

Ti-1023 合金工业规格铸锭凝固组织的数值模拟研究

王阳阳¹, 刘向宏^{1*}, 王庆¹, 吴江涛¹, 夏勇¹, 赵小花^{1,2}, 付杰^{1,2}

(1. 西部超导材料科技股份有限公司, 陕西 西安 710018)

(2. 西北工业大学 材料学院, 西安 710072)

摘要: 采用有限体积法建立数值模型, 将模拟得到的温度场、流场与实际铸锭的凝固组织建立对应关系, 研究了工业化大规格 Ti-1023 合金铸锭的晶粒生长方向及晶粒形态转变。结果表明: 通过温度梯度分量 $\partial T/\partial r$ 和 $\partial T/\partial x$, 预测的铸锭底部及底部柱状晶的晶粒生长方向(角度)与实际组织的重合度达到 90%以上; 绘制 $G-R$ (温度梯度-凝固速率) 图形: 等轴晶与柱状晶间有较为明显的分界线, 且不同熔炼工艺下, 柱状晶-等轴晶转变的临界参数值 G^* 存在差异。

关键词: Ti-1023 合金; 凝固组织; 数值模拟; 真空自耗熔炼

Ti-1023 合金 (Ti-10 V-2 Fe-3 Al) 是一种典型的近 β 型钛合金, 因其具有高强度、良好的断裂韧性和优异的锻造性能等优点成为航空和军工领域的关键材料, 目前被广泛应用于制造机翼结构件、发动机支架及飞机机身等^[1-3]。在真空自耗电弧熔炼 (VAR) 中, 该合金受限于 Fe 元素的宏观偏析导致的“ β 斑”, 使得所生产的铸锭在空间上发生质量波动^[4-6], 因而极少工程化应用于大型锻件。探索新的熔炼工艺和凝固条件来消除或控制 Ti-1023 合金在凝固过程中的偏析具有重要意义。VAR 生产钛合金铸锭的凝固组织主要是由柱状晶和等轴晶组成^[7-10], 大量研究表明, 柱状晶内元素的偏析程度通常小于等轴晶^[11-14], 且在实际工业化生产中, 等轴晶区会出现各种类型的偏析缺陷。而近年来国内外学者主要针对熔炼参数变化对铸锭成分分布的影响进行了广泛的研究^[15-20], 但对于在 VAR 熔炼过程中钛合金凝固组织方面却鲜有报道。本研究基于有限体积法建立 VAR 熔炼模型, 以工业化制备的大规格 Ti-1023 合金铸锭为研究对象, 研究和预测了不同工艺条件下铸锭的凝固行为。

1 数值模型建立

真空自耗电弧熔炼中, 合金的凝固组织主要取决于熔池中的温度场分布, 而熔池温度场的分布主要取决于熔炼工艺和冷却条件。图 1 为 VAR 熔炼过程示意图, 主要涉及到自耗电极的熔化、熔池流动、铸锭冷却散热及凝固结晶等过程。其中自耗电极的熔化主要取决于电弧输入到熔池的热量, 而影响铸锭冷却散热的最重要的区域是熔融金属池下方的收缩间隙, 即铸锭和坩埚间的传热。基于此, 本文采用实验与模拟相结合的

方法重点研究了 VAR 熔炼过程中熔炼参数对钛合金铸锭凝固组织的影响, 揭示了凝固组织与温度梯度等凝固动力学参数间的关系。

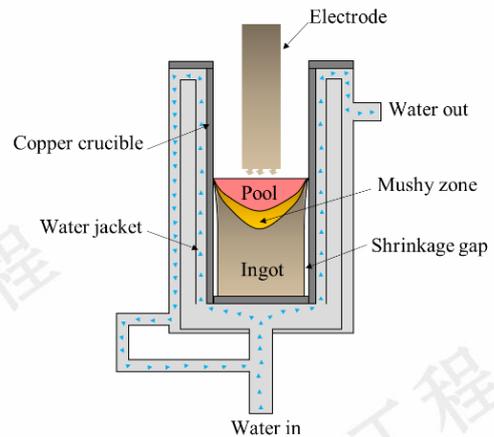


图 1 VAR 熔炼过程示意图

Fig.1 Schematics of VAR process

VAR 熔炼中, 熔池及糊状区中液态金属的流动对金属材料的凝固过程有重要的影响, 其是由质量和动量守恒方程控制。由于金属池中的流动可能是湍流形式, 因此使用雷诺平均 Navier-Stokes 方程来描述熔炼过程中的液相流动。

