Обзорная статья

УДК 621.78.083:544.015. DOI: 10.57070/2304-4497-2023-2(44)-60-71

МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В БЕЙНИТНЫХ СТАЛЯХ

© 2023 г. А. Д. Филяков, В. Д. Сарычев, И. И. Чумачков

Сибирский государственный индустриальный университет (654007, Россия, Кемеровская обл. – Кузбасс, Новокузнецк, ул. Кирова, 42)

Аннотация. К механическим свойствам и эксплуатационным характеристикам рельсовых сталей предъявляются повышенные требования. В связи с этим разработка новых марок рельсовых сталей на сегодняшний день является актуальной задачей. Бейнитные стали, не содержащие карбидов, являются своего рода потенциальными кандидатами для применения на железных дорогах, благодаря своей более высокой вязкости разрушения, сопротивлению усталости и износостойкости. Процесс термической обработки оказывает существенное влияние на механические свойства бейнитных рельсовых сталей. Решаюшим фактором, определяющим технологию производства рельсовых сталей, является прогнозирование микроструктуры. Для того, чтобы отойти от метода перебора, необходимо создавать математические модели охлаждения рельсов, учитывающие химический состав стали. Для моделирования структурно-фазовых превращений в рельсах для неизотермических условий разрабатываются два подхода: Аврами-Колмогорова с учетом правила Шейля и модель фазового поля. Настоящий обзор посвящен современным исследованиям по компьютерному моделированию структурно-фазовых превращений по этим двум подходам. Первый подход был предложен в 30-е годы ХХ века для изотермических условий, позднее был развит для неизотермического случая в рамках правила Шейля. В настоящее время к этому подходу интерес со стороны исследователей не ослабевает из-за малого времени расчета. Однако описать пространственное распределение фаз и структур этот метод не может, поэтому активно развиваются методы фазового поля, расчеты по которому могут занимать от нескольких часов до нескольких суток. В представленном обзоре проведен анализ указанных подходов, а также продемонстрированы их ограничения.

Ключевые слова: модель фазового поля, ЈМАК, фазовые превращения, бейнитная сталь, рельсы

- Финансирование. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-79-10229, https://rscf.ru/project/22-79-10229/?CODE=22-79-10229#.
- Для цитирования: Филяков А.Д., Сарычев В.Д., Чумачков И.И. Методы моделирования фазовых превращений в бейнитных сталях // Вестник Сибирского государственного индустриального университета. 2023. № 2 (44). С. 60–71. http://doi.org/10.57070/2304-4497-2023-2(44)-60-71

Original article

MODELLING METHODS OF PHASE TRANSFORMATION IN BAINITIC STEEL: A REVIEW

© 2023 A. D. Filyakov, V. D. Sarychev, I. I. Chumachkov

Siberian State Industrial University (42 Kirova Str., Novokuznetsk, Kemerovo Region – Kuzbass, 654007, Russian Federation)

Abstract. For rail steels, there are increased requirements for the mechanical properties and performance characteristics. Therefore, the development of new grades of rail steel is an urgent task. Continuously cooled carbide-free bainitic steels are potential candidates for railway applications owing to their high fracture toughness, fatigue resistance,

and wear resistance. The heat-treatment process has a significant impact on the limiting mechanical properties of bainitic rail steels. Predicting the microstructure is a decisive factor in reshaping the production technology. To move away from the enumeration method, it is necessary to create mathematical models of rail cooling that consider the chemical composition. To model structural phase transformations in rails under non-isothermal conditions, two approaches are being developed: Avrami-Kolmogorov with the Scheil rule and the phase field model. This review focuses on modern research on computer simulations of structural phase transformations using these two approaches. The first approach was proposed in the 30 s of the 20th century for isothermal conditions and was later developed for the non-isothermal case in the framework of Scheil's rule. At present, the interest of researchers in this approach has not weakened owing to the short calculation time. However, this method cannot describe the spatial distribution of phases and structures; therefore, methods of the phase field are being actively developed, the calculations of which can range from several hours to several days. This review analyses these approaches and demonstrates their limitations.

Keywords: phase field model, JMAK, phase transformation, bainite steel, rails

Funding. This work was supported by the Russian Science Foundation no. 22-79-10229, https://rscf.ru/project/22-79-10229/?CODE=22-79-10229#.

For citation: Filyakov A.D., Sarychev V.D., Chumachkov I.I. Modelling methods of phase transformation in bainitic steel: a review. Bulletin of the Siberian State Industrial University. 2023, no. 2 (44), pp. 60–71. (In Russ.). http://doi.org/http://doi.org/10.57070/2304-4497-2023-2(44)-60-71

Введение

На заре появления железных дорог рельсы изготавливались из чугуна. Но рост количества поездов и увеличение грузоперевозок в начале XIX века привели из-за хрупкости чугунных рельсов к отказу от них и к переходу на рельсы, изготовленные из стали. С момента появления рельсов из стали в 1856 году и в течение следующих 20 лет происходила эволюция их профилей до тех, что и сегодня используются во всем мире [1].

В настоящее время железнодорожный транспорт из-за высоких постоянных затрат и большой пропускной способности экономически наиболее выгоден при больших объемах перевозок [2]. Затраты на техническое обслуживание железнодорожной инфраструктуры могут составлять от 15 000 до 40 000 евро/км пути в европейских странах [3]. Выбор оптимальных рельсов, их проверка и обслуживание являются ключевыми для снижения затрат на поддержание железнодорожной инфраструктуры в рабочем состоянии [3].

К рельсовым сталям предъявляются повышенные требования по механическим свойствам и эксплуатационным характеристикам. Рельсы должны иметь высокие прочность, предел текучести и способность к деформационному упрочнению [4]. Обычно для изготовления рельсов применяют два типа сталей: перлитную и аустенит-мартенситную [5]. Во время эксплуатации рельсы подвергаются износу, поверхностной усталости, в них образуются трещины, происходит выкрашивание [4, 6]. В последние годы наблюдается тенденция к увеличению скорости движения поездов и нагрузки на ось, что способствует увеличению частоты появления описанных выше дефектов [7, 8].

В связи с этим актуальной задачей является разработка новых марок рельсовых сталей. В качестве кандидатов для следующего поколения высокопрочных рельсов рассматриваются бейнитные рельсовые стали, поскольку в них ниже содержание углерода и они обладают лучшими механическими свойствами по сравнению с перлитными сталями [9, 10].

В 1980-х годах XX столетия впервые была разработана бейнитная рельсовая сталь «Титан» для применения в системе высокоскоростных железных дорог. В 1996 году в США была разработана бейнитная рельсовая сталь J6 (термическая обработка которой включала воздушное охлаждение), которая показала более высокую стойкость к контактной усталости при качении по сравнению с перлитными сталями [10].

В настоящее время исследования сосредоточены на разработке так называемых бейнитных марок рельсовых сталей, чтобы производить рельсы с лучшими характеристиками по сравнению с перлитными марками рельсовых сталей. Поскольку структура бейнитной стали содержит несколько подтипов с различными свойствами (такими как верхний бейнит, нижний бейнит и бейнит без карбида), существует также несколько концепций производства бейнитных рельсовых сталей. Бейнит без карбида (CF-B) может быть получен путем легирования такими элементами, как кремний, хром, ванадий, молибден и т.д. [11].

