

微观结点数目对显微偏析数值模拟的影响

刘永刚, 孙瑜, 孙国雄

(东南大学机械系, 南京 210096)

[摘要] 凝固过程微观数值模拟是目前材料学科研究的一个热点, 其中显微偏析数值模拟具有重要的指导意义, 国内在此研究方向上尚处于起步阶段。研究了显微偏析数值模拟中微观结点数目对计算结果的影响, 并与试验结果进行了对照, 指出基于迭代方法的显微偏析模拟结果与微观时间步数之间的关系为弱影响, 不需大量的微观结点数目即可获得比较精确的模拟结果。

[关键词] 显微偏析; 数值模拟; 微观结点

[中图分类号] TG111.4 **[文献标识码]** A **[文章编号]** 1009-1742(2004)02-0077-05

1 前言

显微偏析数值模拟是为了计算铸件或铸锭的枝晶参数及枝晶偏析(包括二次枝晶臂间距、二次枝晶臂中的溶质质量分数分布、固相分数和共晶相的数量), 从而预测材料的组织和性能以及指导进行正确的铸件后续加工。近年来已经出现了很多先进的微观模拟模型^[1~6], 在这些模型中考虑了固相扩散、枝晶粗化、过冷等动力学因素对显微偏析的影响。目前的显微偏析模型大多数为数值模型, 因为数值模型在处理复杂铸件宏观、微观耦合计算时具有不可替代的优势, 并且可以在微观计算中迭代求解溶质扩散方程和溶质守恒方程, 从而计算显微偏析参数。虽然国际上关于显微偏析数值模型算法的研究报道很多, 但是就笔者看到的文献中, 还没有发现关于微观结点数目对显微偏析预测结果影响的报道。结合模拟和试验结果, 讨论了在微观数值方法中的结点数目对计算结果的影响。

2 相图计算的耦合

凝固模型的建立必须以正确描述固-液界面上的相平衡为基础, 关于相图的不正确假设很容易导

致错误的仿真结果。目前, 处理界面平衡最好、最准确的方法是把显微偏析计算和基于 CALPHAD (calculation of phase diagrams) 方法的相图计算耦合起来, 用这种方法, tie-line 可以在每一时间步长中通过解动力学方程计算出来。近几年已经有研究者^[7~9]开始利用相图计算耦合模拟显微偏析。笔者微观计算中耦合了相图计算软件 Pandat 2.0。在计算相图中, 液相(面)线和固相(面)线不再是理想的(面)直线, 而是一系列离散点组成的曲线。对相图数据的利用是以线性插值为基础的。微观模型中使用所有有关相图的数据从计算相图数据中由插值方法计算出并读取到程序中^[10]。

3 模型和算法

3.1 主要的数学物理模型

粗化方程采用 A. Roósz 等人提出的动力学模型^[11],

$$[\lambda(t)]^3 = \int_0^t BM dt, \quad (1)$$

式中 $\lambda(t)$ 是二次枝晶臂间距的一半; B 是一形状因子, 对于特定合金有特定的数值, 对于所选的 Al-4.5% Cu 合金, B 取为 13.125; 粗化参数 M

定义为

$$M = \frac{\gamma D_L T}{m(1-k)\Delta H C_L^*}, \quad (2)$$

式中 ΔH 为熔融焓, γ 为固液界面能, D_L 为溶质在液相中的扩散系数, T 为温度, m 为液相线斜率, k 为平衡溶质分配系数, C_L^* 为固液界面上液相中的溶质质量分数。

固相中的溶质再分配符合菲克第二定律:

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_s \frac{\partial C_s}{\partial x} \right), \quad (3)$$

