

DOI: 10.34185/1991-7848.2022.01.03

УДК 004.942:536.24:66.021.3:517.982:515.127

Т.В. Селівьорстова, В.Ю. Селівьорстов, Л.Х. Іванова

МАТЕМАТИЧНІ ОСНОВИ ФРАКТАЛЬНОГО ТЕПЛО І МАСОПЕРЕНОСУ В ДВОХФАЗНІЙ ЗОНІ РОЗПЛАВУ МЕТАЛУ

***Анотація.** В статті наведені результати аналізу процесів переносу в розплаві. Представлені результати експериментальних досліджень, що свідчать про фрактальний характер затвердіння притаманній більшості ливарних сплавів. Наведений математичний апарат опису процесу затвердіння з позиції тепло та масопереносу в двофазній зоні та дифузії у фрактальних середовищах. Показано, що математичний апарат дробового обчислення дозволяє ефективно описувати фрактальний характер дифузійних процесів.*

***Ключові слова:** тепло, маса, дифузія, фрактал, модель, розплав, затвердіння, двофазна зона.*

Вступ

Проблема вдосконалення прогресивних та створення нових технологій у металургії та ливарному виробництві є актуальною для отримання якісного литого металу і виливків. Вирішенню цієї проблеми сприяє розробка методик визначення температурних полів у процесі затвердіння виливків для отримання практичних рекомендацій щодо управління структурою та властивостями литого металу [1]. Мікроскопічні та макроскопічні властивості темплетів виливків істотно залежать від теплофізичних параметрів системи виливок та ливарна форма, а саме, ширини двофазної зони затвердіння розплаву, початкової температури розплаву, швидкості охолодження виливка, градієнту охолодження розплаву, температури на поверхні ливарної форми [2]. З метою отримання дрібнокристалічної структури металу, зокрема, можливо застосовувати технологію легування [3] або, наприклад, газодинамічного впливу на розплав в ливарній формі [4]. В роботі [5] наведені результати експериментальних досліджень, які свідчать про фрактальний характер структуроутворення в двофазній зоні металевого розплаву, що твердіє.

Аналіз моделей тепло і масопереносу в двофазній зоні розплаву металу

В роботах [6, 7] наведена термодинамічної постановка задачі нестационарного затвердіння бінарних систем. Розглянемо затвердіння бінарної суміші вздовж просторової осі z (рисунок 1).

