

基于热溶质对流及晶粒运动的柱状晶-非球状等轴晶 混合三相模型*

李 军¹⁾ 葛鸿浩¹⁾ WU Menghuai^{2,3)} LUDWIG Andreas²⁾ 李建国¹⁾

1) 上海交通大学材料科学与工程学院, 上海 200240

2) Simulation and Modeling of Metallurgical Processes, University of Leoben, A-8700, Austria

3) Christian-Doppler Lab for Advanced Process Simulation of Solidification and Melting, University of Leoben, A-8700, Austria

摘 要 基于 Eulerian-Eulerian 方法, 阐述了简化枝晶状等轴晶、柱状晶以及金属液三相完全混合的凝固模型. 模型考虑了等轴晶的移动及柱状晶对等轴晶的捕获, 跟踪了柱状晶尖端的位置并考虑了等轴晶和柱状晶的相互竞争生长, 因此该模型具备了预测柱状晶向等轴晶转变(CET)的能力; 为了在不过量增加计算量的前提下提高模型的精度, 模型对等轴晶采取了简单的枝晶化处理, 即采用简化方法描述等轴晶包络线内固相分数. 分别模拟了 3.25 和 25 t 钢锭的凝固过程, 成功预测了大型钢锭凝固过程所形成的底部锥形负偏析、“类-A 型”偏析以及 CET 等现象. 分析认为长细形状铸锭中出现的顶部负偏析区, 是由于凝固后期所形成的局部小钢锭及等轴晶在其内部的沉积聚集而成.

关键词 数值模拟, 宏观偏析, 钢锭, 晶粒运动, CET

中图法分类号 TG261

文献标识码 A

文章编号 0412-1961(2016)09-1096-09

A COLUMNAR & NON-GLOBULAR EQUIAXED MIXED THREE-PHASE MODEL BASED ON THERMOSOLUTAL CONVECTION AND GRAIN MOVEMENT

LI Jun¹⁾, GE Honghao¹⁾, WU Menghuai^{2,3)}, LUDWIG Andreas²⁾, LI Jianguo¹⁾

1) School of Materials Science and Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China

2) Simulation and Modeling of Metallurgical Processes, University of Leoben, A-8700, Austria

3) Christian-Doppler Lab for Advanced Process Simulation of Solidification and Melting, University of Leoben, A-8700, Austria

Correspondent: WU Menghuai, professor, Tel: (0043)3842-4023103,

E-mail: menghuai.wu@unileoben.ac.at

Support by Christian-Doppler Lab for Advanced Process Simulation of Solidification and Melting (Austria), National Natural Science Foundation of China (No.51404152), National Basic Research Program of China (No.2011CB012900), Shanghai Pujiang Program (No.14PJ1404800) and Shanghai International Cooperation Project (No.14140711-000)

Manuscript received 2015-12-07, in revised form 2016-04-29

ABSTRACT The prediction of the macrosegregation in large ingot is a challenging issue due to the size of the ingots and the variety of the phenomena to be accounted for, such as thermal-solutal convection of the liquid,

* 克里斯汀-多普勒(先进凝固和融化模拟实验室)项目, 国家自然科学基金项目 51404152, 国家重点基础研究发展计划项目 2011CB012900, 上海市浦江人才支持计划项目 14PJ1404800 和上海市国际合作项目 14140711000 资助

收到初稿日期: 2015-12-07, 收到修改稿日期: 2016-04-29

作者简介: 李 军, 男, 1984 年生, 讲师

DOI: 10.11900/0412.1961.2015.00627

equiaxed grain motion, evolution of grain morphology by suitably considering a coupled grain growth model in the macroscopic solidification model, the columnar-to-equiaxed transition (CET), and shrinkage, *etc.*. Each of these phenomena is very important to the solidification pattern, while it is impossible for one model to consider all the phenomena together until now due to the computation power limited. Thus, the model capability and computational cost should be counterpoised for the simulation of large ingot. In this work, a mixed three-phase (simplified dendritic-equiaxed, columnar and liquid) solidification model is described based on Eulerian-Eulerian approach and volume average method. The model considers the thermosolutal buoyancy flow, the movement of equiaxed crystal, and the capture of the equiaxed crystals by growing columnar tree trunks. The mechanical interaction and impingement between columnar and equiaxed crystals are considered which give the capability to predict CET. In order to enhance the model capability without increasing the computational cost significantly, a simplified method is proposed to consider the dendritic of equiaxed crystal. This model is employed to simulate the formation process of macrosegregation for two different steel ingots (3.25 and 25 t). The general macrosegregation pattern predicted by this model includes the cone of negative segregation in the bottom of ingot, quasi-A-segregation in the columnar zone, and positive segregation in the top region, which are quite similar to the classic knowledge. The CET zones are also predicted. Although there is still some quantitative discrepancy, the macrosegregation distribution predicted by this model is quite similar to the experimental measurements. The non-globular equiaxed three-phase mixed model results are compared with the globular-equiaxed mixed three-phase model ones, which indicated that for large ingots the equiaxed dendritic structure plays an important role in liquid flow and it affects final characteristic of macrosegregation. It is predicted successfully that a negative segregation zone would be formed in the upper region due to the formation of a local mini-ingot and the subsequent sedimentation and piling up of equiaxed grains within the mini-ingot.

KEY WORDS numerical simulation, macrosegregation, steel ingot, grain movement, CET

在合金凝固过程中, 因固相溶解度往往小于液相溶解度, 导致凝固过程中发生溶质再分配, 使得早凝固区的溶质含量小于后凝固区. 由此而产生在固液相之间成分的不均匀, 称之为微观偏析^[1]. 微观偏析体现在晶粒尺度为微米级. 同时, 如果各相间存在着相对运动, 偏析在大尺度范围内出现, 此类偏析称之为宏观偏析. 宏观偏析一般发生在毫米及以上尺度, 对于大型铸件为分米甚至米级^[2]. 铸件中的微观偏析可以通过后续的热处理得以消除, 而宏观偏析在后续加工过程中几乎不能改善, 因此如何降低铸件中的宏观偏析一直是铸造研究者非常关注的问题^[3-6].

