

Matematično modeliranje termičnih stanj pri strjevanju

Mathematical Modelling of Thermal States by Solidification

B. Štok, B. Bukovec, Univerza v Ljubljani, Fakulteta za strojništvo

B. Koroušič, Inštitut za kovinske materiale in tehnologije, Ljubljana

Razumevanje mehanizmov strjevanja in poznavanje parametrov, ki vplivajo na kinetiko strjevanja, je bistvenega pomena za uspešno načrtovanje livarske tehnologije, saj začetna kemična sestava taline ter zgodovina ohlajanja le-te povsem določata mehanske lastnosti litih materialov in zlitin. Časovno spreminjanje temperaturnega polja tako med samim procesom strjevanja, kakor tudi pozneje, ko je talina že strjena in v splošnem preide v procesu nadaljnjega ohlajanja določeno število faznih premen, je najpomembnejši generator končnih lastnosti ulitega materiala. Čeprav se je zaradi izredne kompleksnosti problematike vzpostavilo obsežno izkustveno znanje, le-to v mnogih primerih žal ne zadostuje. Zato predstavlja matematično modeliranje z eksperimentalno preverjenimi modeli tisto objektivno možnost učinkovitega načrtovanja kompleksnih problemov, ki bi jim bili sicer navkljub dobremu empiričnemu znanju mnogo teže kos.

Obravnavano je matematično modeliranje termomehanskih stanj v litini ob spremembi agregatnega stanja iz tekočega v trdno. Uporabljeni matematični model vključuje na makroskopskem nivoju popis previda toplote v obravnavanem območju, medtem ko na mikroskopskem nivoju zajema termodinamiko in kinetiko strjevanja. Verifikacija matematičnega modela je bila izvedena na primeru računalniške simulacije strjevanja in ohlajanja sive litine evtektoidne sestave. Izračunano temperaturno polje je bilo zatem primerjano z izmerjeno ohlajevalno krivuljo, posneto s Quick-Cup metodo.

Ključne besede: matematično modeliranje, računalniška simulacija, termomehanska stanja, kinetika strjevanja

The initial chemical composition of a molten metal and its cooling history completely determine mechanical properties of a cast material. Understanding of solidification mechanisms and identification of parameters influencing the solidification kinetics is therefore of major importance for designing a casting technology. Time variation of the temperature field during solidification, and later cooling of already solidified material as well, is the most important generator of the obtained final mechanical properties of a casting. Although a vast empirical knowledge about the problem, which is rather complex, has been gained, experience proves that it is often not sufficient. It seems that mathematical modelling, when based on experimentally verified models, could enable in a very objective and reliable way an efficient design of more complex problems, which would be otherwise, despite all good empirical experience, designed with much more difficulty.

The paper is concerned with mathematical modelling of the thermomechanical state in a solidifying molten metal. The mathematical model used considers at the macroscopic level the heat transfer in the problem domain, and thermodynamics and kinetics of solidification at the microscopic level, respectively. Verification of the mathematical model has been obtained through computer simulation of solidification and cooling of eutectic gray cast iron. Finally, a correspondent comparison of the computed temperature time variation with the cooling curve, registered experimentally in accordance with Quick-Cup method, has been done.

Key words: *mathematical modelling, computer simulation, thermomechanical state, solidification kinetics*

1 Uvod

Načrtovanje postopkov litja je izredno zahtevna naloga, saj vsebuje prehod iz tekočega stanja v trdno in povsem ohlajeno stanje veliko fenomenoloških specifičnosti. Čeprav so le-te pogojene že s samo kemično sestavo taline, je hitrost ohlajanja vendarle tisti parameter, ki ključno opredeli končne lastnosti litine tako v smislu dosežene homogenosti strukture kakor tudi njene sestave. Zaradi kompleksnosti problema v pogojih tehniške uporabe, ki se ob zapletenem mehanizmu strjevanja kaže še v njegovi prostorski razsežnosti in časovni spremenljivosti, je bilo uspešno načrtovanje željenih končnih lastnosti litin še do nedavna odvisno skorajda izključno od pridobljenih empiričnih izkušenj. Pridobljena nova znanja na področju matematičnega modeliranja strjevanja pa dandanes ponujajo ob podpori sodobne visoko zmogljive računalniške tehnologije ter ustreznega programskega orodja možnost povsem drugačnega pristopa k obravnavanju te problematike. Ob obstoječih empiričnih izkušnjah, ki še vedno predstavljajo nepogrešljivo izhodišče vsakršnega načrtovanja, je livarsko tehnologijo mogoče uspešno in ceneno načrtovati predvsem na osnovi računalniške simulacije, vodenje oz. kontrolo tako določene tehnologije v realnih industrijskih pogojih pa zagotoviti z ustrezno on-line regulacijo.

