

# Rozkład wielkości podłoża do zarodkowania heterogenicznego fazy pierwotnej stopu Al-Cu

J. Lelito, B. Gracz\*, P.L. Żak, J.S. Suchy, M. Szucki, P. Malinowski

AGH Akademia Górniczo-Hutnicza,

Wydział Odlewnictwa, Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, ul. Reymonta 23, 30-059 Kraków, Polska

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

Otrzymano 20.11.2015; zaakceptowano do druku 29.12.2015

## Streszczenie

Rozwój komputeryzacji spowodował duży postęp w numerycznym modelowaniu krystalizacji stopów odlewniczych. Możliwe staje się prognozowanie mikrostruktury odlewów. W tym celu konieczna jest znajomość równań opisujących rozkłady wielkości podłoża do zarodkowania heterogenicznego ziaren bądź funkcji gęstości ziaren w zależności od przechłodzenia. W pracy zamieszczono obliczenia dla modelu wykładniczego i eksponencjalnego gęstości ziaren w funkcji przechłodzenia maksymalnego. Dodatkowo przeprowadzono również obliczenia dla logarytmiczno-normalnego rozkładu wielkości podłoża do zarodkowania heterogenicznego.

Zasadniczym celem tej pracy jest wyznaczenie w powyższych równaniach, parametrów dopasowania krzepnącego stopu Al-Cu na podstawie badań doświadczalnych zamieszczonych w literaturze [7]. W przypadku logarytmiczno-normalnego rozkładu wielkości podłoża do zarodkowania heterogenicznego, parametry występujące w tym równaniu zostały wyznaczone za pomocą algorytmu numerycznego. Tak wyznaczone rozkłady zostały następnie zestawione na wykresie z danymi eksperymentalnymi w celu ich porównania.

**Słowa kluczowe:** rozkład logarytmiczno-normalny, rozkład Oldfielda, rozkład eksponencjalny

## 1. Wprowadzenie

W numerycznym modelowaniu struktury odlewów wykorzystuje się równania opisujące funkcję gęstości ziaren w zależności od stopnia przechłodzenia [1-3], bądź jak ma to miejsce w przypadku modelu FreeGrowth, rozkład wielkości podłoża do zarodkowania heterogenicznego [4-6]. Jednym z głównych założeń modelu FreeGrowth jest logarytmiczno-normalny rozkład wielkości podłoża do zarodkowania heterogenicznego. Z tych też względów zagadnienie zarodkowania jest przedmiotem licznych badań teoretycznych i doświadczalnych [1-7]. Efektem tych badań są różne prawa zarodkowania. Najczęściej wykorzystywane do numerycznego

modelowania procesu krystalizacji są następujące zależności: wykładniczy (Oldfielda) [1], eksponencjalny [3] i logarytmiczno-normalny [4-6]. Występujące w tych zależnościach parametry określone są empirycznie dla każdego stanu fizyko-chemicznego ciekłego metalu.

## 2. Wyniki

W celu określenia kinetyki zarodkowania stopu Al-Cu (tabela 1) posłużono się zależnościami empirycznymi, które są wykorzystywane przy numerycznym modelowaniu procesu krystalizacji.

Tabela 1. Skład chemiczny stopu Al-Cu [8]

Skład chemiczny (%wag.)					
Si	Fe	Cu	Mn	B	Ti
0.05	0.11	4.90	0.4	0.0013	0.07

Zależność wykładnicza (Oldfielda):

$$N_V = Y \Delta T^m, m^{-3} \quad (1)$$

Zależność eksponencjalna:

$$N_V = \lambda \exp(-b/\Delta T), m^{-3} \quad (2)$$

Zależność logarytmiczno-normalna:

$$n(d) = \frac{N_0}{\sigma \cdot d \cdot \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{[\ln(d) - \ln(d_0)]^2}{2 \cdot \sigma^2}\right), m^{-3} \quad (3)$$

gdzie:  $Y$ ,  $m$ ,  $\lambda$  i  $b$  – parametry krystalizacji, które można wyznaczyć doświadczalnie,  $N_0$  – zakładana totalna populacja podkładek/podłoża zarodkowania (zarówno aktywnych jak i nieaktywnych),  $d_0$  – średnia geometryczna rozkładu log-normal,  $\sigma$  – odchylenie standardowe dystrybucji,  $d$  – średni wymiar charakterystyczny (sprawdzona średnica) powierzchni podłoża do zarodkowania heterogenicznego.

