

[文章编号] 1004-0609(2002)05-0875-03

用相场方法模拟铝合金枝晶生长形貌^①

张光跃, 荆涛, 柳百成
(清华大学 机械工程系, 北京 100084)

[摘 要] 采用相场方法对枝晶的生长形貌进行了模拟计算, 数学模型中包含了相场控制方程、溶质守恒方程以及能量守恒方程, 其中枝晶的形貌由相场变量控制。模拟结果与实验结果基本吻合, 同时由于相场方法更符合枝晶生长的物理机制, 因而相场的模拟结果比 CA 模拟结果更接近实验结果。

[关键词] 相场方法; 凝固过程; 数值模拟; 微观组织

[中图分类号] TG 21.39

[文献标识码] A

微观组织决定铸件的性能和使用寿命, 控制铸件成形过程中微观组织的形成具有重要的意义, 但是由于成形过程需要控制大量的参数, 全部用实验确定不太现实, 因而模拟预测方法显得越来越重要。随着铸件凝固过程宏观数值模拟的逐步成熟和完善以及计算机软硬件技术的快速发展, 对微观组织进行模拟成为可能。

常用的微观组织数值模拟方法主要有 3 类型: 确定性方法、概率方法和相场方法。目前, 国外采用相场方法对枝晶形貌进行模拟计算已经取得较大的进展, 特别是 Kobayashi^[1], Wheeler^[2, 3], Beckermann^[4], Karma 和 Rappel^[5~8]等人的工作起了重要的推动作用。而国内在这方面的研究才刚刚开始。作者尝试采用相场方法对枝晶生长的形貌进行数值模拟计算。

1 数学模型

1.1 相场控制方程

$$\begin{aligned} \tau \omega^2 \frac{\partial \phi}{\partial t} &= [\phi - \Delta \theta (1 - \phi^2)] (1 - \phi^2) + \\ &\quad \nabla (\omega^2 \nabla \phi) - \frac{\partial}{\partial x} \left[\omega \frac{\partial \omega}{\partial \beta} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right] + \\ &\quad \frac{\partial}{\partial y} \left[\omega \frac{\partial \omega}{\partial \beta} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] \\ \Delta &= (T_m - T_\infty) / (L/c) \\ \theta &= (T - T_m) / (T_m - T_\infty) \\ \omega &= 1 + \gamma \cos(4\beta) \\ \beta &= \arctan \left[\frac{\partial \phi}{\partial y} / \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] \end{aligned}$$

式中 τ 为驰豫时间, ω 为各向异性, ϕ 为相场变量, T_m 为液相线温度, t 为时间坐标, θ 为无量纲温度, T_∞ 为初始温度, λ 为常数, c_l 为液相浓度, γ 为各向异性强度, L 为结晶潜热, c 为比热容, β 为生长方向与晶轴夹角。

这里相场变量 ϕ 的取值范围为 $[-1, 1]$ 。液相为 -1 , 固相为 1 , 界面为 0 。

1.2 溶质守恒方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [(1 + \phi + (1 - \phi)k) c_l] &= \\ \nabla \cdot [(1 - \phi) D_s k \nabla c_l + (1 + \phi) D_l \nabla c_l] \end{aligned}$$

式中 k 为分配系数, D_s 为固相扩散系数, D_l 为液相扩散系数。

这里假定固相无扩散, 并且在界面处 $c_s = kc_l$ 。

1.3 能量守恒方程

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = D \nabla^2 \theta + \frac{1}{2\Delta} \frac{\partial \phi}{\partial t} - \nabla \cdot \vec{q}$$

其中 $\vec{q}$ 为热噪声, D 为热扩散系数。

作者认为枝晶分枝是主要由热扰动导致的, 因此在方程中引入了热扰动 $\nabla \cdot \vec{q}$ 。

2 数值方法和模拟结果

作者采用了有限差分方法对以上方程进行离散, 离散格式是中心差分格式; 并采用矩形网格对计算域进行划分。系统环境: P III 450, 内存 256 M, 硬盘 40 G, 联想主板, Win2000 操作系统。

2.1 等轴枝晶模拟

① [基金项目] 国家自然科学基金重大基金资助项目(59990470); 国家自然科学基金资助项目(50005011); 国家重点基础研究发展规划资助项目(G200067208-3) [收稿日期] 2001-12-24; [修订日期] 2002-03-06 [作者简介] 张光跃(1973-), 男, 博士研究生。