Не содержащие карбидов бейнитные стали, термическая обработка которых включает не-

прерывное охлаждение, потенциально применимы на железных дорогах из-за более высоких вязкости разрушения и сопротивления усталости [12 – 15]. Однако за счет изотермической термообработки [15 – 17] толщина бейнитной рейки может достигать нанометрового уровня. Такие бейнитные стали обладают лучшими механическими свойствами, чем бейнитные стали, термическая обработка которых включает непрерывное охлаждение. Но изотермическую обработку сложно применять на реальной производственной линии, особенно при производстве рельсов длиной 100 м, поэтому в работе [18] сосредоточились на изучении реального производства рельсов из бейнитных сталей, не содержащих карбидов, при непрерывном охлаждении.

В последние годы было проведено множество полевых и лабораторных исследований по изучению характеристик износа и поведения при повреждениях перлитных рельсовых и колесных сталей [19 – 25]. В целом факторы, влияющие на износ и характеристики контактной усталости при качении перлитной стали, относительно ясны.

Что касается бейнитной стали, исследования в основном были сосредоточены на сравнении износостойкости [26 - 30] и контактной усталости при качении [14, 18, 27, 31] при одинаковых условиях эксплуатации рельсов из бейнитных и перлитных сталей. Однако результаты очень противоречивы. Некоторые исследователи полагают, что повышение износостойкости рельсов из бейнитных сталей обусловлено преобразованием микроструктуры поверхности в процессе износа [30]. Эффект пластичности, вызванный трансформацией (TRIP), и больший допуск степени пластической деформации [28] способствовал повышению их износостойкости. Некоторые из этих исследований показали, что рельсы из бейнитных сталей обладают лучшей стойкостью к контактной усталости при качении [18, 27, 31], что объясняется отсутствием поверхностных и приповерхностных микротрещин [27], а также высокой усталостной прочностью [31].

Процесс термической обработки оказывает существенное влияние на предельные механические свойства бейнитных рельсовых сталей. Прогнозирование микроструктуры является решающим фактором, определяющим технологию их производства [32].

В настоящее время широко распространено автоматизированное проектирование обработки материалов. Помимо одношаговых процессов моделируются целые производственные цепочки. Типичные задачи оптимизации производственных цепочек основаны на моделировании различных вариантов нескольких процессов в соответствии с применяемым методом оптимизации. Для моделирования и расчета целевой функции необходимы полностью связанные тепломеханические и микроструктурные модели.

В основе моделей, использующихся для определения эволюции микроструктуры при горячей штамповке и охлаждении, лежит вычисление кинетики фазовых превращений.

В настоящей работе рассмотрены модели, применяемые для определения фазовых превращений, на основе уравнения Колмогорова – Джонсона – Мела – Аврами (JMAK) и метода фазового поля.

Перспективные применения моделей связаны с оптимизацией производственных цепочек, ключевыми параметрами при выборе моделей являются малое время вычислений и высокая точность получаемых результатов. Именно поэтому рассматриваются модели JMAK и метод фазового поля.

Модель Колмогорова – Джонсона – Мела – Аврами (JMAK)

Основы моделей, описывающих нестационарные фазовые превращения, были заложены в конце 1930-х гг. Джонсоном, Мелом, Аврами и Колмогоровым (JMAK) [33] Данный подход основан на определении кинетики системы, при этом микроструктурные аспекты фазовых превращений игнорируются [34]. Исторически сложилось так, что уравнение JMAK и его модификации обычно используются для быстрого моделирования фазовых превращений [35].

Основные положения моделей, основанных на ЈМАК уравнении, можно записать в виде

$$V(t) = 1 - e^{-V_{\theta}(t)},$$
 (1)

где V – доля превращенной фазы; V_e – так называемый расширенный объем преобразованной фазы.

Экспоненциальная часть уравнения (1) может быть представлена в виде $\exp\left[a\left(\frac{t}{t_x}\right)^n\right]$, где коэффициент *a* зависит от времени t_x , которое является «базовым временем». Можно представить $a = \ln(1 - X_b)$ (где X_b – объемная доля новой фазы после «базового времени»).

При моделировании рекристаллизации в качестве основного времени обычно используется время 50 % рекристаллизации ($t_{0.50}$).

В этом случае $X_b = 0,5$ и $a = \ln(0,5) = 0,693$. Однако это базовое время не используется при моделировании фазовых превращений в сталях, а вместо него используется один коэффициент Аврами *k*:

$$X = 1 - exp(-kt^n). \tag{2}$$

В твердом состоянии фазовые превращения часто носят гетерогенный характер и могут быть описаны как результат трех одновременно действующих механизмов: зарождения частиц продуктовой фазы, их роста и их столкновения на более поздних стадиях фазового превращения [36].

Кинетическое уравнение JMAK справедливо только при ряде предварительных условий: фазы распределены случайным образом; зародышеобразование является случайным; скорости роста постоянны и не зависят от положения в образце; столкновение с объектами, отличными от соседних доменов фазы продукта, незначительно; рост фазы одинаков во всех направлениях; состояние равновесия постоянно. Выявлено несколько механизмов, вызывающих отклонения от этих предпосылок, к ним относятся: эффект; аннигиляция вакансий; блокировка за счет анизотропного роста; внутренние напряжения и удары о дефекты [37].

Если объемные отношения растущих зародышей малы, уравнение JMAK очень хорошо аппроксимирует истинную преобразованную долю, что имеет место в начале превращения и когда система содержит очень большое количество зародышей, так что превращение завершается до того, как зародыши достигнут больших объемных отношений.

Если система содержит небольшое количество зародышей с относительно большими объемными отношениями, независимо от того, насколько велик объем системы, предсказания уравнения JMAK отклоняются от истинной доли преобразования. В этом случае следует применять точное уравнение (5), описанное в работе [38]. Чем меньше количество растущих зародышей, тем больше отклонение преобразованной доли, предсказываемой уравнением JMAK.

Для любого числа и соотношения объемов растущих зародышей уравнение (5), описанное в работе [38], правильно предсказывает истинное количество трансформированной фракции. Уравнение особенно полезно для расчета трансформированной доли от роста небольшого количества зародышей [38].

Кроме того, в работе [39] удалось создать аналитические решения для выражений классической модели, что сделало определение кинетических параметров с помощью экспериментов гораздо более практичным. Однако кинетические параметры, определенные в соответствии с этой моделью, иногда расходятся с предположениями модели [40]. Чтобы преодолеть этот недостаток, модель JMAK усовершенствована путем модификации модулей зародышеобразования, роста и столкновения. Например, неоднородность [41], самокатализ [42] и смесь [43] дополнительно рассматриваются в модуле зародышеобразования, а неравномерный рост фаз во всех направлениях и условия, при которых зародыши фаз в модели распределены не случайно [40], рассматриваются в модуле столкновения, который также вводит один или несколько новых кинетических параметров в классическую модель ЈМАК. Другая хорошо принятая стратегия состоит в том, чтобы рассматривать модель JMAК полуэмпирически в соответствии с серией симуляций и экспериментов [44]. Среди них модель ЈМАК с включенным индексом зародышеобразования (NI-JMAK), которая прекрасно решает проблему классической модели ЈМАК, принимая самокатализ нуклеации и введение одного нового кинетического параметра: индекса нуклеации.

