

**Соценко О. В.**

Национальная металлургическая академия Украины, Днепропетровск

**КОМПЬЮТЕРНАЯ DLA-МОДЕЛЬ ФОРМИРОВАНИЯ  
ШАРОВИДНОГО ГРАФИТА В ВЫСОКОПРОЧНОМ ЧУГУНЕ**

*Рассмотрена возможность применения методов фрактальной геометрии к описанию морфологии включений шаровидного графита в чугуне. Показано, что шаровидные графитные включения являются фрактальными структурами. Представлена фрактальная модель формирования шаровидных включений графита в чугуне по механизму диффузионно ограниченной агрегации. Показана тождественность структуры включений графита и моделей DLA.*

**Ключевые слова:** высокопрочный чугун, шаровидный графит, газовые пузырьки, агрегация, поликристаллические включения, эпициклоидальные впадины, квазиглобулярные структуры, фрактальная размерность

*Постановка проблемы.* В течение более четырех десятилетий длится вялотекущая дискуссия авторов и сторонников различных гипотез формирования шаровидного графита в модифицированных чугунах [1-4 и др.]. Авторы одного из первых критических обзоров отмечали недостаточную аргументацию ряда наиболее распространенных гипотез, отдавая предпочтение гипотезе образования графита в микроскопических газовых пузырьках [1]. В работе [2], опубликованной через 20 лет после даты публикации первого критического обзора, обращается внимание на противоречия теории и экспериментальных фактов в пузырьковой гипотезе. Автор этого обзора считает гипотезу формирования графита в газовых пузырьках несостоятельной в объяснении механизма процесса.

Тем не менее, в очередном критическом анализе «общепринятых» гипотез образования шаровидного графита [3], опубликованном по истечении еще 20 лет, авторы предлагают не только очередную вариант процесса на основе пузырьковой теории, но и распространяют его на механизм формирования вермикулярного графита [4]. Циклическая периодичность возрождения пузырьковой гипотезы в прошлом и, вероятно, будущем обусловлена настолько очевидной привлекательностью и «бесспорной» тождественностью формы газового пузырька и идеального графитного шарика, что попытки теоретического обоснования этой гипотезы будут продолжаться. Однако, для объяснения механизма формирования включений графита различных «аномальных» форм в высокопрочном чугуне, например, которые отражены в ГОСТ 3443-87, сторонникам пузырьковой гипотезы приходится использовать разные, часто экзотические механизмы.

*Постановка задачи.* В работе [2] предложен комплекс критериев обоснованности той или иной гипотезы. В частности, постулируется положение о том, что образование включений любой из из-

вестных форм графита в железоуглеродистых сплавах должно объясняться только на основе единой теории. Наличие нескольких трактовок одного явления указывает на необоснованность некоторых из них. При этом утверждается, что эксперимент может убедительно опровергнуть ту или иную теорию, тогда как доказать ее истинность однозначно не может. Теория может базироваться только на основании результатов всех известных экспериментальных данных, и ошибочные теории не могут быть руководящим материалом в практике. Такой подход к оценке многих, часто экзотических или чисто умозрительных гипотез, позволяет обсуждать гипотезы, только убедительно подтвержденные экспериментом.

Этот комплекс требований на современном этапе развития компьютерных технологий уместно дополнить условием возможности компьютерного моделирования процесса по любой предлагаемой гипотезе на основе понятной, легко реализуемой, воспроизводимой и достаточно универсальной модели, которая была бы достаточно адекватна результатам эксперимента. Необходим поиск новых подходов, а не тривиальных решений, пригодных для объяснения не только умозрительно идеальной шаровидной формы графитных включений в ЧШГ, но и всего разнообразия морфологических форм графита в модифицированных чугунах.

Представляется маловероятным предположение о том, что формирование шаровидного и вермикулярного графитов в чугуне может осуществляться только на основе каких-то «уникальных» механизмов, присущих исключительно модифицированным чугунам. Игнорирование классических представлений и богатейшего экспериментального материала по агрегативной устойчивости дисперсной фазы, а также универсальных процессов формирования кластерных агрегатов в различных дисперсионных средах, включая и высокотемпературные расплавы, было бы ошибочным.

В работах автора [5-11] приведены результаты

исследования процессов формирования графитных структур в модифицированных чугунах, которые дают основания утверждать, что эти процессы реализуются путем диффузионного переноса графитной фазы и агрегации графитных частиц разной степени дисперсности в поликристаллические компактные включения различной плотности. Промежуточной стадией образования таких квазиглобулярных структур является рост круговых секторов из общего центра с возможным последующим, но не всегда реализуемым смыканием их в плотный агрегат шаровидной формы. Процесс агрегации первичных частиц графитной фазы инициируется вводом оптимальной концентрации глобуляризирующего модификатора, нарушающей агрегационную устойчивость системы расплав–графит и как следствие — запускающей коагуляционно-агрегационный механизм формирования компактного графита с участием инокулирующего воздействия на расплав или без него [11].

