



ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ПРОГНОЗИРОВАНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ МЕТАЛЛА СВАРНЫХ ШВОВ ПРИ СВАРКЕ ВЫСОКОПРОЧНЫХ СТАЛЕЙ (ОБЗОР)

Д. Ю. ЕРМОЛЕНКО, В. В. ГОЛОВКО

ИЭС им. Е. О. Патона НАНУ. 03680, г. Киев-150, ул. Боженко, 11. E-mail: office@paton.kiev.ua

Проведен анализ современного состояния проблем численного моделирования и прогнозирования микроструктуры металла сварных швов ВПНЛ сталей. Проанализированы современные подходы к компьютерному моделированию микроструктуры сварного шва с точки зрения прогнозирования микроструктуры и свойств металла швов с учетом влияния на них неметаллических включений. Рассмотрены общие положения проблемы моделирования процесса образования и развития неметаллических включений в металле сварного шва. Рассмотрен термодинамический подход к прогнозированию микроструктуры металла шва и его недостатки. Выполнен анализ особенностей моделирования процесса кристаллизации металла в сварочной ванне. Отмечены теоретические модели роста дендрита по Иванцову, KGT-теории; описаны ограничения аналитического моделирования. Проведен критический анализ численных моделей дендритной кристаллизации. Сделан вывод, что наиболее адекватных и экспериментально обоснованных результатов моделирования роста дендритов с учетом влияния неметаллических включений стоит ожидать от метода клеточных автоматов, который необходимо модифицировать с учетом возможностей аналитических и численных моделей. Такой подход сопряжен с вычислительной простотой и отсутствием необходимости определения ряда физических констант для реальных материалов. Библиогр. 53, рис. 3.

Ключевые слова: сварной шов, микроструктура, первичная структура, дендриты, неметаллические включения, численное моделирование, прогнозирование микроструктуры

Основной целью при выборе технологии сварки и сварочных материалов является возможность влияния на формирование микроструктуры металла сварного шва с помощью выбора процесса сварки, варьирования его параметрами и химическим составом металла сварного шва [1, 2].

Процесс формирования микроструктуры металла сварных швов носит явно выраженный наследственный характер. Вторичная микроструктура, которая обеспечивает высокие показатели работоспособности сварного шва, наследует определенные параметры первичной структуры, формирующейся в результате эпитаксиального роста дендритов.

Рассмотрим схему (рис. 1), на которой обобщены современные направления в моделировании образования структуры металла сварного шва [3, 4]. Моделирование процесса формирования структуры металла сварного соединения делят на две основные группы — макро- и микромоделирование.

Кратко рассмотрим существующие модели, описывающие влияние каждого из этих факторов на структурообразование на микроуровне.

Модели формирования неметаллических включений. Включения формируются в сварных

швах в результате взаимодействия растворенного алюминия, титана, кремния и марганца с кислородом, азотом, углеродом и серой. Включения характеризуют по объемной доле, размеру, химическому составу, морфологии и типу соединений на поверхности, что влияет на дальнейшее твердофазное преобразование. Например, включения, содержащие в поверхностном слое большое количество титана, способствуют формированию игольчатого феррита [5, 6].

В работе [7] К. С. Hseih описал термодинамику формирования неметаллических включений в интервале температур от 2300 до 1800 К и показал, что и простые, и сложные оксиды формируются при различных температурах. Аналогичный подход был использован и в работе [8] Т. Koseki. Модель, описывающая кинетику реакции одновременного формирования оксидов, в соответствии с которой содержание оксидов, их морфология и температура образования изменяются в зависимости от химического состава расплавленного металла шва, приведена в работах [9, 10].

Данные модели позволяют учитывать особенности формирования неметаллических включений, но никак не описывают их влияние как на движение фронта кристаллизации в сварочной ванне, так и на морфологию и размеры структурных составляющих металла шва.



Рис. 1. Схема моделирования структуры металла сварного шва

Термодинамические и кинетические модели на базе фазовых диаграмм. Такие модели основываются на методе расчета фазовых диаграмм (CALculation of PHase Diagrams «CALPHAD») [11]. Техника CALPHAD позволяет использовать обширную базу доступной термодинамической информации (термодинамические данные и данные фазовых равновесий) для подбора параметров модели и описания энергии Гиббса отдельных кристаллографических фаз. Энергия Гиббса каждой фазы описывается соответствующей термодинамической моделью и зависит от физических и химических свойств фазы. Эти функции энергии Гиббса, учитывающие химический состав и температурную зависимость, были получены путем критической оценки двойных и тройных диаграмм, а затем уточнялись с помощью программного обеспечения Thermo-Calc [12]. Основным недостатком термодинамических моделей является отсутствие возможности учета кинетики процессов, что весьма актуально в случае кристаллизации сварных швов.

Кинетические модели, основанные на диффузионно-контролируемом росте, могут быть интегрированы с термодинамическими моделями для получения ценной информации о эволюции микроструктуры [13]. С их использованием возможно проведение расчетов влияния скорости охлаждения на финальную микроструктуру сварного шва.

Модели данного типа могут быть использованы только при наличии определенных фазовых диаграмм в базе данных. Построение новых диаграмм требует большого объема экспериментальных работ. Кроме того, в данных моделях нельзя

учесть влияние неметаллических включений на формирование составляющих микроструктуры.

Моделирование твердофазных преобразований в процессе охлаждения. Окончательная микроструктура сварного шва образуется в результате твердофазных превращений при охлаждении металла от солидуса до комнатной температуры.

Наиболее известные инструменты были разработаны А. Schaeffler и модифицированы в виде WRC-1992-диаграмм. В последующие годы были разработаны новые методы. Один из них [14] основан на сравнении термодинамической стабильности феррита и аустенита и по точности сопоставим с WRC-1992-диаграммами, хотя может быть применен к более широкому спектру сплавов. Более точные результаты, чем WRC-1992-диаграммы на 40 % показывает подход, основанный на нейронной сети [15].