早期研究中, Flemings 和 Nereo^[7]提出了著名的“局部溶质再分布方程”, 该方程的提出标志着宏观偏析模型化的突破. 该模型首次将逆偏析、负偏析、“A-型”偏析等不同类型宏观偏析的形成机制统一为同一个数学模型, 并指出, 这些宏观偏析均为枝晶间富集(或贫集)溶质的液相在固相以及其周边液相的相对移动行为所致. 这种相互移动主要包括^[8-11]: (1) 凝固收缩; (2) 自然以及强制对流; (3) 晶粒移动; (4) 糊状区的变形. 但 Flemings 理论不能对等轴晶的运动进行分析.

通常, 对铸造宏观偏析的数值模拟预测需要综合考虑以下因素: (1) 热-溶质对流; (2) 晶粒的运动;

(3) 晶粒的形核、长大及断裂; (4) 柱状晶与等轴晶的竞生长及相互作用, 以及因此而产生的柱状晶向等轴晶转变(CET); (5) 凝固收缩等等. 各个因素对所形成的宏观偏析都有着重大影响, 但第一代偏析模型基本只考虑了1种或者2种因素^[12-14]. 其中 Ols-son 等^[14]基于等轴晶沉积区相对高度与固相率的相互关系, 建立了简单的可预测底部负偏析区的模型, 该模型应用于 1.7 t 钢锭. Mehrabian 等^[12]建立了适用于侧向凝固的偏析模型, 该模型考虑了凝固收缩流及自然对流.

20 世纪末, Schneider 和 Beckermann^[15]采用体平均法耦合质量、动量、能量以及溶质传输方程, 建立了可适用于多组分合金的两相宏观偏析模型. 随后 Liu 等^[16]基于此模型建立了两相连续模型, 该模型进一步考虑了晶粒的形核及生长, 并先后被应用于 3.3 t^[17], 5 t^[18] 及 360 t^[19] 钢锭的宏观偏析分析. Li 等^[20]和 Tu 等^[21]采用类似的处理考虑了铸锭凝固过程的凝固收缩, 并将模型应用于大型铸锭的数值模拟预测. Combeau 等^[22]考虑了等轴晶的形核以及等轴晶形貌的发展演变, 该模型被 Ge 等^[23]进一步延伸并成功预测了大型铸锭中的“A-型”偏析.

但是上述模型均没有明确区分等轴晶与柱状晶的生长, 未能考虑柱状晶-等轴晶的竞争生长及相互作用, 因此不能预测 CET. Wu 和 Ludwig^[24,25]建

立了柱状晶-等轴晶混合三相模型,成功预测了模型铸锭底部锥形负偏析及顶部正偏析区,并首次在宏观上预测了 CET. 本文作者利用 Wu-Ludwig 模型成功预测了大型铸锭凝固过程中宏观偏析的形成过程^[26,27],包括铸锭底部的锥形负偏析、顶部正偏析区、类“A-型”偏析、类“V-型”偏析以及 CET 转变区. 然而模型将等轴晶简化为球形,导致过度预测了底部负偏析的严重程度. 本工作基于之前模型,建立考虑简化等轴晶枝晶结构的等轴晶、柱状晶、液相三相混合凝固模型,并将其应用于不同大小(3.25 和 25 t)工业铸锭的凝固过程,研究钢锭凝固过程宏观偏析的形成过程及机理.

1 模型介绍

1.1 模型描述

(1) 凝固过程中铸锭内部存在三相即液相、柱状晶及等轴晶相,分别由下标 l, c, e 表示,对应的体积分数分别由 f_l, f_c, f_e 表示,且 $f_l+f_c+f_e=1$. 其中液相及等轴晶相均为可自由移动相,柱状晶在凝固过程中不能移动,因此不需要求解柱状晶相的动量传输方程.

(2) 随着铸件温度的逐渐降低,柱状晶从铸件的侧壁及底部慢慢生长. 柱状晶被近似假设为层状长大的圆柱体. 模型同时跟踪了柱状晶尖部在凝固过程的发展进程.

(3) 一种简化的枝晶模型被用于模拟等轴晶的枝晶结构^[28],如图 1 所示. 等轴晶在熔融金属液的拖拽力以及重力的作用下流动,但同时也会受到柱状晶的捕获以及相邻等轴晶之间的相互阻碍力.

(4) 采用 Rappaz^[29]提出的异质形核模型来模拟等轴晶的形核. 枝晶断裂而成为新的等轴晶这一现

象没有考虑进去.

(5) 在热力学参数上,模型近似采用二元线性 Fe-C 相图作为钢的相图,即平衡分配系数 k 以及液相线斜率 m 为常数.

(6) 模型采用 Boussinesq 方法^[24]计算了凝固过程中的热-溶质对流. 模型忽略了凝固收缩,因此模型不能预测凝固收缩.

对三相凝固模型的详细介绍参考文献[24,25,27,30,31].

1.2 等轴晶枝晶简化模型

本文作者前期工作^[27]采用球状等轴晶-柱状晶三相混合模型比较合理地预测了大型钢锭凝固过程的宏观偏析分布规律. 然而,该模型将等轴晶晶粒假设为球状,导致过度预测了铸锭底部负偏析区域负偏析的严重程度. 将等轴晶晶粒处理为球状存在 2 方面的不足:一方面,过小预测了等轴晶沉积过程中液相对其拖拽阻力,因此过大预测了等轴晶的沉积速率(R_i);另一方面,枝晶间液体(图 1)含有比周边液体较高的溶质含量,而球状等轴晶模型没有将枝晶间的液体单独考虑,因此过低预测了等轴晶晶粒的溶质含量(R_s). 这 2 方面的最终结果导致了模型所预测的等轴晶区负偏析程度比实际过大. 因此,为了提高模型的计算精度,有必要对等轴晶晶粒进行枝晶化处理.

