



УДК 669.13.017:620.18

МОДЕЛИРОВАНИЕ ШАРОВИДНОГО ВКЛЮЧЕНИЯ ГРАФИТА В ВЫСОКОПРОЧНОМ ЧУГУНЕ: ВНУТРЕННЕЕ СТРОЕНИЕ И ПОВЕДЕНИЕ ПРИ НАГРУЖЕНИИ

А. И. ПОКРОВСКИЙ, Физико-технический институт НАН Беларуси,

г. Минск, Беларусь, ул. Купревича, 10. E-mail: art@phti.by.

И. В. РАФАЛЬСКИЙ, П. Е. ЛУЩИК, Государственное предприятие «Научно-технологический парк БНТУ «Политехник», г. Минск, Беларусь, ул. Я. Коласа, 24. E-mail: rafalski@park.bntu.by.

Цель работы – построение методом конечных элементов модели шаровидного включения графита в высокопрочном чугуне, моделирование процесса его разрушения при двустороннем сжатии и верификация моделей при проведении экспериментов по сжатию.

Построены трехмерная и конечно-элементная модели шаровидного включения графита в высокопрочном чугуне. Модель включает в себя: микроскопическую шарообразную частицу в центре (кремнистый феррит либо комбинация оксидов, сульфидов и окисульфидов) и обрамление пирамидальными структурами графита с вершинами, расходящимися от центра частицы.

Численное моделирование двухосной (четырёхсторонней) деформации шаровидного включения графита с использованием программы Ansys показало, что центральный зародыш не деформируется и не разрушается, а разрушение вначале происходит по границам графитовых пирамидальных структур, а затем и сами они разрушаются. Определены напряжения в центральной частице и в пирамидальных структурах (от 14 до 192 МПа).

Для верификации компьютерных моделей были проведены эксперименты на сжатие образцов высокопрочного чугуна при комнатной температуре на разрывной машине. Исследования с помощью РЭМ подтвердили секторально-пирамидальное строение включения графита с наличием внутри пирамид параллельных плоскостей. Экспериментально доказано, что, начиная с определенной нагрузки, происходит полное разрушение составляющих пирамиду пакетов из графитных плоскостей.

Результаты моделирования четырехстороннего сжатия адекватно описывают поведение шаровидного включения графита. В дальнейшем полученные результаты будут использованы для сравнения поведения графита при высокотемпературной (900–1000 °С) деформации чугуна методом выдавливания.

Ключевые слова. *Высокопрочный чугун, моделирование, шаровидный графит, внутреннее строение включения, нагружение, разрушение.*

MODELING OF THE INTERNAL STRUCTURE OF A SPHERICAL GRAPHITE INCLUSION IN DUCTILE CAST IRON AND ITS BEHAVIOR UNDER LOADING

A. I. POKROVSKY, Physical-Technical Institute of the National Academy of Sciences of Belarus,

Minsk, Belarus, 10, Kuprevicha str. E-mail: art@phti.by.

I. V. RAFALSKI, P. E. LUSHCHYK, State Enterprise “Science and Technology Park of BNTU “Polytechnic”, Minsk, Belarus, 24, Ya. Kolasa str. E-mail: rafalski@park.bntu.by.

The goal of this work is to develop a finite element model of a spherical graphite inclusion in ductile cast iron, modeling the process of its destruction under bilateral compression and verification of models by performing compression experiments.

Three-dimensional and finite element models of a spherical graphite inclusion in ductile cast iron are developed. The model includes (a) a microscopic spherical particle in the center (siliceous ferrite or a combination of oxides, sulfides and oxysulphides) and (b) its framing by pyramidal graphite structures with vertices radiating from the center of the particle.

Numerical modeling of biaxial (quadrilateral) deformation of spherical graphite inclusion, which was carried out using the Ansys program, has shown that destruction initially occurs over the boundaries of pyramidal graphite structures and then the latter are destroyed; the central nucleus is not deformed nor destroyed. The stresses in the central particle (up to 53 MPa) and in the pyramidal graphite structures (14 to 192 MPa) are determined.

