

引文格式: 王兵, 王俊升. 铝合金凝固过程中缺陷预测模型研究进展 [J]. 航空制造技术, 2022, 65(5): 76-86.

WANG Bing, WANG Junsheng. Research progress on defect predictions during solidification of aluminum alloys[J]. Aeronautical Manufacturing Technology, 2022, 65(5): 76-86.

铝合金凝固过程中缺陷预测模型研究进展*

王 兵¹, 王俊升^{1,2}

(1. 北京理工大学材料学院, 北京 100081;

2. 北京理工大学前沿交叉科学研究院, 北京 100081)

[摘要] 近些年航空航天对轻质高强抗疲劳铝合金的需求日益迫切, 铸造缺陷的预测与抑制技术受到广泛重视。铝合金凝固过程中产生的氢气孔缺陷是疲劳失效的主要裂纹源, 其预测与控制技术是高品质铝合金制备加工的核心工艺技术。在国外, 元胞自动机(CA)等具有物理意义且计算效率较高的微观组织结构模型已成功地应用于先进铸造工艺的设计, 如飞机发动机单晶叶片、飞机发动机涡轮盘, 以及飞机蒙皮高强轻质铝合金工艺窗口优化。总结了计算模型应用于铝合金凝固过程中缺陷的预测及最新研究进展, 提出了未来缺陷预测模型的发展方向。

关键词: 铝合金; 凝固; 微观组织结构; 缺陷预测; 元胞自动机模型

Research Progress on Defect Predictions During Solidification of Aluminum Alloys

WANG Bing¹, WANG Junsheng^{1,2}

(1. School of Materials Science & Engineering, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China;

2. Advanced Research Institute for Multidisciplinary Science, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

[ABSTRACT] In recent years, rapid development of aerospace and aeronautic industries demands for light-weight, high strength, and fatigue resistant aluminum alloys. Predictions of cast defects and technologies of controlling those defects become more and more important. Hydrogen porosity is one of the major initiators for the fatigue failures of aluminum alloys, which forms during solidification. In the foreign companies, mathematical models such as cellular automaton (CA) model have been widely used to optimize the advanced casting practices such as single crystal turbine blades, turbine disc, and exterior frames for aircraft engines. This paper summarizes the most recent progresses of defect prediction models for solidification process, and propose the future directions for modeling of casting defects.

Keywords: Aluminum alloys; Solidification; Microstructure; Defect prediction; Cellular automaton models

DOI: 10.16080/j.issn1671-833x.2022.05.076

铝合金由于密度小、强度高、耐腐蚀性能优、塑性好、易加工成形等优点, 广泛应用于航空航天飞行器设计。在航空方面, 飞机向大机型、高速度方向发展, 铝合金占飞机总重的 60%~80%^[1-2]。

近年来, 新型航空器设计对抗疲劳铝合金提出了更高要求^[3-6]。但铝合金在铸造过程中会不可避免地出现

孔洞等缺陷。经研究表明, 作为疲劳失效的裂纹源, 孔洞大小决定了疲劳寿命。然而, 通过对凝固过程模拟研究可以帮助研究人员设计合理的铸造工艺来调整合金微观组织结构, 从而获得性能优异的铝合金。因此, 合金凝固过程中, 对微观组织结构进行预测尤为重要。

对凝固组织的研究分为实验法、解析法和数值模拟

* 基金项目: 国家自然科学基金面上基金(52073030); 国家自然科学基金区域创新发展联合基金(重点项目)(U20A20276)。

3种方法。由于合金在凝固过程中的微观形貌不易观察且枝晶形貌较为复杂,相较于其他两种方法,数值模拟更能形象地呈现枝晶的生长过程和最终形貌,因此元胞自动机(CA)、相场法(PF)、前沿跟踪法(FT)等数值模拟方法得到了快速发展^[7-9]。而元胞自动机是数值模拟中一种高效、形象的计算方法。随着凝固物理原理和计算机的不断完善,CA模型用于凝固过程的模拟也越来越接近实际凝固过程。

本文主要对凝固模型的理论、发展历程、模拟方法以及铝合金凝固中缺陷预测等方面的学术文献进行归纳,通过分析提出该领域未来发展方向。

1 枝晶生长模型

1.1 凝固理论基础

凝固理论是枝晶模型建模的基础,在晶粒生长和组织形成的物理基础上进行建模,能更好地获得与真实结果相近的凝固组织。凝固理论主要包括形核、过冷、枝晶生长动力学和溶质再分配。

1.1.1 形核

根据基本形核理论,形核过程包括均质形核和非均质形核。在实际凝固过程中,由于铸型内壁表面凹凸不平和不熔颗粒等杂质的存在导致大多数形核为异质形核。异质形核模型分为瞬时形核和连续形核两种模型^[10]。

瞬时形核模型假设所有晶核的形成过程是在同一过冷度下瞬时形成的。Hunt^[11]基于大量试验数据预测完全等轴结构出现的关系表达式为

$$\frac{\partial N}{\partial t} = K_1 [n_s - n(t)] \exp\left(-\frac{\Delta G^* f(\theta)}{k_B T}\right) \quad (1)$$

式中, K_1 是常数; n_s 为非均质形核基底密度; $n(t)$ 为 t 时刻的晶核密度; ΔG^* 为形核激活能; θ 为非均质形核基底与晶核的接触角; k_B 为 Boltzmann 常数; T 为温度。接触角 θ 和形核密度 n_s 可由试验确定。瞬时形核模型适用于异质形核质点种类、尺寸等完全相同的情况,但实际合金溶液中含有不同的形核质点,因此晶核密度也不断发生变化。

连续形核模型假设晶核密度依赖于过冷度,形核过程在一定温度范围连续完成。Oldfield^[12]基于连续形核的概念,提出了连续形核模型

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -n\mu_1 (\Delta T)^{n-1} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2)$$

式中, n 、 μ_1 为试验确定的常数; ΔT 为过冷度。

目前,大部分CA模型采用形核模型是Thévoz等^[13]根据Oldfield等^[12]提出的非均质连续形核模型,对于给定过冷度 ΔT ,形核数量 $N(\Delta T)$ 可由正态分布公式表示为

$$N(\Delta T) = \frac{N_{\max}}{\sqrt{2\pi}\Delta T_\sigma} \int_0^{\Delta T} \exp\left[-\frac{(\Delta T' - \Delta T_M)^2}{2(\Delta T_\sigma)^2}\right] d(\Delta T') \quad (3)$$

式中, ΔT_M 为分布平均值; ΔT_σ 为标准偏差; N_{\max} 为过冷度较大时铸件会形成的晶粒总密度。图1所示为非均匀连续形核模型,其中 m^2 为二维上计算面积, m^3 为三维上计算面积; $\Delta T_{s, \max}$ 、 $\Delta T_{b, \max}$ 为二维和三维条件下形核过冷度的期望值; $2\Delta T_{s, \sigma}$ 和 $2\Delta T_{b, \sigma}$ 为二维和三维条件下形核过冷度的取值偏差。

1.1.2 生长动力学

晶粒形核和生长驱动力为过冷度。通常认为枝晶尖端的过冷度由成分过冷、曲率过冷、热过冷和动力学过冷4种组成,其中成分过冷 ΔT_c 是由于浓度差引起,是影响枝晶生长的主要因素;曲率过冷 ΔT_r 是界面曲率引起的过冷;热过冷 ΔT_t 是凝固过程潜热释放产生;动力学过冷 ΔT_k 在速率较低的情况下可忽略不计。总过冷度 ΔT 可以表示为

$$\Delta T = \Delta T_c + \Delta T_r + \Delta T_t + \Delta T_k \quad (4)$$

Kurz等^[14]考虑到枝晶尖端溶质平衡的基础上提出了KGT模型,KGT模型计算过冷度可以忽略曲率过冷和成分过冷。在CA模型中,KGT模型是计算晶粒尖端生长速率常用的方法。对于介观尺度上经典的CA模型来说,用温度过冷来表示过冷度;对于微观尺度上的CA模型来说,考虑了溶质再分配和界面曲率等因素,常用局部过冷来表示过冷度。

