

## СТРУКТУРА, ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ДИФФУЗИЯ

УДК 669.1'784:532.739.2

### МОДЕЛИРОВАНИЕ РОСТА АНСАМБЛЯ АУСТЕНИТНЫХ ЗЕРЕН С УЧЕТОМ ТОРМОЖЕНИЯ ЧАСТИЦАМИ ВТОРЫХ ФАЗ

© 2024 г. И. И. Горбачев<sup>а, \*</sup>

<sup>а</sup>Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН,  
ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108 Россия

\*e-mail: gorbachev@imp.uran.ru

Поступила в редакцию 01.12.2023 г.

После доработки 07.12.2023 г.

Принята к публикации 09.12.2023 г.

Предложены методы для моделирования роста зерна в сплавах с учетом сдерживания этого роста частицами вторых фаз. Представленные подходы, в первую очередь, ориентированы на низколегированные стали с карбонитридным упрочнением. Проведено сравнение результатов расчетов с имеющимися в литературе экспериментальными данными и показано их удовлетворительное согласие.

*Ключевые слова:* моделирование, рост зерна, выделения вторых фаз, низколегированные стали

DOI: 10.31857/S0015323024050139, EDN: XVDPHQ

#### ВВЕДЕНИЕ

Теоретические подходы к описанию роста зёрен в металлах начали появляться уже довольно давно. В качестве примера первых таких исследований можно отметить [1, 2], а одной из самых известных работ в данной области является статья ХиллERTA [3], которая по праву считается классической. В ней предложена как базовая модель роста зерен, так и модель, учитывающая сдерживание роста зерен со стороны частиц вторых фаз. Впоследствии подходы, аналогичные предложенному в [3], стали называть как модели, основанные на среднем поле, так как в них не учитывается геометрическое расположение конкретных отдельных зерен, а рассматривается эволюция всего набора зерен целиком.

Как правило, попытки учесть торможение роста зерен выделениями вторых фаз приводят к значительному усложнению моделей и вносят диссонанс в относительно лаконичные выражения для описания роста зерен без учета данного фактора. По этой причине вплоть до настоящего времени в ряде работ практикуются подходы к описанию укрупнения зерен для случая, когда частицы вторых фаз отсутствуют. К примеру, в [4, 5] рост зерен моделируется на основе метода фазовых полей в кубике с размерами  $292^3$  и  $2560^3$  элементов соответственно. В [6] анализируются различные способы трехмерного моделирова-

ния (3D) роста зерен в сравнении с аналитическим решением и экспериментальными данными. В [7] представлено обобщение выражений, использованных Хиллертом [3], а также в рамках теории Лившица–Слезова–Вагнера [8], и предложены методы расчета стационарных функций распределения по размерам для различных случаев. Для моделирования эволюции зеренной структуры также популярен метод клеточных автоматов. Этот метод активно развивается и в настоящее время используется не только для описания роста зерна [9, 10], но и для более сложных задач, к примеру, для описания рекристаллизационных процессов [11]. Метод клеточных автоматов – довольно мощное средство, которое имеет большой потенциал. Как и в методе фазовых полей, в нем есть привлекательная возможность визуализации моделируемой структуры в 2D и 3D. Однако плата за это – очень большие вычислительные затраты. Поэтому в некоторых работах [5, 12] сообщается о проведении расчетов на суперкомпьютерах или мощных графических процессорах. Вероятно, по указанной выше причине – усложнение модели и, как следствие, еще большее увеличение вычислительных затрат – в подавляющем большинстве моделей на основе метода клеточных автоматов и фазовых полей сдерживание роста зерна выделениями вторых фаз не учитывается.

Чаще всего в основе моделей для описания роста зерна используются выражения, подобные тем, что приводятся в [3]:

$$\dot{D}_i = \alpha \sigma M \left( \frac{1}{D_{cr}} - \frac{1}{D_i} \right), \quad (1)$$

где  $D_i$  – размер  $i$ -го зерна,  $D_{cr}$  – критический размер зерна,  $A$  – энергия границы зерна,  $\alpha$  – безразмерная геометрическая постоянная ( $\approx 1$ , согласно [3]),  $M$  – подвижность границы зерна. Здесь и далее точкой сверху обозначена производная по времени.

При переходе к относительному размеру зерна  $u = \frac{D}{D_{cr}}$  выражение (1) преобразуется к виду:

$$\dot{D}_i^2 = 2M\alpha\sigma(u_i - 1), \quad (2)$$

что соответствует часто наблюдаемому экспериментально параболическому росту зерна, или собирательной рекристаллизации.

С учетом условия постоянства объема  $V$  (в приближении сферической формы зерен) для  $N$  зерен:

$$V = \sum_{i=1}^N \frac{\pi D_i^3}{6} = \text{const}, \quad (3)$$

$$\dot{V} = \sum_{i=1}^N \frac{\pi D_i^2 \dot{D}_i}{2} = 0, \quad (4)$$

легко можно вывести выражение для определения критического размера зерна:

$$D_{cr} = \frac{\sum_{i=1}^N D_i^2}{\sum_{i=1}^N D_i}. \quad (5)$$

Однако в [3] данное выражение почему-то не приводится. Для стационарного состояния там используется оценка среднего размера зерна  $\langle D \rangle$ :

$$\langle D \rangle = \frac{8}{9} D_{cr}. \quad (6)$$

В [13] для описания роста зерен предложен подход на основе принципа термодинамического экстремума (ПТЭ) [14, 15]. Согласно этому принципу система эволюционирует путём максимального производства энтропии. И хотя в итоге авторы [13] приходят ровно к тому же самому выражению (1), (с учетом (5)), нельзя не отметить красоту этого подхода, которая вдохновляет на то, чтобы развивать и использовать его в более широком спектре задач. Сами авторы [13] так и поступают – в этой же работе данный подход применяется для вывода выражений, описывающих эволюцию выделений вторых фаз. В других работах они применяют его

для моделирования пластической деформации, а в [16] – для расчета укрупнения зерен с учетом торможения роста за счет сегрегации растворенных элементов на границах зерен.

Как для моделей, основанных на среднем поле, так и для более сложных подходов при учете тормозящего влияния частиц вторых фаз характерна отсылка к работе Хиллерта [3], согласно которой

$$\dot{D}_i = \begin{cases} M(P_d^i - P_z) & \text{для } P_d > P_z \\ M(P_d^i + P_z) & \text{для } P_d < -P_z' \\ 0 & \text{для } -P_z < P_d < P_z \end{cases} \quad (7)$$

где  $P_d$  и  $P_z$  – движущая сила роста зерен и тормозящая сила со стороны частиц вторых фаз соответственно.

$$P_d^i = \alpha \sigma \left( \frac{1}{D_{cr}} - \frac{1}{D_i} \right). \quad (8)$$

Тормозящая сила, как правило, учитывается на основе выражений зинеровского [17] типа:

$$P_z = \beta \sigma \frac{f^w}{\langle r \rangle}, \quad (9)$$

где  $\beta$  и  $w$  – безразмерные константы,  $f$  и  $\langle r \rangle$  – объемная доля и средний размер выделений.

