



POLISH ACADEMY OF SCIENCES - COMMITTEE OF MATERIALS SCIENCE
SILESIA UNIVERSITY OF TECHNOLOGY OF GLIWICE
INSTITUTE OF ENGINEERING MATERIALS AND BIOMATERIALS
ASSOCIATION OF ALUMNI OF SILESIA UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

Conference
Proceedings

12th INTERNATIONAL SCIENTIFIC CONFERENCE

ACHIEVEMENTS IN MECHANICAL & MATERIALS ENGINEERING

Symulacja wymuszonej konwekcji ciekłego metalu przed paraboloidalnym frontem krystalizacji

J. Szajnar

Zakład Odlewnictwa, Instytut Materiałów Inżynierskich i Biomedycznych,
Politechnika Śląska, 44-100 Gliwice, ul. Towarowa 7

Wymuszona konwekcja wywołuje w krzepnącym odlewie szereg zmian, których efektem jest poprawa jego jakości. W pracy przeprowadzono symulację przepływu ciekłego metalu przed frontem krystalizacji wymuszonego przez wirujące pole magnetyczne. Podano model matematyczny i numeryczny krzepnięcia oparty na równaniu przewodnictwa ciepła i równaniach Naviera-Stokesa. Określono wpływ geometrii frontu krystalizacji na jakościowe zależności pomiędzy przepływem a zmianami w strukturze.

1. WPROWADZENIE

Celem stosowania nowoczesnych technologii odlewniczych jest między innymi poprawa jakości struktury poprzez eliminację kryształów kolumnowych. Jednym z takich sposobów jest wymuszanie konwekcji fazy ciekłej poprzez wirujące pole magnetyczne. Okazuje się, że wymuszona konwekcja fazy ciekłej zmienia warunki krystalizacji w otoczeniu frontu krystalizacji powodując utratę stabilności powierzchni rozdziału faz. W następstwie tego występuje krzepnięcie objętościowe, w którym powstają kryształy równoosiowe. Ponadto cechą charakterystyczną kryształów kolumnowych krystalizujących z cieczy przyptywającej przed frontem jest zmieniony kierunek wzrostu. W pracach [1-5] wykazano, że przy wirowym ruchu ciekłego metalu wzrost kryształów kolumnowych odchyła się od kierunku radialnego a odchylenie ma zwrot przeciwny do kierunku wirowania cieczy (rys. 1a). Przyczyną tego zjawiska jest różnicowanie się stężenia dodatku stopowego na czole kryształu [5-7], które może wynikać ze zmiany grubości warstwy dyfuzyjnej wywołanej strumieniem ciekłego metalu płynącym przed frontem krystalizacji.

Badania ruchu ciekłego metalu na modelu fizycznym są bardzo utrudnione, dlatego coraz chętniej stosowane jest numeryczne modelowanie procesu krzepnięcia, rozwijane w kierunku formułowania modeli sprzężonych [8-10]. W niniejszej pracy, proponuje się model symulacji numerycznej procesu krystalizacji fazy stałej stopu dwuskładnikowego z uwzględnieniem wymuszonej konwekcji wirującym polem magnetycznym. Dokonano oceny pola prędkości fazy ciekłej przed frontem krystalizacji poprzez symulację numeryczną dla paraboloidalnego frontu krystalizacji wg modelu Mullinsa-Sekerki [11].

Paraboloidalny front krystalizacji tworzą tzw. komórki dendrytyczne (dendryty kolumnowe), których kształt czoła odpowiada paraboloidzie, a przekrój osiowy jest parabolą o równaniu $y = bx^2$. Promień krzywizny czoła komórki R równy jest wtedy:

$$R = \frac{1}{2b}. \quad (1)$$

Ustalenie kształtu i wymiarów czoła kryształu wymaga znalezienia równania paraboli tzw. „najlepszego dopasowania” i na jej podstawie można obliczyć promień R [12]. Można również wpisać koło o promieniu R w czoło kryształu na zglądzie metalograficznym. Promień koła będzie równocześnie promieniem krzywizny czoła dendrytu R [13].

