

[文章编号] 1004-0609(2002)06-1130-06

Al-4.5%Cu 合金凝固过程显微组织的数值模拟^①

刘永刚, 陈 军, 潘 冶, 孙国雄, 仇春荔

(东南大学 机械系, 南京 210096)

[摘 要] 对 Al-4.5%Cu 二元合金在水冷铜型中的凝固进行了模拟, 建立了耦合温度场、浓度场和微观生长过程的凝固组织模拟模型。以 CA(Cellular Automaton)技术为基础, 建立了晶粒生长过程的局部演变规则, 在晶粒尺度上模拟了其凝固过程。将相同条件下的实验结果和模拟结果进行了对照, 检验了模型的正确性与适用条件。

[关键词] 显微组织模拟; Cellular Automaton 技术; 宏微观耦合模拟

[中图分类号] TG 111.4

[文献标识码] A

对于一个既定形状与合金成分的铸件而言, 其性能除了受宏观缺陷的影响外, 主要的决定因素便是其组织形态, 包括晶粒形态、晶粒度以及内部相组成等。目前通过经验性控制铸造工艺参数以及宏观传热、传质与流动的数值模拟, 许多的宏观缺陷已经可以或有希望得到控制。然而, 鉴于显微组织形成过程的复杂性, 光凭经验往往难以获得预想的组织。因此, 利用现有的宏观模拟成果, 依赖基本的铸造理论, 对显微组织的形成进行模拟是当前凝固模拟的一大趋势。

1 基于 CA 技术的宏-微观耦合模拟

CA(Cellular Automaton)技术自从被 Gandin 等人^[1]应用以来, 在近年来的微观组织模拟研究中受到了极大的重视, 也取得了相当的成功^[2~5]。这一方面得益于其物理意义清晰, 可以方便地实现和枝晶尖端生长动力学的耦合^[6~7], 另一方面也因为其数学处理简单明了, 容易实现程序编写。

1.1 温度场的计算

宏观温度场的模拟是进行微观组织模拟的前提。本文作者采用有限差分法(FDM)显式差分格式求解热传导微分方程。借鉴前人^[4]的研究方法, 利用宏微观两套网格分别进行宏观温度场和微观组织模拟, 分别称为单元和胞元, 单元的尺寸为 1.5 mm × 1.5 mm, 胞元尺寸为 0.15 mm × 0.15 mm。在宏观单元中以有限差分法计算温度场, 在微观胞元中以 CA 技术处理枝晶生长过程, 并借助潜热和宏-

微观温度场四点插值把两种尺度的信息紧密联系在一起, 建立了基于 CA 技术的宏微观耦合模拟模型。二维宏观温度场热传导控制方程为

$$\rho C_P \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \rho \Delta H \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (1)$$

式中 T 为温度, ρ 为密度, C_P 为热容, λ 为导热系数, ΔH 为凝固潜热。潜热是联接宏微观现象、进行宏微观耦合模拟的一个纽带, 潜热的释放速度直接由微观范畴的晶粒形核、生长来确定, 而潜热对温度场的影响则放在宏观温度场的计算当中, 以等效热容法处理^[8]。

1.2 浓度场的计算

溶质浓度场的计算直接在微观胞元中完成。由于微观胞元数目巨大, 为了减少计算量, 对溶质分配做如下处理。

1) 固/液界面上存在局部平衡:

$$c_s^* = k c_l^* \quad (2)$$

式中 k 为溶质分配系数, c_s^* 和 c_l^* 分别为界面上固相和液相的平衡浓度。

2) 凝固过程中的浓度场主要由液相和固相中的溶质扩散控制, 不考虑对流引起的溶质转移。一个胞元变为固相将排出溶质到临近液相胞元, 液相区域中溶质分布有如下控制方程:

$$\frac{\partial c_l}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_l \frac{\partial c_l}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_l \frac{\partial c_l}{\partial y} \right) + c_l (1-k) \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (3)$$

① [基金项目] 国家自然科学基金资助项目(59974011)

[收稿日期] 2002-01-09; [修订日期] 2002-03-18

[作者简介] 刘永刚(1976-), 男, 博士研究生。

式中 t 为时间, D_l 为液相中的溶质扩散系数, f_s 为固相分数, k 为分配系数。方程(3)右端最后一项为界面上排出的溶质的量。而固相中溶质的扩散控制方程为

