

С.О. Федоряченко^{1,*}, к.т.н., доцент, ORCID 0000-0002-8512-3493**К.А. Зіборов**¹, к.т.н., доцент, ORCID 0000-0002-4828-3762**Д.В. Лаухін**¹, д.т.н., проф., ORCID 0000-0002-9842-499X**О.В. Швець**², к.т.н., ORCID 0009-0005-4871-4402**В.М. Король**¹, аспірант, ORCID 0009-0004-6433-1797**Д.В. Гаркавенко**¹, аспірант, ORCID 0009-0004-5011-9015¹ *Національний технічний університет «Дніпровська політехніка»*² *Український державний університет науки і технологій** *Автор для листування: fedoriachenko.s.o@ntu.one*

ОБЧИСЛЮВАЛЬНИЙ АЛГОРИТМ ОЦІНКИ ТРІЩИНОСТІЙКОСТІ СТАЛЕВИХ ВИЛИВКІВ НА ОСНОВІ ТЕРМОГІДРОДИНАМІЧНИХ СИМУЛЯЦІЙ

Анотація. У роботі представлено науково обґрунтований підхід до прогнозування та керування тріщиностійкістю литих сталевих оболонок, що ґрунтується на інтеграції термогідродинамічного моделювання процесів затвердіння з мікромоделями фазоутворення. Продемонстровано, що надійність і довговічність відливок безпосередньо визначаються контрольованістю мікроструктурного стану, який формується під час кристалізації та подальшого охолодження. Попри суттєвий прогрес у моделюванні теплових і гідродинамічних процесів лиття, практична перевірка якості здебільшого спирається на випробування, що збільшує собівартість виробництва й не гарантує відтворюваності властивостей. Для подолання цих обмежень запропоновано постпроцесорний модуль до системи Thercast, здатний поєднувати результати чисельного аналізу температурних полів із фізично обґрунтованими моделями еволюції мікроструктури та критеріями формування дефектів. Розроблений підхід дозволяє прогнозувати ключові мікроструктурні параметри на основі термополів та фазовим складом, а також відображати їхній вплив на пористість та прогнозовані механічні властивості матеріалу. Отримані карти фазового складу та пористості трансформуються у просторово-часові поля ефективної межі плинності й тріщиностійкості, що забезпечує можливість подальшої перевірки методом скінчених елементів. Методика базується на використанні термокінетичних моделей фазових перетворень, зокрема рівняння Ендрюса для визначення температури початку мартенситного перетворення, залежності Койстінена-Марбургера для оцінки частки мартенситу та узагальненої моделі Джонсона-Мелла-Аврамі-Колмогорова для опису дифузійних фазових змін. Застосовані залежності зберігають фізичну

© С. О. Федоряченко, К. А. Зіборов, Д. В. Лаухін, О. В. Швець, В. М. Король,
Д. В. Гаркавенко, 2026

Це стаття відкритого доступу за ліцензією CC BY-NC-ND 4.0
<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/legalcode.uk>

інтерпретацію та можуть бути адаптовані за термодинамічними діаграмами конкретних сплавів, що спрощує їх калібрування для різних марок сталі. Практичне значення роботи полягає у переході від експериментальної оцінки до попереднього прогнозування властивостей безпосередньо на етапі проєктування. Розроблений програмний модуль інтегрований у Thercast надає можливість проводити дослідження методом скінчених елементів.

Ключові слова: мікропористість, литі сплави, механіко-математичне моделювання, тріщиностійкість, Thercast.

