

# Dlaczego modelowanie komputerowe jest w odlewnictwie potrzebne?

## Why is the computer modelling needed in casting?

Od lat kilkunastu coraz większe znaczenie w przygotowaniu technologii ma możliwość numerycznego, komputerowego modelowania procesów odlewniczych, czyli ich odtworzenia w postaci wirtualnej. Spośród różnych metod modelowania – z wykorzystaniem analogów elektrycznych, hydraulicznych i metod numerycznych – tylko te ostatnie wytrzymały próbę czasu, przy czym ich rozwój i wykorzystanie zachodzi prawie równolegle z eksplozywnym rozwojem mocy obliczeniowych sprzętu komputerowego. Modelowanie komputerowe procesów z wykorzystaniem metod numerycznych najpełniej odtwarza złożoną fizyko-chemię i mechanikę procesów odlewniczych.

Odpowiedź na postawione w tytule pytanie będzie łatwiejsza i lepiej umotywowana, gdy sformułujemy odpowiedzi na poniższe pytania cząstkowe.

### Czym jest modelowanie komputerowe i do czego ono służy?

Rewolucja przemysłowa ostatnich wieków nie byłaby możliwa bez rozwoju podstawowych nauk: matematyki, fizyki i chemii, które umożliwiają ścisły opis procesów fizyko-chemicznych występujących w produkcji odlewów. Specjaliści z nauk podstawowych często uważają, że odlewnictwo nie jest nauką lecz najstarszą sztuką wytwarzania przedmiotów wywodzącą się od czasów Mezopotamii. Tak rzeczywiście było, gdy poprawne zaprojektowanie np. pieców do topienia, układów wlewowych, nadlewów, czy samej konstrukcji odlewu, wynikało z intuicji odlewników nabytych kosztowną metodą prób i błędów. Ogromne zdziwienie wspomnianych specjalistów budzi natomiast fakt, że w wielu przypadkach postawą odlewnictwa jest teoria pola, i że procesy odlewnicze można sprowadzić do skomplikowanych równań fizyki matematycznej opisujących pola<sup>1</sup>: temperatury, stężenia, pędu, prędkości, ciśnienia, naprężeń czy ostatnio rozwijanej teorii pola fazowego oraz tzw. automatu komórkowego, i że takim ujęciem odlewnictwa zajmują się w świecie renomowane ośrodki naukowe.

W ten sposób opisane procesy odlewnicze dają możliwość sterowania nimi, a zatem możliwość świadomego dążenia do

From the last dozen or so years, the possibility of a numerical modelling of casting processes, that being their virtual reproduction, acquires more and more significance in the preparation of technological procedures. Among various modelling methods – at first with an application of electric and hydraulic analogues and numerical methods – only the last ones survived the time test. Their development and application occurs nearly in parallel with the tremendous development of the calculating power of computers. The computer process modelling with an application of numerical methods reproduces the complicated physical-chemistry and mechanics of casting processes.

The answer for the main question, presented in the title, will be easier and substantiated better, when we answer at first the partial questions formulated below.

### What is the computer modelling and what is its aim?

The industrial revolution of the last centuries would not be possible without the development of basic sciences: mathematics, physics and chemistry, which enable an accurate description of physical and chemical processes in the production of castings. Specialists of basic sciences often consider that casting is not a science but a craftsman's art, having its roots in Mesopotamia times. It was really like that when the proper designing of e.g. melting furnaces, inlet systems, risers or just the structure of casting itself was only possible on the bases of founders intuition gained by an expensive trial-and-error method. The mentioned above scientists are deeply surprised when learning that the basis for many casting cases is the field theory and that casting processes can be presented as complicated equations of mathematical physics, describing fields<sup>1</sup> of: temperature, concentration, momentum, velocity, pressure, stresses and recently being developed the phase field theory and the so-called cellular automaton. Whereas such approach to castings is being researched by the most renowned scientific centres in the world.

**Prof. dr hab. inż. W. Kapturkiewicz** (kaptur@agh.edu.pl), **prof. dr hab. inż. E. Fraś**, **dr inż. A.A. Burbelko** – Katedra Odlewnictwa Żeliwa, Wydział Odlewnictwa AGH, Kraków (Chair of Cast Iron Casting, Faculty of Founding, University of Science and Technology, Kraków).

<sup>1</sup>Pod pojęciem pola: temperatury, stężenia, pędu, prędkości, ciśnienia, naprężeń etc., rozumie się zbiór wartości odpowiedniej zmiennej w czasie i wybranej części przestrzeni, którą stanowi, np. odlew, rdzennica, forma, kadz, piec itp.

<sup>1</sup>As a notion of: temperature, concentration, momentum, velocity, pressure, stress etc. – field, the set of values of the corresponding variable in time and in the selected space (which constitute e.g. casting, core box, moulding cast, ladle, furnace, etc.) is understood.

z góry zadanego celu. Dla procesów złożonych, jakie występują w odlewnictwie, rozwiązania analityczne wspomnianych równań, aczkolwiek piękne i przejrzyste, były możliwe tylko dla najbardziej uproszczonych przypadków i dlatego stosunkowo mało przydatne dla praktyki. Dopiero pojawienie się komputerów i to najnowszej generacji, wraz z rozwojem metod numerycznych, stworzyło możliwość obliczeń, przy których można mówić o „prawdziwym” modelowaniu procesów odlewniczych (zwanym również symulacją), wykonywanym za pomocą odpowiednich programów (*software*) uruchamianych w komputerach (*hardware*). Tak ujęta technologia odlewnicza jest zaliczana do klasy, tzw. *High Technology* i pomimo, że liczne jeszcze odlewnie opierają się w swej pracy na sztuce rzemieślniczej, to te przodujące tę właśnie nowoczesną wiedzę wykorzystują w produkcji. Można powiedzieć, że wiele procesów odlewniczych jest związanych z teorią pola. I tak na przykład znajomość pola:

