

文章编号: 1004-0609(2004)03-0329-06

金属近快速定向凝固过程的数值模拟^①

冯 坚¹, 张长瑞¹, 黄卫东², 周尧和²

(1. 国防科技大学 航天与材料工程学院 新型陶瓷纤维及其复合材料国防科技重点实验室, 长沙 410073;

2. 西北工业大学 凝固技术国家重点实验室, 西安 710072)

摘 要: 从非稳态传热角度并按照柱坐标系中二维传热方式对 Bridgman 装置中 Al 柱状试样近快速定向凝固过程进行了数值模拟, 分析了试样在近快速定向凝固过程中液固界面前沿的温度梯度和生长速度随试样抽拉速度的变化规律。计算结果表明: 在 30~3 000 $\mu\text{m/s}$ 的抽拉速度范围, 随着抽拉速度的提高, 液固界面前沿的温度梯度在 $(145 \pm 10) \text{ K/cm}$ 范围变化, 生长速度与抽拉速度的差别不超过 5%。研究结果为实验研究近快速定向凝固组织形态转变提供了可靠的控制参数依据。

关键词: 近快速定向凝固; Al 柱试样; 数值模拟; 温度梯度; 凝固速度

中图分类号: TB 115; TG 111.4

文献标识码: A

Numerical simulation on near-rapid directional solidification process of Al bar sample

FENG Jian¹, ZHANG Chang-rui¹, HUANG Wei-dong², ZHOU Yao-he²

(1. Key Laboratory of National Defense Technology for Advanced Ceramic Fibers and Composites,

College of Aerospace and Materials Engineering, National University of

Defense Technology, Changsha 410073, China;

2. State Key Laboratory of Solidification Processing,

Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

Abstract: An universal method of numerical simulation on near-rapid directional solidification of Al round bar in a vertical Bridgman furnace was developed, in which the transient heat transfer equations were used and the longitudinal heat conduction is taken into account. The influence of pulling velocity on the temperature gradient and growth velocity of liquid-solid interface was analyzed. The results indicate that, in the pulling velocity range of 30~3 000 $\mu\text{m/s}$, the change of pulling velocity on the temperature gradient and growth velocity of liquid-solid interface is hardly obvious. With pulling velocity increasing, the temperature gradient is changed from 135 to 155 K/cm , and the difference of growth velocity and pulling velocity is within the range of 5%. The numerical simulation of the near-rapid directional solidification of Al sample can provide an available tool for the investigation on the selection of microstructure of binary single phase Al-Zn alloy under near-rapid directional solidification condition.

Key words: near-rapid directional solidification; Al round bar sample; numerical simulation; temperature gradient; growth velocity

在金属的定向凝固过程中, 需要准确地获取凝固过程中液、固相的温度场, 特别是固液界面的温度梯度和凝固速度, 以确定金属凝固特性与外部控

制参数之间的定量关系^[1-3]。数值模拟法作为一种主要方法已用于金属定向凝固过程的温度场研究。以往的研究工作^[4-13], 或者忽略凝固潜热的释放,

① 收稿日期: 2003-05-15; 修订日期: 2003-11-05

作者简介: 冯 坚(1969-), 男, 副教授, 博士。

通讯作者: 冯 坚, 博士; 电话: 0731-4573167; E-mail: fengj1277@sohu.com

或者假定凝固速度和抽拉速度相等, 大多考察稳态或准稳态凝固行为, 模拟对象主要以低速定向凝固为主。而关于近快速定向凝固范围内(即金属从低速枝晶到快速细胞晶组织之间), 随着凝固速度的提高, 凝固速度是否与外界控制参数抽拉速度一致, 以及随着抽拉速度的提高, 液固界面的温度梯度是否发生变化等问题仍有待深入研究。本文作者将凝固潜热的释放考虑在内, 采用非稳态数值模拟方法考察试样在近快速定向凝固过程中温度梯度和凝固速度随抽拉速度的响应关系, 为实验研究近快速定向凝固的组织形态选择提供可靠控制参数依据。

1 物理模型及假设

金属试样定向凝固的原理与计算模型如图 1 所示。当试样以一定的抽拉速度由上向下运动时, 其所处的传热区域包括加热区、绝热区和冷却区。试样凝固过程的实际传热现象非常复杂, 因此对上述的物理模型做如下简化处理:

- 1) 忽略液、固态金属内部的质量传输;
- 2) 忽略液态金属内的对流;
- 3) 在抽拉开始前, 试样和坩埚中的温度分布达到稳态, 抽拉开始后, 试样和坩埚热量传输即为非稳态。

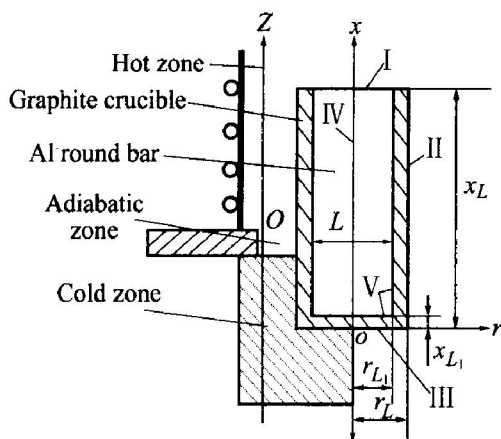


图 1 定向凝固过程中的物理模型及计算区域

Fig. 1 Schematic diagram of model for directional solidification process and computation region

2 数学模型

2.1 传热控制方程

数值模拟的对象是凝固过程中的石墨坩埚和金

属试样(长度和径向范围为: $0 \leq x \leq x_L$, $0 \leq r \leq r_L$), 将石墨坩埚和金属试样看成具有图 1 右边所示的轴对称圆柱体。计算采用的坐标系是固定于坩埚底部的坐标系, 其对称轴(x 轴)正向指向液固界面的前进方向。于是圆柱体内非稳态导热问题的控制方程为

$$\rho_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[k \frac{\partial T}{\partial x} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[rk \frac{\partial T}{\partial r} \right] + S \quad (1)$$

式中 T 为某点的温度; t 为时间; r, x 为温度场中某点的坐标; k 为导热系数; ρ 为密度; c_p 为恒压比热容(对于试样的液相和固相以及坩埚分别采用其相应的 k, ρ 和 c_p 值); S 为热源项(由凝固潜热的释放而产生)。

对于稳态过程, $\frac{\partial T}{\partial t} = 0$, 其传热控制方程为

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[k \frac{\partial T}{\partial x} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[rk \frac{\partial T}{\partial r} \right] = 0 \quad (2)$$

2.2 边界条件

假设试样及坩埚在从低速至高速抽拉过程中, 炉膛和镓铟液态冷却合金在轴向上的温度分布保持不变。通过实测加热区、绝热区和冷却区的温度, 坐标原点取在如图 1 所示绝热区的几何中心。其拟合公式为

$$T_{f,z} = 50 + 0.5 \{ 1 + \tanh[25(0.5 + (z - 140)/280)] \} / (950 - 50) \quad (3)$$

式中 $T_{f,z}$ 为炉膛轴向温度; z 为炉子的轴向坐标。

- 1) 边界 I ($x = x_L$, $0 \leq r \leq r_L$), $T = T_{f,z}$ 。
- 2) 边界 II 和 III ($r = r_L$, $0 \leq x \leq x_L$ 和 $x = 0$, $0 \leq r \leq r_L$), 与环境的辐射和对流换热综合处理为下式:

$$q = \alpha_c (T_{f,z} - T) \quad (4)$$

式中 q 为表面综合换热强度; $T_{f,z}$ 为相应的炉膛温度; α_c 为综合换热系数。

以绝热区几何中心为原点, 根据文献[9]及采用试算法, 拟合出绝热区上部 and 下部与石墨坩埚之间的换热系数分别为

$$\alpha_c = 4000.0 \{ 1.0 + 0.5 [\tanh(z - 1.25) + \tanh(-(z + 1.25))] \} \quad (5)$$

$$\alpha'_c = 300.0 \{ 1.0 + 0.5 [\tanh(z - 1.25) + \tanh(-(z + 1.25))] \} \quad (6)$$

- 3) 边界 IV ($r = 0$, $0 \leq x \leq x_L$) 处有

$$\frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (7)$$

- 4) 边界 V ($r = r_{L1}$, $x_{L1} \leq x \leq x_L$ 和 $x = x_{L1}$, $0 \leq r \leq r_{L1}$), 按理想接触界面处理。