KGT模型基于界面稳定性理论,给出了尖端半径、尖端生长速率和界面前沿过冷度之间的关系,应用模型时拟合为过冷度与生长速率的关系为

$$v_i = \alpha_1 \Delta T^2 + \alpha_2 \Delta T^3 \quad (5)$$

式中, v_i 为生长速率; α_1 、 α_2 为生长系数。

KGT算法只适用于尖端稳定生长时的情况,不能应用于整个枝晶界面的生长。考虑到生长取向和各向

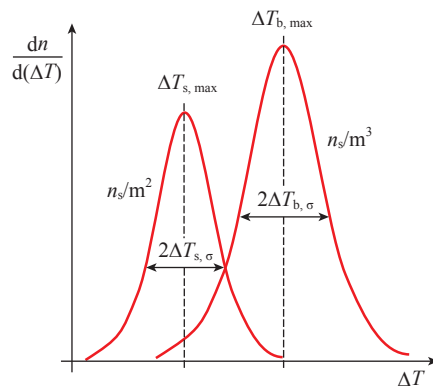


图1 异质形核模型

Fig.1 Heterogeneous nucleation model in melt

异性后,基于枝晶生长时溶质和能量守恒原理的模型^[15]可用来计算枝晶生长速率,其表达式为

$$v_n C_L^* (1 - k_0) = \left[D_s \left(\frac{\partial C}{\partial n} \right)_s - D_L \left(\frac{\partial C}{\partial n} \right)_L \right] \quad (6)$$

$$v_n \Delta H = \left[\lambda_s \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_s - \lambda_L \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_L \right] \quad (7)$$

式中, C_L^* 是界面处液相中溶质浓度; k_0 是平衡溶质分配系数; D_L 是溶质在液相中的扩散系数; D_s 是溶质在固相中扩散系数; n 是固液界面法向量; ΔH 是凝固过程中的焓变; λ_s 是固相的热扩散系数; λ_L 是液相热扩散系数。

1.1.3 界面曲率和各向异性

CA 模型的介观尺度和微观尺度的不同在于生长动力学的计算。介观尺度只需考虑温度过冷,而微观尺度上还需要考虑曲率过冷和成分过冷。对枝晶的曲率和各向异性的计算是 CA 模型完成改进的重要步骤。计算曲率方法有两种,第 1 种是 Nastac^[16] 根据界面邻近固相分数计算曲率 K ,其表达式为

$$K = \frac{1}{\Delta x} \left[1 - \frac{2}{N+1} \left(f_s + \sum_{i=1}^N f_s(j) \right) \right] \quad (8)$$

式中, Δx 为格子尺寸; f_s 为固相分数; N 为邻位的个数。第 2 种是 Kurz^[14] 根据界面固相分数的梯度进行计算,其表达式为

$$K = \left[\left(\frac{\partial f_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial f_s}{\partial y} \right)^2 \right]^{-3/2} \times \left[2 \frac{\partial f_s}{\partial x} \frac{\partial f_s}{\partial y} - \frac{\partial f_s}{\partial x} \frac{\partial^2 f_s}{\partial y^2} - \frac{\partial f_s}{\partial y} \frac{\partial^2 f_s}{\partial x^2} \right] \quad (9)$$

式(8)是一种定性的计算方法,不能代表曲率的实际意义,但是计算简单、效率高,当网格尺寸较大时,可根据固相分数近似单个网格内部的曲率。然而,式(9)的计算方法具有严格的数学基础,具有更明确的物理意义。但是,该式的推导基于网格大小与枝晶间距相比足够小,适用于捕捉固/液界面曲率引起的过冷,因此第 2 种方法更适用于模拟二次枝晶、3 次枝晶臂的生长。该方法的缺陷在于:当枝晶与枝晶相遇,界面液相区域接近于 0 时,固相分数增加值接近于无穷小,造成曲率极大值,从而产生不真实的枝晶绕行。对于某些合金系(Fe-C 和 Al-Si 等),第 1 种计算方法可改善上述情况,因此应用得较为普遍。

由于固/液界面存在各向异性,因此枝晶生长具有择优取向。对于具有 4 重对称体系,各向异性函数为^[18]:

$$\gamma(\varphi, \theta_0) = \gamma_0 \cdot \Psi(\varphi, \theta_0) \quad (10)$$

$$\Psi(\varphi, \theta_0) = 1 + \varepsilon \cos 4(\varphi - \theta_0) \quad (11)$$

式中, $\gamma(\varphi, \theta_0)$ 为固/液界面能; γ_0 为平均固/液界面能;

$\Psi(\varphi, \theta_0)$ 为界面能各向异性函数; ε 是界面能各向异性强度系数; θ_0 为择优生长方向与 x 轴的夹角; φ 为界面法向与 x 轴夹角。

存在各向异性时,固/液界面曲率如图 2 所示。

1.1.4 溶质再分配

假设晶粒生长界面处于平衡状态,溶质原子在固/液界面界面上会进行再分配。为了简化模型,一般忽略液体对流对溶质再分配影响,得到溶质在凝固过程中扩散方程^[19]

$$\frac{\partial C_L}{\partial t} = \nabla \cdot (D_L \nabla C_L) \quad (12)$$

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = \nabla \cdot (D_s \nabla C_s) \quad (13)$$

式中, C_L 、 C_s 分别为溶质在液相和固相的浓度; D_L 、 D_s 分别为溶质在液相和固相的扩散系数。

溶质在液相和固相浓度存在一定的分配系数。由于溶质在固相中的扩散能力较小,可认为固相中不存在扩散。当凝固驱动力较小时,溶质原子在界面处局部平衡可以得到以下方程式

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_1 \frac{\partial C_1}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[D_1 \frac{\partial C_1}{\partial y} \right] + C_1 (1 - k) \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (14)$$

式中, D_1 为溶质扩散系数; k 为分配系数。

1.2 凝固枝晶模型基本原理

凝固组织数值模拟主要研究方法分为解析、统计和相场方法。解析法只适用于简单的二维结构,无法求解复杂的三维凝固组织。统计的方法主要有蒙特卡罗(MC)法和 CA 法。CA 模型以凝固过程中晶粒的形核和生长的物理机理为基础,相对于 MC 具有物理依据,能定量分析各物理量对凝固组织的影响。CA 模型虽然是以统计概念为基础的模型,为了更准确地描述凝固过程中的组织形成,CA 模型采用解析解与统计规律相结合方法。CA 模型对于晶粒形核密度和枝晶尖端生长速率原始计算采用解析解可以较准确得到晶粒的尺寸,但

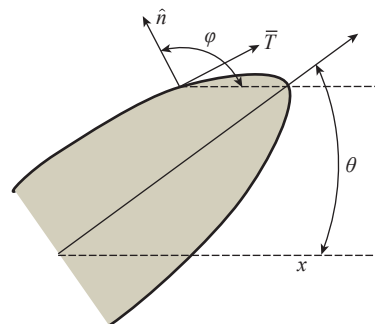


图 2 凝固过程中存在各向异性时固/液界面生长示意图
Fig.2 Schematic of S/L interface in presence of anisotropy

由于非统计法无法再现晶粒生长、竞争等过程,对形核位置和晶体学取向采用随机性方法。

CA 模型是在时间和空间上都离散的动力学系统。其基本原理是以一定形式将空间划分为元胞,每个元胞储存其状态值,如温度、溶质浓度、固相分数等物理信息。元胞的状态演化依据区域进行,即给定时间步的元胞状态由其自身和邻近元胞上一时间步状态决定。在 CA 计算中,晶粒长大可表示为固态元胞按一定规则捕获周围液态元胞的过程,当液态元胞变为固态时,与母胞具有相同的生长取向。CA 模型可以预测枝晶生长、竞争等过程以及柱状晶向等轴晶的转变过程。

2 CA 模型的发展

2.1 经典 CA 模型的发展

CA 模型最初应用于介观尺度上凝固组织的演化。1989 年, Rappaz^[20] 首先建立了研究凝固过程晶粒形核和生长过程的 CA 模型。该模型是将晶粒的成核和生长与连续性热场和液体流动模型相耦合从而模拟均匀温度场下的晶粒的生长。CA 模型的形核采用非均质形核的连续模型,晶粒尖端的生长速率应用 KGT 模型进行计算,在模型中还包括溶质的扩散、晶体学的择优取向和晶粒间竞争生长等物理现象,可以模拟出柱状晶和等轴晶的凝固组织。此外,晶粒生长方向的算法是晶粒形貌呈现的主要因素之一,文中对晶粒生长方向的处理方法为:在模型中假设晶粒生长外形为正方形,同时为了保持晶粒生长方向不偏离先前的生长方向对晶粒尖端进行修正,其中图 3 (a) 为正方形生长及尖端修正后的示意图。随后, Gandin 等^[21] 基于二维模型开发凝固过程的三维 CA 模型。该模型用八面体形状代替晶粒形状,从而确定晶粒的生长方向,结果表明模拟结果接近实际情况。但无论二维还是三维模型都是在温度均