The compression tests of ductile cast iron specimens at a room temperature provided verification of the computer models. SEM studies have confirmed the sector-pyramidal structure of a graphite inclusion with the presence of parallel planes inside the pyramids and demonstrated that, starting from a certain stress, complete destruction of the pyramid-shaped packets of graphite planes occurs. Thus, the results of modeling of biaxial deformation of a spherical graphite inclusion adequately describe its behavior.

Keywords. *Ductile cast iron, casting, modeling, spheroidal graphite, internal structure of inclusion, loading, fracture.*

Введение

Основной гипотезой о строении шаровидного включения в высокопрочном чугуна является следующая. Предполагают, что в центре включения расположено сферическое ядро, состоящее из сложных оксидов и сульфидов, а радиально от него – большое число графитных пирамидальных структур [1]. На металлографическом шлифе сечения этих пирамид имеют вид секторов со специфической структурой, состоящей из концентрически расположенных слоев углерода с характерной границей между секторами.

Рост шаровидного графита происходит в радиальном направлении наружу за счет поочередного наслаивания базисных плоскостей углерода друг на друга.

Краткий обзор предыдущих исследований

Одну из первых моделей зародыша, на котором выделяется графит, предложил Т. Skaland [2]; он представляет собой многослойное образование. Центральной частью зародыша является частица сложного сульфида кальция-магния-стронция (Ca, Mg, Sr ...) S. За ней следует промежуточная оболочка в виде оксида магния-кремния (MgO·SiO₂). Наружный слой зародыша – это сложный металлооксид (MeO·SiO₂) с гексагональной решеткой, с которой уже впоследствии может когерентно связываться решетка графита.

По другой версии зародышем шаровидного включения графита является частица кремнистого феррита. Например, в [3] показано, что кремнистый феррит может находиться внутри включения графита.

Подробный обзор исследований, посвященный истории моделирования процессов зарождения включений графита, выполнил D.M. Stefanescu [4–6], где перечислены основные достижения в моделировании кристаллизации чугуна и проблемные вопросы, остающиеся неисследованными: зародышеобразование графита, предсказание формы, размеров и морфологии графита, вероятность образования карбидов, возможность предсказания механических свойств. A. V. Catalina и др. [7] предложили модифицированную модель Джексона-Ханта для роста эвтектики в чугуна, применимую как к обычным, так и нерегулярным эвтектикам. Модель предусматривает изотермическую границу раздела и учитывает разницу плотностей между жидкостью и двумя твердыми фазами. Для разных переохлаждений определены четыре характеристических расстояния, при которых переохлаждение минимально.

L. Beltran-Sanchez и D.M. Stefanescu [8] улучшили предыдущую модель, включая кристаллизацию первичных зерен аустенита и инициируя рост графита. Показано, что после контактирования с зернами аустенита графит может расти по диффузионному механизму. Более полная модель для прогнозирования статических механических свойств серого и высокопрочного чугуна была предложена A. Catalina, X. Guo и др. [9]. Вначале разработали сферическую симметричную модель для роста эвтектического зерна в сером чугуна, предполагая, что рост контролируется диффузией. Затем происходит контролируемый диффузией рост ферритных зерен и утолщение графита.

Из публикаций стран СНГ наиболее интересны результаты, изложенные в статьях О.В. Соценко [10, 11]: в них реализовано компьютерное моделирование формирования графитных включений различной морфологии на основе DLA-модели (DLA – diffusion limited aggregation – диффузионно-лимитированная агрегация). Такой подход позволяет создавать адекватные модели путем построения фрактального кластера, образованного из отдельных частиц. Ограниченное двумерное пространство разбивается на множество квадратных ячеек. В одну из них помещают частицу-затравку, а затем из удаленного источника на границе области поочередно выпускаются частицы, которые совершают броуновское движение. Каждая новая частица передвигается в соседнюю клетку случайным образом – ее путь выбирают методом Монте-Карло. DLA-модели имеют удовлетворительное согласование с экспериментальными данными по строению компактных графитных включений. Однако такие модели применимы только для немонолитных сферических включений и не учитывают поликристаллическое строение графита.

