

# Modelowane wzrostu dyfuzyjnego ziaren równoosiowych metodą uśrednionego wielościanu Voronoia

A. Burbelko \*, J. Początek

Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica, Wydział Odlewnictwa  
Katedra Inżynierii Stopów i Kompozytów Odlewanych, ul. Reymonta 23, 30-059 Kraków, Polska

\*Kontakt korespondencyjny. e-mail: abur@agh.edu.pl

Otrzymano 25.07.2014; zaakceptowano do druku 22.08.2014

## Streszczenie

Przedmiotem artykułu jest zaprezentowanie modelu matematycznego krystalizacji równoosiowej. W tym celu został stworzony aparat matematyczny pozwalający na opis pola stężenia danego pierwiastka w niesferycznym Elementarnym Polu Mikrodyfuzji (EPMD) na przykładzie przemiany eutektycznej i perytektycznej w stopie Fe-C oraz przemiany perytektycznej w stopie Pb-Bi. Cechą charakterystyczną tego modelu jest uwzględnienie losowych kontaktów pomiędzy sąsiednimi EPMD, co powoduje powstanie niesferycznego kształtu tak krystalizujących ziaren. W celu opisanego tak powstałych struktur zastosowano wielościany Voronoia. Ścianami takiej figury są fragmenty symetrycznych do odcinka łączącego dwa sąsiednie ziarna. Dokładny kształt tak powstałej bryły jest zależny od położenia najbliższych zarodków w stosunku do ziarna centralnego. Struktura taka powstaje podczas natychmiastowego zarodkowania ziaren i ich sferycznego wzrostu i została nazwana Uśrednionym Wielościaniem Voronoia.

**Słowa kluczowe:** Modelowanie, Krystalizacja równoosiowa, Dyfuzja, Wielościany Voronoia, Segregacja

## 1. Wprowadzenie

Większość zaawansowanych mikromodeli wzrostu ziaren równoosiowych podczas krystalizacji, stosowanych do symulacji wzrostu jednofazowego, przemiany perytektycznej lub eutektycznej o strukturze typu żeliwa z grafitem kulkowym, pozwala na jednoczesne uwzględnienie zjawiska dyfuzji zarówno w zanikającej fazie ciekłej, jak i w fazie stałej (tzw. dyfuzja wsteczna). Modele te najczęściej bazują się na sferycznym kształcie Elementarnego Pola Mikro-Dyfuzji (EPMD) [1-5]. Niestety, ze względu na pominięcie odchylenia kształtu EPMD od idealizowanego kształtu sferycznego w miarę oddalania się od środka ziarna, co jest wywołane przez kontakty z sąsiednimi ziarnami, odwzorowanie

rozkładu składu chemicznego wzdłuż promienia ziarna pogarsza się w miarę zwiększenia odległości od środka ziarna.

Równoosiowa struktura ziaren, powstająca podczas krystalizacji stopu, może być opisana za pomocą wielościanów Voronoia. Podziałem przestrzeni na wieloboki Voronoia nazywa się taki podział obszaru zawierającego zbiór  $n$  punktów, nazywanych dalej środkami komórek, na  $n$  obszarów wielobocznych w taki sposób, że każdy punkt w dowolnym z tych wieloboków znajduje się bliżej określonego środka ze zbioru  $n$  punktów, niż od pozostałych  $n-1$  punktów. Utworzone w ten sposób wieloboki mają nazwę wieloboków lub komórek Voronoia, a procedura podziału jest nazywana teselacją Voronoia.

Ścianami wieloboków Voronoia są wycinki lokalnych płaszczyzn symetrii wytyczonych dla par najbliższych środków

komórek. Wskazują one miejsca, gdzie ziarna pierwotnie kuliste, rosnące z jednakową szybkością, stykają się ze sobą.

Przykład takiego podejścia w dwuwymiarowym modelu procesu krystalizacji został przedstawiony w pracach [6, 7]. Dyfuzja składników podczas krystalizacji w tych pracach była analizowana w obszarach trójkątnych tworzonych przez połączenie wierzchołków komórki Voronoia z miejscem zarodkowania ziarna (jej środkiem). Podobne podejście zostało zastosowane też w przestrzeni trójwymiarowej, gdzie zamiast wieloboków były użyte wielościany Voronoia [8]. Modele krystalizacji oparte na diagramach Voronoia można również znaleźć w pracach [9,10].