Довольно распространен подход к описанию поведения среднего размера зерна, который считается близким к  $D_{cr}$ . Особенно это характерно для экспериментальных исследований, в которых эксперимент дополняется теоретической обработкой (см., напр., [18–21]). В этом случае предполагается, что

$$\langle \dot{D} \rangle = M \left( \frac{\alpha \sigma}{\langle D \rangle} - P_z \right). \quad (10)$$

Этот же подход (с учетом или без учета  $P_z$ ) часто практикуется и в более сложных моделях, где рост зерна является частным случаем более сложного набора процессов в рамках данной модели [22–24]. В наших предыдущих работах [25–30] модели тоже строились на основе описания поведения среднего размера зерна, так как это позволяет делать вполне удовлетворительные качественные и количественные прогнозы развития фазовых и структурных превращений при относительно небольших вычислительных затратах. С другой стороны, это является существенным упрощением и ограничивает развитие

новых, более реалистичных физических моделей. Поэтому в данной работе сделана попытка предложить подход, свободный от указанного ограничения, но сохраняющий такие преимущества, как простота, понятный физический смысл и приемлемые вычислительные затраты.

Как было отмечено выше, в подавляющем большинстве предложенных на сегодняшний день моделей для описания роста зерен уделяется весьма слабое влияние реалистичному описанию эволюции выделений вторых фаз. Обычно используются очень упрощенные модели. В этом аспекте [25, 28] выглядят более предпочтительно, так как опираются на развитые в [31, 32] подходы для моделирования эволюции выделений, которые учитывают сразу несколько важных для данной задачи факторов: полидисперсность ансамбля выделений, зарождение новых частиц, конечную объемную долю выделений, взаимовлияние диффузионных потоков разных элементов, возможность эволюции выделений сложного состава.

## ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ

### *Модель роста зерен на основе принципа термодинамического экстремума*

К сожалению, при попытке нативно учесть торможение со стороны выделений вторых фаз на основе ПТЭ [13] возникают значительные сложности. Пройти по пути вывода выражений, аналогично тому, как это делали авторы [13], не получается — вся красота подхода разрушается, выражения в процессе вывода становятся очень громоздкими и, по-видимому, не разрешимыми в аналитическом виде. Тем не менее можно предложить способ с одной стороны, воспользоваться наработками [13], чтобы моделировать эволюцию именно ансамбля зерен (а не среднего размера) и, с другой стороны, учесть сдерживание роста зерен выделениями. Этот способ представлен ниже.

Чтобы сократить вычислительные затраты, предлагается учитывать не отдельные зерна, а описывать зеренную структуру гистограммой. Т. е. интервалу размеров зерен  $D_i$  ставится в соответствие величина  $H_i$ , которая равна количественной доле зерен с размерами  $D_i \pm \Delta D$ :

$$H_i = \frac{N_i}{N}. \quad (11)$$

В рамках модели предполагается, что внутри каждого интервала размеры зерен распределены равномерно. Для текущего состояния ансамбля зерен, заданного гистограммой, общее число зе-

рен  $N$  (в приближении сферической формы зерен) можно рассчитать следующим образом:

$$N = \frac{6}{\pi \sum_{i=1}^m H_i D_i^3}, \quad (12)$$

где  $m$  — количество интервалов гистограммы.

Как отмечается в [16], диффузионные процессы в объеме, сопутствующие эволюции выделений вторых фаз, идут значительно медленнее, чем трансформация зеренной структуры, поэтому диссипацией энергии в объеме можно пренебречь. Таким образом, учитывается диссипация энергии  $Q$  только за счет изменения общей площади  $S$  границ зерен при изменении размеров зерен:

$$Q = \int_S (\mathbf{J}_{\text{GB}} \cdot \mathbf{F}_{\text{GB}}) dS, \quad (13)$$

где  $\mathbf{F}_{\text{GB}}$  — термодинамическая сила, соответствующая стремлению системы понизить зернограничную энергию,  $\mathbf{J}_{\text{GB}}$  — поток свойства, за счет которого это стремление реализуется. Поток свойства — это производная по времени параметра состояния. В данном случае, параметр состояния — размеры зерен, то есть,  $\mathbf{J}_{\text{GB}}$  — это вектор с координатами  $\dot{D}_i$ . Произведение в (13) обозначает скалярное произведение векторов. Таким образом,

$$Q = \frac{1}{2} \int_S \sum_{i=1}^m J_i F_i dS. \quad (14)$$

Одна вторая появляется, поскольку одну границу делят два зерна.

Согласно [3, 13]:

$$\dot{D}_i = M_i F_{\text{GB}i} \rightarrow F_{\text{GB}i} = \frac{\dot{D}_i}{M_i}. \quad (15)$$

Следовательно, принимая, что форма зерна сферическая,

$$Q = \frac{1}{2} \int_S \sum_{i=1}^m \dot{D}_i \frac{\dot{D}_i}{M_i} dS = \frac{\pi}{2} \sum_{i=1}^m N_i D_i^2 \frac{\dot{D}_i^2}{M_i}. \quad (16)$$

Поскольку процесс реализуется путем максимального производства энтропии, задача соответствует отысканию экстремума диссипативной функции  $Q(\dot{D}_i)$  при условиях постоянства объема (4) и равенства диссипации энергии скорости изменения свободной энергии системы  $G$ :

$$\frac{\partial}{\partial \dot{D}_i} (Q + \lambda(Q + \dot{G}) + \mu \dot{V}) = 0. \quad (17)$$

Для свободной энергии системы рассматривается только зернограничный вклад:

$$G = G_{\text{surf}} = \frac{\pi}{2} \sigma \sum_{i=1}^m N_i D_i^2. \quad (18)$$

Привнесение в выражения (16), (18) количества зерен  $N_i$  не меняет логики вывода формул, проделанного в [13]. В целом, повторяя этот вывод и принимая, что подвижности границ всех зерен одинаковы, можно прийти к

$$\dot{D}_i = 4\sigma M \left( \frac{\sum_{j=1}^m N_j D_j}{\sum_{j=1}^m N_j D_j^2} - \frac{1}{D_i} \right). \quad (19)$$