Uzależnienie geometrii powierzchni międzyfazowej od stężenia dodatku stopowego wymagało przyjęcia zmodyfikowanego modelu frontu krystalizacji Kurza-Fishera [14], w którym powierzchnię rozdziału tworzą komórki o elipsoidalnej powierzchni główki (rys. 1). Uproszczoną zależność na promień czoła kryształu R otrzymuje się z kryterium stabilności marginalnej Mullinsa-Sekerki [15]:

$$R = 2\pi \sqrt{\frac{\Gamma}{mG_c - G_T}} \quad (2)$$

gdzie:

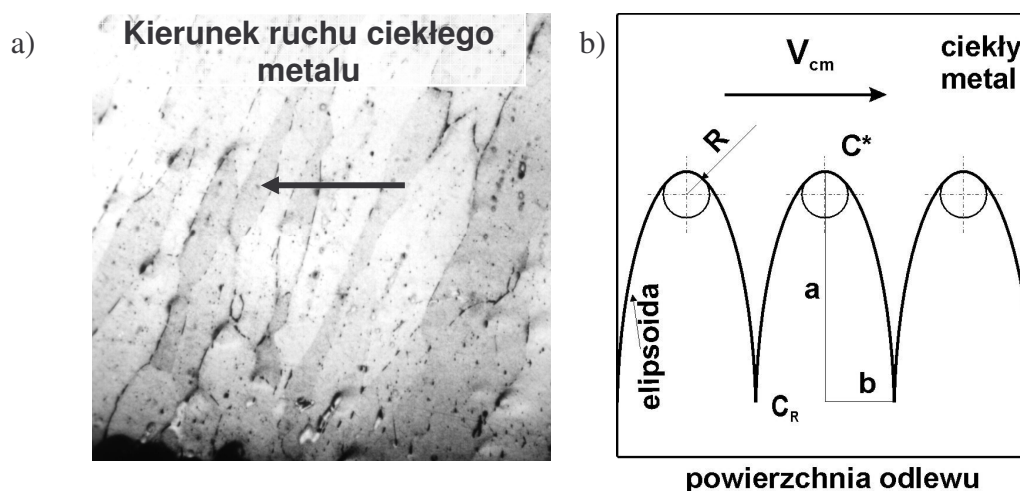
Γ - współczynnik Gibbsa – Thomsona, G_c - gradient stężenia,

G_T - gradient temperatury na froncie krystalizacji,

m - współczynnik kierunkowy linii likwidus

lub z pomiarów.

Front krystalizacji tworzą kryształy jak na rys. 1b. Najistotniejszymi parametrami frontu dla symulacji są wielkości ‘a’ i ‘b’, które są równocześnie osiami elipsy.



Rys. 1. Struktura strefy kryształów kolumnowych w odlewach z AlCu0,2 krzepnących przy wymuszonej konwekcji (a) - pow. 25x, (b) model powierzchni rozdziału faz

Do obliczenia parametrów ‘a i b’ można zastosować procedury wynikające z modelu Kobayashiego na stężenie składnika stopowego w miejscu styku kryształów [16]. Często przyjmuje się, co potwierdzono wieloma pomiarami, że $C_R \approx C_E$ nawet dla stopów niskoskładnikowych użytych w niniejszych badaniach [11]. Stężenie C^* na czole komórki definiuje funkcja Ivantsov’a [11]: $Iv = -Pe_c \exp(Pe_c) E_i(-Pe_c)$.