Z vidika obvladovanja prostorske in časovne odvisnosti je opisani način reševanja livarske problematike nedvomno izredno perspektiven, vendar pa moramo zaradi objektivnosti priznati, da zaenkrat popolnega matematičnega modela, ki bi povsem zadovoljivo popisal celotno fenomenologijo obravnavanega procesa na tako širokem temperaturnem intervalu, vključujočem termomehanska stanja od tekoče faze pa do trdne faze pri temperaturi okolice, še ni. Razlogov za to je vsekakor mnogo, med najpomembnejše pa lahko prištevamo naše nepopolno poznavanje problemov faznega prehoda ter toplotnih, kemičnih in strukturnih sprememb pri tem prehodu, nepoznavanje temperaturne odvisnosti snovnih lastnosti,... Zaradi tega je matematični model potrebno stalno dopolnjevati v skladu z našimi na novo pridobljenimi empiričnimi izkušnjami, rezultate, ki jih modificirani model daje, pa izpostaviti ustrezni eksperimentalni verifikaciji.

Prispevek obravnava numerično simulacijo strjevanja in ohlajanja litine ter v tem smislu predstavlja doprinos k izboljšanju matematičnega modela za popis termomehanskih stanj v litini ob spremembi le-te iz tekočega v trdno stanje. Model, ki na makroskopskem nivoju vključuje popis prevoda toplote v obravnavanem območju, na mikroskopskem pa termodinamiko in kinetiko strjevanja, je potrjen na primeru računalniške simulacije strjevanja in ohlajanja sive litine evtektoidne sestave v pogojih, ki jih opredeljuje Quick-Cup metoda.

2 Matematični model

Za čim bolj verodostojen popis procesa litja je le-tega potrebno obravnavati kot razširjen termodinamični sistem, ki vključuje talino, formo in okolico. Toplotno neravnotežje, ki karakterizira dani sistem v trenutku, ko formo zapolnimo s talino, je generator vseh kasnejših strukturnih in mehanskih sprememb v litini. Zato je v nadaljevanju vsa naša pozornost

usmerjena v čim verodostojnejšo določitev prostorsko in časovno spremenljivega temperaturnega polja $T(\mathbf{x}_k, t)$, ki ob začetni kemični sestavi taline povsem pogojuje strukturno in mehansko stanje v strjenem in ohlajenem ulitku.

Določitev termomehanskega stanja v litini sledi iz rešitve vezanega sistema diferencialnih enačb, ki popisujejo fenomenologijo prevoda toplote, kinetike strjevanja in morebitnih faznih premen. V teoretičnem delu analize se omejujemo le na obravnavo termomehanskih razmer v litini, vpliv preostanka celotnega termodinamičnega sistema (forma, okolica) pa nadomestimo z ustreznimi robnimi pogoji na ograji območja, ki ga izpolnjuje litina.

2.1 Osnovne enačbe prenosa toplote

Ob predpostavki, da tako talino ($\mathbf{x}_k \in \Omega_L(t)$) kot strjeno litino ($\mathbf{x}_k \in \Omega_S(t)$) obravnavamo kot isti kontinuum ($\mathbf{x}_k \in \Omega_L \cup \Omega_S = \Omega(t)$; $\Omega_L \cap \Omega_S = \emptyset$), kateremu se časovno, v skladu s spreminjanjem temperaturnega polja, ustrezno spreminjajo fizikalne lastnosti, lahko temperaturno polje $T(\mathbf{x}_k, t)$ določimo na osnovi toplotne analize, ki je definirana z enačbo prevoda toplote ter pripadajočimi začetnimi in robnimi pogoji. V tenzorski obliki zapišemo enačbo prevoda toplote na sledeči način

