

論 文

鋳塊におけるマクロ偏析のコンピューター シミュレーション

大 中 逸 雄*・松 本 雅 充*²

Computer Simulation of Macrosegregation in Ingots

Itsuo OHNAKA and Masamitsu MATSUMOTO

Synopsis:

A direct simulation method of macrosegregation in ingots has been proposed, where the flow due to liquid density change by temperature and concentration variation during solidification and due to solidification contraction was postulated to be laminar and darcy flows in the liquid and the solid-liquid coexisting (mushy) regions, respectively. Since the conservation laws of thermal energy, mass and momentum are solved by the direct finite difference method developed by the authors, this method is applicable to ingots with complicated boundary condition. Some numerical examples such as unidirectional solidification of Al-Cu and Fe-C alloys including solidification of a stepped specimen and a large steel ingot showed that the proposed method can fairly accurately simulate at least the macrosegregation caused by the convection and solidification contraction in the mushy region, excluding the channel type segregation. Although the accuracy of simulation of the macrosegregation in large steel ingots should be further examined by comparing the simulations with experiments, the tendency of positive segregation could be simulated. Further, it was found that the accuracy of the simulation depends especially on the data of the liquid density and permeability in the mushy region.

Key words: ingot making; solidification; segregation; computer simulation; macrosegregation; fluid flow; darcy flow.

1. 緒 言

鋳塊の凝固時に生じるマクロ偏析は最終製品の機械的あるいは化学的性質などに影響を与えるため、従来多くの研究が行われている。しかし、その多くは実験的研究で理論的研究は必ずしも多くない。

理論的あるいは解析的研究は KIRKALDY ら¹⁾ による逆偏析の一次元解析の後、FLEMINGS ら²⁾ により非常に進歩させられた。すなわち、彼らは流動を考慮した液相濃度と液相率の関係式を導き、固液共存域の流れをダルシー流れと仮定して濃度場を解析した。そして彼らの方法、あるいはより発展させた方法により逆偏析や逆V偏析など主に固液共存域における流動に基づく偏析の解析が種々行われた^{2)~11)13)~18)}。一方、正偏析や負偏析の解析については BURTON ら³⁹⁾ の実効分配係数や高橋ら²⁷⁾ の洗浄効果式を利用する比較的簡便な方法以外に、乱流拡散係数を利用した数値解析がある¹²⁾。

しかしながら、これらの研究は特定のマクロ偏析の生成機構解明のために定常凝固を仮定してなされたものが

多く、いまだに種々のマクロ偏析を統一的、かつ実用的に推定し得る方法は確立されておらず、マクロ偏析の生成機構も十分理解されたとはいえない。

そこで本報告では熱エネルギー、運動量、質量に関する基本保存則を直接解くことにより固相移動と乱流現象を除く、ほとんどの要因を考慮し、かつ複雑な境界条件の場合でも実用的に種々のマクロ偏析を推定し得る可能性のある方法を提案し、いくつかの解析例について検討する。

2. 解 析 方 法

2.1 基礎式

熱エネルギー保存則、質量保存則および運動量保存則が基礎式となる。まず、熱エネルギー保存則の離散化式(差分式)としては前報¹⁹⁾ で求めた式に凝固による発熱項を加えた次式を使用する。

$$T_i = T_i^B + \frac{\Delta t}{(\rho C_P V)_i} Q_{Ti} + \frac{\Delta H}{C_P} \Delta f_{Si} \dots \dots (1)$$

ここで

昭和 61 年 10 月日本金属学会講演大会にて一部発表 昭和 61 年 12 月 15 日受付 (Received Dec. 15, 1986)

* 大阪大学工学部 工博 (Faculty of Engineering, Osaka University, 2-1 Yamadaoka Suita 565)

*2 大阪大学工学部 (現: 東京大学大学院) (Faculty of Engineering, Osaka University, Now Graduate School, University of Tokyo)

$$Q_{Ti} = \sum_j S_{ij} (T_i^B - T_i^B) / R_{ij} \\ - \sum_k (\rho_L C_P f_L S U)_{ik} (\bar{T}^B - T_i^B) \\ + \sum_m (\epsilon \Gamma F S)_{im} ((T_m^B)^4 - (T_i^B)^4) \\ R_{ij} = 1/h_{ij} + d_{ij}^i/\lambda_i + d_{ij}^j/\lambda_j \\ \bar{T}^B = T_j^B (U \leq 0), \bar{T}^B = T_i^B (U > 0)$$

である。

溶質保存則も熱エネルギー保存則と同様にして直接差分法により求められる。すなわち

$$V_i \frac{\partial \bar{\rho} C_i}{\partial t} = - \sum_j (\rho_L f_L S U C_L)_{ij} \\ + \sum_j (\rho_L D_L S)_{ij} (C_{Lj}^B - C_{Li}^B) / d_{ij} \dots \dots (2)$$

ここで

$$\bar{\rho} C_i = \bar{\rho}_s f_s \bar{C}_{Si} + \rho_L f_L C_{Li} \dots \dots \dots (3)$$

である。さらに固相内拡散を無視するか、平衡状態が成立すると仮定すると次式が成立する¹²⁾。

$$\frac{\partial f_s \bar{C}_s}{\partial t} = k \left(C_L \frac{\partial T_s}{\partial t} + a^* f_s \frac{\partial C_L}{\partial t} \right) \dots \dots \dots (4)$$

ここで $a^* = \begin{cases} 0: \text{固相内拡散無視} (D_S=0) \\ 1: \text{平衡凝固} (D_S=\infty) \end{cases}$

である。従つて(2), (3), (4)式から次の前進差分式が得られる。

$$C_{Li} = \left\{ 1 + \frac{\rho_s (1-k) \Delta f_s}{G_{fi}} \right\} C_{Li}^B + \frac{\Delta t}{G_{fi} V_i} \cdot W_{Ci} \\ \dots \dots \dots (5)$$