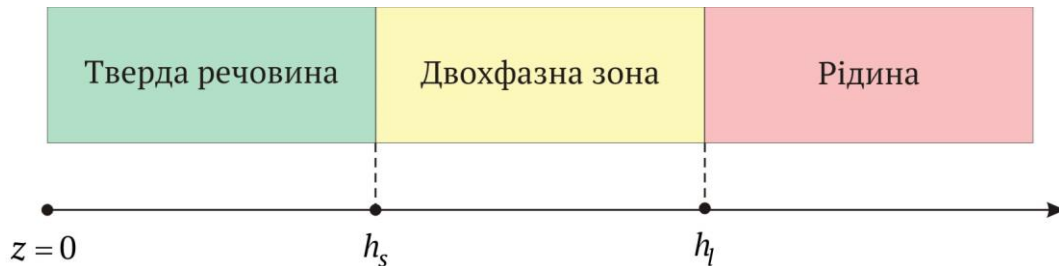


Рисунок 1 – Схематичне представлення компонентів суміші

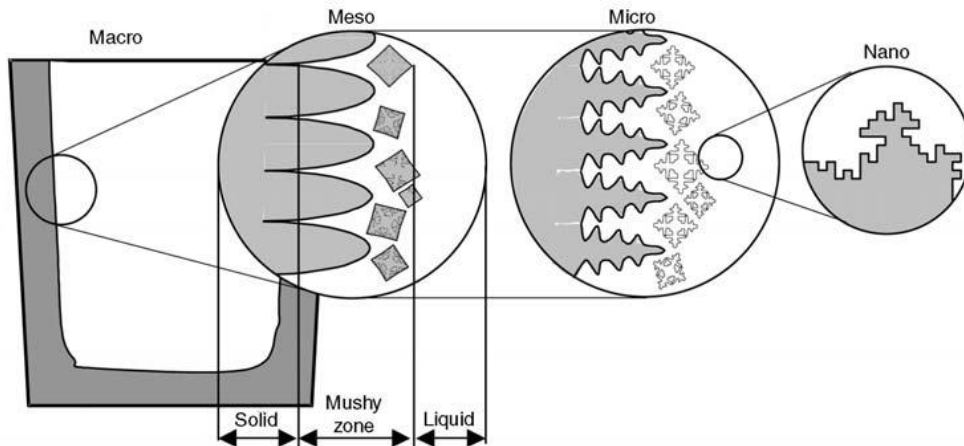


Рисунок 2 – Шкала зон затвердіння [8]

На границі $z = 0$, системи що розглядається підтримується постійна температура $T_{const} = T_B$. Границя h_l розділяє рідину і двофазну зону, h_s між двоїфазною зоною і твердою речовиною. Індокси l , m , s позначають відповідно значення в рідкій, двофазній зоні та твердій фазі.

Температурне поле T в твердій фазі задовольняє рівнянню переносу тепла

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = \kappa_s \frac{\partial^2 T_s}{\partial z^2}, \quad 0 < z < h_s(t), \quad (1)$$

де t – час, κ_s – коефіцієнт температуропровідності.

Рівняння тепло і масопереносу в двофазній зоні без врахування дифузії в твердій фазі має вигляд:

$$\rho_m \frac{\partial T_m}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(k_m \frac{\partial T_m}{\partial z} \right) + \rho_s L \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad h_s(t) \leq z < h_l(t), \quad (2)$$

$$\chi \frac{\partial C_m}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_l \chi \frac{\partial C_m}{\partial z} \right) + (1-k) C_m \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad h_s(t) \leq z < h_l(t), \quad (3)$$

$$T_m = T_* - \Gamma C_m, \quad h_s(t) \leq z < h_l(t), \quad (4)$$

де ρ_m та ρ_s – щільності, C_m – теплоємність, k_m – коефіцієнт теплопровідності, L – прихована теплота затвердіння, D_l – коефіцієнт дифузії, k – коефіцієнт розподілу домішки, T_* – температура фазового перетворення речовини, Γ – нахил лінії ліквідус, φ та $\chi = 1 - \varphi$ – частка твердої та рідкої фаз, відповідно.

Процеси тепло та масопереносу в рідкій фазі описується наступними рівняннями:

$$\frac{\partial T_l}{\partial t} = \kappa_l \frac{\partial^2 T_l}{\partial z^2}, \quad z > h_l(t), \quad (5)$$

$$\frac{\partial C_l}{\partial t} = D_l \frac{\partial^2 C_l}{\partial z^2}, \quad z > h_l(t). \quad (6)$$

Граничні умови на границях h_s та h_l мають вигляд:

$$\rho_s L \chi_a \frac{dh_s}{dt} = k_s \left(\frac{\partial T_s}{\partial z} \right) \Big|_{h_s^-} - k_m \left(\frac{\partial T_m}{\partial z} \right) \Big|_{h_s^+}, \quad z = h_s(t), \quad (7)$$

$$(1-k) C_m \chi_a \frac{dh_s}{dt} = -D_l \chi_a \left(\frac{\partial C_m}{\partial z} \right) \Big|_{h_s^-}, \quad z = h_s(t), \quad (8)$$

$$\rho_s L (1 - \chi_b) \frac{dh_l}{dt} = k_m \left(\frac{\partial T_m}{\partial z} \right) \Big|_{h_l^-} - k_l \left(\frac{\partial T_l}{\partial z} \right) \Big|_{h_l^+}, \quad z = h_l(t), \quad (9)$$