$$\rho c_p \dot{T} = (k T_{,i})_{,i} + Q, \quad \mathbf{x}_k \in \Omega(t), \quad (1)$$

pri čemer je T absolutna temperatura, ρc_p toplotna kapaciteta, k toplotna prevodnost in Q polje prostorsko porazdeljenih toplotnih virov. Simbola $(\bullet)$ in $(\bullet)_{,i}$ označujeta časovni odvod $(\bullet) = \frac{\partial \bullet}{\partial t}$ ter odvod po krajevni koordinati x_i ($\bullet)_{,i} = \frac{\partial \bullet}{\partial x_i}$). Če zasledovanje obravnavanega problema opredelimo časovno z intervalom $t \geq 0$, mora temperaturno polje $T(\mathbf{x}_k, t)$, ki sledi kot rešitev enačbe (1), zadostiti še začetnim in robnim pogojem

$$\begin{aligned} T(\mathbf{x}_k, 0) &= T^*(\mathbf{x}_k, 0) = T_0(\mathbf{x}_k), & \mathbf{x}_k \in \Omega(0) \\ H_T(T, \mathbf{x}_k, t) &= 0, & \mathbf{x}_k \in \Gamma(t), \end{aligned} \quad (2)$$

ki so predpisani v območju $\Omega(0)$ ter na ograji $\Gamma(t)$ tega območja. Funkcija $H_T(T, \mathbf{x}_k, t)$ predstavlja implicitno obliko možnih robnih pogojev, ki so za $t > 0$ definirani glede na vrsto prestopa toplote na ograji $\Gamma(t)$.

Numerična določitev temperaturnega polja, ki je matematično povsem determinirano z enačbami (1) in (2), ne predstavlja večjih težav⁶. Verodostojnost takšne rešitve v realnih razmerah pa je vendarle odvisna od nekaj ključnih faktorjev, ki so v bistvu vselej odraz našega poznavanja parametrov problema. Vsakršno odstopanje od dejanskih vrednosti v enačbah obravnavanega problema prisotnih parametrov povzroči odstopanje numerične rešitve od dejanske, ki jo je mogoče tudi eksperimentalno ugotoviti. Za določitev čim realnejšega odziva, ki sledi zgoraj opisanim enačbam, je pomembno zagotoviti realne podatke o temperaturni odvisnosti snovnih lastnosti, prestopnih pogojih na meji obravnavanega območja z okolico ter časovni odvisnosti polja prostorsko porazdeljenih toplotnih virov $Q(\mathbf{x}_k, t)$.

Glede na naravo problema, ki ga ob prehodu iz tekoče v trdno fazo karakterizira eksotermna reakcija s sproščanjem latentne toplote Q_L , namenjamo v nadaljevanju pozornost predvsem vprašanju objektivnega modeliranja te reakcije. Če z $f_s(x_k, t)$ označimo delež trdne faze v opazovanem volumnu in z Q_L celotno latentno toploto, ki se sprosti pri strjevanju enote volumna, je toplotni tok $Q(x_k, t)$ mogoče zapisati kot

$$Q(x_k, t) = Q_L \frac{\partial f_s(x_k, t)}{\partial t} \quad (3)$$

2.2 Osnovne enačbe kinetike strjevanja

Prav določitev časovne in prostorske odvisnosti deleža trdne faze $f_s(x_k, t)$, ki posredno pogojuje intenzivnost polja toplotnih izvorov (3), predstavlja enega večjih problemov pri modeliranju tovrstnih procesov. Ob več poznanih pristopih je eden bolj zapletenih, ki temelji na teoriji kristalizacije, obravnavan v nadaljevanju.

2.2.1 Termodinamika strjevanja

Snovne spremembe, med katere prištevamo tako spremembe agregatnega stanja (fazne transformacije) kot fazne spremembe pri istem agregatnem stanju (fazne premene), so termodinamično karakterizirane z energijskimi spremembami, ki jih je mogoče zajeti v obliki spremembe Gibbsove proste energije G . Le-ta je definirana v odvisnosti od entalpije H , entropije S ter absolutne temperature T danega sistema z enačbo

$$G = H - T \cdot S \quad (4)$$

Termodinamično stanje opazovanega sistema je stabilno, če je njegova prosta energija G v stacionarnem stanju, ki je pri poljubno majhni spremembi veličin stanja pogojeno z veljavnostjo $dG = 0$. Spremembo termodinamičnega stanja iz stanja 1 v stanje 2, za katero velja $\Delta G = G_2 - G_1 < 0$, je tedaj mogoče razumeti kot potreben pogoj za razvoj katerekoli snovne spremembe.