匀情况下进行模拟,热场计算与实际情况有所偏差。为了解决温度场的问题,1994 年, Gandin 等^[22] 提出将有限元热流计算与之前二维 CA 模型相耦合,每个元胞温度用相对应有限元节点处的温度代表,用来计算晶粒的成核和生长,并将凝固过程释放的潜热反馈到各节点处,这种将晶粒凝固时释放潜热反馈到宏观热流模型的方法可以用来计算非均匀温度场的情况。对此,改进了元胞生长算法,提出 2D 长方体算法,如图 3 (b) 所示。2D 长方体算法可以计算随机取向二维晶粒的生长,因此可以应用于任意热场的计算。由于方形尖端修正方法以及 2D 长方形算法很难扩展到三维不均匀温度场晶粒生长计算,三维 CA 模型一度无法向前发展。直到 1997 年, Gandin 等^[23] 提出了新想法,对二维和三维晶粒生长取向提出“偏心四面体”和“偏心八面体”算法,避免枝晶在生长过程中偏离初始方向。

2.2 改进 CA 模型的发展

经典 CA 模型没有考虑到溶质再分配、界面曲率等因素对晶粒演化的影响,从而使模拟结果与实际凝固过程有所偏差,也无法得到晶粒的形貌。近年来,研究人员不断提出新模型来克服经典 CA 模型存在的问题,而且 CA 模型也从介观尺寸发展到微观尺寸。如今, CA 模型已经可以模拟出晶粒形态、孔隙等缺陷组织。

2.2.1 CA 模型中晶粒模型的发展

自 2001 年开始, Zhu 等^[24-29] 提出了一种改进 CA 模型来模拟凝固过程枝晶和共晶演化过程,研究了熔体内树枝晶自由生长和竞争生长的微观结构以及规则共晶和不规则共晶生长模式。在只计算热过冷度的经典 CA 模型基础上,模型还考虑了溶质在固/液界面再分配以及界面曲率。

该模型在根据 KGT 模型计算尖端生长速率与过冷度关系时,不再只考虑热过冷,还考虑了成分过冷和曲

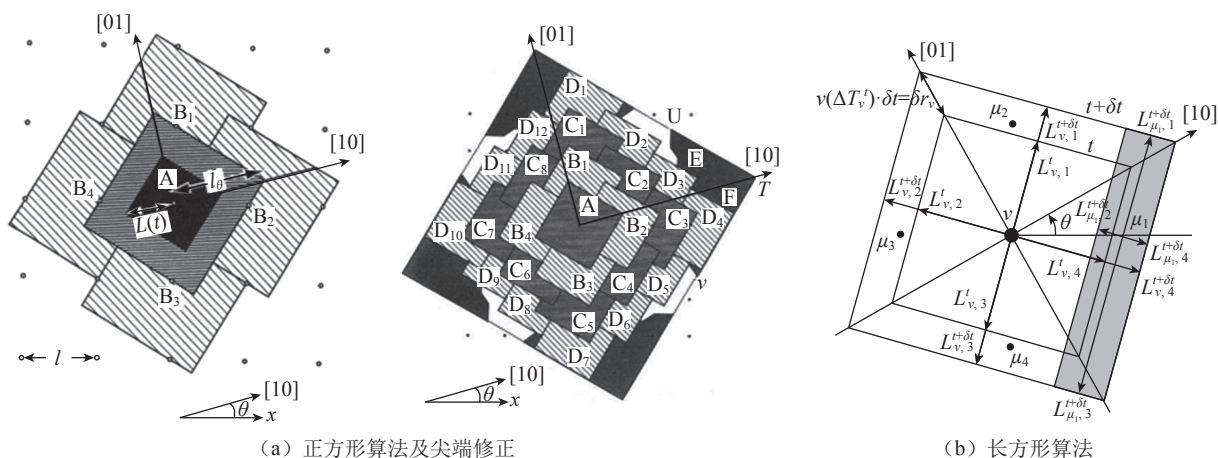


图 3 固/液界面的晶粒取向算法

Fig.3 Grain orientation algorithm for S/L interface

率过冷对界面平衡温度影响。局部过冷可表示为

$$\Delta T(t) = T_1 + [C(t) - C_0] \cdot m - T(t) - \Gamma \bar{K}(t) \quad (15)$$

式中, T_1 为合金液相平衡温度; C_0 为合金初始浓度; Γ 为吉布斯系数; $\bar{K}(t)$ 、 $C(t)$ 、 $T(t)$ 为 t 时刻界面处元胞平均曲率、溶质浓度和温度。

基于各向异性和曲率计算, 可得到微观尺度上枝晶形貌。2001 年, Zhu 等^[24] 提出了新的生长算法, 该算法不仅可以预测粗糙的晶粒结构, 还可以预测晶粒内部的枝晶生长形态, 包括初生枝晶的生长和粗化、次生枝晶甚至三次枝晶生长。新算法的原理是对于界面元胞来说, 与其相邻的 8 个元胞至少有 1 个液态元胞, 界面沿液态元胞方向生长距离 L 由择优方向的生长距离进行转化得到。如果为最近邻位置 i 上的液态元胞, 当生长距离 L 大于元胞尺寸 Δx 时捕获该元胞。同理, 如果该液态元胞位于次近邻位置 j 上, 当生长距离 $L > \sqrt{2} \Delta x$ 时捕获该元胞。其捕获原理如图 4 所示。

2002 年, 许庆彦等^[30] 为了描述枝晶形状, 提出了通过数学构造方法。在研究中引入形状因子来描述等轴晶轮廓曲线, 即

$$L(\theta) = L_0[A' + (1-A') \cos 4\theta] \quad (16)$$

式中, A' 为形状因子; L_0 可通过生长过程数值计算得到; θ 为生长方向与择优生长方向之间的夹角, 如图 5 所示。

2.2.2 CA 模型孔隙模型的发展

孔隙分为缩孔和气孔。缩孔是指浇筑过程中液体流动不充分导致补缩不足而产生的孔隙; 气孔是指氢在固态和液态铝合金中溶解度不同而产生的孔隙。孔隙的产生较大程度损害了材料性能, 因此孔隙模型的建立对预测材料性能有较大的意义。研究表明, 通常最大孔隙的大小是影响材料力学性能的主要因素, 且位于表面附近的孔隙更容易引起材料失效。因此不应只对孔隙率进行求解, 孔隙的大小、形貌和位置的预测也十分重要。

2001 年, See 等^[31] 基于孔隙的二维连续随机模型提出了应用 CA 模型模拟凝固过程中晶粒与孔隙的三

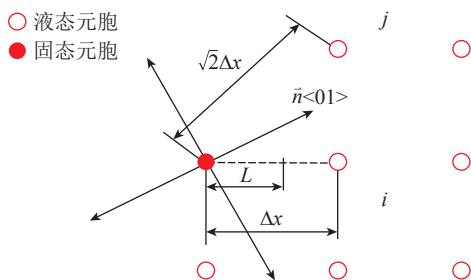


图4 生长算法示意图
Fig.4 Schematics of growth algorithm

维形核与生长。相较于之前的数值模型而言, CA 模型考虑了孔洞生长与局部区域微观枝晶生长相互影响, 更加形象地模拟了孔洞在凝固过程中生长^[32-33]。

在铝合金中, 气孔的形核依赖局部氢过饱和度, 当含有成核位点的元胞的氢过饱和度大于临界饱和度时, 使局部化学势变得足够大, 便在形核位点处形成与该处氢浓度相平衡的孔隙。氢的饱和度 s 计算公式为

$$s = \frac{C_L^H}{C_L^{H*}} = \frac{N_M^H}{N_A^H} = \sqrt{\frac{P_{H_2}}{P_{H_1}}} \quad (17)$$