W zmodyfikowanym modelu Kurza-Fishera powierzchnia czola dendrytu jest elipsoidą obrotową. W związku z tym dużą półoś można obliczyć z równania:

$$a = \frac{m(C^* - C_R)}{G_s} \quad 3)$$

a małą półoś

$$b = \sqrt{aR} \quad 4)$$

gdzie:

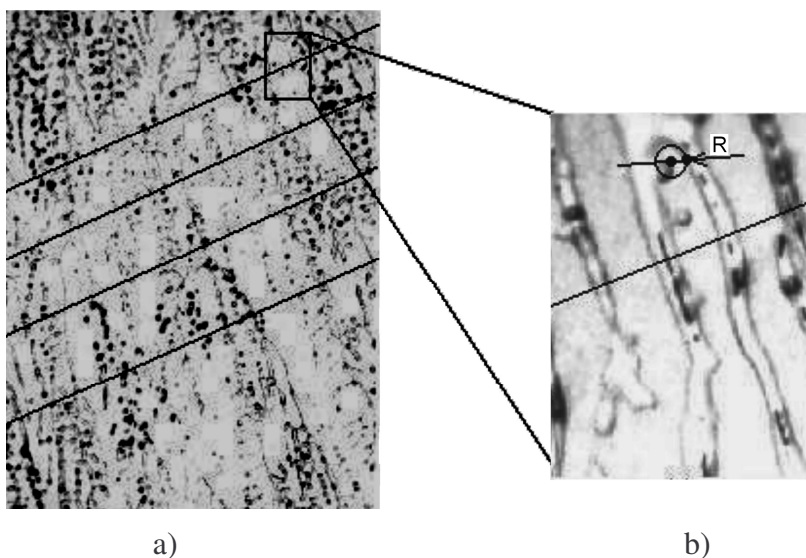
C_R - stężenie składnika stopowego w miejscu styku kryształów. Przyjęto średni wynik pomiarów stężenia miedzi w stopach AlCu0,2 na granicach ziaren $Cu=C_R=2,93\%$,

G_s - gradient temperatury w fazie stałej, obliczony na podstawie wyników symulacji (tab. 1).

Obliczenia parametru ‘a i b’

1. Wyznaczenie promienia czola komórki R

Promień czola komórki R zmierzono na odpowiednio przygotowanym zglądzie metalograficznym. Procedura pomiaru miała następujący przebieg [17]: najpierw w odległości ok. 10 mm od powierzchni zewnętrznej wlewka wytypowano na mikrozglądzie czoło kryształu, następnie polerowano powierzchnię próbki zbierając warstwę około $5 \mu\text{m}$ i w czoło wpisywano okrąg o stosownym promieniu (rys. 2). Polerowanie i pomiar powtarzano do chwili gdy czoło osiągnęło maksymalny wymiar.



Rys. 2. Mikrostruktura odlewu z AlCu0,2 o średnicy 45 mm w strefie przemiany struktury: a) pow.25x, b) pow. 50x

Następne pomiary po kolejnym polerowaniu wykazywały mniejszą wartość promienia R . Maksymalny promień wpisanego koła w czoło komórki przyjmowano za wynik pomiarów (tab. 1).

2. Obliczenie stężeniowej liczby Pecleta

$$Pe_C = \frac{R \cdot Vp1}{2D} \quad (5)$$

gdzie:

R - promień krzywizny czoła komórki (z pomiarów),

$Vp1$ - prędkość krystalizacji przyjęta z wyników symulacji [5],

D - współczynnik dyfuzji ($D=5,45 \cdot 10^{-3} \text{ mm}^2/\text{s}$) [5].

3. Obliczenie stężenia na wierzchołku komórki C^*

$$C^* = \frac{C_o}{1 + (1 - k_o) Pe_C \exp(Pe_C) E_i(-Pe_C)} \quad (6)$$

gdzie:

C_o - stężenie początkowe,

k_o - równowagowy współczynnik rozdziału faz,

Pe_C - stężeniowa liczba Pecleta,

$E_i(-Pe_C)$ - funkcja aproksymująca (wykładnicza funkcja całkowa) [18],

dla $Pe_C > 1$

$$E_i(-Pe_C) = - \frac{\exp(-Pe_C) \cdot \left[0,26773 + 8,63476 Pe_C + 18,05901 Pe_C^2 + 8,57333 Pe_C^3 + Pe_C^4 \right]}{Pe_C \left(3,9585 + 21,09965 Pe_C + 25,63296 Pe_C^2 + 9,57332 Pe_C^3 + Pe_C^4 \right)}$$