式中 C_s 为固相溶质质量分数, D_s 为溶质在固相中的扩散系数。

考虑在二次臂内区域的封闭系统, 溶质分配应满足守恒控制方程:

$$C_L^*(X(t) - X_s) + \int_0^{X_s} C_s dx = X(t)C_0, \quad (4)$$

式中 $X(t)$ 是体积元的长度, X_s 是固相长度, C_0 是合金名义成分。

枝晶尖端过冷采用被广泛引用的 KGT 模型迭代计算^[12], 该模型是 Kurz, Giovanola 和 Trivedi 在研究枝晶尖端溶质平衡的基础上建立的, 定量地描述了枝晶尖端半径 r_T 、枝晶尖端生长速度 v_g 与尖端过冷度 ΔT_T 之间的关系。主要包含以下各式:

$$\Delta T_T = mC_0 \left(1 - \frac{1}{1 - \Omega(1-k)} \right), \quad (5)$$

$$\Omega = \frac{C_L^* - C_0}{C_L^*(1-k)} = I_v(P_e), \quad (6)$$

$$P_e = \frac{r_T v_g}{2D_L}, \quad (7)$$

$$r_T = 2\pi \left(\frac{\Gamma}{m_L G_c \xi_c(P_e) - G} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (8)$$

式中 Ω 为枝晶尖端的溶质过饱和度, P_e 为溶质的 Péclet 数, Γ 为 Gibbs-Thomson 系数, $\Gamma = \frac{\gamma T_T}{\Delta H}$, I_v 为 Ivantsov 函数, 可表示为

$$I_v(P_e) = P_e \exp(P_e) \text{Ei}(P_e), \quad (9)$$

Ei 为指数积分函数 $\text{Ei}(P_e) = \int_{P_e}^{\infty} \frac{\exp(-z)}{z} dz$ 。

3.2 微观模型数值方法

宏观计算出铸件各结点的冷却曲线以后, 输入显微偏析微观模型计算各结点的显微偏析参数, 在微观计算中考虑了各种凝固过程的动力学现象, 迭代求解各项显微偏析参数。

在微观计算中, 对于每一结点, 首先读取宏观

计算的冷却曲线, 计算树枝晶尖端过冷, 得到枝晶尖端过冷度以后, 将局部凝固 t_f 时间离散为一定数目的时间段, 这样就可以在每一时间步长内迭代求解各个控制方程, 这个时间段的数目决定了微观结点的数目, 也就是讨论的焦点。在每一时间步长计算开始时, 首先由热力学计算相图读取界面平衡信息, 求解粗化方程获得此时二次臂间距的值, 然后就可以使用 Scheil 方程计算出此时的固相体积分数, 并可以由得到的固相分数估算此时固相长度和固相长度在此时间步长内的增加量 Δx_{est} 。

采用相同的离散化方法求解溶质扩散方程和溶质守恒方程, 见图 1, 这种离散化方法将每一时间步长凝固出的固相长度分为两部分, 分别属于不同的结点参加固相扩散计算。由于固相内溶质质量分数是递增的, 这样就避免了由此结点代表一个整时间段形成固相长度所带来的误差。结点所在位置为每一微观时间步长后界面所在的位置, 从而达到显式跟踪自由边界的目的。

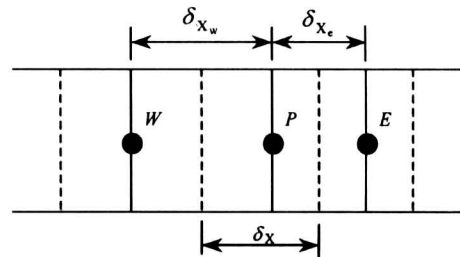


图 1 微观计算离散化方法

Fig.1 Numerical dispersed method in micro calculation

求解溶质扩散方程时使用的固相溶质质量分数, 使用该结点当前时刻求解溶质扩散方程得到的各微观结点的溶质质量分数, 液相溶质质量分数为相图液相线给出的液相成分。通过这个求解溶质分布的过程又可以得到一个具体计算出的固相长度增加量 Δx_{cal} , 当这 2 个值的差别不符合收敛条件时, 用计算出的 Δx_{cal} 替代 Δx_{est} , 再次求解扩散方程与守恒方程, 直到迭代收敛为止, 这样就在固相分数的计算上考虑了各种动力学因素, 修正了开始估算的固相分数。值得注意的是, 由于在微观计算中, 时间步长是由等分局部凝固时间 t_f 预先给定的, 所以求解扩散方程必须采用有限差分的全隐式求解方法, 因为这个预先给定的时间步长未必满足显式差分的求解稳定性条件。重复上述过程, 直至该结点的温度到达合金的共晶温度, 即所有的微观时间

