

Р. Н. ВАСИЛЬЕВА

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА НАПРАВЛЕННОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Статья посвящена изучению процесса получения монокристаллических лопаток методом высокоскоростной направленной кристаллизации. Рассмотрены теоретические процессы затвердевания плоской отливки, при этом в анализ кристаллизации включена зона кластеров. *Математическое моделирование; направленная кристаллизация; монокристаллическая отливка; температурный градиент*

Конкуренция на мировом рынке авиационного двигателестроения выдвигает новые требования по повышению надежности, работоспособности и экономичности газотурбинных двигателей (ГТД). Эти требования ставят перед разработчиками и производителями ГТД задачи увеличения гарантированного ресурса, повышения мощности двигателей при одновременном снижении их веса. Ресурс и экономичность двигателей определяются работоспособностью турбины, в первую очередь, наиболее нагруженной ее частью – I и II ступенями. Ужесточение температурно-силовых условий эксплуатации обусловило разработку конструкций и применения лопаток с монокристаллической структурой. По сравнению с лопаткой, имеющей поликристаллическую структуру, у монокристаллической лопатки выше значения прочности (в 9 раз), термоусталости (в 9 раз) и стойкости к окислению и коррозии (в 3,5 раза) [1]. Повышение работоспособности и надежности лопаток первых ступеней ГТД за счет качественного совершенствования структуры монокристаллических лопаток на основе управления параметрами технологического процесса является важной и актуальной задачей.

Практика изготовления лопаток показала, что в отливках обнаруживаются различные дефекты: микропоры в междендритном пространстве, ликвация, «паразитные зерна», разориентация угла между дендритами первого порядка и вертикальной осью отливки. Они возникают из-за невозможности управления процессом на микроуровне, что связано с недостаточным уровнем знаний о процессе кристаллизации монокристалла. Растущие требования к совершенству кристалла требуют более точных и изученных технологических процессов, в которых получение структуры требуемого качества гарантировано.

Общей особенностью большинства современных промышленных процессов получения монокристаллических лопаток является погружение залитой сплавом оболочки (формы) в жидкометаллический охладитель (ЖМО). В России такой способ получил развитие под названием высокоскоростной направленной кристаллизации, где в качестве ЖМО используется расплав алюминия (рис.1).

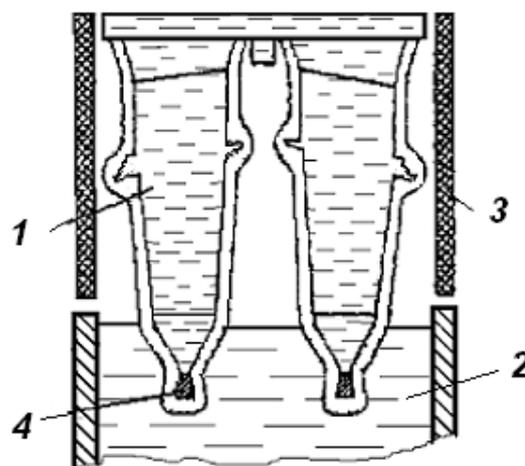


Рис. 1. Схема высокоскоростной направленной кристаллизации: 1 – форма, 2 – жидкометаллический охладитель, 3 – нагреватели, 4 – затравочный кристалл

Математическое описание этого процесса основывается на уравнениях тепло- и массопереноса, записываемых во всех зонах и граничных условиях на поверхностях раздела зон. При этом в зоне, предшествующей границе погружения, поддерживается температура порядка температуры заливки. В зоне ниже границы погружения стараются удерживать температуру, равную исходной температуре ЖМО. Такая схема позволяет рассматривать температурное поле как одномерное, разделив его на качественно определенные зоны.

При затвердевании традиционно принято рассматривать три зоны: жидкую, зону кристаллизации и затвердевшую. Однако растущие требования к совершенству кристалла и теоретические разработки в области жидких металлов позволяют включить в анализ кристаллизации четвертую зону – зону кластеров (рис.2).