式中, C_L^H 、 C_L^{H*} 分别代表氢在液体中的浓度和溶解度; N_M^H 、 N_A^H 分别代表氢的分子分数和原子分数; P_{H_2} 、 P_{H_1} 分别代表氢在液相和固相中的分压。

孔隙生长符合热力学理想气体方程

$$P_p V_p = nRT \quad (18)$$

$$P_p = P_m + \frac{2\gamma}{r_p} \quad (19)$$

式中, T 和 P_p 是局部温度和压力; n 是氢气摩尔数; V_p 是孔隙体积; P_m 是外部金属压力; γ 是表面张力。

Atwood 等^[33] 在对 Al-Si 合金建模中考虑固相和液相相互作用。随着固体分数增加会改变孔隙的形状, 即两者之间相互作用会改变孔隙表面曲率, 此时孔隙的曲率半径由边界固体形状和界面能量决定, 即

$$r_1 = \frac{r_1^0(1-f_s)}{2 \cos \theta} \quad (20)$$

式中, θ 为固-液-气的接触角; r_1^0 为初始枝晶间距; f_s 为含有孔隙元胞固相分数。

2.2.3 CA 模型在其他方向上的发展

凝固过程中自然对流和强制对流都不可避免, 凝固过程中溶质再分配和潜热释放都会引起自然对流现象, 浇注过程为了细化晶粒而对熔液进行搅拌也会引起液体流动。有研究者将 Navier-Stokes (NS) 动量方程和溶质控制方程与 CA 模型耦合从而再现对流条件下枝晶形貌特征^[34-36]。石玉峰等^[36] 研究了不同流速下等轴晶晶粒形貌的变化以及不同抽拉速率与柱状晶一次臂

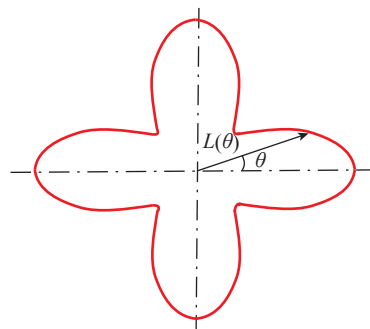


图5 等轴晶轮廓曲线
Fig.5 Isometric crystal profile curve

间距关系。格子 Boltzmann 方法 (LBM) 是近 20 年发展起来的一种新的流体力学计算方法,该方法简化了流体的相互作用并且可计算复杂边界,与 NS 动量方程相比,算法简单且具有较高的计算效率。近年来,研究者将 LBM 方法耦合到 CA 模型中计算流场^[37-39],通过对流作用下对合金微观组织模拟来研究对流现象对枝晶生长行为、最终偏析以及孔隙等缺陷的影响。

2004 年, Lee 等^[40] 提出三元合金 CA 模型,该模型运用多尺度模拟的概念,对凝固过程的模拟尺寸跨越了 10^6 个数量级,如图 6 所示,在宏观尺度上 (100) 分析热量和流量传递,在介观尺度上 (10^{-3}) 分析缺陷的生长以及微观尺度上 (10^{-6}) 分析溶质和氢元素的扩散。在微观尺度上计算需要运用较大的运算资源,在介观尺度上无法获得晶粒的枝晶形貌。这种多尺度耦合的计算方法提供了足够的优势。

3 模型在铝合金中的应用

铝合金在凝固过程主要形成枝晶和共晶两种微观组织,此外,由于金属收缩和气体在固液两相中溶解度差等原因,在凝固过程中孔隙形成不可避免。国内外不少研究机构对在凝固过程中枝晶、共晶和气孔的形成与长大进行了模拟研究。

3.1 对枝晶的模拟

基体相是合金的主要组成部分,对铝合金的力学性能起着决定性作用,因此对初生相的研究是基础。Jarvis 等^[41] 根据 Al-3.95Cu-0.8Mg 定向凝固的试验应用 CA 模型在相同的合金成分和凝固条件下进行模拟,模拟结果表明,在初生相体积分数上与试验结果有较好的一致性。许庆彦^[42] 和李强^[43] 等应用经典 CA 模型分别对铝硅合金等轴晶和柱状晶进行了晶粒预测。但由于 CA 模型的局限性,不能很好地呈现枝晶形貌。之后, Zhu 等^[27] 应用改进的 CA 模型研究了浇注温度和冷却速率对 Al-7Si 初生相生长形貌的影响。赵红蕾^[37]、

Sun^[38-39] 等应用 CA 模型结合 LBM 模拟流场作用下枝晶形貌。Dong^[44] 和 Dai^[45] 等模拟了 Al-Cu 合金的 CET 转变,系统研究了成核过冷、液核密度及合金凝固范围对 CET 的影响。

相场模型 (PFM) 近年来经历了快速发展,已广泛应用于探究凝固机理,如枝晶竞争生长^[46-47]、粗化^[48-49]、取向选择^[50-51] 以及 CET 过程^[52]。枝晶 PFM 生长计算基于能量泛函理论,假设体系总能量包括界面自由能和体积自由能两部分,将总能量表示为相场、溶质浓度和温度 3 个变量泛函^[53],即

$$E(\varphi, C, T) = \int_V \left(\frac{\sigma}{2} |\nabla \varphi|^2 + f_{AB}(\varphi, C, T) \right) dV \quad (21)$$

式中, E 代表总能量,为能量密度在整个体系 V 上的积分; φ 、 C 、 T 分别代表相场、溶质和温度; σ 是梯度能系数; f_{AB} 是二元合金的体自由能密度。

相场可对多组元、多物理场中枝晶进行模拟。在二元相场模型的基础上, Moelans^[54] 提出热力学一致的自由能插值函数以及 Choudhury 等^[55] 依据的巨势泛函概念,两种方法都可以将 PFM 从两相系统延伸到多相多组元体系。Aagesen 等^[56] 采用巨势泛函概念改进 Moelans^[54] 的模型,很大程度上简化了多相多组元的计算。另一方面,相场模型由最初单一溶质扩散发展到如今热质流之间相互耦合。Bollada^[57] 和 Wu^[58] 等改变算法架构解决了热扩散系数和溶质扩散系数数量级问题,从而发展了热质耦合模型。Takaki 等^[59-60] 将 LBM 模型引入相场中简化了对流场的计算,模拟了对流下枝晶和柱状晶的生长。相场中引入的自适应多重网格^[61-62] 是一种动态重新生成算法,减少了网格细分和网格生成的时间消耗,从而解决了缩短两阶相场的计算时间。LBM 模型对流场的求解提供了新的方法,因此用来研究自然对流和强迫对流对枝晶形态的影响^[60,63]。

LBM 将整个体系的演变视为一系列粒子的运动,通过这些粒子的重复迁移和碰撞来求解温度场和流场的演变。以求解温度场的 LBM 为例,粒子运动的 Boltzmann 方程(无外力项)^[64] 为

$$\frac{\partial g_i(r_{LB}, t_{LB})}{\partial t_{LB}} + e_i \cdot \nabla g_i(r_{LB}, t_{LB}) = \Omega_i \quad (22)$$

式中, $g_i(r_{LB}, t_{LB})$ 为求解温度的粒子分布函数,即在位置 r_{LB} 和时刻 t_{LB} 时粒子速度为 e_i 的概率或密度; e_i 和 Ω_i 分别为沿着第 i 个方向的离散速度和碰撞因子。将式(22)进行离散化并加入凝固潜热和冷却项^[65] 为

$$g_i(r_{LB} + \delta r_{LB}, t_{LB} + \delta t_{LB}) = g_i(r_{LB}, t_{LB}) + \Omega_i + \delta t_{LB} G_i \quad (23)$$

式中, G_i 为合金比热容和潜热的函数。

同理,可求解速度场的 LBM 表达式^[66]

