

Henryk Połcik*, Witold Byrski*, Bartłomiej Zawada*, Mariusz Murawski*

Modelowanie procesu krystalizacji wybranych stopów metali nieżelaznych za pomocą programu FLUENT**

1. Wprowadzenie

Przedmiotem badań było poszukiwanie metod wspomagających modelowanie i sterowanie procesem krystalizacji stopów aluminium. Badania realizowano w dwóch obszarach: eksperymentów fizycznych i eksperymentów symulacyjnych.

Dla stopów aluminium przyjęto przemysłowy stop AK9. Dla określenia wpływu warunków chłodzenia na mikrostrukturę tego stopu wykonano kilka wytopów w Przedsiębiorstwie SPECODLEW (dawny Zakład Doświadczalny Instytutu Odlewnictwa). Eksperymenty fizyczne prowadzono w dwóch seriach. W każdej serii wykonano trzy wytopy. W czasie badań określano czas krystalizacji i wielkości DAS charakteryzujące strukturę badanego materiału. Analizowano warunki chłodzenia przy stosowaniu wody i oleju.

W czasie badań czasu krystalizacji przyjęto, że różnica między czasem osiągnięcia temperatury solidus a czasem osiągnięcia temperatury likwidus jest czasem krystalizacji. Zastosowana w pracy metodologia może być z powodzeniem zastosowana w innych przypadkach. W czasie badań symulowano proces krystalizacji z chłodzeniem wodą oraz różnymi rodzajami olejów. Dla zmniejszenia różnic czasów krystalizacji wybranych punktów odlewu zmieniano przewodność cieplną masy formierskiej. Badania symulacyjne prowadzono za pomocą programu FLUENT. Podstawowym celem prowadzonych badań było opracowanie metod modelowania i sterowania procesem krystalizacji odlewów oraz dobór narzędzi przydatnych do realizacji tego celu.

Proces krystalizacji stopu można przybliżyć równaniem różniczkowym cząstkowym przewodzenia ciepła:

$$\frac{\partial T(r,t)}{\partial t} = a \left(\frac{\partial^2 T(r,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T(r,t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T(r,t)}{\partial z^2} \right) + q(r,t) \quad (1)$$

* Katedra Automatyki, Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie

** Praca realizowana w ramach środków projektu badawczego nr. 3-T08B 011 27, Katedra Automatyki AGH

gdzie:

- $T(r, t)$ – temperatura w punkcie r w chwili t ,
- r – wektor współrzędnych w przestrzeni, $r = (x, y, z) \in \Omega \subset \mathbb{R}^3$, gdzie Ω jest obszarem ograniczonym przez dostatecznie gładką powierzchnię S ,
- t – czas,
- a – przewodność temperaturowa,
- $q(r, t)$ – funkcja źródeł ciepła.

Na warunki graniczne równania (1) składa się warunek początkowy w chwili $t = 0$:

$$T(r, 0) = \Psi(r), \quad r \in \Omega \quad (2)$$

oraz warunek brzegowy pierwszego rodzaju zwany warunkiem Dirichleta postaci:

$$T(r, t) = \Phi(r, t), \quad \forall t \geq 0, \quad r \in S \quad (3)$$

gdzie funkcje Ψ i Φ są znane.

W celu wyznaczenia rozwiązania równania (1) zastosowano numeryczne metody obliczeń, wykorzystując stosowaną w inżynierii metodę elementów skończonych, która polega na dyskretyzacji badanego obszaru na skończoną liczbę elementów, dla których wykonywane są obliczenia [1].