2.3 初始条件和结晶潜热处理

试样和坩埚在抽拉开始前, 其热量传输已达稳态, $t=0$ 的温度分布按式(2)的稳态控制方程进行处理计算。

计算过程中按照纯 Al 的结晶潜热释放处理。从抽拉一开始, 试样和坩埚的热量传输已进入非稳态过程, 以稳态时的温度分布作为 0 时刻的初始场来计算时间 $t = \Delta t$ 时的温度分布 (Δt 为时间步长), 再由计算出的温度分布确定液固界面的生长速度, 从而求出凝固潜热; 然后根据计算的凝固潜热再重新求该时刻的温度分布, 依次再求出生长速度、凝固潜热, 直到前后 2 次求出的生长速度满足一定的精度要求 ($\varepsilon = \left| \frac{v_2 - v_1}{v_2} \right| \leq 5\%$, v_1 和 v_2 分别为前、后 2 次计算的生长速度) 时, 再计算下一时刻的温度分布和生长速度, 直到整个试样凝固结束时为止。凝固潜热的释放由以下方程描述:

$$k_c \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_c = k_m \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_m + \rho_m v L_v / \Delta x \quad (8)$$

式中 v 为生长速度; Δx 为轴向方向上的网格长度; k_c , k_m 和 ρ_m 分别为试样的固相导热系数、液相导热系数和液相密度; L_v 为凝固潜热。

3 数值计算方法及程序编制

3.1 网格剖分

以试样和石墨坩埚为模拟对象。纯 Al 和石墨坩埚的物性参数见文献[2]。选择的坩埚抽拉速度在 30 ~ 3 000 $\mu\text{m/s}$ 之间。试样直径为 5 mm, 长度为 120 mm; 坩埚外径为 7 mm, 内径为 5 mm, 长度为 125 mm。炉膛的结构尺寸: 绝热区上下宽度为 10 mm, 以绝热区几何中心为原点, 炉膛上部的长度为 140 mm, 径向直径为 10.5 mm、下部的长度为 140 mm, 径向直径为 16 mm。

采用单区域方法, 即对于计算域内试样的液相和固相以及坩埚用统一网格进行划分。图 2 所示为对计算区域进行的网格划分示意图, 计算长度 $x_L = 0.125$ m, 其网格长度 $\Delta x = 0.001$ m, 计算的径向半径 $r_L = 0.0035$ m, 其网格宽度 $r = 0.0005$ m, 计算的总节点数为 $N_1 \times M_1 = 127 \times 9 = 1143$ 。图中的 i , j 分别表示 x 方向和 r 方向的节点序号, 其中 $x_{L_1} = 0.005$ m, 则与其界面相邻的节点单元为 $(6, j)$ 和 $(7, j)$, $j = 1, 6$; $r_{L_1} = 0.0025$ m, 则与其界面相邻的节点单元为 $(i, 6)$ 和 $(i, 7)$, $i = 7, N_1$ 。

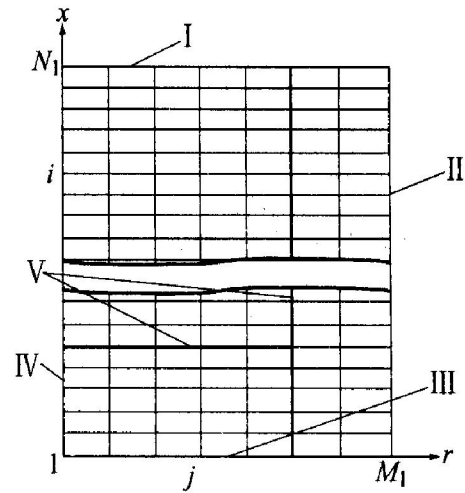


图 2 计算区域的网格划分
Fig. 2 Computational grid division

3.2 离散处理

采用控制容积积分法进行控制方程的差分离散, 即将方程(1)在如图 3 所示的控制容积上积分处理得到全隐格式的离散方程(具体推导见文献[14]):

$$\alpha_P T_P = \alpha_E T_E + \alpha_W T_W + \alpha_N T_N + \alpha_S T_S + b \quad (9)$$