Таким образом, в работах по моделированию зарождения и роста шаровидных графитных включений при кристаллизации ВЧ еще много пробелов. В большинстве своем модели являются эмпирическими. Представляет интерес создать модель на основе поликристаллического строения включения (с центральным ядром и секторально-пирамидальной структурой вокруг него) методом конечных элементов. Поскольку чугуны класса ВЧ являются в ряде случаев эффективными конкурентами и заменителями легированных сталей по прочности, целесообразно также провести моделирование разрушения включения и сравнить с экспериментальными данными.

Результаты исследований и их обсуждение

Построение модели шаровидного включения графита в высокопрочном чугуне

На основании проанализированных выше литературных данных о формировании графитных включений в ВЧ установлено, что их зарождение и рост начинаются с образования зародыша микроскопической шарообразной частицы. По одной из версий эта частица представляет собой сложную комбинацию оксидов, сульфидов и окисульфидов, причем наружный слой частицы когерентен с решеткой графита. По другой версии – это частица с высокой концентрацией железа и кремния (кремнистый феррит).

С учетом таких предположений разработаны трехмерная твердотельная модель строения включения графита, состоящая из сферического ядра в центре (рис. 1, а), конечно-элементная модель включения (рис. 1, б) и модель одного из периферийных сегментов (пирамид) (рис. 1, в). В результате предложена конечно-элементная модель мезофрагмента: «ферритная матрица – комплекс сегментарно расположенных пластин включения графита (пирамид) – центральный шаровидный зародыш» для дальнейшего численного анализа (рис. 1, г).