2. Badania eksperymentalne

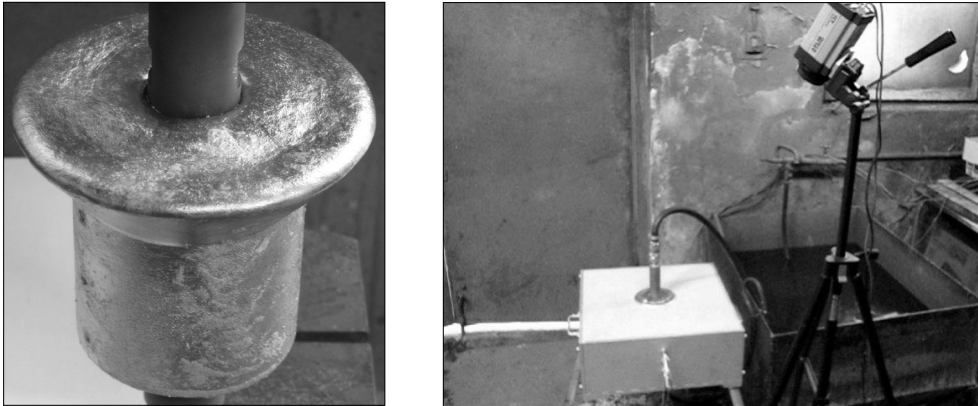
W czasie badań eksperymentalnych przyjęto założenie, że odlew próbny ma kształt tulei cylindrycznej o określonych wymiarach. W środku tulei zaprojektowano układ chłodzenia wodą przez rurę ze stali ST35. Zaprojektowano również układ pomiarowy złożony z sześciu termopar. Przyjęto trzy punkty pomiarowe na granicy odlewu i formy piaskowej oraz trzy punkty w pobliżu rury chłodzącej. Do wykonania serii odlewów próbnych przyjęto przemysłowy stop aluminium AK9 stosowany powszechnie w praktyce przemysłowej. Przeprowadzono dwie serie badań. W poszczególnych eksperymentach przyjęto warunki chłodzenia wodą o temperaturze wejściowej 20°C i stałym ciśnieniu $0,6 \text{ MPa}$. Wykonano następujące eksperymenty:

- chłodzenie wodą przez cały czas trwania procesu krystalizacji odlewu,
- chłodzenie wodą przez pierwsze 70 s i 25 s,
- bez chłodzenia wodą.

W czasie procesu krystalizacji mierzono temperaturę w wybranych punktach układu odlew-forma. Przebieg eksperymentu przedstawiono na rysunku 1.

Dla odlewów próbnych wyznaczono odległości ramion kryształów dendrytycznych drugiego rzędu – DAS. Jest to miara stopnia dyspersji mikrostruktur dendrytycznych skorelowana z właściwościami mechanicznymi oraz lokalnym czasem krystalizacji. Na podsta-

wie wstępnych badań symulacyjnych ustalono, że na mikrostrukturę można wpływać poprzez sterowanie za pomocą wody chłodzącej. Zostało to potwierdzone w trakcie przeprowadzonych eksperymentów, w których stwierdzono, że wpływ chłodzenia na wielkość DAS wzrasta w pobliżu rury chłodzącej.



Rys. 1. Stanowisko badawcze oraz wykonany próbny odlew stopu aluminium AK9

3. Charakterystyka programu FLUENT

Programy CDF (*Computational Fluid Dynamic*) umożliwiają rozwiązywanie problemów z zakresu badań kosmicznych, chemicznych, energetycznych i metalurgicznych metodami numerycznymi [2–10]. W rozwiązywaniu tych problemów wykorzystywana jest między innymi metoda elementów skończonych. W procesie symulacji występują etapy: sformułowanie modelu matematycznego, generacja siatki numerycznej, wprowadzenie danych, rozwiązanie problemu za pomocą solvera i opracowanie wyników. System okien i rozwijalne menu ułatwiają przygotowanie i przeprowadzenie obliczeń. Program FLUENT składa się z kilku modułów pełniących specyficzne funkcje, dostępnych z każdego poziomu programu.

Model geometryczny i generowanie siatki można utworzyć, wychodząc z definicji punktów geometrycznych i łącząc je krawędziami zgodnie z pożądanym kształtem. Możliwe jest również importowanie geometrii obiektu i siatki numerycznej utworzonych w innych programach.

Po zdefiniowaniu geometrii i siatki numerycznej podaje się warunki początkowe i brzegowe oraz wybiera się model procesu (*solidification/melting*). Kolejnym krokiem jest podanie właściwości materiałowych takich jak gęstość, przewodność cieplna itp. Można skorzystać z wbudowanej bazy, która zawiera charakterystykę większości znanych materiałów (woda, aluminium, stal itp.).

Problemy opisywane równaniami różniczkowymi cząstkowymi rozwiązywane są w module solvera z dokładnością określoną przez użytkownika. Wyniki mogą być przedstawione w postaci wygenerowanych wykresów. Wbudowana grafika umożliwia uzyskiwanie obrazów i wykresów w dowolnych przekrojach.