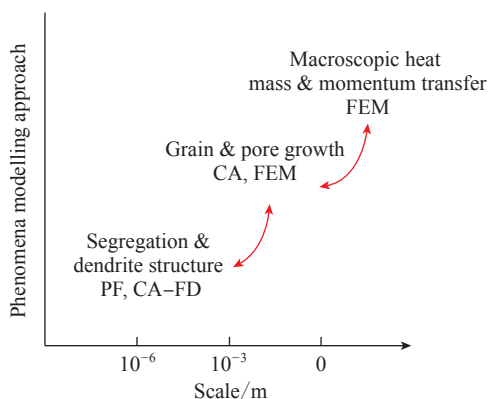


图 6 多尺度模拟在缺陷预测中的运用示意图

Fig.6 Multi-scale modeling of defects in solidification

$$f_i(r_{LB} + \delta r_{LB}, t_{LB} + \delta t_{LB}) = f_i(r_{LB}, t_{LB}) + \Omega_i + \delta t_{LB} F_i \quad (24)$$

式中, $f_i(r_{LB}, t_{LB})$ 为求解速度的粒子分布函数; F_i 为外力矢量的函数。当只考虑固液相变时, 外力矢量包括界面拖曳力和体积力两部分。

近年来, 为了更好地描述凝固过程中晶粒的演化, 将 PFM 与 CA 模型相结合从而可以模拟大尺度范围高精度枝晶形貌。Tourret 等^[67-68] 提出了枝晶针状网络法 (Dendritic needle network), 该方法可有效地研究空间扩展枝晶阵列的稳定性和动力学特性, 并进一步研究对流作用下凝固。Viardin^[69] 和 Olmedilla^[70] 等基于介观包络层模型研究了枝晶间的竞争生长及相互作用。

3.2 共晶模拟

对于多组元合金来说, 在凝固过程往往会出现偏析现象。共晶作为常见的凝固形式引起了研究人员的关注。通过对溶质浓度的计算可得到两共晶相各自的过冷度从而计算两相的生长。Zhu 等^[28-29] 在改进 CA 模型中给出了 α 相对溶质原子的排斥和 β 相对溶质原子吸收共同作用下, 溶质的再分配扩散控制方程为

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \nabla^2 C + C(1 - k_\alpha) \frac{\partial f_{s,\alpha}}{\partial t} + C(1 - k_\beta) \frac{\partial f_{s,\beta}}{\partial t} \quad (25)$$

式中, D_L 为溶质在液相中的扩散系数; k_α 、 k_β 分别为 α 和 β 相的分配系数; $\partial f_{s,\alpha}$ 、 $\partial f_{s,\beta}$ 分别为 α 和 β 相的固相分数。该模型可以较准确地预测共晶和亚共晶铝硅合金组织, 包括新相成核、初生相枝晶和共晶的成核和长大。

研究者应用相场模型对共晶生长过程的片层稳定相^[71] 和各向异性相边界^[72-74] 进行了研究。相场中共晶组织生长算法引入了 φ_α 、 φ_β 和 φ_L 3 个相场变量分别刻画固相 α 、 β 和液相 L^[74], 则

$$E = \int_V \left[\sum_{j>i} \sum_i \left(-\frac{\sigma_{ij}^2}{2} \nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j + \omega_{ij} \varphi_i \varphi_j \right) + \sum_i \varphi_i f^i(C_i) + \lambda_{Lag} \left(\sum_i \varphi_i - 1 \right) \right] dV \quad (26)$$

式中, φ_i ($i = \alpha, \beta, L$) 在 0~1 之间变化, 在体系任何位置满足 $\varphi_\alpha + \varphi_\beta + \varphi_L = 1$; σ_{ij} 是梯度能系数; ω_{ij} 是双势阱系数; λ_{Lag} 是 Lagrange 因子; $f^i(C_i)$ 是 i 相的自由能密度。

在共晶 PFM 中, 浓度 C 和扩散系数 D 由线性加权平均得到, 其溶质控制方程为

$$\frac{\partial C}{\partial t} + f_L v \cdot \nabla C = \nabla \cdot D \sum_i \varphi_i \nabla C_i \quad (27)$$

式中, f_L 为液相率; v 为流速。

与枝晶研究一样, 对共晶的模拟也朝多组元、多物理场方向发展。Hötzer 等^[75] 采用巨势相场模型模拟了

Ag-Al-Cu 定向凝固共晶, 对共晶形貌的影响因素和共晶生长机制进行了研究。Zhang^[76-77] 和 Feng 等^[78] 研究了对流作用对片层共晶相貌的影响, 发现流场会改变共晶生长速率和生长模式。之后 Zhang^[79] 模拟发现流场的存在使三相点处的浓度不再是平衡浓度。Zhang 等^[80] 考虑了潜热释放在固液界面附近造成的热量累积, 模拟了热与溶质扩散耦合的共晶生长。

3.3 对孔隙的模拟

为了对孔隙的形成和长大进行模拟, 在模型中不仅要考虑温度场、流场以及合金溶质和氢的扩散等因素对晶粒和孔隙生长的影响, 还需要考虑固/气两相之间的相互作用。Lee 等^[81] 对 2001 年以前的模拟方法进行了综述, 对比了 5 种孔隙模拟方法的优缺点。Carlson 等^[82-83] 基于熔体中气体的微偏析来模拟凝固过程铝合金的孔隙的形成, 模型中除考虑流体和压力场外还加入了局部有限扩散效应。研究发现, 气孔受限于合金中氢的扩散作用, 冷却速率增大会减小氢的扩散时间, 从而减小气孔的尺寸; 而缩孔在高冷却速率和低温度梯度下占一定比重。Zhu 等^[84] 提出了预测孔隙的两阶段方法, 其中第 1 阶段是在液体包封之前, 基于压降的计算, 当液体中氢的浓度过饱和时会产生气孔; 第 2 阶段是液体包封之后, 根据固相网络中液体凝固引起的收缩计算。Backer 等^[85] 将扩散控制的孔隙生长模型与枝晶间流动凝固模型相结合, 可准确地预测最大孔隙长度和体积分数。Yao 等^[86] 在模型中假设熔体中的氢过饱和度是一个高斯函数, 并且假设熔体中氢过饱和度是在一个非均匀形核情况下, 孔隙的大小分布是一个数学模型。Khalajzadeh 等^[87] 建立了金属合金凝固过程中气体和收缩引起的孔隙形成的统一模型, 该模型基于一种以孔隙为中心的方法, 其中孔隙半径的时间演化被计算为冷却速率、热梯度、气体扩散和收缩的函数, 解释了孔隙形成对糊状带内流体速度的影响。

对于铝合金来说, 氢在固液两相中的溶解度相差数十倍, 因此氢气孔是铝合金最常见的缺陷之一。Lee^[32] 和 Atwood^[33] 建立了针对二元铝合金中氢的扩散以及孔隙的形核、生长与晶粒形核生长相耦合的 CA 模型。Wang 等^[88] 在此模型基础上, 模拟了不同工艺下的 Al-Cu、Al-Si 和 Al-Si-Cu 合金孔隙, 提出了球形度因子和弯曲度因子的概念来具体表示孔隙的三维形貌。之后, Wang 等^[89] 还针对多组元合金 Al-Si-Cu-Fe 合金的富铁金属间相固液界面能的强各向异性, 提出了一种倾斜板算法, 可以预测板状富铁化合物的形貌, 得出含铁量和富铁化合物对孔隙的形成的影响。Sun 等^[90] 建立了 CA-LBM 模型来模拟流场作用下枝晶和微孔的生长。Zhang 等^[91-92] 建立了 CA-FDM 模型对凝固过程中的铝

合金枝晶和共晶以及氢气孔多相组织的演变进行了准确预测。

目前相场求解气孔有两种模型,分别是 Felberbaum 等^[74]提出的守恒 PFM 和 Meidani 等^[93]提出固液气三相 PFM。其中气液两相流守恒 PFM 模型用于追踪气液界面演变,可用于求解气泡在液体中的生长和变形;固液气三相 PFM 模型着重于求解气泡前沿的枝晶生长。

对气液两相流守恒 PFM 来说,当只有扩散通量时,相场方程可表示为

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\nabla \cdot j_d = -\nabla \cdot (-M_C \nabla \phi) \quad (28)$$

式中, j_d 和 M_C 分别为扩散通量和界面迁移率。

当考虑需要考虑相分离通量 j_s 和外界流场引起的对流通量时,得相场模型为^[94]

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (v\phi) = \nabla \cdot (-M_C \nabla \phi) - j_s \quad (29)$$