V nadaljevanju se omejimo le na obravnavo tehnično čistih kovin in evtektičnih zlitin, za katere velja, da je pri strjevanju pri konstantnem tlaku termodinamično ravnotežje lahko vzpostavljeno vedno samo v eni fazi. Obe fazi, tekoča in trdna, lahko eksistirata samo pri eni, točno določeni temperaturi transformacije T_M . Glede na vzpostavljeno termodinamično ravnotežje velja

$$\begin{aligned} G^L(T_M) &= G^S(T_M) \\ \Delta G(T_M) &= G^S(T_M) - G^L(T_M) = 0, \end{aligned} \quad (5)$$

pri čemer se indeksa L in S nanašata na tekočo oziroma trdno fazo. Potrebno spremembo proste energije $\Delta G < 0$, ki bo omogočala, da se preostala talina strdi, dosežemo s podhladitvijo za $\Delta T = T_M - T$. Dano termodinamično stanje ni stabilno, saj pri temperaturi podhladitve T ($T < T_M$) namreč velja

$$G^L(T) > G^S(T) \quad (6)$$

$$\Delta G(T) = G^S(T) - G^L(T) < 0.$$

Velikost spremembe proste energije ΔG je za majhne podhladitve ΔT mogoče izraziti v odvisnosti od sproščene latentne toplote Q_L v obliki enačbe

$$\Delta G(T) = -Q_L \frac{T_M - T}{T_M} \quad (7)$$

Čeprav je s podhladitvijo ΔT dosežen potreben pogoj za strjevanje, pride do strjevanja le, če so ob tem ustvarjeni tudi pogoji za rast kristalnih kali.

2.2.2 Kinetika strjevanja

Ob izpolnjenem potrebnem pogoju $\Delta G < 0$, kar enačba (7) zagotavlja, sta strjevanje in hitrost strjevanja odvisna od pogojev nukleacije, to je rasti kristalnih kali do kritične velikosti r_{cr} , kateri sledi stabilna rast kristalnih zrn. Iz analize t.i. homogene nukleacije, pri kateri se kristali formirajo v osnovni talini brez dodatka drugega materiala ali nečistoč, lahko predpostavimo, da se množica atomov združi v delce oz. grozde kroglaste oblike. Sprememba proste energije $\Delta G_r(r)$, ki karakterizira nastanek delca radija r , je sestavljena iz dveh delov: že poznane energijske prispevka (7), ki je posledica spremembe agregatnega stanja, ter energijske spremembe zaradi vzpostavitve meje med trdno in kapljevito fazo

$$\Delta G_r(r) = 4\pi r^2 \gamma + \frac{4}{3}\pi r^3 \Delta G(T), \quad (8)$$

kjer je γ površinska prosta energija. Iz funkcijske odvisnosti obeh deležev je razvidno, da prvi sumand povečuje, drugi pa zmanjšuje spremembo proste energije. Glede na velikost radija r je funkcija $\Delta G_r(r)$ za $r < r_{cr}$ naraščajoča, za $r > r_{cr}$ pa padajoča. Nastali grozdi atomov, katerih velikost se nahaja v območju $r < r_{cr}$, niso obstojni in se ponovno topijo v talini. Kritična velikost grozda atomov r_{cr} , s katero je opredeljena meja stabilne rasti kristalnih zrn, je določena s pogojem stacionarnosti funkcije (8). Tako sledi

$$r_{cr} = -\frac{2\gamma}{\Delta G(T)} \quad (9)$$

Spremembo proste energije ΔG^{cr}

$$\Delta G^{cr} = \Delta G_r(r_{cr}), \quad (10)$$

ki karakterizira kritično velikost grozda atomov, je razumeti kot aktivacijsko energijo, to je tisti del energijske spremembe, ki omogoči stabilno rast kristalnih zrn.