В случае низколегированных сталей микроструктура сварного шва может быть спрогнозирована с помощью моделей Bhadeshia, рассмотренных в работе [16], однако она не учитывает наследственного характера образования финальной микроструктуры сварного шва, так как рассматривает только превращение аустенитного зерна. Для моделирования структуры в металле ЗТВ может быть использована модель Ashby [17], работающая в дополнении с классическими работами N. Yurioka [18].

Данные модели способны предсказывать количественные соотношения фаз в финальной структуре металла шва исходя из химического состава и скорости охлаждения металла шва, но не дают информации о влиянии неметаллических включе-

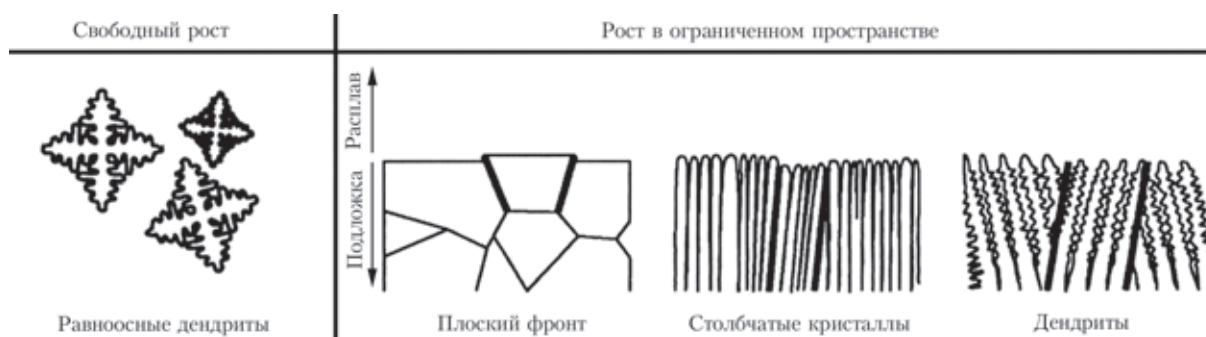


Рис. 2. Возможные кристаллизационные морфологии металла сварных швов [20]

ний на процесс ее формирования. Чтобы понять как именно развивается структура металла шва в процессе охлаждения и определить влияние включений на движение фронта первичной кристаллизации необходимо рассмотреть кристаллизацию металла сварочной ванны как процесс перехода жидкой фазы в твердую.

Кристаллизация металла в сварочной ванне. Условия затвердевания металла определяют структуру, однородность и прочность литых изделий в целом. Знание процессов кристаллизации при обычном литье металла имеет прямое отношение к процессам сварки плавлением, которые могут рассматриваться как «литье в миниатюре» [19].

Процесс кристаллизации металла в сварочной ванне контролирует размер и форму зерен, дефектность шва (пористость и горячие трещины). Есть некоторые сходства в кристаллизации слитка и кристаллизации сварочной ванны, но моделирование кристаллизации расплава металла в зоне сварочного шва осложняется такими факторами [1]:

- динамический характер процесса сварки;
- неопределенность формы сварочной ванны;
- эпитаксиальный рост (рост кристалла на подложке и, как следствие, наследование кристаллографической ориентации подложки);
- изменение градиента температуры и скорости в различных областях сварочной ванны.

При кристаллизации сплавов, в зависимости от условий охлаждения, возможны два варианта кристаллизации, которые отличаются путем отвода тепла от поверхности кристаллизации [20]:

- свободный рост в переохлажденном расплаве. В таком случае в основном образуются равноосные дендриты;
- направленная кристаллизация или рост в ограниченном пространстве. В таком случае в основном образуются плоские, столбчатые или дендритные структуры (рис. 2).

В сварочной ванне затвердевание происходит из уже существующей твердой подложки и, следовательно, образование новых зародышей незначительно и ими можно пренебречь. Для контроля роста зародышей используют модификаторы и динамические методы, такие как перемешивание

расплава в сварочной ванне и колебания сварочной дуги. Для описания влияния этих факторов модели тепло- и массообмена необходимо связать с вероятностными моделями, такими как клеточные автоматы или детерминированные модели с использованием фундаментальных уравнений зарождения [9].

Образование микроструктуры во время роста зародыша контролируется процессами на границе раздела твердой и жидкой фаз. Стабильность этой границы раздела определяется термическими условиями и химическим составом в непосредственной близости от границы раздела. В зависимости от этих условий может происходить линейный, ячеистый (сотовый) или дендритный рост кристаллов. Энергетически выгодным является рост кристаллов в направлении теплового потока, что необходимо учитывать при прогнозировании микроструктуры металла сварного шва [21].

Поскольку основным механизмом кристаллизации при сварке сталей [20] является рост дендритов в направлении теплового потока, целесообразно рассмотреть модели, описывающие именно этот процесс и возможности этих моделей.

Моделирование роста дендритов. Моделирование процесса кристаллизации является важным в понимании явлений фазовых переходов, поэтому теоретический анализ и моделирование этих процессов многие десятилетия привлекали внимание ученых. Значительный прогресс достигнут в теоретическом анализе роста дендритов, что показано в работе R. Trivedi и W. Kurz [22].

Большинство аналитических моделей рассматривают стационарный рост изолированного дендрита, предполагая, что все дендриты сохраняют одинаковую форму. В этом случае кончик дендритов считается параболом вращения [23].

При использовании численных методов для решения задачи диффузии вокруг дендритов или кончика ячеистого дендрита предположение об иглоподобной форме может быть опущено, а также можно учесть анизотропию поверхностного натяжения на границе разделения жидкой и твердой фаз [24].



При применении современных методов моделирования, таких как клеточные автоматы [25, 26] и фазовые поля [27], кристаллизационные морфологии могут быть смоделированы без специальных предположений о форме дендритов или ячеек.

Рассмотрим более подробно данный вопрос.

