

Fe-Pb合金凝固多相体系内偏析形成过程的 三维数值模拟*

王哲¹⁾ 王发展^{1)2)†} 王欣¹⁾ 何银花¹⁾ 马姗²⁾ 吴振²⁾

1)(西安建筑科技大学, 材料与矿业学院, 西安 710055)

2)(西安建筑科技大学, 机电工程学院, 西安 710055)

(2013年11月15日收到; 2014年1月1日收到修改稿)

基于Eulerian-Eulerian方法和流体体积技术, 建立了三维多相流体动力学凝固模型, 并将其与质量、动量、溶质和热焓守恒方程相耦合, 对Fe-Pb合金侧向凝固过程进行了数值模拟. 首先, 分析了分布面积二次梯度($\nabla(\nabla S_{Pb})$)和浓度二次梯度($\nabla(\nabla C_{Pb})$)对偏析模式的影响, 结果表明: 液、气两相的流动相变使偏析模式表现为上端X形下端V形, X偏析由气相相变驱动力和多取向相变作用下的“散射”形成; $t > t_c$ 时, 随 $\nabla(\nabla S_{Pb})$ 和 $\nabla(\nabla C_{Pb})$ 曲线降低, X偏析的下偏析角增大, 上偏析角和V偏析角减小, Pb收得率增大, 有利于获得含量稳定弥散的凝固组织. 此外, 还研究了液、气两相交互流动下通道偏析的形成机理, 结果表明: 通道偏析仅存在于流动-相变交互作用($\mathbf{u}_l \cdot \nabla c_l$ 和 $\mathbf{u}_g \cdot \nabla c_g$)为负值的区域, 该区域的流动扰动抑制合金的局部凝固, 促进偏析通道生长; 流动-相变交互作用负值越小, 偏析通道持续增长越稳定. 模拟结果与实验结果符合, 验证了模型的准确性.

关键词: 多相凝固, X形偏析形成, 通道偏析, 数值模拟

PACS: 61.25.Mv, 29.85.-c, 81.30.Fb

DOI: 10.7498/aps.63.076101

1 引言

Fe-Pb合金是一种易切削钢材料, 广泛应用于笔头材料、精密仪表、汽车零件、机械重要部件等高精密加工领域^[1-5], 当第二相弥散分布于基体中时, 该合金表现出更加优良的切削性能. 但由于该合金凝固时存在液-气相变过程, 液相Pb易富集于钢锭底部而气相Pb易上浮挥发, 使Pb的收得率很低且在基体中的分布情况比较复杂极易产生偏析现象, 严重限制了该合金的应用, 为其凝固过程的研究带来极大困难^[6-8].

实验上, 早在1969年McDonald和Hunt^[9,10]建立了NH₄Cl-H₂O系统, 首次发现了A偏析主要是由密度差异导致的局部双扩散对流引起的; Sarazin和Hellawell^[11]建立了三元合金系统, 采用定向凝

固方法研究了流动扰动的瑞利数对通道偏析的影响. 此后, Shahani等^[12]发现数值模拟可以很好的呈现出偏析通道内的流动过程, 但并没有解释其形成机理; Schneider和Beckermann^[13]首次通过理论研究发现Pb-20%Sn合金在凝固过程中糊状区的渗透率较高, 易形成更长、更多的偏析通道. 近年来, 人们对二维条件下的偏析过程进行了大量的数值模拟研究, 如Bellet等^[14]借助普朗特数和刘易斯数来研究合金的凝固过程, 王同敏等^[15]研究了固-液-气三相合金凝固时的宏观偏析情况. 但是, 关于在三维多相凝固条件下气相对合金偏析形成过程影响的理论研究鲜有报道.

本文以Fe-Pb合金为研究对象, 建立了固-液-气三相三维流动凝固模型, 对合金凝固组织形成过程进行了数值模拟, 首次揭示了气、液两相流动

* 十二五期间国家科技支撑计划项目(批准号: 2011BAE31B02)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: wangfz10_1@163.com

相变对合金偏析模式的影响, 并详细讨论了液相与气相交互流动下通道偏析的形成机理. 将模拟结果与实验进行对比, 验证了此三维模型的准确性.

2 数学模型

本文中符号的说明见表 1, 所建三相流动凝固模型引入如下假设: 1) 凝固体系中不同物质的密度、比热容、热导率、熔化热和黏度不同; 2) 溶质在

固相中静止无扩散; 3) 考虑气相浮力, 定义压力出口为气相溢出口; 4) 界面处浓度一定且相变界面处于热力学平衡; 5) 偏析通道内为液、气两相交交互流动; 6) 糊状区近似为多孔介质; 7) 糊状区的流动阻力采用 Blake-Kozeny 假设; 8) 热溶质对流采用 Boussinesq 假设. 固、液、气三相数学模型的守恒方程与传递速率方程见表 2. 此凝固模型与以往的一些模型 [16–23] 不同.

表 1 符号说明

符号说明			
C_s, C_l, C_g	溶质浓度, wt. %	S_A, S_B	液、气相通道的截面浓度, m^{-1}
C_s^*, C_l^*, C_g^*	界面溶质浓度	T_s, T_l, T_g	温度, K
C_{ls}^M, C_{gl}^M	相变溶质传递, $kg \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$	T_{Fe}, T_{Pb}	熔点, K
C_P^{Fe}, C_P^{Pb}	比热容, $J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$	T_{ref}	热焓参考温度, K
D_{Fe}, D_{Pb}	液相扩散系数, $m^2 \cdot s^{-1}$	t	时间, s
f_s, f_l, f_g	体积分数, v. %	U_{ls}^D, U_{gl}^D	拖拽引起的能量交换速度, $kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-2}$
g	重力加速度, $m \cdot s^{-2}$	U_{ls}^M, U_{gl}^M	相变引起的能量交换速度, $kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-2}$
h	传热系数, $W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$	$\beta_T^{Fe}, \beta_T^{Pb}$	热膨胀系数, K^{-1}
h_s, h_l, h_g	热焓, $J \cdot kg^{-1}$	$\beta_C^{Fe}, \beta_C^{Pb}$	溶质膨胀系数, wt. % $^{-1}$
$h_s^{ref}, h_l^{ref}, h_g^{ref}$	参考热焓, $J \cdot kg^{-1}$	u_l, u_g	速度矢量, $m \cdot s^{-1}$
$\Delta h_{Fe}, \Delta h_{Pb}$	熔化热, $J \cdot kg^{-1}$	v_{R_l}, v_{R_g}	通道生长速率, $m \cdot s^{-1}$
K	渗透率, m^2	κ_{Fe}, κ_{Pb}	平衡分配系数
k_{Fe}, k_{Pb}	热导率, $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$	μ_{Fe}, μ_{Pb}	黏度, $kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$
M_{ls}, M_{gl}	质量相变速率, $kg \cdot s^{-1} \cdot m^{-3}$	ρ_{Fe}, ρ_{Pb}	密度, $kg \cdot m^{-3}$
m_{Fe}, m_{Pb}	液相线斜率, $K \cdot (wt. \%)^{-1}$	τ_s, τ_l, τ_g	应力-应变张量, $kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-2}$
Q_{ls}^D, Q_{gl}^D	热量交换速率, $J \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$	$\nabla C_l, \nabla C_g$	液、气相的浓度梯度
Q_s^M, Q_l^M, Q_g^M	相变热量源项, $J \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$	∇C_{Pb}	Pb 的浓度梯度
R_c	偏析通道的半径, m	∇S_{Pb}	Pb 的分布面积梯度
R_l, R_g	液、气相通道的半径, m	$\nabla(\nabla S_{Pb}), \nabla(\nabla C_{Pb})$	Pb 的分布面积、浓度二次梯度

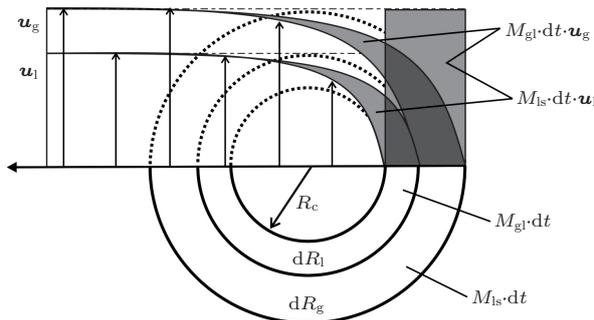


图 1 凝固传质过程中偏析通道内的速度和动量交换速率剖面示意图

首先, 守恒为三相形式, 固、液、气三相的温度在局部区域有所差异, 可用三相间的无限体积传热来消除. 其次, 相变引起的动量交换速率 (U_{ls}^M 和 U_{gl}^M) 与文献 [24–26] 定义的有所不同. 此模型

中, 相变会引起界面膨胀或收缩, U_{ls}^M 和 U_{gl}^M 分别表示液相和气相在界面间动量通量的交换速率, 使用质量相变速率 (M_{ls} 和 M_{gl}) 和界面速度 (u_{l-s} 和 u_{g-l}) 来计算 U_{ls}^M 和 U_{gl}^M [20]; 在凝固时, 液-固界面的速度 u_{l-s} 可表示为 u_l , 气-液界面的速度 u_{g-l} 可表示为 u_g . 图 1 为凝固传质过程中偏析通道内的速度和动量交换速率剖面图, 由图可知, 液、气两相在半径为 R_c 的偏析通道内部流动速度较大, 越接近相变界面速度越小. 图中 dt 为时间间隔, $M_{ls} \cdot dt$ 和 $M_{gl} \cdot dt$ 分别为液-固和气-液相变时的平均体积传质. 三相中, 由于动量传递, 相邻相间的动量损失为 $M_{ls} \cdot dt \cdot u_l$ 和 $M_{gl} \cdot dt \cdot u_g$. 因此, 在凝固过程中, 液-固和气-液的动量传递速率分别为 $U_{ls}^M = M_{ls} \cdot dt \cdot u_l$ 和 $U_{gl}^M = M_{gl} \cdot dt \cdot u_g$.