Достоверность анализа ЈМАК подвергалась критике в работе [45]. Поскольку это теория среднего поля, можно было бы ожидать, что она становится менее достоверной по мере приближения к порогу перколяции. Здесь формы растущих регионов должны стать более важными. В работе [46] показано, что форма уравнения JMAK сохраняется для случайно ориентированных анизотропно растущих частиц, если анизотропия не слишком велика. Однако сомнительно, что это остается верным для частиц с очень высокой анизотропией. Наиболее серьезные ошибки ЈМАК анализа проявляются, когда нарушается предположение о случайном зарождении и росте [47]. Наконец, важно признать, что уравнение ЈМАК является изотермическим уравнением. Простые расширения для описания неизотермических превращений зародышеобразования и роста явно ошибочны [48]. Ясно, что уравнение ЈМАК следует использовать с осторожностью даже для описания изотермических превращений. В частности, независимые исследования трансформирующихся микроструктур необходимы для правильной интерпретации трансформации [49].

Метод фазового поля

Метод фазового поля является мощным вычислительным подходом к моделированию и прогнозированию мезомасштабной морфологической и микроструктурной эволюции материалов [50]. Изначально метод фазового поля применялся при описании процессов кристаллизации [51, 52]. В работе [53] представлен процесс моделирования затвердевания сталей и зародышеобразования графита в чугунах. Другим важным примером является работа [54], посвященная моделированию перитектического затвердевания в Fe – C. Приведенные выше примеры моделирования фазовых переходов из жидкости в твердое тело являются классическими. В настоящее время метод фазового поля также активно применяется для моделирования фазовых превращений в твердом теле.

В контексте анализа сильных и слабых сторон методологии фазового поля и ее применения к сталям полезно кратко вспомнить основы этого подхода. Например, уравнения многофазного поля, предложенные в работе [55], используются, поскольку они обеспечивают простую корреляцию с физическими параметрами (например, подвижностью интерфейса и энергией). В этом подходе каждая составляющая микроструктуры (то есть зерна і) задается собственным параметром фазового поля $\Phi_i = [1, ..., N]$ (где $\Phi_i = 1$ внутри зерна *i* и $\Phi_i = 0$ в других местах). На границе двух зерен происходит постепенное изменение двух соответствующих параметров фазового поля от 0 до 1 так, что $\sum_{i}^{N} \phi_{i}(r,t) = 1$ выполняется в каждой позиции *r* в области моделирования с общим числом N зерен. Скорость изменения параметров фазового поля определяется системой связанных дифференциальных уравнений [55]:

$$\frac{d\Phi_i}{dt} = \sum_{i \neq j} \mu_{ij} \left[\sigma_{ij} \left\{ \Phi_j \nabla^2 \Phi_i - \Phi_i \nabla^2 \Phi_j + \frac{\pi^2}{2\eta_{ij}^2} \left(\Phi_i - \Phi_j \right) \right\} + \frac{\pi}{\eta_{ij}} \sqrt{\Phi_i \Phi_j \Delta G_{ij}} \right], \quad (3)$$

где μ_{ij} – подвижность границы раздела; σ_{ij} – энергия поверхности раздела; η_{ij} – толщина границы раздела; G_{ij} – движущая сила (изменение энергии Гиббса при фазовом превращении) [56].

При малых переохлаждениях ΔT_{ij} движущая сила G_{ij} может быть аппроксимирована для перехода из фазы *i* в фазу *j*. В данном случае считается, что фактическая температура *T* близка к равновесной температуре T_{ij}^{0} и поэтому изменение энтальпии ΔH_{ij}^{0} и энтропии ΔS_{ij}^{0} при изменении температуры T_{ij}^{0} – *T* незначительно [57]:

$$\Delta G_{ij} = \frac{\Delta H_{ij}^0}{T_{ij}^0} \left(T_{ij}^0 - T \right) = \Delta S_{ij}^0 \Delta T_{ij}. \tag{4}$$

В многокомпонентных сплавах движущая сила обычно связана с концентрацией компонентов:

$$\Delta G_{ij} = G_M^i(c_k^i) - \sum_{k=1}^n c_k^i \mu_k^i(c_k^i), \quad (5)$$

где c_k^i – молярная доля компонента k в фазе i; μ_k^i – химический потенциал компонента k в фазе i; G_M^i – молярная энергия Гиббса фазы j.

Концентрации связаны равновесными коэффициентами распределения k_{ij} , которые обычно являются функцией температуры. Для произвольно выбранной эталонной фазы *R* транспорт растворенного вещества может быть описан уравнением [57]:

$$\dot{c}(\vec{x},t) = \nabla(\sum_{i=1}^{n} \phi_i D_i \nabla(k_{iR} c_R)).$$
⁽⁶⁾

где D_i — коэффициент диффузии компонента *i*; k_{iR} — равновесный коэффициент распределения компонента *i* в эталонной фазе *R*; c_R — концентрация эталонной фазы [57].

Эволюция параметров фазового поля, описывающих микроструктуру, определяется минимизацией полной свободной энергии системы. Уравнения фазового поля могут быть связаны с уравнениями диффузии. Кроме того, можно учитывать вклад упругих деформаций в свободную энергию, а уравнения фазового поля можно связать с уравнениями температуры [53]. Каждое зерно в области моделирования может быть охарактеризовано рядом атрибутов, что увеличивает количество потенциальных свойств интерфейса ($\mu_{ii}, \sigma_{ii}, \eta_{ii}$), которые необходимо ввести в качестве входных данных. Следует отметить, что точное знание межфазных параметров, в частности подвижностей и их потенциальной анизотропии, весьма ограничено. Поскольку PFM получен как модель роста, зарождение зерен с новой фазой является еще одним процессом, который должен быть количественно определен как входная информация. Результаты моделирования PFM заметно зависят от выбранной плотности и распределения зародышей, а также от скорости образования зародышей. В результате межфазные подвижности, факторы анизотропии и сценарии зародышеобразования могут использоваться в качестве регулируемых параметров при количественном описании экспериментальных наблюдений.

Вычисление на границе между двумя фазами является очень ресурсоемкой задачей в методе фазового поля из-за диффузного характера интерфейса. Чтобы уменьшить вычислительные затраты, толщина интерфейса, используемая в моделировании, часто может быть на несколько порядков больше фактической толщины интерфейса. Следовательно, для написания корректных выводов требуется тщательный асимптотический анализ результатов моделирования. Имеются различные допущения для области интерфейса для фазовых превращений, которые рассматривают эту область как смесь двух фаз, имеющих одинаковый состав, или как смесь двух фаз с различным составом, которые определяются постоянным соотношением для каждого элемента [56].