Program FLUENT umożliwia wprowadzenie własnych funkcji i procedur dla rozwiązywania problemów wymagających ingerencji w proces obliczeniowy podczas symulacji procesu krystalizacji.

Zastosowanie programowalnych funkcji UDF (*User Defined Function*), pisanych w języku C, pozwala na dalsze rozszerzenie funkcjonalności kodu. Procedury są wywoływane dynamicznie podczas trwania procesu, co pozwala na odczyt zmiennych procesowych, ich obróbkę i zapis do przestrzeni roboczej programu. Każda wielkość pobierana lub wysyłana do programu musi być wyrażona w jednostkach SI. Istnieją dwa rodzaje funkcji UDF: interpretowana i kompilowana.

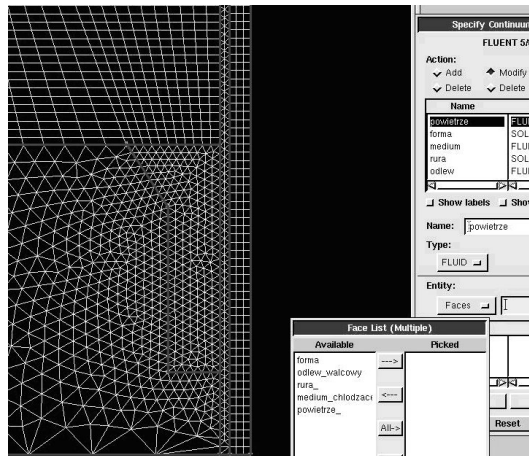
Przesyłana do programu FLUENT w postaci pliku źródłowego funkcja interpretowana UDF kompilowana jest razem z resztą kodu programu symulacyjnego. Jej największą zaletą jest kompatybilność z innymi systemami operacyjnymi i różnymi wersjami pakietu FLUENT. Natomiast do wad należy zaliczyć wolniejszą realizację kodu w porównaniu do funkcji kompilowanej oraz pewne ograniczenia w stosunku do klasycznego języka C (np. niedozwolona jest deklaracja struktur, unii, tablic funkcji i wskaźników do funkcji).

Funkcja kompilowana UDF jest kompilowana niezależnie od środowiska FLUENT i dołączana w postaci biblioteki. Charakteryzuje się dużą szybkością wykonywania, dlatego zalecana jest w przypadkach, gdy wykonuje się częste i skomplikowane obliczenia (np. gdy funkcja wywoływana jest w każdym kroku). Wadą funkcji kompilowanej jest konieczność przebudowy biblioteki w przypadku zmiany wersji oprogramowania, systemu operacyjnego lub typu komputera.

4. Modelowanie procesu krystalizacji stopu aluminium AK9 za pomocą programu FLUENT

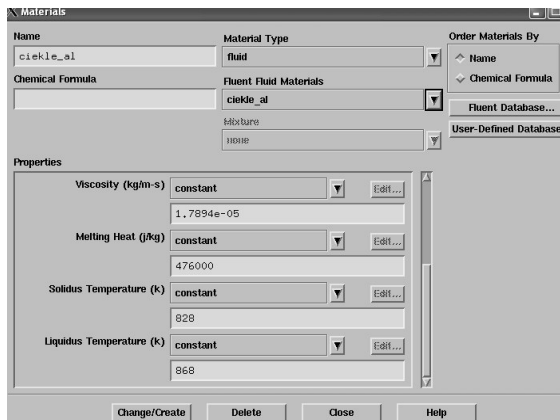
W badaniach symulacyjnych procesu krystalizacji stopu aluminium analizowano wielkość czasu krystalizacji. Rozważając różne ciecze chłodzące dobierano taką, dla której osiąga się możliwie najkrótszy czas krystalizacji. Ponadto badano wpływ warunków chłodzenia na strukturę materiału określoną przez wartość DAS.

Warunki uzyskania jednorodnej struktury stopu w różnych punktach odlewu określono, dobierając symulacyjnie przewodność cieplną masy formierskiej. Obliczenia wykonano dla stopu chłodzonego wodą i olejem. Geometryczny model krystalizacji przedstawiono w postaci dwuwymiarowego przekroju układu odlew-forma, który zbudowano przy użyciu programu GAMBIT zainstalowanego na jednym z superkomputerów (jowisz.cyfronet.krakow.pl) i przesyłano do programu FLUENT. Fragment siatki modelu geometrycznego przedstawiono na rysunku 2.