表2 守恒方程与传递速率方程

守恒方程与传递速率方程	
守恒方程	
质量守恒:	
固液质量守恒:	$\frac{\partial}{\partial t}(f_s \rho_s) = M_{ls} \quad (1)$
	$\frac{\partial}{\partial t}(f_l \rho_l) + \nabla \cdot (f_l \rho_l \mathbf{u}_l) = M_{sl} \quad (2)$
液气质量守恒:	$\frac{\partial}{\partial t}(f_l \rho_l) + \nabla \cdot (f_l \rho_l \mathbf{u}_l) = M_{gl} \quad (3)$
	$\frac{\partial}{\partial t}(f_g \rho_g) + \nabla \cdot (f_g \rho_g \mathbf{u}_g) = M_{lg} \quad (4)$
动量守恒:	
固液动量守恒:	$\frac{\partial}{\partial t}(f_l \rho_l \mathbf{u}_l) + \nabla \cdot (f_l \rho_l \mathbf{u}_l \otimes \mathbf{u}_l) = -f_l \nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_l + f_l \rho_l \mathbf{g} - \mathbf{U}_{ls}^M - \mathbf{U}_{ls}^D \quad (5)$
液气动量守恒:	$\frac{\partial}{\partial t}(f_g \rho_g \mathbf{u}_g) + \nabla \cdot (f_g \rho_g \mathbf{u}_g \otimes \mathbf{u}_g) = -f_g \nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_g + f_g \rho_g \mathbf{g} - \mathbf{U}_{gl}^M - \mathbf{U}_{gl}^D \quad (6)$
式中: $\boldsymbol{\tau}_l = \mu_l (\nabla \cdot (f_l \boldsymbol{\mu}_l) + (\nabla \cdot (f_l \boldsymbol{\mu}_l))^T)$, $\boldsymbol{\tau}_g = \mu_g (\nabla \cdot (f_g \boldsymbol{\mu}_g) + (\nabla \cdot (f_g \boldsymbol{\mu}_g))^T)$	
溶质守恒:	
固液溶质守恒:	$\frac{\partial}{\partial t}(f_s \rho_s c_s) = C_{ls}^M \quad (7)$
	$\frac{\partial}{\partial t}(f_l \rho_l c_l) + \nabla \cdot (f_l \rho_l \mathbf{u}_l c_l) = C_{sl}^M \quad (8)$
液气溶质守恒:	$\frac{\partial}{\partial t}(f_l \rho_l c_l) + \nabla \cdot (f_l \rho_l \mathbf{u}_l c_l) = C_{gl}^M \quad (9)$
	$\frac{\partial}{\partial t}(f_g \rho_g c_g) + \nabla \cdot (f_g \rho_g \mathbf{u}_g c_g) = C_{lg}^M \quad (10)$
热焓守恒:	
固相热焓守恒:	$\frac{\partial}{\partial t}(f_s \rho_s h_s) = \nabla \cdot (f_s k_s \nabla T_s) + Q_s^M + Q_{ls}^D \quad (11)$
液相热焓守恒:	$\frac{\partial}{\partial t}(f_l \rho_l h_l) + \nabla \cdot (f_l \rho_l \mathbf{u}_l h_l) = \nabla \cdot (f_l k_l \nabla T_l) + Q_l^M - Q_{ls}^D \quad (12)$
气相热焓守恒:	$\frac{\partial}{\partial t}(f_g \rho_g h_g) + \nabla \cdot (f_g \rho_g \mathbf{u}_g h_g) = \nabla \cdot (f_g k_g \nabla T_g) + Q_g^M - Q_{gl}^D \quad (13)$
式中: $h_s = \int_{T_{ref}}^{T_s} c_p^s dT + h_s^{ref}$, $h_l = \int_{T_{ref}}^{T_l} c_p^l dT + h_l^{ref}$, $h_g = \int_{T_{ref}}^{T_g} c_p^g dT + h_g^{ref}$	
传递速率方程	
通道生长速率:	
液相通道生长速率:	$v_{R_l} = \frac{dR_l}{dt} = \frac{D_l}{R_l} \cdot \frac{(c_1^* - c_1)}{(c_1^* - c_s^*)} \cdot \ln^{-1} \left(\frac{R_f}{R_l} \right) \quad (14)$
气相通道生长速率:	$v_{R_g} = \frac{dR_g}{dt} = \frac{D_g}{R_g} \cdot \frac{(c_g^* - c_g)}{(c_g^* - c_1^*)} \cdot \ln^{-1} \left(\frac{R_f}{R_g} \right) \quad (15)$
质量相变速率:	
固液质量相变速率:	$M_{ls} = v_{R_l} \cdot S_A \cdot \rho_s \quad (16)$
液气质量相变速率:	$M_{gl} = v_{R_g} \cdot S_B \cdot \rho_l \quad (17)$

此外, 三相间的相变传质与之前的模型^[20,21,23,25]也有所不同. 偏析通道内的界面传质体系如图2所示. 固、液、气三相间的守恒方程与传递方程用符号 Z_1 到 Z_{11} 表示. 由于固相与气相间没有传质, 在瞬时情况下($\mathbf{u}_l = \mathbf{u}_g = 0$)局部区域有 $f_s + f_l = 1$ 和 $f_l + f_g = 1$, 由表2中的溶质守恒方程可得

$$d(f_s \rho_s c_s + f_l \rho_l c_l)/dt = 0, \quad (18)$$

$$d(f_l \rho_l c_l + f_g \rho_g c_g)/dt = 0. \quad (19)$$

其中由方程(18)可得

$$Z_1 + \rho_s c_s^* \frac{df_s}{dt} - Z_2 + Z_6 - \rho_l c_l^* \frac{df_s}{dt} + Z_4 = 0. \quad (20)$$

由于 $Z_1 = Z_2$ 且 $Z_5 = Z_4 + Z_6$, 所以,

$$Z_5 = \rho_l (c_l^* - c_s^*) \frac{df_s}{dt}. \quad (21)$$

将图2中的 Z_5 和 $\frac{df_s}{dt}$ 代入方程(21)中可得

$$\begin{aligned} & \rho_l S_A D_l \cdot \frac{(c_l^* - c_l)}{R_l} \cdot \ln^{-1} \left(\frac{R_f}{R_l} \right) \\ & = \rho_l (c_l^* - c_s^*) \cdot \nu_{R_l} \cdot S_A. \end{aligned} \quad (22)$$

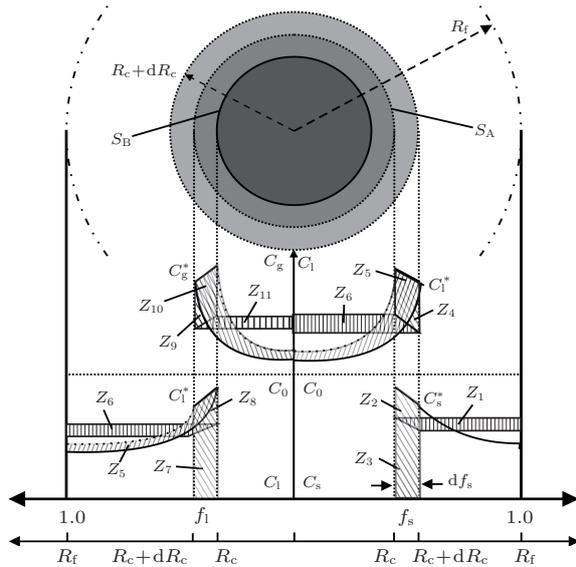


图2 偏析通道内的界面传质体系示意图

$$\nu_{R_1} \cdot S_A = \frac{df_s}{dt}, \nu_{R_g} \cdot S_B = \frac{df_1}{dt}, Z_1 = \rho_s f_s \frac{dc_s}{dt}, Z_2 = \rho_s (c_s^* - c_s) \frac{df_s}{dt}, Z_3 = \rho_s c_s^* \frac{df_s}{dt}, Z_4 = \rho_l (c_1^* - c_1) \frac{df_s}{dt}, Z_5 = \rho_l S_A D_1 \cdot \frac{c_1^* - c_1}{R_1} \cdot \ln^{-1} \left(\frac{R_f}{R_1} \right), Z_6 = \rho_l f_1 \frac{dc_1}{dt}, Z_7 = \rho_l c_1^* \frac{df_1}{dt}, Z_8 = \rho_l (c_1^* - c_1) \frac{df_1}{dt}, Z_9 = \rho_g (c_g^* - c_g) \frac{df_1}{dt}, Z_{10} = \rho_g S_B D_g \cdot \frac{c_g^* - c_g}{R_g} \cdot \ln^{-1} \left(\frac{R_f}{R_g} \right), Z_{11} = \rho_g f_g \frac{dc_g}{dt}$$

同理由方程 (19) 可得

$$\rho_g S_B D_g \cdot \frac{(c_g^* - c_g)}{R_g} \cdot \ln^{-1} \left(\frac{R_f}{R_g} \right) = \rho_g (c_g^* - c_1^*) \cdot \nu_{R_g} \cdot S_B. \quad (23)$$

该假设由表2中的通道生长速率方程和质量相变速率方程推导而得. 显然, 偏析通道生长受溶质扩散影响, 这种扩散只发生在液相与气相区域. 相变过程来自界面的迁移: $C_{ls}^M = M_{ls} \cdot c_s^*$ 和 $C_{gl}^M = M_{gl} \cdot c_1^*$, 但在凝固区域, 没有跨越固-液界

面的浓度通量, 所以无需考虑凝固界面的扩散迁移 [27-29].

3 计算方法

本文以 3000 kg 钢锭的三维基准模型为基础, 建立 Fe-Pb 合金侧向凝固过程中固、液、气三相的流体动力学模型, 模拟中采用的主要参数见表 3, 初始 Pb 相在基体中分布均匀为理想状态, 模型及边界条件如图 3 所示. 利用 ANSYS FLUENT 14.5, 使用 SIMPLE 算法和自定义函数 UDF (user defined function) 对质量、动量、溶质和热焓进行耦合, 时间步长为 0.01 s, 为了使残差更好的收敛, 每步最大迭代次数为 80. 鉴于 Fe-Pb 合金中 Pb 的收得率较低 [30], 为了有效的模拟此类易切削钢, 选取该合金的初始状态为 Fe-10%Pb.

