

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ ТА НАУКИ УКРАЇНИ

ДНІПРОВСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

**Кафедра прикладної математики**

**Методичні вказівки до самостійної роботи**

**з дисципліни**

**«Чисельні методи у комп'ютерному моделюванні технологічних процесів»**

для здобувачів вищої освіти третього (освітньо-наукового) рівня

докторів філософії спеціальності 113 «Прикладна математика»

за освітньо-професійною програмою «Прикладна математика»

ЗАТВЕРДЖЕНО

Редакційно-видавничою

секцією НМР ДДТУ

від «\_\_» \_\_\_\_\_ 2018 р.

протокол № \_\_\_\_\_

Кам'янське

2018

Методичні вказівки до самостійної роботи з дисципліни «Чисельні методи у комп'ютерному моделюванні технологічних процесів» для здобувачів вищої освіти третього (освітньо-наукового) рівня докторів філософії спеціальності 113 «Прикладна математика» / Укл. С.Є.Самохвалов, О.С.Косухіна – Кам'янське: ДДТУ, 2018. – 55 с.

Укладачі: д.т.н., професор Самохвалов С.Є.

к.т.н., доцент Косухіна О.С.

Відповідальний за випуск : зав. кафедри Самохвалов С.Є.

Рецензент: д.т.н., проф. Шумейко О.О.

(Дніпровський державний технічний університет)

Методичні вказівки затверджені на засіданні кафедри прикладної математики  
протокол № \_\_\_\_ від “\_\_” \_\_\_\_\_ 2018 року

Завідувач кафедри \_\_\_\_\_ ( проф. Самохвалов С.Є. )

(підпис)

“\_\_” \_\_\_\_\_ 2018 року

Методичні вказівки призначені для здобувачів вищої освіти третього (освітньо-наукового) рівня докторів філософії спеціальності 113 «Прикладна математика». В них наведено теоретичний матеріал окремих розділів програми дисципліни, які не викладалися на лекціях.

## ЗМІСТ

1.1. Мета викладання дисципліни	3
1.2. Задачі вивчення дисципліни	3
1.3. Перелік базових дисциплін та тем, засвоєння яких необхідно для вивчення дисципліни	3
1.3. Основні елементи самостійної роботи	5
<i>Тема 5с. Середовища з вільною поверхнею.</i>	5
<i>Тема 9с. Кристалізація у багатофазних середовищах</i>	13
<i>Тема 10с. Кінетика фазових перетворень</i>	42
Перелік посилань	55

## **1.1. Мета викладання дисципліни**

Викладання дисципліни має на меті вивчення основних методів, які застосовуються при створенні математичних (комп'ютерних) моделей технологічних процесів в основі яких лежить динаміка та перетворення багатофазних суцільних середовищ, зокрема в металургійному, хімічному та ін. виробництвах.

## **1.2. Задачі вивчення дисципліни**

Після викладання дисципліни студент повинен знати: основні закономірності, які описують динаміку багатофазних середовищ, а також методи побудови математичних моделей різноманітних процесів у багатофазних середовищах, зокрема гідродинамічних та тепло-масопереносних, основні рівняння, котрі описують такі процеси, а також їх характерні спрощення, що використовуються для створення комп'ютерних моделей.

Студент повинен вміти виконувати фізичну та математичну постановку задачі, побудову математичної моделі, створювати комп'ютерні програми та виконувати чисельне дослідження різноманітних процесів, пов'язаних з динамікою та перетвореннями в багатофазних середовищах.

Студент повинен мати навички: оперування математичними методами в теорії багатофазних середовищ, аналізу одержаних чисельних результатів, роботи з підручниками та науковою літературою, яка відноситься до теорії багатофазних середовищ.

## **1.3. Перелік базових дисциплін та тем, засвоєння яких необхідно для вивчення дисципліни**

1.3.1. Чисельні методи

1.3.2. Рівняння математичної фізики

1.3.3. Чисельні методи математичної фізики

1.3.4. Комп'ютерне моделювання фізичних процесів

1.3.5. Механіка суцільних середовищ (бакалаври)

#### 1.4. Основні елементи самостійної роботи

На самостійну роботу при вивченні дисципліни відводиться 140 год. Основні етапи самостійної роботи включають в себе:

1. Опрацювання лекційного матеріалу (0,25 год/лек. — 8 год.)
2. Опрацювання окремих розділів програми, які не викладалися на лекціях (132 год.)

*Тема 5с. Середовища з вільною поверхнею [1] — 25 з.*

*Тема 9с. Кристалізація у багатофазних середовищах [1] — 80 з.*

*Тема 10с. Кінетика фазових перетворень [1] — 27 з.*

### ТЕМА 5с

#### СЕРЕДОВИЩА З ВІЛЬНОЮ ПОВЕРХНЕЮ

Досить часто розрахункова область має певний поділ на зони, які істотно відрізняються одна від одної за характером фізичних процесів, які в них відбуваються. Така ситуація реалізується, наприклад, в разі багатофазного середовища з розділеними фазами. Інший дуже цікавий приклад поділу розрахункової області на зони наведено при розгляді кристалізації бінарного сплаву. В цьому разі поділ на зони не визначається однозначно поділом на фази (хоч певною мірою з цим і пов'язаний), а обумовлений різним характером перебігу в них фізичних процесів.

Зараз будемо розглядати саме таку ситуацію, тобто випадок просторового розщеплення за фізичними факторами, причому з урахуванням динаміки такого розщеплення, а також можливої зміни поділу розрахункової області на зони в ході розрахунку.

Основна ідея застосування методу розщеплення за фізичними факторами в разі просторового розщеплення полягає в тому, що зони розрахунку об'єднуються за принципом однаковості перебігу в них фізичних процесів. При цьому одна й та сама зона може при розгляді одного фізичного процесу об'єднуватись з одними зонами, а при розгляді іншого процесу – з іншими. Так,

в разі тверднення стефановського типу (з визначеною межею поділу фаз) при розгляді дифузійного теплопереносу як тверда, так і рідка частина зливка можуть розглядатись спільно (звичайно, з урахуванням різного значення для них теплофізичних характеристик), оскільки дифузійний перенос тепла відбувається в обох зонах. Що ж стосується конвективного теплопереносу, то він має місце виключно в рідинній частині і може розглядатись тільки для неї. В разі тверднення з наявністю двофазної зони такого роду комбінацій значно більше і, як буде показано в наступному параграфі, деякі з них істотно здатні спростити алгоритм розрахунку.

Можливість для кожного фізичного процесу окремо враховувати крайові умови (навіть для однієї й тієї самої фізичної величини) спрощує їх правильне використання і дозволяє оптимізувати і уніфікувати їх застосування.

Розглянемо застосування ідеї просторового розщеплення за фізичними факторами на прикладі гідродинаміки рідини з вільною поверхнею.

Знання гідродинаміки рідини з вільною поверхнею необхідне при розв'язанні багатьох важливих на практиці задач, таких, наприклад, як задача початкового етапу заповнення виливниць та литтєвих форм розплавом та ін. Процеси, які відбуваються на поверхні рідини, часто виявляються досить бурхливими і пов'язані з утворенням бризок, заплесків і т. ін. Це виключає можливість опису таких процесів в аналітичному вигляді і потребує застосування числових методів.

Різноманітним методам розрахунку течій з вільною поверхнею присвячена велика кількість праць. Залежно від способу руху середовища ці методи поділяються на три класи: лагранжеві, ейлерові та лагранжево-ейлерові. Лагранжеві методи застосовуються для відносно гладких течій з незначною деформацією рідини. При цьому розрахункова область розбивається на комірки, які переміщуються та деформуються разом з рідиною. У випадку сильних деформацій рідини застосовуються ейлерові методи, в яких комірки розрахункової сітки залишаються нерухомими, а через їх грані протікає рідина. Проте для стеження за вільною поверхнею рідини, навіть при використанні нерухомої розрахунко-

вої сітки, часто виявляється необхідним лагранжевий етап. В цьому разі метод є лагранжево-ейлеровим.

В наш час найпопулярнішим є лагранжево-ейлерів метод маркерів на сітці – МАК. Перевагою його є універсальність та наочність в описі руху рідини. Серед недоліків слід назвати принципову неконсервативність методу МАК, яка породжується тим, що об'єм, зайнятий рідиною, визначається за розташуванням маркерів, координати яких знаходяться наближено. Крім того, для забезпечення стійкості руху вільної рідини та попередження утворення в її об'ємі розрахункових порожнин необхідно вводити велику кількість маркерів, координати яких переобтяжують пам'ять ЕОМ.

Цих недоліків позбавлений числовий метод, описаний у даній лекції. Він є консервативним ейлеровим методом (КЕМ) розрахунку гідродинамічних параметрів руху рідини з вільною поверхнею. Наслідком консервативності цього методу є можливість задовільного опису руху дрібних бризок з масштабами менше сіткових, що дозволяє збільшувати крок просторової сітки, зменшивши тим самим вимоги до ресурсів ЕОМ. Розрахунки, результати яких наводяться далі, виконані на ПЕОМ ІВМ РС.

Основна ідея КЕМ полягає в тому, що вся розрахункова область уявляється заповненою стратифікованим за густиною газорідинним середовищем. За величиною густини цього середовища в елементарному об'ємі можна судити про частку рідини в ньому. Розташування вільної поверхні рідини визначається по лініях однакової густини середовища. В областях, повністю зайнятих рідиною, середовище повинно бути нестисливим. В областях, зайнятих рідиною частково (приповерхневі області, бризки), рівняння стану середовища має якись чиним постулюватися.

У даному разі зробимо такі спрощуючі припущення:

1. Відсутні фазові перетворення, газ не виділяється і не поглинається рідиною.

2. Середовище є ньютонівським, і коефіцієнт його ефективної динамічної в'язкості, який містить турбулентну складову, пропорційний густині  $\mu = \nu \rho$ , тобто ефективна кінематична в'язкість середовища не залежить від густини.

3. Рівняння стану середовища має вигляд:

$$\begin{aligned} \rho &= \text{const} \quad \text{при} \quad \gamma = 1, \\ p &= \text{const} \quad \text{при} \quad \gamma < 1 \end{aligned} \quad (5.1)$$

де  $\gamma$  – об'ємна частка рідини. Згідно з цим припущенням поза простором, повністю зайнятим рідиною (приповерхневі області, бризки та області зовсім вільні від рідини), середовище абсолютно стисливе. Фізично це більше відповідає не газорідинному, а вакуумно-рідинному середовищу.

Внаслідок зроблених припущень рівняння руху середовища розпадається на дві системи рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \vec{\nabla}) \vec{v} = \nu \Delta \vec{v} + \vec{g} - \vec{\nabla} p', \\ \vec{v} \vec{\nabla} = 0 \quad \text{при} \quad \gamma = 1, \end{cases} \quad (5.2)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \vec{\nabla}) \vec{v} = \nu \Delta \vec{v} + \vec{g}, \\ p = \text{const} \quad \text{при} \quad 0 < \gamma < 1. \end{cases} \quad (5.3)$$

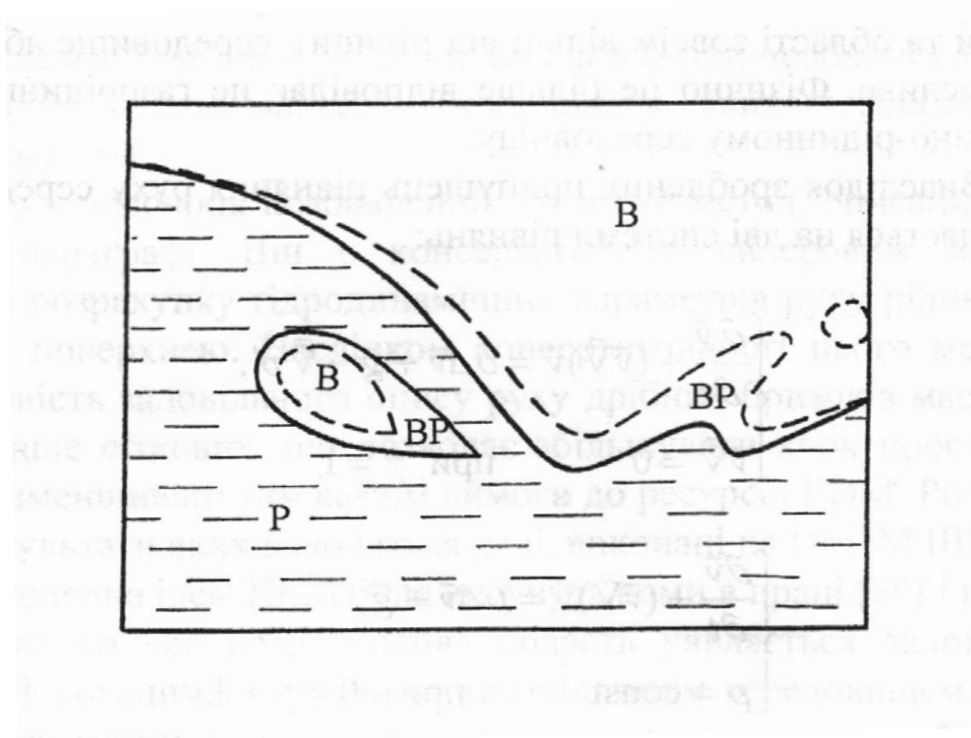
Вони доповнюються рівнянням

$$\frac{\partial \gamma}{\partial t} + \vec{\nabla}(\gamma \vec{v}) = 0, \quad (5.4)$$

яке випливає з рівняння нерозривності (1.11) та співвідношення  $\rho = \rho_p \gamma$ , де  $\rho_p$  – істинна густина рідини.

Залежно від результатів розв'язання рівняння (5.4) область інтегрування розбивається на три зони (рис. 5.1): рідинну з  $\gamma = 1$ , вакуумно-рідинну з  $0 < \gamma < 1$ , для якої справедливі рівняння (5.3), та вакуумну з  $\gamma = 0$ . Оскільки з плином часу поділ розрахункової області на зони змінюється, маємо спряжену задачу з рухомими межами спряження. Можливість опису динаміки вакуумно-рідинної зони, передбачена в нашому підході, є суттєвою його особливістю, яка дозволяє при числовому розв'язанні забезпечити консервативність різницевої схеми.





**Рис.5.1.** Схема зон розрахункової області для рідини з вільною поверхнею:  
 P – рідинна; VP – вакуумно-рідинна; V – вакуумна

В рідинній та вакуумно-рідинній зонах (тобто скрізь, де присутня розглядувана рідина) рівняннями (5.2) та (5.3) однаково описуються процеси конвективного і дифузійного переносу імпульсу під дією сили тяжіння. При використанні методу розщеплення за фізичними факторами ця обставина значно полегшує числове розв'язання поставленої задачі. Дійсно, згідно з цим методом рівняння руху середовища в усіх зонах можна виразити у вигляді єдиної системи рівнянь:

$$\text{I} \quad \vec{\tilde{v}} = \vec{v}^n + \tau \left[ -(\vec{v}^n \cdot \vec{\nabla}) \vec{v}^n + \nu \Delta \vec{v}^n + \vec{g} \right], \quad (5.5)$$

$$\text{II} \quad \Delta p'^{n+1} = \vec{\nabla} \cdot \vec{\tilde{v}} / \tau, \quad (5.6)$$

$$\text{III} \quad \vec{v}^{n+1} = \vec{\tilde{v}} - \tau \vec{\nabla} p'^{n+1}, \quad (5.7)$$

причому рівняння (5.5)–(5.7) розв'язуються в зонах, де присутня рідина (з  $\gamma \neq 0$ ), а рівняння для тиску (5.6) – тільки в зоні, повністю заповнені рідиною (з

$\gamma = 1$ ). Таким чином, рівнянням (5.7) забезпечується соленоїдальність руху середовища (нестисливість) тільки в рідинній частині.