Посилання для цитування: Обчислювальний алгоритм оцінки тріщиностійкості сталевих виливків на основі термогідродинамічних симуляцій / С. О. Федоряченко, К. А. Зіборов, Д. В. Лаухін, О. В. Швець, В. М. Король, Д. В. Гаркавенко // *Фундаментальні та прикладні проблеми чорної металургії*. 2026. Вип. 40. С. 98-109. <https://doi.org/10.52150/2522-9117-2026-40-006>

Вступ

Забезпечення прогнозованої тріщиностійкості литих сталевих оболонок безпосередньо зумовлюється контрольованістю мікроструктурного стану, який формується під час кристалізації та подальшого охолодження. Попри суттєвий прогрес у сфері термогідродинамічного моделювання процесів лиття, практична оцінка якості досі значною мірою спирається на випробування. Це підвищує собівартість виготовлення та не гарантує відтворюваності отриманих результатів. Інтеграція індексу Нійами для оцінювання повноти живлення, емпіричних залежностей міждендритного кроку (SDAS) та кінетичних моделей фазоутворення (Койстінен-Марбургер; Джонсон-Мелл-Аврамі-Колмогоров) створює цілісну основу для переходу від аналізу температурних полів до побудови предикторів дефектності та, зрештою, до розрахунку ефективних механічних характеристик, релевантних задачам скінчено-елементного аналізу [1-4].

На цьому тлі особливого значення набуває розроблення відтворюваного обчислювального інструменту, що поєднує результати термогідродинамічних симуляцій у Thercast із матеріалознавчими моделями еволюції мікроструктури та механіки руйнування. Аналіз технічної документації й допоміжних Python-скриптів свідчить, що наявні інструменти можуть бути розширені до рівня, коли з полів температури $T(x,t)$, її градієнтів ∇T та швидкості зміни T' безпосередньо формуються карти фазового складу та пористості. На цій основі можна будувати просторово-часові поля ефективної границі плинності та тріщиностійкості, придатні для подальшого динамічного моделювання роботи оболонок конструцій.

Запропонований підхід забезпечує послідовне узгодження ланцюга

«процес - структура - властивості», мінімізуючи розрив між термодинамікою затвердіння та параметрами, що визначають ініціювання і розвиток тріщин під дією імпульсних навантажень [5].

Метою дослідження є обґрунтування та розроблення постпроцесорного модуля для системи Thercast, призначеного для комплексного аналізу мікроструктурної еволюції та прогнозування механічних характеристик литих сталевих оболонок.

Запропонований модуль має забезпечити:

а) реконструкцію мікроструктурних параметрів на основі температурних полів, SDAS, індексу Нійями та фазового складу (частки перліту, бейніту, мартенситу);

б) відображення цих параметрів у дефектну структуру матеріалу шляхом застосування логістичних кривих;

в) трансформацію отриманих мікроструктурних карт у просторово-часові поля ефективних механічних властивостей, що можуть бути використані для верифікації методом скінчених елементів за умов динамічного навантаження.

Наукова новизна полягає в інтегрованому зв'язуванні фізично обґрунтованих мікромоделей із розрахунками процесів затвердіння. Такий підхід забезпечує можливість керування технологічними параметрами лиття на етапі проектування виробу з метою формування прогнозованої тріщиностійкості виливків та зменшення варіабельності їхніх експлуатаційних характеристик у серійному виробництві.

Методика дослідження

Методологія дослідження базується на інтеграції термодинамічного моделювання процесів лиття з матеріалознавчими моделями формування мікроструктури та багатокритеріальним описом дефектності. Застосовано методи математичного моделювання та програмування у середовищі Python для реалізації математичних моделей оцінки тріщиностійкості методом скінчених елементів у програмному забезпеченні Thercast

Для часової дискретизації застосовувався адаптивний крок 0,02-0,1 с із контролем збіжності. Граничні умови задані наступним чином. Тепловіддача на стінки форми з коефіцієнтом $400-900 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{К}^{-1}$, конвективно-радіаційний теплообмін на вільних поверхнях, фазові перетворення з урахуванням прихованої теплоти плавлення. Розраховані температурні поля $T(x,t)$, модуль градієнта $|\nabla T|$ та швидкість охолодження T експортувалися у формат *.vtu та піддавалися постпроцесингу за допомогою Python-модулів.