$$(1-k) C_m \varphi_b \frac{dh_l}{dt} = D_l \chi_b \left(\frac{\partial C_m}{\partial z} \right) \Big|_{h_l^-} - D_l \left(\frac{\partial C_l}{\partial z} \right) \Big|_{h_l^+}, \quad z = h_l(t), \quad (10)$$

$$\left(\frac{\partial T_l}{\partial z} \right) \Big|_{h_l^+} = -\Gamma \left(\frac{\partial C_l}{\partial z} \right) \Big|_{h_l^+}, \quad z = h_l(t). \quad (11)$$

Значення кількості рідкої фази $\chi_b(\varphi_b)$ на границі h_l та кількості твердої фази $\chi_a(\varphi_a)$ на границі h_s є розв'язком задачі [9]. Аналітичний розв'язок для наведеної вище постановки задачі твердіння неведених в роботах [10, 11].

Зважаючи на значний розвиток питань пов’язаних з твердінням двохфазної зони, слід зазначити що дана постановка не враховує питання фрактального тепло і масопереносу на границі затвердіння розплаву металу.

Метою статті є аналіз процесів термо та масопереносу, що властиві розплаву металу, який перебуває в рідко-твєдому стані, та їхній опис із застосуванням математичного апарату дробового обчислення.

Особливості математичних моделей фрактального тепло і масопереносу в двохфазній зоні розплаву металу

Дендритна кристалізація один із найпоширеніших видів затвердіння металів і сплавів [12, 13] (рисунок 2, 3). В роботах [14 – 16] для опису процесів в фрактальних середовищах рівняння переносу набуває вигляд:

$$a_2 D_{0t}^\alpha u(x,t) = -\frac{\partial q(x,t)}{\partial x}, \quad (12)$$

де a_2 та α – додатні величини, які залежать від структури хаусдорфової розмірності фрактального середовища, D_{0t}^α – оператор дробового диференціювання по t порядку α з початком в початковий момент часу $t=0$, $u(x,t)$ – дифузія, $q(x,t)$ – тепловий потік, $a \leq x \leq b$ – одновимірне фрактальне середовище, $t \in [0, T]$ – розрахунковий час.

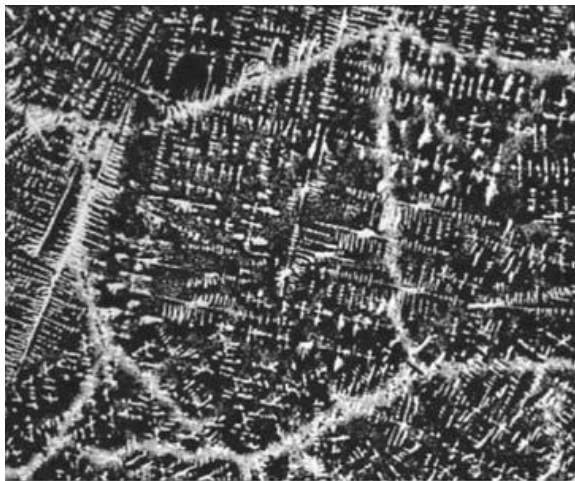


Рисунок 2 – Структура литого алюмінієво-кремнієвого сплаву [12]

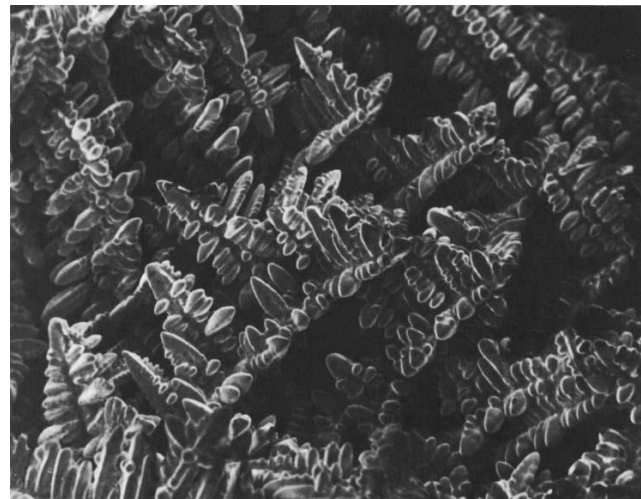


Рисунок 3 – Електронна мікрофотографія центру литого злитка низьковуглецевої сталі з дендритними шипами [13]