В данной работе рассматривается возможность применения методов фрактальной геометрии к описанию морфологических особенностей включений графита в ВЧШГ. Фрактальный подход отвечает более высокому уровню анализа и понимания физической природы систем и явлений. Идеи и методы фрактального анализа успешно реализуются в материаловедении [12], оценке свойств металлов [13], металлургии, литейном производстве [14, 15] и др. В последние десятилетия количество публикаций о фракталах и приложениях фрактальной геометрии в науке и технике возрастает во всем мире экспоненциально. Фрактальный анализ позволяет намного упростить сложные процессы и объекты, что важно для понимания их сущности, моделирования и описания.

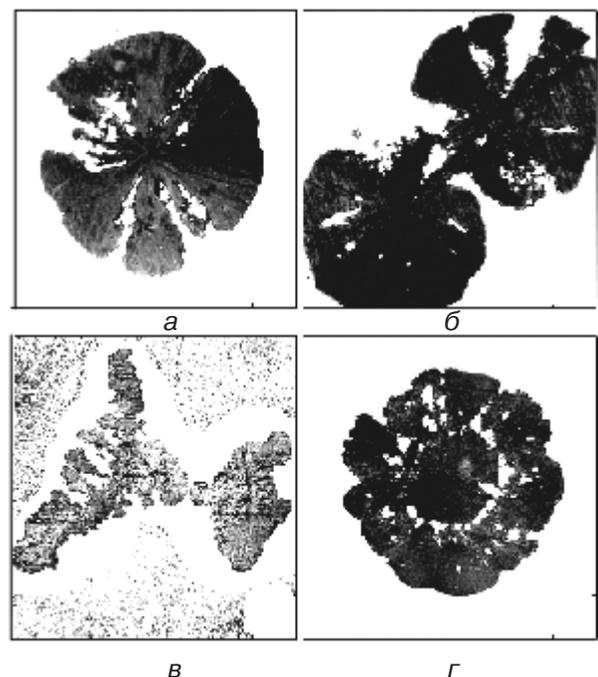
Один из основоположников теории фракталов Б. Мандельброт определяет фрактал как структуру, состоящую из частей, которые в каком-то смысле подобны целому [16]. Самоподобие является главной особенностью иерархической организационной структуры фракталов. Самоподобие, или масштабная инвариантность, подразумевает, что внешняя, наблюдаемая форма изучаемого объекта или явления, представленная в графическом виде, включает в себя большое количество копий (клонов) разного масштаба, образовавшихся по одному и тому же механизму. Как геометрический объект фрактал характеризуется дробной (нецелой) размерностью.

*Экспериментальные данные и фрактальность графита.* В качестве экспериментального материала для обоснования фрактального строения ШГ и, соответственно, механизма его формирования были использованы ранее опубликованные [5, 7, 9 и др.] результаты исследований процессов формирования ШГ и трактовка их автором с позиций коагуляционно-агрегативного механизма [9, 10]. Объектом исследования были статистически представительные «аномальные» графитные структуры, сформировавшиеся в широком диапазоне скоростей затвердевания магниевых чугунов:

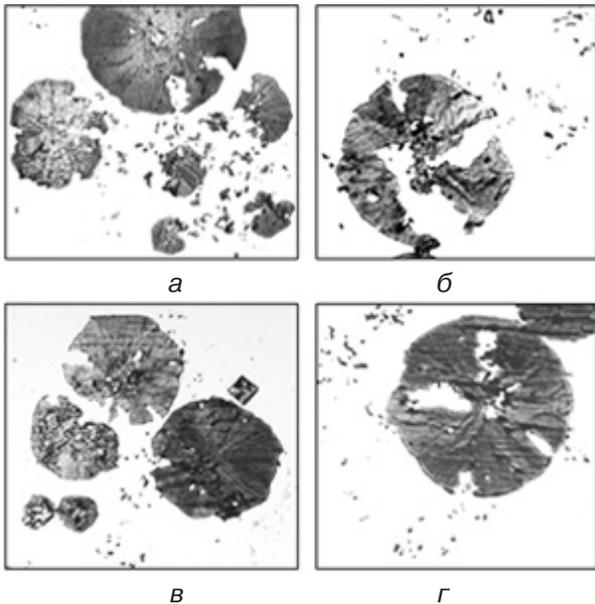
в цилиндрических образцах диаметром 2-400 мм, отлитых в кокиль и сухие песчаные формы; в призматических образцах толщиной 0,8 мм, полученных высокоскоростной закалкой расплава при вакуум-всасывании его в кварцевые трубки и щелевой капилляр медного холодильника. Химический состав исследованных чугунов находился в пределах (в %): 3,10-4,20 С; 0,93-3,20 Si; 0,10-0,50 Mn; 0,01-1,05 P; 0,01-0,02 S; 0,03-0,05 Mg.