W zależności (6) zamiast równowagowego współczynnika rozdziału k_o przyjęto efektywny współczynnik k_{ef} , który oblicza się z równania Scheila [11]. Szczegółową analizę założeń i stosowany przebieg obliczeń k_{ef} przedstawiono w [5]. Stężenia nominalnego C_o w równaniu (6) zastąpiono wynikami pomiarów rozkładu stężenia miedzi wzdłuż promienia odlewu $Cu(x)$ [5,6] przyjmując, że $C_o = Cu(x) / k_{ef}$. W ten sposób uzależniono stężenie na wierzchołku komórki C^* od położenia x frontu krystalizacji w odlewie uzyskując

$$C^*(x) = \frac{Cu(x)}{\left[1 + (1 - k_{ef}) Pe_C \exp(Pe_C) E_i(-Pe_C) \right] k_{ef}} \quad (7)$$

Dane do obliczeń: k_{ef} i $Cu(x)$ przyjęto z [5]. Wyniki zawarto w tab. 1.

4. Obliczenie 'a' i 'b' z zależności (3) i (4)

Wyniki obliczeń dla warstwy odlewu od 6,1 do 12,1 mm, mierzonej od jego powierzchni zewnętrznej, przedstawiono w tab. 1.

Tabela 1

Zestawienie wyników pomiarów i obliczeń dla odlewu o średnicy 45 mm z AlCu0,2 wykonanego pod wpływem WPM o indukcji $B=0,015$ T i $V_{cm}=0,55$ m/s

x [mm]	R [mm]	Vp1 [mm/s]	Pe _C	G _s [K/mm]	C*(x) [%]	a [mm]	b [mm]
6,1	0,022	0,59	1,191	7,8	0,218	0,9	0,141
7,1	0,022	0,54	1,09	6,91	0,216	1,02	0,150
8,1	0,022	0,51	1,029	6	0,217	1,18	0,161
9,1	0,022	0,52	1,05	5,03	0,221	1,4	0,175
10,1	0,022	0,55	1,11	3,88	0,226	1,82	0,200
11,1	0,022	0,61	1,231	3,1	0,228	2,27	0,223
12,1	0,022	0,71	1,433	2,46	0,229	2,86	0,251

Uzyskane wymiary geometrii frontu krystalizacji przyjęto do obliczeń numerycznych przepływu ciekłego metalu przed jego powierzchnią.

Symulację procesu przeprowadzono w oparciu o model krzepnięcia ciekłego metalu uwzględniający wzajemny, złożony wpływ zjawisk cieplnych i przepływowych, bowiem związany z rozwiązywaniem równania przewodnictwa ciepła i równań Naviera-Stokesa.

Zadanie rozwiązano metodą elementów skończonych [12]. Modelowaniu poddano odlew walcowy ze stopu AlCu0,2 .

2. MODEL MATEMATYCZNY

Model numerycznej symulacji krzepnięcia odlewu z uwzględnieniem ruchu ciekłego metalu opiera się na rozwiązywaniu następującego układu równań różniczkowych [9,10,20]:

- równań Naviera-Stokesa i równania ciągłości przepływu:

$$\rho \frac{dv_i}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 v_i}{\partial x_j \partial x_j} + \rho g_i \beta (T - T_z), \quad \frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0, \quad (8)$$