- temperatury w odlewie (zmiany temperatury każdego punktu odlewu w czasie), jak również prędkości i ciśnienia w ciekłym metalu pozwala optymalnie zaprojektować kształt oraz wymiary nadlewów i układów wlewowych oraz ich wzajemne położenie względem siebie, a także dobrać właściwą temperaturę odlewania; ponadto pozwala przewidywać proces wyptywania różnych wtrąceń (decydujących o właściwościach użytkowych metali i niektórych stopów, np. staliwa) w piecach, kadziach i formach oraz zoptymalizować konstrukcje filtrów ceramicznych do ich przechwytywania, także zoptymalizować konstrukcje przewodów do transportu ciekłych metali (np. aluminium) z punktu widzenia wydajności i najmniejszej erozji materiałów ceramicznych;
- temperatury i stężenia składników stopowych daje możliwość przewidywania procesów przemian fazowych i wynikającą stąd strukturę oraz makro i mikrosegregację, a zatem czynników decydujących o właściwościach użytkowych odlewów;
- ciśnienia i prędkości ośrodków gazowych w rdzennicach nadmuchiwarek i strzelarek daje możliwość właściwego zaprojektowania układów wdmuchowych i wylotowych;
- ciśnienia, prędkości i temperatury gazów w żeliwiaku pozwala na optymalizację konstrukcji ich przewodów powietrznych, kształtu, wymiarów i umiejscowienia dysz oraz urządzeń odpylających, w celu oszczędności energii i poprawy ochrony środowiska; z kolei znajomość tych pól w formie odlewniczej daje możliwość sterowania przepuszczalnością gazów w celu zmniejszenia porowatości gazowej odlewów;
- naprężeń daje możliwość optymalizacji konstrukcji odlewów w celu uniknięcia pęknięć odlewów i zmniejszenia ich masy;
- pola fazowego pozwala przewidywać strukturę odlewów;
- magnetycznego pozwala na optymalizację konstrukcji pieców indukcyjnych (w tym do lewitacyjnego i pół-lewitacyjnego przetapiania metali w celu zmniejszenia zanieczyszczeń pochodzących z materiałów ceramicznych) oraz mieszalników magnetycznych do wprowadzania różnych dodatków do ciekłych metali (np. zapraw magnezowych do kąpielii żeliwa) w celu zmniejszenia kosztów produkcji.

Najczęściej projektowanie wspomnianych urządzeń i technologii odlewniczej, niezależnie od wcześniejszych obliczeń, polega na wykonaniu odpowiednich doświadczeń fizycznych (co jest bardzo kosztowne), bądź na wykorzystaniu doświadczeń wcześniej wykonanych lub zdobytych. Natomiast jeśli mamy możliwość przeprowadzenia modelowania, czyli odtworzenia zapisanego numerycznie mechanizmu procesu, wówczas wszelkie te eksperymenty możemy przeprowadzić za pomocą odpowiedniego programu komputerowego. Za pomocą modelowania komputerowego możemy przewidzieć, jaki będzie, przy danych założeniach, przebieg odlewniczego procesu technologicznego i jak będzie zachowywał

Mathematic presentation of casting phenomena offers the possibility of controlling them, which means the possibility of conscious striving to attain the aim given in an advance. For complicated processes, which characterize the pouring, analytical solutions of the mentioned equations, however beautiful and transparent, were possible for the most simplified cases only and therefore not much useful in practice.

It was only when computers emerged, especially those of the newest generation, together with the development of numerical methods the possibility of calculating was raised to the new heights and one can speak about the ‘real’ modelling (simulating) of the casting processes by applying adequate software on the sophisticated hardware.

The technology of casting approached in such a way is considered to be a *High Technology* and whereas numerous casting houses still base their operations on craftsman art, the best ones utilize modern knowledge in their production. One can say that many casting processes are connected with the field theory.

Thus, the knowledge of the:

- Temperature field in castings (temperature changes of each point of casting vs. time), as well as the velocity and pressure fields in liquid metals allow optimal designing of shape and dimensions of risers and inlet systems and finding their best mutual positions. This also allows selecting of the proper casting temperature. In addition such knowledge allows forecasting the process of floating of various inclusions in furnaces, ladles and casting moulds (decisive for functional properties of metals and some alloys e.g. cast steel) and optimising the structure of ceramic filters used for intercepting of those inclusions. This also can help in optimising construction of conduits for transporting liquid metals (e.g. aluminium) – when the effectiveness and the lowest erosion of ceramic materials should be taken into account;
- Temperature field and alloy components concentration fields allow to predict the phase transition and resulting structure as well as macro and micro-segregation, which means agents deciding on functional qualities of castings;
- Pressure and velocity fields of gases in core boxes of core blowers and core shooters help in an adequate designing of inlet and outlet systems;
- Pressure, velocity and temperature fields of gases in cupolas allow to optimise construction of their air conduits, shape, dimensions and placement of nozzles and dust collection devices – in order to save energy and to improve environment protection. Knowledge of these fields in the casting moulds allows to control the permeability of gases to reduce the gaseous porosity of castings;
- Stress fields provides the possibility of optimisation of casting construction to avoid cracks and reduction of casting weights;
- Magnetic field allows optimising the construction of induction furnaces (including those for levitational and semi-levitational remelting of metals to reduce their contamination originated from ceramic materials) and magnetic mixers for introduction of additives into melted metals (e.g. magnesium preliminary alloys for cast iron bath) in order to reduce production costs.

Most often the designing of the mentioned above devices and casting technologies – regardless of the previous calculations – requires either performing corresponding experiments (which might be very expensive) or utilising experience gained or obtained earlier. However, if we have the possibility of computer modelling, that being the reproduction of a numerical notation of

się dane urządzenie odlewnicze nie tylko w warunkach normalnych lecz również ekstremalnych a nawet awaryjnych.

Ogólnie biorąc fizyka i chemia procesów odlewniczych jest w zasadzie rozpoznana. Jednak równoczesne uwzględnienie wszystkich pól, teoretycznie jest możliwe, ale komplikuje niestęchanie zapis matematyczny oraz obliczenia numeryczne, a w rezultacie spowoduje przeładowanie komputera, bądź nie do przyjęcia wydłużenie czasu obliczeń. Najczęściej dostępne na rynku programy komputerowe są wyspecjalizowane do równoczesnych obliczeń jednego lub kilku wybranych pól.

W dalszej części artykułu swe uwagi ograniczymy do modelowania krystalizacji i stygnięcia odlewów oraz przepływu ciekłego metalu w odlewach, a zatem obszarów w których autorzy mają największe doświadczenie.

Aktualnie możemy wyróżnić cztery generacje programów (modeli), ujmujących zagadnienia krystalizacji i stygnięcia odlewów:

I generacja – opisująca pole temperatury, ewentualnie pola stężenia, prędkości i ciśnienia, a także trajektorie ruchu dla stanu ciekłego oraz pole naprężeń w zakrzepłym odlewie w skali całego odlewu, tzw. skala makro;

II generacja – cechą, która wyróżnia te programy (modele), jest rozszerzenie zakresu modelowania, typowego dla rozwiązań pierwszej generacji, o prawa zarodkowania i wzrostu kryształów, co przy założonym kształcie kryształów (znanym z doświadczenia) pozwala przewidywać mikrostrukturę odlewów. Tego rodzaju programy można nazwać jako makro-mikro;

III generacja – są to programy dające możliwość modelowania struktury odlewów w skali *mezo*, to jest na poziomie pośrednim ( $10^{-4} \div 10^{-7}$  m) pomiędzy modelowaniem w skali mikro a modelowaniem w skali wielkości atomowych. Programy trzeciej generacji wykorzystują metody, tzw. automatów komórkowych, zaś ich niewątpliwą zaletą jest samoczynne generowanie się kształtu kryształów w trakcie obliczeń (Rys. 1).