Стабильность дендритов. В работе [28] Т. Koseki, исходя из теоретического анализа, показал, что дендриты или ячейки (клетки) появляются во время кристаллизации в широком диапазоне условий сварки плавлением.

Дендритные структуры образуются в результате неустойчивости плоской границы во время затвердевания. Ранее теория переохлаждения W. A. Tiller и соавторов [29] и теория возмущений W. W. Mullins и R. F. Sekerka [30] объяснили это явление. При кристаллизации сплавов в режиме плоской границы область переохлажденного расплава впереди этой границы образуется за счет перехода растворенного вещества из твердого состояния в жидкую фазу. С увеличением содержания растворенного вещества температура плавления сплава уменьшается. Таким образом, если появится возмущение на границе раздела твердой и жидкой фаз, то она может развиваться в дендрит, кончик которого отталкивает растворенное вещество не только перпендикулярно фронту кристаллизации, но и в стороны. В связи с этим переохлаждение становится меньше по сравнению с переохлаждением для плоской границы. Теория возмущений дает нижний и верхний пороги для скорости затвердевания

$$v_s^{\min} = \frac{GD_l}{\Delta T_0}, \quad (1)$$

$$v_s^{\max} = \frac{\Delta T_0 D_l}{k\Gamma_k}, \quad (2)$$

где G — градиент температуры в жидкости на границе; D_l — коэффициент диффузии растворенного компонента в расплаве; ΔT_0 — равновесный диапазон охлаждения; k — равновесный коэффициент распределения растворенного вещества; Γ_k — коэффициент Гиббса–Томсона.

Для растворов внедрения, таких как сплавы системы Fe–C, при типичном для сварки градиенте температуры $G = 2,0 \cdot 10^4$ °C/м, исходя из уравнений (1) и (2), можно рассчитать пороговые значения скорости кристаллизации, которые равны $v_s^{\min} = 10^{-5}$ м/с и $v_s^{\max} = 20$ м/с для сталей. Таким образом, существует возможность плоского режима кристаллизации при сварке, если скорость затвердевания является крайне низкой (порядка мкм/с) или очень высокой (порядка м/с). Однако в большинстве практических случаев скорость затвердевания лежит в интервале $v_s^{\min} - v_s^{\max}$. Ис-

ключение составляет начальная зона кристаллизации, расположенная на поверхности контакта сварочной ванны с основным металлом, где скорость кристаллизации начинается с нуля. Верхний порог скорости кристаллизации не достигается при обычной сварке плавлением, так как при увеличении скорости сварки сварочная ванна приобретает форму капли и максимальная скорость затвердевания приближается к ограниченной величине, которая всегда меньше, чем скорость сварки.

Приведенный выше теоретический анализ стабильности плоского фронта кристаллизации показывает, что при сварке сталей в сварочной ванне кристаллизация происходит в виде дендритов или клеток (ячеек). Это подчеркивает важность исследования и моделирования такого рода структур для понимания сварочных явлений.

Аналитические модели. *Решение Иванцова.* Первое последовательное решение задачи о диффузии вокруг изолированного кончика иглы как роста кристалла в переохлажденном расплаве было опубликовано в работе [31] Г. П. Иванцовым. Изотермическая поверхность вокруг кончика дендрита была представлена как совместный параболоид вращения. Кончик дендрита имеет форму параболоида вращения, так как это соответствует границе раздела между жидкой и твердой фазами, которая считается изотермической. Аналитическое выражение, связывающее радиус закругления дендрита R_t и скорость роста v_t с температурой кончика дендрита T_p , представленное в работе [31], приведено в уравнении:

$$T_t - T_\infty = \frac{\Delta H}{c_m} Iv(P_t); \quad (3)$$

$$Iv(P_t) = P_t \exp(P_t) Ei(P_t), \quad P_t = \frac{v_t R_t}{2\alpha_\tau};$$

где T_∞ — температура расплава в бесконечности; ΔH — энтальпия плавления; C_m — теплоемкость расплава; α_τ — коэффициент термодиффузии; P_t — тепловое число Пекле; Ei — интегральная показательная функция; R_t — радиус закругления дендрита; v_t — скорость роста; Iv — функция Иванцова.

Применив аналогию между тепловой диффузией и диффузией растворенного вещества, при условии постоянного состава на кончике дендрита, аналогичное выражение может быть получено для концентрационных дендритов:

$$C_t - C_0 = C_i(1 - k)Iv(P); \quad P = \frac{v_t R_t}{2D_l}, \quad (4)$$

где C_0 — номинальный состав бинарного сплава; P — концентрационное число Пекле.

Для заданной температуры кончика или его состава данная модель прогнозирует только значе-



ние числа Пекле или произведение $v_i R_i$. Это означает, что возможно несколько вариантов решения для дендритов с радиусом кончика, обратно пропорциональным скорости затвердевания.

В случае ограниченной направленной кристаллизации температура кончика дендрита контролируется диффузией растворенного вещества. Предполагая, что фазовая диаграмма линейна, переохлаждение на кончике может быть выражено формулой

$$\Delta T_i = -m(C_i - C_0), \quad (5)$$

где m – наклон линии ликвидуса.

Подставляя значение C_i из уравнения (4) и принимая во внимание следующее соотношение для равновесного диапазона плавления $\Delta T_0 = T_i - T_s = mC_0(1 - k)/k$, переохлаждение на кончике дендритов можно записать в виде:

$$\Delta T_i = \frac{k\Delta T_0 I_v(P)}{1 - (1 - k)I_v(P)}. \quad (6)$$

Если скорость затвердевания определяется процессом (например, видом источника тепла при сварке), существует несколько решений для нахождения переохлаждения на кончике дендрита. Таким образом, дополнительное ограничение необходимо для выбора уникального радиуса закругления дендрита из множества возможных решений, предсказанных моделью Иванцова.

