



# Математическое моделирование

## и численные методы

Димитриенко Ю.И., Сальникова А.А., Орешникова Е.А.  
Моделирование изменения микроструктуры и упругих свойств  
сплавов в процессе контактной точечной сварки.  
Математическое моделирование и численные методы, 2023, №  
4, с. 47–63

Источник: <https://mmcm.bmstu.ru/articles/324/>

## Моделирование изменения микроструктуры и упругих свойств сплавов в процессе контактной точечной сварки

© Ю.И. Димитриенко, А.А. Сальникова, Е.А. Орешникова

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, 105005, Россия

*Предложена математическая модель фазовых превращений в стальных сплавах при контактной точечной сварке, учитывающая все этапы процесса: от разогрева и частичного расплавления металла, которые вызывают необратимые физико-химические превращения микроструктуры стали, до этапа охлаждения, при котором происходит отверждение и «возвратное» образование фаз сплава. Модель описывает изменения 3D микроструктуры стального сплава нагретом и последующем охлаждении с образованием ферритных и аустенитных структур. Предложен алгоритм вычисления констант модели с помощью специальной процедуры решения обратной задачи, а также алгоритм численного решения задачи прогнозирования изменения упругих свойств стали в процессе сварки, включающий в себя конечно-элементное 3D моделирование с помощью программного комплекса SMCМ, разработанного на кафедре «Вычислительная математика и математическая физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана. Приведен пример численного моделирования с помощью предложенной модели и алгоритма для стального сплава.*

**Ключевые слова:** фазовые превращения сплавов, контактная точечная сварка, математическое моделирование, микроструктура, упругие характеристики, метод конечного элемента

**Введение.** Контактная точечная сварка (КТС) широко используется для соединения различных металлов и сплавов, так как она обеспечивает высокую скорость работы, и позволяет легко комбинировать применение полуавтоматических или автоматических станков. В процессе КТС соединяемые части сплава подвергаются нагреву до высоких температур, при которых происходят сложные цепочки фазовых превращений в сплаве, может осуществляться переход в жидкую фазу, а после нагрева происходит охлаждение соединенной части деталей, и снова меняется фазовый состав сплава. При таком режиме нагрева-охлаждения сплава, когда в зоне сварки происходят сложные изменения фазового состава [1-6], меняется микроструктура сплава, а эти изменения в свою очередь существенно влияют на механические свойства сплава в зоне КТС. Вопросам моделирования изменения фазового состава и механических свойств сплавов в процессе КТС посвящено большое число работ [], однако, как правило, при этом рассматриваются модели аналитического класса, не учитывающие изменение 3-х мерной микроструктуры

сплавов в процессе КТС. В последнее время возник интерес к разработке моделей микроструктур сплавов при сварке, которые позволяют проводить последующие конечно-элементные расчеты свойств таких сплавов в зоне сварных соединений. Однако сложность построения таких моделей по-прежнему велика, так как создание математических моделей, детально воспроизводящих реальную микроструктуру сплавов, меняющуюся при сварке, едва ли возможно даже в обозримом будущем.

Целью настоящей работы является разработка математической модели изменения микроструктуры сплавов при КТС, «умеренной сложности», которая предназначена для последующего конечно-элементного расчета механических свойств сплавов в процессе сварки. Модель основана на концепции многостадийности процесса фазовых превращений, она идеализированно имитирует изменение реальной пространственной микро-структуры сплавов при КТС. Модель содержит систему дифференциальных уравнений, описывающих изменение параметров микроструктуры в процессе сварки, а также использует непосредственный математический аппарат для конечно-элементного расчета изменения упругих свойств сплавов в зоне КТС при различных режимах температурного нагрева при сварке. При конечно-элементном расчете использован программный комплекс SMCM.

**Математическая модель изменения микроструктуры стали в процессе сварки.** Будем рассматривать далее модель изменения микроструктуры стали. Фазовый состав сталей существенно различается для разных их типов и марок, в этой связи ограничимся только типовыми низкоуглеродистыми сталями типа Стали 3, которая в своем исходном состоянии, до начала КТС, имеет в своем химическом составе содержание углерода до 0.25%.

Пусть процесс КТС в зоне непосредственной сварки состоит из 2-х основных этапов: нагрев стали от начальной температуры до температуры сварки, которая может варьироваться, максимально возможной будем полагать температуру до 1500 °С, и охлаждение до комнатной температуры.

При нагреве до максимальной температуры происходит последовательное изменение фазового состава стали. Полагается, что на разных температурных диапазона существуют фазы: феррит, аустенит, жидкая фаза и газ [4, 13], которые последовательно сменяют друг друга, причем на некоторых временных интервалах могут одновременно существовать несколько фаз одновременно.

Модель изменения фазового основана на рассмотрении представительного элементарного объема (ПЭО) сплава. Предполагается, что ПЭО является ячейкой периодичности сплава,

причем каждая фаза в любой момент времени КТС имеет конечный объем, отделенный поверхностями раздела от других фаз сплава.

Введем следующие обозначения:  $\varphi_1$  — объемная концентрация ферритной фазы при нагреве (феррит 1),  $\varphi_2$  — объемная концентрация аустенитной фазы при нагреве (аустенит 1),  $\varphi_3$  — объемная концентрация жидкой фазы,  $\varphi_4$  — объемная концентрация газовой фазы,  $\varphi_5$  — объемная концентрация вторичной аустенитной фазы, возникающей при охлаждении (аустенит 2),  $\varphi_6$  — объемная концентрация вторичной ферритной фазы при охлаждении (феррит 2).

Эти концентрации в любой момент  $t$  времени связаны соотношением:

$$\varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3 + \varphi_4 + \varphi_5 + \varphi_6 = 1. \quad (1)$$

т.е. гипотетически в каждый момент времени могут одновременно существовать все фазы. В реальности фазы группируются по-другому. Будем полагать, что известна фазовая диаграмма стали, которая определяет температурные диапазоны совместного существования фаз при монотонном изменении температуры от начального значения до максимального рассматриваемого значения  $\theta_{\max}$  и при последующем охлаждении.