图 1 为简化等轴晶枝晶示意图,枝晶包含一次枝晶和二次枝晶. 将二次枝晶尖端与一次枝晶尖端逐次连接起来,就构成了等轴晶枝晶的轮廓即包络线. 在等轴晶包络线内部包含 2 部分:枝晶间液相 $f_{env,l}$ 以及枝晶内部固相 f_e ,且 $f_{env,l}+f_e=f_{env}$. 定义等轴晶包络线内部固相分数 $f_{si}=f_e/f_{env}$ ($f_{si}\leq 1$,当 $f_{si}=1$ 时,为球状等轴晶). 因此铸件中有 2 部分液体:包络线外部液相 $f_{ext,l}$,以及枝晶间液相 $f_{env,l}$,总的液相体积分数可以表示为 $f_{ext,l}+f_{env,l}=f_l$. 因此,实际有 $f_l+f_e+f_c=1$ 以及 $f_{ext,l}+f_{env,l}+f_c+f_e=1$. 以包络线中心为球心,做一个球使其体积等于包络线的体积,对应的直径 d_{env} 即为等轴晶包络线的等效直径. 同理,做一个体积与包络线内部固相相等的球,对应的直径 d_e 即为等轴晶内固相等效直径.

理论上包络线内部固相以及液相为不同的相,需要分别定义,并且分别考虑等轴晶包络线及内部固相的生长. 包络线内部固相的生长可采用溶质扩散理论进行计算,而包络线的生长则可采用经典的 Lipton-Glicksman-Kurz (LGK) 模型计算枝晶尖端生长速率,对其进行时间积分并与几何形状因子 φ_e 相

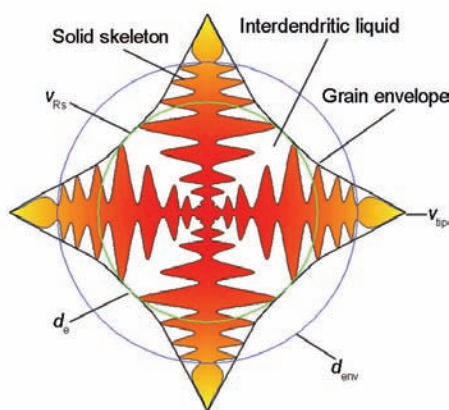


图 1 枝晶状等轴晶示意图^[28]

Fig.1 Schematic of equiaxed dendritic structure and envelope^[28] (v_{tip} —dendritic tip growth velocity; d_{env} —equiaxed envelope diameter; d_e —equiaxed solid diameter; v_{Rs} —growth velocity of solid)

乘^[28,32,33]. 因此, 只要知道每个控制体积中包络线内部的固相分数 f_{si} 以及形状因子 φ_e , 就可以确定等轴晶枝晶的形貌. 但是分别计算包络线(f_{env})及包络线内部固相(f_s)的生长速率将大量增加整个模型的复杂程度, 影响模型的计算速度而限制模型在大型铸锭中的应用. 因此, 为了不过多增加计算量, 本工作提出一种简化枝晶模型:

(1) 模型不直接求解 f_{env} , 而是通过求解 f_e 及 f_{si} 显性求解 f_{env} .

(2) 在控制体积中采用简单方程求解 f_{si} , 即建立一个 f_{si} 与过冷度 ΔT 及时间 t 的简单函数关系: $f_{si}=f(\Delta T, t)$ ^[34]来获得 f_{si} .

如此简化可近似弥补上述的 R_1 问题, 但是对 R_2 问题没有做处理. 因此该简化处理与理论模型有一定偏差. 基于上述简化, 该模型与之前的球状等轴晶-柱状晶三相混合模型^[24,25,27,30,31]主要存在以下方面的修改:

(1) 枝晶状等轴晶的黏度计算

等轴晶的黏度 μ_e 由有效黏度推出, 即:

$$\mu_e = \frac{\mu_1}{f_1} ((1 - f_s/f_s^c)^{-0.25 \cdot f_s^c} - (1 - f_s)) \quad (1)$$

式中, μ_1 为金属液黏度; f_s 为固相轮廓分数, $f_s = f_{env} + f_c$; f_s^c 为临界固相分数, 此处取值0.637^[24].

(2) 枝晶状等轴晶与金属液的拖拽力

等轴晶与液相间的拖拽力的求解非常关键, 此处采用Wang-Beckermann模型^[35]进行计算. 该模型综合考虑了等轴晶枝晶结构对拖拽力的影响. 等轴晶-液相拖拽力 K_{le} 关系如下:

$$K_{le} = \frac{4\beta^2 \mu_1 f_1^2}{d_{env}^2} \quad (2)$$

式中,

$$\beta = \frac{\beta_d}{\left[(1 - \beta_1)^n + (\beta_d/\beta_1)^{2n} \right]^{1/2n}} \quad (3)$$

并且有 $n = 0.176 \lg \beta_d + 0.275$, β_d and β_1 分别求解如下:

$$\beta_d = \frac{3\sqrt{5}}{(1 - f_{si})^{\frac{3}{2}} \varphi_e S_{env}} \cdot \frac{S_e}{\varphi_e S_{env}} \quad (4)$$

$$\beta_1 = \left\{ \frac{9 \cdot f_{env}}{2 - 3f_{env}^{\frac{1}{3}} + 3f_{env}^{\frac{5}{3}} - 2f_{env}^{\frac{6}{3}}} \cdot \frac{1}{c_p(\varphi_e)} \cdot \frac{2\beta_d^2 [1 - \tanh(\beta_d/\beta_1)]}{2\beta_d^2 + 3[1 - \tanh(\beta_d/\beta_1)]} \right\}^{0.5} \quad (5)$$

