

# 基于胞元自动机方法的凝固过程微观组织数值模拟

博士研究生姓名：陈晋

导师姓名：孙国雄 教授

学校名称：东南大学

## 摘要

凝固过程及其微观组织的研究不仅具有很强的工程应用背景，而且具有重要的理论研究价值，因此长期以来都引起不同领域学者的广泛关注。随着计算机技术的发展，用数值模拟方法来研究凝固过程取得了很大的进展。近十几年来，在凝固温度场等宏观模拟逐渐发展成熟的基础上，微观组织模拟开始成为研究的重点。

本文在前人研究的基础上，提出了基于溶质扩散控制的枝晶生长数值模型与算法。这一模型采用胞元自动机方法将固液界面两侧的锐变转化为界面胞元固相份数的渐变，既坚持了尖锐界面的基本假设，又避免了跟踪复杂的固液界面。模型充分考虑了成分过冷、曲率过冷、界面能各向异性以及界面扰动等影响枝晶生长的主要因素。

利用这一枝晶生长模型，本文对过冷熔体中枝晶的稳态生长行为进行了模拟计算，并与描述枝晶尖端生长的理论模型取得一致。通过在界面上施加扰动模拟了枝晶的分枝机制及侧枝的竞争生长，并研究了扰动波长和振幅对分枝发达程度的影响，研究结果与界面稳定性理论的分析取得一致。

将这一枝晶生长模型进行扩展并应用到了定向凝固组织的模拟中去，通过施加不同的温度梯度和凝固速度，成功模拟了定向凝固条件下的平界面、胞状和枝晶状三种典型界面形貌以及一次臂的分枝和调整机制，并分别研究了温度梯度和凝固速度对一次臂间距的影响，研究结果与理论模型的预测基本一致。

将这一枝晶生长模型与基于正态分布的形核模型相结合，直接应用到了晶粒组织的模拟中，避免了传统晶粒组织模拟中对晶粒形状的人为假设，用胞元自动机方法对晶粒组织模拟和枝晶生长模拟进行了整合，使这种方法的模拟能力和适用尺度得到了改进。

通过耦合传热计算模拟了金属型中正常凝固的等轴晶组织，并通过施加不同的冷却速度、温度梯度、形核参数模拟了晶粒组织中的柱状—等轴转变，分析了不同工艺因素对等轴晶和柱状晶竞争生长的影响，模拟结果与工艺实践和理论分析一致。

**关键词：**凝固，微观组织，数值模拟，胞元自动机，枝晶生长，晶粒组织

# NUMERICAL SIMULATION ON SOLIDIFICATION MICROSTRUCTURES USING CELLULAR AUTOMATON METHOD

by CHEN Jin  
Supervised by Prof. SUN Guo-xiong  
Southeast University

## Abstract

Solidification process and microstructures formation during solidification have attracted researchers from different fields for a long time because they have not only profound background of engineering application, but also significant theoretical value. With the development of computer technology, numerical simulation on solidification has made great progress. In the last decade, based on the success of macro simulation on temperature field, microstructure simulation has become the major focus.

On the basis of previous researches, a solute diffusion controlled model for dendritic growth is developed and relative numerical method is provided. Cellular automaton method is applied to transform the sharp change at the solid-liquid interface to gradual change of solid fraction in interfacial cells, which avoids direct front tracking while sharp interface hypothesis is still kept. The effects of constitutional undercooling, curvature undercooling, anisotropy of interfacial energy and interface perturbation are considered in this model.

The model is applied to simulate stable growth behavior in undercooled melt and the simulated results are in agreement with the prediction of theoretical model for tip growth. Branching mechanism and competition growth of side branches are simulated by imposing perturbation at the interface and the effects of perturbation wavelength and amplitude on the degree of side branch are studied. The results are in agreement with marginal stability theory.

The model is extended to simulate constrained growth in the directional solidification. By imposing different combinations of temperature gradient and solidification rate, the typical interface morphology including planar, cellular and dendritic are successfully simulated as well as the branching and adjustment of primary arm. The variation of primary arm spacing with the temperature gradient and solidification rate are simulated respectively and agree with the prediction of theoretical model.

Combined with the nucleation model based on normal distribution, the dendritic growth model is directly applied to simulate grain structures, which avoids the artificial geometry hypothesis in traditional grain structures simulation. In this way, simulation of grain structures and dendritic growth is integrated with cellular automaton method, which greatly improves the capability and the modeling scale of this method.

Equiaxed grain structure normally solidified in metal mold is simulated with coupling of heat transfer calculation. By imposing different cooling rates, temperature gradients and nucleation parameters, the columnar-to-equiaxed transition is simulated and the effects of processing parameters on the competition growth between columnar and equiaxed grains are analyzed. The results are in agreement with practical process and theoretical analysis.

**Keywords:** Solidification, Microstructure, Numerical Simulation, Cellular Automaton, Dendritic Growth, Grain Structure

## 前言

凝固是材料加工制备中一个非常重要的阶段，几乎所有的金属（合金）在成形过程中都要经历凝固，凝固得到的微观组织直接影响着材料的使用性能，并且在很大程度上决定了材料的最终组织与性能。此外，凝固也是自然界中常见并且涉及范围很广的一类相变过程，作为凝固过程中最常被观察到的一种微观组织，枝晶则代表着自然界中一种典型的非线性、自组织模式。因此，对于凝固及其组织的研究不仅具有很强的工程应用背景，而且具有重要的理论研究价值。

然而，凝固过程涉及到一系列复杂的物理化学变化。从宏观上看，凝固伴随着传热、传质、流动；从微观上看，凝固则体现为形核、生长的动力学过程，而宏微观之间又有复杂的相互影响。这使得理论研究和数学解析遇到了很大的困难。而且，由于发生凝固的液态金属往往处于较高的温度下，金属本身又不透明，并处于流动状态，这使得实验研究也缺乏直接和有效的方法。

计算机技术的发展使得人们可以以此为手段，运用数值模拟的方法来开展对凝固过程的研究，为古老的凝固研究开拓了新的空间。目前，对于凝固过程的数值模拟研究大致可以分为宏观模拟和微观模拟两个方面。

宏观模拟以能量、质量、动量等守恒为基本控制方程进行数值计算，包括对温度场、流场、应力场等的模拟。宏观模拟可以对铸件的凝固时间、冷却曲线、流动充型、缩孔、缩松、宏观偏析以及应力和变形等进行预测和相应的工艺优化设计。这方面的研究由于开展较早相对成熟，目前已经有应用于工程实践的商业软件如 ProCAST、MAGMASoft、FLOW-3D、FT-Star 等。

微观模拟也称为微观组织模拟或组织模拟，自上世纪 80 年代末 90 年代初开始成为凝固模拟的研究热点和发展方向。其研究方法主要是在宏观传输计算的基础上，结合各种形核生长过程的动力学模型，对凝固组织的晶粒尺寸与外观、相形貌与组成，枝晶组织的形貌细节、成分偏析以及枝晶臂间距等进行预测或描述。根据其研究对象又可分为尺度逐渐减小的三个层次：晶粒组织模拟、枝晶生长模拟和枝晶二次臂间距内的微观偏析模拟。

近十几年来研究者发展了各种微观模拟方法和模型，但由于实际的凝固过程相当复杂，而影响凝固组织的主要物理机制又在不同尺度上起着不同作用，使得各种模型和方法受到其适用尺度的限制，模拟条件和真实情况也尚有差距。因此，凝固微观组织模拟目前还难以进入实用化阶段。

在各种微观组织模拟研究方法中，胞元自动机方法基本思想简单清晰，便于在各种尺度上与影响凝固过程的物理机制进行结合。尽管最初只是被应用于晶粒尺度的模拟，但随着研究者不断的改进，在枝晶尺度上也显示出一定的模拟能力。

本文拟在前人研究的基础上,以合金的尖锐界面模型为基础,建立枝晶生长的数值模型,并采用胞元自动机方法进行求解,对枝晶形貌细节及其生长规律进行模拟研究。在此基础上,将进一步结合微观形核模型和宏观传热计算,对凝固过程中晶粒组织的演变进行模拟。从而将微观组织模拟的两个主要方面,晶粒组织模拟和枝晶生长模拟在胞元自动机方法的框架下进行整合,使这一方法的模拟能力和适用尺度得到扩展和改进。

## 符号注释表

符号	量纲或表达式	物理意义
$A$	—	扰动振幅
$C$	mass%	合金成分
$C_E$	mass%	合金共晶成分
$C_0$	mass%	合金初始成分
$C_L^*$	mass%	界面平衡液相成分
$C_S^*$	mass%	界面平衡固相成分
$D$	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	溶质扩散系数
$G$	$\text{K} \cdot \text{m}^{-1}$	温度梯度
$G_c$	$\text{mass\%} \cdot \text{m}^{-1}$	成分梯度
$I$	$\text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$	形核率
$\text{lv}()$	—	Invanstov 函数
$K$	—	曲率
$L$	$\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$	凝固潜热
$P_c$	$VR/(2D)$	溶质 Péclet 数
$P_t$	$VR/(2\alpha)$	热 Péclet 数
$R$	$\text{m}$	枝晶尖端半径
$R_0$	$\text{m}$	初始生长半径
$R^*$	$\text{m}$	临界晶核半径
$T$	$\text{K}$	温度
$T^*$	$\text{K}$	界面温度
$T_\infty$	$\text{K}$	过冷熔体温度
$T_L$	$\text{K}$	液相线温度
$T_S$	$\text{K}$	固相线温度
$T_E$	$\text{K}$	共晶转变温度
$T_M$	$\text{K}$	纯组元熔点
$T_f$	$\text{K}$	环境温度

续上表

符号	量纲或表达式	物理意义
$T_0$	K	初始温度或浇铸温度
$\dot{T}$	$\text{K} \cdot \text{s}^{-1}$	冷却速度
$V$	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	枝晶尖端生长速度
$V$	$\dot{T}/G$	凝固速率
$V_n$	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	界面法向速度
$c_p$	$\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$	比热
$c_{Eq}$	$\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$	等价比热
$d_0$	$\frac{\Gamma}{\Delta T_0}$ (合金) 或 $\frac{\Gamma}{Lc_p}$ (纯金属)	毛细长度
$f_S$	vol%	固相份数
$h$	$\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$	换热系数
$h_{int}$	$\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$	金属-铸型界面换热系数
$h_{air}$	$\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$	空气对流换热系数
$k_B$	$1.38 \times 10^{-23} \text{J} \cdot \text{K}^{-1}$	Boltzmann 常数
$k_0$	—	平衡分配系数
$l_T$	$\frac{\alpha}{V}$ (过冷熔体) 或 $\frac{\Delta T_0}{G}$ (定向凝固)	热扩散特征长度
$l_D$	D/V	溶质扩散特征长度
$m_L$	$\text{K} \cdot (\text{mass}\%)^{-1}$	液相线斜率
$n_{max}$	$\text{m}^{-3}$	形核基底的密度
$q$	$\text{J} \cdot \text{s}^{-1}$	热流量
$r$	m	半径
$t$	s	时间
$t_f$	s	局部凝固时间
$\dot{u}$	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	速度矢量, 其分量为 u、v、w
$\bar{x}$	m	坐标矢量, 其分量为 x、y、z
$\Gamma$	$\text{m} \cdot \text{K}$	Gibbs-Tompson 系数
$\Delta G_d$	J	扩散激活能

续上表

符号	量纲或表达式	物理意义
$\Delta G_n^*$	J	临界形核自由能
$\Delta T$	K	过冷度
$\Delta T_N$	K	形核过冷均值
$\Delta T_c$	K	成分过冷
$\Delta T_r$	K	曲率过冷
$\Delta T_t$	K	热过冷
$\Delta T_0$	K	凝固温度区间
$\Delta T_s$	K	形核过冷方差
$\Delta T'$	K	非平衡凝固温度区间
$\Delta f_s$	—	固相分数增量
$\Delta s_f$	$\text{J} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{K}^{-1}$	体积融化熵
$\Delta x$	m	胞元网格大小, 微观计算空间步长
$\Delta X$	m	单元网格大小, 宏观计算空间步长
$\Delta t$	s	时间步长
$\Phi$	—	相场变量
$\Omega_c$	—	无量纲溶质过饱和度
$\Omega_t$	—	无量纲热过饱和度
$\alpha$	$\lambda / (\rho c_p)$	热扩散率
$\varepsilon$	—	物体发射率或黑度
$\varepsilon$	—	界面能各向异性因子
$\varphi$	vol%	体积份数
$\lambda$	$\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$	导热系数
$\lambda$	m	扰动波长
$\lambda_c$	m	临界扰动波长
$\lambda_1$	m	枝晶一次臂间距
$\lambda_2$	m	枝晶二次臂间距
$\rho$	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	密度
$\sigma$	J	表面能