- równania przewodnictwa ciepła z członem konwekcyjnym:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T(x_i, t)}{\partial x_j} \right) - \rho c_{ef} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_j \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) = 0, \quad (9)$$

gdzie: ρ - gęstość [kg/m^3],

v_i - współrzędna prędkości przepływu metalu [m/s],

g_i - współrzędna przyspieszenia ziemskiego [N/kg],

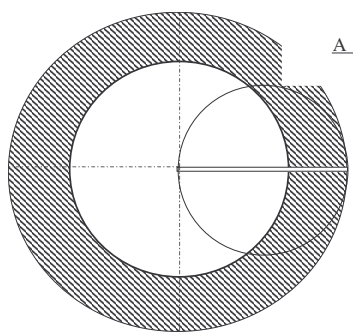
- p - ciśnienie [N/m^2]; T - temperatura [K]; t - czas [s],
 μ - współczynnik lepkości dynamicznej [Ns/m^2],
 β - objętościowy współczynnik rozszerzalności cieplnej [$1/\text{K}$],
 T_z - temperatura zalewania metalu [K],
 c_{ef} - efektywne ciepło właściwe [$\text{J}/(\text{kgK})$],
 λ - współczynnik przewodzenia ciepła [$\text{W}/(\text{mK})$],
 x_i - współrzędna wektora położenia [m],
 $(i, j)=1, 2$ - zadanie dwuwymiarowe.

Dodatkowym założeniem jest przyjęcie zmiany gęstości z temperaturą: $\rho = \rho(T)$. W zaproponowanym modelu krzepnięcia źródło ciepła nie występuje jawnie w równaniu przewodnictwa, lecz znajduje się w efektywnym ciepłe właściwym (model pojemnościowy) [10,19].

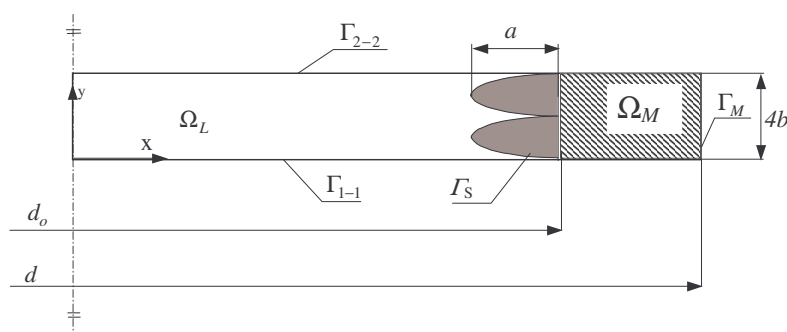
Układ równań (8,9) uzupełniono warunkami początkowymi dla pól prędkości i temperatury oraz odpowiednimi warunkami brzegowymi zadanymi na powierzchniach ograniczających rozważany układ (rys. 3,4) [10,19,20].

Warunki początkowe dla pól prędkości i temperatury są następujące:

$$\mathbf{v}(x_i, t_0) = \mathbf{v}_0(x_i), \quad T(x_i, t_0) = T_0(x_i). \quad (10)$$



Rys. 3. Przekrój układu odlew-kokila



Rys. 4. Schemat rozważanego układu (szczegół A na rys.3 w powiększeniu)

Warunki brzegowe na wskazanych powierzchniach (rys. 4) wynoszą:

- dla prędkości:

$$\begin{aligned} v_n \Big|_{\Gamma_{1-1}} &= v_{cm}, & v_t \Big|_{\Gamma_{1-1}} &= v_t \Big|_{\Gamma_{2-2}} = 0, \\ v_n \Big|_{r=0} &= 0, & v_t \Big|_{\Gamma_S} &= v_n \Big|_{\Gamma_S} = 0, & \frac{\partial v_t}{\partial r} \Big|_{r=0} &= 0, \end{aligned} \quad (4)$$

- dla temperatury:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_{\Gamma_{1-1}} &= 0, & \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=0} &= 0, \\ \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_{\Gamma_{2-2}} &= 0, & \lambda_M \frac{\partial T_M}{\partial n} \Big|_{\Gamma_M} &= -\alpha_M (T_M \Big|_{\Gamma_M} - T_a), \end{aligned} \quad (5)$$

gdzie: T_a - temperatura otoczenia [K],

α_M - współczynnik wymiany ciepła między formą a otoczeniem [W/m²K].