步长循环完毕后，认为剩余液相瞬时转变为共晶体，然后进入下一结点的计算，当所有宏观节点都运算完毕以后，就可以得到整个铸件或铸锭的显微偏析参数。图 2 为微观数值方法的流程图。

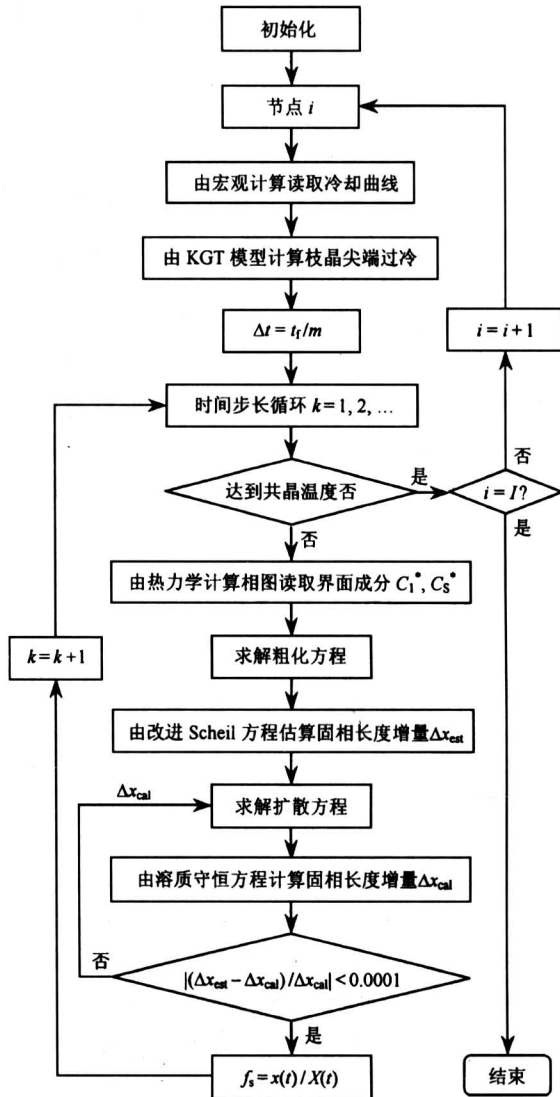


图 2 显微偏析数值模拟微观数值方法

Fig.2 Scheme of the numerical method of micro model for microsegregation simulation

由上述算法可以看出，在显微偏析微观模型中，将局部凝固时间离散为若干个时间段进行迭代显微偏析参数的计算。一般认为，离散化步长愈细密，计算结果愈精确；而如果结点划分越多，计算量肯定会越大，程序运行时间也将会大大增加，这就需要在计算精度要求和减少计算量二者之间综合考虑，得到一个既能满足计算精度要求又能尽量减少计算量的离散化结点数目。

4 结果讨论与验证

表 1 给出了微观时间步数为 5, 10, 20 的情况下，凝固结束后不同位置处的显微偏析计算结果与试验结果的对比。可见，当微观时间步数选取 10 和 20 时，对凝固结束后的二次臂间距几乎没有影响，数据的变化在于多位有效数字以后，而且这种差别显然来自计算误差，而非计算结果精度的增加；微观结点数对共晶相体积分有很微小的影响，这是因为在求解溶质扩散方程时选取的控制容积大小不同引起的。当结点数为 20 时，共晶相体积分有了很微小的增加，这是由于当求解计算固相溶质扩散方程时，控制容积变小，即一个结点的溶质质量分数代表更小体积的一个容积内的溶质质量分数，使计算结果有了微小的变化。当然，这是有利于计算结果的精度提高的，但是，由于计算结果相差无几，有理由认为不必要为了获得如此小的差别而牺牲相当大的系统资源和计算时间。而当选取微观时间步数为 5 时，共晶相体积分就有一定差距了，即这时在处理固相扩散问题上收敛程度不高，认为达不到计算的精度要求。所以，当微观结点数目为 10 的时候，可以认为计算结果已经较好地收敛，继续增加微观结点数目不会给显微偏析模拟带来更加精确的计算结果，选取此数目是合理、足够的，而选取微观结点数目为 5，认为计算结果精确度不够高。

