

# 等轴球晶凝固多相体系内热溶质对流、补缩流 及晶粒运动的数值模拟\*

## I. 三相流模型

王同敏 姚山 张兴国 金俊泽

(大连理工大学材料科学与工程学院三束材料改性国家重点实验室,  
辽宁省原材料特种制备技术重点实验室, 大连 116024)

M Wu A Ludwig

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

B Pustal A Bührig-Polaczek

(Foundry Institute, RWTH Aachen University, Aachen D-52072, Germany)

**摘要** 基于 Eulerian-Eulerian 方法和体积元平均技术, 建立了模拟等轴球晶凝固过程的液、固、气三相流模型。液、固两相处理成相互分离、相互扩散的介质, 气相与液、固两相只存在热量及动量的相互作用, 三相(凝固前)作为自由流体共享一个统一的压力场。分别求解三相的质量、动量、溶质、热焓守恒方程; 相间的热量交换和摩擦拖拽以及液/固界面上的溶质再分配和凝固潜热释放, 通过定义对应守恒方程的源项和交换项而加以考虑; 另外, 单独求解一个晶粒密度守恒方程。晶粒的形核生长(相变)也加以模型化并体现在对应的源项中, 模型中所用的密度定义为溶质与温度的函数, 因此可综合考虑热溶质对流、晶粒运动及凝固收缩所引起的补缩流动。凝固过程的体积收缩及补缩流动将体现在气/液自由表面的波动上。

**关键词** 热溶质对流, 补缩流, 晶粒运动, 三相流, 数值建模

中图分类号 TG249, TG291 文献标识码 A 文章编号 0412-1961(2006)06-0584-07

## MODELLING OF THE THERMO-SOLUTAL CONVECTION, SHRINKAGE FLOW AND GRAIN MOVEMENT DURING GLOBULAR EQUIAXED SOLIDIFICATION IN A MULTI-PHASE SYSTEM

### I. Three-Phase Flow Model

WANG Tongmin, YAO Shan, ZHANG Xingguo, JIN Junze

School of Materials Science and Engineering, State Key Laboratory of Materials Modification by Laser, Ion and Electron Beams, Liaoning Key Laboratory of Special Processing of Raw Materials, Dalian University of Technology, Dalian 116024

M Wu, A Ludwig

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

B Pustal, A Bührig-Polaczek

Foundry Institute, RWTH Aachen University, Aachen D-52072, Germany

Correspondent: WANG Tongmin, associate professor, Tel: (0411)84709458,

E-mail: tmwang@dlut.edu.cn

Supported by National Natural Science Foundation of China (No.50474055), Collaborative Project of German Science Foundation (No.SFB370), and Liaoning Natural Science Foundation (No.20052176)

Manuscript received 2005-09-29, in revised form 2005-12-30

\* 国家自然科学基金项目 50474055, 德国自然科学基金 (DFG) 重大项目 SFB 370 以及辽宁省自然科学基金项目 20052176 资助  
收到初稿日期: 2005-09-29, 收到修改稿日期: 2005-12-30

作者简介: 王同敏, 男, 1971 年生, 副教授

**ABSTRACT** A three-phase flow model has been developed to simulate the solidification process of globular equiaxed grains based on the volume averaging and Eulerian-Eulerian methods. The three phases, liquid, solid and air, share a single pressure field. The basic conservation equations of mass, momentum and enthalpy, and a user defined conservation equation of grain density have been solved for each phase. The thermal and mechanical (drag force) interactions among the phases have been considered. Grain nucleation, growth rate (mass exchange), solute partitioning at the liquid/solid interface and solute transport have also been accounted for. Due to the low density, the air phase floats always at the top region, forming a definable air/liquid melt interface, i.e. free surface. By tracking this free surface, the shrinkage cavity in an open casting system can be modeled. As the temperature and concentration dependent density and solidification shrinkage are explicitly included, the thermo-solutal convection, together with feeding flow and grain movement can be taken into account.