续上表

符号	量纲或表达式	物理意义
$\sigma$	$\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$	Stefan-Boltzmann 常数
$\sigma^*$	—	稳定性常数
上标 *	—	界面
上标 0	—	上一时刻的变量值
下标 S	—	固相
下标 L	—	液相
下标 M	—	铸型
下标 P	—	当前结点
下标 nb	—	邻结点
下标 E、W、N、S	—	东、南、西、北邻结点
下标 e、w、n、s	—	与东、南、西、北邻结点的边界

## 东南大学学位论文独创性声明

本人声明所呈交的学位论文是我个人在导师指导下进行的研究工作及取得的研究成果。尽我所知，除了文中特别加以标注和致谢的地方外，论文中不包含其他人已经发表或撰写过的研究成果，也不包含为获得东南大学或其它教育机构的学位或证书而使用过的材料。与我一同工作的同志对本研究所做的任何贡献均已在论文中作了明确的说明并表示了谢意。

研究生签名: 陈亚 日期: 2005.6

## 东南大学学位论文使用授权声明

东南大学、中国科学技术信息研究所、国家图书馆有权保留本人所送交学位论文的复印件和电子文档，可以采用影印、缩印或其他复制手段保存论文。本人电子文档的内容和纸质论文的内容相一致。除在保密期内的保密论文外，允许论文被查阅和借阅，可以公布（包括刊登）论文的全部或部分内容。论文的公布（包括刊登）授权东南大学研究生院办理。

研究生签名: 陈亚 导师签名: 孙国林 日期: 2005.6

# 第一章 凝固微观组织模拟概述

## 1.1 凝固过程及其微观组织

凝固是物质从液态向固态转变的相变过程，广泛存在于自然界和工程技术领域<sup>[1]</sup>，对于金属或合金而言，这一过程也称为结晶。对于凝固过程的研究可以从两方面进行，在宏观上凝固伴随着传热、传质、对流，即三传过程，三传主要与工艺手段发生关系；从微观上看，凝固则体现为形核与生长，形核、生长决定了合金凝固的微观组织。因此，将两方面结合起来，就能更好地揭示工艺手段是如何影响微观组织，从而通过控制工艺手段得到所需的微观组织。

### 1.1.1 三传现象

三传现象可以用一个统一的控制方程来描述<sup>[2]</sup>

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\Phi) + \operatorname{div}(\rho\bar{u}\Phi) = \operatorname{div}(\Gamma \operatorname{grad}\Phi) + S \quad (1.1)$$

式中

$\rho$ ——密度；

$\Phi$ ——通用变量，可以代表需要求解的温度  $T$ 、成分  $C$  或沿三个坐标轴方向的速度分量  $u$ 、 $v$ 、 $w$  等；

$\bar{u}$ ——代表速度矢量，其沿三个坐标轴方向的分量分别为  $u$ 、 $v$ 、 $w$ ；

$\Gamma$ ——广义扩散系数，对传热方程表示热扩散率  $\alpha$ ，对扩散方程表示扩散系数  $D$ ，对动量方程表示流体的运动粘度  $\nu$ ；

$S$ ——广义源项；

为求解控制方程，还需要给定初始条件和边界条件。边界条件分三类<sup>[3]</sup>，第一类边界条件，也称 Dirichlet 条件，即已知所求变量在边界处的值；第二类边界条件，也称 Neumann 条件，即已知所求变量在边界处的梯度值；第三类边界条件，也称 Cauchy 条件，即已知所求变量在边界处的梯度可以表示为变量的线性函数。这三类边界条件可以分别用以下三式表示

$$\Phi(\bar{x}, t) = \hat{\Phi}(\bar{x}, t) \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n}(\bar{x}, t) = \hat{Q}(\bar{x}, t) \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n}(\bar{x}, t) = h(\bar{x}, t)[\Phi(\bar{x}, t) - \Phi_a] \quad (1.4)$$

式中

$\bar{x}$ ——边界处的空间座标;

$t$ ——时间座标;

$\partial/\partial n$ ——边界处沿法向量 $\bar{n}$ 的偏导数;

$\wedge$ ——已知函数值;

$h$ ——线性函数的系数项;

$\Phi_a$ ——线性函数的常数项;

通过求解给定条件下的控制方程, 就可以得到凝固过程中合金各处的温度、成分、速度矢量随时间空间的变化规律, 即温度场、浓度场和流场。

然而, 只有在极简单的条件下, 上述偏微分方程才能够求得精确的解析解, 因此对实际的凝固过程而言, 往往需要用数值计算的方法来求解。数值求解<sup>[4]</sup>的基本思想是把连续的场变量在时间和空间上进行离散化, 建立场变量在这些离散节点之间的关系得到离散方程, 通过联立求解方程组最终获得各结点处的场变量值。比较常用的数值求解方法包括有限差分法<sup>[5]</sup>、有限容积法<sup>[2]</sup>、有限元法<sup>[6]</sup>、边界元法<sup>[7]</sup>。其中有限容积法也称控制容积法, 由于在导出离散方程时能够保证守恒, 并且方程具有明确的物理意义, 所以本文在进行传热和溶质扩散计算时选择这一方法。

### 1.1.2 形核与生长

从热力学的角度来看, 形核首先需要一定的过冷, 以保证固相的自由能小于液相自由能, 在此条件下, 液相中将会形成一些晶胚, 但只有大于临界形核半径的晶胚才能作为一个晶核稳定地存在。而晶核得到一个原子后能够继续长大, 失去一个原子后则可能会消失。若将形核率定义为单位时间内在单位体积的液相中形成的晶核数目, 则根据经典形核理论<sup>[8]</sup>, 形核率

$$I = I_0 \exp\left(-\frac{\Delta G_n^* + \Delta G_d}{k_B T}\right) \quad (1.5)$$

式中

$I$ ——形核率;

$I_0$ ——指数项前的因子, 由于指数项的影响很大, 因此  $I_0$  可以近似看成常数;

$\Delta G_n^*$ ——临界形核自由能;

$\Delta G_d$ ——原子越过固液界面的扩散激活能;

$k_B$ ——Boltzman 常数;

$T$ ——温度;

根据形核的机理不同可以分为均质形核和异质形核。均质形核时, 液相中的原子集团只能自己逐渐长大而形成晶核, 这种情况很少见。异质形核时, 液相中的原子集团往

往依附在已有的基底表面形核，这些基底可能是液相内部的外来质点或铸型内壁。由于在实际凝固过程中，异质形核基底的数量和类型受到各种因素的影响，所以很难有一个准确的形核理论模型。在实际应用中，根据形核率随过冷度的变化情况，大致可以将形核模型分为瞬时形核和连续形核。如图 1-1 所示，瞬时形核假定所有的核心都在到达形核温度后形成，此后不再变化；而连续形核则假定晶核数目随过冷度的变化而保持连续变化。

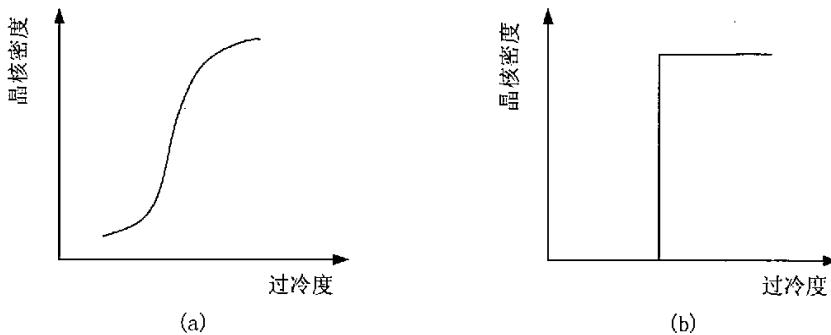


图 1-1 连续形核(a)与瞬时形核(b)

Fig. 1-1 Continuous nucleation(a) and instantaneous nucleation(b)

晶体的生长从原子的尺度上说，意味着原子在固液界面上不断地堆积。根据固液界面的微观结构不同，可以将其划分为粗糙界面和光滑界面。在此基础上，晶体可能以连续生长、二维台阶生长、螺型位错生长等机制长大<sup>[9]</sup>。另一方面晶体的生长则表现为宏观上的固液界面向前推进。这一过程首先受到热扩散的影响，因为结晶释放的潜热需要排走。对于合金而言，晶体的生长还受到溶质扩散的影响，因为固、液相的成分不同造成了界面前沿的溶质再分配。此外，晶体的生长还与界面能作用和界面动力学效应有关。

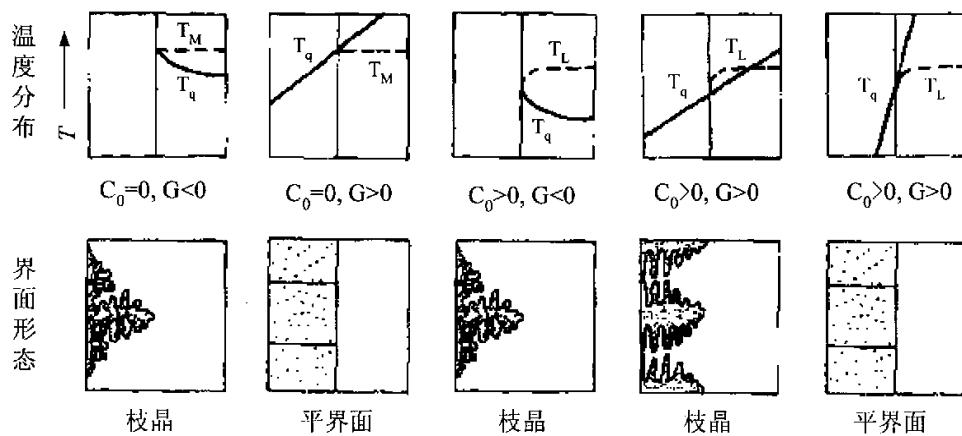


图 1-2 界面前沿的温度梯度与界面形貌

Fig. 1-2 Tempreture gradient ahead of the interface and its morphology

( $T_q$ —实际温度； $T_M$ —纯金属熔点； $T_L$ —合金液相线温度)

根据固液界面前沿的温度梯度和成分梯度的不同,界面将可能呈现如图 1-2 所示的不同形态。当界面前沿的温度梯度为负时,界面处的凸起将处于过冷熔体中,因而其生长得到加强,最终将会破坏界面的稳定形成枝晶组织。当界面前沿的温度梯度为正时,对于纯金属而言,界面处的凸起将处于过热状态而熔化,生长界面将保持为稳定的平界面;但对于合金而言,界面前沿可能会由于溶质富集(对于平衡分配系数小于 1 的合金)而形成成分过冷,使稳定的平界面生长遭到破坏而产生胞状组织或枝晶组织。在实际的凝固过程中,枝晶组织最为常见。

### 1.1.3 微观组织

枝晶组织是最常见的合金凝固组织,它是平界面的稳定生长遭到破坏后形成的一种树枝状的分枝结构,通常包括主干、一次分枝、二次分枝以及高次分枝。根据枝晶的生长条件可以分为过冷熔体中自由生长的等轴晶和定向生长的柱状晶。等轴晶前方的温度梯度为负,凝固潜热由界面向周围的过冷熔体排走,而柱状晶前方的温度梯度为正,凝固潜热只能通过已经凝固的固相排走。描述枝晶的特征尺寸有一次臂间距( $\lambda_1$ )、二次臂间距( $\lambda_2$ )和尖端半径( $R$ ),图 1-3 给出了枝晶形貌的示意图及其主要特征尺寸。

