

相场方法模拟铝合金三维枝晶生长^{*}

赵代平 荆涛[†] 柳百成

(清华大学机械工程系, 北京 100084)

(2002 年 10 月 18 日收到, 2002 年 11 月 26 日收到修改稿)

以相场模型为基础, 采用宏微观耦合方法和界面捕获液态方法对铝合金枝晶生长进行模拟计算. 为解决试样全场微观计算的困难, 采取宏微观耦合的计算方法, 试样整体计算温度场, 而微观组织计算只在一个确定的宏观单元内进行, 宏观微观计算交替耦合进行. 在不改变相场模型的前提下, 提出界面捕获液态计算方法. 赋值计算单元界面标志, 只对界面处的单元求解相场变量, 当枝晶生长时, 捕获液态单元为界面从而推进界面, 并对捕获到的单元校正相场变量. 通过界面捕获液态方法加速相场模型的计算, 实现了铝合金试件局部三维单晶粒和多晶粒的模拟. 对模拟结果与实际试样的金相结果进行分析和比较.

关键词: 相场方法, 液态捕获, 微观组织, 枝晶

PACC: 7115Q, 6480G, 6100, 6185

1. 引言

近 10 年来, 相场方法已发展为最适合模拟晶粒生长形貌的确定性方法之一^[1-5]. 相场方法也称为直接的微观组织模拟, 是一种计算技术, 它能使研究者直接模拟微观组织的形成. 一般认为建立相场方程方法有两种^[6]: 自由能函数法和熵函数法. 相场方法的主要特点是引入相场变量 ψ , 用来表示系统在空间和时间的物理状态(液态或固态). 在液相区, 相场变量 $\psi = -1$; 在固相区, $\psi = 1$; 在固液两相区, ψ 值在 -1 — 1 之间变化. 相场方法可以描述平衡状态下新相、母相以及固液界面处的复杂生长过程. 如果耦合温度场、溶质场、流场及其他外部场, 那么就可以比较真实地对凝固过程进行模拟. 相场方法用统一的控制方程, 不必区分固液相及其界面, 不必跟踪固液界面, 非常适合模拟枝晶生长, 尤其三维空间的模拟. 然而很少研究针对实际试样的三维枝晶模拟, 主要原因有两方面: 试件全场微观划分需要超大的存储空间和计算总时间; 三维相场方程求解算法效率较低. 如果不解决这两方面的问题, 以现有的计算设备根本不可能完成模拟计算任务. 本文采用宏微观温度场耦合的计算方法来解决全场微观划分单元不可实现的问题,

采用较大的网格和时间步长 Δt 计算宏观温度场, 当选取的单元温度降到液相线以下时, 在一个宏观时间步长 Δt 内, 采用小网格和小时间步长 δt 对该单元进行微观组织计算, 宏观微观计算交替进行. 仅对一个小区域微观模拟能够避免全场微观划分单元. 本文提出界面捕获液态计算方法: 当计算节点成为固相时, 重新校正界面空间并将固相附近液态设为界面节点, 再进行计算. 使用该方法大大加快了计算速度, 提高了相场方程求解效率, 使三维晶粒生长模拟更容易实现.

本文通过采用宏微观耦合方法和界面捕获液态方法来实现对铝合金试样的微观组织模拟. 针对铝合金试样, 运用相场方法模拟单晶粒和多晶粒枝晶的生长. 为降低计算难度, 在条件允许的前提下, 单晶粒和多晶粒模拟采用相同的相场控制方程. 对模拟结果和实验结果作了比较分析.

2. 数学模型

2.1. 相场模型

三维单晶粒生长相场模型的基本方程采用 Karma^[7]提出的模型. 相场变量 ψ 代表凝固单元的物

^{*} 国家自然科学基金 批准号 50005011 资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: todd@sun.midwest.com.cn

态 $\psi = -1$ 代表液相, $\psi = 1$ 代表固相, ψ 值在 -1 — 1 之间代表界面, 温度场和相场控制方程可以描述为

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \nabla^2 u + \frac{1}{2} \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \tau(\mathbf{n}) \partial_i \psi = & [\psi - \lambda u (1 - \psi^2)] [1 - \psi^2] \\ & + \mathbf{V} \cdot [\mathbf{W}(\mathbf{n}) \nabla \psi] \\ & + \sum_p \partial_p \left[|\nabla \psi|^2 \mathbf{W}(\mathbf{n}) \frac{\partial \mathbf{W}(\mathbf{n})}{\partial \partial_p \psi} \right] \end{aligned} \quad (2)$$