Метод фазового поля применим к большому количеству микроскопических систем только тогда, когда & намного больше, чем любая конкретная микроскопическая длина. Интерпретируемая в смысле описания универсальных свойств многих микроскопических моделей, величина & представляет собой мезоскопическую длину. Аналогичным образом модели с острыми границами применимы к большому количеству континуальных полевых моделей формирования паттернов или фазового разделения в том пределе, что масштабы длины, определяемые паттернами, намного больше, чем ξ. Однако существует важное различие в построении двух подходов. Стандартные модели четкого интерфейса строятся на основе феноменологических описаний интерфейсов, в то время как модели фазового поля могут быть построены так, чтобы явно подчиняться фундаментальным принципам статистической механики [58].

В то время, как модели непрерывного фазового поля обеспечивают фундаментальный подход, который является ясным и работоспособным, важно установить связь между этим описанием и описанием точного интерфейса. Основная трудность, которая возникает, состоит в том, как учесть конечную толщину ξ диффузной границы модели сплошной среды. Некоторые исследователи извлекли уравнения интерфейса, взяв предел, при котором ширина интерфейса модели фазового поля стремится к нулю для задачи Стефана. Этот подход не очень удобен, так как ширина интерфейса всегда конечна. Совсем недавно эти расчеты были расширены для специального выбора функционала свободной энергии F, чтобы включить интерфейс ненулевой ширины [58].

Преимущества метода фазового поля по сравнению с моделями, базирующимися на JMAK уравнении, хорошо видны в работе [59]. В ней демонстрируется экстремальный сценарий, в котором симулируется рост единичной частицы в центре квадратной исходной фазы. Уравнение JMAK предсказывает более медленное развитие доли фазы по сравнению с точным аналитическим решением и методом фазового поля. Метод JMAK основан на случайности: если бы частица была помещена где-то еще, кроме центра, столкновение произошло бы раньше. Кроме того, как указывалось ранее, теория требует, чтобы растущая частица была намного меньше, чем объем материала в целом; частицы присутствуют и растут, потребляя большие доли матрицы. Это нереалистичный сценарий для приложений, где рассчитывается реальная микроструктурная эволюция.

Наиболее очевидное различие между механистическим методом JMAK и методом фазового поля, в который трудно включить атомистическую информацию, заключается в том, что последний позволяет изобразить структуру по мере ее развития.

Это невозможно для метода ЈМАК, учитывая его зависимость от вероятностей и преобразования между расширенным и реальным пространством. В правильно выбранных задачах метод фазового поля может лучше учитывать явления, в которых существует перекрытие между диффузионными или температурными полями частиц, которые растут из разных мест. Действительно, точное определение таких полей во всем пространстве моделирования является обычным делом. В случае ЈМАК используется либо приближение среднего поля, в котором для расчета граничных условий предполагается, что, например, диффундирующее растворенное вещество равномерно распределяется по исходной фазе во время превращения, либо какое-то приближенное аналитическое решение используется для обработки перекрывающихся полей [57].

Заключение

В настоящее время ведутся интенсивные исследования бейнитных марок рельсовых сталей без карбидов. Важную роль при этом играет химический состав и соответствующие параметры термообработки рельсов. Для того, чтобы отойти от метода перебора, необходимо создавать математические модели охлаждения рельсов, учитывающие химический состав стали. В современной зарубежной литературе по этой тематике рассматриваются два основных подхода: нульмерное моделирование, основанное на подходе JMAK, и 3D-моделирование, основанное на модели фазового поля. Первый подход был предложен в 30-е годы XX века для изотермических условий, позднее был развит для неизотермического случая в рамках правила Шейля. В настоящее время к этому подходу интерес со стороны исследователей не ослабевает из-за малого времени расчета. Однако описать пространственное распределение фаз и структур этот метод не может, поэтому активно развиваются методы фазового поля, расчеты по которому могут составлять от нескольких часов до нескольких суток. В представленном обзоре проведен анализ указанных подходов, а также продемонстрированы их ограничения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Garnham J.E., Davis C.L. *Rail materials*. In: Wheel-rail interface handbook. 2009. P. 125–171. *https://doi.org/10.1533/9781845696788.1.125*
- 2. Vickerman R. International Encyclopedia of Transportation. Elsevier, 2021. P. 4569–4418.
- Mićić M., Brajović L., Lazarević L., Popović Z. Inspection of RCF rail defects – Review of NDT methods // Mechanical Systems and Signal Processing. 2023. Vol. 182. Article 109568.
- Królicka A., Lesiuk G., Radwański K., Kuziak R., et al. Comparison of fatigue crack growth rate: Pearlitic rail versus bainitic rail // International Journal of Fatigue. 2021. Vol. 149. Article 106280. http://dx.doi.org/10.1016/j.ijfatigue. 2021.106280
- **5.** Aglan H.A. *Fatigue crack growth and fracture behavior of bainitic rail steels. United States.* Federal Railroad Administration. Office of Railroad Policy and Development, 2011.
- Ruijie Z., Chunlei Z., Bo L., Xubiao W., Xiaofeng L., et al. Research progress on rolling contact fatigue damage of bainitic rail steel // Engineering Failure Analysis. 2022. Article 106875. http://dx.doi.org/10.56748/ejse. 131621
- Hasan S.M., Chakrabarti D., Singh S.B. Dry rolling/sliding wear behaviour of pearlitic rail and newly developed carbide-free bainitic rail steels // Wear. 2018. Vol. 408. P. 151–159. https://doi.org/10.1016/j.wear.2018.05.006
- Tung P.Y., Zhou X., Morsdorf L., Morsdorf L., et al. Formation mechanism of brown etching layers in pearlitic rail steel // Materialia. 2022. Vol. 26. Article 101625. http://dx.doi.org/ 10.1016/j.mtla.2022.101625
- Wang K., Tan Z., Gao G., Gui X., Misra, Bingzhe Baia. 2016. "Ultrahigh strengthtoughness combination in Bainitic rail steel: The determining role of austenite stability during tempering" // Materials Science and Engineering A..2016. Vol. 662. P. 162–168. http://dx.doi.org/10.1016/j.msea.2016.03.043
- 10. Zhang R., Zheng C., Chen C., Lv B., et al. Study on fatigue wear competition mechanism and microstructure evolution on the surface of a bainitic steel rail // Wear. 2021. Vol. 482. Article 203978. http://dx.doi.org/10.1016/j. wear.2021.203978

