

С. В. Коваль, С. С. Коваль

*Николаевский учебно-научный центр Одесского национального университета
им. И.И. Мечникова, г. Николаев*

Учет изменения теплофизических характеристик системы в задачах моделирования фазовых переходов

Создана методика расчета изменения теплопроводности и теплоемкости двухкомпонентной системы в интервале температур солидус–ликвидус. Установлена зависимость теплофизических свойств системы как функция от температуры и состава сплава. Результаты разработанной методики могут быть использованы при изучении процессов формирования внутренней структуры литых образцов.

Создание математических моделей процесса затвердевания металлических многокомпонентных систем требует учета изменения их теплофизических свойств. Теплоперенос при кристаллизации от поверхности затвердевшей фазы при формировании кристаллической структуры образца происходит через нее к стенке изложницы. Кинетика приведенного процесса оказывает определяющее влияние на физико-химические свойства слитка. Его внутренняя структура зависит, прежде всего, от интенсивности снятия теплоты перегрева и скорости кристаллизации расплава, которая характеризуется температурным градиентом перед границей затвердевания двухфазной системы. Размер двухфазной области зависит от интервала метастабильности сплава, который можно представить как суперпозицию интервалов метастабильности двухкомпонентных систем растворитель-примесь, скорости передвижения изотерм и распределения концентрации примесных компонентов вблизи поверхности кристаллизации.

Целью работы является создание методики расчета теплопроводности и теплоемкости сплава на различных этапах кристаллизации.

Зависимость теплопроводности сплава от концентрации компонентов и их теплопроводности, согласно [1]

$$\lambda = \sum_{p=1}^n \frac{r_p}{r} \lambda_p = \frac{\sum_{p=1}^n \lambda_p C_{0p}}{\sum_{p=1}^n \mu_p} = \mu \sum_{p=1}^n \frac{C_{0p} \lambda_p}{\mu_p}, \quad (1)$$

где r_p — число киломолей p -го компонента; r — число киломолей всего сплава

ва; C_{0p} — массовая концентрация p -го компонента; μ_p — молярная масса компонента;

$$\mu = \frac{1}{\sum_{p=1}^n \frac{C_{0p}}{\mu_p}} \text{ — кажущаяся молекулярная масса сплава.}$$

Тогда для двухкомпонентной системы $Fe-C$, согласно (1), теплопроводность (ijk) элемента запишется так:

$$\lambda_{ijk} = \frac{\mu_C \lambda_{Fe} (1 - C_{ijk}^T) + \lambda_C \mu_{Fe} C_{ijk}^T}{\mu_C (1 - C_{ijk}^T) + \mu_{Fe} C_{ijk}^T}, \quad (2)$$

где C_{ijk}^T — концентрация компонента в (ijk) выделенном элементе.

Моделирование фазовых переходов в конденсированных средах наиболее рационально производить методом конечных элементов. Преимущество данного метода заключается в том, что элементарный объем можно рассматривать как макроскопическую систему с сосредоточенными параметрами. При этом температурное поле во всем образце будет являться функцией пространства и времени. Для определения тепловых потоков через выделенный элемент (ijk) твердой фазы воспользуемся электрической аналогией для теплопроводности [2]:

$$q_{ijk} = \frac{\Delta T_{ijk}}{R_{ijk}}, \quad (3)$$

где $\Delta T_{ijk} = T_{ijk}'' - T_{ijk}'$ — перепад температур на границе элемента (ijk) (термический потенциал); T_{ijk}' , T_{ijk}'' — температура твердой фазы на входе и выходе из (ijk) элемента; R_{ijk} — термическое сопротивление полностью затвердевшей ячейки.

В двухфазной области, вокруг растущего дендрита формируется диффузионный пограничный слой, теплопередача в котором осуществляется только кондуктивным способом. Для кондуктивного переноса тепла термическое сопротивление, согласно [3], запишется так:

$$R_\lambda = \frac{\Delta y}{f \lambda}, \quad (4)$$

где Δy — расстояние между соответствующими точками сплошной среды; f — площадь поверхности контакта; λ — определяемый коэффициент теплопроводности металла.

Термическое сопротивление твердой фазы, закристаллизовавшейся за промежуток времени Δt , с учетом (2), в выделенном элементе:

$$R_{(\tau)ijk} = \frac{\Delta \varepsilon_{ijk} \Delta y}{\Delta x \Delta z \lambda_{ijk}}, \quad (5)$$

где $\Delta \varepsilon_{ijk}$ — относительное количество твердой фазы [4], закристаллизовавшейся за промежуток времени Δt , в выделенном элементе Δx , Δy , Δz — линейные размеры выделенного элемента; λ_{ijk} — теплопроводность твердой фазы, закристаллизовавшейся за данный промежуток времени.