**KEY WORDS** thermo-solutal convection, feeding flow, grain movement, three-phase flow, numerical modeling

### 符号说明

$c_l, c_s$	液、固相溶质浓度 (质量分数, %)	$\vec{U}_{ls} (= -\vec{U}_{sl}),$	
$c^*$	液 / 固界面的溶质浓度	$\vec{U}_{la} (= -\vec{U}_{al}),$	
$c_p(l), c_p(s), c_p(a)$	液、固、气相比热容, J/(kg·K)	$\vec{U}_{sa} (= -\vec{U}_{as})$	动量交换速度, kg/(m <sup>2</sup> ·s <sup>2</sup> )
$C$	溶质交换率, kg/(m <sup>3</sup> ·s)	$\vec{U}_{ls}^d, \vec{U}_{la}^d, \vec{U}_{sa}^d$	归因于拖拽等机械作用引起的能量交换速度, kg/(m <sup>2</sup> ·s <sup>2</sup> )
$C_D$	拖拽系数	$\vec{U}_{ls}^p$	相变引起的动量交换速度, kg/(m <sup>2</sup> ·s <sup>2</sup> )
$C_p(\phi_e)$	枝晶形状因子 ( $\phi_e$ 为形状相关常量)	$v$	生长速率, m/s
$d_a$	气相粒子表征尺寸, m	$\beta_T$	热膨胀系数, K <sup>-1</sup>
$d_s$	晶粒直径, m	$\beta_C$	溶质膨胀系数
$D_l, D_s$	液、固相溶质扩散系数, m <sup>2</sup> /s	$\Delta T$	过冷度, K
$f_l, f_s, f_a$	液、固、气相的体积分数	$\Delta T_N$	对应最大形核率的平均形核过冷度, K
$\vec{g}$	重力加速度, m/s <sup>2</sup>	$\Delta T_\sigma$	Gauss 分布标准偏差, K
$g_\alpha$	晶粒生长因子, m/s	$\kappa$	液、固、气相热导率, W/(m·K)
$h_l, h_s, h_a$	液、固、气相热焓, J/kg	$\mu_l, \mu_s, \mu_a$	液、固、气相的粘度, kg/(m·s)
$H_{la}, H_{sa}$	热量交换系数, W/(m <sup>2</sup> ·K)	$\rho_l, \rho_s, \rho_a$	液、固、气相的密度, kg/m <sup>3</sup>
$k$	溶质平衡分配系数	$\bar{\tau}_l, \bar{\tau}_s, \bar{\tau}_a$	应力-应变张量, kg/(m·s <sup>2</sup> )
$K_{ls}, K_{la}, K_{sa}$	动量交换系数, kg/(m <sup>3</sup> ·s)		
$m$	液相线斜率, K		
$M_{ls} (= -M_{sl})$	质量相变速率, kg/(s·m <sup>3</sup> )		
$n$	晶粒密度, m <sup>-3</sup>		
$n_{max}$	最大形核密度, m <sup>-3</sup>		
$N$	形核速率, m <sup>-3</sup> ·s <sup>-1</sup>		
$Nu$	Nusselt 数		
$p$	压力, Pa		
$Q_{la}^d, Q_{sa}^d$	热量交换速率, J/(m <sup>3</sup> ·s)		
$Q_{ls} (= -Q_{sl}),$			
$Q_{la} (= -Q_{al}),$			
$Q_{sa} (= -Q_{as})$	热量交换系数, J/(m <sup>3</sup> ·s)		
$Re$	Reynolds 数		
$t$	时间, s		
$T, T_l, T_s, T_a$	温度, K		
$T_f$	纯金属熔点, K		
$T_{ref}$	热焓计算所用的参考温度点, K		
$T_0$	密度函数中的参考温度点, K		
$\vec{u}_l, \vec{u}_s, \vec{u}_a$	速度矢量, m/s		
$\vec{u}^*$	界面速度, m/s		

熔体流动与晶粒运动在很大程度上影响着铸件的晶粒组织及溶质偏析的形成<sup>[1-3]</sup>。熔体内部温度与溶质组分不同造成各处的质量密度差异, 重力场下这种差异引起了熔体的热溶质对流, 晶粒 (固相) 与熔体 (液相) 之间的质量密度差异则引起了固相晶粒的沉淀现象。常规铸造过程中, 还需考虑凝固收缩力, 该力是铸件缩孔缩松、热 / 冷裂, 应力变形的主要原因。Campbell<sup>[3]</sup>指出热溶质对流、晶粒运动及补缩流的多重流动是宏观偏析形成的主要原因。然而, 大多数凝固模拟模型忽略了晶粒运动及补缩流, 因为对晶粒运动建模需要在熔体液相基础上引入另外一晶粒固相, 这样一个固、液两相共存体系使得计算变得更加复杂, 而如果进一步考虑补缩流, 则必须考虑凝固收缩的影响以及体积的变化, 给模拟计算带来极大的不便。实际上在计算热溶质对流时, 由于液固相之间密度的差异以及液相内部密度的变化, 铸件体积并非定值, 为了能够计算热溶质对流同时又忽略铸件体积的变化, 常常用到 Boussinesq 方法<sup>[4]</sup>, 其计算思路是, 在求解动量