模型中常采用 LBM 来对流场速率进行计算,此时外力矢量 F 与枝晶求解不同,此时 F 为气液密度差造成的浮力和气泡边界处的表面张力。

Carré 等^[95]研究了纯铝凝固过程中气泡的形核和生长。Du 等^[96]模拟了气相-液相和固相-液相,研究了氢气孔的存在对固液界面的影响。Zhang 等^[97-98]采用 LBM 计算流场发展了两种模型,采用 LBM 对流场速率进行计算时,此时外力矢量 F 为气液密度差造成的浮力和气泡边界处的表面张力。

目前,求解氢气孔的相场模型还不太成熟,模型具有一定的局限性。守恒 PFM 模型求解液态中气孔的运动对最终孔隙的求解帮助有限;三相 PFM 模型中没有考虑凝固过程固相和氢气孔的形核以及固相与气相之间的相互作用,而且着重求解气泡前沿枝晶的相貌而忽略固相对气孔的影响。要描述凝固过程固液气三相之间的相互作用还需要更加严谨的物理模型。

4 结论

随着铝合金在航空航天的广泛应用,需要了解合金的微观组织结构形成机理,从而改善铸造工艺,获得更好的力学性能。CA 模型已经可以预测二元甚至三元合金晶粒和孔隙的尺寸、三维形貌和位置分布,从而得出凝固时间、合金浓度、初始氢含量以及压力等铸造工艺对凝固组织的影响。

随着合金种类的增加,固相的形成越来越复杂,影响气相的因素也越来越多,实际凝固过程较为复杂,CA 模型需要进一步完善和充实。目前 CA 模型存在的问题主要有 3 方面:

(1) 随着快速凝固技术在铝合金开发中的运用,模

型急需从平衡或近平衡条件下的凝固扩展到快速凝固模拟;

(2) 对于近些年出现的凝固新技术,如增材制造、电磁凝固等,有些物理参量暂时无法加入到模型中,因此对这些新技术凝固过程还无法进行模拟;

(3) 为了准确描述微观组织,需要对晶粒和气孔生长算法模型不断加以改进。

参考文献

- [1] 铸造铝合金应用现状及未来前景分析[J]. 资源再生, 2018(9): 28-29.
Analysis of application status and future prospects of cast aluminum alloys[J]. Resources Recycling, 2018(9): 28-29.
- [2] 贾洋江, 陈邦峰. 高强高韧铸造铝合金的研究现状及发展[C]//大型飞机关键技术高层论坛暨中国航空学会 2007 年学术年会论文集. 深圳, 2007.
JIA Panjiang, CHEN Bangfeng. Research status and development of high strength and high toughness casting aluminum alloy[C]//High Level Forum on Key Technologies of Large Aircraft and Papers of 2007 Academic Conference of China Aviation Society. Shenzhen, 2007.
- [3] 甘武奎, 彭金贵, 李仕豪, 等. 铝合金选区激光熔化精密成形及其在航空领域的应用[J]. 航空制造技术, 2019, 62(16): 53-63.
GAN Wukui, PENG Jingui, LI Shihao, et al. Aluminum alloy selective laser melting precision forming technology and application in aviation field[J]. Aeronautical Manufacturing Technology, 2019, 62(16): 53-63.
- [4] 樊振中. 熔模精密铸造在航空航天领域的应用现状与发展趋势[J]. 航空制造技术, 2019, 62(9): 38-52.
FAN Zhenzhong. Application status and development trend of investment casting in aerospace industry[J]. Aeronautical Manufacturing Technology, 2019, 62(9): 38-52.
- [5] 王安东, 陈跃良, 卞贵学, 等. 飞机用高强度铝合金腐蚀疲劳研究进展[J]. 航空制造技术, 2017, 60(20): 95-103.
WANG Andong, CHEN Yueliang, BIAN Guixue, et al. Research progress on corrosion fatigue of high strength aluminum alloy of aircraft[J]. Aeronautical Manufacturing Technology, 2017, 60(20): 95-103.
- [6] 刘牧东. 航空铝合金材料低温疲劳研究进展[J]. 航空制造技术, 2019, 62(15): 93-100.
LIU Mudong. Research progress on cryogenic fatigue of aeronautic aluminium alloy[J]. Aeronautical Manufacturing Technology, 2019, 62(15): 93-100.
- [7] 许庆彦, 杨聪, 柳百成. 镍基高温合金定向凝固过程枝晶组织相场模拟研究[J]. 航空制造技术, 2019, 62(19): 14-20.
XU Qingyan, YANG Cong, LIU Baicheng. Phase-field simulation of dendrite growth in direction ally solidified nickel-based superalloy[J]. Aeronautical Manufacturing Technology, 2019, 62(19): 14-20.
- [8] 张强, 杨泽南, 王祯, 等. DD5 镍基单晶高温合金凝固过程元素偏析的相场模拟[J]. 航空制造技术, 2017, 60(23/24): 48-53.
ZHANG Qiang, YANG Ze'nan, WANG Zhen, et al. Phase field simulation of alloying element segregation during solidification of DD5 nickel-base single crystal superalloy[J]. Aeronautical Manufacturing Technology, 2017, 60(23/24): 48-53.
- [9] 魏雷, 林鑫, 王猛, 等. 金属激光增材制造过程数值模拟[J].

航空制造技术, 2017, 60(13): 16–25.

WEI Lei, LIN Xin, WANG Meng, et al. Numerical simulation on laser additive manufacturing process for metal components[J]. *Aeronautical Manufacturing Technology*, 2017, 60(13): 16–25.

[10] STEFANESCU D M. Methodologies for modeling of solidification microstructure and their capabilities[J]. *ISIJ International*, 1995, 35(6): 637–650.

[11] HUNT J D. Steady state columnar and equiaxed growth of dendrites and eutectic[J]. *Materials Science and Engineering*, 1984, 65(1): 75–83.

[12] OLDFIELD W. A quantitative approach to casting solidification: freezing of cast iron [J]. *ASM Trans Quart*, 1966, 59(4): 945–961.

[13] THÉVOZ P, DESBIOLLES J L, RAPPAZ M. Modeling of equiaxed microstructure formation in casting[J]. *Metallurgical Transactions A*, 1989, 20(2): 311–322.

[14] KURZ W, GIOVANOLA B, TRIVEDI R. Theory of microstructural development during rapid solidification[J]. *Acta Metallurgica*, 1986, 34(5): 823–830.

[15] 赵九洲, 李璐, 张显飞. 合金凝固过程元胞自动机模型及模拟方法的发展 [J]. *金属学报*, 2014, 50(6): 641–651.

ZHAO Jiuzhou, LI Lu, ZHANG Xianfei. Development of cellular automaton models and simulation methods for solidification of alloys[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2014, 50(6): 641–651.

[16] NASTAC L. Numerical modeling of solidification morphologies and segregation patterns in cast dendritic alloys[J]. *Acta Materialia*, 1999, 47(17): 4253–4262.

[17] BELTRAN-SANCHEZ L, STEFANESCU D M. A quantitative dendrite growth model and analysis of stability concepts[J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2004, 35(8): 2471–2485.

[18] TRIVEDI R, KURZ W. Dendritic growth[J]. *Metallurgical Reviews*, 1994, 39(2): 49–74.

[19] KURZ W, FISHER D J. *Fundamentals of solidification*[M]. Bern: Trans Tech Publications, 1998.

[20] RAPPAZ M. Modelling of microstructure formation in solidification processes[J]. *International Materials Reviews*, 1989, 34(1): 93–124.

[21] GANDIN C A, RAPPAZ M, TINTILLIER R. 3-Dimensional simulation of the grain formation in investment castings[J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 1994, 25(3): 629–635.

[22] GANDIN C A, RAPPAZ M. A coupled finite element-cellular automaton model for the prediction of dendritic grain structures in solidification processes[J]. *Acta Metallurgica et Materialia*, 1994, 42(7): 2233–2246.

[23] GANDIN C A, RAPPAZ M. A 3D cellular automaton algorithm for the prediction of dendritic grain growth[J]. *Acta Materialia*, 1997, 45(5): 2187–2195.

[24] 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.

[25] ZHU M F, KIM J M, HONG C P. Modeling of globular and dendritic structure evolution in solidification of an Al–7mass%Si alloy[J]. *ISIJ International*, 2001, 41(9): 992–998.

[26] ZHU M F, HONG C P. Modeling of microstructure evolution

in regular eutectic growth[J]. *Physical Review B*, 2002, 66(15): 155428.