连续性方程:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{u}) = 0 \quad (1)$$

动量方程:

$$\frac{\partial (\rho \bar{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{u} \bar{u}) = -\nabla P + \nabla \cdot (\mu_{eff} (\nabla \bar{u} + \nabla \bar{u}^T)) - \rho \bar{g} + \bar{F}_L \quad (2)$$

基金项目: 国家重点研发计划(2018YFB1106000)

作者简介: 王阳阳, 女, 1994 年生, 硕士, 中级工程师

通讯作者*: 刘向宏, 男, 1967 年生, 博士, 教授, 西部超导材料科技股份有限公司, 陕西 西安 710018, 电话: 029-86514525, E-mail: xhliu@c-wst.com

式中, ∇P 表示浮力, $\nabla \cdot (\mu_{eff} (\nabla \bar{u} + \nabla \bar{u}^T))$ 表示洛伦磁力,

并使用 $k-\varepsilon$ 模型来封闭雷诺应力, 简化湍流流动的计算。

本文建立的大规格铸锭全尺寸数值模型, 对 VAR 过程中发生的所有物理过程进行了全面分析, 涉及熔池流动、铸锭传热、电磁场及宏观偏析等, 具体模型构建细节参见文献^[21,22]。针对网格“精度-效率”的核心矛盾, 本文将模型简化为二维轴对称形式, 并采用毫米级的细网格精准捕捉铸锭凝固界面前沿特征, 实现精度与效率的平衡; 结合大规格铸锭生产中冷却系统非均匀性的实际工况, 模型设置分区边界条件, 即在铸锭顶部、底部及与侧边收缩熔融金属池下方的区域分别赋予不同换热系数, 以贴近实际生产场景; 此外, 为解决钛合金材料参数随温度变化的动态不确定性, 本文通过实验实测 Ti-1023 合金铸锭全凝固区间的热物理参数, 以降低参数误差、提升模拟计算的基础准确性, 相关参数如表 1 所示, 热导率、动力粘度和比热随温度变化的曲线见图 2。

经过大量的工业级实验验证, 该模型的边界条件

与目前的电弧炉设备匹配良好。因此本文以典型的 $\Phi 520$ mm 规格 Ti-1023 合金为例建立模型, 输入实际熔炼参数, 分析熔炼过程, 并与实际的凝固组织建立联系。

表 1 Ti-1023 合金的物性参数

Table 1 Thermophysical properties of Ti-1023 alloy	
Parameter	Value
Liquid Density/ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	4270
Solid Density/ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	4650
Solidus Temp./K	1890
Liquid Temp./K	1930
Latent Heat/ $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$	3.5×10^5
Electrical Conductivity/ $\text{Amp} \cdot \text{V}^m$	7.6×10^5

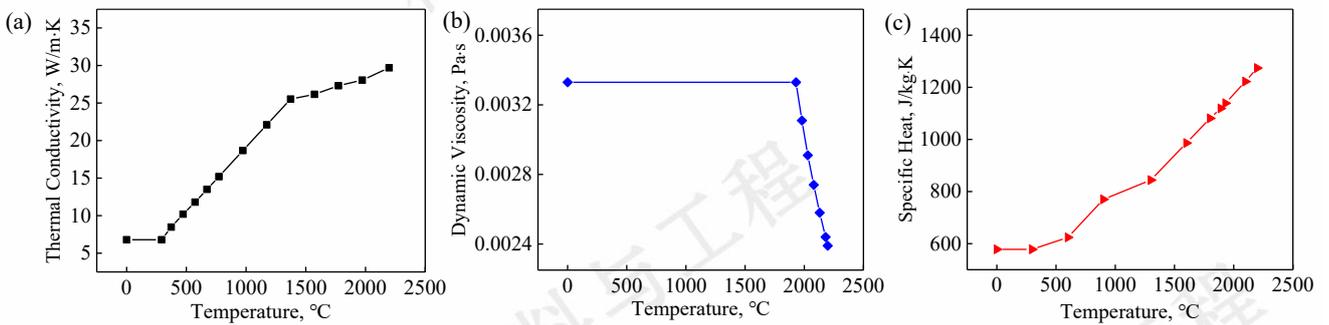


图 2 Ti-1023 合金变温物性参数

Fig.2 Physical properties of Ti-1023 alloy at different temperatures: (a) thermal conductivity, (b) dynamic viscosity, and (c) specific heat