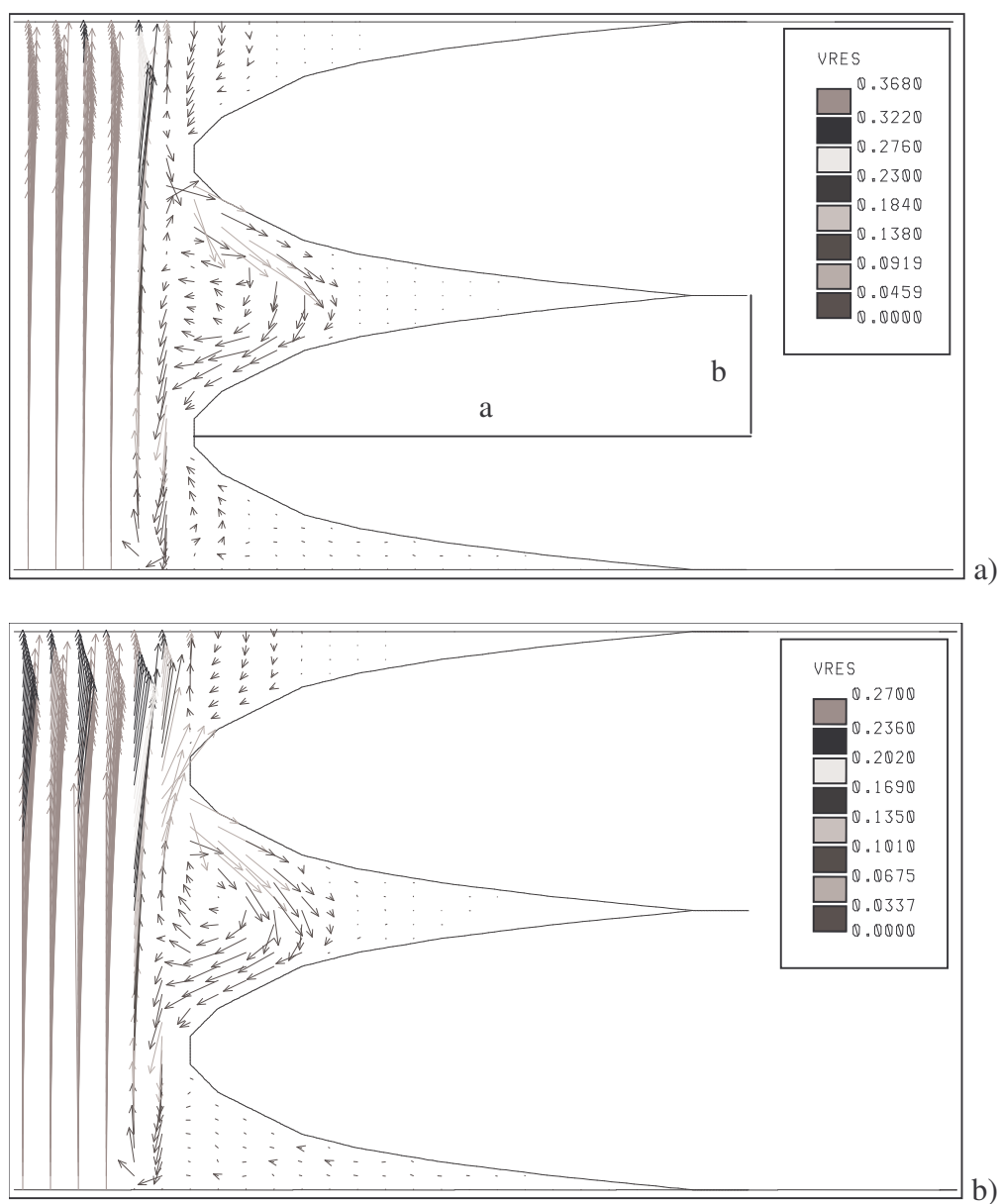
Postawione zadanie rozwiązano metodą elementów skończonych.