З врахуванням закону Фіка (13) рівняння (12) набуває вигляд (14), (15):

$$q(x,t) = -\alpha_1 \frac{\partial u}{\partial x}, \quad \alpha_1 = \text{const} > 0, \quad (13)$$

$$a_2 D_{0t}^\alpha u(x,t) = a_1 \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}, \quad (14)$$

$$D_{0t}^\alpha u(x,t) = D_a \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}, \quad (15)$$

де $D_a = a_1/a_2 > 0$.

Вважається припустимим, що в середовищах із фрактальною геометрією порушується закон (13), тоді замість (13) можливо розглядати рівняння вигляду

$$q(x,t) = -\alpha_1 \frac{\partial u}{\partial x} + b_1(t) \int_a^x u(\xi,0) d\xi + b_2(t) \int_x^b u(\xi,0) d\xi, \quad (16)$$

де $b_1(t)$ та $b_2(t)$ – характеристики середовища та процесу переносу, ξ – координата поточної точки.

Припущення (14) та (16) призводять до розгляду навантаженого рівняння переносу

$$D_{0t}^\alpha u(x,\eta) = a_{12} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b_{12}(t) u(x,0), \quad (17)$$

де $a_{12} = a_1/a_2$, $b_{12}(t) = (b_1(t) - b_2(t))/a_2$.

Рівняння (12) відноситься до класу математичних моделей

$$A_0 D_{0t}^\alpha u(x,\eta) + \sum_{k=1}^m A_k D_{0t}^{\alpha_k} u(x_k,\eta) = -D_{ax}^\beta q(\xi,t) \quad (18)$$

з потоком

$$q(x,t) = -B_0 D_{ax}^{\beta_0} u(\xi,t) - \sum_{k=1}^n B_k D_{ax}^{\beta_k} u(\xi,t_k), \quad (19)$$

де A_k , B_k , α , α_k , β , β_k , a – характеристики фрактального середовища, $a \leq x_1 < x_2 < \dots < x_m$, $0 \leq t_1 < t_2 < \dots < t_n$.

Рівняння переносу в середовищах із фрактальною часовою та просторовою структурою набувають вигляд

$$A_0 D_{0t}^\alpha u(x, \tau) - D_{ax}^\beta B_0 D_{a\xi}^{\beta_0} u(\xi_1, t) = \sum_{k=1}^n D_{ax}^\beta B_k D_{a\xi}^{\beta_k} u(\xi_1, t_k) - \sum_{k=1}^n B_k D_{ax}^{\beta_k} u(\xi, t_k), \quad (20)$$

Якщо $0 < \beta_k < 1$, $B_k = B_k(t)$, $D_{ax}^{\beta_k-1} u(\xi, t) = 0$ при $x = a$ для будь-якого $k = 0, 1, 2, \dots, n$ та $t \geq 0$, то рівняння (20) перетворюється на навантажене диференціальне рівняння переносу дробового порядку

$$A_0 D_{0t}^\alpha u(x, \tau) - B_0 D_{ax}^{\delta_0} u(\xi, t) = \sum_{k=1}^n B_k D_{ax}^{\delta_k} u(\xi, t_k) - \sum_{k=1}^n A_k D_{at}^{\alpha_k} u(x_k, \eta), \quad (21)$$

де $\delta_k = \beta + \beta_k$.