V realnih pogojih strjevanja imamo opraviti s heterogeno in le izjemoma s homogeno nukleacijo. Za slednjo je namreč potrebna razmeroma velika aktivacijska energija ΔG_{het}^{σ} , ki jo je mogoče doseči le z velikimi podhladitvami. V primeru heterogene nukleacije, kjer se prične nukleacija ob stenah kokile, se energijske spremembe glede na ugotovljene spremembe v primeru homogene nukleacije (8) spremenijo v skladu z oblikovnim faktorjem omočenja $f(\Theta)$ ($0 \leq f(\Theta) \leq 1$). Glede na aktivacijsko energijo pri homogeni nukleaciji (10) je tedaj, ob nespremenjeni kritični velikosti grozda atomov r_{cr} (9), potrebna aktivacijska energija heterogene nukleacije podana z

$$\Delta G_{het}^{\sigma} = \Delta G_{hom}^{\sigma} f(\Theta), \quad (11)$$

pri čemer je Θ kot omočenja ($0 \leq \Theta \leq 1$).

2.2.3 Določanje deleža trdne faze

Volumski delež trdne faze $f_s(x_k, t)$ ($0 \leq f_s(x_k, t) \leq 1$) je odvisen od vrste nukleacije in njene hitrosti. Če privzamemo, da se prične rast kristalnih zrn okrog kristalnih kali pri določeni nukleacijski temperaturi T , zapišemo po Huntu⁸ hitrost nukleacije $I_{het}(t)$ v obliki

$$I_{het}(t) = \frac{\partial n(t)}{\partial t} = [n_s - n(t)] K_I(t) \exp\left(-\frac{\Delta G_{het}^{\sigma}}{kT}\right), \quad (12)$$

kjer je k Boltzmannova konstanta, n_s število v enoti volumna prisotnih kristalnih kali in $n(t)$ trenutno število nastalih kristalnih zrn v enoti volumna, $K_I(t)$ pa koeficient, katerega vrednost je odvisna od difuzijskih lastnosti taline. Vrednost koeficienta $K_I(t)$ se za Fe-C zlitine giblje v območju od 1.78×10^{18} do $8.66 \times 10^{22} \text{ s}^{-1}$, odvisno od vrste zlitine. Z enačbo (12) je opredeljen zakon nukleacije, katerega integracija po času da število kristalnih zrn $n(t)$ v danem trenutku t

$$n(t) = \int_0^t I_{het}(\tau) d\tau. \quad (13)$$

Glede na to, da je število kristalnih zrn v določenem trenutku t po prostoru $x_k(t) \in \Omega(t)$ različno, je potrebno upoštevati $n(t) = n(x_k, t)$. Če nadalje predpostavimo, da so vsa kristalna zrna kroglaste oblike, je povprečni delež trdne faze $f_s(x_k, t)$ v točki x_k v ulitku opredeljen z

$$f_s(x_k, t) = n(x_k, t) \cdot \frac{4}{3} \pi R^3(x_k, t), \quad (14)$$

kjer je $R(x_k, t)$ srednja vrednost radijev obstoječih kristalnih zrn. Kristalna zrna rastejo v skladu z zakonom rasti, ki ga je mogoče za primer ekvialksialnih kristalov evtektika zapisati v obliki enačbe

$$\frac{dR}{dt} = \mu_1 (\Delta T)^2 \quad (15)$$

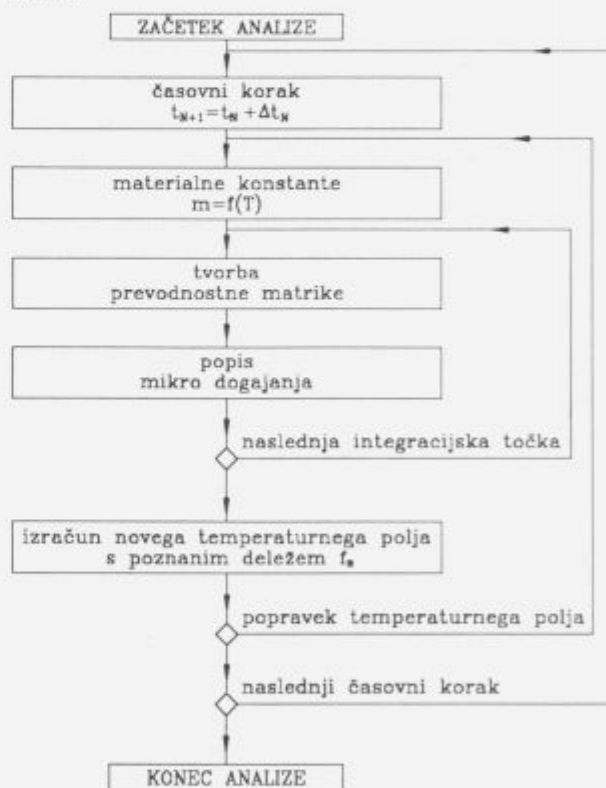
s konstanto μ_1 , ki jo lahko dobimo iz eksperimenta.

