНТУ),
Д.В. МЕНДЕЛЕВ, канд. техн. наук (ГКНТ РБ)

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ СТАЛЬНЫХ СЛИТКОВ И ЗАГОТОВОК: СОСТОЯНИЕ, ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ

Благодаря развитию вычислительной техники в последнее время существенно возросли сложность и детализация прикладных задач в области металлургии. Применительно к процессам кристаллизации сталей и сплавов у исследователей появилась возможность совместного решения задач теплопроводности, гидродинамики, массообмена и термомеханики. Но как показывает опыт моделирования, расширение возможностей не всегда позволяет существенно улучшить качество результатов. Одной из основных причин изложенной проблемы является недостаточность (а иногда и полное отсутствие) информации о свойствах материалов в области высоких температур, а также сложности, которые возникают при описании, например, двухфазной зоны затвердевающего слитка, и др.

Рассмотрим классическую постановку задачи, включающую уравнение теплопроводности, движения расплава, диффузии и термомеханики.

Уравнение теплопроводности имеет вид [1]:

$$\rho c_{\text{эф}}(T) \frac{\partial T}{\partial \tau} = \text{div}(\lambda \text{grad} T). \quad (1)$$

Теплофизические характеристики (плотность, коэффициент теплопроводности, теплоемкость) для уравнения (1) определяются следующим образом:

$$\rho = \begin{cases} \rho_{\text{ТВ}}(T) & \text{при } T \leq T_S; \\ [\rho_{\text{ТВ}}\psi + \rho_{\text{Ж}}(1-\psi)] & \text{при } T_S < T < T_L; \\ \rho_{\text{Ж}} & \text{при } T \geq T_L; \end{cases}$$

$$\lambda = \begin{cases} \lambda_{\text{ТВ}}(T) & \text{при } T \leq T_S; \\ [\lambda_{\text{ТВ}}\psi + \lambda_{\text{Ж}}(1-\psi)] & \text{при } T_S < T < T_L; \\ \lambda_{\text{Ж,эфф}} & \text{при } T \geq T_L; \end{cases}$$

$$c_{\text{эфф}} = \begin{cases} c_{\text{ТВ}}(T) & \text{при } T \leq T_S; \\ c_{\text{ТВ}} - L \frac{d\psi}{dT} & \text{при } T_S < T < T_L; \\ c_{\text{Ж}} & \text{при } T \geq T_L, \end{cases}$$

где T_L и T_S – температуры ликвидуса и солидуса разливаемого сплава соответственно; L – скрытая теплота кристаллизации.

Доля твердой фазы рассчитывается согласно правилу Шелла [2] при условии, что кристаллизация близка к равновесной

$$\psi = \left(\frac{T_L - T}{T_L - T_S} \right)^{\frac{1}{k_0 - 1}},$$

где k_0 – коэффициент равновесия фаз при температуре T .

Граничные условия на поверхности затвердевающей заготовки можно в общем случае задать следующим образом:

$$q(\tau) = \alpha_i [T_{\text{пов}}(x, y, z, \tau) - T_c],$$

где α_i – приведенный коэффициент теплоотдачи на охлаждаемой поверхности заготовки; T_c – температура охлаждающей среды.

Очевидно, что уже на стадии постановки задачи кристаллизации слитков и заготовок возникает ряд вопросов. В частности, теплофизические свойства стали при высоких температурах в справочной литературе практически отсутствуют; оценка эффективного коэффициента теплопроводности расплава также затруднена, так как он является функцией скорости циркуляции расплава в жидком ядре и локальной концентрации примесей. И если первое обстоятельство может быть учтено при помощи известных критериальных соотношений [1], то второе учесть достаточно сложно. Очевидно, что химический состав расплава в процессе кристаллизации неоднороден, при этом наличие слоя ликватов на поверхности фронта кристаллизации или дендрита будет оказывать непосредственное и весьма заметное влияние на теплообмен между твердой фазой и расплавом. Помимо этого геометрия фронта, толщина и состав пограничного слоя жидкости по мере затвердевания слитка (заготовки) будут изменяться.

