

18 1197-1200

铸钢件凝固过程中自然对流引起的宏观偏析模拟*

杜强 李殿中 李依依

(中国科学院金属研究所, 沈阳 110015)

摘要 使用 SIMPLER 算法, 基于体积平均的描述对铸件凝固宏观传输过程的温度场、溶质场、流场耦合模型进行了求解. 应用此模型对铸钢件凝固过程进行了模拟, 考察了自然对流对传热、传质的影响. 结果表明, 自然对流显著改变了糊状区等温线的形状与溶质浓度的分布. 此模型定量地预测了铸件的宏观偏析, 采用 Suzuki 判据, 计算出了 A 型偏析可能出现的位置.

关键词 宏观偏析, 自然对流, 数值模拟

中图分类号 TG115, TG142.45

文献标识码 A

文章编号 0412-1961(2000)11-1197-04

QUANTITATIVE PREDICTION OF MACROSEGREGATION FORMATION CAUSED BY NATURAL CONVECTION DURING SOLIDIFICATION OF STEEL CASTING

TG2603

DU Qiang, LI Dianzhong, LI Yiyi

Institute of Metal Research, The Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110015

Correspondent: DU Qiang, Tel: (024)29849591-55472, E-mail: qdu@imr.ac.cn

Manuscript received 2000-04-07, in revised form 2000-07-10

ABSTRACT The modeling of full coupling of the temperature, concentration and velocity fields during solidification of castings is solved using the SIMPLER algorithm. The model is applied into the large steel casting to examine the effect of thermosolutal convection on the heat and solute transfer mechanisms and further to predict the macrosegregation quantitatively. The natural convection dramatically alters the shape of the isotherms in muddy zone and the distribution of the solute. Suzuki criterion is applied to predict the presence of A-segregates.

KEY WORDS macrosegregation, natural convection, numerical calculation

符号说明

$D_1(D_s)$	液相(固相)扩散率, m^2/s
\bar{g}	重力加速度, m/s^2
$h_1(h_s)$	液相(固相)焓, J/kg
K	渗透率, m^2
k	平衡分配系数
l_s	逆扩散长度, m
p	压力, Pa
S_v	单位体积的界面面积, m^{-1}
T	温度, K
$T_1(T_s)$	液相(固相)线温度, K
t	时间, s
\vec{v}	流动速度, m/s

$w_1(w_s)$	液相(固相)质量分数
w_{s1}	固液界面处固相质量分数
β_c	溶质膨胀系数
β_T	热膨胀系数, K^{-1}
η	液相粘度系数, $kg/m \cdot s$
$\kappa_1(\kappa_s)$	液相(固相)热导率, $W/(m \cdot K)$
λ_1	一次枝晶臂距, μm
λ_2	二次枝晶臂距, μm
$\rho_1(\rho_s)$	液相(固相)密度, kg/m^3
$\varphi_1(\varphi_s)$	液相(固相)的体积分数

宏观偏析是指在铸件中合金成分在大于晶粒尺度范围内的不均匀分布, 它严重影响铸件的物理、力学性能, 且很难通过热处理、锻造等后续工序消除, 因而在凝固阶段尽量减小偏析程度. Flemings 等^[1]的工作表明, 铸件中多种截然不同的宏观偏析事实上都可由凝固时的传热、流动和传质过程来定量描述, 使得宏观偏析的定量计算成为

* 国家 973 超级钢资助项目 G1998061512

收到初稿日期: 2000-04-07, 收到修改稿日期: 2000-07-10

作者简介: 杜强, 男, 1974 年生, 满族, 博士生

可能. 从目前的研究结果看, 宏观偏析是由于以下 5 个因素的作用或相互作用而引起的, 即

- (1) 固液界面的不稳定现象和末端效应;
- (2) 液相中的搅拌;
- (3) 柱状晶区的枝晶熔断与迁移;
- (4) 等轴晶的迁移、沉积;
- (5) 自然对流.