## 2. Opis modelu

W proponowanym modelu zakłada się, że wewnątrz obszaru EPMD, w dowolnym punkcie i w dowolnym momencie czasu stężenie danego pierwiastka  $C$  może być opisane jako funkcja odległości od środka EPMD (zarodka)  $r$  i czasu  $\tau$ .

$$C(r, \tau) = f(r, \tau) \quad (1)$$

Oznacza to, że strumienie dyfuzyjne są skierowane promieniowo, podczas gdy strumienie boczne są pomijane. Założony również został zerowy strumień dyfuzyjny przez zewnętrzne granice EPMD, czyli przez granice oddzielające od siebie sąsiednie ziarna. Zależności matematyczne i cechy tej bryły niezbędne do rozwiązania problemu jednowymiarowego zjawiska mikrodyfuzji składników w EPMD, wyznaczono na podstawie statystycznej teorii krystalizacji Kolmogorova [11]. Zgodnie z tą teorią, w przypadku natychmiastowego zarodkowania  $n$  ziaren w jednostce objętości i ich sferycznego wzrostu z jednakową (ale niekoniecznie stałą) prędkością, objętość materiału znajdującego się w odległości nie przekraczającej  $r$  od miejsca zarodkowania, można wyznaczyć za pomocą następującej zależności:

$$V(r) = \frac{1}{n} \left( 1 - \exp\left(-\frac{4}{3} \pi n r^3\right) \right) \quad (2)$$

gdzie:  $n$  – liczba ziaren przypadająca na jednostkę objętości.

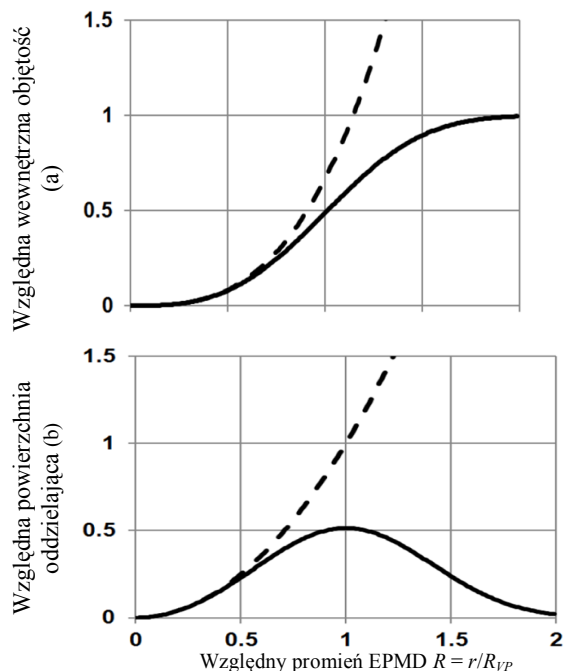
Funkcja ta opisuje średnią objętość, która została nazwana jako objętość wewnętrzna Uśrednionego Wielościanu Voronoia (UWV).

Pole powierzchni, oddzielającej wewnętrzną część UWV  $V(r)$  od jego części zewnętrznej, bardziej oddalonej od miejsca zarodkowania, może zostać opisane jako:

$$F(r) = \frac{dV(r)}{dr} = 4\pi r^2 \cdot \exp\left(-\frac{4}{3} \pi n r^3\right) \quad (3)$$

Zgodnie z zależnością (2) dla małego promienia  $r$  objętość wewnętrzna UWV zbliżona jest do objętości kuli o tym samym promieniu. Natomiast, wraz ze wzrostem promienia ziarna  $r$  objętość kuli o tym promieniu będzie rosła do nieskończoności, natomiast objętość wewnętrzna UWV będzie dążyć do  $1/n$  (patrz rys. 1a). Tak samo, jak w przypadku objętości wewnętrznej, dla

małej wartości promienia  $r$ , pole powierzchni oddzielającej zbliżone jest do powierzchni kuli o tym samym promieniu. Natomiast, gdy promień ziarna rośnie, powierzchnia rozdzielająca kule rośnie do nieskończoności, ale powierzchnia oddzielająca obszar wewnętrzny UWV od części zewnętrznej dąży do zera (rys.1 b).



