

### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ПРИМЕСЕЙ ПРИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ СЛИТКА

*В данной работе представлена неравновесная теория многофазной зоны кристаллизации, учитывающая возможное движение кристаллов и распределение примесей. Рассмотрен процесс кристаллизации слитка с учетом переноса примесей в дендритном каркасе. Приведены двумерная математическая модель кристаллизации слитка с учетом переноса примесей, метод расщепления по физическим факторам для решения системы уравнений, результаты компьютерной реализации модели и численных исследований.*

*Ключевые слова:* дендритный каркас, перенос примесей, многофазная среда, кристаллизация, фильтрация.

Т. Ж. НАДРИГАЙЛО

Дніпродзержинський державний технічний університет

### МАТЕМАТИЧНЕ ТА КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПЕРЕНОСУ ДОМІШОК ПРИ КРИСТАЛІЗАЦІЇ ЗЛИВКА

*У даній роботі представлена нерівноважна теорія багатофазної зони кристалізації, яка враховує можливий рух кристалів та перерозподіл домішок. Розглянуто процес кристалізації зливка з врахуванням переносу домішок у дендритному каркасі. Наведені двовимірна математична модель кристалізації зливка з врахуванням переносу домішок, метод розщеплення за фізичними факторами для розв'язку системи рівнянь, результати комп'ютерної реалізації моделі та чисельних досліджень.*

*Ключові слова:* дендритний каркас, перенос домішок, багатофазне середовище, кристалізація, фільтрація.

T. ZH. NADRYGAYLO

Dneprodzerzhinsk State Technical University

### MATHEMATICAL AND COMPUTER MODELING OF TRANSFER OF IMPURITIES DURING CRYSTALLIZATION INGOT

*In this paper presents a non-equilibrium theory of multiphase crystallization zone, taking into the possible movement of the crystals and the distribution of impurities. Considered the process of crystallization ingot with the transfer of impurities in the dendrite carcass. Presents a two-dimensional mathematical model of crystallization ingot with the transfer of impurities, method of splitting into physical factors for solving the system of equations, the results of the computer implementation of models and numerical studies.*

*Keywords:* the dendrite framework, the transfer of admixtures, multiphase area, crystallization, filtration.

#### Постановка проблемы

При переходе стали из жидкого состояния в твердое возникает снижение растворимости примесей и образуется химическая неоднородность в слитке. Химическая неоднородность стальных слитков и отливок вызвана, так называемой, избирательной кристаллизацией. Сначала образуются кристаллы, имеющие по составу более высокую температуру плавления.

Если примесь повышает температуру плавления стали, то сначала образуются кристаллы с повышенным содержанием этой примеси, и наоборот, если примесь понижает температуру плавления, то сначала образуются кристаллы, содержащие наименьшее количество примеси (например, серы, углерода, фосфора и т.д.)

#### Анализ публикаций по теме исследований

Кристаллизующийся расплав – пример среды с фазовыми превращениями. Область затвердевания можно разделить на пять зон [1], различающихся между собой по характеру протекания в них теплофизических процессов: жидкую зону, зону движущихся кристаллов, зону питания, зону вкрапленного расплава, твердую зону. Существенное влияние на процессы формирования структуры слитка и перераспределение в нём примесей оказывает движение кристаллов и примесных фаз в жидкой зоне затвердевающего слитка.

В результате изучения процесса кристаллизации слитка возникает широкий спектр вопросов [2]. Решение задач на практике показало, что фронт кристаллизации неустойчивый, то есть возможен рост дендритов или хаотическое зарождение кристаллов. В этом случае возникает двухфазная зона кристаллизации, в которой кристаллизующееся вещество существует в жидком и твердом состоянии.

Считается, что в равновесной модели двухфазной зоны диффузионные процессы в жидкой и твердой фазах проходят полностью. Тогда, для определения плотности фазы примесей через её плотность в жидкой и твердой фазах справедливо правило рычага [3].

Изучение и анализ фильтрационного движения расплава в дендритном каркасе очень важно, поскольку оно существенно влияет на структурную и химическую неоднородности в слитке, которые возникают благодаря механизму сегрегации [4, 5].

Известно, что примеси движутся сквозь дендритный каркас с фильтрационной скоростью расплава. Как следует из экспериментальных данных [6], сегреганты, у которых угол смачивания дендритных кристаллов большой, чем в чистом расплаве, капиллярными силами выталкиваются из дендритного канала в направлении жидкой зоны, то есть движутся в сторону противоположную движению расплава. Это движение является определяющим при образовании химической неоднородности слитка.