Rys. 2. Fragment siatki modelu geometrycznego w programie GAMBIT

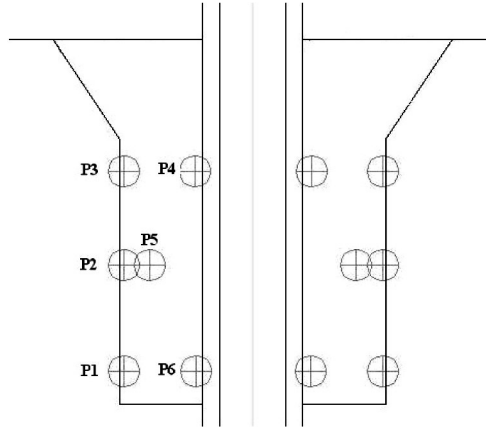
Procedura przygotowania procesu obliczeniowego oraz przeprowadzenie symulacji krystalizacji odlewu obejmowała kilka kroków, takich jak: weryfikacja siatki geometrycznej, wybór modelu (w badanym przypadku jest to model solidification/melting), określenie właściwości materiałów układu odlew-forma, ustalenie warunków brzegowych, wyznaczenie warunków początkowych i przeprowadzenie symulacji. Okno przykładowego wyboru właściwości badanego stopu aluminium AK9 przedstawiono na rysunku 3.



Rys. 3. Przykładowe właściwości stopu aluminium AK9

W czasie badań symulacyjnych rozpatrywano różne warianty chłodzenia. Dla medium chłodzącego, którym była woda i olej, określono odpowiednie wartości parametrów takich jak: gęstość, przewodność cieplna i ciepło właściwe.

Na rysunku 4 zaznaczono sześć punktów odlewu wybranych do obliczeń symulacyjnych.



Rys. 4. Położenie punktów wybranych do obliczeń symulacyjnych

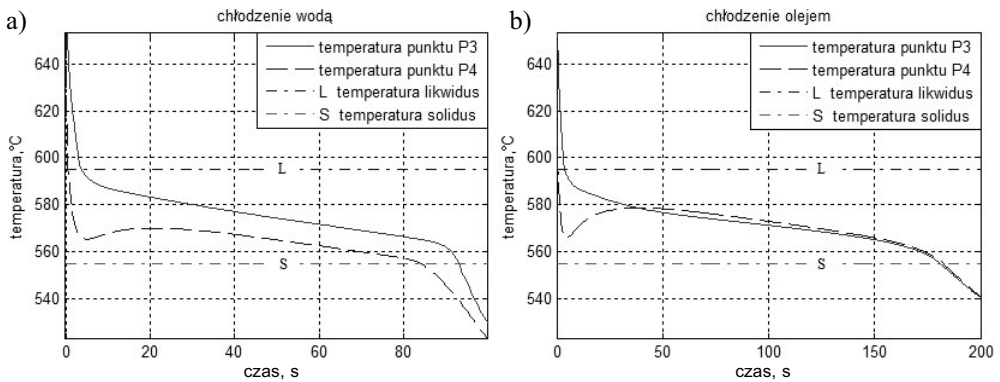
Dla poszczególnych punktów wyznaczano symulacyjnie rozkłady temperatur w czasie krystalizacji odlewu. Analizowanymi symulacyjnie wartościami były czasy osiągnięcia temperatury likwidus t_L , temperatury solidus t_S oraz czasu krystalizacji t_{KR} określonego wzorem:

$$t_{KR} = t_L - t_S \quad (4)$$

Symulacje przeprowadzono dla wartości ciśnienia medium chłodzącego równego 10 kPa. Wyniki symulacji procesu krystalizacji wybranych punktów stopu aluminium chłodzonego wodą i olejem przedstawiono w tabeli 1. Rozkłady temperatur dla wybranych punktów przedstawiono na rysunku 5.