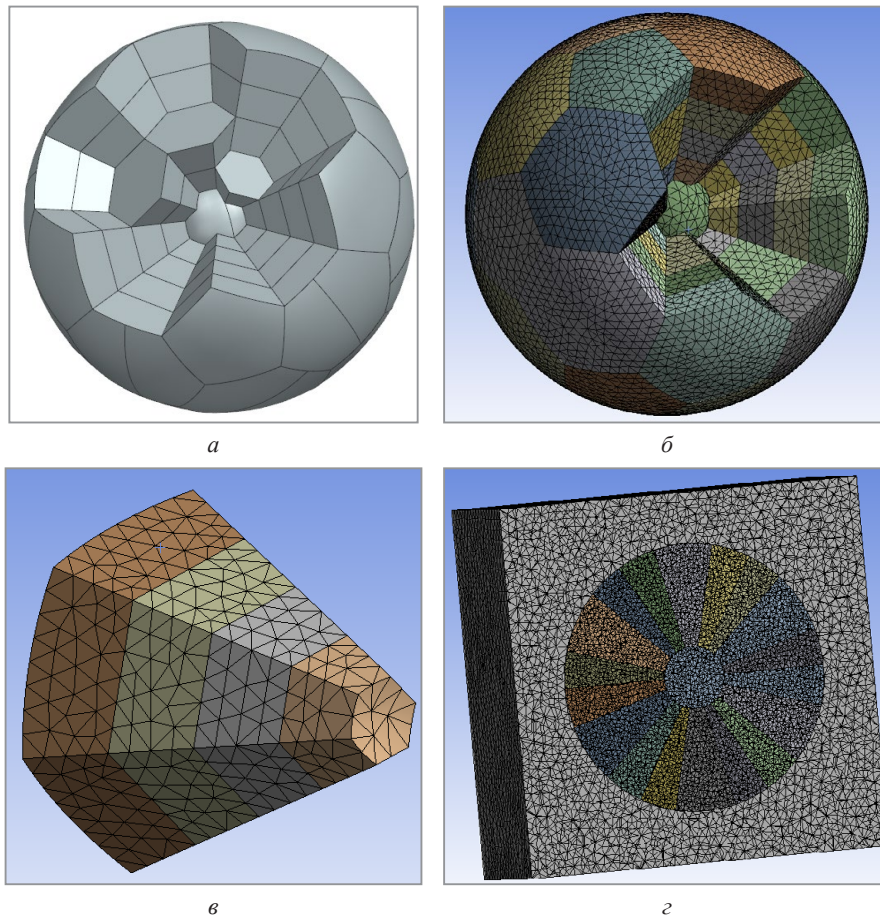


Рис. 1. Модель внутреннего строения включения шаровидного графита в высокопрочном чугуне:
 а – трехмерная твердотельная модель включения графита; б – конечно-элементная модель включения графита;
 в – конечно-элементная модель одного из периферийных сегментов включения графита (пирамид);
 г – конечно-элементная модель (в сечении) системы: «ферритная матрица – комплекс сегментарно расположенных пластин включения графита (пирамид) – шаровидный зародыш»

Модель включения графита была разбита на 1 160 307 объемных конечных элементов.

Моделирование разрушения включения шаровидного графита при простом двухосном сжатии

Проведен численный анализ двухосной (четырёхсторонней) деформации включения шаровидного графита в программе Ansys. При этом деформация происходит по осям X и Y, а по оси Z – свободное перемещение включения до момента его полного разрушения (рис. 2).

В качестве центра шаровидного включения графита рассматривали частицу кремнистого феррита. Пластины, сжимающие модель, считали абсолютно жесткими. Используются теплофизические и механические параметры графита и кремнистого феррита из базы Ansys.

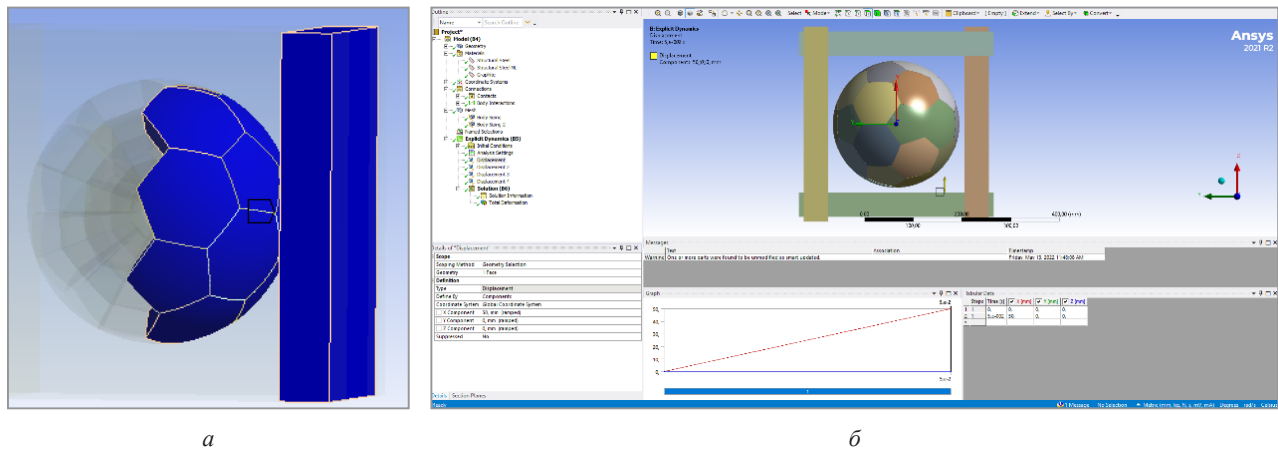


Рис. 2. Схема приложения нагрузки к включению шаровидного графита при двухосной (четырёхсторонней) деформации: *а* – схема контакта включения с пластиной; *б* – назначение параметров контакта и перемещения сдавливающих пластин

Между собой каждый элемент графитной пирамиды взаимодействует с трением, коэффициент которого принят равным 0,1. Также учитывали контакт между элементами соседних пирамид и внутренним шаровидным включением кремнистого феррита.