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_s \frac{\partial c_s}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_s \frac{\partial c_s}{\partial y} \right) \quad (4)$$

式中 D_s 为固相中的溶质扩散系数。

1.3 晶粒形核模型

采用 Rappaz^[3, 4] 的准瞬时形核模型处理晶粒的形核。该模型认为形核并不是一个完全的瞬时过程, 而是随着过冷度增加的一个渐进过程, 认为在模壁表面和熔体内部随机位置上发生异质形核, 在一个特定的过冷度下这些形核基底开始活化, 形核率的变化和过冷度之间满足某种概率分布, 如高斯分布。对于一定的过冷度 ΔT , 晶粒密度由下式给出:

$$n(\Delta T) = \int_0^{\Delta T} \frac{dn}{d(\Delta T)} \cdot d(\Delta T) \quad (5)$$

式中 $n(\Delta T)$ 是过冷度为 ΔT 时的晶粒密度, $dn/d(\Delta T)$ 为形核率与过冷度间的分配函数。当采用高斯正态分布函数时, 上式具体变为

$$n(\Delta T) = \frac{n_{\max}}{\sqrt{2\pi}\Delta T_0} \int_0^{\Delta T} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\Delta T - \Delta T_{\max}}{\Delta T_0} \right)^2 \right] d(\Delta T) \quad (6)$$

式中 $n_{\max}$ 为初始形核基底密度, $\Delta T_{\max}$ 和 ΔT_0 分别为高斯正态分布曲线的中心过冷度和标准方差值。由于模壁表面和熔体内部的形核条件有很大差异, 需要采用两种不同的数据分别处理模壁表面和熔体内部的形核, 即两种不同的高斯分布。

1.4 枝晶演化模型

对于枝晶的生长模拟, 最重要的便是获得生长着的枝晶尖端的半径和其生长速度, 然后才能根据这些来确定枝晶主干的长度和枝晶域。枝晶尖端生长速率 v 可以采用 KGT (Kurz-Giovanola-Trivedi)^[9] 模型计算。该模型根据界面稳定性动力学和枝晶尖端温度、成分、曲率以及速度的关系推导出关于枝晶尖端半径 R 的一元二次方程为

$$\frac{4\pi^2\Gamma}{R^2} + \frac{2P_C \cdot mc_0(1-k)\xi_C}{[1-(1-k)I_V P_C]} \cdot \frac{1}{R} + G = 0 \quad (7)$$

式中 溶质的 Peclet 数 P_C 在溶质场已知的前提下由 $P_C = a[\Omega/(1-\Omega)]^b$ 获得^[10], 其中 $a = 0.4567$, $b = 1.195$, Ω 为枝晶尖端溶质饱和度; I_V 为 Ivantsov

函数; Γ 为 Gibbs-Thompson 系数, ξ_C 也是 P_C 的函数, 在缓慢生长条件下, $\xi_C \approx 1$, 当 P_C 较大时 ($P_C > \pi^2/\sqrt{k}$), $\xi_C = \pi^2/kP_C^2$; c_0 为合金原始成分; k 为溶质分配系数; m 为液相线斜率; 温度梯度 G 则由尖端胞元和相邻胞元的温度来计算得到。解此方程得到的较小根即枝晶尖端半径, 从而进一步可按 $P_C = Rv/2D_L$ 推出枝晶尖端生长速度。本文中, 直接采用了 Kurz 等人推导的关于枝晶生长速度和枝晶尖端过冷度的关系来计算, 即 $v_{\text{tip}} = \mu \cdot \Delta T^2$, 其中 $\mu = kD_L/[2\pi^2\Gamma m(k-1)c_0]$, 为和合金相关的系数。而任一时刻枝晶主干的长度 L 可由速度在时间上的积分得出。

在获得枝晶主干长度的基础上, 为了确定枝晶区域, 有必要对晶粒的形状进行一定的近似处理, 并加以恰当的数学描述。关于枝晶, 当前的研究普遍认为单个枝晶臂的形状为旋转抛物体。本文在该基础上假设单个枝晶臂二维情形下的界面轨迹为抛物线^[11], 并建立了基于 CA 技术的枝晶局部演化规则。

