

文章编号: 1004-0609(2004)S1-0354-04

铀铌合金铸造晶粒度的计算机模拟与实验研究^①

罗 超, 武 胜, 谢志毅, 王震宏
(中国工程物理研究院, 绵阳 621900)

摘 要: 利用 ProCast 和 CalcoSoft-3D 软件中的 CA-FE 模块, 采用元胞自动机-有限元方法(Cellular automaton-finite element), 对 U-Nb 合金以 50 °C/min 的铸造冷却速度铸造的 $d107\text{ mm}/d77\text{ mm} \times 80\text{ mm}$ 管形铸件作为算例, 对该铸件的微观组织和晶粒度进行模拟计算。结果表明: U-Nb 合金的凝固微观组织的晶粒度变化规律为, 在铸件的同一高度上, 内层晶粒半径 < 外层晶粒半径 < 中间层晶粒半径; 按从上到下的顺序晶粒半径逐渐减小。用金相方法实测了 U-Nb 合金铸件在各个高度位置之中间层的凝固微观组织晶粒半径, 实测值小于模拟计算值近 1 倍, 但是二者晶粒度的变化趋势是一致的, 模拟结果达到了定性或半定量的水平。

关键词: 铀铌合金; 铸造; 晶粒度; 计算机模拟

Computer simulation and experimental investigation on casting grain size for uranium-niobium alloy

LUO Chao, WU Sheng, XIE Zhiyi, WANG Zhenhong
(China Academy of Engineering and Physics, Mianyang 621900, China)

Abstract: Using cellular automaton-finite element method, the casting grain size of $d107\text{ mm}/d77\text{ mm} \times 80\text{ mm}$ tube-like part for Uranium-2% (mass fraction) Niobium alloy in the cooling rate of about 50 °C/min was simulated by professional software ProCast and CalcoSoft-3D. The simulated results show that the casting grain size varied from the inner to the outer in the same height of section of the casting part as following: the inner grain size < the middle grain size < the outer grain size. The grain size gradually reduces from top to the bottom of the part. The casting grain size was verified by optical metallurgical method. The grain size of the experimental results were smaller than that of simulated results, but the changing trends was in the same way.

Key words: uranium-niobium alloy; cast; grain size; computer simulation

铸造凝固过程的计算机模拟通过数值模拟和物理模拟相结合的方法, 可实现计算机试生产、动态显示工艺历程、预测缺陷和优化工艺^[1~5], 主要具有以下特点。1) 宏观模拟成熟化。大量的商品化软件的出现及其在实际生产中的广泛应用, 说明了宏观场量模拟已逐步完善, 如温度场、流场、应力应变场等。到目前为止, 典型的商品化软件有: Ansys, LS-DYNA3D, Procast, ViewCast 等。2) 组织模拟成为研究热点。目前主要有以下方法模拟组织演变过程: 采用相场方法或界面追踪方法模拟枝晶形态演变; 使用平均值法模拟加工过程中构件不同区域的

晶粒度; 使用元胞自动机(Cellular Automaton-CA)法模拟晶体形核生长动力学过程; 多尺度模拟主要在学术方面上开展研究, 凝固模拟的尺度现已从枝晶层次扩展到宏观铸件。然而, 在核工程领域中, 可供借鉴的有关铀铌合金(U-Nb)铸造过程计算机模拟的文献很少, 作者利用 ProCast 和 CalcoSoft-3D 软件中的 CA-FE 模块, 采用元胞自动机-有限元方法(Cellular Automaton-Finite Element), 对 U-Nb 合金以 50 °C/min 的铸造冷却速度铸造的 $d107\text{ mm}/d77\text{ mm} \times 80\text{ mm}$ 管形铸件作为算例, 对该铸件的微观组织和晶粒度进行模拟计算, 并进行了实验验

① 作者简介: 罗 超(1965-), 男, 研究员。

通讯作者: 罗 超, 四川绵阳 919 信箱 71 分箱, 621900.