可以看出, 对于宏观偏析的精确定量模拟, 只有建立了溶质场、流场、温度场的三场耦合模型才有可能实现. 其中的难点在于追踪液相 / 固液两相区界面、固液两相 / 固相区界面. Bennon 和 Incropera^[2] 应用经典混合理论, 建立了凝固时传热、传质和传动力过程耦合的连续模型. Ni 和 Beckermann^[3] 提出基于体积平均概念的三场耦合模型, 这两个模型克服了上述难点, 它们在固相、液相和固液两相区的宏观传输的方程形式是一致的, 这样, 无需追踪界面, 简化了计算. 国内外很多学者将这些模型应用于不同合金、不同凝固方式, 这些模型不但可以用来考察热溶质对流对枝晶臂熔断导致的形核、柱状晶取向、柱状晶等轴晶转变等的影响, 而且, 可以直接计算出宏观溶质场的分布、预测宏观偏析^[4-7].

对于大型铸件, 采用反复实验消除偏析的方法费用高、周期长, 而计算机模拟与实验相结合的方法显示出了优势. 本文使用 SIMPLER 算法, 基于体积平均模型, 开发了计算溶质场、流场、温度场的程序, 对大型铸钢件的偏析作了定量预测, 使用 Suzuki 判据^[8], 指出了 A 型偏析可能出现的位置, 计算结果较好地反映了铸件中的偏析趋势. 该三场耦合模拟为微观组织模拟奠定了基础, 通过将三场模型与微观形核生长动力学相结合, 可以深入模拟铸件在不同工艺条件下的组织形态.

1 凝固过程温度场、溶质场及流场耦合模型

二元合金在凝固过程中, 伴随着能量、溶质、动量的传输, 还会发生固液相变, 释放结晶潜热. 基于 Schneider 等^[9] 体积平均的双相模型, 假设

- (1) 固相速度为零;
- (2) 在一个计算单元内, 瞬间能达到热平衡;
- (3) 在一个计算单元内, 液相溶质充分扩散;
- (4) 在固液界面上局部热力学平衡假设成立;
- (5) 在处理自然对流时, 采用了 Boussinesq 近似.

其主要思想为: 流体的自然对流运动是由于地心引力产生的, 所以在偏微分方程中除了地心引力这一项中的密度视为变量外, 其余各项中的密度可近似作常量处理.

从而, 有如下控制凝固过程的方程

质量守恒方程

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varphi_1 \rho_1) + \nabla \cdot (\varphi_1 \rho_1 \langle \vec{v}_1 \rangle) = -\frac{\partial}{\partial t}(\varphi_s \rho_s) \quad (1)$$

液相溶质守恒方程

$$\begin{aligned} \varphi_1 \rho_1 \frac{\partial \langle w_1 \rangle}{\partial t} + \varphi_1 \rho_1 \langle \vec{v}_1 \rangle \cdot \nabla \langle w_1 \rangle = \\ \nabla \cdot (\varphi_1 \rho_1 D_1 \nabla \langle w_1 \rangle) - \varphi_s \rho_s \frac{\partial \langle w_s \rangle}{\partial t} + \\ (\langle w_1 \rangle - \langle w_s \rangle) \frac{\partial}{\partial t}(\varphi_s \rho_s) \end{aligned} \quad (2)$$

固相溶质守恒方程

$$\begin{aligned} \varphi_s \rho_s \frac{\partial \langle w_s \rangle}{\partial t} = (\langle w_{sl} \rangle - \langle w_s \rangle) \cdot \\ \left[\frac{\partial}{\partial t}(\varphi_s \rho_s) + S_s \frac{\rho_s D_s}{l_s} \right] \end{aligned} \quad (3)$$

能量守恒方程

$$\begin{aligned} \varphi_1 \rho_1 \frac{d \langle h_1 \rangle}{dT} \frac{\partial T}{\partial t} + \varphi_1 \rho_1 \frac{d \langle h_1 \rangle}{dT} \langle \vec{v}_1 \rangle \cdot \nabla T = \\ \nabla \cdot [(\varphi_1 \kappa_1 + \varphi_s \kappa_s) \nabla T] - \varphi_s \rho_s \frac{d \langle h_s \rangle}{dT} \frac{\partial T}{\partial t} + \\ (\langle h_1 \rangle - \langle h_s \rangle) \frac{\partial}{\partial t}(\varphi_s \rho_s) \end{aligned} \quad (4)$$