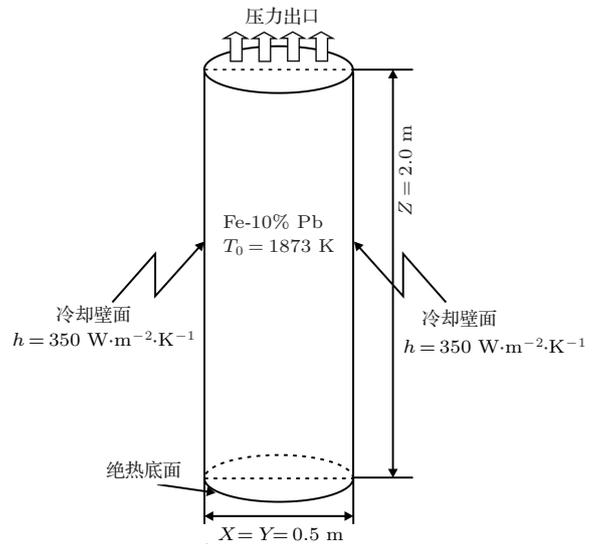


图3 三维模型及其边界条件与初始条件示意图

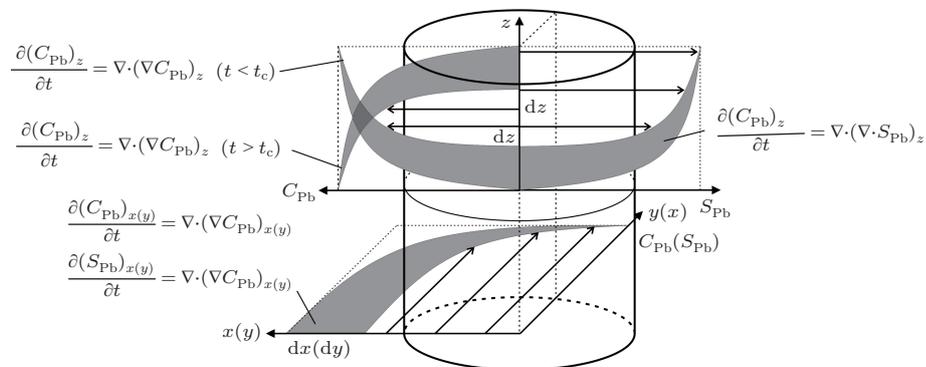


图4 三维模型的 $\nabla \cdot (\nabla C_{Pb})$ 和 $\nabla \cdot (\nabla S_{Pb})$ 示意图

表3 模拟中采用的主要参数

物理量	单位	金属 Fe		金属 Pb	
		符号	数值	符号	数值
相对原子质量	—	—	55.8	—	207.2
熔点	K	T_{Fe}	1808	T_{Pb}	600
密度	$kg \cdot m^{-3}$	ρ_{Fe}	7850	ρ_{Pb}	10400
比热容	$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$	C_P^{Fe}	460	C_P^{Pb}	130
黏度	$kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$	μ_{Fe}	0.0059	μ_{Pb}	0.0015
热导率	$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$	k_{Fe}	80.4	k_{Pb}	35.3
熔化热	$J \cdot kg^{-1}$	Δh_{Fe}	246400	Δh_{Pb}	24700
热膨胀系数	K^{-1}	β_T^{Fe}	1.43×10^{-4}	β_T^{Pb}	3.58×10^{-4}
溶质膨胀系数	$wt. \%^{-1}$	β_C^{Fe}	1.1×10^{-2}	β_C^{Pb}	2.8×10^{-2}
液相线斜率	$K \cdot (wt. \%)^{-1}$	m_{Fe}	-55.0	m_{Pb}	-3.2
液相扩散系数	$m^2 \cdot s^{-1}$	D_{Fe}	2.0×10^{-9}	D_{Pb}	1.5×10^{-9}
平衡分配系数	—	κ_{Fe}	0.36	κ_{Pb}	0.27
初始温度	K	T_0	1873	T_0	1873
外界温度	K	T_E	298	T_E	298

4 模拟结果与讨论

4.1 偏析模式

Pb的熔点很低、饱和蒸气压较大，在凝固过程中会发生液相→气相→液相→固相的相变过程，Pb在基体内既存在液相下沉又有气相上浮，其偏析情况比较复杂。Fe-Pb合金凝固过程中，单位时间内Pb在基体中的偏析情况可以用浓度梯度 ∇C_{Pb} 和分布面积梯度 ∇S_{Pb} 来表示。设Pb在钢锭中的浓度函数为 $c(a, t)$ ，分布函数为 $f(a, t)$ ，其中 a 表示为 x, y 或 z 方向，因此在凝固 ξ 时间后有

$$c(a, t + \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(a - a', \xi) c(a', t) da', \quad (24)$$

积分得

$$\begin{aligned} c(a, t + \xi) &= c(a, t) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial a^2} \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} (a - a')^2 f[(a - a'), \xi] d(a - a'), \quad (25) \end{aligned}$$

化简得

$$\frac{\partial c}{\partial a} = \frac{1}{2\xi} \frac{\partial^2 c}{\partial a^2} \int_{-\infty}^{\infty} (a - a')^2 f[(a - a'), \xi] d(a - a'). \quad (26)$$

令 $a - a' = \eta$ 在三维方向上有

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} &= \frac{1}{6\xi} \eta^2 \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) \\ &= \frac{1}{6\xi} \eta^2 \nabla(\nabla C_{Pb}). \quad (27) \end{aligned}$$

同理可得

$$\begin{aligned} \frac{\partial s}{\partial t} &= \frac{1}{6\xi} \eta^2 \left(\frac{\partial^2 s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 s}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 s}{\partial z^2} \right) \\ &= \frac{1}{6\xi} \eta^2 \nabla(\nabla S_{Pb}). \quad (28) \end{aligned}$$

方程(27)和(28)揭示了偏析相随时间、位置变化的规律^[31]。

图4给出了Fe-Pb合金凝固过程中Pb在基体中的浓度与分布面积随时间和位置的变化规律， t_c 为Pb下沉于钢锭底部时的临界时间。在竖直方向上， $t > t_c$ 时，离钢锭底部越近，Pb的浓度越大， $\nabla(\nabla C_{Pb})_z$ (Z 轴方向上的Pb浓度二次梯度)越小， $t < t_c$ 时，结果正好相反；离底部越近，Pb的分布面积越小， $\nabla(\nabla S_{Pb})_z$ (Z 轴方向上的Pb分布面积二次梯度)越大。在水平方向上，中心部位Pb的 $\nabla(\nabla C_{Pb})_{x(y)}$ (X 和 Y 轴方向上的Pb浓度二次梯度)和 $\nabla(\nabla S_{Pb})_{x(y)}$ (X 和 Y 轴方向上的Pb分布面积二次梯度)最大，并向壁面方向逐渐减小。单独的 $\nabla(\nabla C_{Pb})$ (合金体系内的Pb浓度二次梯度)或 $\nabla(\nabla S_{Pb})$ (合金体系内的Pb分布面积二次梯度)都

不能准确表示Pb的偏析情况, 需要结合这两方面来研究Pb在基体中的偏析模式.

Fe-10%Pb合金在不同凝固速率下凝固后Pb的三维分布情况如图5所示, 其中白色虚线为辅助线, Pb在基体下端呈V偏析, 上端呈两端多中间少的偏析分布. 此偏析形式不同于A偏析和V偏析,

是两个相反力场共同作用的结果, 定义其为X偏析, X偏析上端为上偏析角, 下端为下偏析角. 随凝固速率的增加, X偏析区域的位置升高, 下偏析角减小, 上偏析角和V偏析角增大, 比重偏析程度较轻, 在竖直方向Pb相弥散分布, 但在水平方向分布不均匀.

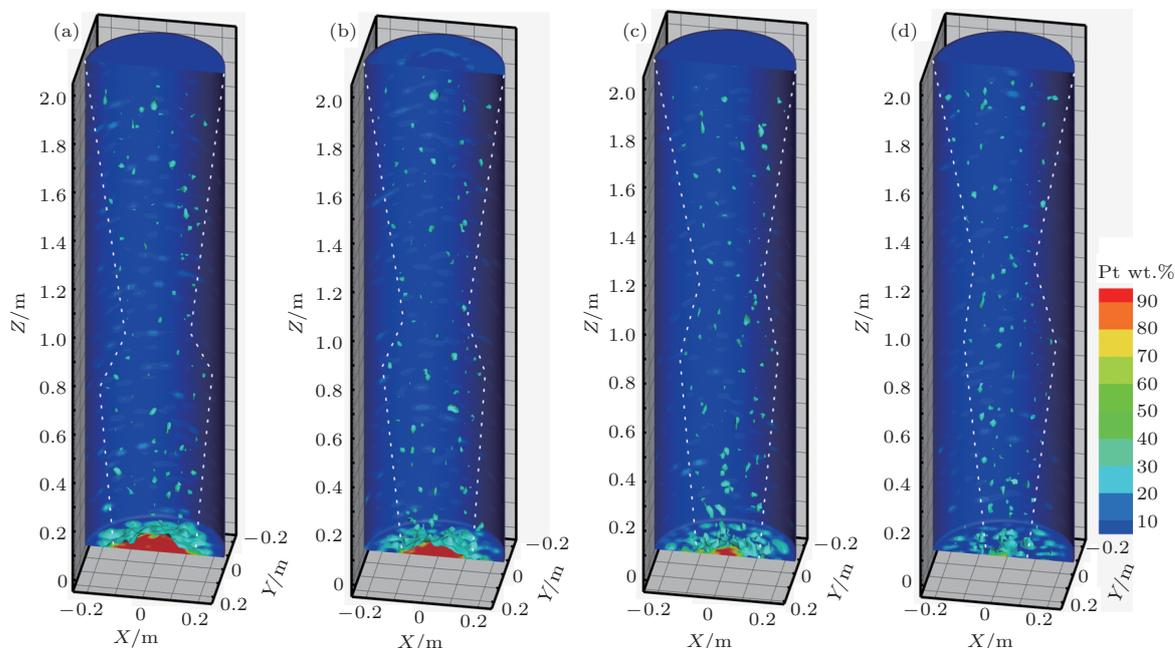


图5 (网刊彩色) Fe-10%Pb合金在不同凝固速率下凝固后Pb的三维分布图 (a) 0.08 mm/s; (b) 0.10 mm/s; (c) 0.14 mm/s; (d) 0.20 mm/s

X偏析的形成过程比较复杂, 凝固初期, 气相相变驱动力($c_g^* - c_g$)较小, 对Pb分布情况影响较小, 在重力与侧向凝固作用下, 逐渐形成X形的上半部分; 当气相相变驱动力增大到临界值时, Pb由液相大量转变为气相, 在气相相变驱动力和多取向相变的作用下, 向上“散射”的气相Pb继续形成X形上半部分, 液相Pb在重力与气相Pb“散射”的拖拽力作用下下沉, 逐渐形成X形下半部分; 凝固后期, 基体内流动通道逐渐减小, 此时相变对偏析模式没有影响. 在“X”最狭窄区域, 相变驱动力和相变“散射”程度最大, Pb含量最小, 此区域为贫Pb带.