ここで

$$W_{Ci} = - \sum_j (\rho_L f_L S U)_{ij} (\bar{C}_L^B - C_{Li}^B) \\ + \sum_j (\rho_L D_L S)_{ij} (C_{Lj}^B - C_{Li}^B) / d_{ij} \dots \dots (6)$$

$$G_{fi} = (\rho_L f_L)_i + a^* (\rho_s k f_s^B)_i \dots \dots \dots (7)$$

$$\bar{C}_L^B = C_{Li}^B (U \geq 0), \bar{C}_L^B = C_{Lj}^B (U < 0)$$

である。

質量保存則においては3.1, 3.3で述べるようにAl-Cu合金などでは液相収縮も重要であり、次式を採用する。

$$\frac{V_i}{\Delta t} [(\rho_s - \rho_L) \Delta f_s + (\rho_L - \rho_L^B) f_L]_i \\ = - \sum_j (\rho_L f_L S U)_{ij} \dots \dots \dots (8)$$

左辺第1項が凝固収縮、第2項が液相収縮を示している。

以上で求めた(1), (5), (8)式および前報¹⁹⁾で求めた運動量保存則が基礎式であるが、未知数 T, C_L, f_s, U, P に対し、方程式が不足する。これは固液共存域における温度と溶質濃度の関係を導入することにより解決される。すなわち、状態図の液相線を線型近似し

$$T = T_f - m_L C_L \dots \dots \dots (9)$$

の関係があると仮定する。ここで m_L は液相線温度勾配である。

また固相中の溶質濃度 $\bar{C}_S$ 、分割要素の平均濃度 $\bar{C}$ は次式で求められる。

$$\bar{C}_S = (\bar{\rho}_s^B f_s^B \bar{C}_S^B + \rho_s \Delta f_s C_s) / (\bar{\rho}_s f_s) \dots (10)$$

$$\bar{C} = (\bar{\rho}_s f_s \bar{C}_S + \rho_L f_L C_L) / (\bar{\rho}_s f_s + \rho_L f_L) \dots (11)$$

ここで $\bar{\rho}_s$ は固相平均密度で

$$\bar{\rho}_s = (\bar{\rho}_s^B f_s^B + \rho_s \Delta f_s) / f_s \dots \dots \dots (12 \cdot a)$$

$$\rho_s = \rho_{s0} + a_s k C_L \quad (C_L < C_{LE}),$$

$$\rho_s = \rho_{SE} \quad (C_L = C_E) \dots \dots \dots (12 \cdot b)$$

である。

なお液相密度 ρ_L は次式で近似する。

$$\rho_L = \rho_{L0} + a_{LC} C_L + a_{LT} T \dots \dots \dots (13)$$

2.2 計算手順

上記の基礎式(1), (5), (8), (9)および運動量保存則の式は連立方程式となつてゐるが、完全に連成させると計算コストが膨大となるし、その必要があるかどうか明らかではない。そこで本研究では温度、濃度場と速度場は完全には連成させず、(1), (5), (9)式を $T_i, C_{Li}, \Delta f_{Si}$ に関してのみ連成させることとした。すなわち、(1), (5)式では要素表面流速 U 、密度 ρ_s, ρ_L などは Δt 前の既知量とした。従つて(1), (5), (9)式より Δt 間の固相率増加量 Δf_s は

$$\Delta f_s = (B - \sqrt{B^2 - 4AC}) / (2A) \dots \dots \dots (14)$$

で求められる。ここで

$$A = (\rho V)_i \Delta H$$

$$B = (\rho V)_i [a^* \Delta H + \rho_s C_P m_L (1-k) C_{Li}^B] / \rho_L \\ + (\rho C_P V)_i (T_f - m_L C_{Li}^B - T_i^B) - \Delta t \cdot Q_{Ti}$$

$$C = m_L (\rho C_P) \Delta t \cdot W_{Ci} / \rho_L \\ + a^* [(\rho C_P V)_i (T_f - m_L C_{Li}^B - T_i^B) \\ - \Delta t \cdot Q_{Ti}] / \rho_L$$

である[†]。

開発したプログラムにおける計算手順は以下のとおりである。

(1) プリプロセッサにより作製した要素分割、境界条件、物性値などのデータを読み込み、初期値をセットする。

(2) (1)式で凝固を無視した ($\Delta f_{Si}=0$ とした) 温度 $\bar{T}_i$ および、要素への流入熱量、流入溶質量 Q_{Ti}, W_{Ci} を求める。ただし、後述の解析例では分子拡散の寄与は極めて小さく、乱流拡散のデータもほとんどないので拡散項は無視した。

(3) (14)式で Δf_s を求める。

(4) (1), (5), (10), (11)式などで $T_i, C_{Li}, \bar{C}_{Si}, \bar{C}_i$ などを求める。

[†] 多元系の場合、(7)式の f_L を既知量 f_L^B とすることにより容易に Δf_s を算出できる。

Table 1. Physical properties and boundary conditions used in the numerical examples.