Aby wyznaczyć parametry krystalizacji do powyższych zależności (1), (2) i (3), wykorzystano dane doświadczalne z literatury [8] i zamieszczone w tabeli 2.

Tabela 2. Objętościowa gęstość ziaren i przechłodzenie maksymalne stopu Al-Cu [8]

Grubość płytki (mm)	Przechłodzenie maksymalne (K)	Gęstość ziaren (cm <sup>-3</sup> )
3	11.80	17.16
5	10.93	10.094
13	8.71	7.832
25	8.26	6.503

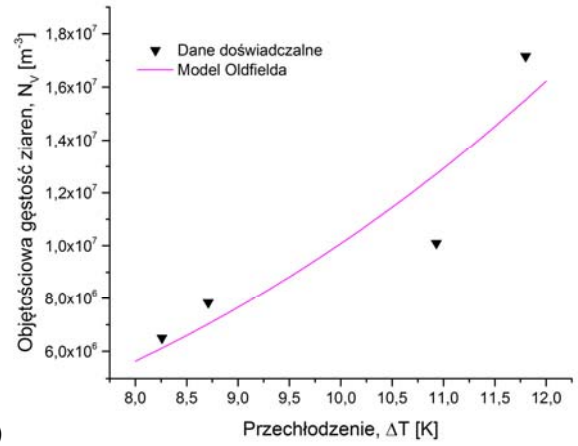
Wyniki analizy statystycznej dla modelu Oldfielda i eksponencjalnego zestawiono i pokazano na rysunku 1.

Na rysunku 1 zostały naniesione wyniki eksperymentalne z literatury [8] wraz z krzywymi korelacyjnymi, uzyskanymi dzięki programowi komputerowemu STATISTICA. Wyznaczone zostały również parametry krystalizacji dla modelu Oldfielda i eksponencjalnego, opisujących kinetykę zarodkowania.

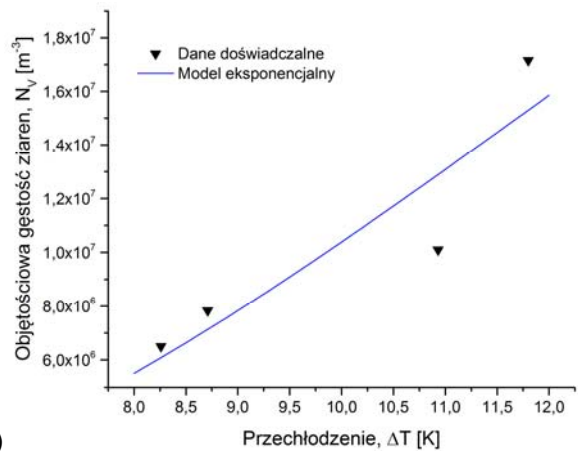
Dla wyznaczenia parametrów w równaniu (3) wykorzystano algorytm opisany szerzej w literaturze [7].

Opracowany algorytm bazuje na trzech rodzajach danych wejściowych. Pierwsze to wartości eksperymentalne charakteryzujące stop, dla którego generujemy rozkład. Należą do nich przechłodzenia maksymalne ( $\Delta T_{max}$ ) i odpowiadające im obliczone gęstości ziaren ( $N_{ve}$ ).

