FIATAL MŰSZAKIAK TUDOMÁNYOS ÜLÉSSZAKA

Kolozsvár, 2001. március 23-24.

REVERZIBILIS AUSZTENIT-FERRIT ÁTALAKULÁSI FOLYAMAT SZIMULÁCIÓJA

Simulation of reversible austenite/ferrite transformation processes

Kovács Tünde, Réti Tamás , Réger Mihály

Abstract

A phenomenological kinetic model has been developed for the prediction of non-isothermal reversible and incomplete transformations in steels. The theoretical basis of the proposed method has its origin in a possible extension of the traditional Austin-Rickett kinetic differential equation. To critically assess the applicability of the model, experiments based on computer simulations have been performed to predict the austenite/ferrite proeutectoid transformation in the temperature range of A_{c1} to A_{c3} on plain carbon hypoeutectoid steels. A comparison with published experimental data has verified that the model developed is reasonable both quantitatively and with respect to well-established trends.

1. Bevezetés

Ötvözetekben végbemenő átalakulási folyamatok során gyakran előfordul, hogy az átalakulási (például bomlási, kiválási) folyamat nem megy teljesen végbe, vagyis az átalakult hányad a reakció befejeztével 1-nél kisebb pozitív szám. Az ilyen reakciók modellezésére a klasszikus Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (JMAK) elmélet nem alkalmazható. Ugyancsak nem használható a JMAK elmélet olyan esetekben, amikor az átalakulási folyamat nem "egyirányú", hanem reverzibilis jellegű. Mint tipikus példa említendő a kis karbon-tartalmú hipoeutektoidos acélokban az A_{c1} és A_{c3} egyensúlyi hőmérsékletek között végbemenő ausztenit-ferrites ($\gamma \rightleftharpoons \alpha$) átalakulás, amely nem-teljes és egyúttal reverzibilis reakciónak tekintendő.

A következőkben - szimulációs kísérletekre támaszkodva - megmutatjuk, hogy bizonyos kinetikai modell-feltételezések bevezetésével igen egyszerűen konstruálhatók olyan autonóm differenciálegyenletek, amelyek eredményesen használhatók reverzibilis és nem-teljes átalakulási folyamatok előrejelzésére.

2. Kinetikai modell nem-teljes és reverzibilis átalakulási folyamatok leírására

A nem teljes és reverzibilis átalakulási folyamatok leírására javasolt kinetikai modell a következő feltételezéseken alapul:

1. A vizsgált ötvözet kétfázisú, amely gamma (γ) és alfa (α) fázisokból áll, és adott T hőmérsékleten és t időpillanatban $y=y(t,T)$ jelöli az alfa fázis és $y_\gamma=1-y(t,T)$ a gamma fázis térfogathányadát.
2. A körülményektől függően T hőmérsékleten a gamma/alfa átalakulás mindkét irányban végbemehet. Az alfa-fázis átalakulási sebessége alapján - pontosabban fogalmazva - a dy/dt derivált előjeléből az átalakulás irányára következtethetünk. Ha a dy/dt derivált pozitív, akkor gamma- $\rightarrow$ alfa átalakulás, ha pedig negatív, akkor alfa- $\rightarrow$ gamma átalakulás következik be.
3. Az átalakulási folyamat befejezettnek tekintendő, ha $y(t,T) = Y(T)$ teljesül, ahol $Y=Y(T)$ az alfa fázis egyensúlyi hányada konstans T hőmérsékleten. Az egyensúlyi hányad $0 < Y(T) \leq 1$ pozitív mennyiség, amely definíció szerint $y(t,T)$ határértéke $t \rightarrow \infty$ esetén. Konstans T hőmérsékleten, $Y=Y(T)$ értéke a nem-teljes reakciókra I -nél kisebb szám, teljes reakciókra pedig 1.
4. Feltételeztük, hogy a reverzibilis gamma $\leftrightarrow$ alfa átalakulási folyamat $y(0)=y_0$ kezdeti feltétel mellett leírható a

$$\frac{dy}{dt} = \chi(T) \operatorname{sgn}(Y - y) |Y - y|^a y^b \quad (1)$$

alakú autonóm differenciálegyenlettel.