证。

1 模型建立与求解条件

1.1 模型的建立

1.1.1 几何模型

采用以 50 °C/min 的铸造冷却速度铸造的 $d107\text{ mm}/d77\text{ mm} \times 80\text{ mm}$ 的 U-2Nb 合金管形铸件作为算例, 由于 U-2Nb 合金的高活性极易氧化, 且凝固温度区间较宽(约 100 °C), 故需要在真空条件下, 将金属液浇注于具有一定温度梯度的石墨模具内。图 1 所示为用 ProCast 进行该铸件凝固过程计算机模拟时的有限元网格剖分示意图。为了节约计算机时, 在铸件的上、中、下各部位分别取 1 mm × 1 mm × 2 mm 立方单元, 采用宏-微观耦合方式进行计算。

1.1.2 宏观温度场的数学模型^[4]

1) 热传导。液体金属充满铸型以后, 金属和铸型之间的导热主要以不稳定导热方式进行, 三维不稳定导热的控制方程为

$$\rho_p \frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial \theta}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) + Q \quad (1)$$

式中 ρ 为密度, g/cm³; c_p 为定压比热容, J/(kg·°C); θ 为温度, °C; t 为时间, s; λ 为热导

率, W/(m·°C); Q 为热源项, 这里 $Q = \rho L \frac{\partial \varphi_s}{\partial \theta}$; L 为熔化潜热, J/kg, φ_s 为固相率; x, y, z 为坐标值, m。

2) 辐射换热。遵循 Stefan-Boltzman 定律

$$q = \varepsilon \sigma_0 T_s^4 \quad (2)$$

式中 T_s 为表面的绝对温度; ε 为辐射黑度; σ_0 为 Stefan-Boltzman 常数。

2.1.3 凝固微观组织的数学模型^[6~8]

1) 形核模型。Rappaz 和 Gandin 等人提出了一种基于高斯分布的形核模型。假设形核现象发生在一系列不同的形核位置上(忽略形核本身所需要的时间, 即形核是瞬时出现的), 而这些形核位置由连续的而非离散的分布函数 $d n / d(\Delta T)$ 来描述: 在某一过冷度 ΔT 时所形成的晶粒密度 $k(\Delta T)$ 即可由对该分布曲线的积分求得:

$$n(\Delta T) = \int_0^{\Delta T} \frac{d n}{d(\Delta T')} d(\Delta T') \quad (3)$$

$d n / d(\Delta T')$ 的表达式为

$$\frac{d n}{d(\Delta T')} = \frac{n_{\max}}{\sqrt{2\pi}\Delta T_0} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\Delta T' - \Delta T_N}{\Delta T_0} \right)^2 \right] \quad (4)$$