方程时, 密度处理成温度与浓度的函数, 而在解质量守恒方程时密度是一个恒定值, 这样既考虑了密度差异引起的热溶质对流又忽略了体积的收缩. 计算补缩流时则必须考虑铸件体积在凝固过程中的变化, 需要计算并得到自由表面, 因为自由表面既是铸件边界也是传热及压力边界. 到目前为止, 关于自由表面计算尚少见报道, Ueno 等<sup>[5]</sup>利用前沿跟踪法模拟计算气泡在均一垂直磁场上上浮过程的变形行为; Ehlen<sup>[6]</sup>基于 VOF (volume of fluid) 模型, 将密度定义为温度与浓度依存, 模拟了 Al-Si 合金铸件深缩孔的形成过程; Tagawa<sup>[7]</sup>建立两相流数值模型研究了均一垂直磁场条件下液滴落下撞击液层过程中的自由表面变化. 归纳起来, 目前主要有两种途径获得自由表面: 一种是跟踪法, 即跟踪计算自由表面, 需要较大计算量; 另一种是相界面法即模拟一个多相体系, 两相间界面的迁移演变代表着其中某一相的自由表面的变化, 如气、液界面即是熔体的自由表面, 这种方法更接近自由表面的物理意义.

综上所述, 铸件凝固过程存在一个多相体系的变化, 只有构建出相间转变, 相间影响的定量关系, 才能更好地描述这一过程, 以上提到的热溶质对流、晶粒运动及补缩流即隐含在这样一个多相体系中, 如图 1 所示. Beckermann 研究组<sup>[8-12]</sup>开创了凝固过程多相流动模拟的先河, 将枝晶凝固过程分解为液相、固相及枝晶间液相, 分别求解各相质量、动量、溶质、热焓守恒方程, 相间作用及转变也加以模型化, 然而这一模型没有建立一个合理的形核模型, 且模型过于追求统一, 因而考虑因素太多变得复杂, 模型中一些参数无法得到实验支持, 如质量转变系数、界面浓度等. Beckermann 的模型被 Wu 和 Ludwig 等进一步修改并应用到等轴球晶的凝固过程<sup>[13-16]</sup>, 等轴球晶是一个比较容易模型化的形貌, 晶粒可近似地看

成一个球体, 从而避开很多不确定因素, 等轴球晶在工程上也有广泛的应用, 如许多高性能的工程材料要求细小的球晶, 半固态浆料的制备过程即是典型的等轴球晶凝固过程<sup>[17]</sup>. 本工作在 Wu 和 Ludwig 的基础上, 对其模型进一步完善并引入气相, 建立了一个与实际铸件凝固过程较符合的液-固-气三相凝固体系数学模型, 从而使补缩流、热溶质对流的模拟计算在考虑铸件凝固体积收缩的前提下变得可能. 在三相体系中, 凝固过程的熔体自由表面被定义为液相与气相的交界面, 该界面上所发生的传热, 压力平衡及动量传输通过定义液、气相间交换项而模型化, 而不必显式地去界定自由表面的位置<sup>[18]</sup>.

### 1 模型描述

在一个等轴球晶凝固体系中存在三相, 即液相、固相及凝固体积收缩吸入的气相, 分别由下标 l, s, a 表示. 基于体积元平均技术及 Eulerian-Eulerian 方法, 分别对此三相建立质量、动量、溶质、热焓守恒方程.

#### 1.1 守恒方程

质量方程

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_q \rho_q) + \nabla \cdot (f_q \rho_q \vec{u}_q) = M_{pq} \quad (1)$$

$$\sum f_q = 1 \quad (2)$$

式中,  $p, q$  分别代表 l, s, a 且  $p \neq q$  (下同). 气相与液、固相之间无相变; 液、固相变时  $M_{pq} > 0$  表示凝固发生, 反之为重熔. 三相在时间及空间上连续, 因此三相体积分数之和必然满足式 (2) 这样一个恒定条件.

动量方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(f_q \rho_q \vec{u}_q) + \nabla \cdot (f_q \rho_q \vec{u}_q \times \vec{u}_q) = \\ -f_q \nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau}_q + f_q \rho_q \vec{g} + \vec{U}_{pq} \end{aligned} \quad (3)$$

式中,  $\bar{\tau}_q = \mu_q f_q \cdot (\nabla \cdot \vec{u}_q + (\nabla \cdot \vec{u}_q)^T)$ .

溶质方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(f_q \rho_q c_q) + \nabla \cdot (f_q \rho_q \vec{u}_q c_q) = \\ \nabla \cdot (f_q \rho_q D_q \nabla \cdot c_q) + C_{pq} \end{aligned} \quad (4)$$

溶质守恒方程中略掉了气相, 原因是气相内不发生溶质传输.

热焓方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(f_q \rho_q h_q) + \nabla \cdot (f_q \rho_q \vec{u}_q h_q) = \\ \nabla \cdot (f_q \kappa_q \nabla \cdot T_q) + Q_{pq} \end{aligned} \quad (5)$$

式中,  $h_q = \int_{T_{ref}}^{T_q} c_p(q) dT + h_q^{ref}$ .

