



METRO

MEtalurgiczny TRening *On-line*



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

Wykład II: ADI, wzrost ausferrytu

Wojciech Kapturkiewicz

AGH



Edukacja i Kultura



# Wzrost ausferrytu

## Streszczenie wykładu

Zaprezentowano matematyczny model oraz program modelowania wzrostu ausferrytu z austenitu dla izotermicznych warunków wytwarzania żeliwa ADI. Jego wykorzystanie umożliwia obserwację procesu wzrostu ausferrytu, t.j. wysokowęglowego ferrytu w austenicie. Model oparty jest na nieustalonym dyfuzyjnym wzroście płytek ferrytu w austenicie w odpowiednich warunkach brzegowych, właściwych dla temperatury hartowania izotermicznego; uwzględnia funkcję zarodkowania ferrytu. Rezultaty modelowania zestawiono z wynikami eksperymentów.

### **Słowa kluczowe :**

modelowanie, ausferryt, ADI

*modelling, ausferrite, ADI*



# Wzrost ausferrytu

## Wstęp

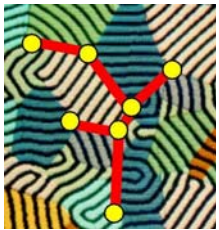
Żeliwo jest tworzywem, w którym przemiany w fazie stałej mogą krańcowo zmienić strukturę pierwotną; jest ona tylko punktem wyjścia do dalszych przemian fazowych. Przedmiotem rozważań niniejszej pracy jest żeliwo sferoidalne, poddane dalszej obróbce cieplnej, charakterystycznej dla ADI (Austempered Ductile Iron).

W żeliwie sferoidalnym w stanie stałym szczególne znaczenie mają prze-miany fazowe austenitu:

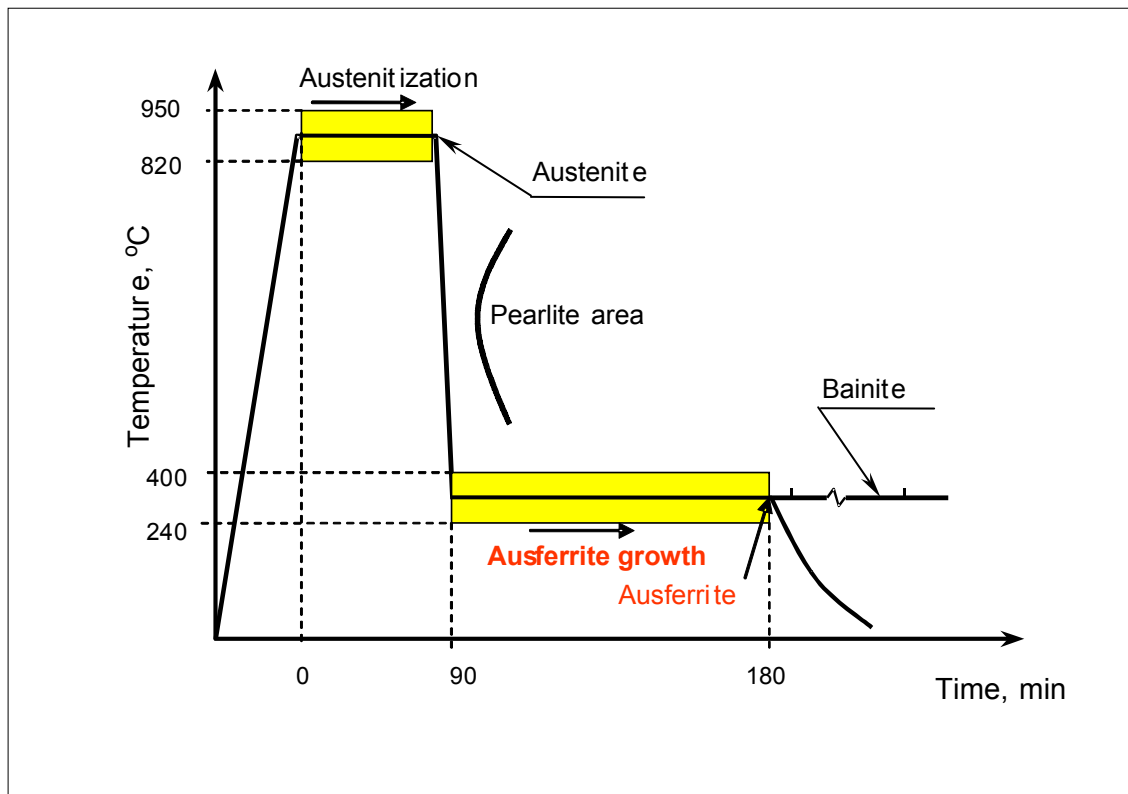
- austenit – ferryt przy stygnięciu żeliwa sferoidalnego w formie odlewniczej,
- austenit – ferryt w technologii ADI.

Szybkie chłodzenie odlewu (rys. 1) z temperatury austenitizacji ( $820 - 950^{\circ}\text{C}$ ) do temperatury ausferrytyzacji ( $240 - 400^{\circ}\text{C}$ ) zmienia warunki równowagi, w rezultacie powodując zarodkowanie i wzrost ferrytu w austenicie. Typową strukturę płytkowego ferrytu w austenicie nazywamy ausferrytem.