液相动量守恒方程

$$\begin{aligned} \varphi_1 \rho_1 \frac{\partial \langle \vec{v}_1 \rangle}{\partial t} + \varphi_1 \rho_1 \langle \vec{v}_1 \rangle \cdot \nabla \langle \vec{v}_1 \rangle = \\ -\varphi_1 \nabla p + \nabla \cdot (\varphi_1 \rho_1 \gamma \nabla \langle \vec{V}_1 \rangle) + \nabla \cdot \{ \varphi_1 \rho_1 \gamma \cdot \\ (\nabla \langle \vec{v}_1 \rangle)^t + \rho_1 \gamma (\langle \vec{v}_1 \rangle \nabla \varphi_1 + \nabla \varphi_1 \langle \vec{v}_1 \rangle) \} + \\ \langle \vec{v}_1 \rangle \frac{\partial}{\partial t}(\varphi_s \rho_s) - \varphi_1^2 \rho_1 \gamma K^{-1} \langle \vec{v}_1 \rangle - \varphi_1 \rho_1 \vec{g} \cdot \\ [\beta_T (T - T_{ref}) + \beta_c (\langle w_1 \rangle - w_{ref})] \end{aligned} \quad (5)$$

其中

$$\varphi_1 = \frac{T - T_s}{T_l - T_s}$$

$$\varphi_s = 1 - \varphi_1$$

$$w_{sl} = k \langle w_1 \rangle$$

$$K = 6 \times 10^{-4} \lambda_1^2 \frac{\varphi_1^3}{(1 - \varphi_1)^2}$$

$$S_s = \frac{2}{\lambda_2}$$

$$l_s = \frac{\varphi_s \lambda_2}{6}$$

$$\rho_1 = \rho_s = 7300$$

这里, 主变量分别为 $\langle w_1 \rangle$, $\langle w_s \rangle$, T , $\langle \vec{v}_1 \rangle$ 和 p . $\langle w_1 \rangle$, $\langle w_s \rangle$, $\langle \vec{v}_1 \rangle$ 是 w_1 , w_s , \vec{v}_1 在计算单元内的平均量, T_{ref} 与 w_{ref} 指参考温度与溶质浓度, 这组方程完整描述了铸件凝固的宏观传输过程, 各个符号的说明见文首. 在 Fe-C 合金凝固时, 通常会出现 A 偏析, A 偏析的出现是由于枝晶间的液相流动到低温区引起的固相重熔导致的. 使用本模

型, 结合 Suzuki 判据, 可以预测铸件 A 偏析可能出现的位置。

2 数值计算方法

SIMPLER 方法^[10]是 Patankar 提出的用于流场计算的一种有限差分算法, 该算法收敛速度快, 适合于多场耦合计算。在三场耦合模拟及数值计算过程中, 还有几点需要注意: 首先, 剖分单元的尺寸对于本单元的固相分数的计算有很大的影响, 如果剖分单元的尺寸小于等轴晶粒的尺寸, 则固相分数的值不会连续; 如果太大, 则会影响计算精度。剖分单元的尺寸必须同时确保计算精度与固相分数的值连续。其次, 宏观传输过程与微观组织的形成过程的相互影响是通过固相分数来相互耦合的。因而, 对于固相分数的计算公式显得极为重要, 较为常用的有适用于较低凝固速率的杠杆法则, 固相无扩散、液相完全扩散的 Scheil 模型。Clyne 和 Kurz^[11]考虑逆扩散 (back diffusion), 提出了一个固相分数模型。在柱状晶生长过程中, 有些学者尝试建立固相分数与枝晶尖端生长速度之间的关系, 也有些学者考虑了固相分数与溶质浓度的关系, 这些都会使得固相分数的计算更加精确, 但同时计算所需的时间也是相当长的。

3 计算结果

计算的铸件几何形状如图 1 所示。温度场的边界条件为: 铸件的上、下、右面为绝热, 左面向外单向散热, 热通量为 $150 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$, 环境温度为 293 K 。溶质场的边界条件为: 固相、液相溶质在边界处通量为 0。流场边界为非滑移边界 (no-slip)。选择的合金为 Fe-C 合金。温度场的初始条件为: 所有点的温度值为 1813 K ; 溶质场的初始条件为均匀溶质场, 大小为 0.008, 初始速度场为 0。Fe-C 合金的物性参数如表 1 所示, 对于宏观传输模型所需的微观参数, 一次臂距 λ_1 为 $350 \mu\text{m}$, 二次臂距为 $75 \mu\text{m}$ 。在 DELL PIII-733 微机上计算, 需要一周的时间。