Alloy	Al-4.1%Cu	Fe-0.25%C	Al-4.4%Cu	Fe-1.0%C	Fe-0.19%C
λ (W/(mK))	125.6	41.9	125.6	41.9	41.9
C_P (kJ/kgK)	1.088	0.628	1.088	0.628	0.628
ρ_{S0} (kg/m ³)	2700.0	7270.0	2700.0	7270.0	7270.0
ρ_{L0} (kg/m ³)	2664.9	7000.0	2667.3	9615.9	9615.9
ρ_{SE} (kg/m ³)	3400.0	7270.0	3400.0	7270.0	7270.0
a_S (Eq. (12))	340.0	0.0	340.0	0.0	0.0
a_{LC} (Eq. (13))	2428.0	0.0	2428.0	-80.0	-200.0
a_{LT} (Eq. (13))	-0.3	0.0	-0.3	-1.45	-1.45
ΔH (kJ/kg)	397.7	272.1	397.7	272.1	272.1
μ (mPa·s)	3.0	6.0	3.0	6.0	6.0
m_L (K/%)	3.3939	78.0	3.3939	35.0	78.0
C_E (%)	33.0	4.3	33.0	4.3	4.3
k (-)	0.172	0.32	0.172	0.32	0.32
a^* (Eq. (7))	0.0	1.0	0.0	1.0	1.0
T_f (K)	933.0	1809.0	933.0	1788.0	1809.0
T_E (K)	821.0	1474.0	821.0	1637.5	1474.0
T_P (K)	970.0	1843.0	920.0	1763.0	1818.0
K (m ²)*	A	A	B, D	B, C	C, E
f_{LC}	0.9	—	0.8258(B)	0.7088(C)	0.6(E)
a_1	6×10^{-11}	—	4×10^{-10}	4×10^{-10}	4×10^{-10}
b_1	2.0	—	3.0	3.0	3.0
a_2	2.2356×10^{-7}	—	4.0729×10^{-8}	1.6318×10^{-6}	$9.137 \times 10^{-5}(E)$
b_2	80.047	—	27.155	27.155	27.155
h_a (W/(m ² K))	837.0	418.6	627.9	418.6	2093.0
T_a (K)	293.0	773.0	293.0	903.0	418.0
					773.0

* Permeability $K = a_1 f_L^{b_1}$ for $f_L \leq f_{LC}$ and $a_2 f_L^{b_2}$ for $f_{LC} < f_L < 1.0$. $K = 0.1$ was used for $f_L = 1.0$ in the Case A, B, C and E. D is the case where $f_{LC} = 1.0$ in case B.

(5) 次の要素状態インデックス IDS_i を求める。

$IDS_i = 1$ ($f_S = 0$ の完全液相要素), 2 ($0 < f_S < f_{SC}$ の固液共存要素), 3 ($f_S \geq f_{SC}$ の液相不流動あるいは固相要素)。

(6) $IDS_i = 1, 2$ の要素に対し, 前報¹⁹⁾の方法で速度場を求める。

(7) 上記の計算をタイムステップ Δt ごとに所定時間までくり返す。

次節でいくつかの解析例を示すが, 使用した物性値などを Table 1 にまとめて示す。なお限界固相率 f_{SC} については 0.8 以下のデータが多いが, ここでは 0.999 を使用した結果を示す (1.0 とすると (7) 式の a^* が 0 の時, 不合理な結果となる。また Al-4.1%Cu 合金の逆偏析などでは 0.9 などの共晶凝固に達しない固相率では不自然な結果となる)。

3. 解析例および考察

3.1 Al-Cu 一方向凝固鑄塊の逆偏析

Al 合金を一方向凝固するとチル面に溶質が濃化する逆偏析に関して従来多くの研究がなされている。最近 MIYAGAWA ら¹⁸⁾ は熱伝導による熱移動を考慮してこの逆偏析を解析しているが, 従来の他の研究¹⁾²⁾¹⁷⁾ では液相線および共晶線の移動が仮定されている。また液相密度の温度変化を十分考慮した解析はほとんどない。

そこで長さ 120 mm の Al-4.1%Cu 合金鑄塊を一端から一方向凝固させた場合の解析を行った。なお冷却は外

部温度 $T_a = 293$ K の流体と熱伝達率 $h_a = 837$ W/(m² K) で行われると仮定したが, これは KATO ら¹⁷⁾ の実験における凝固速度に近くなるように設定したものである。また液相密度, 固相密度などは文献 4), 20)~22)などを参照して近似したものである。ミクロ偏析は (4) 式で $a^* = 0$, すなわち, 固相内拡散を無視できるものとした。

結果の一例を Fig. 1 に示す。KATO ら¹⁷⁾ の実測値に対し, 本解析結果はかなり良く一致していることが分かる。逆偏析の生成機構に関しては種々議論されているが^{23)~25)}, 少なくとも固相移動のないデンドライト凝固では凝固収縮による液相移動が第 1 の原因であると言つてよいであろう。また Al-Cu 合金の場合, Cu 濃度の増大と共に液相密度は増大し, 約 10% 以上で固相密度より大きくなり²²⁾ 凝固により膨張が生じることになる。実際には液相密度の増大による液相収縮によりこの膨張は打ち消されると考えられ, (8) 式の液相収縮項を無視すると実測値とは非常に異なった結果となつた。従つてこの場合, 液相収縮も重要である。さらに固相密度も一定とするよりは上記のように濃度により変化させた方が実測値に近くなつた。すなわち, 逆偏析の正確な予測には液相および固相密度の正確なデータ (温度および濃度変化を考慮したデータ) が必要である。一方, 透過率, 凝固速度の影響は比較的少なかった。ただし, 透過率が小さい場合, 圧力が低下し, 気孔が発生しやすくなる。気孔が発生すると収縮流が変化するため偏析も変化する

ことが考えられる。

3.2 段付鋼試験片のマクロ偏析

FLEMINGS ら³⁾ や野村ら¹⁴⁾ は肉厚が急変する場合に生じるマクロ偏析の解析および実験を行っている。これらの解析では液相流動は仮定されており、2次元の溶質分布は求められていない。

Fig. 2 は野村ら¹⁴⁾ が実験に使用した Fe-C 合金試験片寸法と同一のものを下部から冷却した場合の冷却開始後 50 s における流速分布を示している。冷却は下端で

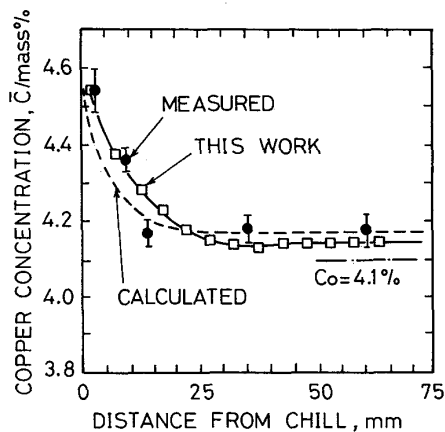


Fig. 1. Comparison of simulated solute distribution with measured and calculated ones by KATO and CAHOON¹⁷⁾ in an Al-4.1%Cu ingot solidified unidirectionally.