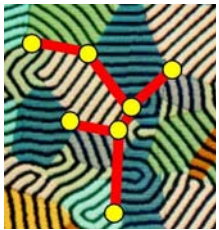
Strukturę najbardziej pożądaną w ADI jest wysokowęglowy ferryt w osnowie wysokowęglowego austenitu (t.j. ausferrytu) z grafitem kulkowym, typowym dla żeliwa sferoidalnego.



# Wzrost ausferrytu

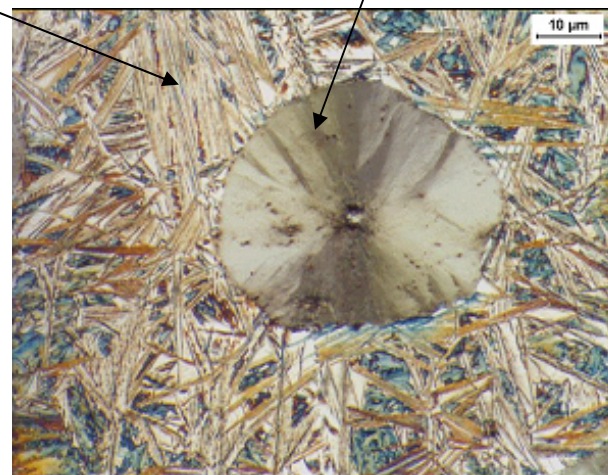
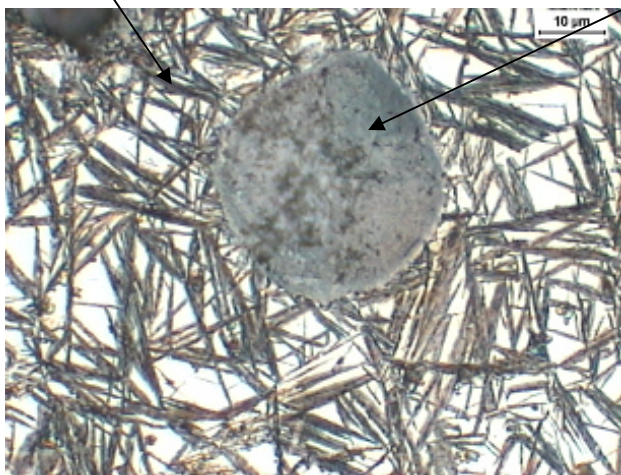


Rys. 1. Wzrost ausferrytu – drugi etap technologii ADI

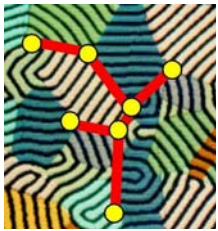


# Model wzrostu ausferrytu

Ausferryt jest charakterystyczną strukturą żeliwa ADI. Jest on mieszaniną ferrytu i nasyconego węglem austenitu z rozłożonym identycznie jak w żeliwie sferoidalnym grafitem kulkowym. Ferryt w osnowie austenitu ma na szlifie metalograficznym charakterystyczny kształt igieł (acicular ferrite – ferryt iglasty). Biorąc jednak pod uwagę płaską powierzchnię przecięcia szlifu, igły należy traktować jako płytki lub tarcze. Prawidłowa struktura ausferrytyczna nie zawiera typowych dla bainitu węglików.



Rys. 2. Struktura ADI



# Model wzrostu ausferrytu

Bazową strukturą w technologii ADI (po austenitizacji) jest osnowa austenityczna z kulkami grafitu, z zawartością węgla w austenicie w granicach 0.9 - 1.2%, zgodnie z temperaturą austenitizacji (punkt  $C_0$  na rys. 3). Szybkie chłodzenie do temperatury wytrzymywania izotermicznego (240 - 400°C) zmienia warunki równowagi, czego rezultatem jest zarodkowanie i wzrost ferrytu (ze stężeniem węgla  $C_{\alpha/\gamma}$ ) oraz zmiana stężenia węgla w austenicie do poziomu  $C_{\gamma/\alpha}$  (rys. 3) i tworzenie ausferrytu.

Wydaje się, że nazwa "ausferyt", wprowadzona przez Kovacsa (AFS, 1994) jest w pełni uzasadniona, chociaż bywają w użyciu również nazwy "feryt bainityczny" lub "bainit".

Rozwiązaniem problemu modelowania może być układ jednowymiarowy, we współrzędnych kartezjańskich. Rozwiązanie sprowadza się do problemu dyfuzji w układzie ferryt - austenit przy zmianie warunków równowagi, spowodowanych przejściem od temperatury austenitizacji do temperatury wytrzymywania izotermicznego (hartowania). Powstałe gradienty stężenia węgla powodują jego dyfuzję oraz ruch granicy międzyfazowej, wzrost ferrytu połączony z formowaniem się wysokowęglowego, stabilnego austenitu.