Enačbo (14) je smotno dopolniti v smislu Johnson-Mehlove korekcije, s katero upoštevamo proporcionalno zmanjšanje hitrosti strjevanja, ki sicer sledi iz enačbe (14). Korekcija upošteva efektivno površino med trdno in tekočo fazo, s čemer je dana možnost upoštevanja nepravilnosti oblike kristalnih zrn. Upoštevajoč faktor Johnson-Mehlove korekcije ($I-f_s$) dobimo končno

$$f_s(x_k, t) = 1 - \exp\left(-\frac{4}{3} \pi n(x_k, t) R^3(x_k, t)\right) \quad (16)$$

3 Numerična implementacija modela

Rešitev problema, ki smo ga matematično formulirali v predhodnem razdelku, je zaradi prostorske in časovne odvisnosti fizikalnih veličin problema mogoče poiskati le aproksimativno. Aproksimativno rešitev zato poiščemo v obliki numerične analize, katere prostorska diskretizacija temelji na konceptu končnih elementov, časovna pa na poznanih diferenčnih shemah.



Slika 1: Diagram poteka izračuna.

Figure 1: Flow chart for computational analysis.

Numerično reševanje problema zahteva koračno reševanje s časovnim korakom Δt_N , pri čemer je samo reševanje znotraj istega časovnega koraka v splošnem iterativno, saj je zaradi temperaturne odvisnosti snovnih lastnosti problem izrazito nelinearen. Diagram poteka izračuna (slika 1) prikazuje zaporedje računskih operacij, ki jih je v okviru izračuna odziva obravnavanega sistema v danem časovnem koraku Δt_N potrebno izvesti.

Numerično modeliranje sproščanja latentne toplote, ki je vezano na kinetiko strjevanja, je potrebno izvesti na nivoju diskretnih integracijskih točk posameznega končnega elementa v skladu z evolutivnimi zakoni (3), (13), (15) in (16).

4 Eksperimentalna verifikacija

Verodostojnost ustreznega računskega modela je potrebno iskati na primeru, ki je eksperimentalno nesporen. Glede na to, da se proces strjevanja taline kakor tudi poznejše rekristalizacije v trdnem odražajo v temperaturnem stanju opazovanega dela, lahko našemu namenu služi ohlajevalna krivulja, posneta na vzorcu po Quick-Cup metodi. Navkljub temu, da je celoten proces strjevanja sicer makroskopsko uravnavan s temperaturnim stanjem ter hitrostjo sproščanja latentne toplote, smo pri validaciji računskega modela ugotovili, da nikakor ne smemo prezreti vpliva kinetike in načina rasti kristalnih zrn pri modeliranju procesa strjevanja taline, saj ta bistveno vpliva na hitrost sproščanja latentne toplote.

4.1 Opis eksperimenta strjevanja sive litine v Quick-Cup lončku

Eksperiment meritve ohlajevalne krivulje za sivo litino približno eutektične sestave je bil opravljen na Inštitutu za kovinske materiale in tehnologije v Ljubljani. Merilni sistem je bil sestavljen iz naslednjih glavnih komponent: PC računalnika za obdelavo izmerjenih podatkov, dataloggerja in Quick-Cup lončka z vgrajenim termoelementom.

Talina je bila izdelana v indukcijski peči z vložkom, ki je bil sestavljen iz naslednjih komponent: 300 kg grodlja, 10.35 kg Si, 1.726 kg Mn in 38.08 kg Fe. Iz vložka lahko ocenimo kemično sestavo zlitine po raztalitvi: 3.51 % C, 3.30 % Si, 0.50 % Mn, 0.007 % S, 0.023 % P. Obravnavana zlitina seveda ne ustreza čistemu Fe-C sistemu, sama sestava pa približno ustreza eutektiki sestavi sive litine.