Drugi rodzaj stanowią parametry termofizyczne stopu tj. zmiana entropii ( $\Delta S_v$ ) oraz energii międzyfazowej na granicy ciec-z-kłaster ( $\sigma_{lc}$ ). Ostatnią grupę danych wejściowych stanowią warunki kontroli obliczeń, na które składają się:  $N_0$  - zakładana całkowita liczba podłoża zarodkowania (zarówno aktywnych jak i nieaktywnych),



a)



b)

Rys. 1. Wpływ stopnia przechłodzenia na gęstość ziaren fazy pierwotnej  $\alpha(Al)$  w stopie Al-Cu według modelu: a - Oldfielda ( $N_V=(0,0247)*\Delta T^{(2,61)}$ ) i b - eksponencjalnego ( $N_V=(131,555)*\exp(-(-25.39)/\Delta T)$ )

( $D_{min} - D_{max}$ ) - przedział w którym poszukujemy średniej geometrycznej ( $d_0$ ) dla rozkładu log-normal, ( $\sigma_{min} - \sigma_{max}$ ) – dopuszczalny przedział odchylenia standardowego dystrybucji, liczby podziałów dla średnic oraz odchylenia standardowego, krok całkowania, maksymalna ilość kroków całkowania oraz dokładność

z jaką wyliczana jest całość.

Minimalna wartość wymiaru charakterystycznego podłoża ( $d_{mini}$ ), które przy zarejestrowanym w trakcie eksperymentu stopniu przechłodzenia maksymalnego ( $\Delta T_{max}$ ), bierze aktywny udział

w procesie zarodkowania wyliczona jest z równania na przechłodzenie swobodnego wzrostu [4]:

$$d_{min}^i = \frac{4\sigma_{lc}}{\Delta S_v \Delta T_{max}^i} \quad (4)$$

gdzie:  $\sigma_{lc}$  – energia powierzchniowa na granicy ciec – kłaster ( $Jm^{-2}$ ),  $\Delta S_v$  – zmiana entropii ( $Jm^{-3}K^{-1}$ ),

Bazując na równaniu (3) opisującym rozkład logarytmiczno-normalny próbujemy  $J(\sigma^j, d_0^k)$ , tak że:

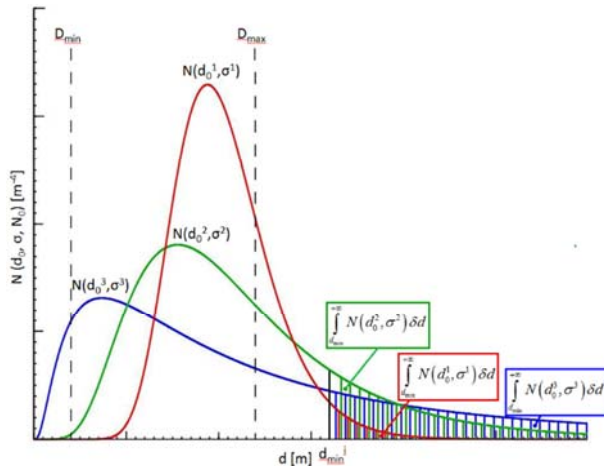
$$J(\sigma^j, d_0^k) = \sum_{i=1}^n \left[ N_{ve}^i - N_{vt}^i(\sigma^j, d_0^k) \right]^2 \quad (5)$$

gdzie:  $J$  – globalna funkcja optymalizacji celu dążąca do minimum,

$N_{ve}^i$  – eksperymentalna gęstość ziaren fazy pierwotnej,  
 $N_{vt}^i$  – teoretyczna gęstość podłoża obliczana poprzez całkowanie numeryczne

$$N_{vt}^i(\sigma^j, d_0^k) = \int_{d_{min}^i}^{+\infty} N(d, \sigma^j, d_0^k, N_0) \delta d \quad (6)$$

Innymi słowy, algorytm obliczeniowy generuje ciąg rozkładów zależnych od średniej geometrycznej rozkładu, odchylenia standardowego oraz wcześniej założonego  $N_0$ , następnie pozwala określić teoretyczną gęstość aktywnych podłoży (całka o dolnej granicy  $d_{min}$ ). Szacowany jest błąd (suma kwadratów odchyłeń – równanie (5)) umożliwiającą wybór rozkładu najbardziej zbliżonego do rozkładu wielkości podłoży do zarodkowania heterogenicznego w danym stopie. Schemat graficzny opracowanego algorytmu zaprezentowano na rys. 3.