2 实验

选用纯度为 99.7% 的零级海绵钛、钒铝合金和铝豆等原材料按照 Ti-10 V-2 Fe-3 Al 名义成分配料, 完成三次真空自耗电弧熔炼, 其中第三次熔炼设定不同的稳弧磁场 (14A/10 s、8A/10 s、8A/15 s)。由于实际生产重量存在差异, 因此得到 3 个 $\Phi 520$ mm 规格长度分别为 1.2 m、1.6 m 和 2.1 m 的铸锭。

3 个铸锭的纵向对称解剖示意图见图 3。用带锯沿铸锭纵向锯切一个 20 mm 厚的试样片, 再铣削抛光任意一面, 采用腐蚀液 ($\text{HNO}_3 + \text{HF} + \text{H}_2\text{O}$, 体积比 3:1:6) 腐蚀抛光面, 观察低倍组织。

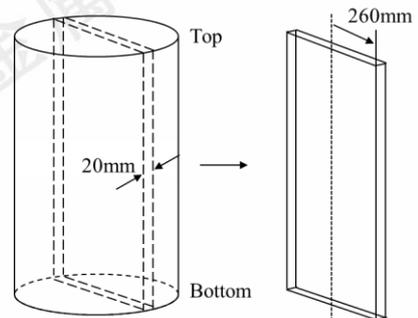


图 3 Ti-1023 合金纵向解剖示意图

Fig.3 Sectional sketch of the cutting positions from the Ti-1023

3 模拟结果及分析

本文根据实际生产模拟了 $\Phi 520$ mm 规格 Ti-1023 合金在 3 种不同稳弧磁场下 (14A/10s、8A/10s、8A/15s) 的 VAR 熔炼过程。铸锭与坩埚间的辐射换热系数均设置为 $300 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}$ 。图 4、图 5 分别为不同稳弧磁场下并经充分冷却后, 近液相线温度下的铸锭温度梯度 G 、凝固速率 R 的模拟结果。温度梯度 G 为单元体积所占位置处两个相互垂直的分量组成的矢量, 具体表达式为:

$$\frac{\partial T}{\partial n} = \left(\left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right)^2 \right)^{0.5} \quad (3)$$

式中, $\partial T/\partial r$ 为垂直于固/液界面的温度梯度, $\partial T/\partial x$ 为固/液界面切线处的温度梯度。三者之间的关系可进一步表示为:

$$\sin(\alpha) = - \frac{\partial T/\partial x}{\left((\partial T/\partial x)^2 + (\partial T/\partial r)^2 \right)^{0.5}} \quad (4)$$

式中, α 为固/液界面与水平面形成的夹角, 即生长前沿角度^[11]。

从图 4 中可以看出, 三种工艺下的温度梯度 G 均呈现边部高、心部低的分布规律, 铸锭边部为 $10000 \sim 12000 \text{ K/m}$, 心部位置为 $400 \sim 600 \text{ K/m}$ 。这是由于钛合金熔点高, 在熔炼过程中需要较高的熔炼电流, 在 VAR 熔炼中期进入熔池的热量增多, 形成较深的熔池, 熔池心部积聚的热量不能及时传导出去, 因而温度梯度较小。而铸锭表面的热量通过熔融金属池下方的收缩间隙被坩埚冷却系统带走, 使得铸锭外围水平方向的冷却速率变大, 因而温度梯度较大。上述这种差异, 使得熔池中部和铸锭表面形成较大的温度梯度差, 这有利于促进柱状晶的生长。靠近铸锭头部位置的 G 范围为 $300 \sim 350 \text{ K/m}$, 这是由于进入补缩后期, 铸锭顶部上方区域散热能力增强, 头部一部分金属液被液封, 且在熔炼中期铸锭边缘形成的凝壳此时会变厚, 使得铸锭和坩埚之间形成一定间隙, 熔池冷却速率变小, 减小了液相中的温度梯度, 这促进了等轴晶的生长。