В результате численного моделирования получены данные о направлении перемещений и деформации элементов мезофрагмента графитного включения ВЧ, а также напряжений внутри пластин графита и в ядре (кремнистый феррит) при упругой двухосевой четырехсторонней деформации (рис. 3). Заметно, что разрушение происходит по границам сегментов (рис. 3, *а*). В продольном сечении заметно также смещение графитных плоскостей внутри пирамид (рис. 3, *б*). Напряжения в центральном ядре не превышают 53 МПа, причем оно практически не деформируется. Напряжения в различных частях пирамид различаются на порядок и варьируются от 14 МПа (в основном в центральной части) до 192 МПа (на краях включения).

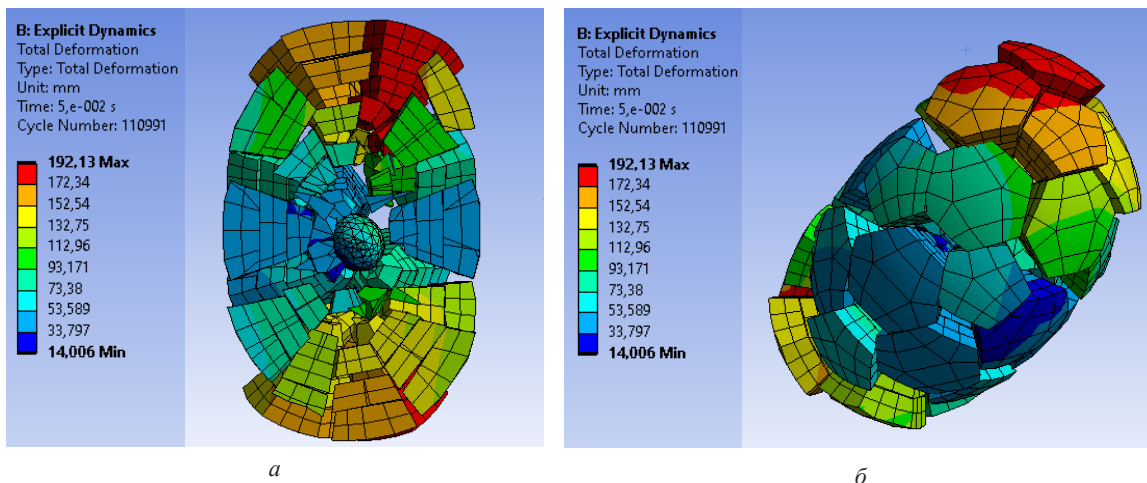


Рис. 3. Визуализация смещений элементов, составляющих мезофрагмент шаровидного графитного включения ВЧ при двухосном сжатии: *а* – продольное сечение включения; *б* – аксонометрия

Для верификации компьютерных моделей были проведены эксперименты по сжатию образцов высокопрочного чугуна на стандартной разрывной машине. РЭМ-изображения разрушенных графитных включений приведены на рис. 4.

На рисунках 4, *а*, *б* заметно, что на определенных этапах нагружения наблюдаются фрагменты разрушенных графитных пирамид с отчетливо выраженным слоистым (пакетным) строением (отмечены красными кружками), состоящим из стопки параллельных пластин. На рис. 4, *в*, *г* показано, что, начиная с определенной нагрузки, происходит полное разрушение составляющих призму пакетов из графитных плоскостей и разрушение самих пирамид на множество пластин.

Таким образом, упругая модель четырехстороннего сжатия достаточно хорошо описывает поведение элементов системы. В дальнейшем полученные результаты будут использованы для анализа поведения графита при высокотемпературной (900–1000 °С) деформации чугуна.