# Model wzrostu ausferrytu

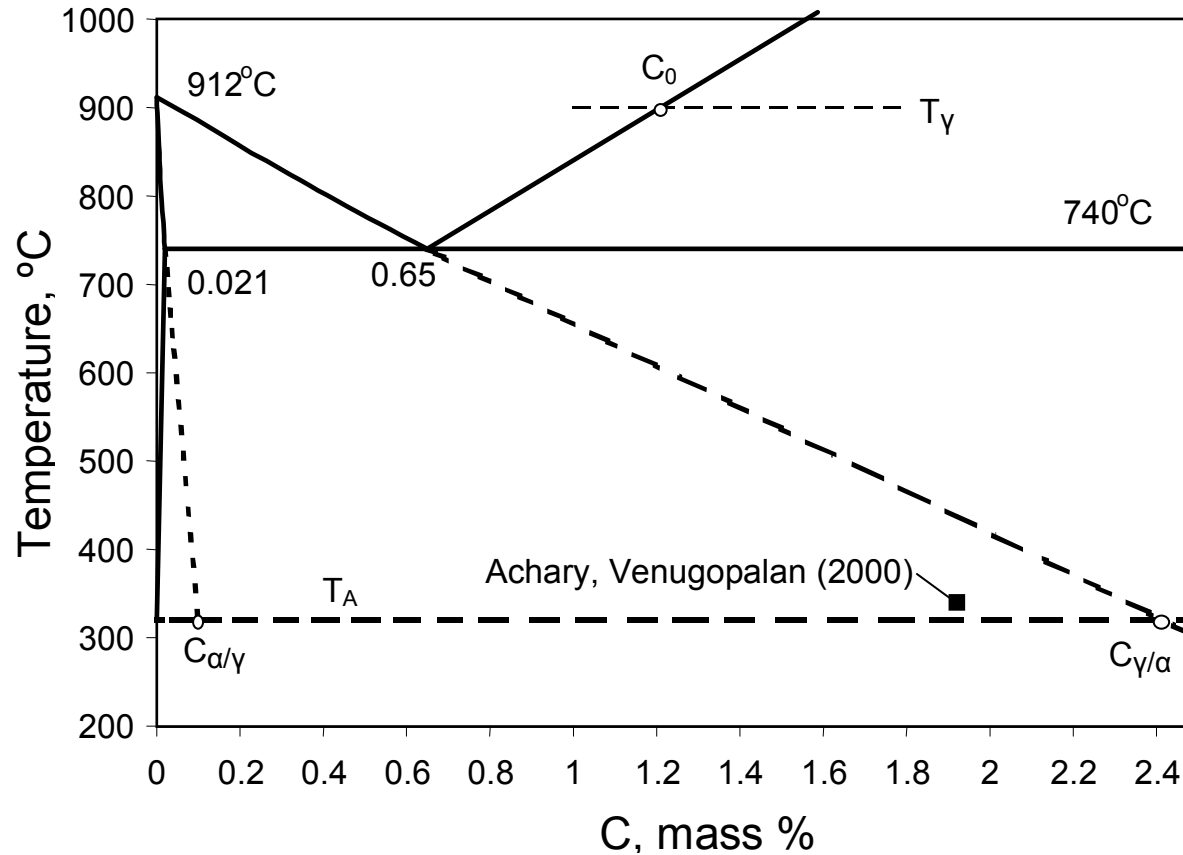
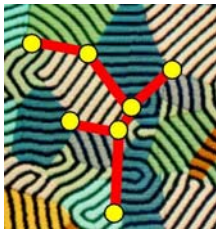


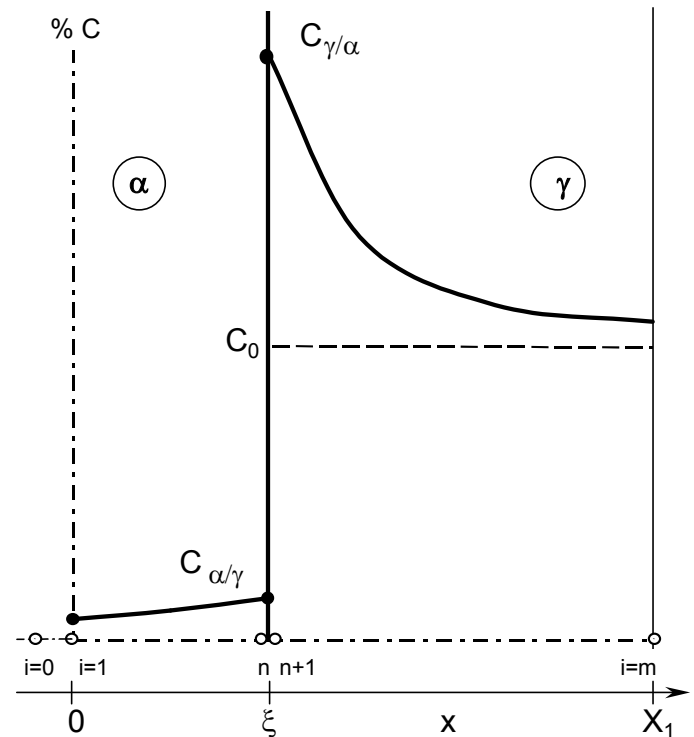
Fig. 3: Fragment układu Fe-C. Punkt ■ - dane eksperymentalne.



# Model wzrostu ausferrytu

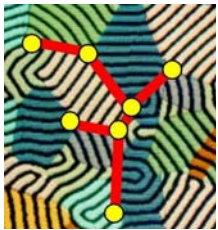


Rys. 4 pokazuje schematyczny rozkład stężenia węgla podczas wzrostu ferrytu w austenicie w temperaturze wytrzymywania izotermicznego  $T_A$ . Oznaczenia na rys. 4 odpowiadają symbolom na układzie równowagowym Fe-C - rys. 3.