图5中单位时间内30%Pb的截面分布面积曲线如图6所示, 从图中可以看出Pb的分布面积随位置的变化存在一个 ∇S_{Pb} (Pb的分布面积梯度). 图6(a)为横截面(垂直于Z轴方向)Pb的分布面积曲线, 在合金最底部, 比重偏析造成分布面积较大, 随后快速减小; 合金下端在重力和侧向凝固作用下, 随着高度增加分布面积逐渐增大, 呈V偏析模

式; 合金上端分布面积随高度增加而减小, 最小处为贫Pb带, 越过贫Pb带后, 在1.8 m附近达到峰值, 表现为X偏析模式; 在合金最顶端, Pb上浮挥发, 此处分布面积较小. 纵切面Pb的分布面积曲线如图6(b)(垂直于X轴方向)和图6(c)(垂直于Y轴方向)所示, 合金中间区域分布面积最大, 向壁面方向逐渐减少, 曲线斜率最大处是V偏析和X偏析的形成边界. 从图6中可以得出, 凝固速率为0.14 mm/s的Pb分布面积曲线最为平缓, Pb在基体中分布较均匀.

由图6中的曲线拟合出Pb的分布面积函数, 并求解其方向变量的二阶偏微分, 得到合金整个凝固过程中不同凝固速率下Pb的分布面积二次梯度函数, 其曲线如图7所示. 图7(a)为横截面上 $\nabla(\nabla S_{Pb})_z$ 曲线, 合金凝固速率越快, V偏析区域曲线高度越高(图7(a)左侧插图), X偏析区域曲线高度越低(图7(a)右侧插图); 纵切面上 $\nabla(\nabla S_{Pb})_x$ 曲线(图7(b)) and $\nabla(\nabla S_{Pb})_y$ 曲线(图7(c))的高度随凝固速率的增加而降低. 由方程(28)可知三维空

间内的 $\nabla(\nabla S_{Pb})$ 函数为 X, Y 和 Z 方向上的分布面积二次梯度函数之和, 其随位置坐标变化的曲线如图 7(d) 所示, 凝固速率越快 $\nabla(\nabla S_{Pb})$ 曲线的高

度越低, 垂直方向上 Pb 的面积分布越均匀, 水平方向上越不均匀, 验证了 Pb 的偏析模式可由方程 (28) 中 $\nabla(\nabla S_{Pb})$ 来表示.

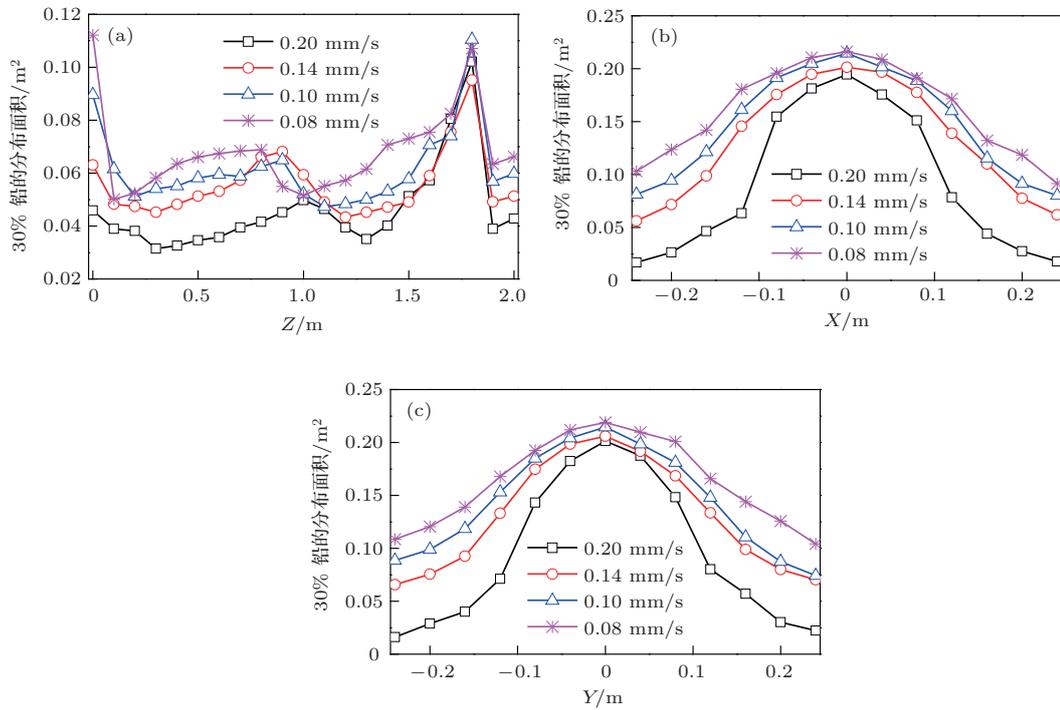


图6 合金在不同凝固速率下凝固后含量为30%铅的分布面积随位置变化曲线 (a) 横截面(垂直于 Z 轴方向); (b) 纵切面(垂直于 X 轴方向); (c) 纵切面(垂直于 Y 轴方向)

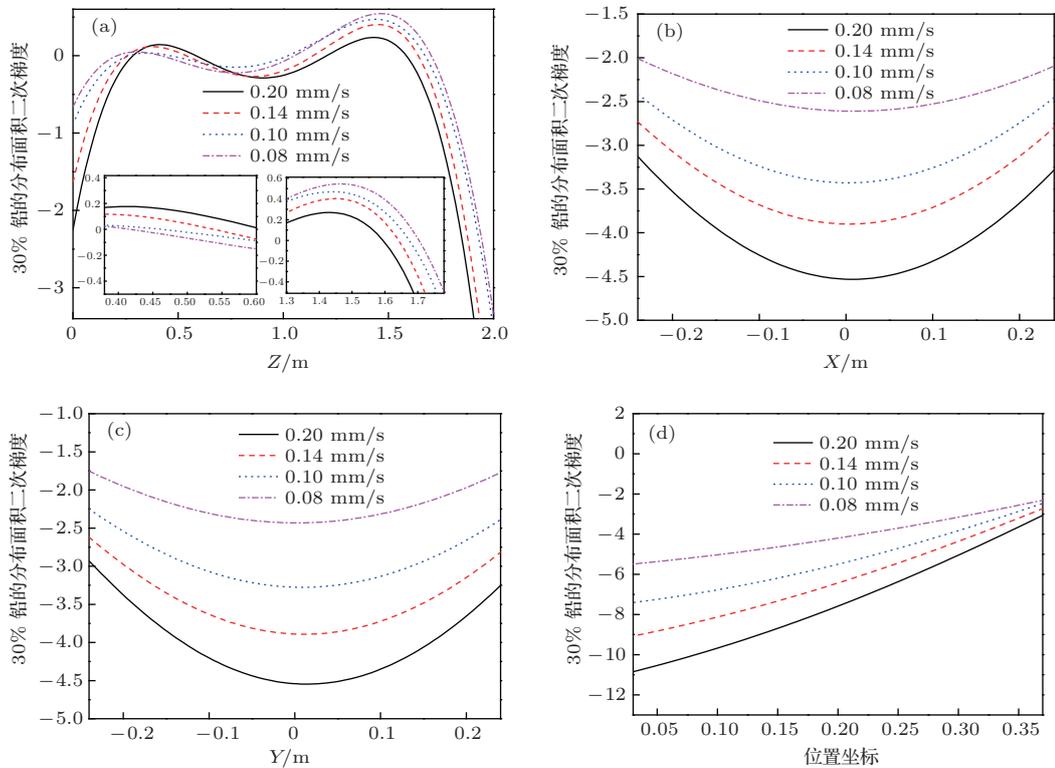


图7 (网刊彩色) 合金在不同凝固速率下凝固后含量为30%铅的分布面积二次梯度随位置变化曲线 (a) $\nabla(\nabla S_{Pb})_z$ (垂直于 Z 轴方向); (b) $\nabla(\nabla S_{Pb})_x$ (垂直于 X 轴方向); (c) $\nabla(\nabla S_{Pb})_y$ (垂直于 Y 轴方向); (d) $\nabla(\nabla S_{Pb})$

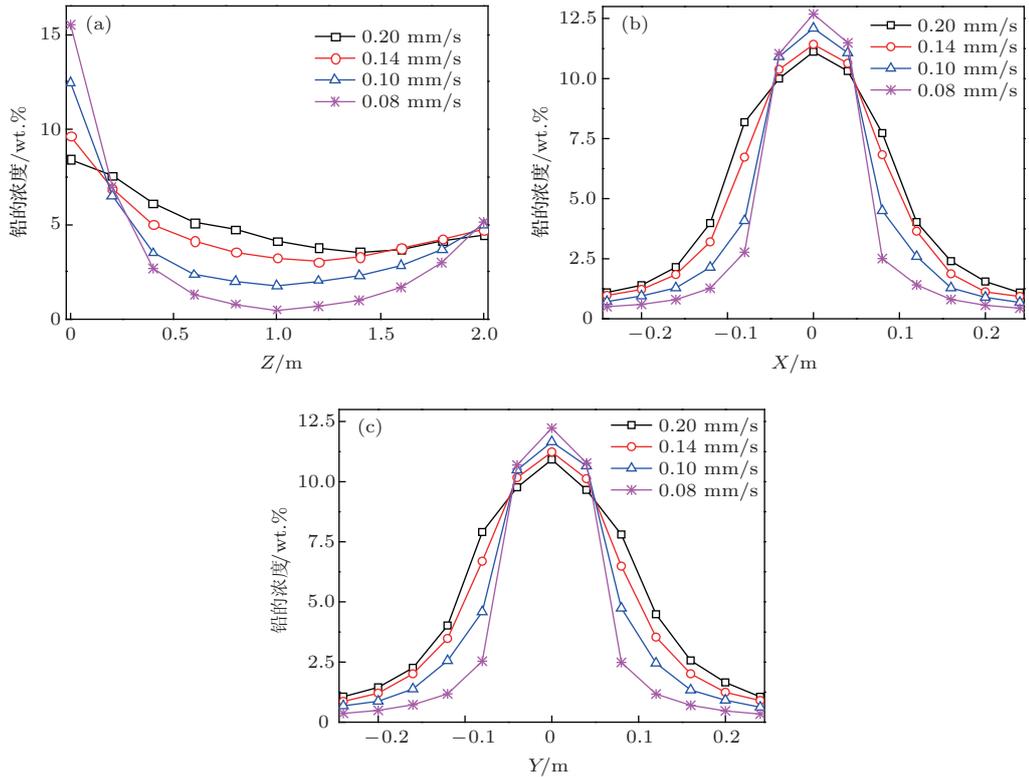


图8 合金在不同凝固速率下凝固后铅的浓度随位置变化曲线 (a)横截面(垂直于Z轴方向); (b)纵切面(垂直于X轴方向); (c)纵切面(垂直于Y轴方向)

