

金属快速凝固的非平衡超急速传热模型*

杨院生¹⁾ 童文辉¹⁾ 陈晓明¹⁾ 朱仕学¹⁾ 胡壮麒^{1,2)} 惠希东³⁾

1) 中国科学院金属研究所, 沈阳 110016

2) 中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家(联合)实验室, 沈阳 110016

3) 北京科技大学新金属材料国家重点实验室, 北京 100083

摘要 运用非 Fourier 传热理论建立了金属快速凝固过程中的非平衡传热理论模型, 包括非 Fourier 方程的建立、传热与相变模拟。模拟计算表明: (1) 在溅射激冷条件下, 界面换热系数越大, 界面冷却速度和移动速度也越高。在界面换热系数相同时, 计算得到的界面冷却速度随着固-液界面高度的提高呈现先上升而后下降的变化趋势; 计算得到的冷却速度值明显小于 Fourier 定律的计算值。(2) 在激光加热条件下, 计算的界面移动速度在凝固开始时先急剧增加, 然后渐趋平稳。计算还表明, 金属的过热度及过冷度与其热物性相关。

关键词 快速凝固, 非 Fourier 传热, 非平衡模型, 溅射激冷, 激光表面熔凝

中图分类号 TG111.4

文献标识码 A

文章编号 0412-1961(2003)03-0249-05

TRANSIENT HEAT TRANSFER MODEL FOR RAPID SOLIDIFICATION OF METALS

YANG Yuansheng¹⁾, TONG Wenhui¹⁾, CHEN Xiaoming¹⁾, ZHU Shixue¹⁾, HU Zhuangqi^{1,2)},
HUI Xidong³⁾

1) Institute of Metal Research, The Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016

2) Shenyang National Laboratory for Materials Science, Institute of Metal Research, The Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016

3) State Key Lab. for Advanced Metals and Materials, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083

Correspondent: YANG Yuansheng, professor, Tel: (024)23971728, E-mail: ysyang@imr.ac.cn

Supported by Key Basic Research Projects of The Chinese Academy of Sciences (No.KJ951-B1-704)

and The Science and Technology Foundation of Liaoning Province

Manuscript received 2002-05-27, in revised form 2002-09-09

ABSTRACT Based on the non-Fourier heat transfer theory, non-equilibrium theoretical models during rapid solidification process (RSP) of metals are put forward and simulations are done for melt spinning of pure aluminum and laser surface remelting and solidification of pure nickel and aluminum, which include establishing the non-Fourier equations of the processes, non-Fourier simulation of heat transfer and phase transformation during the processes. Simulation results show that RSPs of the metals is within the range of transient heat transfer and the non-Fourier effects can be characterized by the non-Fourier heat transfer modes: (1) When a droplet falls on the surface of a running roller under the condition of melt spinning, the larger the interface heat transfer coefficient, the faster the interface cooling rate and interface velocity. When the interface heat transfer coefficient is the same, with the solid/liquid interface elevation, the interface cooling rate increases and then decreases, which is different from that obtained by Fourier model. In addition, the calculated cooling rate is less than that by the Fourier model; (2) Under the condition of laser heating, the solid/liquid interface velocity increases rapidly and then becomes slow. The simulation results also show the superheating and undercooling of the metals are related to their thermophysical properties.

KEY WORDS rapid solidification, non-Fourier heat transfer, non-equilibrium model, melt spinning, laser surface remelting and solidification

在金属快速凝固研究中, 传热模型是沿用传统传热学理论及方法导出的, 其理论基础为经典的 Fourier 定律, 相应热传导方程为如下抛物线型 (PHC) 偏微分方程

$$\partial T / \partial t = \alpha \nabla^2 T \quad (1)$$

* 中国科学院“九五”重大基础研究基金 KJ951-B1-704 和辽宁省科学基金资助项目

收到初稿日期: 2002-05-27, 收到修改稿日期: 2002-09-09

作者简介: 杨院生, 男, 1956 年生, 研究员, 博士

式中, T 为温度, K; t 为时间, s; α 为导热系数, m^2/s .