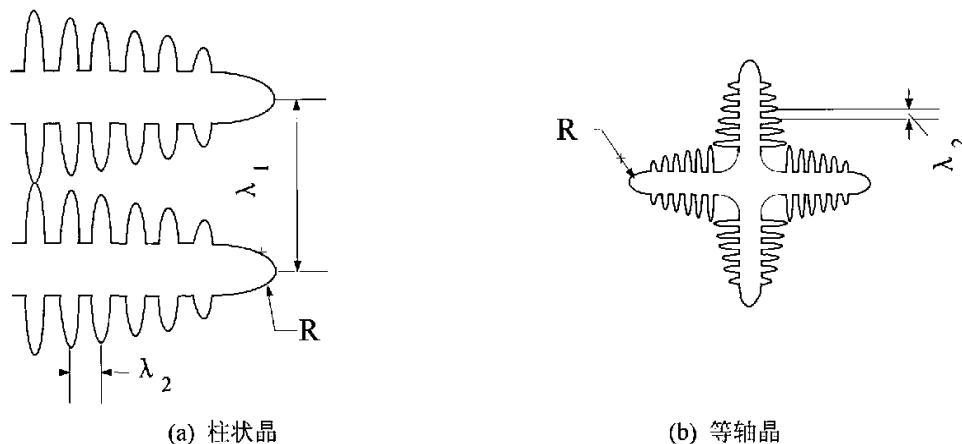


图 1-3 枝晶形貌及主要特征尺寸的示意图

Fig. 1-3 Schematic representation of dendrite morphology and important length scale

与枝晶生长有关的主要物理过程包括热扩散、溶质扩散和界面能效应,这些物理过程分别在不同的尺度内发生影响。表 1-1 给出了这些物理过程的作用尺度。

表 1-1 影响枝晶生长的物理过程作用尺度

Table 1-1 Characteristic lengths of physical processes to control dendrite growth

	过冷熔体	定向凝固
热扩散长度 $l_T$	$\alpha_L/V$	$\Delta T_0/G$
溶质扩散长度 $l_D$	$D/V$	
毛细长度 $d_0$	$\Gamma/\Delta T_0$ (合金)、 $\Gamma/(L/c_p)$ (纯金属)	

文献[10]指出, 就一般情况而言, 微观组织的特征长度与物理过程的作用尺度之间的关系可以写成一个通用形式  $l=A[l_D]^a[l_T]^b[d_0]^c$ , 其中  $a+b+c=1$ 。而微观组织发生转变的条件也可视为不同物理过程之间竞争的结果, 比如在定向凝固条件下保持平界面的条件可写成  $l_D=l_T$ 。这样, 通过控制工艺参数, 改变不同物理过程的作用尺度, 就可以控制枝晶的特征尺寸。

对于铸件而言, 不同的工艺条件下得到的晶粒组织也不同, 但一般说来可以分成三个典型的区域<sup>[11]</sup>: 表层的细晶区、中间的柱状晶区和内部的等轴晶区。表层细晶区的特点是排列没有规则, 组织细密。柱状晶区则由一系列平行排列的柱状晶粒沿垂直于型壁方向向内延伸。内部的等轴晶区则无明显的方向性, 但晶粒较表层细晶区粗大。

不同的晶粒组织对于铸件的性能有很大影响, 一般来说, 细小的等轴晶有助于提高铸件的力学性能, 但在高温单向收载的铸件中, 柱状晶的方向性反而会使其单向力学性能大幅度提高。为了更好地控制凝固得到的晶粒组织, 研究者对于三个晶区的形成机理, 尤其是内部等轴晶区的形成以及柱状—等轴转变 (Columnar-to-Equiaxed Transition) 提出了各种不同的解释<sup>[12-14]</sup>, 并进行了理论模型的推导、实验研究和计算机模拟。

## 1.2 微观组织模拟研究历程

### 1.2.1 微观组织模拟的早期研究

早在 1966 年, W. Oldfield 就首次提出在凝固过程温度场数值模拟的基础上将传热方程的潜热项表示为形核率和生长速度的函数, 从而获得反映凝固组织形成的模拟结果<sup>[15]</sup>。但由于计算条件和宏观传输模拟的限制, 这一研究方向并未有大的进展。直至上世纪 80 年代中后期, 凝固组织模拟方面的文献才开始大量出现。

在形核模型方面, 继 Oldfield 早期提出的连续形核模型后<sup>[15]</sup>, Hunt 依据于经典形核理论, 在考虑到熔体中的初始形核质点将随形核的进行逐渐减少的基础上提出了瞬时形核模型<sup>[16]</sup>。Thevoz 和 Rappaz 等人<sup>[17]</sup>则考虑到在实际凝固过程中存在着不同类型的异质形核基底, 提出基于概率分布的准瞬时形核模型, 并用正态分布函数来描述形核率随过冷度的变化率。

关于生长模型的研究也从最初的共晶生长扩展到枝晶生长。这一时期, Lipton、Kurz、Glicksman 等人<sup>[18-21]</sup>对枝晶生长的理论模型进行了推导, 并与实验进行了比较, 建立了枝晶在过冷熔体中生长的 LGK 模型和定向生长条件下的 KGT 模型, 将枝晶尖端的过冷度与生长速度建立了联系。为了进一步得到固相份数, 还需要将晶粒的形状简化为球形, 但等轴晶内部复杂的枝晶很难视为一完全固相的球, 于是 Dustin 和 Kurz 提出了球状等轴晶的“内在固相份数”这一概念<sup>[22]</sup>, 认为枝晶的固相率  $f_s$  等于枝晶的体积率  $f_g$  和内在固相份数  $f_i$  的乘积, 这一等轴晶生长的溶质扩散模型如图 1-4 所示。Rappaz

等人进一步完善了这个模型，并推导出了  $f_i$  与溶质 Péclet 数之间的关系<sup>[23,24]</sup>。

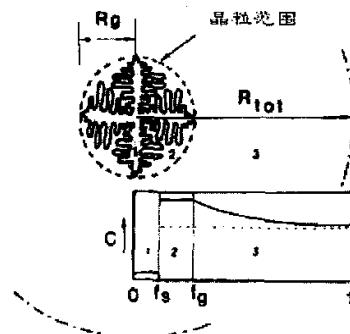


图 1-4 等轴晶生长的溶质扩散模型示意图<sup>[22]</sup>

Fig. 1-4 Schematic representation of solute diffusion model for equiaxed dendritic growth

从方法上看，这一类形核生长的模型后来被称为决定论模型，因为它们将形核率和生长速度看成过冷度的确定函数，而没有考虑晶粒形核生长中的随机因素。1989 年，Rappaz 在 IMR 杂志上发表了一篇综述，对早期决定论模型做了系统的总结<sup>[3]</sup>。

### 1.2.2 微观组织模拟的发展

早期决定论模型一统天下的局面很快被打破，微观组织模拟进入了繁荣与发展时期。这一时期，在晶粒组织的模拟方法上出现了决定论和随机论的分野，自上世纪 90 年代开始，这两种方法各自发展到了一定的高度。与此同时，在另一个尺度上对枝晶生长的模拟也在相场法的推动下逐渐展开。而对显微偏析问题的研究则伴随着凝固组织模拟的发展从早期的解析、半解析模型向数值模型发展。

Monte Carlo (MC) 方法的应用开创了凝固组织模拟的随机论模型。这一方法考虑到晶粒生长过程中的随机因素，采用形核概率来处理每个计算单元，按照界面能最小原理，用长大概率来计算界面的推进，通过对不同位向的计算单元进行颜色填充或边界填充再现晶粒的生长演化。MC 方法最初被用来模拟再结晶过程中的固相晶粒的生长<sup>[25]</sup>，Spittle 和 Brown 则用它来模拟凝固过程中晶粒的形核生长<sup>[26,27]</sup>，Zhu 和 Smith 进一步发展了这种方法并模拟出了与通常经验具有一致趋势的典型晶区组织<sup>[28]</sup>，如图 1-5 所示。MC 方法的最大弱点是计算中使用的时间步长并非实际的物理时间步长，而晶粒的演化则完全依据能量最小原理进行，并且没有考虑枝晶尖端生长动力学。

自 1993 年开始，Rappaz 和 Gandin 等人提出了新的随机方法来模拟晶粒组织，他们采用的方法称为 Cellular Automaton (CA) 技术<sup>[29,30]</sup>。CA 方法用基于正态分布的形核模型来描述型壁和内部的晶核数量、位置及其变化，用 KGT 模型<sup>[20]</sup>来计算枝晶尖端生长速度，用偏心正方算法来进行胞元的捕获。此外他们还把 CA 方法和宏观传热计算

的有限元方法结合起来, 创建了 CAFÉ 算法模型<sup>[31]</sup> (如图 1-6 所示), 实现了宏微观耦合, 并将其发展到了三维非均匀温度场<sup>[32,33]</sup>, 从而很好地模拟了晶粒的竞争演化机制。与 MC 方法相比, CA 方法不但方便地引入了随机位向, 并且有更强的物理背景。

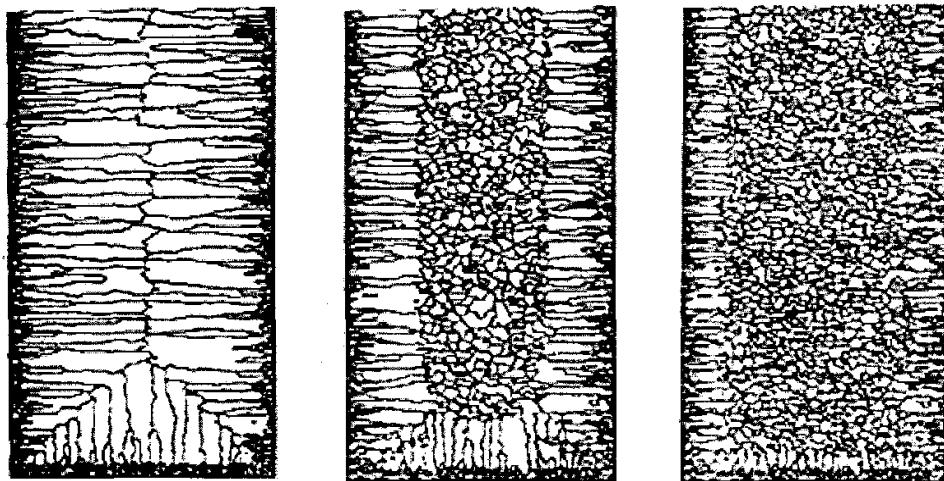


图 1-5 MC 方法模拟的铸锭中典型晶区组织<sup>[28]</sup>

Fig. 1-5 Simulation on typical grain structure of ingot with MC method

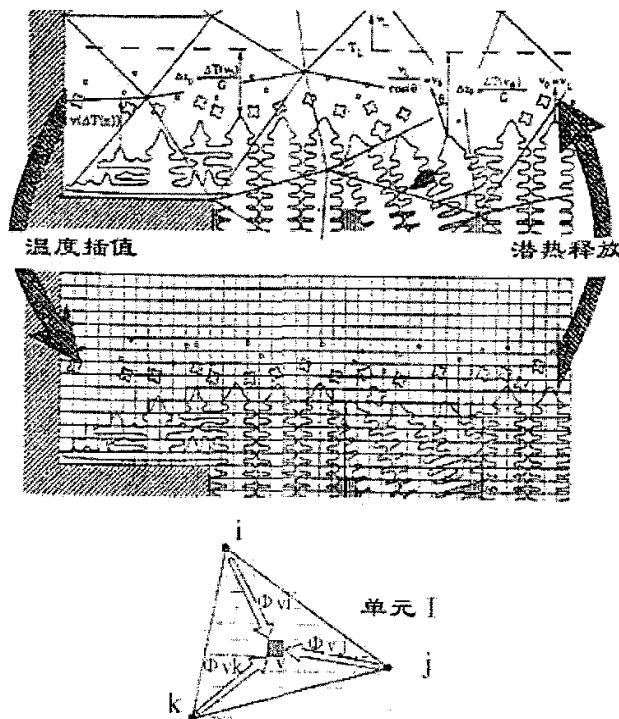


图 1-6 宏微观耦合的 CAFÉ 模型<sup>[31]</sup>

Fig. 1-6 Coupling calculation of CAFÉ model

伴随着随机论模型的发展,决定论模型也发展到了一定的高度。Wang 和 Beckermann 自 1993 年开始连续发表了一系列文章提出了多尺度/多相流模型(Multi-scale/multi-phase Model) [34-39], 并用 Al-4%Cu 和 NH<sub>4</sub>Cl 水溶液的实验结果对模型进行了验证。如图 1-7 所示,这个模型秉承了决定论的基本思想,将可能含有多个等轴晶的体积元看成由固相、枝晶间液相和晶粒外液相三相组成,用体积元平均的办法来处理宏观温度场、溶质场、速度场的守恒方程,并通过界面迁移项与微观尺度建立联系,成功地实现了多场耦合和宏微观耦合。