С учетом влияния межфазной энергии уравнение (6) модифицируется в уравнение (7), которое соединяет модель Иванцова и стабилизирующий эффект капиллярности:

$$\Delta T_i = \frac{k\Delta T_0 I_v(P)}{1 - (1 - k)I_v(P)} + \frac{2\Gamma_k}{R_i}. \quad (7)$$

Поскольку модель Иванцова действительна только для изотермических поверхностей, а эффект капиллярности проявляется только вдоль неизотермической поверхности, модификации данной модели являются лишь приближительными. Более подробные решения для неизотермических интерфейсов были предложены в работах [32, 33]. Добавление термина капиллярности делает лишь очень небольшую область решений нестабильными, но это не устраняет множественность результатов, предсказанных моделью Иванцова. Необходимо дополнительное ограничение для того, чтобы позволить системе выбрать уникальное значение радиуса кончика дендрита. Так как отношение скорости и радиусов имеет экстремальный характер, было доказано, что выбор радиуса кончика дендрита происходит при экстремальном значении, которое соответствует максимальной скорости роста при данном переохлаждении или минимальному переохлаждению при данной скорости роста. При этом следует отметить, что экспериментальные результаты, приведенные в рабо-

те [34] Н. С. Huang и М. Е. Glicksman, поставили под сомнение это предположение.

КГТ-теория. Авторы работы [35] J. S. Langer и J. Muller-Krumbhaar предложили заменить принцип максимальной скорости критерием устойчивости формы $v_i R_i^2 = \text{const}$. Они обнаружили, что массивные дендриты имеют нестабильный кончик, в то время как те, которые являются слишком узкими и быстро растущими, как правило, замедляются из-за нестабильности бокового ветвления. В настоящее время это наиболее популярный критерий выбора, который называют «предельной стабильностью». Основываясь на этой концепции, авторы работ [23, 36] разработали теоретическую модель для направленной кристаллизации, которая известна как КГТ-модель. Считая, что радиус кончика дендрита в стационарном состоянии равен критической длине волны нестабильной границы твердой и жидкой фаз ($R_i = \lambda_s$), и используя решение Иванцова для транспортной проблемы, получены уравнения (8)–(11) для критерия выбора параметров кончика дендрита:

$$Av_i^2 - Bv_i + G = 0, \quad (8)$$

$$A = \frac{\Gamma_k}{4\sigma^* P^2 D_i^2}, \quad (9)$$

$$B = \frac{k\Delta T_0}{1 - (1 - k)I_v(P)} \frac{\xi_c}{D_i}, \quad (10)$$

$$\xi_c = 1 - \frac{2k}{\left(1 + \frac{1}{\sigma^* P^2}\right)^{0.5} - 1 + 2k}, \quad (11)$$

где σ^* – константа устойчивости, которая определяется экспериментально.

Если рассмотреть критическую длину волны нестабильной границы раздела фаз на кончике дендрита λ_s , то для того, чтобы она соответствовала плоской границе, теоретическое значение σ^* должно быть равно $1/4\pi^2 = 0,0253$. Экспериментальные значения для различных двойных систем, которые варьируются около значения 0,02 [36], хорошо совпадают с этой величиной.

Для заданного значения скорости кристаллизации v_i , число Пекле P может быть найдено путем численного решения уравнения (8). Значение радиуса закругления R_i получают из выражения для P (4). Используя значения P и R_i , переохлаждение на кончике дендрита, и, следовательно, температура T_i может быть рассчитана из уравнения (7), а состав на кончике дендрита из уравнения (4). Таким образом, данные, предоставленные КГТ-моделью, могут быть использованы для сравнения с прогнозами других моделей, включая варианты прямого моделирования кристаллизации.

КГТ-модель была также использована для расчета кинетики роста дендрита с помощью кле-



точных автоматов и моделей виртуального зерна, разработанных для прямого моделирования формирования зеренной структуры в отливках [37] и при сварке [38].

Ограничения аналитического моделирования. Описанные выше и аналогичные [36] аналитические модели были сосредоточены на изолированных дендритах, которые растут либо в переохлажденном расплаве, либо в расплаве с положительным градиентом температуры в стесненных условиях кристаллизации. Задача кристаллизации со свободной границей является чрезвычайно сложной, выше описанные модели являются лишь приближением к физической трактовке проблемы, с целью получения устойчивого аналитического решения. Их ограничения заключаются в росте массива дендритов, в котором диффузионные поля соседних дендритов взаимодействуют друг с другом. Особенно заметно это выражается в невозможности прогнозирования расстояния между стволами дендритов [39]. Кроме того, выше рассмотренные аналитические модели не описывают нестабильности кончика дендрита и, следовательно, развитие вторичных веток дендритов.

Численные модели. Модели McCartney и Hunt. Авторы работ [24, 39] разработали теоретическую модель устойчивого роста массива ячеек и дендритов при положительном градиенте температуры с использованием методов конечных элементов. Они исходили из того, что проблема со свободной границей и границей раздела твердое–жидкое предполагает нахождение в равновесии обеих фаз, а также выполнение дополнительного условия равновесия на границе твердой и жидкой фазы. Это условие относится к температуре границы T_1 и его составу C_1 , кривизне и кинетической мобильности:

$$T_1 = T_M + m(C_1 - C_0) - \Gamma_k k - \frac{v}{\mu_v}, \quad (12)$$

где μ_v – кинетический коэффициент; v – нормальная скорость движения границы раздела.

Данная численная модель устраняет предположение о форме иглы. Кроме того, диффузия тепла и растворенного вещества рассмотрены одновременно. Таким образом, модель способна делать реалистичные прогнозы.

Полученные численные результаты указывают на минимум переохлаждения кончика в зависимости от полуширины элементарной ячейки. Самоогласованность формы может быть найдена только при определенных условиях роста [24] и только до определенного максимального значения полуширины. Если предположить, что рост происходит между минимальным переохлаждением на кончике и точкой нестабильности, то численные

результаты согласуются с соответствующими экспериментальными данными. При этом не существует самосогласованной формы выше определенной скорости роста, что делает невозможным использование этого метода при переходе от ячеистой к дендритной морфологии с хорошо развитым боковым ветвлением, которые не могут быть смоделированы этим методом.