凝固速率 R 表示固/液界面在单位时间内向液相区域推进的距离, 为冷却速率 V (单元网格体积中温度随时间的瞬时变化率, 即 dT/dt) 与温度梯度 G 的比值。从图 5 中可以看出, 三种工艺下的凝固速率 R 均呈现出边部低、心部高的分布规律, 边部位置 $4.0 \sim 5.0 \times 10^{-5} \text{ m/s}$, 铸锭上 1/2 心部位置为 $5.0 \sim 8.0 \times 10^{-5} \text{ m/s}$, 而铸锭头部相对其他位置大一个数量级为 $4.0 \sim 13.0 \times 10^{-4}$

m/s, 这主要是由于铸锭顶部冷却强度大 (约 1.5 K/s), 温度梯度较小的缘故。在凝固过程中, 凝固速率 R 的增大或减小, 会使固相局部区域的溶质产生贫乏或富集, 造成宏观偏析。

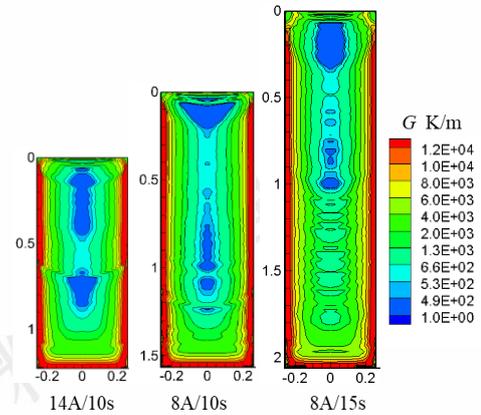


图 4 不同搅拌磁场强度下的铸锭温度梯度分布

Fig.4 Temperature gradient near liquidus distribution of Ti-1023 ingots under different magnetic fields

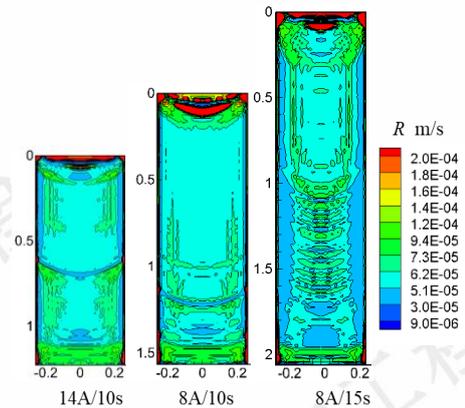


图 5 不同搅拌磁场强度下的铸锭凝固速率分布

Fig.5 Speed of the solidification front near liquids distribution of Ti-1023 ingots under different magnetic fields

4 结果与讨论

4.1 晶粒生长方向预测

图 6 为不同稳弧磁场下制备的铸锭纵剖面宏观组织。三种工艺下铸锭凝固组织均由表层细晶组织、底部三角及铸锭外侧柱状组织、心部等轴组织组成, 由于表层细晶区的厚度范围很小, 因此在本文研究中可忽略。图中已勾勒出等轴晶区和柱状晶区的范围, 为后续晶粒形态转变部分做准备。