2 模拟结果及讨论

对二元 Al-4.5% Cu 合金在不同条件下的凝固过程进行了模拟研究, 铸型为水冷铜型, 水冷温度为 300 K, 铸锭为圆柱形, 上表面直接和空气接触, 下表面绝热。考虑到圆柱形的旋转对称性, 取其纵截面作为二维模拟计算区域, 其尺寸为 45 mm × 36 mm。模拟采用的 Al-Cu 合金的热物性值与相关文献一致^[12]。计算结果表明, 所采用的基于 CA 技术的宏-微观耦合模拟有非常好的计算效率, 并且需要的内存量较少, 整个模拟过程在 Pentium PC-450 MHz 上运行时间大约 3 min, 须用内存大约为 10 MB。

2.1 与实验结果及资料报道模拟结果的对照

图 1 所示为 Al-4.5% Cu 合金在不同浇注温度下水冷金属型中铸造得到的晶粒组织, 铸锭尺寸为 $d50 \text{ mm} \times 100 \text{ mm}$ ^[12]。图 2 所示为 Zhu 等人采用蒙特卡罗法模拟得到的结果^[12]。图 3 所示为本研究在相同浇注温度下对同等尺寸铸锭模拟得到的结果。从晶粒形貌、柱状晶区域大小以及柱状晶向等轴晶的转变(CET)位置看, 本研究的模拟结果和实验结果吻合较好。由于两种模拟模型均未考虑流动与收缩, 因此模拟结果中没有体现出实验铸锭中产生的宏观缺陷。

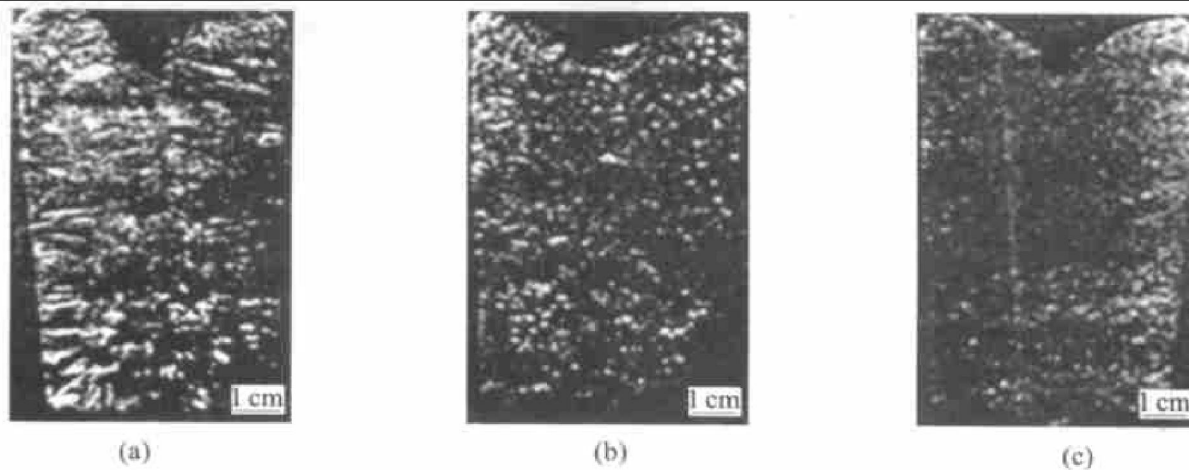


图 1 不同浇注温度下 Al-4.5% Cu 合金铸锭的晶粒组织

Fig. 1 Grain structures of Al-4.5% Cu ingot with different pouring temperature
(a) $-800\text{ }^{\circ}\text{C}$; (b) $-730\text{ }^{\circ}\text{C}$; (c) $-700\text{ }^{\circ}\text{C}$