式中 ΔT_N 为平均形核过冷度; ΔT_0 为标准偏差过冷度; $n_{\max}$ 为异质形核衬底的数目。

2) 生长模型。Rappaz 和 Kurz 基于 KGT 模型, 研究了枝晶尖端动力学, 给出了枝晶尖端生长速率

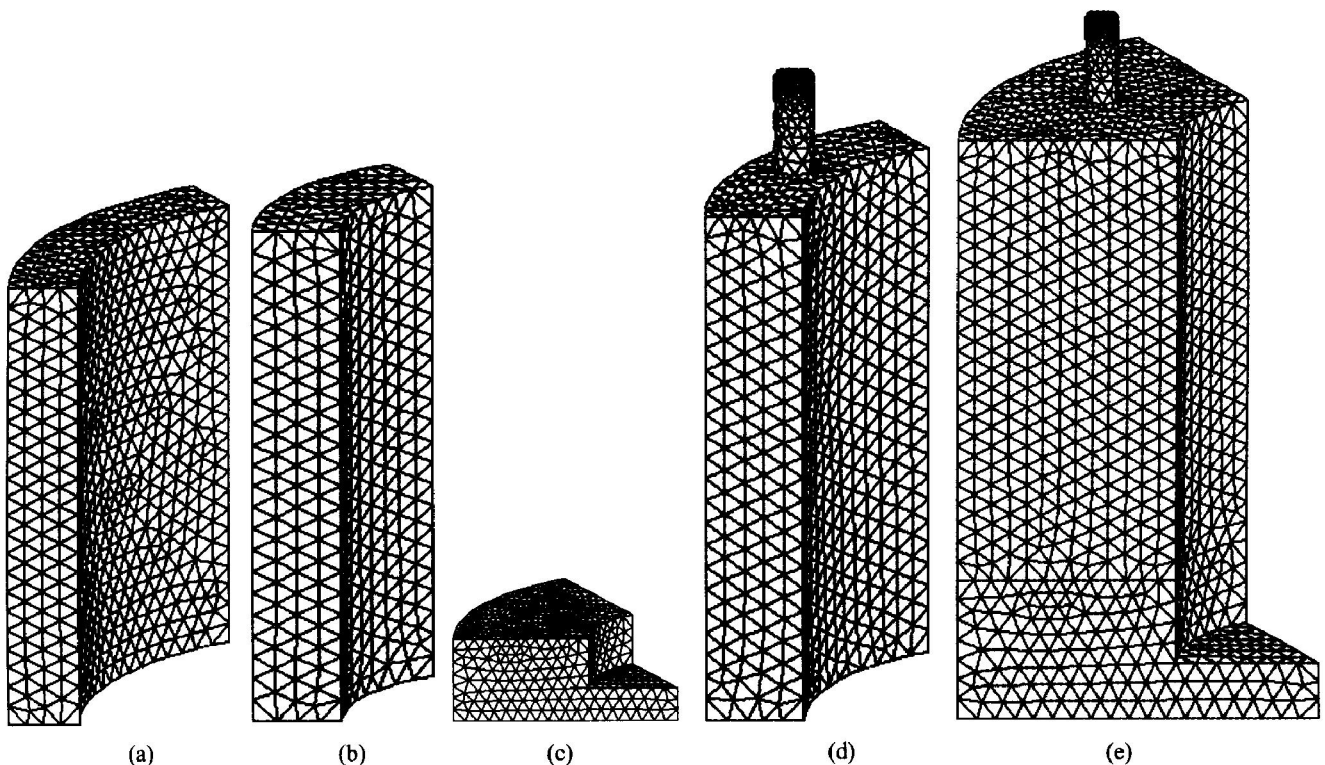


图 1 用 ProCast 进行铸件凝固过程计算机模拟时的有限元网格剖分示意图

v 与过冷度 ΔT 之间的简化关系

$$v = \alpha \cdot \Delta T^2 + \beta \cdot \Delta T^3 \quad (5)$$

式中 α , β 为生长系数。

凝固微观组织模拟在 ProCast 上采用 CAFE 方法求解, 计算体积取 2 mm^3 , 相关的参数设置见表 1。

表 1 U-Nb 合金凝固微观组织模拟的相关参数

α	β	ΔT_N
1.0×10^{-6}	1.5×10^{-7}	15
ΔT_0	型壁处形核数	液体内形核数
1.5	5.0×10^{12}	1.5×10^{11}

1.2 初始条件

1) 由于 U-2Nb 合金的凝固温度 ($\theta_s = 1\,135\text{ }^\circ\text{C}$, $\theta_l = 1\,235\text{ }^\circ\text{C}$) 区间约 $100\text{ }^\circ\text{C}$, 需要在具有一定温度梯度的石墨模具内进行浇注、铸造成形。

2) 金属液的初始温度等于浇注温度 θ_p , $\theta_p = 1\,450\text{ }^\circ\text{C}$ 。

3) 真空炉内的环境温度为 $25\text{ }^\circ\text{C}$ 。

1.3 边界条件

由于浇注与凝固是在真空条件下进行的, 因而对流换热非常微弱, 可忽略不计。主要的换热方式是模具与环境辐射换热, 辐射系数为 0.88; 铸件与模具之间的换热以热传导方式进行, 在本例中的界面换热系数 h_i 经过数值反演计算为

$$h_i = 2\,000 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C})$$

1.4 热物性参数

U-2Nb 合金的热物性参数由实测或者文献数据经过最小二乘方法拟合, 结果如下。

1) 质量定压热容 ($\text{J}/(\text{kg} \cdot ^\circ\text{C})$)

$$c_p = a_0 + a_1 \theta + a_2 T^2 + a_3 \theta^3 (\theta \leq 1\,500\text{ }^\circ\text{C}) \quad (6)$$

式中 $a_0 = 77.2$, $a_1 = 0.082$, $a_2 = 1.56 \times 10^{-4}$, $a_3 = 1.36 \times 10^{-7}$ 。