对图 4 得到的铸锭温度梯度场进行后处理, 具体

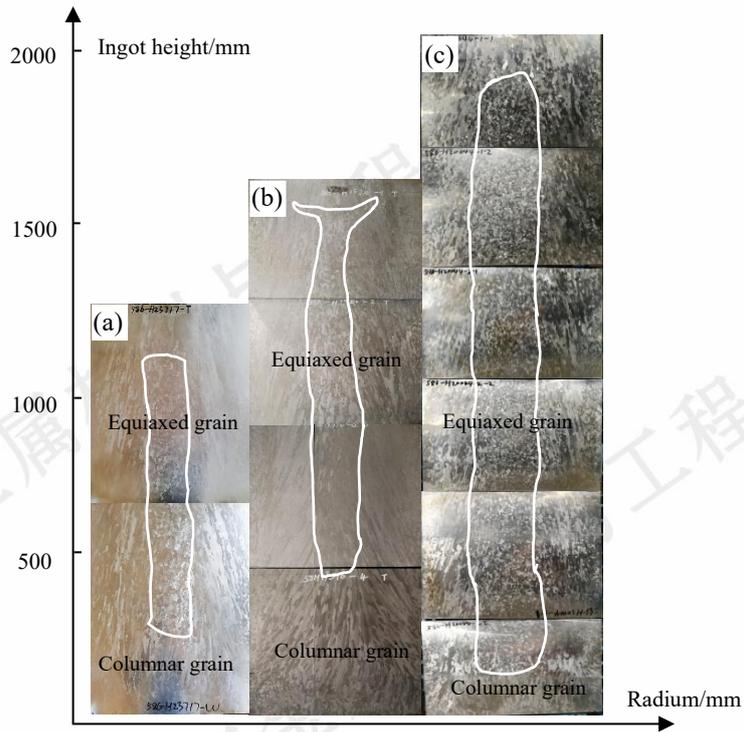


图 6 不同熔炼状态下制备的 Ti-1023 合金铸锭纵截面的凝固宏观组织

Fig.6 Longitudinal macrostructures of the Ti-1023 alloy ingots under different magnetic fields: (a) 14 A/10 s, (b) 8 A/10 s, (c) 8 A/15 s

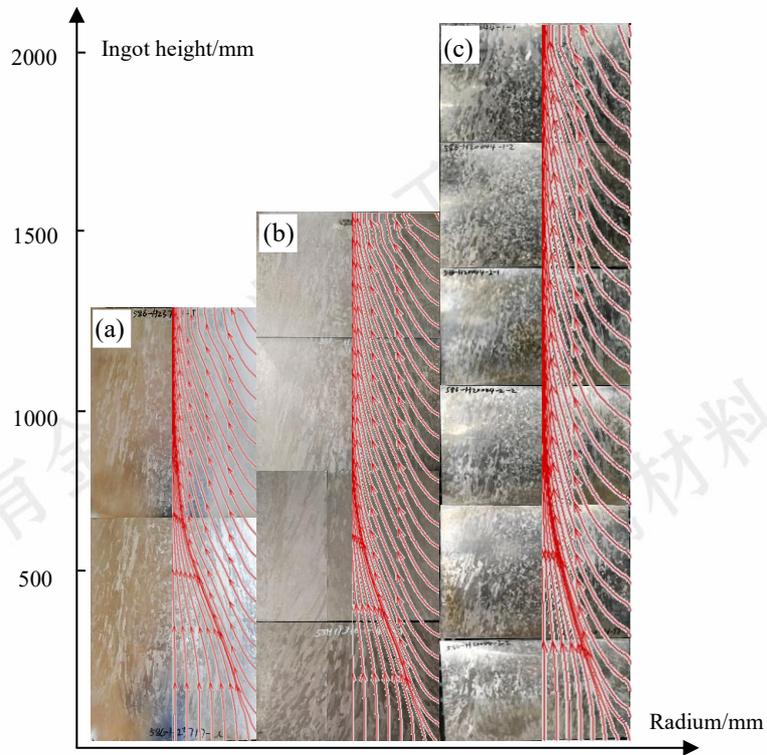


图 7 不同熔炼状态下制备的 Ti-1023 合金铸锭纵截面的晶粒生长方向图

Fig.7 Grain growth direction in longitudinal macrostructures of the Ti-1023 alloy ingots under different magnetic fields: (a) 14 A/10 s, (b) 8 A/10 s, (c) 8 A/15 s

过程为：利用模拟输出的生长前沿角度 α 及公式(4)，终得到铸锭在凝固过程中每个单元格内的温度梯度分量 $\partial T/\partial r$ 和 $\partial T/\partial x$ 。以 $\partial T/\partial x$ 为横坐标、 $\partial T/\partial r$ 为纵坐标绘制图形，得到上述 3 种熔炼工艺下晶粒生长方向的预测图见图 7 所示。进一步地，通过对比模拟与实际情况下铸锭右侧柱状晶生长方向和水平负方向的夹角，来评估数值模拟的准确性，具体如图 8 所示。由图 7、图 8 可知，铸锭底部三角区和顶部的粗大柱状晶、边部竹节状柱状晶的晶粒生长方向（角度）预测能力均达到 90% 以上，这间接证明了本文所建立的有限元模型计算的温度场信息具有一定的准确度。对于铸锭底部三角区，柱状晶生长方向垂直于底部，这侧面反映了在 VAR 熔炼初期热量向坩埚底部传输，此时坩埚底部是影响散热的关键区域。14A/10 s 和 8A/15 s 两种工艺下的底部三角区柱状晶范围较小，以及 8A/15 s 工艺下边部竹节状柱状晶预测的晶粒生长方向均与实际情况存在一定偏差，这主要考虑是实际生产过程中坩埚底部、铸锭边部的散热条件存在差异。