IV generacja – programy dające możliwość modelowania krystalizacji w skali nano ( $10^{-6} \div 10^{-9}$  m) czyli zbliżonej do skali atomowej, tzw. nanomodelowanie, które wykorzystuje metodę pola fazowego. Podobnie jak programy III generacji, również i te programy samoczynnie generują kształty kryształów w trakcie obliczeń), lecz wy-

the process mechanism, then we are able to perform all experiments by means of the adequate computer program. Thus, we can predict the progress of the technological casting process – at the given assumptions – as well as predict the behaviour of the given casting device, not only at normal conditions but also at extreme or even failure ones.

Generally speaking, the physical and chemical aspects of casting processes are known. Simultaneous taking into account all fields, however theoretically possible, complicates tremendously the mathematical formulations and calculations, which can either overload the computer memory or unacceptably prolong the calculation time. Computer programs, accessible in the market, are usually destined for simultaneous calculations of one or a few selected fields.

In the further part of the paper the authors will limit their considerations to modelling of the crystallisation and cooling of castings and the flow of liquid metals in castings, which means thus the problems in which they have gained the highest experience.

In this very moment we can distinguish four generations of programs (models) concerning the problems of crystallisation and cooling of castings:

1<sup>st</sup> generation – describes the temperature field, and eventually also concentration, velocity and pressure fields as well as motion trajectories for liquid state and the stress field in a solidified casting. This is the, so-called, macro scale.

2<sup>nd</sup> generation – extends modelling range of the 1<sup>st</sup> generation by the nucleation and crystal growing laws, which at the assumed shape of crystals (known from experience), allows to forecast the microstructure of castings. These kinds of programs are in macro-micro scales.

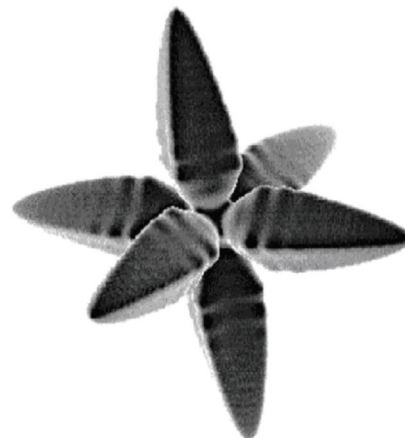
3<sup>rd</sup> generation – these programs allow to model casting structure in *mezo* scale, which means intermediate level between the micro scale and the atomic scale ( $10^{-4} \div 10^{-7}$  m). Programs of the 3<sup>rd</sup> generation utilise methods of cellular automata, while their advantage is self-generating of crystal shapes in the course of calculations (Fig. 1).

4<sup>th</sup> generation – these programs provide the possibility of modelling in the *nano* scale ( $10^{-6} \div 10^{-9}$  m), which means close to the atomic scale. The, so-called, nano-modelling applies the phase



Rys. 1. Kształt dendrytu dwuwymiarowego uzyskany w modelu w skali mezo [1].

Fig. 1. Two-dimensional dendrite shape obtained in the mezo scale model [1].



Rys. 2. Kształt dendrytu trójwymiarowego uzyskany w modelu w skali nano [2].

Fig. 2. Three-dimensional dendrite shape obtained in the nano scale model [2].

magają stosowania superkomputerów (przykładowe modelowanie – rys. 2 – 60 godzin CPU na 32 procesorowym superkomputerze CRAY T3E).

Istniejące obecnie procedury i przykłady numerycznego modelowania krystalizacji odlewów obejmują w większości dwie pierwsze generacje.

### **Jakie są ograniczenia dotyczące modelowania komputerowego?**

Możliwości symulacji komputerowej są ogromne, niemniej podlegają one pewnym ograniczeniom, wynikającym z:

- a) rozpoznania fizyki procesów;
- b) ograniczeń rozwiązań matematycznych;
- c) przybliżeń numerycznych;
- d) możliwości sprzętu komputerowego;
- e) niekompletnych danych doświadczalnych, a w szczególności powodowanych:
  - niepewnością danych materiałowych ich zmienności z temperaturą i czasem;
  - niepewnością tzw. warunków brzegowych, a w szczególności współczynników wymiany ciepła na kontaktujących się powierzchniach.

Należy podkreślić, że uzyskanie poprawnych wyników modelowania przez program komputerowy wymaga wprowadzenia tzw. warunków jednoznaczności, czyli wszystkich parametrów opisujących stan początkowy procesu (np. początkowy rozkład temperatury w rozpatrywanym układzie), parametrów termofizycznych metalu i formy, warunków wymiany ciepła pomiędzy odlewem i poszczególnymi częściami formy, formą i otoczeniem itp. Wiarygodność przeprowadzonego modelowania zależy od wiarygodności tych warunków, co niestety w praktyce nie zawsze wykonane jest zadawalająco wskutek np. braku precyzyjnych praktycznych danych wyjściowych procesu lub danych termofizycznych z dostępnych źródeł literaturowych.

Istotną rolę odgrywa odwzorowanie kształtu odlewu. W metodach obliczeniowych, którymi posługuje się numeryczny program komputerowy, przestrzenny kształt odlewu odwzorowany jest przez elementy najczęściej czworo- lub sześciocienne. Zwiększenie liczby elementów (aktualna możliwość rzędu  $10^6$  elementów) powoduje dokładniejsze odwzorowanie kształtu, lecz równocześnie może być przyczyną nieekonomicznego wydłużenia czasu obliczeń lub wręcz przeładowania pamięci komputera. Należy zauważyć, że do przygotowania, tzw. siatki obliczeniowej punktem wyjścia jest komputerowy zapis kształtu odlewu, który wykonywany jest na ogół za pomocą typowego oprogramowania CAD.

Dokładne przestrzenne (3D) odwzorowanie kształtu odlewu ważne jest przy modelowaniu związanym z optymalizacją technologii odlewu, gdzie zasadniczą rolę odgrywa jego kształt, natomiast jest mniej istotne przy rozwiązaniach zagadnień w skali mikro, np. związanych z zarodkowaniem, wzrostem ziaren, mikrosegregacją. Dla takich rozwiązań możliwe i wiarygodne są na ogół rozwiązania w skali dwuwymiarowej (2D), odniesione do wydzielonej przestrzeni odlewu (np. objętości jednostkowej). Uzyskane w ten sposób rozwiązania [1-4] mogą być adaptowane do warunków makro, czyli z uwzględnieniem skomplikowanego często kształtu odlewu.

### **Czy metody obliczeniowe i języki kodu programowego odgrywają istotną rolę?**

Dla opracowania odpowiedniego programu do modelowania procesu krystalizacji i stygnięcia odlewu niezbędny jest wcześniejszy wybór metody obliczeń numerycznych oraz języka programowania. Z punktu

field method. In similar fashion as the 3<sup>rd</sup> generation programs, these programs also self generate crystal shapes during the calculations, but they require using of supercomputers (as an example: modelling presented in Fig. 2 – required 60 hours CPU [Central Processing Unit] on 32 processor supercomputer CRAY T3E).