表 1 微观结点数对凝固结束后显微偏析参数的影响

Table 1 Influence of micro steps on microsegregation simulation results after solidification

测定点位置 距离圆心 /mm	二次臂间距/ μm	共晶相体积分/%						
		试验 结果	模拟结果(结点数目)			试验 结果	模拟结果(结点数目)	
		5	10	20	5	10	20	
19	26	26.3	26.3	26.3	7.91	7.53	7.64	7.65
15	26	26.5	26.5	26.5	8.39	8.07	8.17	8.18
11	28	26.6	26.6	26.6	9.08	8.68	8.75	8.76
8	29	27.0	27.0	27.0	10.20	9.08	9.15	9.16

图 3 为微观时间步数为 10 和 20 的情况下，凝固结束后特定位置处的二次臂内的溶质分布情况计算结果与试验结果的对比，图中方形点所表示的曲线为微观时间步数为 10 时的模拟结果，五角形点表示的曲线为微观时间步数为 20 时的模拟结果，三角形点所表示的线为试验结果。由图 3 可以看出，方形点和五角形点表示的曲线趋势相同，几乎

完全重合, 这同样说明, 微观结点数目为 10 的情况下, 模拟结果已经收敛得非常好, 无需继续增加结点数目。图 4 为特定位置处采用不同微观时间步数目计算出的固相分数随凝固时间的变化, 方形点和三角形点代表的曲线分别为微观时间步数目为 10、20 时的计算结果, 可以看出, 2 条曲线重合非常好, 即微观时间步数目的增加同样几乎没有对结果造成任何影响。

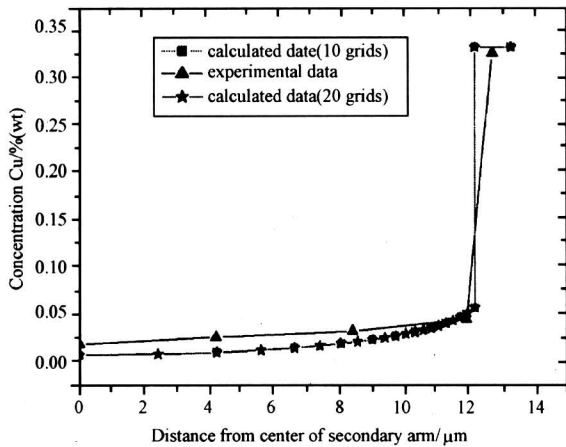


图 3 微观结点数目对凝固结束后二次臂内容质分布的影响

Fig.3 Influence of micro steps on solute distribution in secondary arm after solidification

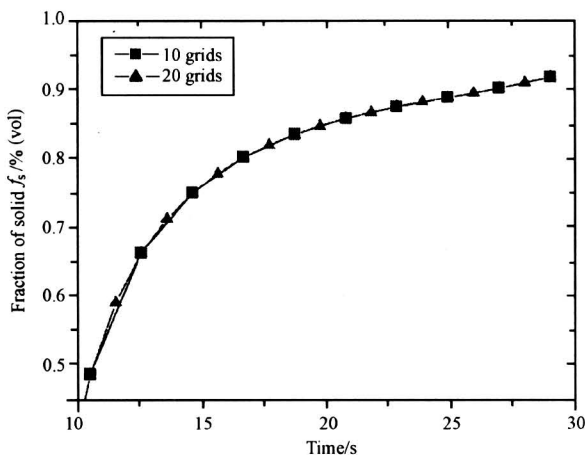


图 4 微观结点数目对固相分数变化的影响

Fig.4 Influence of micro steps on variation of fraction of solid according to solidification time