Примерные такие диапазоны существования всех рассмотренных 6 фаз стали, которые далее были приняты в расчетах, показаны в таблице 1.

Таблица 1

**Температурные области существования различных фазовых составляющих стали в рамках рассматриваемой модели**

Номер фазы $i$	Фаза	Температура, °C		
		20	800	1500
1	Феррит 1			
2	Аустенит 1			
3	Жидкая фаза			
4	Газовая фаза			
5	Аустенит 2			
6	Феррит 2			

Согласно выбранной конкретной фазовой диаграмме, которая выражена таблицей 1, цикл нагрева-охлаждения при одном акте сварки можно представить в виде 5 следующих стадий, на каждой из которых существуют несколько фаз сплава:

**1 стадия** (рис. 1, а): это начальная стадия КТС, когда температура равна 20°С, на данной стадии существует только фаза  $\varphi_1$  (феррит 1);

**2 стадия** (рис. 1, б-д): повышение температуры от  $20^{\circ}\text{C}$  до  $1500^{\circ}\text{C}$  по линейному закону, на данной стадии происходит одновременное увеличение фазы  $\varphi_2$  (аустенит 1) и уменьшение фазы  $\varphi_1$  (феррит 1), в момент завершения этой стадии (рис. 1, ж) в сплаве существует только фаза  $\varphi_2$  (аустенит 1);

**3 стадия** (рис. 1, е-и): постоянная температура  $1500^{\circ}\text{C}$ , на данной стадии происходит переход металла из твердого состояния в жидкое расплавленное, при этом уменьшается фаза  $\varphi_2$  (аустенит 1) и увеличивается фаза  $\varphi_3$  (жидкая фаза), кроме того, с увеличением фазы жидкой фазы возникает и увеличивается фаза  $\varphi_4$  (газовая фаза);

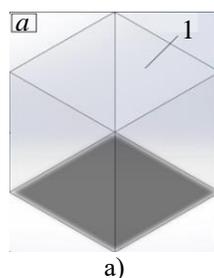
**4 стадия** (рис. 1, к-н): понижение температуры от  $1500^{\circ}\text{C}$  до  $800^{\circ}\text{C}$  по линейному закону, на данной стадии происходит переход из жидкого расплавленного состояния в твердое, одновременно уменьшается фаза  $\varphi_3$  (жидкая фаза) и увеличивается фаза  $\varphi_5$  (аустенит 2), при этом сохраняется фаза  $\varphi_4$  (газовая фаза);

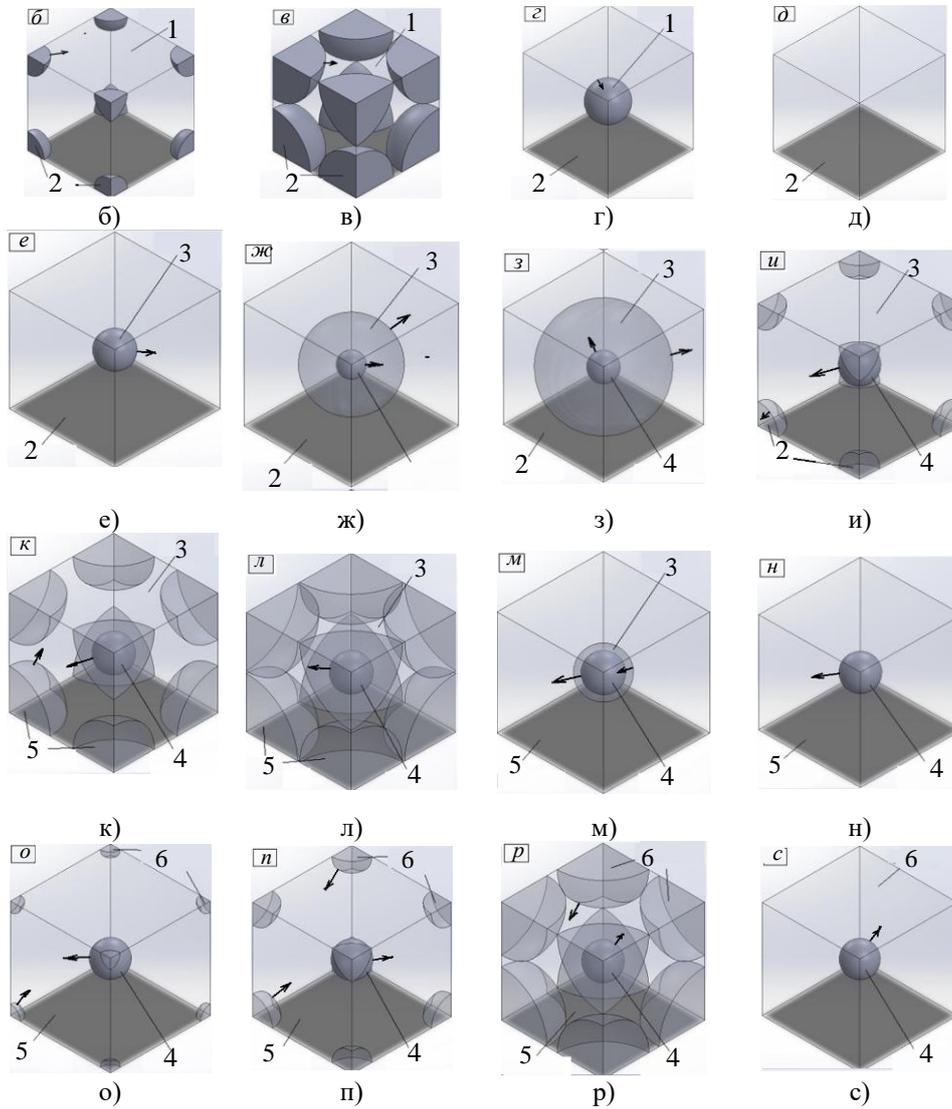
**5 стадия** (рис. 1, о-с): понижение температуры от  $800^{\circ}\text{C}$  до  $20^{\circ}\text{C}$ , одновременно уменьшается фаза  $\varphi_5$  (аустенит 2) и увеличивается фаза  $\varphi_6$  (феррит 2), при этом сохраняется фаза  $\varphi_4$  (газовая фаза), в конечный момент времени существуют только фазы  $\varphi_6$  (феррит 2) и  $\varphi_4$  (газовая фаза).