钢锭的三场耦合模拟计算结果如图 2 所示, 图 2a 和 c 中的不同深浅度分别对应温度、溶质数值的大小。图 2a 中的右侧窄条是温度场的标尺, 每种衬度对应的温度值用其右边的数值注明, 单位为 $^{\circ}\text{C}$ 。图 2b 中的速度值的大小用箭头的长短表示, 方向由箭头所示方向注明, 单位为 m/s 。图 2c 中的右侧窄条是溶质浓度 (质量分数) 的标尺。由图

2a 和 c 可见, 在经过 2078.72 s 时, 靠近锭模端已凝固, 引起固液界面前沿溶质富集, 由于自然对流作用, 富集的液相向外流动, 聚集在底部, 形成负偏析。考虑与不考虑自然对流的温度场差别是很明显的。如不考虑对流, 热量将单向散热, 必然形成顺序凝固; 而在自然对流作用下, 凝固方向明显改变。

图 2b 中自然对流方向为逆时针方向。固液界面前沿由于温度差和浓度差较大, 对流速度也相对较大。经过 1278.7 s 时, 靠近型壁处已经凝固, 凝固层大约为整个铸件的 15%, 对流速度为 0, 由于自然对流引起的长尺度的溶质传输形成了宏观偏析, 见图 2c。由图可见, 在铸锭底部形成负偏析, 在顶部形成正偏析。Suzuki 和 Miyamoto 指出, A 型偏析通常在如下位置容易产生, 应满足条件

$$R^{-2.1} \cdot G^{1.1} \geq \beta \quad (6)$$

式中, R 为凝固冷却速度; G 为温度梯度; β 为临界常数, $\text{s}/(\text{K} \cdot (\text{m}/\text{s})^{1.1})$ 。式 (6) 中左边值越大, 越易形成 A 型偏析。应用 Suzuki 判据预测铸件 A 型偏析可能出现的位置, 结果如图 3 所示, 衬度与判据值的对应关系由图 3 右边的窄条说明, 在最后凝固部分易形成 A 型偏析。

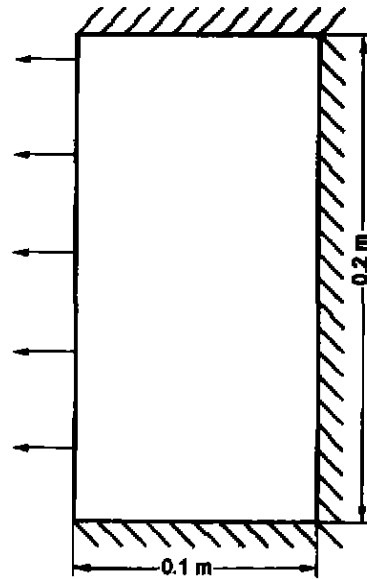


图 1 几何形状示意图

Fig.1 Schematic diagram of the simulated casting

表 1 铸件的热物性参数

Table 1 Thermophysical properties of Fe-C casting

Concentration of C mass fraction	Solutal expansion coefficient, $\beta_c, 10^{-4}$	Thermal expansion coefficient, $\beta_T, 10^{-4}$	Mass diffusivity in liquid, $D_l, 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$
0.8	110	4	2
Mass diffusivity in solid, $D_s, \text{ m}^2/\text{s}$	Thermal conductivity in liquid, $\kappa_l, \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$	Thermal conductivity in solid, $\kappa_s, \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$	Kinematic viscosity $\eta, 10^{-3} \text{ kg}/(\text{m}\cdot\text{s})$
5.6	27	30	0.6