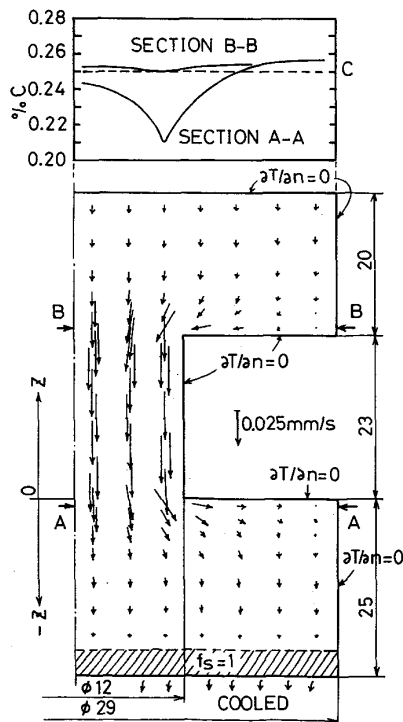


Fig. 2. Simulated fluid flow at 50s after cooling and macrosegregation in a Fe-0.25%C specimen.

外部温度 $T_a=773$ K, 熱伝達率 $h_a=418.6$ W/(m²K) で行われるものとした。また平衡凝固 ((4) 式の $a^*=1$) で、試験片上部には理想的押湯がついており、初期濃度 $C_0(=0.25\%)$ の溶鋼が供給されると仮定した。

Fig. 2 には A-A および B-B 断面における凝固後の溶質分布 (マクロ偏析) も示している。従来の解析では得られていない A-A 断面において大きなマクロ偏析が発生していることが分かる。また Fig. 3 は凝固後の $\pm Z$ 方向 (Fig. 2 参照) における断面平均溶質分布を野村ら¹⁴⁾ の実測および解析結果と比較して示している。彼らは高周波コイルを移動させ凝固速度を約 0.09 mm/s, 固液共存域の幅を約 7 mm にしているが、本解析では一端冷却の条件で解いており、おのおの約 0.2 mm/s, 13 mm と凝固条件は多少異なっている。しかし、本解析結果と彼らの実測値はかなり良く一致していると言つてよいであろう。

このようなマクロ偏析は断面縮少部で凝固収縮流が大きくなり濃化液相が洗い流されるために生じるもので、特に角部で大きくなることが本解析から分かる。またこの負偏析には凝固収縮率、固液共存域の幅、断面縮少率の影響が大きかった。

3.3 水平一方向凝固鋳塊のマクロ偏析

MEHRABIAN ら⁴⁾⁵⁾ や MAPLES ら¹⁵⁾ は水平一方向凝固した Al-Cu 合金鋳塊に生じるマクロ偏析の解析を行っている。しかし、彼らは熱移動を仮定し、液相域に生じる自然対流は考慮していない。

そこで MEHRABIAN ら⁵⁾ の実験に相当する Al-Cu 合金鋳塊の解析を行った。使用した物性値などは Table 1 に示すとおりである。冷却面での冷却は外部流体温度 $T_a=293$ K, 熱伝達率 $h_a=627.9$ W/(m²K) で行われるものと仮定した。この境界条件は彼らの実験結果に近い凝固条件となるよう選定したものである。

Fig. 4 に冷却開始後 400 s における流速分布を示した。完全液相域 (L) では最大流速 0.5 mm/s 程度の自然対流 (密度の温度変化に基づくもの) が生じている。また、固液共存域 (S+L) では主にミクロ偏析 (固相内拡散を無視できるものと仮定している) による密度変化と凝固および液相収縮による流れが生じている。この流速は完全液相域の流速より約 1 オーダー小さくなっている。

このような流速分布は当然のことながら密度変化および透過率に強く依存するものであり、Fig. 4 の結果は透過率 B (Table 1) を使用したものである。MAPLES ら¹⁵⁾ は全液相率に対し透過率 $K=6 \times 10^{-11} f_L^2$ を使用してダルシー流れ解析を行っているが、本解析でも同一

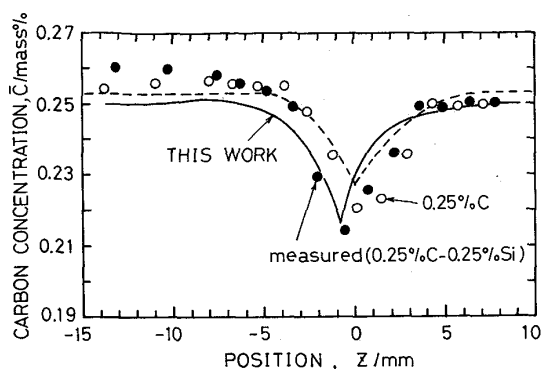


Fig. 3. Comparison of simulated solute distribution with measured and calculated (broken line) ones by NOMURA *et al.*¹⁴⁾ in the Fe-0.25%C specimen shown in Fig. 2.