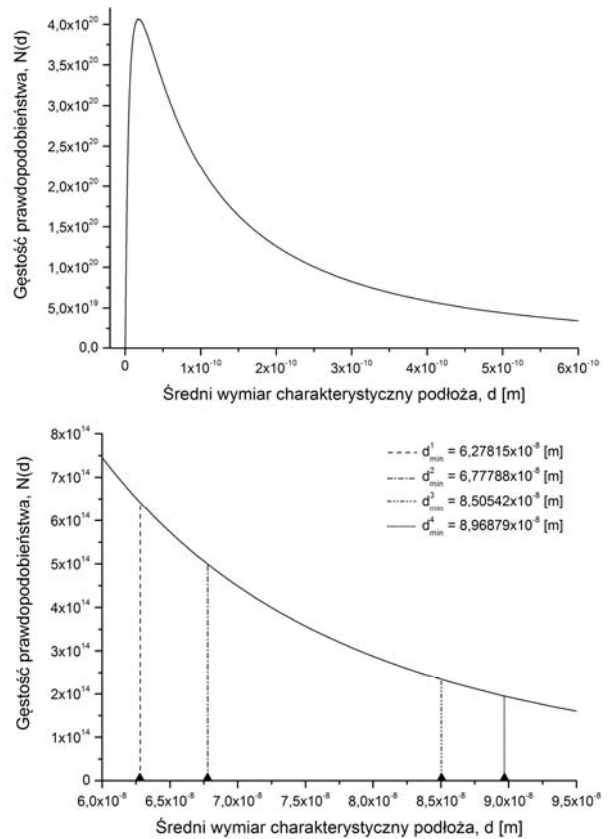


Rys. 3. Schemat graficzny algorytmu obliczeniowego rzeczywistego rozkładu wielkości podłoża zarodkowania heterogenicznego

Jako dane wejściowe do obliczeń rzeczywistego rozkładu wielkości podłoża zarodkowania heterogenicznego przyjęto  $\sigma_{s/v}=0.169 \text{ Jm}^{-2}$  i  $\Delta S_v=9.125 \cdot 10^5 \text{ Jm}^{-3}\text{K}^{-1}$  [7].

Wyniki obliczeń zamieszczono w postaci graficznej na rysunku 4.

Na rysunku 5 zastawiono wyniki eksperymentalne pochodzące z literatury [8], z obliczeniami bazującymi na powyższych modelach zarodkowania. Jak można zauważyć na rysunku 5, modele zarówno Oldfielda, eksponentialny, jak i logarytmiczno-normalny poprawnie opisują zależność gęstości ziaren od przechłodzenia. Wszystkie modele wykazują duże odstępstwo od wyników eksperymentalnych dla przechłodzenia równego około 11 K. Dla pozostałych wartości przechłodzeń model logarytmiczno-normalny wydaje się być bliższy wynikom badań eksperymentalnych.



Rys. 4. Wpływ wielkości podłoża na gęstość prawdopodobieństwa według modelu logarytmiczno-normalnego

$$N(d) = \frac{1 \cdot 10^{11}}{1.580 \cdot d \cdot \sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{[\ln(d) - \ln(2.165 \cdot 10^{-10})]^2}{2 \cdot 1.580^2}\right)$$

## 4. Wnioski

Dane doświadczalne mogą być poprawnie opisane równaniami (1), (2) i (3).

Analiza statystyczna oraz numeryczny algorytm umożliwiły wyznaczenie parametrów krystalizacji dla trzech zależności opisujących kinetykę zarodkowania.