实验试样为 d 10 mm 的圆棒, 长度为 80 mm。砂型铸造, 浇注温度为 710 °C。

由于计算量的限制, 无法对整个试样进行计算, 作者采用了 2 种剖分步长和 2 种时间步长分别计算宏观温度场和枝晶生长过程。枝晶生长过程模拟计算的计算域为试样中心区域, 尺度为 0.5 mm $\times$ 0.5 mm。并且枝晶生长模拟计算的初始温度场由其相邻的宏观单元插值得到。

模拟计算采用了自行开发的铝合金微观组织模拟模块, 该模块已经集成到课题组开发的模拟软件 FT-star 中。

网格尺度为 1 μ m, 网格数目为 500 $\times$ 500。合金为 Al-12.5% Si (质量分数)。假定晶核位于计算区域中心, 初始温度为 710 °C, 计算时间为 0.5 h。

2.1.1 枝晶温度场

枝晶温度场如图 1 所示。液相温度为 574 °C。枝晶前沿存在曲率过冷, 因此温度较低; 由于枝晶生长过程中释放潜热, 因而固相中的温度较之液相要高。同时, 由于存在着热扰动, 因而枝晶温度场的分布并不完全对称。

2.1.2 枝晶浓度场和形貌

图 2 和图 3(a) 所示为采用相场方法模拟的 Al-12.5% Si 合金的枝晶形貌; 图 3(b) 所示为实验中观察到的枝晶形貌; 而图 3(c) 所示为韩国 Hong 课

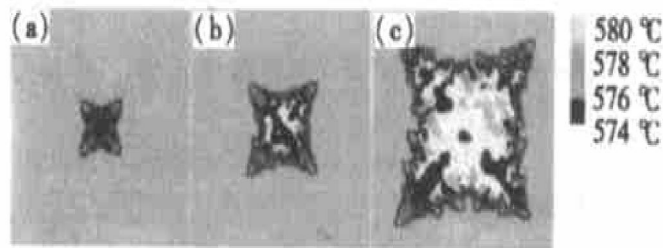


图 1 枝晶温度场

Fig. 1 Dendritic temperature field

(a) -0.25 s; (b) -0.5 s; (c) -1.0 s

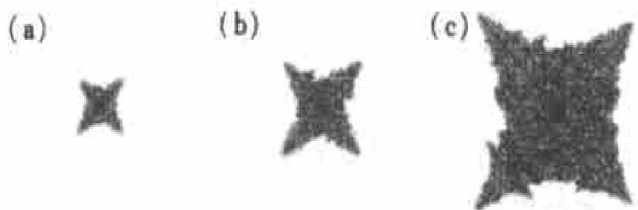


图 2 相场方法模拟等轴枝晶生长

Fig. 2 Simulation of equiaxed dendritic growth using phase field method

(a) -0.25 s; (b) -0.5 s; (c) -1.0 s

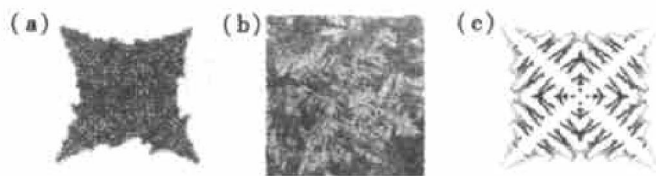


图 3 等轴枝晶形貌

Fig. 3 Morphologies of equiaxed dendrites

(a) —Phase field method; (b) —Experiment;

(c) —CA method

题组用 CA 方法模拟的枝晶形貌^[9]。从图 3(a) 可以看出, 在固相区域内在枝晶主干和侧枝旁存在着低浓度区, 这是曲率和界面动力学的综合影响导致的。从图 3(a) 中还发现, 三次枝晶臂只在二次枝晶臂的一侧生长, 而不是在两侧同时生长, 这种现象在 Glicksman^[10] 等人的实验中已经被发现, 模拟结果揭示了这一点, 造成这种现象的主要原因是: 在等轴晶凝固过程中, 热流是从枝晶流向液相; 同时在枝晶内部溶质浓度较高且不容易扩散, 因而不利于凝固, 而近外侧由于存在较大浓度梯度, 利于向液相扩散, 因而枝晶倾向于向外侧生长。比较图 3(a), (b) 和(c), 可以看出枝晶轮廓三者基本吻合, 同时可以看出相场模拟结果比 CA 模拟结果更接近实验结果, 这是由于 CA 方法是通过捕获机制来模拟生长情况, 从其机理来说不善于描述枝晶的细微结构, 而相场方法则是根据最小能量原理计算相场的变化从而得到枝晶生长情况, 并综合考虑了界面能和曲率的影响, 所以相场方法更符合枝晶生长的物理机制。由于实际凝固过程影响枝晶形貌的因素较多, 模拟结果与实际结果不可能完全一致, 尽管如此, 从模拟结果中可以清晰地发现与实际观察相一致的生长现象: 一次枝晶臂的生长与粗化, 二次、三次枝晶臂的分化以及溶质偏析等。作者还比较了平均二次枝晶臂间距模拟结果和实验结果的大小, 分别为 6 和 7.5 μ m, 两者基本吻合。

