



METRO

MEtalurgiczny TRening *On-line*



Modelowanie komputerowe przemian fazowych w stanie stałym stopów ze szczególnym uwzględnieniem odlewów ADI

Wykład I: ADI, Austenityzacja

Wojciech Kapturkiewicz

AGH



Edukacja i Kultura



AUSTENITYZACJA



Streszczenie wykładu

Do obliczeń kinetyki austenitizacji zaprezentowano model obliczeniowy wzrostu austenitu jako jednowymiarowy dyfuzyjny mechanizm pomiędzy płytkami ferrytu i cementytu, przy czym dyfuzyjny mechanizm przemiany sprzężony został z nieustalonym polem temperatury, wynikającym z nagrzewania odlewu (próbki) w kąpieli solnej. Wyniki modelowania zestawiono z rezultatami pomiaru temperatury w nagrzewanej próbce. Dla celów porównawczych zastosowano również równanie Kolmogorowa do wyznaczenia objętości przemienionej fazy, przy czym kinetykę zarodkowania i wzrostu ziaren austenitu powiązano z przegrzaniem powyżej temperatury A1 w układzie Fe-C (z uwzględnieniem wpływu Si oraz Mn) oraz kinetyką nagrzewania próbki. Równanie Kolmogorowa zestawiono z równaniem Johnsona-Mehla-Avramiego (dla stałych współczynników).

Słowa kluczowe:

modelowanie, austenitizacja, perlit, żeliwo sferoidalne, ADI
modelling, austenitization, pearlite, ductile iron, ADI



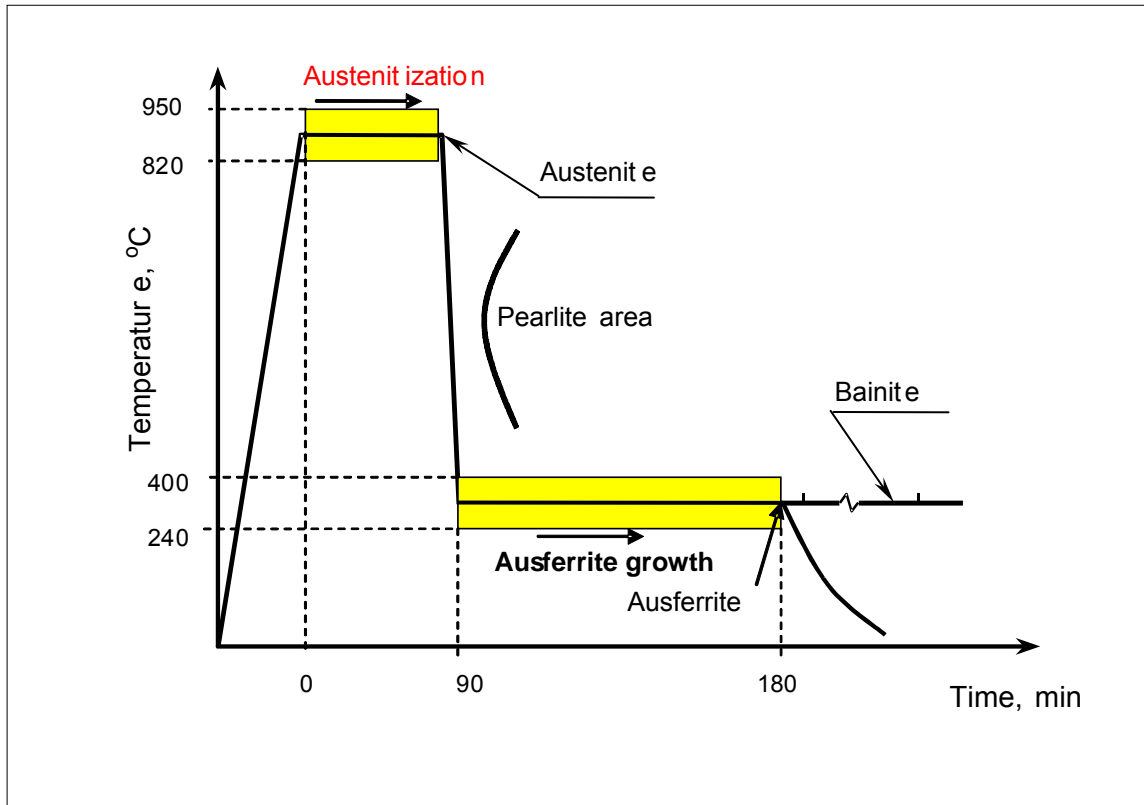
AUSTENITYZACJA

Austenityzacja, jako pierwszy etap obróbki cieplnej odlewów (rys. 1) dla uzyskania żeliwa ADI polega na wygrzewaniu odlewów w temperaturze w granicach 800-950°C, dla uzyskania austenitycznej osnowy struktury, jako punktu wyjścia do struktury ausferrytycznej. Według danych literaturowych [1-9], temperatura i czas austenizacji mają wpływ na parametry struktury i parametry wytrzymałościowe tworzywa po końcowych zabiegach, czyli po hartowaniu izotermicznym.

Zbyt krótki czas austenizacji może być powodem niepełnej przemiany perlitu w austenit, a konsekwencji pozostawienie nieprzetworzonej struktury, niekorzystnie oddziałującej na parametry żeliwa ADI. Niezbędny i optymalny czas austenizacji bardzo istotnie zależy od rodzaju osnowy (perlityczna, ferrytyczna lub z udziałem obu tych składników strukturalnych), a także od rozdrobnienia struktury.