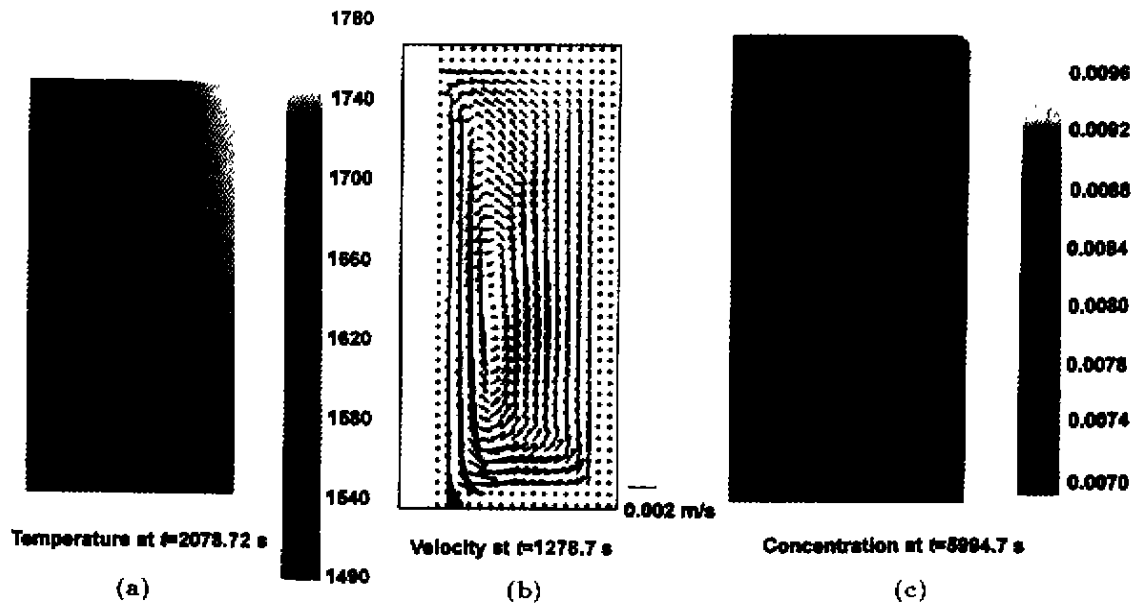


图2 钢锭的三场耦合模拟计算结果

Fig.2 The results of full coupling of heat, momentum and mass fields in steel ingot during solidification fields
(a) temperature field (K) (b) velocity field (c) concentration field (mass fraction)

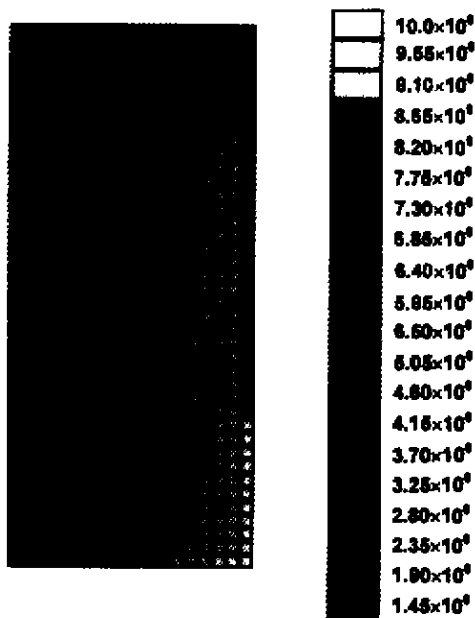


图3 预测A型偏析的Suzuki判据值

Fig.3 The results of Suzuki criterion for prediction of A-segregation

4 结论

(1) 三场耦合模型完整地描述了铸件凝固的宏观传输过程, 根据该模型, 定量预测了热溶质对流引起宏观偏析

缺陷.

(2) 使用 Suzuki 判据, 预测了 A 型偏析可能出现的位置.

(3) 求解三场耦合的数值算法的效率有待提高, 特别是动量传输的控制方程, 它是耦合计算的关键. 在固相分数的计算中, 进一步的研究应考虑与形核、生长动力学模型结合, 提出更为精确的固相分数计算模型.

参考文献

- [1] Flemings M C, Mehrabian R, Nereo G G. *Trans AIME*, 1968; 242: 41
- [2] Bennon W D, Incropera F P. *Int J Heat Mass Transfer*, 1987; 30: 2161
- [3] Ni J, Beckermann C. *Metall Trans*, 1991; B22: 349
- [4] Rappaz M. *Int Mater Rev*, 1989; 34(3): 33
- [5] Felicelli S D, Poirier D R, Heinrich J C. *Metall Mater Trans*, 1998; B29: 847
- [6] Reddy A V, Beckermann C. *Metall Mater Trans*, 1997; B28: 479
- [7] Gu J P, Beckermann C. *Metall Mater Trans*, 1999; A30: 1357
- [8] Moore B, Shah C. *Int Mater Rev*, 1983; 28: 345
- [9] Schneider M C, Beckermann C. *Int J Heat Mass Transfer*, 1995: 298
- [10] Patankar S V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. New York: McGraw-Hill, 1980: 131
- [11] Clyne T W, Kurz W. *Metall Trans*, 1981; A12: 965