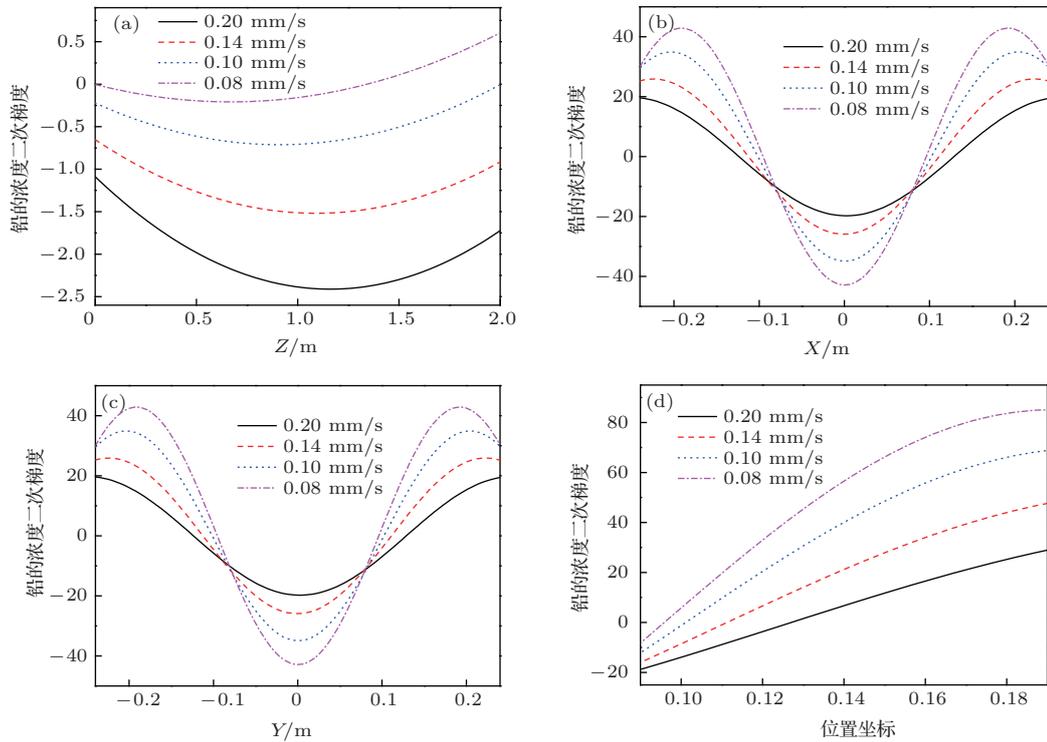


图9 (网刊彩色) 合金在不同凝固速率下凝固后铅的浓度二次梯度随位置变化曲线 (a) $\nabla(\nabla C_{Pb})_z$ (垂直于Z轴方向); (b) $\nabla(\nabla C_{Pb})_x$ (垂直于X轴方向); (c) $\nabla(\nabla C_{Pb})_y$ (垂直于Y轴方向); (d) $\nabla(\nabla C_{Pb})$

图8给出了单位时间内图5中Pb的浓度分布曲线, 从图中可以看出Pb的浓度随位置的变化存在一个 ∇C_{Pb} (Pb的浓度梯度). 图8(a)为横截面

(垂直于Z轴方向)Pb的浓度曲线, 合金在底部存在富Pb相, 随着高度的增加Pb的浓度先减小后增加; 在中心区域, 液相Pb重力下沉, 气相Pb克服

重力上浮, Pb 的浓度最小. 图 8(b) 和 (c) 为纵切面 (垂直于 X, Y 轴方向) Pb 的浓度分布情况, 中心区域 Pb 浓度最大, ±0.12 m 附近 Pb 的浓度梯度最大, 此处为 X 偏析和 V 偏析稳定形成区域. 由图 8 可得, 凝固速率越快, Pb 的浓度曲线越平缓, Pb 在基体中含量越均匀.

图 9 示出合金整个凝固过程中不同凝固速率下 Pb 的浓度二次梯度曲线, 图 9(a) 为 $\nabla(\nabla C_{Pb})_z$ 曲线, 凝固速率越快, 曲线高度越低. 从图 9(b) 和 (c) 可以看出, 凝固速率较大时, 纵切面方向上壁面区域的 $\nabla(\nabla C_{Pb})_x$ 和 $\nabla(\nabla C_{Pb})_y$ 曲线高度较低, 中心区域高度较高. 由方程 (27) 可知三维空间内的 $\nabla(\nabla C_{Pb})$ 函数为 X, Y 和 Z 方向上的浓度二次梯度函数之和, 其随位置坐标变化的曲线如图 9(d)

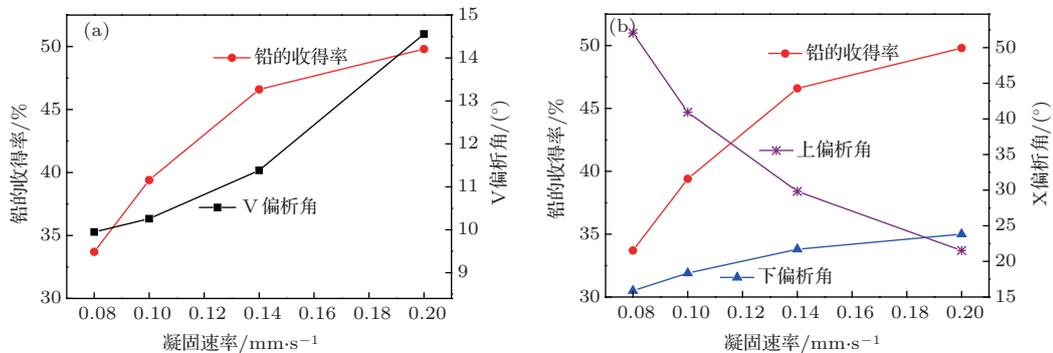


图 10 合金在不同凝固速率下的偏析角与铅的收得率变化曲线 (a) V 偏析角; (b) X 偏析角

通过对此偏析模式的分析得出: 气相的存在对 $\nabla(\nabla C_{Pb})$ 曲线和 $\nabla(\nabla S_{Pb})$ 曲线有很大的影响, 而 $\nabla(\nabla C_{Pb})$ 和 $\nabla(\nabla S_{Pb})$ 曲线又是偏析模式形成的重要因素. $\nabla(\nabla C_{Pb})$ 和 $\nabla(\nabla S_{Pb})$ 曲线越低, X 偏析的下偏析角越大, 上偏析角和 V 偏析角越小, Pb 收得率越高, 易得到含量稳定的凝固组织. $\nabla(\nabla C_{Pb})$ 曲线较低, 在一定范围内 Pb 在基体中含量较均匀; $\nabla(\nabla S_{Pb})$ 曲线较低, 竖直方向 Pb 的面积分布较均匀, 水平方向不均匀. 综合分析以上数据, 此合金模型在 0.14 mm/s 的凝固速率下, Pb 的偏析程度相对较小, 在基体中含量稳定, 分布较为弥散.

4.2 通道偏析

合金凝固过程中, 当偏析通道初步形成时, 在扩散支配相变的情况下, 流动速率与局部相变速率有关, 由于固相与气相间没有质量交换, 局部区域的浓度守恒方程可写为

所示, 凝固速率越快 $\nabla(\nabla C_{Pb})$ 曲线的高度越低, 在一定范围内 Pb 在基体中含量越均匀, 验证了 Pb 的偏析模式也可由方程 (27) 中 $\nabla(\nabla C_{Pb})$ 来表示.

图 10 给出不同凝固速率下 Pb 收得率和偏析角 (图 10(a) 为 V 偏析, 图 10(b) 为 X 偏析) 的变化曲线, 由图可得凝固速率越快, Pb 收得率为单调递增的凸函数, V 偏析角为单调递增的凹函数 (图 10(a)), X 偏析的上偏析角为单调递减的凹函数, 下偏析角为单调递增的凸函数 (图 10(b)). 这主要是由于合金凝固速率越低, 气相逸出量增加, 导致 Pb 收得率快速减小, Pb 在重力、浮力、气相相变驱动力和相变取向共同作用下, V 偏析角缓慢减小, X 偏析的上偏析角快速增大, 下偏析角快速减小.

$$c_s^* \rho_s \frac{\partial f_s}{\partial t} + \rho_l c_l \frac{\partial f_l}{\partial t} + \rho_l f_l \frac{\partial c_l}{\partial t} + \nabla \cdot (f_l \rho_l c_l \mathbf{u}_l) = 0 \quad (29)$$

和

$$c_1^* \rho_l \frac{\partial f_l}{\partial t} + \rho_g c_g \frac{\partial f_g}{\partial t} + \rho_g f_g \frac{\partial c_g}{\partial t} + \nabla \cdot (f_g \rho_g c_g \mathbf{u}_g) = 0. \quad (30)$$

将质量守恒方程代入方程 (29), 得到液相浓度的时间导数

$$\frac{\partial c_l}{\partial t} = -\frac{(c_l - c_s^*)}{f_l} \cdot \frac{\partial f_l}{\partial t} - \mathbf{u}_l \cdot \nabla c_l. \quad (31)$$

对 $T = T_f + m c_1^*$ 两边求时间的导数, 得到界面浓度随时间的变化:

$$\frac{\partial c_1^*}{\partial t} = \frac{1}{m} \frac{\partial T}{\partial t}. \quad (32)$$

方程 (31) 和 (32) 相减, 结果为局部 $(c_1^* - c_l)$ 的变化率:

$$\frac{\partial (c_1^* - c_l)}{\partial t} = \frac{(c_l - c_s^*)}{f_l} \cdot \frac{\partial f_l}{\partial t} + \frac{1}{m} \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u}_l \cdot \nabla c_l. \quad (33)$$

同理, 局部 $(c_g^* - c_g)$ 的变化率:

$$\frac{\partial(c_g^* - c_g)}{\partial t} = \frac{(c_g - c_l^*)}{f_g} \cdot \frac{\partial f_g}{\partial t} + \frac{1}{m} \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u}_g \cdot \nabla c_g. \quad (34)$$

质量相变速率 (M_{lg} 和 M_{lg}) 由方程 (33) 和 (34) 左侧的相变驱动力 $((c_l^* - c_l)$ 和 $(c_g^* - c_g))$ 控制 [20,23,32], 局部相变速率由方程 (33) 和 (34) 右边三项决定. 第

一项表示相变引起的溶质富集, 其符号恒为负, 相变速率降低使溶质在基体中逐渐富集. 第二项表示冷却速率, 其符号恒为正, 即冷却使相变速率不断增加. 在不考虑相变过程中通道偏析的形成因素下, 前两个条件相对稳定. 第三项表示液、气两相的流动-相变交互作用 $(\mathbf{u}_l \cdot \nabla c_l)$ 和 $(\mathbf{u}_g \cdot \nabla c_g)$, 它是通道偏析形成的最关键因素, 由于流动方向和浓度梯度的不确定性, 该项的符号可正可负.