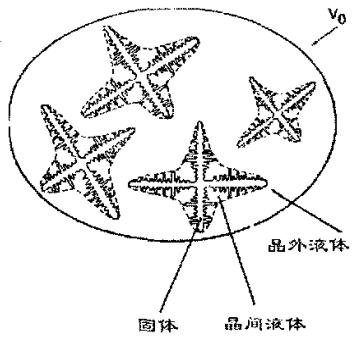


图 1-7 多尺度/多相流模型中三相体积元<sup>[35]</sup>

Fig. 1-7 A volume element consist of three phases in multi-scale/multi-phase model

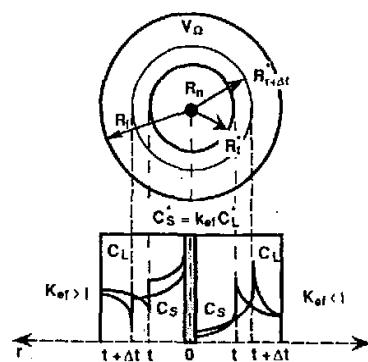


图 1-8 球形体积元及其内部溶质分布图<sup>[43]</sup>

Fig. 1-8 A solidifying spherical element and the associated concentration profile

Stefanescu 的研究组关注的重点是宏观传输计算和微观转变动力学(MT-TK)的耦合<sup>[40,41]</sup>,他们提出一个考虑了微观偏析和固相扩散的解析模型来描述包括平界面、柱状树枝晶和等轴树枝晶在内的溶质再分配<sup>[42]</sup>,如图 1-8 所示,这一模型基于晶粒的球形假设和内在固相份数思想,成功实现了宏观传输与微观转变动力学的耦合并对 Ni 基合金 INCONEL 718 的凝固组织进行了模拟<sup>[43-45]</sup>。此外,他们也采用随机论模型进行了对比尝试并认为随机论方法将最终取代纯粹的决定论<sup>[46]</sup>。

这一时期,组织模拟的发展不但在方法上,而且在尺度上产生分野。研究者已经不满足于仅仅得到晶粒组织的特征,而希望对晶粒内部的枝晶形貌和生长细节展开更深入的研究。在这一研究方向上相场(Phase Field)方法取得了巨大成功。

其实在更早的时期,枝晶生长在物理学领域就引起了研究者的兴趣,Meiron、Kessler 和 Saito 等<sup>[47-49]</sup>通过用数值方法求解积分方程,对枝晶的稳态生长和分枝进行了研究。另一种更加直接的模拟方法是界面跟踪法(Front Tracking Method)<sup>[50,51]</sup>。这种方法基于尖锐界面模型,通过分别求解固液相变,并用固液界面的边界条件进行耦合就可以描述界面形貌的演变。但这是一个典型的移动边界问题,需要随时跟踪两相界面的位置,以便分别处理固相和液相计算单元。Ihle 和 Krumbhaar 试图用旋转网格法来减少因为网格造成的各向异性<sup>[52]</sup>, Juric 和 Udaykumar 等人<sup>[53-55]</sup>则对于移动界面的处理、界面曲率的计算、两相界面处二阶精度离散格式的保证,以及笛卡儿坐标系下如何处理不规则形

状的控制容积等问题做了研究。但总的说来，界面跟踪法的计算量大，算法比较繁琐，三维模拟很难实现，限制了它的发展。

相场方法<sup>[56]</sup>针对界面跟踪的困难，用弥散的相场变量 $\Phi$ 代替了尖锐界面， $\Phi=1$  时表示固相， $\Phi=0$  时表示液相， $0<\Phi<1$  时则表示界面，这样相场方程的解就可以描述界面的形态。相场方程是以金兹堡-朗道理论为基础，考虑有序化势和热力学驱动的综合作用，推导出的一个可以处理所有计算单元的统一控制方程。这样就免去了界面跟踪的不便，并且还可以和温度场、浓度场、流场等外部场进行耦合。

相场模型的提出虽然更早，但直到 1993 年 Kobayashi 利用含各向异性的相场模型对过冷熔体中枝晶生长的二维模拟取得成功后<sup>[57]</sup>，利用相场方法进行组织模拟才引起了研究者极大的兴趣。很快 Wheeler 等人<sup>[58]</sup>对相场方法的可靠性和准确性进行了定量的评估。在 Karma<sup>[59]</sup>、Warren<sup>[60]</sup>、Suzuki<sup>[61]</sup>等人的努力下相场模型得到进一步拓展和修正，对 Ni-Cu 系、Fe-C 系、Al-Si 系合金的复杂枝晶组织都进行了模拟。图 1-9 是 Warren 等人用相场方法模拟得到的 Ni-Cu 合金枝晶形貌和及其内部的成分偏析。

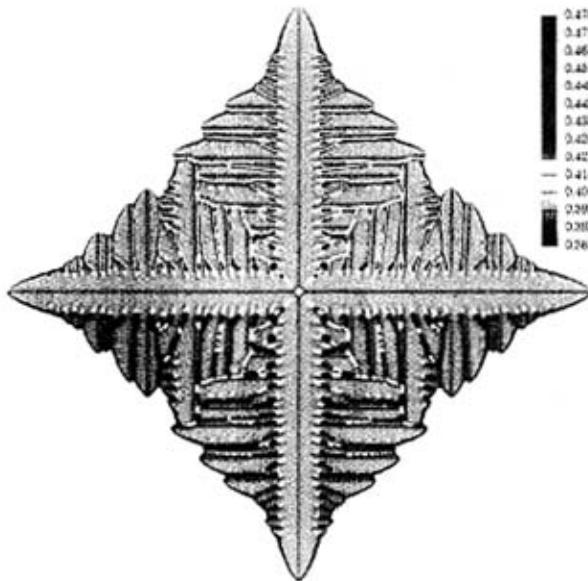


图 1-9 相场法模拟的 Ni-Cu 合金枝晶形貌及成分偏析<sup>[60]</sup>

Fig. 1-9 Phase field simulation of dendrite morphology and concentration profiles for Ni-Cu alloy

在相场法的带动下，枝晶生长模拟在上世纪 90 年代末期又有新的发展。Dilthey 和 Pavlik<sup>[62]</sup>基于界面处溶质扩散的平衡和界面处的曲率作用，通过求解溶质场，以及利用胞元自动机方法中胞元捕获的思想，建立了描述枝晶界面及其生长的一系列方程，模拟了具有复杂生长界面的枝晶形貌。Nastac<sup>[63]</sup>也采用类似的方法模拟了这种扩散控制的枝晶生长。事实上，这个方法可以追溯到 1994 年，Sasikumar 首先用热扩散控制方程来模拟了纯金属的生长及枝晶形貌<sup>[64,65]</sup>，随后又用溶质扩散方程模拟了合金的生长及枝晶形

貌<sup>[66]</sup>。但他的模拟结果还只能看成定性地揭示了枝晶生长的一般规律。

### 1.2.3 微观组织模拟的现状

近年来,微观组织模拟方面的研究仍在继续, Udaykumar 等人<sup>[67,68]</sup>进一步完善了界面跟踪法并考虑了流场对枝晶生长的影响。相场方法也在计算效率、模型和应用上有了很大发展<sup>[69]</sup>。

为了提高相场法的计算效率, Provatas<sup>[70]</sup>等人提出了自适应网格求解技术,如图 1-10 所示。相场模型也从最初的纯物质、二元合金单相场发展到包括包晶和共晶反应的多相场<sup>[71-73]</sup>, 并从定量的角度开展了对枝晶生长理论的验证<sup>[74-76]</sup>。此外, 将流场耦合入现有的相场模型也是一个研究趋势, Tong 和 Beckmann 等<sup>[77]</sup>提出了考虑流场的相场模型, 模拟了强迫对流对枝晶生长和形貌的影响。但总的说来, 相场模拟的尺度比较小, 计算时间也相当长, 一般说来, 只适合模拟枝晶组织。

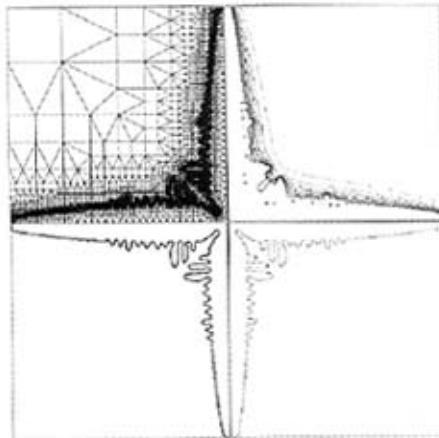


图 1-10 自适应网格技术<sup>[70]</sup>

Fig. 1-10 Adaptive grid method

对于晶粒组织的模拟,传统的决定论方法因为只能预测一些微观组织的平均值如晶粒平均尺寸,不能显示晶粒组织的动态演变,所以 CA 方法显示出明显的优势而逐渐成为主流。而由 Rappaz 等人在模拟晶粒组织时开创的经典 CA 方法近年来也出现了一些改进型。

Wang 和 Lee 等人<sup>[78]</sup>在 CA 和 FD 的框架下,考虑了溶质扩散和界面能的作用, 通过求解溶质扩散方程而不是直接套用 KGT 模型来处理枝晶的生长。他们成功地模拟了定向凝固条件下一次臂间距变化, 说明了一次臂对热历史的依存性 (thermal history dependent)。Zhu 和 Hong 自 2001 年起陆续发表文章对 CA 方法做了新的改进<sup>[79,80]</sup>, 将溶质扩散场引入计算, 综合考虑了成分过冷和曲率过冷的影响, 改进了经典 CA 方法中的“偏心正方”捕获算法, 对 Al-Cu 系合金的模拟结果与实验结果取得很好的一致, 并

且对 Al-Si 合金半固态组织也进行了很好的模拟<sup>[81]</sup>。同时 Zhu 和 Hong 还用这种改进的 CA 方法成功地模拟了包括多相系统的规则、非规则共晶组织以及包晶转变组织<sup>[82,83]</sup>。

此外, CA 方法在枝晶生长的模拟方面也表现出很大的潜力。Zhu 和 Hong 提出的改进的 CA 方法不但可以模拟晶粒组织, 而且对过冷熔体中自由晶生长的模拟也得到类似相场模拟的结果。最近, Zhu 又在 Hong 和 Shin 等人前期工作<sup>[84,85]</sup>的基础上, 耦合了流场计算, 用改进的 CA 方法来模拟在对流作用下枝晶的生长<sup>[86]</sup>, 如图 1-11 所示。Rappaz 的研究组采用求解溶质扩散的方法对多组元合金的凝固组织进行了模拟<sup>[87]</sup>。在文献中他们把这种方法称为“伪界面跟踪法 (Pseudo-Front Tracking)”。为了减少网格造成的各向异性, 他们采用了正六边形的计算单元, 并把模拟结果同理论模型、相场模型的结果进行了比较。Dilthey 和 Nastac 采用的方法则由 Stefanescu 和 Lazaro 等人<sup>[88,89]</sup>继续发展, 并从对枝晶生长的定性模拟逐渐向定量验证发展。

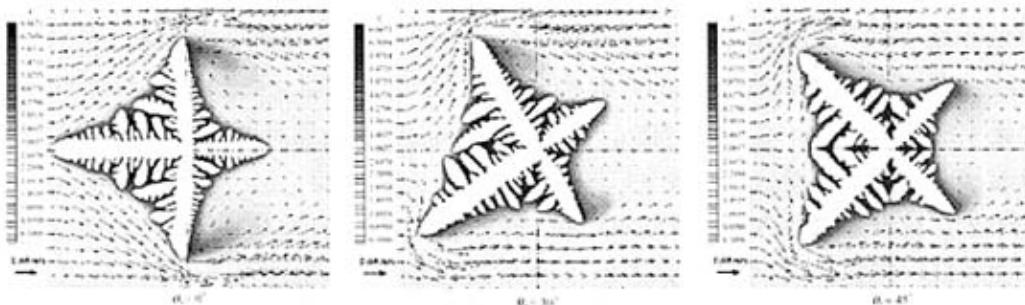


图 1-11 枝晶在对流条件下的生长<sup>[75]</sup>

Fig. 1-11 Dendritic growth with melt convection

近十几年来, 国内在凝固微观组织模拟方面也开展了一系列研究。清华大学许庆彦、柳百成<sup>[90-91]</sup>等将 CA 模型与宏观传热耦合, 对 Al-7%Si 合金的晶粒组织进行了模拟计算, 他们还提出了用一种形状函数来描述晶粒外部轮廓模拟铝合金枝晶生长的方法, 用金属型和砂型试样验证了模拟结果。李文珍、赵海东、柳百成等<sup>[92-95]</sup>基于凝固动力学, 并考虑扩散控制和界面条件建立了球墨铸铁中各组成相的生长模型, 开发了微观组织模拟软件, 并对实际铸件进行了模拟。大连理工大学王同敏、金俊泽等<sup>[96-99]</sup>以枝晶形核和生长动力学为基础, 结合宏观热流计算, 综合 CA 模拟技术和 MC 方法, 提出了 CAMC 宏微观耦合模拟技术, 成功模拟了 Al-4.5% 合金的晶粒组织。沈阳铸造研究所李殿中<sup>[100-102]</sup>考虑了非均质形核的机理及影响因素, 用 CA 方法模拟了镍基合金叶片凝固微观组织, 并在此基础上进行了工艺优化研究。中国科学院金属研究所康秀红、杜强等<sup>[103]</sup>用 CA 与宏观传输场耦合模拟了钢锭凝固组织中的晶粒形貌以及柱状-等轴转变; 李强、李殿中等<sup>[104-107]</sup>用连续性方法来处理两相界面物理性质的差异, 选用 Fe-C 二元合金模拟了凝固过程中枝晶生长、界面失稳、及高次臂的演化和显微偏析等。西北工业大学于艳梅