Procedures and examples of numerical modelling of casting crystallisation concern now-a-days mainly two first generations.

### **What are the limitations of the computer modelling?**

The possibilities of the computer simulations are tremendous, however limited – to a certain extend – as a result of:

- a) Not complete knowledge of the physics of the processes;
- b) Limitations of mathematical solutions;
- c) Numerical approximations;
- d) Capacities of hardware;
- e) Not complete experimental data, especially due:
  - unreliability of data concerning materials, their variations with time and temperature;
  - uncertainty of boundary conditions, especially of heat exchange coefficients on surfaces being in contact.

It should be emphasised that obtaining the accurate results of the process modelling by the computer program requires introduction the so-called: boundary conditions. Those conditions include all parameters describing the beginning of the process (e.g. initial temperature distribution in the system), thermo-physical parameters of metal and casting mould, conditions of heat exchange between a casting and individual parts of mould, between a casting mould and surroundings, etc. The reliability of the performed modelling depends on the reliability of those data, which – unfortunately – is not always satisfactory in practice. There is usually a lack of initial data of the process or thermal and physical data from accessible reference sources.

An adequate reflection of the shape of casting is very important. The spatial shape is most often represented by the tetra or hexa-wall elements – in the calculation methods used by the computer software. An increased number of elements (current possibility is of the order of  $10^6$  elements) gives more accurate shape representation but can be the reason of uneconomic prolongation of calculating time or can cause overloading of the computer memory. But it is worth mentioning, that the computer notation of the shape usually accomplished by the typical CAD software constitutes the origin for the preparation of the so called: computing network.

The precise spatial (3D) representation of the shape of casting is essential in the modelling connected with the optimisation of the casting technology, when the shape is the most important factor, whilst it is less important in solving micro scale problems concerning nucleation, grain growth, micro-segregation etc. For such solutions an application of two dimensional (2D) scale – referred to the separated casting space (e.g. unitary volume) are possible and reliable. The solutions obtained in such a way [3-6] can be adapted for macro conditions, which means taking into account the complicated shape of castings.

### **Do the calculating methods and languages of programming play an essential role?**

The previous selection of the numerical calculation method and the programming language is necessary for the development of an adequate software for modelling of the crystallisation and cooling of casting. However, these both factors are not relevant – from the point of view of the accuracy of the obtained results.

widzenia poprawności uzyskiwanych wyników oba te czynniki nie mają istotnego znaczenia. Można mówić o bardziej czy mniej efektywnych lub wygodnych w użyciu metodach obliczeniowych lub językach programowania, najistotniejszy jest jednak prawidłowy układ równań procesu wraz z warunkami jednoznaczności.

Pośród metod obliczeniowych można wyróżnić dwie grupy, posiadające szereg odmian: metodę różnic skończonych (*Finite Difference Method – FDM*), oraz metodę elementów skończonych (*Finite Element Method – FEM*), do których w ostatnim okresie można dołączyć metodę elementów brzegowych (*Boundary Element Method – BEM*) i metodę objętości skończonych (*Finite Volume Method FVM*). Wszystkie te metody posiadają bogatą literaturę, zestawioną m.in. w pracach [5-12].

Pośród wymienionych powyżej metod obliczeniowych najczęściej jest stosowana metoda różnic skończonych (FDM) lub elementów skończonych (FEM), przy czym ta ostatnia charakteryzuje się lepszą możliwością odwzorowania kształtu przestrzennego odlewu i daje bardziej precyzyjne wyniki, szczególnie jeśli chodzi o kinetykę zalewania i przepływów ciekłego metalu (pola prędkości i ciśnienia oraz pole temperatury ciekłego metalu) w trakcie zalewania, stygnięcia i krystalizacji odlewu.

O ile w odniesieniu do metod obliczeniowych można mówić o różnej dokładności, „gładkości” wyników, a twórcy programu prawie zawsze ujawniają stosowaną metodę (n.b. jest ona zwykle rozpoznawalna po wyglądzie wyników), to język programu jest często pomijany w opisie (instrukcjach) oprogramowania. Wychodzi się z założenia, że każdy język oprogramowania powinien dawać takie same wyniki obliczeń; różne są tylko nakłady pracy na przygotowanie oprogramowania, elastyczność programu oraz szybkość uzyskiwanych obliczeń. Aktualnie do przygotowania kodu programu zwykle stosuje się język C lub Delphi a ostatnio obserwuje się także powrót do języka Fortranu (w nowszych odmianach).

### **Co to jest eksperyment numeryczny i kiedy jest on wiarygodny?**

Istotna jest odpowiedź na pytanie „czy wyniki modelowania komputerowego mają jakąś wartość, zbliżoną lub analogiczną do rezultatów eksperymentów rzeczywistych?”. To pytanie jest związane z tzw. eksperymentem numerycznym. Słowo „eksperyment” w naszym przypadku kojarzy się z doświadczeniem z ciekłym metalem, gorącym odlewem i formą odlewniczą. Przeprowadzenie doświadczenia (eksperymentu) numerycznego to wykonanie modelowania danego procesu z wykorzystaniem komputera. Należy przy tym spełnić warunek, by program modelowania komputerowego był odpowiednikiem rzeczywistych procesów w odlewie. Nie jest to w pełni możliwe, gdyż program może być tylko lepszym lub gorszym odzwierciedleniem rzeczywistości. Stopień tego przybliżenia zależy od poziomu wiedzy twórców i zapotrzebowania użytkowników programów, oraz od znajomości warunków jednoznaczności [13]. Z tego powodu eksperymenty numeryczne zawsze powinny być zweryfikowane rzeczywistym doświadczeniem. Chodzi o pewność, że przyjęte parametry materiałowe, warunki jednoznaczności oraz procesy opisywane za pomocą stosowanych równań w wirtualnej przestrzeni – a w efekcie uzyskane wyniki obliczeń są jak najbardziej zbliżone do wyników rzeczywistych uzyskanych w odlewie. Istotne jest również określenie zakresu obszaru podobieństwa, w którym dana weryfikacja zachowuje ważność. Jeśli np. dokonujemy pomiarów związanych z kinetyką krystalizacji odlewu stygnącego w formie piaskowej, to obszar weryfikacji na ogół nie obejmuje technologii odlewania ciśnieniowego, itp.

Methods and languages are more or less effective or convenient for the user, but the most important issue remains the correct set of formulations together with the reliable boundary conditions.

There are two main groups of calculating methods, each having several modifications: the *Finite Difference Method – FDM* and the *Finite Element Method – FEM*, to which – in the recent years – can be added the *Boundary Element Method – BEM* and the *Finite Volume Method – FVM*. All those methods are widely referred in papers [5-12].