AUSTENITYZACJA



Rys. 1. Austenitizacja - pierwszy etap w technologii ADI



Austenityzacja – model procesu



Według danych literaturowych można wydzielić trzy grupy modeli, ujmujących proces austenizacji poprzez:

- dyfuzyjny mechanizm pomiędzy płytkami ferrytu i cementytu oraz austenitu - [Akbay, Reed, Atkinson 1994-96, Mancini, Budde 1999, Caballero, Capdevila, Garcia de Andres 2000];
- pole dyfuzji we wzrastającym ziarnie austenitu na froncie czoła płytek ferrytu i cementytu [A. Jacot, M. Rappaz, R.C. Reed 1997-98 – model numeryczny, Gaude-Fugarolas, Bhadeshia 2003 - model analityczny];
- Równanie Avramiego (równanie Johnsona-Mehla-Avramiego lub Kolmogorowa-Johnsona-Mehla-Avramiego) dla objętościowej zależności wzrastającej fazy austenitu od czasu [Roosz, Gacsi, Fuchs 1983, Nihli Ahmadabadi, Parsa 2001, Elmer et al. 2003, Szeng, Shi 2004, Kumar et al. 2005].



AUSTENITYZACJA



W niniejszej prezentacji wykorzystano pierwszy z wymienionych powyżej modeli wzrostu austenitu w perlicie (płytkowy 1D model), przy czym dyfuzyjny płytkowy mechanizm przemiany sprzężony został z nieustalonym polem temperatury (3D), wynikającym z nagrzewania odlewu (próbki) w kąpeli solnej.

Wyniki modelowania zestawiono z rezultatami pomiaru temperatury w nagrzewanej próbce. Dla celów porównawczych zastosowano również równanie Kolmogorowa do wyznaczenia objętości przemienionej fazy (jako model z 2-giej wymienionej powyżej grupy), przy czym kinetykę zarodkowania i wzrostu ziaren austenitu powiązano z przegrzaniem powyżej temperatury A_1 w układzie Fe-C (z uwzględnieniem wpływu Si oraz Mn) oraz kinetyką nagrzewania próbki.

Równanie Kolmogorowa zestawiono z równaniem Johnsona-Mehla-Avramiego (dla stałych współczynników).



Austenityzacja – opis modelu procesu



Do rozważań modelowych wzięto pod uwagę połowę płytki cementytu i ferrytu, umownie traktowanych sumarycznie jako płytka perlitu o grubości X_{prl} .

W modelu uwzględnia się następujące zagadnienia:

- kinetykę nagrzewania próbki (odlewu) w kąpeli do austenityzacji;
- dyfuzję węgla, spowodowaną zmianą warunków równowagi międzyfazowej przy nagrzewaniu próbki (odlewu) w kąpeli do austenityzacji;
- przemieszczanie się granic międzyfazowych, spowodowane dyfuzją węgla;
- zmienność współczynników dyfuzji węgla w austenicie i ferrycie w funkcji temperatury;
- wpływ zawartości Si i Mn na położenie linii równowagowych stopu Fe-C.



Austenityzacja – opis modelu procesu

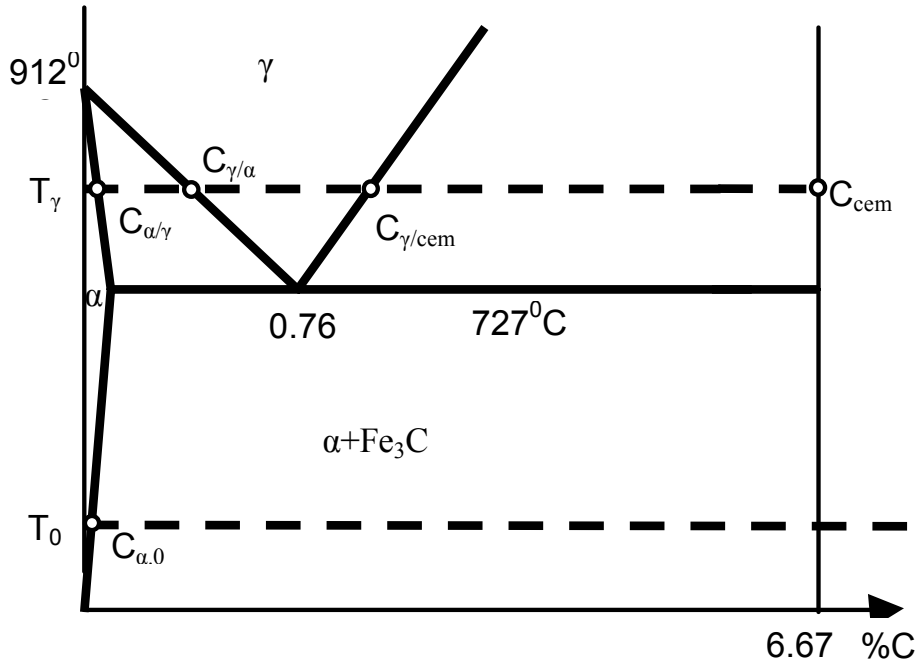


Przyjmuje się, że austenit zarodkuje w postaci płytki pomiędzy cementytem i ferrytem na całej długości w początkowym momencie procesu austenityzacji, przy przekroczeniu linii układu równowagi.