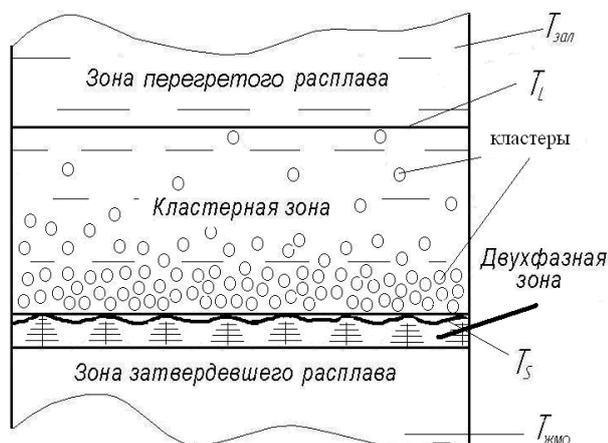


Рис. 2. Четырехзонное представление задачи

В соответствии с кластерной моделью жидких расплавов [2] структурными составляющими жидкости считаются разобщенные кластеры, обладающие хаотической атомной структурой. По мере образования и роста кластера, его свойства изменяются, т.е. количество и размеры этих частиц определяют физико-химические свойства расплава при затвердевании. Сначала происходит зарождение и рост небольших кластеров. В дальнейшем кластер может осаживаться на поверхность возникшего ранее кристалла или в результате последующего роста превратиться в зародыш кристалла, что недопустимо при литье монокристаллов. Если плотность образующихся кластеров больше плотности расплава, то скорость осаждения будет выше, а структура образующегося монокристалла будет менее совершенной; если же

плотность кластеров меньше плотности расплава, то будут преобладать кластеры с малым числом частиц [2]. Скорость осаждения во втором случае будет низкой, а структура монокристалла будет однородной высокодисперсной и иметь высокую степень совершенства. Таким образом, используя это явление, можно создать такие условия, при которых рост монокристалла будет происходить за счет атомов или малоатомных кластеров, что должно приводить к структурно более совершенным слоям.

В двухфазной зоне происходит послойное наращивание твердой фазы. Макро- и микроструктура отливки будет наиболее благоприятной, если фронт кристаллизации сделать плоским, для этого необходимо обеспечение максимального температурного и минимального концентрационного градиентов [3].

В результате тщательного анализа литературы, предлагается математическое описание процесса направленной кристаллизации, в котором присутствует кластерная зона (табл.1). При этом учитывается различие физических констант в жидкой, кластерной, двухфазной и твердой зонах, так как теплопроводность, теплоемкость, плотность зависят от температуры.

В математической модели приняты обозначения: $i=1$ – зона перегретого сплава; $i=2$ – кластерная зона; $i=3$ – двухфазная зона, зона переохлажденного сплава; $i=4$ – зона затвердевания сплава; T – температура, К; t – время, с; x – координата, м; A_i – температуропроводность, $\text{м}^2/\text{с}$; λ – теплопроводность, $\text{Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$; ρ – плотность, $\text{кг}/\text{м}^3$; c – удельная теплоемкость, $\text{Дж}/(\text{кг}\cdot\text{К})$; q – удельная теплота кристаллизации, $\text{Дж}/\text{кг}$; a – размер кластера, м; f – функция распределения; ψ – относительный объем твердой фазы; C – концентрация элемента, растворенного в жидкой фазе; D – коэффициент диффузии растворенного компонента в жидкой фазе, $\text{м}^2/\text{с}$; ν – коэффициент захвата.

Таблица 1

Основные уравнения, описывающие процессы, происходящие в каждой зоне

Зона	Интервал температур	Уравнение баланса для температуры	Уравнение баланса для концентрации
I – зона перегретого расплава	$[T_{\text{зал}}; T_L)$	$\frac{\partial T_1}{\partial t} = A_1 \frac{\partial^2 T_1}{\partial x^2}$	$\frac{\partial c_1}{\partial t} = 0$
II – кластерная зона	$[T_L; T_{\text{кл}})$	$\frac{\partial T_2}{\partial t} = A_2 \frac{\partial^2 T_2}{\partial x^2} + \frac{4\pi q}{c_2} \int_0^\infty da a^2 V(a) f$	$\frac{\partial c_2}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} + 4\pi(1-\nu) c_2 \int_0^\infty da a^2 V(a) f$
III – двухфазная зона	$[T_{\text{кл}}; T_S)$	$\frac{\partial T_3}{\partial t} = A_3 \frac{\partial^2 T_3}{\partial x^2} + \frac{q\rho_4}{c_3\rho_3} \frac{\partial \psi}{\partial t}$	$\frac{\partial c_3}{\partial t} = D \frac{d^2 C_3}{dx^2}$
IV – зона затвердевшего расплава	$[T_S; T_{\text{жмо}})$	$\frac{\partial T_4}{\partial t} = A_4 \frac{\partial^2 T_4}{\partial x^2}$	$\frac{\partial c_4}{\partial t} = 0$

Для решения системы уравнений необходимо дополнить граничными и начальными условиями. В начальный момент времени начальная температура равна температуре заливки, а распределение примесей считается равномерным. На границах температуры равны. Таким образом, начальные условия:

$$T_1(x, 0) = T_{\text{зал}}; \quad \psi(x, \tau_{\text{зал}}) = 0.$$

Граничные условия приведены в табл.2.