晶粒传输方程

$$\frac{\partial}{\partial t} n + \nabla \cdot (\vec{u}_s \cdot n) = N \quad (6)$$

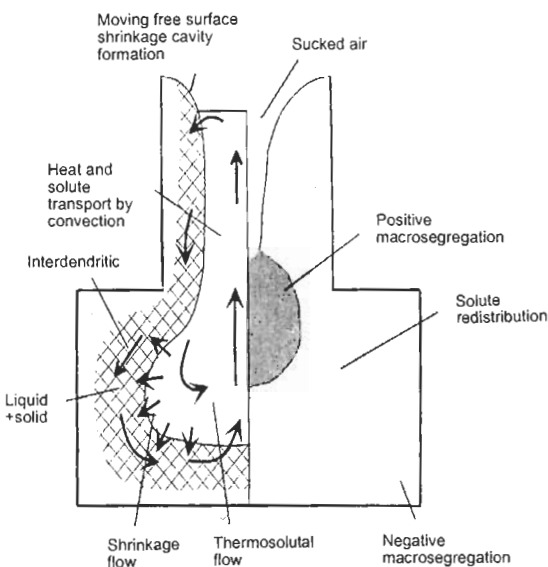


图 1 凝固过程多相、多重流动体系示意图<sup>[5]</sup>

Fig.1 Multi-flow in a multiphase solidification system<sup>[5]</sup>

式(6)中有源项  $N$ (考虑形核贡献)及对流项  $\nabla \cdot (\vec{u}_s \cdot n)$ (考虑晶粒运动传输),但没有扩散项,即忽略了晶粒扩散的影响。

以上各式中出现的与体积对应的物理量均取作“体积平均”,如一控制体积单元内的平均温度和平均速度等.利用 CFD 计算软件 FLUENT<sup>TM</sup>(Ver.6.1)求解以上守恒方程式(1)–(6),其中,式(4)和式(6)为用户自定义方程 UDS(user defined scalar),对各守恒方程的源项及相间交换项(具体物理过程相关项) $\vec{U}_{pq}, M_{pq}, C_{pq}, Q_{pq}, N$ 单独模型化,并通过用户定义子函数 UDF (user defined function) 加载到 FLUENT<sup>TM</sup> 中去,这部分模型化工作将在以下阐述。

### 1.2 形核、生长及质量交换

建立晶粒传输方程式(6)中的晶粒形核率以及质量守恒方程式(1)中的相变质量交换速率  $M_{ls}(= -M_{sl})$  的计算模型,如图 2, 3 所示。

晶粒形核采用 Rappaz 等<sup>[19]</sup>提出的三参数异质形核模型.该模型基于以下的假设:在熔体中存在很多潜在的形核质点,形核的驱动力为过冷度,形核质点与过冷度的关系满足如下 Gaussian 正态分布:

$$\frac{dn}{d\Delta T} = \frac{n_{\max}}{\sqrt{2\pi} \cdot \Delta T_{\sigma}} \cdot e^{(1/2)[(\Delta T - \Delta T_N)/\Delta T_{\sigma}]^2} \quad (7)$$

为求得晶粒形核率  $N(dn/dt)$ , 做如下分解:  $N=(dn/d(\Delta T)) \cdot (d(\Delta T)/dt)$ , 即把形核率分解为过冷度形核率与冷却速率的乘积,此处过冷度指的是成分过冷

度,定义为  $T_f + m \cdot c_l - T$ , 其值既受到当前温度也受到浓度的影响。

求解方程式(1–5),可以得到控制体积内的平均温度  $T$  和液、固相内的平均溶质浓度  $c_l$  和  $c_s$ , 控制体积内的固相体积分数  $f_s$  及晶粒密度  $n$ , 如图 4 所示. 对于一个等轴球晶凝固过程,晶粒的生长等同于球形液/固界面的推移,溶质扩散场属于 Zener 型<sup>[20]</sup>,液/固界面处于平衡生长时有  $v \cdot c_l^*(1-k) = -D_l \cdot G_c^*$  (其中  $G_c^*$  为浓度梯度),最终得到晶粒生长速率

$$v = g_{\alpha}(c_l^* - c_l)/c_l^* \quad (8)$$

式中,  $g_{\alpha} = 2D_l/(d_s(1-k))$ .