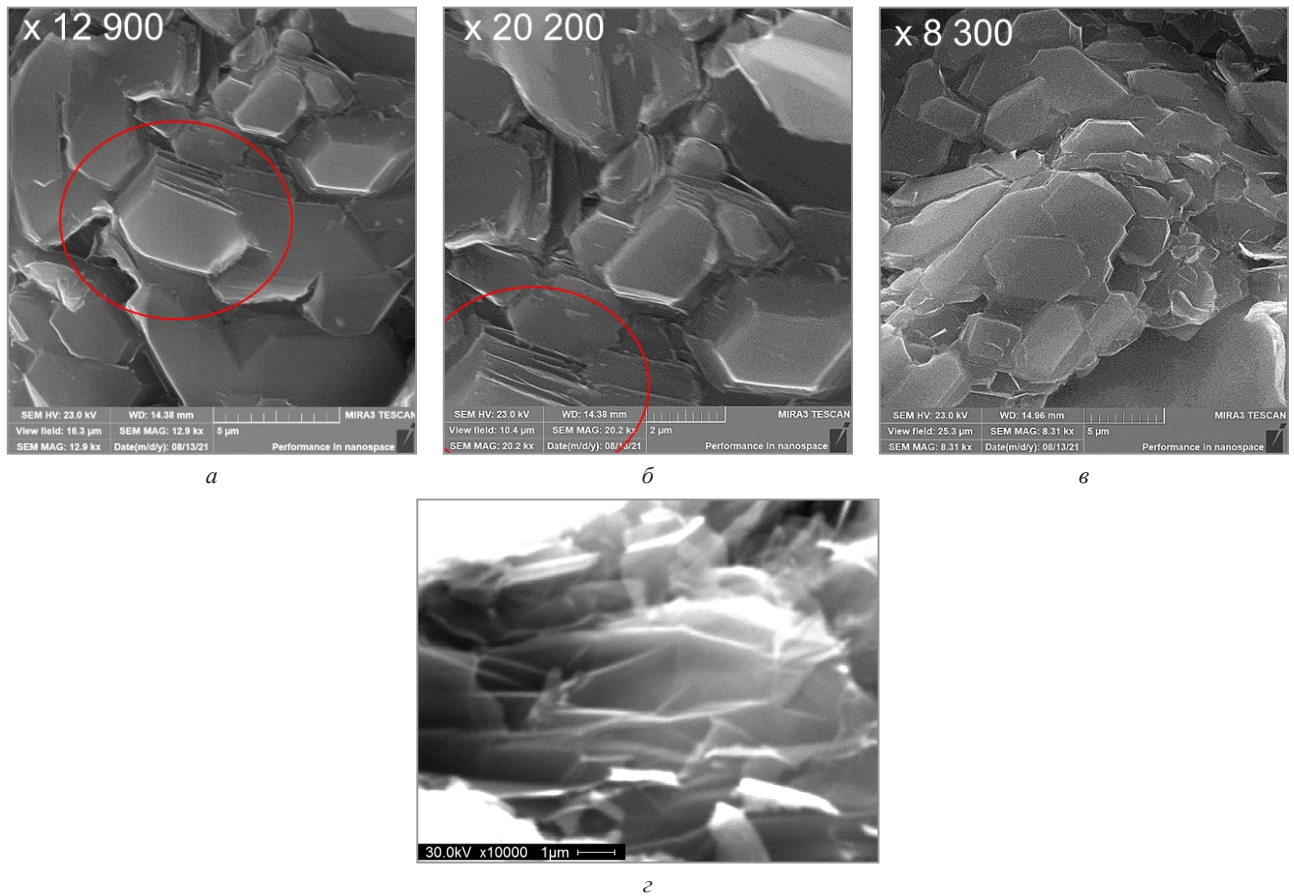


Рис. 4. РЭМ-изображения разрушенных двухосным сжатием графитных включений в высокопрочном чугунае: *a* – $\times 12\,900$; *б* – $\times 20\,200$; *в* – $\times 8\,300$; *з* – $\times 10\,000$

