

Визначення оптимальних вихідних розміру і маси часток модифікатора методом скінчених різностей

А. І. Троцан, доктор технічних наук, професор

В. В. Каверинський

І. Л. Бродецький, кандидат технічних наук

Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України, Київ

Запропонована методика визначення оптимальних розмірів дисперсних тугоплавких часток, що вводяться, маси модифікатора і температури розплаву, побудована на принципах скінченорізного комп'ютерного моделювання шляхом зворотнього прогнозуючого розрахунку. Методика дозволяє встановити параметри модифікування розплавів, що забезпечують утворення заданої кількості додаткових центрів кристалізації.

Модифікування розплавів тугоплавкими інокуляторами є ефективним і перспективним методом поліпшення структури литого металу [1, 2]. Раніше, у роботах [3 – 5] нами розроблені аналітичні математичні моделі поводження у розплаві часток тугоплавких інокуляторів: модель розчинення часток у розплаві, що охолоджується [3], модель розчинення тугоплавких часток з поправкою на зміну концентрації [4], модель переміщення часток, що розчиняються в розплаві [5]. На їх підставі запропоновані методики визначення раціональних параметрів модифікування. Була показана можливість модифікування розплаву із застосуванням не нанорозмірних порошків, використання яких дороге і не технологічне, а крупніших, здатних розчинятися до розмірів центрів кристалізації до моменту її початку. При цьому важливим стає визначення параметрів модифікування, що забезпечують утворення максимального числа додаткових центрів кристалізації, що і приведено в даній роботі.

Побудова аналітичних моделей передбачає цілий ряд допущень і усереднювань, необхідних для здобуття однозначних алгебраїчно вирішуваних залежностей, що певною мірою знижує точність і достовірність результатів. Точніше визначити вихідні розміри часток модифікатора, що вводяться, його масу і оптимальну температуру розплаву при введенні можна з використанням чисельних математичних методів скінченорізного моделювання [6]. Доцільність їх використання обумовлена нелінійністю даного процесу – параметри, що впливають на розчинення змінюються за його ходом; зміна деяких з них (наприклад, концентрації в розплаві розчинених елементів) безпосередньо залежить від протікання самого процесу. Для вирішення даного завдання слід виконати зворотній розрахунок, при якому спочатку задається: кінцевий розмір часток, вважаючи його рівним розміру центру кристалізації; кількість необхідних додаткових (утворених модифікатором) центрів кристалізації; температура початку кристалізації. Для повноти вихідних даних не вистачає кінцевої концентрації елементів модифікатора в розплаві, оскільки вона залежить від маси розчинених часток, яка, у свою чергу, залежить від маси введених і є однією з шуканих величин.

Розглянемо сутність скінченорізного моделювання стосовно поставленого завдання. Задаємо наступні параметри: концентрації елементів, які можна отримати в сталі після розчинення модифікатора; температура розплаву у момент початку кристалізації (ліквідус); кінцевий розмір часток (розмір центру кристалізації); кількість додаткових центрів кристалізації; швидкість охолодження розплаву і крок за часом. Розміри всіх часток вважаємо однаковими, а їх кількість незмінною. Поетапно розраховуємо, яким має бути розмір частки на початку заданого малого інтервалу (кроку за часом), починаючи з кінця останнього, щоб розмір частки за рахунок процесу розчинення, що йде, став таким, як в кінці цього інтервалу (для першого інтервалу – заданий кінцевий розмір). Параметри системи (температура, концентрації, коефіцієнти дифузії, в'язкість) протягом малого інтервалу часу вважаємо постійними.