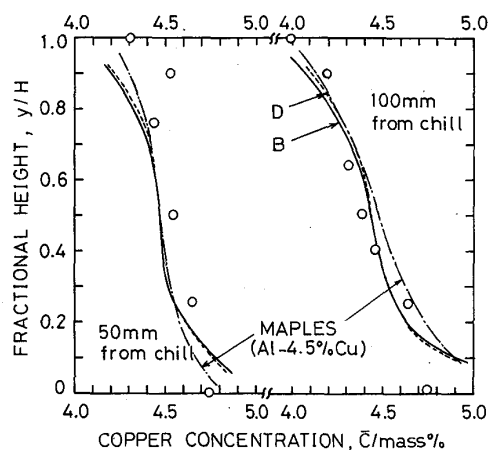


Fig. 5. Comparison of simulated solute distribution with measured one by MEHRABIAN *et al.*⁵⁾ in Al-4.4%Cu ingot. B and D indicate results using permeability B and D (all darcy flow) shown in Table 1, respectively. The calculated result by MAPLES *et al.*¹⁵⁾ is for Al-4.5%Cu ingot.

の透過率を使用すると彼らの結果と同様の流速分布が得られた。

Fig. 5 は冷却面から 50, 100 mm の位置における高さ方向の凝固後の銅濃度分布の解析結果を MEHRABIAN ら⁵⁾の実験結果および MAPLES ら¹⁵⁾の解析結果(彼らは Al-4.5%Cu に対して解析している)と比較したものである。本解析結果は実験結果と比較的良好一致している。またすべてダルシー流れとした場合(D (Table 1 参照)および MAPLES らの結果)と完全液相域での自然対流を考慮した結果(図中実線で示す曲線)はあまり異なっていない。このことは固相率 0.2 程度以下での洗浄効果は少なくとも冷却面に近い部分のマクロ偏析にはあまり影響しないことを示している。

Fe-C 合金を水平方向に一方凝固させた場合には濃

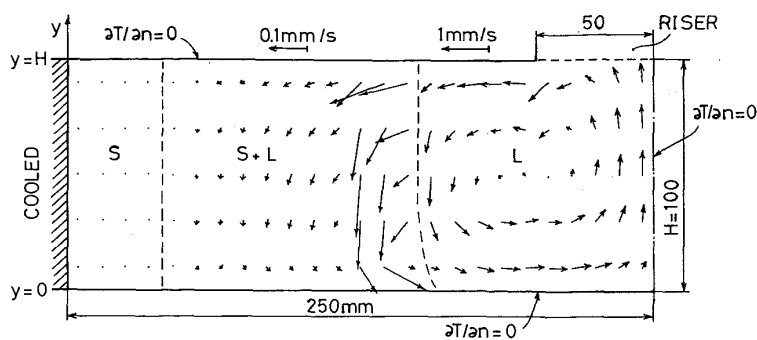


Fig. 4. Simulated fluid flow at 400 s after cooling in a horizontally solidifying Al-4.4%Cu ingot.

化液相の密度は小さくなるので Al-Cu 合金の場合とは逆に鋳塊上部で溶質濃度が大きくなることが予想される。Fig. 6 は Fig. 4 と同一寸法の Fe-1%C 合金を左端から一方凝固させた場合の冷却開始後 500 s における流速分布を示している。冷却条件を Al-4.4%Cu 合金の場合と同一にした場合には固液共存域の幅が狭くなりマクロ偏析があまり生じなかつたため冷却速度を遅くしている。Fig. 4 と Fig. 6 を比較すると固液共存域の流速分布が全く異なることが分かる。また Fe-1.0%C 合金の場合の方が完全液相域(L)の流速は大きく、固液共存域の流速は小さくなっている。これは主に Fe-1%C 合金の方が液相密度の温度変化(Eq. (13)の a_{LT})が大きく、濃度による変化(Eq. (13)の a_{LC})が小さいためである。

なお Fig. 6 は透過率を C (液相率 $f_{LC}=0.7088$ 以上で透過率大)とした場合であるが、透過率 B ($f_{LC}=0.8258$ 以上で透過率大)とした解析結果では固液共存域での上向きの流れがかなり減少した。

このような流動により、凝固後の炭素濃度分布は Fig. 7 に示すようなものとなつた。ここで破線は透過率 B、実線は透過率 C による結果である。

Fig. 7 からまず Al-4.4%Cu 合金の場合と同一の透過率 B を使用すると偏析はごくわずかしき生じないことが分かる。これは主に固液共存域での液相流動が Fe-1%C 合金では小さいためである。

また Fe-1%C 合金では冷却面のごく近くでは鋳塊下部の濃度が高く、離れるに従つて上部の濃度が高くなっている。冷却面近くで鋳塊上部の濃度が低下しているのは自然対流によりデンドライト樹間の濃化液相が洗い流されたためである。特に透過率 C の場合にはこの洗浄効果が冷却面近くで大きく現れ、逆偏析となつていことが分かる。