Az (1) egyenletben $\operatorname{sgn}(x)$ az un. szignum függvény, $|x|$ pedig az abszolút-érték függvény, $X(T)$ pozitív függvény, a és b nem-negatív konstansok, vagy hőmérséklettől is függő paraméterek. A fenti differenciálegyenlet tetszőleges $y(0)=y_0$ kezdeti feltétel mellett numerikusan mindig megoldható. Mint megállapítható, a dy/dt átalakulási sebesség és az $(Y-y)$ tényező előjele egymással megegyező, következésképpen $(Y-y)$ előjele határozza meg az átalakulás irányát (kiválás, III. oldódás bekövetkezését).

3. A kinetikai differenciálegyenlet megválasztása

Az (1) differenciálegyenlet ismeretlen paramétereinek (χ , a és b) becslése feltételezi az y , dy/dt , T és $Y(T)$ mérési adatok előzetes ismeretét. A kinetikai paraméterek meghatározása jelentősen egyszerűsödik, ha az (1) differenciálegyenlet paraméterei speciális módon vannak megválasztva, nevezetesen

$$\chi(T) = m \frac{K^{1/m}(T)}{Y(T)} \quad (2)$$

alakban definiált, $K=K(T)$ pozitív valós függvény, továbbá $a=1+1/m$ és $b=1-1/m$, ahol $m \geq 1$ hőmérséklettől függő paraméterek. Ekkor eredményül

$$\frac{dy}{dt} = m \frac{K^{1/m}(T)}{Y} \operatorname{sgn}(Y - y) |Y - y|^{1+1/m} y^{1-1/m} \quad (3)$$

kinetikai differenciálegyenletet kapjuk, amely az ún. Austin-Rickett (AR) differenciálegyenlet egy lehetséges általánosítása. Ennek előnyös tulajdonsága, hogy konstans hőmérséklet esetében mindig létezik zárt alakú megoldása.

Izotermikus bomlási folyamat esetében, amikor is $y < Y(T)$ egyenlőtlenség mindig fenn áll, a (3) differenciálegyenlet a

$$\frac{dy}{dt} = m \frac{K^{1/m}(T)}{Y} [Y - y]^{1+1/m} y^{1-1/m} \quad (4)$$

alakra egyszerűsödik. Ennek megoldására az $y_0=0$ kezdeti feltétel esetében

$$y(t, T) = Y(T) \left[1 - \frac{1}{1 + K(T)t^m} \right] \quad (5)$$

adódik. Az (5) kinetika-függvény paraméterei izoterm mérési adatokból becsülhetők.

4. Az izoterm ausztenit ferrites átalakulás modellezése

A vizsgálatokhoz Kamat és munkatársai 0.1% karbon tartalmú ötvözetlen acélra vonatkozó mérési adatait használtuk fel [1]. Dilatométeres mérésekre támaszkodva meghatározták az előzetes ausztenítést követően a 764-812 °C hőmérséklet tartományban a konstans hőmérsékleten az ausztenitből képződő ferrithányadot az idő függvényében. A szakirodalmi adatok felhasználásával végzett elemzéseink azt igazolták, hogy a ferritképződés folyamata izoterm körülmények között jól leírható a (3) összefüggéssel definiált Austin-Rickett kinetikafüggvénnyel. Az is bebizonyosodott, hogy az Austin-Rickett kinetikafüggvény $K=K(T)$ és $m=m(T)$ paraméterei a vizsgált hőmérséklet-tartományban jól approximálhatók a

$$K(T) = \exp\{A_0 + AT_1 + A_2 T^2\} \quad (6)$$

és

$$m(T) = m_0 + m_1 T \quad (7)$$

alakú függvényekkel. Az ismeretlen öt modellparaméter meghatározásához a (6) egyenlet logaritmizált alakját, nevezetesen a

$$\ln \left[\frac{Y(T)}{Y(T) - y(t)} - 1 \right] = A_0 + A_1 T + A_2 T^2 + m_0 \ln t + m_1 T \ln t \quad (8)$$