Конец цикла КТС.

Построим для каждой из этих 5 стадий идеализированную 3D модель геометрической ЯП микроструктуры сплава. Будем полагать форму всех фаз либо идеально шаровой, либо в виде полого шара, либо в виде шарового сектора, либо в виде области, представляющей собой вычитание указанных выше форм из куба (рис. 1).

Такой выбор формы фаз (шарового типа) позволяет моделировать изменение концентрации фазы на некотором промежутке времени самоподобным образом, т.е. только за счет увеличения или уменьшения радиуса шара.





а) — 1 стадия; б-д) — 2 стадия; е-и) — 3 стадия;  
к-н) — 4 стадия; о-с) — 5 стадия

**Рис 1.** Геометрическая 3D модель изменения микроструктуры стали на 5 стадиях КТС

В моменты времени, когда начинается касание растущих из углов шаров, происходит «перестыковка» модели: касающиеся шары заменяются внешностью шара, радиус которого уменьшается. Аналогичная перестыковка модели происходит при касании растущего из центра шара с границами ЯП.

В результате общая модель изменения микроструктуры ЯП стали состоит из 5 стадий, каждая из которых в свою очередь разбивается на 1 или 2 фрагмента, разделенных процедурами перестыковки моделей.

На стадии 1 имеется только 1 фрагмент модели (рис. 1.а).

На стадии 2 имеется 2 фрагмента модели: на рис. 1.б), 1.в) и 1.г) показан 1-ый фрагмент, затем происходит перестыковка модели, и на рисунке 1.д) – показан 2 фрагмент.

На стадии 3 имеются 2 фрагмента модели: рисунки 1.е) .... 1.з) соответствуют 1-ому фрагменту, затем происходит перестыковка модели, а рисунок 1.и) соответствует 2-му фрагменту.

На стадии 4 тоже имеются 2 фрагмента модели: рис. 1.к) и 1.л) – это 1-ый фрагмент, затем происходит перестыковка модели, рис. 1.м) и 1.н) – 2-й фрагмент.

На стадии 5 также имеется 2 фрагмента модели: рис. 1.о)... 1.р) – это 1-ый фрагмент, затем происходит перестыковка модели, рис. 1.с) – 2-й фрагмент.

Предложенная геометрическая модель хотя и является сильно идеализированной по сравнению с реальной микроструктурой стали, однако она обладает несколькими важными полезными свойствами:

- она позволяет связать в единую непрерывную цепочку без разрывов все основные рассмотренные фазовые превращения в ЯП стали в зоне КТС;
- она отражает основные закономерности сложных переходов одних фаз в другие;
- позволяет связать изменение геометрической микроструктуры с изменением концентрации фаз (это будет показано ниже), что имеет важное значение для определения температурного диапазона существования стадий КТС и их фрагментов;
- построить конечно-элементные модели для 3D геометрий микроструктуры и вычислить физико-механические характеристики стали на разных стадиях КТС;
- обладает относительной простотой в реализации.

Поскольку разработанная геометрическая 3D модель структуры стали основана на простейшей шаровой форме фаз, то можно найти зависимость эффективных (осредненных) радиусов этих шаров фаз в ЯП от значения концентрации фаз в каждый момент времени, т.е.

$$\bar{r}_i(t) \sim \varphi_i(t), \text{ где } \bar{r}_i(t) = \frac{r_i}{a}, \quad (2)$$

где  $\bar{r}_i(t)$  — относительные радиусы,  $a$  — сторона единичного куба ЯП.

Функции  $\bar{r}_i(t)$ , согласно разработанной геометрической модели микроструктуры, имеют вид

$$\bar{r}_i(t) = \begin{cases} \eta \hat{\phi}_2(t) + (1 - \eta) \hat{\phi}_1(t), & t_1 \leq t \leq t_2 \\ \lambda (\hat{\phi}_3(t) + \hat{\phi}_4(t)) + (1 - \lambda) (\hat{\phi}_2(t) + \hat{\phi}_4(t)), & t_2 \leq t \leq t_3 \\ \kappa (r_4 + \hat{\phi}_5(t)) + (1 - \kappa) (r_4 + \hat{\phi}_3(t)), & t_3 \leq t \leq t_4 \\ \psi (r_4 + \hat{\phi}_6(t)) + (1 - \psi) r_4, & t_4 \leq t \leq t_5 \end{cases} \quad (3)$$

где  $\eta$ ,  $\lambda$ ,  $\kappa$ ,  $\psi$  — индикаторные функции, которые отличны от нуля для одного из фрагментов соответствующей стадии, и равны нулю для другого фрагмента:

$$\eta = \begin{cases} 1, & \text{если } t_1 \leq t \leq t_1^*, \\ 0, & \text{если } t_1^* \leq t \leq t_2, \end{cases} \quad \lambda = \begin{cases} 1, & \text{если } t_2 \leq t \leq t_2^*, \\ 0, & \text{если } t_2^* \leq t \leq t_3, \end{cases} \quad (4)$$

$$\kappa = \begin{cases} 1, & \text{если } t_3 \leq t \leq t_3^*, \\ 0, & \text{если } t_3^* \leq t \leq t_4, \end{cases} \quad \psi = \begin{cases} 1, & \text{если } t_4 \leq t \leq t_4^*, \\ 0, & \text{если } t_4^* \leq t \leq t_5, \end{cases}$$

здесь  $t_1^*$  — моменты перестыковки моделей, разделяющие фрагменты стадий,

$$\hat{\phi}_i(t) = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi} \varphi_i(t)} \quad (5)$$

— эффективные радиусы фаз, а  $r_4$  — константное значение радиуса газовой фазы, возникающее при охлаждении.

