

## 基于体积平均法模拟铸锭凝固过程的可靠性分析\*

李日† 王健 周黎明 潘红

(河北工业大学, 材料成型及控制工程重点实验室, 天津 300130)

(2013年12月28日收到; 2014年2月27日收到修改稿)

采用欧拉方法和体积平均思想, 建立了以液相为主相、等轴晶和柱状晶视为两类不同第二相的三相模型, 耦合凝固过程质量、动量、能量、溶质的守恒方程和晶粒的传输方程. 以Al-4.7 wt.%Cu二元合金铸锭为例, 模拟了合金铸锭二维的流场、温度场、溶质场、柱状晶向等轴晶转变过程以及等轴晶的沉积过程, 并将模拟的铸锭组织和偏析结果与实验所得结果对比. 温度场、流场和组织的模拟结果与理论基本一致, 但由于模型没有考虑收缩以及浇注时的强迫对流, 导致铸锭外层的偏析模拟值比实测值低, 内层的模拟值比实测值高. 所以收缩和逆偏析在模拟中是不可忽略的, 这也是本文模型的改进方向. 另外在所得模拟结果的基础上分析了体积平均法计算铸锭凝固过程的优点和不足之处.

关键词: 宏观偏析, 流动, 传热, 传质

PACS: 81.30.Fb, 64.10.+h, 81.10.Aj

DOI: 10.7498/aps.63.128103

## 1 引言

凝固过程中存在着传热、传质、固相和液相的移动以及固液界面的迁移, 同时还存在着形核、枝晶的生长、柱状晶向等轴晶转变(CET)过程等现象. 早期的模型是以经典的传热理论为基础来研究铸锭的凝固过程. 从20世纪80年代以后, 模型逐渐完善到传热、传质和流动的完全耦合, 并且从微观角度来模拟固液界面现象. 1987年, Bennon和Incropera<sup>[1]</sup>提出了连续介质模型. 1988年, Beckermann和Viskanta<sup>[2]</sup>提出了二元合金体积平均模型. 1991年, Ni和Beckermann<sup>[3]</sup>提出了体积平均两相模型. 1996年, Wang和Beckermann<sup>[4]</sup>建立了描述多尺度、多相模型. 2006年, Wu和Andreas<sup>[5]</sup>改进了体积平均模型, 提出了等轴晶-柱状晶混合的三相模型. 王同敏等<sup>[6]</sup>基于体积平均思想提出了等轴晶凝固过程的液、固、气三相模型. 2009年, Wu和Ludwig<sup>[7,8]</sup>提出了考虑枝晶包络的以全域等轴晶方式凝固的三相模型. 刘东戎等<sup>[9]</sup>以体积平均法为基础, 建立考虑固相移动的大尺寸

铸锭宏观偏析的数学模型. 2010年, Wu等<sup>[10,11]</sup>提出了考虑枝晶包络的以等轴晶-柱状晶方式凝固的五相模型. 2012年, 张红伟等<sup>[12]</sup>建立了合金凝固过程元胞自动机-控制容积积分法(CA-FV)的宏观双向耦合的数学模型. 2014年, 王哲等<sup>[13]</sup>基于欧拉方法和流体体积元技术, 建立了三维多相流体动力学凝固模型, 并将其与三传方程耦合模拟合金的凝固过程. 综上, 从模型的发展历程可知, 宏观耦合、多维多相以及多元合金凝固的数值模拟已成为当今模型发展的主流方向.

## 2 数学模型

本文采用Wu和Andreas<sup>[5]</sup>提出的等轴晶-柱状晶混合的三相模型, 此数学模型基于如下假设:

- 1) 考虑到研究对象为轴对称的铸锭, 所以用二维横截面模拟结果代替三维空间模拟结果;
- 2) 熔体视为不可压缩流体且为层流流动;
- 3) 等轴晶近似为球体; 柱状晶近似为圆柱体, 生长方向垂直于壁面, 一次枝晶间距视为常数;

\* 国家重点基础研究发展计划(批准号: 2011CB610402)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: sdzllr@163.com

4) 无补缩流, 热溶质对流、晶粒的沉积和熔体对流采用 Boussinesq 方法求解, 即除浮力项外的其他项密度值视为常数;

5) 忽略枝晶熔断, 等轴晶和柱状晶之间无质量交换;

6) 不考虑浇注时的充型过程, 假设熔体在铸型中为稳定的初始状态且无过热;

7) 忽略凝固过程中铸锭的收缩以及由收缩引起的液相流动等效效应;

8) 界面换热系数和边界温度视为常数;

9) 不考虑固相中溶质的扩散.