Out of the two – most frequently used – calculation methods, the Finite Difference Method (FDM) and the Finite Element Method (FEM), the last one is characterised by the better possibility of reproduction of the spatial shape of castings and gives more accurate results especially when it concerns the kinetics of pouring and liquid metals flow (velocity and pressure fields as well as liquid metal temperature field) during pouring, cooling and crystallising of casting.

Whereas, in respect to the calculating methods, one can speak about their various accuracy and „smoothness” of the results and the authors of the program nearly always reveal the applied method (n.b. the method is usually recognizable by the appearance of the results), the programming language is often omitted in the description. This is based on the assumption that each language should provide the same results, however, the time consumption at the designing stage, the program elasticity and the speed of calculations might be different. Nowadays, most often, the C and Delphi languages are being used for the preparation of the program code, but also the resumption of the Fortran language (in newer modifications) is observed.

### **What is the numerical experiment and when is it reliable?**

Answer for the question ‘Are the results of computer modelling of a similar or analogical value as the results of true experiments?’ is really important. This question is connected with the so-called numerical experiment. The word „experiment” – in our case – concerns experimenting with liquid metal, hot casting and casting mould. To perform a numerical experiment means to accomplish the computer-assisted simulation of the process. One should satisfy the condition that the computer modelling software fully corresponds to the real processes occurring in casting. That is not totally possible since the software can only represent the reality in a better or worse fashion, the approximation degree depends on the level of knowledge of the program designer and on the needs of program users as well as on the recognition of boundary conditions [13]. Due to these problems the numerical experiments should be always verified by the actual experiments. One has to be certain that the assumed material parameters, boundary conditions and processes presented by equations in virtual space and in effect the obtained results are truly similar to the real results obtained in casting processes. The determination of the zone of similarity in which the performed verification attains validity – is also very essential. If, for example, we are measuring parameters connected with the crystallization kinetics of the casting being cooled down in a sand mould, the verified zone of similarity does not extent to the technology of a pressure casting.

We can assume that the numerical experiment can carry even the higher weight than the actual experiment, since the last one offers only the possibility to obtain some results but generally does not indicate their causes. When performing the numerical experiments we not only obtain the results for arbitrary boundary conditions, but simultaneously we are getting the information concerning their reasons. Since, by definition, we have the full

Można przyjąć założenie, że wartość eksperymentu komputerowego może być wyższa niż eksperymentu rzeczywistego, za pomocą którego na ogół możemy tylko stwierdzić istnienie pewnych rezultatów, natomiast niekoniecznie możemy dociec ich przyczyn. Za pomocą eksperymentu komputerowego nie tylko otrzymujemy wyniki dla dowolnych warunków jednoznaczności, ale równocześnie jesteśmy świadomi, jakie były przyczyny ich powstania. Wynika to z faktu, że z definicji znamy budowany przez nas model procesu i łatwo dociec jest źródeł nietypowych niekiedy rezultatów. W eksperymencie numerycznym unikamy przypadkowych zaburzeń procesu, błędów pomiarowych, a rezultaty są wynikiem ściśle zapisanego matematycznie modelu procesu i warunków jednoznaczności.

Eksperymenty numeryczne doprowadziły do wyjaśnienia niektórych zjawisk, dotychczas całkowicie odmiennie interpretowanych, lub których mechanizm nie był wcześniej udowodniony. Dotyczyło to m.in. zjawisk rozdrobnienia ziaren w środkowej strefie odlewu [3], tworzenia się zabielań wewnętrznych w odlewach z żeliwa szarego [4], czy zagadnienia minimum pochodnej temperatury pod koniec krystalizacji odlewu [14].

Eksperyment numeryczny nie tylko pozwala dociec przyczyn nietypowych niekiedy wyników, lecz również daje sposobność głębszego poznania mechanizmu danego procesu. W szczególności dotyczy to ilościowego określenia istotności oddziaływania warunków brzegowych, kształtu i wymiarów odlewu, początkowego rozkładu temperatury w układzie „odlew-forma”, składu chemicznego metalu, parametrów materiału formy i warunków zarodkowania na końcową strukturę odlewu, mikrosegregację pierwiastków czy porowatość skurczową. Ponadto pozwala również ocenić procesy zachodzące w stanie stałym (związane np. z technologią żeliwa ADI).

### **Czy opłaca się stosować modelowanie komputerowe?**

Opłacalność wykorzystania sprzętu komputerowego z oprogramowaniem do modelowania zależy od:

- jakości programu i jego możliwości;
- fachowego jego wykorzystania.

Program symulacyjny winien służyć do przeprowadzania eksperymentów komputerowych w celu opracowania optymalnej technologii (komputerowe wspomaganie technologii), a w szczególności dla:

- sprawdzenia dobranych układów zalewania, miejsc doprowadzenia metalu;
- sprawdzenia działania nadlewów, optymalizacji ich wielkości, kształtu i rozmieszczenia w odlewie;
- działania otulin izolacyjnych i sposobu połączenia nadlewów z odlewem;
- poszukiwania innych możliwości likwidacji porowatości np. przez ochładzalniki zewnętrzne, wewnętrzne, żebra chłodzące itp.;
- wizualizacji kinetyki krystalizacji i określenia czasu osiągnięcia odpowiedniej temperatury wybicia odlewu;
- wyznaczenia pola naprężeń w odlewie i miejsc narażonych na pęknięcia;
- możliwości przewidywania struktury odlewu, a w szczególności rozdrobnienia struktury, wystąpienia np. zabielań w odlewach żeliwnych itp.;
- przewidywania kinetyki przemian fazowych w odlewie w stanie stałym w okresie jego stygnięcia, a także podczas różnych zabiegów obróbki cieplnej.

Stosowanie programów do modelowania komputerowego przez wiele znanych odlewni w świecie świadczy o opłacalności przedsięwzięcia [15-16]. Koszt sprzętu komputerowego, a zwłaszcza oprogramowania, jest stosunkowo szybko kompen-

knowledge about the designed – by us – model of the process, we can easily find sources of not typical results. We can avoid accidental process disturbances, measurement errors; thus, the obtained results depend only on the accuracy of mathematical formulations and boundary conditions.

The numerical experiments have already contributed to the explanation of several phenomena, differently interpreted previously or of not yet proven mechanism. This concerns, among others, diminution of grains in the middle zone of casting [3], formation of internal hard spots in casting of grey cast iron [4] and the problem of minimum temperature derivative at the end of crystallization [14].

The numerical experiment not only allows finding the causes of not typical results, but also provides the possibility of a deeper understanding of the process mechanism. Especially it concerns the quantitative determination of the boundary conditions influence, shape and dimension of casting, initial temperature distribution in the system: „casting – casting mould”, chemical composition of metal, parameters of casting mould material and conditions of nucleation, on the final casting structure, micro-segregation of elements and a shrinkage porosity. In addition it allows assessing processes occurring in solid state (concerning e.g. technology of cast iron – ADI formation).