Крайовими умовами для полів  $\gamma$  та  $\vec{v}$  на твердих поверхнях і площинах (або осі) симетрії вибираються умови непротікання і вільного ковзання:

$$\vec{n} \cdot \vec{\nabla} \gamma|_S = 0, \quad v_{\perp}|_S = 0, \quad \vec{n} \cdot \vec{\nabla} v_{\parallel}|_S = 0, \quad (5.8)$$

а для вхідних або вихідних потоків рідини – умови вільного протікання:

$$v_{\perp}|_S = v_S, \quad (5.9)$$

якщо швидкість потоку визначена, і

$$\vec{n} \cdot \vec{\nabla} v_{\perp}|_S = 0 \quad (5.10)$$

в протилежному випадку, а також

$$\gamma|_S = 1, \quad \vec{n} \cdot \vec{\nabla} v_{\parallel}|_S = 0. \quad (5.11)$$

Умови для тиску на межах розрахункової області можна отримати, спроектувавши рівняння (5.7) на нормаль  $\vec{n}$ , до поверхні за винятком поверхонь, через які рідина протікає вільно і швидкість її обчислюється з використанням умови (5.10). На цих поверхнях необхідно задавати величину тиску  $p_S$ , і граничними умовами для  $p'$  будуть граничні умови першого роду:

$$p'|_S = p_S / \rho_p. \quad (5.12)$$

Оскільки вакуумна зона в розрахунку швидкостей не використовується, а тиск обчислюється тільки в рідинній зоні, на межах вакуумної та рідинної зон необхідно задавати граничні умови для швидкостей і тиску відповідно. Тиск на межі рідинної та вакуумно-рідинної зон приймається таким, що дорівнює сталому значенню  $p_a$ , а для швидкостей на межі з вакуумом необхідно забезпечити вільний рух рідини, тобто крайовими умовами для швидкостей необхідно вибирати умови вільного протікання (5.10), (5.11).

Різницева апроксимація правих частин рівнянь системи (5.5)–(5.7) виконується на шаховій сітці з використанням при запису дифузійного доданку ап-

роксимаційної складової в'язкості. Зараз зупинимось лише на особливостях застосування крайових умов.

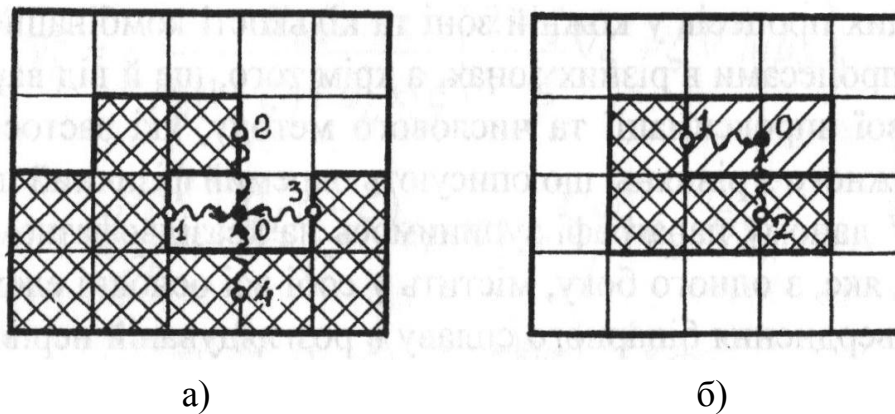
Якщо різницеве подання умов для швидкості і тиску на межах розрахункової області виконується стандартно (див. наступну главу), то на вільній поверхні необхідно простежувати, щоб умови вільного протікання рідини виконувались по можливості найбільш точно, тобто було відсутнє гальмування вільної поверхні, здатне спотворити її форму і динаміку руху. Для цього необхідно, по-перше, задавати, згідно з різницевим аналогом рівнянь (5.9)–(5.11), швидкості на проміжних вакуумних гранях, що розділяють вакуумні комірки, не один раз для всіх обчислюваних швидкостей, а для кожної швидкості наново. Ілюструє сказане рис. 5.2, *а*. Так, при обчисленні нової швидкості в точці 1 використовується швидкість у вакуумній точці  $O$ , яка прирівнюється швидкості в точці 1. Те саме можна сказати і про точки 2–4. Оскільки швидкості в точках 1–4 в загальному випадку різні, точці  $O$  неможливо приписати яку-небудь одну швидкість без порушення різницевого аналога умови вільного протікання, тому при обчисленні кожної з швидкостей в точках 1–4 швидкість в точці  $O$  задається наново. Це уповільнює розрахунок, але не призводить до сіткового гальмування рідини біля вільної поверхні. По-друге, на гранях комірок, що були вакуумними і мають через це нульову швидкість, в які потрапляє на даному кроці за часом рідина, необхідно задати значення швидкостей. На рис. 5.2, *б* точка  $O$  – одна з таких точок. Їй можна приписати як швидкість точки 1, так і швидкість точки 2. В таких ситуаціях вибираємо середнє арифметичне між швидкостями в сусідніх невакуумних точках.

Крайовими умовами для тиску служить сталі значення  $p_a$  в не комірках повністю заповнених рідиною, незалежно від кількості рідини в них. Різницеве рівняння для тиску може розв'язуватись методом верхньої релаксації.

Відзначимо, що в методі, який пропонується, як і в методі МАС, легко вдосконалити розстановку крайових умов для тиску на поверхні рідини.

Рівняння (5.4), що визначає поділ розрахункової області на зони, потребує ретельного вибору методу числового розв'язання, оскільки наявність навіть

невеликої сіткової дифузії, яка завжди виникає при різницевій апроксимації рівняння переносу, призводить до швидкого розмазування межі рідини і вакууму, так що простежити за нею після цього вже не вдається. Тому для самої можливості числової реалізації запропонованого тут методу дослідження гідродинаміки рідини з вільною поверхнею КЕМ, необхідне повне подавлення сіткової дифузії при записі різницевого аналога рівняння (5.4).



**Рис. 5.2.** Ілюстрація до задання крайових умов для швидкостей на вільній поверхні: заштриховані квадратики – комірки, що мають рідину, решта – зайняті рідиною

Описаний метод легко узагальнюється на випадок багаторідинного середовища з вільними поверхнями поділу фаз. При цьому зберігається основна ідея методу, яка полягає в розгляді стратифікованого за густиною середовища, що заповнює всю розрахункову область. В багаторідинному випадку, на відміну від однорідного, по-перше, слід окремо розглядати перенос кожної з рідинних фаз, тобто для кожної з фаз розв'язувати рівняння (5.4). При цьому для можливості стеження за межами поділу фаз слід використовувати бездифузійний метод розв'язання цих рівнянь. По-друге, в цьому разі змінність густини слід враховувати, також всередині рідинної зони через можливу відмінність густин різних рідинних фаз.

## ТЕМА 9с

### КРИСТАЛІЗАЦІЯ У БАГАТОФАЗНИХ СЕРЕДОВИЩАХ

Розглянемо дуже важливий випадок багатофазного середовища – багатофазну (або гетерогенну) зону кристалізації, яка через присутність у ній двох основних фаз – розплаву та кристалічної фази – часто називається просто двофазною зоною зливка, що кристалізується. Двофазна зона практично завжди виникає при звичайних режимах кристалізації бінарних сплавів і, зокрема, при виробництві сталі. Утворення двофазної зони пов'язане з так званим концентраційним переохолодженням, внаслідок якого фронт кристалізації бінарного розплаву стає нестійким [10, 11]. Крім того, ріст кристалів може відбуватися не тільки від фронту кристалізації, а й від зародків в об'ємі розплаву. Виникаючи таким чином, кристали рухаються і рух їх суттєво впливає на хід кристалізації. Гідродинамічні та теплофізичні процеси в багатофазній зоні кристалізації є визначальним для формування якісного зливка, і можливості впливу на ці процеси з метою покращення кінцевої якості зливка мають велике практичне значення.

В даній темі викладена нерівноважна теорія багатофазної зони кристалізації, яка враховує:

- можливий рух кристалів;

- перерозподіл домішок завдяки

- а) конвективному переносу в рідинній зоні і зоні рухомих кристалів,

- б) фільтраційним процесам в дендритному каркасі;

- можливі механізми газоутворення та формування газоусадочної поруватості:

- енергетичні характеристики міжфазних перетворень.

При цьому використовується загальний феноменологічний підхід до побудови моделей багатофазних середовищ, який дозволяє створювати моделі багатофазних середовищ, що піддаються чисельному моделюванню на сучасних ЕОМ. Розплав, який кристалізується – це багатофазне середовище з фазовими перетвореннями. Але в загальному випадку, ми не можемо скористатися лінійним за

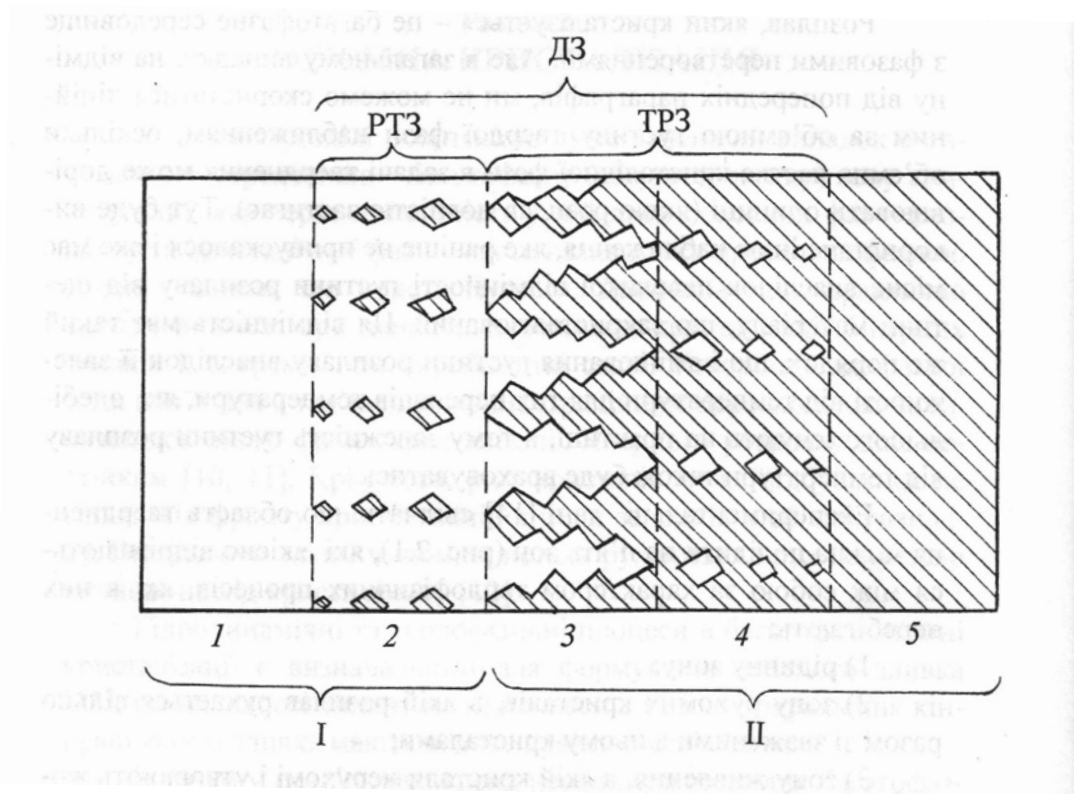
об'ємною густину твердої фази наближенням, оскільки об'ємна частка кристалічної фази в задачі тверднення може дорівнювати одиниці (якщо розплав повністю застигає). Тут буде використане інше наближення, яке раніше не припускалося і яке має місце внаслідок невеликої відмінності густини розплаву від щетини матеріалу, що закристалізований. Ця відмінність має такий же порядок, що і змінювання густини розплаву внаслідок її залежності від температури для тих перепадів температури, які здебільшого існують на практиці, а тому залежність густини розплаву від температури також буде враховуватись.

Експериментальні дані свідчать, що область тверднення можна поділити на п'ять зон (рис. 9.1), які якісно відрізняються між собою за характером теплофізичних процесів, які в них перебігають:

- 1) рідинну зону;
- 2) зону рухомих кристалів, в якій розплав рухається вільно разом зі зваженими в ньому кристалами;
- 3) зону живлення, в якій кристали нерухомі і утворюють жорсткий дендритний каркас, але розплав ще має змогу крізь нього фільтруватись;
- 4) зону вкрапленого розплаву, в якій ще не застиглий розплав розбивається на окремі ізольовані об'єми, внаслідок чого губить здатність до переміщення;
- 5) тверду зону.

Зона рухомих кристалів, зона живлення та зона вкрапленого розплаву відрізняються між собою тим, що в них одночасно існують як рідинна, так і тверда фази, а тому вони разом утворюють двофазну зону (ДЗ).

Зону рухомих кристалів через більшу частку в ній рідинної фази називають ще рідинно-твердою зоною (РТЗ), а зону живлення разом із зоною вкрапленого розплаву через більшу частку в них твердої фази – твердо-рідинною зоною (ТРЗ).



**Рис. 9.1.** Схема зон області тверднення:

ДЗ – двофазна зона; РТЗ – рідинно-тверда зона, ТРЗ – твердо-рідинна зона; 1 – рідинна зона; 2 – зона рухомих кристалів; 3 – зона живлення; 4 – зона вкрапленого розплаву; 5 – тверда зона; I – плинна зона; II – неплинна зона.

Зона рухомих кристалів та зона живлення розділяються за межею виливаності. Її назва пояснюється тим, що при виливанні зливка він роз'єднується саме за цією межею. Межа, що розділяє зону живлення і зону вкрапленого розплаву, носить назву межі живлення. Саме до цієї межі в принципі може потрапляти розплав з рідинної зони, поповнюючи об'єми, які вивільнюються внаслідок усадки тверднення, і живлячи фазове перетворення. Місце знаходження цих меж визначається багатьма чинниками, як-то: швидкістю охолодження зливка, тиском та іншими факторами, серед яких основним є об'ємна густина кристалічної фази  $\zeta$ . Так, встановлено, що в звичайних умовах тверднення існує критичне значення частки кристалічної фази в розплаві  $\zeta_v$ , при якій кристали об'єднуються в жорсткий дендритний каркас і стають нерухомими. Анало-

гічно цьому межі живлення відповідає значення  $\zeta_G$ . Чисто рідинна зона, де немає кристалів, відділяється від зони рухомих кристалів за значенням об'ємної густини кристалічної фази  $\zeta_L = 0$ , а тверда зона відділяється від зони вкрапленого розплаву за значенням  $\zeta_S$ , близьким до одиниці та відмінним від одиниці лише через можливість існування неметалічних включень та газоусадочної поруватості.

Таким чином, вся область тверднення розподіляється на зони за значенням об'ємної частки кристалічної фази:

при  $\zeta = \zeta_L = 0$  розплав не має кристалічних включень, що відповідає рідинній зоні;

при  $\zeta_L < \zeta < \zeta_V$  кристали та розплав будуть рухомими, що відповідає зоні рухомих кристалів;

при  $\zeta_G < \zeta < \zeta_G$  розплав ще буде рухомим, але кристали вже об'єднані в дендритний каркас і нерухомі, що відповідає зоні живлення;

при  $\zeta_G < \zeta < \zeta_S$  як розплав, так і кристали будуть нерухомими, що відповідає зоні вкрапленого розплаву;

при  $\zeta_S \leq \zeta$  рідинна фаза взагалі не буде існувати, що відповідає твердій зоні.