Анализ J. D. Hunt и S. L. Lu, прогнозирование междендритного расстояния и структуры. Используя модифицированный вариант описанной выше численной модели, Hunt и Lu [40] изучили механизмы регуляции расстояния в растущем массиве ячеек или дендритов. Для того чтобы сделать анализ проще и быстрее, они исключили решение уравнения теплопроводности. Вместо этого тепловой поток был описан путем введения движущегося линейного температурного поля, которое меняется только в осевом направлении. Кроме того, была разработана очень простая модель для нескольких ячеек, которая изучает взаимодействия центральной ячейки с шестью окружающими клетками. На основе этой модели был предложен критерий отбора минимального расстояния до стабильной клетки. Одним из наиболее важных результатов модели является то, что она прогнозирует небольшой диапазон расстояний для стабильной клетки и отдельный диапазон дендритов.

Приведенные выше результаты обобщены в работе [41], где численные данные в безразмерной форме были оснащены аналитическими выражениями для определения на границе раздела фаз концентрационного переохлаждения и переохлаждения за счет кривизны поверхности («Curvature under cooling») как для ячеистого механизма затвердевания, так и для дендритного. Формулы, приведенные в этой работе, хорошо сочетаются с экспериментами и с другими моделями, поскольку они представляют зависимости первичного расстояния между дендритами, а также переохлаждения на кончиках для массивов ячеек и дендритов, в зависимости от параметров кристаллизации (скорость, градиент температуры и свойства материала).

Пространственные (прямые) методы моделирования. Прямые методы моделирования подразумевают, что моделируется вся дендритная структура или существенная ее часть. Для этого эволюция твердой и жидкой фаз должны рассчитываться в пространстве и времени. Это может быть реализовано явным отслеживанием поверхности раздела фаз или неявно, как в клеточных автоматах или модели фазового поля, которые описаны ниже.

Клеточные автоматы. Модель Brown. В последние два десятилетия клеточные автоматы

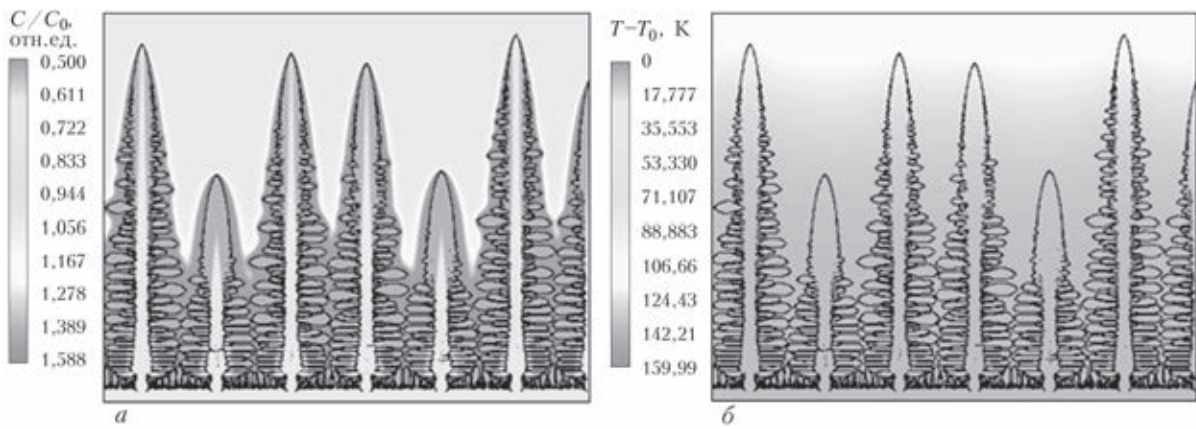


Рис. 3. Результат моделирования направленного дендритного роста в переохлажденном расплаве Fe–C [49]: *a* — распределение концентрации (C/C_0); *b* — распределение температуры ($T - T_0$)

были использованы для имитации различных фазовых превращений в материалах [42, 43]. Этот метод моделирования использует регулярную решетку, которая делится на равные по размеру клетки, как правило, это квадраты в 2D и кубы в 3D. Каждая ячейка характеризуется ее состоянием, например, жидкая фаза, твердая фаза, фаза 1, фаза 2 и т. д. Ячейка может также содержать одну или несколько переменных, например, значения температуры и/или химический состав. Применяя правила перехода, клетка может менять свое состояние итеративно во времени («степинг»). Правила перехода принимают во внимание состояние самой клетки, ее соседей и их переменные. Это очень простой способ для изучения эволюции системы в ответ на технологические параметры и переменные. Теоретическая и практическая значимость применения модели клеточных автоматов для моделирования явления кристаллизации была рассмотрена в работах S. G. R. Brown и J. A. Spittle [42] и Ch. A. Gandin и M. Rappaz [37].

Иллюстрация использования моделирования клеточными автоматами для имитации дендритных морфологий и кинетики роста была представлена в работе [25]. Авторы рассчитывают свободный рост неизотермических дендритов в переохлажденных расплавах для однокомпонентных систем. Модель включает правила для учета тепловой диффузии, влияние кривизны на равновесную температуру кристаллизации и эволюцию скрытой теплоты. Спрогнозированная кинетика роста удовлетворительно согласуется с известными экспериментальными и теоретическими результатами. Но так как количественная физика процесса практически не включена в модель, с помощью этой модели возможно только качественное изучение факторов, определяющих развитие дендритов в переохлажденных расплавах.