Таким чином, дифузійно-релаксаційні процеси в середовищах з фрактальною геометрією для одновимірного випадку можуть бути описані рівнянням

$$D_{0t}^\alpha u(x, \eta) = B_\beta D_{0x}^\beta u(\xi, t) + c(x, t) u(x, t), \quad (22)$$

де $B_\beta = \text{const} > 0$, $c(x, t) = -\tau^{-\beta/2}$, $0 < \alpha \leq 1$, $1 < \beta \leq 2$ або безперервним диференціальним рівнянням осередненим по α та β

$$\int_0^1 D_{0t}^\alpha u(x, \eta) d\alpha = \int_1^2 B_\beta D_{0x}^\beta u(\xi, t) d\beta + c(x, t) u(x, t). \quad (23)$$

ВИСНОВКИ

В роботі наведені результати аналізу процесів переносу в розплаві, що перебуває в процесі затвердіння, встановлений фрактальний характер дифузійних процесів, наведені математичні основи дробового обчислення, яке застосовується для більш коректного опису дифузійних процесів у фрактальних середовищах.

ЛІТЕРАТУРА

1. Соколовская, Л. (2013). О выборе рациональных тепловых режимов отливки стальных слитков с дробью. *Металл и литье украины*, 9(244), 32–35.
2. Bohacek, J., Kharicha, A., Ludwig, A., Wu, M., & Karimi-Sibaki, E. (2018). Heat transfer coefficient at cast-mold interface during centrifugal casting: Calculation of Air Gap. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 49(3), 1421–1433. <https://doi.org/10.1007/s11663-018-1220-0>
3. Dotsenko, Y., Dotsenko, N., Tkachyna, Y., Fedorenko, V., & Tsybulskyi, Y. (2018). Operation optimization of holding furnaces in special casting shops. *Technology Audit and Production Reserves*, 6(1(44)), 18–22. <https://doi.org/10.15587/2312-8372.2018.150585>

4. Селівьорстов, В.Ю., Доценко, Ю.В., Хричиков, В.Є., Носко, О.А., & Куцова, В.З. (2010). Особливості газодинамічного впливу на структуроутворення литої інструментальної штампової сталі. Вісник Національного технічного університету «ХПІ». Серія: Нові рішення у сучасних технологіях, 1(57), 59–67. Вилучено із <http://vestnik2079-5459.khpi.edu.ua/article/view/46636>
5. Иванова, В. С., Баланкин, А. С., Бунин, И. Ж., & Оксогоев, А. А. (1994). Синергетика и фракталы в материаловедении. М.: Наука.
6. Hills, R. N., Loper, D. E., & Roberts, P. H. (1983). A thermodynamically consistent model of a mushy zone. *The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, 36(4), 505–540. <https://doi.org/10.1093/qjmath/36.4.505>
7. Furmański, P. (2000). Modeling of transport phenomena during solidification of binary systems. *Computer Assisted Mechanics and Engineering Sciences*, 7(3), 391-402.
8. Stefanescu, D. M. (n.d.). Numerical macro-modeling of solidification. *Science and Engineering of Casting Solidification, Second Edition*, 1–30. https://doi.org/10.1007/978-0-387-74612-8_6
9. Worster, M. G. (1986). Solidification of an alloy from a cooled boundary. *Journal of Fluid Mechanics*, 167(-1), 481. <https://doi.org/10.1017/s0022112086002938>
- 10.10. Alexandrov, D. V., Nizovtseva, I. G., Malygin, A. P., Huang, H.-N., & Lee, D. (2008). Unidirectional solidification of binary melts from a cooled boundary: Analytical solutions of a nonlinear diffusion-limited problem. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 20(11), 114105. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/20/11/114105>
11. Alexandrov, D. V., Alexandrova, I. V., & Ivanov, A. A. (2017). The role of nonlinear mass transport on directional crystallization with a mushy layer. *AIP Conference Proceedings*. <https://doi.org/10.1063/1.5012481>
12. Stefanescu, D. M., & Ruxanda, R. (2004). Fundamentals of Solidification. *Metallography and Microstructures*, 71–92. <https://doi.org/10.31399/asm.hb.v09.a0003724>
13. Stefanescu, D. M., & Ruxanda, R. (2004). Solidification structures of steels and cast irons. *Metallography and Microstructures*, 97–106. <https://doi.org/10.31399/asm.hb.v09.a0003725>
14. Нахушев, А.М. (2003). Дробное исчисление и его применение. М.: Физматлит.
15. Beybalayev, V. D. (2010). Mathematical model of heat transfer in fractal structure mediums. *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2(1), 91–97. <https://doi.org/10.1134/s2070048210010096>
16. Kovalenko, A. N., Zarichnyak, Y. P., Ivanov, V. A., & Bolshev, K. N. (2021). Fractal characterization of heat and mass transfer processes in nanostructured materials. Paper presented at the *Journal of Physics: Conference Series*, , 2096(1) doi:10.1088/1742-6596/2096/1/012168