К сказанному следует добавить, что задание постоянных границ диапазона кристаллизации в виде температур ликвидуса и солидуса также не отражает реальной картины процесса, так как изменение химического состава расплава за счет ликвации примесей и легирующих элементов будет изменять эти границы [3]. Например, более высокая концентрация углерода, серы и других элементов в междендритном пространстве или в осевой зоне заготовки на завершающей стадии затвердевания приведет к тому, что процесс кристаллизации завершится при более низкой температуре по сравнению с расчетным значением солидуса разливаемого сплава.

Серьезным препятствием для корректного решения задачи теплопроводности является еще одно обстоятельство. В технической литературе до настоящего времени отсутствует однозначное мнение относительно того, как следует учитывать выделение скрытой теплоты кристаллизации [1]. При известных количественных характеристиках этого процесса нет ясности относительно того, какова динамика выделения этой теплоты во времени и как она распределяется в пределах двухфазной зоны. Также не решена задача поглощения и отвода этой теплоты от зоны кристаллизации. В качестве некоторых причин этого необходимо отметить различие теплофизических

свойств (плотности, коэффициента теплопроводности и теплоемкости) и непостоянство состава слоя жидкости на поверхности формирующегося кристаллита за счет выделения ликватов, неравномерность состава и, как следствие, теплофизических свойств по сечению и длине структурных элементов дендрита.

Рассмотрим задачу движения расплава в жидком ядре затвердевающего слитка. Уравнение движения выглядит следующим образом [4]:

$$\rho \frac{\partial \bar{u}}{\partial \tau} - \eta \nabla^2 \bar{u} + \left(\frac{\eta}{k_p} \right) \bar{u} + \nabla p = F, \quad (2)$$

где p – локальное давление; F – вектор внешней силы; η – динамическая вязкость расплава; k_p – коэффициент проницаемости.

Компоненты вектора внешней силы при отсутствии динамических воздействий имеют вид [4]:

$$F_z = -\alpha \rho g_0 (T - T_0), F_x = F_y = 0.$$

В случае использования средств динамического воздействия на затвердевающую заготовку (например, электромагнитного перемешивания, «мягкого» обжата и др.), это должно быть учтено при формулировке компонентов вектора внешних сил [5 и др.].

В качестве начальных условий принимается скорость истечения расплава из разливочного стакана МНЛЗ, а граничные условия определяются с учетом «прилипания» внешнего слоя жидкости к смачиваемой поверхности:

$$v_x = 0, \quad p = 0 \quad \text{при } \tau = 0;$$

$$\frac{\partial v_x}{\partial z} = 0, \quad v_z = v_0 \quad \text{при } z = 0.$$

Постановку задачи следует дополнить условием неразрывности:

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0.$$

Из уравнения движения следует, что поле скоростей в жидком ядре затвердевающего слитка зависит от интенсивности внешних воздействий, градиента температуры и давления в жидкости, ее вязкости, шероховатости границы раздела «жидкость – твердая фаза». Последнее обстоятельство требует решения задачи с весьма высоким разрешением расчетной сетки. Размеры элементов должны быть сопоставимы с размерами растущих дендритов, что даже с учетом достигнутых мощностей и быстродействия современных компьютеров является достаточно сложной задачей.

Известно, что вязкость многокомпонентной жидкости зависит не только от температуры, но и от концентрации примесей [6]. Следовательно, расплав в междендритном пространстве, пограничном слое и в осевой зоне будет обладать различными свойствами. Помимо перечисленных факторов на характер течения расплава при кристаллизации будет оказывать влияние концентрация и фракционный состав газовых и твердых неметаллических включений, присутствующих в жидком металле. Таким образом, рассмотрение расплава как гомогенной жидкости нельзя считать корректным.