式中 $\alpha_E = \frac{r_P \Delta r}{(\delta x)_e / k_e}$; $\alpha_W = \frac{r_P \Delta r}{(\delta x)_w / k_w}$; $\alpha_N = \frac{r_n \Delta x}{(\delta r)_n / k_n}$; $\alpha_S = \frac{r_s \Delta x}{(\delta x)_s / k_s}$; $\alpha_P = \alpha_E + \alpha_W + \alpha_N + \alpha_S + \alpha_P^0 - S_P \Delta V$; $\alpha_P^0 = \frac{(\rho_p)_P \Delta V}{\Delta t}$; $b = S_c \Delta V + \alpha_P^0 T_P^0$; $\Delta V = 0.5(r_n + r_s) \Delta r \Delta x$ 。e, w, n, s 为控制容积的界面节点, E, W, N, S 为节点 P 的邻点, 它们之间的位置见图 4。控制方程离散为一组代数方程组

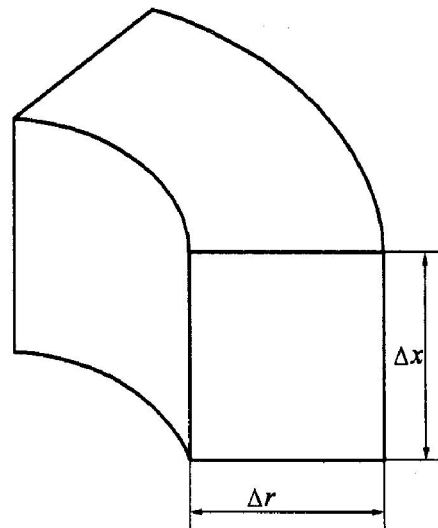


图 3 控制容积

Fig. 3 Control volume for derivation of fundamental equation

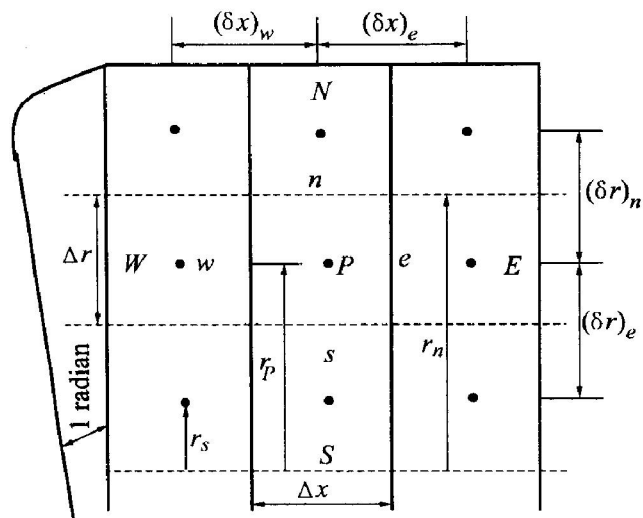


图 4 圆柱轴对称坐标的网格系统

Fig. 4 Grid system of cylindrical coordinates

后, 采用交替方向隐式迭代法(ADI)求解。

同样, 对图 2 和图 4 的网格系统, 根据本文 3.2 节所述的模型对边界 I, II, III, IV 以及 V 进行离散处理, 与方程组 (9) 一起组成代数方程组, 进一步求解。

3.3 计算程序

本程序采用全隐格式的有限差分方法计算, 用 Fortran 语言编写程序, 程序的调试和运行在 P4 微机上进行。程序计算过程关键是固-液界面位置的处理; 另外, 时间步长的选取也对计算的稳定性影响很大。

4 计算结果

4.1 模拟计算值与实测值的比较

图 5 所示为定向凝固过程中试样中心轴线上 2 点 ($x = 70 \text{ mm}$ 和 $x = 50 \text{ mm}$ 处) 温度随时间的变化曲线(抽拉速度为 $300 \mu\text{m/s}$)。实测值与计算值之间的差别不超过 1%。可见, 实测值与计算值之间吻合较好, 因此采用上述的数学模型和边界条件处理方法能较好地反映试样凝固过程中的传热情况。

4.2 试样凝固过程中的温度分布

图 6 所示为抽拉速度等于 $2000 \mu\text{m/s}$ 时试样温度分布的计算结果(炉膛上部控制温度为 1228 K , 下部采用镓铟液态合金冷却, 其外壁采用自来水循环强制冷却)。其中, 图 6(a), 6(b) 和图 6(c) 分别为 14, 28 和 44 s 3 个不同时刻整个试样的等