3. OBLICZENIA NUMERYCZNE

Obliczenia przeprowadzono dla odlewu ze stopu AlCu0,2 o wymiarach $\phi 45 \times 180$ mm, krzepnącego w kokili grafitowej o grubości ścianki 7 mm. Właściwości termofizyczne stopu AlCu0,2 i materiału formy zaczerpnięte z prac [4,11] podano w tab. 2. Rozważany wycinek przekroju pokazano na rys. 3, zaznaczając najistotniejsze wymiary: $d = 0,059$ m, $d_o = 0,045$ m, $R = 0,001$ m. W celu dokonania oceny wpływu zmiany geometrii frontu krystalizacji na rozkład prędkości ciekłego metalu obliczenia przeprowadzono dla dwóch wartości prędkości ciekłego metalu V_{cm} przed frontem. Przyjęto, że wnęka kokili wypełniona jest ciekłym metalem o temperaturze zalewania $T_{zal} = 973$ K. Początkowa temperatura kokili (T_M) wynosiła 300 K. Ciepło przemiany fazowej (L) wydzielające się pomiędzy temperaturami likwidusu (T_L) równą 931 K a solidusu (T_S) wynoszącą 928 K, wynosiło 390 kJ/kg. Wymianę ciepła pomiędzy kokilą a otoczeniem modelowano warunkiem brzegowym Newtona przyjmując temperaturę otoczenia (T_∞) równą 300 K, natomiast współczynnik przejmowania ciepła (α_M) wynosił 60W/(m²K). Przyjęto liniową zmianę gęstości (ρ) i współczynnika przewodzenia ciepła (λ) w przedziale temperatury likwidusu i solidusu. Zmianę współczynnika lepkości dynamicznej (μ) z temperaturą określono według zależności podanej w pracy [21].

Tabela 2
Dane termofizyczne odlewu i kokila

	W/(mK)	J/(kgK)	kg/m ³
Faza ciekła	$\lambda_L = 95$	$c_L = 1290$	$\rho_L = 2390$
Faza stała	$\lambda_S = 210$	$c_S = 1090$	$\rho_S = 2550$
Kokila	$\lambda_M = 96$	$c_M = 1100$	$\rho_M = 2200$



Rys. 5. Wektory prędkości [m/s] w pobliżu frontu krystalizacji przy szerokości warstwy zakrzepłej: a) $l_s = r_o/4$ i b) $l_s = r_o/2$; paraboloidalny front krystalizacji; a:b=4:1

Dla przyjętych parametrów termicznych uzyskano prędkości przyrostu fazy stałej, dla której powierzchnia krzepnięcia zajmowała położenie równe $l_s = r_o / 2$ po około 15s trwania procesu krystalizacji. Dla takiej prędkości przesuwania się frontu krystalizacji wyznaczono rozkłady wektorów prędkości w obszarze kontrolnym (rys. 4.). Wymuszoną prędkość ruchu ciekłego metalu przyjęto równą $V_{cmmax}=0,55m/s$. Pole prędkości po osiągnięciu przez front odległości $l_s = r_o / 4$ i $l_s = r_o / 2$ od powierzchni zewnętrznej odlewu, prezentuje w powiększeniu rys. 5. Wyniki obliczeń pokazano dla przekroju na wysokości 70mm od dna kokili.