描述凝固过程流动、传热、传质的模型方程可以写成如下统一形式:

$$\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u\varphi) = \nabla \cdot (\Gamma \cdot \nabla\varphi) + S_\varphi, \quad (1)$$

(1) 式从左到右分别为方程的时间项、对流项、扩散项和源项. 基于欧拉方法和体积平均思想, 采用等轴晶-柱状晶混合的三相模型, 依据 (1) 式分别对三相建立质量、动量、溶质和能量守恒方程.

质量方程为

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_l\rho_l) + \nabla \cdot (f_l\rho_l\mathbf{u}_l) = M_{sl}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_s\rho_s) + \nabla \cdot (f_s\rho_s\mathbf{u}_s) = M_{ls}, \quad (3)$$

式中,  $l$  代表液相,  $s$  代表固相, 指代等轴晶或柱状晶;  $f$ ,  $\rho$  和  $u$  分别代表体积分、密度和相对运动速度;  $M$  代表固液相之间的质量交换率.

动量方程为

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(f_l\rho_l\mathbf{u}_l) + \nabla \cdot (f_l\rho_l\mathbf{u}_l \otimes \mathbf{u}_l) \\ &= -f_l\nabla p + \nabla \cdot [f_l\boldsymbol{\mu}_l\nabla \cdot \mathbf{u}_l + f_l\boldsymbol{\mu}_l(\nabla \cdot \mathbf{u}_l)^T] \\ &+ f_l\rho_l[\beta_T(T^{\text{ref}} - T) + \beta_C(c^{\text{ref}} - c_l)]g + U_{sl}, \quad (4) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(f_s\rho_s\mathbf{u}_s) + \nabla \cdot (f_s\rho_s\mathbf{u}_s \otimes \mathbf{u}_s) \\ &= -f_s\nabla p + \nabla \cdot [f_s\boldsymbol{\mu}_s\nabla \cdot \mathbf{u}_s + f_s\boldsymbol{\mu}_s(\nabla \cdot \mathbf{u}_s)^T] \\ &+ f_s(\rho_s - \rho_l)g + U_{ls}, \quad (5) \end{aligned}$$

式中, 上标  $T$  表示矩阵的转置,  $\otimes$  表示矢量的并积运算,  $p$  为压力,  $\boldsymbol{\mu}$  为黏度,  $g$  为重力加速度,  $U$  为固液之间的动量交换率,  $\beta_T$  和  $\beta_C$  分别为热膨胀系数和溶质膨胀系数,  $c^{\text{ref}}$  和  $T^{\text{ref}}$  分别为参考成分和参考温度. 动量方程仅应用于液相和等轴晶相.

溶质方程为

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_l\rho_l c_l) + \nabla \cdot (f_l\rho_l\mathbf{u}_l c_l)$$

$$= \nabla \cdot (f_l\rho_l D_l \nabla c_l) + C_{sl}, \quad (6)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(f_s\rho_s c_s) + \nabla \cdot (f_s\rho_s\mathbf{u}_s c_s) \\ &= \nabla \cdot (f_s\rho_s D_s \nabla c_s) + C_{ls}, \quad (7) \end{aligned}$$

式中,  $C$  为固液之间的溶质交换率,  $D$  为溶质扩散系数.

能量方程为

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(f_l\rho_l h_l) + \nabla \cdot (f_l\rho_l\mathbf{u}_l h_l) \\ &= \nabla \cdot (f_l k_l \nabla \cdot T_l) + Q_{sl}, \quad (8) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(f_s\rho_s h_s) + \nabla \cdot (f_s\rho_s\mathbf{u}_s h_s) \\ &= \nabla \cdot (f_s k_s \nabla \cdot T_s) + Q_{ls}, \quad (9) \end{aligned}$$

式中,

$$h_l = \int_{T^{\text{ref}}}^{T_l} c_{p(l)} dT + h_l^{\text{ref}};$$

$$h_s = \int_{T^{\text{ref}}}^{T_s} c_{p(s)} dT + h_s^{\text{ref}},$$

$h$  为焓,  $k$  为热导率,  $Q$  为固液之间的能量交换率,  $T^{\text{ref}}$  为热焓计算所用参考温度,  $c$  为比热容.

在求解 (4)—(9) 式中的源项时都是以 (2) 和 (3) 式中的源项  $M_{sl}$  和  $M_{ls}$  为基础求解, 而求解  $M_{sl}$ ,  $M_{ls}$  和等轴晶漂移时需要知道等轴晶的密度  $n$ , 通过 (10) 和 (11) 式联立求出  $n$ .