**Модель кинетики фазовых превращений стали при контактной точечной сварке.** Запишем систему уравнений неразрывности всех 6 фаз, которые рассматриваются в модели ЯП сплава при КТС:

$$\begin{aligned} \rho_1 \frac{\partial \varphi_1}{\partial t} &= -J_1, \\ \rho_2 \frac{\partial \varphi_2}{\partial t} &= J_1 - J_2 \chi, \\ \rho_3 \frac{\partial \varphi_3}{\partial t} &= (1 - \Gamma) J_2 \chi - J_3 (1 - \chi), \\ \rho_4 \frac{\partial \varphi_4}{\partial t} &= \Gamma J_2 \chi, \\ \rho_5 \frac{\partial \varphi_5}{\partial t} &= J_3 (1 - \chi) - J_4 (1 - \chi), \\ \rho_6 \frac{\partial \varphi_6}{\partial t} &= J_4 (1 - \chi), \end{aligned} \quad (6)$$

причем выполняется суммарное уравнение баланса массы

$$\sum_{i=1}^6 \rho_i \frac{\partial \varphi_i}{\partial t} = 0, \quad (7)$$

где  $J_i$  — массовые скорости фазовых превращений, для которых примем справедливым обобщенный закон Аррениуса (с наличием предельной температуры фазового перехода):

$$\begin{aligned} J_1 &= \varphi_1 J_1^0 \exp\left(-\frac{E_{A1}}{R\theta}\right), & J_2 &= \varphi_2 J_2^0 \exp\left(-\frac{E_{A2}}{R\theta}\right), \\ J_3 &= \varphi_3 J_3^0 \exp\left(-\frac{E_{A3}}{R(\theta_{**} - \theta)}\right), & J_4 &= \varphi_4 J_4^0 \exp\left(-\frac{E_{A4}}{R(\theta_{s5} - \theta)}\right). \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь  $J_i^0 \left(\frac{\text{кг}}{\text{м}^3 \cdot \text{с}}\right)$  — предэкспоненциальные множители, характеризующие скорость фазовых превращений,  $\theta$  (K) — переменная температура,  $R = 0,3 \cdot 10^3 \frac{\text{Дж}}{\text{кг} \cdot \text{К}}$  — газовая постоянная,  $E_{Ai} \left(\frac{\text{Дж}}{\text{кг}}\right)$  — энергии активации фазового превращения,  $\rho_i = \text{const}$   $\left(\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}\right)$  — плотности фаз,  $\Gamma$  — коэффициент газификации,  $\theta_{**}$  — предельная температура перегрева жидкости,  $\theta_{s5}$  — температура начала отверждения.

В уравнениях сохранения масс фаз введена  $\chi$  — индикаторная функция, разделяющая процессы нагрева и охлаждения

$$\chi = \begin{cases} 1, & \dot{\theta} \geq 0, \\ 0, & \dot{\theta} < 0. \end{cases} \quad (9)$$

### Численный алгоритм решения задачи о фазовых превращениях стали в процессе контактной точечной сварки.

Для численного решения системы уравнений (6) и (8) относительно концентраций фаз  $\varphi_i$ ,  $i = \overline{1,6}$  применим к уравнениям неразрывности следующую неявную разностную схему (10).

Эта неявная схема содержит в себе процедуру линеаризации скоростей фазовых превращений. Решение указанной системы линеаризованных уравнений (10) осуществлялось численно, для этой цели была разработана программа на C++ в среде VisualStudio.

$$\left. \begin{aligned}
 \Phi_1^{m+1} &= \frac{\Phi_1^m}{1 + J_1^0 \Delta t \frac{1}{\rho} \exp\left(-\frac{E_{A1}}{R\theta^m}\right)}, \\
 \Phi_2^{m+1} &= \frac{\Phi_2^m + \Phi_1^m J_1^0 \Delta t \frac{1}{\rho} \exp\left(-\frac{E_{A1}}{R\theta^m}\right)}{1 + J_2^0 \Delta t \frac{1}{\rho} \exp\left(-\frac{E_{A2}}{R\theta^m}\right) \chi}, \\
 \Phi_3^{m+1} &= \frac{\Phi_3^m + \Phi_2^m J_2^0 \Delta t \frac{1}{\rho} \exp\left(-\frac{E_{A2}}{R\theta^m}\right) \chi (1 - \Gamma)}{1 + J_3^0 \Delta t \frac{1}{\rho} \exp\left(-\frac{E_{A3}}{R(\theta_{**} - \theta^m)}\right) (1 - \chi)}, \\
 \Phi_4^{m+1} &= \Gamma \Phi_2^m J_2^0 \Delta t \frac{1}{\rho} \exp\left(-\frac{E_{A2}}{R\theta^m}\right) \chi + \Phi_4^m, \\
 \Phi_5^{m+1} &= \frac{\Phi_5^m + \Phi_3^m J_3^0 \Delta t \frac{1}{\rho} \exp\left(-\frac{E_{A3}}{R(\theta_{**} - \theta^m)}\right) (1 - \chi)}{1 + J_4^0 \Delta t \frac{1}{\rho} \exp\left(-\frac{E_{A4}}{R(\theta_{*5} - \theta^m)}\right) (1 - \chi)}, \\
 \Phi_6^{m+1} &= \Phi_4^m J_4^0 \Delta t \frac{1}{\rho} \exp\left(-\frac{E_{A4}}{R(\theta_{*5} - \theta^m)}\right) (1 - \chi) + \Phi_6^m.
 \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

**Решение обратной задачи определения констант модели фазовых превращений в стали.** Система уравнений (10) вначале была использована для решения обратной задачи – определения констант  $E_{Ai}$  и  $J_i^0$  модели фазовых превращений в стали. Алгоритм решения обратной задачи заключался в следующем. Рассматривался цикл нагрева-охлаждения стали, имитирующий процесс КТС. На рисунке 2 показан график изменения температуры  $\theta(t)$  сплава от времени, который был рассмотрен при численном моделировании КТС.