### **Is the computer modelling a profitable procedure?**

The profitability of the computer equipment and the software depends on:

- Program quality and its possibility;
- Professional implementation of the program.

The simulating program should be applied for performing numerical experiments aimed at the preparation of the optimal technology (computer assisted technology) and especially at:

- Testing of the selected pouring systems and places for metal introduction;
- Testing of the risers operation, optimisation of their dimensions, shapes and distribution in the casting;
- Performance of insulating materials and means of joining risers with castings;
- Searching for other possibilities to avoid porosity, e.g. by external or internal coolers, cooling fins etc.;
- Visualisation of the crystallisation kinetics and the time needed to reach the temperature suitable for knocking out the casting;
- Determination of the stress fields in castings and places of a crack hazard;
- Possibility of predicting the casting structure, especially the diminution of structure and occurrence of hard spots in cast iron castings;
- Predicting the kinetics of phase transformations in the solid casting during the period of its cooling down and at other heat treatment procedures.

The very fact, that many world known foundries are using programs for computer modelling, certifies that this must be a profitable enterprise [15-16]. The savings on technological economy quickly compensates the cost of computer hardware and software. The profitability of the computer-assisted technology is specially emphasised at large castings (even in the case of a unitary production) as well as at smaller castings but of serial production.

The direct economic effect can be assessed by taking an average cost of a high-class software (only such software can

sowane uzyskiwanymi oszczędnościami w technologii. Opłacalność przygotowania technologii ze wspomaganie modelowania uwidacznia się szczególnie przy masywnych odlewach (nawet w przypadku jednostkowej produkcji), a także przy mniejszych odlewach wykonywanych w większych seriach.

Bezpośredni efekt ekonomiczny można ocenić, przyjmując średni koszt wysokiej klasy oprogramowania (a po takim tylko można spodziewać się efektywności rezultatów) ok. 20.000 Euro/rok. Jeśli w odlewni, przez prawidłowo przygotowaną technologię uniknie się zabrakowania ok. 20 ton odlewów na przykład z żeliwa sferoidalnego (a w niektórych odlewniach jest to jeden odlew), to koszt takiego oprogramowania już wówczas w pełni się zwróci (przyjmując nawet zaniżoną cenę 1 Euro/kg odlewu).

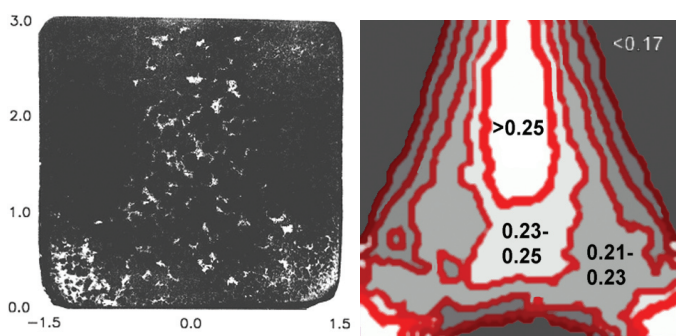
Poza bezpośrednim efektem uniknięcia zabrakowania odlewu, modelowanie komputerowe usprawnia przygotowanie technologii, ma znaczenie dydaktyczne dla personelu (wizualizacja procesu krystalizacji, zasilania), ale również marketingowe: korzystanie z oprogramowania komputerowego świadczy o nowoczesności odlewni.

Obecne komputery osobiste PC, a nawet laptopy, osiągają lub przewyższają już parametry wcześniejszych drogich stacji roboczych i mogą być z powodzeniem wykorzystywane do programów symulacyjnych.

### Kilka przykładów

Jednym ze zjawisk, których mechanizm udało się wyjaśnić przez modelowanie komputerowe, były tzw. zabielenia wewnętrzne w odlewach z żeliwa szarego. Rys. 3a pokazuje obraz struktury z zabieleniami wewnątrz odlewu, natomiast rys. 3b jest potwierdzeniem poprzez modelowanie komputerowe tego zjawiska, a opracowany i zastosowany w programie komputerowym model matematyczny jest odzwierciedleniem poszukiwanego mechanizmu procesu.

Możliwość modelowania tworzenia się struktury odlewu, począwszy od zarodkowania, przez swobodny wzrost, a także wzrost ograniczony wzajemnym stykaniem się ziaren, pokazana jest na rys. 4. Rys. 4a – 4d pokazują kolejne etapy wzrostu ziaren uzyskane przez opracowany program symulacyjny (modelowanie komputerowe), a rys. 4a' – 4d' – odpowiadające czasowo momenty z eksperymentu, uzyskanego przez zamrażanie krzepnącego odlewu. Eksperyment numeryczny ma charakter poznawczy (wyjaśnia



**Rys. 3. Zabielenia wewnętrzne w odlewie z żeliwa szarego: a) przekrój rzeczywistego odlewu (liczby na obwodzie – współrzędne w cm); b) izoliny komputerowego pola zawartości węglików (liczby – udział objętościowy ledeburytu) [4].**

**Fig. 3. Hard spots inside the casting of grey cast iron: a) cross-section of the actual casting (numbers on the perimeter – coordinates in cm); b) iso-lines of a carbide content field – simulated in the computer (numbers – volumetric participation of ledeburite) [4].**

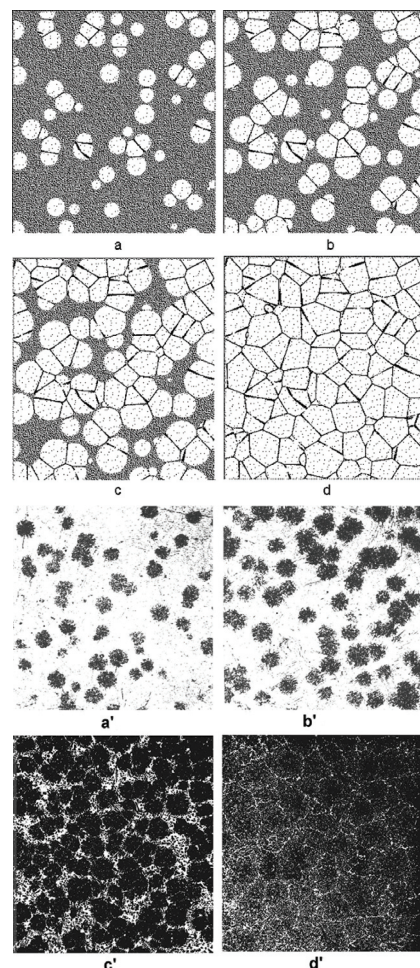
provide efficient results) as approximately 20.000 Euro/year. If due to the properly prepared technology a rejection of e.g. 20 tonnes of castings from spheroidal cast iron (in some casting houses this might be just a single casting) is avoided, the cost of the program will already be fully reimbursed – even when assuming to low price of 1 Euro/kg of casting.