В работе [5] показано, что основным субструктурным элементом включений графита в ЧШГ, независимо от их морфологических типов, является автономный пирамидальный поликристаллический блок (АППБ). Характер взаимодействия и относительная ориентация при агрегации и кооперированном росте АППБ из общего центра (рис. 1, а, б, г) или от некоторой пространственной линии (рис. 1, в) определяют образование различных форм включений графита, наблюдаемых в ЧШГ [5]. Характерной особенностью таких АППБ является оптически выявляемая «макрошероховатость» их поверхности. Такую шероховатость создают пирамидальные блоки (ПБ) мелкодисперсного графита (рис. 1, а, б). Дисперсные ПБ часто фиксируются высокоскоростной закалкой из жидкого состояния (рис. 2) в матричной жидкости на стадии движения в зону формирования АППБ в составе квазিশаровидного агрегата [7].

Аналогичные закономерности строения характерны и для морфологической группы двухслойных включений графита. Формирование наружного слоя этих включений так же, как и внутреннего ядра (рис. 1, г) происходит посредством кооперированного роста АППБ. При этом как в структуре ядра, так и наружного слоя наблюдаются одинаковые признаки предшествующего смыкания шероховатых границ между АППБ — радиальные строчки



**Рис. 1.** Кооперированный рост АППБ и распределение матричной жидкости на межблочных границах включений графита



**Рис. 2.** Графитные включения в микрообъемах закалочных образцов: а-г — случайные сечения,  $\times 400$

участков матричной жидкости и микропористости с соответствующими им эпициклоидальными впадинами наружного контура сечения [7].

Важным экспериментальным доказательством формирования в расплаве АППБ графита разной степени дисперсности являются структуры графита с «аномальным» внешним слоем (рис. 3). На поверхности плотных глобулярных включений образуется рыхлый слой из различно ориентированных мелкодисперсных АППБ (рис. 3).

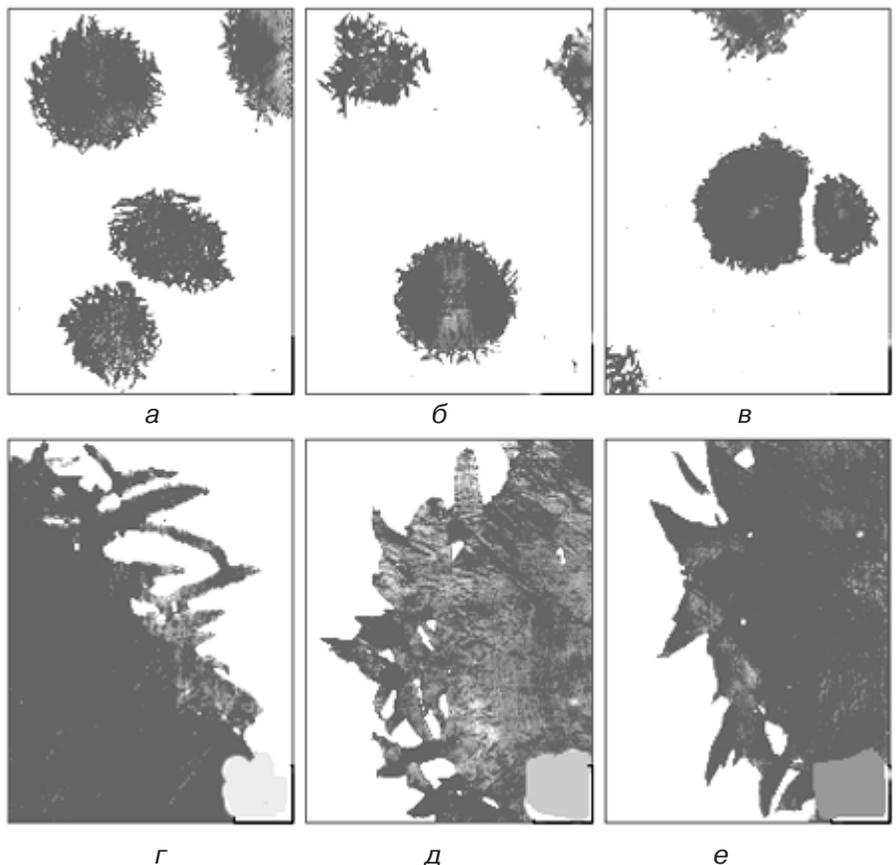
Присутствие в структуре графитных включений разновневных по масштабу фрагментов графита с устойчивой пирамидальной формой их случайных сечений дает основание отнести графитную фазу в ЧШГ к так называемым нерегулярным фракталам, проявляющим самоподобие в большом диапазоне увеличений. Для графитных включений иерархия самоподобия ограничивается уровнем формирования АППБ (круговых секторов) на этапе смыкания их в квазиглобулярные агрегаты разной степени плотности.