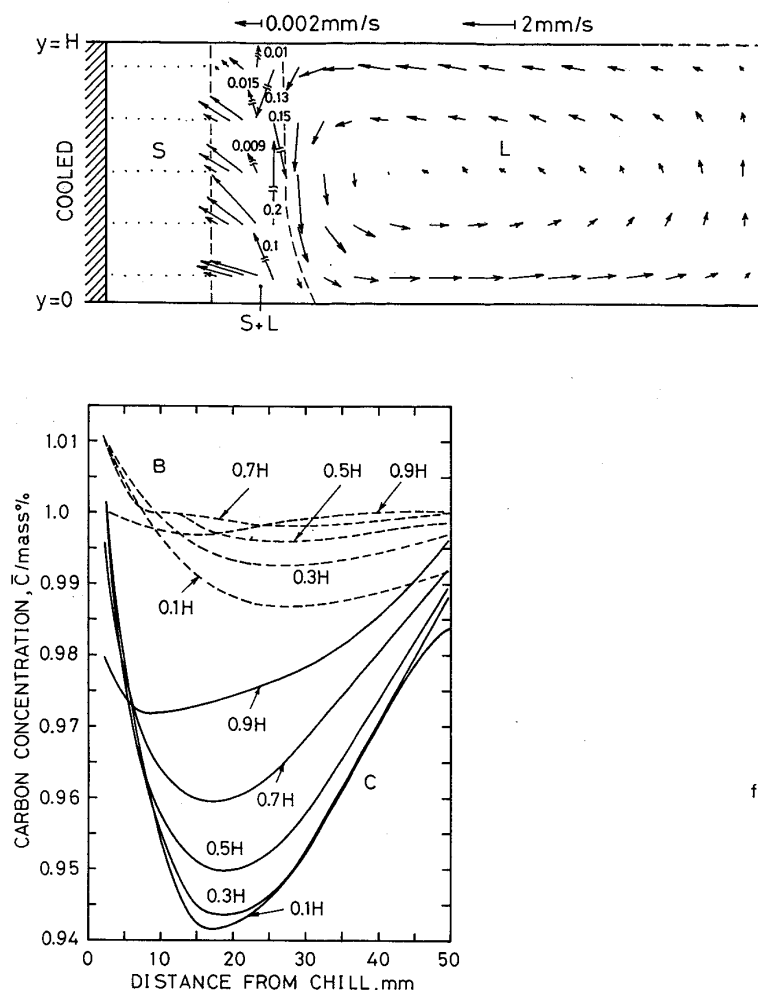


Fig. 7. Simulated solute distribution at various heights in the Fe-1.0%C ingot shown in Fig. 6. Broken and solid lines are results using permeability B and C in Table 1, respectively.

3.4 大型鋼塊のマクロ偏析

大型鋼塊では一般に上部ほど炭素が濃化する正偏析が生じるが底部からの一方向凝固によりある程度軽減できる。しかし、もし側面の断熱状態が悪く側面からの凝固が生じると著しい正偏析が生じることを中田ら²⁶⁾は報告している。

Fig. 8, 9 は中田ら²⁶⁾の実験条件に近い寸法の Fe-0.19%C 鋼塊に生じる流動とマクロ偏析の解析結果を示したものである。ただしこれらの解析では計算コストの点から冷却速度をかなり大きくした。すなわち、底面では一定温度の定盤 ($T_{a1}=373\text{ K}$) と熱伝達率 (h_{a1}) $2090.3\text{ W/(m}^2\text{K)}$ で、側面では外部温度 (T_{a2}) 773 K と熱伝達率 (h_{a2}) $418.6\text{ W/(m}^2\text{K)}$ で冷却されるものとした。また上面は断熱とした。なお液相密度の濃度係数 a_{LC} ((13)式参照) は Fe-1%C の場合と同一の -80.0 とすると濃化液相の流動は極めて小さくなったため、こ

Fig. 6. Simulated fluid flow at 500 s after cooling in a horizontal unidirectionally solidifying Fe-1.0%C ingot. Permeability C in Table 1 was used.

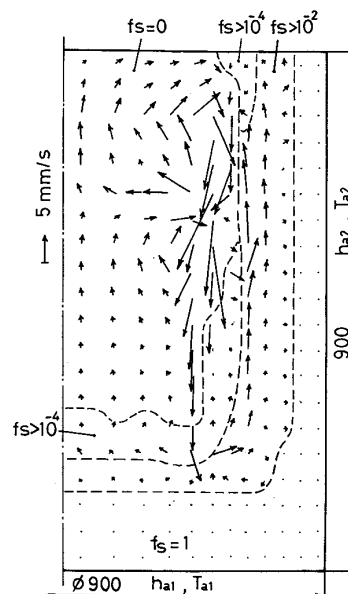


Fig. 8. Simulated fluid flow at 800 s in a Fe-0.19%C ingot.

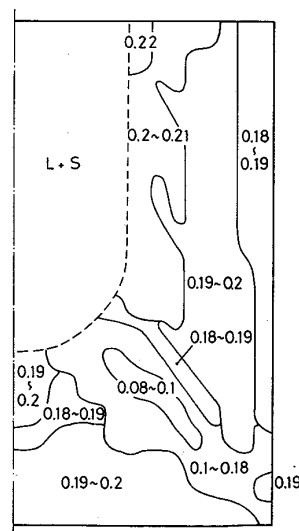


Fig. 9. Simulated macrosegregation at 3 800 s in the Fe-0.19%C ingot shown in Fig. 8. Numbers indicate carbon concentration in mass %.

こでは -200.0 と仮定した。解析に要した CPU は解析時間 3 600 s に対し、823 s であった。

冷却開始後数 10 s の間は側面での下向流による時計まわりの流動が生じたが、固液共存域が発達すると Fig. 8 に示すように複雑な流れとなつた。すなわち、固液共存域では濃化液相の上向きの流れが、また完全液相域ではいくつかの渦が見られる。

このような流動の結果、Fig. 9 に示すマクロ偏析が発生した。側面から上部に行くほど炭素濃度は増大し正偏析となつてはいるが、底面近くでははつきりしていない。また底面コーナー部から 45° の方向に著しい負偏析が発生している。これは温度変化に基づく自然対流による洗浄効果が現れたものと考えられるが、沈殿晶を考慮していない本モデルでも鋼塊下部に負偏析が生じていることは興味深い。