基于液/固界面热力学平衡假设,液/固界面处液相溶质浓度  $c_l^*$  可以由计算  $(T - T_f)/m$  得出.凝固过程中,一个控制体积内所有球晶液/固界面之和为  $(n \cdot \pi d_s^2)$ ,这些界面以平均的生长速率  $v$  生长,考虑到有晶粒碰撞现象存在,因此通过 Avrami 因子  $(1 - f_s)$  来修正生长界面,另外乘上晶粒的密度  $\rho_s$  以得到质量相变速率  $M_{ls}$ .

$$M_{ls} = -M_{sl} = v \cdot (n \cdot \pi d_s^2) \cdot \rho_s \cdot (1 - f_s) \quad (9)$$

控制体积内晶粒平均尺寸的计算依赖于该控制体积内的固相分数以及晶粒密度。

$$d_s = \left( \frac{6f_s}{\pi \cdot n} \right)^{1/3} \quad (10)$$

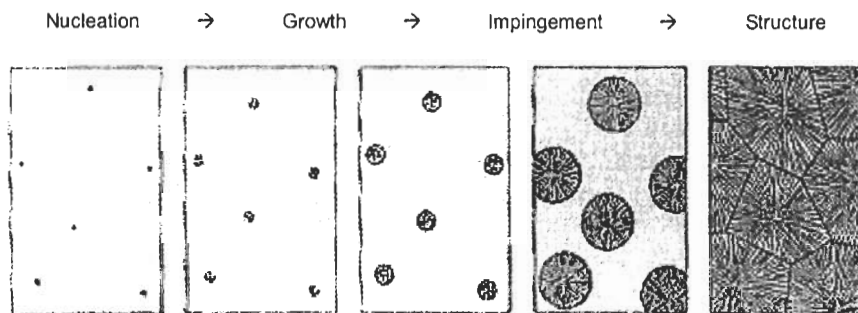


图 2 等轴球晶凝固组织的形成过程示意图<sup>[18]</sup>

Fig.2 Schematic diagram of equiaxed globular grains formation<sup>[18]</sup>

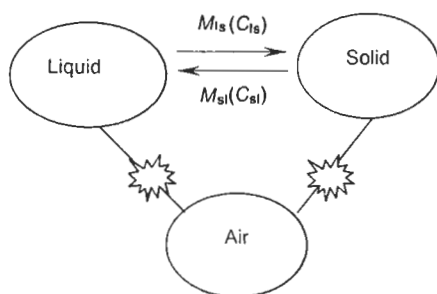


图 3 液、固、气三相间质量与溶质交换

Fig.3 Mass and solute transfer among liquid, solid and air

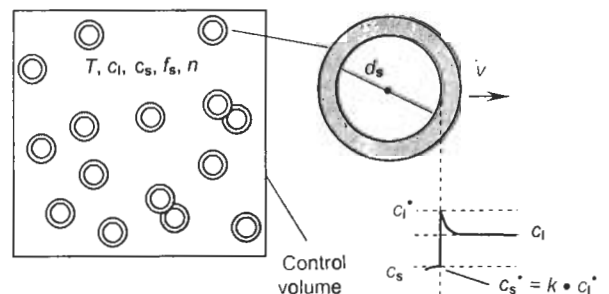


图 4 一个控制体积内等轴球晶生长模型

Fig.4 Solute diffusion controlled growth model of globular grains within a control volume

### 1.3 动量交换

提出动量守恒方程式 (3) 中液、固、气三相间动量交换项的计算模型, 如图 5 所示.

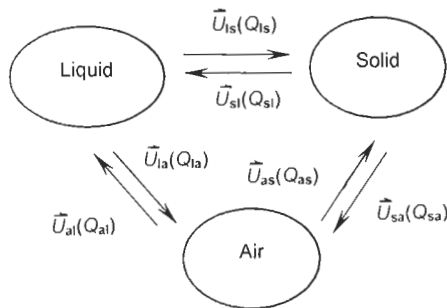


图 5 液、固、气三相间动量与热量的交换

Fig.5 Momentum and thermal transfer among liquid, solid and air

相间动量产生交换通常来自于两方面原因: (1) 两相之间的摩擦与拖拽作用, 用上标 d 表示; (2) 相变引起的动量交换, 用上标 p 表示. 因此液、固两相间的动量交换项可写为

$$\vec{U}_{ls} = -\vec{U}_{sl} = \vec{U}_{ls}^p + \vec{U}_{ls}^d \quad (11)$$

式中,  $\vec{U}_{ls}^p = \vec{u}^* \cdot M_{ls}$ ,  $\vec{U}_{ls}^d = K_{ls}(\vec{u}_l - \vec{u}_s)$ .