Таблица 2

Граничные условия	
Граница I-II	$-\lambda_1 \frac{\partial T_1(x_1, t)}{\partial x} = -\lambda_2 \frac{\partial T_2(x_1, t)}{\partial x}$ $T_1(x_1, t) = T_2(x_1, t) = T_L$
Граница II-III	$-\lambda_2 \frac{\partial T_2(x_2, t)}{\partial x} = -\lambda_3 \frac{\partial T_3(x_2, t)}{\partial x} + L\rho_4[1 - \psi(x_2, t)] \frac{\partial x_2}{\partial t}$ $T_2(x_2, t) = T_3(x_2, t) = T_L$
Граница III-IV	$-\lambda_3 \frac{\partial T_3(x_3, t)}{\partial x} = -\lambda_4 \frac{\partial T_4(x_3, t)}{\partial x}$ $T_3(x_3, t) = T_4(x_3, t) = T_S$

Кристаллизация расплава включает две стадии: образование зародышей кристаллизации (зарождение новой фазы внутри исходной) и собственно рост кристаллической фазы. Возникновение центров кристаллизации и рост доли твердой фазы в двухфазной зоне можно описать кинетическим уравнением Колмогорова [4]:

$$\psi = 1 - \exp \left\{ -\phi \left[N_1 \left(\int_0^\theta \vartheta(\Delta\theta) d\xi \right)^3 + \int_0^\theta n \left(\int_0^\theta \vartheta(\Delta\theta) d\xi \right)^3 d\theta' \right] \right\}.$$

Показатель экспоненты в уравнении Колмогорова состоит из двух слагаемых – первое характеризует увеличение твердой фазы за счет роста зародышей, второе – за счет возникновения спонтанных зародышей и их роста.

В реальных технологических процессах монокристалл отливки растет от одного отобранного зерна или зародыша. Поэтому второе слагаемое показателя экспоненты не учитывается. Число зародышей принимается равным единице, в этом случае

$$\psi = 1 - e^{-\omega},$$

где

$$\omega = \phi N_2 \left(\int_0^\theta \nu(\Delta\theta) d\xi \right)^3.$$

В связи с тем, что Ψ определяется как функция от температуры [3], то

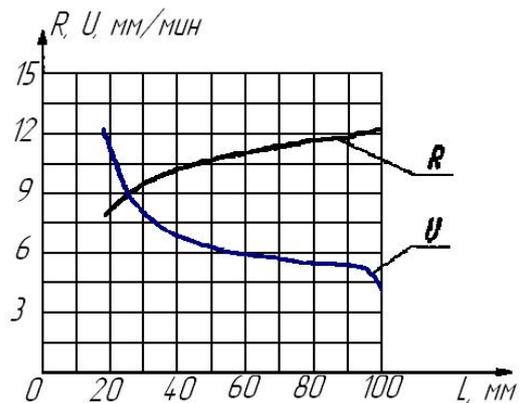
$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial \psi}{\partial T} \cdot \frac{\partial T}{\partial t}$$

или

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \mu \cdot \frac{\partial T}{\partial t},$$

где μ является функцией от температуры внутри интервала кристаллизации сплава и называется темпом кристаллизации [4]. На данном этапе исследования темп кристаллизации условно принимается величиной постоянной.

Условием отсутствия спонтанного возникновения центров кристаллизации перед фронтом кристаллизации будет превышение скорости роста кристалла (R) над скоростью продвижения фронта кристаллизации (U) [3]. Сравнение скорости роста кристалла и скорости продвижения фронта кристаллизации (рис. 3) позволяет оценить возможную структуру отливки.



R – скорость роста кристалла
 U – скорость продвижения фронта кристаллизации

Рис. 3. Условие получения монокристалла

Решая уравнения, получаем численное описание распределения температурного поля при затвердевании (табл. 3). Полученные уравнения позволяют определить температурный градиент, а также действительную скорость кристаллизации отливки [3]. После проведенных расчетов можно определить ширину двухфазной зоны, то есть ширину жидкого расплава, заливаемого порционно, при которой будет формироваться отливка с наилучшими характеристиками.