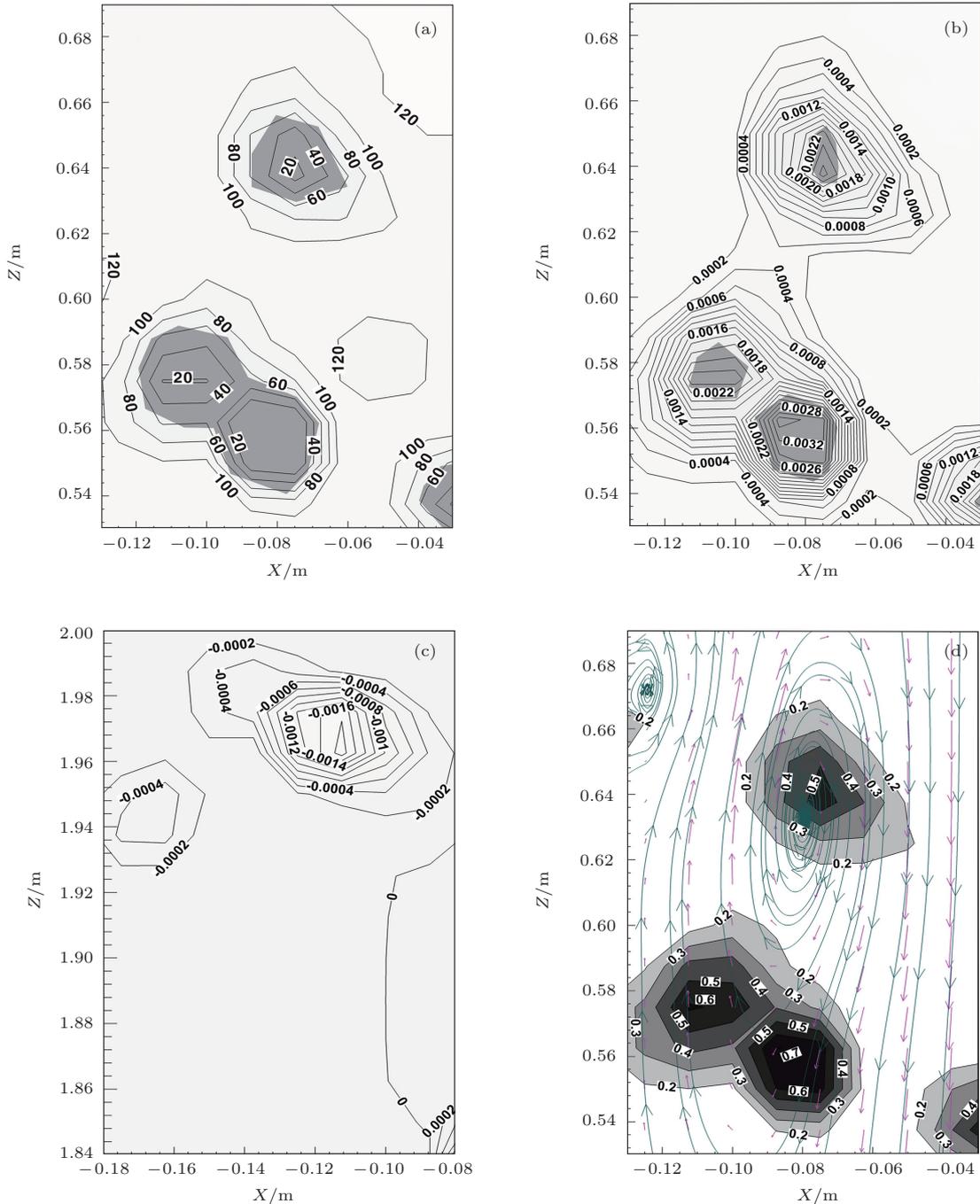


图 11 凝固速率为 0.14 mm/s 的合金在 1150 s 时通道偏析矢量云图 (a) $\mathbf{u}_l \cdot \nabla c_l$ 和 M_{lg} 云图 (灰色区域的 $\mathbf{u}_l \cdot \nabla c_l$ 为负值); (b) $\mathbf{u}_g \cdot \nabla c_g$ 和 M_{lg} 云图 (灰色区域的 $\mathbf{u}_g \cdot \nabla c_g$ 为负值); (c) 顶部的 $\mathbf{u}_g \cdot \nabla c_g$ 和 M_{lg} 云图 (灰色区域的 $\mathbf{u}_g \cdot \nabla c_g$ 为负值); (d) 液相分数 (f_l) 和流动方向的流线图

合金内气、液两相流动方向与其浓度梯度方向相同的区域, $\mathbf{u}_l \cdot \nabla c_l$ 和 $\mathbf{u}_g \cdot \nabla c_g$ 为正值, 此处流动扰动作用被抑制, 促进了合金凝固, 导致渗透率比相邻区域要低, 没有偏析通道形成. 在气、液两相流动方向与其浓度梯度方向相反的区域, $\mathbf{u}_l \cdot \nabla c_l$ 和 $\mathbf{u}_g \cdot \nabla c_g$ 为负值, 此时流速较快区域在液相与气相交互作用下产生非定向流动, 这种流动扰动作用促进合金局部流动而抑制凝固, 这些固相分数相对较低区域的渗透率较大, 易形成偏析通道; 同时, 较强的局部流动又加剧了流动扰动作用使流动扰动幅度不断增大, 促进偏析通道形成.

凝固速率为 0.14 mm/s 的合金凝固 1150 s 时, X 轴方向 -0.125—-0.045 m 和 Z 轴方向 0.534—0.686 m 区域的截面如图 11 所示. 图 11 (a) 为 $\mathbf{u}_l \cdot \nabla c_l$ 与 M_{ls} 云图 (灰色区域的 $\mathbf{u}_l \cdot \nabla c_l$ 为负值), $\mathbf{u}_l \cdot \nabla c_l$ 为负值区域的凝固速率较低, M_{ls} 的值比周围区域要小, 为 $20 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$ — $40 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$, 而周围区域高达 $100 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$ — $120 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$. 图 11 b 为 $\mathbf{u}_g \cdot \nabla c_g$ 与 M_{lg} 云图 (灰色区域的 $\mathbf{u}_g \cdot \nabla c_g$ 为负值), M_{lg} 的正值越大, Pb 由液相转变为气相的速率越快, 负值越小, Pb 由气相转变为液相的速率越快, 从图中可以看出液-气相变从通道内部开始, 符合自聚集理论 [33], M_{lg} 值在最大区域为 $3.2 \times 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$, 最小区域为 $2 \times 10^{-4} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$. 图 11 c 为合金顶部的 M_{lg} 云图, 此区域的 $\mathbf{u}_g \cdot \nabla c_g$ 值为正, M_{lg} 为负值, 由于顶部温度比内部低, Pb 在顶部发生气相 → 液相的相变过程. 图 11 d 为液相分数和流动方向的流线图, 局部区域的相变与偏析通道生长速率在流动扰动作用下不断变化, 从图中可以看出气、液两相流动会从阻力最小的路径通过, 通道内的流动通过该通道路径行进, 相邻区域几乎为竖直流动, 流动扰动作用强烈影响通道偏析的形成.

图 12 为 Pb 浓度的等值线云图, 由图可得 C_{Pb} 与 M_{ls} , M_{lg} 和 f_l 有类似的分布情况. 观察图 12 的虚线区域 (竖直方向 0.53—0.59 m), 分析该区域的 f_l , C_{Pb} , $\mathbf{u}_l \cdot \nabla c_l$, $\mathbf{u}_g \cdot \nabla c_g$, M_{ls} 和 M_{lg} 的演变过程, 得到图 13 的偏析通道随凝固时间的变化曲线. 由图可知, f_l 和 C_{Pb} 曲线都为拱形突起的形式 (图 13 (a), (b)); 此区域 $\mathbf{u}_l \cdot \nabla c_l$ 和 $\mathbf{u}_g \cdot \nabla c_g$ 曲线比较类似 (图 13 (c), (d)), M_{ls} 和 M_{lg} 曲线趋势相反 (图 13 (e), (f)). 结果表明, 通道偏析的形成受冷却速率、相变富集和流动-相变交互作用共同影响,

这进一步验证了方程 (33) 和 (34) 右边三项的正确性, 其中流动-相变交互作用 ($\mathbf{u}_l \cdot \nabla c_l$ 和 $\mathbf{u}_g \cdot \nabla c_g$) 是决定质量相变速率的最关键因素. 在 $\mathbf{u}_l \cdot \nabla c_l$ 和 $\mathbf{u}_g \cdot \nabla c_g$ 都为正值的区域 (如 150 s 前), 由于 M_{ls} 的值较大、 M_{lg} 的值较小, 此处未产生流动扰动作用, 还不能形成偏析通道. 而在 250 s 时, 虚线区域的 $\mathbf{u}_l \cdot \nabla c_l$ 和 $\mathbf{u}_g \cdot \nabla c_g$ 为负值, 凝固过程开始被抑制使 M_{ls} 逐渐减小、 M_{lg} 逐渐增大, 但此时液、气两相流动扰动作用较弱, f_l 和 C_{Pb} 曲线的拱起也不明显, 拱形突起是通道偏析形成的一个重要指标, 所以此区域并没有偏析通道形成. 600 s 后, $\mathbf{u}_l \cdot \nabla c_l$ 和 $\mathbf{u}_g \cdot \nabla c_g$ 曲线一直保持局部为负, 部分区域振荡的趋势, M_{ls} 曲线表现为向下凹的趋势, M_{lg} 曲线表现为向上凸的趋势, f_l 和 C_{Pb} 曲线的拱形突起明显, 偏析通道逐渐生长. 在 850 s 时, 凝固抑制区域的 M_{ls} 和 M_{lg} 分别只有 $22 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$ 和 $1.23 \times 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$, 比相邻区域的 $128 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$ 和 $4.63 \times 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$ 小很多, 凝固抑制区域和相邻区域之间的 M_{ls} (M_{lg}) 差异越大, 偏析通道生长的越稳定. 因此, $\mathbf{u}_l \cdot \nabla c_l$ 和 $\mathbf{u}_g \cdot \nabla c_g$ 为负值的区域会发生通道偏析现象, $\mathbf{u}_l \cdot \nabla c_l$ 和 $\mathbf{u}_g \cdot \nabla c_g$ 的负值越小, 有助于偏析通道持续稳定生长.