其中 $p = x, y, z$ 为空间方向, D 为热扩散率, λ 为温度在相场中的耦合系数, $\mathbf{W}(\mathbf{n}), \tau(\mathbf{n})$ 分别与界面厚度、表面强度有关. 如果通过 $A_s(\mathbf{n})$ 表达界面各向异性, 并取

$$A_s(\mathbf{n}) = (1 - 3\epsilon_4) + 4\epsilon_4 \frac{(\partial_x \psi)^4 + (\partial_y \psi)^4 + (\partial_z \psi)^4}{|\nabla \psi|^4}, \quad (3)$$

可以得到

$$\mathbf{W}(\mathbf{n}) = W_0 A_s(\mathbf{n}), \quad \tau(\mathbf{n}) = \tau_0 (A_s(\mathbf{n}))^2 \quad (4)$$

ϵ_4 为各向异性模数. 控制方程中所有变量都已无量纲化, u 为无量纲过冷度.

比较理想的多晶粒模型是多相场模型. Tiaden^[8] 提出了自由能函数为下式的多相场模型:

$$F(\phi, \nabla \phi) = \int_V \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^i (f_{ij}^{\text{grad}}(\phi, \nabla \phi) + f_{ij}^{\text{pot}}(\phi)) dV. \quad (5)$$

虽然从许多方面来考虑, 在计算多晶粒枝晶生长时, 多相场模型都是比较合理的方法, 然而多相场模型的一个明显缺点是变量太多. 每个晶粒都相当具有一个单独的相场控制方程, 这将引起计算空间和计算量数倍甚至数十倍的增加. 为不加重计算任务, 本文不采用多相场模型, 仍然采用单晶粒相场模型来计算多晶粒的枝晶生长, 所有的晶粒都同用一个相场变量. 需要指出的是, 当晶粒间碰撞发生时, 这样计算的结果有偏差, 如果没有晶粒碰撞产生, 二者结果不会有太大差别. 采用统一的相场变量方程, 各晶粒的最优生长方向都相同, 这与一些实际合金的晶粒生长现象相悖, 但在相场模型并不是非常成熟的情况下, 这种差异并不影响问题的研究.

2.2. 形核模型

在采用宏微观耦合算法的基础上, 本文采用微观区域一致形核原则: 将整个微观模拟区域看作一个宏观单元, 通过这个宏观单元的过冷度来确定形核数, 当形核数增加时, 形核在微观模拟区域内随机

形核. 形核模型采用连续性形核, 形核密度的变化 $dn/d(\Delta T')$ 满足高斯分布:

$$\frac{dn}{d(\Delta T')} = \frac{n_{\text{max}}}{\sqrt{2\pi}\Delta T'_\sigma} \exp\left(-\frac{(\Delta T' - \Delta T'_{\text{max}})^2}{2\Delta T'^2_\sigma}\right) \quad (6)$$

式中 $\Delta T'_{\text{max}}$ 为最大形核过冷度, $\Delta T'_\sigma$ 为标准方差过冷度, n_{max} 为最大形核密度.

3. 计算方法

3.1. 宏微观耦合算法

由于实际试样尺寸一般是毫米量级, 如果采用微米为单位进行整体剖分, 计算量将非常大, 以至于在计算机上无法进行模拟计算. 而且实际铸件的尺寸比这大得多, 因而采用统一的剖分步长不切实际, 对整个铸件进行微观模拟计算目前不可能实现, 所以采取宏微观温度场耦合的计算方法: 整体计算宏观温度场, 而微观组织计算则是选取一个宏观单元进行, 采用较大的网格和时间步长 Dt 计算宏观温度场, 当选取的单元温度降到液相线以下时, 在一个宏观时间步长 Dt 内, 采用小网格和小时间步长 dt 对该单元进行微观组织计算, 宏观微观计算根据时间步长交替进行. 微观组织计算的初始温度场由模拟区域的周边单元插值得到, 其基本形式可以表示为

$$T_{\text{micro}} = \sum_i^n l_i^{-1} T_i / \sum_i^n l_i^{-1}. \quad (7)$$

宏微观温度耦合虽然不能精确地描述微观单元的边界传热问题, 但是微观区域中边界单元的温度由与其接触的宏观单元加以修正是目前最可行的计算方法.