Запропонований розподіл на зони та межі між ними дещо умовні. Дійсно, наприклад, чисто рідинної зони практично на всьому етапі тверднення взагалі не існує через попадання в неї різними способами рухомих кристалів. Рухомі кристали разом з розплавом можуть потрапляти також і в міждендритні проміжки. Насичений же лікватами розплав в ізольованих об'ємах зони вкрапленого розплаву має досить низьку температуру тверднення. Якщо взяти до уваги відносно рідке розміщення таких об'ємів і зменшення їх густини в напрямку твердої зони, а також присутність у зовсім застиглому розплаві неметалічних включень та газоусадочних пустот, стає очевидною умовність межі і між твердою зоною та зоною живлення. Незважаючи на це, розглянутий поділ області тверднення є досить точним наближенням до реальної ситуації.



Чисто рідинну зону, де немає кристалів, можна умовно віднести до зони рухомих кристалів з нульовою їх об'ємною густиною, як і тверду зону можна умовно віднести до зони вкрапленого розплаву з нульовою густиною рідинної фази.

Велике значення для тверднення має характер перебігу гідродинамічних процесів. За цією ознакою область тверднення поділяється на плинну зону (I) з відмінною від нуля рідинно-плинністю і неплинну зону (II) з нульовою рідинно-плинністю. В більшості випадків кристалізації, зокрема для кристалізації сталі, межа рідинно-плинності буде збігатися з межею виливаності, що ми надалі і будемо припускати. Таким чином, плинна зона в нас складається з рідинної зони та зони рухомих кристалів, а неплинна зона – з зони живлення, зони вкрапленого розплаву та твердої зони.

Зони I та II значною мірою відрізняються між собою особливостями перебігу теплофізичних процесів і потребують, таким чином, різного підходу при побудові математичної моделі, а тому розглядати кожну з них будемо окремо.

### *Плинна зона*

Плинна зона, як ми тільки що бачили, складається з рідинної зони та зони рухомих кристалів, що дозволяє здійснити їх спільний опис, вважаючи рідинну зону окремим випадком зони рухомих кристалів з  $\zeta = 0$ .

Характер руху кристалів та домішкових фаз в плинній зоні має великий вплив на процеси формування структури зливка, перерозподіл домішок у ньому, утворення зон ліквідації і т. ін. Але, на жаль, в математичних моделях кристалізації рухомість кристалів, як правило, не враховується. Ми ж можливість руху кристалів в плинній зоні будемо враховувати в рамках розглянутого підходу до багатофазного середовища.

Домовимось, що основній компоненті розплаву буде відповідати індекс 1, а кристалічній фазі – фазі розплаву, який закристалізований, – індекс 2. Крім цих фаз будемо враховувати присутність у розплаві ще деякої кількості газових

фаз, що, позначаються індексом  $a$ , та деякої кількості домішок (однаково твердих чи рідинних), що позначаються індексом  $b$ .

Окремо звернемо увагу на те, що газові та домішкові фази в нашому розгляді вважаються, що належать саме рідинній фазі – розплаву, де вони можуть мати нетривіальну динаміку і здійснювати суттєвий вплив на хід теплофізичних процесів у зливку. Кристалічна фаза також має в своєму складі різноманітні домішки, але вплив їх на теплофізичні процеси в зливку значно менший, тому розрізняти їх між собою в межах кристалічної фази зараз при розгляді теплофізики тверднення, не будемо, враховуючи їх присутність тут лише в теплофізичних характеристиках твердої фази. Питання розподілу домішок та включень у твердій фазі є одним із центральних питань кристалізації зливка і буде розглянуто окремо далі.

Для протиставлення кристалічної фази розплаву інколи замість індексу 2 будемо використовувати індекс  $S$  для кристалічної фази, особливо в наступних параграфах, де структура твердої фази і зміст у ній домішок та включень буде важливим.

Істинні густини основного компонента розплаву та кристалічної фази можна виразити так:

$$\rho_1^o = \rho_o(1 + \varepsilon), \quad (9.1)$$

$$\rho_2^o = \rho_o(1 + \delta_f), \quad (9.2)$$

В околі температури  $T_f$ , з якої починається кристалізація розплаву, параметр температурної усадки  $\varepsilon$  можна подати у вигляді:

$$\varepsilon = -\delta_t \Delta_f T_1, \quad (9.3)$$

де  $\Delta_f T_1 = T_1 - T_f$ . Залежністю  $\delta_f$  від температури нехтуємо, тобто  $\delta_f$  є об'ємним коефіцієнтом фазової усадки. Для сталі (а саме кристалізацію сталі будемо розглядати в даній монографії) цей коефіцієнт залежить від марки і має порядок  $5 \cdot 10^{-2}$ . Коефіцієнт температурної усадки для рідин  $\delta_t$  невеликий. Для сталі, наприклад, він має порядок  $10^{-4}$  1/град і тому температурна усадка  $\varepsilon$  в

більшості випадків, які мають місце в умовах сталеливарного виробництва, коли  $T_1 - T_f$  не перевищує кількох сотень градусів, має той же порядок, що і фазова усадка  $\delta_f$ . Все це дозволяє скористатись лінійним по  $\delta_t$  та  $\delta_f$  наближенням. Дійсно, нехтування доданками порядку  $10^{-3}$  здається досить обґрунтованим, особливо в задачах металургійного виробництва, де забезпечити більшу точність постановки задачі та перевірки результатів її розв'язання практично неможливо.

Істинні густини газових фаз будемо вважати змінними відповідно до закону стану газу, а істинні густини домішок – незмінними.

Якщо об'ємну густину кристалічної фази позначити  $\zeta$ , то густини фаз та середовища в цілому, з урахуванням формул (9.1) та (9.2), визначаються так:

$$\begin{aligned} \rho_1 &= \gamma \rho_o (1 + \varepsilon), & \rho_2 &= \zeta \rho_o (1 + \delta_f), \\ \rho_a &= \alpha_a \rho_a^o, & \rho_b &= \beta_b \rho_b^o, \\ \rho &= \rho_o \left[ \gamma (1 + \varepsilon) + \zeta (1 + \delta_f) + \sum_b \beta_b x_b \right], \end{aligned} \quad (9.4)$$

де  $x_b = \rho_b^o / \rho_o$ . Об'ємні густини фаз задовольняють співвідношенню:

$$\gamma + \zeta + \alpha + \beta = 1, \quad (9.5)$$

де  $\alpha = \sum_a \alpha_a$ ;  $\beta = \sum_b \beta_b$ .

Експериментальні дані свідчать, що для сталі  $\zeta_v$  лежать в межах 0,2–0,4. Це дозволяє для плинної зони застосувати лінійне по  $\zeta$  наближення. В цьому випадку  $x_2 = 1 + \delta_f$  і вираз для барицентричної швидкості середовища матиме вигляд

$$\vec{v} = \vec{v}_1 + \zeta (1 - \varepsilon + \delta_f) \vec{v}_{21} + (1 - \varepsilon) \sum_b \beta_b x_b \vec{v}_{b1}. \quad (9.6)$$

Тоді для дифузійних швидкостей фаз маємо

$$\vec{w}_1 = -\zeta (1 - \varepsilon + \delta_f) \vec{v}_{21} - (1 - \varepsilon) \sum_b \beta_b x_b \vec{v}_{b1} \quad (9.7)$$

$$\vec{w}_2 = \vec{v}_{21} + \vec{w}_1, \quad \vec{w}_a = \vec{v}_{a1} + \vec{w}_1, \quad \vec{w}_b = \vec{v}_{b1} + \vec{w}_1.$$

Оскільки газові та домішкові фази  $a$  і  $b$ , які ми розглядаємо, за визначенням знаходяться в рідинній фазі – розплаву, поряд з об’ємними густинами  $\alpha_a$  та  $\beta_b$ , які визначаються відносно об’єму всього середовища, є сенс розглядати об’ємні густини газових та домішкових фаз по відношенню до об’єму розплаву:

$$\alpha_a^L = \alpha_a / (1 - \zeta), \quad \beta_b^L = \beta_b / (1 - \zeta).$$

Але в плинній зоні, коли ми нехтуємо квадратами об’ємних густин всіх фаз, крім першої,  $\alpha_a^L = \alpha_a$ ,  $\beta_b^L = \beta_b$ .

Дивергенція барицентричної швидкості середовища знаходиться за формулою:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{w} - (1 + \delta_t \Delta_f T_1) \vec{\nabla} \cdot [(1 - \delta_t \Delta_f T_1) \vec{w}_1] + \psi + \gamma \delta_t \frac{d\Delta_f T_1}{dt}, \quad (9.8)$$

де в нашому випадку

$$\psi = -(\delta_f + \delta_t \Delta_f T_1) \Phi_S + \Phi_q + \sum_b [1 - x_b (1 + \delta_t \Delta_f T_1)] \Phi_b, \quad (9.9)$$

$$\vec{w} = \zeta \vec{w}_S + \sum_a \alpha_a \vec{w}_a + \sum_b \alpha_b \vec{w}_b, \quad (9.10)$$

і  $\Phi_q = \sum_a \Phi_a$  – сумарна густина джерел всіх газових фаз. Нагадаємо, що ми при-

йняли, за визначенням,  $\vec{w}_S = \vec{w}_2$  та  $\Phi_S = \Phi_2$ .

Рівняння руху плинної зони отримуємо використовуючи дифузійне наближення:

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = -\vec{\nabla} \tilde{p} + \nu_e \Delta \vec{v} + \left[ -\gamma \delta_t \Delta_f T_1 + \zeta \delta_f - \alpha - \sum_b \beta_b (1 - x_b) \right] \vec{g}, \quad (9.11)$$

де

$$\nu_e = \nu_1 \left[ 1 + \gamma \delta_t \Delta_f T_1 + \zeta (A - \delta_f) + \alpha (A + 1) + \sum_b \beta_b (A + 1 - x_b) \right]. \quad (9.12)$$

Це наближення має досить серйозне експериментальне обґрунтування, оскільки дифузійні швидкості домішок в разі їх утворення при кристалізації сплаву, невеликі.

Масоперенос газових фаз визначається рівняннями

$$\frac{\partial \alpha_a}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot [\alpha_a (\vec{v} + \vec{w}_a^c)] = \vec{\nabla} \cdot (D_a \vec{\nabla} \alpha_a) + \Phi_a, \quad (9.13)$$

в яких швидкості колективних складових руху  $\vec{w}_a^c$  будемо або знаходити за формулами, задавши середні радіуси пупирів  $R_a$ , або задавати безпосередньо, виходячи з експериментальних даних. Здебільшого для всіх газових фаз маємо приблизно однакові дані для колективних швидкостей, тобто  $\vec{w}_a^c = \vec{w}_q^c$ . Коефіцієнти ефективної дифузії для всіх газових фаз  $D_a$  зумовлені одними й тими ж закономірностями – нестійкістю руху пупирів та турбулентністю, а тому для всіх фаз їх можна брати однаковими:  $D_a = D_q$ . Враховуючи все це і підсумовуючи рівняння (9.13) по  $a$ , отримуємо

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot [\alpha (\vec{v} + \vec{w}_q^c)] = \vec{\nabla} \cdot (D_q \vec{\nabla} \alpha) + \Phi_q \quad (9.14)$$

В наближенні ідеального газу, коли рівняння стану газу визначається рівнянням Клапейрона

$$\rho_a^o = \frac{\mu_a p}{R T}, \quad (9.15)$$

за умови локальної рівноважності газорідинної складової середовища, похідні від  $\ln \rho_a^o$  для кожної з фаз збігаються між собою і становлять

$$\frac{d_a \ln \rho_a^o}{dt} = \frac{1}{p} \left( \frac{d_q p}{dt} - \frac{1}{T} \frac{d_q T}{dt} \right). \quad (9.16)$$

Тут субстанційна похідна  $\frac{d_q}{dt}$  береться вздовж спільної для всіх газових фаз швидкості

$$\vec{v}_q = \vec{v} + \vec{w}_q^c - \frac{1}{\alpha} D_q \vec{\nabla} \alpha. \quad (9.17)$$

В цьому разі отримуємо

$$\Phi_q = \sum_j \sum_a J_{ja} / \rho_a^o - \frac{\alpha}{p} \left( \frac{d_q p}{dt} - \frac{1}{T} \frac{d_q T}{dt} \right). \quad (9.18)$$

Оскільки і в інші рівняння газові фази входять лише спільно в комбінації  $\alpha$ , в зазначеному випадку можна їх всі розглядати як одну сумарну газову фазу з об'ємною густиною  $\alpha$ , яка визначається рівнянням (9.14).

Для кристалічної фази і домішок рівняння масопереносу мають вигляд:

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot [\zeta(\vec{v} + \vec{w}_S^c)] = \vec{\nabla} \cdot (D_S \vec{\nabla} \zeta) + \Phi_S, \quad (9.19)$$

$$\frac{\partial \beta_b}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot [\beta_b(\vec{v} + \vec{w}_b^c)] = \vec{\nabla} \cdot (D_b \vec{\nabla} \beta_b) + \Phi_b. \quad (9.20)$$

Для розрахунку колективних складових дифузійних швидкостей цих фаз  $\vec{w}_S^c$  та  $\vec{w}_b^c$ , як і у випадку газових фаз, замість розв'язання диференціальних рівнянь колективного руху частинок здебільшого будемо користуватись безінерційним наближенням з припущенням лінійної залежності сили опору від відносної швидкості, що призводить до співвідношень

$$\vec{v}_{S1}^c = -\frac{d_S^2}{C_{1D} \nu_1} (\varepsilon - \delta_f) \vec{g}, \quad (9.21)$$

$$\vec{v}_{b1}^c = -\frac{d_b^2}{C_{1D} \nu_1} (1 + \varepsilon - x_b) \vec{g}, \quad (9.22)$$

де індексом "c" позначено про те, що даними формулами визначаються колективні складові відносних швидкостей. Нагадаємо, що у випадку сферичних частинок  $C_{1D} = 18$  (закон Стокса). З формул (9.7) випливає, що дифузійні швидкості дисперсних фаз  $\vec{w}_S^c$  та  $\vec{w}_b^c$ , фігуруючи в рівнянні масопереносу (9.19) та (9.20), відрізняються від відповідних відносних швидкостей  $\vec{v}_{S1}^c$  та  $\vec{v}_{b1}^c$ , що задаються, наприклад, рівняннями (9.21), (9.22), на нескінченно малу величину дифузійної швидкості основного компонента розплаву  $\vec{w}_1$ :

$$\vec{w}_S^c = \vec{v}_{S1}^c + \vec{w}_1, \quad \vec{w}_b^c = \vec{v}_{b1}^c + \vec{w}_1. \quad (9.23)$$

Це дозволяє в рівняннях (9.19) та (9.20), враховуючи наше наближення лінійності за об'ємними густинами дисперсних фаз, замість дифузійних швидкостей  $\vec{w}_S^c$  та  $\vec{w}_b^c$  використовувати вже знайдені відносні швидкості  $\vec{v}_{S1}^c$  та  $\vec{v}_{b1}^c$ .

Структура джерел фаз  $\Phi_S$ ,  $\Phi_a$  та  $\Phi_b$  визначається кінетичними рівняннями і буде спільно для всіх зон розглянута далі.