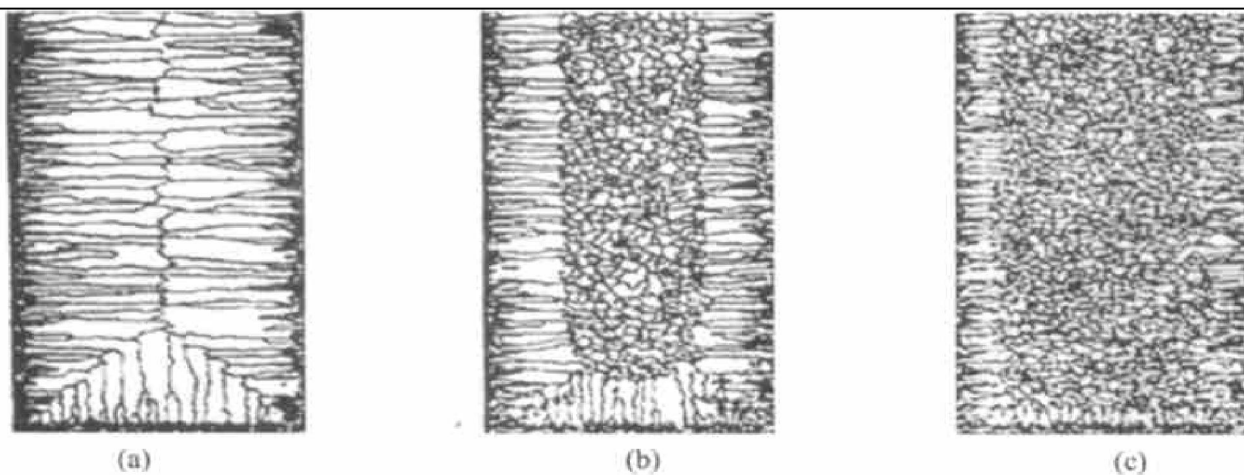


图 2 蒙特卡罗法模拟不同浇注温度下 Al-4.5% Cu 合金铸锭的组织

Fig. 2 Grain structures of Al-4.5% Cu ingot with different pouring temperature
modeled by Monte Carlo
(a) $-800\text{ }^{\circ}\text{C}$; (b) $-730\text{ }^{\circ}\text{C}$; (c) $-700\text{ }^{\circ}\text{C}$

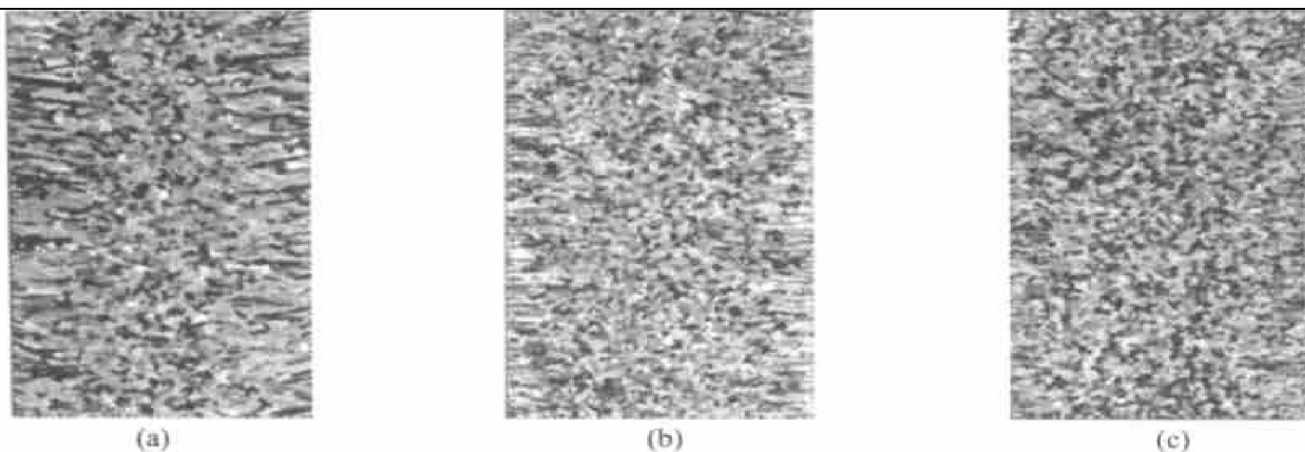


图 3 不同浇注温度下 Al-4.5% Cu 合金铸锭的模拟组织

Fig. 3 Modeling grain structures of Al-4.5% Cu ingot with different pouring temperature
(a) $-800\text{ }^{\circ}\text{C}$; (b) $-730\text{ }^{\circ}\text{C}$; (c) $-700\text{ }^{\circ}\text{C}$