- Stock R., Pippan R. RCF and wear in theory and practice-The influence of rail grade on wear and RCF // Wear. 2011. Vol. 271. No. 1-2. P. 125–133. http://dx.doi.org/10.1016/j. wear.2010.10.015
- 12. Ueda M., Matsuda K. Effects of carbon content and hardness on rolling contact fatigue resistance in heavily loaded pearlitic rail steels // Wear. 2020. Vol. 444. Article 203120. https://doi.org/10.1016/j.wear.2019.203120
- Kumar A., Dutta A., Makineni S.K., Herbig M., et al. In-situ observation of strain partitioning and damage development in continuously cooled carbide-free bainitic steels using micro digital image correlation // Materials Science and Engineering: A. 2019. Vol. 757. P. 107–116. http://dx.doi.org/10.1016/j.msea.2019.04.098
- 14. Sourmail T., Caballero F.G., García-Mateo C., Smanio V., et al. Evaluation of potential of high Si high C steel nanostructured bainite for wear and fatigue applications // Materials Science and Technology. 2013. Vol. 29. No. 10. P. 1166–1173. http://dx.doi.org/10.1179/1743284713Y.0000000242
- Kumar A., Makineni S.K., Dutta A., Goulas C., et al. Design of high-strength and damageresistant carbide-free fine bainitic steels for railway crossing applications // Materials Science and Engineering: A. 2019. Vol. 759. P. 210–223.
- 16. Leiro A., Kankanala A., Vuorinen E., Prakash B. Tribological behaviour of carbide-free bainitic steel under dry rolling/sliding conditions // Wear. 2011. Vol. 273. No. 1. P. 2–8. http://dx.doi.org/10.1016/j.wear.2011.03.025
- Hu F., Wu K.M., Hodgson P.D. Effect of retained austenite on wear resistance of nanostructured dual phase steels // Materials Science and Technology. 2016. Vol. 32. No. 1. P. 40–48.
- 18. Liu J., Li Y., Zhang Y., Hu Y., et al. Dry rolling/sliding wear of bainitic rail steels under different contact stresses and slip ratios // Materials. 2020. Vol. 13. No. 20. P. 4678. http://dx.doi.org/10.3390/ma13204678
- 19. Masoumi M., Ariza E.A., Sinatora A., Goldenstein H. Role of crystallographic orientation and grain boundaries in fatigue crack propagation in used pearlitic rail steel // Materials Science and Engineering: A. 2018. Vol. 722. P. 147–155. http://dx.doi.org/10.1016/j.msea. 2018.03.028
- 20. Zhou Y., Wang S., Wang T., Xu Y., Li Z. Field and laboratory investigation of the relationship between rail head check and wear in a heavy-haul railway // Wear. 2014. Vol. 315. No. 1–2. P. 68–77. http://dx.doi.org/10.1016/j.wear. 2014.04.004

- 21. Ding H.H., Fu Z.K., Wang W.J., Guo J., et al. Investigation on the effect of rotational speed on rolling wear and damage behaviors of wheel/rail materials // Wear. 2015. Vol. 330. P. 563–570. http://dx.doi.org/10.1016/j. wear.2014.12.043
- 22. Huang Y.B., Shi L.B., Zhao X.J., Cai Z.B., et al. On the formation and damage mechanism of rolling contact fatigue surface cracks of wheel/rail under the dry condition // Wear. 2018. Vol. 400. P. 62–73. http://dx.doi.org/ 10.1016/j.wear.2017.12.020
- 23. Guo L.C., Zhu W.T., Shi L.B., Liu Q.Y., et al. Study on wear transition mechanism and wear map of CL60 wheel material under dry and wet conditions // Wear. 2019. Vol. 426. P. 1771–1780. http://dx.doi.org/10.1016/j.wear.2018. 12.049
- 24. Maya-Johnson S., Santa J. F., Toro A. Dry and lubricated wear of rail steel under rolling contact fatigue-Wear mechanisms and crack growth // Wear. 2017. Vol. 380. P. 240–250. http://dx.doi.org/10.1016/j.wear.2017.03.025
- 25. Benoît D., Salima B., Marion R. Multiscale characterization of head check initiation on rails under rolling contact fatigue: Mechanical and microstructure analysis // Wear. 2016. Vol. 366. P. 383–391. http://dx.doi.org/10.1016/j. wear.2016.06.019
- 26. Messaadi M., Oomen M., Kumar A. Friction modifiers effects on tribological behaviour of bainitic rail steels // Tribology international. 2019. Vol. 140. Article 105857.
- 27. Lee K.M., Polycarpou A.A. Wear of conventional pearlitic and improved bainitic rail steels // Wear. 2005. Vol. 259. No. 1–6. P. 391–399. http://dx.doi.org/10.1016/j.wear.2005.02.058
- 28. Hasan S.M., Chakrabarti D., Singh S.B. Dry rolling/sliding wear behaviour of pearlitic rail and newly developed carbide-free bainitic rail steels // Wear. 2018. Vol. 408. P. 151–159. *http://dx.doi.org/10.1016/j.wear.2018.05.006*
- **29.** Liu J.P., Li Y.Q., Zhou Q.Y., Zhang Y. H., et al. New insight into the dry rolling-sliding wear mechanism of carbide-free bainitic and pearlitic steel // Wear. 2019. Vol. 432. Article 202943. https://doi.org/10.1016/j.wear. 2019.202943
- 30. Chen Y., Ren R., Pan J., Pan R., et al. Microstructure evolution of rail steels under different dry sliding conditions: A comparison between pearlitic and bainitic microstructures // Wear. 2019. Vol. 438. Article 203011. https://doi.org/10.1016/j.wear.2019.203011
- **31.** Li Q., Guo J., Zhao A. Effect of upper bainite on wear behaviour of high-speed wheel steel // Tribology Letters. 2019. Vol. 67. P. 1–9.

- **32.** Kuziak R., Pidvysotskyy V., Pernach M., Rauch L., et al. Selection of the best phase transformation model for optimization of manufacturing processes of pearlitic steel rails //Archives of Civil and Mechanical Engineering. 2019. Vol. 19. P. 535–546. *http://dx.doi. org/10.1016/j.acme.2018.12.004*
- **33.** Tehler M. Modeling phase transformations and volume changes during cooling of case hardening steels. KTH, 2009.
- 34. Bzowski K., Rauch L., Pietrzyk M. Application of statistical representation of the microstructure to modeling of phase transformations in DP steels by solution of the diffusion equation // Procedia Manufacturing. 2018. Vol. 15. P. 1847–1855. http://dx.doi.org/10.1016/j. promfg.2018.07.205
- 35. Rauch L., Kuziak R., Pietrzyk M. From high accuracy to high efficiency in simulations of processing of Dual-Phase steels // Metallurgical and Materials transactions B. 2014 Vol. 45. P. 497–506. http://dx.doi.org/10.1007/s11663-013-9926-5
- **36.** Rheingans B., Mittemeijer E.J. Phase transformation kinetics: advanced modeling strategies // JOM. 2013. Vol. 65. P. 1145–1154.
- **37.** Starink M.J. On the meaning of the impingement parameter in kinetic equations for nucleation and growth reactions // Journal of Materials Science. 2001. Vol. 36. No. 18. P. 4433–4441.
- 38. Todinov M.T. On some limitations of the Johnson–Mehl–Avrami–Kolmogorov equation // Acta materialia. 2000. Vol. 48. No. 17. P. 4217–4224.
- **39.** Kempen A.T.W., Sommer F., Mittemeijer E.J. Determination and interpretation of isothermal and non-isothermal transformation kinetics; the effective activation energies in terms of nucleation and growth // Journal of materials science. 2002. Vol. 37. P. 1321–1332. *https://doi.org/10.1023/a:1014556109351*
- **40.** Liu F., Sommer F., Bos C., Mittemeijer E.J. Analysis of solid state phase transformation kinetics: models and recipes // International materials reviews. 2007. Vol. 52. No. 4. P. 193–212. http://dx.doi.org/10.1179/174328007X160308
- **41.** Robson J.D. Modeling competitive continuous and discontinuous precipitation // Acta Materialia. 2013. Vol. 61. No. 20. P. 7781–7790. http://dx.doi.org/10.1016/j.actamat.2013.09.017
- **42.** Ranganathan S., Von Heimendahl M. The three activation energies with isothermal transformations: applications to metallic glasses // Journal of Materials Science.1981. Vol. 16. P. 2401–2404.
- **43.** Liu F., Sommer F., Mittemeijer E.J. Analysis of the kinetics of phase transformations; roles

of nucleation index and temperature dependent site saturation, and recipes for the extraction of kinetic parameters // Journal of Materials Science. 2007. Vol. 42. P. 573–587.