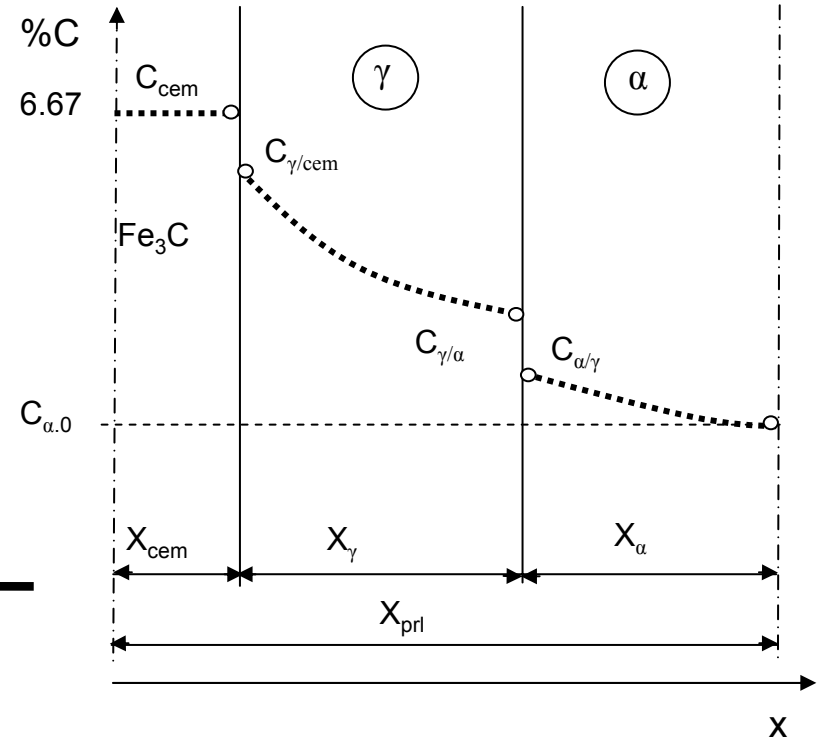
Punktem wyjścia do rozważań jest układ Fe-Fe₃C (rys. 2a), na który naniesiono charakterystyczne punkty równowagi międzyfazowej. Punkty te pokazano również na schemacie płytki perlitu (rys. 2b), w której występuje już, na pewnym etapie wzrostu, płytka austenitu.



Austenityzacja – opis modelu procesu



Rys. 2a. Schemat metastabilnego układu równowagi dla Fe-Fe₃C.



Rys. 2b. Schemat stężenia węgla w ferrycie, cementycie i austenicie podczas austenitacji



Austenityzacja – opis modelu procesu



Proces jest kontrolowany poprzez dyfuzję węgla w sprzężeniu z polem temperatury. Zakładamy, że cementyt, jako składnik perlitu, ma stałą zawartość węgla (6,67% mas.), natomiast gradienty stężenia mogą występować w ferrycie oraz w rosnącym austenicie. Zestaw równań procesu w tym przypadku można zapisać:

równanie dyfuzji dla fazy α (ferryt):

$$\frac{\partial C_{\alpha}}{\partial \tau} = D_{\alpha} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

i dla fazy γ (austenit):

$$\frac{\partial C_{\gamma}}{\partial \tau} = D_{\gamma} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

gdzie C , D , τ – stężenie węgla w Fe , współczynnik dyfuzji i czas



Austenityzacja – opis modelu procesu



Bilans masy na granicy cementyt – faza γ (rys. 2b):

$$u_{\gamma/cem} (C_{cem} \rho_{cem} - C_{\gamma/cem} \rho_{\gamma}) = D_{\gamma} \rho_{\gamma} \left. \frac{\partial C_{\gamma}}{\partial x} \right|_{x_{cem/\gamma}^+}$$

i na granicy faza γ – faza α (rys. 2b):

$$u_{\gamma/\alpha} (C_{\gamma/\alpha} \rho_{\gamma} - C_{\alpha/\gamma} \rho_{\alpha}) = -D_{\gamma} \rho_{\gamma} \left. \frac{\partial C_{\gamma}}{\partial x} \right|_{x_{\gamma/\alpha}^+} + D_{\alpha} \rho_{\alpha} \left. \frac{\partial C_{\alpha}}{\partial x} \right|_{x_{\gamma/\alpha}^-}$$

Warunek na granicy płytki perlitu (rys. 2b):

$$\left. \frac{\partial C_{\alpha}}{\partial x} \right|_{x=X_{prl}} = 0$$



Austenityzacja – opis modelu procesu



Równanie przewodnictwa ciepła dla odlewu:

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = a \nabla^2 T + \frac{L_p}{c} \frac{d\xi_\gamma}{d\tau}$$

gdzie L_p – ciepło przemiany ferryt – austenit, J/g

c – ciepło właściwe żeliwa, J/(g K)

ξ_γ - udział grubości warstwy austenitu

z warunkami brzegowymi 3-go rodzaju.



Austenityzacja – opis modelu procesu



Przyjęto temperaturową zależność współczynnika dyfuzji węgla w austenicie i ferrycie według rys. 3

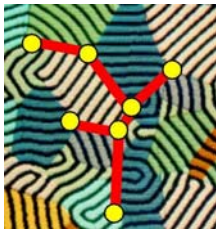
$$D_{\alpha} = 7.90 \cdot 10^{-3} \exp\left(-\frac{7.58 \cdot 10^4}{R \cdot T}\right) \quad D_{\gamma} = 1.67 \cdot 10^{-2} \exp\left(-\frac{1.20 \cdot 10^5}{R \cdot T}\right) \quad \text{cm}^2/\text{s}$$

oraz zależność równowagowych stężeń granicznych według układu Fe-Fe₃C:

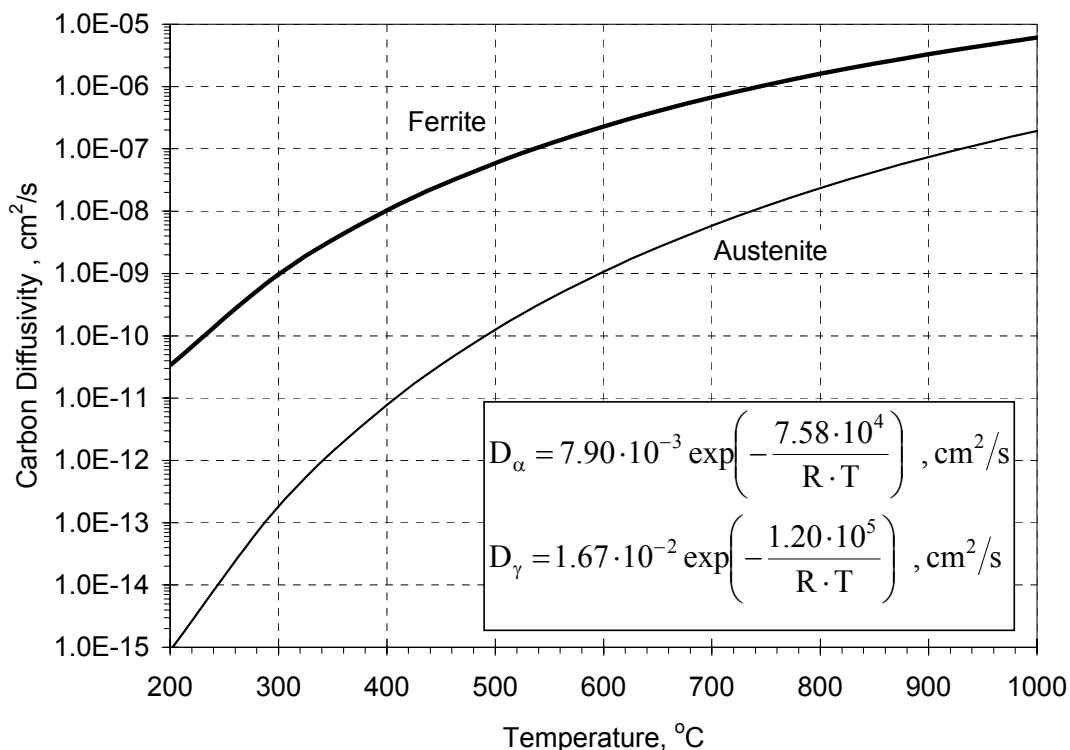
$$C_{\alpha/\gamma} = -\frac{T - 912}{9249.96} \quad C_{\gamma/\alpha} = -\frac{T - 912}{240.26} \quad C_{\gamma/\text{cem}} = \frac{T - 485.08}{314.18}$$

Z pomocą oprogramowania Thermocalc wyznaczono stężenia graniczne układu Fe-C z zawartością 2% Si oraz 0.8% Mn:

$$C_{\alpha/\gamma} = \frac{991.73 - T}{15498} \quad C_{\gamma/\alpha} = \frac{976.3 - T}{372.3} \quad C_{\gamma/\text{cem}} = \frac{T - 491.27}{365.95}$$



Austenityzacja – opis modelu procesu



Rys. 3. Zależność współczynnika dyfuzji węgla w austenicie i ferrycie w funkcji temperatury

Uwaga: bardzo mocna zależność od temperatury (skala logarytmiczna), duża różnica pomiędzy współczynnikiem dyfuzji w austenicie i ferrycie!



AUSTENITYZACJA



*Do rozwiązania układu równań zastosowano metodę różnic skończonych wraz z metodą zmiennej siatki
(Appendix, Wykład III)*



Model Kołmogorowa

Według Kołmogorowa [1937] udział produktów przemiany może być określony równaniem:

$$f_s = 1 - \exp(-\Omega(t))$$

Dla dowolnej szybkości zarodkowania α i dowolnej prędkości wzrostu u

$$\Omega(t) = \frac{4\pi}{3} c^3 \int_0^t \alpha(t') \left(\int_{t'}^t u(\tau) d\tau \right)^3 dt'$$

gdzie c^3 jest współczynnikiem kształtu (dla ziaren kulistych $c^3=1$), a t' jest czasem zarodkowania poszczególnych ziaren.

Funkcja $\Omega(t)$ wyznacza tzw. "objętość rozszerzona" ("extended volume") ziaren produktu przemiany. Jest to sumaryczna objętość względna, którą mogłyby zająć wszystkie kryształy razem, pod warunkiem ich swobodnego wzrostu, jeżeli nie brać pod uwagę zetknięcia w przestrzeni z sąsiadami i wzajemnego blokowania.



Model Kołmogorowa

W przyjętym modelu zostały sprawdzone przypadki prędkości wzrostu zależnej od przegrzania $u = \mu(\Delta T)^n$

$$u = \mu(\Delta T)^n$$

dla $n = 0.5, 1$ i 2 oraz zarodkowanie natychmiastowe i zarodkowanie ciągłe (ilość ziaren proporcjonalna do kwadratu przegrzania).

W przypadku zarodkowania natychmiastowego wartość funkcji α jest zerowa dla całego zakresu czasu z wyjątkiem nieskończenie małego odcinka δt na początku. Na tym odcinku

$$\alpha \rightarrow \infty, \text{ natomiast iloczyn } \alpha \delta = N$$

określa ilość ziaren na jednostkę objętości, a objętość rozszerzona:

$$\Omega(t) = \frac{4\pi}{3} N \left(\int_{t'}^t u(\tau) d\tau \right)^3$$



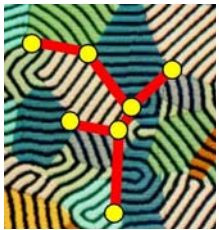
AUSTENITYZACJA



Wyniki eskperymentów i modelowania

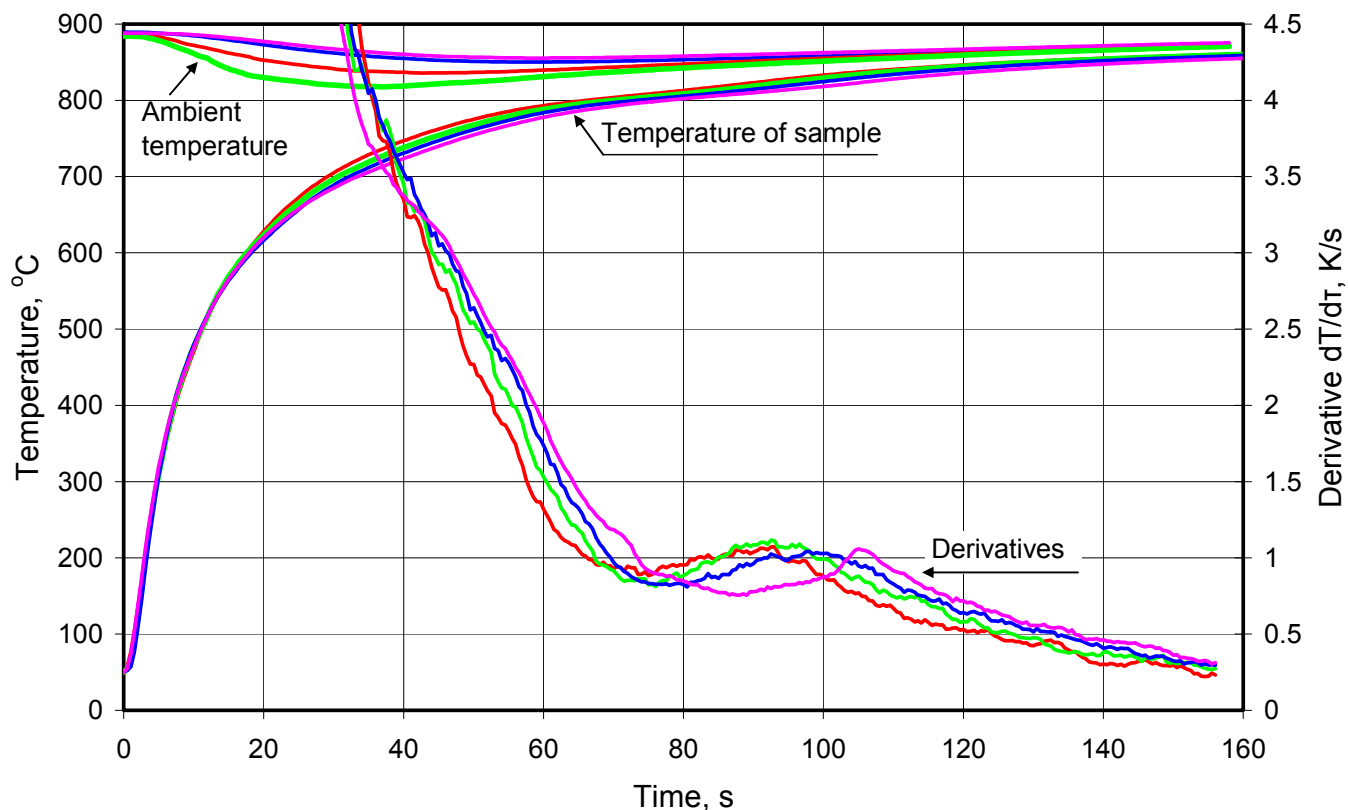
Wyniki obliczeń konfrontowano z pomiarami pola temperatury w próbce z żeliwa sferoidalnego (C- 3.5%, Si – 2.0%, Mn – 0.8%) o osnowie perlitycznej i wymiarach 6x10x15 mm. Próbkę umieszczano w kąpeli solnej w piecu sylitowym z regulowana temperaturą. Dokonywano pomiaru temperatury w geometrycznym środku próbki z pomocą termoelementu Ni-CrNi o grubości 0.2 mm oraz temperatury kąpeli solnej.

Przebieg temperatury w środku próbki (dla serii czterech pomiarów) nie wskazuje na wyraźne występowanie jakiegokolwiek przemiany, związanej z efektami cieplnymi. Taki efekt widoczny jest dopiero po obliczeniu pochodnej temperatury po czasie z wykonanych pomiarów w postaci przystanku na krzywych pochodnych w zakresie ok. 65 do 100 sekund od początku nagrzewania próbki – rys. 4.



AUSTENITYZACJA

Wyniki eskperymentów i modelowania



Rys. 4. Przebieg krzywych nagrzewania próbki dla czterech pomiarów, odpowiadających im pochodnych oraz temperatury kąpeli solnej (otoczenie dla próbki).



AUSTENITYZAJCA



Wyniki eskperymentów i modelowania

Załamanie pomiarowych krzywych pochodnych temperatury, spowodowane efektem cieplnym przemiany perlit – austenit wykorzystano dla oszacowania wartości tego efektu. Wykorzystano w tym przypadku metodę analizy termicznej, zaproponowanej przez Chen i Stefanescu [1984] i na podstawie czterech krzywych nagrzewania uzyskano wartość ciepła przemiany (efekt endotermiczny) perlit austenit $L_{prl/\gamma} = 12.8 \text{ J/g}$ (z odchyleniem standardowym $\sigma = 1.8$).