#### Цель исследования

Целью данной работы является математическое и компьютерное моделирование переноса примесей в дендритном каркасе затвердевающего слитка. В данной работе на основании одномерной математической модели [7] предложена двумерная математическая модель изучаемого процесса и один из вариантов применения метода расщепления по физическим факторам для этой модели.

#### Постановка задачи

Рассматривается слиток цилиндрической формы. Расчетная область представляет собой половину осевого сечения слитка. С боковой поверхности и дна слитка происходит отдача тепла за счет конвективного теплообмена. При кристаллизации слитка происходит перенос примесей. Будем рассматривать существование только одной примесной фазы  $b$ .

В основу модели положены следующие уравнения, относящиеся к отдельным зонам затвердевающего слитка:

$$\vec{v} \cdot \vec{v} = -(\delta_f - \varepsilon) [\Phi_S - \vec{v} \cdot (\zeta \vec{v}_{S1}^c - D_S \vec{\nabla} \zeta)] - (1 - \zeta) \frac{d\varepsilon}{dt}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = -(\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} + \nu_e \Delta \vec{v} + [\zeta \delta_f + (1 - \zeta) \varepsilon] \vec{g} - \vec{\nabla} \tilde{p}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot [\zeta (\vec{v} + \vec{v}_{S1}^c)] + \vec{\nabla} \cdot (D_S \vec{\nabla} \zeta) + \Phi_S, \quad (3)$$

$$\frac{\partial \beta_b}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot (\beta_b \vec{v}_b^c) + \vec{\nabla} \cdot \left[ (1 - \zeta) D_b \vec{\nabla} \frac{\beta_b}{(1 - \zeta)} \right] - \frac{k_b \beta_b}{(1 - \zeta)} \Phi_S, \quad (4)$$

$$\vec{v}_{S1}^c = \frac{d_S^2}{C_{1D} \nu_L} (\varepsilon - \delta_f) \vec{g}, \quad (5)$$

$$\vec{v}_b^c = -\frac{K_b \zeta}{R_b (1 - \zeta) + \nu_L x_b \zeta} \left( \frac{2 - \zeta}{1 - \zeta} \vec{\nabla} \zeta + \zeta \vec{\nabla} \ln \beta_b \right), \quad (6)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{C_L (1 - \zeta)}{C} \vec{v}_L \cdot \vec{\nabla} T - \frac{C_S \zeta}{C} \vec{v}_S \cdot \vec{\nabla} T + \frac{1}{C} \vec{\nabla} \cdot \{ [\lambda'_L (1 - \zeta) + \lambda'_S \zeta] \vec{\nabla} T \} + \frac{L_e}{C} \Phi_S, \quad (7)$$

где  $\vec{v}$  – среднемассовая (барицентрическая) скорость,  $\vec{v}_{S1}^c$  – коллективная составляющая относительной скорости мелкокристаллической фазы,  $\vec{v}_b^c$  – коллективная скорость примесей,  $\vec{v}_L$  – скорость расплава,  $\vec{v}_S$  – скорость твердой фазы,  $\delta_f$  – объемный коэффициент фазовой усадки,  $\varepsilon$  – температурная усадка,  $\tilde{p}$  – нормированное на плотность давление,  $T$  – температура,  $t$  – время,  $C$  – удельная теплоемкость,  $C_S$  – удельная теплоемкость твердой фазы,  $C_L$  – удельная теплоемкость расплава, причем  $C = C_L (1 - \zeta) + C_S \zeta$ ,  $\zeta$  – объемная плотность кристаллической фазы,  $C_{1D}$  – коэффициент сопротивления движению кристаллов,  $\Phi_S$  – источник твердой фазы,  $D_S$  – коэффициент эффективной турбулентной диффузии мелкокристаллической фазы,  $L_e$  – эффективная удельная энергия фазового преобразования,  $\lambda'_S$ ,  $\lambda'_L$  – нормированные на плотность расплава коэффициенты теплопроводности твердой и жидкой фаз соответственно,  $\beta_b$  – объемная плотность примесной фазы,  $D_b$  – коэффициент диффузии примесей,  $k_b$  – коэффициент равновесного распределения примесей,  $\nu_e$  – эффективный коэффициент кинематической вязкости,  $\nu_L = \frac{\mu}{\rho_0}$  – вязкость жидкой компоненты среды,  $g$  – ускорение свободного падения,  $R_b$  та  $K_b$  –