凝固过程中 (液  $\rightarrow$  固), 取  $\vec{u}^* = \vec{u}_l$ ; 重熔过程中 (固  $\rightarrow$  液), 取  $\vec{u}^* = \vec{u}_s$ . 这样处理的物理意义是: 发生凝固相变时, 单位体积单位时间内有  $M_{ls}$  质量的液相转变成固相, 相变前这部分液相蕴含着  $M_{ls} \cdot \vec{u}_l$  的动量也在相变后全部传给了固相, 重熔过程反之亦然. 摩擦与拖拽等机械作用所引起的动量交换正比于两相的速度差, 由于作用力与反作用力的关系, 两相间的动量交换大小恒等, 方向相反, 为了得到相间动量交换量, 求出动量交换系数  $K_{ls}$  是关键, 此处采用了 Wang 等 [12] 提出的动量交换系数模型.

$$K_{ls} = \frac{4\beta^2 \mu_l}{d_s^2} f_1^2 \quad (12)$$

式中

$$\beta = \left[ \frac{9}{2} (1 - f_1) \frac{2 + \frac{4}{3} \eta^5}{2 - 3\eta + 3\eta^5 - 2\eta^6} \frac{1}{C_p(\phi_e)} \right]^{1/2},$$

$$\eta = (1 - f_1)^{1/3}$$

$$C_p(\phi_e) = \phi_e^2 \quad 0.0 < f_1 < 0.7$$

$$C_p(\phi_e) = 1.26 \lg\left(\frac{\phi_e}{0.163}\right) \quad 0.7 < f_1 < 1.0$$

式 (12) 是一个统一的动量交换系数计算模型, 适用于球晶、等轴晶及柱状晶, 对于球晶凝固  $\phi_e$  简化为 1. 晶粒直径越小, 液、固相间动量交换系数越大. 另外, 随着固相分数的提高, 糊状区内晶粒之间所搭构架越来越稳固, 对熔体流动的阻力也越来越大, 总是存在一个临界固相分

数, 超过这个临界固相分数, 熔体很难流动. 很多学者通过分析模型和相关实验观察提出临界固相分数取值: Wang 等 [12] 提出以固相分数 0.7 为界, Ilegbusi 等 [21] 设定为 0.625, Ludwig 等 [16] 采用 0.637.

气相与液、固相之间无质量交换, 因此无相变所引起的动量交换, 只有摩擦拖拽引起的动量交换, 故液-气、固-气体系动量交换项可写成

$$\vec{U}_{la} = -\vec{U}_{al} = \vec{U}_{la}^d = K_{la}(\vec{u}_l - \vec{u}_a) \quad (13)$$

$$\vec{U}_{sa} = -\vec{U}_{as} = \vec{U}_{sa}^d = K_{sa}(\vec{u}_s - \vec{u}_a) \quad (14)$$

采用 Schiller-Naumann 模型计算  $K_{la}$  值 [22] 如下:

$$K_{la} = 3\mu_l f_l f_a C_D Re / (4d_a^2) \quad (15)$$

在等轴球晶的凝固多相体系中, 液相定义为基本相, 固相与气相均为从属相, 对称模型 [22] 适合于计算从属相之间的动量交换, 因此采用对称模型计算固-气之间的动量交换系数  $K_{sa}$ . 对称模型类似于 Schiller-Naumann 模型, 区别在于: 将气、固两相粒子尺寸的平均值  $(d_a + d_s)/2$ , 混合粘度  $\mu_a f_a + \mu_s f_s$  和平均密度  $\rho_a f_a + \rho_s f_s$  用于式 (15) 中.

### 1.4 热量交换

提出的热焓守恒方程式 (4) 中液、固、气三相间热量交换项的计算模型亦见图 5. 凝固发生时, 单位体积单位时间内有  $M_{ls}$  质量的液相转变成固相, 转变前的液相具有  $M_{ls} \cdot h_l$  的热量却无法在相变时全部转给固相. 这是因为液、固两相存在热焓差异 ( $h_l > h_s$ ), 热平衡条件下固相只能接受热量  $M_{ls} \cdot h_s$ . 剩余的热量 (也即凝固潜热)  $M_{ls}(h_l - h_s)$  将按照如下原则分配:  $f_s \cdot M_{ls}(h_l - h_s)$  给固相,  $f_l \cdot M_{ls}(h_l - h_s)$  给液相. 这样分配是为了避免凝固潜热被分配给体积分数极小那一相而导致数值计算发散, 但是也带来了新的问题: 由于  $Q_{ls}$  不总等于  $Q_{sl}$ , 在同一控制体积内液相与固相的温度可能不同, 这与本文的热平衡相变假设不符, 解决办法是给定一较大的液-固相间热量交换系数  $H_{ls}$  ( $10^9$  W/(m<sup>2</sup>·K)), 使得液、固相在同一控制体积内温度相等. 重熔过程反之亦然, 只不过为使固相熔化转变成液相需要吸收熔化潜热  $M_{ls}(h_l - h_s)$ . 归纳起来有

$$Q_{ls} = M_{ls} \cdot h_s + f_s \cdot M_{ls}(h_l - h_s) + H_{ls}(T_l - T_s) \quad (16)$$

$$Q_{sl} = -M_{ls} \cdot h_l + f_l \cdot M_{ls}(h_l - h_s) + H_{ls}(T_s - T_l) \quad (17)$$