式中

$$S_{env} = \frac{n_c \cdot \pi d_{env}^2}{\varphi_e} = \frac{6f_{env}}{\varphi_e d_{env}} \quad (6)$$

$$S_e = \frac{4}{\lambda_2} f_{si}^{0.5} \cdot f_{env} (1 - f_{si}^6) + f_{si}^6 S_{env} \quad (7)$$

$$c_p(\varphi_e) = \begin{cases} \varphi_e^2 & 0.0 < f_1 < 0.7 \\ 1.26 \lg\left(\frac{\varphi_e}{0.163}\right) & 0.7 < f_1 < 1 \end{cases} \quad (8)$$

式中, n_c 为等轴晶数量密度, λ_2 为二次枝晶臂距.

2 计算方法描述

采用控制容积法将控制方程离散化为代数方程. 求解传输方程过程中, 采用C++程序编写凝固生长模块、方程源项及交换项, 实现上述方程的耦合求解. 在一个控制体积内固相和液相共享同一个压力场. 采用SIMPLE方法求解动量方程及质量守恒方程. 在方程求解过程中, 连续性方程、动量守恒方程、体积分数、溶质传输及晶粒传输方程的残差小于 10^{-4} , 热焓守恒方程小于 10^{-7} 时认为迭代收敛. 在求解过程中, 每一个时间步长内计算步骤如下: 首先计算质量传输速率 M_{lc} , M_{lc} 以及 d_e , c_{mix} 等中间量, 然后计算交换项及源项, 最后计算晶粒分布、质量、动量、热焓及溶质守恒方程.

3 算例1: 3.25 t钢锭

3.1 物理问题描述

采用所建模型模拟3.25 t钢锭(Fe-0.4%C, 质量分数)^[36]的凝固过程. 该钢锭截面为四方形, 总长为1.68 m, 最宽处为0.51 m, 中心截面见图2所示, 铸锭在金属模中凝固. 模拟所采用的初始条件及边界条

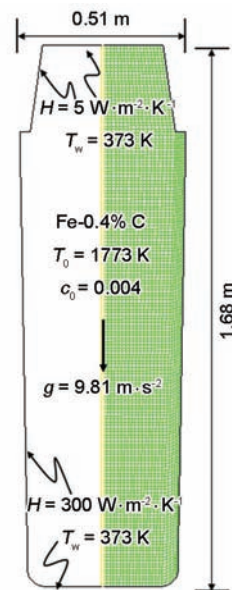


图2 3.25 t钢锭示意图及相关初始条件和边界条件
Fig.2 Boundary and initial conditions of 3.25 t steel ingot

表 1 3.25 t 钢锭凝固过程模型的热物性参数

Table 1 Thermodynamic and physical properties of model for 3.25 t steel ingot

Property	Symbol	Unit	Value
Melting point of pure iron	T_f	K	1805.15
Liquidus slope	m	$\text{K}\cdot\%^{-1}$	-80.45
Equilibrium partition coefficient	k	-	0.36
Reference density	ρ_l, ρ_s, ρ_e	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	6990
Solid-liquid density difference	$\Delta\rho$	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	150
Specific heat	c_p^l, c_p^s, c_p^e	$\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	500
Thermal conductivity	k_l, k_s, k_e	$\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	34.0
Latent heat	L	$\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}$	2.71×10^5
Viscosity	μ	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$	4.2×10^{-3}
Thermal expansion coefficient	β_T	K^{-1}	1.07×10^{-4}
Solutal expansion coefficient	β_c	$\%^{-1}$	1.4×10^{-2}
Dendritic arm spacing	λ_1	m	5×10^{-4}
Diffusion coefficient (liquid)	D_l	$\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$	2.0×10^{-8}
Diffusion coefficient (solid)	D_s, D_e	$\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$	1.0×10^{-9}

件如图 2 所示, 主要参数如表 1 所示, 所有数据均来自于文献[27]. 计算所采用的网格尺寸约为 1.5 cm, 时间步长开始设为 0.005 s, 逐渐增至 0.02 s. 计算控制精度除能量方程采用 10^{-7} , 其余均采用 10^{-4} . 该模拟计算在 6 核(Intel Nehalem Cluster 2.93 GHz)服务器上运行.

3.2 凝固过程

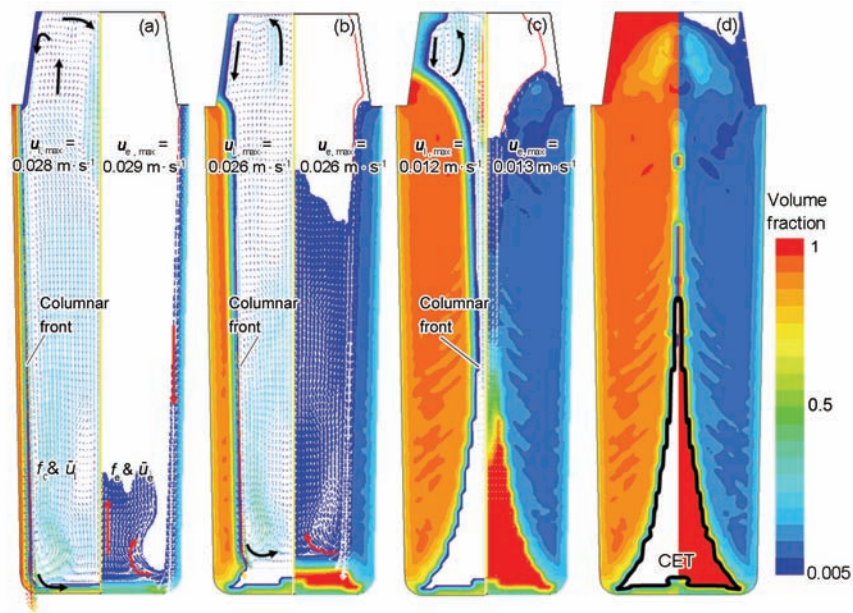
钢锭的凝固过程(从 100 s 到 6000 s)包含等轴晶、柱状晶的生长, 等轴晶的沉积以及热溶质对流现象, 如图 3 所示. 凝固过程中凝固前沿温度较低, 钢液受到向下的重力、向上的溶质浮力以及等轴晶沉积而拖拽周边钢液向下运动的共同作用下在铸型内流动. 如图 3a 所示, 凝固初期在凝固前沿, 驱使钢液向下运动的力占主导地位, 因此凝固前沿处钢液向下流动. 直至碰到铸锭底部, 向下流动的液流被迫改变流动方向为向铸锭中心方向. 在铸锭中心位置, 与相向而来的钢液相撞而改变流向为向上. 因此, 在铸锭底部能够看到非常明显的回流. 反观等轴晶, 一方面受到重力的作用而下沉; 另一方面受到钢液的拖拽力而随钢液一起运动. 因此, 等轴晶在大部分范围内表现出与钢液类似的流向, 但是在整个凝固过程中等轴晶相对于钢液是向下运动.