Rys.1. Względna objętość wewnętrzna (a) i względna powierzchnia oddzielająca w UWV, dla kształtu sferycznego (linia przerywana) i UWV (linia ciągła) w funkcji względnego promienia [12, 13]

Dokładny opis modelu można znaleźć w pracy [14]. Przykład zastosowania takiego modelu do celów analizy rozkładu węgla wzdłuż promienia ziarna eutektycznego w żeliwie z grafitem kulkowym przedstawiono w pracy [15].

## 3. Wyniki modelowania

Symulacje komputerowe z użyciem zaproponowanego modelu matematycznego zostały przeprowadzone dla stopu nadperytektycznego Pb-Bi oraz dla stopu podwójnego Fe-C o dwóch różnych składach początkowych równych punktowi perytektycznemu i eutektycznemu.

Wyniki symulacji dla stopu Pb-Bi skonfrontowano z wynikami eksperymentów.

### 3.1. Modelowanie rozkładu bizmutu w stopie Pb-Bi

Modelowanie zostało przeprowadzone dla stopu nadperytektycznego Pb-32% mas. Bi. z użyciem parametrów przedstawio-

nych w tab. 1. W obliczeniach przyjęto krok siatki przestrzennej równy 1  $\mu\text{m}$ . Wyniki symulacji uzyskane z modelowania zostały pokazane na rys. 2 i rys. 3.

Szybkość odprowadzania ciepła, zastosowana w symulacji komputerowej, została określona na podstawie prawa Newtona wraz z uwzględnieniem liniowej zależności od czasu wartości współczynnika przenikania ciepła:

$$T' = (a_0 + a_1 \tau) \cdot (T - T_0) \quad (4)$$

gdzie:  $T$  – temperatura próbki;  $^{\circ}\text{C}$ ,  $T_0$  – temperatura otoczenia ( $20^{\circ}\text{C}$ );  $a_0, a_1$  – współczynniki wyznaczone doświadczalnie,  $a_0 = -7.87 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ ,  $a_1 = 1.3810^{-9} \text{ s}^{-2}$ .

Współczynniki  $a_0$  i  $a_1$  zostały wyznaczone za pomocą metody najmniejszych kwadratów na podstawie pomiarów temperaturowych. Rysunek 2 a) przedstawia pozycję interfejsu pomiędzy fazą stałą (faza Pb) a cieczą po rozpoczęciu krystalizacji, jak również pozycję granicy międzyfazowej pomiędzy fazą perytektyczną  $\epsilon$  a zanikającą cieczą oraz pomiędzy fazą pierwotną Pb (która również zanika) a fazą perytektyczną w funkcji czasu. Na rys. 2 b) przedstawiona natomiast została zmiana objętości poszczególnych faz w funkcji czasu.

Tabela 1.