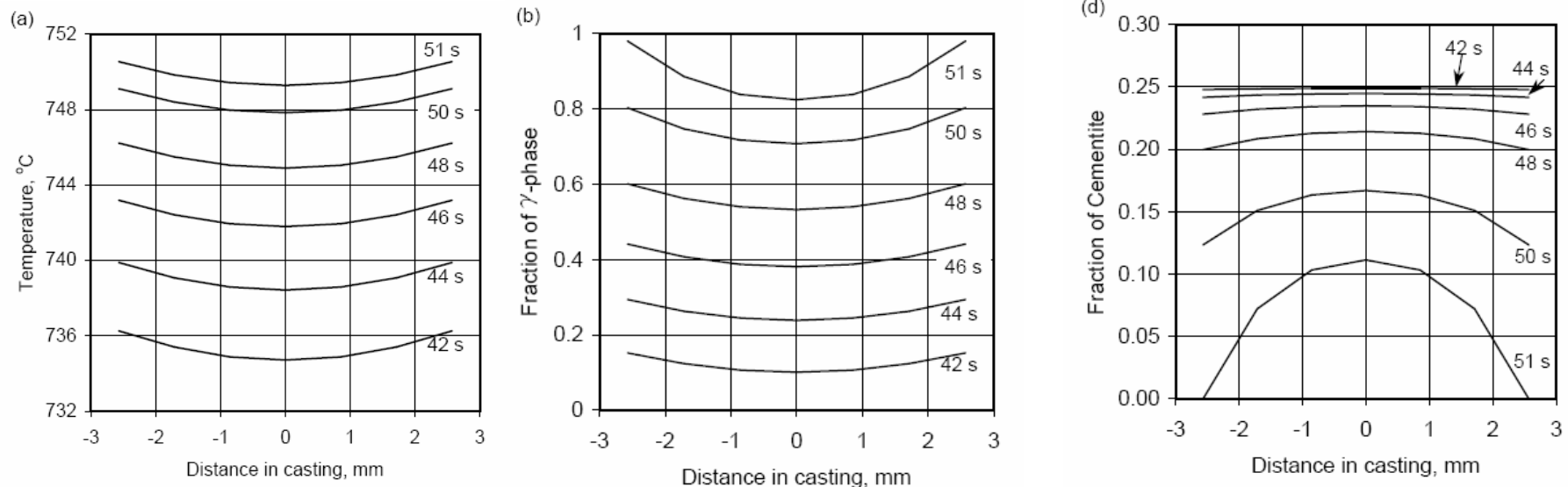


AUSTENITYZACJA

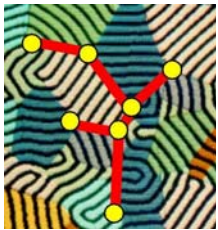
Wyniki modelowania



Na rys. 5 i 6 pokazano przykładowy rozkład temperatury, udziału austenitu i cementytu w przekroju odlewu (na rys.6 - wydruk ekranu, dodatkowo rozkład frakcji ferrytu). Widoczne jest zróżnicowanie badanych wielkości w przekroju odlewu.



Rys. 5. Rozkład temperatury (a), udziału austenitu (b) i cementytu (d) w przekroju odlewu (modelowanie)



Wyniki modelowania



Time = 48.0 s; Temperature						
744.1	743.3	742.9	742.7	742.9	743.3	744.1
744.1	743.4	742.9	742.8	742.9	743.4	744.1
744.2	743.5	743.0	742.9	743.0	743.5	744.2
744.4	743.6	743.2	743.0	743.2	743.6	744.4
744.5	743.8	743.3	743.2	743.3	743.8	744.5
744.8	744.0	743.6	743.4	743.6	744.0	744.8
745.1	744.3	743.9	743.7	743.9	744.3	745.1
745.4	744.7	744.2	744.1	744.2	744.7	745.4
745.8	745.0	744.6	744.5	744.6	745.0	745.8
746.2	745.5	745.1	744.9	745.1	745.5	746.2
746.7	746.0	745.6	745.4	745.6	746.0	746.7
747.3	746.6	746.1	746.0	746.1	746.6	747.3
747.9	747.2	746.8	746.6	746.8	747.2	747.9
748.6	747.9	747.5	747.3	747.5	747.9	748.6
749.4	748.7	748.3	748.1	748.3	748.7	749.4
750.2	749.5	749.1	749.0	749.1	749.5	750.2
751.1	750.4	750.0	749.9	750.0	750.4	751.1

Austenite						
0.505	0.469	0.447	0.440	0.447	0.469	0.505
0.507	0.471	0.449	0.442	0.449	0.471	0.507
0.511	0.474	0.453	0.446	0.453	0.474	0.511
0.517	0.480	0.459	0.451	0.459	0.480	0.517
0.524	0.488	0.466	0.459	0.466	0.488	0.524
0.534	0.498	0.476	0.469	0.476	0.498	0.534
0.547	0.510	0.488	0.481	0.488	0.510	0.547
0.562	0.524	0.503	0.495	0.503	0.524	0.562
0.580	0.542	0.520	0.512	0.520	0.542	0.580
0.601	0.562	0.540	0.533	0.540	0.562	0.601
0.626	0.586	0.563	0.556	0.563	0.586	0.626
0.655	0.614	0.591	0.583	0.591	0.614	0.655
0.689	0.647	0.623	0.615	0.623	0.647	0.689
0.731	0.686	0.660	0.652	0.660	0.686	0.731
0.784	0.733	0.705	0.696	0.705	0.733	0.784
0.856	0.792	0.760	0.750	0.760	0.792	0.856
0.980	0.878	0.834	0.821	0.834	0.878	0.980

Ferrite						
0.276	0.307	0.325	0.331	0.325	0.307	0.276
0.274	0.305	0.324	0.330	0.324	0.305	0.274
0.271	0.302	0.320	0.327	0.320	0.302	0.271
0.266	0.297	0.315	0.322	0.315	0.297	0.266
0.260	0.290	0.309	0.315	0.309	0.290	0.260
0.252	0.282	0.300	0.307	0.300	0.282	0.252
0.242	0.272	0.290	0.296	0.290	0.272	0.242
0.230	0.260	0.278	0.284	0.278	0.260	0.230
0.216	0.246	0.264	0.270	0.264	0.246	0.216
0.199	0.229	0.247	0.253	0.247	0.229	0.199
0.181	0.211	0.228	0.234	0.228	0.211	0.181
0.160	0.189	0.207	0.213	0.207	0.189	0.160
0.137	0.166	0.183	0.189	0.183	0.166	0.137
0.111	0.139	0.157	0.162	0.157	0.139	0.111
0.083	0.110	0.127	0.133	0.127	0.110	0.083
0.052	0.079	0.095	0.100	0.095	0.079	0.052
0.020	0.044	0.060	0.065	0.060	0.044	0.020