Рівняння енергії плинної зони зливка, що кристалізується, запишемо припускаючи, що в рівновазі з розплавом знаходяться газові і домішкові фази (при температурі  $T_r$ ), а кристали, внаслідок фазового перетворення, мають температуру фазового перетворення  $T_f$ . За таких умов рівняння набуває вигляду:

$$\begin{aligned} \left[ C_1\gamma(1+\varepsilon) + \sum_b C_b\beta_b x_b \right] \frac{dT_r}{dt} = \vec{\nabla} \cdot (\lambda'_e \nabla T_r) + Q' - \sum_{i,j} J'_{ij} E_i - \\ - \left[ C_1\gamma(1+\varepsilon)\bar{w}_1 + \sum_b C_b\beta_b x_b \bar{w}_b \right] \vec{\nabla} T_r - C_2\zeta (1+\delta_f) \frac{d_S T_f}{dt}. \end{aligned} \quad (9.24)$$

Тут

$$\bar{w}_b = \bar{w}_b^c - \frac{1}{\beta_b} D_b \vec{\nabla} \beta_b \quad (9.25)$$

і субстанційна похідна  $\frac{d_S}{dt}$  береться вздовж швидкості кристалічної фази

$$\vec{v}_S = \vec{v} + \bar{w}_S^c - \frac{1}{\zeta} D_S \vec{\nabla} \zeta. \quad (9.26)$$

Зробимо тепер ряд припущень для спрощення. Насамперед, знехтуємо в рівнянні (9.24) всіма джерелами  $J_{ij}$ , крім  $J_{12}$  (і, зрозуміло,  $J_{21} = -J_{12}$ ), вважаючи, що всі фазові перетворення, крім тверднення, енергетично не значущі (це припущення в деяких цікавих випадках не справедливе), приймаючи ще, що

$$Q = L \sum_i J_{12} = L J_{12} = L \rho_S^0 \Phi_S. \quad (9.27)$$

Температура фазового переходу  $T_f$  визначається з діаграми стану розплаву через густину домішок. Оскільки в плинній зоні перенос домішок має конвективну складову (див. рівняння (9.20)), то за умови не дуже великої швидкості виділення домішок при кристалізації вони досить рівномірно поширюються по цій зоні, що дозволяє, зважаючи на малу змінність  $T_f$  вздовж плинної зони, знехтувати останнім доданком в рівнянні (9.24). Якщо ще використати позначення

$$C_L = C_1\gamma(1 + \varepsilon) + \sum_b C_b\beta_b x_b, \quad (9.28)$$

$C_L$  – питома теплоємність розплаву, та

$$\bar{\chi}_L = C_1\gamma(1 + \varepsilon)\bar{w}_1 + \sum_b C_b\beta_b x_b \bar{w}_b, \quad (9.29)$$

то теплове рівняння плинної зони значно скоротиться

$$C_L \frac{dT_r}{dt} = \bar{\nabla} \cdot (\lambda'_e \nabla T_r) + (1 + \delta_f) L_e \Phi_S - \bar{\chi}_L \cdot \bar{\nabla} T_r, \quad (9.30)$$

де

$$L_e = L + E_1(T_f) - E_2(T_f) \quad (9.31)$$

Вектор  $\bar{\chi}_L$  – першого порядку малості за об'ємними густинами дисперсних фаз, і тому останній доданок в рівнянні (9.30) мало впливає на перебіг теплових процесів в плинній зоні. Для знаходження ефективного коефіцієнта теплопровідності середовища  $\lambda_e = \lambda'_e \rho_o$  можна використати середньозважений за фазами варіант:

$$\lambda_e = \gamma\lambda_1 + \zeta\lambda_2 + \sum_a \alpha_a \lambda_a + \sum_b \beta_b \lambda_b, \quad (9.32)$$

хоча, в основному, теплопровідність плинної зони визначається турбулентною складовою.

Врахування в рівнянні (9.30) величин першого порядку малості за об'ємними густинами дисперсних фаз та коефіцієнтами усадки на відміну від рівнянь руху слабо впливає на кінцевий результат, а тому теплове рівняння має смисл використовувати в нульовому (рідинному) наближенні за цими параметрами

$$C_1 \frac{dT_1}{dt} = \bar{\nabla} \cdot (\lambda'_e \nabla T_1) + L_e \Phi_S. \quad (9.33)$$

Конкретизувати тут значення  $\lambda'_e$ , користуючись, наприклад, формулою (9.32), коли  $\lambda'_e = \lambda'_1$  і  $\lambda'_1 = \lambda_1 / \rho_o$ , поки що не будемо, пам'ятаючи, що основна складова ефективної теплопровідності плинної зони визначається турбулентним характером її руху, а не теплопровідністю окремих фаз. Тепловий вплив дисперсних фаз (і часто досить значний) проявляється, переважно через швид-



кість середовища  $\bar{v}$ , якою визначається в багатьох випадках основний конвективний доданок у рівнянні (9.33), що входить у субстанційну похідну температури.

В тому разі, коли в зоні рухомих кристалів рівноважна температура  $T_r$  мало відрізняється від температури фазового перетворення  $T_f$  (а саме ця ситуація за даними експериментальних та теоретичних досліджень має місце на практиці), можна ввести спільну для всіх фаз без винятку квазірівноважну температуру  $T$ , яка може бути визначена як усереднена в елементарному об'ємі за всіма фазами температура, і її значення з певною похибкою можна приписувати всім фазам, які знаходяться у вибраному елементарному об'ємі. В рідинній зоні квазірівноважна температура  $T$ , очевидно, збігається з температурою розплаву  $T = T_r$ .

Теплове рівняння, записане відносно квазірівноважної температури  $T$ , має вигляд, аналогічний рівнянню для температури  $T_r$  рівноважних фаз (9.30) відносно енергій фазових перетворень

$$C \frac{dT}{dt} = \bar{\nabla} \cdot (\lambda'_e \nabla T) + (1 + \delta_f) L_e \Phi_S - \bar{\chi} \cdot \bar{\nabla} T, \quad (9.34)$$

Вся їх відмінність полягає в коефіцієнтах, які тепер визначаються за допомогою всіх фаз без винятку, тобто

$$C = C_1 \gamma (1 + \varepsilon) + C_2 \zeta (1 + \delta_f) + \sum_b C_b \beta_b x_b, \quad (9.35)$$

$C$  – питома теплоємність середовища, та

$$\bar{\chi} = C_1 \gamma (1 + \varepsilon) \bar{w}_1 + C_2 \zeta (1 + \delta_f) \bar{w}_2 + \sum_b C_b \beta_b x_b \bar{w}_b. \quad (9.36)$$

Перепишемо ще рівняння (9.34) в двофазному наближенні, нехтуючи тепловим впливом газових та домішкових фаз, а також тепловими ефектами усадки:

$$[C_1 (1 - \zeta) + C_2 \zeta] \frac{dT}{dt} = -[C_1 (1 - \zeta) \bar{w}_1 + C_2 \zeta \bar{w}_2] \bar{\nabla} T + \bar{\nabla} \cdot (\lambda'_e \nabla T) + L_e \Phi_S. \quad (9.37)$$

Якщо в цьому рівнянні знехтувати також тепловим впливом кристалів, покладаючи  $\zeta = 0$ , отримаємо теплове рівняння в однофазному (рідинному) наближенні (9.33) (очевидно, в цьому випадку  $T = T_1$ ).

### *Неплинна зона*

Неплинна зона, як ми бачили, складається з зони живлення, зони вкрапленого розплаву та твердої зони. Гідродинаміка останніх двох зон тривіальна, оскільки вони, за нашим припущенням, нерухомі. Що ж стосується зони живлення, то характер руху розплаву і домішкових фаз у ній виявляє виключно великий вплив на кінцевий розподіл домішок у зливку, його структуру і якість. Тому почнемо свій розгляд неплинної зони з гідродинамічних та масопереносних процесів у зоні живлення.

Зона живлення обмежується, з одного боку, межею виливальності, а з другого – межею живлення, тобто для неї  $\zeta_v < \zeta < \zeta_G$ . Значення  $\zeta_G$  майже більше половини, а може наближатись і до одиниці в звичайних умовах ( $\zeta_G$  лежить в околі 0,8), тому вважати  $\zeta$  малим зараз ми не можемо. Речовина, котра закристалізована в зоні живлення, утворює нерухомий дендритний каркас, який можливий рух ще не застиглої розплаву та газових фаз і домішок.

Через меншу рухомість розплаву та невелике значення коефіцієнтів дифузії газових фаз та домішок, в зоні живлення накопичується їх більше, ніж у плинній зоні. Ще більшою буде їх частка відносно об'єму розплаву  $\alpha_a^L$  та  $\beta_b^L$ , а тому припущення малості  $\alpha_a^L$  та  $\beta_b^L$ , як і  $\zeta$ , в зоні живлення і в інших частинах неплинної зони, намагаємося не робити.

Як і в плинній зоні, вважаємо, що на межі поділу фаз відбувається фазове перетворення при температурі  $T_f$ . Але, оскільки на відміну від плинної зони, частка розплаву в зоні живлення порівнянна з часткою кристалічної фази, то внаслідок їх високої теплопровідності можна зробити висновок (який підтвер-

джується розрахунками), що температура всієї зони живлення мало відрізняється від  $T_f$ , а тому температурною усадкою основного компонента розплаву можна знехтувати, покладаючи

$$\varepsilon = 0. \quad (9.38)$$

В зоні живлення

$$\bar{v}_2 = 0, \quad (9.39)$$

внаслідок чого розглядати субстанційну швидкість всього середовища, а тим більше дифузійну швидкість, наприклад, твердої фази, яка при такому розгляді не буде дорівнювати нулю, немає сенсу. У цьому разі в зоні живлення є сенс розглянути відповідні характеристики для розплаву, який складається з основної рідинної, газових та домішкових фаз. Так, його густина  $\rho_L$  визначається формулою (тут і далі індекс  $L$  використовується для позначення величин, які належать до розплаву):

$$\rho_L = \rho_o \gamma_L, \quad (9.40)$$

де

$$\gamma_L = \gamma + \sum_b \beta_b x_b = 1 - \zeta - \alpha - \sum_b \beta_b (1 - x_b). \quad (9.41)$$

Кристалічна фаза в певному розумінні протилежна рідинній фазі, яка позначається індексом  $L$ . Для підкреслення цього факту величини, які належать до кристалічної фази, поряд з індексом 2 позначатимемо також індексом  $S$ , а для об'ємних густин розплаву і кристалічної фази використовувати ще такі позначення:

$$\varphi_L = \gamma + \alpha + \beta, \quad \varphi_S = \zeta. \quad (9.42)$$

Очевидно,  $\varphi_L + \varphi_S = 1$ ,  $\rho = \rho_L + \rho_S$ .

Основною кінематичною характеристикою розплаву є його середньомасова швидкість:

$$\gamma_L = \frac{1}{\gamma_L} \left( \gamma \bar{v}_1 + \sum_b \beta_b x_b \bar{v}_b \right), \quad (9.43)$$

відносно якої визначаються дифузійні швидкості основної рідинної, газових та домішкових фаз:  $\vec{w}_{iL} = \vec{v}_i - \vec{v}_L$  для всіх  $i \neq 2$ .

Рівняння масопереносу розплаву можна отримати, підсумувавши рівняння масопереносу за всіма фазами, що належать йому, тобто за всіма, крім кристалічної (другої):

$$\frac{\partial \rho_L}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_L \vec{v}_L) = -\rho_S^0 \Phi_S. \quad (9.50)$$

При отриманні цього рівняння враховано, що внаслідок збереження маси  $\sum_{i,j} J_{ij} = 0$  і

$$\sum_i \sum_{j \neq 2} J_{ij} = -\sum_i J_{i2} = -\rho_2^0 \Phi_2 \equiv -\rho_S^0 \Phi_S. \quad (9.51)$$

Підставляючи (9.40) в (9.44), з урахуванням (9.41), отримуємо

$$\vec{\nabla} \cdot (\gamma_L \vec{v}_L) = -(1 + \delta_f) \Phi_S + \frac{\partial \zeta}{\partial t} + \sum_a \frac{\partial \alpha_a}{\partial t} + \sum_b \frac{\partial \beta_b}{\partial t} (1 - x_b). \quad (9.52)$$

Вирази для частинних похідних від об'ємних густин окремих фаз можна знайти з їх рівнянь масопереносу:

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = \Phi_S, \quad (9.53)$$

$$\frac{\partial \alpha_a}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot (\alpha_a \vec{v}_a) + \Phi_a, \quad (9.54)$$

$$\frac{\partial \beta_b}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot (\beta_b \vec{v}_b) + \Phi_b. \quad (9.55)$$

Нагадаємо, що  $\Phi_S$  та  $\Phi_b$  – сумарні об'ємні джерела кристалічної та  $b$ -ї домішкової фази, а  $\Phi_a$  – сумарне ефективне об'ємне джерело  $a$ -ї газової фази, яке враховує її стисливість. Підставляючи (9.47)–(9.49) в (9.46), знаходимо

$$\vec{\nabla} \cdot (\gamma_L \vec{v}_L) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{w} + \psi_L, \quad (9.56)$$

де

$$\vec{w} = \sum_a \alpha_a \vec{v}_a + \sum_b \beta_b (1 - x_b) \vec{v}_b, \quad (9.57)$$

$$\psi_L = -\delta_f \Phi_S + \sum_a \Phi_a + \sum_b (1 - x_b) \Phi_b. \quad (9.58)$$

В лівій частині формули (9.50) фігурує дивергенція не швидкості рідини, а комплексу  $\gamma_L \vec{v}_L$ , яка саме і характеризує джерело масової частки розплаву в зоні живлення. Джерело об'ємної частки розплаву характеризується дивергенцією комплексу  $\varphi_L \vec{v}_L$  для якого за аналогією з (9.50) отримуємо

$$\vec{\nabla} \cdot (\varphi_L \vec{v}_L) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{w}_L + \psi_L, \quad (9.50')$$

де

$$\vec{w}_L = \sum_a \alpha_a \vec{w}_{aL} + \sum_b \beta_b (1 - x_b) \vec{w}_{bL}. \quad (9.51')$$

Якщо знехтувати домішками, обидві дивергенції стають пропорційними коефіцієнту фазової усадки  $\delta_f$  та джерелу твердої фази  $\Phi_S$ , тобто цілком зумовлюються усадкою тверднення.

Рівняння руху розплаву крізь дендритний каркас, за аналогією з рівнянням масопереносу розплаву (9.44) отримуємо з рівнянь для окремих фаз, що утворюють розплав, підсумовуючи їх та враховуючи визначення  $\vec{v}_L$  (9.43):

$$\begin{aligned} \rho_L \frac{d\vec{v}_L}{dt} = & \nabla^k \vec{\sigma}_L^k + \rho_L \vec{g} + \vec{P}_{SL} + \rho_S^o \Phi_S \vec{v}_L - \\ & - \sum_{i \neq 2} \nabla^k (\rho_i \vec{w}_{iL} w_{iL}^k) \end{aligned} \quad (9.53)$$

де  $\vec{\sigma}_L^k = \sum_{i \neq 2} \vec{\sigma}_i^k$ ,  $\vec{P}_{SL} = \sum_i \vec{P}_{2i}$  – сила, з якою дендритний каркас діє на розплав у зоні живлення. При отриманні рівняння (9.43) був врахований закон збереження маси у вигляді рівняння масопереносу розплаву (9.44), а також закон збереження імпульсу, внаслідок якого

$$\sum_i \sum_{j \neq 2} \vec{P}_{ij} = -\sum_i \vec{P}_{i2} = \vec{P}_{SL}. \quad (9.54)$$

Наявність кристалічної фази в рівнянні (9.43) враховується у силі  $\vec{P}_{SL}$  та непрямо в реактивній силі, якою через не дуже велику швидкість кристалізації, яка має місце в зоні живлення, слід нехтувати.