На рисунке 2 обозначены моменты времени  $t_i, i = \overline{0,5}$ , соответствующие моментам перехода от одной стадии фазовых превращений стали на другую:  $t_0$  — начало процесса КТС ( $20^\circ C$ ),  $t_1$  — образование аустенита при нагреве ( $800^\circ C$ ),  $t_2$  — образование жидкой и газовой фаз ( $1500^\circ C$ ),  $t_3$  — начало охлаждения и образование аустенита при охлаждении ( $1500^\circ C$ ),  $t_4$  — образование феррита при охлаждении ( $800^\circ C$ ),  $t_5$  — конечная стадия ( $20^\circ C$ ).

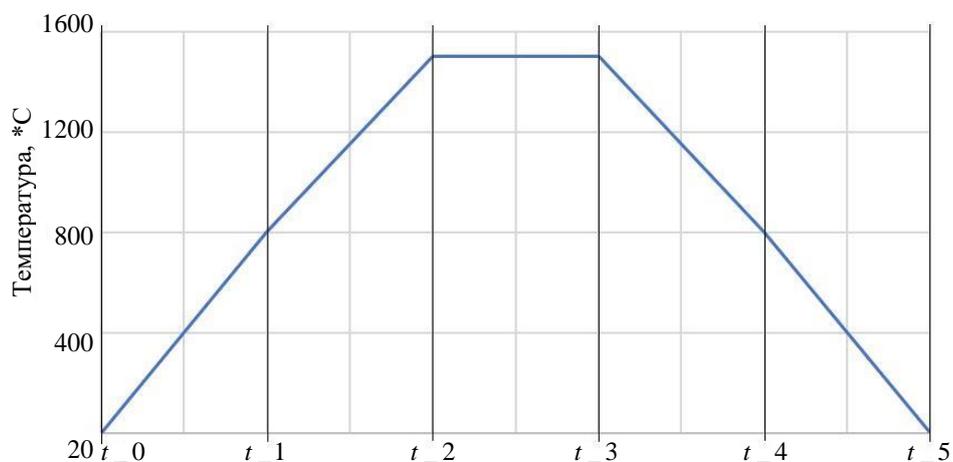


Рис 2. Зависимость температуры стали от времени в процессе КТС

Используя температурные диапазоны существования фаз, представленные в таблице 1, которые были взяты из литературных данных, с помощью численного решения системы (10) были определены константы  $E_{Ai}$  и  $J_i^0$  фазовых превращений, из условия наилучшего соответствия указанным температурным диапазонам.

Функции изменения концентраций фаз  $\varphi_i$ ,  $i = \overline{1,6}$ , вычисленные с помощью указанной процедуры, при нагреве от  $20^\circ\text{C}$  до  $1500^\circ\text{C}$  и охлаждении до  $20^\circ\text{C}$ , представлены на рисунке 3.

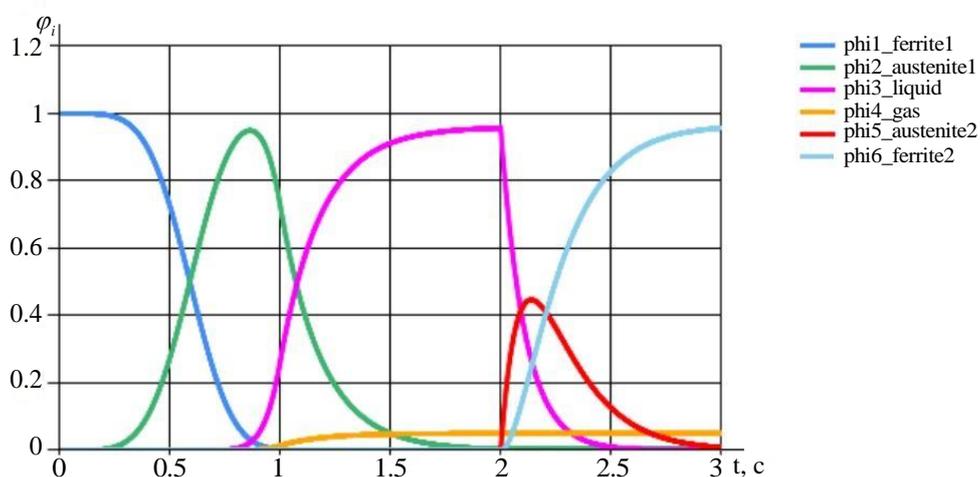


Рис 3. Зависимость температуры стали от времени в процессе КТС

Были наложены дополнительные ограничения, такие как значения коэффициента газификации и температур перегрева, за счет которых было получено наилучшие значения констант модели в целом. Было установлено, что оптимальное значение коэффициента

газификации равно 0.05. Ввиду отсутствия достоверной информации о значении некоторых констант, было сделано допущение о том, что плотности фаз композита совпадают.

Константы модели изменения фазового состава (характеристики фаз) стали, вычисленные с помощью решения обратной задачи, представлены в таблице 2.

Таблица 2

**Характеристики фаз, определенные в результате решения обратной задачи**

Номер фазы $i$	Фаза	$\rho_i, \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$	$\frac{E_{Ai}}{R}, K$	$J_i^0, \frac{\text{кг}^2}{(\text{м}^3 \cdot \text{с})}$
1	Феррит 1	7850	$5 \cdot 10^3$	$3 \cdot 10^6$
2	Аустенит 1	7850	$31,7 \cdot 10^3$	$2,4 \cdot 10^{12}$
3	Жидкая фаза	7850	$1 \cdot 10^4$	$8 \cdot 10^4$
4	Газовая фаза	7850	$1 \cdot 10^4$	$7,5 \cdot 10^4$
5	Аустенит 2	7850	-	-
6	Феррит 2	7850	-	-

Результаты расчетов показывают (рисунок 4), что при охлаждении образуется малое количество аустенита, поскольку процесс охлаждения происходит с высокой скоростью, в результате наблюдается быстрая кристаллизация жидкой фазы и образование феррита.

**Модель изменения упругих характеристик сплава в процессе нагрева и охлаждения при сварке.** Построенная математическая модель изменения фазового состава и микроструктуры сплавов позволяет прогнозировать зависимость механических характеристик сплава, например, упругих констант, от режима температурного нагрева при сварке.