Выводы

1. Построены трехмерная модель шаровидного включения графита в высокопрочном чугунае, а также конечно-элементная модель, которая включает в себя более миллиона конечных элементов. При ее построении основывались на предположении, что в центре включения графита находится микроскопическая инородная шарообразная частица. По одной из версий она представляет собой сложную комбинацию оксидов, сульфидов и оксисульфидов, причем наружный слой частицы когерентен с решеткой графита; по другой версии – это частица кремнистого феррита. Частица обрамлена графитом, имеющим поликристаллическое секторальное строение в виде пирамид с вершинами, расходящимися от центра частицы; в основании пирамид находятся пяти- и шестиугольники. Каждый сегмент пирамиды включает в себя множество графитных пластин, расположенных параллельно и наслаивающихся друг на друга.
2. Проведено численное моделирование двухосной (четырёхсторонней) деформации шаровидного включения графита в программе Ansys. Показано, что центральный зародыш при этом не деформируется и не разрушается; напряжения в нем не превышают 53 МПа. Установлено, что разрушение вначале происходит по границам графитовых пирамидальных структур, а на определенных этапах они разрушаются. В продольном сечении заметно также смещение графитных плоскостей внутри пирамид. Напряжения в различных частях пирамидальных структур различаются на порядок и варьируются от 14 МПа (в основном в центральной части) до 192 МПа (на краях графитного включения).
3. Для верификации компьютерных моделей были проведены эксперименты на сжатие при комнатной температуре образцов высокопрочного чугуна на разрывной машине. Исследования с помощью РЭМ подтвердили секторально-пирамидальное строение включения графита с наличием внутри пирамид параллельных плоскостей. Экспериментально показано, что, начиная с определенной нагрузки, происходит полное разрушение составляющих пирамиду пакетов из графитных плоскостей.
4. Показано, что результаты моделирования четырехстороннего сжатия адекватно описывают поведение шаровидного включения графита. В дальнейшем полученные результаты будут использованы для сравнения поведения шаровидного графита при высокотемпературной (900–1000 °С) деформации чугуна методом выдавливания.

Работа выполнена в ФТИ НАН Беларуси и научно-технологическом парке БНТУ «Политехник» (г. Минск, Беларусь) в рамках задания № 2.01 ГПНИ «Металлургия» (2021–2025 гг.).

ЛИТЕРАТУРА

1. **Верховлюк, А. М.** Особенности роста шаровидных включений графита в чугунах / А. М. Верховлюк, Шумихин В. С., Назаренко А. В. // Процессы литья. – 2007. – № 5. – С. 11–18.
2. **Skaland, T., Grong, F., Grong, T.** A Model for the Graphite Formation in Ductile Cast Iron: Part I. Inoculation Mechanisms // Metallurgical Transactions A. – 1993. – Vol. 24. – P. 2321–2345.
3. **Покровский, А. И.** Анализ химического состава и морфологии графитных включений в высокопрочном чугунах / А. И. Покровский // Современные методы и технологии создания и обработки материалов: Сб. НТ. В 2 кн. Кн. 1. Новые технологии и материалы / ред. колл.: В. Г. Залесский (гл. ред.) [и др.]. – Мн.: ФТИ НАН Беларуси, 2021. – С. 224–234.
4. **Stefanescu, D. M.** Solidification and modeling of cast iron – A short history of the defining moments / D. M. Stefanescu // Materials Science and Engineering A. – 2005. – Vol. 413–414. – P. 322–333.
5. **Stefanescu, D. M.** Modeling of Cast Iron Solidification–The Defining Moments / D. M. Stefanescu // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2005. – Vol. 38, No. 7. – P. 1433–1447.
6. **Stefanescu, D. M.** State of the Art in Solidification Modeling of Cast Iron / D. M. Stefanescu // Science and Processing of Cast Iron VIII. – Tsinghua University Press, Beijing. – 2006. – P. 32–41.
7. **A. V. Catalina, S. Sen, D. M. Stefanescu.** A new analytical approach to predict spacing selection in lamellar and rod eutectic systems // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2003. – Vol. 34. – P. 383–394.
8. **L. Beltran–Sanchez, D. M. Stefanescu.** A quantitative dendrite growth model and analysis of stability concepts // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2004. – Vol. 35. – P. 2471–2486.
9. **A. Catalina, X. Guo, D. M. Stefanescu, L. Chuzhoy, M. A. Pershing.** Prediction of room temperature microstructure and mechanical properties in lamellar iron castings // AFS Transactions. – 2000. – Vol. 94. – P. 889–912.
10. **Соценко, О. В.** Компьютерная DLA-модель формирования шаровидного графита в высокопрочном чугунах / Соценко О. В. // Металл и литье Украины. – 2009. – № 9. – С. 3–9.
11. **Соценко, О. В.** Особенности агрегативного механизма формирования структуры шаровидного и вермикулярного графита в модифицированных чугунах // Металл и литье Украины. – 2012. – № 12 (235). – С. 3–9.