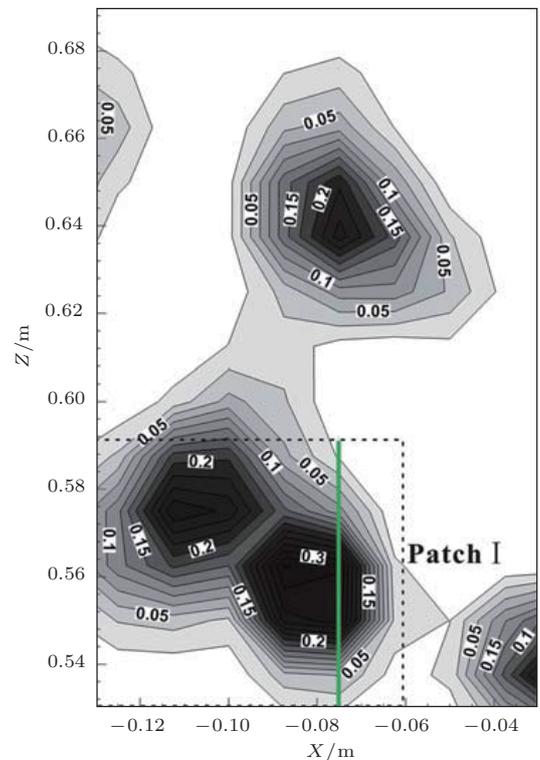


图 12 铅浓度的等值线云图

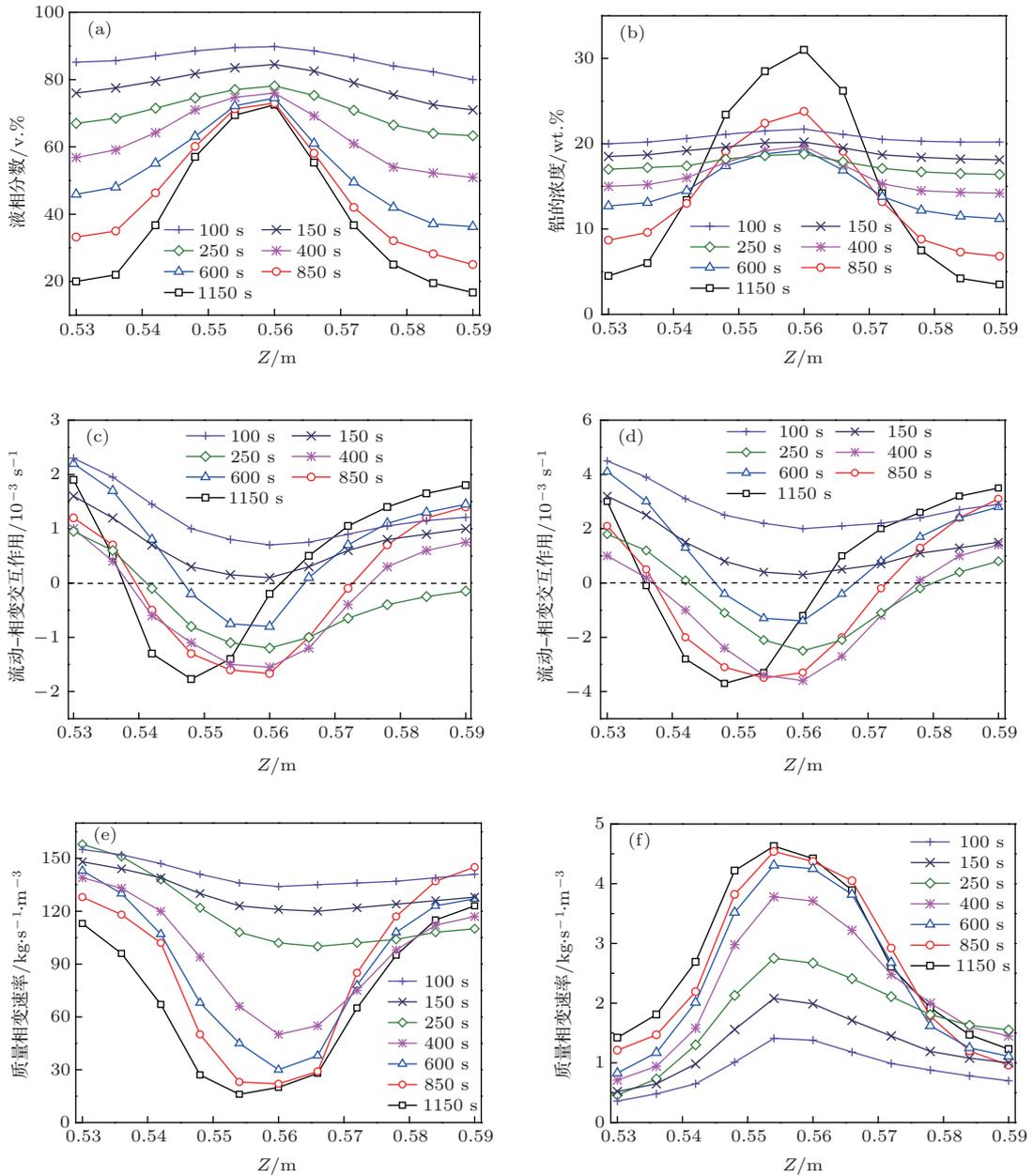


图13 分析图12虚线区域的通道偏析演变过程 (a) f_l ; (b) C_{Pb} ; (c) $u_1 \cdot \nabla c_l$; (d) $u_g \cdot \nabla c_g$; (e) M_{ls} ; (f) M_{lg}

5 实验验证

为了验证模型体系的准确性,笔者在太钢技术中心进行了相应的材料制备和实验研究.实验选取Fe-Pb合金中Pb的初始含量为10 wt.%,钢锭重量为3000 kg,凝固速率分别为0.20 mm/s, 0.14 mm/s, 0.10 mm/s和0.08 mm/s,对比实验结果与模拟结果,得到不同凝固速率下Pb收得率的变化曲线,如图14所示.由于实际冶炼过程中存在局部温度差异,部分区域Pb的蒸发速率较快,导致实验

结果中Pb的收得率低于模拟结果,但总体变化趋势相符.此外,实验还将不同凝固速率冶炼出的钢锭通过锻造开坯、热轧、冷拉、退火、酸洗等工序拉拔成 $\Phi 2.3$ mm的成品线材.选取凝固速率为0.14 mm/s的钢锭5个横截面位置(0.2 m, 0.6 m, 1.0 m, 1.4 m和1.8 m)换算为成品线材的横截面位置,将其与同条件下的模拟结果进行对比,得到不同位置下Pb的浓度曲线,如图15所示.由于模拟合金中Pb的收得率较高,所以其含量曲线与实验结果有所差异,但随着钢锭竖直方向高度的增加,模拟结果与实验结果的Pb含量变化趋势相似.

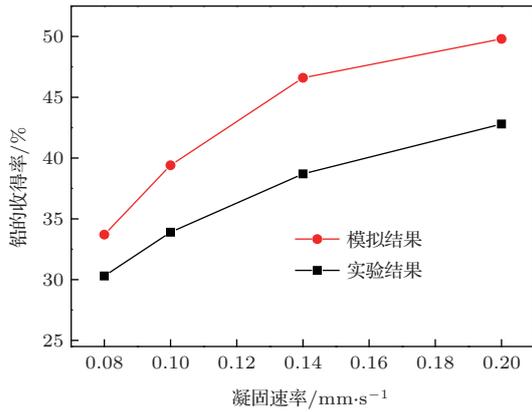


图14 实验结果与模拟结果的收得率变化曲线

另一方面, 本文还将模拟结果与SF20T(此合金由日本新日铁住友不锈钢公司生产)的组织结构进行对比. 在模型中选取冷却速度为0.14 mm/s的Fe-10%Pb合金, 模拟拉成 $\Phi 2.3$ mm的线材, 将其与SF20T线材的组织结构进行对比, 如图16所示. 图16(a)和(c)为SF20T线材中心位置横、纵方向上的SEM图, 白色框内为Pb相(图中黑色区域为MnS相, 其在基体中分布较弥散^[34], 可简化模

型进行模拟). 图16(b)和(d)为模拟的Fe-10%Pb合金(无MnS相)线材中心位置横、纵方向上的组织结构图, 由于模型中Pb的初始值较高, 与SF20T线材相比, Pb相的体积略大, 但组织结构比较类似, 横截面上Pb相呈细小点状分布, 纵切面上呈椭球型分布, 且Pb相在基体中分布均匀弥散.

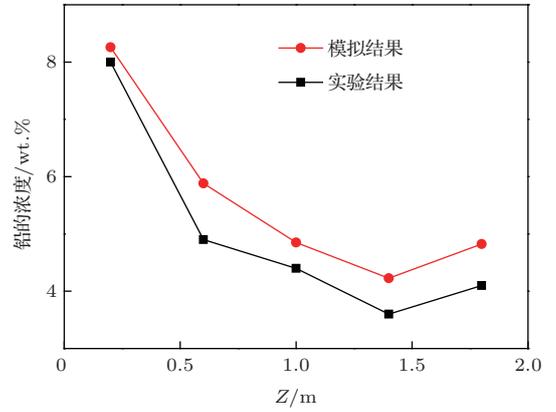


图15 实验结果与模拟结果的横截面Pb含量变化曲线

模拟结果与实验结果一致, 验证了此模型的准确性.