REFERENCES

1. Sokolovskaya, L. (2013). On the choice of rational thermal regimes for casting steel ingots with shot. *Metal and casting of Ukraine*, 9(244), 32–35.
2. Bohacek, J., Kharicha, A., Ludwig, A., Wu, M., & Karimi-Sibaki, E. (2018). Heat transfer coefficient at cast-mold interface during centrifugal casting: Calculation of Air Gap. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 49(3), 1421–1433. <https://doi.org/10.1007/s11663-018-1220-0>
3. Dotsenko, Y., Dotsenko, N., Tkachyna, Y., Fedorenko, V., & Tsybul'skyi, Y. (2018). Operation optimization of holding furnaces in special casting shops. *Technology Audit and Production Reserves*, 6(1(44)), 18–22. <https://doi.org/10.15587/2312-8372.2018.150585>
4. Selivorstov, V.Iu., Dotsenko, Yu.V., Khrych'kov, V.Ie., Nosko, O.A., & Kutsova, V.Z. (2010). Osoblyvosti hazodynamichnoho vplyvu na strukturoutvorennia lytoi instrumentalnoi shtampovoi stali. *Visnyk Natsionalnoho tekhnichnoho universytetu «KhPI»*. Serii: Novi rishennia u suchasnykh tekhnolohiiakh, 1(57), 59–67. Vylucheno iz <http://vestnik2079-5459.khpi.edu.ua/article/view/46636>
5. Ivanova, V. S., Balankin, A. S., Bunin, I. Zh., & Oksogoev, A. A. (1994). *Synergetics and fractals in materials science*. M.: Science.
6. Hills, R. N., Loper, D. E., & Roberts, P. H. (1983). A thermodynamically consistent model of a mushy zone. *The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, 36(4), 505–540. <https://doi.org/10.1093/qjmam/36.4.505>
7. Furmański, P. (2000). Modeling of transport phenomena during solidification of binary systems. *Computer Assisted Mechanics and Engineering Sciences*, 7(3), 391–402.
8. Stefanescu, D. M. (n.d.). Numerical macro-modeling of solidification. *Science and Engineering of Casting Solidification*, Second Edition, 1–30. https://doi.org/10.1007/978-0-387-74612-8_6
9. Worster, M. G. (1986). Solidification of an alloy from a cooled boundary. *Journal of Fluid Mechanics*, 167(-1), 481. <https://doi.org/10.1017/s0022112086002938>
10. Alexandrov, D. V., Nizovtseva, I. G., Malygin, A. P., Huang, H.-N., & Lee, D. (2008). Unidirectional solidification of binary melts from a cooled boundary: Analytical solutions of a nonlinear diffusion-limited problem. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 20(11), 114105. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/20/11/114105>
11. Alexandrov, D. V., Alexandrova, I. V., & Ivanov, A. A. (2017). The role of nonlinear mass transport on directional crystallization with a mushy layer. *AIP Conference Proceedings*. <https://doi.org/10.1063/1.5012481>
12. Stefanescu, D. M., & Ruxanda, R. (2004). Fundamentals of Solidification. *Metallography and Microstructures*, 71–92. <https://doi.org/10.31399/asm.hb.v09.a0003724>
13. Stefanescu, D. M., & Ruxanda, R. (2004). Solidification structures of steels and cast irons. *Metallography and Microstructures*, 97–106. <https://doi.org/10.31399/asm.hb.v09.a0003725>
14. Nakhush'ev, A.M. (2003). *Fractional calculus and its application*. Moscow: Fizmatlit.