经典 Fourier 定律的物理本质是假定热流量与温度梯度成正比, 热传导是一个速度为无限大的扩散过程. 这表明只要给物体某一点施加加热影响, 其它位置在同一时刻立即就有响应, 这在物理意义上存在局限性. 已经发现, 在接近绝对零度和超急速传热条件下, 热量以热波形式传递^[1], 热传导不符合经典 Fourier 定律. Cattaneo 第一个修正 Fourier 定律中的无穷大热传播速度假定, 推导出了一维空间中的热流速率方程以及热传导系数 λ 和弛豫时间 τ 的动力学表达式; Vernotte 等^[2] 以及 Morse 和 Feshbach^[3] 也进行了类似研究. 他们提出的方程归并成一类称作 Cattaneo-Vernotte 方程或双曲线型 (HHC) 热传导方程

$$\tau \frac{\partial \vec{q}}{\partial t} + \vec{q} = -\lambda \nabla T \quad (2)$$

式中, \vec{q} 为热流密度, W/m^2 ; λ 是热导率, $\text{W}/(\text{m}\cdot\text{K})$; τ 为弛豫时间, s, 即当热梯度施加到物体上后建立温度场所需要的时间. 可见, 当 $\tau \rightarrow 0$ 时, 上述方程即简化为经典 Fourier 方程.

近年来, 非 Fourier 方程在热传导分析中逐渐被采用, Glass 等^[4] 将非 Fourier 热传导模型应用于快速加热; Gembarovic 等^[5] 给出了瞬时脉冲和宽脉冲加热条件下有限平板的温度场分析解; Tang 等^[6] 分析了周期性热流作用下有限介质的非 Fourier 热传导效应; Sadd 等^[7] 用非 Fourier 导热模型研究了阶变加热条件下半无限大固体的熔化.

金属快速凝固时冷却速度可达到 $10^6\text{--}10^9$ K/s 甚至更高, 已经到了超急速传热的范畴, 而金属的非 Fourier 热传导弛豫时间一般为 $10^{-9}\text{--}10^{-11}$ s. 因此, 非 Fourier 热传导模式将对快速凝固过程有一定影响. 但到目前为止, 在快速凝固过程中运用非 Fourier 模型研究凝固和相变问题尚未引起人们的重视.

本文基于 Cattaneo-Vernotte 热传导方程和相变动力学方程, 对在溅射激冷和激光熔凝条件下的金属快速凝固, 建立了非 Fourier 的传热传质模型并进行了数值求

解; 对快速凝固过程中的温度场、冷却速度和凝固热历史等关键问题进行了探讨; 对非 Fourier 效应进行了分析, 并且评述了采用非 Fourier 模型和 Fourier 模型的差异.

1 金属溅射激冷过程中的非 Fourier 传热与相变

1.1 数学模型

单辊激冷制备薄带是典型的溅射激冷过程. 当作以下假设时, 热传导简化为一维非稳态热传导问题, 即: 液滴内无温度梯度, 熔体稳态流动; 忽略与辊轮表面平行方向的传热; 固-液界面存在局部热力学平衡; 熔体与辊轮表面间无相对滑动.

采用 Cattaneo-Vernotte 方程时, 热传导方程如下式所示

$$\tau \frac{\partial q(x,t)}{\partial t} + q(x,t) = -\lambda \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} \quad (3)$$

当能量项采用热焓形式表示时, 能量守恒方程为

$$\frac{\partial q(x,t)}{\partial x} + g(x,t) = -\frac{\partial \rho H(x,t)}{\partial t} \quad (4)$$

式中, ρ 为密度, kg/m^3 ; H 为热焓, J/mol ; g 为源项, 在本工作中, g 恒等于 0.