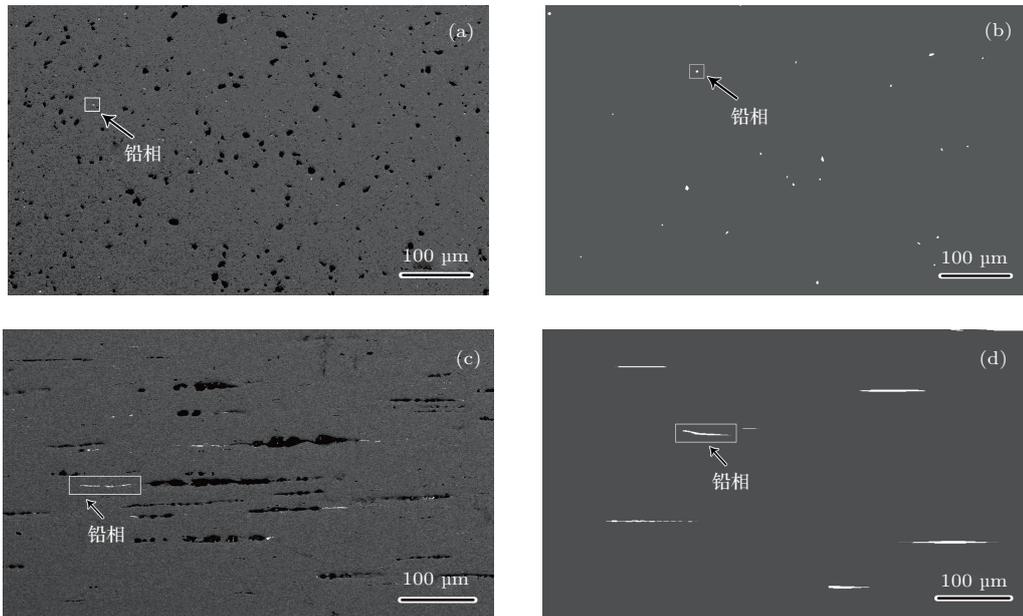


图16 线材横、纵向的实验与模拟表面组织结构图 (a) SF20T的横截面SEM图; (b) 模拟的合金横截面形貌图; (c) SF20T的纵切面SEM图; (d) 模拟的合金纵切面形貌图

6 结 论

基于Eulerian-Eulerian方法和流体体积技术, 建立了三维多相流体动力学凝固模型, 考虑凝固过程中气、液两相交互流动下的多取向相变, 模拟分

析了Fe-Pb合金侧向凝固过程, 理论研究了该合金的偏析模式和通道偏析形成的影响因素, 并通过实验进行验证, 得到如下结论:

1. 在合金凝固过程中, 液、气两相的流动相变使偏析模式主要表现为上端X形下端V形. X偏析

由气相相变驱动力和相变取向作用下的“散射”形成, V 偏析由重力场作用下的侧向凝固形成. $t < t_c$ 且值越小, Pb 相在基体中的分布越不均匀; $t > t_c$ 时, 在一定范围内随着 $\nabla(\nabla C_{Pb})$ 和 $\nabla(\nabla S_{Pb})$ 曲线的下降, X 偏析的下偏析角增大, 上偏析角和 V 偏析角减小, Pb 收得率增大, 有利于获得含量稳定弥散的凝固组织.

2. 流动-相变交互作用 ($\mathbf{u}_l \cdot \nabla c_l$ 和 $\mathbf{u}_g \cdot \nabla c_g$) 是通道偏析形成的最关键因素. $\mathbf{u}_l \cdot \nabla c_l$ 和 $\mathbf{u}_g \cdot \nabla c_g$ 为正值, 浓度梯度和流动方向相同, 流动扰动作用被抑制而促进合金凝固, 偏析通道不易形成. $\mathbf{u}_l \cdot \nabla c_l$ 和 $\mathbf{u}_g \cdot \nabla c_g$ 为负值, 浓度梯度和流动方向相反, 流动扰动作用促进局部流动而抑制合金凝固, 有助于偏析通道持续稳定生长; 同时, 较强的局部流动又加剧了流动扰动作用, 通道偏析只发生在流动-相变交互作用 ($\mathbf{u}_l \cdot \nabla c_l$ 和 $\mathbf{u}_g \cdot \nabla c_g$) 小于零的区域.

3. 合金的截面组织形貌、横截面 Pb 含量和 Pb 收得率的模拟结果与实验结果相符合, 反映了本文所建模型较好的理论预测能力.

参考文献

- [1] Nazábal J L, Urcola J J, Fuentes M 1984 *Metallography*. **71** 439
- [2] Murakami Y, Mine K, Usuki H 1988 *J. Iron. Steel. Inst. Jpn.* **74** 1113
- [3] Bernsmann G, Blyemehl M, Ehl R 2001 *Stahl. Eisen.* **121** 87
- [4] Iwamoto T, Murakami T 2004 *JFE. Tech. Rep.* **4** 74
- [5] Guduru R K, Scattergood R O, Koch C C, Murty K L, Guruswamy S, McCarter M K 2006 *Scripta. Mater.* **54** 1879
- [6] Yamauchi K, Nakagawa Y 1971 *Jpn. J. Appl. Phys.* **10** 1730
- [7] Burton B 1991 *J. Phase. Equilib.* **12** 200
- [8] Iwama N, Uchiyama M, Owaki S 1999 *Curr. Adv. Mater. Process.* **12** 1387
- [9] McDonald R J, Hunt J D 1969 *Trans. Metall. Soc. AIME.* **245** 1993
- [10] McDonald R J, Hunt J D 1970 *Metall. Trans.* **1** 1787
- [11] Sarazin J R, Hellawell A 1988 *Metall. Trans. A* **19** 1861
- [12] Shahani H, Amberg G, Fredriksson H 1991 *Metall. Trans. A* **23** 2301
- [13] Schneider M C, Beckermann C 1995 *Int. J. Heat. Mass. Tran.* **38** 3455
- [14] Belleta M, Combeau H, Fautrelle Y, Gobin D, Rady M, Arquis E, Budenkova O, Dussoubs B, Duterrail Y, Kumar A, Gandin C A, Goyeau B, Mosbah S, Založnik M 2009 *Int. J. Therm. Sci.* **48** 2013
- [15] Wang T M, Yao S, Zhang X G, Jin J Z, Wu M, Ludwig A, Pustal B, Bührig-Polaczek A 2006 *Acta. Metall. Sin.* **42** 584 (in Chinese)[王同敏, 姚山, 张兴国, 金俊泽, Wu M, Ludwig A, Pustal B, Bührig-Polaczek A 2006 金属学报 **42** 584]
- [16] Cockroft S L, Maijer D M 2009 *Modeling of Casting Welding and Advanced Solidification Processes* (Warrendale: Wiley-IEEE Press) pp250-265
- [17] Zhu C S, Wang Z P, Jing T, Xiao R Z 2006 *Acta. Phys. Sin.* **55** 1502 (in Chinese)[朱昌盛, 王智平, 荆涛, 肖荣振 2006 物理学报 **55** 1502]
- [18] Kumar A, Dussoubs B, Založnik M, Combeau H 2009 *Phys. J. Appl. Phys.* **42** 105503
- [19] Li J, Wu M, Hao J, Ludwig A 2012 *Comp. Mater. Sci.* **55** 407
- [20] Wu M, Ludwig A 2006 *Metall. Mater. Trans. A* **37** 1613
- [21] Kumar A, Založnik M, Combeau H 2012 *Int. J. Therm. Sci.* **54** 33
- [22] Schneider M C, Beckermann C 1995 *Int. J. Heat. Mass. Tran.* **38** 3455
- [23] Wu M, Ludwig A 2007 *Metall. Mater. Trans. A* **38** 1465
- [24] Xu D, Bai Y, Guo J, Fu H, Guo J J 2004 *Int. J. Heat. Mass. Tran.* **46** 767
- [25] Beckermann C, Viskanta R 1993 *Appl. Mech. Rev.* **46** 1
- [26] 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]
- [27] Založnik M, Combeau H 2010 *Comp. Mater. Sci.* **48** 1
- [28] Wang K F, Guo J J, Mi G F, Li B S, Fu H Z 2008 *Acta. Phys. Sin.* **57** 3048 (in Chinese)[王狂飞, 郭景杰, 米国发, 李邦盛, 傅恒志 2008 物理学报 **57** 3048]
- [29] Li Q, Guo Q Y, Li R D 2003 *Chin. Phys.* **15** 778
- [30] Monchoux J P, Rabkin E 2002 *Acta. Mater.* **50** 3159
- [31] Hu G X, Cai X, Rong Y H 2010 *Fundamentals of Materials Science* (Shanghai: Shanghai Jiao-tong University Press) pp131-140 (in Chinese)[胡庚祥, 蔡珣, 戎咏华 2010 材料科学基础 (上海: 上海交通大学出版社) 第 131—140 页]
- [32] Wu M, Könözsy L, Ludwig A, Schützenhöfer W, Tanzer R 2008 *Steel. Res. Int.* **79** 637
- [33] Tong J S 1999 *Theory of Molecular Aggregation and Application* (BeiJing: Science Press) pp37-68 (in Chinese)[童景山 1999 分子聚集理论及其应用 (北京: 科学出版社) 第 37—68 页]
- [34] Yaguchi H 1986 *J. Applied. Metalworking.* **4** 214

Three-dimensional modelling and numerical simulation on segregation during Fe-Pb alloy solidification in a multiphase system*

Wang Zhe¹⁾ Wang Fa-Zhan^{1)2)†} Wang Xin¹⁾ He Yin-Hua¹⁾ Ma Shan²⁾ Wu Zhen²⁾

1) (College of Material and Mineral Resources, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055, China)

2) (School of Mechanical and Electrical Engineering, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055, China)

(Received 15 November 2013; revised manuscript received 1 January 2014)

Abstract

The three-dimensional mathematical model for a three-phase flow during its horizontal solidification is studied using fluid dynamics method based on Eulerian-Eulerian and volume of fraction methods, in which the mass, momentum, species, and enthalpy conservation equations of the Fe-Pb alloy solidification process are solved simultaneously. Effects of Pb area quadratic gradient ($\nabla(\nabla S_{\text{Pb}})$) and Pb concentration quadratic gradient ($\nabla(\nabla C_{\text{Pb}})$) on the segregation formation are investigated. Results show that the segregation mode is manifested as X-segregates in the upper and V-segregates in the lower part during flow-solidification of liquid phase and gas phase. The X-segregates result from the phase transformation driving force of gas phase and "scattering" is due to the orientation of phase transition. When $t > t_c$ the lower $\nabla(\nabla S_{\text{Pb}})$ and $\nabla(\nabla C_{\text{Pb}})$ curves cause a larger yielding rate of Pb with a larger down angle of X-segregates and a smaller up angle of X-segregates and V-segregates. All these are favorable for the formation of a well-dispersed microstructure. In addition, the gas-liquid two-phase flow interaction term has an effect on channel segregation, showing that channels occur only in the region where the flow-phase transition interaction term ($\mathbf{u}_l \cdot \nabla c_l$ and $\mathbf{u}_g \cdot \nabla c_g$) is negative. With a negative flow-phase transition interaction term the increase in flow velocity due to the flow perturbation and flow-phase transition interaction becomes more negative, thus the channel continues to grow and tends to be stable. Calculated results show good agreement with experimental data.

Keywords: multiphase solidification, formation of X-segregates, channel segregation, numerical simulation

PACS: 61.25.Mv, 29.85.-c, 81.30.Fb

DOI: 10.7498/aps.63.076101

* Project supported by the National Key Technology R&D Program during the 12th Five-year Plan Period of China (Grant No. 2011BAE31B02).

† Corresponding author. E-mail: wangfz10_1@163.com