Для оценки уровня ликвации примесей и распределения элементов по сечению заготовки сформулированная задача дополняется уравнением конвективной диффузии [7]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \bar{u} \text{grad} C = \nabla(D \nabla C). \quad (3)$$

Начальные условия для уравнения (3): равномерное распределение примесей по объему струи с начальной концентрацией C_0 . Для определения поля концентраций в затвердевающем слитке используются значения скоростей циркуляции жидкости в ядре, которые являются результатом решения уравнения движения.

Учитывая, что продолжительность кристаллизации заготовки в условиях МНЛЗ относительно невелика, процессы диффузии в твердой фазе, как правило, не учитываются. Для расчета отношения концентраций в твердой и жидкой фазах при перемещении фронта

кристаллизации с некоторой постоянной скоростью v_k в работе [8] предложено использовать так называемый «эффективный коэффициент распределения»:

$$k_{\text{эфф}} = \frac{C_{\text{sol}}}{C_{\text{liq}}} = \frac{k}{k + (1 - k) \exp\left(-\frac{v_k \delta}{D}\right)}.$$

При рассмотрении массообмена в пределах двухфазной зоны для упрощения задачи считают, что режим циркуляции жидкости в междендритном пространстве носит ламинарный характер и распределение примесей между пограничным слоем и жидкой фазой осуществляется в соответствии с законами конвективной диффузии:

$$D \frac{\partial C}{\partial n} = \beta(C_m - C),$$

где D – коэффициент диффузии примеси в жидкой фазе; β – коэффициент массопереноса (коэффициент молекулярной диффузии большинства легирующих элементов и примесей находится в пределах $D = (10-20) \cdot 10^{-8}$ см²/с).

За счет конвективного переноса и внешних воздействий величина коэффициента диффузии в реальных процессах кристаллизации стальных расплавов больше в 10^3-10^5 раз. Коэффициент массопереноса β можно определить из числа Шервуда Sh [9]:

$$Sh = 0,33Re^{0,5} Sc^{0,33},$$

$$\text{где } Sh = \frac{\beta l}{D}; \quad Re = \frac{\rho w l}{\mu}; \quad Sc = \frac{\mu}{\rho D}.$$

При решении задачи массопереноса одной из основных проблем также является отсутствие данных об эффективном коэффициенте диффузии различных элементов. Зависимости, которые представлены выше, позволяют лишь приблизительно оценить влияние режима движения жидкости на данную характеристику. Кроме того, в расплаве могут протекать химические реакции с образованием ок-

сидов, сульфидов, нитридов и других соединений, что будет заметно влиять на окончательное распределение примесей в затвердевшем металле.

Определенную погрешность в результаты решения задачи массопереноса вносит задание начальной концентрации примесей постоянной по всему объему. При температурах разливки даже при интенсивном перемешивании расплав не достигает однородности. Это обусловлено тем, что в жидкости сохраняются микрообласти, несущие наследственную информацию о структуре и составе шихтовых материалов, из которых она была получена [10]. То есть в жидком металле может существовать субмикроскопическая неоднородность, обусловленная различной растворимостью компонентов в кластерах и межкластерном пространстве. Такая неоднородность будет отражаться на распределении примесей и легирующих элементов как в объеме отдельно взятого дендрита, так и в масштабе всего слитка.

Для полноты описания процесса кристаллизации стального слитка рассмотрим задачу термомеханики. Поле термических напряжений в твердой оболочке заготовки может быть описано уравнением Максвелла [11]:

$$2G\dot{e}_{ij} = \frac{1}{\tau_p} S_{ij} + \dot{S}_{ij}, \quad (4)$$

где принято

$$e_{ij} = \varepsilon_{ij} - \delta_{ij} \cdot \varepsilon; \quad S_{ij} = \sigma_{ij} - \delta_{ij} \cdot \sigma;$$

$$\varepsilon = \frac{1}{3} \varepsilon_{ii}; \quad \sigma = \frac{1}{3} \sigma_{ii}; \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{при } i = j \\ 0 & \text{при } i \neq j \quad (i, j = 1, 2, 3) \end{cases};$$

$$\tau_p = \left(\frac{G}{\eta} - \frac{G'T}{G} \right)^{-1},$$

где τ_p – условное время релаксации, учитывающее сумму двух различных физических явлений – вязкое течение материала под

нагрузкой при повышенных температурах (ползучесть) и влияние нелинейности упругих характеристик материала (модуля сдвига), связанное с локальными значениями скорости охлаждения $\dot{T} = \frac{dT}{d\tau}$.