Для этой цели сплав рассматривается как композиционный материал с периодической структурой, причем вследствие фазовых превращений ЯП такого композита меняется с течением времени в зависимости от циклограммы нагрева-охлаждения.

$$E = E(\varphi_1, \dots, \varphi_6, t), \quad \nu = \nu(\varphi_1, \dots, \varphi_6, t). \quad (11)$$

Для обеспечения непрерывности изменения функций (11) при переходе от одного фрагмента к другому применяется кусочно-линейная аппроксимация.

Согласно разработанной модели, на каждой стадии нагрева функции (11) зависят только от нескольких фаз, причем микроструктура сплава на каждой стадии является регулярной. Регулярность микроструктуры позволяет использовать метод асимптотического осреднения [14] для каждой стадии и его численную реализацию.

$$E(\varphi_i(t), t) = \begin{cases} E^{(1)}(\varphi_1(t)), & t_0 \leq t \leq t_1, \\ E^{(1)}(\varphi_1(t_1)) + \frac{t-t_1}{\Delta t} E^{(2)}(\varphi_{1,2}(t_1 + \Delta t)), & t_1 + \Delta t \leq t \leq t_2, \\ E^{(2)}(\varphi_{1,2}(t_2)) + \frac{t-t_2}{\Delta t} E^{(3)}(\varphi_{2,3,4}(t_2 + \Delta t)), & t_2 + \Delta t \leq t \leq t_3, \\ E^{(3)}(\varphi_{2,3,4}(t_3)) + \frac{t-t_3}{\Delta t} E^{(4)}(\varphi_{3,4,5}(t_3 + \Delta t)), & t_3 + \Delta t \leq t \leq t_4, \\ E^{(4)}(\varphi_{3,4,5}(t_4)) + \frac{t-t_4}{\Delta t} E^{(5)}(\varphi_{4,5,6}(t_4 + \Delta t)), & t_4 + \Delta t \leq t \leq t_5. \end{cases} \quad (12)$$

Значения всех функций  $E^{(i)}(\varphi_i(t))$  на каждой стадии определяются численно, с помощью программного комплекса SMCM [15] и с учетом кинетической модели (5) изменения концентраций фаз, где  $\Delta t$  — переходный интервал времени, для непрерывного соединения модулей упругости на разных стадиях.

**Численная реализация модели изменения упругих свойств.** Численная реализация разработанного алгоритма осуществлялась в программном комплексе SMCM, разработанном в Научно-образовательном центре «Суперкомпьютерное инженерное моделирование и разработка программных комплексов» (НОЦ «СИМПЛЕКС») и на кафедре «Вычислительная математика и математическая физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана.

В качестве исходных данных были приняты следующие значения модулей упругости отдельных фаз сплава: феррит —  $E_1 = 190$  ГПа, аустенит —  $E_1 = 40$  ГПа. Коэффициент Пуассона для всех фаз был принят равным 0.3.

Численные результаты моделирования изменения модуля упругости сплава в целом, вычисленные с помощью уравнений (10) и (12), представлены в таблице 3.

Таблица 3

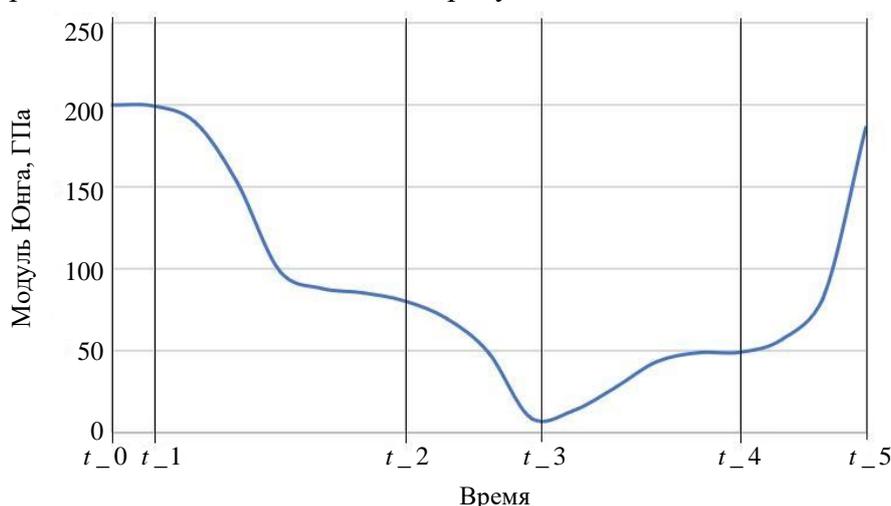
**Численные результаты моделирования изменения модуля упругости стального сплава в процессе КТС**

Моменты времени $t_i$ , №	Температура, °С	Модуль Юнга, ГПа
0	20	200
1	800	199.426
2	900	195.429
3	1100	152.816
4	1200	92.2732
5	1300	90.2565
6	1400	90
7	1500	88.49
8	1500	69.826

Продолжение таблицы 3

9	1500	49.029
10	1500	9.3854
11	1360	13.4174
12	1220	21.4078
13	1080	47.3935
14	940	49.0086
15	800	49.2691
16	600	51.1233
17	300	83.5917
18	20	186.224

График температурной зависимости модуля упругости  $E$  стального сплава в процессе КТС, рассчитанный с помощью разработанной модели, показан на рисунке 5.



**Рис 4.** График зависимости модуля Юнга сплава от времени в процессе КТС

По полученным результатам численного моделирования можно сделать вывод о том, что в соответствии с законом, показанным на рисунке 2, модуль Юнга сплава уменьшается неравномерно по времени, это связано с особенностями кинетического характера изменения фазовой структуры сплава, на стадии перехода от феррита к аустениту. На 3-й стадии, когда образуется жидкая фаза, модуль Юнга сплава достигает своего минимального значения. При охлаждении сплава на 4-ой и 5-ой стадиях происходит «возвратное» образование твердых фаз сплава (аустенита 2 и феррита 2), модуль упругости сплава при этом увеличивается, но так же неравномерно во времени, несмотря на линейный характер уменьшения температуры сплава. Итоговое значение модуля упругости сплава после завершения всего цикла

КТС, меньше, чем исходное значение модуля упругости сплава, вследствие наличия пористой структуры сплава, образовавшейся в процессе высокотемпературных фазовых превращений.