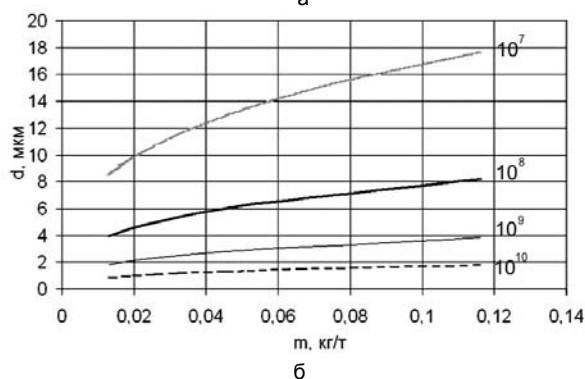
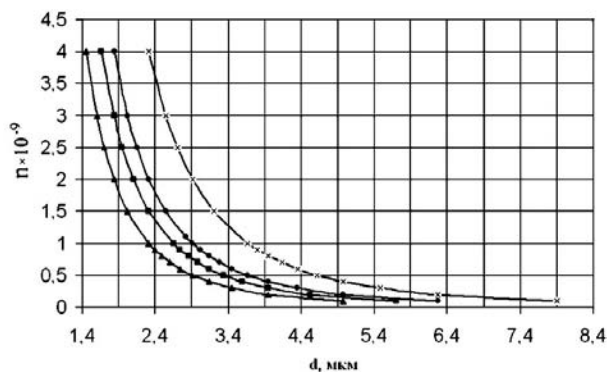
Враховуючи розраховану зміну розміру однієї частки і знаючи загальну кількість часток (її в першому наближенні, як встановлено в [7], слід приймати в 10^3 раз більш, ніж число необхідних додаткових центрів кристалізації), розраховуємо, наскільки більшою була їх маса на початку інтервалу. Знаходимо різницю між початковою і кінцевою загальною масою. Знаючи зміну маси часток і масу розплаву, що приходить на задану їх кількість, розраховуємо наскільки меншою була концентрація елементів, що розчинялися в розплаві на початку інтервалу. Враховуючи зміну температури за даний крок за часом, розраховуються зміна константи рівноваги і рівноважних концентрацій елементів, що розчиняються в розплаві, коефіцієнтів в'язкості (рівняння типу Ареніуса) і дифузії (формула Стокса-Ейнштейна). Кінцеві значення параметрів попереднього інтервалу стають початковими для наступного. Обчислення проводяться до тих пір, поки не дійдемо до початкової концентрації хоч би одного з елементів модифікатора. Після цього корегуємо початкову концентрацію іншого елементу, визначаємо значення температури розплаву (температура, до якої дійшли на останньому розрахунковому інтервалі, при якій частки попали в нього) і їх початковий розмір та масу на цей момент. Для реалізації вказаного алгоритму розрахунку нами написана комп'ютерна програма на мові Delphi.

Проведені розрахунки для різних модифікаторів (TiN, TiC, NbN, ZrN) показали, що використовуючи одну і ту ж масу часток, що вводяться, можна отримувати різну кількість центрів кристалізації, змінюючи при цьому розмір вихідних часток. Оскільки дрібніші частки розчиняються швидше, а більші повільніше (при тому непропорційно), то слід вводити їх в розплав при певній температурі для кожного випадку. Більше число центрів кристалізації (при рівній масі модифікатора) утворюється при використанні дрібніших часток. Оптимальна температура введення в цьому випадку зміщується до температури, близької до початку кристалізації. Вводячи дрібні частки (2 – 3 мкм) перед початком кристалізації (у прикладі, що розглядається нижче, для нітриду титану при 1520 °C) масою від 0,05 до 0,07 кг/т можемо розраховувати на ефективне модифікування розплаву. Ще більший ефект можна отримати при введенні від 0,06 до 0,12 кг/т часток розміром 1 – 2 мкм. Чим більше маса модифікатора при тих же розмірах часток, тим центрів кристалізації більше. Оптимальна температура розплаву при введенні в такому разі мало залежить від маси і розміру порошку, що вводиться. Вона близька або навіть приблизно дорівнює температурі ліквідусу, що пов'язано з тим, що «час життя» настільки малої частки складає декілька секунд. З іншого боку, подібні частки не утворюють крупних неметалічних включень.

На рисунку приведена система графіків за отриманими за допомогою комп'ютерної програми даними, що показують залежність кількості додаткових центрів кристалізації від розмірів часток модифікатора для різних мас порошку нітриду титану. Початкова концентрація титану ~ 0,006 %, азоту ~ 0,0086 %, охолодження розплаву із швидкістю 0,7 °C/с.

Методи дослідження та контролю якості металів

З представлених графіків (рисунок а) видно, якого розміру мають бути частки модифікатора, і яка має бути їх маса для утворення заданої кількості центрів кристалізації. Використовуючи частки більше 4,5 мкм навіть при відносно великій масі модифікатора (~ 0,1 кг/т), що вводиться, неможливо забезпечити високе (більше 10^9 т^{-1}) число додаткових центрів кристалізації. При використанні дрібніших часток



Залежність кількості додаткових центрів кристалізації n від розмірів часток d модифікатора (а) і співвідношення між масою модифікатора m і розміром його часток d , необхідне для отримання додаткових центрів кристалізації на тону розплаву (б). а – \times – $n = 0,103 \text{ кг/т}$, \rightarrow – $n = 0,052 \text{ кг/т}$, \leftarrow – $n = 0,039 \text{ кг/т}$, \leftarrow – $n = 0,026 \text{ кг/т}$; б – --- – $n = 10^7$, --- – $n = 10^8$, --- – $n = 10^9$, --- – $n = 10^{10}$.

розплавів (утворення $10^{10} - 10^{11}$ додаткових центрів кристалізації на тону) слід використовувати частки з розміром від 0,50 до 5,0 мкм (залежно від типу модифікатора), що вводяться при температурі близькій до температури ліквідусу.