Izmerjeno ohlajevalno krivuljo ter hitrost spreminjanja temperature smo prikazali grafično v sliki 2. Iz nje je možno razbrati, da se proces strjevanja začne okoli časovnega trenutka $t=40$ s, ko po nastanku kristalnih kalij začnejo kristali rasti. Podhladitev taline se zmanjša in temperatura se približa ravnotežni temperaturi fazne transformacije. Iz časovnega poteka je nadalje razvidno, da pride pri času okoli 500 s še do ene eksotermne reakcije (okoli 780°C), ki je posledica strukturne premene v trdnem stanju.

4.2 Numerična simulacija strjevanja sive litine v Quick-Cup lončku

Zaradi verifikacije matematičnega modela smo izvedli tudi numerično simulacijo strjevanja sive litine, ki ustreza prejšnjemu eksperimentu. Modeliran je bil celoten sistem talina - lonček, medtem ko je bil vpliv okolice upoštevan preko robnih pogojev. V simulaciji so bile uporabljene snovne lastnosti naslednjih velikosti:

ulitek:

gostota $\rho=7000 \text{ kg/m}^3$, koeficient prevodnosti $k=45 \text{ W/mK}$, specifična toplota $c_p=540 \text{ J/kgK}$, temperatura eutektika $T=1135^\circ\text{C}$, latentna toplota $Q_L=1.9 \cdot 10^9 \text{ J/m}^3$, nukleacijska konstanta $K_1=10^{20} \text{ s}^{-1}$, konstanta rasti kristala $\mu_1=10^{-7} \text{ ms}^{-1} \text{ K}^{-2}$, nukleacijska podhladitev $\Delta T_n=2 \text{ K}$.

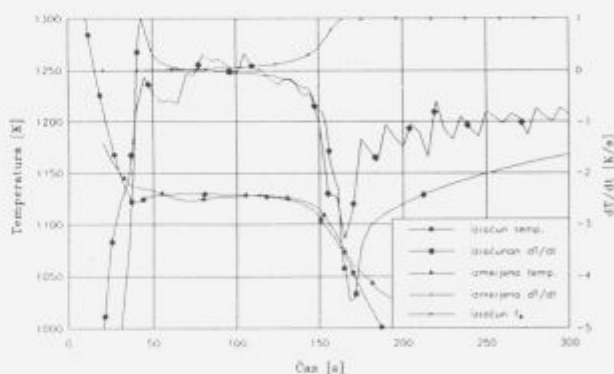
lonček:

gostota $\rho=1500 \text{ kg/m}^3$, koeficient prevodnosti $k=0.61 \text{ W/mK}$, specifična toplota $c_p=800 \text{ J/kgK}$.

ter robni pogoji, kot sledi:

temperatura okolice $T_0=20^\circ\text{C}$, koeficient prestopnosti $\alpha=20 \text{ W/mK}$, emisivnost $\varepsilon=0.9$.

V sliki 2 sta prikazana izračunani potek temperature v ulitku in hitrost ohlajanja. Iz primerjave z eksperimentalnimi rezultati je očitno, da se obe krivulji v fazi strjevanja dokaj dobro ujemata. Fazo strjevanja je mogoče iz slike identificirati tako iz funkcijske odvisnosti deleža trdne faze, ki se med strjevanjem stalno večja, kakor tudi iz poteka ohlajevalne krivulje, ki je v primeru strjevanja karakterizirana s konstantnostjo temperature. Pri eksperimentu je v začetni fazi nukleacije krivulja precej drugačna, najverjetneje zaradi strjevanja prve faze, ker je pač obravnavana siva litina samo približno eutektik. Tudi v nadaljevanju ohlajanja, torej že izven območja fazne premene pri okoli 1050°C pride do nekoliko večje razlike v hitrosti ohlajanja. Pravih razlogov za odstopanje nismo iskali, saj smo bili v tej analizi predvsem osredotočeni na modeliranje pojavov strjevanja. Vsekakor pa lahko z gotovostjo trdimo, da je vzrok za to odstopanje iskati v zmanjšanem odvodu toplote na okolico, kot posledice spremembe koeficienta prestopnosti α zaradi spremembe površine lončka in tudi strukture samega materiala lončka pod vplivom zelo visokih temperatur.