晶粒传输方程为

$$\frac{\partial}{\partial t}n + \nabla \cdot (\mathbf{u}_s n) = N, \quad (10)$$

式中  $N$  为形核率.

采用经典的三参数形核公式计算  $N$ :

$$\begin{aligned} N &= \frac{dn}{dt} = \frac{dn}{d(\Delta T)} \cdot \frac{d(\Delta T)}{dt} \\ &= \frac{d(\Delta T)}{dt} \cdot \frac{n_{\text{max}}}{\sqrt{2\pi}\Delta T_\sigma} \\ &\times \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta T - \Delta T_N}{\Delta T_\sigma}\right)^2\right], \quad (11) \end{aligned}$$

$\Delta T_\sigma$  为方差过冷度,  $\Delta T_N$  为对应最大形核率的平均形核过冷度,  $n_{\text{max}}$  为最大形核密度.

### 3 计算方法

本文采用体积平均法, 即上述方程中所求的物理量均视为一个控制单元内的平均值, 如能量方程所求的为单元的平均温度, 动量方程所求的为单元的平均速度. 将方程 (2)—(10) 进行耦合分离式求

解, 固相和液相的压力场相同, 应用SIMPLE算法求解. 在每一个时间步长内的计算顺序是: 动量方程、质量方程、能量方程、溶质方程、晶粒传输方程, 分别得到速度  $u$ , 体积分数  $f$ , 温度  $T$ , 溶质浓度  $c$ , 晶核密度  $n$ .

## 4 计算结果与讨论

### 4.1 边界条件和初始条件

本文模拟 Al-4.7 wt.%Cu 二元合金在金属型铸锭中的凝固过程, 模拟时简化为一个在二维区域的凝固过程, 该区域大小为  $50 \text{ mm} \times 100 \text{ mm}$ , 上边界与空气接触, 换热系数为  $100 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{°C}^{-1}$ , 左右以及下边界与金属型型壁接触, 设置为第三类换热边界条件, 换热系数为  $500 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{°C}^{-1}$ , 环境温度为  $25 \text{ °C}$ , 合金初始的浇注温度为  $933 \text{ K}$ , 不考虑浇注时的强迫对流, 假设金属液初始为静止状态. 模拟的时间步长设置为  $0.01 \text{ s}$ , 将计算区域划分为正方形网格, 每个网格的大小为  $1 \text{ mm}^2$ . 计算采用

的主要参数见表 1.

### 4.2 铸锭凝固的传热、流动和传质

#### 4.2.1 温度场模拟结果

由于铸锭的左右及底部边界的换热系数比顶部边界大且相差比较悬殊, 所以左下角和右下角散热最快, 铸锭的底部温度降低也较快, 温度梯度也较大. 随着时间的推移, 铸锭逐渐呈现出由下到上的顺序凝固趋势, 固相线温度为  $821 \text{ K}$ , 图 1(d) 等温线  $821 \text{ K}$  以内的区域为铸锭最后凝固的区域.

#### 4.2.2 等轴晶体积分数、等轴晶流场及柱状晶体积分数

等轴晶和柱状晶的生长如图 2 和图 4 所示. 由于左右下角部分温度最低, 利于等轴晶的形核和柱状晶的生长, 所以等轴晶最先在左右下角部分形核长大, 其次在边界处形核长大, 如图 2(a) 所示. 柱状晶最先在四个角处长大, 如图 4(a) 所示. 左右边界由于热量的散失较快, 紧靠边界的流体由于温度的降低而导致密度变大, 所以左右边界处的等轴晶

表 1 计算所采用的主要参数

参 数	参数值	参 数	参数值
动态黏度 $\mu_l/\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	$1.3 \times 10^{-2}$	纯 Al 的熔点 $T_f/\text{K}$	933
比热容 $c_p/\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$	1179	共晶点 $T_E/\text{K}$	821
液相扩散系数 $D_l/\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	$3 \times 10^{-9}$	Gibbs-Thomson 系数 $\Gamma/\text{m} \cdot \text{K}$	$2.4 \times 10^{-7}$
液相热导率 $k_l/\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$	77	最大晶核密度 $n_{\text{max}}/\text{m}^{-2}$	$1 \times 10^9$
固相热导率 $k_s/\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$	153	Gauss 分布标准偏差 $\Delta T_\sigma/\text{K}$	2
密度 $\rho/\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	2606	对应最大形核率的平均形核过冷度, $\Delta T_N/\text{K}$	5
分配系数 $k$	0.145		
液相线斜率 $m_l/\text{K}$	-344		