феноменологические параметры, характеризующие зону дендритного каркаса,  $x_b = \frac{\rho_b^0}{\rho_0}$ ,  $\rho_0$  – истинная плотность жидкой фазы,  $\rho_b^0$  – истинная плотность примесной фазы. В текучей зоне скорости  $\vec{v}_L$  и  $\vec{v}_S$  могут быть найдены по формулам:

$$\vec{v}_L = \vec{v} - \zeta \vec{v}_{S1}^c, \quad \vec{v}_S = \vec{v} + \vec{v}_{S1}^c.$$

Данные уравнения дополняются граничными условиями:

– на твердых поверхностях и оси симметрии для перпендикулярных составляющих скорости – условия непротекания:

$$\vec{n} \cdot \vec{V}_\perp = 0;$$

– на скорости параллельные поверхности – условие свободного скольжения:

$$\left. \frac{\partial V_\parallel}{\partial \vec{n}} \right|_S = 0;$$

– для давления на всех границах задаются граничные условия второго рода:

$$\vec{n} \cdot \vec{\nabla} \tilde{p} = 0;$$

– для температуры на оси симметрии и верхней поверхности формы – условие теплоизоляции:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} \right|_S = 0;$$

– на боковой поверхности и дне формы – условие конвективного теплообмена:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} \right|_S = \alpha(T - T_{cp});$$

– для примесей и твердой фазы на всех границах – условие непротекания:

$$\vec{n} \cdot \vec{\nabla} \zeta = 0, \quad \vec{n} \cdot \vec{\nabla} \beta = 0.$$

Для решения системы (1)–(7) будем использовать метод расщепления по физическим факторам [7]: Покоординатная запись математической модели для двумерного случая уравнений (1)–(7) имеет вид:

0

$$2 \quad u_{S1}^c = 0; \quad w_{S1}^c = -\frac{d_S^2}{C_{1D} \nu_L} (\varepsilon - \delta_f) g, \quad (8)$$

I

1, 2

$$\tilde{u} = u^n + \tau \left[ -u^n \frac{\partial u^n}{\partial r} - w^n \frac{\partial u^n}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{\nu_e^r}{r} \frac{\partial (ru^n)}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \nu_e^z \frac{\partial u^n}{\partial z} \right) \right], \quad (9)$$

$$\tilde{w} = w^n + \tau \left[ -u^n \frac{\partial w^n}{\partial r} - w^n \frac{\partial w^n}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \nu_e^r r \frac{\partial w^n}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \nu_e^z \frac{\partial w^n}{\partial z} \right) + \left[ \zeta^n \delta_f + (1 - \zeta^n) \varepsilon^n \right] g \right], \quad (10)$$

$$1-5 \quad \lambda^n = \lambda_L' (1 - \zeta^n) + \lambda_S' \zeta^n, \quad (11)$$

$$1-5 \quad C^n = C_L (1 - \zeta^n) + C_S \zeta^n, \quad (12)$$

$$1-5 \quad \tilde{T} = T^n + \frac{\tau}{C^n} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \lambda^n \left( \frac{\partial T^n}{\partial r} \right) \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} (\lambda^n T^n) + L_e \Phi_S^n \right], \quad (13)$$

$$1, 2 \quad \tilde{\zeta} = \zeta^n + \tau \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r D_S \frac{\partial \zeta^n}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( D_S \frac{\partial \zeta^n}{\partial z} \right) + \Phi_S^n \right], \quad (14)$$

1-3

$$\tilde{\beta} = \beta^n + \tau \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r(1-\zeta^n) D_b \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{\beta^n}{1-\zeta^n} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( (1-\zeta^n) D_b \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\beta^n}{1-\zeta^n} \right) \right) - \frac{k_b \beta^n}{(1-\zeta^n)} \Phi_S^n \right]. \quad (15)$$

II

$$1, 2 \quad T^{n+1} = \tilde{T} - \tau \left( u^n \frac{\partial T^n}{\partial r} + w^n \frac{\partial T^n}{\partial z} \right), \quad (16)$$

$$1, 2 \quad \zeta^{n+1} = \tilde{\zeta} - \tau \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \zeta^n (u^n + u_{S1}^c) \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \zeta^n (w^n + w_{S1}^c) \right) \right], \quad (17)$$

$$3 \quad A^{n+1} = - \frac{k_b \zeta^{n+1}}{R_b (1-\zeta^{n+1}) + \nu_L x_b \zeta^{n+1}}, \quad (18)$$

$$3 \quad B^{n+1} = \frac{2-\zeta^{n+1}}{1-\zeta^{n+1}} \left( \frac{\partial \zeta^{n+1}}{\partial r} + \frac{\partial \zeta^{n+1}}{\partial z} \right), \quad (19)$$

$$1-3 \quad \beta^{n+1,0} = \tilde{\beta}, \quad p^{n+1,0} = p^n, \quad u^{n+1,0} = u^n, \quad w^{n+1,0} = w^n, \quad (20)$$