随着温度的下降, 柱状晶在钢锭的侧面以及底部开始慢慢生长. 在铸锭内部, 金属液只要存在过冷度, 柱状晶会一直生长, 直至和其它晶粒相互碰

撞(图 3d)或者被等轴晶阻碍而不能继续生长从而发生 CET 转变. 随着铸锭的逐渐冷却, 在铸锭四周及顶部形成过冷度, 当过冷度达到异质形核过冷度时, 等轴晶开始大量形核. 由于等轴晶密度比钢液大, 已形核并长大的等轴晶相对于液相将下沉并聚集于铸锭底部. 因此, 等轴晶相的体积分数在铸锭底部增长比较快. 在 500 s 时(图 3b)铸锭底部区域等轴晶相体积分数已超过 CET 转变极值($0.49^{[24,27]}$), 在此区域柱状晶将被阻碍生长, CET 转变将在此发生. 凝固最终各相分布如图 3d 所示, 图中黑色粗线所示范围内全部由等轴晶占据, 此区域即为 CET 转变区域.

3.3 偏析结果对比

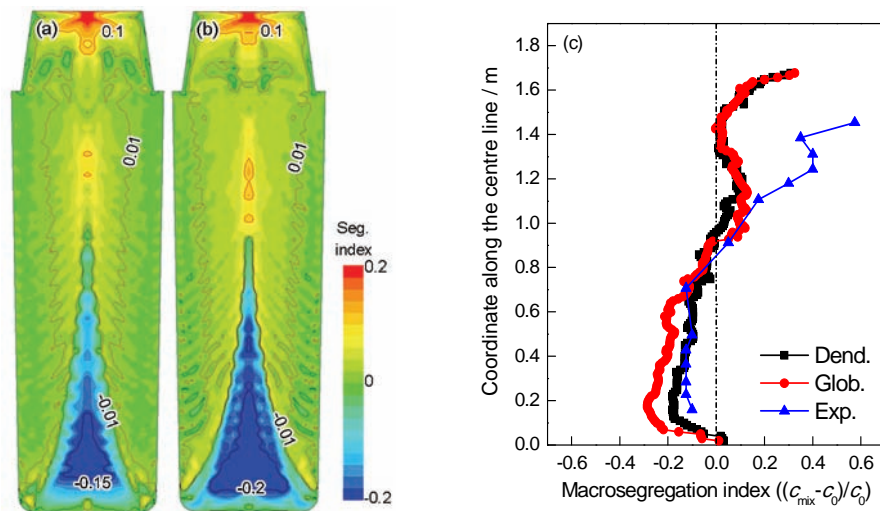
采用该简化枝晶模型所预测的宏观偏析分布如图 4a 所示. 模型成功预测了铸锭底部的锥形负偏析区及铸锭顶部的正偏析区, 底部负偏析区和等轴晶区(图 3d)对应. 从图 3 凝固进程可以看出, 铸锭底部等轴晶区主要是由于等轴晶的沉积堆积而成, 因此可以推断, 钢锭底部锥形负偏析区主要由凝固过程中等轴晶由上而下的沉积并聚集于铸锭底部造成的, 这一结论和文献[24,25,27]描述的一致. 在铸锭两侧存在着周期性分布的正偏析带, 这些偏析带类似于铸锭中所存在的“A-型”偏析, 此处称之为类“A-型”偏析. “A-型”偏析主要是由于热溶质对流^[1]、晶粒沉积^[27]等原因导致的糊状区液流的不稳定造



Color online

图 3 3.25 t 钢锭凝固进程

Fig.3 Predicted solidification sequence of the 3.25 t ingot at 100 s (a), 500 s (b), 2000 s (c) and 6000 s (d) (The volume fraction of each phase is shown in color map with 20 levels from 0 to 1. The left half of each graphic shows the evolution of the columnar volume fraction (f_c) and the melt velocity (u_1) vectors. The right half of each graphic shows the evolution of the equiaxed volume fraction (f_e) and the equiaxed sedimentation velocity (u_e) vectors. The position of the columnar dendrite tip was marked with a black solid line) (CET—columnar to equiaxed transition)



Color online

图 4 3.25 t 钢锭偏析结果

Fig.4 Final macrosegregation color maps of 3.25 t steel ingot predicted by simplified dendritic model (a), globular model (b), and the comparison between simulated and experimental macrosegregation distributions along the central line for different models (c)

成。研究^[10,27]表明,为了很好地预测通道偏析(“A-型”偏析),数值模拟过程中所采用的网格尺寸应该小于等于 1 cm。本研究所采用的网格尺寸为 2 cm,导致所预测的类“A-型”偏析带不够明显,有必要对网格进行细化。