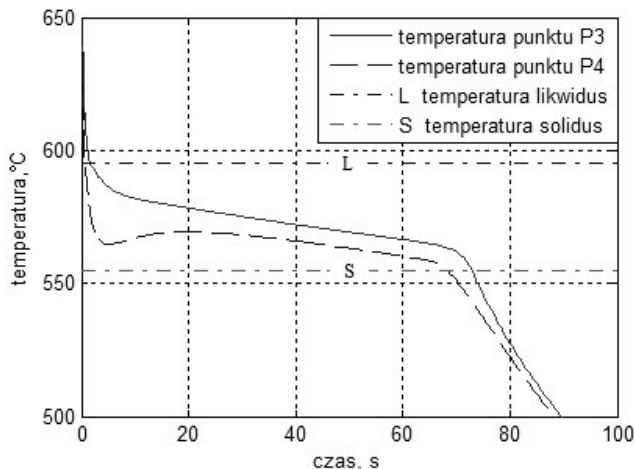
Tabela 1
Czasy krystalizacji wybranych punktów odlewu w [s]

Rodzaj chłodzenia	Badane punkty odlewu					
	P1	P2	P3	P4	P5	P6
Brak	161,25	358	466	480,5	357,75	195,5
Woda, ciśnienie 10 kPa	38	70,25	89,5	83,25	66,75	25,5
Olej, ciśnienie 10 kPa	47	126	177,5	182	124,5	57,5
Woda, ciśnienie 10 kPa, forma o zwiększonej przewodności cieplnej	20,5	51,75	71,5	68	48,5	15,5



Rys. 5. Rozkłady temperatur w punkcie P3 położonym w pobliżu masy formierskiej o standardowej przewodności cieplnej i w punkcie P4 położonym w pobliżu medium chłodzącego: a) wody; b) oleju

Przedstawione wyniki symulacyjne wskazują na istotny wpływ medium chłodzącego na czas krystalizacji stopu. Przy stosowaniu ciągłego chłodzenia otrzymuje się istotne różnice w strukturze materiału w pobliżu medium chłodzącego i w strukturze w pobliżu masy formierskiej. Stosowanie przerw w czasie chłodzenia pozwala na zmniejszenie tych różnic. Dalszą poprawę struktury można uzyskać dokonując zmiany przewodności cieplnej masy formierskiej przez zwiększenie jej wartości. Wyniki otrzymane w czasie obliczeń symulacyjnych zweryfikowano przez porównanie z wynikami otrzymanymi z wytopów eksperymentalnych. Wpływ wartości zwiększonej przewodności cieplnej masy formierskiej na rozkład temperatury w różnych punktach odlewu przedstawiono na rysunku 6.



Rys. 6. Rozkłady temperatur w punkcie P3 położonym w pobliżu masy formierskiej o zwiększonej przewodności cieplnej i w punkcie P4 położonym w pobliżu chłodzenia wodnego

Wykorzystując program FLUENT, można dodatkowo zmieniać warunki chłodzenia w trakcie trwania procesu, a tym samym warunki krystalizacji stopu. Zmiany takiej można dokonać poprzez zmiany ciśnienia medium chłodzącego stosowanego w czasie procesu.

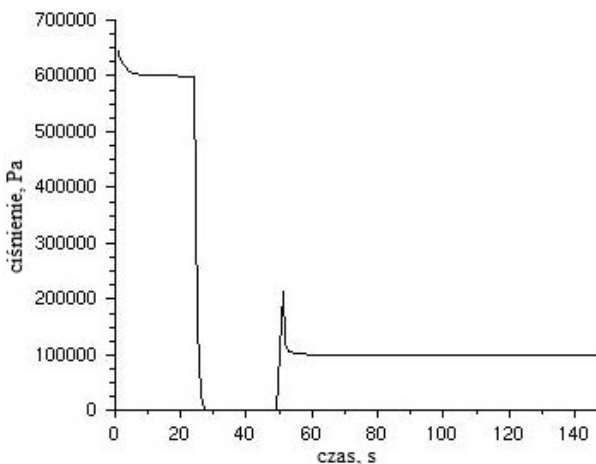
Przykład procedury w programie FLUENT realizującej tak postawione zadanie przedstawiono poniżej:

```
#include „udf.h”
#include „mem.h”

real P, czas;
real t1 = 25, t2 = 50;
DEFINE_PROFILE (zmien_cisnienie, t, i)
{
  face_t f;
  czas = CURRENT_TIME;
  if(czas < t1) P = 600000;
  else if (czas >= t1 && czas < t2) P = 0;
  else P = 100000;
  begin_f_loop(f,t)
  {
    F_PROFILE(f,t,i) = P;
  }
  end_f_loop(f,t);}

```

Zmiany ciśnienia medium chłodzącego obliczonego według przedstawionej powyżej funkcji zamieszczono na rysunku 7.