III

$$1, 2 \quad \tilde{p}^{n+1,k+1} = \tilde{p}^{n+1,k} + \omega \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \tilde{p}^{n+1,k}}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \tilde{p}^{n+1,k}}{\partial z^2} - \left( \frac{1}{r} \frac{\partial (r\tilde{u})}{\partial r} + \frac{\partial \tilde{w}}{\partial z} + \Phi_S^{n+1,k} \right) / \tau \right], \quad (21)$$

IV

$$3 \quad u_b^{c\ n+1,k} = A^{n+1} \left( B^{n+1} + \zeta^{n+1} \frac{\partial (\ln \beta^{n+1,k})}{\partial r} \right), \quad (22)$$

$$w_b^{c\ n+1,k} = A^{n+1} \left( B^{n+1} + \zeta^{n+1} \frac{\partial (\ln \beta^{n+1,k})}{\partial z} \right).$$

$$1-3 \quad \beta^{n+1,k+1} = \tilde{\beta} - \tau \left[ \frac{1}{r} \left( \frac{\partial (r \beta^{n+1,k} u_b^{c\ n+1,k})}{\partial r} \right) + \left( \frac{\partial (\beta^{n+1,k} w_b^{c\ n+1,k})}{\partial z} \right) \right]. \quad (23)$$

$$1, 2 \quad u^{n+1} = \tilde{u} - \tau \frac{\partial \tilde{p}^{n+1}}{\partial r}, \quad (24)$$

$$w^{n+1} = \tilde{w} - \tau \frac{\partial \tilde{p}^{n+1}}{\partial z}.$$

Здесь  $n$  – номер временного слоя,  $k$  – номер итерации.

Слева возле каждой формулы указаны номера зон, в которых эти формулы справедливы: 1 – жидкая зона; 2 – зона движущихся кристаллов; 3 – зона питания; 4 – зона вкрапленного расплава; 5 – твердая зона.

Процесс расчета условно разбивается на 4 этапа. За циклом по времени по формуле (8) находится скорость кристаллов относительно расплава в зоне движущихся кристаллов (нулевой этап). Все последующие этапы выполняются в цикле по времени.

На первом этапе выполняются предварительные расчеты всех основных теплофизических величин (9)–(15) и учитываются только диффузионные компоненты всех процессов. Для скорости учитывается и конвективная составляющая без поля давления, т.е. находится вспомогательное поле скорости, как в обычной схеме расщепления.

На втором этапе для вычисления  $T$  и  $\zeta$  используется явная схема (16)–(17) с учетом переносных процессов для этих величин в зонах, где они происходят. Кроме того, выполняются тождества (20), необходимые для расчетов в итерационном цикле на последних двух этапах, а также расчеты (18)–(19), которые можно вынести за итерационный цикл.

На третьем этапе находится поле давления в текущей зоне (21).

Окончательные значения примеси в зоне питания (23) и скорости среды в текучей зоне (24), также плотности примеси во всех этих зонах находятся на четвертом этапе. Вычисления на третьем и четвертому этапах могут проводиться в любом порядке.

Расчетную область разобьем равномерной шахматной сеткой на элементарные ячейки. На этой сетке получим разностную аппроксимацию уравнений схемы (8)–(24) и граничных условий.

По данной математической модели разработана программа на языке C# в среде Microsoft Visual Studio 2008. С помощью программы получена графическая визуализация процесса затвердевания слитка с учетом переноса примесей. В начальный момент предполагается, что примеси распределены равномерно по всему объему формы. При затвердевании слитка примеси переносятся в центр слитка. Проведенные численные исследования показали, что место максимальной концентрации примесей зависит от теплофизических параметров, например, коэффициента теплоотдачи  $\alpha$ , и от способа задания граничных условий для температуры. На рисунке 1 представлены результаты компьютерной реализации математической модели. Изолиниями показаны распределение концентрации примесей на последнем этапе кристаллизации слитка.