2.2 柱状晶生长模拟

合金为 Al-4.5% Cu, 热流方向为垂直向下, 其他三面绝热。网格数目为 300 $\times$ 450, 网格尺度为 1 μ m, 冷却速度为 20 °C/s, 计算时间为 40 min。

图 4 所示为用相场方法模拟的柱状晶生长图形。从图 4 中可以看到明显的竞争生长现象。

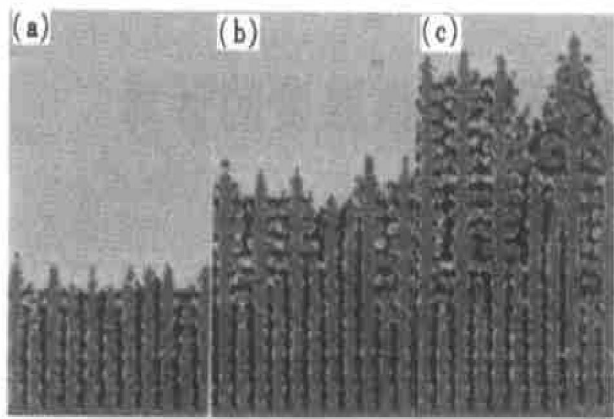


图 4 用相场方法模拟柱状晶生长

Fig. 4 Simulation of columnar growth using phase field method

(a) -0.3 s ; (b) -0.5 s ; (c) -1.0 s

3 结论

1) 建立了枝晶生长的相场模型, 模型中引入了热扰动, 模拟了等轴晶的生长过程以及柱状晶的生长过程。

2) 枝晶形貌模拟结果与实验结果、其他学者的模拟结果吻合。

[REFERENCES]

[1] Kobayashi R. Modeling and numerical simulation of dendritic crystal growth[J]. Phys D, 1993, 63: 410– 423.

- [2] Wheeler A A, Boettinger W J, McFadden G B. Phase field model for isothermal phase transitions in binary alloys[J]. Phys Rev A, 1992, 45(10): 7424– 7439.
- [3] Wheeler A A, Boettinger W J, McFadden G B. Phase field model of solute trapping during solidification. Phys Rev E, 1993, 47(3): 1895– 1909.
- [4] Beckermann C, Diepers H J, Steinbach I, et al. Modeling melt convection in phase-field simulation of solidification [J]. Comput Phys, 1999, 154: 468– 496.
- [5] Karma A, Rappel W J. Phase-field simulation of three-dimensional dendrites: is microscopic solvability theory correct? [J]. Crys Growth, 1997, 174: 54– 64.
- [6] Karma A, Rappel W J. Numerical simulation of three-dimension dendritic growth[J]. Phys Rev Lett, 1996, 77(19): 4050– 4053.
- [7] Karma A, Rappel W J. Phase-field model of dendritic sidebranching with thermal noise [J]. Phys Rev E, 1999, 60(4): 3614– 3625.
- [8] Karma A, Rappel W J. Phase-field method for computationally efficient modeling of solidification with arbitrary interface kinetics[J]. Phys Rev E, 1996, 53(4): 3017 – 3020.
- [9] Zhu M F, Hong C P. A modified cellular automaton model for the simulation of dendritic growth in solidification of alloys[J]. ISIJ International, 2001, 41(5): 436 – 445.
- [10] Hurle D J T. Handbook of Crystal Growth 1B: Fundamentals, Transport and Stability[M]. North Holland: Amsterdam Publishers, 1993. 1078– 1080.

Simulation of dendritic growth morphology of aluminum alloy using phase field method

ZHANG Guang-yue, JING Tao, LIU Bai-cheng

(Department of Mechanical Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

[Abstract] The phase field method is applied to simulate the dendritic growth morphology of aluminum alloy. The mathematic model includes phase field governing equation, solute conservation equation and energy conservation equation. The computed results are compared with the experiment and the published results.

[Key words] phase field method; solidification; numerical simulation; microstructure

(编辑 陈爱华)