Rys. 4: Schemat stężenia w austenicie i ferrycie





# Model wzrostu ausferrytu



Równania dyfuzji dla powyższego układu można zapisać (przy stałej wartości współczynnika dyfuzji w temperaturze wytrzymywania izotermicznego) następująco:

dla fazy  $\alpha$ :

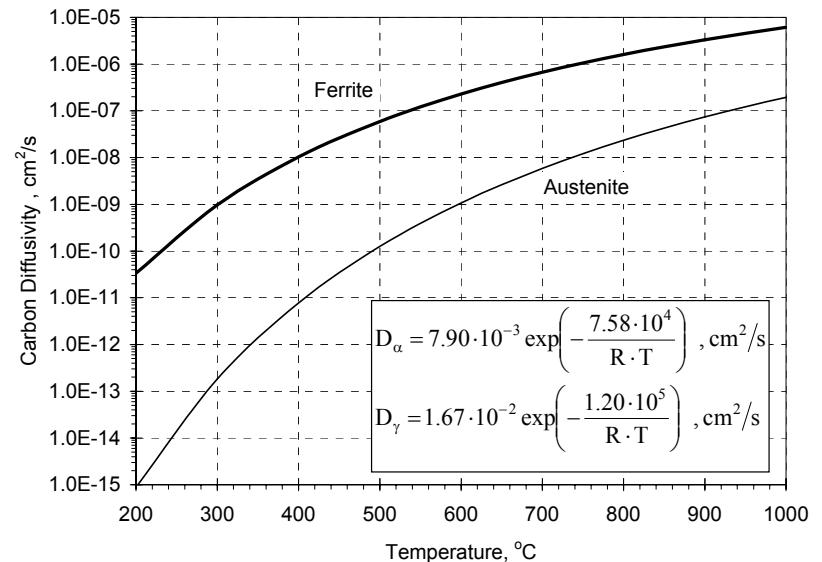
$$\frac{\partial C_{\alpha}}{\partial \tau} = D_{\alpha} \frac{\partial^2 C_{\alpha}}{\partial x^2} \quad (1)$$

dla fazy  $\gamma$ :

$$\frac{\partial C_{\gamma}}{\partial \tau} = D_{\gamma} \frac{\partial^2 C_{\gamma}}{\partial x^2} \quad (2)$$

gdzie  $C_{\alpha}$ ,  $C_{\gamma}$  – stężenie węgla w ferrycie i austenicie

$D_{\alpha}$ ,  $D_{\gamma}$  – współczynnik dyfuzji węgla dla danej fazy w danej temperaturze procesu (rys. 5)



Rys. 5: Współczynnik dyfuzji węgla w ferrycie i austenicie



# Model wzrostu ausferrytu

Bilans masy na granicy faz (rys. 2):

$$\left( C_{\alpha/\gamma} \rho_{\alpha} - C_{\gamma/\alpha} \rho_{\gamma} \right) \frac{d\xi}{d\tau} = D_{\gamma} \rho_{\gamma} \left( \frac{\partial C_{\gamma}}{\partial x} \right)_{x=\xi^+} - D_{\alpha} \rho_{\alpha} \left( \frac{\partial C_{\alpha}}{\partial x} \right)_{x=\xi^-} \quad (3)$$

Warunki brzegowe:

$$\text{dla fazy } \alpha : \quad \frac{\partial C_{\alpha}}{\partial x} = 0, \quad x = 0 \quad \text{i dla fazy } \gamma : \quad \frac{\partial C_{\gamma}}{\partial x} = 0, \quad x = X_1$$

$$C = C_{\alpha/\gamma}, \quad x = \xi^+; \quad C = C_{\gamma/\alpha}, \quad x = \xi^-$$

Warunki początkowe są narzucone przez układ równowagi (rys. 3).



# Model wzrostu ausferrytu

## Rozwiązanie numeryczne

Szybkość zmiany stężenia zgodnie z równaniem (1) lub (2) zależy od gradientu tego stężenia. Przy założonych warunkach brzegowych prawdopodobnie możliwe jest jedynie rozwiązanie numeryczne. Jeśli przyjmiemy model ze stałą liczbą elementów różnicowych w obrębie jednej fazy, ze względu na zmianę grubości tej fazy będą również zmieniać się wymiary tych elementów. Obliczona w danym punkcie układu wartość stężenia składnika (odzwierciedleniem którego jest wartość stężenia w danym elemencie) będzie nie tylko od gradientu stężenia, ale i od zmiany wymiaru danego elementu. Szybkość zmiany tego stężenia w wewnętrznym punkcie układu, którego ułożenie jest stałym ułamkiem zmiennej grubości fazy, może być wyrażone poprzez zmienną siatkę Murray-Landisa:

$$\frac{dC_i}{d\tau} = \frac{\partial C_i}{\partial x_i} \left( \frac{dx_i}{d\tau} \right) + \left( \frac{\partial C_i}{\partial \tau} \right) \quad (4)$$