На початковому етапі має бути визначений індекс Нійями як ключовий критерій оцінки живлення та схильності до утворення

усадкової пористості:

$$N_y = \frac{|\nabla T|}{\sqrt{|\dot{T}|}} \quad (1)$$

Необхідною умовою є розрахунок часу затвердіння t_s і локальної швидкості охолодження R . Другий етап полягає у реконструкції мікроструктури та факторів, які її визначають, а саме температури початку мартенситного перетворення M_s на основі залежностей Ендрюса з хімічного складу плавки; встановлені частки мартенситу $f_M(T)$ за залежністю Койстінена-Марбургера; встановленні частки дифузійних продуктів за узагальненою моделлю Джонсона-Мелла-Аврамі-Колмогорова з інтеграцією швидкості перетворення $k(T)$ уздовж пружно-пластичної ланки скінчено-елементної сітки; вихначенні вторинного міждендритного кроку.

Наступним етапом дослідження є встановлення технологічних предикторів виникнення дефектів, таких як функція $\varphi(N_y)$, що перетворює N_y у системи вимірювань локальної частки пористості.

Для потреб подальшого скінчено-елементного моделювання напружено-деформованого стану сформульовано механічні властивості скінчено-елементної комірки досліджуваної моделі:

$$\sigma_{y,eff} = \sigma_{y0} [1 - k_\varphi \varphi - \frac{1}{100} (k_P f_P + k_B f_B + k_M f_M)], \quad (2)$$

$$K_{Ic,eff} = K_{Ic0} [1 - k_\varphi^* \varphi - \frac{1}{100} (k_P^* f_P + k_B^* f_B + k_M^* f_M)], \quad (3)$$

де $\sigma_{y,eff}$ - локальна межа плинності, МПа; σ_{y0} - експериментально встановлена межа плинності матеріалу, МПа; $K_{Ic,eff}$ - ефективна тріщиностійкість, МПа м^{1/2}; K_{Ic0} - базове значення ефективної тріщиностійкості, МПа м^{1/2}; φ - відносна локальна пористість; k_φ - коефіцієнт впливу пористості на межі плинності; k_φ^* - коефіцієнт впливу пористості на зниження ефективної тріщиностійкості; f_P, f_B, f_M - частки вмісту фаз перліту, бейніту, мартенситу відповідно; k_P, k_B, k_M - емпіричні коефіцієнти кореляції межі плинності; k_P^*, k_B^*, k_M^* - емпіричні коефіцієнти кореляції ефективної тріщиностійкості

Отримані коефіцієнти кореляції узгоджуються з результатами фізичних випробувань.

Чисельне моделювання зразків передбачає проведення експериментальних досліджень для визначення тимчасового опору розтягуванню та ударної в'язкості, а також оцінювання вмісту δ -фериту за еквівалентами DeLong/WRC-92.

Вихідні данні та результати дослідження

Результати моделювання фазових перетворень, литого виробу та дефектності сталей із прив'язкою до термічних полів і швидкостей охолодження реалізується із урахуванням узгодженої оцінки температури початку мартенситного перетворення, часток фаз за безперервного охолодження, міждендритного кроку та індексу Ніями з подальшим відображенням прогнозованих механічних властивостей. Застосовані рівняння зберігають відомі фізичні інтерпретації та легко калібруються за термокінетичними діаграмами конкретних плавов.

Температура початку мартенситного перетворення M_s і прогнозована частка мартенситу для сталей визначається із урахуванням того, що обсяг мартенситу після охолодження є критичним фактором, що впливає на якість готового продукту.

Температуру початку перетворення доцільно визначати за формулою Ендрюса:

$$M_s = \beta_0 - \sum_i \beta_i w_i \quad (4)$$

$$M_s [^\circ\text{C}] = 539 - 423C - 30,4Mn - 17,7Ni - 12,1Cr - 7,5Mo \quad (5)$$

де β_i - температурний коефіцієнт впливу i -го елемента; w_i - масова частка i -го легувального елемента у сплаві; i - індекс елементів (C , Mn , Cr тощо); β_0 - емпірично встановлена константа.