**Заключение.** Разработана математическая модель фазовых превращений сплавов в процессе точечной контактной сварки. Модель относится к классу «умеренной сложности», она позволяет проводить конечно-элементный расчет механических свойств сплавов в процессе сварки с учетом 3D моделей микроструктуры сплавов, изменяющейся в процессе фазовых превращений. Несмотря на значительную степень идеализации микроструктуры сплавов, модель более детально описывает микроструктуру фаз, чем это делают классические аддитивные модели. Приведенный численный пример модельного расчета упругих модулей стального сплава в процессе КТС подтвердил принципиальную возможность проведения таких расчетов с помощью разработанной модели и численного алгоритма.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Khandoker N., Takla M. Tensile strength and failure simulation of simplified spot weld models. *Materials&Design*, 2014, no. 54, pp. 323–330.
- [2] Hernandez B.V.H., Kuntz M.L., Khan M.I., Zhou Y. Influence of microstructure and weld size on the mechanical behavior of dissimilar AHSS resistance spot welds. *Science and Technology of Welding & Joining*, 2008, no. 13(8), pp. 769–776.
- [3] Morawski J., Lauterbach B., Schwarzer I., Villalonga L.R., Tryfonidis M. Spot weld modeling with implemented rupture criteria. *Proceedings of the 5th ANSA and  $\mu$ ETA International Conference*, Thessaloniki, Greece, 2013, 5–7 June.
- [4] Khan M.I., Kuntz M.L., Biro E., Zhou Y. Microstructure and mechanical properties of resistance spot welded advanced high strength steels. *Materials Transactions*, 2008, vol. 49, no. 7, pp. 1629–1637.
- [5] Pouranvari M., Marashi S.P.H. Critical review of automotive steels spot welding: process, structure and properties, *Science and Technology of Welding & Joining*, 2013, pp. 361–403.
- [6] Brauser S., Pepke L.A., Weber G., Rethmeier M. Deformation behavior of spot-welded high strength steels for automotive applications. *Materials Science and Engineering A*, 2010, no. 527, pp. 7099–7108.
- [7] Nicholas O'Meara. *Developing material models for use in finite element predictions of residual stresses in ferritic steel welds*. A Doctor's thesis. The University of Manchester, 2015, 244 p.
- [8] Дмитриенко Ю.И. Механика композитных конструкций при высоких температурах. Москва, *Физматлит*, 2018, 448 с.
- [9] Dimitrienko Yu.I. Thermomechanical Behaviour of Composite Materials and Structures under High Temperatures: 1. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 1997, vol. 28, no. 5, pp. 453–461.
- [10] Дмитриенко Ю.И. Асимптотическая теория многослойных тонких пластин. Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Серия естественные науки, 2012, № 3 (46), с. 86–99.

- [11]Dimitrienko Yu.I., Yakovlev D.O. The asymptotic theory of thermoelasticity of multilayer composite plates. *Composites: Mechanics, Computations, Applications*, 2015, vol. 6, no. 1, pp. 13-51.
- [12]Dimitrienko Y.I., Dimitrienko I.D., Sborschikov S.V. Multiscale hierarchical modeling of fiber reinforced composites by asymptotic homogenization method. *Applied Mathematical Sciences*, 2015, vol. 9. iss. 145–148, pp. 7211–7220.
- [13]Dimitrienko Yu.I., Gubareva E.A., Markevich M.N., Sborschikov S.V. Mathematical modelling of dielectric properties of nanostructural composites using asymptotic homogenizing method. Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Series Natural Sciences, 201, no. 1(64), pp. 76-89.
- [14]Paveebunvipak K., Uthaisangsuk V. Microstructure based modeling of deformation and failure of spot-welded advanced high strength steels sheets. *Materials & Design*, 2018, vol. 160, p. 731.
- [15]Димитриенко Ю.И., Кашкаров А.В. Расчет эффективных характеристик композитов с периодической структурой методом конечного элемента. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*, 2002, № 2, с. 95–96.
- [16]Свидетельство № 2018614767 Программа MultiScale\_SMCM для многомасштабного моделирования напряженно-деформированного состояния конструкций из композиционных материалов, на основе метода многоуровневой асимптотической гомогенизации и конечно-элементного решения трехмерных задач теории упругости: свидетельство об офиц. регистрации программы для ЭВМ / Ю.И. Димитриенко, С.В. Сборщиков, Ю.В. Юрин; заявитель и правообладатель МГТУ им. Н.Э. Баумана — № 2018677684; заявл. 21.02.2018; зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 17.04.2018 — [1].

Статья поступила в редакцию 18.06.2023

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Димитриенко Ю.И., Сальникова А.А., Орешникова Е.А. Моделирование изменения микроструктуры и упругих свойств сплавов в процессе контактной точечной сварки. *Математическое моделирование и численные методы*, 2023, № 4, с. 47–63.