Висновки Розроблена методика визначення оптимальних параметрів модифікування залізовуглецевих розплавів дисперсними частками тугоплавких сполук з використанням зворотного прогноуючого розрахунку методом скінчених різностей,

Оптимальні розміри часток дисперсних порошоків для модифікування низьковуглецевих сталей

Тип модифікатору	Розмір часток, мкм	Витрати модифікатора, кг/т	Температура введення, °C
TiN	0,85 – 1,80	$0,12 \pm 0,01$	1530
TiC	0,50 – 1,50	$0,14 \pm 0,01$	1530
ZrN	2,0 – 5,0	$1,1 \pm 0,025$	1535
NbN	1,4 – 3,0	$0,33 \pm 0,01$	1533

(~ 2 мкм) навіть при чотирикратному зменшенні маси модифікатора в порівнянні з попереднім випадком, кількість центрів кристалізації буде значно більше 10^9 т^{-1} . На рисунку б представлений взаємозв'язок необхідної маси і розміру часток для утворення заданої кількості додаткових центрів кристалізації. Таким чином, рисунок б є номограмою, що дозволяє визначити оптимальний розмір часток при відомій масі модифікатора, що вводиться, необхідний для одержання заданої кількості додаткових центрів кристалізації.

Розглянутий випадок є окремим і передбачає певні початкові концентрації титану і азоту в розплаві. При варіюванні цих параметрів вигляд номограми буде іншим, хоча характер ходу кривих і порядок величин не зміниться.

В таблиці наведено розраховані за розробленою в даній роботі методикою рекомендації щодо ефективного модифікування сталей різними сполуками (TiN, TiC, NbN, ZrN), з якої видно, що для ефективного модифікування

яка дозволяє розрахувати оптимальні параметри модифікування, необхідні для утворення заданої кількості додаткових центрів кристалізації в одиниці об'єму розплаву.

Розраховані розміри і загальні маси часток, що забезпечують ефективне модифікування: частки 0,5 – 5,0 мкм, витрати порошку від 0,12 до 1,1 кг/т залежно від типу модифікатора, що вводиться при температурі, близькій до температури ліквідусу. Запропоновані частки дисперсних порошоків модифікаторів значно більші наночасток (які мають розміри у десятки нанометрів), що вказує на технологічність і економічну вигоду їх використання.

Література

1. Гаврилин В.И. Плавление и кристаллизация металлов и сплавов. – Владимир: ВГУ, 2000. – 260 с.
2. Чуркин Б.С. Теория литейных процессов. – Екатеринбург, 2006. – 454 с.
3. Исаев О.Б. Определение оптимальных размеров тугоплавких частиц, вводимых в расплав для модифицирования. // *Металлургическая и горнорудная промышленность*. – 2010. – № 7. – С. 87 – 89.
4. Троцан А.И. Оцінка розмірів тугоплавких часток, що вводяться у розплав, здатних ставати центрами кристалізації. // *Металознавство та обробка металів*. – 2010. – № 4. – С. 49 – 52.
5. Троцан А.И. Определение оптимальных размеров дисперсных частиц для модифицирования расплава в кристаллизаторе МНЛЗ на основе математического моделирования процесса. // *Збірник “Наукові праці ДонНТУ”*. Серія *Металургія*. – 2010. – Вип. 12. – С. 149 – 156.
6. Гулд Х. Компьютерное моделирование в физике. Ч. 1. – М.: Мир, 1990. – 349 с.
7. Троцан А.И. Анализ распределения вводимых в жидкий металл дисперсных частиц модификатора по типу их действия в расплаве. // *Материалы 8-й Межд. научно-техн. конф. “Тепло и массообменные процессы в металлургических системах”*. – Мариуполь: ПТУ, 2010. – С. 211 – 215.

Одержано 01.03.11

А. И. Троцан, В. В. Каверинский, И. Л. Бродецкий

Определение оптимальных исходных размеров и массы частиц модификатора методом конечных разностей

Резюме

Предложена методика определения оптимальных размеров вводимых дисперсных тугоплавких частиц, массы модификатора и температуры расплава, построенная на принципах конечноразностного компьютерного моделирования путём обратного прогнозирующего расчёта. Методика позволяет установить параметры модифицирования расплавов, обеспечивающие образование заданного количества дополнительных центров кристаллизации.

A. I. Trotsan, V. V. Kaverinskiy, I. L. Brodetskiy

The determination of the optimum initial size of particles of the modifier and their mass by the finite differences method

Summary

The method of determination of the optimum size of high-melting dispersed particles, the mass of modifying agent and melt temperature is proposed. The procedure is based on the principles of computer modeling by a method of finite differences by return predicting calculation. The method allows to define the parameters of modifying of the melts, providing formation of the given quantity of additional centers of crystallization.