等用相场法分别模拟了纯镍和镍铜合金在过冷熔体中的枝晶生长<sup>[108-111]</sup>。

以上对凝固微观组织模拟的发展和研究进行了评述,但主要集中在晶粒组织的模拟和枝晶生长的模拟上。考虑到本研究未包括微观偏析方面的模拟,所以在这方面未展开叙述。相关的研究情况可以参看文献<sup>[112]</sup>。

### 1.3 胞元自动机方法

胞元自动机方法 (Cellular Automaton Method) 是在上世纪 50 年代初,由计算机创始人,著名数学家 Neumann 提出的<sup>[94]</sup>。它的基本思想是一个细胞或系统的基元,依据与其相邻的其它基元的情况,按事先设定的规则来决定自己的状态,从而通过定义局部简单的规则来描述系统整体复杂的演变规律。胞元自动机具有四个要素:(1)求解区域由具有相同尺寸和几何结构的胞元规则排列而成,在二维情况下,正方或六方点阵是最常见的形式;(2)胞元具有确定的邻域关系,在二维正方形点阵中,最常采用的是 Neumann 邻域和 Moore 邻域。前者由东西南北四个最近邻胞元构成,后者还包括对角上的四个次近邻胞元;(3)每个胞元具有不同的状态值或变量值来标识;(4)每个胞元自身的状态转变由预先定义的转变规则和邻胞状态决定。

胞元自动机方法的基本思想简单清晰,在数值计算中处理也很方便,并且很容易和各种物理过程结合起来。因此在晶粒组织和枝晶生长的模拟中都得到了广泛应用。在各种文献中,有称之为胞元自动机方法,也有称为元胞自动机模型或胞元模型,并且还产生了很多改进型。为叙述方便,本文通称为 CA 方法。在应用 CA 方法模拟凝固组织的过程中,除设定胞元形状、邻域关系、状态值之外,还需要结合形核、生长模型及相应的捕获算法来建立胞元的局部转变规则。

在晶粒组织的模拟中,胞元状态转变可以通过形核或生长两种机制发生。当胞元处于过冷状态并且其局部过冷度小于形核过冷时将发生形核,该胞元的状态被标记为固相并成为一个核心开始生长,同时该胞元还被赋予一个随机数代表  $[-\pi/4, \pi/4]$  范围内的择优生长方向。一旦有核心形成,则核心胞元开始沿着择优生长方向生长,并捕获其邻近的液相胞元,使邻胞的状态发生变化,被捕获的胞元将按照核心胞元的生长位向继续捕获其它胞元。当一个胞元的所有邻近胞元都被捕获后,该胞元停止生长。

而在处理生长问题时,一般是将枝晶生长理论模型推导的结果进行数学回归处理,将尖端生长速度  $V$  表示为界面前沿过冷度  $\Delta T$  的简单函数

$$V = k_1 \Delta T^2 + k_2 \Delta T^3 \quad (1.6)$$

这种方法比较简单,但函数的形式和参数的选择会因为合金体系和生长条件的变化而不同,适用性和准确性受到限制。同时需要注意这种方法计算的是枝晶尖端的速度,在离开尖端的其它各处则无法知道准确的生长速度,因此需要对晶粒的外形轮廓做简化处理,由尖端速度和捕获算法来确定胞元的状态转变规则。

对于胞元的捕获，研究者提出了各种不同的算法。在最初模拟均匀温度场中的晶粒组织时，Rappza 等人<sup>[29]</sup>假设晶粒的生长外形为一正方，其对角线与坐标轴正向成  $\theta$  夹角，代表晶粒的择优生长方向，如图 1-12 所示。若核心胞元 A 在  $t_N$  时刻形成，则在  $t$  时刻代表晶粒外形的正方形的半对角线长将为

$$L(t) = \int_{t_N}^t V[\Delta T(\tau)]d\tau \quad (1.7)$$

当这一外形到达邻近胞元 B 时有

$$L(t_B) = \Delta x(\cos\theta + |\sin\theta|) \quad (1.8)$$

此时 4 个邻近胞元 B1、B2、B3、B4 将被全部捕获，其状态由液相转变为固相并按照核心胞元的生长方向继续生长，核心胞元 A 则停止生长。但用这种方法在进行多步的捕获后，晶粒的择优生长方向发生偏离。因此还需要进行尖端校正，即在每一时间步还记录尖端 T 的位置，并将三角形 TUV 内被遗漏的胞元捕获，其中 TU 和 TV 的长度大约在胞元间距的尺度。在随后的非均匀温度场和三维模拟中，这一三角形修正法被偏心正方算法所取代。偏心正方算法<sup>[32]</sup>的得名来源于对捕获方块的裁剪，为了保证生长方向不发生偏离，捕获方块始终以核心位置为中心，但这样会使它越来越大而违背了状态值逐层传递的 CA 规则，因而需要进行裁剪。这使其实际的捕获中心实际上偏离了原始核心因而成为一个偏心正方。

考虑到这种捕获算法的繁琐，Zhu 对此进行改进<sup>[79]</sup>。如图 1-12b 所示，对于界面胞 M 来说，其 8 邻域中至少会有一个液相胞，界面沿液相胞 i 方向的生长距离  $L_i$  由择优方向的生长距离进行转化得到

$$L_i = \frac{\int_{t_N}^{t+\Delta t} V_i(\Delta T_i) d\tau}{\cos\theta + |\sin\theta|} \quad (1.9)$$

如果 i 为最近邻位置上的液相胞，则  $L_i$  大于胞元尺寸  $\Delta x$  时捕获该胞。而当 i 为次近邻位置上的液相胞时，则  $L_i$  大于  $\sqrt{2}\Delta x$  时捕获该胞。

此外，也有研究者采用数学曲线来描述晶粒的外形，并以此进行捕获。王同敏<sup>[99]</sup>考虑到在非均匀温度场中晶粒在四个择优生长方向上并不等长生长的事实，提出了通过分别计算四个方向的生长臂长而进行捕获的算法，但这种不规则四边形捕获的晶粒往往出现尖角，为此他采用 Steinbach 等人<sup>[114]</sup>给出的枝晶轮廓经验公式

$$\frac{X_{ip}}{R} = 0.668 \left( \frac{Z}{R} \right)^{0.859} \quad (1.10)$$

来确定晶粒外形，如图 1-12c 所示。陈军<sup>[115]</sup>则用图 1-12d 所示抛物线来描述晶粒轮廓，根据 Glicksman 等人<sup>[116]</sup>的研究结果，认为二次臂以大于 40% 的速度生长，这样当已知主干长度  $L$  后，晶粒在一个方向上的轮廓由下式确定

$$y = -\frac{x^2}{0.16L} + L \quad (1.11)$$

许庆彦<sup>[91]</sup>等则采用了如图 1-12e 所示的形状函数来得到晶粒轮廓曲线

$$L(\theta) = L_0 [A' + (1 - A') \cos 4\theta] \quad (1.12)$$

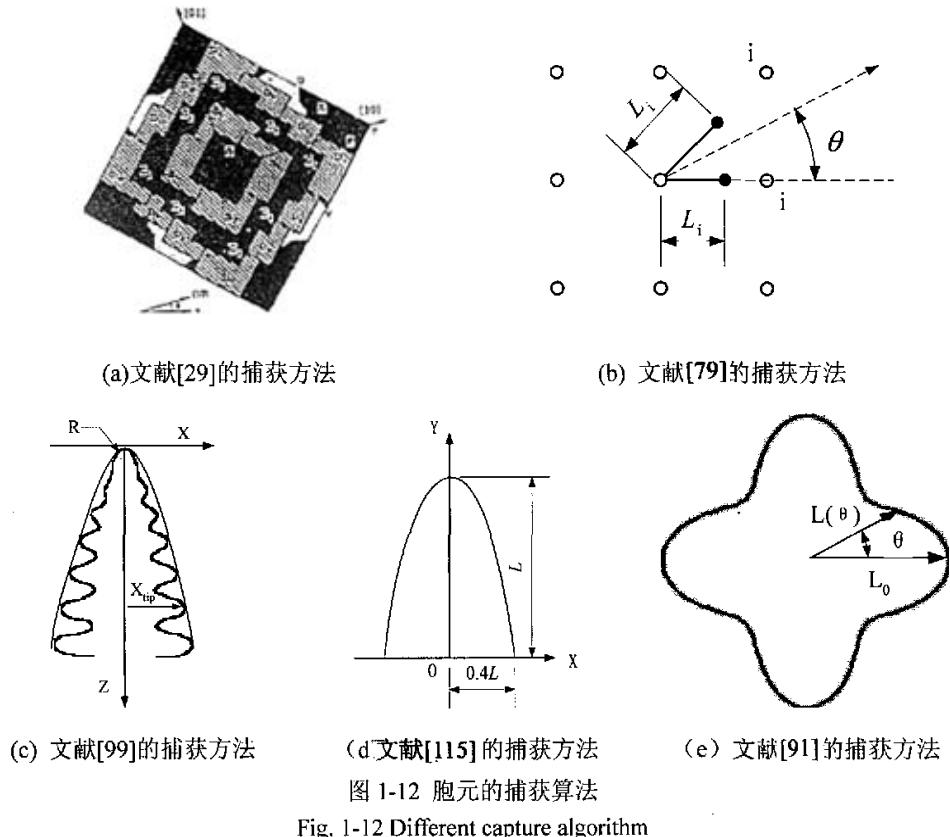


图 1-12 胞元的捕获算法

Fig. 1-12 Different capture algorithm

总的说来,在晶粒组织的模拟中,现有的捕获算法总是基于对晶粒外形的特定假设,同时为了保证晶粒沿择优方向生长,以及保证胞元在捕获中按照 CA 的规则逐层进行状态传递,需要对捕获算法进行许多额外的处理,并且这种方法很难描述枝晶的形貌细节。因此,在模拟复杂的枝晶生长时,需要采用更为准确的办法。

对于枝晶生长的模拟,除相场方法外,实际上也可以采用 CA 的思想,基于胞元的捕获和状态转变来模拟枝晶的生长行为及形貌演变。单个的枝晶生长无需处理形核问题,因此,主要是建立适当的生长模型以及捕获规则。根据枝晶生长时界面处的热扩散和溶质扩散平衡可以得到界面法向速度

$$V_n = \left[ \alpha_s \left( \frac{\partial T}{\partial n} \right)_s - \alpha_L \left( \frac{\partial T}{\partial n} \right)_L \right] / L \quad (1.13)$$

$$V_n = \left[ D_s \left( \frac{\partial C}{\partial n} \right)_s - D_L \left( \frac{\partial C}{\partial n} \right)_L \right] C_L^* (1 - k_0) \quad (1.14)$$

式中

$V_n$ ——界面法向速度；

$\alpha$ ——热扩散率， $\alpha = \lambda / (\rho c_p)$ ；

$L$ ——凝固潜热；

$C_L^*$ ——界面平衡液相成分；

$k_0$ ——平衡分配系数；

S, L——分别表示固相和液相；

对于主要受热扩散控制的纯金属凝固，可应用（1.13）式，对于主要由溶质扩散控制的合金凝固，可应用（1.14）式。用这种方法获得的速度将不再仅仅是尖端速度，而是枝晶生长界面上各处的实际速度。这样不但可以模拟单个枝晶的生长，而且可以将这一生长模型直接应用到晶粒组织的模拟中去，而无需对晶粒的外形做任何简单假设。当然，对以上二式的求解需要结合其它条件并在整个计算区域内进行，这将在以后的章节内进行详细的说明。