Как видно, с помощью выражения (19) легко рассчитать скорость изменения размеров зерен каждого размерного интервала, а сложность вычислений составляет  $O(2m)$ . Причем  $m$  может быть относительно небольшим, например, 1000, то есть, от 0 до 1000 мкм с шагом 1 мкм. Однако торможение роста зерен со стороны выделений вторых фаз здесь никак не учитывается. Чтобы исправить этот недостаток, в настоящей модели предлагается гибридный подход – описывать с помощью (19) поведение ансамбля зерен, а торможение роста учитывать через подвижность всех границ зерен, отслеживая поведение среднего размера зерна. При этом, чтобы сгладить переход от свободного роста зерен к заторможенному состоянию, подвижности  $M$ , аналогично [33], брались взвешенными между подвижностью свободной  $M_{\text{Free}}$  и заторможенной границы  $M_{\text{Pinned}}$ :

$$M = \begin{cases} P_d^i M_{\text{Free}} + (1 - P_d^i) M_{\text{Pinned}}, & P_d > P_Z \\ M_{\text{Pinned}}, & P_d \leq P_Z \end{cases}, \quad (20)$$

где

$$P_d^i = \frac{P_d - P_Z}{P_d}, \quad (21)$$

$$M_{\text{Pinned}} = \eta_{\text{Pinned}} M_{\text{Free}}. \quad (22)$$

Коэффициент  $\eta_{\text{Pinned}}$  подразумевает, что максимально заторможенная граница все же движется с некоторой ненулевой скоростью.

Предполагается, что движущая сила  $P_d$  соответствует выражению (10) для среднего размера зерна, т. е.

$$P_d = \frac{\alpha\sigma}{\langle D \rangle}. \quad (23)$$

Аналогично [25, 28] для описания поведения выделений вторых фаз использовалась модель,

подробно описанная в [31, 32]. Эта модель учитывает полидисперсность и конечную объемную долю ансамбля выделений, диффузионное взаимодействие элементов в растворе, зарождение новых частиц, комплексный состав выделений и наличие в системе выделений разного состава. Учет полидисперсности позволяет для оценки  $P_z$ , аналогично тому, как это делалось в [26, 29], вместо (9) использовать выражение:

$$P_z = \beta\sigma \left[ \sum_i \left( \frac{f_i^w}{r_i} \right) \right], \quad (24)$$

где  $f_i$  и  $r_i$  – объемная доля и радиус выделений определенного размерного класса и состава.

В расчетах для данной модели были использованы параметры  $\beta = 9/8$  и  $w = 0.93$  [34].

Таким образом, алгоритм расчета для одного временного шага, в соответствии с описанной выше моделью, выглядит следующим образом:

1. На основе модели [31, 32] рассчитываются характеристики ансамбля выделений вторых фаз (их распределения по размерам и объемные доли).

2. По (12) рассчитывается общее число зерен в единице объема.

3. Согласно (19), рассчитываются скорости изменения размеров зерен для каждого  $i$ -го размерного интервала гистограммы и новые размеры зерен  $D_i^j$  для каждого интервала:

$$D_i^j = D_i + \dot{D}_i \Delta t. \quad (25)$$

4. С учетом приближения, что внутри каждого интервала размеры зерен распределены равномерно, рассчитывается изменение долей  $H_i$ :

$$H_i(t + \Delta t) = \sum_j H_j \frac{\omega_i^j}{\Delta D}, \quad (26)$$

где  $\Delta D$  – шаг гистограммы,  $\omega_i^j$  – длина пересечения  $i$ -го и  $j$ -го интервалов. Здесь  $i$  соответствует номерам интервалов на исходной гистограмме,  $j$  – номерам интервалов на новой гистограмме (после их смещения).

$$\omega_i^j = [D_i - \Delta D, D_i + \Delta D] \cap [D_j^j - \Delta D, D_j^j + \Delta D]. \quad (27)$$

5. Гистограмма перенормируется на единицу.

Результаты расчета, полученные для данного временного шага, служат исходными данными для следующего.

Забега вперед, можно сказать, что результаты работы такого алгоритма показывают согласие с экспериментом не хуже, чем моделирование только на основе среднего размера зерна, выполненное в [28]. Но данный алгоритм дополнительно позволяет отслеживать изменение рас-

пределения зерен по размерам. Тем не менее как описание зеренной структуры через гистограмму, так и учет сдерживающего фактора со стороны выделений только через средний размер зерна в каких-то случаях могут являться существенным упрощением и ограничивать дальнейшее развитие модели. Поэтому далее приведен еще один – альтернативный – алгоритм для рассматриваемой задачи.

*Модель для описания поведения  
массива отдельных зерен*

Модель, предложенная в [3], была достаточно глубоко проанализирована Хиллертом. Однако проблема в том, что этот анализ был проведен аналитически, и его результаты нельзя в полной мере использовать при моделировании ансамбля отдельных зерен. Так, например, даже для свободного роста зерен при использовании (5) либо (6) вследствие накопления погрешности машинных вычислений суммарный объем всех зерен потихоньку изменяется. Кроме того, оба эти выражения не учитывают того, что при конечном временном шаге новый размер зерна (25) может получиться меньше нуля. И, наконец, учет тормозящей силы со стороны выделений на основе (7)–(9) делает вообще невозможным аналитический расчет  $D_{cr}$ .

В настоящей работе предлагается разом решить все указанные выше проблемы с помощью численного нахождения  $D_{cr}$  (например, методом Ньютона) из условия сохранения объема:

$$V(t + \Delta t) = \sum_{i=1}^m \frac{\pi D_i^3}{6} - V_0 = 0, \quad (28)$$

где  $V_0$  – исходный суммарный объем всех зерен;  $D_i$  в данном разделе подразумевает размер конкретного зерна, а не средний размер соответствующего интервала гистограммы.

Чтобы заложить основу для дальнейшего развития данной модели (например, для описания процессов, протекающих при деформации), зеренная структура задавалась в виде массива отдельных зерен, а не гистограммой. В качестве параметра алгоритма может выступать начальное количество зерен или моделируемый объем. В модели поведения массива отдельных зерен в качестве начального состояния необходимо сгенерировать массив размеров зерен, с некоторым распределением по размерам так, чтобы их суммарный объем равнялся заданному. Сам же моделируемый объем необходимо выбирать, исходя из предполагаемого изменения размеров зерен в процессе моделирования.