# Model wzrostu ausferrytu

## Rozwiązanie numeryczne

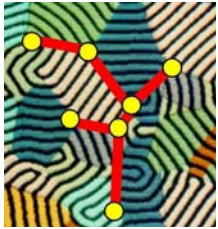
gdzie:  $\frac{\partial C_i}{\partial \tau}$  określone jest równaniem (1) lub (2) i gdzie szybkość przemieszczania wewnętrznego punktu "i" jest funkcjonalnie powiązana z szybkością ruchu granicy międzyfazowej:

$$\frac{dx_i}{d\tau} = \frac{x_i}{\xi} \frac{d\xi}{d\tau} \quad (5)$$

Zestawiając (4) i (5) dla szybkości zmiany stężenia fazy  $\alpha$  w wewnętrznym punkcie "i" otrzymujemy (dla  $i = 2, 3 \dots n-1$ ):

$$\frac{dC_{i,\alpha}}{d\tau} = \frac{x_i}{\xi} \frac{\partial C_{\alpha,i}}{\partial x_i} \frac{d\xi}{d\tau} + \frac{\partial C_{i,\alpha}}{\partial \tau} \quad (6)$$

gdzie:  $\frac{d\xi}{d\tau}$  - szybkość ruchu granicy międzyfazowej.



# Model wzrostu ausferrytu

## Rozwiązanie numeryczne

Dla fazy  $\gamma$  (dla  $i = n+1 \dots m-1$  - rys. 2):

$$\frac{dC_{i,\gamma}}{d\tau} = \frac{X_1 - x_i}{X_1 - \xi} \frac{\partial C_{\gamma,i}}{\partial x_i} \frac{d\xi}{d\tau} + \frac{\partial C_{i,\gamma}}{\partial \tau} \quad (7)$$

Dla powierzchni międzyfazowej równania (6) i (7) są sprzężone z równaniem bilansu masy (3), którego rozwiązanie daje szybkość przemieszczania się powierzchni międzyfazowej.

Przekształcając równania (6) i (7) do postaci różnic skończonych (przy założeniu, że współczynnik dyfuzji jest niezależny od stężenia) otrzymujemy (oznaczenia według rys. 4, dla siatki o zmiennych wymiarach elementów różnicowych):  
dla fazy  $\alpha$ , w punktach  $i \in (1, n-1)$

$$\frac{C_i^{k+1} - C_i^k}{\Delta\tau} = \frac{x_i}{\xi} \frac{C_{i+1}^k - C_{i-1}^k}{2 \Delta x_1} \frac{d\xi^{k+1}}{d\tau} + \frac{D_\alpha}{\Delta x_1^2} (C_{i-1}^k - 2C_i^k + C_{i+1}^k) \quad (8)$$



# Model wzrostu ausferrytu

## Rozwiązanie numeryczne



i dla fazy  $\gamma$ , w punktach  $i \in (n+2, m)$ :

$$\frac{C_i^{k+1} - C_i^k}{\Delta\tau} = \frac{X_1 - x_i}{X_1 - \xi} \frac{C_{i+1}^k - C_{i-1}^k}{2\Delta x_2} \frac{d\xi^{k+1}}{d\tau} + \frac{D_\gamma}{\Delta x_2^2} (C_{i-1}^k - 2C_i^k + C_{i+1}^k) \quad (9)$$

gdzie:  $k$  – indeks kroku czasowego,

$\Delta x_1, \Delta x_2$  – wymiar elementów różnicowych dla fazy  $\alpha$  i  $\gamma$



# Model wzrostu ausferrytu

## Rozwiązanie numeryczne

Szybkość przesuwania się granicy międzyfazowej  $u_\xi$  określamy z przekształcenia równania bilansu masy (3) do postaci różnicowej:

$$u_\xi = \frac{1}{C_{\alpha/\gamma} - C_{\gamma/\alpha}} \left[ \frac{D_\gamma}{2\Delta x_2} (-C_{n+3}^k + 4C_{n+2}^k - 3C_{\gamma/\alpha}) - \frac{D_\alpha}{2\Delta x_1} (C_{n-2}^k - 4C_{n-1}^k + 3C_{\alpha/\gamma}) \right] \quad (10)$$

gdzie  $u_\xi = \frac{\xi^{k+1} - \xi^k}{\Delta \tau}$

Dla elementów, leżących na granicy układu, pochodna stężenia składnika równa się zero, co pozwala zapisać:

$$C_0^{k+1} = C_2^{k+1}; \quad C_{m+1}^{k+1} = C_{m-1}^{k+1}$$



# Model wzrostu ausferrytu

## Modelowanie

Powyższy model matematyczny wykorzystano do opracowania programu komputerowego, którego zadaniem było śledzenie kinetyki wzrostu ferrytu w austenicie w warunkach wytrzymywania izotermicznego. Celem obliczeń było sprawdzenie funkcjonowania modelu dla założonych warunków jednoznaczności. Podstawowym parametrem jest współczynnik dyfuzji węgla w austenicie i ferrycie, którego zmienność w funkcji temperatury w sposób istotny zmienia obraz procesu.

Współczynniki dyfuzji dla ferrytu i austenitu określono według rys. 5:

a)  $T=250^{\circ}\text{C}$ ,  $D_{\alpha} = 2.11 \times 10^{-10}$ ,  $D_{\gamma} = 1.64 \times 10^{-14}$ ;

b)  $T=300^{\circ}\text{C}$ ,  $D_{\alpha} = 9.68 \times 10^{-10}$ ,  $D_{\gamma} = 1.83 \times 10^{-13}$ .