给定边界条件和初始条件, 对方程进行无量纲变换, 利用 MacCormack 显式校正-预测格式^[8] 对金属 Al 进行了数值计算. 计算所用的工艺参数如下: 辊速为 34.5 m/s, 熔体过热温度为 50 K, 液滴高度为 35 μm , 长度为 4 mm. 材料的热物理性质见表 1.

1.2 计算结果及分析

计算结果表明, 溅射激冷过程中薄带不同部位处的固-液界面的高度不同. 图 1 为用 HHC 方程计算得到的不同界面换热系数时 Al 在溅射激冷过程中固-液界面高度 H_i 与到左边界距离 d 的变化规律, 为对比, 图中同时给出了用 PHC 方程计算的结果. 从图可见, 无论采用 HHC 方程还是 PHC 方程, 在液滴落到辊轮表面相同时间后, 界面换热系数 h 越大, 界面高度值 H_i 越大. 当界面换热系数 $h = 5 \times 10^5 \text{ W}/(\text{m}^2\cdot\text{K})$ 时, 利用两种传热模

表 1 纯金属 Al, Cu 和 Ni 的热物理性质

Table 1 Physical properties for the pure metals used in the calculation

Metal	T_m	L	ΔH_m	λ_l	λ_s	$c_{p,l}$	$c_{p,s}$	ρ_l	ρ_s	α_l	α_s	$\Delta H_m/RT_m^2$	$\Delta S/R$	v_s	μ_k
	K	J/kg	J/mol	W/(m·K)	W/(m·K)	J/(kg·K)	J/(kg·K)	kg/m ³	kg/m ³	m ² /s	m ² /s	K ⁻¹		m/s	m/(s·K)
Al	933.6	3.97	1.05	105	210	1080	1180	2390	2550	4.1	7.0	14.4	1.35	4688	1.74
Cu	1356.0	2.00	1.30	170	244	495	473	8000	8900	4.3	5.8	8.5	1.15	3485	0.94
Ni	1728.0	2.92	1.70	43	74	620	595	7900	8900	0.9	1.4	6.9	1.19	4036	0.85

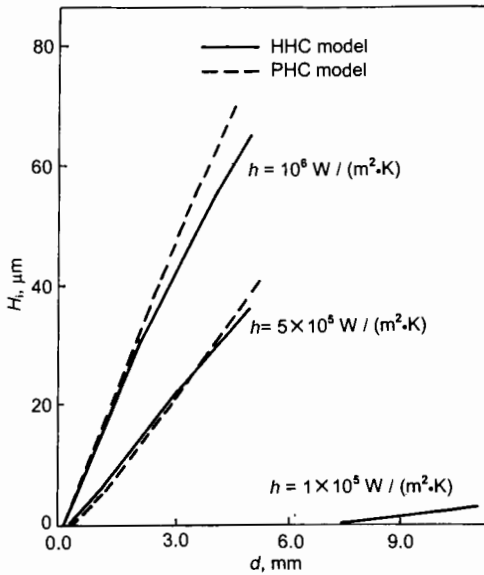


图 1 不同界面换热系数时 Al 在喷射激冷过程中固 - 液界面的高度 H_i 与到左边界距离 d 的变化曲线

Fig.1 Interface location d as a function of distance from the upstream meniscus H_i for aluminum spun on a copper wheel (HHC model—non-Fourier Model, PHC model—Fourier model)