Результаты проведенных исследований морфологии включений графита в ЧШГ показали, что они характеризуются самоподобной или фрактальной структурой. Это дает основание утверждать, что графитные включения являются результатом агрегации дисперсной графитной фазы и могут быть одним из центральных объектов приложения

теории фракталов в исследовании процессов структуро-образования в ЧШГ и ЧВГ.

**Фрактальная размерность графита.** Попытка приложения теории фракталов к описанию процессов формирования и морфологии включений компактного графита в ЧШГ требует предварительного рассмотрения некоторых положений этой теории. Одной из основных характеристик фрактала или фрактальной системы является фрактальная размерность ( $D$ ), которую обычно называют хаусдорфовой. Фрактальная размерность — основная характеристика того, как кластер заполняет занимаемое им пространство. На основании фрактальной размерности можно сделать предположение о механизме формирования частиц [17].

Фрактальная размерность системы в отличие от топологической (точка имеет размерность 0; линия — 1; плоскость — 2; куб — 3) нецелочисленная. Она измеряется как оценка параметра самоподобия и характеризует геометрическую сложность объекта, а также, в определенной мере, характеризует скорость роста элементов фрактала с увеличением интервала масштабов, на котором он рассматривается. Весьма наглядным, классическим примером, характеризующим фрактал и его фрактальную размерность, является лист бумаги, скомканный в шар. Этот шар не может рассматриваться как двумерный, так как он имеет длину, ширину и высоту. Но он не может быть и трехмерным, так как он не полностью однороден,



**Рис. 3.** Разновидности аномального строения внешнего слоя компактных включений графита: а-в —  $\times 100$ ; г-е —  $\times 500$

поскольку сделан из одного бесконечно тонкого листа. Фрактальная размерность этого шара примерно равна 2,5. При этом его нормальная (Эвклидова) размерность равна 3.

Для определения фрактальной размерности на плоскости фрактальная структура заключается в сеть квадратов все меньшего размера (рис. 4). Если  $N(L)$  —

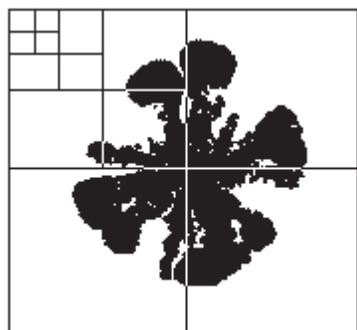


Рис. 4. Схема к определению фрактальной размерности включения графита

число квадратов со стороной  $L$ , необходимых для покрытия фрактальной структуры, график двойного логарифма от  $N(L)$  как функции от  $L$  имеет угловой коэффициент, равный  $D$ :

$$D = \lim_{L \rightarrow 0} \frac{\ln N(L)}{\ln L} .$$

Такие измерения с использованием фотоизображений,

например, микроструктур разного масштаба или увеличения дают в итоге результаты близкие к инвариантным значениям  $D$ . Этот метод называют «методом ящичков». Для количественной характеристики включений компактного графита на разных стадиях его формирования [8, 18] использовали значения фрактальной размерности ( $D$ ), которые определяли с помощью компьютерных программ *ImageJ* и *Fractal Analysis*.

Микрофотографии включений графита или их фрагментов, имеющих оттенки серого цвета, подвергали бинаризации. Это позволило получить высококонтрастные изображения с четко различимыми элементами исследуемой структуры.

Фрагмент скриншота с результатами определения  $D$  в программе *ImageJ* приведен на рис. 5.