**Димитриенко Юрий Иванович** — д-р физ.-мат. наук, заведующий кафедрой «Вычислительная математика и математическая физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана, директор Научно-образовательного центра «Суперкомпьютерное инженерное моделирование и разработка программных комплексов» МГТУ им. Н.Э. Баумана. e-mail: dimit.bmstu@gmail.com

**Сальникова Анна Андреевна** — старший преподаватель кафедры «Вычислительная математика и математическая физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана. e-mail: anna\_salnikova@bmstu.ru

**Орешникова Евгения Андреевна** — магистрант кафедры «Вычислительная математика и математическая физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана. e-mail: oreshnikovaea@student.bmstu.ru

## Modeling of microstructure changes and elastic properties of alloys in the process of spot welding

© Yu.I. Dimitrienko, A.A. Salnikova, E.A. Oreshnikova

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, 105005, Russia

*A mathematical model of phase transformations in steel alloys during resistance spot welding is proposed, taking into account all stages of the process: from heating and partial melting of the metal, which cause irreversible physical and chemical transformations of the steel microstructure, to the cooling stage, during which solidification and "return" formation of alloy phases occurs. The model describes changes in the 3D microstructure of a steel alloy during heating and subsequent cooling with the formation of ferritic and austenitic structures. An algorithm for calculating model constants using a special procedure for solving the inverse problem is proposed, as well as an algorithm for numerically solving the problem of predicting changes in the elastic properties of steel during the welding process, which includes finite element 3D modeling using the SMCM software package, developed at the Department of Computational Mathematics and Mathematics physics" of Bauman Moscow State Technical University. An example of numerical simulation using the proposed model and algorithm for a steel alloy is given.*

**Keywords:** phase transformations of alloys, resistance spot welding, mathematical modeling, microstructure, elastic characteristics, finite element method

### REFERENCES

- [1] Khandoker N., Takla M. Tensile strength and failure simulation of simplified spot weld models. *Materials&Design*, 2014, no. 54, pp. 323–330.
- [2] Hernandez B.V.H., Kuntz M.L., Khan M.I., Zhou Y. Influence of microstructure and weld size on the mechanical behavior of dissimilar AHSS resistance spot welds. *Science and Technology of Welding & Joining*, 2008, no. 13(8), pp. 769–776.
- [3] Morawski J., Lauterbach B., Schwarzer I., Villalonga L.R., Tryfonidis M. Spot weld modeling with implemented rupture criteria. *Proceedings of the 5th ANSA and  $\mu$ ETA International Conference*, Thessaloniki, Greece, 2013, 5–7 June.
- [4] Khan M.I., Kuntz M.L., Biro E., Zhou Y. Microstructure and mechanical properties of resistance spot welded advanced high strength steels. *Materials Transactions*, 2008, vol. 49, no. 7, pp. 1629–1637.
- [5] Pouranvari M., Marashi S.P.H. Critical review of automotive steels spot welding: process, structure and properties, *Science and Technology of Welding & Joining*, 2013, pp. 361–403.
- [6] Brauser S., Pepke L.A., Weber G., Rethmeier M. Deformation behavior of spot-welded high strength steels for automotive applications. *Materials Science and Engineering A*, 2010, no. 527, pp. 7099–7108.
- [7] Nicholas O'Meara. *Developing material models for use in finite element predictions of residual stresses in ferritic steel welds*. A Doctor's thesis. The University of Manchester, 2015, 244 p.
- [8] Dimitrienko Yu.I. Механика композитных конструкций при высоких температурах [Mechanics of composite structures at high temperatures]. Moscow, *Fizmatlit [Fizmatlit]*, 2018, 448 c.

- [9] Dimitrienko Yu.I. Thermomechanical Behaviour of Composite Materials and Structures under High Temperatures: 1. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 1997, vol. 28, no. 5, pp. 453-461.
- [10] Dimitrienko Yu.I. Asymptotic theory of multilayer thin plates. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Series Natural Sciences*, 2012, no. 3 (46), pp. 86-99.
- [11] Dimitrienko Yu.I., Yakovlev D.O. The asymptotic theory of thermoelasticity of multilayer composite plates. *Composites: Mechanics, Computations, Applications*, 2015, vol. 6, no. 1, pp. 13-51.
- [12] Dimitrienko Y.I., Dimitrienko I.D., Sborschikov S.V. Multiscale hierarchical modeling of fiber reinforced composites by asymptotic homogenization method. *Applied Mathematical Sciences*, 2015, vol. 9, iss. 145–148, pp. 7211–7220.
- [13] Dimitrienko Yu.I., Gubareva E.A., Markevich M.N., Sborschikov S.V. Mathematical modelling of dielectric properties of nanostructural composites using asymptotic homogenizing method. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Series Natural Sciences*, 2011, no. 1(64), pp. 76-89.
- [14] Paveebunvipak K., Uthaisangsuk V. Microstructure based modeling of deformation and failure of spot-welded advanced high strength steels sheets. *Materials & Design*, 2018, vol. 160, p. 731.
- [15] Dimitrienko Yu.I., Kashkarov A.I. Calculation of the effective characteristics of composites with a periodic structure by the finite element method. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Series Natural Sciences*, 2002, no. 2, pp. 95–96.
- [16] Certificate no. 2018614767 *Programma MultiScale\_SMCM dlya mnogomasshtabnogo modelirovaniya napryazhenno-deformirovannogo sostoyaniya konstrukcij iz kompozicionnyh materialov, na osnove metoda mnogourovnevoj asimptoticheskoj gomogenizacii i konechno-elementnogo resheniya trekhmernyh zadach teorii uprugosti* [MultiScale\_SMCM program for multiscale modeling of the stress-strain state of structures made of composite materials, based on the method of multilevel asymptotic homogenization and finite element solution of three-dimensional problems of elasticity theory]: certificate of offic. registration of computer programs/ Yu.I. Dimitrienko, S.V. Sborschikov, Yu.V. Yurin; applicant and copyright holder: BMSTU — no. 2018677684; application 21.02.2018; registered in the register of computer programs 17.04.2018 — [1].

**Dimitrienko Yu. I.**, Dr. Sci. (Phys. — Math.), Professor, Head of Department of Computational Mathematics and Mathematical Physics, Bauman Moscow State Technical University, Director of Research and Education Center Scientific and Educational Centre of Supercomputer Engineering Modeling and Software Packages (Simplex), Bauman Moscow State Technical University. e-mail: dimit.bmtstu@gmail.com

**Salnikova A. A.**, Senior lecturer, Department of Computational Mathematics and Mathematical Physics, Bauman Moscow State Technical University. e-mail: anna\_salnikova@bmtstu.ru

**Oreshnikova E. A.**, Student of Department of Computational Mathematics and Mathematical Physics, Bauman Moscow State Technical University. e-mail: oreshnikovaea@student.bmtstu.ru