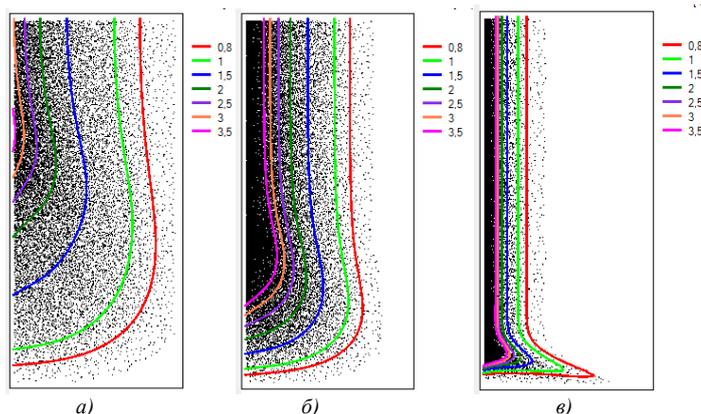


Рис. 1. Динамика распределения примесей при значении коэффициента теплопроводности :  
 $a - \alpha = 0,05$ ;  $b - \alpha = 0,1$ ;  $c - \alpha = 2$

Из рис. 1 видно, что на дне слитка в направлении к центру постепенно накапливаются примеси, а с боков слитка они исчезают. Остаются только небольшие части. Максимальное значение равно 3,5 располагается в центральной части слитка.

При теплоизоляции дна формы характер распределения примесей иной. Примеси равномерно вытесняются к оси симметрии слитка (рис. 2).

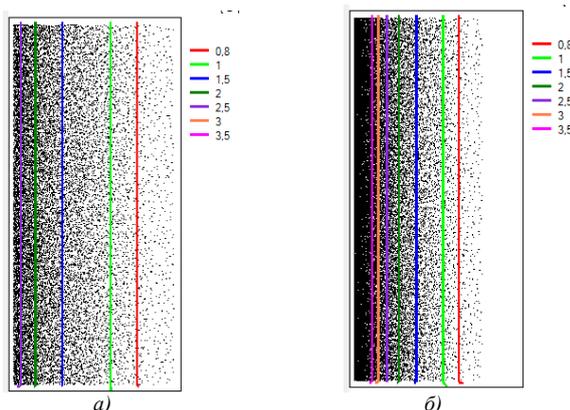


Рис. 2. Динамика распределения примесей при теплоизоляции дна формы:  $a - \alpha = 0,05$ ;  $b - \alpha = 0,1$

### Выводы

В работе рассмотрена неравновесная теория многофазной зоны кристаллизации, которая учитывает возможное движение кристаллов и перераспределение примесей благодаря конвективному переносу в жидкой зоне и зоне движущихся кристаллов затвердевающего слитка. Приведена двумерная математическая модель кристаллизации слитка с учетом переноса примесей в дендритном каркасе. По данной модели разработана программа на языке C# для проведения численных исследований и проверки модели на адекватность. При сравнении полученных результатов с экспериментальными данными [8], можно говорить о качественной адекватности разработанной модели. Дальнейшее развитие модели заключается в ее объединении с математической моделью, описывающей структурные неоднородности в слитке.

**Список использованной литературы**

1. Гуляев Б.Б. Теория литейных процессов. – Ленинград: Машиностроение, 1976, – 216 с.
2. Авдонин Н.А. Математическое описание процессов кристаллизации. – Рига: Знание, 1980, – 189 с.
3. Борисов В.Т. Теория двухфазной зоны металлического слитка. – М.: Металлургия, 1987, – 232 с.
4. Никитенко Н.И., Снежкин Ю.Ф., Сорокова Н.Н., Кольчик Ю.Н. Молекулярно-радиационная теория и методы расчета тепло- и массообмена. – К.: Наукова думка, 2014, – 743 с.
5. Ефимов В.А. Разливка и кристаллизация стали. – М.: Металлургия, 1976, – 552 с.
6. Недопекин Ф.В. Процессы переноса импульса, энергии и массы в сплошных средах. – Донецк: ДонГУ, 2013, – 422 с.
7. Самохвалов С.С. Теплофізичні процеси в багатофазних середовищах: Теоретичні основи комп'ютерного моделювання. – Дніпродзержинськ: ДДТУ, 1994, – 172 с.
8. Лейбензон В.А. и др. Затвердевание металлов и металлических композиций. – Киев: Наукова думка, 2009, – 411 с.