Для нескольких типов включений компактного графита были найдены фрактальные размерности их случайных сечений. Проведено сопоставление значений фрактальной размерности классических фракталов с фрактальной размерностью реальных графитных структур. Так, для сечения графита, показанного на рис. 5,  $D = 1,79$ . Близкую к этому значению размерность имеют классические фрактальные кластеры. Фрактальная размерность может быть успешно использована как еще одна количественная оценка формы и морфологии графитных включений наряду с известными оценками фактора формы и компактности [19]. Преимущество фрактальной размерности по сравнению с указанными оценками состоит в возможности компьютеризации получения таких оценок без использования шкал сравнения реальных структур с эталонными.

*Компьютерное моделирование.* Одним из наиболее вероятных и экспериментально подтвержденных механизмов формирования включений квазиглобулярного графита в ЧШГ является агрегативно-коагуляционный [9, 10]. Исследование ранних стадий формирования графитных включений происходит в результате агрегации дисперсных субмикроскопических блоков-кристаллитов по диффузионному механизму [5, 8]. Для подобных агрегатов часто используют понятие фрактального кластера, под которым понимают структуру, образующуюся в результате ассоциации частиц при условии диффузионного характера их движения.

Для исследования и моделирования таких объектов часто применяют модельные фракталы

Смоделированному фрактальному кластеру, у которого есть своя фрактальная размерность, можно сопоставить реальный кластер или агрегат, который также имеет фрактальную

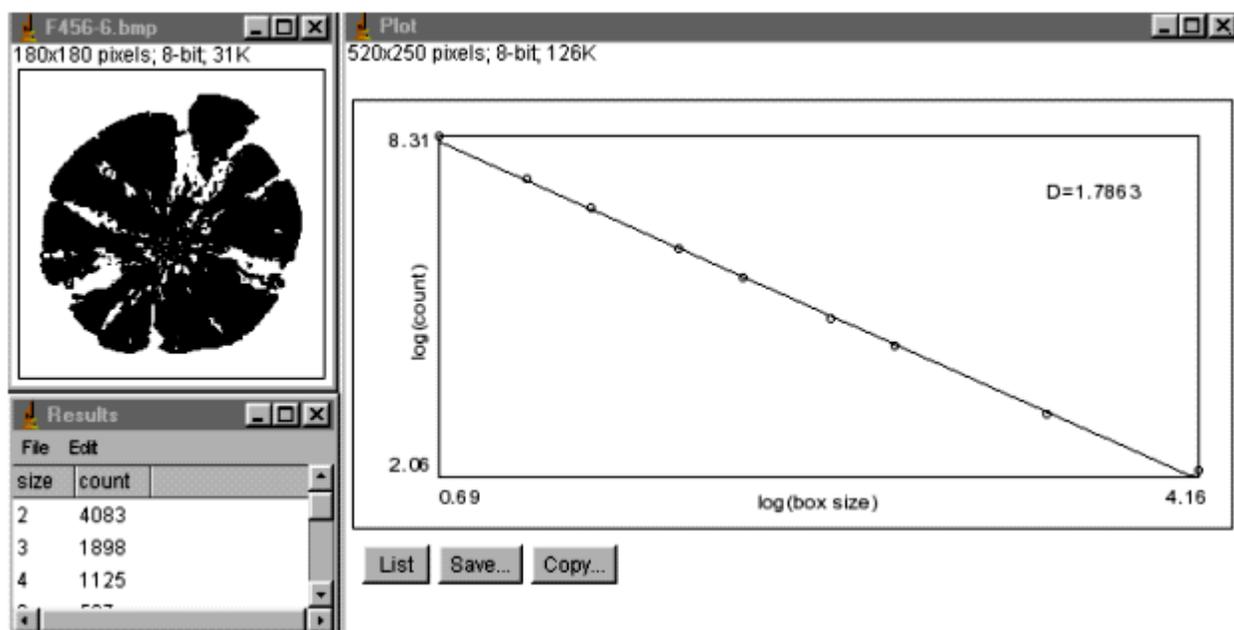
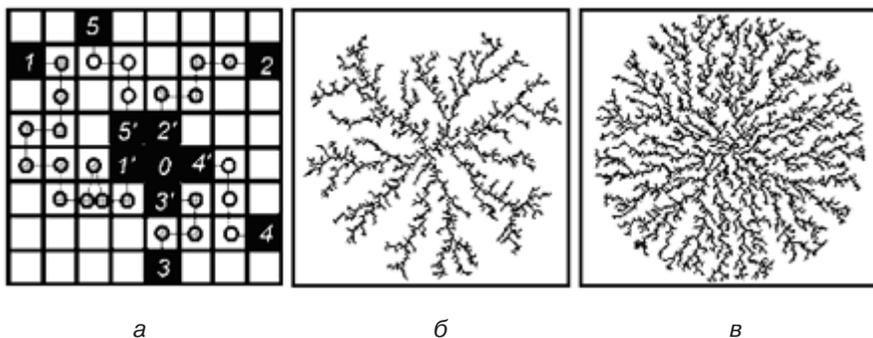


Рис. 5. Оценка фрактальной размерности диаметрального сечения графитного включения

структуру и такую же фрактальную размерность. Таким образом, исследуя свойства модельного фрактального кластера, можно проанализировать свойства реальных кластеров с фрактальной структурой [20].

