

**Ю. В. Юдин, М. В. Майсурадзе\*, А. А. Куклина, П. Д. Лебедев**

Уральский федеральный университет

имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург

\*m.v.maisuradze@urfu.ru

Научный руководитель — проф., д-р техн. наук Ю. В. Юдин

## **КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В 3D-РЕАЛИЗАЦИИ**

Разработан алгоритм программы компьютерного моделирования фазовых превращений в твердом состоянии, позволяющей получать кинетические кривые при различных начальных условиях. Проведены аналогии между результатами компьютерного моделирования и экспериментальной кинетикой изотермического превращения аустенита в легированных сталях.

*Ключевые слова:* компьютерное моделирование, фазовые превращения, уравнение Колмогорова — Аврами, логистическая функция.

**Yu. V. Yudin, M. V. Maisuradze, A. A. Kuklina, P. D. Lebedev**

## **3D-COMPUTER MODELING OF PHASE TRANSFORMATION**

An algorithm has been developed for a computer program for modeling the solid state phase transformation which makes it possible to obtain kinetic curves under various initial conditions. The analogies are drawn between the results of computer simulation and the experimental kinetics of the isothermal transformation of austenite in alloyed steels.

*Key words:* computer modeling, phase transformation, KJMA equation, logistic function.

**М**одель представляет собой куб, содержащий от 8 до 64 млн ячеек. Внесенные в него зародышевые ячейки 2-й фазы имеют различное трехмерное распределение по координатам. На рис. 1 приведены проекции в плоскости  $X$ – $Y$  различного расположения зародышевых ячеек: на ребрах (рис. 1, *a*), на ребрах и гранях (рис. 1, *б*), равномерно по всему объему (рис. 1, *в*), неравномерно по объему (рис. 1, *г*). С каждым тактом времени происходит 3-мерный послойный рост каждого из зародышей, что в итоге дает возможность оценить кинетику объемного роста 2-й фазы.

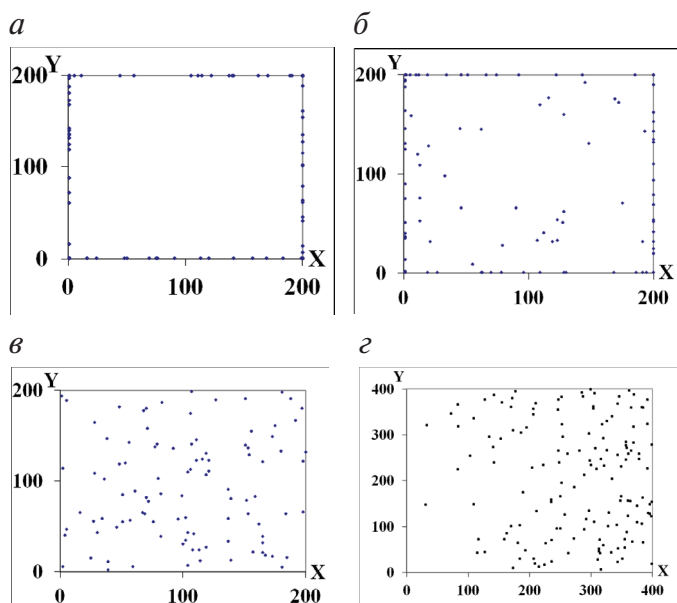


Рис. 1. Координаты проекций на плоскость  $X$ - $Y$  положения частиц зародышей при компьютерном моделировании:

$a$  — на ребрах;  $б$  — на ребрах и гранях;  $в$  — равномерно по объему;  $г$  — с переменной локальной концентрацией

Кинетика роста второй фазы для приведенных конфигураций (рис. 1  $a$ ,  $б$ ,  $в$ ) в координатах уравнения Колмогорова — Аврами  $\ln \tau - \ln(-\ln(1-p))$  аппроксимируется линейной зависимостью, коэффициент детерминации которой близок к 1. Значение показателя степени  $n$  уравнения Колмогорова — Аврами изменяется от 2,3 до 3 в зависимости от начальной конфигурации расположения зародышевых ячеек, оставаясь постоянным во времени (рис. 2).

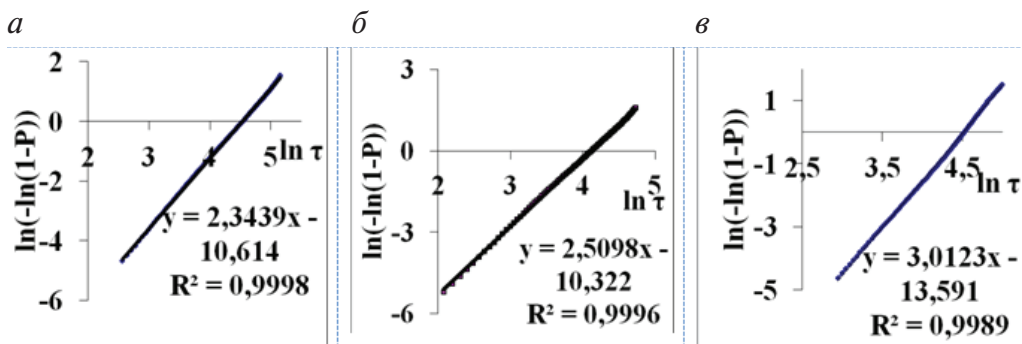


Рис. 2. Кинетика роста второй фазы и ее описание уравнением Колмогорова — Джонсона — Мейла — Аврами для различного расположения зародышевых ячеек:

$a$  — на ребрах;  $б$  — на ребрах и гранях;  $в$  — равномерно по объему

Полученные результаты показывают, что геометрическое расположение зародышевых ячеек новой фазы в объеме может оказывать значительное влияние на параметры кинетики превращения. Для конфигурации равномерного распределения зародышевых ячеек (рис. 1, *в*) концентрация увеличилась в 100 раз (количество зародышевых ячеек от 10 до 1000), тогда как показатель степени  $n$  изменился лишь в пределах 2,8–3.