Для випадку, коли миттєва температура $T < M_s$, аустеніт стає термодинамічно нестійким до дифузійного мартенситного перетворення. За цієї умови формування мартенситу може протікати без повільної дифузії вуглецю чи легуючих елементів. Тоді, кількість утвореного мартенситу при охолодженні нижче температури M_s визначають емпіричною залежністю Койстінена-Марбургера:

$$f_M(T) = 1 - \exp[-\alpha(M_s - T)] \quad (6)$$

де $\alpha = 0,01-0,015 \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$

Як приклад, для аустенітної сталі 316L через високий вміст Ni , Cr , Mo може бути отримане низьке або від'ємне значення M_s , що узгоджується з відсутністю мартенситу за типової литої термоісторії.

Дифузійні перетворення за моделлю Джонсона-Мелла-Аврамі-Колмогорова визначається, виходячи з умови ізотермічного перетворення:

$$X(t) = 1 - \exp\{-[k(T)t]^n\}, \quad (7)$$

$$k(T) = k_0 \exp[-Q/R(T + 273,15)], \quad (8)$$

де $X(t)$ - частка перетвореної фази на момент часу t ; n - показник

Аврамі, що відображає механізм нуклеації ($n=1\dots 4$); $k(T)$ - температурно-залежний кінетичний коефіцієнт перетворення; k_0 - передекспоненційний множник рівняння Арреніуса; Q - енергія активації процесу перетворення, Дж; R - газова стала.

У випадку неізотермічного термодинамічного перетворення:

$$X(t) = 1 - \exp\{-[Z(t)]^n\}, \quad (9)$$

$$Z(t) = \int_0^t k(T(t')) dt', \quad (10)$$

де $Z(t)$ - час перетворення.

При обмежених вхідних даних термоісторії скінчено-елементної сітки результатів розрахунку моделі застосовано апроксимацію:

$$t_b \approx \frac{\Delta T_b}{|T|_{T_*}} \quad (11)$$

$$X \approx 1 - \exp[-k(T_*)t_b]^n \quad (12)$$

Зазначене коректно відтворює вплив охолодження об'ємів структур, що утворюються під час дифузії. Вторинний міждендритний крок (SDAS, λ_2) застосовується відповідно до емпіричної форми:

$$\lambda_2 = KR^{-n} \quad (13)$$

або

$$\lambda_2 = At_s^b \quad (14)$$

де R - локальна швидкість охолодження; t_s - час затвердіння; $n \approx b \approx 0,33$. Зменшення λ_2 корелює з підвищенням σ_y і зниженням схильності до утворення гарячих тріщин; K - коефіцієнт пропорційності ($K=0,33-0,5$).

Низькі значення N_y відповідають ризику виникнення усадкової мікропористості. Для побудови карт дефектності застосовано гладке відображення пористості φ :

$$\varphi(N_y) = \frac{\varphi_{max}}{1 + \exp[a(N_y - N_y^*)]} \quad (15)$$

де a , φ_{max} - емпіричні коефіцієнти.

Для оцінки очікуваної кількості δ -фериту замість повноцінного термодинамічного розрахунку застосовано емпіричні діаграми DeLong (рис. 1) та WRC-92 (рис. 2) [7] з метою переводу реального хімічного складу у еквіваленти хрому й нікелю (сукупний вплив легувальних елементів на стабільність фаз), за якими з діаграми визначається феритне число, наближене до об'ємної частки δ -фериту.