На основе предложенной модели построена численная модель, которая позволяет определить распределение температуры по высоте отливки. Результаты вычислений представляют собой значения температуры в дискретных точках по высоте плоской отливки для любого момента времени и в любом сечении.

Основные уравнения теплопроводности в аналитическом и численном виде

Зона	Интервал температур	Аналитическое уравнение теплопроводности	Численное уравнение теплопроводности
I – зона перегретого расплава	$[T_{зал}; T_L)$	$\frac{\partial T_1}{\partial t} = A_1 \frac{\partial^2 T_1}{\partial x^2}$	$T_i^{k+1} = T_i^k(1-2F_1) + F_1(T_{i-1}^k + T_{i+1}^k)$
II – кластерная зона	$[T_L; T_S)$	$\frac{\partial T_2}{\partial t} = A_2 \frac{\partial^2 T_2}{\partial x^2} + \frac{4\pi q}{c_2} \int_{a_0}^{\infty} da a^2 V(a) f$	$T_i^{k+1} = T_i^k(1-2F_2) + F_2(T_{i-1}^k + T_{i+1}^k) + B_2 e^{\left(\frac{iL}{hx}\right)} 4\pi\Delta Th_a \sum_{j=1}^n (a_{j-1} - a_{кр})$
III – двухфазная зона	$[T_L; T_S)$	$\frac{\partial T_3}{\partial t} = A_3 \frac{\partial^2 T_3}{\partial x^2} + \frac{q\rho_4}{c_3\rho_3} \frac{\partial \psi}{\partial t}$	$T_i^{k+1} = \frac{T_i^k(1-2F_3) + F_3(T_{i-1}^k + T_{i+1}^k)}{(1 - \frac{q\rho_4}{c_3\rho_3} \mu)}$
IV – зона затвердевшего расплава	$[T_S; T_{ЖМО})$	$\frac{\partial T_4}{\partial t} = A_4 \frac{\partial^2 T_4}{\partial x^2}$	$T_i^{k+1} = T_i^k(1-2F_4) + F_4(T_{i-1}^k + T_{i+1}^k)$

Установлено, что с увеличением длины отливки увеличивается время кристаллизации и уменьшается температурный градиент (рис.4).

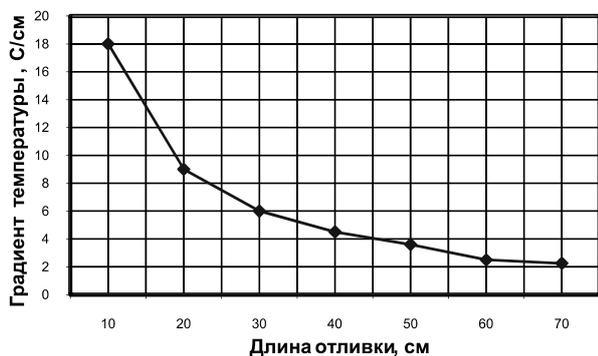


Рис. 4. Зависимость температурного градиента от длины отливки

Установленные зависимости показывают, что с увеличением длины отливки увеличиваются ширина двухфазной зоны и время процесса кристаллизации. С течением времени меняются основные параметры процесса и, как следствие, уменьшается градиент температуры, что влияет на совершенство структуры. Для устранения влияния времени на процесс кристаллизации и для получения максимального градиента необходимо заполнять форму порционно. В этом случае параметры процесса остаются практически неизменными.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Иноземцев А. А., Сандрацкий В. Л.** Газотурбинные двигатели. М.: Авиадвигатель, 2006. 1202 с.
2. **Мирзаде Ф. Х.** Самоорганизация пространственно неоднородных структур при объемной кристаллизации полидисперсных систем // Журнал технической физики. 2006, том 76, вып. 9.
3. **Челушкин А. С., Мамлеев Р. Ф.** Технология монокристаллических отливок в авиадвигателестроении: учеб. пособие. Уфа: УГАТУ, 2008. 148 с.
4. **Баландин Г. Ф.** Теория формирования отливки: Основы тепловой теории. Затвердевание и охлаждение отливки: учеб. для вузов. М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 1976. 360 с.

ОБ АВТОРЕ

Васильева Регина Николаевна, асп. каф. машин и технол. литейного производства. Дипл. магистр техники и технологий по машинам и технологии литейного пр-ва (УГАТУ, 2010). Готовит дис. по мат. моделированию процесса направленной кристаллизации.