- **44.** Dill E.D., Folmer J.C.W., Martin J.D. Crystal growth simulations to establish physically relevant kinetic parameters from the empirical Kolmogorov–Johnson–Mehl–Avrami model // Chemistry of Materials. 2013. Vol. 25. No. 20. P. 3941–3951.
- **45.** Weinberg M.C. A test of the Johnson-Mehl-Avrami equation // Journal of crystal growth. 1987. Vol. 82. No. 4. P. 779–780. https://doi.org/10.1016/S0022-0248(87)80025-8
- 46. Weinberg M.C., Birnie III D.P., Shneidman V.A. Crystallization kinetics and the JMAK equation // Journal of non-crystalline solids. 1997. Vol. 219. P. 89–99. https://doi.org/10.1016/S0022-3093%2897%2900261-5
- 47. Kelton K.F., Spaepen F.A study of the devitrification of Pd82Si18 over a wide temperature range // Acta Metallurgica. 1985. Vol. 33. No. 3. P. 455–464.
- **48.** Yinnon H., Uhlmann D.R. Applications of thermoanalytical techniques to the study of crystallization kinetics in glass-forming liquids, part I: theory // Journal of Non-Crystalline Solids. 1983. Vol. 54. No. 3. P. 253–275.
- **49.** Levine L.E., Narayan K.L., Kelton K.F. Finite size corrections for the Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov equation // Journal of Materials Research. 1997. Vol. 12. P. 124–132.
- **50.** Chen L.Q. Annu Rev Mater Res // Annu. Rev. Mater. Res. 2002. Vol. 32. P. 113–140.
- Fallah V., Amoorezaei M., Provatas N., Corbin S.F., et al. Phase-field simulation of solidification morphology in laser powder deposition of Ti–Nb alloys // Acta Materialia. 2012. Vol. 60. No. 4. P. 1633–1646. http://dx.doi.org/ 10.1016/j.actamat.2011.12.009
- **52.** Beckermann C., Diepers H.J., Steinbach I., Karma A., et al. Modeling melt convection in phase-field simulations of solidification // Journal of Computational Physics. 1999. Vol. 154. No. 2. P. 468–496.
- 53. Böttger B., Apel M., Eiken J., Schaffnit P., et al. Phase-Field simulation of solidification and solid-state transformations in multicomponent steels // Steel Research International. 2008. Vol. 79. No. 8. P. 608–616. http://dx.doi.org/10.2374/SRI08SP021-79-2008-608
- **54.** Tiaden J. Phase-field simulations of the peritectic solidification of Fe-C // Journal of Crystal Growth. 1999. Vol. 198. P. 1275–1280.

- **55.** Steinbach I., Pezzolla F., Nestler B., Seeßelberg M., et al. A phase field concept for multiphase systems // Physica D: Nonlinear Phenomena. 1996. Vol. 94. No. 3. P. 135–147.
- 56. Militzer M. Phase field modeling of microstructure evolution in steels // Current Opinion in Solid State and Materials Science. 2011. Vol. 15. No. 3. P. 106–115. https://doi.org/10.1016/j.cossms.2010.10.001
- **57.** Pariser G., Schaffnit P., Steinbach I., Bleck, W. Simulation of the γ - α -transformation using the phase-field method // Steel Research. 2001. Vol. 72. No. 9. P. 354–360. *http://dx.doi.org/10.1002/srin.200100130*
- 58. Elder K.R., Grant M., Provatas N., Kosterlitz J. M. Sharp interface limits of phase-field models // Physical Review E. 2001. Vol. 64. No. 2. Article 021604. http://dx.doi.org/10.1103/ PhysRevE.64.021604
- **59.** Jou H.J., Lusk M.T. Comparison of Johnson-Mehl-Avrami-Kologoromov kinetics with a phase-field model for microstructural evolution driven by substructure energy // Physical Review B. 1997. Vol. 55. No. 13. P. 8114. http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.55.8114

REFERENCES

- 1. Garnham J.E., Davis C.L. *Rail materials*. In: Wheel-rail interface handbook. 2009, pp. 125–171. *https://doi.org/10.1533/9781845696788.1.125*
- **2.** Vickerman R. International Encyclopedia of *Transportation*. Elsevier, 2021, pp. 4569– 4418.
- **3.** Mićić M., Brajović L., Lazarević L., Popović Z. Inspection of RCF rail defects–Review of NDT methods. *Mechanical Systems and Signal Processing*. 2023, vol. 182, article 109568.
- 4. Królicka A., Lesiuk G., Radwański K., Kuziak R., et al. Comparison of fatigue crack growth rate: Pearlitic rail versus bainitic rail. *International Journal of Fatigue*. *International Journal of Fatigue*. 2021, vol. 149, article 106280. http://dx.doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2021.106280
- **5.** Aglan H.A. *Fatigue crack growth and fracture behavior of bainitic rail steels*. United States. Federal Railroad Administration. Office of Railroad Policy and Development, 2011.
- 6. Ruijie Z,. Chunlei Z., Bo L., Xubiao W., Xiaofeng L., et al. Research progress on rolling contact fatigue damage of bainitic rail steel. *Engineering Failure Analysis.* 2022, article 106875. *http://dx.doi.org/10.56748/ejse.* 131621
- **7.** Hasan S.M., Chakrabarti D., Singh S.B. Dry rolling/sliding wear behaviour of pearlitic rail and newly developed carbide-free bainitic rail

steels. Wear. 2018, vol. 408, pp. 151–159. https://doi.org/10.1016/j.wear.2018.05.006