3.2. 界面捕获液态算法

为提高计算效率, 缩短计算总时间, 提出界面捕获液态计算方法. 本文不对所有单元求解相场变量, 只对界面单元计算相场变量值. 赋值计算单元界面状态变量 $S(i, j, k)$: $S = -1$ 表示液态 ($\psi = -1$), $S = 0$ 表示界面 ($-1 < \psi < 1$), $S = 1$ 表示固态 ($\psi = 1$). 在计算过程中, 只对 $S = 0$ 的单元求解相场方程, 这里对已凝固的固态单元不作计算, 即忽略了固态单元重熔的情况. 计算单元的 S 值随着枝晶的生长而变化. S 值的设定规则服从提出的捕获液态方法.

界面捕获液态原则:当某单元 $U(i, j, k)$ 变为固态时,扫描该单元附近的单元 ($r \leq R_s$) 是否为液态 ($S = -1$), 如果为液态, 则将扫描单元设定为界面 ($S = 0$), 并根据假定的平衡界面赋值该单元的相场变量值 $\psi = P(r)$. 其中 $U(i, j, k)$ 为任一微观单元, r 为某单元与 $U(i, j, k)$ 的距离, R_s 为界面层厚度, $P(r)$ 为假定存在的平衡界面, 界面处的 ψ 满足 $\psi = P(r)$, r 为计算单元与临近固态的距离, $P(r)$ 为需要选定的函数. 本文参考一维空间一致过冷度条件下, 平衡态时界面处相场变量解的形式^[9], $P(r)$ 选取如下形式:

$$P(r) = 1 - a \times \tan\left(\frac{r}{R_s}\right), \quad (8)$$

其中 R_s 为界面层厚度, a 为常数.

需要讨论的是该方法的作用和正确性. 采用该方法只计算界面单元的 ψ 变化, 节约了计算时间, 提高了计算效率. 通过假定平衡界面设置捕获的液态单元的 ψ 值, 能够保证界面的连续性, 防止界面层厚度变小甚至消失的错误发生. 以上的校正不违背能量守恒及相场理论对界面层存在的假设, 同时也允许了对界面层的校正.

值得一提的是强制赋值液态单元 $\psi = P(r)$ 是否会引起 ψ 的突变. 如果引起 ψ 的突变, 该方法就会引起计算错误. 因为时间步长足够小, ψ 不可能突变. 由于与该单元很近的单元不可能是液态, 它们肯定已经被捕获为界面, 捕获的液态单元其 r 肯定与 R_s 相近, 所以 $P(r)$ 和 -1 相近, 不会引起 ψ 的突变. 下述计算结果的稳定也表明了这一点.

4. 结果与讨论

4.1. 三维等轴枝晶生长模拟

模拟对象为 Al-4.5wt% Cu 合金试棒. 试样的形状为 $\phi 10\text{mm} \times 80\text{mm}$ 的棒体, 砂型铸造(铸型材料为水玻璃砂), 自然条件下空气冷却, 浇注温度为 710°C . 热物性参数的选择参考 Diepers 等人^[10]所述.

模拟计算的空间步长为: 微观步长为 $2\mu\text{m}$, 宏观步长为 0.5mm . 在 CPU-1.7G 计算机上计算 60h 得到模拟结果.

图 1 为不同时刻模拟的枝晶生长形貌, 显示了枝晶的生长过程. 由图 1(a)~(d) 可以看出, 界面各向异性影响越来越明显, 从图 1(b) 开始, 在一次枝晶臂根部出现明显的颈缩现象. 观察图 1(d), 一次

枝晶臂生长方向的垂直截面也有明显的颈缩现象. 比较 Karma 等人^[11]的模拟结果: 在主枝方向有各向异性, 而主枝截面上各向异性却不明显, 显然本文的结果更加合理. 颈缩现象是界面各向异性生长的合理结果. 生长的后阶段有明显的二次枝晶产生, 二次枝晶臂对预测材料的机械性能有重要意义. 图 2 示出主枝尖端生长直径. 开始时, 由于初始晶核的随意设定, 晶粒生长未达到稳定, 生长直径不稳定; 当晶粒生长到某时刻, 晶粒生长达到稳定, 枝晶尖端直径变得趋于稳定.