Помимо этого формулировка задачи включает уравнения равновесия:

$$\partial\sigma_{ij} / \partial x_{ij} = 0$$

и соотношения Коши

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right).$$

Кроме того, используется предположение о том, что средние значения деформаций (ε) и напряжений (σ) связаны линейным соотношением:

$$\varepsilon = N\sigma + \alpha \delta T,$$

где $N = (1 - 2\nu)/E$, ν – число Пуассона, δT – избыточная локальная температура в сечении заготовки, определяемая из решения задачи теплопроводности.

При решении задачи термомеханики вновь возникает проблема отсутствия данных о механических свойствах металла при высоких температурах. Но даже наличие такой информации, которую можно получить в результате лабораторных исследований, не дает оснований утверждать, что величина расчетных напряжений и деформаций будет соответствовать реальной картине затвердевания слитка. Известно, что металл в различных структурных зонах имеет разные механические свойства. Но практически все исследователи это не учитывают. Кроме того, сопротивление деформации зависит от скорости деформации, которая является функцией как внешних причин, обусловленных конструктивными особенностями МНЛЗ и применением средств динамического воздействия, так и внутренних, вызванных изменением градиента температуры. Как следствие,

расчетная оценка вероятности возникновения дефектов в виде микротрещин или разрушения твердой корочки весьма приближительна.

К сказанному следует добавить, что, несмотря на существенное увеличение быстродействия и мощности вычислительных машин, полноценное совместное решение взаимосвязанных задач теплопроводности, диффузии, гидродинамики и термомеханики в режиме реального времени невозможно. Это исключает интеграцию сложных математических моделей в систему управления машинами непрерывного литья заготовок и ограничивает их использование на производстве.

С другой стороны, учет всех перечисленных нюансов при решении практических задач, как правило, не требуется и не приводит к существенному повышению точности результатов. Но определение значимости и необходимости учета того или иного фактора зачастую само по себе является достаточно сложной задачей.

Без сомнения все сказанное не говорит о том, что моделирование таких сложных физических процессов, как кристаллизация сталей и сплавов, не имеет перспектив. Напротив, обозначенные проблемы показывают, насколько широки перспективы таких исследований. И основной задачей этих исследований в конечном итоге должно являться создание инструмента, который позволит управлять процессом кристаллизации слитка вплоть до получения металла с заранее определенными свойствами.

Значительный интерес представляют исследования, целью которых является изучение процессов формирования микроструктуры слитка. Решение данной задачи в полном объеме, т.е. при рассмотрении в качестве объекта моделирования всего слитка, как показывает анализ, выполненный выше, не позволит получить корректные результаты. Целесообразно на первом этапе решить теоретическую задачу роста отдельно взятого дендрита или группы дендритов при варьировании внешними условиями. В рамках этой задачи представляется возможным учесть многие особенности, которые теряются при переходе на макромасштаб. В свою очередь, теоретические данные о микроструктуре литого металла можно в дальнейшем использовать при формулировке полной модели типа (1)–(4).

С практической точки зрения достаточно перспективным представляется вариант, когда при решении задачи кристаллизации в качестве исходных данных будут использоваться текущие показате-

тели процесса разливки (показания датчиков температуры расплава в промежуточном ковше, результаты экспресс-анализа химического состава и др.). Сопоставление получаемых результатов с данными штатных приборов, контролирующих температуру поверхности заготовки по длине разливочной дуги, скорость вытягивания слитка, расход воды в ЗВО и др., позволит более качественно управлять процессом разливки. При условии использования модели, адаптированной к конкретному оборудованию (конкретной МНЛЗ), наличии достаточной базы данных о свойствах разливаемых марок стали и применении компьютеров, способных решать поставленную задачу в режиме «реального» времени, расчетные результаты будут служить основной для системы поддержки принятия решения обслуживающим персоналом.