图 4b 给出了采用球状等轴晶模型的预测结果。对比简化枝晶和球状晶模型预测结果可知,2 个模型所预测的宏观偏析整体分布类似:都预测到了铸锭底部的锥形负偏析区、顶部正偏析区及两侧类“A-型”偏析。然而,定量分析二者又有明显差

异: (1)采用球状模型所预测的负偏析区明显大于枝晶模型; (2)采用球状模型所预测的类“A-型”偏析带更明显. 这是因为: (1)球状等轴晶模型过小预测了等轴晶沉积过程中金属液对其拖拽力作用, 从而导致所预测的等轴晶沉积速率(以及金属液的移动速率)过大, 两相区过大的金属液流动加剧了宏观偏析的严重程度; (2)过大的流动增加了两相区金属的不稳定性, 从而更加易于促进类“A-型”偏析的形成.

从铸锭中心线宏观偏析分布曲线(图4c)可以看出, 虽然枝晶模型和球状模型所预测的分布趋势非常相似, 但是采用枝晶模型所预测的底部负偏析严重程度明显小于球状晶模型结果. 球状模型所预测的底部负偏析和实验测量值偏差较大, 枝晶模型的预测结果和实验测量值结果非常接近. 因此, 为了提高宏观偏析预测精度, 有必要对等轴晶采用枝晶化处理. 需要注意的是, 在热顶区域预测结果和实验测量值偏差较大: 一方面是由于模型忽略了凝固收缩以及铸锭顶部“V-型”缩孔的形成, 这对于热顶附近偏析的预测会有较大影响; 另一方面, 由于实验具体实施细节无法追溯, 模拟所采用的热顶处边界条件与实际情况可能会有所偏差, 导致预测结果偏差较大. 需要强调的是, 本研究的主要目的是研究模型的适用性及钢锭相应偏析的形成机理, 基于

实验的一些不确定因素本研究没有刻意去与实验测量值进行迎合.

4 算例2: 25 t钢锭

4.1 模拟所用条件

采用简化枝晶模型研究了25 t钢锭(Fe-0.44% C)^[36]的凝固过程. 该钢锭为八角形, 总长4.5 m, 最宽处为1.1 m, 中心截面如图5a所示, 铸锭在金属模中凝固. 模拟所采用的初始条件及边界条件如图5a所示, 主要参数如表1所示. 计算所采用的网格尺寸约为1.5 cm, 时间步长开始设为0.005 s, 随后逐渐增大到0.02 s. 计算控制精度除能量方程采用 10^{-7} , 其余均采用 10^{-4} . 对该铸锭在8核(Intel Nehalem Cluster 2.93 GHz)服务器上数值模拟运算.

4.2 25 t钢锭结果

图5b和c分别给出了实验观察测量的钢锭中心截面硫印图以及测量成分点还原的成分分布云图, 所预测的钢锭最终宏观偏析分布云图如图5d所示, 图5e对比了数值模拟预测及实验测量所得的沿铸锭中心线宏观偏析分布. 由图5c~e可见, 所预测的宏观偏析分布和实验测量分布图表现出基本一致的规律. 在底部出现面积较大的锥形负偏析区, 负偏析区上面有一个小的正偏析区. 从硫印结果(图5b)可以看出, 在铸锭中心处有“A-型”偏析, 铸锭两侧靠近外壁处有“细条状”的“A-型”偏析. 数值模拟

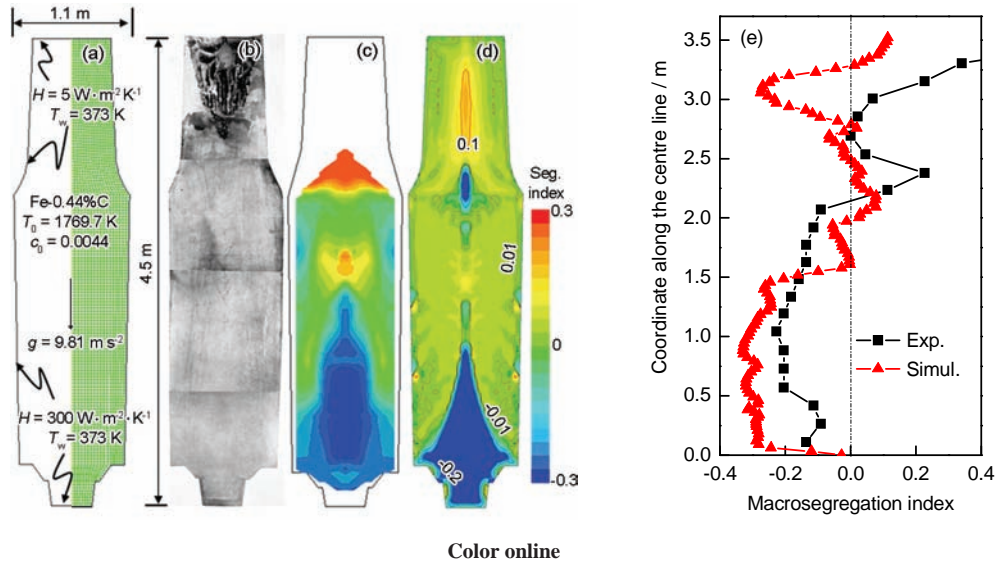


图5 25 t钢锭示意图及相关初始条件和边界条件、模拟与实验偏析结果

Fig.5 Boundary and initial conditions for simulation, simulated and experimental results of 25 t steel ingot

- (a) boundary and initial conditions for simulation
- (b) experimentally etched surface
- (c) experimentally measured macrosegregation map
- (d) simulated macrosegregation pattern
- (e) comparison between simulated and experimental central line macrosegregation distributions