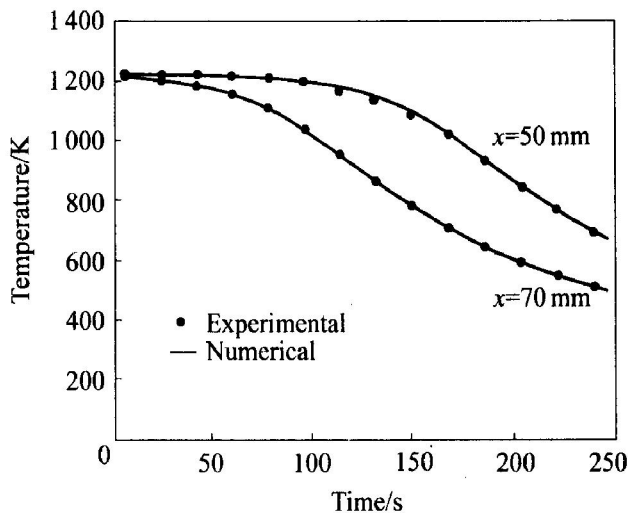


图 5 试样中心轴线上 2 点温度随时间的变化

Fig. 5 Temperature distributions of sample center line

温线图, 相邻等温线的差值 ΔT 为 50 K , 液固界面的温度等于 933 K 。可见, 随着试样凝固的进行, 液固界面在 x 方向上逐渐上移。在每一个时刻, 液固界面附近轴向的温度梯度较大 (G_{L-S} 约为 140 K/cm), 而远离液固界面的液相和固相轴向温度梯度则很小 ($G_L < 5 \text{ K/cm}$, $G_S < 6 \text{ K/cm}$), 径向的温度梯度(约为 3 K/cm) 相对于轴向温度梯度很小。液固界面附近的这种温度分布非常有利于试样的定向生长。另外, 又计算了试样抽拉速度分别为 300 , 500 , 1000 和 $3000 \mu\text{m/s}$ 时的温度分布。从计算结果发现, 随着抽拉速度的增大, 液固界面前沿的温度梯度略有减小, 在 $30 \sim 3000 \mu\text{m/s}$ 的抽拉速度范围内, 温度梯度在 $(145 \pm 10) \text{ K/cm}$ 范围变化。在每一种抽拉速度下, 从抽拉开始到整个试样全部凝固结束, 随着凝固的进行, 液固界面前沿的温度梯度略有增大, 前后的差别在 5 K/cm 范围内。可见, 在 $30 \sim 3000 \mu\text{m/s}$ 的抽拉速度范围内考察近快速定向凝固过程的组织形态, 可以认为液固界面前沿的温度梯度基本保持在 145 K/cm 不变。

4.3 抽拉速度与凝固速度的响应关系

图 7 所示为抽拉速度为 $1000 \mu\text{m/s}$ 时凝固速度的计算结果。凝固速度和抽拉速度基本一致, 差别不超过 5%。另外, 对 300 , 500 , 2000 和 $3000 \mu\text{m/s}$ 抽拉速度下的凝固速度进行了计算, 也发现凝固速度与抽拉速度基本一致。因此, 在本文所选择的抽拉速度下进行近快速定向凝固实验, 抽拉速度能够代表液固界面的生长速度。