Нетрудно заметить, что использование (8) для расчета движущей силы приводит к очень боль-

шой (в пределе – бесконечной) скорости уменьшения размера для очень маленьких зерен. Это может приводить к проблемам при автоматическом контроле временного шага, поскольку очевидно, быстрее всего изменяется размер либо самых больших, либо самых маленьких зерен. Временной шаг желательно выбирать таким, чтобы изменения размеров зерен за этот шаг не были слишком резкими. Поэтому выражение для скорости роста зерна лучше использовать в виде, аналогичном (2):

$$\dot{D}_i^2 = 2M \left( \alpha \sigma \left( \frac{D_i}{D_{cr}} - 1 \right) \pm P_Z D_i \right), \quad (29)$$

где знак перед последним слагаемым определяют аналогично (7).

Таким образом, можно предложить следующий алгоритм расчета (для одного временного шага):

1. На основе модели [31, 32] рассчитываются характеристики ансамбля выделений вторых фаз.
2. Методом Ньютона уравнение (28) решается относительно  $D_{cr}$ . При этом  $D_i$  вычисляются с помощью (29) и

$$D_i' = \sqrt{D_i^2 + \dot{D}_i^2 \Delta t}. \quad (30)$$

3. Для найденного  $D_{cr}$  рассчитываются итоговые скорости изменения квадратов размеров зерен (29) и размеры зерен (30).

4. Зерна с отрицательным значением под корнем (30) удаляются, причем это должно быть учтено уже на этапе расчета  $D_{cr}$  в п. 2.

В данном варианте алгоритма все подвижности границ зерен были приняты одинаковыми, в отличие от варианта, рассмотренного выше.

Казалось бы, объем вычислений можно несколько сократить, если условие сохранения объема использовать в виде (4). Однако в этом случае из-за накапливающейся погрешностей машинных вычислений суммарный объем с каждым шагом будет постепенно изменяться.

В качестве начального приближения для нахождения  $D_{cr}$  на первом шаге может служить  $\langle D \rangle$ , а далее – значение, полученное на предыдущем шаге. В этом случае новый  $D_{cr}$  находится буквально за пару итераций метода Ньютона, что обеспечивает приемлемые вычислительные затраты.

## ПАРАМЕТРЫ МОДЕЛИ

Термодинамические параметры и коэффициенты диффузии, необходимые для моделирования поведения карбонитридных выделений, можно найти в [31, 32, 35]. Остальные параметры приведены в табл. 1.

**Таблица 1.** Значения параметров, использованные при моделировании

Переменная	Значение	Источник
$\alpha$	1	[3]
$\beta$	3 (для первого алгоритма)	[36]
$\beta$	9/8 (для второго алгоритма)	[34]
$\eta_{\text{Pinned}}$	0.005	Эта работа
$\sigma$	$1.3111 - 0.0005 T \text{ Дж/м}^2$	[33]
$M$	$120 \cdot \exp\left(-\frac{350000}{RT}\right)$	[20], [37]
$M_{\text{Free}}$	$M$	
$w$	1 (для первого алгоритма)	[36]
$w$	0.93 (для второго алгоритма)	[34]

Параметры  $\beta$  и  $w$  для двух моделей, представленных выше, использованы разные. Их можно было бы взять одинаковыми для обоих случаев. Но часть данных из эксперимента, с которыми выполнялось сравнение в рамках тестирования моделей (см. следующий раздел и [28]), в [18, 19] были не измерены экспериментально, а оценены на основе (10) с параметрами  $\beta = 3$  и  $w = 1$  (точнее, в этих работах приводится значение  $\beta = 12$ , но для  $\alpha = 4$ , а касательно торможения частицами вторых фаз важно именно соотношение  $\beta / \sigma$ ). Первый из предложенных выше методов как раз ближе к этому подходу, поэтому при сравнении с данными из работ [18, 19] и были использованы те же самые параметры, что и там. Второй алгоритм основан на идеях Хиллберта [3], поэтому закономерно использовать предложенные им же в [34] значения  $\beta$  и  $w$  для расчета  $P_z$ .

В [33] предложено значение  $\eta_{\text{Pinned}} = 0.03$ , но ряд расчетов (выполненных не только в рамках данной работы, но и для других условий) показывает завышенный рост заторможенных зерен. Поэтому было использовано значение 0.005, которое показало лучшее согласие при сравнении с [18, 19].

### ТЕСТИРОВАНИЕ МОДЕЛИ

Хотя представленные выше методы моделирования роста зёрен не привязаны к конкретной системе, наши прошлые работы [25–32, 35] ориентированы на стали, легированные V, Nb и Ti. Настоящая работа во многом является логическим продолжением этих исследований, поэтому программная реализация описанных выше

алгоритмов тоже была выполнена применительно к таким сталям.

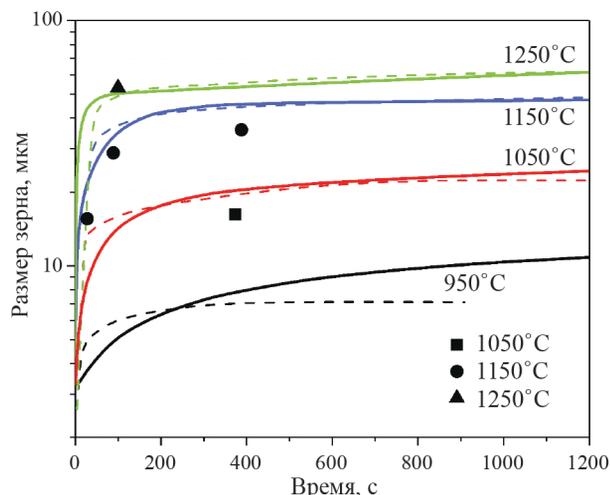
В литературе можно найти несколько работ, где приводятся экспериментальные данные по росту зерен в сталях при термической обработке в условиях наличия сдерживающего фактора со стороны карбонитридных выделений. К сожалению, в большинстве таких работ измерения размеров аустенитного зерна были выполнены для квазистационарного состояния – то есть, для той стадии процесса, когда зерна уже выросли до максимального размера, ограниченного выделениями. Сравнить с данными результатами большого смысла нет, так как для этого случая достаточно расчета на основе простой формулы (10). Однако есть два исследования [18, 19], где размер зерна измерялся в процессе роста. Причем в [18], помимо металлографических измерений, оценка размера зерна проводилась с помощью ультразвука в реальном времени.

Исходный размер зерна и в том и в другом эксперименте составлял примерно 3 мкм. Поскольку в ряде статей (в том числе [3]) отмечается, что распределение зерен по размерам обычно соответствует логнормальному, для моделирования был задан начальный набор размеров зерен с распределением этого вида с параметрами  $\mu = 1.176$  и  $\sigma = 0.392$  [мкм] (здесь  $\mu$  и  $\sigma$  имеют смысл, обычный для формулы, описывающей плотность вероятности логнормального распределения), что и соответствует среднему размеру зерна 3 мкм. Согласно приведенным в [18, 19] результатам, размер зерна в конце обработки приближается к 100 мкм. Исходя из этого, моделируемый объем для второго алгоритма был задан равным 1 мм<sup>3</sup>, при этом начальное число зерен составило около 28 млн.