Termofizyczne parametry użyte w modelowaniu

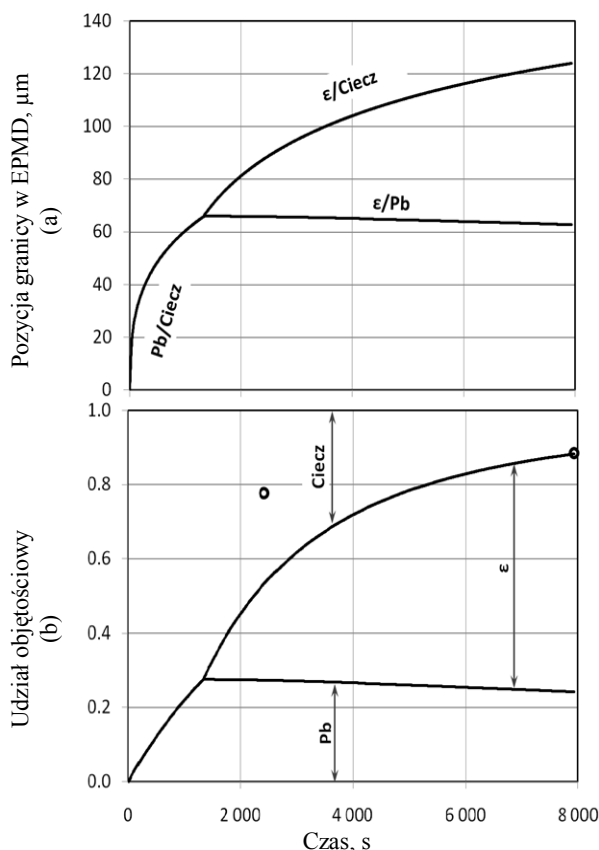
Współczynnik dyfuzji bizmutu w: $\text{m}^2/\text{s}$		Zródło
– cieczy	$D_L$	$1.3 \cdot 10^{-9}$ [16]
– fazie $\epsilon$	$D_\epsilon$	$1 \cdot 10^{-14}$ [17]
– fazie Pb	$D_{Pb}$	$1 \cdot 10^{-14}$ [17]
Entalpia przemiany fazowej: $\text{J}/\text{m}^3$		
– ciecz w fazę Pb	$\Delta H_{L \rightarrow Pb}$	$6.0 \cdot 10^7$ *
– ciecz w fazę $\epsilon$	$\Delta H_{L \rightarrow \epsilon}$	$5.7 \cdot 10^7$ *
– faza Pb w fazę $\epsilon$	$\Delta H_{Pb \rightarrow \epsilon}$	$5.8 \cdot 10^7$ *
Gęstość, $\text{kg}/\text{m}^3$		
– cieczy	$\rho_L$	$10 \cdot 10^3$ [19]
– fazy $\epsilon$	$\rho_\epsilon$	$9.8 \cdot 10^3$
– fazy Pb	$\rho_{Pb}$	$11.3 \cdot 10^3$ [19]
Ciepło właściwe $\text{J}/(\text{m}^3 \cdot \text{K})$		
– ciecz	$c_{v,L}$	$1.38 \cdot 10^6$ *
– faza $\epsilon$	$c_{v,\epsilon}$	$1.31 \cdot 10^6$ *
– faza Pb	$c_{v,Pb}$	$1.33 \cdot 10^6$ *

\* dane otrzymane za pomocą oprogramowania Thermo-CALC®

Liniowa szybkość wzrostu fazy pierwotnej jest największa w początkowym etapie krystalizacji, ale wraz ze zwiększaniem się objętości fazy stałej jej szybkość maleje. Natomiast, szybkość wzrostu objętości zakrzepłej pozostaje praktycznie bez zmian. Tuż po rozpoczęciu przemiany perytektycznej można zaobserwować krótkie zwiększenie szybkości przemieszczania się interfejsu  $\epsilon$ /ciecz. Szybkość ta zmniejsza się wraz z czasem, co związane jest ze wzrostem grubości warstwy fazy  $\epsilon$ . W tym samym czasie promień ziaren fazy pierwotnej zmniejsza się na skutek jego rozpuszczania się w fazie  $\epsilon$ .

Ilościowa analiza metalograficzna przeprowadzona metodą punktową wykazała, że udział objętościowy bizmutu w próbce zamrożonej w temperaturze  $171.5^{\circ}\text{C}$  jest równy 4.9%, a w próbce zamrożonej w temperaturze  $120^{\circ}\text{C}$  wynosi 2.53%. W tempe-

raturze eutektycznej faza ciekła jest w równowadze z czystym bizmutem i fazą  $\epsilon$  o stężeniu 43.0 % Bi. Z reguły dźwigni, pomijając różnicę gęstości tych faz, można wyznaczyć udział objętościowy Bi w eutektyce w temperaturze eutektycznej. Wartość ta jest równa 0.22. Udziały objętościowe fazy stałej obecnej w próbkach przed rozpoczęciem krystalizacji eutektycznej "faza  $\epsilon$  – Bi" obliczone na podstawie tego parametru dla temperatury zamrożenia próbek  $171.5^{\circ}\text{C}$  i dla temperatury równowagi eutektycznej  $125^{\circ}\text{C}$  pokazane zostały na rys 2 b).



Rys. 2. Pozycja granic międzyfazowych w funkcji czasu (a) oraz zmiany udziałów objętościowych poszczególnych faz podczas krystalizacji pierwotnej i przemiany perytektycznej (b); linie – wyniki symulacji, punktami oznaczono wyniki doświadczalne.