比较蒙特卡罗法和本文方法所得到的模拟结果可看出,二者都较好地再现了铸锭中的 3 种晶状区组织,主要的区别在于蒙特卡罗法得到的晶粒形状相对圆整。这是由于二者在晶粒演化规则方面的差别造成的。在蒙特卡罗法中,晶粒的生长基于液固胞元间的能量最小原理进行,并辅以长大概率这一随机化处理,使晶粒域的扩展在较小距离范围内具有一定的均匀性,因而晶粒较为圆整。而本文模型中,枝晶生长速度由枝晶尖端生长动力学确定,无阻碍生长的枝晶臂为抛物线型,最终的晶粒因这种形状上的假设而更加趋近树枝状生长所得到的晶粒外形。

从本文的模拟结果以及实验结果均可看出,在较大的浇注过冷度下,即 800 °C 浇注时,并未得到采用蒙特卡罗法模拟时出现的穿晶组织。这是由于铸锭尺寸较小,在水冷铜型的强冷却作用下,很快便发生了温度场的交叠,从而降低了剩余熔体中的温度梯度,使得熔体中的过冷区域和过冷度增大,当过冷达到一定的程度时便会发生等轴晶的形核,并阻止柱状晶的生长,从而形成了内部的等轴晶区。此外,比较图 3 的(a), (b) 和(c) 易看出,随着浇注温度的提高,柱状晶区增大,并且晶粒尺寸也发生了一定程度的粗化。这和实验结果及通常的理论分析是一致的。

2.2 枝晶的择优生长和柱状晶区的形成

从模拟结果可以看到,在靠近型壁处,有一层薄薄的细小等轴晶粒,位向很凌乱。随着这些晶粒向内部的生长,晶粒数目减少,晶粒尺寸增大,晶粒间位向几乎一致。这是因为在金属系统中,枝晶具有择优生长方向,在立方晶系中,该择优生长方

向为[100]方向,因此位向垂直于型壁的晶粒生长速度最大,晶粒间相互竞争生长的结果使那些位向和型壁接近垂直的晶粒长到了其周围晶粒的前面,并抑制了周围晶粒的进一步生长,形成了柱状晶区。然而,从最终的显微组织图像中可以看到,柱状晶区并非完全由在型壁上形核的晶粒组成。图 4 所示为典型的柱状晶生长过程中的液固界面特征,在图 4(a) 所示的界面前沿附近出现了少量的晶粒核心,随着凝固的进行(如图 4(b)),这些晶粒并没有生长成等轴状晶,而是和那些在型壁形核的晶粒一起以柱状晶的形式向熔体内部生长,参照图 5(a) 也可以看出这一点。这是由于形核密度和形核过冷度间存在高斯正态分布关系,虽然绝大多数的形核基底在过冷度达到该分布曲线的中心才能成为有效的形核核心,但熔体中也存在极少量具有强形核能力的异质形核基底,其形核过冷度很小。这样,当柱状晶前沿的温度梯度还很大、过冷度还很小时,便可能在凝固界面前沿形成少量的晶核。但由于数目很少,而且不存在等轴晶生长所要求的负温度梯度,这些晶粒只能依附于生长着的柱状晶,和它们一起向熔体内部生长,共同组成了柱状晶区。

2.3 中心等轴晶区的形成

传统的理论认为,铸锭/铸件中心的等轴晶形核长大是几乎一致的。也就是说,一旦柱状晶前沿过冷区中等轴晶开始生长,即一旦发生了柱状晶向等轴晶的转变,剩余液相便同时以等轴晶形式形核生长,从而形成中心等轴晶区。而根据本文中的模拟结果,当柱状晶区固液界面前沿的局域过冷度达到一定大小时,可能在该过冷带中形成大量的等轴晶,这些等轴晶的生长阻止了柱状晶区的进一步发