Модель Sasikumar и Sreenivasan. В работе [26] представлена 2D-модель роста дендритов в однокомпонентной системе с элементами метода кле-

точных автоматов, похожая на модель S. G. R. Brown, описанную выше, но расширенная за счет метода конечных элементов для решения уравнения теплопроводности. Таким образом, модель Sasikumar и Sreenivasan представляет собой сочетание физического и эмпирического подходов, т. е. движущая сила роста дендрита рассчитывается на основе реалистичной физической модели, в то время как эмпирические правила, введенные в метод, используются для учета кривизны поверхности, анизотропии роста и шума. Нельзя ожидать, что модель даст количественно правильные результаты, но она может быть использована для изучения тенденций в изменении морфологии дендритов в зависимости от свойств материала и параметров процесса.

В более поздних работах эта модель была модифицирована для иллюстрации влияния частиц на морфологию дендритов [44] и для моделирования роста дендритов в бинарных сплавах [45].

Результаты П. К. Галенко и М. Д. Кривилева. Данный подход был использован в работах [46–49] и показал адекватные результаты при моделировании роста дендритов (рис. 3) как при малых скоростях роста кристаллов (диффузионно-лимитируемое затвердевание), так и для высокоскоростного роста (диффузионно-лимитируемое и кинетически контролируемое затвердевание). Также в работе [46] приведен ряд результатов для различных сплавов (Fe–C, Cu–Ni, Ni–B, Ag–Cu).

Метод фазового поля. Популярность метода фазового поля в последние годы быстро увеличивается [27, 50, 51]. Метод основан на фундаментальных физических принципах из термодинамики и кинетики и широко используется для моделирования широкого спектра задач фазового перехода. Основные принципы метода и его применение для проблемы затвердевания могут быть описаны на основе работы [27], в которой была адаптирована модель Steinbach [52] для фазовых превращений в сталях, в том числе роста дендри-



тов, роста дендритов с перетектической реакцией, роста зерна и аллотриоморфного образования феррита.

Метод фазового поля отбрасывает парадигму четкой границы, вводя параметр ϕ , который указывает на присутствие ($\phi = 1$) или отсутствие ($\phi = 0$) определенной фазы [27]. На границе ϕ изменяется резко, но непрерывно в нескольких точках сетки. Истинное положение границы предполагается в точке, где $\phi = 0,5$. Физические величины являются функциями параметра порядка. Исходя из минимизации функционала свободной энергии системы получают эволюционные уравнения для различных фаз. В этих уравнениях переохлаждение для каждой пары фаз включены как функции местной концентрации растворенного вещества. В рассматриваемой модели [27] концентрация обрабатывается как внешнее поле, а уравнения диффузии приводятся к ϕ . Таким образом, моделирование эволюции микроструктуры при фазовых превращениях, связанное с множеством нелинейных дифференциальных уравнений для фазы ϕ и полей концентрации решается численно.

Так как модели фазового поля имеют дело с численным решением дифференциальных уравнений, они легко могут быть сформулированы как в 2D, так и в 3D [53]. Расчеты, однако, являются вычислительно очень интенсивными.

Несмотря на то, что они должны дать количественные результаты, их применение для моделирования процессов в существующих материалах требует знания их физических свойств, которые трудно определить. Однако этот метод становится одним из самых мощных и перспективных в области моделирования фазовых переходов в различных системах.

В заключение следует отметить, что кристаллизация в сварочной ванне является первым этапом формирования микроструктуры при сварке плавлением, который влияет на конечную микроструктуру и, следовательно, механические и технологические свойства сварного шва. Основные параметры, управляющие этим процессом, — состав сплава, скорость кристаллизации и градиент температуры перед фронтом кристаллизации.

Для того, чтобы учитывать влияние неметаллических включений на первичную структуру, а как следствие, и на вторичную, следует моделировать рост дендритов в сварочной ванне в процессе охлаждения.

Значительные успехи достигнуты в области аналитического моделирования дендритных структур, которые, в принципе, могут быть применены для сварки. Аналитические модели, однако, ограничиваются рассмотрением изолированных кончиков дендритов. Взаимодействие между

диффузионными полями соседних дендритов не принимаются во внимание. Кроме того, интервал между дендритами может быть предсказан очень грубо и с рядом эмпирических допущений, что не позволяет качественно прогнозировать дендритную структуру металла в ситуации, когда в сварочной ванне содержатся разного рода неметаллические включения.

Численные методы моделирования распространения концентрационного поля вокруг кончика дендрита или ячейки позволяют описать более точно форму иглы, переохлаждение и концентрации как функции условий роста и свойств материала.

Аналитические и численные модели развития дендритов не учитывают возможности ветвления, огрубления структуры и микросегрегации во всей двухфазной зоне, так как они предполагают полную симметрию и описывают лишь границу раздела фаз.

Прямые методы моделирования, такие как клеточные автоматы и метод фазового поля, потенциально не нуждаются в ограничениях и способны имитировать всю структуру во время кристаллизации. Применяя их, можно получить температурные или концентрационные поля перед фронтом кристаллизации, геометрию кончика дендритов, первичные и вторичные расстояния между ветвями дендритов, а также микросегрегации в подплавленной зоне. Однако, поскольку эти методы основаны на численных решениях основных уравнений и/или правилах перехода, влияние размерности должно быть исследовано и сведено к минимуму.

Положительный результат применения данных моделей применительно к решению практических задач может быть получен в том случае, когда прямые методы моделирования базируются на результатах, полученных с использованием аналитических и численных моделей.

Исходя из сказанного выше, можно сделать вывод, что наиболее адекватных и показательных результатов моделирования роста дендритов с учетом влияния неметаллических включений стоит ждать от метода клеточных автоматов, который необходимо модифицировать с учетом возможностей аналитических и численных моделей. Преимущество данного метода по сравнению с методом фазового поля заключается в его вычислительной простоте и отсутствии необходимости определения некоторых физических свойств реальных материалов, таких как подвижность и анизотропия.