[27] ZHU M F, HONG C P. A three dimensional modified cellular automaton model for the prediction of solidification microstructures[J]. *ISIJ International*, 2002, 42(5): 520–526.

[28] ZHU M F, NISHIDO S, HONG C P. Modeling of eutectic structure formation by a modified cellular automaton model[J]. *International Journal of Cast Metals Research*, 2003, 15(3): 273–278.

[29] ZHU M F, HONG C P. Modeling of irregular eutectic microstructures in solidification of Al–Si alloys[J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2004, 35(5): 1555–1563.

[30] 许庆彦, 冯伟明, 柳百成, 等. 铝合金枝晶生长的数值模拟 [J]. *金属学报*, 2002, 38(8): 799–803.

XU Qingyan, FENG Weiming, LIU Baicheng, et al. Numerical simulation of dendrite growth of aluminum alloy[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2002, 38(8): 799–803.

[31] SEE D, ATWOOD R C, LEE P D. A comparison of three modeling approaches for the prediction of microporosity in aluminum–silicon alloys[J]. *Journal of Materials Science*, 2001, 36(14): 3423–3435.

[32] LEE P D, ATWOOD R C, DASHWOOD R J, et al. Modeling of porosity formation in direct chill cast aluminum–magnesium alloys[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2002, 328(1–2): 213–222.

[33] ATWOOD R C, LEE P D. Simulation of the three-dimensional morphology of solidification porosity in an aluminium–silicon alloy[J]. *Acta Materialia*, 2003, 51(18): 5447–5466.

[34] ZHU M F, LEE S Y, HONG C P. Modified cellular automaton model for the prediction of dendritic growth with melt convection[J]. *Physical Review E, Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 2004, 69(6 Pt 1): 061610.

[35] 石玉峰, 许庆彦, 柳百成. 对流作用下枝晶形貌演化的数值模拟和实验研究 [J]. *物理学报*, 2011, 60(12): 381–391.

SHI Yufeng, XU Qingyan, LIU Baicheng. Simulation and experimental research of melt convection on dendrite morphology evolution[J]. *Acta Physica Sinica*, 2011, 60(12): 381–391.

[36] 石玉峰, 许庆彦, 柳百成. 基于改进元胞自动机方法的强制对流作用下三维枝晶生长的数值模拟 [J]. *稀有金属材料与工程*, 2013, 42(4): 700–705.

SHI Yufeng, XU Qingyan, LIU Baicheng. Numerical simulation of 3-D dendritic growth under forced convection using the modified cellular automaton method[J]. *Rare Metal Materials and Engineering*, 2013, 42(4): 700–705.

[37] 赵红蕾, 孙东科, 潘诗琰, 等. 强制对流作用下溶质枝晶生长的 CA–LBM 模拟 [J]. *东南大学学报 (自然科学版)*, 2009, 39(2): 255–261.

ZHAO Honglei, SUNDongke, PAN Shiyan, et al. CA–LBM modeling of solutaldendritic growth with forced convection[J]. *Journal of Southeast University (Natural Science Edition)*, 2009, 39(2): 255–261.

[38] SUN D K, ZHU M F, DAI T, et al. Modelling of dendritic growth in ternary alloy solidification with melt convection[J]. *International Journal of Cast Metals Research*, 2011, 24(3–4): 177–183.

[39] SUN D K, ZHANG Q Y, CAO W S, et al. Simulation of dendritic growth with melt convection in solidification of ternary alloys[J]. *Chinese Physics Letters*, 2015, 32(6): 068103.

[40] LEE P D, CHIRAZI A, ATWOOD R C, et al. Multiscale

modelling of solidification microstructures, including microsegregation and microporosity, in an Al–Si–Cu alloy[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2004, 365(1–2): 57–65.

[41] JARVIS D J, BROWN S G R, SPITTLE J A. Modelling of non-equilibrium solidification in ternary alloys: Comparison of 1D, 2D, and 3D cellular automaton–finite difference simulations[J]. *Materials Science and Technology*, 2000, 16(11–12): 1420–1424.

[42] 许庆彦, 柳百成. 采用 Cellular Automaton 法模拟铝合金的微观组织 [J]. *中国机械工程*, 2001, 12(3): 328–331.

XU Qingyan, LIU Baicheng. Microstructure simulation of Al alloy with cellular automaton method[J]. *China Mechanical Engineering*, 2001, 12(3): 328–331.

[43] 李强, 李殿中, 钱百年. Al–7%Si 凝固过程组织演变的元胞自动机方法模拟 [J]. *材料工程*, 2004, 32(7): 35–39.

LI Qiang, LI Dianzhong, QIAN Bainian. Modeling microstructure evolution of Al–7%Si during solidification process by cellular automaton method[J]. *Journal of Materials Engineering*, 2004, 32(7): 35–39.

[44] DONG H B, LEE P D. Simulation of the columnar-to-equiaxed transition in directionally solidified Al–Cu alloys[J]. *Acta Materialia*, 2005, 53(3): 659–668.

[45] DAI H J, DONG H B, ATKINSON H V, et al. Simulation of the columnar-to-equiaxed transition in alloy solidification—The effect of nucleation undercooling, density of nuclei in bulk liquid and alloy solidification range on the transition[J]. *Solid State Phenomena*, 2008, 139: 129–134.

[46] LI J J, WANG Z J, WANG Y Q, et al. Phase-field study of competitive dendritic growth of converging grains during directional solidification[J]. *Acta Materialia*, 2012, 60(4): 1478–1493.

[47] TAKAKI T, SAKANE S, OHNO M, et al. Competitive grain growth during directional solidification of a polycrystalline binary alloy: Three-dimensional large-scale phase-field study[J]. *Materialia*, 2018, 1: 104–113.

[48] NEUMANN-HEYME H, ECKERT K, BECKERMANN C. General evolution equation for the specific interface area of dendrites during alloy solidification[J]. *Acta Materialia*, 2017, 140: 87–96.

[49] NEUMANN-HEYME H, SHEVCHENKO N, LEI Z, et al. Coarsening evolution of dendritic sidearms: From synchrotron experiments to quantitative modeling[J]. *Acta Materialia*, 2018, 146: 176–186.

[50] BECKER M, DANTZIG J A, KOLBE M, et al. Dendrite orientation transition in AlGe alloys[J]. *Acta Materialia*, 2019, 165: 666–677.

[51] YANG M, XIONG S M, GUO Z. Characterisation of the 3–D dendrite morphology of magnesium alloys using synchrotron X-ray tomography and 3–D phase-field modelling[J]. *Acta Materialia*, 2015, 92: 8–17.

[52] ZHANG A, MENG S X, GUO Z P, et al. Dendritic growth under natural and forced convection in Al–Cu alloys: From equiaxed to columnar dendrites and from 2D to 3D phase-field simulations[J]. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 2019, 50(3): 1514–1526.

[53] RAMIREZ J C, BECKERMANN C, KARMA A, et al. Phase-field modeling of binary alloy solidification with coupled heat and solute diffusion[J]. *Physical Review E, Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 2004, 69(5 Pt 1): 051607.

[54] MOELANS N. A quantitative and thermodynamically consistent phase-field interpolation function for multi-phase systems[J].

Acta Materialia, 2011, 59(3): 1077–1086.

[55] CHOUDHURY A, NESTLER B. Grand-potential formulation for multicomponent phase transformations combined with thin-interface asymptotics of the double-obstacle potential[J]. *Physical Review E, Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 2012, 85(2 Pt 1): 021602.

[56] AAGESEN L K, GAO Y, SCHWEN D, et al. Grand-potential-based phase-field model for multiple phases, grains, and chemical components[J]. *Physical Review E*, 2018, 98(2–1): 023309.

[57] BOLLADA P C, GOODYER C E, JIMACK P K, et al. Simulations of three-dimensional dendritic growth using a coupled thermo-solutal phase-field model[J]. *Applied Physics Letters*, 2015, 107(5): 053108.

[58] WU J, GUO Z P, LUO C. Development of a parallel adaptive multigrid algorithm for solving the multi-scale thermal-solute 3D phase-field problems[J]. *Computational Materials Science*, 2018, 142: 89–98.