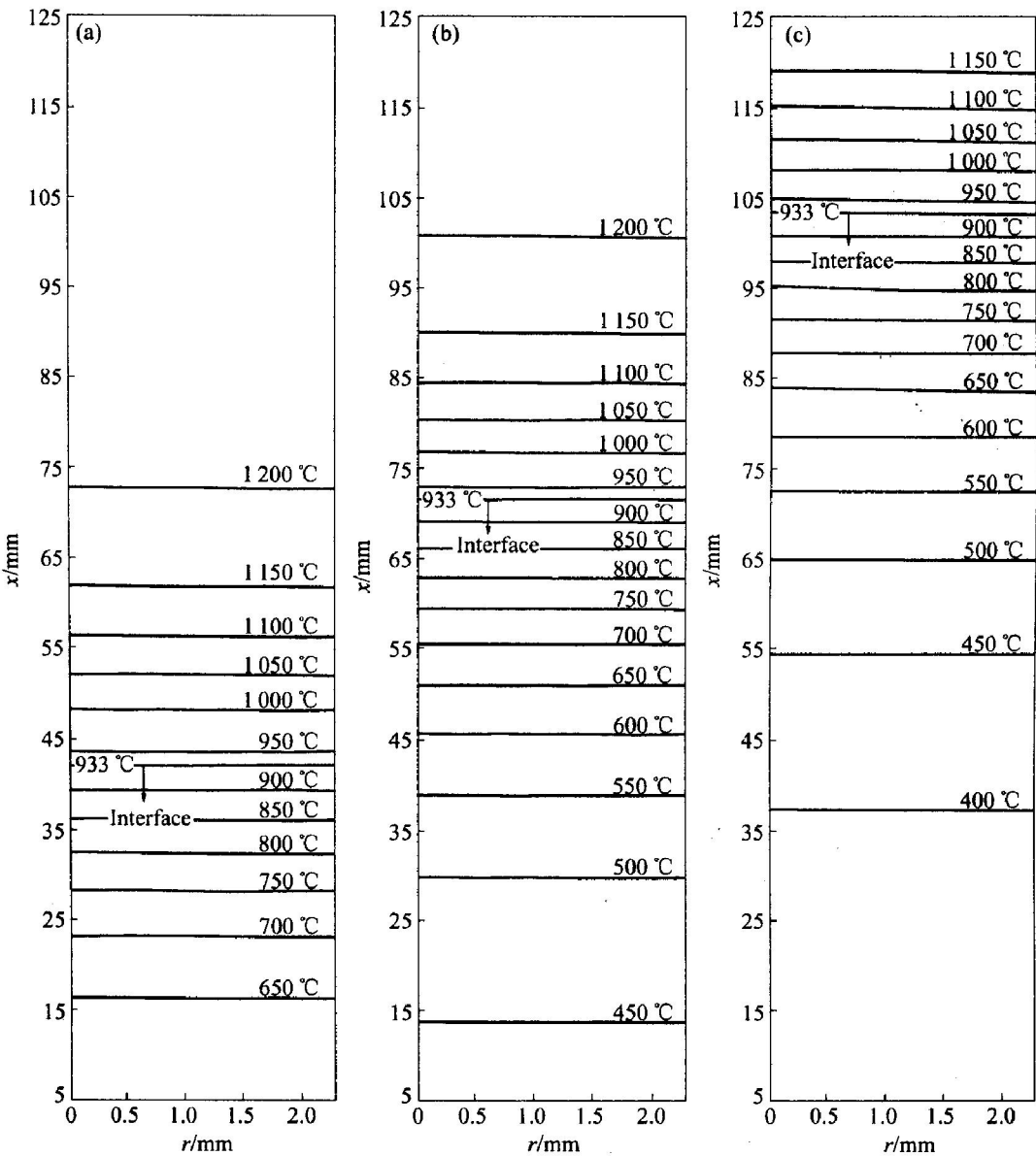


图 6 抽拉速度为 2 000 $\mu\text{m/s}$ 时试样温度场的计算结果

Fig. 6 Calculated profiles of temperature field of sample at withdrawing rate of 2 000 $\mu\text{m/s}$
(a) -14 s; (b) -28 s; (c) -44 s

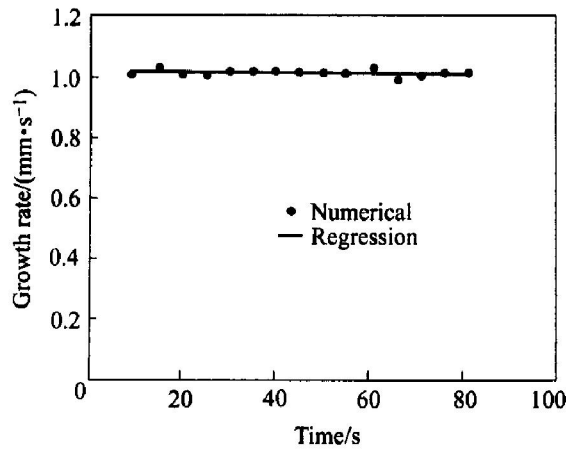


图 7 抽拉速度为 1 000 $\mu\text{m/s}$ 时生长速度
随时间的变化

Fig. 7 Variation of growth rate with
time at withdrawing rate of 1 000 $\mu\text{m/s}$