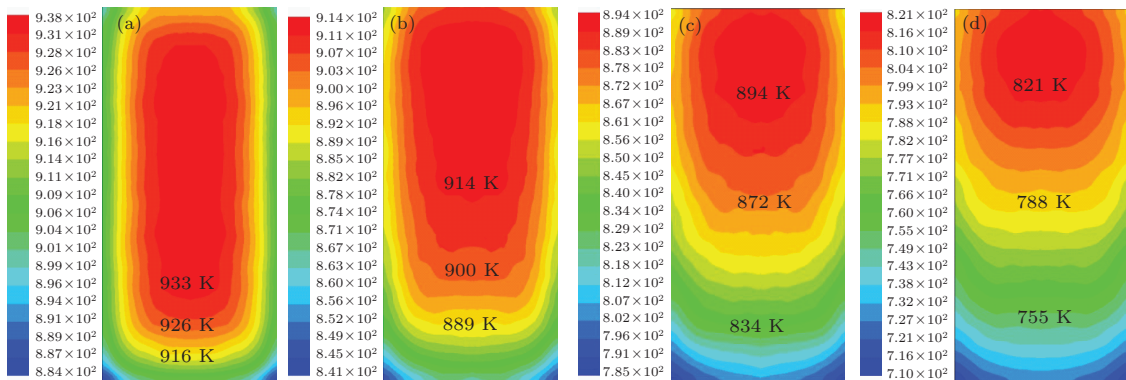


图 1 (网刊彩色) 铸锭温度场 (a) 2 s; (b) 10 s; (c) 24 s; (d) 38 s



随着流体向下流动,同时推动底部中间的等轴晶向上运动;另一方面由于底部的温度低,导致底部金属液的密度比上部大,等轴晶在底部中间部位由于浮力的作用向上漂移,所以等轴晶的流场方向呈现出图3(a)所示的方向.随着温度的进一步降低,过冷度增大,等轴晶逐渐开始趋于在底部中央形核,另一方面左右两边下沉的等轴晶向底部中间汇集,所以造成了底部较大的等轴晶体积分数(图2(b)).当等轴晶的体积分数、温度梯度和浓度梯度增大到一定程度时,铸锭内的等轴晶流场速度增强,由于等轴晶在底部的体积分数较大,导致等轴晶的运动阻力变大,此时底部等轴晶流场速度急剧减小(图3(b)).底部温度梯度较边部大,所以底部的柱状晶较边部生长得更快(图4(b)).当温度继续降低,温度梯度进一步增大,等轴晶开始大面积形核(图2(c)).由于后期未凝固位置的溶质Cu含量较高,新形成的等轴晶的密度也较大,导致晶粒整体向下沉积(图3(c)).此时柱状晶枝晶尖端的等轴晶体积分数大于0.49,根据Hunt<sup>[14]</sup>提出的CET

理论,柱状晶停止生长(图4(c)).当温度场整体低于821 K时,铸锭凝固完毕,最后等轴晶的体积分数如图2(d)所示,在边缘处由于柱状晶的存在,所以等轴晶在该处的体积分数最低,中间红色区域无柱状晶,等轴晶的体积分数为1,即为CET过程的转变.另外本文作者还模拟了Al-4.7 wt.% Cu砂型铸锭的全域等轴晶组织,参见文献[15].

### 4.2.3 溶质场分析

溶质场的分布如图5所示,2 s时左右角和边界处溶质含量较低(图5(a)),这是由于合金的平衡分配系数 $k < 1$ ,发生溶质再分配时边部和底部的晶体的析出需要向外排出溶质,致使晶体自身的溶质含量减少.10 s时边部和底部的负偏析变大,由于等轴晶的堆积,底部的三角形负偏析开始形成,同时铸锭中上部由于排出溶质量的增加,导致正偏析也随之变大.24 s以后由于等轴晶在整个区域内大量形核,导致等轴晶的运动阻力增加,铸锭内流场的速度急剧减小,流场基本趋于稳定静止状态,所以24 s之后的溶质场变化差距不大.图5(d)所示为