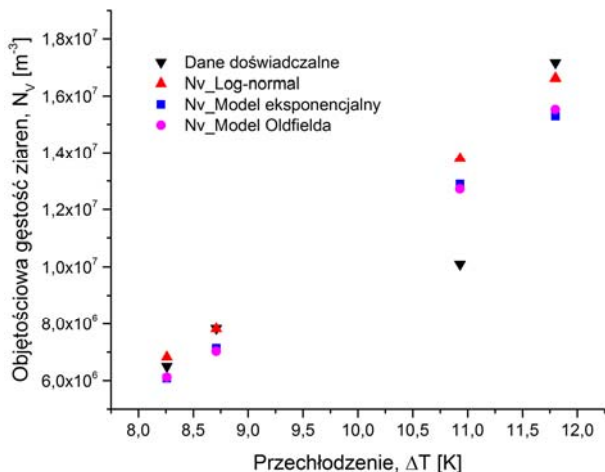
Uzupełnione modele zarodkowania o parametry krystalizacji wyglądają następująco:

Model Oldfielda:  $N_v = (0,0247) \cdot \Delta T^{(2,61)}$ ,

Model eksponentialny:  $N_v = (131,555) \cdot \exp((-25,39)/\Delta T)$ .

Model logarytmiczno-normalny:

$$N(d) = \frac{1 \cdot 10^{11}}{1.580 \cdot d \cdot \sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{[\ln(d) - \ln(2.165 \cdot 10^{-10})]^2}{2 \cdot 1.580^2}\right)$$



Rys. 5. Zestawienie wyników doświadczalnych [1] z modelami ujmującymi gęstość ziaren w funkcji przechłodzenia

## Podziękowania

Opracowano w ramach projektu nr 11.11.170.318 zad. 1.

## Literatura

[1] Oldfield, W. (1966). Quantitative Approach to Casting Solidification. *Freezing of Cast Irons ASM*. 59, 945-961.

- [2] Górny, M. (2001). *Badania modelowe zarodkowania ziaren eutektycznych w żeliwie i ich weryfikacja doświadczalna*, AGH w Krakowie.
- [3] Fraś, E., Wienczek, K., Górny, M. & Lopez, H. (2003). Theoretical Model for Heterogeneous Nucleation of Grains During Solidification. *Material Science and Technology*. 19, 1653-1659.
- [4] Greer, A.L., Bunn, A.M., Tronche, A., Evans, P.V., Bristow, D.J. (2000). Modelling of inoculation of metallic melts: application to grain refinement of aluminium by Al-Ti-B. *Acta Materialia*. 48, 2823-2835.
- [5] Quedsted, T.E., Greer, A.L. (2004). The effect of the size distribution of inoculant particles on as-cast grain size in aluminium alloys. *Acta Materialia*. 52, 3859-3868.
- [6] Quedsted, T.E., Dinsdale, A.T., Greer, A.L. (2005). Thermodynamic modelling of growth-restriction effects in aluminium alloys. *Acta Materialia*. 53, 1323-1334.
- [7] J. Lelito, B. Gracz, P. L. Żak, M. Szucki, D. Kalisz, J. Suchy, W. Krajewski. (2013). Determination of substrate log-normal distribution in the AZ91/(SiC)p composite. *Archives of Foundry Engineering*. 13 (3), 35-38.
- [8] M. Górny, G. Sikora. (2015). Effect of Titanium Addition and Cooling Rate on Primary  $\alpha$ (Al) Grains and Tensile Properties of Al-Cu Alloy. *Journal of Materials Engineering and Performance*. 24 (3), 1150-1156.

# Size Distribution of Substrate to Heterogeneous Nucleation of Primary Phase in Al-Cu Alloy

## Abstract

The development of computerization caused a lot of progress in numerical modeling of alloys crystallization. It becomes possible to predict casting microstructure. For this purpose, it is necessary to know the equations describing the size distribution of the substrate to the heterogeneous nucleation of grains or grains density function dependence on supercooling. The paper presents calculations for Oldfield and exponential model of grain density as a function of the maximum supercooling. In addition, calculations were also performed for the log-normal distribution of the substrate size to heterogeneous nucleation of primary phase.

The main aim of this work is to determine the fitting parameters of Al-Cu alloy solidifying based on experimental studies published in the literature [7] for above equations. In the case of log-normal size distribution of substrate for heterogeneous nucleation, the parameters present in the equation were determined using a numerical algorithm. Thanks to these schedules were then summarized in the graph of experimental data for comparison.