Na rys. 3 a) zostały pokazane wyniki symulacji rozkładu stężenia Bi wzdłuż promienia EPMD dla następującej temperatury:

$184.6^{\circ}\text{C}$  – przed zakończeniem krystalizacji pierwotnej (powyżej przemiany perytektycznej),

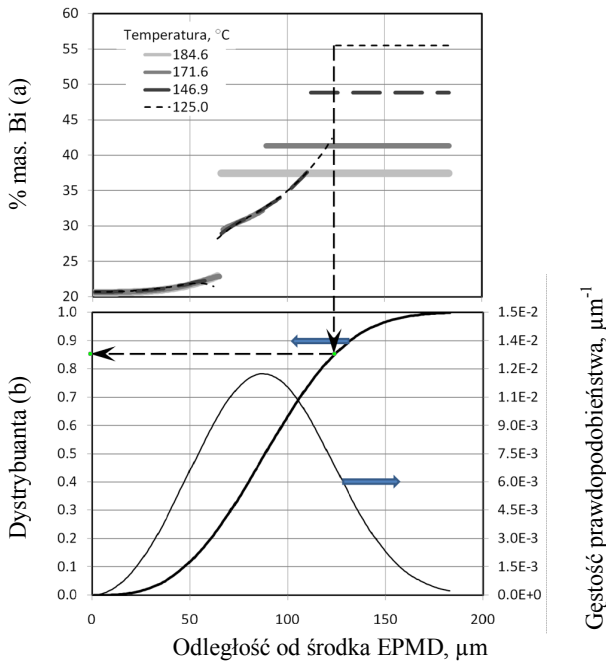
$171.6^{\circ}\text{C}$  – po zamrożeniu w wodzie,

$146.9^{\circ}\text{C}$  – po zamrożeniu w wodzie,

$125.0^{\circ}\text{C}$  – temperatura przemiany perytektycznej.

Funkcja gęstości prawdopodobieństwa (rys. 3b) opisuje względną częstotliwość występowania obszarów z określoną zawartością Bi w próbce. Zgodnie z tym wykresem najwięcej miejsc o tym samym stężeniu znajduje się w odległości  $83.8 \mu\text{m}$  od środka EPMD. Natomiast z wykresu dystrybuanty można

odczytać, że całkowity udział fazy stałej w temperaturze przemiany eutektycznej równy jest 85%.



Rys. 3. Rozkład stężenia bizmutu pod koniec krystalizacji pierwotnej (184,6°C), w trakcie przemiany perytektycznej (171,6°C i 146,9°C) oraz w temperaturze przemiany eutektycznej (125°C) (a), wraz z rozkładem funkcji gęstości prawdopodobieństwa oraz dystrybuantą (b) w funkcji odległości od środka komórki

### 3.2. Modelowanie rozkładu węgla w stopie Fe-C krystalizującego z przemianą eutektyczną

Modelowanie zostało przeprowadzone dla stopu eutektycznego Fe-C. Parametry termofizyczne dwuskładnikowego stopu Fe-C zastosowane w symulacji przedstawiono w tabeli 2.

W obliczeniach dyfuzji węgla przyjęto krok siatki przestrzennej 1 μm. Założono również typową dla żeliwa z grafitem kulkowym gęstość ziaren  $n = 2 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-3}$ . Zgodnie z zależnością zaprezentowaną w pracy [14] dla tej gęstości ziaren i stałej zaokrąglenia  $\varepsilon = 1 \cdot 10^{-3}$  wyznaczono promień charakterystyczny EPMD  $R_{UWV} = 44 \text{ μm}$ .

Założono, że szybkość zmian temperatury jest opisana następującym równaniem:

$$Q = -5.082 \cdot c \cdot \exp(-5.307 \cdot 10^3 \cdot \tau) \quad (5)$$

gdzie:  $c$  – objętościowe ciepło właściwe stopu  $\text{J} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{K}^{-1}$ .

Przyjęta powyżej szybkość odprowadzania ciepła jest typową wartością dla odlewu żeliwa z grafitem kulkowym o grubości ścianki 9 mm.

Tabela 2.