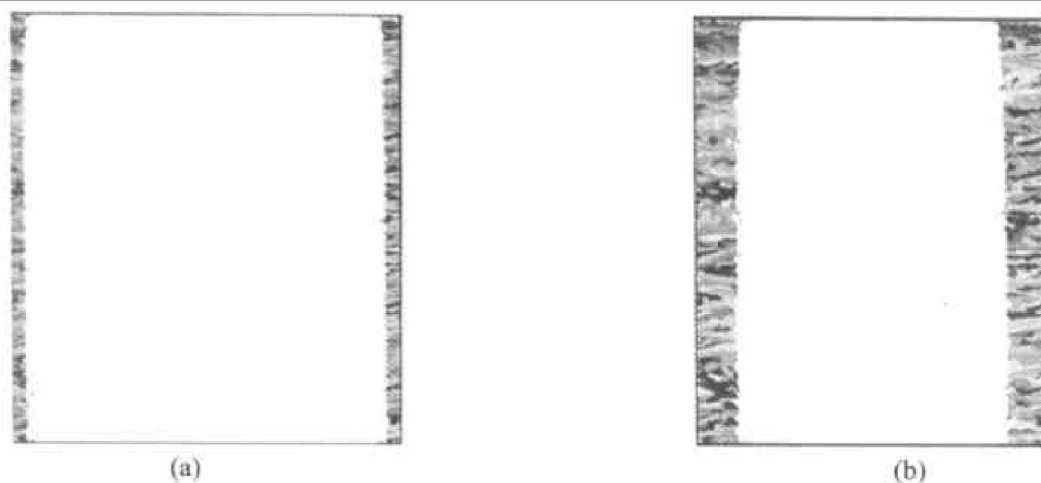


图 4 模拟过程中典型的液固界面特征

Fig. 4 Representative interfaces during modeling

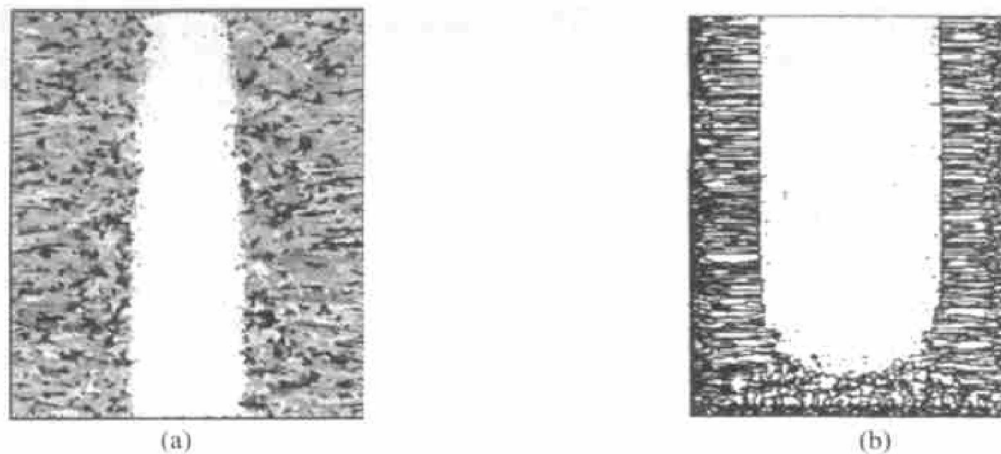


图 5 等轴晶的逐渐形成过程

Fig. 5 Progressive formation of equiaxed dendrite area
(a) —By Cellular Automaton Model; (b) —By Monte Carlo Method

展,于是便发生柱状晶向等轴晶的转变。但此时铸锭中心的熔体不一定有条件形成大量晶核,故仍保持液相状态。这种情况在通常的铸造条件下较难发生,但在本研究所模拟的这种铸锭尺寸小、铸型冷却能力强、材料导热系数大的情况下却很容易出现。这是因为在这样的条件下,柱状晶区凝固界面前沿容易出现大的温度梯度和大的局域过冷度共存的情况。此时等轴晶区域便以逐渐向铸锭中心推移的形式完成剩余液相的凝固(如图 5(a))。在 Zhu 和 Smith^[2]采用蒙特卡罗法模拟小铸件枝晶生长时也发现了类似的现象,其模拟过程中典型的液固界面如图 5(b)所示。