总之，尽管研究者在用 CA 方法模拟凝固组织中的处理方法和细节各有不同，但可以看到 CA 方法无论在晶粒组织模拟还是单个枝晶模拟方面都有一定潜力。

## 1.4 存在的问题与本研究主要内容

从微观组织模拟的研究进展和现状看来，尽管各种方法都取得了一定成功，但还存在着一些问题。

首先，由于凝固现象的复杂性，对于许多问题凝固理论至今也没有给出很好的解答。这使得许多时候凝固组织模拟陷于缺乏理论指导的困境。模拟计算虽然可以通过一些看似合理的假设和参数调整来得到合理的结果，但往往难以揭示真正影响凝固组织的因素。因此在模拟过程中，提出假设和选取参数时需要慎重，并尽可能对结果进行多方验证，力求避免从特殊的情况得到特殊的结果。

其次，凝固过程伴随着宏微观两个层面的多种变化，这些变化在一个跨度较大的多尺度范围内发生，并且这些变化之间还有复杂的交互影响。全面而准确地在模拟中处理上述问题目前看来，无论是从理论、模型还是算法、计算能力来看都并不实际。因此需要针对不同的模拟目的，不同的模拟尺度，分析其中占主导作用的物理机制，在此基础上运用适当的模型和算法，选取适当的模拟参数，使模拟尽可能在工程实际的背景下进行。

第三，在使用数值模拟方法研究凝固问题时，除去因理论模型和真实物理机制之间

的差异造成的误差外,数值计算本身也会造成一定误差和带来许多额外问题,比如离散格式的精度、时间、空间步长的收敛性和稳定性、网格依赖等,而这些误差将共同反映在模拟结果中。所以在模拟中尤其需要对数值计算本身进行关注,以免在分析中将数值计算的影响施加到物理量的影响中。

针对现有的组织模拟成功之处与存在的问题,结合自身的实际情况,本研究拟完成如下工作:

1、在前人研究的基础上,对枝晶生长的数值模型进行改进和完善,以溶质扩散为基础,将成分过冷、曲率过冷、界面能各向异性以及界面扰动等因素尽可能包括在其中,使模型能够比较完整地描述枝晶的稳态生长和分枝演化。

2、用 CA 方法对枝晶生长模型进行数值求解,编制模拟程序。程序提供输入界面以便于改变相关模拟参数,并输出数据文件以便进行后续分析和可视化处理。

3、用这一数值模型和算法对过冷熔体中枝晶尖端的稳态生长和分枝机制进行模拟计算,通过与枝晶生长理论模型和其它数值模拟方法的比较来验证本文提出的数值模型的准确性和适用性。

4、将这一模型进行扩展,对定向凝固条件下的枝晶组织进行模拟,并通过改变模拟参数来研究工艺因素对定向凝固组织和界面形貌的影响,并与凝固理论的预测结果进行比较验证。

5、将这个枝晶生长模型直接应用到晶粒组织的模拟中去,结合宏观温度场的模拟和形核模型,实现宏微观的耦合。用 CA 方法对晶粒组织模拟和枝晶组织模拟进行整合,并对晶粒组织模拟结果进行讨论。

## 第二章 枝晶生长理论与模型

枝晶生长对于涉及凝固过程的铸造、焊接等工艺有重要意义，因为枝晶组织的形貌及其演变在很大程度上影响着材料的使用性能；枝晶生长同时也代表着自然界一种复杂的自组织模式，因而也成为非线性动力学理论的研究对象。这使得材料和物理领域的研究者对枝晶生长产生了共同的研究兴趣，因而在近几十年里开展了大量关于枝晶生长的理论和实验研究。

然而，到目前为止，关于枝晶生长的理论仍然没有取得一致。NASA 曾分别在 1994 年、1996 年和 1997 年利用哥伦比亚号宇宙飞船在太空微重力条件下开展了等温枝晶生长实验 (Isothermal Dendritic Growth Experiment)，IDGE 采用了两种透明有机物 SCN[CN-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-CN] 和 PVA[(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-C-COOH] 作为实验材料，这些实验为研究枝晶生长提供了珍贵的资料和迄今为止最为准确的数据<sup>[117,118]</sup>。

枝晶的生长一方面涉及到尖端的稳态生长行为，另一方面则包括了非稳态的分枝结构的不断产生和演化。本章首先对枝晶生长的有关理论问题进行阐述，并对相应的理论模型进行推导。在此基础上建立枝晶生长的数学模型并提出相应的数值计算处理方法。

### 2.1 枝晶的稳态生长

#### 2.1.1 尖端的稳态生长理论

对于合金而言，在通常的铸造条件下凝固时，枝晶的生长主要伴随着热扩散、溶质扩散和表面能效应这三个物理过程。其中热扩散和溶质扩散将促使界面失稳，而表面能则作为一种稳定性力量使界面维持平衡，从而使枝晶的稳态生长得以保持。

若以固液界面为原点建立移动坐标系，则当界面以速度  $V$  沿坐标轴  $Z'$  方向移动时，界面前沿的温度场和溶质场可以由以下二式给出

$$\alpha_L \nabla^2 T + V \frac{\partial T}{\partial z'} = 0 \quad (2.1)$$

$$D_L \nabla^2 C + V \frac{\partial C}{\partial z'} = 0 \quad (2.2)$$

但对 (2.1) 式和 (2.2) 式的稳态求解不容易，因为界面的形状并不是已知条件，而需要作为求解的一部分，同时还必须通过一种自洽的方式使界面形状在生长中保持不变。严格的形状恒定求解非常复杂，求解结果表明它非常接近一个旋转抛物面。Invanstov<sup>[119]</sup>首先对这一旋转抛物面模型进行了严格的数学求解，得到

$$\Omega_c = \frac{C_c^* - C_0}{C_c^*(1 - k_0)} = Iv(P_c) \quad (2.3)$$

$$\Omega_t = \frac{T^* - T_\infty}{L/C_p} = Iv(P_t) \quad (2.4)$$

式中

$\Omega$ ——无量纲过饱和度;

$C_0$ ——合金原始成分;

$T_\infty$ ——熔体温度;

$T^*$ ——界面温度;

$Iv(P)$ ——Invanstov 函数;  $Iv(P) = P \cdot \exp(P) \cdot \int_p^\infty \frac{\exp(-z)}{z} dz$

$P_c$ ——溶质 Péclet 数,  $P_c \equiv RV/(2D_L)$ ;

$P_t$ ——热 Péclet 数,  $P_t \equiv RV/(2\alpha_L)$ ;

$R$ ——枝晶尖端半径;

$V$ ——枝晶尖端生长速度;

但这一关系并不足以求得枝晶尖端的生长速度  $V$  和尖端半径  $R$ , 而只能求得它们的乘积  $VR$ , 因此还需要其它的约束条件作为尖端选择判据。Langer 等人<sup>[120]</sup>根据界面稳定性理论<sup>[121]</sup>提出将  $R=\lambda_c$  作为另一个约束条件, 其中  $\lambda_c$  为最小临界扰动波长。这一条件可以写成如下形式

$$m_L G_c \xi_c - G = \frac{1}{\sigma^*} \frac{\Gamma}{R^2} \quad (2.5)$$

式中

$m_L$ ——液相线斜率;

$G_c$ ——界面处的成分梯度;

$\xi_c$ —— $P_c$  的函数, 在  $P_c < 1$  时  $\xi_c \approx 1$ ;

$G$ ——界面处的平均温度梯度

$\sigma^*$ ——稳定性常数, 其理论值为  $1/(4\pi^2)$ ;

$\Gamma$ ——Gibbs-Tompson 系数;

这一约束条件也称为临界稳定判据。根据 IMS (Invanstov solution & Marginal Stability criterion) 得到的枝晶尖端半径、生长速度和过冷度之间的关系与实验数据取得很好的一致<sup>[10]</sup>, 并且实验数据显示, 在不同过冷度下,  $\sigma^*$  在很窄范围内变动。这说明  $\sigma^*$  确实表现出稳定性常数的特性, 与过冷度和熔体流动无关。

但近十年来, 通过对枝晶生长的稳态自恰解研究, 又出现了微观可解性理论 (Microscopic Solvability Condition)<sup>[47,48,122]</sup> 和界面波理论 (InterFacial Wave theory)<sup>[123]</sup>。根据文献[124], MSC 理论的结论和 IMS 大致相同, 只是 MSC 认为界面能各向异性是

枝晶能够稳态生长的必要条件，在界面能各向同性的情况下，将不会得到稳态解，但只要存在各向异性，就会有稳态解存在。并且 MSC 理论认为稳定性常数  $\sigma^*$  是界面能各向异性的函数。MSC 和 IFW 的主要分歧则在于，MSC 认为只要存在各向异性，就会有稳态解，但 IFW 理论认为存在一个临界各向异性，只有大于这一临界值时才会有稳态解。

这些理论分歧目前还没有得到很好的解决，但从 IDGE 实验数据来看，两种实验材料 PVA 和 SCN 的尖端生长行为确实有所不同。前者的界面能几乎是各向同性的，而前者的界面能各向异性因子则比前者大 10 倍。但需要指出的是，界面能各向异性的影响仅仅造成枝晶生长尖端附近的细微的差别。目前看来，IMS 理论对于枝晶尖端生长行为的预测仍然是足够准确的。

### 2.1.2 尖端的稳态生长模型

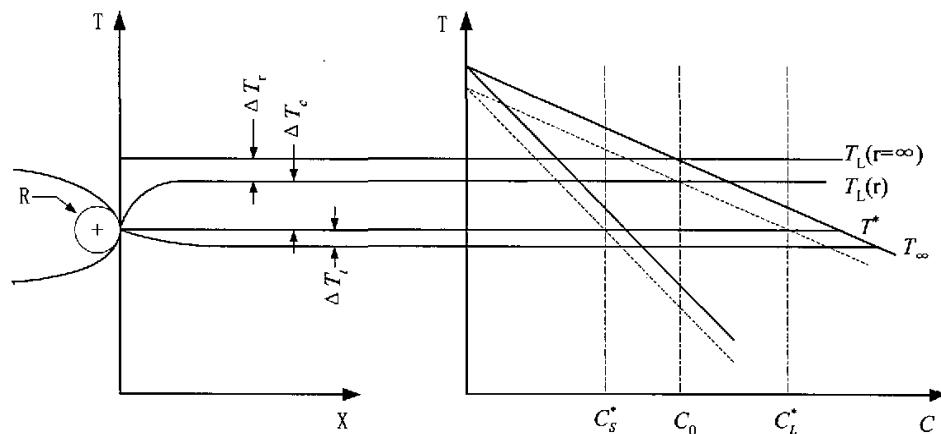


图 2-1 过冷熔体中的枝晶尖端过冷

Fig. 2-1 Undercooling at dendrite tip into undercooled alloy melt

对于在过冷熔体中生长的枝晶，其尖端的温度和成分如图 2-1 所示。熔体总过冷  $\Delta T = T_L - T_\infty$  由三项组成。其中  $\Delta T_r$  为曲率过冷，意味着由于枝晶生长界面的曲率引起平衡液相线温度的改变。根据 Gibbs-Thompson 关系

$$\Delta T_r = K \frac{\sigma}{\Delta s_f} = \frac{2\Gamma}{R} \quad (2.6)$$

式中

$\sigma$ ——表面能；

$\Delta s_f$ ——体积熔化熵；

$K$ ——界面曲率，如图 2-2 所示，对于三维曲面来说根据曲率的定义可以将其表示为两个垂直方向上的矢径倒数之和 ( $1/r_1 + 1/r_2$ )。由于球形界面在任意方向上矢径均为  $R$ ，所以曲率为  $2/R$ ；

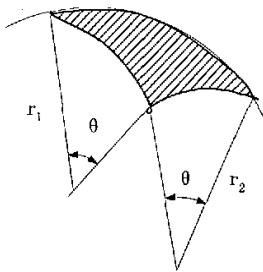
图 2-2 空间曲面的主曲率<sup>[8]</sup>

Fig. 2-2 Principal curvature of a surface

$\Delta T_c$  为成分过冷, 这是由于界面前沿的溶质富集 (对于平衡分配系数  $k_0 < 1$  的合金) 使得界面处的温度和前方熔体的液相线温度形成的差距。成分过冷可以表示为

$$\Delta T_c = m_L (C_0 - C_L^*) \quad (2.7)$$

应用 Invanstov 解 (2.3) 式可以得到

$$\Delta T_c = m_L C_0 \left[ 1 - \frac{1}{1 - (1 - k_0) Iv(P_c)} \right] \quad (2.8)$$