Termofizyczne parametry użyte w modelowaniu przemiany eutektycznej stopu Fe-C

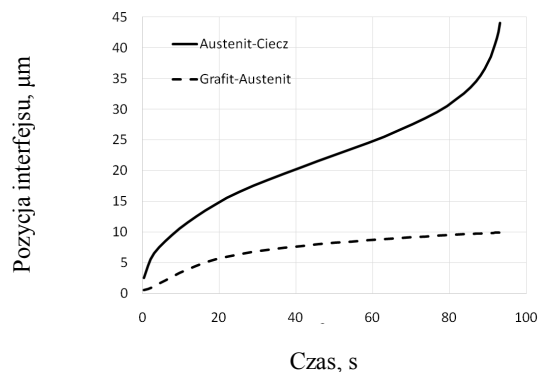
Współczynnik dyfuzji węgla, $\text{m}^2/\text{s}$ :		Źródło
– w cieczy	$D_L$	$1.25 \cdot 10^{-9}$ [18]
– w austenicie	$D_\gamma$	$1.67 \cdot 10^{-10}$
Entalpia przemiany fazowej: $\text{J}/\text{m}^3$		
– cieczy w austenit	$\Delta H_{L \rightarrow \text{Pb}}$	$1.97 \cdot 10^9$ [19]
– austenitu w grafit	$\Delta H_{L \rightarrow \varepsilon}$	$8.8 \cdot 10^5$
Gęstość, $\text{kg}/\text{m}^3$		
– cieczy	$\rho_L$	$7.0 \cdot 10^3$ [20]
– austenitu	$\rho_\gamma$	$7.3 \cdot 10^3$
– fazy Pb	$\rho_{\text{gr}}$	$2.2 \cdot 10^3$ [19]
Ciepło właściwe $\text{J}/(\text{m}^3 \cdot \text{K})$		
– cieczy	$c_L$	$5.6 \cdot 10^6$ [19]
– austenitu	$c_\gamma$	$5.84 \cdot 10^6$ [20]
– grafitu	$c_{\text{gr}}$	$1.78 \cdot 10^6$ [19]

Na rys. 4 została przedstawiona zmiana pozycji interfejsów austenit-ciecz i grafit-austenit, natomiast szybkość przemieszczania się tych interfejsów jest przedstawiona na rys. 6.

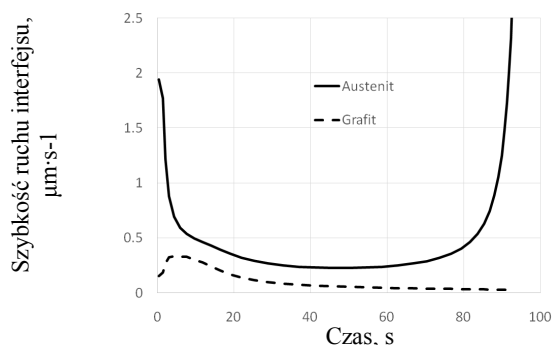
Na rys. 5 można również zauważyć charakterystyczne przyspieszenie szybkości przemieszczania się interfejsu austenit-ciecz pod koniec procesu krystalizacji. Wynik ten jest zgodny z zauważonym w literaturze zjawiskiem tworzenia się zabielenia w węzłach cieplnych odlewów żeliwnych [21].

### 3.3. Modelowanie rozkładu węgla w stopie Fe-C krystalizującego z przemianą perytektyczną

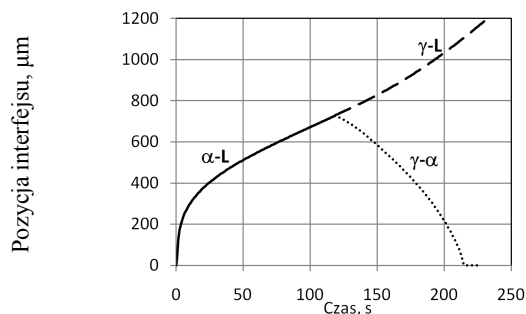
Wyniki symulacji dla staliwa o składzie perytektycznym (0,17% mas. C) pokazane są na rys. 6 i 7. Na rys. 6 przedstawione zostały zmiany odległości interfejsów międzyfazowych od środka UWV zarówno podczas krystalizacji pierwotnej, dla rosnącego ziarna ferrytu ( $\alpha/L$ ), jak i podczas przemiany perytektycznej, podczas której następuje rozpuszczanie się ziaren ferrytu ( $\delta/\alpha$ ) oraz wzrost otoczki austenitu ( $\gamma/L$ ). Natomiast na rys. 7 zostały przedstawione zmiany udziałów objętościowych poszczególnych faz w trakcie całego procesu krystalizacji.