- Tung P.Y., Zhou X., Morsdorf L., Morsdorf L., et al. Formation mechanism of brown etching layers in pearlitic rail steel. *Materialia*. 2022, vol. 26, article 101625. *http://dx.doi.org/10.* 1016/j.mtla.2022.101625
- Wang K., Tan Z., Gao G., Gui X., et al. Misra, Bingzhe Baia. 2016. "Ultrahigh strengthtoughness combination in Bainitic rail steel: The determining role of austenite stability during tempering". *Materials Science and Engineering A*. 2016, vol. 662, pp. 162–168. http://dx.doi.org/10.1016/j.msea.2016.03.043
- 10. Zhang R., Zheng C., Chen C., Lv B., et al. Study on fatigue wear competition mechanism and microstructure evolution on the surface of a bainitic steel rail. *Wear*. 2021, vol. 482, article 203978. http://dx.doi.org/10.1016/j. wear.2021.203978
- 11. Stock R., Pippan R. RCF and wear in theory and practice-The influence of rail grade on wear and RCF. *Wear*. 2011, vol. 271, no. 1-2, pp. 125–133. *http://dx.doi.org/10.1016/j.wear*. 2010.10.015
- 12. Ueda M., Matsuda K. Effects of carbon content and hardness on rolling contact fatigue resistance in heavily loaded pearlitic rail steels. *Wear.* 2020, vol. 444, article 203120. *https://doi.org/10.1016/j.wear.2019.203120*
- **13.** Kumar A., Dutta A., Makineni S.K., Herbig M., et al. In-situ observation of strain partitioning and damage development in continuously cooled carbide-free bainitic steels using micro digital image correlation. *Materials Science and Engineering: A.* 2019, vol. 757, pp. 107–116. *http://dx.doi.org/10.1016/j.msea.2019.04.098*
- 14. Sourmail T., Caballero F.G., García-Mateo C., Smanio V., et al. Evaluation of potential of high Si high C steel nanostructured bainite for wear and fatigue applications. *Materials Science and Technology*. 2013, vol. 29, no. 10, pp. 1166–1173. *http://dx.doi.org/10.1179/1743284* 713Y.0000000242
- **15.** Kumar A., Makineni S.K., Dutta A., Goulas C., et al. Design of high-strength and damage-resistant carbide-free fine bainitic steels for railway crossing applications. *Materials Science and Engineering:* A. 2019, vol. 759, pp. 210–223.
- 16. Leiro A., Kankanala A., Vuorinen E., Prakash B. Tribological behaviour of carbide-free bainitic steel under dry rolling/sliding conditions. Wear. 2011, vol. 273, no. 1, pp. 2–8. http://dx.doi.org/10.1016/j.wear.2011.03.025
- **17.** Hu F., Wu K.M., Hodgson P.D. Effect of retained austenite on wear resistance of

nanostructured dual phase steels. *Materials Science and Technology*. 2016, vol. 32, no. 1, pp. 40–48.

- Liu J., Li Y., Zhang Y., Hu Y., et al. Dry rolling/sliding wear of bainitic rail steels under different contact stresses and slip ratios. *Materials*. 2020, vol. 13, no. 20, pp. 4678. *http://dx.doi.org/10.3390/ma13204678*
- **19.** Masoumi M., Ariza E. A., Sinatora A., Goldenstein H. Role of crystallographic orientation and grain boundaries in fatigue crack propagation in used pearlitic rail steel. *Materials Science and Engineering: A.* 2018, vol. 722, pp. 147–155.

http://dx.doi.org/10.1016/j.msea.2018.03.028

- 20. Zhou Y., Wang S., Wang T., Xu Y., Li Z. Field and laboratory investigation of the relationship between rail head check and wear in a heavyhaul railway. *Wear*. 2014, vol. 315, no. 1-2, pp. 68–77. *http://dx.doi.org/10.1016/j.wear*. 2014.04.004
- **21.** Ding H.H., Fu Z.K., Wang W.J., Guo J., et al. Investigation on the effect of rotational speed on rolling wear and damage behaviors of wheel/rail materials. *Wear*. 2015, vol. 330, pp. 563–570.

http://dx.doi.org/10.1016/j.wear.2014.12.043

- 22. Huang Y.B., Shi L.B., Zhao X.J., Cai Z.B., et al. On the formation and damage mechanism of rolling contact fatigue surface cracks of wheel/rail under the dry condition. *Wear*. 2018, vol. 400, pp. 62–73. *http://dx.doi.org/10.1016/j.wear.2017.12.020*
- 23. Guo L.C., Zhu W.T., Shi L.B., Liu Q.Y., et al. Study on wear transition mechanism and wear map of CL60 wheel material under dry and wet conditions. *Wear*. 2019, vol. 426, pp. 1771– 1780. *http://dx.doi.org/10.1016/j.wear*. 2018.12.049
- 24. Maya-Johnson S., Santa J.F., Toro A. Dry and lubricated wear of rail steel under rolling contact fatigue-Wear mechanisms and crack growth. *Wear*. 2017, vol. 380, pp. 240–250. *http://dx.doi.org/10.1016/j.wear.2017.03.025*
- 25. Benoît D., Salima B., Marion R. Multiscale characterization of head check initiation on rails under rolling contact fatigue: Mechanical and microstructure analysis. *Wear*. 2016, vol. 366, pp. 383–391. *http://dx.doi.org/* 10.1016/j.wear.2016.06.019
- 26. Messaadi M., Oomen M., Kumar A. Friction modifiers effects on tribological behaviour of bainitic rail steels. *Tribology international*. 2019, vol. 140, article 105857.
- **27.** Lee K.M., Polycarpou A.A. Wear of conventional pearlitic and improved bainitic rail steels.

Wear. 2005, vol. 259, no. 1-6, pp. 391–399. http://dx.doi.org/10.1016/j.wear.2005.02.058

- 28. Hasan S.M., Chakrabarti D., Singh S.B. Dry rolling/sliding wear behaviour of pearlitic rail and newly developed carbide-free bainitic rail steels. *Wear*. 2018, vol. 408, pp. 151–159. *http://dx.doi.org/10.1016/j.wear.2018.05.006*
- **29.** Liu J.P., Li Y.Q., Zhou Q.Y., Zhang Y. H., et al. New insight into the dry rolling-sliding wear mechanism of carbide-free bainitic and pearlitic steel. *Wear*. 2019, vol. 432, article 202943. *https://doi.org/10.1016/j.wear*. 2019.202943
- 30. Chen Y., Ren R., Pan J., Pan R., et al. Microstructure evolution of rail steels under different dry sliding conditions: A comparison between pearlitic and bainitic microstructures. Wear. 2019, vol. 438, article 203011. https://doi.org/10.1016/j.wear.2019.203011
- **31.** Li Q., Guo J., Zhao A. Effect of upper bainite on wear behaviour of high-speed wheel steel. *Tribology Letters*. 2019, vol. 67, pp. 1–9.
- 32. Kuziak R., Pidvysotskyy V., Pernach M., Rauch L., et al. Selection of the best phase transformation model for optimization of manufacturing processes of pearlitic steel rails. *Archives of Civil and Mechanical Engineering*. 2019, vol. 19, pp. 535–546. *http://dx.doi.org/* 10.1016/j.acme.2018.12.004
- **33.** Tehler M. Modeling phase transformations and volume changes during cooling of case hardening steels. KTH, 2009.
- 34. Bzowski K., Rauch L., Pietrzyk M. Application of statistical representation of the microstructure to modeling of phase transformations in DP steels by solution of the diffusion equation. *Procedia Manufacturing*. 2018, vol. 15, pp. 1847–1855. *http://dx.doi.org/10.1016/j. promfg.2018.07.205*
- **35.** Rauch L., Kuziak R., Pietrzyk M. From high accuracy to high efficiency in simulations of processing of Dual-Phase steels. *Metallurgical and Materials transactions B*. 2014, vol. 45, pp. 497–506. *http://dx.doi.org/10.1007/s11663-013-9926-5*
- **36.** Rheingans B., Mittemeijer E.J. Phase transformation kinetics: advanced modeling strategies. *JOM*. 2013, vol. 65, pp. 1145–1154.
- **37.** Starink M.J. On the meaning of the impingement parameter in kinetic equations for nucleation and growth reactions. *Journal of Materials Science*. 2001, vol. 36, no. 18, pp. 4433–4441.
- **38.** Todinov M.T. On some limitations of the Johnson–Mehl–Avrami–Kolmogorov equation. *Acta materialia*. 2000, vol. 48, no. 17, pp. 4217–4224.