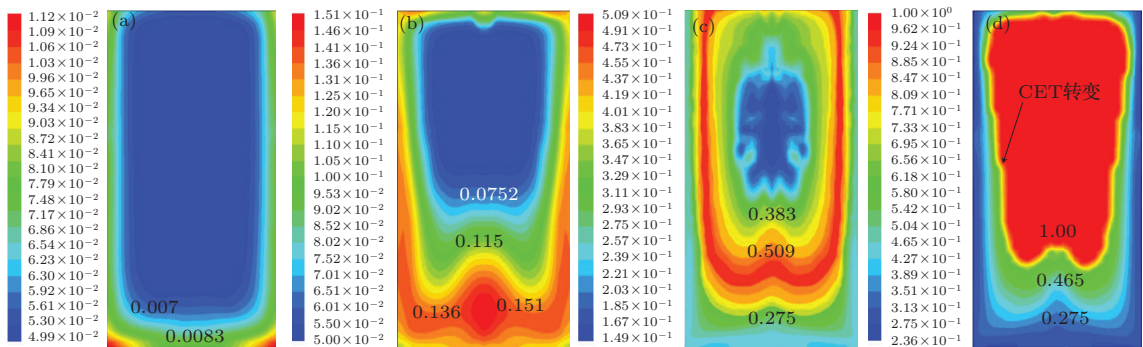


图2 (网刊彩色) 等轴晶的体积分数 (a) 2 s; (b) 10 s; (c) 24 s; (d) 38 s

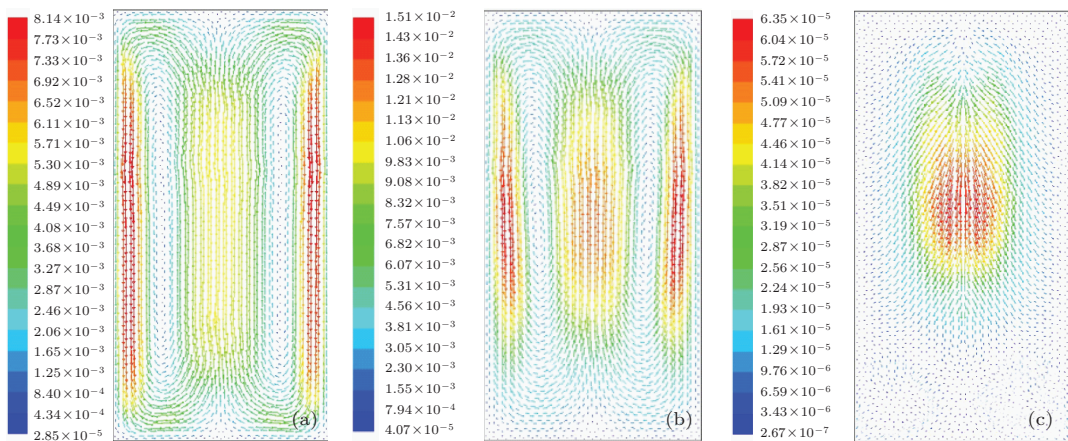


图3 (网刊彩色) 等轴晶的流场 (a) 2 s; (b) 10 s; (c) 24 s

铸锭最终的溶质分布, 底部和边部出现负偏析, 边部的负偏析是由于凝固期间柱状晶的生长需要向外排出溶质, 底部的负偏析除柱状晶的影响外, 还应考虑底部等轴晶的沉积; 上部出现正偏析是由于固液界面溶质的再分配导致凝固后期熔体的浓度升高, 当温度低于共晶温度时, 熔体转变为高浓度的固相组织。

### 5 实验验证

为了验证本文基于体积平均法模拟结果的可靠性, 浇注了  $\Phi 50 \text{ mm} \times 100 \text{ mm}$  的 Al-4.7 wt.%Cu 二元合金金属型圆柱铸锭, 腐蚀后铸锭中心断面的组织如图 6 (a) 所示, 可以清晰地看到边缘的柱状晶和内部等轴晶的组织结构. 模拟的柱状晶组织如