综上所述, 根据表 1、图 3、图 4 所示的对比, 可以认为基于迭代方法计算的显微偏析参数与微观时间步数目之间的关系为弱影响, 微观结点数

目对显微偏析模拟计算的结果影响不显著。显然, 微观时间步数目为 10 对于显微偏析数值模拟结果是足够精确的, 不必要再考虑增加微观结点数目、消耗大量计算时间这种途径来提高计算结果的精确性。

5 结论

1) 考虑了树枝晶的粗化、枝晶尖端过冷、有限固相溶质扩散和随温度变化的热物理参数, 对 Al-4.5% Cu 合金整体铸锭凝固过程中显微偏析的形成进行了数值模拟, 再现了合金凝固过程中显微偏析的形成, 并与试验结果进行了对照, 试验结果与模拟结果吻合较好。

2) 讨论了微观结点数目对显微偏析数值模拟结果的影响, 对比了不同模拟条件下的计算结果。指出基于迭代算法的显微偏析参数计算与微观结点数目之间的关系为弱影响, 当微观时间步数目为 10 时, 计算结果已经完全收敛, 计算量不算太大, 不必继续增加微观结点数目。

参考文献

- [1] Kraft T. Coupling of a macroscopic solidification simulation with a micro model and thermodynamic calculations of phase diagrams [J]. *Int J Cast Metals Res*, 1996, 11(4): 51~61
- [2] Voller V R. A model of microsegregation during binary alloy solidification [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2000, 43(11): 2047~2052
- [3] Dore X, Combeau H, Rappaz M. Modeling of microsegregation in ternary alloys: application to the solidification of Al-Mg-Si [J]. *Acta Mater*, 2000, 48(15): 3951~3962
- [4] Voller V R. A semi-analytical model of microsegregation and coarsening in a binary alloy [J]. *Journal of Crystal Growth*, 1999, 197(2): 333~340
- [5] Yoo H, Kim C J. A refined solute diffusion model for columnar dendritic alloy solidification [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 1998, 41(24): 4379~4383
- [6] Voller V R. A semi-analytical model of microsegregation in a binary alloy [J]. *Journal of Crystal Growth*, 1999, 197(2): 325~332
- [7] Boettinger W J, Kattner U R, Banerjee D K. Analysis of solidification path and microsegregation in multicomponent alloys [A]. Thomas B G, Becker-

- mann C. Modelling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processed-VIII (1) [C]. Warrendale, PA: TMS, 1998. 159~170
- [8] Greven K, Fackeldey M, Ludwig A, et al. Macroscopic modeling of the microstructural evolution in castings using thermodynamic formulated phase diagrams [A]. Thomas B G, Beckermann C. Modelling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processed-VIII (1) [C]. Warrendale, PA: TMS, 1998. 187~194
- [9] Kraft T, Liang H, Chang Y A. An approximate method for coupling microscopic and macroscopic simulations using calculated phase diagrams [A]. Thomas B G, Beckermann C. Modelling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processed-VIII (1) [C]. Warrendale, PA: TMS, 1998. 203~210
- [10] 刘永刚,陈晋,孙国雄,等. 相图计算耦合显微偏析数值模拟的宏/微观数值方法 [J]. 铸造, 2003, 52(2): 123~125
- [11] Roos A, Halder E, Exner H E. Numerical calculation of microsegregation in coarsened dendrite microstructures [J]. Materials Science and Technology, 1986, 2(11): 1149~1155
- [12] Kurz W, Giovanola B, Trivedi R. Theory of microstructural development during rapid solidification [J]. Acta Metal, 1986, 34(5): 823~830

Discussion About Influence of Microgrid Number on Microsegregation Simulation

Liu Yonggang, Sun Yu, Sun Guoxiong

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

[**Abstract**] Micro simulation of solidification process is one of the focuses in material field, and simulation on microsegregation forming has important effect on directing materials processing. But papers about this field were seldom found on domestic publications. Influence of micro time steps on microsegregation simulation results was investigated in this paper and it is pointed out that the relation between the micro time steps and the microsegregation simulation results is weak for iterative method based microsegregation simulation. It is not necessary for using a large number of micro grids to converge the calculated results.

[**Key words**] microsegregation; simulation; micro grid