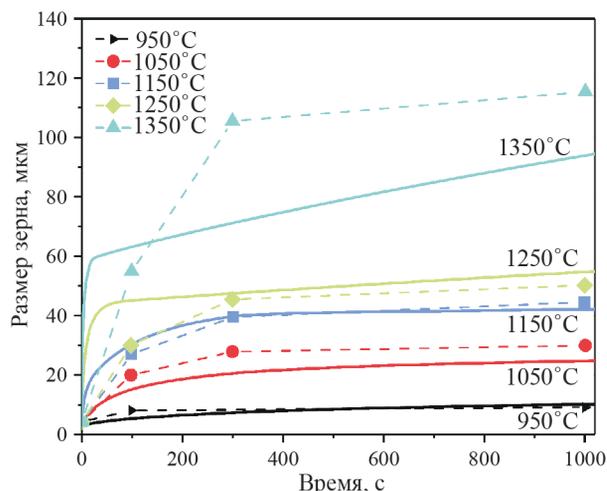
В [18] исследовался рост аустенитного зерна при отжиге стали X80, химический состав которой приведен в табл. 2. Эксперименты были выполнены для температурного диапазона 950–1250°C. В исходном состоянии в исследуемой стали присутствовали две карбонитридные фазы: фаза, близкая по составу к нитриду титана, и фаза, близкая по составу к карбиду ниобия. В качестве начального состояния была задана объемная доля TiN( $f_{\text{TiN}}$ ) 0.00022, распределение – нормальное с параметрами  $\mu = 29.5$  и  $\sigma = 5$  [нм]. Для второй фазы  $f_{\text{NbC}} = 0.00038$ , распределение по размерам – бимодальное, состоящее из суммы двух нормальных: с  $\mu_1 = 3.5$  и  $\sigma_1 = 2$  [нм] и  $\mu_2 = 24$  и

**Таблица 2.** Химический состав стали X80, исследованной в работе [18] (мас. %)

C	Mn	Nb	Ti	N	Mo	Fe
0.06	1.65	0.034	0.012	0.005	0.24	Осн.



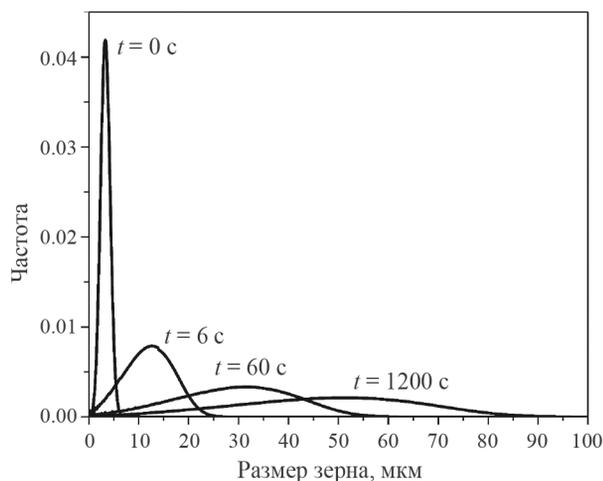
**Рис. 1.** Изменение размера аустенитного зерна в процессе отжига по данным [18]. Символы – экспериментальные данные на основе металлографических измерений; пунтир – результаты ультразвуковых измерений; сплошные линии – результаты моделирования на основе ПТЭ.



**Рис. 2.** Изменение размера аустенитного зерна в процессе отжига по данным [19]. Символы и пунтир – экспериментальные данные; сплошные линии – результаты моделирования на основе ПТЭ.

**Таблица 3.** Химический состав стали X70, исследованной в работе [19] (мас. %)

C	Mn	V	Nb	Ti	N	Mo	Si	Fe
0.0878	1.61	0.0013	0.0363	0.018	0.0038	0.009	0.3035	Осн.



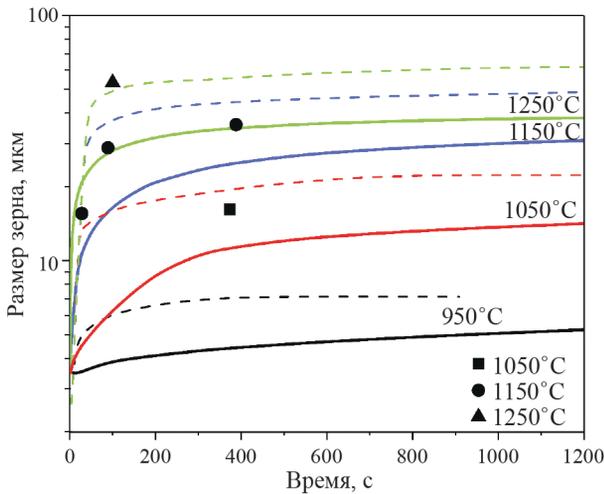
**Рис. 3.** Изменение распределения зерен по размерам в ходе отжига при 1150°C (результаты моделирования на основе ПТЭ, соответствующие данным [18]).

$\sigma_2 = 8$  [нм]. Соотношение мод в объемном выражении составляло 1:2.8. Все эти данные частично получены на основе прямых измерений в [18], частично – на основе некоторой оценки. Мотивация выбора такого исходного состояния изложена в [28].

В [19] исследование роста зерен проводилось для стали X70, химический состав которой пред-

ставлен в табл. 3. Исследования были проведены для температур 950÷1350°C. В исходном состоянии этой стали тоже присутствовали две карбонитридные фазы: фаза, близкая по составу к TiN, и фаза, близкая по составу к NbC. В [19] приводится значение  $f_{\text{TiN}} = 0.00037$ , но это явно какая-то ошибка, поскольку оно значительно превышает максимально возможную долю – 0.000255 – для данного состава сплава. Поэтому  $f_{\text{TiN}}$  была задана равной 0.000255. Параметры распределения по размерам для этой фазы были оценены аналогично тому, как это делалось для [18]. Были заданы значения  $\mu = 29$  и  $\sigma = 5$  [нм]. Для второй фазы:  $f_{\text{NbC}} = 0.00042$ , распределение по размерам – бимодальное, состоящее из суммы двух нормальных: с  $\mu_1 = 3.5$  и  $\sigma_1 = 1.17$  [нм] и  $\mu_2 = 31$  и  $\sigma_2 = 10.3$  [нм]. Соотношение мод в объемном выражении составляло 1.6:2.6 (в соответствии с данными [19]).