- **39.** Kempen A.T.W., Sommer F., Mittemeijer E.J. Determination and interpretation of isothermal and non-isothermal transformation kinetics; the effective activation energies in terms of nucleation and growth. *Journal of materials science*. 2002, vol. 37, pp. 1321–1332. *https://doi.org/10.1023/a:1014556109351*
- **40.** Liu F., Sommer F., Bos C., Mittemeijer E.J. Analysis of solid state phase transformation kinetics: models and recipes. *International materials reviews*. 2007, vol. 52, no. 4, pp. 193–212. *http://dx.doi.org/10.1179/174328007X160308*
- **41.** Robson J. D. Modeling competitive continuous and discontinuous precipitation. *Acta Materialia*. 2013, vol. 61, no. 20, pp. 7781–7790. *http://dx.doi.org/10.1016/j.actamat.2013.09.017*
- **42.** Ranganathan S., Von Heimendahl M. The three activation energies with isothermal transformations: applications to metallic glasses. *Journal of Materials Science*. 1981, vol. 16, pp. 2401–2404.
- **43.** Liu F., Sommer F., Mittemeijer E. J. Analysis of the kinetics of phase transformations; roles of nucleation index and temperature dependent site saturation, and recipes for the extraction of kinetic parameters. *Journal of Materials Science*. 2007, vol. 42, pp. 573–587.
- **44.** Dill E.D., Folmer J.C.W., Martin J.D. Crystal growth simulations to establish physically relevant kinetic parameters from the empirical Kolmogorov–Johnson–Mehl–Avrami model. *Chemistry of Materials.* 2013, vol. 25, no. 20, pp. 3941–3951.
- **45.** Weinberg M.C. A test of the Johnson-Mehl-Avrami equation. *Journal of crystal growth*. 1987, vol. 82, no. 4, pp. 779–780. *https://doi.org/10.1016/S0022-0248(87)80025-8*
- **46.** Weinberg M.C., Birnie III D.P., Shneidman V.A. Crystallization kinetics and the JMAK equation. *Journal of non-crystalline solids*. 1997, vol. 219, pp. 89–99. *https://doi.org/10.1016/S0022-3093%2897% 2900261-5*
- **47.** Kelton K.F., Spaepen F.A study of the devitrification of Pd82Si18 over a wide temperature range. *Acta Metallurgica*. 1985, vol. 33, no. 3, pp. 455–464.
- **48.** Yinnon H., Uhlmann D.R. Applications of thermoanalytical techniques to the study of crystallization kinetics in glass-forming liquids, part I: theory. *Journal of Non-Crystalline Solids*. 1983, vol. 54, no. 3, pp. 253–275.
- **49.** Levine L.E., Narayan K.L., Kelton K.F. Finite size corrections for the Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov equation. *Journal of Materials Research*. 1997, vol. 12, pp. 124–132

- **50.** Chen L.Q. Annu Rev Mater Res. *Annu. Rev. Mater. Res.* 2002, vol. 32, pp. 113–140.
- Fallah V., Amoorezaei M., Provatas N., Corbin S. F., et al. Phase-field simulation of solidification morphology in laser powder deposition of Ti–Nb alloys. *Acta Materialia*. 2012, vol. 60, no. 4, pp. 1633–1646. *http://dx.doi.org/10.1016/ j.actamat.2011.12.009*
- **52.** Beckermann C., Diepers H. J., Steinbach I., Karma A., et al. Modeling melt convection in phase-field simulations of solidification. *Journal of Computational Physics*. 1999, vol. 154, no. 2, pp. 468–496.
- Böttger B., Apel M., Eiken J., Schaffnit P., et al. Phase-Field simulation of solidification and solid-state transformations in multicomponent steels. *Steel Research International*. 2008, vol. 79, no. 8, pp. 608–616. *http://dx.doi.org/10.2374/SRI08SP021-79-2008-608*
- **54.** Tiaden J. Phase-field simulations of the peritectic solidification of Fe-C. *Journal of Crystal Growth*. 1999, vol. 198, pp. 1275–1280.
- **55.** Steinbach I., Pezzolla F., Nestler B., Seeßelberg M., et al. A phase field concept for multiphase systems. 1996, vol. 94, no. 3, pp. 135–147.
- 56. Militzer M. Phase field modeling of microstructure evolution in steels. Current Opinion in Solid State and Materials Science. 2011, vol. 15, no. 3, pp. 106–115. https://doi.org/ 10.1016/j.cossms.2010.10.001
- 57. Pariser G., Schaffnit P., Steinbach I., Bleck, W. Simulation of the γ–α-transformation using the phase-field method. *Steel Research*. 2001, vol. 72, no. 9, pp. 354–360. *http://dx.doi.org/10.1002/srin.200100130*
- 58. Elder K.R., Grant M., Provatas N., Kosterlitz J. M. Sharp interface limits of phase-field modelsto *Physical Review E*. 2001, vol. 64, no. 2, article 021604. *http://dx.doi.org/10.1103/ PhysRevE.64.021604*
- 59. Jou H. J., Lusk M. T. Comparison of Johnson-Mehl-Avrami-Kologoromov kinetics with a phase-field model for microstructural evolution driven by substructure energy. *Physical Review B.* 1997, vol. 55, no. 13, pp. 8114. *http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.55.8114*

Сведения об авторах

Артем Дмитриевич Филяков, научный сотрудник Лаборатории электронной микроскопии и обработки изображений, Сибирский государственный индустриальный университет *E-mail:* filyakov.1999@mail.ru

ORCID: 0000-0002-8168-8809

Владимир Дмитриевич Сарычев, к.т.н., доцент, доцент кафедры естественнонаучных дисциплин имени профессора В.М.Финкеля, Сибирский государственный индустриальный университет *E-mail*: sarychev_vd@mail.ru

Илья Игоревич Чумачков, младший научный сотрудник, Сибирский государственный индустриальный университет *E-mail:* I.I.Chumachkov@yandex.ru ORCID: 0000-0003-4721-6821

Information about the authors

Artem D. Filyakov, Researcher of the Laboratory of Electron Microscopy and Image Processing, Siberian State Industrial University E-mail: filyakov.1999@mail.ru ORCID: 0000-0002-8168-8809

Vladimir D. Sarychev, Cand. Sci. (Eng.), Associate Professor of the Department of Natural Sciences named after Professor V.M. Finkel, Siberian State Industrial University

E-mail: sarychev_vd@mail.ru

Ilya I. Chumachkov, Junior Researcher, Siberian State Industrial University *E-mail:* I.I.Chumachkov@yandex.ru *ORCID:* 0000-0003-4721-6821

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

The authors declare that there is no conflict of interest.

Поступила в редакцию 15.05.2023 После доработки 09.06.2023 Принята к публикации 14.06.2023

> Received 15.05.2023 Revised 09.06.2023 Acceted 14.06.2023