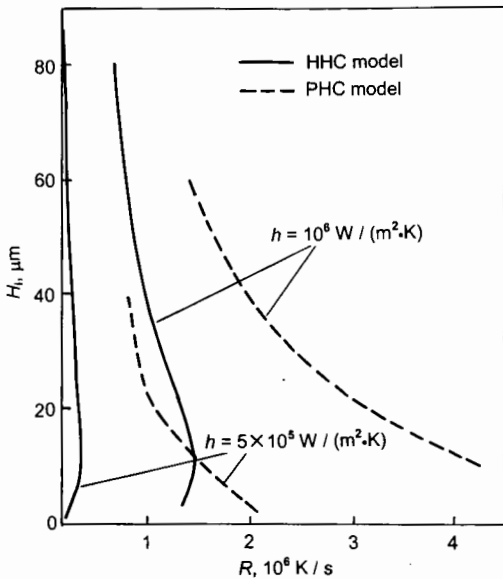


图 2 固 - 液界面冷却速度 R 与界面高度 H_i 的关系

Fig.2 Local cooling rate R at the interface as a function of distance from the wheel H_i for aluminum spun (HHC model—non-Fourier model, PHC model—Fourier model)

型计算的结果几乎相同,但是当 $h = 10^6 \text{ W}/(\text{m}^2\cdot\text{K})$ 时,利用 Fourier 定律计算得到的固 - 液界面高度在距离左边界 2 mm 以上时比利用非 Fourier 定律计算得到的数值明显偏大.

图 2 为固 - 液界面冷却速度 R 与界面高度 H_i 的关系. 界面换热系数越大, 界面冷却速度也越大. 对同一界面换热系数, 按照非 Fourier 模型计算得到的界面冷却速度 R 随着固 - 液界面高度 H_i 的提高先增加而后降低. 这可以解释为: 在凝固的最初阶段熔体处于过热状态, 仅靠近辊轮表面很薄的一层冷却到熔点以下, 固 - 液界面前沿液相一侧的温度梯度非常大, 所以此时冷却速度是比较低的; 随着凝固层不断增大, 熔体过热度越来越低, 固 - 液界面前沿液相一侧的温度梯度也相应减小, 从而导致冷却速度增加. 因此, 在凝固开始时冷却速度的升高与熔体的过热有关. 当凝固层厚度进一步加大, 凝固层热阻增加使冷却速度下降. 而利用 Fourier 定律计算得到的冷却速度只是随界面距离增大而降低. 另外值得注意的是, 在大界面换热系数时, 用 Fourier 定律计算得到的冷却速度值明显大于用非 Fourier 定律计算得到的数值, 其原因在于传播速度为无限大的热量扩散模型相对于热波模型而言会导致较高的冷却速度.

2 激光加热过程中金属的非 Fourier 传热与相变

2.1 数学模型与计算方法

考虑一有限厚度的金属平板被脉冲激光加热熔凝, 采用非 Fourier 传热模型时控制方程为

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{1}{\lambda} \left[g(x, t) + \frac{\alpha}{c^2} \frac{\partial g}{\partial t} \right] \quad (5)$$

式中, c 为热波传播速度, m/s .

在固 - 液边界上, 能量和溶质守恒方程为

$$\rho L \frac{d^2 Y_i}{dt^2} = \left(\frac{\partial q}{\partial Y_i} \frac{dY_i}{dt} + \frac{\partial q}{\partial t} \right)_l - \left(\frac{\partial q}{\partial Y_i} \frac{dY_i}{dt} + \frac{\partial q}{\partial t} \right)_s \quad (6)$$

式中, L 为熔化潜热, J/kg ; Y_i 为界面位置变量; 下标 i 表示固 - 液界面, s 和 l 分别代表固相和液相.

对纯金属而言, 界面非平衡动力学条件可以采用 Turnbull [9] 和 Jackson [10] 根据碰撞生长理论提出的如下动力学关系

$$v_i = \beta (D_0 / \delta) \exp \left(- \frac{\Delta G_{am}}{kT_i} \right) \left[1 - \exp \left(- \frac{\Delta H_m \Delta T_i}{kT_i T_m} \right) \right] \quad (7)$$

式中, v_i 为界面移动速度, m/s ; D_0 为熔体的自扩散系数; δ 为界面厚度; ΔG_{am} 为分子迁移激活能; ΔH_m

为熔化热; T_i 和 ΔT_i 分别为界面温度和界面过冷度; β 为 Cahn 等^[11] 引进的考虑分子穿越界面和分子不对称趋向的系数, 一般为 1; k 为 Boltzmann 常数; T_m 为平衡熔点温度.