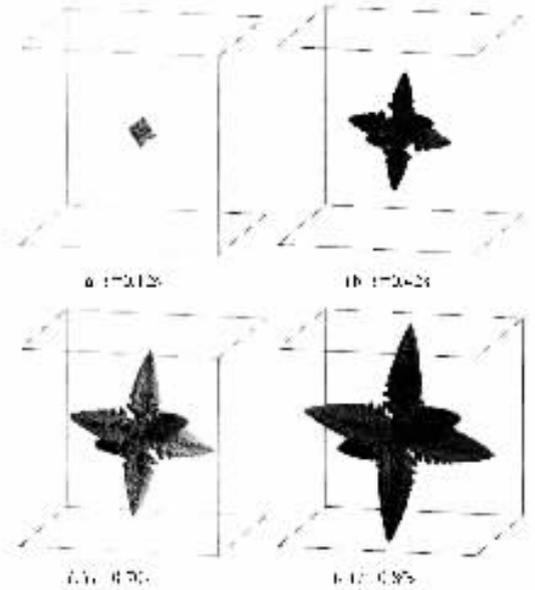


图 1 铝铜合金单晶粒生长模拟

实验获得的晶粒组织如图 3 所示. 取样观察位置与模拟选定的区域相对应. 由于晶粒形核具有无法预测的随机性, 同时金相制作面和晶粒的位置关系难以确定, 所以从晶粒形貌上对实验得到的平面晶粒形貌和模拟得到的空间晶粒形状做出精确的比较几乎不可能. 不过这并不影响问题的研究, 可以粗略比较它们的整体特征. 从图 1 和图 3 能够看出它们的共同特征: 树枝晶, 生长各向异性, 具有二次枝晶. 值得提出的是实验得到的各主枝长度并不相当, 其原因可能为金相制作面与主枝轴心并不平行; 实际凝固中存在对流, 而模拟没有考虑对流的影响.

本文对实验和模拟所获得的主枝宽度和二次枝晶臂作了定量的对比. 模拟的主枝宽度可以由主枝生长达到稳定时的尖端生长直径来近似, 从图 2 可以得出主枝宽度范围为 $30\text{—}35\mu\text{m}$; 实验的主枝宽度为 $20\text{—}40\mu\text{m}$. 从图 1(d) 得到, 二次枝晶臂的模拟结果约为 $30\text{—}40\mu\text{m}$; 实验结果为 $35\text{—}45\mu\text{m}$. 因为微

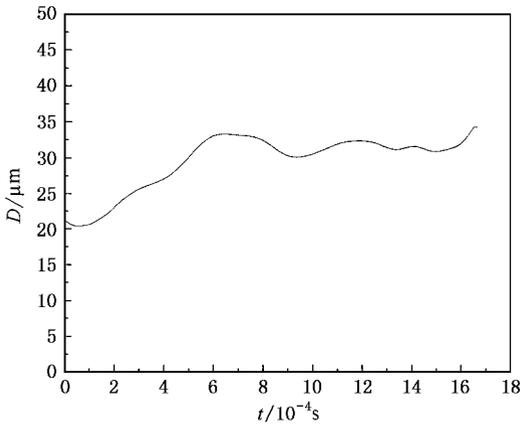


图 2 主枝尖端生长直径

观组织模拟还处于理论发展阶段,模型的发展还需要完善,所以本文并没有精确对比实验和模拟结果.从上面的比较可以看出,本文的模拟结果和实验结果基本相符,同时表明本文所采用的计算方法有效.

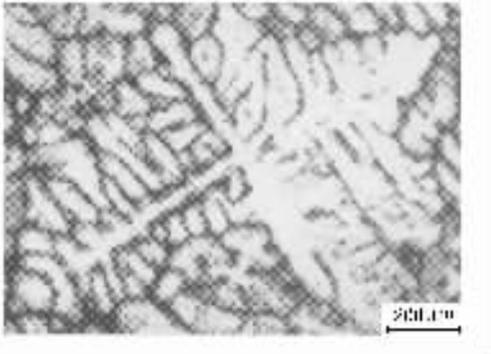


图 3 铝铜合金试样晶粒形貌

4.2. 三维多晶粒枝晶生长模拟

针对金属型铸造 Al-7wt% Si 合金试样模拟,试样的形状为 $\phi 10\text{mm} \times 80\text{mm}$ 的棒体,自然条件下空气冷却,浇注温度为 720°C .