1. David S. A., Babu S. S., Vitek J. M. Recent advances in modeling and characterization of weld microstructure // Sci. and Techn. of Weld. and Joining. – 2001. – 6, № 6. – P. 341–346.



2. *Trends in welding research: proceedings of the 5th Intern. conf.*: M. L. Santella, S. S. Babu, B. Riemir, Z. Feng: Materials Park, OH, ASM International, 1999. – P. 605–609.
3. *Grong O. Metallurgical modeling of welding.* — The Institute of Materials, London, 1997. – 605 p.
4. *Mathematical models of transport phenomena associated with arc-welding processes: a survey* / P. G. Jönsson, J. Szekeley, R. T. T. Choo, T. P. Quinn // Modeling and Simulation in Material Sci. and Eng. – 1994. – № 2. – P. 995–1016.
5. *Evans G. M., Bailey N. Metallurgy of Basic Weld Metal.* – Cambridge: Abington, 1997. – 432 p.
6. *Kluken A. O., Grong O. Mechanisms of inclusion formation in Al–Ti–Si–Mn deoxidized steel weld metals* // Metallurgical Transactions A. – 1989. – 20A. – P. 1335–1349.
7. *Calculation of inclusion formation in low alloy steel welds* / K. C. Hsieh, S. S. Babu, J.M. Vitek, S. A. David // Mat. Sci. Eng. – 1996. – A215. – P. 84–91.
8. *Koseki T., Ohkita S., Yurioka N. Thermodynamic study of inclusion formation in low alloy steel weld metals* // Sci. and Techn. of Weld. and Joining. – 1997. – № 2. – P. 65–69.
9. *Development of macro- and microstructures of C–Mn low alloy steel welds –inclusion formation* / S. S. Babu, S. A. David, J. M. Vitek et al. // Mat. Sci. and Techn. – 1995. – № 11. – P. 186–199.
10. *Effect of high-energy-density welding processes on inclusion and microstructure formation in steel welds* / S. S. Babu, F. Reidebach, S. A. David et al. // Sci. and Techn. of Weld. and Joining. – 1999. – № 4. – P. 63–73.
11. *Manson P. Program aids in modeling welding thermodynamics* // Welding J. – 2012. – № 12. – P. 28–30.
12. *Thermo-calc and DICTRA, computational tools for materials science* / J. O. Andersson, T. Helander, L. Höglund et al. // Calphad. – 2002. – № 26. – P. 273–312.
13. *Babu S. S. Thermodynamic and kinetic models for describing microstructure evolution during joining of metals and alloys* // Intern. Mat. Review. – 2009. – № 54(6). – P.333–367.
14. *New model for prediction of ferrite number of stainless steel welds* / S. S. Babu, J. M.Vitek, Y. S. Iskander, S. A. David // Sci. and Techn. of Weld. and Joining. – 1997. – № 2(6). – P. 279–285.
15. *Vitek J. M., Iskander Y. S., Oblow E. M. Improved ferrite number prediction in stainless steel arc welds using artificial neural networks.* – Pt. 1: Neural network development // Welding J. – 2000. – № 79(2). – P. 33–46.
16. *Bhadেশia H. K. D. H., Svensson L. E., Gretoft B. A model for the development of microstructure in low-alloy steel (Fe–Mn–Si–C) weld deposits* // Acta Met. – 1985. – № 33. – P. 1271–1283.
17. *Ion J. C., Easterling K. E., Ashby M. F. A second report on diagrams of microstructure and hardness for heat-affected zones in welds* // Ibid. – 1984. – № 32(11). – P. 1949–1962.
18. *Kasuya T., Yurioka N. Carbon Equivalent and Multiplying Factor for Hardenability of Steel* // Welding J. – 1993. – № 72. – P. 263–268.
19. *Smallman R. E., Bishop R. J. Modern physical metallurgy and materials engineering.* – Oxford: Auckland Boston Johannesburg Melburn New Delhi, 1999. – 438 p.
20. *Pavlyk V. Modeling and direct numerical simulation of dendritic structures under solidification conditions during fusion welding.* – Aachen: Shaker Verlag GmbH, 2004. – 147 p.
21. *David S. A., Babu S. S., Vitek J. M. Welding: solidification and microstructure* // JOM. – June 2003. – Режим доступа: <http://www.tms.org/pubs/journals/JOM/0306/David-0306.html>.
22. *Trivedi R., Kurz W. Dendritic growth* // Intern. Mat. Reviews. – 1994. – № 39(2). – P. 47–74.
23. *Kurz W., Giovanola B., Trivedi R. Theory of microstructure development during rapid solidification* // Acta Met. – 1986. – № 34(5). – P. 823–830.
24. *McCartney D. G., Hunt J. D. A numerical finite difference model of steady state cellular and dendritic growth* // Metallurgical Transactions A. – 1984. – 15A. – P. 983–994.
25. *Brown S. G. R., Williams T., Spittle J. A. A cellular automaton model of the steady-state «free» growth of a non-isothermal dendrite* // Acta Met. et Mat. – 1994. – № 42(8). – P. 2893–2898.
26. *Sasikumar R., Sreenivasan R. 2-dimensional simulation of dendrite morphology* // Ibid. – 1994. – № 2(7). – P. 2381–2386.
27. *Tiaden J., Grafe U. A phase-field model for diffusion and curvature controlled phase transformations in steels* // Proc. of the Intern. Conf. on Solid-Solid Phase Transformations'99, Kyoto, Japan. – 1999. – P. 737–740.
28. *Koseki T. Solidification and solidification structure control of weld metals* // Welding Intern. – 2001. – № 16(5). – P. 347–365.
29. *The redistribution of solute atoms during the solidification of metals* / W. A. Tiller, K. A. Jackson, J. W. Rutter, B. Chalmers // Acta Met. – 1953. – № 1. – P. 428–437.
30. *Mulins W. W., Sekerka R. F. Stability of a planar interface during solidification of a dilute binary alloy* // J. of Appl. Phys. – 1964. – № 35(2). – P. 444–451.
31. *Иванцов Г. П. Температурное поле вокруг сферического, цилиндрического и иглообразного кристалла растущего в переохлажденном расплаве* // Докл. АН СССР. – 1947. – № 58(4). – С. 567–569.
32. *Темкин Д. Е. О скорости роста кристаллической иглы в переохлажденном расплаве* // Там же. – 1960. – № 132(6). – С. 1307–1310.
33. *Trivedi R. Growth of dendritic needles from a supercooled melt* // Acta Met. – 1970. – № 18(3). P. 287–296.
34. *Huang H. C., Glicksman M. E. Fundamentals of dendritic solidification: Steady-state tip growth* // Ibid. – 1981. – № 29. – P. 701–715.
35. *Langer J. S., Müller-Krumbhaar J. Stability effects in dendritic crystal growth* // J. of Crystal Growth. – 1977. – № 42. – P. 11–14.
36. *Trivedi R., Kurz W. Dendritic growth* // Intern. Mat. Reviews. – 1994. – № 39(2). – P. 47–74.
37. *Gandin Ch. A., Rappaz M. A coupled finite element-cellular automaton model for the prediction of dendritic grain structures in solidification processes* // Acta Met. – 1994. – № 42(7). – P. 2233–2246.
38. *Ploshikhin V. V., Bergmann H. W. Correlation between the welding parameters and the grain structure for the fast moving high power line heat source in a thin plate.* – London: The Institute of Materials, 2001. – Mathematical Modelling of Weld Phenomena 5. – P. 269–281.
39. *Hunt J. D., McCartney D. G. Numerical finite difference model for steady state cellular array growth* // Acta Met. – 1987. – № 35. – P. 89–99.
40. *Lu S. L., Hunt J. D. A numerical analysis of dendritic and cellular array growth: the spacing adjustment mechanisms* // J. of Crystal Growth. – 1992. – № 123. – P. 17–34.
41. *Hunt J. D., Lu S. Z. Numerical modelling of cellular/dendritic array growth: Spacing and structure predictions* // Met. and Mat. Transactions A. – 1996. – № 27A(3). – P. 611–623.
42. *Spittle J. A., Brown S. G. R. A 3d cellular automaton model of coupled growth in two component systems* // Acta Met. et Mat. – 1994. – № 42(6). – P. 1811–1815.
43. *Dilthey U., Reichel T., Pavlik V. A modified cellular automaton model for grain growth simulation.* – London: The Institute of Materials, 1997. –Mathematical Modelling of Weld Phenomena 3. – P. 106–113.
44. *Kurien L., Sasikumar R. Simulation of dendrite morphology in the presence of particles* // Acta Met. – 1996. – № 44(8). – P. 3385–3395.
45. *Sasikumar R., Jacob E., George B. Simulation of dendrite growth in binary alloys* // Scr. Mat. – 1998. – № 38(4). – P. 693–701.
46. *Галенко П. К., Кривилев М. Д. Изотермический рост кристаллов в переохлажденных бинарных сплавах* // Мат. моделирование. – 2000. – 12, № 11. – С. 17–37.
47. *Галенко П. К., Кривилев М. Д. Конечно-разностная схема для моделирования кристаллического структурообразования в переохлажденных бинарных сплавах* // Там же. – 2000. – 12, № 12. – С. 11–23.]