В 1981 г. Т. Виттен и Л. Сандер [21] предложили простую модель агрегации частиц, ограниченной диффузией (DLA — Diffusion Limited Aggregation). Интерес к этой модели был вызван, во-первых, тем, что большое число физических объектов формируется примерно по такому механизму. Во-вторых, при относительно простой модели можно учесть влияние многих факторов.

В простейшей постановке задачи способ построения фрактального кластера, образованного из отдельных частиц в двумерной модели состоит в следующем [21]. Ограниченное двумерное пространство разбивается на множество квадратных ячеек. В одну из них помещают частицу-затравку, а затем из удаленного источника на границе области поочередно выпускаются частицы, которые совершают броуновское движение (рис. 6, а). Каждая новая частица передвигается в соседнюю клетку случайным образом — ее путь выбирается методом Монте Карло. Если частица достигла границы пространства, она отражается от нее. Движение частицы продолжается до тех пор, пока она не окажется по соседству с частицей-затравкой или с одной из частиц образующегося агрегата-кластера. Тогда «блуждающая» частица останавливается и закрепляется в данной ячейке, а в пространство запускается следующая частица. Таким образом происходит рост DLA-кластера.



**Рис. 6.** Схема формирования фрактального кластера по модели Виттена-Сандера: а — траектории броуновского движения частиц 1-5 в зону затравки 0 с образованием кластера 0-1-5-2-4-3; б, в — кластеры

В результате образуется пористый кластер, последовательные стадии формирования которого изображены на рис. 6, б, в. Внутри кластера между его ветвями роста образуются поры — участки матричной жидкости. По мере роста структуры число пор и их размеры увеличиваются, что обусловлено эффектом экранирования. Экранированными оказываются элементы кластера, расположенные во впадинах его извилистой фрактальной поверхности, куда вероятность попадания частиц из окружаю-

щей матричной жидкости-макрофазы очень мала. Поэтому частицы дисперсной фазы присоединяются к тем центрам роста кластера, которые более доступны для контакта. Такие центры роста оказываются расположенными на выступах поверхности кластера. Поэтому экранированные центры роста фрактального кластера остаются нереализованными. Они остаются в процессе роста кластеров во внутренних замкнутых порах. Этим и объясняется снижение средней плотности частиц фрактального кластера по мере удаления от образующего центра. В двумерном случае фрактальная размерность такого кластера (рис. 7) оказывается близка к значению 1,7. Практическое равенство фрактальных размерностей, полученных для графитного включения (рис. 5) и фрактального кластера (рис. 7) дает основание утверждать не только морфологическую идентичность их фрактальной структуры, но и общность механизма формирования.

Сравнение строения реальных графитных включений с разной степенью плотности смыкания АППБ (рис. 8, а, в, д, ж) и соответствующих типов моделей DLA-кластеров (рис. 8, б, г, е, з) свидетельствует об аналогичности процессов их формирования. Последовательная обработка фрактальных DLA-кластеров методом дилатации, имитирующей процессы коалесценции и уплотнения частиц в кластере, позволяет получить кластеры, аналогичные графитным структурам. При этом их фрактальная размерность возрастает от 1,702 до 1,847, то есть стремится к значению 2 — топологической размерности круга, которая соответствует сечению идеализированного шаровидного включения графита.