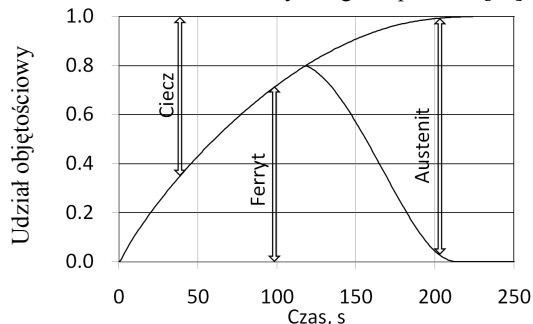
Rys. 4. Zmiany pozycji interfejsów w funkcji czasu uzyskane z modelowania eutektycznego stopu Fe-C [22]



Rys. 5. Szybkości przemieszczania się poszczególnych granic uzyskane z modelowani eutektycznego stopu Fe-C [22]



Rys. 6. Zmiany pozycji interfejsów w funkcji czasu uzyskane z modelowani eutektycznego stopu Fe-C [13]



Rys. 7. Szybkości przemieszczania się poszczególnych granic uzyskane z modelowani eutektycznego stopu Fe-C [13]

## 4. Wnioski

- Opracowany został model matematyczny, algorytm obliczeniowy oraz program komputerowy pozwalający na symulację pola stężenia składnika w ziarnach równoosiowych podczas krystalizacji kontrolowanej przez dyfuzję.
- Dzięki zastosowanemu podejściu możliwe było ujęcie dyfuzji zarówno w zanikającej fazie macierzystej, jak i tzw. efektu wstecznej dyfuzji w obrębie ziaren produktów przemian fazowych. Zaproponowany model pozwala na symulację krystalizacji jednofazowej oraz krystalizacji

perytektycznej lub eutektycznej bez sprzężonego wzrostu faz.

- Wykazano możliwość zastosowania proponowanego modelu dla symulacji krystalizacji eutektycznej w stopie typu żeliwa z grafitem kulkowym oraz dla symulacji krystalizacji perytektycznej w stopach Fe-C, jak również do modelowania przemiany perytektycznej w stopie Pb-Bi.

## Podziękowania

Badania przeprowadzono w ramach finansowania ze środków Narodowego Centrum Nauki przyznanych na podstawie decyzji numer DEC-2011/01/B/ST8/01689.

## Literatura

- Onsoien, M.I., Grong, O., Gundersen, O. & Skaland, T., (1999). A process model for the micro-structure evolution in ductile cast iron: part I. The Model". *Metallurgical and Materials Transactions*. 30A, 1053-1068.
- Tanzilli, R.A., & Heckel R.W. (1968). Numerical Solutions to the Finite, Diffusion-Controlled Two-Phase", Moving-Interface Problem (with Planar, Cylindrical, and Spherical Interfaces). *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*. 242, 2313-2321.
- Lanam, R. D. I.R. & Heckel, W. (1971). A study of the effect of an Intermediate Phase on the Dissolution and Homogenization Characteristics of Binary Alloys. *Metallurgical Transactions*. 2, 2255-2266.
- Phillion, A.B, Desbiolles, J.-L., Rappaz, M. (2009). A 3D Granular Model of equiaxed-granular solidification", Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes –XII, TMS (The Minerals, Metals&Materials Society), 353-360.
- Wu, M. & Ludwig, A. (2009). Modeling equiaxed solidifications with melt convection and grain sedimentation – I: Model description, *Acta Materialia*. 57, 5621-5631.
- Mathier, V., Jacot, A. & Rappaz, M. (2004). Coalescence of equiaxed grains during solidification. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 12, 479-490.
- Vernede, S., Jarry, P. & Rappaz, M. (2006). A granular model of equiaxed mushy zones: Formation of a coherent solid and localization of feeding. *Acta Materialia*. 54, 4023-4034.
- Mathier, V., Jacot, A. & Rappaz, M. (2004). Coalescence of equiaxed grains during solidification. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 12, 479-490.
- Vernede, S. Dantzig, J.A. & Rappaz, M. (2009). A mesoscale granular model for the mechanical behavior of alloys during solidification. *Acta Materialia*. 57,1554-1569.
- Phillion, A.B., Vernede, S., Rappaz, M., Cockcroft, S.L., & Lee, P.D. (2009). Prediction of solidification behaviour via microstructure models based on granular structures. *International Journal of Cast Metals Research*. 22(1-4), 240-246.