Тогда результирующее термическое сопротивление закристаллизовавшегося элемента выразится следующим образом:

$$R_{ijk} = \sum_{p=1}^n \frac{\Delta \varepsilon_{(ijk)p} \Delta y}{\Delta x \Delta z \lambda_{(ijk)p}}. \quad (6)$$

Зависимость теплоемкости (ijk) элемента дендритной ячейки от концентрации компонента, согласно [1], выразится так:

$$c_{ijk} = \sum_{p=1}^n C_{0p} c_p, \quad (7)$$

где c_p — теплоемкость p -го компонента смеси.

Уравнения (2), (3), (5) — (7) образуют систему, которая может быть использована при построении математических моделей фазовых переходов в металлических конденсированных средах. Существующие модели фазовых переходов [5,6] принимают свойства системы либо постоянными, либо экспериментальные данные аппроксимируются по реперным точкам.

Экспериментально установлено, что теплопроводность сплавов вблизи температур солидус–ликвидус изменяется ступенчато. Проведенная компьютерная симуляция (рис. 1.а) позволила сравнить данные расчета с данными по замеру теплопроводности сплава AISI_1008 проведенные в Удмуртском государственном университете (УГУ), Россия. Видно, что в диапазоне температур солидус–ликвидус при понижении температуры наблюдается снижение теплопроводности сплава. Удовлетворительное совмещение результатов эксперимента и компьютерной симуляции свидетельствует об адекватности принятой методики расчета.

Преимущество разработанной схемы учета изменения теплофизических свойств системы состоит в том, что рассматриваемые параметры являются функциями температуры, времени и концентрации. На рис. 1.б. изображена зависимость теплопроводности выделяющейся твердой фазы в элементе двухфазной области сплава AISI_1008 от времени. Характер изменения теплопроводности для различных слоев неодинаков, что позволяет исследовать

кинетику формирования внутренней структуры в данной области. Разработанная методика расчета может быть использована при построении математических моделей неравновесной кристаллизации сплавов.

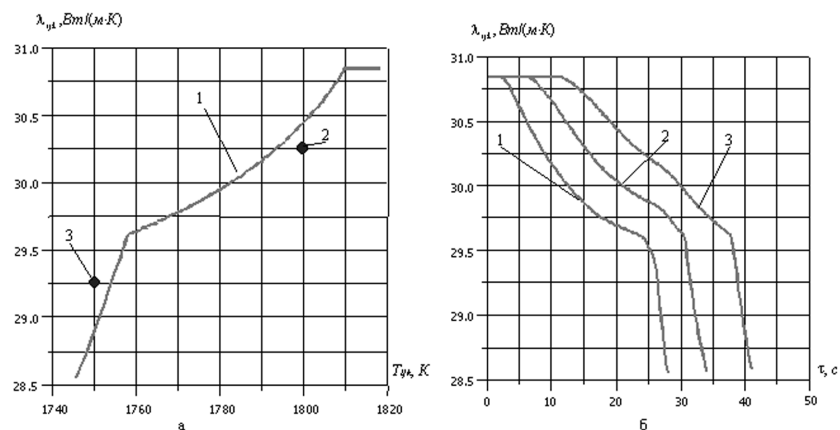


Рис.1 а). Зависимость теплопроводности сплава AISI_1008 от температуры. (1 — данные расчета; 2, 3 — данные эксперимента, проведенного в УГУ); б). Зависимость теплопроводности, выделяющейся твердой фазы в элементе (ijk) сплава AISI_1008 от времени.(1-4 элемент, 2-6 элемент, 3-8 элемент).

Литература

1. Хоблер Т. Теплопередача и теплообменники. — Л.:ГХИ, — 1961., 820с.
2. Ф.Крейт, У.Блек Основы теплопередачи. — М.: Мир, 1983. — 512с.
3. Лыков А.В. Теория теплопроводности. М.: Высшая школа, 1967. 600с.
4. Мочалов А.А., Коваль С.С. Математическая модель неравновесной кристаллизации двухкомпонентного сплава (укр.) // Науковий вісник Миколаївського державного педагогічного університету. Випуск 1, 1999, С249-252.
5. Недопекин Ф.В. Математическое моделирование гидродинамики и теплопереноса в слитках. — Ижевск, “Удмуртский ун-т.”, 1995, 236с.
6. Кан Р.У., Хаазен П. Физическое металловедение: в 3т. Т2: Фазовые превращения в металлах и сплавах и сплавы с особыми физическими свойствами. — М.: Металлургия. 1987.

С. В. Коваль, С. С. Коваль

**Врахування зміни теплофізичних характеристик системи
в задачах моделювання фазових переходів**

АНОТАЦІЯ

Створена методика розрахунку зміни теплопровідності та теплоємності в інтервалі температур солідус–ліквідус. Встановлено залежність теплофізичних властивостей системи, як функція від температури та концентрації сплаву. Результати розробленої методики можуть бути використані при дослідженні процесів формування внутрішньої структури литих зразків.

Koval S. V., Koval S. S.

**The calculating of heat-physics properties change in phase transition
modeling problem**

SUMMARY

The calculating methodic of heat conductor and heat capacity change of double component system in solidus–liquidus temperature interval is developed. The dependencies of heat-physics system properties on temperature and concentration are computed. The describing methodic can be used for studying the inside structure forming process of cast pattern.