2) 热导率 ($\text{W}/(\text{m} \cdot ^\circ\text{C})$)

$$\lambda = a_0 + a_1 \theta + a_2 \theta^2 + a_3 \theta^3 (\theta \leq 1\,500\text{ }^\circ\text{C}) \quad (7)$$

式中 $a_0 = 9.38$, $a_1 = 0.1086$, $a_2 = 1.56 \times 10^{-4}$, $a_3 = 7.95 \times 10^{-8}$ 。

3) 凝固潜热

$$L(\text{U-Nb}) = 38.72 \text{ J/g}$$

4) 密度

$$\rho(\text{U-Nb}) = 18.5 \text{ g/cm}^3$$

2 结果与讨论

表 2 所示为 U-Nb 合金按表 1 设置的参数模拟计算的晶粒度与实测值, 图 2 和 3 分别为 U-Nb 合金在铸件下部高度为 0.5 mm 、铸件中部高度为 40 mm 处的凝固微观组织计算机模拟结果。图 4 所示为 U-Nb 管件上、下部位铸态组织金相图。

在该实验条件下, U-2Nb 合金的凝固微观组织的模拟结果为等轴晶, 未发生柱状晶与等轴晶之间的转变; 对于同一高度而言, 铸件内层晶粒半径 < 铸件外层晶粒半径 < 铸件中间层晶粒半径; 按从上到下的顺序, 晶粒半径逐渐减小; 用金相方法实测

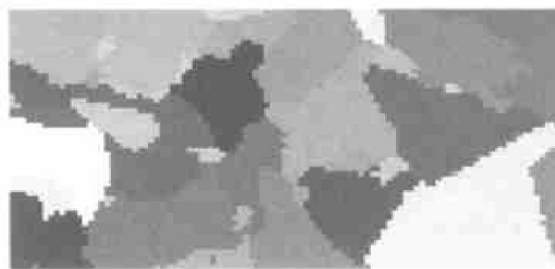


图 2 U-Nb 合金在铸件底部高度为 0.5 mm 时晶粒结构模拟结果

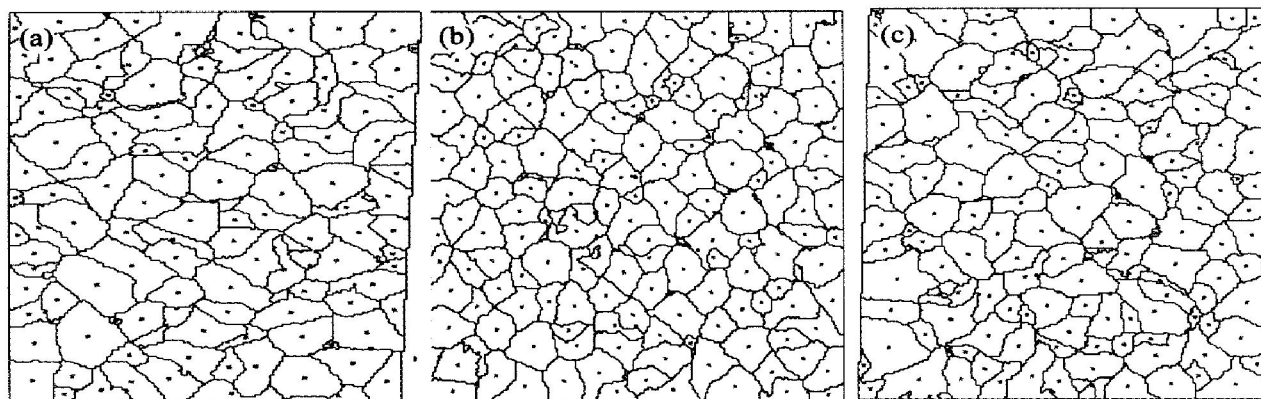


图 3 在铸件中部高度为 40 mm 处晶粒边界的模拟结果

(a) — 铸件外层; (b) — 铸件中间层; (c) — 铸件内层

表 2 U-2Nb 合金按表 1 参数的计算结果与实测值

在铸件中的位置	铸态晶粒半径 平均实测值/ μm	晶粒平均半径 计算值/ μm	
上	45~ 65	102(内层)	
		166(中间层)	
		160(外层)	
中	45~ 65	110(内层)	
		189(中间层)	
		120(外层)	
下	45	35. 8(内层)	
		115	112
		(中间层)	(中间层)
		49. 1	52
		(外层)	(外层)