Зависимости изменения среднего размера зерна от времени для разных температур, построенные по данным [18] и [19], а также по результатам моделирования на основе ПТЭ (первый алгоритм) приведены на рис. 1, 2. На рис. 3 в качестве примера работы этого же алгоритма показано смоделированное изменение распределения зерен по размерам со временем в ходе выдержки при 1150°C по данным [18].

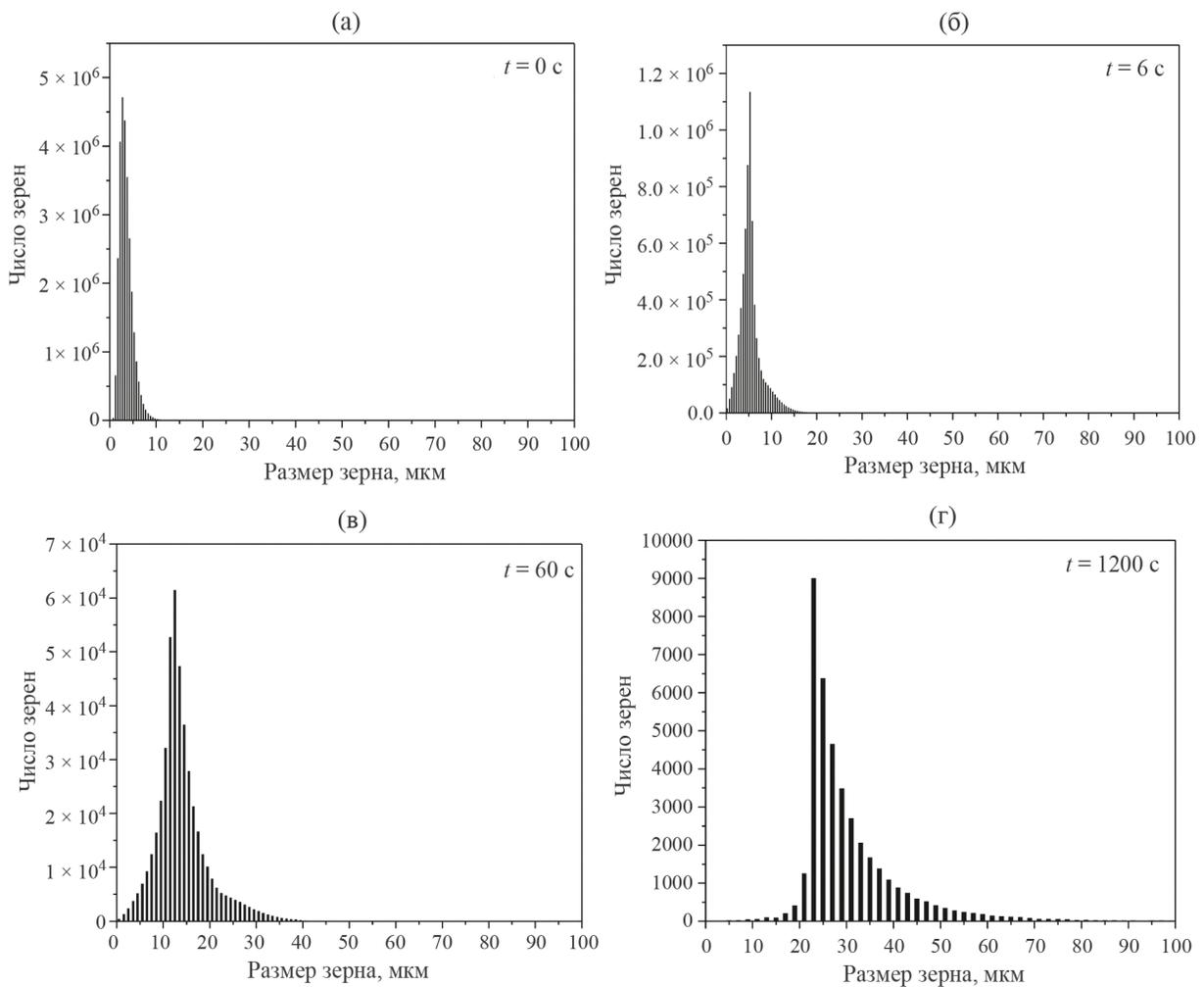


**Рис. 4.** Изменение размера аустенитного зерна в процессе отжига по данным [18]. Символы – экспериментальные данные на основе металлографических измерений; пунктир – результаты ультразвуковых измерений; сплошные линии – результаты моделирования поведения массива отдельных зерен.

Результаты моделирования поведения массива отдельных зерен (второй алгоритм) в сравнении с экспериментом [18] демонстрирует рис. 4, а на рис. 5 на основе этого же алгоритма показано изменение распределения зерен по размерам со временем для тех же условий, что и на рис. 3.

**ОБСУЖДЕНИЕ**

Если обратиться к нашей прошлой работе [28], то видно, что моделирование на основе ПТЭ (рис. 1, 2) показывает примерно такое же согласие с экспериментом, как и расчеты для среднего размера зерна. Но, как уже отмечалось, преимуществом здесь выступает возможность отслеживать изменение распределения зерен по размерам, что и было продемонстрировано на рис. 3. На этом примере, в частности, можно увидеть, что, хотя средний размер зерен к концу обработки приближается к 50 мкм, в распределении есть и зерна в 2 раза больше. Это вполне нормально для стадии собирательной рекри-



**Рис. 5.** Изменение распределения зерен по размерам в ходе отжига при 1150°C (результаты моделирования для массива отдельных зерен, соответствующие данным [18]).

## ВЫВОДЫ

сталлизации, — когда среди зерен есть те, которые в два и более раза крупнее среднего размера. Но, судя по графику на рис. 1, эволюцию размеров зерен после выдержки  $\sim 500$  с уже трудно отнести к собирательной рекристаллизации, так как средний размер зерен меняется мало. Поскольку в предложенном алгоритме принято, что по достижению ансамблем зерен максимального критического размера зерна

$$D_{cr}^{\max} = \frac{\alpha}{\beta} \left[ \sum_i \left( \frac{f_i^w}{r_i} \right) \right]^{-1}, \quad (31)$$

подвижность границ зерен становится маленькой, но ненулевой, изменение размеров зерен продолжится. Таким образом, можно сказать, что это соответствует вторичной рекристаллизации — когда увеличение среднего размера зерен прекращается, но отдельные крупные зерна продолжают расти.