结果预测了铸锭两侧靠近外壁处的类“A-型”偏析。然而由于所采用的数值模拟网格较粗, 所预测的“A-型”偏析呈现出“胖条状”, 这与实验观测现象有偏差, 并且“A-型”偏析所分布的具体位置也不一致。研究^[10,27]表明, 数值模拟所采用的网格大小对通道偏析(“A-型”偏析)的预测结果影响很大, 太粗的网格不能够准确预测出通道偏析。因此, 想要精确预测如图5b所示“A-型”偏析, 需要进一步对所采用的数值模拟网格进行研究。由于本模拟所对应的实验条件、物性参数与实验的实际情况会有所偏差, 因此对所预测的结果只能进行定性分析与初步定量分析。

本数值模拟结果预测了铸锭中心的“V-型”正偏析, 形状上与“V-型”偏析相似。Ludwig等^[1]认为钢锭中心的“V-型”偏析形成于凝固后期, 枝晶发生变形及断裂等现象。然而, 本模型忽略了上述现象, 因此所预测的“V-型”偏析不能确定为“V-型”偏析, 故称为类“V-型”偏析。作者设想如果这种类“V-型”偏析即为“V-型”偏析, 则枝晶变形及断裂可能不是“V-型”偏析出现的必要条件。

值得一提的是, 实验测量数据和数值模拟预测结果都表明在铸锭高度大约3/4处出现了负偏析区。此负偏析区的形成机理将在后文详细讨论。

5 分析讨论

5.1 模型的不确定性

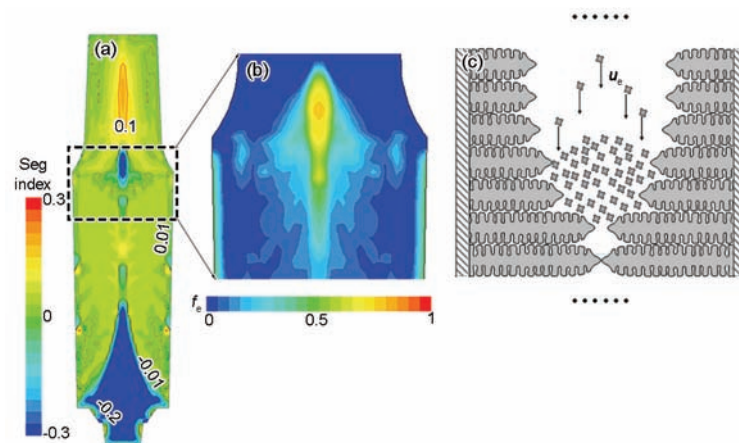
(1) 事实上, 铸锭凝固过程中不仅等轴晶会发生由球晶向枝晶的转变, 柱状晶也会发生由圆柱状向枝晶的转变, 因此凝固模型理论上需要考虑液相、

等轴晶包络线内部液相、等轴晶包络线内部固相、柱状晶包络线内部液相和柱状晶包络线内部液相。Wu等^[30,32]采用五相模型对小型铸锭进行了凝固预测, 所预测的结果和实验测量结果非常接近。然而如此考虑大量增加了模型的复杂程度, 带来的代价就是计算速度极慢。对于大型钢锭的数值模拟就要找到模型精度与计算效率的均衡。本工作所采用的模型仅对等轴晶进行简化枝晶处理, 虽然模型的简化带来了与实际物理模型的偏差, 但是一方面, 模型考虑了枝晶结构对等轴晶沉积过程中的影响, 为合理预测钢液及晶粒的运动提供了一个处理方法; 另一方面, 如此简化处理保证了模型的计算效率, 使其能够适用于大型铸件, 并能够合理预测凝固结果。

(2) 模型忽略了凝固收缩, 因此不能预测铸锭顶部的缩孔。研究^[13]表明, 此缩孔的形成对顶部宏观偏析的影响比较大。采用此凝固模型所预测的大型铸锭宏观偏析结果在热顶区域会存在较大的偏差, 因此尚需对模型优化完善以进一步考虑凝固收缩对凝固结果的影响。

(3) 模型热力学数据全部依据简化二元Fe-C相图。而通常钢锭实际还包含Mn, Cr, Ni, Si等元素, 其凝固过程是一个多元/多组分传输过程。二元模型会导致一定的预测结果误差, 因此需进一步考虑其它元素如Mn^[37]对凝固过程的影响。

因此, 模型可用于定性预测大型铸锭的宏观偏析及其形成机理, 但是存在着一些不足, 使得定量分析不够精确, 今后需对该模型进一步优化, 同时加以更多实验验证。



Color online

图6 铸锭上部负偏析区形成示意图

Fig.6 Formation of negative segregation zone in the upper of ingot

- (a) the macrosegregation distribution
- (b) the local equiaxed distribution
- (c) the formation schematic of equiaxed zone in upper of ingot

5.2 热顶下面负偏析区的形成

由图 5d~e 可知, 数值模拟以及实验测量结果均表明在铸锭上部出现一个明显的负偏析区域. 许多针对长条形铸锭的研究都发现了这种负偏析, 有数值模拟预测结果^[22,27], 也有实验测量结果^[22]. 然而, 只有少数人讨论其形成机理^[27].

图 6 给出了铸锭上部负偏析区形成示意图. 从图 6a 和 b 可以看出, 铸锭上部负偏析区与等轴晶堆积区相对应, 此负偏析区的形成是等轴晶在此区域的沉积汇集造成的. 柱状晶在凝固过程中逐渐长大, 直至凝固后期, 从两侧生长的柱状晶相互碰触 (图 6c). 在铸锭上部, 由于热顶部分散热比铸锭侧壁慢很多, 当下面柱状晶相互碰撞时, 上部的柱状晶还没有长到铸锭中心. 因此在柱状晶碰触位置的上部形成了一个局部小铸锭(local-mini-ingot). 在此小铸锭内部, 仍然存在着柱状晶的生长、等轴晶的生长及沉积, 等轴晶枝晶沉积并汇聚于此局部铸锭的底部. 与整体铸锭底部锥形负偏析形成机理一样, 等轴晶的汇集使得局部铸锭的底部形成一个局部的负偏析区.