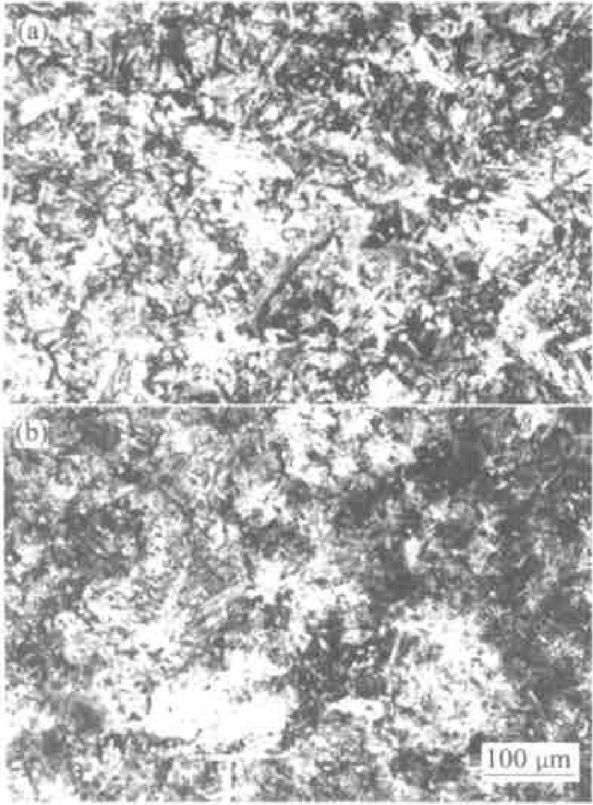


图 4 U-Nb 合金管件上、下部位的铸态组织
(a) 一上部; (b) 一下部

了 U-2Nb 合金铸件在各个高度位置之中间层的凝固微观组织晶粒半径, 实测值小于模拟计算值近一倍, 二者晶粒度的变化趋势是一致的, 模拟结果达到了定性或半定量的水平。

3 结论

U-2Nb 合金铸件以自下而上的顺序凝固方式进行凝固, 凝固微观组织的模拟结果为等轴晶, 未发生柱状晶与等轴晶之间的转变。用金相方法实测了 U-2Nb 合金铸件在各个高度位置之中间层的凝固微观组织晶粒半径, 实测值小于模拟计算值近一倍, 二者晶粒度的变化趋势是一致的, 模拟结果达到了定性或半定量的水平。

致谢

在本课题的完成过程中得到了作者所在的热加工及分析检验组、工艺模拟组的同事们的大力协助, 在此, 本文作者对他们表示感谢。

参考文献

[1] 李殿中. K417 合金精铸叶片组织形成过程数值模拟与质量控制[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 1998.

[2] Stefanescu D M, Pang H. Modeling of casting solidification stochastic or deterministic[J]. Canada Metallurgical Quaterly, 1998, 37(3 - 4): 229 - 239.

[3] 李殿中, 张玉妥, 刘 实, 等. 材料制备工艺的计算机模拟[J]. 金属学报, 2001, 37(5): 449 - 452.

[4] 柳百成. 铸件凝固过程的宏观及微观模拟仿真研究进展[J]. 中国工程科学, 2000, 2(9): 29 - 37.

[5] Boettinger W J, Coriell S R, et al, Solidification microstructures: recent developments future directions[J]. Acta Mater, 2000, 48: 43 - 70.

[6] Rappaz M, Gandin C A. Probabilistic modeling of microstructure formation in solidification process[J]. Acta Metall Mater, 1993, 41(2): 345 - 360.

[7] Gandin C A, Rappaz M. A coupled finite element-cellular automaton model for the prediction of dendrite grain structures in solidification process [J]. Acta Metall Mater, 1994, 42(7): 2233 - 2246.

[8] Gandin C A, Desbiolles J L, Rappaz M, et al. A three-dimensional cellular automaton-finite element model for the prediction of solidification grain structures[J]. Metall Mater Trans A, 1999, 30: 3153 - 3165.

(编辑 陈爱华)