Из рис. 4 видно, что, вроде бы, алгоритм для описания поведения массива отдельных зерен показывает заметно худшее согласие с экспериментом, чем алгоритм на основе ПТЭ, — он предсказывает почти в два раза меньший максимальный размер зерна, чем это наблюдается в эксперименте. Однако нельзя не учитывать, что средний размер частиц TiN в [18] был определен не на основе прямых измерений, а исходя из оценки по (31) для температуры отжига 1250°C (когда все частицы NbC заведомо растворяются). Для предложенного здесь алгоритма тоже можно было бы аналогичным образом подобрать средний радиус частиц TiN, достигнув очень хорошего согласия с экспериментом. В то же время видно, что на качественном уровне модель демонстрирует вполне адекватные результаты.

Можно также отметить, что данная модель естественным образом описывает вторичную рекристаллизацию — если исходно были крупные зерна, или же какие-то из зерен успели вырасти до достаточно больших размеров до того, как ансамбль в целом дорос до критического среднего размера, то такие зерна будут способны преодолеть тормозящую силу со стороны выделений и продолжат рост. Это можно наблюдать на гистограммах, приведенных на рис. 5, к концу обработки среди зерен есть такие, которые более чем в 2–3 раза больше среднего размера. Эти результаты вполне согласуются с анализом, сделанным в [3].

Видно, что распределения, которые получаются в ходе расчетов на основе двух алгоритмов, заметно отличаются друг от друга. Трудно сказать, что лучше соответствует экспериментальной картине, так как гистограммы распределения зерен по размерам в [18, 19] не приводятся.

Предложено два метода моделирования роста ансамбля зерен с учетом тормозящего влияния частиц вторых фаз. Каждый из них имеет свои сильные и слабые стороны. Так, алгоритм расчетов на основе ПТЭ, с одной стороны, отличается относительно низкими вычислительными затратами, с другой стороны, его недостатком является учет сдерживающей силы со стороны выделений не для каждого размерного класса зерен, а только для среднего размера зерна. Алгоритм для моделирования роста отдельных зерен, наоборот, довольно ресурсоемкий, зато он более естественным образом описывает поведение каждого зерна, что создает хорошие возможности для создания более сложных моделей на его основе.

С учетом отношения реалистичности модели к вычислительным затратам оба алгоритма могут занять свою нишу между методами на основе расчетов для среднего размера зерна и алгоритмами, основанными на методе клеточных автоматов и фазовых полей.

Оба подхода можно использовать в качестве основы для развития более реалистичных моделей. Так, например, при построении более сложных моделей можно было бы учесть:

- зависимость энергии границ зерен от состава сплава (твердого раствора)
- уменьшение подвижности границы зерна за счёт сегрегации примесных атомов

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 22-29-01106).

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Harker D., Parker E.R.* Grain shape and grain growth // Trans. American Soc. Metals. 1945. V. 34. P. 156–195.
2. *Burke J.E.* Some factors affecting the rate of grain growth in metals // AIME Trans. 1949. V. 180. P. 73–91.
3. *Hillert M.* On the theory of normal and abnormal grain growth // Acta Metal. 1965. V. 13. № 3. P. 227–238. [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(65\)90200-2](https://doi.org/10.1016/0001-6160(65)90200-2)
4. *Maire L., Scholtes B., Moussa C., Bozzolo N., Muñoz D.P., Bernacki M.* Improvement of 3D mean field models for capillarity-driven grain growth based on full field simulations // J. Mar. Sci. 2016. V. 51. № 24. P. 10970–10981. <https://doi.org/10.1007/s10853-016-0309-6>
5. *Miyoshi E., Takaki T., Ohno M., Shibuta Y., Sakane S., Shimokawabe T., Aoki T.* Ultra-large-scale phase-field simulation study of ideal grain growth // npj Computational Materials. 2017. V. 3. № 1. P. 25. <https://doi.org/10.1038/s41524-017-0029-8>