# Wzrost ausferrytu

## Modelowanie

Rys. 6a i b pokazują kinetykę granicy międzyfazowej ferryt – austenit połączoną z polem dyfuzji dla typowego czasu procesu tj. około 2 godzin wytrzymywania izotermicznego i parametrami dyfuzji, odpowiadającymi temperaturze 250 (a) i 350<sup>0</sup>C (b).

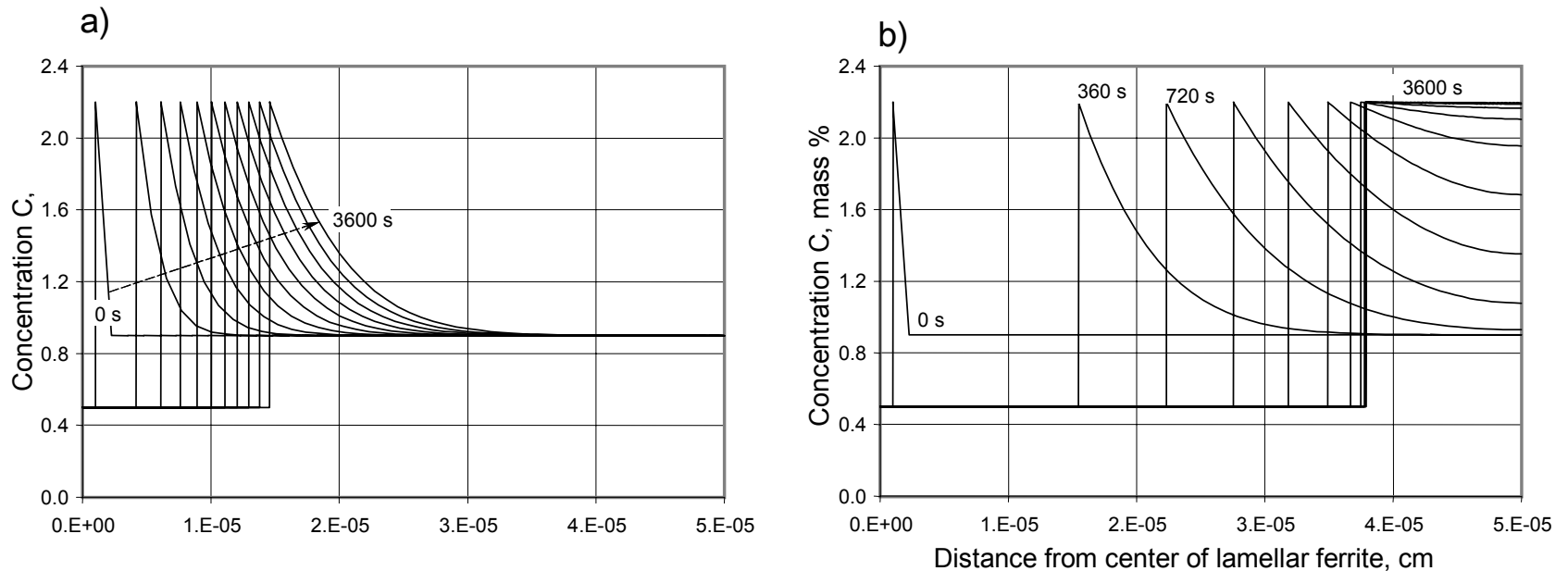


Fig. 6: Pole stężenia w ferrycie i austenicie podczas wytrzymywania izotermicznego w temperaturze 250<sup>0</sup>C (a) i 300<sup>0</sup>C (b) - modelowanie



# Wzrost ausferrytu

## Modelowanie



Z przebiegu krzywych ilustrujących kinetykę stężenia węgla (rys. 6a) wynika, że w temperaturze  $250^{\circ}\text{C}$  proces wzrostu płytki ferrytu przebiega bardzo wolno. Po czasie około 3600 sekund wymiar płytki jest ciągle bardzo niewielki i nie stabilizuje się. Ten sam proces dla współczynników dyfuzji, odpowiadających temperaturze  $300^{\circ}\text{C}$  (według rys. 6b), wskazuje na stabilizację wzrostu płytki ferrytu po czasie około 1800 sekund.

Wynika z tego niezwykle istotny wpływ temperatury ausferrytyzacji na kinetykę wzrostu ausferrytu poprzez silną zależność współczynników dyfuzji od temperatury.