液-气体系和固-气体系由于无相变引起的的热量交换, 相间热量交换可简化为

$$Q_{la} = -Q_{al} = H_{la} \cdot (T_l - T_a) \quad (18)$$

$$Q_{sa} = -Q_{as} = H_{sa} \cdot (T_s - T_a) \quad (19)$$

只需计算以上两式中的相间热量交换系数  $H_{1a}$  和  $H_{sa}$  即可.  $H_{1a}$  可由 Ranz-Marshall 模型<sup>[22]</sup> 计算

$$H_{1a} = 6\kappa_1 f_1 f_s Nu / d_a^2 \quad (20)$$

$H_{sa}$  比较简单, 可由式 (21) 计算

$$H_{sa} = h_{sa} f_s f_a \quad (21)$$

式中,  $h_{sa}$  取决于固相表面以及固-气接触状况.

### 1.5 溶质交换

建立了溶质守恒方程式 (4) 中的溶质交换项, 也即液/固界面溶质再分配的计算模型, 亦见图 3. 凝固发生时, 单位体积单位时间内有  $M_{ls}$  质量的液相转变成固相, 转变前的液相具有  $M_{ls} \cdot c_l$  的溶质却无法在相变时全部转给固相, 这是因为液/固界面存在溶质再分配  $c_s = k \cdot c_l$ , 其中  $k$  为溶质平衡分配系数, 即在平衡凝固条件下, 固相只能接受溶质  $M_{ls} \cdot c_s$ , 剩余的溶质  $M_{ls}(c_l - c_s)$  继续留在液相中, 造成液/固界面液相侧的溶质富集. 归纳起来则有

$$C_{ls} = -C_{sl} = M_{ls} \cdot c_s \quad (22)$$

本工作并未像处理热量交换那样在液-固相间接体积分数重新分配溶质, 这是因为固相溶质扩散系数非常低, 固相接受溶质的能力远小于接受热量的能力, 因此多余的溶质几乎全部分配给液相. 对于重熔过程则不存在溶质再分配问题, 熔化的固相中的全部溶质将转给液相.

### 1.6 热溶质对流、补缩流及晶粒运动

在凝固过程中, 由于液-固相变以及温度与浓度的不均一性导致了凝固多相体系内密度的差异, 熔体本身各处密度的差异引起了热溶质对流, 而凝固相变后的固相晶粒通常密度大于液相熔体, 因而固相晶粒将发生游离、沉淀运动. 这些游离的晶粒具有较低的溶质浓度, 因而晶粒所到之处通常为铸件的溶质负偏析区. 对于等质量凝固体系, 密度的变化势必引起体积的变化, 凝固体积收缩所引起的补缩流动较热溶质对流和晶粒运动大得多, 原因是前者驱动力是压差吸力而后两者是重力. 当然凝固过程的多重流动并不是相互独立而是相互影响的. 通过以上分析不难看到, 凝固时多相体系内发生的多重流动归根结底是因为密度的变化引起的. 因此, 为了计算热溶质对流、晶粒运动及补缩流, 只需在前面三相流模型基础上引入密度变化项, 在本工作中, 亦将液相密度定义为温度与浓度的函数<sup>[4]</sup>, 为了简化计算, 忽略固相体积收缩, 液、固相密度计算式分别为

$$\rho_l = \rho_l(T, c_l) = \rho_0[1 - \beta_T(T - T_0) - \beta_C(c_l - c_0)] \quad (23)$$

$$\rho_s = \text{Const} \quad (24)$$

与 Boussinesq 方法不同的是, 本工作将式 (23) 应用于全部守恒方程中, 而不是仅仅用于动量守恒方程, 即

当前模型考虑了体积收缩对凝固多相体系的影响, 引入的第三相气相将在这样一个体积变化的凝固体系中起到协调平衡的关键作用. 对于一个顺序凝固过程, 凝固体系内的体积收缩引起的压差吸力将使气体从铸件上部随着补缩流进入型腔, 液-气动态的变化界面即为熔体的自由表面, 凝固全部结束后, 这一表面将成为中心上部大缩孔的边缘.