6 结论

(1) 模型采用体平均技术, 在 Wu-Ludwig 三相凝固模型基础上加以改进, 简化等轴晶, 在无明显增加计算工作量的前提下, 提高了对模型的数值计算精度.

(2) 采用简化枝晶模型可以获得比球状模型更精确的宏观偏析预测结果.

(3) 模型成功预测了大型铸锭凝固过程所形成的底部锥形负偏析区、“A-型”偏析区以及 CET 转变区域.

(4) 长细型铸锭凝固过程中顶部出现的负偏析区是由于凝固后期所形成的局部小铸锭及等轴晶在其内部的沉积聚集造成的.

参考文献

- [1] Ludwig A, Wu M, Kharicha A. *Metall Mater Trans*, 2015; 46A: 4856
- [2] Pickering E J. *ISIJ*, 2013; 53: 935
- [3] Du Q, Li D Z, Li Y Y. *Acta Metall Sin*, 2000; 36: 1197 (杜强, 李殿中, 李依依. 金属学报, 2000; 36: 1197)
- [4] Han Z Q, Liu B C. *Acta Metall Sin*, 2003; 39: 140 (韩志强, 柳百成. 金属学报, 2003; 39: 140)
- [5] Cao H F, Shen H F, Liu B C. *Acta Metall Sin*, 2005; 41: 917 (曹海峰, 沈厚发, 柳百成. 金属学报, 2005; 41: 917)
- [6] Wang T M, Yao S, Zhang X G, Jin J Z, Wu M, Ludwig A, Pustal B, Polaczek A. *Acta Metall Sin*, 2006; 42: 584 (王同敏, 姚山, 张兴国, 金俊泽, Wu M, Ludwig A, Pustal B, Polaczek A. 金属学报, 2006; 42: 584)
- [7] Flemings M C, Nereo G E. *Trans Met Soc AIME*, 1967; 239: 1449
- [8] Dantzig J A, Rappaz M. *Solidification*. Switzerland, EPFL Press, 2009: 568
- [9] Li X, Noeppel A, Saadi B, Budenkova O, Zaidat K, Ciobanas A, Ren Z, Fautrelle Y. *Trans Indian Ins Met*, 2009; 62: 465
- [10] Li J, Wu M, Hao J, Ludwig A. *Comp Mater Sci*, 2012; 55: 407
- [11] Li J, Wu M, Hao J, Ludwig A. *Comp Mater Sci*, 2012; 55: 419
- [12] Mehrabian R, Keane M, Flemings M C. *Metall Trans*, 1970; 1: 1209
- [13] Flemings M C. *Scand J Metall*, 1976; 5: 1
- [14] Olsson A, West R, Fredriksson H. *Scand J Metall*, 1986; 15: 104
- [15] Schneider M, Beckermann C. *Metall Mater Trans*, 1995; 26A: 2373
- [16] Liu D R, Li D Z, Sang B G. *J Mater Sci Technol*, 2009; 25: 561
- [17] Liu D R, Kang X H, Fu P, Li D Z. *Kovove Mater*, 2011; 49: 143
- [18] Liu D R, Kang X H, Sang B G, Li D Z. *Acta Metall Sin (Engl Lett)*, 2011; 24: 54
- [19] Liu D R, Sang B G, Kang X H, Li D Z. *Int J Cast Met Res*, 2010; 23: 354
- [20] Li W S, Shen H F, Liu B C. *Steel Res Int*, 2010; 81: 994
- [21] Tu W T, Shen H F, Liu B C. *ISIJ*, 2014; 54: 351
- [22] Combeau H, Zaloznik M, Hans S, Richy P. *Metall Mater Trans*, 2009; 40B: 289
- [23] Ge H H, Li J, Han X J, Xia M X, Li J G. *J Mater Process Technol*, 2016; 227: 308
- [24] Wu M, Ludwig A. *Metall Mater Trans*, 2006; 37A: 1613
- [25] Wu M, Ludwig A. *Metall Mater Trans*, 2007; 38A: 1465
- [26] Li J, Wu M, Ludwig A, Kharicha A. *IOP Conference Series: Mater Sci Eng*, 2012; 33: 012091
- [27] Li J, Wu M, Ludwig A, Kharicha A. *Int J Heat Mass Transfer*, 2014; 72: 668
- [28] Wu M, Fjeld A, Ludwig A. *Comp Mater Sci*, 2010; 50: 32
- [29] Rappaz M. *Int Mater Rev*, 1989; 34: 93
- [30] Wu M, Könözy L, Ludwig A, Schützenhöfer W, Tanzer R. *Steel Res Int*, 2008; 79: 637
- [31] Wu M, Li J, Ludwig A, Kharicha A. *Comp Mater Sci*, 2013; 79: 830
- [32] Wu M, Ludwig A. *Acta Mater*, 2009; 57: 5621
- [33] Ahmadein M, Wu M, Ludwig A. *J Cryst Growth*, 2015; 417: 65
- [34] Li J, Wu M, Ludwig A, Kharicha A, Schumacher P. *Mater Sci Forum*, 2014; 790-791: 121
- [35] Wang C Y, Ahuja S, Beckermann C, de Groh H C. *Metall Mater Trans*, 1995; 26B: 111
- [36] Heterogeneity Sub-Committee of the British Iron and Steel Institute. *J Iron Steel Inst London*, 1926; 113: 39
- [37] Wu M, Li J, Ludwig A, Kharicha A. *Comp Mater Sci*, 2014; 92: 267

(责任编辑:李海兰)