Rys. 7. Zmiany ciśnienia medium chłodzącego w trakcie trwania symulacji

Przedstawiona metoda prowadzenia obliczeń symulacyjnych może zostać wykorzystana w praktyce przemysłowej do wyboru medium chłodzącego, masy formierskiej oraz określenia warunków chłodzenia w celu uzyskania jednorodnej struktury stopów aluminium.

5. Uwagi i wnioski

Na podstawie przeprowadzonych badań symulacyjnych i eksperymentów wyciągnięto następujące wnioski, które pozwalają na określenie warunków chłodzenia w czasie procesu krystalizacji stopów aluminium:

- Zastosowanie układu chłodzącego w procesie krystalizacji stopu aluminium pozwala na znaczne skrócenie czasu krystalizacji odlewu.
- Przeprowadzanie symulacji programem FLUENT pozwala wybrać odpowiednie właściwości medium chłodzącego, określenie przewodności cieplnej masy formierskiej i czasu krystalizacji w celu uzyskania bardziej jednorodnej struktury stopu aluminium.
- Wykorzystując wbudowane w pakiet FLUENT makrodefinicje (funkcje UDF) użytkownik może zmieniać warunki chłodzenia podczas trwania symulacji, co umożliwia sterowanie procesem zgodnie z zadanym algorytmem. Docelowo, po identyfikacji kilku punktów układu odlew-forma, możliwe będzie obliczenie sterowania optymalnego jego implementacji w postaci funkcji UDF, a następnie wykorzystanie w symulacji procesu krystalizacji odlewu.

Literatura

- [1] Mochnacki B., Suchy J.S.: *Numerical methods in computations of foundry processes*. Cracow, PFTA 1995
- [2] Majchrzak E., Mochnacki B.: *Application of the BEM in the thermal theory of foundry*. Engineering Analysis with Boundary Elements, 1995, No 16
- [3] Fraś E., Kapturkiewicz W., Lopez H.F.: *Macro and micro modelling of the solidification cinetics of casting*. AFS Transactions 1993
- [4] Rappaz M., Gandin Ch.-A., Jacot A., Charbon Ch.: *Modeling of microstructure formation*. Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes – VII, M. Cross, J. Campbell (eds.), TMS 1995
- [5] Kapturkiewicz W., Fraś E., Burbelko A.A.: *Modelling of The Austenitizing Process in Cast Iron With Pearlitic Matrix*. The 5th International Conference Simulation Designing and Control of Foundry Processes, Kraków-Aachen-Sofia, 2006, FOCOMP '06, Kraków 2006
- [6] Marukovich E.I., Branovitsky A.M., Lebedinsky Y.A., Zakharov I.L.: *Grain Growth Modelling For Continuous Casting Ingots of Alsi Eutectic*. The 5th International Conference Simulation Designing and Control of Foundry Processes, Kraków-Aachen-Sofia, 2006, FOCOMP '06, Kraków 2006
- [7] Majchrzak E., Mochnacki B., Szopa R.: *Identification of Micro/Macro Solidification Model Parameters*. The 5th International Conference Simulation Designing and Control of Foundry Processes, Kraków-Aachen-Sofia, 2006, FOCOMP '06, Kraków 2006

- [8] Bieniasz S., Kluska-Nawarecka S., Cetnarowicz K., Nawarecki E., Połcik H.: *Simulation Agent Model in Designing and Control Solidification Casting Process*. The 5th International Conference Simulation Designing and Control of Foundry Processes, Kraków-Aachen-Sofia, 2006, FO-COMP '06, Kraków 2006
- [9] Tadeusiewicz R., Połcik H.: *Applicability of Neural Models For Monitoring And Control Of Selected Foundry Processes*. The 5th International Conference Simulation Designing and Control of Foundry Processes, Kraków-Aachen-Sofia, 2006, FOCOMP '06, Kraków 2006
- [10] Byrski W., Mitkowski M.: *Computer control systems in foundry processes*. The 5th International Conference Simulation Designing and Control of Foundry Processes, Kraków-Aachen-Sofia, 2006, FOCOMP '06, Kraków 2006