48. *Кривилев М. Д., Галенко П. К.* Моделирование перехода к бездиффузионному затвердеванию при высокоскоростной кристаллизации бинарных сплавов // Вестн. Удмуртского ун-та. – 2008. – № 1. – С. 129–140.
49. *Кривилев М. Д., Галенко П. К.* Программный комплекс для моделирования кристаллического структурообразования в переохлажденных бинарных сплавах: Уч. пос.–Ижевск: Удмуртский ун-т, 1999. – 59 с.
50. *Zhang Y.* Phase field modeling of dendritic growth and coarsening supercooling. – InTech: ISBN: 978-953-51-0113-0. – 2012. –134р. – Режим доступа: <http://www.intechopen.com/books/supercooling/phase-field-modeling-of-dendrite-growth>.
51. *Лебедев В. Г., Данилов Д. А., Галенко П. К.* Об уравнениях модели фазового поля для неизотермической кинетики превращений в многокомпонентной и многофазной системе // Вестн.Удмуртского ун-та. – 2010. – № 1. – С.26–33.
52. *Phase field concept for multiphase systems / I. Steinbach, F. Pezzolla, B. Nestler et al. // Physica. D. – 1996. – № 94(3). – P.135–147.*
53. *Kobayashi R.* A numerical approach to three-dimensional dendritic solidification // Exp. Mat. – 1994. – № 3. — P. 410–423.

Поступила в редакцию 22.11.2013

ВНИМАНИЮ СПЕЦИАЛИСТОВ!

В январе 2014 г. Институт электросварки им. Е. О. Патона НАН Украины передал в эксплуатацию Харьковскому ОАО «Турбоатом» установку СВ-112 для электронно-лучевой сварки пакетов рабочих лопаток паровых турбин. Впервые в практике электронно-лучевой сварки этих изделий применен принцип их однопозиционной загрузки в вакуумную камеру сравнительно небольшого ($0,2 \text{ м}^3$) объема, откачиваемого до рабочего вакуума за время не более 3-х минут.



Ранее для электронно-лучевой сварки этих пакетов использовали установки с вакуумными камерами большого объема, где размещались многопозиционные поворотные столы со сварочной оснасткой для монтажа подлежащих сварке пакетов рабочих лопаток. Но высокая производительность такой установки не может быть востребована в условиях невысокой загрузки турбинного производства. Кроме того, стоимость самой установки и затраты на ее обслуживание достаточно высоки.

Эффективность применения малогабаритной установки с однопозиционной нагрузкой пакетов лопаток подтверждена в процессе ее продолжительного испытания с участием специалистов ОАО «Турбоатом».