4. PODSUMOWANIE KOŃCOWE

Na podstawie uzyskanych wyników można stwierdzić, że pole prędkości ciekłego metalu zmienia się w zależności od zadanej prędkości ciekłego metalu przed rosnącymi kryształami. Wyraźniej większa prędkość ciekłego metalu od strony napływu cieczy (rys. 5) może wywoływać zmniejszenie grubości warstwy dyfuzyjnej i z tej strony czoła kryształu występuje intensywniejsze konwekcyjne odsyłanie domieszki. Powoduje to zubożenie w składnik stopowy ciekłego metalu na czole komórki od strony napływu cieczy, a wzbogacenie warstwy dyfuzyjnej na czole komórki poprzedzającej po stronie przeciwnej napływu fazy ciekłej. Objawia się to mniejszym stężeniem miedzi w kryształach kolumnowych od strony napływu ciekłej fazy [5,6]. Ta asymetria jest przyczyną wzrostu komórek z tendencją kierowania się w stronę przeciwną do makroskopowego kierunku wymuszenia ruchu fazy ciekłej (rys. 1a).

LITERATURA

1. J. Gawroński, J. Szajnar, Krzepnięcie Metali i Stopów, 13 (1987) 5.
2. J. Szajnar, Analysis of columnar crystals growth during the solidification in magnetic field, Proc. Sec. Inter. Conf. "Comput. Modell. of Free and Mov. Boundry", Computational Mech. Public. Southampton, Mediolan 1993.
3. J. Szajnar, Krzepnięcie Metali i Stopów, 22 (1995) 160.
4. J. Szajnar, J. Gawroński, Archiwum Tech. Masz. i Autom. vol. 16, nr 1 (1996) 81.
5. J. Szajnar, Transformacja struktury kolumnowej w równoosiową przy krzepnięciu odlewów z wymuszoną konwekcją wirującym polem magnetycznym, ZN Politechniki Śl., Mechanika nr 138, Gliwice 2001.
6. J. Szajnar, J. Gawroński, M. Cholewa, Raport końcowy proj. bad. nr 7 T08B 030 17 KBN, Politechnika Śl. 2001.
7. J. Szajnar, J. Gawroński, Wpływ zmiany rozkładu stężenia składnika stopowego na strukturę odlewu. Proc.Conf.Mat.Mech.&Manuf.'2000, Pol. Śl. Gliwice, 2000.
8. A. Buchholz, S. Engler, Comput. Materials Science, 7 (1996) 221.
9. G. Dhatt, D.M. Gao, Inter. Journal for Num. Meth. in Eng., vol. 30 (1990) 821.
10. J.A. Dantzig, Inter. Journal for Num. Meth. in Eng., 28 (1989) 1769.
11. W. Kurz, D.J. Fisher, Fundamentals of solidification. Trans. Tech. Public., Switzerland - Germany - UK - USA, 1989.

12. M. Glicksman, R. Schaefer, In situ observation growth and remelting, The Iron and Steel Inst., London 1978, p. 33.
13. H.K. Kim, J.C. Earthman, E.J. Lavernia, Acta Metal. Mater. vol. 40, No. 4 (1992) 637.
14. W. Kurz, D.J. Fisher, Acta Metall. vol. 29 (1981) 11.
15. W.W. Mullins, R.F. Sekerka, J. Appl. Phys., vol. 35 (1964) 444.
16. S. Kobayashi, Trans. Iron Steel Institut Japan, vol. 28 (1988) 728.
17. J. Szajnar, Zmiana geometrii frontu krystalizacji w strefie kryształów kolumnowych w odlewach krzepnących pod wpływem pola magnetycznego, Archiwum Odlewnictwa, vol. 1, nr1 (2001) 379.
18. E. Majchrzak, Zastosowanie metody elementów brzegowych w termodynamice procesów odlewniczych, Pr. hab., ZN Politechniki Śl., Mechanika, z. 102, Gliwice 1991.
19. B. Mochnacki, J.S. Suchy, Modelling and simulation of casting solidification, PWN, Warsaw, 1993.
20. J. Szajnar, Wpływ kształtu frontu krystalizacji na skutki działania wymuszonej konwekcji, Archiwum Odlewnictwa, R. 1, nr 2 (2001) 385.
21. D. Sichen, J. Bygden, S. Seetharaman, Metal. Trans. B, vol. 25B (1994) 519.