Литература

1. **Самойлович, Ю.А.** Стальной слиток. Т. 2. Затвердевание и охлаждение / Самойлович Ю.А. [и др.] // Минск: Беларус. навука, – 2000. – 637 с.
2. **Santos C.A.** Modelling of solidification in twin-roll strip casting / C.A. Santos, J.A. Spim, Jr., A. Garcia // Journal of Materials Processing Technology. – 2000. No. 102. – P. 33–39.
3. **Определение границ** двухфазной зоны углеродистых и легированных сталей / С.М. Кабишов [и др.] // Литье и металлургия. – 2015. – № 3 – С. 82–88.
4. **Самойлович, Ю.А.** Исследование термогравитационных конвективных процессов в жидком ядре при затвердевании стальных слитков / Ю.А. Самойлович, В.И. Тимошпольский, Е.В. Калиневич // Литье и металлургия. – № 4. – 2005. – С. 63–67.
5. **Самойлович, Ю.А.** Стальной слиток. Т. 1. Управление кристаллической структурой / Ю.А. Самойлович [и др.] // Минск: Беларус. навука, – 2000. – 583 с.
6. **Арсентьев, П.П.** Металлические расплавы и их свойства / П.П. Арсентьев, Л.А. Коледов // М.: Металлургия. – 1976. – 375 с.
7. **Цаплин, А.И.** Моделирование теплофизических процессов и объектов в металлургии: учеб. пособие/ А.И. Цаплин, И.Л. Никулин. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та, 2011. – 299 с.

8. **Burton, J.A.** The distribution of solute in crystals grown from the melt. Part I. Theoretical / J.A. Burton, R.C. Prim, W.P. Slichter // Journal of Chem. Physics. – 1953, v. 21. – pp. 1987–1991.

9. **Самойлович, Ю.А.** Сопряженная задача теплообмена и гидродинамики в затвердевающем расплаве / Ю.А. Самойлович, Л.Н. Ясницкий, З.К. Кабаков // Теплофизика высоких температур. – 1981. – Т.19. – № 4. – С. 814–820.

10. **Задиранов, А.Н.** Теоретические основы кристаллизации металлов и сплавов / А.Н. [Задиранов, А.М. Кац](#) // Издательство: РУДН. – 2008. – 228 с.

11. **Боли Б.** Теория температурных напряжений / Б. Боли, Дж. Уэйнер. – М.: Физматгиз, 1963. – 251 с.

УДК 669.715

И.В. РАФАЛЬСКИЙ, канд. техн. наук (БНТУ)

КОНТРОЛЬ СОДЕРЖАНИЯ ТВЕРДОЙ ФРАКЦИИ В ЖИДКО-ТВЕРДОФАЗНЫХ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ ПОЛУЧЕНИЯ ЛИТЕЙНЫХ И ДИСПЕРСНО- УПРОЧНЕННЫХ АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КВАРЦЕВЫХ МАТЕРИАЛОВ

Введение. Важной задачей при получении изделий из литейных и дисперсно-упрочненных алюминиевых сплавов с использованием жидко-твердофазных (ЖТ) технологий литья (реолитье, комполитье) является обеспечение контроля состояния расплавов металлических и композиционных материалов (суспензий) в интервале между температурами ликвидус и солидус [1, 2]. При выборе технологических маршрутов получения и обработки ЖТ-суспензии на основе системы Al/SiO₂, прежде всего, необходимо иметь информацию о температурах фазовых превращений и содержании твердой фракции, выделившейся из расплава при данной температуре во время его затвердевания.

При затвердевании сплава, полученного из композиционной суспензии Al/SiO₂, на кривых охлаждения появляются изменения, которые связаны, согласно принципу непрерывности Н.С. Курнакова,