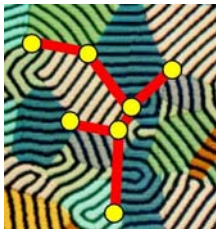


# Wzrost ausferrytu

## Eksperymenty

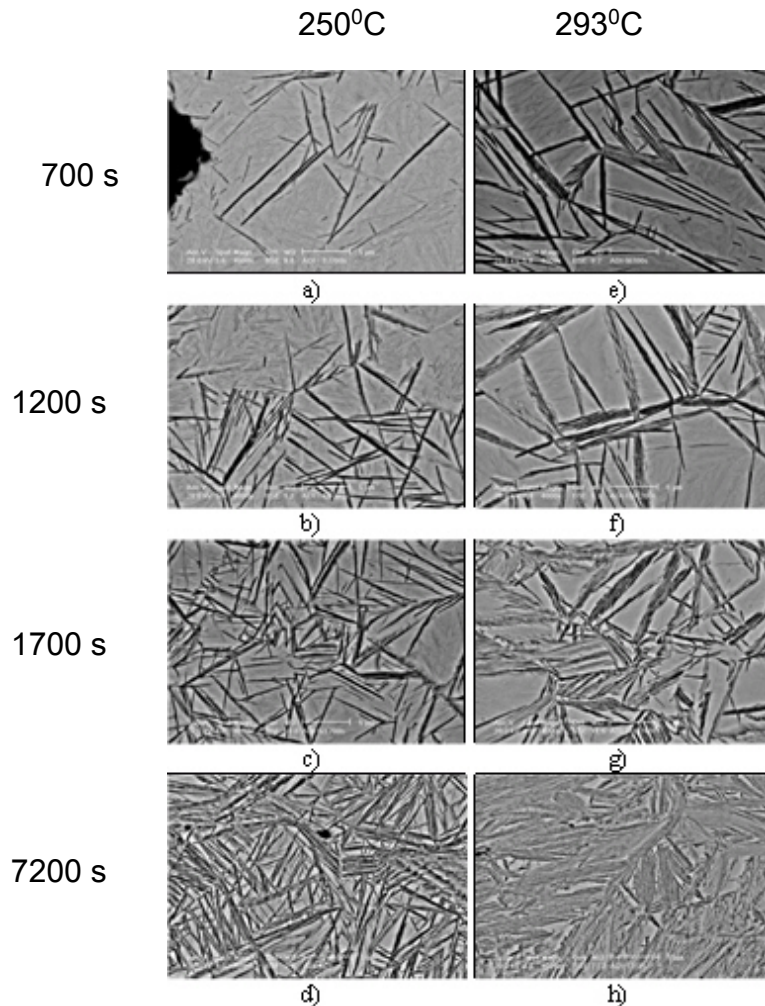
Tab. 1: Skład chemiczny żeliwa sferoidalnego przed ausferryzacją

Zawartość pierwiastków [wt%]						
C	Mn	Si	P	S	Cr	Ni
3.45	0.21	2.32	0.069	0.012	0.04	1.68
Cu	Mg	Mo	Ti	Sn	Pb	
0.72	0.072	0.097	0.018	0.005	0.003	



# Wzrost ausferrytu

## Zarodkowanie ferrytu



Rys. 7. Morfologia płytek ferrytu w ausferrytycznej strukturze ADI po czasie procesu 700 (a, e), 1200 (b,f), 1700 (c, g) i 7200 sekund (d, h) dla temperatury procesu 250°C (a, b, c, d) i 293°C (e, f, g, h)



# Wzrost ausferrytu

## Zarodkowanie ferrytu

Kinetykę zarodkowania płytek ferrytu pokazano na rys. 8; punkty eksperymentalne z analizy struktury - rys. 7 ujęto krzywą regresji typu równania Avramiego. Krzywe te są użyte jako dane wejściowe do modelowania.

Funkcje zarodkowania ferrytu wykorzystane były w modelowaniu wzrostu objętości ausferrytu dla temperatury 250 i 293<sup>o</sup>C (rys. 9) oraz grubości płytek ferrytu (rys. 10), a uzyskane rezultaty porównane są z danymi z eksperymentów.

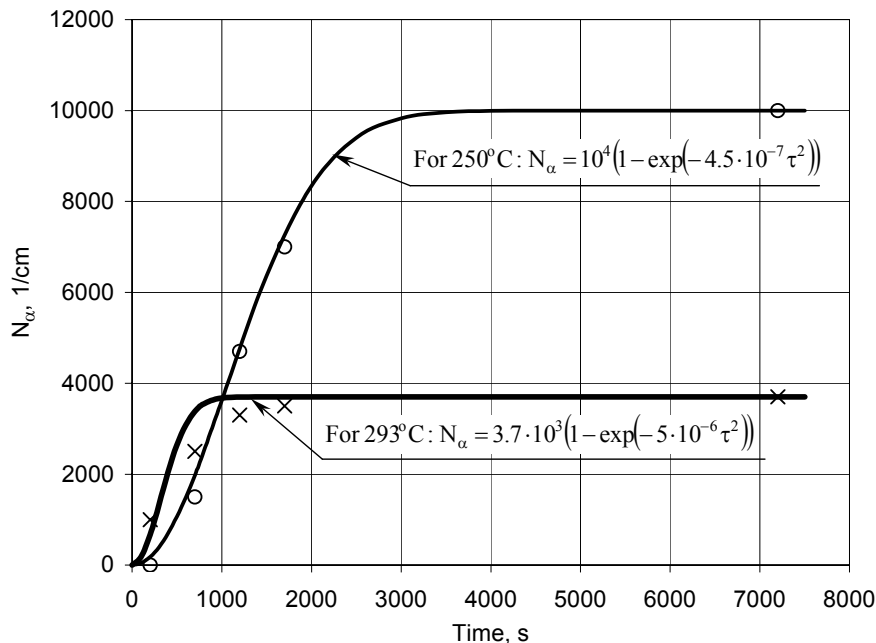
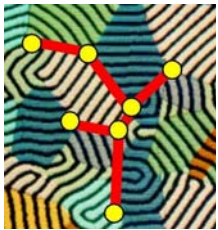