- [11] Kolmogorov, A.N. (1937). On the Statistical Theory of Metal Crystallisation”, *Bull. Acad. Sci., USSR*. 3, 1937, 355-359 (in Russian).
- [12] Burbelko, A., Gurgul, D., Kapturkiewicz, W., Początek, J. & Wróbel, M. (2013). Stochastic nature of the casting solidification displayed by micro-modelling and cellular automata method. *Solid State Phenomena*. 197, 101-106.
- [13] Burbelko, A., Początek, J., Gurgul, D. & Wróbel, M. (2014). Micromodeling of the diffusion controlled equiaxed peritectic solidification. *Steel Research International*. 85(6), 1010-1017.
- [14] Burbelko, A., Początek, J. (2013). Averaged Voronoi polyhedron in the diffusion controlled solidification modeling. TMS 2013, Annual meeting Publications. 523-530.
- [15] Burbelko, A. Początek, J. (2013). Analiza rozkładu węgla w ziarnie eutektycznym żeliwa sferoidalnego metodą uśrednionego wielościanu Voronoia. *Archives of Foundry Engineering*. 13(2), 29-34.
- [16] Liu, S. & Trivedi, R. (2006). Effect of Thermosolutal Convection on Microstructure Formation in the Pb-Bi Peritectic System. *Metallurgical and Materials Transactions*. 37A, 3293-3304.
- [17] Das, A., Manna, I. & Pabi, S.K. (1999). A numerical model of peritectic transformation”, *Acta mater*. 47(4), 1379-1388.
- [18] Magnin, P. Mason, J.T. & Trivedi, R. (1991). Growth of Irregular Eutectic and the Al-Si System. *Acta Metallurgica et Materialia*. 39(4), 469-480.
- [19] Kikoin I.K. Ed., (1976). Tabele wielkości fizycznych, Atomizdat, 1976, Moskwa.
- [20] Beltran-Sanchez, L. & Stefanescu, D.M. (2004). A quantitative dendrite growth model and analysis of stability concepts. *Metallurgical and Materials Transaction*. 35A, 2471-2485.
- [21] Kapturkiewicz, W. & Burbielko, A.A. (1992). Carbide Formation in Central Zone of Cast Iron Casting. *Krzepnięcie Metali i Stopów - Solidification of Metals and Alloys*. 16, 41-48.
- [22] Burbelko, A.A., Początek, J., Kapturkiewicz, W., Wróbel, M. „Averaged Voronoi Polyhedron in the Equiaxed Solidification Modelling”, 10th International Symposium on the Science and Processing of Cast Iron – oddane do druku.

# Modeling of Diffusion-Controlled Growth of Equiaxed Grains Using Averaged Voronoi Polyhedron

## Abstract

The aim of the paper is to present a mathematical model of the equiaxed grains growth. This model describes the solute concentration field in the real-shape Elementary Diffusion Micro-Field (EMDF) during the solidification of equiaxed grains. Model can be used for different solidification mechanism: single-phase solidification, eutectic nodular graphite iron or peritectic solidification. A characteristic feature of the used model is an accounting of the realistic shape of the equiaxed grains as a result of the stochastic contacts between adjacent grains. For a description of polycrystalline structures in the simulation the Voronoi polyhedrons are used. In this case, the walls of this polyhedron are fragments of planes perpendicular to the segments joining the "nuclei" and dividing these segments into two equal parts. The specific shape and volume of these polyhedra, as well as the number of faces and edges depend on the distribution of the nearest neighbouring "nuclei". Structure of this type is formed in the case of an immediate nucleation of the grains and their spherical growth at an equal rate. The shape of such a grain is called *Averaged Voronoi Polyhedron (AVP)*.