összefüggést használtuk fel. E formula alkalmazása azzal az előnnyel jár, hogy az ismeretlen paramétereket többváltozós lineáris regressziós módszerrel egyszerűen

becsülhetjük. Az elvégzett számítások eredményeként $A_0 = -2,37145$, $A_1 = 0,0680295$, $A_2 = -8.88906 \cdot 10^{-5}$, $m_0 = 8.644614 \cdot 10^{-3}$ és $m_1 = -5.0097$ adódott.

A fenti paraméterekkel visszszámolt izoterm kinetika-függvényeket négy konstans hőmérsékletre vonatkozóan az 1. ábra szemlélteti.

1. ábra Az izoterm ausztenit/ferrit átalakulás kinetikája négy konstans hőmérsékletre vonatkozóan

A vizsgált 0.1% karbon tartalmú ötvözetlen acélra a ferrit $Y(T)$ egyensúlyi hányadát az

$$Y(T) = 1 - \frac{C(\%)}{13.27 - 0.0276T + 0.0000143T^2} \quad (9)$$

formulával számítottuk. Ez érvényes a $A_{e1} = 727 \text{ } ^\circ\text{C} - A_{e3}$ hőmérséklet-intervallumban, az ötvözetlen 0.08-0.25% C tartalmú acélokra.

A (3) differenciálegyenletből kiindulva lehetőség kínálkozik arra, hogy a ferrit-térfogathányad és az ausztenit karbon-tartalma közötti kapcsolatot fizikai-metallurgiai szempontból is értelmezzük.

A fázisszabályból következik, hogy adott hőmérsékleten az $Y(T)$ egyensúlyi ferrithányad az

$$Y(T) = \frac{C_{\gamma E} - C_0}{C_{\gamma E} - C_\alpha} \quad (10)$$

összefüggéssel számítható, ahol $C_0=0.1\%$ az acél névleges karbon-tartalma, C_α a ferrit karbon koncentrációja, és $C_{\gamma E}$ az ausztenit egyensúlyi karbon koncentrációja.

Amennyiben a ferrithányad y aktuális értéke különbözik az $Y(T)$ egyensúlyi ferrit-frakciótól, akkor az ausztenit karbon-tartalma is eltér az egyensúlyi $C_{\gamma E}$ koncentrációtól. Ez esetben az ausztenit aktuális $C_{\gamma A}$ karbon-koncentrációja és a mindenkor y ferrithányad között fenn áll

$$y = \frac{C_{\gamma A} - C_0}{C_{\gamma E} - C_\alpha} \quad (11)$$

összefüggés. A(10)és(11) formulák hányadosaként

$$\frac{y}{Y} = \frac{C_{\gamma A} - C_0}{C_{\gamma E} - C_0} \quad (12)$$

adódik. Felhasználva a (12) képletet, felírható a

$$Y - y = Y - Y \frac{C_{\gamma A} - C_0}{C_{\gamma E} - C_0} = Y \frac{C_{\gamma E} - C_{\gamma A}}{C_{\gamma E} - C_0} \quad (13)$$

összefüggés, amely a (3) kinetikai differenciál egyenletre nézve a következő konklúzióra vezet: Az átalakulás dy/dt sebességének nagyságát és „irányát” alapvetően a $(C_{\gamma E} - C_{\gamma A})$ karbon-koncentráció különbség határozza meg. Az ausztenit mindenkor $C_{\gamma A}$ karbon-tartalma a (10) és (11) formulákból következően a

$$C_{\gamma A}(y, T) = \frac{y}{1 - Y(T)} [C_0 - C_\alpha(T)] + C_0 \quad (14)$$

összefüggés szerint változik. Mint megállapítható, konstans hőmérsékleten - amint ezt a 2. ábra is - illusztrálja -, a $C_{\gamma A}$ karbon-koncentráció a ferrithányad lineáris függvénye. (Itt jegyezzük meg, hogy a számítások során a vizsgált hőmérséklet-tartományban a ferrit átlagos karbon-koncentrációját $C_\alpha=0.02\%$ értékűnek vettük.)