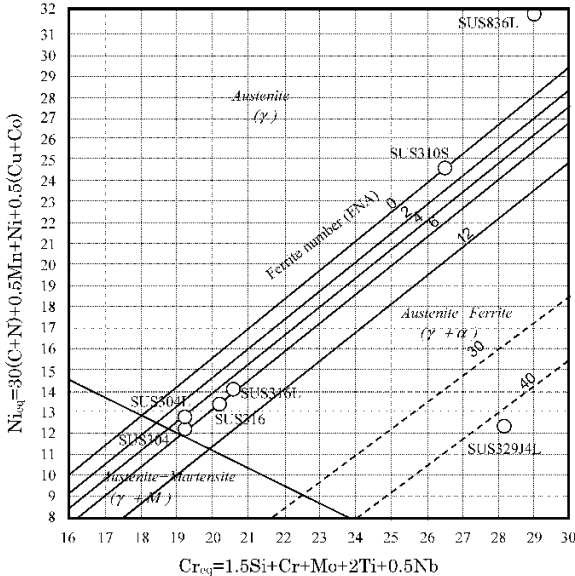


Рисунок 1 - Діаграма DeLong

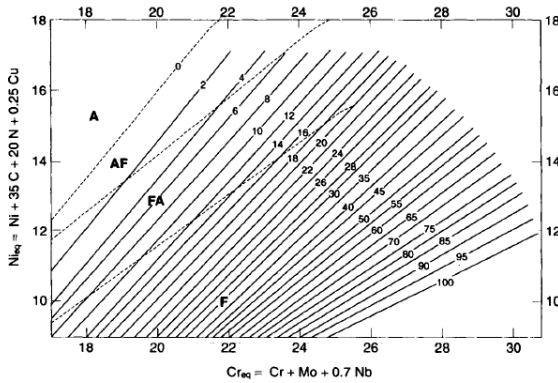


Рисунок 2 - Діаграма WRC-92

Ефективні властивості з урахуванням дефектності та фаз під час розрахунку методом скінчених елементів визначається у наступній формі:

$$\sigma_{y,eff} = \sigma_{y0} \left[1 - k_{\varphi} \varphi - \frac{1}{100} (k_P f_P + k_B f_B + k_M f_M) \right]_{\geq 0,1} \quad (15)$$

$$K_{Ic,eff} = K_{Ic0} \left[1 - k_{\varphi}^* \varphi - \frac{1}{100} (k_P^* f_P + k_B^* f_B + k_M^* f_M) \right]_{\geq 0,1} \quad (16)$$

Пористість найбільш суттєво знижує K_{Ic} , високий f_M підвищує

міцність, але зменшує ударну в'язкість.

Для проведення розрахунку та обчислення K_{Ic} методом скінчених елементів реалізовано скрипт розширення функціоналу Thercast. Код програмної реалізації приведено на рис. 3-5.

```
def compute_effective_fracture_toughness():
# -----
# Tunable parameters (set to your alloy/system)
# -----
K_IC_REF = 80.0 # Reference fracture toughness at T_REF [MPa^0.5 * m^0.5], edit to your material
T_REF = 20.0 # Reference temperature [°C]
BETA_dK_dT = 5.0e-4 # Linear softening per °C: K_IC(T)=K_IC_REF*(1 - BETA*(T - T_REF))
K_IC_MIN = 5.0 # Lower bound to prevent non-physical negative/near-zero toughness

# Stress state reduction parameters (bounded, conservative forms)
A_TRIAX = 0.75 # Strength of triaxiality penalty
B_LODE = 0.25 # Strength of Lode parameter penalty

# Compute von Mises, hydrostatic pressure, triaxiality, Lode parameter (element level)
# -----
vonmises = sqrt(0.5*(pow((sigma.xx()-sigma.yy()),2)+pow((sigma.yy()-sigma.zz()),2)+pow((sigma.zz()-sigma.xx()),2)) \
+3*((pow(sigma.xy(),2))+(pow(sigma.yz(),2))+(pow(sigma.xz(),2))))

# Hydrostatic pressure (positive in tension by this convention)
pressure = - ( sigma.xx() + sigma.yy() + sigma.zz() ) / 3.0

# Avoid division by zero in triaxiality: add a tiny floor to von Mises
vm_floor = replaceValuesBelow(vonmises, 1e-12, 1e-12)
Triaxiality_elt = - pressure / vm_floor

# Lode parameter based on J3 invariant and von Mises (bounded to [-1, 1])
J3_invariant = - ( sigma.xx()*sigma.yy()*sigma.zz() + 2*sigma.xy()*sigma.yz()*sigma.xz() \
- sigma.yy()*pow(sigma.xz(),2) - sigma.zz()*pow(sigma.xy(),2) - sigma.xx()*pow(sigma.yz(),2) ) / 27.0
Lode_param_elt = - 0.5 * 27.0 * J3_invariant / pow(vm_floor,3)
Lode_param_elt = replaceValuesBelow(Lode_param_elt, -1.0, 1.0)
Lode_param_elt = replaceValuesAbove(Lode_param_elt, 1.0, 1.0)
```