给定初始条件和边界条件后, 进行无量纲变换, 采用二阶精度的 Von Neumann 隐式格式离散后, 对金属 Al 和 Ni 进行数值计算. 计算所得基底厚度为 $50 \mu\text{m}$, 远大于熔化层厚度. 激光热流密度 $q=1.5 \times 10^{11} \sim 5.0 \times 10^{11} \text{ W/m}^2$, 辐照时间为 35 ns. 材料热物性亦见表 1.

2.2 计算结果及讨论

2.2.1 界面移动速度 激光加热条件下金属 Al 的界面移动速度随界面高度的关系曲线如图 3 所示. 激光开始辐照后很短时间内, 金属表面开始熔化. 随着熔化层不断加深, 熔化速度达到最大值, 3 种热流密度 q 值下的熔化速度达到最大值时的界面高度均小于 $1.0 \mu\text{m}$. 当激光辐照结束后, 熔化速度急剧下降, 直到界面处流入和流出的热流密度相等, 熔化过程即转变为凝固过程. 采用非 Fourier 定律计算的界面移动速度在凝固开始时先是显著增加, 而后随着熔池深度的减小平稳增加. 激光的热流密度对快速熔凝过程的影响显著, 随着热流密度的增大, 最大熔化深度、最大熔化速度及对应的熔池深度都增大了, 而凝固后期界面移动速度却减小了. 与采用 Fourier 方程模拟 (由于篇幅所限, 不再列出计算结果) 相比, 两者对熔化计算的结果基本相同, 但是, 对凝固过程中界面移动速度计算的结果有所不同. 在 3 种热流密度作用下, 采用非 Fourier 定律计算的界面移动速度值均比用 Fourier 定律计算的数值大.

2.2.2 过热度 and 过冷度 图 4 为金属 Ni 和 Al 激光熔凝过程中的过热度和过冷度随界面高度的变化曲线. 可

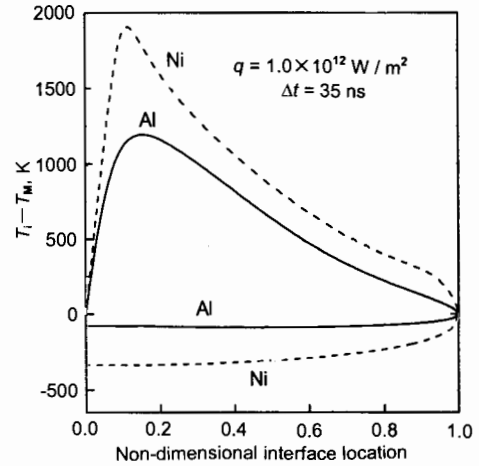


图 4 金属 Ni 和 Al 激光熔凝过程中的过热度和过冷度随界面高度的变化

Fig.4 Deviation of the interface temperature from its equilibrium value as a function of the solid/liquid interface location non-dimensionalized by the maximum melt depth (HHC model)

见, 在同样的热流密度 ($q = 1.0 \times 10^{12} \text{ W/m}^2$) 条件下, Ni 在熔化过程中达到的过热度较高, 这说明金属熔点的高低和熔化动力学系数对熔化过程起着重要的作用. 在凝固过程中过冷度的变化遵循相似的规律, Ni 的过冷度明显较大. 与 Fourier 定律计算得到的结果相比, 采用非 Fourier 方程计算的 Al 和 Ni 的过热度均较大; 两种模型计算得到的 Al 的过冷度相近, 而非 Fourier 方程计算的 Ni 的过冷度明显偏大.