Внаслідок великого опору рухові рідини з боку дендритного каркаса швидкість рідини, очевидно, буде незначною. Це дозволяє, використовуючи дифузійне наближення, знехтувати квадратами дифузійних швидкостей, а та-

кож інерційними та в'язкими силами, вважаючи ліву частину формули (9.43) нульовою, та приймаючи, що

$$\nabla^k \bar{\sigma}_L^k = -\bar{\nabla} p. \quad (9.55)$$

Дія кристалічного каркаса на розплав складається з двох частин: з капілярної сили  $\bar{F}_{KL}$  (сили капілярної взаємодії) та сили опору  $\bar{F}_{DL}$ :

$$\bar{P}_{SL} = \bar{F}_{KL} + \bar{F}_{DL}. \quad (9.56)$$

Капілярна сила  $\bar{F}_{KL}$  направлена вздовж дендритних каналів і зумовлена ступінню змочуваності розплавом поверхні дендритних кристалів. Внаслідок змочуваності виникає додатковий капілярний тиск  $p_{KL}$ , через який виражається капілярна сила:

$$\bar{F}_{KL} = -\bar{\nabla} p_{KL}. \quad (9.57)$$

Величину капілярного тиску можна визначити за формулою:

$$p_{KL} = \Phi_L / H(\zeta), \quad (9.58)$$

де параметр  $\Phi_L$  має розмірність поверхневого натягу (Н/м) і визначається властивостями розплаву за взаємодією з дендритним каркасом та  $H(\zeta)$  – функція  $\zeta$  розмірності довжини (м), яка залежить від побудови дендритної зони і має властивість

$$\lim_{\zeta \rightarrow 0} H(\zeta) \rightarrow \infty. \quad (9.59)$$

Із зростанням  $\zeta$  функція  $H(\zeta)$  спадає, завжди залишаючись додатною.

В деякій мірі прояснити зміст параметрів  $\Phi_L$  та  $H(\zeta)$  можна, звернувшись до відомої формули Лапласа для капілярного тиску в циліндричному капілярі радіусом  $R$ , яку можна отримати з (9.58), формально покладаючи в ній

$$\Phi_L = 2\sigma_L \cos\theta_L, \quad (9.60)$$

$$p_{KL}^L = -\frac{2\sigma_L}{R} \cos\theta_L, \quad (9.61)$$

де додатковий верхній індекс  $L$  біля тиску свідчить про те, що формулою (9.61) визначається тиск, усереднений за рідинною фазою (розплавом), в не за всім середовищем, як в (9.58),  $\theta_L$  – крайовий кут змочування та  $\sigma_L$  – поверхневий

натяг на міжфазній межі. Із формули (9.60) випливають властивості параметра  $\Phi_L$ , які мають місце і в загальному випадку: для не дуже насиченого лікватами розплаву крайовий кут змочування менше  $\pi/2$ ,  $\cos\theta_L > 0$  і параметр  $\Phi_L$ , як і капілярний тиск у дендритному каналі, від'ємний, а для дуже насиченого лікватами розплаву кут  $\theta_L$  може перевищити  $\pi/2$  і тоді  $\Phi_L$  стає додатним.

Якщо склад розплаву вздовж дендритного каналу буде не дуже мінятись, змінністю параметра  $\Phi_L$  можна знехтувати. У цьому разі підставляючи (9.58) в (9.57), отримуємо

$$\vec{F}_{KL} = -\Phi_L \varphi(\zeta) \vec{\nabla} \zeta, \quad (9.62)$$

де функція  $\varphi(\zeta)$  цілком визначається структурою дендритної зони:

$$\varphi(\zeta) = -H(\zeta)' / H(\zeta)^2 \quad (9.63)$$

і  $H(\zeta)'$  – звичайна похідна від  $H(\zeta)$  по  $\zeta$ . За нашим припущенням, і  $H(\zeta)' < 0$ , тому  $\varphi(\zeta) > 0$ . Крім того,

$$\lim_{\zeta \rightarrow 0} \varphi(\zeta) \rightarrow 0. \quad (9.64)$$

Отже, капілярна сила діє вздовж градієнта  $\zeta$  (саме в цьому напрямку, ми припускаємо, розташовані дендритні канали). Враховуючи властивості параметра  $\Phi_L$ , бачимо, що в разі, коли розплав не дуже насичений лікватами, капілярна сила діє в напрямку твердої зони. Для дуже насиченого лікватами розплаву капілярна сила має протилежний напрямок. Разом із зменшенням густини кристалічної фази  $\zeta$  капілярна сила зменшується.

Завдяки тому, що капілярна сила проявляється лише через додатковий (капілярний) тиск, який разом із статичним та динамічним тиском входить у повний тиск середовища, конкретний вираз для капілярної сили (9.62), що діє на розплав у цілому, з невизначеними коефіцієнтами і параметрами, не має практичного значення, оскільки, як буде видно з подальшого, можна безпосередньо знаходити повний тиск середовища без диференціації його на капілярний (міжфазний) і некапілярний (внутріфазний).

У нашому випадку можна вибрати лінійний за швидкістю закон опору рухові розплаву, аналогічний стоксівському:

$$\vec{F}_{DL} = -\frac{\mu_L}{K(\zeta)}\gamma_L\vec{v}_L, \quad (9.65)$$

де функція  $K(\zeta)$ , яка залежить від густини кристалічної фази  $\zeta$ , називається проникністю зони живлення та має розмірність площини ( $m^2$ ) і властивості:

$$\begin{aligned} \lim_{\zeta \rightarrow 1} K(\zeta) &\rightarrow 0, \\ \lim_{\zeta \rightarrow 0} K(\zeta) &\rightarrow \infty, \end{aligned} \quad (9.66)$$

завдяки чому при збільшенні об'ємної частки твердої фази до одиниці сила опору руху рідини збільшується до нескінченності, а при зменшенні її до нуля – зменшується до нуля.

Враховуючи всі названі вище припущення, замість диференціального рівняння руху розплаву в зоні живлення (9.43) отримуємо досить просте алгебраїчне рівняння:

$$-\vec{\nabla}(p + p_{KL}) + \rho_o\gamma\vec{g} - \frac{\mu_L}{K(\zeta)}\gamma_L\vec{v}_L = 0 \quad (9.67)$$

відносно швидкості  $\vec{v}_L$ , розв'язання якого дає закон Дарсі:

$$\vec{v}_L = -\frac{K(\zeta)}{\gamma_L\nu'_L}(\vec{\nabla}\bar{p} - \gamma_L\vec{g}), \quad (9.68)$$

де  $\bar{p} = (p + p_{KL})/\rho_o$  та  $\nu'_L = \mu_L/\rho_o$ . Виділимо статичну частку тиску чистого розплаву  $p_o$ , яка визначається рівнянням  $\vec{\nabla}p_o = (1-\zeta)\rho_o\vec{g}$  та динамічну частку тиску:  $p' = p - p_o + p_{KL}$ .

Тоді формула (9.67) з урахуванням (9.41) набуває вигляду

$$\vec{v}_L = -\frac{K(\zeta)}{\gamma_L\nu'_L} \left\{ \vec{\nabla}\tilde{p} + \left[ \alpha + \sum_b \beta_b(1-x_b) \right] \vec{g} \right\}, \quad (9.69)$$

де  $\tilde{p} = p'/\rho_o$ .

Щоб знайти поле тиску в зоні живлення, обидві частини рівняння (9.69) помножимо на  $\gamma_L$  і виконаємо операцію взяття дивергенції:

$$\vec{\nabla} \cdot (\gamma_L\vec{v}_L) = -\left\{ \vec{\nabla} \cdot [K(\zeta)\vec{\nabla}\tilde{p}] + \vec{g} \cdot \vec{\nabla}[(1-\gamma_L)K(\zeta)] \right\} / \nu'_L \quad (9.70)$$



або, з урахуванням виразу для  $\gamma_L$  (9.41):

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot (\gamma_L \vec{v}_L) = & - \left\{ \vec{\nabla} \tilde{p} + \vec{g} \cdot [\vec{\nabla} \zeta + \vec{\nabla} \alpha + \right. \\ & \left. + \sum_b \vec{\nabla} \beta_b (1 - x_b) \right\} K(\zeta) / v'_L - \\ & - \left\{ \vec{\nabla} \tilde{p} + [\zeta + \alpha + \sum_b \vec{\nabla} \beta_b (1 - x_b)] \vec{g} \right\} \cdot \vec{\nabla} K(\zeta) / v'_L. \end{aligned} \quad (9.70')$$

Порівнюючи (9.70) з (9.40), знаходимо рівняння для визначення тиску в зоні живлення:

$$\vec{\nabla} \cdot [K(\zeta) \vec{\nabla} \tilde{p}] = -\vec{g} \cdot \vec{\nabla} [(1 - \gamma_L) K(\zeta)] + (\vec{\nabla} \cdot \vec{w} - \psi_L) v'_L, \quad (9.71)$$

або:

$$\begin{aligned} \Delta \tilde{p} = & -\vec{g} \cdot [\vec{\nabla} \zeta + \vec{\nabla} \alpha + \sum_b \vec{\nabla} \beta_b (1 - x_b)] - \\ & - \left\{ \vec{\nabla} \tilde{p} + [\zeta + \alpha + \sum_b \vec{\nabla} \beta_b (1 - x_b)] \vec{g} \right\} \cdot \vec{\nabla} \ln K(\zeta) + \\ & + (\vec{\nabla} \cdot \vec{w} - \psi_L) v'_L / K(\zeta). \end{aligned} \quad (9.71')$$

Розглянемо тепер масоперенос газових фаз та домішок у зоні живлення. Вихідними рівняннями тут є рівняння (9.48) та (9.49), в яких треба ще конкретизувати швидкості фаз, в чому і полягає наше завдання.

Механізм переносу дисперсних фаз у поруватій зоні живлення зі змінною і структурованою завдяки присутності дендритів поруватістю дуже складний і може бути промодельований лише за умови серйозних спрощуючих припущень, які повинні ґрунтуватись на наявних експериментальних даних. В основу нашого розгляду покладемо механізм масопереносу в зоні живлення, який впливає з досить ґрунтовних та всебічних експериментальних досліджень, проведених в інституті проблем лиття НАН України, як на прозорих фізичних моделях, так і безпосередньо на сталі за допомогою спеціально розробленої експериментальної методики. Ці дослідження підтверджують та деталізують гіпотезу про капілярний (в основному) механізм переносу домішок у міждендритному просторі.

Завдяки капілярним явищам змочуюча рідина втягується в капіляр, а незмочуюча, навпаки, з нього виштовхується. У процесі усадки основний компонент розплаву через кращу змочуваність поверхні кристалів переміщується по дендритному каналу в напрямку до повністю застиглому металу і виштовхує звідти рідину, збагачену лікватами. Ця рідина буде рухатись у напрямку вершин дендритів з швидкістю, порівнянною зі швидкістю фронту кристалізації.

Для оцінки середньої швидкості капілярного пересування збагаченої лікватами рідини звичайно користуються формулою Пуазейля

$$\vec{v}_p = -\frac{R^2}{8\mu_L} \vec{\nabla} p^L = \frac{R^2}{8\mu_L} \frac{\Delta p^L}{L} \vec{n}, \quad (9.72)$$

де  $R$  та  $L$  – середній радіус та довжина міждендритних каналів:  $\Delta p^L$  – перепад парціального капілярного тиску на збагачену лікватами рідину по каналу, розміщеному вздовж одиничного вектора  $\vec{n}$ , направлено до вершин дендритів. Для приблизного знаходження перепаду парціального тиску в дендритному каналі можна скористатись з формули Лапласа (9.61). Тоді, враховуючи присутність в дендритному каналі як чистого розплаву (основного компонента розплаву), так і лікватів, отримуємо

$$\vec{v}_p = \frac{R}{4L} \left( \frac{\sigma_p}{\mu_p} \cos\theta_p - \frac{\sigma_1}{\mu_1} \cos\theta_1 \right) \vec{n}, \quad (9.73)$$

де індекс  $P$  відноситься до розплаву, збагаченого лікватами, а  $1$  – до чистого розплаву. Оскільки до насиченого лікватами розплаву теплофізичні параметри залежать від концентрації лікватів і в загальному випадку не відомі, їх доводиться розглядати як феноменологічні параметри, що наштовхує на думку безпосередньо задавати капілярні швидкості лікватів як феноменологічні параметри. При цьому одночасно можна знехтувати всіма іншими складовими швидкостей дисперсних фаз як малими порівняно з капілярними складовими. Надалі, в спрощених варіантах моделей масопереносу в зоні живлення, ми так і будемо робити. Зараз же розглянемо більш повний варіант, що детальніше враховує за-

кономірності капілярного руху компонентів розплаву й інші складові їх швидкостей.

Оскільки як газові, так і домішкові фази мають спільний механізм переносу в зоні живлення, будемо розглядати їх поки що спільно, розрізняючи всі величини, які належать фазам, за індексом  $l$ , який для газових фаз набуває значення  $l = a$ , а для домішкових –  $l = b$ . Тоді, наприклад,  $\alpha_l$  при  $l = a$  буде об'ємною густиною газової фази  $\alpha_a$ , а при  $l = b$  – об'ємною густиною домішкової фази  $\beta_b$ . Для об'ємних густин включень відносно одиничного об'єму розплаву використовується позначення  $\alpha_l^L = \alpha_l / (1 - \zeta)$ .

Розглянемо сили, які діють на одиничний об'єм  $l$ -ї фази в зоні живлення, нехтуючи інерційними та реактивними силами:

$$\vec{F}_{Vl} + \vec{F}_{Kl} + \vec{F}_{Ll} + \vec{F}_{Sl} = 0, \quad (9.74)$$

де  $\vec{F}_{Vl}$  – рівнодіюча об'ємної та архімедової сили;  $\vec{F}_{Kl}$  – капілярна сила і  $\vec{F}_{Ll}$  та  $\vec{F}_{Sl}$  – сили опору руху  $l$ -ї фази з боку розплаву та дендритного каркаса відповідно.

Сила  $\vec{F}_{Vl}$  визначається співвідношенням:

$$\vec{F}_{Vl} = -\alpha_l \rho_o (1 - x_l) \vec{g}, \quad (9.75)$$

де  $x_l = \rho_l^o / \rho_o$ .

Для сили капілярної дії на  $l$ -у фазу використовуємо вираз, аналогічний (2.2.20):

$$\vec{F}_{Kl} = -\vec{\nabla} p_{Kl}, \quad (9.76)$$

де  $p_{Kl}$  – парціальний капілярний тиск на  $l$ -у фазу, величина якого може бути визначена за формулою, аналогічною (9.58):

$$p_{kl} = \phi_l(\alpha_l^L) / H(\zeta), \quad (9.77)$$

але яка враховує залежність параметра  $\phi_l$  від густини  $l$ -ї фази  $\alpha_l^L$  в дендритному каналі. Очевидно,

$$\lim_{\alpha_l^L \rightarrow 0} \phi_l(\alpha_l^L) \rightarrow 0. \quad (9.78)$$

Підставляючи (9.77) в (9.75) з урахуванням визначення (9.63), знаходимо

$$\bar{F}_{kl} = -\phi_l(\alpha_l^L) \varphi(\zeta) \bar{\nabla} \zeta - \frac{\phi_l(\alpha_l^L)}{H(\zeta)} \bar{\nabla} \alpha_l^L, \quad (9.79)$$

тобто, крім першої складової капілярної сили, пов'язаної з розширенням дендритного каналу, існує ще й друга складова, яка має місце внаслідок зміни концентрації дисперсної фази. Якщо  $\alpha_l^L$  зростає у глиб дендритного каналу, то з (9.79) випливає, що ці обидві компоненти мають однаковий напрямок, який визначається знаком параметра  $\phi_l(\alpha_l^L)$ .