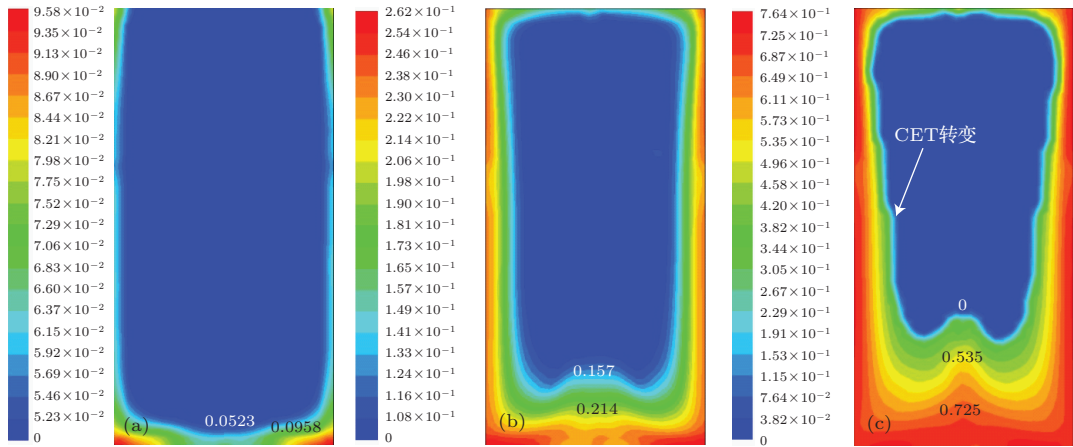


图 4 (网刊彩色) 柱状晶组织的体积分数 (a) 2 s; (b) 10 s; (c) 24 s

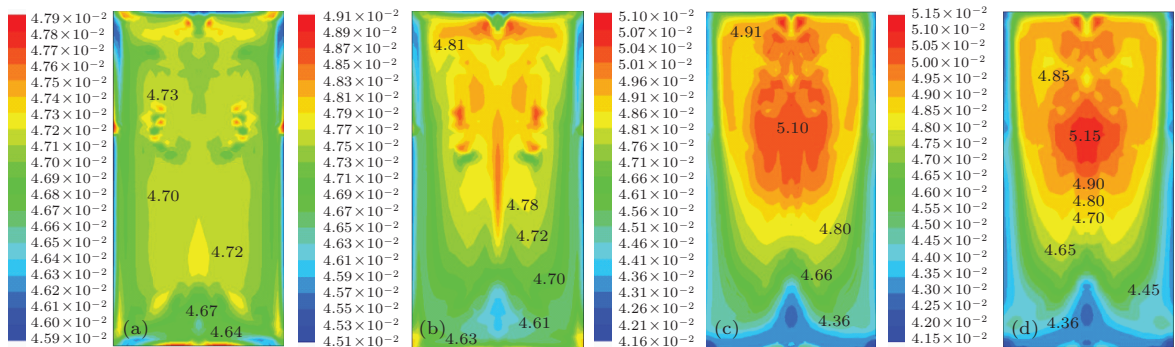


图 5 (网刊彩色) 铸锭内的溶质场 (a) 2 s; (b) 10 s; (c) 24 s; (d) 38 s

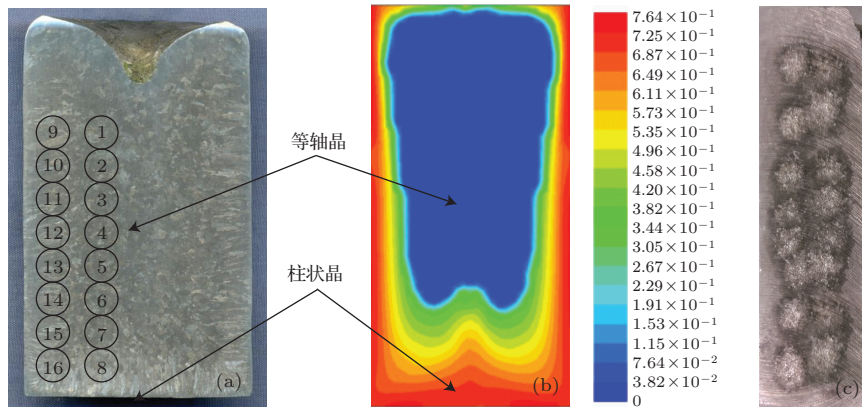


图 6 (网刊彩色) 不同样品的对比示意图 (a) 铸锭组织及取样区域编号; (b) 模拟柱状晶组织; (c) 光谱仪打点试样

图6(b)所示,可以看出模拟的组织轮廓与实验结果基本符合.为了进行偏析的对比,采用Spectro-lab直读光谱仪测定断面上各个小圆形区域的Cu含量,所得结果为各小区域内Cu含量的平均值,所测各区域的位置如图6(c)所示,各区域的编号如图6(a)所示,各个区域Cu含量的实测值与模拟值如表2所示.

由表2可以看出,内层3,4,6区域实测值小于初始浓度,发生负偏析,外层除14区域外实测值大于初始浓度,发生正偏析.由图7的Cu含量对比折线可以看出,在内层1—6各区域模拟值大于实测值,而外层的11—16区域模拟值小于实测值.这是

由于在实际情况下Al-Cu合金结晶温度范围宽,型壁处柱状晶组织粗大,收缩量较大,凝固开始时边部和底部由于固液两相的糊状区热收缩使得内侧富含溶质的熔体沿枝晶向边部发生相对运动,这样使得原来相邻的内层位置溶质含量降低,同时熔体含气量较高而使枝晶间熔体的压力增大,所以极易发生逆偏析过程,因此造成外层Cu含量较高,外层产生逆偏析后导致其邻近内层的Cu含量相对减少.因为本文的模拟没有考虑逆偏析和收缩,所以导致实测值和模拟值出现上述的差异.同样底部也出现逆偏析,所以内层7区域和8区域实测值也大于模拟值,外层15区域和16区域出现上升趋势.