3 结论

(1) 金属快速凝固时冷却速度属于超急速传热的范畴, 非 Fourier 热传导模式可以表征快速凝固中的非 Fourier 影响. 运用 Cattaneo-Vernotte 热传导方程和相变动力学方程, 建立了金属在溅射激冷和激光熔凝条件下快速凝固的非 Fourier 传热模型.

(2) 金属在溅射激冷条件下快速凝固, 无论是采用 Fourier 传热方程还是采用非 Fourier 传热模型计算都表明: 在液滴落到辊轮表面相同时间后, 界面换热系数越大, 界面冷却速度和移动速度也越高. 对同一界面换热系数, 按照非 Fourier 模型计算得到的界面冷却速度随着固-液界面高度的提高先上升而后下降; 而利用 Fourier 定律计算得到的冷却速度仅随界面距离增大而降低. 利用 Fourier 定律计算得到的冷却速度在大界面换热系数时要比用非 Fourier 定律计算得到的数值明显增大, 其原因在于传播速度为无限大的热量扩散模型相对于热波模型将导致较高的冷却速度.

(3) 在激光加热条件下, 采用非 Fourier 定律计算的界面移动速度在凝固开始时先是急剧增加, 此后又逐渐平

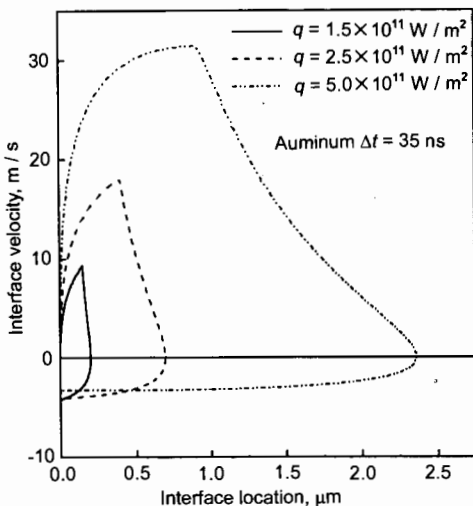


图 3 激光加热条件下金属 Al 的界面移动速度与界面高度的关系

Fig.3 Interface velocity during laser surface melting of pure aluminum vs the solid/liquid interface location for three laser fluxes (HHC model)

稳地增加。不同金属的过热度 and 过冷度因其热物性不同而不同。采用非 Fourier 定律计算的界面移动速度值普遍比用 Fourier 定律得到的计算值偏大，两者计算的过热度 and 过冷度也存在差别。

参考文献

- [1] Joseph D D, Preziosi L. *Rev Mod Phys*, 1990; 62: 375
- [2] Vernotte P. *Compt Rend Acad Sci*, 1958; 246: 3154
- [3] Morse P M, Feshbach H. *Methods of Theoretical Physics*. Vol.I, New York: McGraw-Hill, 1953: 119
- [4] Glass D E, Ozisik M N, Kim W S. *Numerical Heat Transfer*, 1990; 18A: 503
- [5] Gembarovic J, Majernik V. *Int J Heat Mass Transfer*, 1988; 31: 1073
- [6] Tang D W, Araki N. *Int J Heat Mass Transfer*, 1996; 39: 1585
- [7] Sadd M H, Didiakie J E. *J Heat Transfer*, 1977; 99: 25
- [8] Anderson D A, Tannehill J C, Pletcher R H. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. Washington D.C.: Hemisphere, 1984
- [9] Turnbull D. In: Gensamer M, Brick R M, Hollomon J H, Cohen M, Zener C, Jackson L R, eds., *Thermodynamics in Physical Metallurgy*, Metals Park, OH: American Society for Metals, 1949: 282
- [10] Jackson K A. In: Ueda R, Mullin J B, eds., *Crystal Growth and Characterization*. Amsterdam: North-Holland Publication, 1974: 21
- [11] Cahn J W, Hillig W B, Sears G W. *Acta Metall*, 1964; 12: 1421