Apart from a direct effect, such as casting rejection avoidance, the computer modelling improves preparation of technology, has didactic importance for the staff (by visualisation of several processes such as: crystallisation, feeding etc.), it has also a marketing impact since an application of a computer modelling certifies that this particular casting house is a modern one.

Current personal computers (PC) and even laptops reach or exceed the parameters of the previous expensive workstations and can be successfully used for simulating programs.

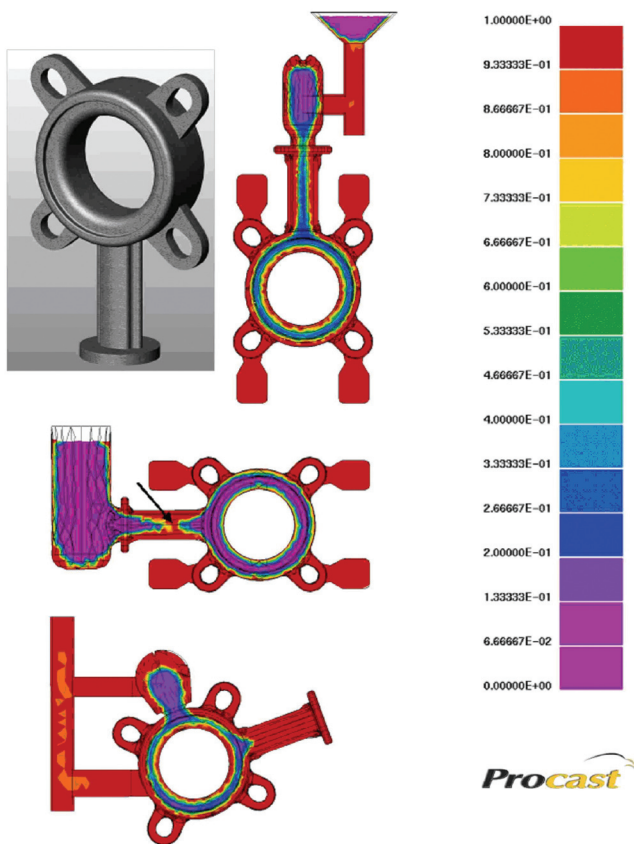
### Some examples

One of the phenomena, which mechanism was explained by means of the computer modelling was the so-called hard spots in castings of grey cast iron. Fig. 3a shows the structure with hard spots inside the casting, while Fig. 3b confirms the findings by means of a computer modelling of this phenomenon. It certifies that the mathematical formulations developed and applied



**Rys. 4. Kinetyka wzrostu ziaren podczas krystalizacji żeliwa szarego modelowana komputerowo (a – d) i sprawdzona eksperymentalnie (a' – d') [5].**

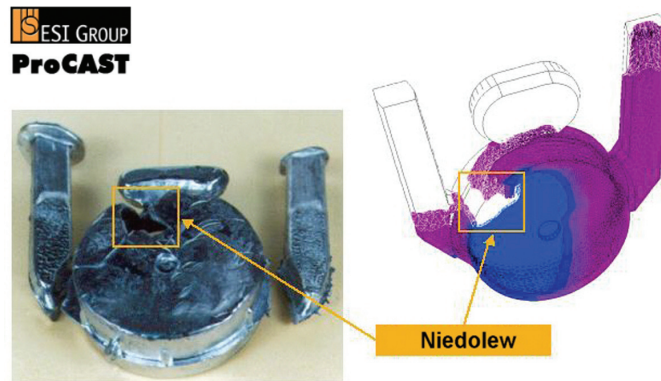
**Fig. 4. Kinetics of grain growth during crystallisation of grey cast iron, (a – d) simulated on computer confirmed by the actual experiment (a' – d') [5].**



**Rys. 5. Sprawdzanie działania nadlewów przy różnej konstrukcji układu. Strzałka pokazuje przerwę w możliwości zasilania odlewu przez nadlew.**

**Fig. 5. Testing a riser operation at different system constructions. An arrow indicates interruption in the possibility of feeding of an incomplete filling by a riser.**

np. zjawisko powstawania wielościennych ziaren ze swobodnych kulistych zarodków w cieczy), jak i praktyczny – pozwala np. ocenić wpływ warunków chłodzenia czy składu chemicznego stopu na wielkość ziaren w odlewie.



**Rys. 6. Przykład poszukiwania przyczyn powstawania niedolewu przez modelowanie komputerowe. Lewy rysunek – wadliwy odlew, prawy rysunek – modelowanie zalewania.**

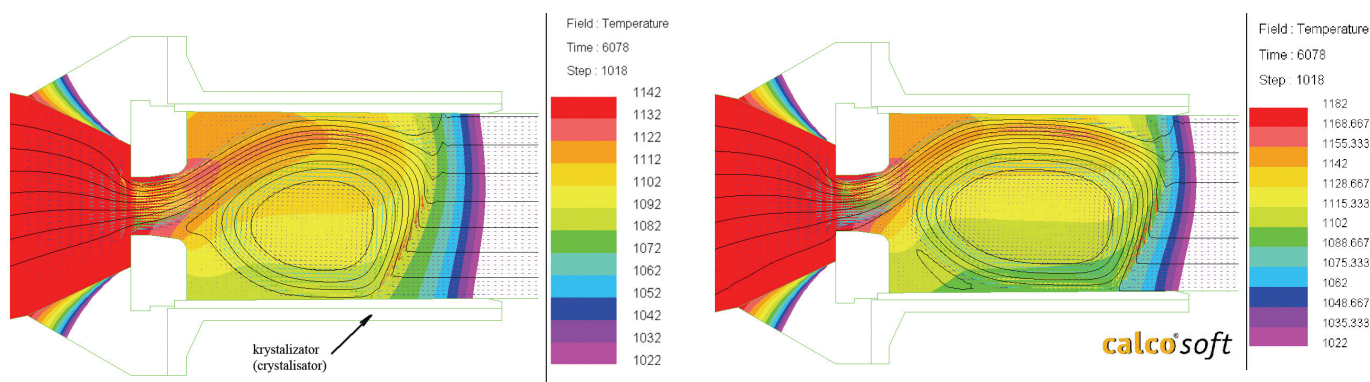
**Fig. 6. Example of searching – by means of a computer modelling – for reasons of an incomplete filling occurrence. Figure on the left – faulty casting, figure on the right – simulation of pouring procedure.**

in the program provide the accurate reflection of the process mechanism.

The possibility of modelling of the casting structure formation, starting from a nucleation process, via a free growth and also via a growth limited by mutual contact of grains – is shown in Fig. 4.

Figs 4a – 4d present consecutive stages of grain growth obtained by means of the simulating program, while Figs 4a' – 4d' present corresponding moments from the actual experiment obtained by freezing of the solidifying casting. Numerical experiment is of a cognitive character (e.g. it explains the phenomenon of multiwall grains formation from free spherical nucleuses) and of a practical one (e.g. it allows to assess an influence of cooling conditions or a chemical composition of an alloy on the dimension of grains in castings).