模拟计算的空间步长为:微观步长为 $2\mu\text{m}$,宏观步长为 1mm .在 CPU-266M 的服务器上计算 430h 得到模拟结果.

图 4 为多晶粒的形核和长大过程模拟结果,连续形核模型随机位置形核,所有晶粒的生长各向异性特征被假定为相同.从图 4(c)开始,形核基本完成.图 5 为实验结果,晶粒形貌不是很完整,但仍然可以粗略地比较模拟的晶粒度与计算的晶粒度来验证模拟结果.如果定义平面晶粒度 N_s 为单位面积内的晶粒个数,空间晶粒度 N_v 为单位体积内的晶

粒个数,那么能够近似认为

$$N_s = \sqrt[3]{N_v^2}. \quad (9)$$

实验晶粒度为 $71 \text{ 个}/\text{mm}^2$,模拟晶粒度为 $492 \text{ 个}/\text{mm}^3$ 相当于 $62 \text{ 个}/\text{mm}^2$.计算结果与模拟结果基本相符.

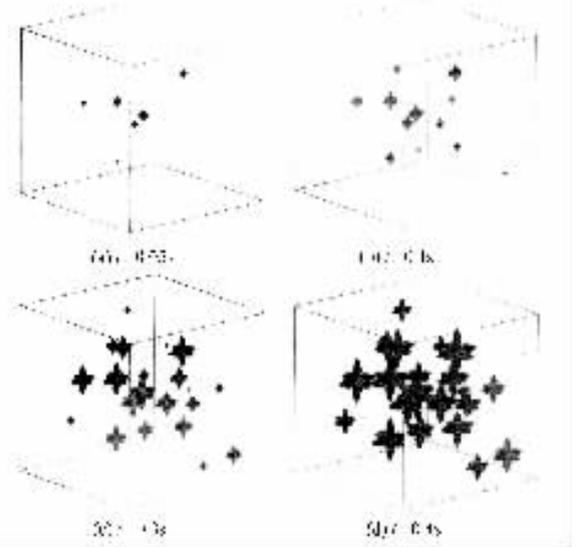


图 4 铝硅合金多晶粒生长模拟

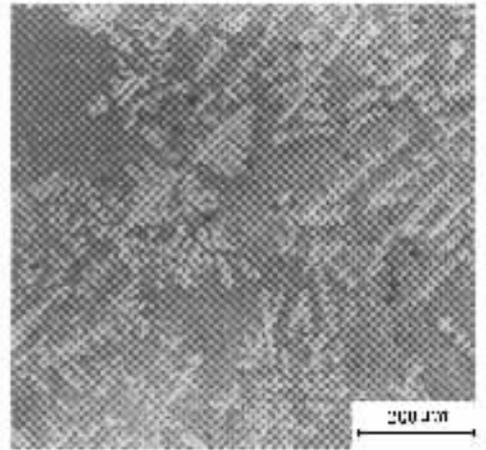


图 5 铝硅合金试样晶粒形貌

三维空间下,由于晶粒间的彼此遮挡,各个晶粒的详细形貌很难观察.为了具体观测多个晶粒的详细轮廓,将不同时刻多晶粒的计算结果(图 4(c)~(d))二维剖切,剖面通过晶粒中心,结果如图 6 所示.理想上图 6 应该与图 5 相一致,就当前微观组织模拟研究的进展而言,这样的结果还难以实现.图 5 为最终的生长形貌,而图 6 示出生长的中间状态,且本模型没有考虑对流的存在,这些因素也是二者不

能很好符合的原因. 从图 6 可以看到一些小的星形状晶粒分布, 它们是由剖切面与晶粒主枝相交得到的, 它们的形状也就是主枝断面的形状, 在平面内有 4 个最优生长方向, 与三维空间各向异性的设定相一致. 某些晶粒显示出主枝与晶核在剖切平面内相脱离的现象, 实际上, 在三维空间上主枝和晶核并没有脱离, 相反它们恰恰是主枝根部颈缩的证明, 如果在靠近三维空间下的晶核中心剖切, 能够观察到主枝和晶核是相连的, 从图 6 其他的晶粒形态也可以观察到.