При неравномерном расположении зародышевых ячеек по объему уравнение кинетики роста второй фазы в координатах уравнения Колмогорова — Аврами при аппроксимации линейной зависимостью показывает коэффициент детерминации 0,96. На кинетической зависимости видно изменение тангенса угла наклона (рис. 3, *а*). Аналогичные результаты получены экспериментально для стали 50ХМФА. На рис. 3 приведена кинетика изотермического бейнитного превращения при температуре 330 °С. Уравнение кинетики роста второй фазы в координатах логистического уравнения [1] показывает одинаково высокий коэффициент детерминации (более 0,99) для случая компьютерного моделирования и эксперимента (рис. 3, *б*).

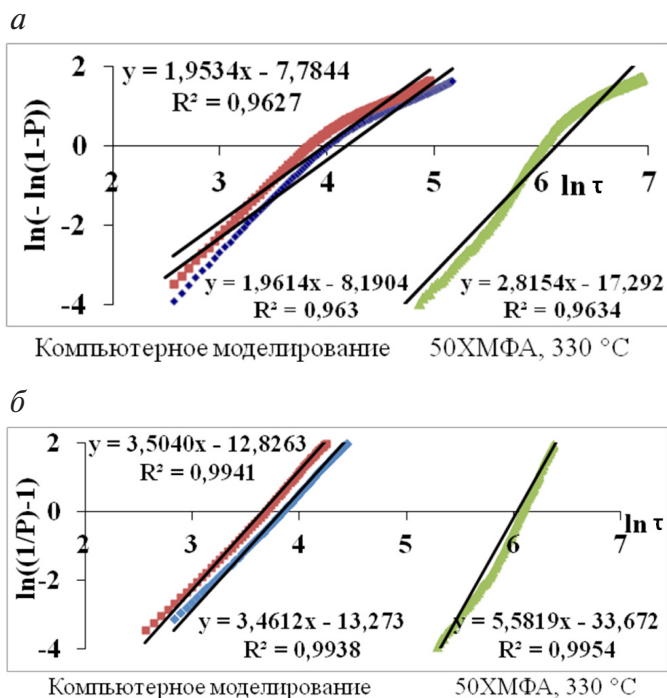


Рис. 3. Кинетика роста второй фазы и ее описание:  
*а* — уравнением Колмогорова — Джонсона — Мейла — Аврами;  
*б* — логистическое уравнение

Проведено сравнение результатов компьютерного моделирования и экспериментальных данных. Показана разность моделируемой и расчетной доли второй фазы (рис. 4, а) при аппроксимации уравнениями Колмогорова — Аврами и логистическим; аналогичная разность экспериментальной и расчетных долей бейнитного превращения приведена для стали 50ХМФА на рис. 4, б. Необходимо отметить, что относительно экспериментальных данных результаты компьютерного моделирования при аппроксимации уравнениями логистическим и Колмогорова — Аврами имеют одинаковый характер.

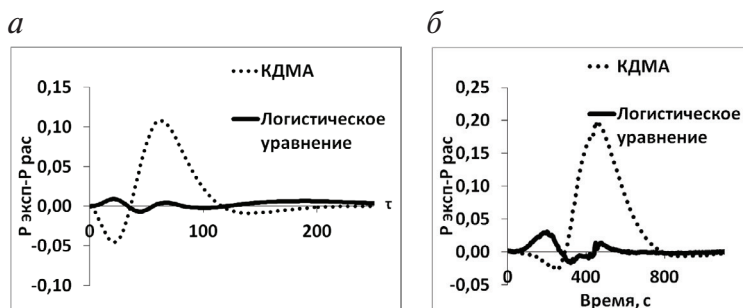


Рис. 4. Разность долей различных фаз:

*а* — превращенной фазы, рассчитанной методом компьютерного моделирования, и фаз, аппроксимированных уравнениями Колмогорова — Аврами и логистической функцией; *б* — разность долей бейнита, полученных экспериментально (сталь 50ХМФА,  $t_{\text{изот. выд}} = 330 \text{ }^\circ\text{C}$ ) и фаз аппроксимированных уравнениями Колмогорова — Аврами и логистической функцией

Следовательно, характер изменения абсолютного отклонения говорит об адекватном компьютерном моделировании кинетики бейнитного превращения — рост бейнитных колоний происходит послойно, скорость зарождения равна нулю, начальное распределение зародышей характеризуется существенной дисперсией их концентрации.

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1 Юдин Ю. В., Майсурадзе М. В., Куклина А. А. Использование логистической функции для описания изотермического бейнитного превращения в конструкционных сталях // Сталь. 2017. № 3. С. 52–56.