Для функції  $\varphi(\zeta)$  найпростішим виразом є лінійна залежність від  $\zeta$ , тому з урахуванням (9.64) в даному випадку маємо

$$\varphi(\zeta) = f\zeta, \quad (9.80)$$

де  $f$  – деяка додатна константа, що залежить від структури дендритного каркаса.

У цьому разі з (9.63) випливає

$$\frac{1}{H(\zeta)} = \frac{f}{2} \zeta^2. \quad (9.81)$$

Припустимо також, що залежність параметрів  $\phi_l(\alpha_l^L)$  від  $\alpha_l^L$ , яка задовольняє властивості (9.78) лінійна:

$$\phi_l(\alpha_l^L) = h_l \alpha_l^L. \quad (9.82)$$

Тут параметр  $h_l$ , який цілком визначається властивостями  $l$ -ї фази, від'ємний у разі змочуваності даною фазою дендритів і додатний – в протилежному випадку. Тоді підставляючи (9.81) та (9.82), одержуємо в (9.67),

$$p_{kl} = H_l \alpha_l^L \zeta^2 / 2 = (H_l / 2) \alpha_l^L \zeta^2 / (1 - \zeta), \quad (9.83)$$

де  $H_l = f h_l$ , і капілярна сила набуває вигляду

$$\begin{aligned} \bar{F}_{kl} &= -H_l \zeta \alpha_l^L \left( \bar{\nabla} \zeta + \frac{1}{2} \zeta \bar{\nabla} \ln \alpha_l^L \right) = \\ &= -\frac{H_l}{2} \alpha_l^L \frac{\zeta}{1 - \zeta} \left( \frac{2 - \zeta}{1 - \zeta} \bar{\nabla} \zeta + \zeta \bar{\nabla} \ln \alpha_l^L \right). \end{aligned} \quad (9.84)$$

Константи  $H_l$  залежать як від властивостей  $l$ -ї фази, так і від властивостей дендритного каркаса, а тому при вивченні масопереносу домішок можуть розглядатись як феноменологічні параметри.

Сила опору першій фазі з боку решти складових розплаву  $\vec{F}_{Ll}$  може бути знайдена за формулою на зразок стоксівської:

$$\vec{F}_{Ll} = -C_{lD} \frac{v'_L}{d_l^2} \rho_o \alpha_l \vec{v}_l^c = -m_l \rho_o \alpha_l \vec{v}_{lL}^c, \quad (9.85)$$

де, очевидно,

$$m_l = C_{lD} \frac{v'_L}{d_l^2}, \quad (9.86)$$

і використана колективна складова відносної швидкості першої фази  $\vec{v}_{lL}^c$ .

Сила опору з боку дендритного каркаса  $\vec{F}_{Sl}$  пропорційна масовій густині  $l$ -ї фази:

$$\vec{F}_{Sl} = -\frac{\mu_L}{K(\zeta)} \frac{\rho_l}{\rho_o} \vec{v}_l^c = -n_l \rho_o \alpha_l \vec{v}_l^c, \quad (9.87)$$

де

$$n_l = \frac{v'_L x_l}{K(\zeta)} \quad (9.88)$$

та  $\vec{v}_l^c$  – колективна швидкість  $l$ -ї фази, яка вибрана з урахуванням необхідності виконання співвідношення

$$\sum_{i \neq 2} \vec{F}_{Si} = \vec{F}_{DL}, \quad (9.89)$$

де  $\vec{F}_{DL}$  – сила опору руху розплаву з боку дендритного каркаса, яка дається виразом (9.65). Проникність зони живлення  $K(\zeta)$  має геометричне походження, а тому вона однакова як для всіх фаз, так і для всього розплаву в цілому. У справедливості співвідношення (9.79) при колективному русі легко переконатися, виходячи з виразу (9.87) і аналогічного виразу для  $\vec{F}_{Si}$  та враховуючи визна-

чення (9.43), в якому замість повних швидкостей слід використовувати колективні швидкості.

Підставляючи в рівняння (9.74) знайдені вирази для сил та виконуючи ще деякі прості алгебраїчні перетворення, отримуємо рівняння для визначення колективної швидкості l-ї фази:

$$(1-x_l)\bar{g} + \frac{H'_l}{2} \frac{\zeta}{1-\zeta} \left( \frac{2-\zeta}{1-\zeta} \bar{\nabla}\zeta + \zeta \bar{\nabla} \ln \alpha_l \right) + m_l \bar{v}_{lL}^c + n_l \bar{v}_l^c = 0, \quad (9.90)$$

де  $H'_l = H_l / \rho_0$ . Зважаючи на те, що

$$\bar{v}_{lL}^c = \bar{v}_l^c - \bar{v}_L, \quad (9.91)$$

з (9.90) знаходимо

$$\bar{v}_l^c = \frac{1}{m_l + n_l} \left[ m_l \bar{v}_L - (1-x_l)\bar{g} - \frac{H'_l}{2} \frac{\zeta}{1-\zeta} \left( \frac{2-\zeta}{1-\zeta} \bar{\nabla}\zeta + \zeta \bar{\nabla} \ln \alpha_l \right) \right]. \quad (9.92)$$

Користуючись (9.86) та (9.88), перший множник цієї формули можна подати у вигляді

$$\frac{1}{m_l + n_l} = \frac{1}{v'_L} \frac{K(\zeta) d_l^2}{C_{lD} K(\zeta) + x_l d_l^2}. \quad (9.93)$$

Для газових фаз, завдяки вакуумному наближенню,  $x_a \rightarrow 0$ ,  $n_a \rightarrow 0$ , і формула (9.92) спрощується

$$\bar{v}_a^c = \bar{v}_L - \frac{d_a^2}{v'_L C_{aD}} \left[ \bar{g} + \frac{H'_a}{2} \frac{\zeta}{1-\zeta} \left( \frac{2-\zeta}{1-\zeta} \bar{\nabla}\zeta + \zeta \bar{\nabla} \ln \alpha_a \right) \right]. \quad (9.94)$$

Внаслідок взаємодії частинок дисперсної фази з гілками первинних та вторинних дендритів стає помітною додаткова випадкова або дифузійна складова руху l-ї фази:

$$\bar{v}_l = \bar{v}_l^c + \bar{w}_l^d, \quad (9.95)$$

$$\bar{w}_l^d = -\frac{1}{\alpha_l^L} D_l \bar{\nabla} \alpha_l^L = -\frac{1}{\alpha_l^L} (1-\zeta) D_l \bar{\nabla} \frac{\alpha_l}{1-\zeta}, \quad (9.96)$$

яка містить у собі також складову, зумовлену молекулярною дифузією. Але, як відомо, ця складова в десятки тисяч разів менша за інші, що дає можливість її

не враховувати і ефективні коефіцієнти дифузії  $D_i$  вважати за феноменологічні параметри.

При спробі більш повно врахувати в рівняннях масопереносу анізотропну структуру дендритної зони, ефективні коефіцієнти дифузії  $D$  слід брати у вигляді, які залежать від  $\zeta$  тензорів, використовуючи при побудові їх такий характерний для дендритної зони вектор, як  $\vec{\nabla}\zeta$ , або, при наявності більшої інформації про структуру дендритної зони, ще й інші вектори, що її характеризують.

Отже, масоперенос газових та домішкових фаз у зоні живлення визначається рівнянням

$$\frac{\partial \alpha_l}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_l \vec{v}_l^c) = \vec{\nabla} \cdot [(1 - \zeta) D_l \vec{\nabla} \frac{\alpha_l}{1 - \zeta}] + \Phi_l, \quad (9.97)$$

яке впливає з (9.48), (9.49) і в якому  $\vec{v}_l^c$  визначається – співвідношенням (9.92) (або для газових фаз в спрощеному вигляді співвідношенням (9.94)).

При отриманні рівнянь масопереносу в зоні вкрапленого розплаву будемо враховувати, що, за нашим припущенням, швидкості всіх фаз у цій зоні дорівнюють нулю, внаслідок чого рівняння (9.47)–(9.49) скорочуються:

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = \Phi_s, \quad \frac{\partial \alpha_a}{\partial t} = \Phi_a, \quad \frac{\partial \beta_b}{\partial t} = \Phi_b. \quad (9.98)$$

Використання ж рівняння нерозривності для середовища в цілому (можливо, у вигляді рівняння (9.44)) приводить до співвідношення між джерелами фаз:

$$\delta_f \Phi_s = \sum_a \Phi_a + \sum_b (1 - x_b) \Phi_b, \quad (9.99)$$

яке свідчить про їх залежність у зоні вкрапленого розплаву. Ця залежність має глибокий фізичний зміст і є основною причиною деяких дефектів зливка, зокрема газоусадочної поруватості. Дійсно, з формули (9.99) впливає, що усадка тверднення в зоні вкрапленого розплаву може бути скомпенсована або за рахунок ефективних джерел газових фаз (перший доданок правої частини формули (9.99)), який, нагадаємо, містить у собі й доданки, що враховують згідно з рівняннями стану стисливість газових фаз, або за рахунок джерел домішкових фаз

(останній доданок у формулі (9.99)). Перший механізм може призвести до появи в ізолюваних об'ємах розплаву в зоні вкрапленого розплаву газових включень за рахунок розриву рідини при досягненні тиском, що зменшується через розрядження, зумовлене усадкою тверднення, критичного від'ємного значення  $p_{кр}$ , і всмоктування в них розчинених у рідині газів. Другий механізм може призвести до активізації виділення в ізолюваному об'ємі лікватів і утворення через це дефекту структури зливка. Більш детально ці питання розглянемо в наступному параграфі при розгляді структури джерел фаз.

Розглянемо тепер рівняння енергії в неплинній зоні.

Насамперед дослідимо зону живлення. Оскільки частинки рідинної та твердої фаз в зоні живлення порівнянні, то незважаючи на те що на поверхні їх розподілу підтримується температура фазового переходу  $T_f$ , ні для однієї з цих фаз не можемо прийняти, що її температура також дорівнює  $T_f$ . Температура дендритів (в разі тверднення) в середньому завжди буде дещо нижчою за  $T_f$ , і чим більшою буде їх об'ємна частка  $\zeta$ , тим нижче буде їх середня температура, що і забезпечуватиме відведення тепла кристалізації з поверхні кристалізації в тверду зону. Рідинна ж фаза в цілому (за винятком областей переохолодження розплаву перед фронтом кристалізації в разі їх виникнення) має дещо вищу за  $T_f$  температуру, що забезпечує потік тепла з рідинної зони зливка і її охолодження. Така ситуація вимагає застосування двотемпературного способу опису теплового стану середовища, що значно ускладнює задачу і збільшує вимоги до ЕОМ в разі чисельного моделювання. Щоб уникнути цих додаткових ускладнень зауважимо, що температура обох фаз (кристалічної та рідинної) в зоні живлення все ж слабо відрізняється від  $T_f$  і хоч не можна для обох фаз ввести рівноважну температуру, можна, як і в плинній зоні, ввести середню за фазами або квазірівноважну температуру  $T$ , вважаючи, що вона притаманна всім фазам, за допомогою такого підходу можна описати теплову обстановку та основні теплові потоки в зоні живлення зливка, який кристалізується, економлячи, водно-



час, кількість необхідних рівнянь. Але цей же підхід може бути застосованим і в зоні вкрапленого розплаву та твердій зоні. В цих зонах квазірівноважна температура  $T$  буде наближатись до температури твердої фази, збігаючись з нею в твердій зоні. Отже, подальші міркування стосуються всієї неплинної зони в цілому. При цьому треба враховувати, що в зоні вкрапленого розплаву та твердій зоні всі швидкості фаз дорівнюють нулю.

Таким чином, замість використання теплових рівнянь окремо для кожної з фаз підсумуємо їх, враховуючи наше припущення –  $T_i = T$ :

$$\begin{aligned} & \left[ C_1 \gamma + C_2 \zeta (1 + \delta_f) + \sum_b C_b \beta_b x_b \right] \frac{\partial T}{\partial t} = \\ & = \vec{\nabla} \cdot (\lambda'_e \vec{\nabla} T) + Q' + \sum_{i,j} J'_{ij} E_i - \left[ C_1 \gamma \vec{v}_1 + \sum_b C_b \beta_b x_b \vec{v}_b \right] \cdot \vec{\nabla} T, \end{aligned} \quad (9.100)$$

де, як і в плинній зоні, прийнято, що

$$\vec{q} = \lambda'_e \vec{\nabla} T. \quad (9.101)$$

В неплинній зоні, на відміну від плинної, рух фаз, якщо він і відбувається, досить повільний, а тому турбулентними ефектами можна знехтувати. В цьому разі теплопровідність середовища визначається теплопровідностями фаз та їх частинками і може бути знайдена за формулою (9.32):

$$\lambda_e = \lambda'_e \rho_o = \gamma \lambda_1 + \zeta \lambda_2 + \sum_a \alpha_a \lambda_a + \sum_b \beta_b \lambda_b. \quad (9.102)$$

В припущенні теплової вагомості тільки теплоти тверднення розплаву:

$$Q' + \sum_{i,j} J'_{ij} E_i = (1 + \delta_f) L_e \Phi_S, \quad (9.103)$$

де  $L_e$  визначається формулою (9.31), а також ввівши позначення

$$C = C_1 \gamma + C_2 \zeta (1 + \delta_f) + \sum_b C_b \beta_b x_b, \quad (9.104)$$

$$\vec{\chi} = C_1 \gamma \vec{v}_1 + \sum_b C_b \beta_b x_b \vec{v}_b, \quad (9.105)$$

замість (9.100) отримуємо рівняння, схоже на рівняння (9.30):

$$C \frac{\partial T}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (\lambda'_e \vec{\nabla} T) + (1 + \delta_f) L_e \Phi_S - \vec{\chi} \cdot \vec{\nabla} T, \quad (9.106)$$

яке в нульовому наближенні за об'ємними густинами газових та домішкових фаз і коефіцієнтом фазової усадки  $\delta_f$  (в двофазному наближенні) набуває вигляду

$$[C_1(1-\zeta)+C_2\zeta]\frac{\partial T}{\partial t} = -C_1(1-\zeta)\vec{v}_1 \cdot \vec{\nabla}T + \\ + \vec{\nabla} \cdot \{[\lambda'_1(1-\zeta)+\lambda'_2\zeta]\vec{\nabla}T\} + L_e\Phi_s, \quad (9.107)$$

де  $\lambda'_1 = \lambda_1 / \rho_o$ ,  $\lambda'_2 = \lambda_2 / \rho_o$ , причому в цьому наближенні  $\vec{v}_1 = \vec{v}_L$ .

Рівняння (9.106) та (9.107), як можна легко побачити, є окремим випадком рівнянням (9.34) та (9.37), якщо в них покласти  $\vec{v}_2 = 0$  та врахувати ламінарний режим руху, який має місце в нашому випадку.

В зоні вкрапленого розплаву та твердій зоні  $\vec{\chi} = 0$ ,  $\vec{v}_1 = 0$ , а тому останній доданок в рівнянні (9.106) та перший доданок правої частини формули (9.107) в цих зонах будуть відсутні.