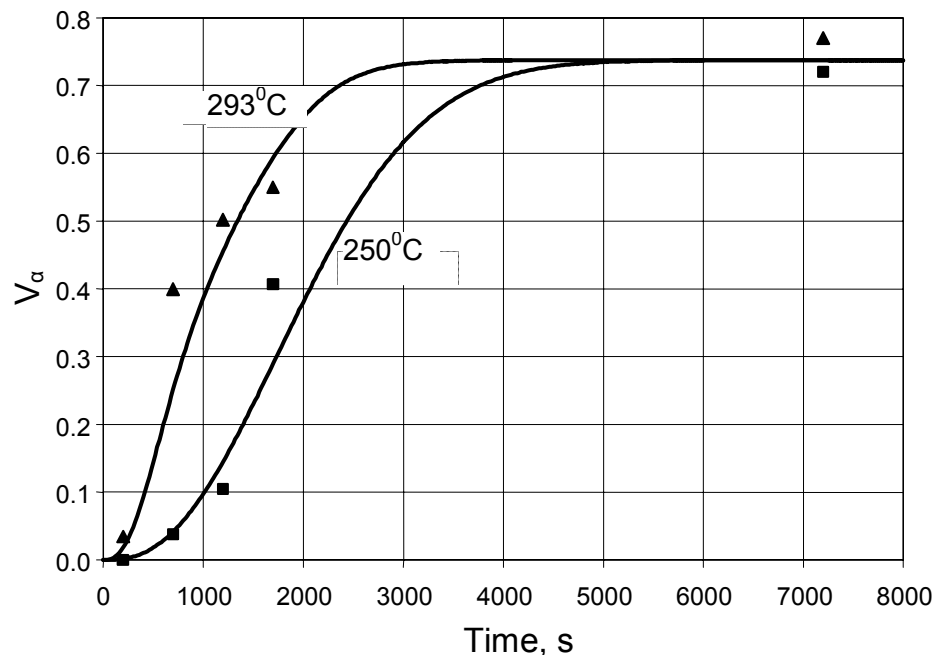
Fig. 8: The rate of ferrite nucleation (points: the experimental data)

*From the performed simulation and data obtained in experiments it also follows that quite an important role in the kinetics of ausferrite formation is played by the nucleation of ferrite which is strongly dependent on both time and temperature of austempering.*



# Wzrost ausferrytu

## Modelowanie i eksperymenty



Rys. 9: Kinetyka wzrostu objętości ferrytu w czasie procesu hartowania izotermicznego (linie: modelowanie; punkty - dane eksperymentalne)



# Wzrost ausferrytu

## Modelowanie i eksperymenty

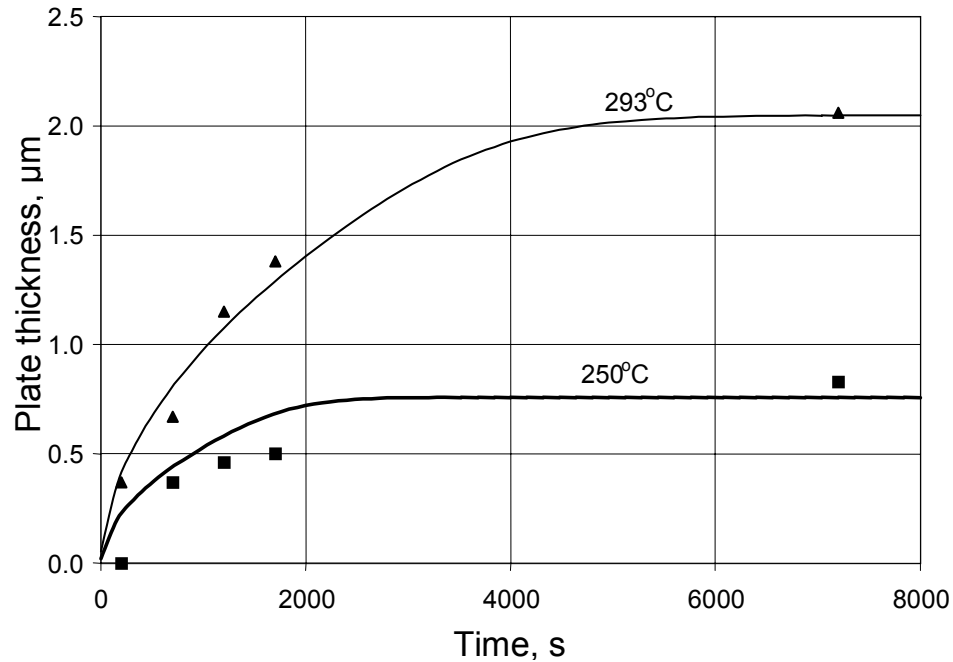


Fig.10: Kinetyka wzrostu grubości płytek ferrytu podczas hartowania izotermicznego (linie - modelowanie, punkty - eksperymenty)

*Kinetyka wzrostu objętości ferrytu (rys. 9) oraz grubości płytek ferrytu (rys. 10) bardzo istotnie zależą zarówno od czasu jak i temperatury hartowania izotermicznego.*