Cementite						
0.219	0.225	0.227	0.228	0.227	0.225	0.219
0.219	0.224	0.227	0.228	0.227	0.224	0.219
0.218	0.224	0.227	0.228	0.227	0.224	0.218
0.217	0.223	0.226	0.227	0.226	0.223	0.217
0.216	0.222	0.225	0.226	0.225	0.222	0.216
0.214	0.220	0.224	0.225	0.224	0.220	0.214
0.212	0.218	0.222	0.223	0.222	0.218	0.212
0.209	0.216	0.219	0.221	0.219	0.216	0.209
0.205	0.213	0.217	0.218	0.217	0.213	0.205
0.200	0.208	0.213	0.214	0.213	0.208	0.200
0.193	0.203	0.208	0.210	0.208	0.203	0.193
0.185	0.196	0.202	0.204	0.202	0.196	0.185
0.174	0.187	0.194	0.196	0.194	0.187	0.174
0.158	0.175	0.183	0.186	0.183	0.175	0.158
0.134	0.157	0.168	0.171	0.168	0.157	0.134
0.092	0.129	0.145	0.150	0.145	0.129	0.092
-0.000	0.078	0.106	0.113	0.106	0.078	-0.000

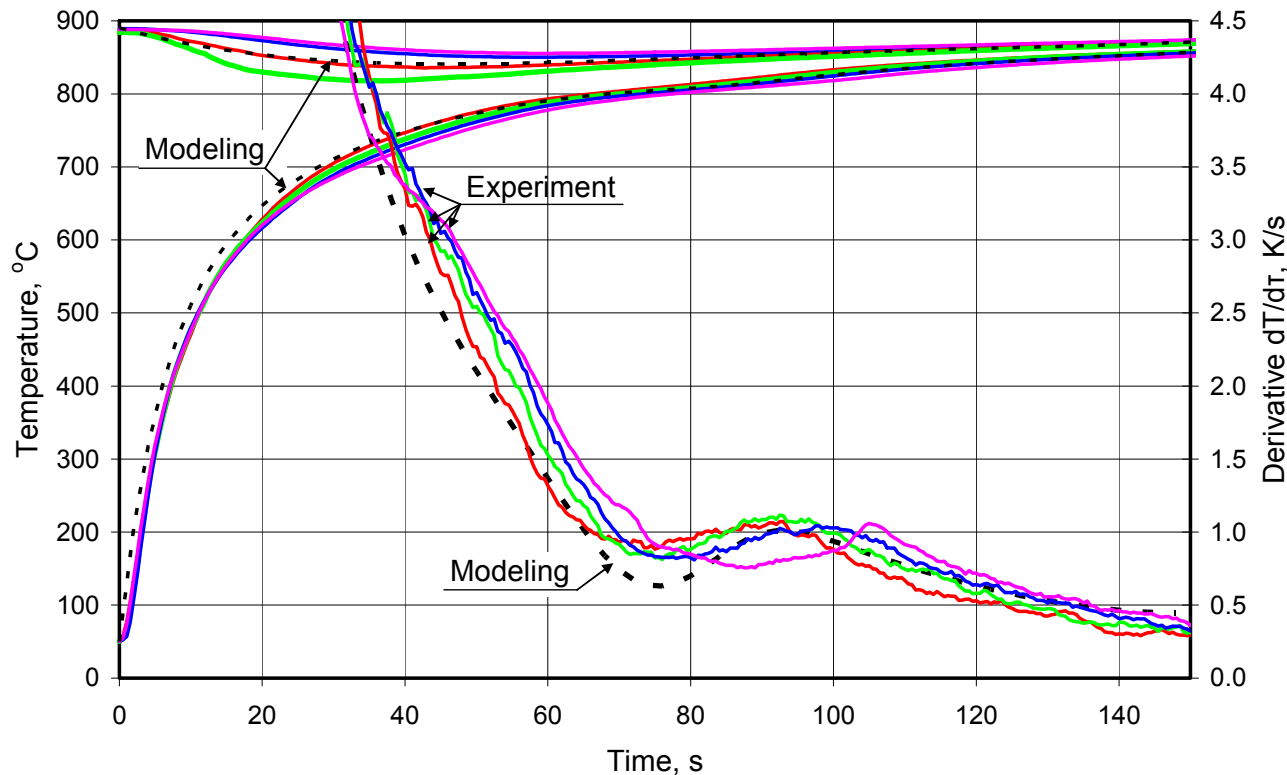
Rys. 6. Wydruk ekranu dla pola temperatury, udziału austenitu, ferrytu i cementytu w przekroju odlewu



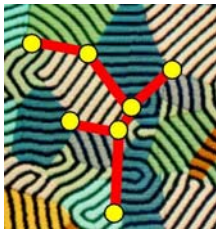
AUSTENITYZACJA

Wyniki eskperymentów i modelowania

Rys. 7 pokazuje przebieg temperatury i pochodnych z pomiarów w zestawieniu z obliczeniami, przeprowadzonymi z pomocą modelu Kolmogorowa.