## ТЕМА 10с.

### КІНЕТИКА ФАЗОВИХ ПЕРЕТВОРЕНЬ

Для замикання системи рівнянь динаміки кристалізації, наведених у попередніх параграфах, необхідно ще визначити об'ємні джерела фаз  $\Phi_s$ ,  $\Phi_a$  та  $\Phi_b$  (або масові джерела  $J_{ij}$ ) як функції теплофізичних характеристик середовища, таких як, тиск, температура, концентрація домішок та інших фаз, тобто визначитись з кінетикою фазових перетворень.

Якщо врахувати багатофазність середовища, що кристалізується, та взаємозалежність всіх його параметрів, стає зрозумілим, що сподіватись на знаходження точних кінетичних рівнянь зараз немає підстав. Крім того, в цьому немає і необхідності, тому що якби навіть такі співвідношення і були відомі, практично використати їх, швидше за все, не було б змоги через обмеженість ресурсів обчислювальної техніки. Разом з цим, прагнення до врахування якомога більшої кількості факторів повинно обмежуватись принциповою можливістю

перевірки їх наслідків, що дуже скорочує кількість таких факторів, особливо у випадку сталеливарного виробництва.

Все згадане вище дозволяє вибрати для визначення кінетики фазових перетворень феноменологічний підхід, що враховує лише основні залежності і використовує феноменологічні величини, які передбачається знаходити з експериментальних даних.

Розглянемо, насамперед, процес тверднення, який визначається об'ємним джерелом кристалічної фази  $\Phi_s$ .

Припустимо, що  $\Phi_s$  явно залежить тільки від двох параметрів – об'ємної частки кристалічної фази  $\zeta$  та різниці між квазірівноважною температурою середовища  $T$  та температурою фазового перетворення  $T_f$ :

$$\Delta_f T = T - T_f, \quad (10.1)$$

Тобто

$$\Phi_s = \Phi_s(\zeta, \Delta_f T). \quad (10.2)$$

Різниця  $\Delta_f T$  визначає ступінь відхилення середовища від рівноважного стану і можна чекати, що саме вона, насамперед, визначатиме швидкість перебігу фазового перетворення. Очевидно,

$$\Phi_s(\zeta, 0) = 0. \quad (10.3)$$

За допомогою залежності від  $\zeta$  можна враховувати, наприклад, такі різні джерела кристалічної фази, як гомогенне зародження кристалів та їх ріст від існуючих зародків – гетерогенне зародження.

Квазірівноважна температура  $T$  визначається як середня за всіма фазами в елементарному об'ємі температура і характеризує середовища в цілому, а тому залежить не тільки від температур фаз, а й від їх об'ємного співвідношення. Через  $T$  від цих факторів, завдяки припущенню (10.2), залежить і  $\Phi_s$ .

Ясно, що одну й ту саму температуру  $T$  може мати середовище з різними міжфазними різницями (градієнтами) температур, що, очевидно, призведе до різних швидкостей фазових перетворень. Це, з одного боку, показує деяку при-

близність і недосконалість використання квазірівноважної температури  $T$  для визначення швидкості кристалізації, з іншого, – важливість врахування залежності  $\Phi_s$  від  $\zeta$ , оскільки саме ця залежність може дещо знівелювати зазначені вище недоліки, пов'язані із застосуванням квазірівноважної температури  $T$ . Дійсно, через виділення скритої теплоти фазового перетворення  $L$  при твердненні межа поділу кристалічної та рідинної фаз буде підтримуватись при температурі  $T_f$  і та фаза, об'ємна частка якої менша, матиме температуру, ближчу до  $T_f$ . Отже, квазірівноважна температура  $T$  буде, в основному, визначатись часткою та температурою переважаючої фази. Це, насамперед, свідчить про взаємозалежність квазірівноважної температури  $T$ , об'ємної частки твердої фази  $\zeta$  та міжфазних температурних градієнтів, що дозволяє сподіватися на врахування їх в деякій мірі за допомогою параметрів  $T$  та  $\zeta$ . Крім того, внаслідок близькості температури переважаючої фази до квазірівноважної температури  $T$ , а температури інших фаз – до температури фазового перетворення  $T_f$ , в зоні рухомих кристалів  $\Delta_f T$ , буде визначати переохолодження розплаву по відношенню до кристалів, а в зоні вкрапленого розплаву навпаки, переохолодження кристалів відносно до розплаву.

Зазначених вище проблем не виникає в багатотемпературній моделі кристалізації, але комп'ютерна реалізація такої моделі вимагає набагато більше машинних ресурсів, ніж модель, яка розглядається, а тому, практично, взагалі не може бути реалізована на сучасній обчислювальній техніці.

Пильної уваги вимагає питання про фізичний зміст температури фазового перетворення  $T_f$ . Застосування її у визначенні (10.2) при  $T = T_f$  фазове перетворення не відбувається, тобто  $T_f$  є рівноважною температурою.

В моделі з фіксованими температурами ліквідуса  $T_L$  і солідуса  $T_S$  температура фазового перетворення  $T_f$  буде залежати від  $\zeta$ . При  $\zeta = 0$  вона повинна збігатися з  $T_L$ , а при  $\zeta = 1$  – з  $T_S$ . В усіх проміжних зонах значення  $T_f$  буде лежати між  $T_L$  та  $T_S$ . Найпростішою тут є лінійна залежність від  $\zeta$ :

$$T_f = (1 - \zeta)T_L + \zeta T_S. \quad (10.4)$$

Більш точним буде припущення про лінійну залежність температур ліквідуса  $T_L$  і солідуса  $T_S$  від густин домішкових фаз:

$$T_L = T_A - \sum_b a_b \beta_b^L, \quad (10.5)$$

$$T_S = T_A - \sum_b b_b \beta_b^S. \quad (10.6)$$

У цих формулах  $T_A$  – рівноважна температура чистого основного компонента;  $a_b$  та  $b_b$  – тангенси кутів нахилу ліній ліквідуса та солідуса відповідно, які визначають поверхні ліквідуса та солідуса на діаграмі стану середовища;  $\beta_b^L$  – об'ємна густина  $l$ -ї домішкової фази в розплаві, підрахована відносно одиничного об'єму розплаву;  $\beta_b^S$  – об'ємна густина (яка досі не розглядалася) тієї ж фази в кристалічній фазі відносно одиничного об'єму кристалічної фази.

Раніше, при розгляді динаміки тверднення, кристалічна фаза – основний компонент розплаву, що закристалізувався разом з розчиненими у ньому домішками, – розглядалась як одна спільна фаза. Це обумовлено кількома чинниками. Насамперед, через невеликі коефіцієнти дифузії домішок у твердій фазі порівняно з коефіцієнтами дифузії в рідинній фазі (хіба що за винятком водню) рухом домішок в кристалічній фазі можна знехтувати. Крім того, практично в усі формули динаміки кристалізації входять лише рухомі компоненти домішок, розчинених у розплаві, що дозволяє домішки в кристалічній фазі при розгляді динаміки тверднення не розглядати. Формальний опис цієї ситуації полегшується, якщо вважати вморожену фазу порівняно з фазою, що знаходиться в розплаві, вже іншою фазою, як ми це робили для основного компонента розплаву, враховуючи перехід у кристалічну фазу через джерело  $\Phi_S$ . І, нарешті, в рівноважному випадку, при фіксованій температурі, концентрації домішок у рідинній та кристалічній фазах однозначно зв'язані між собою за допомогою коефіцієнтів  $k_b$  рівноважного розподілу:

$$k_b = \beta_b^S / \beta_b^L, \quad (10.7)$$

що робить об'ємні густини домішок у твердій фазі, які однозначно виражаються через об'ємні густини домішок у розплаві

$$\beta_b^S = k_b \beta_b^L, \quad (10.8)$$

які, в свою чергу, виражаються через об'ємні густини домішок у розплаві  $\beta_b$ , що раніше розглядалися, підраховані відносно до одиничного об'єму всього середовища:

$$\beta_b^L = \beta_b / (1 - \zeta). \quad (10.9)$$

Експериментально було доведено, що хоча коефіцієнти  $k_b$  визначаються через поняття рівноваги, відношення концентрацій домішок у твердій і рідинній фазі, що знаходиться з нею в рівновазі, змінюється при твердненні або розплавленні дуже мало.

Співвідношення (10.7) дозволяє знайти зв'язок між тангенсами кутів нахилу ліній ліквідуса та солідуса  $a_b$  та  $b_b$  в рівняннях (10.5), (10.6):

$$a_b = k_b b_b. \quad (10.10)$$

Враховуючи той факт, що основними незалежними параметрами для визначення густин домішок у нас є  $\beta_b$ , з урахуванням (10.9) з формули (10.5) знаходимо

$$T_f = T_A - \sum_b a_b \beta_b / (1 - \zeta). \quad (10.11)$$

Через залежність від  $T_f$  (в комбінації  $\Delta_f T$ ) джерело твердої фази  $\Phi_s$  буде, також, залежати й від густин домішкових фаз  $\beta_b$ .

Розглянемо види залежності  $\Phi_s$  від  $\Delta_f T$ . Для цього, вважаючи відхилення температури  $T$  від рівноважного значення  $T_f$  невеликим, зробимо розклад функції  $\Phi_s$  в ряд. Враховуючи співвідношення (10.3), отримуємо

$$\Phi_s = -B(\zeta) \Delta_f T \pm D(\zeta) \Delta_f T^2 + \dots \quad (10.12)$$

Перший доданок у цій формулі відповідає нормальному

$$\Phi_s = -B(\zeta) \Delta_f T, \quad (10.13)$$

а другий – дислокаційному

$$\Phi_s = \pm D(\zeta) \Delta_f T^2 \quad (10.14)$$

механізму росту (плавлення) кристалів. У випадку тверднення перед другим доданком формули (10.12) та у формулі (10.14) слід брати знак плюс, в протилежному випадку – мінус. Це забезпечує симетрію процесу плавлення та тверднення, тобто перехід одного процесу в другий при зміні знака  $\Delta_f T$  на протилежний, причому з тією ж інтенсивністю.

Більш складну залежність джерела твердої фази  $\Phi_s$  від переохолодження розплаву  $\Delta_f T$  було використано в роботах, де прийнято, що у випадку дендритного росту існує критичне переохолодження  $\Delta_f T_k$ , при якому розплав активізується. Для такого розплаву було розглянуто наступна залежність джерела кристалів  $\Phi_s$  від  $\Delta_f T$ :

$$\Phi_s = \begin{cases} 0 & \Delta_f T > \Delta_f T_k \\ f(\Delta_f T) & \Delta_f T \leq \Delta_f T_k \end{cases}, \quad (10.15)$$

де функцію  $f(\Delta_f T)$  можна знайти за однією із формул (10.12)–(10.14).

Дещо узагальнений варіант функції (10.15) був використаний Н.І.Никитенко і Ю.Н.Кольчик у праці, де запропоновано враховувати ще напрям, з якого температура наближається до критичної позначки, а саме вважається, що процес тверднення починається і поновлюється при наявності деякого переохолодження сплаву  $\Delta_f T_k$ , але припиняється всякий раз, коли розплав стає перегрітим, тобто коли  $\Delta_f T > 0$ , а не  $\Delta_f T > \Delta_f T_k$ , як це зумовлено формулою (10.15). При цьому виникає коливальний механізм кристалізації, коли тверднення зливка характеризується чергуванням періодів охолодження міжфазної межі та тверднення. При такому механізмі кристалізації виникають досить цікаві зв'язки між частотою коливань та дисперсним складом кристалів у зливку.

Для з'ясування можливого характеру залежності джерела кристалічної фази  $\Phi_s$  від її частинки розглянемо кристалізацію сферичних кристалів в об'ємі розплаву. Якщо припустити, що відома швидкість зростання її радіуса  $R$ :

$$\frac{dR}{dt} = \pm K(\Delta_f T)^m, \quad (10.16)$$

де показник степеня  $m = 1$  або  $2$  залежить від механізму росту кристала, нормального чи дислокаційного і  $K$  – кінетичний коефіцієнт, то для його об'єму  $V$  отримуємо

$$\frac{dV}{dt} = \pm \sqrt[3]{36\pi} V^{2/3} K (\Delta_f T)^m. \quad (10.17)$$

Припустимо, що в одиничному об'ємі знаходиться  $N$  таких частинок. Тоді підсумовуючи за всіма частинкам в одиничному об'ємі рівняння (10.17) і враховуючи, що за цих умов  $\zeta = NV$ , отримуємо

$$\frac{d\zeta}{dt} = \Phi_s = \pm K' \zeta^{2/3} (\Delta_f T)^m, \quad (10.18)$$

де

$$K' = \sqrt[3]{36N\pi} K. \quad (10.19)$$

Отже, в даному випадку коефіцієнти  $B(\zeta)$  та  $D(\zeta)$  у формулах (10.12)–(10.14) пропорційні об'ємній густині кристалічної фази в степені  $2/3$ .

Необхідність критичного переохолодження розплаву для утворення зародків може бути промодельована залежністю типу (10.15).

**Ліквіація, сегрегація.** Визначимо тепер джерела  $\Phi_b$ , які пов'язуємо з твердими та рідинними домішками.

Тверді домішки в розплаві утворюються в процесі тверднення лише за умов їх вищої температури тверднення, ніж в основного компонента, тобто більшої тугоплавкості. До того ж треба, щоб вихідний розплав мав температуру, вищу за температуру їх плавлення. Таке відбувається дуже рідко, а тому тверді домішки, які зустрічаються в розплаві, потрапляють туди лише стороннім шляхом, тобто для твердих домішок в об'ємі розплаву, як правило,  $\Phi_b = 0$ .

Легкоплавкі ж домішки в розплаві зустрічаються дуже часто. Вони перебувають у рідинному стані протягом всього процесу тверднення зливка, і основний механізм їх виділення – сегрегація, тобто розподільна дифузія, яка має місце на межі поділу твердої та рідинної фаз. Що стосується ліквіації, тобто поділу рідинних фаз, то вона відносно рідко зустрічається при кристалізації, а до того ж погано вивчена. Розглядати її зараз поки що не будемо.



За самим вивченням сегрегації як розподільної дифузії ясно, що для знаходження джерела домішок, які з'являються в розплаві через механізм сегрегації, слід починати з розгляду розподілу їх як за рідинною, так і за твердою фазами та врахувати перерозподіл цих домішок при твердненні з урахуванням закону збереження їх маси.

Таким чином, крім об'ємних густин домішок у рідинній фазі  $\beta_b^L$  (підрахованих відносно об'єму рідинної фази), будемо розглядати об'ємні густини цих же домішок у твердій (кристалічній) фазі  $\beta_b^S$  (підрахованих відносно об'єму твердої фази). Строго кажучи, домішка в твердій фазі знаходиться вже в іншому фазовому стані, ніж у рідинній. Але зараз для нас важливо тільки те, що вони мають однаковий хімічний склад, отже, для знаходження джерела домішки в розплаві можна скористатися з рівняння збереження маси.

Аналогічно визначенню густини рідинної складової домішки  $b$  в середовищі:

$$\beta_b = \varphi_L \beta_b^L \quad (10.20)$$

(нагадаємо, що  $\varphi_L = 1 - \zeta$ ,  $\varphi_S = \zeta$ ), визначається її тверда складова:

$$\tilde{\beta}_b = \varphi_S \beta_b^S, \quad (10.21)$$

а також повна густина домішки  $b$  в середовищі:

$$\rho_b^h = \rho_b^o \beta_b + \tilde{\rho}_b^o \tilde{\beta}_b, \quad (10.22)$$

де  $\rho_b^o$  та  $\tilde{\rho}_b^o$  – істинні масові густини домішки  $b$  в рідинній та твердій фазах.