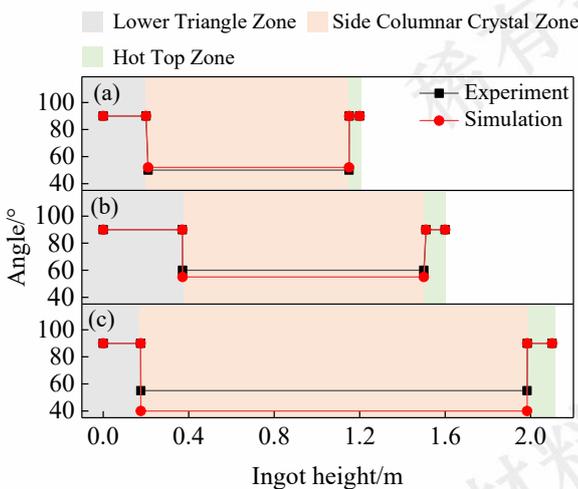


图 8 实际与模拟预测的铸锭晶粒生长方向对比
Fig.8 Comparison of the actual and simulated predicted grain growth directions of ingots: (a) 14 A/10 s, (b) 8 A/10 s, (c) 8 A/15 s

4.2 晶粒预测

对于钛合金凝固组织的预测，除了晶粒生长方向，还需考虑到晶粒形态。钛合金的凝固组织通常是由柱状晶和等轴晶组成。等轴晶在柱状晶前沿形核长大，并阻碍柱状晶的生长，最终使组织发生柱状晶向等轴晶转变（CET）。CET 转变受热力学和凝固理论基本原理的支配，而目前的数值模拟模型正是以此为基本出发点的。虽然该方法已经取得显著进展，但综合来看仍存在一定问题：可复现实验结果，但预测性差；不同成分

通过编写相关程序，将温度梯度 G 进行分解，最合金的扩展性差；同成分合金参数调整难度大；同时由于计算模型的限制，离实际的工业化应用尚有一定距离。

鉴于此，本文提出了一种新的研究思路，即基于所建立的数值模型得到铸锭在实际熔炼参数下对应的温度场、流场信息，将铸锭单元格内的凝固动力学信息与实际的凝固组织建立对应关系，构建 $G-R$ 形态图谱（即温度梯度-凝固速率），以此得到 CET 转变的临界参数值。具体操作流程见图 9 所示。

对上述 3 种熔炼工艺下的凝固组织（图 6）及模拟输出的凝固信息（图 4、图 5）按照图 9 所示流程进行处理，得到每一个单元格内的坐标信息、凝固动力学信息及凝固组织信息。以温度梯度 G 为横坐标、凝固速率 R 为纵坐标绘制包含等轴晶和柱状晶区的 $G-R$ 图如图 10 所示。从图中可以看出，在 $G-R$ 图中，等轴晶区呈现低 G 高 R ，柱状晶区呈现高 G 低 R ，两个晶区间有较为明显的分界线，以此得到不同熔炼工艺下的临界温度梯度 G^* 和临界凝固速率 R^* 。由上可知，不同熔炼工艺下，Ti-1023 合金铸锭 CET 转变的临界参数值（即 G^* 、 R^* ）存在差异，对于温度梯度 G ， G^* 分别为 1800K/m、1800K/m 和 2100K/m，而对于凝固速率 R ，图中两种晶区间并未有明显的界线，均大于 $5.0 \times 10^{-5} \text{m/s}$ 。因而可知温度梯度 G 是影响 Ti-1023 铸锭凝固组织转变的关键参数，这与相关的研究成果相吻合^[23]。

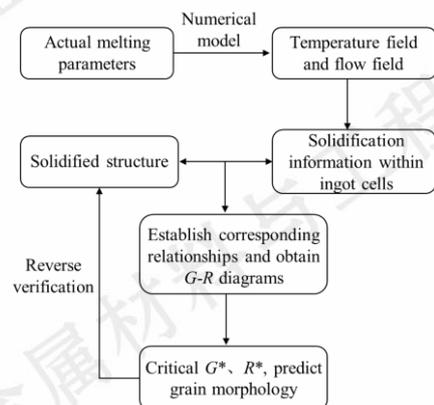


图 9 晶粒形态预测流程图

Fig.9 Flowchart for grain morphology prediction

为了验证上述临界参数值的准确性，根据 G^* 进行反向验证，即当 $G < G^*$ 时，凝固组织为 100% 等轴晶，当 $G \geq G^*$ ，凝固组织为 100% 柱状晶，其余区域均视为中间过渡区。3 种熔炼工艺下对应凝固组织形貌见图 11 所示。从图中得知，无论是晶粒分布位置或是形貌，都与图 6 所示的实际铸锭纵截面的宏观组织吻合良好。