An application of commercial, professional simulating programs in casting houses allows solving several technological



**Rys. 7. Zmiana położenia profilu frontu krzepnięcia przy odlewaniu ciągłym Cu. Wzrost temperatury o 40 K powoduje wyjście strefy niezakrzepłej poza obszar krystalizatora. Skali kolorów odpowiada rozkład temperatury; kreskami oznaczono wektory prędkości, a liniami ciągłymi – linie prądu.**

**Fig. 7. Change of a solidification profile at continuous pouring of copper. Temperature increase of 40 K causes extending of a non-solidified zone outside the crystalliser. Colour scale corresponds to the temperature distribution; velocity vectors are marked by dash-lines, while current lines by solid ones.**



Jak już wcześniej wspomniano, zastosowanie w odlewni profesjonalnych, komercyjnych programów symulacyjnych pozwala rozwiązywać różne zagadnienia technologiczne. Jednym z typowych przykładów tego jest np. przewidywanie działania nadlewów, wpływu ich usytuowania na efektywność zasilania, łącznie z wpływem konstrukcji układu wlewowego itp. [17]. Rys. 5. pokazuje działanie nadlewów w różnych wariantach technologicznych (skalą kolorów oznaczono względną ilość fazy ciekłej w odlewie), wygenerowane programem ProCast. Strzałka na środkowym rysunku wskazuje na miejsce powstania mostka fazy stałej, który przerywa dopływ metalu z nadlewu (po stronie lewej) do obszaru ciekłego o kształcie pierścienia w prawej części odlewu. Będzie to powodem powstania porowatości skurczowej przy tak zaprojektowanej technologii.

Przykład poszukiwania przyczyn powstawania niedolewu przez modelowanie komputerowe pokazuje rys. 6.

Do technologii odlewniczych zalicza się również odlewanie ciągłe lub półciągłe. Rys. 7 pokazuje rezultaty uzyskane za pomocą programu Calcosoft. Nadmierny wzrost temperatury metalu w zbiorniku do poziomego odlewania miedzi, może spowodować sytuację awaryjną – niezakrzepły wlewek (strefa o temperaturze w zakresie 1022-1035°C na rys. 7b) wychodzi poza obszar krystalizatora.

*Sądzymy, że po analizie powyższego tekstu, Czytelnik sam sobie odpowie na postawione w tytule pytanie.*

Recenzował: prof. dr hab. inż. Józef Szczepan Suchy

problems. One of the typical examples is predicting the riser heads operations, an influence of their location on feeding effectiveness and also an influence of the construction of an inlet system etc. [17]. Fig. 5. illustrates operation of risers in different technological variants (colour scale indicates the relative amount of liquid phase in a casting) generated by the ProCast program. An arrow in the middle figure indicates the place where the solid phase bridge is forming. Its formation interrupts the metal flow from the riser (on the left hand side) towards the ring shaped liquid zone (in the right hand side of casting). If such technology had actually been applied shrinkage porosity would have occurred.

Fig 6 illustrates an example of searching – by means of a computer modelling – for reasons of an incomplete filling occurrence.

Continuous and semi-continuous pouring also belongs to casting technologies. Fig. 7 shows the results obtained by the Calcosoft program. An excessive increase of metal temperature in the tank for a horizontal pouring of copper can even cause a failure situation – not solidified casting (temperature zone 1022-1035°C in Fig. 7b) extends outside the crystalliser.

*We think and hope that, after analysing of the presented hereby text, the Reader will answer for himself the question formulated in the title of this paper.*

Reviewed: prof. dr hab. inż. Józef Szczepan Suchy

## Literatura

### References

1. BURBELKO A.: Mezomodelowanie krystalizacji metodą automatu komórkowego. Zesz. Nauk. AGH, seria Rozprawy-Monografie, nr 135, Kraków, 2004.
2. BOETTINGER W.J., CORIELL S.R., GREER A.L., KARMA A., KURZ W., RAPPAZ M., TRIVEDI R.: Solidification microstructures: recent developments, future directions. Acta Materiala, t. 48, 2000, s. 43-70.
3. FRAŚ E., KAPTURKIEWICZ W., LOPEZ H.F.: Macro and micro modeling of the solidification kinetics of castings. Trans. AFS, t. 42, 1992, s. 583-591.
4. FRAŚ E., KAPTURKIEWICZ W., BURBELKO A.A., LOPEZ H.F.: Modeling of graphitization kinetics in nodular cast iron casting. Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes IX, Aachen, Shaker 2000, s. 885-892.
5. FRAŚ E., KAPTURKIEWICZ W., BURBELKO A.A.: Computer modeling of fine graphite eutectic grain formation in the casting central part. Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Process VI, TMS, Warrendale, Pennsylvania, 1993, s. 261-268.
6. BURBELKO A.A., KAPTURKIEWICZ W.: Carbide formation in central zone of cast iron casting. Krzepnięcie Metali i Stopów, t. 16, PAN, Katowice, 1992, s. 41-48.
7. MOCHNACKI B., SUCHY J.S.: Modelowanie i symulacja krzepnięcia odlewów. PWN, Warszawa 1993.
8. MOCHNACKI B., SUCHY J.S.: Numerical Methods in Computational of Foundry Processes. Polish Foundrymen's Technical Assoc., Kraków 1995.
9. MAJCHRZAK E., MOCHNACKI B.: Metody numeryczne. Podstawy teoretyczne, aspekty praktyczne i algorytmy. Wyd. Politechniki Śląskiej, Gliwice 1994.
10. MAJCHRZAK E.: Metoda elementów brzegowych w przepływie ciepła. Wyd. Politechniki Częstochowskiej, Częstochowa 2001.
11. HOFFMAN J.D.: Numerical Methods for Engineers and Scientists. Marcel Decker, New York, Basel 2001.
12. HIRSCH C.: Numerical Computation of Internal and External Flows. John Wiley & Sons, 1995.
13. KAPTURKIEWICZ W.: Eksperyment numeryczny jako metoda wyjaśnienia mechanizmu procesu. Mechanika, nr 253/99, z. 59, Zesz. Nauk., Politechnika Opolska, 1999, s. 181-190.
14. KAPTURKIEWICZ W.: Interpretacja krzywej stygnięcia odlewu ze stopu eutektycznego. Krzepnięcie Metali i Stopów, t. 14, Ossolineum, 1989, s. 18-42.
15. SKOCZYLAŚ R.: Korzyści z matematycznego modelowania procesów odlewniczych. Przegląd Odlewnictwa, 2002, nr 12, s. 439-442.
16. TIHOMIROV M.D.: Osnovy modelirovaniya litiejnykh processov. Vaznyje osobennosti sistem modelirovaniya. Lit. Proizv. 2004, nr 5, s. 24-30.
17. KAPTURKIEWICZ W.: Modelowanie krystalizacji odlewów. Wyd. Naukowe AKAPIT, Kraków 2003.