Припускаючи, що домішка  $b$  в процесі тверднення не утворюється і не розкладається, а лише перерозподіляється між розплавом та кристалічною фазою (що і називається сегрегацією), закон збереження маси для неї можна записати у вигляді

$$\frac{\partial \rho_b^h}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_b^o \beta_b \vec{v}_b + \tilde{\rho}_b^o \tilde{\beta}_b \vec{v}_s) = 0. \quad (10.23)$$

При отриманні цього рівняння було використано позначення  $\vec{v}_b$  для повної швидкості рідинної компоненти домішки  $b$ , а також прийнято, що дифузія домішки в твердій фазі практично відсутня, а тому її швидкість збігається з пов-

ною швидкістю твердої фази  $\vec{v}_s$ . Якщо використати вираз для істинної густини твердої домішки через коефіцієнт її фазової усадки  $\delta_{fb}$ :

$$\tilde{\rho}_b^o = (1 + \delta_{fb})\rho_b^o, \quad (10.24)$$

рівнянню (10.23) можна надати такий вигляд:

$$\frac{\partial}{\partial t}[\beta_b + (1 + \delta_{fb})\tilde{\beta}_b] + \vec{\nabla}[\beta_b \vec{v}_b + (1 + \delta_{fb})\tilde{\beta}_b \vec{v}_s] = 0 \quad (10.25)$$

або

$$\frac{\partial \beta_b}{\partial t} + \vec{\nabla}(\beta_b \vec{v}_b) = -(1 + \delta_{fb}) \left[ \frac{\partial \tilde{\beta}_b}{\partial t} + \vec{\nabla}(\tilde{\beta}_b \vec{v}_s) \right]. \quad (10.26)$$

Отже, для об'ємного джерела рідинної компоненти домішки  $b$  при сегрегації отримуємо

$$\Phi_b = -(1 + \delta_{fb}) \left[ \frac{\partial \tilde{\beta}_b}{\partial t} + \vec{\nabla}(\tilde{\beta}_b \vec{v}_s) \right]. \quad (10.27)$$

Конкретизуємо цей вираз з урахуванням коефіцієнта розподілу  $k_b$ , вважаючи його сталим. При цьому існує дві крайні можливості. В першій, з нашої точки зору більш послідовній, припускається, що через відсутність дифузії в твердій фазі (при максимальній мікросегрегації), коефіцієнт розподілу  $k_b$  визначає відношення концентрацій домішки  $b$ -ї фази в безпосередній близькості від межі фазового перетворення. У цьому разі з використанням (10.21) отримуємо

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\beta}_b = \frac{\partial}{\partial t} (\varphi_s \beta_b^s) = k_b \beta_b^L \frac{\partial \varphi_s}{\partial t}, \quad (10.28)$$

$$\vec{\nabla}(\tilde{\beta}_b \vec{v}_s) = k_b \beta_b^L \vec{\nabla}(\varphi_s \vec{v}_s). \quad (10.29)$$

При повній відсутності мікросегрегації відразу можна покласти  $\tilde{\beta}_b = k_b \beta_b^L$ , що дає такі формули:

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\beta}_b = k_b \left( \beta_b^L \frac{\partial \varphi_s}{\partial t} + \varphi_s \frac{\partial \beta_b^L}{\partial t} \right), \quad (10.30)$$

$$\vec{\nabla}(\tilde{\beta}_b \vec{v}_s) = k_b \left[ \beta_b^L \vec{\nabla}(\varphi_s \vec{v}_s) + \varphi_s \vec{v}_s \vec{\nabla} \beta_b^L \right]. \quad (10.31)$$

Проміжний варіант з наведених двох крайніх можливостей можна утворити за допомогою параметрів  $\zeta, \eta \in [0, 1]$ :

$$\frac{\partial \tilde{\beta}_b}{\partial t} = k_b \left( \beta_b^L \frac{\partial \varphi_S}{\partial t} + \zeta \varphi_S \frac{\partial \beta_b^L}{\partial t} \right), \quad (10.32)$$

$$\bar{\nabla}(\tilde{\beta}_b \bar{v}_S) = k_b \left[ \beta_b^L \bar{\nabla}(\varphi_S \bar{v}_S) + \eta \varphi_S \bar{v}_S \bar{\nabla} \beta_b^L \right] \quad (10.33)$$

Якщо, крім наведених формул, врахувати ще рівняння переносу кристалічної фази

$$\frac{\partial \varphi_S}{\partial t} + \bar{\nabla}(\varphi_S \bar{v}_S) = \Phi_S, \quad (10.34)$$

шукане джерело рідинних домішок набуває вигляду

$$\Phi_b = -(1 + \delta_{fb}) k_b \left( \beta_b^L \Phi_S + \varphi_S \frac{\delta \beta_b^L}{\delta t} \right), \quad (10.35)$$

де введено позначення

$$\frac{\delta \beta_b^L}{\delta t} = \zeta \frac{\partial \beta_b^L}{\partial t} + \eta \bar{v}_S \bar{\nabla} \beta_b^L. \quad (10.36)$$

При максимальній мікросегрегації  $\zeta = \eta = 0$ , тому  $\delta \beta_b^L / \delta t = 0$ . В цьому разі джерело рідинної домішкової фази визначається інтенсивністю фазового перетворення розплав–кристалічна фаза і при твердненні має від’ємний знак. При  $k_b = 0$ , очевидно,  $\Phi_b = 0$ .

З врахуванням виразу (10.35) рівняння макросегрегації (10.26) набуває вигляду

$$\frac{\partial \beta_b}{\partial t} + \bar{\nabla}(\beta_b \bar{v}_b) = -(1 + \delta_{fb}) k_b \left( \beta_b^L \Phi_S + \varphi_S \frac{\delta \beta_b^L}{\delta t} \right). \quad (10.37)$$

В літературі рівняння макросегрегації частіше зустрічається у вигляді рівняння відносно  $\beta_b^L$ . Для його отримання перетворимо ліву частину рівняння (10.37)

$$\frac{\partial \beta_b}{\partial t} + \bar{\nabla}(\beta_b \bar{v}_b) = \beta_b^L \left[ \frac{\partial \varphi_L}{\partial t} + \bar{\nabla}(\varphi_L \bar{v}_b) \right] + \varphi_L \frac{d_b \beta_b^L}{dt} \quad (10.38)$$

та врахуємо рівняння переносу розплаву

$$\frac{\partial \varphi_L}{\partial t} + \bar{\nabla}(\varphi_L \bar{v}_L) = -(1 + \delta_f) \Phi_S. \quad (10.39)$$

Тоді замість (10.38) отримуємо

$$\varphi_L \frac{d_b \beta_b^L}{dt} = \beta_b^L \left[ (I + \delta_f) \Phi_S - \bar{\nabla}(\varphi_L \bar{w}_{bL}) \right] + \Phi_b, \quad (10.40)$$

або, враховуючи, що  $\bar{v}_b = \bar{v}_L + \bar{w}_{bL}$ , матимемо

$$\varphi_L \frac{d_b \beta_b^L}{dt} = -\bar{\nabla}(\beta_b^L \varphi_L \bar{w}_{bL}) + \beta_b^L (I + \delta_f) \Phi_S + \Phi_b. \quad (10.41)$$

Якщо тепер підставити сюди вираз для джерела  $\Phi_b$  (10.35), отримаємо

$$\begin{aligned} \varphi_L \frac{d_b \beta_b^L}{dt} = & -\bar{\nabla}(\beta_b^L \varphi_L \bar{w}_{bL}) + \beta_b^L \left[ (I + \delta_f) - k_b (I + \delta_{fb}) \right] \Phi_S - \\ & - (I + \delta_{fb}) k_b \varphi_S \frac{\delta \beta_b^L}{\delta t}. \end{aligned} \quad (10.42)$$

Нагадаємо, що в загальному випадку швидкість фази  $b$  відносно розплаву  $\bar{w}_{bL}$  складається з двох компонент:

$$\bar{w}_{bL} = \bar{w}_{bL}^c + \bar{w}_{bL}^d, \quad (10.43)$$

які дещо відрізняються за фізичним змістом. Остання з них  $\bar{w}_{bL}^d$  є дифузійною складовою, або ефективною дифузійною складовою (тобто яка має вигляд дифузійної складової, але не молекулярне, а скажімо, турбулентне походження):

$$\bar{w}_{bL}^d = -\frac{I}{\beta_b^L} D_b \bar{\nabla} \beta_b^L. \quad (10.44)$$

Але набагато більше значення в двофазній зоні зливка, що твердне, має перша складова – колективна  $\bar{w}_{bL}^c$ , окремим випадком якої є відносна швидкість домішок зумовлена їх фільтрацією, наприклад, яка визначається в комбінації  $\bar{v}_b^c = \bar{v}_L + \bar{w}_{bL}^c$  рівнянням (10.55). На жаль, ця складова не враховується в існуючих моделях двофазної зони, а враховується лише дифузійна складова (10.44).

З врахуванням (10.43) та (10.44) рівняння (10.42) набуває свого кінцевого і найзагальнішого вигляду

$$\begin{aligned} \varphi_L \frac{d_b \beta_b^L}{dt} = & \bar{\nabla}(\varphi_L D_b \bar{\nabla} \beta_b^L) - \bar{\nabla}(\beta_b^L \varphi_L \bar{w}_{bL}^c) + \\ & + \beta_b^L \left[ (I + \delta_f) - k_b (I + \delta_{fb}) \right] \Phi_S - (I + \delta_{fb}) k_b \varphi_S \frac{\delta \beta_b^L}{\delta t}. \end{aligned} \quad (10.45)$$

За умови нерухомого розплаву  $\bar{v}_L = 0$ , максимальної мікросегрегації  $\zeta = \eta = 0$ , нехтування фазовим перетворенням тверднення та дифузійною домішок

також і в розплаві, перенос домішок все ж відбувається і може бути досить інтенсивним за рахунок капілярних явищ, що буде описуватись рівнянням

$$\varphi_L \frac{\partial \beta_b^L}{\partial t} = -\vec{\nabla}(\beta_b^L \varphi_L \vec{w}_{bL}^c), \quad (10.46)$$

яке впливає з (10.45), в обумовлених наближеннях.

Крім зазначеної вище дуже важливої можливості врахування фільтраційних швидкостей, в рівнянні (10.45) врахована також можливість різної фазової усадки розплаву  $\delta_f$  та домішок  $\delta_{fb}$ .

Рівняння (10.45) справедливе як для плинної, так і для неплинної зон зливка: в плинній – з урахуванням нашого припущення малості  $\zeta$ ,  $\beta_b^L = \beta_b$ , а в неплинній –  $\vec{v}_s = 0$ .

**Газоутворення.** Існує кілька механізмів газоутворення, які реалізуються в різних умовах і в різних зонах зливка, який твердне. З хімічних елементів, які вміщуються в киплячій сталі, на інтенсивність кипіння (газовиділення) найбільший вплив мають кисень, вуглець та марганець. Основну роль у процесі газоутворення відіграє реакція обезвуглення, тому, наприклад, гази, які виділяються при кипінні сталі у виливниці, вміщують до 90 % монооксиду вуглецю, а решта припадає на водень, азот, вуглекислий газ, метан та ін..

Сучасне уявлення про процес газовиділення у випадку киплячої сталі полягає в тому, що він розвивається за рахунок кисню, який розчинений у сталі при даному вміщенні вуглецю та марганцю. При цьому головну роль відіграє процес обезвуглення, при якому відбувається взаємодія між вуглецем та киснем, сконцентрованим на межі рідкої фази та шару, який затвердів.

Відомо, що зародження пузиря CO в розплаві можливе при умові, що внутрішній тиск, або тиск виділення, більший за суму атмосферного  $p_{атм}$ , феростатичного  $p_{фер} = \rho gh$  та капілярного  $p_{кан} = 2\sigma / r$  тисків:

$$p_{CO} \geq p_{атм} + p_{фер} + p_{кан}. \quad (10.47)$$

Гомогенне зародження пузирів CO в об'ємі розплаву ускладнено і при кристалізації металу пузирі CO утворюються здебільшого на твердій шорсткун-

ватій поверхні, тобто розвивається процес гетерогенного зародження. Зародком пузиря CO може служити пора усадочного походження на фронті кристалізації. При наявності готового зародка з радіусом кривизни поверхні достатньої величини (більше  $10^{-4}$  м) капілярним тиском у рівнянні (10.47) можна знехтувати, що спрощує умову (10.46):

$$P_{CO} \geq P_{атм} + P_{фер} \cdot \quad (10.48)$$

У зв'язку з тим, що реакція обезвуглення розплаву у виливниці близька до рівноваги, то чим далі добуток  $\beta_C^L$  (густина вуглецю в розплаві) на  $\alpha_o^L$  (густина кисню в розплаві) на фронті кристалізації знаходиться від рівноважного значення для даного рівня у зливку, тим вище інтенсивність перебігу цієї реакції. Отже, для джерела газової фази можна взяти такий вираз:

$$\Phi_{CO} = A(\beta_C^L - \beta_{Cp}^L)^n (\alpha_o^L - \alpha_{Op}^L)^m, \quad (10.49)$$

де  $A$  – емпіричний коефіцієнт,  $\beta_{Cp}^L$  та  $\alpha_{Op}^L$  – рівноважні густини вуглецю та кисню, а степені  $m$  та  $n$  залежать від форми пузиря, який утворюється і для плоского фронту газоутворення (без врахування кривизни пузиря CO) дорівнюють одиниці, а для сферичного пузиря  $-3/2$ . Теоретичний аналіз дає залежність коефіцієнта  $A$  від температури та тиску такого вигляду:

$$A = a\sqrt{T/p}. \quad (10.50)$$

Джерело  $\Phi_{CO}$  залежить від тиску ще й через рівноважні густини  $\beta_{Cp}^L$  та  $\alpha_{Op}^L$ .

Для визначення критичного тиску, починаючи з якого можливе виникнення газового пузиря існують як теоретичні, так і експериментальні дані, які можуть бути використані в конкретних умовах.

В зоні вкрапленого розплаву джерела всіх фаз зв'язані рівнянням (9.99), яке і дозволяє без визначення моменту досягнення тиском критичного значення, яке рано чи пізно обов'язково досягається через фазову усадку тверднення та обмеженість об'єму вкраплень розплаву, зразу знайти сумарне ефективне джерело всіх газових фаз:

$$\Phi_q = \sum_a \Phi_a = \delta_f \Phi_s - \sum_b (1 - x_b) \Phi_b. \quad (10.51)$$

## ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. А.П. Огурцов, С.Є. Самохвалов. Математичне моделювання теплофізичних процесів у багатофазних середовищах. — К.: "Наукова думка", 2001. — 410 с.
2. С.Є. Самохвалов. Теплофізичні процеси в багатофазних середовищах: теоретичні основи комп'ютерного моделювання. — Дніпродзержинськ, 1994. — 172 с.
3. Р.И. Нигматулин. Основы механики гетерогенных сред. — М.: «Наука», 1978.—336 с.

## НАВЧАЛЬНЕ ВИДАННЯ

Методичні вказівки до самостійної роботи з дисципліни «Чисельні методи у комп'ютерному моделюванні технологічних процесів» для здобувачів вищої освіти третього (освітньо-наукового) рівня докторів філософії спеціальності 113 «Прикладна математика»

Укладачі: д.т.н., професор Самохвалов С.Є.

к.т.н., доцент Косухіна О.С.

Підписано до друку \_\_\_\_\_ 2018 р.

Формат \_\_\_\_\_ Обсяг \_\_\_\_\_ др. арк.

Тираж \_\_\_\_\_ екз. Замовлення \_\_\_\_\_

Редакційно-видавничий відділ ДДТУ

51918, м. Кам'янське, вул.Дніпробудівська, 2.