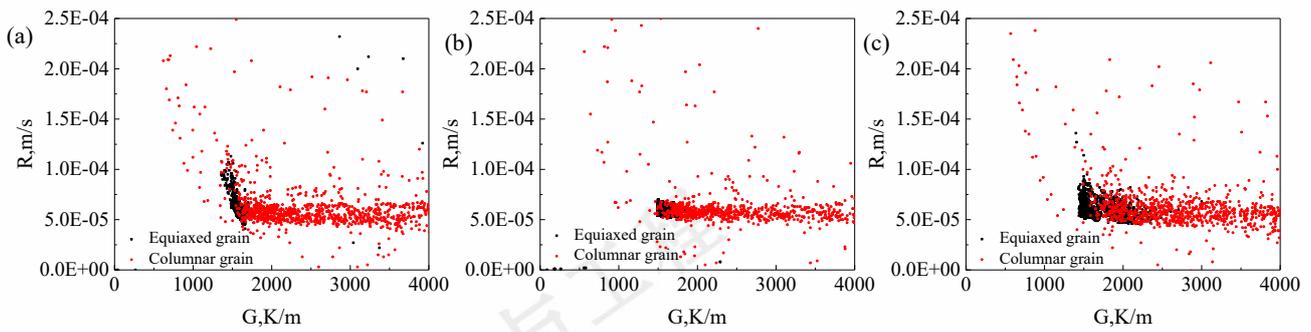


图 10 晶粒形态分布图谱 ($G-R$)

Fig.10 Map of the distribution of different morphological zones ($G-R$): (a) 14 A/10 s, (b) 8 A/10 s, (c) 8 A/15 s

由上述分析可知，虽然 Ti-1023 合金铸锭的 CET 转变临界参数值 G^* 、 R^* 不唯一，但对于相近的熔炼工艺，其 CET 转变的临界参数值一致，可借助本文的研究工作起到一定的预测效果。

进一步地，本文围绕钛合金铸锭凝固组织与温度梯度等凝固动力学参数间的关联展开研究，已初步实现对铸锭晶粒生长方向及 CET 转变位置的预测。但受限于篇幅与研究侧重点，尚未针对晶粒度这一关键指标开展深入分析，后续将该内容作为核心研究方向推进。

晶粒生长方向（角度）与实际铸锭的重合度达到 90% 以上：

3) 绘制 $G-R$ （温度梯度-凝固速率）图并获取了不同工艺下 CET（柱状晶-等轴晶）转变的临界温度梯度 G^* ，该值是影响 CET 转变的关键参数，且随工艺不同而变化。

参考文献 References

- [1] Weiss I, Semiatin S L. *Materials Science and Engineering A*[J], 1998, 243(6): 46
- [2] Huang Lijun(黄利军), Qi Lichun(齐立春), Liu Changkui(刘昌奎) et al. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*(中国有色金属学报)[J], 2010, 20(10): 4
- [3] Zeng W D, Zhou Y G, Yu H Q. *Journal of Materials Engineering and Performance*[J], 2000, 9(2): 222
- [4] Shi Puying(史蒲英), Liu Xianghong(刘向宏), Li Jianwei(李建伟) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程) [J], 2023, 52(5):1925
- [5] Zhao Yongqing(赵永庆), Zhou Lian(周 廉) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程) [J], 2005, 34(4):531
- [6] He Yongsheng(何永胜), Hu Rui(胡 锐) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程) [J], 2017, 46(10):5
- [7] A. Kermapur, W. Wang, P.D. Lee. *Materials Science and Technology*[J], 2003, 35(19):859
- [8] Laurentiu N. *Metallurgical and Materials Transactions B*[J], 2014, 45(2): 44
- [9] H.B. Dong, P.D. Lee. *Acta Materialia*[J], 2005, 69(52): 659
- [10] Kou H C, Zhang Y J, Li P F, et al. *Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2014, 43(7): 1537
- [11] Yang Z J, Zhao X H, et al. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*[J], 2010, 20(10): 6