Рисунок 3 – Лістинг програмної частини встановлення вихідних даних

Рисунок 4 – Фрагмент алгоритму реалізації математичної моделі

```
# Material toughness law vs temperature (linear softening; clipped to [K_IC_MIN, +inf])
# K_IC(T) = K_IC_REF * (1 - BETA_dK_dT * (T - T_REF))
# -----
K_IC_T = K_IC_REF * (1 - BETA_dK_dT * (T_node - T_REF))
K_IC_T = replaceValuesBelow(K_IC_T, K_IC_MIN, K_IC_MIN)

# -----
# Stress-state reductions (bounded, simple, monotone penalties):
# f_triax = 1 / (1 + A_TRIAX * Triaxiality)
# f_lode = 1 - B_LODE * (1 - |Lode_param|) (max penalty at Lode=0, shear-like)
# Both clamped to [0,1]
# -----
# Ensure denominator positive
denom = 1 + A_TRIAX * Triaxiality
denom = replaceValuesBelow(denom, 1e-6, 1e-6)
f_triax = 1.0 / denom

abs_L = sqrt(Lode_param*Lode_param) # |L| without abs()
f_lode = 1 - B_LODE * (1 - abs_L)
f_lode = replaceValuesBelow(f_lode, 1e-3, 1e-3) # clamp to avoid zero

f_stress = f_triax * f_lode

# -----
# Effective fracture toughness field
# -----
K_eff = K_IC_T * f_stress
```

Рисунок 5 – Реалізація алгоритму розрахунку тріщиностійкості

На рис. 6 приведено результат прорахунку термомеханічної моделі лиття із визначенням K_{Ic} у діапазоні температур кристалізації та охолодження до 200 °С.

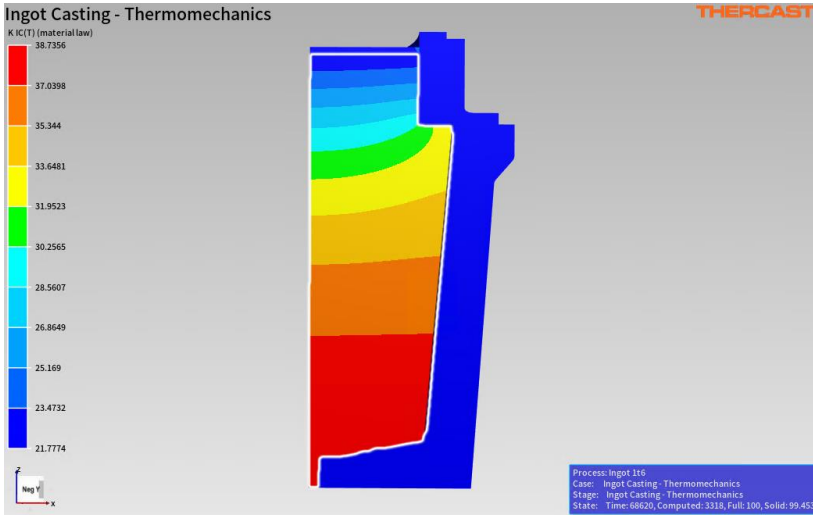


Рисунок 6 – Розподіл значень тріщиностійкості виливки у Thercast за розробленим алгоритмом

Таким чином, підтверджено роботоздатність математичної моделі та її програмної реалізації. Експериментальне підтвердження коректності наукового підходу буде підтвердження в ході продовження роботи над питанням моделювання ефективної тріщиностійкості.

Висновки

Запропоновано комплексний підхід до прогнозування тріщиностійкості литих сталевих виробів шляхом інтеграції термогідродинамічного моделювання процесів затвердіння у Thercast із фізично обґрунтованими мікромоделями фазоутворення та критеріями утворення дефектів. Розроблений постпроцесорний модуль відтворює мікроструктурні параметри, трансформує їх у карти пористості та ефективних механічних властивостей для подальшого використання у скінченно-елементному аналізі. Методика забезпечує узгоджену послідовність реалізації структури «процес - структура - властивості», даючи можливість на етапі проектування керувати параметрами лиття з метою формування прогнозованої тріщиностійкості та зниження девіації якості серійних виробів.