表2 Cu含量的实测值与模拟值

取样区域	1	2	3	4	5	6	7	8
实测值/wt%	4.80	4.77	4.66	4.55	4.73	4.61	4.70	4.77
模拟值/wt%	4.93	5.01	4.99	4.87	4.84	4.69	4.65	4.40
取样区域	9	10	11	12	13	14	15	16
实测值/wt%	4.82	4.84	4.84	4.83	4.88	4.68	4.73	4.77
模拟值/wt%	4.83	4.86	4.78	4.75	4.65	4.59	4.49	4.37

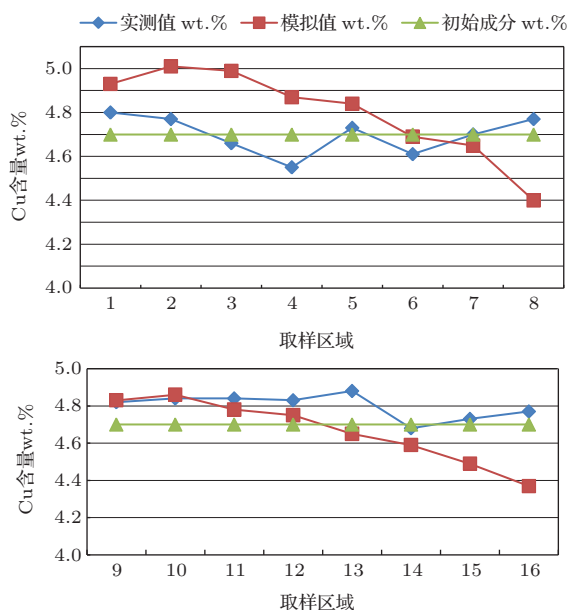


图7 Cu含量实测值与模拟值对比折线

## 6 体积平均法分析

本文基于体积平均的思想,即在一个控制容积内求得该容积各个参量的平均值.在一定的假设条件下,对液相、等轴晶相和柱状晶相分别列出相应的控制方程并联合求解,而且考虑到了流场、温度

场和溶质场之间的相互影响,同时耦合宏微观可以模拟出铸锭凝固过程具体的温度场、流场和溶质场,模拟结果与实际理论基本相符.由于体积平均法模拟时所划分的网格尺寸(1 mm × 1 mm)相对较大,故计算速度相对较快,但缺点是只能计算组织的体积分数,不能再现枝晶的具体形貌和具体的生长过程,忽略了实际情况下的枝晶断裂和晶粒在枝晶上的附着过程.假设柱状晶只能垂直于壁面生长,而不是在温度梯度与浓度梯度共同作用下的倾斜生长,同时也没有考虑形核和生长的随机过程,因此体积平均法不能再现液相沿枝晶间的流动,进而不能模拟出逆偏析形成的过程.而CA方法和相场法可以模拟出具体的枝晶生长过程和形态,例如朱鸣芳等采用CA方法可以模拟出对流作用下的枝晶生长<sup>[16]</sup>、三维的枝晶生长<sup>[17]</sup>过程以及考虑气泡影响的枝晶生长<sup>[18]</sup>,文献<sup>[19, 20]</sup>基于相场法模拟了枝晶的定向生长和倾斜生长,但是CA方法和相场法均不能模拟凝固过程的宏观偏析.

## 7 结 论

1) 基于欧拉模型和体积平均法建立铸锭凝固过程的数学模型,对Al-4.7 wt.%Cu二元合金凝固



过程的流动、传质、传热进行模拟,再现了凝固过程宏观和微观现象.

2) 模拟结果清晰地展现了底部的三角形负偏析和上部的正偏析,在不考虑收缩和逆偏析的条件下,与本文假设条件下的理论分析基本一致,即底部的负偏析是由等轴晶的堆积和柱状晶的生长造成的;上部的正偏析是由于溶质再分配导致最后凝固时溶质(Cu元素)的积聚.

3) 在实际情况下,由于Al-Cu铸锭的收缩和逆偏析导致了Cu元素含量实测值与模拟值的差异,考虑收缩和逆偏析是本文模型将要改进的方向.

4) 分析了体积平均法模拟铸锭组织凝固过程的可靠性. 体积平均法不适合计算发生逆偏析凝固过程的溶质场,仅适合模拟正常偏析. 温度场、流场和组织的模拟与实际情况基本相符.