Az előzőkből következik, hogy izotermikus átalakulásra érvényes a

$$\frac{dC_{\gamma A}(y, T)}{dt} = \frac{C_0 - C_\alpha(T)}{1 - Y(T)} \frac{dy}{dt} \quad (15)$$

összefüggés. E szerint a ferrites átalakulás sebessége arányos az ausztenitben a karbon koncentráció változásának a sebességével.

2. ábra Az auszténit mindenkor karbon-koncentrációjának változása a ferrit hányad függvényében négy konstans hőmérsékleten

5. Nem-izotermikus átalakulási folyamat szimulációja

A (6-8) formulákkal becsült függvényeket felhasználva, számítógépes szimulációs kísérleteket végeztünk a (3) képlet szerint általánosított AR-kinetikai differenciálegyenletre támaszkodva. Vizsgálataink elsődlegesen a nem-izoterm auszténit-ferites átalakulási folyamat predikciójára irányultak.

Példaképpen a 3. ábra egy nem-izotermikus szimulációs kísérlet eredményeit illusztrálja. Az előzetes auszténítés után a vizsgált hipoeutektoidos acélt hirtelen 790 °C-ra lehűtöttük, és ezt követően hőmérsékletét peridódikus függvény szerint változtattuk 830 °C és 750 °C között.

Mint megállapítható, hogy az átalakulási folyamat sebessége kb. 13-14 sec elteltével eléri a maximumát, és a képződő ferrit hányad ekkor 0.5 körüli érték. Ezt követően az átalakulási folyamat már viszonylag lassan halad előre, és olykor - amikor a hőmérséklet megnövekszik (és ezzel párhuzamosan az egyensúlyi ferrithányad csökken) - jól megfigyelhető a ferrit auszténitté történő visszaalakulása is. (Erre utal, hogy az átalakulás sebessége időnként negatív értéket vesz fel.)

3. ábra Nem-izoterm ausztenit-ferrit átalakulás kinetikai jellemzőinek változása az idő függvényében

a) Hőmérséklet függvény b) Ferritre vonatkozó egyensúlyi hányad,
c) Aferrit aktuális hányada d) Aferrites átalakulás sebessége

6. Következtetések

1. A szimulációs vizsgálatok eredményeiből arra következtethetünk, hogy a nem-teljes és reverzibilis átalakulási folyamatok leírására javasolt kinetikai modell, amely az Austin-Rickett differenciálegyenlet (3) szerinti kiterjesztésén alapul, hitelesen írja le az austenit/ferrites átalakulást a vizsgált 0.1% C tartalmú ötvözetlen acélban az A_c1 és A_c3 kritikus hőmérséklet tartományban.
2. A modell előnye, hogy nem szükséges a karbon-transzferre vonatkozó diffúziós egyenletek alkalmazása, amelynek megoldása - tekintettel a mozgó fázishatárok figyelembe vételére - számítástechnikailag is jóval bonyolultabb feladat.
3. A módszer alkalmasnak tűnik ötvözetekben végbemenő egyéb, nem-izoterm reverzibilis folyamatok (pl. karbidok kiválása illetve feloldódása) predikciójára is.

Köszönetnyilvánítás

A témakörben végzett munka az Országos Tudományos Alap támogatásával történt, a T 030521 sz. projekt keretében.

Irodalom

[1] R.G. Kamat et al.: The Principle of Additivity and the Proeutectoid Ferrite Transformation, Metallurgical Transaction A, Vol. 23A, 1992, p. 2469-2480.

Dr Réti Tamás

Budapest Polytechnic, Budapest

H-1081 Budapest, Népszínház u. 8., Hungary

E-mail: reti@zeus.banki.hu