对于在过冷熔体中生长的枝晶, 由于生长中释放的潜热只能通过周围的熔体排走, 因此在熔体中存在着负的温度梯度, 使潜热不断地排放到前方的熔体中去, 并通过远处的熔体排走。这样, 界面处的温度  $T^*$  和远离界面处的熔体温度  $T_\infty$  之间还存在着温差, 即热过冷  $\Delta T_t = T^* - T_\infty$ 。应用 Invanstov 解 (2.4) 式可以得到

$$\Delta T_t = \frac{L}{C_p} Iv(P_t) \quad (2.9)$$

由 (2.6) 式、(2.8) 式和 (2.9) 式就可以得到枝晶尖端的总过冷

$$\Delta T = \frac{L}{C_p} Iv(P_t) + m_L C_0 \left[ 1 - \frac{1}{1 - (1 - k_0) Iv(P_c)} \right] + \frac{2\Gamma}{R} \quad (2.10)$$

根据最小临界波长判据 (2.5) 式可得到枝晶尖端半径

$$R = \sqrt{\frac{\Gamma}{\sigma^* (m_L G_c \xi_c - G)}} \quad (2.11)$$

若考虑尖端的溶质平衡有

$$-G_c D_L = V (C_L^* - C_s^*) \quad (2.12)$$

利用  $C_s^* = k_0 C_L^*$  及 (2.3) 式和 Péclet 数的定义, 可以得到

$$G_c = \frac{-2P_c}{R} \left[ \frac{C_0(1 - k_0)}{1 - (1 - k_0) Iv(P_c)} \right] \quad (2.13)$$

同样的道理, 若考虑到尖端的热平衡有

$$-G_L \alpha_L = VL / C_p \quad (2.14)$$

尖端的平均温度梯度  $G$  可以表示为

$$G = \frac{\lambda_S G_S + \lambda_L G_L}{\lambda_S + \lambda_L} \quad (2.15)$$

式中

$\lambda_S$ ——固相的导热系数；

$\lambda_L$ ——液相的导热系数；

若假设固相和液相的导热系数相同，并且考虑到在 Invanstov 解中枝晶生长是一个等温面 ( $G_S=0$ ) 则由 (2.14) 式和 (2.15) 式可以得到

$$G = \frac{-P_t L}{R C_p} \quad (2.16)$$

将 (2.16) 式和 (2.13) 式代入 (2.11) 式，并认为在  $P_c$  较小的情况下  $\xi_c \approx 1$  就得到

$$R = \frac{\Gamma / \sigma^*}{\frac{P_t L}{C_p} - \frac{2P_c m_L C_0 (1 - k_0)}{1 - (1 - k_0) Iv(P_c)}} \quad (2.17)$$

在给定的总过冷  $\Delta T$  下，由 (2.10) 式和 (2.17) 式就可以唯一地求得枝晶尖端速度  $V$  和尖端半径  $R$ 。这一过冷熔体中的自由晶生长模型最早由 Lipton 等人提出，因此也被称为 LGK 模型<sup>[18]</sup>。

Kurz 等人对于枝晶在定向条件下的生长进行了研究，也给出了一个 KGT 模型<sup>[20]</sup>。这一模型从 (2.11) 式出发，由于定向生长条件下的温度梯度已知，所以只需要将 (2.13) 式代入 (2.11) 式，并把  $R$  写成  $2P_c D_L / V$  整理后可以得到一个关于  $V$  的一元二次方程

$$V^2 \left( \frac{\pi^2 \Gamma}{P_c^2 D_L^2} \right) + V \left( \frac{m_L C_0 (1 - k_0)}{D_L [1 - (1 - k_0) Iv(P_c)]} \right) + G = 0 \quad (2.18)$$

在给定  $P_c$  后就可以求解得到  $V$ ，并由  $P_c = VR / 2D_L$  得到尖端半径  $R$ 。需要注意，与自由晶的生长不同，定向生长的枝晶由于界面前方的温度梯度为正，所以不存在热过冷。将 (2.10) 式中的热过冷项去掉后就得到定向生长的树枝晶界面前沿的过冷

$$\Delta T = m_L C_0 \left[ 1 - \frac{1}{1 - (1 - k_0) Iv(P_c)} \right] + \frac{2\Gamma}{R} \quad (2.19)$$

为了对枝晶尖端生长的理论模型有更好的认识，本文根据 Al-Cu 合金的热物参数（见表 5-1），采用 Matlab 编写程序对 LGK 和 KGT 理论模型分别进行了计算。图 2-3 给出了在总过冷度  $\Delta T$  中，曲率过冷  $\Delta T_r$ 、成分过冷  $\Delta T_c$  和热过冷  $\Delta T_t$  各自所占百分比。可以看出，起主要作用的还是成分过冷，而热过冷则几乎可以忽略。图 2-4 则是枝晶生长尖端速度  $V$  与过冷度  $\Delta T$  之间的关系，其中分别采用 LGK 模型和  $G=0$  时的 KGT 模

型进行了计算。从图 2-4 中可以看出，在同一过冷度下，LGK 模型给出的尖端速度  $V$  要小于 KGT 模型。这是因为 LGK 模型考虑了枝晶尖端的热过冷，因此尖端的实际温度  $T^*$  高于在相同总过冷时 KGT 模型中的  $T^*$ 。

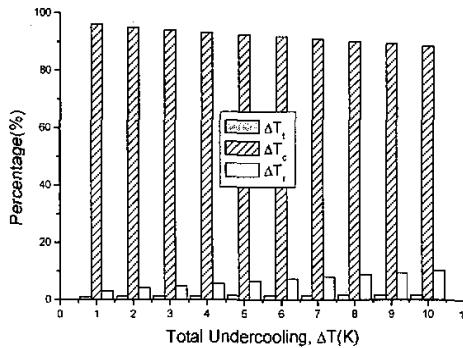


图 2-3 LGK 模型中不同过冷占总过冷的百分比

Fig. 2-3 Percentage of different undercooling in LGK model

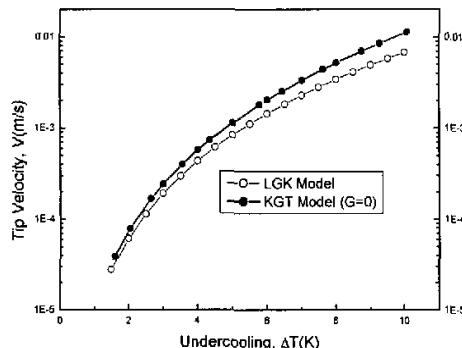


图 2-4 LGK 模型与 KGT 模型的比较

Fig. 2-4 Comparison between LGK model and KGT model

## 2.2 枝晶的分枝机制

MSC 理论认为分枝的形成与界面扰动有关<sup>[125]</sup>。当无扰动时，枝晶尖端将会以光滑的针状抛物面生长；当尖端出现扰动时，扰动波将从尖端沿轴向传播，但扰动振幅会随空间位置变化，在尖端附近会形成扰动波振幅指数增大的外形。对于一个特定波长（频率）的扰动波，尖端附近的扰动将会因为一种放大机制而增加从而使得分枝可见。但对于什么样的波长能够被放大机制选择，理论预测和实验结果并不一致。

IFW 理论<sup>[124]</sup>则认为当考虑到表面能的各向异性后，界面失稳的模式有 GTW (Global Trapped Wave) 和 LF (Low Frequency) 两种机制，当表面能各向异性大于最小临界值

时, LF 模式起作用, 可以得到与 MSC 类似稳态解, 但表面能各向异性低于最小临界值时, GTW 模式将会起作用, 因而分枝结构无需扰动的介入而将能够自我维持。

分枝的产生机制目前理论上还没有得到解决, 但传统的界面稳定性分析却得出一个非常重要的结果, 即对于界面上可能存在的一系列扰动波长来说, 并非所有的扰动都能够发展起来, 只有扰动波长大于临界值的扰动才可能会发展起来, 而扰动波长小于临界值的扰动则会消失。临界波长由下式给出

$$\lambda_c = 2\pi \sqrt{\frac{D\Gamma}{V\Delta T_0}} \quad (2.20)$$

式中  $\Delta T_0$ ——合金的凝固温度范围,  $\Delta T_0 = m_L C_0 (k_0 - 1) / k_0$ ;

一个很有趣的事是,  $D/V$  代表扩散长度, 而  $\Gamma/\Delta T_0$  代表毛细长度 (表 1-1)。由于溶质扩散促成界面的失稳, 而界面能则倾向于维持界面的稳定, 因此 (2.20) 式意味着临界波长将在扩散长度和毛细长度的竞争中达到平衡。

分枝的形貌可以用一次臂间距  $\lambda_1$  和二次臂间距  $\lambda_2$  来描述。 $\lambda_1$  的理论推导可以通过对枝晶的形状做简单假设得到, Kurz 等人<sup>[8]</sup>给出

$$\lambda_1 = 4.3 \left( \frac{D\Gamma\Delta T_0}{k} \right)^{1/4} V^{-1/4} G^{-1/2} \quad (2.21)$$

Hunt 等人<sup>[126]</sup>通过更复杂的推导以及数值计算也得到大体相同的结果, 即  $\lambda_1 \propto G^{-1/2} V^{1/4}$ 。当生长条件改变时,  $\lambda_1$  会通过分枝和淹没机制来自动调整并最终达到当前生长条件下的稳定值。但需要注意的, Hunt 和黄卫东等人<sup>[127,128]</sup>的研究表明, 对于确定的凝固参数, 稳态的一次臂间距存在一个容许的范围, 并与凝固路径相关。因此 (2.21) 式仅能给出一个定性的估计而不是准确的预测。

由于二次臂在距离尖端很近的地方开始产生, 因此直觉的想法是  $\lambda_2$  与临界扰动波长  $\lambda_c$  有关。Krumbhaar 进一步指出在不同的过冷度和界面能各向异性下,  $\lambda_2/\lambda_c \approx 2.5$ , 并称这一结果与实验和数值模拟一致<sup>[125]</sup>。但由于二次臂在凝固后期的粗化作用会使得分枝间距变大, 因此一般认为  $\lambda_2$  与局部凝固时间有关。考虑到粗化效应, Kurz 等<sup>[8]</sup>给出

$$\lambda_2 = 5.5 \left[ \frac{-\Gamma D \ln(C_E / C_0)}{m_L (1 - k_0) (C_E - C_0)} t_f \right]^{1/3} \quad (2.22)$$

式中

$C_E$ ——共晶成分;

$t_f$ ——局部凝固时间, 在定向凝固的条件下  $t_f = \Delta T' / |\dot{T}|$ ;

$\Delta T'$ ——非平衡凝固的温度范围, 对于有共晶反应的凝固过程,  $\Delta T' = m_L (C_L^* - C_E)$ ;

$|\dot{T}|$ ——冷却速度, 在定向凝固条件下可以写成  $|\dot{T}| = |GV|$ ;

## 2.3 枝晶生长的数值模型

### 2.3.1 尖锐界面与扩散界面

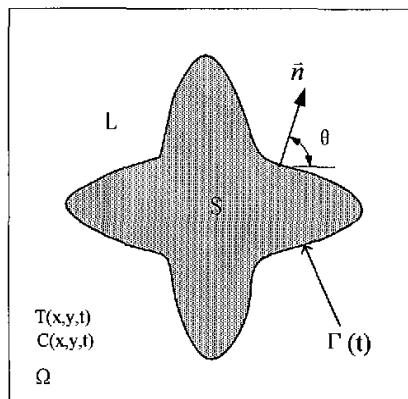


图 2-5 枝晶生长几何模型示意图

Fig. 2-5 Schematic geometry model of dendritic growth

枝晶的生长可以由图 2-5 所示的几何模型来描述, 对于二维情况下的有限求解区域  $\Omega$ , 由固液界面  $\Gamma(t)$  将整个区域分为固相  $S$  和液相  $L$ , 由于  $\Gamma$  本身并不是作为已知条件, 而是作为求解的一部分, 因此这一问题是典型的移动边界问题。