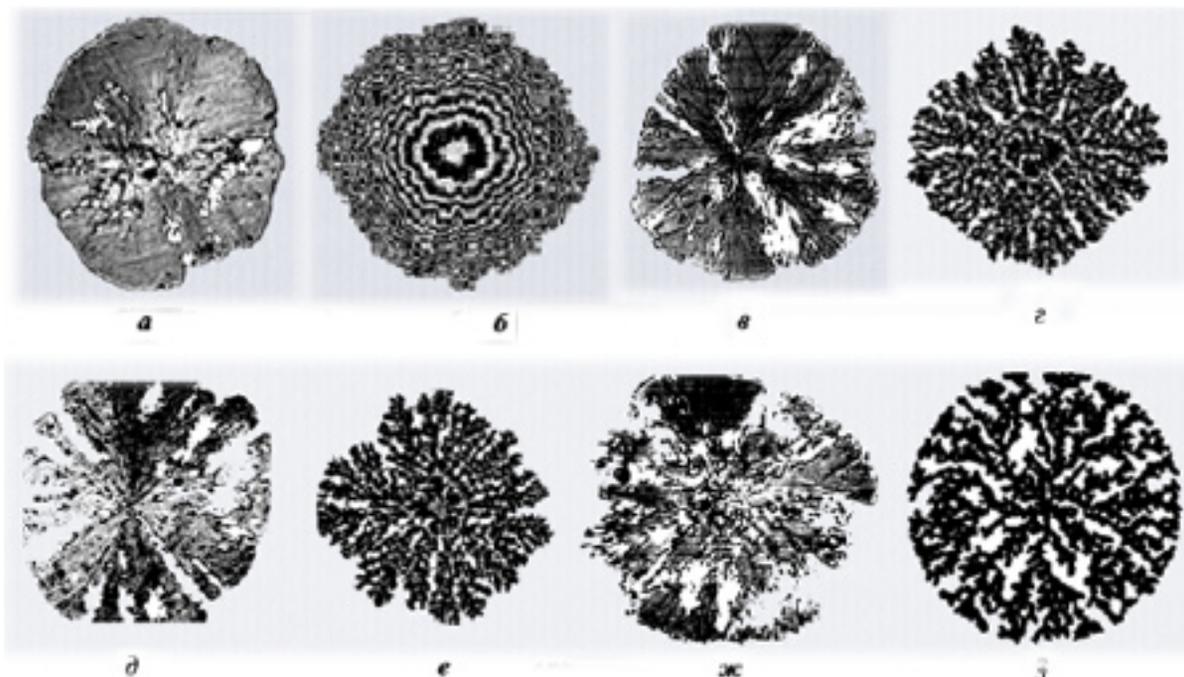
### Выводы

— Строение включений графита в ЧШГ и фрактальных кластеров имеют общие морфологические признаки и свойства — блочно-секториальную структуру, межблочную радиально ориентированную пористость, субструктурное самоподобие и одинаковую фрактальную размерность.

— Сопоставление морфологических особенностей



**Рис. 7.** Определение фрактальной размерности модельного кластера с помощью программы ImageJ



**Рис. 8.** Сопоставление морфологии графитных включений (а, в, д, ж) и модельных DLA-кластеров (б, г, е, з)

различных графитных включений на разных стадиях их формирования с модельными DLA-кластерами дает основание утверждать, что процесс их формирования аналогичен и реализуется на основе DLA-механизма.

— Компьютерное моделирование процесса формирования шаровидного графита с использованием DLA-механизма хорошо согласуется с гипотезой о коагуляционно-агрегативном формировании шаровидного графита.



## Литература

1. Справочник по изготовлению отливок из высокопрочного чугуна / Под ред. А. А. Горшкова. — М.; Киев: Машгиз, 1961. — 300 с.
2. Неижко И. Г. О теориях образования шаровидного графита // Кристаллизация, структурообразование и свойства модифицированного чугуна. — Киев: ИПЛ АН УССР, 1982. — С. 3-14.
3. Баранов А. А., Баранов Д. А. К теории образования в чугуне шаровидного графита // *Металл и литье Украины*. — 2003. — № 9-10. — С. 42-45.
4. Баранов Д. А. О механизме формирования вермикулярного графита при затвердевании чугуна // *Литейн. пр-во*. — 2004. — № 10. — С. 2-3.
5. Соценко О. В. Особенности формирования структуры графита в модифицированных чугунах // Там же. — 1983. — № 12. — С. 5-8.
6. Соценко О. В. Кинетические закономерности процесса формирования графита в высокопрочном чугуне // Там же. — 1984. — № 11. — С. 4-6.
7. Соценко О. В. Особенности массопереноса углерода в процессе формирования графита в ВЧШГ // *Изв. вузов. Чер. металлургия*. — 1988. — № 11. — С. 114-118.
8. Соценко О. В. Аномальные формы графита в модифицированном чугуне // *Теория и практика металлургии*. — 1998. — № 4. — С. 17-20.
9. Соценко О. В. Агрегативный механизм формирования графита в ЧШГ // *Изв. вузов. Чер. металлургия*. — 1990. — № 8. — С. 71-74.
10. Соценко О. В. Физическая модель агрегативного формирования графита в ЧШГ // Там же. — 1990. — № 10. — С. 51-54.
11. Соценко О. В. К вопросу об оптимальной концентрации модификатора в чугуне с шаровидной формой графита // *Металл и литье Украины*. — 1999. — № 1-2. — С. 43-45.
12. Иванова В. С., Баланкин А. С., Бунин И. Ж., Оксогоев А. А. Синергетика и фракталы в материаловедении. — М.: Наука, 1994. — 384 с.
13. Барахтин Б. К., Мещеряков Ю. И., Савенков Г. Г. Динамические и фрактальные свойства стали СП-28 в условиях высокоскоростного нагружения // *Ж-л технической физики*. — 1998. — Т. 68, — № 10. — С. 43-49.
14. Михалев А. И., Деревянко А. И., Помулев В. В. Применение методов фрактальной геометрии для анализа металлоструктур // *Вестник ХГТУ*. — 2001. — № 3(12). — С. 178-180.