5 结论

- 1) 建立了试样在定向凝固过程中温度场的物理模型和数学模型。计算结果和实验结果比较表明, 采用上述模型能较好地反映试样在定向凝固过程的传热本质, 是一种有效模型。
- 2) 对不同抽拉速度下试样的温度场进行计算, 结果表明, 在本文所选择的 30~ 3 000 $\mu\text{m/s}$ 的抽拉速度范围, 液固界面前沿的温度梯度在 (145 $\pm$ 10) K/cm 范围内变化。因此, 可认为在相同的外界控制参数下, 液固界面前沿的温度梯度在整个抽拉速度范围基本保持在 145 K/cm 不变。
- 3) 对不同抽拉速度下液固界面的生长速度进

行计算, 结果表明, 液固界面的生长速度与抽拉速度基本一致。

REFERENCES

- [1] PAN Q Y, HUANG W D, LIN X, et al. Primary spacing selection of Cu-Mn alloys under laser rapid solidification[J]. J Crystal Growth, 1997, 181: 109 - 116.
- [2] FENG Jian, LI Tao, LIN Xin, et al. Primary cellular/dendritic spacing selection of Al-4.95% Zn alloy under near rapid directional solidification condition[J]. Trans Nonferrous Met Soc China, 1999, 9(3): 468 - 471.
- [3] FENG J, HUANG W D, HUANG W D, et al. Cellular spacing selection of Al-Zn alloy under rapid unidirectional solidification[J]. J Mater Sci Letters, 1998, 17: 1499 - 1502.
- [4] EFM hallaw y N A, Farag M M. Effect of some thermal parameters on the directional solidification process[J]. J Crystal Growth, 1978, 44: 251 - 258.
- [5] Clyne T W. Heat flow in controlled directional solidification of metals[J]. J Crystal Growth, 1980, 50: 691 - 700.
- [6] Clyne T W. Heat flow in controlled directional solidification of metals[J]. J Crystal Growth, 1980, 50: 684 - 690.
- [7] Crochet M J, Dupret F, Ryckmans Y. Numerical simulation of crystal growth in a vertical Bridgman furnace[J]. J Crystal Growth, 1989, 97: 173 - 185.
- [8] Young G L, McDonald K A, Palazoglu A, et al. Thermal modeling of Bridgman crystal growth using a boundary element approach[J]. J Crystal Growth, 1992, 118: 193 - 203.
- [9] 张克福. 三维铸件定向凝固过程模拟[D]. 西安: 西北工业大学, 1990.
- ZHANG Ke-fu. Numerical simulation on unidirectional solidification process of 3-D casting[D]. Xi'an: North-western Polytechnical University, 1990.
- [10] Bourret E D, Derby J J, Brown R A. Dynamics of Bridgman-stockbarger for non-dilute binary alloys[J]. J Crystal Growth, 1985, 71: 587 - 596.
- [11] 刘世忠, 李嘉荣, 唐定忠, 等. 单晶高温合金定向凝固过程数值模拟[J]. 材料工程, 1999, 7: 40 - 42.
- LIU Shi-zhong, LI Jia-rong, TANG Ding-zhong, et al. Numerical simulation of directional solidification process of single crystal superalloys[J]. Journal of Materials Engineering, 1999, 7: 40 - 42.
- [12] 常国威, 袁军平, 王自东, 等. 电渣感应连续定向凝固过程温度场计算与实验研究[J]. 人工晶体学报, 1999, 28: 182 - 187.
- CHANG Guo-wei, YUAN Jun-ping, WANG Zi-dong, et al. Analysis of temperature field and verification tests on electroslag induct continuous unidirectional solidification process[J]. Journal of Synthetic Crystals, 1999, 28: 182 - 187.
- [13] 骆合力, 冯 涤, 叶武俊, 等. 水平连铸凝固过程的数值模拟[J]. 特种铸造及有色合金, 1999(1): 142 - 145.
- LUO He-li, FENG Di, YIE Wu-jun, et al. Numerical simulation for solidification in horizontal continuous casting[J]. Special Casting & Nonferrous Alloys, 1999(1): 142 - 145.
- [14] 陶文铨. 数值传热学[M]. 西安: 西安交通大学出版社, 1988. 79 - 83.
- TAO Wen-quan. Numerical Heat Transfer[M], Xi'an: Xi'an Jiaotong University Press, 1988. 79 - 83.

(编辑 陈爱华)