## 参考文献

- [1] Bennon W D, Incropera F P 1987 *Int. J. Heat Mass Transfer*. **30** 2161
- [2] Beckermann C, Viskanta R 1988 *Physicochem. Hydrodyn.* **10** 195
- [3] Ni J, Beckermann C 1991 *Metall. Trans. B* **22** 349
- [4] Wang C Y, Beckermann C 1996 *Metall. Trans. A* **27** 2754
- [5] Wu M H, Andreas L 2006 *Metall. Trans. A* **37** 1613
- [6] Wang T M, Yao S, Zhang X G, Jin J Z 2006 *Acta Metall. Sin.* **42** 584 (in Chinese) [王同敏, 姚山, 张兴国, 金俊泽 2006 金属学报 **42** 584]
- [7] Wu M, Ludwig A 2009 *Acta Mater.* **57** 5621
- [8] Wu M, Ludwig A 2009 *Acta Mater.* **57** 5632
- [9] Liu D R, Sang B G, Kang X H, Li D Z 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 104 (in Chinese) [刘东戎, 桑宝光, 康秀红, 李殿中 2009 物理学报 **58** 104]
- [10] Wu M, Fjeld A, Ludwig A 2010 *Comp. Mater. Sci.* **50** 32
- [11] Wu M, Fjeld A, Ludwig A 2010 *Comp. Mater. Sci.* **50** 43
- [12] Zhang H W, Nakajima K, Wang E G, He J C 2012 *Chin. J. Nonfer. Metal* **22** 1883 (in Chinese) [张红伟, Nakajima Keiji, 王恩刚, 赫冀成 2012 中国有色金属学报 **22** 1883]
- [13] Wang Z, Wang F Z, Wang X, He Y H, Ma S, Wu Z 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 076101 (in Chinese) [王哲, 王发展, 王欣, 何银花, 马姗, 吴振 2014 物理学报 **63** 076101]
- [14] Hunt J D 1984 *Mater. Sci. Eng.* **65** 75
- [15] Li R, Shen H D, Feng C H, Pan H, Feng C N 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 188106 (in Chinese) [李日, 沈焕弟, 冯长海, 潘红, 冯传宁 2013 物理学报 **62** 188106]
- [16] Sun D K, Zhu M F, Yang C R, Pan S Y, Dai T 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 285 (in Chinese) [孙东科, 朱鸣芳, 杨朝蓉, 潘诗琰, 戴挺 2009 物理学报 **58** 285]
- [17] Pan S Y, Zhu M F 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 278 (in Chinese) [潘诗琰, 朱鸣芳 2009 物理学报 **58** 278]
- [18] Wu W, Sun D K, Dai T, Zhu M F 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 150501 (in Chinese) [吴伟, 孙东科, 戴挺, 朱鸣芳 2012 物理学报 **61** 150501]
- [19] Li J J, Wang J C, Yang G C 2008 *Chin. Phys. B* **17** 3516
- [20] Wang Y Q, Wang J C, Li J J 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 118103 (in Chinese) [王雅琴, 王锦程, 李俊杰 2012 物理学报 **61** 118103]

# The reliability analysis of using the volume averaging method to simulate the solidification process in a ingot\*

Li Ri<sup>†</sup> Wang Jian Zhou Li-Ming Pan Hong

(Key Laboratory of Materials Processing and Control Engineering, Hebei University of Technology, Tianjin 300130, China)

( Received 28 December 2013; revised manuscript received 27 February 2014 )

## Abstract

Adopting the Euler and the volume averaging methods, a three-phase mathematical model with parent melt as the primary phase, columnar dendrites and equiaxed grains as two different secondary phases is developed, and the coupled macroscopic mass, momentum, energy and species conservation equations are obtained separately. Taking the Al-4.7 wt% Cu binary alloy ingots for example, the flow field, temperature field, solute field, columnar-to-equiaxed-transition and grain sedimentation in two-dimension are simulated, and the simulated result of ingot and macrosegregation result are compared with their experimental values. The simulation results of temperature field, flow field and structure are basically consistent with the theoretical results, but the result of solute field shows that the simulated values is lower than the measured value on the edge, this is because the model does not take the shrinkage and forced convection into account, and the inner results is higher than the results on edge. The shrinkage and inverse segregation therefore should not be neglected. This model are still necessarily improved. Besides, based on the analysis of simulation results, the advantages and the disadvantages of the volume averaging method to simulate the solidification in a ingot are evaluated.

**Keywords:** macrosegregation, fluid flow, heat transfer, mass transfer

**PACS:** 81.30.Fb, 64.10.+h, 81.10.Aj

**DOI:** [10.7498/aps.63.128103](https://doi.org/10.7498/aps.63.128103)

---

\* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2011CB610402).

† Corresponding author. E-mail: [sdzllr@163.com](mailto:sdzllr@163.com)