Перелік посилань

1. Kirkaldy J. S., Venugopalan D. Prediction of microstructure and hardenability in low alloy steels // *Int. Conf. on Phase Transformations in Ferrous Alloys*. Philadelphia, 1983. P. 125-148.
2. Buchmayr B. and Kirkaldy J. S. Modeling of the temperature field, transformation behavior, hardness and mechanical response of low alloy steels during cooling from the austenite region // *J. Heat Treating*. 1990. 8, № 2. P. 127-136.
3. Leblond J.-B., Devaux J. A new kinetic model for anisothermal metallurgical transformations in steel including effect of austenite grain size // *Acta Met.* 1984. 32, № 1. P. 137-146.
4. Костін, В. А., Позняков, В. Д., Берднікова, О. М., Жуков, В. В., Алексєнко, Т. О., Алексєнко, І. І. (2020). Вплив структурних перетворень на механічні властивості зварних з'єднань броньових сталей. *Фізико-хімічна механіка матеріалів*, 56(4), 78-83.
5. Вплив режимів термічної обробки на міцність і циклічну тріщиностійкість сталі 65Г / О. П. Осташ, В. В. Кулик, В. Д. Позняков, О. А. Гайворонський, В. В. Віра // *Фіз.-хім. механіка матеріалів*. - 2018. - 54, № 6. - С. 24-29.
6. Jonšta P., Kurka V., and coauthors. Casting and solidification simulation of 65 t steel ingot in Thercast software. In *Proceedings of the 31st International Conference on Metallurgy and Materials — METAL 2022* (pp. 1-6). Ostrava: TANGER Ltd. <https://doi.org/10.37904/metal.2022.4452>
7. Todoroki H., Oikawa M., Wang K., Kobayashi Y., Ishii T. (2008). Prospects for the control of solidification structures from the viewpoints of weld, hot-workability and near net shape casting. *ISIJ International*. 2008. Vol. 48. No. 3. P. 256-263. <https://doi.org/10.2355/isijinternational.48.256>
8. Andrews P. V. Resistivity due to grain boundaries in pure copper. *Physics Letters*. 1965. Vol. 19. Issue 7. P. 558-560, [https://doi.org/10.1016/0031-9163\(65\)90776-6](https://doi.org/10.1016/0031-9163(65)90776-6)

References

1. Kirkaldy, J. S. & Venugopalan, D. (1983). Prediction of microstructure and hardenability in low alloy steels. *Int. Conf. on Phase Transformations in Ferrous Alloys*. Philadelphia, 1983. P. 125-148.
2. Buchmayr, B. & Kirkaldy, J. S. (1990). Modeling of the temperature field, transformation behavior, hardness and mechanical response of low alloy steels during cooling from the austenite region. *J. Heat Treating*, 8(2), 127-136.
3. Leblond, J.-B. & Devaux, J. (1984). A new kinetic model for anisothermal metallurgical transformations in steel including effect of austenite grain size. *Acta Met*, 32(1), 137-146.
4. Kostin, V. A., Poznyakov, V. D., Berdnikova, O. M., Zhukov, V. V., Alekseenko, T. O., & Alekseenko, I. I. (2020). Influence of structural transformations on the mechanical properties of welded joints of armor steels. *Physicochemical Mechanics of Materials*, 56(4), 78-83.
5. Ostash, O. P., Kulyk, V. V., Poznyakov, V. D., Haivoronskyi, O. A., & Vira, V. V. (2018). Effect of heat treatment regimes on the strength and cyclic fracture toughness of 65G steel. *Physicochemical Mechanics of Materials*, 54(6), 24-29