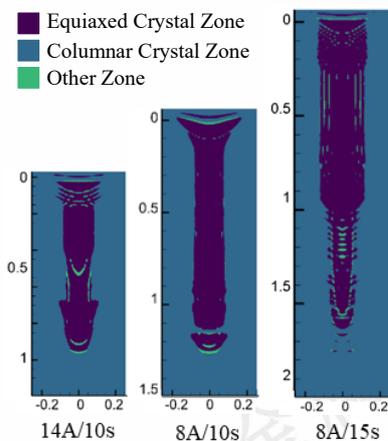


图 11 预测的晶粒形态图

Fig.11 Distribution map of different morphological zones of the predicted Ti-1023 ingots

5 结论

1) 采用有限体积法建立数值模型并自测材料物性参数，对 VAR 熔炼过程中的温度场、流场进行分析，建立与实际铸锭凝固组织间的联系；

2) 根据模拟得到铸锭每个单元格内的温度梯度分量 $\partial T/\partial r$ 和 $\partial T/\partial x$ ，预测的铸锭底部及边部柱状晶的

-
- [12] Chen Zhanqian(陈战乾), Gao Qi(高 颀), Liu Xin(刘 新) *et al.* *Titanium Industry Progress*(钛工业进展)[J], 2003, 20(4):56
- [13] Leder M O, Kondrashov E N. *Russian Metallurgy*[J], 2016, 2016(12):1125
- [14] Mitchell A. *Materials Science and Engineering A*[J], 2005, 413(12):10
- [15] Karimi-Sibaki E, Kharicha A, Abdi M, *et al.* *Metallurgical and Materials Transactions B*[J], 2021(2): 98
- [16] Fan Kai(樊 凯), Wu Lingcai(吴林材), Li Junjie(李俊杰)*et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2020, 49(3): 7
- [17] Karimi-Sibaki E, Kharicha A, Wu M, *et al.* *Metallurgical and Materials Transactions B*[J], 2020, 51(4): 222
- [18] Kermanpur A, Evans D G, Siddall R J, *et al.* *Journal of Materials Science*[J], 2004(24): 39
- [19] Zhao X H, Wang J C, Wang K X, *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2023, 52(8): 2676
- [20] Jing Z Q, Sun Y H, Liu R, *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2023, 52(8): 815
- [21] Luo Wenzhong(罗文忠), Zhao Xiaohua(赵小花)*et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2020, 49(3):6
- [22] Wang Yangyang(王阳阳), Liu Xianghong(刘向宏), *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2023, 52(12):4245
- [23] Kondrashov E N, Tarenkova N Y, Maksimov A Y, *et al.* *Journal of Engineering Thermophysics*[J], 2009, 18(1): 80

Numerical Simulation of Solidification Structure in Industrial-Scale Ti-1023 Alloy Ingots

Wang Yangyang¹, Liu Xianghong^{1*}, Wang Qing¹, Wu Jiangtao¹, Xia Yong¹, Zhao Xiaohua^{1,2}, Fu Jie^{1,2}

(1. Western Superconducting Technologies Co., Ltd, Xi'an 710018, China)

(2. Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

Abstract: In this paper, a numerical model was established using the finite volume method to establish a corresponding relationship between the simulated temperature and flow fields and the actual solidification structure of the ingot. The grain growth direction and grain morphology transformation of the industrial-scale Ti-1023 alloy ingot were investigated. The results indicated that the predicted grain growth direction (angle) of columnar grain at the bottom and edges of the ingot coincides with the actual by more than 90% through temperature gradient components $\partial T/\partial r$ and $\partial T/\partial x$; The $G-R$ (temperature gradient-solidification rate) diagram was plotted. There is an obvious boundary between equiaxed and columnar grains, and the critical parameters G^* for columnar-equiaxed crystal transformation varies under different melting processes.

Key words: Ti-1023 alloy; solidified structure; numerical simulation; vacuum arc remelting

*Corresponding author: Liu Xianghong, Ph. D., Professor, Western Superconducting Technologies Co., Ltd, Xi'an 710018, P. R. China, Tel: 029-86514525, E-mail: xhliu@c-wst.com