Slika 2: Računska in eksperimentalna ohlajevalna krivulja.

Figure 2: Computed versus experimental cooling curve.

5 Zaključne ugotovitve

Rezultati prikazane računalniške simulacije strjevanja ter primerjava le-teh z eksperimentalno dobljenimi rezultati potrjujejo velike zmožnosti, ki jih nudi matematično modeliranje. Ob testiranju računskega modela smo ugotovili, da kljub temu, da je celoten proces strjevanja sicer makroskopsko uravnavan s temperaturnim stanjem ter hitrostjo sproščanja latentne toplote, nikakor ne smemo prezreti vpliva kinetike in načina rasti kristalnih zrn pri modeliranju procesa strjevanja taline, saj ta bistveno vpliva na hitrost sproščanja latentne toplote.

Zaradi kompleksnosti problematike in nepoznavanja določenih snovnih parametrov, ki uravnavajo nukleacijo kristalnih kalij, smo se v analizi omejili na matematično najbolj enostavne primere, t.j. eutektik in tehnično čiste kovine. Za te

primere smo uspeli izdelati računski model, ki zadovoljivo sledi eksperimentalnim rezultatom, vendar pa je nadaljevanje teh vzpodbudnih začetkov v mnogočem odvisno od poglobljenega laboratorijskega dela pri ugotavljanju vseh tistih faktorjev, ki so za natančen odziv računskega modela nujni.

Na koncu kaže opozoriti na izredno perspektivnost in pomen obravnavane problematike. Osvojene matematične modele, ki zajemajo ključne mehanizme obravnavanega fenomena, je namreč po prestani eksperimentalni verifikaciji s povsem poznanimi robnimi pogoji, snovnimi lastnostmi in kinetiko strjevanja mogoče uporabiti v smislu parametrske analize za numerično identifikacijo posameznih parametrov procesa, pa tudi v smislu inverznega problema pri iskanju neznanih snovnih lastnosti. Slednje je predvsem zanimivo ob nastajanju množice novih zlitin in materialov, katerih snovne lastnosti je potrebno še raziskati ter številčno ovrednotiti. Prvi vidik pa omogoča s kontrolirano regulacijo toplotnega toka in hitrosti spremembe le-tega doseganje željenih lastnosti končnega ulitka.

6 Literatura

- ¹ F.J. Bradley: On simulating latent heat evolution during ductile iron solidification, Material Processing in the Computer Age, The Minerals, Metals & Materials Society, 1991
- ² S.G.R. Brown, J.A. Spittle: Computer simulation of grain growth and macrostructure development during solidification, Materials Science and Technology, Vol. 5, 1989
- ³ B. Bukovec: Numerična identifikacija snovnih parametrov na osnovi eksperimentalno določenih ohlajevalnih krivulj, magistrsko delo, Fakulteta za strojništvo, Ljubljana, 1993
- ⁴ H. Fredriksson: A guide to the Solidification of Steels, Jernkontoret, Stockholm, 1977
- ⁵ B. Koroušič: Računalniško podprta metoda za ugotavljanje tališča in intervala strjevanja legiranih jekel in super-zlitin, Poročilo Inštituta za kovinske materiale in tehnologije v Ljubljani, 1991
- ⁶ N. Mole: Numerično modeliranje termoelasto-plastičnih problemov, magistrsko delo, Fakulteta za strojništvo, Ljubljana, 1991
- ⁷ M. Rappaz, D.M. Stefanescu: Modelling of Microstructural Evolution, In Solidification Processing of Eutectics, TMS, Warrendale PA, 1988
- ⁸ D.M. Stefanescu, G.* Upadhyay, D. Bandyopadhyay: Heat Transfer-Solidification Kinetics Modelling of Solidification of Castings, Metallurgical Transactions A, vol. 21A, 1990
- ⁹ B. Štok, N. Mole: Matematično modeliranje rotacijskega litja - analiza termomehanskega stanja v orodju, Kovine, zlitine, tehnologije, letnik 27/št 1-2, 1993