## 2 讨论

本工作提出的三相流模型尚只限于顺序凝固过程, 例如它无法考虑被固相支架包围的液相的体积收缩 (补缩通道被堵死), 当前模型建立的前提假设条件是热平衡凝固, 因此本模型不适合某些特殊的凝固过程 (如快速凝固或者存有强烈紊流情况下的凝固), 这部分模型工作将在以后的研究中加以展开. 模型中三相之间动量、溶质、热量的交换系数以及晶粒形核生长参数很大程度上影响着多相体系计算的精度, 因此对于不同的合金、不同的多相体系凝固过程, 在确定这些系数和参数时要特别注意. 本工作着重在宏观范畴上对等轴球晶的多相凝固体系及多重流动建立数值模型. 此模型目前尚不适于枝晶凝固过程. 本工作所建立的等轴球晶多相凝固模型的一些应用实例 (A356 铝合金的半固态流变铸造过程模拟以及 Al-4%Cu(质量分数) 二元合金的凝固过程模拟) 等见另文<sup>[23]</sup>.

## 3 结论

基于 Eulerian-Eulerian 方法和体积元平均技术, 建立了等轴球晶凝固过程液、固、气三相流数值模拟模型, 建立了三相的质量、动量、溶质、热焓守恒方程, 并对凝固潜热、相间的热量交换、摩擦拖拽及液/固界面上的溶质再分配加以模型化.

首次建立了晶粒密度守恒方程和等轴球晶的形核生长 (相变) 模型. 在液、固两相基础上增加的第三相气相对凝固的体积收缩具有补充的作用, 由于体积收缩及补缩流动, 气相与液相形成一个可以动态变化的自由表面, 从而使得液、固两相体系的计算域变得灵活, 并允许在模型中将密度定义为溶质与温度的函数. 因此所建立的多相凝固模型可综合考虑热溶质对流、晶粒运动及凝固收缩所引起的补缩流.

## 参考文献

- [1] Ohno A. *Solidification-The Separation Theory and its Practical Applications*. Berlin: Springer-Verlag, 1987: 15
- [2] Flemings M C. *Solidification Processing*. New York: McGraw-Hill, 1974: 1
- [3] Campbell J. *Castings*. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1991: 8
- [4] Kaempfer Th U, Rappaz M. In: Sahn P R, ed., *Proc 9th Conf on Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes*, Aachen, TMS, 2000: 640
- [5] Ueno K, Nishita T, Kamiyama H. *J Magn Magn Mater*,

- 1999; 201: 281
- [6] Ehlen G. *PhD Thesis*, Aachen University of Technology, Aachen, Germany, 2004
- [7] Tagawa T. *ISIJ Int*, 2005, 45: 954
- [8] Ni J, Beckermann C. *Metall Trans*, 1991; 22B: 349
- [9] Beckermann C, Viskanta R. *Appl Mech Rev*, 1993; 46(1): 1
- [10] Wang C Y, Beckermann C. *Metall Mater Trans*, 1996; 27A: 2754
- [11] Beckermann C. *Int Mater Rev*, 2002; 47: 243
- [12] Wang C Y, Ahuja S, Beckermann C, Degroh H C. *Metall Mater Trans*, 1995; 26B: 111
- [13] Wu M, Ludwig A. *Adv Eng Mater*, 2003; 5: 62
- [14] Wu M, Ludwig A, Bührig-Polaczek A, Fehlbier M, Sahn P R. *Int J Heat Mass Transf*, 2003; 46: 2819
- [15] Ludwig A, Wu M, Wang T, Bührig-Polaczek A. *Proc 3rd Conf on Computational Modeling and Simulation of Materials*, Sicily, TMS, 2004: B491
- [16] Ludwig A, Wu M. *Metall Mater Trans*, 2002; 33A: 3673
- [17] Wang T, Pustal B, Abondano M, Grimmig T, Bührig-Polaczek A, Wu M, Ludwig A. *Trans Nonferrous Met Soc Chin*, 2005; 15: 289
- [18] Wang T M, Wu M, Ludwig A, Abondano M, Pustal B, Bührig-Polaczek A. *Int J Cast Met Res*, 2005; 18: 221
- [19] Rappaz M, Gandin Ch-A. *Acta Metall Mater*, 1993; 41: 345
- [20] Kurz W, Fisher D J. *Fundamentals Solidification*. Lausanne: Trans Tech Publications Ltd, 1985: 189
- [21] Ilegbusi O J, Mat M D. *Mater Sci Eng*, 1998; A247: 135
- [22] *FLUENT 4.4 User's Guide*. Vol.2, Chapter 9, New Hampshire: Fluent Inc., 1998: 16
- [23] Wang T M, Li T J, Cao Z Q, Jin J Z, Grimmig T, Bührig-Polaczek A, Wu M, Ludwig A. *Acta Metall Sin*, 2006; 42: 591  
(王同敏, 李廷举, 曹志强, 金俊泽, Grimmig T, Bührig-Polaczek A, Wu M, Ludwig A. 金属学报, 2006; 42: 591)