[59] TAKAKI T, ROJAS R, SAKANE S, et al. Phase-field-lattice Boltzmann studies for dendritic growth with natural convection[J]. *Journal of Crystal Growth*, 2017, 474: 146–153.

[60] TAKAKI T, SAKANE S, OHNO M, et al. Large-scale phase-field lattice Boltzmann study on the effects of natural convection on dendrite morphology formed during directional solidification of a binary alloy[J]. *Computational Materials Science*, 2020, 171: 109209.

[61] YIN Y, ZHOU J, LIAO D. Phase-field simulation of dendritic solidification using a full threaded tree with adaptive meshing[J]. *China Foundry*, 2014, 11: 493–497.

[62] GUO Z, XIONG S M. On solving the 3–D phase field equations by employing a parallel-adaptive mesh refinement (Para-AMR) algorithm[J]. *Computer Physics Communications*, 2015, 190: 89–97.

[63] GONG T Z, CHEN Y, LI D Z, et al. Quantitative comparison of dendritic growth under forced flow between 2D and 3D phase-field simulation[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2019, 135: 262–273.

[64] KRÜGER T, KUSUMAATMAJA H, KUZMIN A, et al. The lattice boltzmann method[M]. Cham: Springer International Publishing, 2017.

[65] SETA T. Implicit temperature-correction-based immersed-boundary thermal lattice Boltzmann method for the simulation of natural convection[J]. *Physical Review E, Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 2013, 87(6): 063304.

[66] GUO Z L, ZHENG C G, SHI B C. Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method[J]. *Physical Review E*, 2002, 65(4): 046308.

[67] TOURET D, KARMA A. Multiscale dendritic needle network model of alloy solidification[J]. *Acta Materialia*, 2013, 61(17): 6474–6491.

[68] TOURET D, FRANCOIS M M, CLARKE A J. Multiscale dendritic needle network model of alloy solidification with fluid flow[J]. *Computational Materials Science*, 2019, 162: 206–227.

[69] VIARDIN A, ZALOŽNIK M, SOUHAR Y, et al. Mesoscopic modeling of spacing and grain selection in columnar dendritic solidification: Envelope versus phase-field model[J]. *Acta Materialia*, 2017, 122: 386–399.

[70] OLMEDILLA A, ZALOŽNIK M, COMBEAU H. Quantitative 3D mesoscopic modeling of grain interactions during equiaxed dendritic

solidification in a thin sample[J]. *Acta Materialia*, 2019, 173: 249–261.

[71] PARISI A, PLAPP M. Stability of lamellar eutectic growth[J]. *Acta Materialia*, 2008, 56(6): 1348–1357.

[72] GHOSH S, CHOUDHURY A, PLAPP M, et al. Interphase anisotropy effects on lamellar eutectics: A numerical study[J]. *Physical Review E, Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 2015, 91(2): 022407.

[73] GHOSH S, PLAPP M. Influence of interphase boundary anisotropy on bulk eutectic solidification microstructures[J]. *Acta Materialia*, 2017, 140: 140–148.

[74] FELBERBAUM M, JACOT A. A phase field model for a geometrical description of micropores constrained by a solid network[M]//*Modeling of Casting, Welding, and Advanced Solidification Processes – XII*. Pittsburgh: The Minerals, Metals & Materials Society, 2009: 369–376.

[75] HÖTZER J, JAINTA M, STEINMETZ P, et al. Large scale phase–field simulations of directional ternary eutectic solidification[J]. *Acta Materialia*, 2015, 93: 194–204.

[76] ZHANG A, GUO Z, XIONG S M. Quantitative phase–field lattice–Boltzmann study of lamellar eutectic growth under natural convection[J]. *Physical Review E*, 2018, 97(5–1): 053302.

[77] ZHANG A, DU J L, GUO Z P, et al. Lamellar eutectic growth under forced convection: A phase–field lattice–Boltzmann study based on a modified Jackson–Hunt theory[J]. *Physical Review E*, 2018, 98(4): 043301.

[78] FENG L, FENG X J, LU Y, et al. Phase field modeling of lamellar eutectic growth under the influence of fluid flow[J]. *Computational Materials Science*, 2017, 137: 171–178.

[79] ZHANG A, DU J L, GUO Z P, et al. Abnormal solute distribution near the eutectic triple point[J]. *Scripta Materialia*, 2019, 165: 64–67.

[80] ZHANG A, LIU F Y, DU J L, et al. Phase–field lattice–Boltzmann study on eutectic growth with coupled heat and solute diffusion[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2019, 145: 118778.

[81] LEE P D, CHIRAZI A, SEE D. Modeling microporosity in aluminum–silicon alloys: A review[J]. *Journal of Light Metals*, 2001, 1(1): 15–30.

[82] CARLSON K D, LIN Z P, BECKERMANN C, et al. Modeling of porosity formation in aluminium alloys[J]. *Materials Science Forum*, 2006, 519–521: 1699–1706.

[83] CARLSON K D, LIN Z P, BECKERMANN C. Modeling the effect of finite–rate hydrogen diffusion on porosity formation in aluminum alloys[J]. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 2007, 38(4): 541–555.

[84] ZHU J D, COCKCROFT S L, MAIJER D M. Modeling of microporosity formation in A356 aluminum alloy casting[J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2006, 37(3): 1075–1085.

[85] BACKER G, WANG Q G. Microporosity simulation in aluminum castings using an integrated pore growth and interdendritic flow model[J]. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 2007, 38(4): 533–540.

[86] YAO L, COCKCROFT S, ZHU J D, et al. Modeling of

microporosity size distribution in aluminum alloy A356[J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2011, 42(13): 4137–4148.

[87] KHALAJZADEH V, CARLSON K D, BACKMAN D G, et al. A pore–centric model for combined shrinkage and gas porosity in alloy solidification[J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2017, 48(4): 1797–1816.

[88] WANG J S, LEE P D. Simulating tortuous 3D morphology of microporosity formed during solidification of Al–Si–Cu alloys[J]. *International Journal of Cast Metals Research*, 2007, 20(3): 151–158.

[89] WANG J S, LI M, ALLISON J, et al. Multiscale modeling of the influence of Fe content in a Al–Si–Cu alloy on the size distribution of intermetallic phases and micropores[J]. *Journal of Applied Physics*, 2010, 107(6): 061804.

[90] SUN D K, ZHU M F, WANG J, et al. Lattice Boltzmann modeling of bubble formation and dendritic growth in solidification of binary alloys[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2016, 94: 474–487.

[91] ZHANG Q Y, WANG T T, YAO Z J, et al. Modeling of hydrogen porosity formation during solidification of dendrites and irregular eutectics in Al–Si alloys[J]. *Materialia*, 2018, 4: 211–220.

[92] ZHANG Q Y, SUN D K, PAN S Y, et al. Microporosity formation and dendrite growth during solidification of aluminum alloys: Modeling and experiment[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2020, 146: 118838.

[93] MEIDANI H, DESBIOLLES J L, JACOT A, et al. Three–dimensional phase–field simulation of micropore formation during solidification: Morphological analysis and pinching effect[J]. *Acta Materialia*, 2012, 60(6–7): 2518–2527.

[94] BECKERMANN C, DIEPERS H J, STEINBACH I, et al. Modeling melt convection in phase–field simulations of solidification[J]. *Journal of Computational Physics*, 1999, 154(2): 468–496.

[95] CARRÉ A, BÖTTGER B, APEL M. Phase–field modelling of gas porosity formation during the solidification of aluminium[J]. *International Journal of Materials Research*, 2010, 101(4): 510–514.

[96] DU L F, WANG L L, ZHENG B, et al. Phase–field modeling of microstructure evolution during solidification in presence of gas bubble[J]. *Computational Materials Science*, 2016, 114: 94–98.

[97] ZHANG A, DU J L, ZHANG X P, et al. Phase–field modeling of microstructure evolution in the presence of bubble during solidification[J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2020, 51(3): 1023–1037.

[98] ZHANG A, GUO Z P, WANG Q G, et al. Three–dimensional numerical simulation of bubble rising in viscous liquids: A conservative phase–field lattice–Boltzmann study[J]. *Physics of Fluids*, 2019, 31(6): 063106.

通讯作者: 王俊升, 教授, 研究方向为集成计算材料工程, 专注于航空轻质铝合金和镁合金设计、表征及应用的基础研究。

(责编 阳光)