15. Фрактальная модель роста зерен при затвердевании сплавов / Ю. Н. Таран, А. И. Михалев, В. Е. Хрычиков, А. И. Деревянко // Современные проблемы металлургии. — 2001. — Т. 3. — С. 414-421.
16. Федер Е. Фракталы: Пер. с англ. — М.: Мир, 1991. — 260 с.
17. Смирнов Б. М. Физика фрактальных кластеров. — М.: Наука, 1991. — 134 с.
18. Соценко О. В. Исследование ранних стадий формирования графита в ЧШГ // Эвтектика. — Запорожье, 2003. — С. 180-182.
19. Соценко О. В. Оценка компактности включений графита в высокопрочном чугуна // Литейн. пр-во. — 1982. — № 6. — С. 5-7.
20. Смирнов Б. М. Фрактальные кластеры // Успехи физических наук. — 1986. — Т. 149, вып. 2. — С. 177-217.
21. Witten T. A., Sander L. M. Diffusion-limited aggregation as a kinetical critical phenomena // Phys. Rev. Lett. — 1981. — V. 47, №19. — P. 1400-1403.

**СОЦЕНКО О. В.** Комп'ютерна DLA-модель формування кулястого графіту у високоміцному чавуні

*Розглянута можливість застосування методів фрактальної геометрії до опису морфології включень кулястого графіту в чавуні. Показано, що глобулярні графітні включення є фрактальними структурами. Представлена фрактальна модель формування глобулярних включень графіту в чавуні по механізму дифузійно обмеженої агрегації. Показана тотожність структури включень графіту і моделей DLA.*

**SOTSENKO O.** Computer DLA-model of the formation of spheroidal graphite in high-strength cast-iron

*Possibility of application of methods of fractal geometry to description of morphology of including of spherical graphite in cast-iron is considered. It is shown that the spherical graphite including are fractal structures. The fractal model of forming of the spherical including of graphite in cast-iron on the mechanism of diffusive limited aggregation is represented. The identity of structure of including of graphite and the DLA.*

УДК 621.74

**В. П. Авдокушин, В. П. Самарай**

Национальный технический университет Украины «КПИ», Киев

## **ИССЛЕДОВАНИЕ РЕОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СЫПУЧИХ ФОРМОВОЧНЫХ СМЕСЕЙ ПРИ ВИБРОУПЛОТНЕНИИ**

*Представлена методика реологических исследований сыпучих формовочных смесей.*

**Ключевые слова:** качество литья, дефекты отливок, формовочные смеси, процессы перетекания, реологические модели, реологические свойства, экспертные системы, прогнозирование, диагностика, уплотнение стержней, вибрация

Прямое экспериментальное определение реологических параметров [1-6] сыпучих формовочных смесей, например, холодно-твердеющих смесей (ХТС) или песков вызывает значительные затруднения, состоящие в том, что в процессе испытаний происходит одновременное уплотнение смеси. С целью создания стабильных условий (постоянной плотности) при измерении реологических свойств вибрируемых дисперсных материалов с помощью приборов, основанных на сдвиговых деформациях, обычно прибегают к их предварительному уплотнению [1, 2] до постоянной плотности. Однако в этом случае решить поставленную в работе задачу, состоящую в определении эффективных значений реологических параметров при вибрировании смесей с различной плотностью, невозможно.

Поэтому в работе была использована методика, основанная на математической обработке данных о динамике уплотнения ХТС при различных режимах вибрирования.

На рис. 1 представлены кривые, показывающие изменение высоты пробы смеси (содержание смолы БС 1,2 %) в гильзе высотой 100 мм под действием различных виброускорений и с разной достигаемой плотностью.

На этих кривых можно достаточно четко выделить три фазы уплотнения [7-10]. Первая фаза характеризуется быстрым уменьшением высоты образца с практически постоянной скоростью, которая может быть определена по углу наклона начального прямолинейного участка кривой осадки. Вторая фаза – замедленное уплотнение, что обусловлено существенным возрастанием