15. Beybalayev, V. D. (2010). Mathematical model of heat transfer in fractal structure mediums. *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2(1), 91–97. <https://doi.org/10.1134/s2070048210010096>
16. Kovalenko, A. N., Zarichnyak, Y. P., Ivanov, V. A., & Bolshev, K. N. (2021). Fractal characterization of heat and mass transfer processes in nanostructured materials. Paper presented at the *Journal of Physics: Conference Series*, , 2096(1) doi:10.1088/1742-6596/2096/1/012168

Received 15.12.2022.

Accepted 27.12.2022.

UDC 004.942:536.24:66.021.3:517.982:515.127

T. Selivyorstova, V. Selivyorstov, L. Yvanova

MATHEMATICAL FOUNDATIONS OF FRACTAL HEAT AND MASS TRANSFER IN THE TWO-PHASE ZONE OF THE METAL MELT

The problem of improving progressive and creating new technologies in metallurgy and foundry production is relevant for obtaining high-quality cast metal and castings. The microscopic and macroscopic properties of casting templates significantly depend on the thermophysical parameters of the casting system and the casting mold, namely, the width of the two-phase zone of melt solidification, the initial temperature of the melt, the cooling rate of the casting, the cooling gradient of the melt, and the temperature on the surface of the casting mold. In order to obtain a fine-grained metal structure. The article presents the results of experimental studies, indicating the fractal nature of structure formation in a two-phase zone of the solidifying metal melt. The thermodynamic statement of the non-stationary problem solidifying of binary systems is considered. Transfer equations are described that are adequate for media with fractal geometry. The mathematical apparatus for describing the curing process from the standpoint of heat and mass transfer in a two-phase zone and diffusion in fractal media is presented. It is shown that the mathematical apparatus of fractional calculation makes it possible to effectively describe the fractal nature of diffuse processes. The analysis of the thermal and mass transfer processes in the melt of the metal, which is in the rare state, and their description using the mathematical apparatus of fractional calculation, have been carried out.

Keywords: heat, mass, diffusion, fractal, model, melt, solidification, two-phase zone.

Селівьорстова Тетяна Віталіївна – кандидат технічних наук, доцент, Кафедра інформаційних технологій і систем, ННІ «Інститут промислових та бізнес технологій», Український державний університет науки і технологій.

Селівьорстов Вадим Юрійович – доктор технічних наук, професор, кафедра ливарного виробництва, декан факультету електромеханіки та електрометалургії,

ННІ «Інститут промислових та бізнес технологій», Український державний університет науки і технологій.

Іванова Людмила Харитонівна – доктор технічних наук, професор, Кафедра ливарного виробництва, ННІ «Інститут промислових та бізнес технологій», Український державний університет науки і технологій.

Selivyorstova Tatjana, candidate of technical science, assistant professor, Department of information technology and systems, Scientific and educational institute «Institute of industrial and business technologies», Ukrainian state university of science and technologies.

Selivyorstov Vadim, doctor of engineering's sciences, professor, Department of casting production, Dean of the Faculty of Electromechanics and Electrometallurgy, Scientific and educational institute «Institute of industrial and business technologies», Ukrainian state university of science and technologies.

Yvanova Lyudmyla, doctor of engineering's sciences, professor, Department of casting production, Scientific and educational institute «Institute of industrial and business technologies», Ukrainian state university of science and technologies.