6. Jonšta, P., Kurka, V., & coauthors. (2022, January). Casting and solidification simulation of 65 t steel ingot in Thercast software. In: *Proceedings of the 31st International Conference on Metallurgy and Materials — METAL 2022* (pp. 1-6). Ostrava: TANGER Ltd. <https://doi.org/10.37904/metal.2022.4452>
7. Todoroki, H., Oikawa, M., Wang, K., Kobayashi, Y., & Ishii, T. (2008). Prospects for the control of solidification structures from the viewpoints of weld, hot-workability and near net shape casting. *ISIJ International*, 48(3), 256-263. <https://doi.org/10.2355/isijinternational.48.256>
8. Andrews, P. V. (1965). Resistivity due to grain boundaries in pure copper. *Physics Letters*, 19(7), 558-560, [https://doi.org/10.1016/0031-9163\(65\)90776-6](https://doi.org/10.1016/0031-9163(65)90776-6)

S. O. Fedoriachenko^{1,*}, Ph. D. (Tech.), Associate Professor, ORCID 0000-0002-8512-3493

K. A. Ziborov¹, Ph. D. (Tech.), Associate Professor, ORCID 0000-0002-4828-3762

D. V. Laukhin¹, D. Sc. (Tech.), Professor, ORCID 0000-0002-9842-499X

O. V. Shvets², Ph. D. (Tech.), ORCID 0009-0005-4871-4402

V. M. Korol¹, Ph. D. Student, ORCID 0009-0004-6433-1797

D. V. Harkavenko¹, Ph. D. Student, ORCID 0009-0004-5011-9015

¹ Dnipro University of Technology

² Ukrainian State University of Science and Technologies

* Corresponding author: fedoriachenko.s.o@nmu.one

COMPUTATIONAL ALGORITHM FOR EVALUATING THE FRACTURE TOUGHNESS OF STEEL CASTINGS BASED ON THERMOHYDRODYNAMIC SIMULATIONS

Abstract. The paper presents a scientifically substantiated approach to predicting and controlling the fracture toughness of cast steel shells based on the integration of thermohydrodynamic solidification modeling with micro-scale phase transformation models. It is demonstrated that the reliability and durability of castings are directly determined by the controllability of the microstructural state formed during crystallization and subsequent cooling. Despite significant progress in modeling the thermal and hydrodynamic processes of casting, practical quality assessment still largely relies on testing, which increases production costs and does not guarantee reproducibility of properties. To overcome these limitations, a postprocessor module for the Thercast system is proposed, capable of combining the results of numerical analysis of temperature fields with physically based models of microstructure evolution and defect formation criteria. The developed approach enables the prediction of key microstructural parameters from thermal fields and phase composition and reflects their influence on porosity and the predicted mechanical properties of the material. The resulting maps of phase composition and porosity are transformed into spatio-temporal fields of effective yield strength and fracture toughness, allowing subsequent verification using the finite element method. The methodology is based on thermokinetic models of phase transformations, including the Andrews equation to determine the martensite start

temperature, the Koistinen-Marburger relationship to estimate the fraction of martensite, and the generalized Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov model to describe diffusion-controlled transformations. The applied relationships retain clear physical interpretation and can be adapted using thermokinetic diagrams of specific heats, which simplifies their calibration for different steel grades. The practical significance of this work lies in the transition from experimental evaluation to preliminary property prediction directly at the design stage. The developed software module, integrated into Thercast, provides the capability to perform finite element analyses for assessing the mechanical performance and fracture toughness of cast steel components.

Key words: microporosity, cast alloys, mechanical–mathematical modeling, fracture toughness, Thercast.

For citation: Fedoriachenko, S. O., Ziborov, K. A., Laukhin, D. V., Shvets, O. V., Korol, V. M., & Harkavenko, D. V. (2026). Computational algorithm for evaluating the fracture toughness of steel castings based on thermohydrodynamic simulations. *Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy*, 40, 98-109. <https://doi.org/10.52150/2522-9117-2026-40-006>

Рукопис надійшов до редакції / Received 12.11.2025

Рекомендовано до друку / Accepted 28.05.2026

Опубліковано / Published 30.05.2026