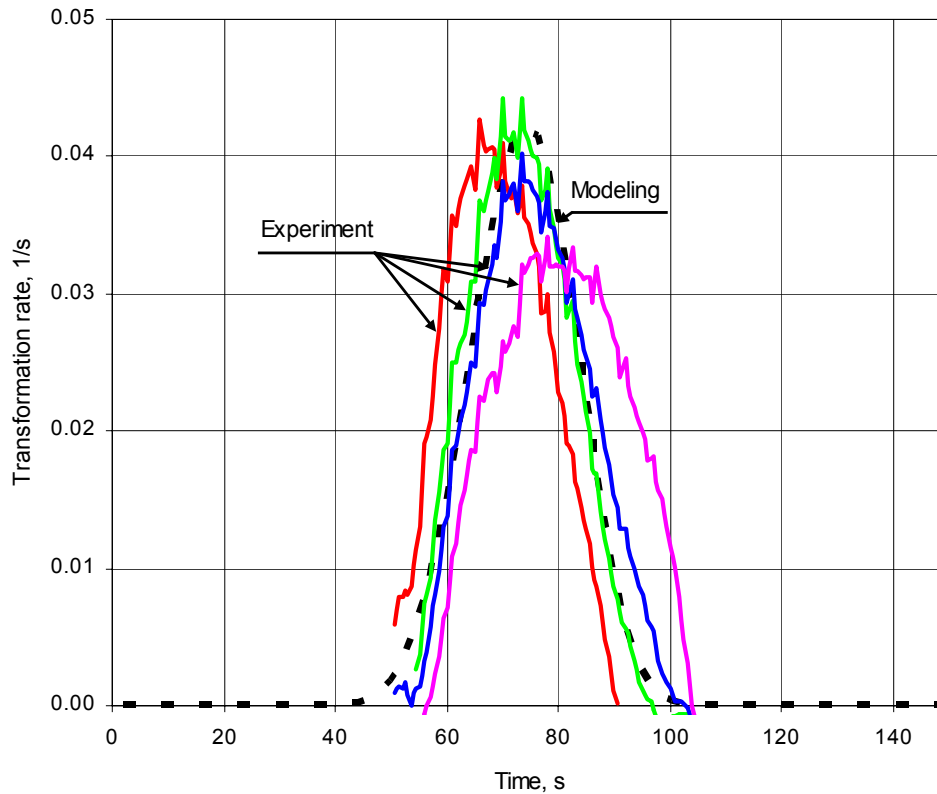
Rys. 7. Wyniki modelowania (linia przerywana) i ekperymentu (linie ciągłe)



AUSTENITYZACJA



Wyniki eskperymentów i modelowania



Rys. 8. Kinetyka przemiany fazowej według eksperymentu (linie ciągłe) i modelowania (linia przerywana)



AUSTENITYZACJA

PODSUMOWANIE

1. Model dyfuzyjny wzrostu austenitu z perlitu (czyli z płytek ferrytu i cementytu) pozwala na ilościowe określenie kinetyki wzrostu austenitu wraz wyznaczeniem kinetyki pola stężenia węgla i temperatury w przekroju odlewu.
2. Zastosowanie równania Kołmogorowa ze stałą liczbą zarodków i zmienną prędkością wzrostu jako funkcji przegrzania pozwoliło na uzyskanie kinetyki przemiany zbliżonej do rezultatów eksperymentu.
3. W procesie austenitizacji istotną rolę odgrywa kinetyka nagrzewania próbki (odlewu). Czas nagrzewania, nawet w przypadku dużej intensywności (np. w kąpeli solnej) przekracza znacznie czas samego procesu austenitizacji.



AUSTENITYZACJA - APPENDIX

Schemat numeryczny obliczania "Objętości rozszerzonej" ("Extended volume")

Przyjmuje się, że ziarna mają postać kulistą, a liczba ziaren w jednostce objętości oraz prędkość liniowa ich wzrostu są znanymi funkcjami przechłodzenia: $N(\Delta T)$ i $u(\Delta T)$.

Wprowadzimy oznaczenia R_i i S_i dla promienia i pola powierzchni ziarna i . Wprowadzimy oznaczenia dla sumy extended volume wszystkich ziaren (Ω), których centra zarodkowania znajdują się w obszarze o objętości jednostkowej, sumarycznego pola powierzchni zewnętrznej of extended volume analizowanych ziaren (S_Ω) i sumy ich promieni (R_Ω):

$$\Omega = \frac{4}{3} \pi \sum_{i=1}^{N(\Delta T)} R_i^3 \quad S_\Omega = 4\pi \sum_{i=1}^{N(\Delta T)} R_i^2 \quad R_\Omega = \sum_{i=1}^{N(\Delta T)} R_i \quad (1)$$



AUSTENITYZACJA - APPENDIX



Ponieważ założono, że w danym momencie czasu wszystkie ziarna rosną z jednakową prędkością liniową, pochodne Ω , S_Ω i R_Ω po czasie:

$$\frac{d\Omega}{d\tau} = u(\Delta T) \cdot 4\pi \sum_{i=1}^{N(\Delta T)} R_i^2 \quad \frac{dS_\Omega}{d\tau} = u(\Delta T) \cdot 8\pi \sum_{i=1}^{N(\Delta T)} R_i \quad \frac{dR_\Omega}{d\tau} = \sum_{i=1}^{N(\Delta T)} u(\Delta T) \quad (2)$$

or, allowing for (1):

$$\frac{d\Omega}{d\tau} = u(\Delta T) \cdot S_\Omega \quad \frac{dS_\Omega}{d\tau} = u(\Delta T) \cdot 8\pi R_\Omega \quad \frac{dR_\Omega}{d\tau} = u(\Delta T) \cdot N(\Delta T) \quad (3)$$



AUSTENITYZACJA - APPENDIX

Po przekształceniu różniczek (3) do postaci różnicowej można zaproponować następujący schemat różnicowy obliczania "Objętości rozszerzonej" dla dowolnych zależności ilości ziaren i prędkości ich wzrostu od temperatury:

$$R_{\Omega,k+1} = R_{\Omega,k} + u(\Delta T) N(\Delta T) \Delta \tau \quad (4)$$

$$S_{\Omega,k+1} = S_{\Omega,k} + u(\Delta T) 8\pi R_{\Omega,k} \Delta \tau \quad (5)$$

$$\Omega_{k+1} = \Omega_k + u(\Delta T) S_{\Omega,k} \Delta \tau \quad (6)$$

gdzie indeksy dolne k i $k+1$ oznaczają numery kolejnych kroków czasowych.