中田ら²⁶⁾の報告によると側面からの凝固が進行し、逆 V 偏析が発生すると鋼塊上部の炭素濃度は 0.5% にも達しているが Fig. 9 では 0.22% 程度でかなり低くなつてはいる¹²⁾。本解析例は平衡凝固と透過率 C を仮定しており、非平衡凝固 (例えば (4) 式の $a^*=0.5$) とし、低固相率域での透過率をより大きくした透過率 E を仮定すると約 3% の値となつた。

鋼塊上部の正偏析は逆 V 偏析線を通じての濃化液相の集積効果¹⁰⁾²⁶⁾と主に完全液相域における自然対流による洗浄効果が原因と考えられている。

逆 V 偏析線を通じて液相が移動する場合、高濃度の液相移動が可能となるため著しい正偏析が生じ得るであろう。本解析では偏析線という優先流路を通じての液相流動ではなく、固液共存域における平均的な流動を取り扱っており、透過率を大きくすれば正偏析も大きくなる。偏析線を考慮しなくても正偏析の程度を推定可能かどうか、また解析における要素分割を細かくし (偏析線直径程度に)、固相率分布にゆらぎを与えることなどにより本解析法により偏析線自体をもシミュレートできるかどうかは今後の課題である。

洗浄効果については高橋ら²⁷⁾の優れた報告があり、連続 casting におけるホワイトバンドも洗浄効果によつて説明されている^{28)~31)}。しかし、洗浄効果はあまり大きくないという報告もある^{32)~34)}。この理由として実験条件や合金によつて液相流動が異なることが第 1 に考えられるが、鋼の場合、対流による濃化液相の移動と洗浄効果を実験的には分離困難であることにも注意すべきである。

洗浄効果は低固相率域 (例えば $f_s \leq 0.35$) での透過率に大きく影響されることが本解析で分かつたが、低固

相率域では溶断等による固相の移動も生じ得るし、その実測^{35)~37)}は容易ではない。しかし、本報に示すような解析結果と実験結果を比較検討することにより、工学的な透過率を決定できる可能性がある。また洗浄効果もより明らかになるであろう。

大型鋼塊では液相域では乱流になつてはいる可能性が大きく、今後 2 方程式モデル³⁸⁾や (2) 式の拡散項の検討が必要である。しかし、この場合にも低固相率域での流動現象のより正確な情報がなければあまり意味がない。従つて、正偏析や負偏析の推定には固相移動をも含む低固相率域での流動現象の解明が今後極めて重要である。

4. 結 論

以上固相移動がない場合のマクロ偏析の直接シミュレーション法を提案した。本方法は直接差分法に基づいており、複雑な境界条件の鋼塊にも適用できるものである。また本方法をいくつかの場合に適用し、実験データと比較したところ、少なくとも固液共存域における対流や凝固収縮によるマクロ偏析 (チャンネル型の偏析を除く) はかなり精度良く推定できることや、従来の解析で得られていない偏析も推定できることが分かつた。また大型鋼塊のマクロ偏析の推定精度については今後さらに検討する必要があるが、正偏析はある程度推定できる可能性がある。また鋼塊下部コーナー部から 45° の方向に負偏析が生じるという興味深い結果が得られた。さらに解析精度を上げるには透過率、液相密度の温度および濃度変化などの正確なデータが必要である。特に低固相率域における固相移動をも含めた流動現象のより正確な理解が必要である。さらに今後本解析法を逆 V 偏析などのチャンネル型偏析のシミュレーションへも発展させることが望まれる。

終わりに本シミュレーション・プログラムの開発に協力されました元大阪大学学生小林慶三氏 (現 (株) 神戸製鋼所) に感謝の意を表します。また計算は大阪大学大型計算センター ACOS 1000 で行われたことを付記する。

記 号

- a^* : (4) 式における係数. $a^*=0, 1$ はそれぞれ Scheil の式, 平衡凝固の式に対応する.
- a_s, a_{LC}, a_{LT} : (12・b), (13) 式における係数
- d_{ij} : 節点 i, j 間の距離 (m)
- d_{ij}^i, d_{ij}^j : 節点 i および j から節点領域 (要素) 界面までの距離 (m)
- f_s, f_L : 体積固相率および液相率 (—)
- f_{LC} : 透過率の変曲点
- f_{sc} : 流動限界固相率 (—)
- Δf_s : タイムステップ Δt 間の固相率増加量 (—)
- h : 熱伝達率 ($W/(m^2K)$)

¹²⁾ Fig. 9 で固液共存域ではさらに濃化しているが、ここで鋼塊上部と呼んでいるのは比較的鋳型に近い部分のことである。

k : 平衡分配係数 (—)
 m_L : 平衡状態図における液相線勾配 (K/mass%)
 t : 時間 (s)
 Δt : タイムステップ (s)
 Z : 座標軸
 C_L, C_S : 液相および固相中の溶質濃度 (mass%)
 $\bar{C}_S$: 固相中の平均溶質濃度 (mass%)
 $\bar{C}$: 要素 (節点領域) の平均溶質濃度 (mass%)
 C_P : 比熱 (kJ/(kg·K))
 D_L, D_S : 液相中および固相中の拡散係数 (m²/s)
 F : 熱放射における形態係数 (—)
 ΔH : 凝固潜熱 (kJ/kg)
 K : 透過率 (m²)
 P : 圧力 (Pa)
 R_{ij} : 節点 i, j 間の熱抵抗 (m²K/W)
 S_{ij} : 節点 i, j 間の要素境界面積 (m²)
 T : 温度 (K)
 $\hat{T}$: (1) 式で凝固潜熱項を除いた時の温度 T (K)
 T_f : 液相線温度を線型近似した時の濃度 $C_L=0$ における融点 (K)
 T_L, T_S : 液相および固相線温度 (K)
 T_P : 注湯温度 (K)
 U : 要素境界面における法線方向の流動 (外向法線方向を正とする) (m/s)
 V : 体積 (m³)
 ϵ : 放射率 (—)
 λ : 熱伝導率 (W/(mK))
 ρ : 密度 (kg/m³)
 $\bar{\rho}$: 要素平均密度 (kg/m³)
 ρ_S : 固相平均密度 (kg/m³)
 Γ : ステファン・ボルツマン定数 (W/(m²K⁴))
 下添え字
 0 : 初期値, a : 雰囲気
 i, j, k, m : 節点 (要素) 番号
 ij : 要素 i, j 間の境界
 P : 注湯時あるいは初期値
 E : 共晶, L : 液相, S : 固相
 上添え字
 B : Δt 前の既知量