6. *Rios P.R., Dalpian T.G., Brandão V.S., Castro J.A., Oliveira A.C.L.* Comparison of analytical grain size distributions with three-dimensional computer simulations and experimental data // *Scripta Mater.* 2006. V. 54. № 9. P. 1633–1637. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2006.01.007>
7. *Svoboda J., Zickler G.A., Kozeschnik E., Fischer F.D.* Generalization of classical Hillert's grain growth and LSW theories to a wide family of kinetic evolution equations and stationary distribution functions // *Acta Mater.* 2022. V. 235. P. 118085. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2022.118085>
8. *Lifshitz I.M., Slyozov V.V.* The kinetics of precipitation from supersaturated solid solutions // *J. Phys. Chem. Solids.* 1961. V. 19. № 1–2. P. 35–50. [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(61\)90054-3](https://doi.org/10.1016/0022-3697(61)90054-3)
9. *Liu Y., Baudin T., Penelle R.* Simulation of normal grain growth by cellular automata // *Scripta Mater.* 1996. V. 34. № 11. P. 1679–1683. [https://doi.org/10.1016/1359-6462\(96\)00055-3](https://doi.org/10.1016/1359-6462(96)00055-3)
10. *Raghavan S., Sahay Satyam S.* Modeling the grain growth kinetics by cellular automaton // *Mater. Sci. Eng.: A.* 2007. V. 445–446. P. 203–209. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2006.09.023>
11. *Sieradzki L., Madej L.* A perceptive comparison of the cellular automata and Monte Carlo techniques in application to static recrystallization modeling in polycrystalline materials // *Comp. Mater. Sci.* 2013. V. 67. P. 156–173. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2012.08.047>
12. *Ogawa J., Natsume Y.* Three-dimensional large-scale grain growth simulation using a cellular automaton model // *Comp. Mater. Sci.* 2021. V. 199. 110729. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110729>
13. *Fischer F.D., Svoboda J., Fratzl P.* A thermodynamic approach to grain growth and coarsening // *Philosoph. Magazine.* 2003. V. 83. № 9. P. 1075–1093. <https://doi.org/10.1080/0141861031000068966>
14. *Onsager L.* Reciprocal relations in irreversible processes. I // *Phys. Rev.* 1931. V. 37. № 4. P. 405–426. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.37.405>
15. *Onsager L.* Reciprocal relations in irreversible processes. II // *Phys. Rev.* 1931. V. 38. № 12. P. 2265–2279. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.38.2265>
16. *Svoboda J., Fischer F.D.* Abnormal grain growth: a non-equilibrium thermodynamic model for multi-grain binary systems // *Model. Simulation Mater. Sci. Eng.* 2013. V. 22. № 1. P. 015013. <https://dx.doi.org/10.1088/0965-0393/22/1/015013>
17. *Zener C.* цитируется по Gladman T. On the theory of the effect of precipitate particles on grain growth in metals // *Proc. R. Soc. Lond. A.* 1966. V. 294. P. 298–309. <https://doi.org/10.1098/rspa.1966.0208>
18. *Maalekian M., Radis R., Militzer M., Moreau A., Poole W.J.* In situ measurement and modelling of austenite grain growth in a Ti/Nb microalloyed steel // *Acta Mater.* 2012. V. 60. P. 1015–1026. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2011.11.016>
19. *Khalaj G., Yoozbashizadeh H., Khodabandeh A., Tamizifar M.* Austenite grain growth modelling in weld heat affected zone of Nb/Ti microalloyed linepipe Steel // *Mater. Sci. Techn.* 2014. V. 30. № 2. P. 424–433. <https://doi.org/10.1179/1743284713Y.0000000364>
20. *Banerjee K., Militzer M., Perez M., Wang X.* Nonisothermal austenite grain growth kinetics in a microalloyed X80 linepipe steel // *Metal. Mater. Trans. A.* 2010. V. 41A. № 12. P. 3161–3172. <https://doi.org/10.1007/s11661-010-0376-2>
21. *Dépinoy S., Marini B., Toffolon-Masclat C., Roch F., Gourgues-Lorenzon A.-F.* Austenite grain growth in a 2.25Cr-1Mo vanadium-free steel accounting for Zener pinning and solute drag: experimental study and modeling // *Metal. Mater. Trans. A.* 2017. V. 48. № 5. P. 2289–2300. <https://doi.org/10.1007/s11661-017-4002-4>
22. *Sandström R., Lagneborg R.* A model for hot working occurring by recrystallization // *Acta Metall.* 1975. V. 23. P. 387–398. [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(75\)90132-7](https://doi.org/10.1016/0001-6160(75)90132-7)
23. *Roucoules C., Pietrzyk M., Hodgson P.D.* Analysis of work hardening and recrystallization during the hot working of steel using a statistically based internal variable model // *Mater. Sci. Eng. A.* 2003. V. 339. № 1–2. P. 1–9. [https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(02\)00120-X](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(02)00120-X)
24. *Rath M., Kozeschnik E.* Coupled grain growth and precipitation modeling in multi-phase systems // *Mater. Sci. Forum.* 2013. V. 753. P. 357–360. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/MSF.753.357>
25. *Горбачёв И.И., Пасынков А.Ю., Попов В.В.* Прогнозирование размера аустенитного зерна микролегированных сталей на основе моделирования эволюции карбонитридных выделений // *ФММ.* 2015. Т. 116. № 11. С. 1184–1191. <https://doi.org/10.1134/S0031918X1511006X>
26. *Горбачев И.И., Пасынков А.Ю., Попов В.В.* Моделирование влияния горячей деформации на размер аустенитного зерна низколегированных сталей с карбонитридным упрочнением // *ФММ.* 2018. Т. 119. № 6. С. 582–589. <https://doi.org/10.1134/S0031918X18060078>
27. *Горбачев И.И., Пасынков А.Ю., Попов В.В.* Моделирование эволюции карбонитридных частиц сложного состава при горячей деформации низколегированной стали // *Физика металлов и металловедение.* 2018. Т. 119. № 8. С. 817–826. <https://doi.org/10.1134/S0031918X18080021>
28. *Горбачев И.И., Корзунова Е.И., Попов В.В., Хабидулин Д.М., Урцев Н.В.* Моделирование роста аустенитного зерна в низколегированных сталях при аустенитизации // *ФММ.* 2023. Т. 124. № 3. С. 303–309. <https://doi.org/10.1134/S0031918X23600100>
29. *Горбачев И.И., Корзунова Е.И., Попов В.В., Хабидулин Д.М., Урцев Н.В.* Модель для прогнозирования размера аустенитного зерна при горячей деформации низколегированных сталей с учётом эволюции дислокационной структуры // *ФММ.* 2023. Т. 124. № 12. С. 1244–1252.

30. Горбачев И.И., Корзунова Е.И., Попов В.В., Хабибуллин Д.М., Урицев Н.В. Моделирование эволюции фазового состава и размера аустенитного зерна при многопроходной горячей деформации низколегированных сталей // ФММ. 2024. Т. 125. № 3. С. 293–305.
31. Горбачев И.И., Попов В.В., Пасынков А.Ю. Моделирование эволюции выделений двух карбонитридных фаз в сталях с Nb и Ti при изотермическом отжиге // ФММ. 2013. Т. 114. № 9. С. 807–817. <https://doi.org/10.1134/S0031918X13090068>
32. Popov V.V., Gorbachev I.I., Pasyнков A. Yu. Simulation of precipitates evolution in multiphase multicomponent systems with consideration of nucleation // Philosoph. Magazine. 2016. V. 96. № 35. P. 3632–3653. <https://doi.org/10.1080/14786435.2016.1232867>
33. Buken H., Kozeschnik E. A model for static recrystallization with simultaneous precipitation and solute drag // Metal. Mater. Trans. A. 2017. V. 48. P. 2812–2818. <https://doi.org/10.1007/s11661-016-3524-5>
34. Hillert M. Inhibition of grain growth by second-phase particles // Acta Metal. 1988. V. 36. № 12. P. 3177–3181. [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(88\)90053-3](https://doi.org/10.1016/0001-6160(88)90053-3)
35. Горбачев И.И., Попов В.В., Пасынков А.Ю. Термодинамическое моделирование карбонитридообразования в сталях с Nb и Ti // ФММ. 2012. Т. 113. № 7. С. 727–735. <https://doi.org/10.1134/S0031918X1207006X>
36. Rios P.R. Overview no. 62: A theory for grain boundary pinning by particles // Acta Metal. 1987. V. 35. № 12. P. 2805–2814. [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(87\)90280-X](https://doi.org/10.1016/0001-6160(87)90280-X)
37. Uhm S., Moon J., Lee Ch., Yoon J., Lee B. Prediction model for the austenite grain size in the coarse grained heat affected zone of Fe–C–Mn steels: Considering the effect of initial grain size on isothermal growth behavior // ISIJ International. 2004. V. 44. № 7. P. 1230–1237. <https://doi.org/10.2355/isijinternational.44.1230>

## SIMULATION OF THE GROWTH OF AN ENSEMBLE OF AUSTENITE GRAINS CONSIDERING THE INHIBITION BY PARTICLES OF THE SECOND PHASES

**I. I. Gorbachev\***

*Miheev Institute of Metal Physics, Ural Branch, Russian Academy, Sciences, Ekaterinburg, 620108 Russia*

*\*e-mail: gorbachev@imp.uran.ru*

Methods to simulate the grain growth in alloys considering the inhibition of this growth by second-phases particles have been proposed. The presented approaches are primarily focused on low-alloyed steels with carbonitride strengthening. The calculation results have been compared with the experimental data available in the literature and their satisfactory agreement has been shown.

*Keywords:* simulation, grain growth, second-phases precipitates, low-alloyed steels