3 结论

1) 提出的基于 CA 技术的微观模拟算法其模拟结果与实验结果吻合较好,通过与蒙特卡罗法模拟结果的对比,本文的模拟结果更接近实验结果。

2) 通过温度插值方法和凝固潜热的处理进行了有效的宏微观耦合,并把浓度场的计算和微观生长计算直接相关,从而成功地将传热、传质和微观范畴的晶粒形核、生长以及组织转变相结合,建立了一套比较完整的宏微观统一模拟模型。

3) 模拟结果有效地再现了凝固过程中晶粒间的相互竞争生长,成功地演绎了柱状晶区的形成过程,并采用准瞬态形核模型计算晶粒形核,通过为微观胞元随机分配形核过冷度的方法对该模型进行了优化,使其更加符合异质形核的物理机制,同时也增加了其易用性。

[REFERENCES]

- [1] Gandin C A, Desbiolles J L, Rappaz M, et al. A three-dimensional cellular-finite element model for the prediction of solidification grain structures [J]. Metall Mater Trans A, 1999, 30A(12): 3153 - 3165.
- [2] 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.
- [3] Rappaz M, Gandin C A. Probabilistic modeling of microstructure formation in solidification processes [J]. Acta Metall Mater, 1993, 41(12): 345 - 360.
- [4] Gandin C A, Rappaz M. A coupled finite element-cellular automaton model for the prediction of dendritic grain structures in solidification processes [J]. Acta Metall Mater, 1994, 42(7): 2233 - 2246.
- [5] Gandin C A, Rappaz M. Three-dimensional probabilistic simulation of solidification grain structures: application to superalloys precision castings [J]. Metall Trans A, 1993, 24A(2): 467 - 479.
- [6] Gandin C A, Jalanti T, Rappaz M. Modeling of dendritic grain structures [A]. Thomas B G, Beckermann C. Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes VIII [C]. Warrendale, PA: TMS Publication, 1998. 363 - 374.
- [7] DU Qiang, LI Diar-zhong, Li Yr-yi. Modeling of solidification microstructure based on fully coupling of micro-transport phenomena with cellular automaton [A]. Sahn P R, Hansen P N, Conley J G. Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes IX [C]. Aachen: Shaker, 2000. 461 - 465.
- [8] Sharma D G R, Krishnan M, Ravindran C. Determinar

- tion of the rate of latent heat liberation in binary alloys [J]. *Materials Characterization*, 2000, 44(3): 309 - 320.
- [9] Kurz W, Giovanola B, Trivedi R. Theory of microstructural development during rapid solidification [J]. *Acta Metall Mater*, 1986, 34(5): 823 - 830.
- [10] Wang C Y, Beckermann C. Equiaxed dendritic solidification with convection: Part I. Multiscale/ multiphase modeling [J]. *Metall Mater Trans A*, 1996, 27A(9): 2754 - 2764.
- [11] Nielsen Q, Appolaire B, Combeau H. Determination of the grain morphology in equiaxed Al-Cu alloys [A]. Sahm P R, Hansen P N, Conley J G. *Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes IX* [C]. Aachen: Shaker, 2000. 513 - 520.
- [12] Zhu P P, Smith R W. Dynamic simulation of crystal growth by Monte Carlo method- II. Ingot microstructures [J]. *Acta Metall Mater*, 1992, 40(12): 3369 - 3379.

Microstructure simulation of solidification process of Al-4.5% Cu binary alloy

LIU Yong-gang, CHEN Jun, PAN Ye, SUN Guo-xiong, QIU Chun-li

(Department of Mechanical Engineering, Southeast University, Nanjing 210096, China)

[Abstract] Coupling temperature field, concentration field and micro growth, the simulation of the solidification structure on the solidification process of Al-4.5% Cu binary alloy in water-cooled Cu mould was presented. The model was built according to Cellular Automaton model and the locally functioned law of grain growth was established. By this model, the solidification of the single phase binary alloy was simulated and studied on the grain scale. The results were compared to other simulations and experimental results available, and then the validity and the applicability of the model were tested.

[Key words] microstructure simulation; Cellular Automaton model; coupling of macro/ micro modeling

(编辑 袁赛前)