文 献

- 1) J. S. KIRKALDY and W. V. YODELIS: Trans. AIME, **212** (1958), p. 833
- 2) M. C. FLEMINGS and G. E. NEREO: Trans. Metall. Soc. AIME, **239** (1967), p. 1449
- 3) M. C. FLEMINGS, R. MEHRABIAN and G. E. NEREO: Trans. Metall. Soc. AIME, **242** (1968), p. 41
- 4) R. MEHRABIAN, M. KEAN and M. C. FLEMINGS: Metall. Trans., **1** (1970), p. 1209
- 5) R. MEHRABIAN, M. KEAN and M. C. FLEMINGS: Metall. Trans., **1** (1970), p. 3238
- 6) N. STREAT and F. WEINBERG: Metall. Trans., **5** (1974), p. 2539
- 7) S. KOU, D. R. POIRIER and M. C. FLEMINGS: Metall. Trans. B, **9** (1978), p. 711
- 8) S. ASAI and I. MUCHI: Trans. Iron Steel Inst. Jpn., **18** (1978), p. 90
- 9) T. FUJII, D. R. POIRIER and M. C. FLEMINGS: Metall. Trans. B, **10** (1979), p. 331
- 10) 森 信幸, 大城桂作, 松田公扶: 日本金属学会誌, **43** (1979), p. 858
- 11) S. D. RIDDER, S. KOU and R. MEHRABIAN: Metall. Trans. B, **12** (1981), p. 435
- 12) K. M. TACKE, A. GRILL, K. MIYAZAWA and K. SCHWERTFEGE: Arch. Eisenhüttenwes., **52** (1981), p. 15
- 13) K. MIYAZAWA and K. SCHWERTFEGE: 同上, p. 415
- 14) 野村宏之, 樽谷芳男, 森 一美: 鉄と鋼, **67** (1981), p. 80, p. 88
- 15) A. L. MAPLES and D. R. POIRIER: Metall. Trans. B, **15** (1984), p. 163
- 16) M. SIMPSON and M. C. FLEMINGS: Metall. Trans. A, **15** (1984), p. 2095
- 17) H. KATO and J. R. CAHOON: Metall. Trans. A, **16** (1985), p. 579
- 18) S. MINAKAWA, I. V. SAMARASEKERA and F. WEINBERG: Metall. Trans. B, **16** (1985), p. 595
- 19) I. OHNAKA and K. KOBAYASHI: Trans. Iron Steel Inst. Jpn., **26** (1986), p. 781
- 20) Smithells Metals Reference Book, sixth edition, ed. by E. A. BRANDES, Butterworths (1983), p. 1414
- 21) A. F. CRAWLEY: Int. Met. Reviews, **19** (1974), p. 32
- 22) P. J. WRAY: Metall. Trans. B, **7** (1976), p. 639
- 23) 中谷義三: 軽金属, **20** (1970), p. 199
- 24) 中野耕作, 鈴木健司, 雄谷重夫: 鋳物, **45** (1974), p. 954
- 25) 茂木徹一, 大野篤美: 日本金属学会誌, **46** (1982), p. 323
- 26) 中田正之, 北川 融, 矢野幸三, 浅野信成, 榊井 明, 玉置稔夫: 鉄と鋼, **69** (1983), p. 1433
- 27) 高橋忠義, 市川 列, 工藤昌行, 島原皓一: 鉄と鋼, **61** (1975), p. 2198
- 28) 佐々木寛太郎, 杉谷泰夫, 小林純夫, 石村 進: 鉄と鋼, **65** (1979), p. 60
- 29) 綾田研三, 成田貴一, 森 隆資, 大西稔泰: 鉄と鋼, **67** (1981), p. 1278
- 30) 氏家義太郎, 前出弘文, 伊藤幸良, 荻林成章, 関 博, 和田 要, 伊藤裕雄: 鉄と鋼, **67** (1981), p. 1297
- 31) K. MURAKAMI, H. AIHARA and T. OKAMOTO: Trans. Iron Steel Inst. Jpn., **25** (1985), p. 1212
- 32) M. R. BRIDGE and G. D. ROGERS: Metall. Trans. B, **15** (1984), p. 581
- 33) F. WEINBERG: Metall. Trans. B, **15** (1984), p. 681
- 34) J. P. GABATHULER and F. WEINBERG: Metall. Trans. B, **14** (1983), p. 733
- 35) T. S. PIWONKA and M. C. FLEMINGS: Trans. Metall. Soc. AIME, **236** (1966), p. 1157
- 36) 高橋忠義, 工藤昌行, 永井慎一: 鉄と鋼, **68** (1982), p. 623
- 37) K. MURAKAMI, A. SHIRAISHI and T. OKAMOTO: Acta Metall., **31** (1983), p. 1417
- 38) P. BRADSHAW, T. CEBECI and J. H. WHITELAW: Engineering Calculation Methods for Turbulent Flow (1981) [Academic Press]
- 39) J. A. BURTON, R. C. PRIM and W. P. SLICHTER: J. Chem. Phys., **21** (1953), p. 1987