REFERENCES

1. **Verhovljuk A. M., Shumihin V. S., Nazarenko A. V.** Osobennosti rosta sharovidnyh vkljuchenij grafitu v chugune [Peculiarities of growth of spherical graphite inclusions in cast iron]. *Processy lit'ja = Casting processes*, 2007, no. 5 pp. 11–18.
2. **Skaland T., Grong F., Grong T.** A Model for the Graphite Formation in Ductile Cast Iron: Part I. Inoculation Mechanisms. *Metallurgical Transactions A.*, 1993, vol. 24, pp. 2321–2345.
3. **Pokrovskij A. I.** Analiz himicheskogo sostava i morfologii grafitnyh vkljuchenij v vysokoprochnom chugune [Analysis of chemical composition and morphology of graphite inclusions in high-strength cast iron]. *Sovremennye metody i tehnologii sozdaniya i obrabotki materialov = Modern methods and technologies for the creation and processing of materials*. Minsk, FTI NAN Belarusi Publ., 2021, pp. 224–234.
4. **Stefanescu D. M.** Solidification and modeling of cast iron – A short history of the defining moments. *Materials Science and Engineering A*, 2005, vol. 413–414, pp. 322–333.
5. **Stefanescu D. M.** Modeling of Cast Iron Solidification–The Defining Moments. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2005, vol. 38, no. 7, pp. 1433–1447.
6. **Stefanescu D. M.** State of the Art in Solidification Modeling of Cast Iron. Science and Processing of Cast Iron VIII, *Tsinghua University Press*, Beijing, 2006, pp. 32–41.
7. **Catalina A. V., Sen S., Stefanescu D. M.** A new analytical approach to predict spacing selection in lamellar and rod eutectic systems. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2003, vol. 34, pp. 383–394.
8. **Beltran–Sanchez L., Stefanescu D. M.** A quantitative dendrite growth model and analysis of stability concepts. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2004, vol. 35, pp. 2471–2486.
9. **Catalina A., Guo X., Stefanescu D. M., Chuzhoy L., Pershing M. A.** Prediction of room temperature microstructure and mechanical properties in lamellar iron castings. *AFS Transactions*, 2000, vol. 94, pp. 889–912.
10. **Socenko O. V.** Komp'juternaja DLA–model' formirovanija sharovidnogo grafitu v vysokoprochnom chugune [Computer DLA model of spheroidal graphite formation in high-strength cast iron]. *Metall i lit'e Ukrainy = Metal and casting of Ukraine*, 2009, no. 9, pp. 3–9.
11. **Socenko, O. V.** Osobennosti agregativnogo mehanizma formirovanija struktury sharovidnogo i vermikuljarnogo grafitu v modifitsirovannyh chugunah [Peculiarities of the aggregative mechanism of formation of the structure of spheroidal and vermicular graphite in modified cast irons]. *Metall i lit'e Ukrainy = Metal and Casting of Ukraine*, 2012, no. 12 (235), pp. 3–9.