一个非常有讨论价值的现象是: 当晶粒彼此相

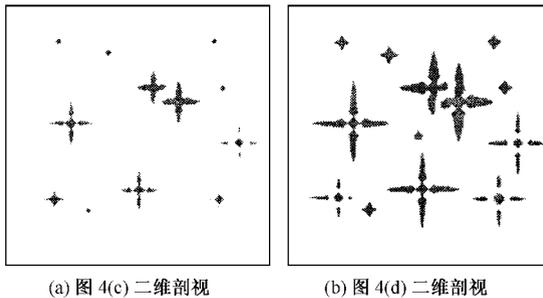


图 6 多晶粒二维剖视获得的晶粒轮廓

向而长时, 生长会彼此影响, 不同晶粒的主枝会彼此抑制, 使得某个晶粒的某一主枝长度比其他主枝长度小, 而且主枝生长弯曲. 这可以通过生长竞争来解释, 在晶粒间产生生长竞争的地方, 各个晶粒的生长均会释放热能, 使得该处过冷度较底, 那么晶粒就向过冷度较大的其他区域生长, 这样就产生了主枝的抑制和弯曲.

在采用两种计算方法后, 我们实现了实际试样局部区域的多晶粒枝晶生长模拟, 对于微观组织模拟实用化有重要的参考意义.

5. 结 论

本文对实际凝固试样尝试微观组织模拟, 采用宏微观温度场耦合, 避免全场微观划分的不可能, 提出界面捕获液态方法加速求解相场方程. 通过这两种算法实现了对两种铝合金试件的单晶粒和多晶粒生长模拟. 经模拟结果分析及其与实验结果的对比, 表明提出的算法是有效和正确的. 结果说明, 在现阶段对实际试样作微观组织模拟是可能的.

- | | |
|--|--|
| [1] Kobayashi R 1993 <i>Physica D</i> 63 410 | [7] Karma A and Rappel W J 1998 <i>Phys. Rev. E</i> 57 4323 |
| [2] Wheeler A A , Murray B T and Schaefer R J 1993 <i>Physica D</i> 66 243 | [8] Tiaden J , Nestler B , Diepers H J and Steinbach I 1998 <i>Physica D</i> 115 73 |
| [3] Karma A and Rappel W J 1996 <i>Phys. Rev. Lett.</i> 77 4050 | [9] Collins J B and Levine H 1985 <i>Phys. Rev. B</i> 31 6119 |
| [4] Li Q and Beckermann C 1998 <i>Phys. Rev. E</i> 57 3176 | [10] Diepers H J , Beckermann C and Steinbach I 1999 <i>Acta Mater.</i> 47 3663 |
| [5] Yu Y M <i>et al</i> 2001 <i>Acta Phys. Sin.</i> 50 2423 (in Chinese] 于艳梅等 2001 <i>物理学报</i> 50 2423] | [11] Karma A and Rappel W J 1996 <i>Phys. Rev. E</i> 53 R3017 |
| [6] Machiko O , Seong G K and Toshio S 2001 <i>ISIJ Inter.</i> 41 1076 | |

Simulating the three-dimensional dendritic growth of Al alloy using the phase-field method^{*}

Zhao Dai-Ping Jing Tao Liu Bai-Cheng

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

(Received 18 October 2002; revised manuscript received 26 November 2002)

Abstract

Numerical simulation of three-dimensional dendritic growth is performed by using a macro-micro coupled method and a capturing liquid method. The growth of the dendritic is controlled by the solution of the phase field equation. Since it is difficult to compute the microstructure of a whole casting, a scheme is adopted that the temperature field is calculated on the whole casting while the microstructure computation is carried out by selecting a macro-cell in the casting samples. Under the condition of not changing the phase-field model, a calculating method is advanced, which captures the liquid cells into the interface ones. In that method, every calculated micro-cell is endowed with a variable which identifies whether the cell is in the interface region and the phase field equation is only solved for those cells in that region. When the grain grows, the method captures the liquid cells into the interface ones and pushes the interface region forward. For the captured liquid cells, the values of the phase variable are modified. We apply the calculating method to improve the calculating efficiency, so the simulation of three-dimensional single grain and multiple grains growth for aluminum alloy samples, can be processed. The simulation results are compared with those obtained experimentally.

Keywords : phase field method, capturing liquid, microstructure, dendrite

PACC : 7115Q, 6480G, 6100, 6185

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50005011).