根据对这一问题不同的处理方法, 枝晶生长的数学模型可以大致分为两类, 一类称为尖锐界面模型, 一类称为扩散界面模型, 如图 2-6 所示。尖锐界面模型认为, 界面本身是没有厚度的, 描述固、液相的性质的物理量在界面两侧锐变。而扩散界面模型则认为在固、液相之间存在一个由界面厚度定义的扩散层, 并用一个统一的物理量来描述固、液相和界面。物理量从界面一侧经过连续的变化过渡到另一侧。

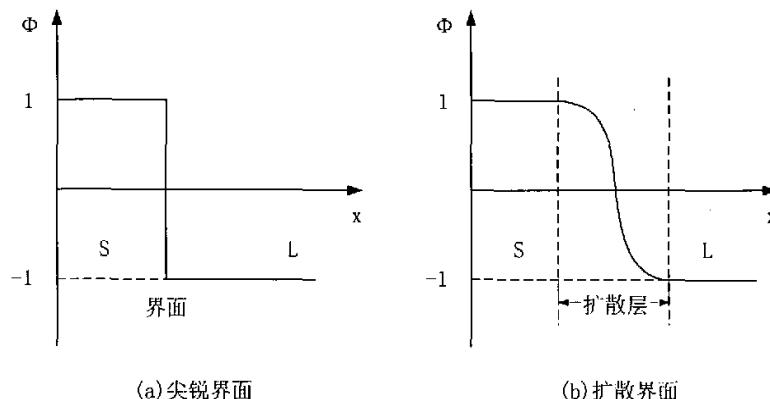


图 2-6 尖锐界面与扩散界面

Fig. 2-6 Sharp interface (a) and diffuse interface (b)

相场法<sup>[56-61]</sup>是基于扩散界面模型的求解方法。从理论上说, 合金凝固时的固液界面

只有几个原子的尺度,更接近尖锐界面模型,因此尽管相场法可以通过渐进分析复归于尖锐界面模型,但正如 Kim<sup>[129]</sup>所指出的,相场模型本身使得进行数值计算时所能用的界面厚度参数和界面动力学系数都有限制。为了在尽可能大的界面厚度参数下获得可靠结果,相场模拟通常采用远高于典型铸造工艺条件下的大过冷度才能获得发达的侧枝<sup>[130]</sup>,这使得模拟结果的物理背景较工程背景更强。

界面跟踪法<sup>[50,53,54,67]</sup>则代表典型的尖锐界面模型求解方法。对于合金来说,尖锐界面模型可以用以下一组方程描述

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_{S/L} \nabla^2 C \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha_{S/L} \nabla^2 T \quad (2.24)$$

$$V_n C_L^* (1 - k_0) = D_S \left( \frac{\partial C}{\partial n} \right)_S - D_L \left( \frac{\partial C}{\partial n} \right)_L \quad (2.25)$$

$$\rho L V_n = \lambda_S \left( \frac{\partial T}{\partial n} \right)_S - \lambda_L \left( \frac{\partial T}{\partial n} \right)_L \quad (2.26)$$

$$T^* = T_M + m_L C_L^* - \Gamma K \quad (2.27)$$

在给定的初始条件和边界条件下,通过对(2.23)式~(2.27)式的数值求解即可获得枝晶生长过程中的温度场、溶质场、枝晶形貌及其演变。考虑到对于合金而言,热扩散的尺度比溶质扩散大3~4个数量级,因此合金枝晶的生长主要受到溶质扩散的控制。

但为了避免如同界面跟踪法那样显式地跟踪界面,本文基于前人的研究<sup>[62-66,88-89]</sup>,对枝晶生长的溶质扩散控制模型进行了改进,通过采用胞元自动机方法对这一模型进行了数值计算,将固液界面处的锐变转化界面胞元内部固相份数的渐变,从而很好地处理了两类模型之间的关系。

### 2.3.2 溶质扩散控制模型

要完整地描述枝晶的生长行为,必须综合考虑到热扩散、溶质扩散、流动、界面能以及高速生长时的动力学效应。但由于它们分别在各种尺度和不同的条件下起作用,此处我们首先建立一个基本模型,在此基础上可以根据情况对基本模型进行扩展。考虑一个最简单的情况:枝晶在过冷熔体中生长,熔体的过冷度 $\Delta T$ 为已知的恒定值。模型的基本假设包括

- (1) 考虑到热扩散的尺度比溶质扩散高出3~4个数量级,因此忽略枝晶生长中的热扩散,认为在枝晶生长过程中熔体始终是等温的;
- (2) 在过冷度不大的情况下,忽略动力学过冷,也不考虑高速生长时的动力学效应,

这一效应包括固、液相线斜率以及分配系数随生长速度的变化；

(3) 考虑到溶质在液相中的扩散系数比在固相中高出 3 个数量级，因此忽略溶质在固相中的扩散；

(4) 不考虑熔体的流动；

(5) 认为界面始终处于平衡状态，界面两侧的固液相成分服从  $C_s^* = k_0 C_L^*$

为应用胞元自动机方法，整个计算区域被划分为  $m \times n$  个正方形的计算单元，称为胞元，胞元尺寸为  $\Delta x$ 。每个胞元设定一个状态值 *State* 来标记其为固相 (SOLID)、液相 (LIQUID) 或界面 (MUSHY)。此外，每个胞元还存储固相成分  $C_s$ 、液相成分  $C_L$ 、固相份数  $f_s$ 、固相增量  $\Delta f_s$ 。

模型首先基于界面平衡液相成分对于每个界面胞进行生长计算，得到其固相份数增量  $\Delta f_s$ ，这部分内容将在 2.3.3 小节进行详细说明。当界面胞进行生长时还需要处理由于多余溶质排出造成的溶质场变化，这部分内容将在 2.3.4 小节详细说明。随着生长的进行，界面胞元固相份数  $f_s$  不断增加。当  $f_s \geq 1$  时，意味着界面胞元已经完全转变为固相胞元，将其状态值 *State* 设为 SOLID，同时检查其 4 近邻胞元，若邻胞状态为 LIQUID，则将其设定为 MUSHY。这样，通过胞元状态的转变就可以对枝晶的生长及其演化进行动态的描述。

### 2.3.3 界面胞的生长

在假设 (1)、(2) 下，熔体的总过冷由曲率过冷  $\Delta T_r$  和成分过冷  $\Delta T_c = m_c (C_0 - C_L^*)$  组成。2.1.2 小节中在计算曲率过冷时仅考虑枝晶尖端的情况，但此处是对枝晶各处的生长界面而言，因此在计算曲率过冷时需要考虑界面能各向异性的影响。对于立方晶系，界面能各向异性可以表示为<sup>[131]</sup>

$$\sigma(\theta) = \sigma_0 \{1 + \varepsilon \cos[4(\theta - \theta_0)]\} \quad (2.28)$$

式中

$\sigma_0$ ——各向同性时的界面能；

$\theta$ ——界面法向与坐标轴正向的夹角；

$\varepsilon$ ——界面能各向异性强度；

$\theta_0$ ——择优生长方向与坐标轴正向的夹角；

在考虑界面能各向异性后，曲率过冷可以写成

$$\Delta T_r = \frac{\sigma(\theta) + \sigma''(\theta)}{\Delta s_f} K = \Gamma K \eta(\theta) \quad (2.29)$$

式中  $\eta(\theta) = 1 - 15\varepsilon \cos[4(\theta - \theta_0)]$  也被称为各向异性函数。

在给定总过冷后, 界面的平衡液相成分由下式得到

$$C_L^* = C_0 - \frac{1}{m_L} [\Delta T - \Gamma K \eta(\theta)] \quad (2.30)$$

由于界面平衡液相成分和远离界面处的液相成分之间存在着成分梯度, 因此固液界面将在这一梯度的作用下排出多余溶质并向前推进, 在假设(3)下由界面处的溶质平衡(2.25)式可以得到

$$V_n = \frac{-D_L}{C_L^*(1-k_0)} \left( \frac{\partial C}{\partial n} \right)_L \quad (2.31)$$

枝晶的生长表现为固液界面的推进, 而界面的推进又表现为界面胞固相份数的不断增加。因此在得到界面推进速度后, 需要将其转化为固相增量。

如图 2-7a 所示, Sasikumar<sup>[66]</sup> 和 Dilthey 等人<sup>[62]</sup> 通过分别计算界面沿 x、y 方向的速度  $V_x$ 、 $V_y$ , 将  $\Delta t$  时间内界面胞的固相增量表示为

$$\Delta f_s = \frac{\Delta t}{\Delta x} \left( V_x + V_y - V_x V_y \frac{\Delta t}{\Delta x} \right) \quad (2.32)$$

但事实上只有在界面方向与坐标轴平行或垂直时, 这种方法得到的结果才是准确的, 而当界面倾斜时, 这种计算会带来很大的误差。Lazaro<sup>[89]</sup> 等人则用界面沿法向推进的距离  $L = V_n \Delta t$  与穿过胞元中心并沿法线方向的胞元长度  $L_0$  的比值来确定  $\Delta f_s$ , 但这种方法仍然不够准确, 并且可以从图 2-7b 中看出,  $\Delta f_s$  的变化实际上并不与  $L/L_0$  的变化一致。

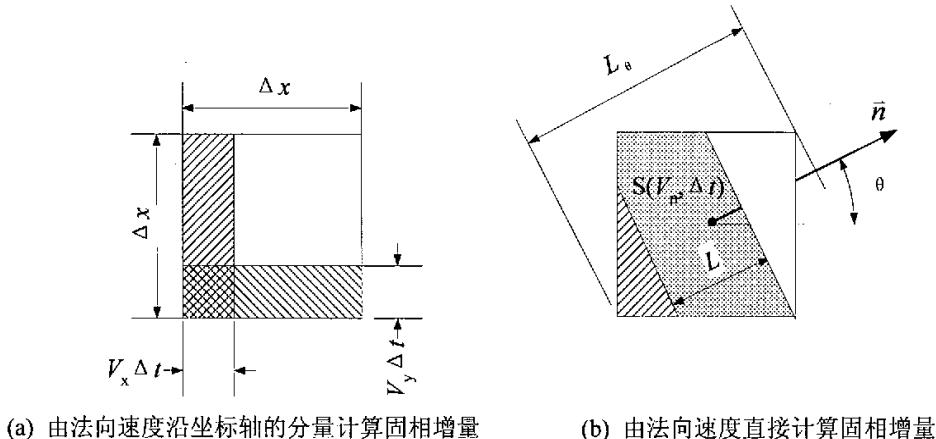


图 2-7 固相增量的计算方法

Fig. 2-7 Calculation of increment in solid fraction

本文提出了一种更为合理的办法, 这种方法借鉴了流体自由表面处理的分段线性思想, 将形状复杂的固液界面用每个界面胞内的直线段进行分段近似。这样由界面胞的固相份数和法向量可以唯一地确定界面位置, 若将界面在  $\Delta t$  时间内以  $V_n$  的速度沿法向量

方向移动扫过的面积记为  $S(V_n, \Delta t)$ , 如图 2-7b 所示, 则新增固相份数可以由

$$\Delta f_s = S(V_n, \Delta t) / \Delta x^2 \quad (2.33)$$

求得。这一算法的细节将在 3.1 节详细说明。

由于  $\Delta f_s$  的计算直接影响着模拟结果的准确性, 本文还提出了另一种固相增量的计算方法, 这种方法无需求解界面速度, 而是直接基于界面胞与液相邻胞之间的溶质扩散来获得固相增量。

考虑到界面胞的 4 近邻中至少存在一个液相胞, 而界面胞与液相邻胞之间由于存在着成分梯度, 溶质将会从界面胞流向液相邻胞, 从而造成界面胞成分的变化。若将  $\Delta t$  时间内通过界面胞与液相邻胞之间的界面面积  $\Delta x$  流出的溶质记为  $\Delta C$ , 则这一溶质平衡关系可表示为

$$\Delta C = \frac{D_L \Delta t}{(\Delta x)^2} \sum_{nb} (C_L^* - C_{nb}) \quad (2.34)$$

式中

$nb$ ——界面胞 4 近邻中的液相胞;

$C_{nb}$ ——液相邻胞  $nb$  的成分;

而界面胞排出溶质  $\Delta C$  意味着其固相份数的增加  $\Delta f_s$ , 二者应满足

$$\Delta f_s = \frac{\Delta C}{C_L^* (1 - k_0)} \quad (2.35)$$

由 (2.34) 式和 (2.35) 式就可以直接求得界面胞的固相增量。

为了体现界面扰动因素, 可以在求得的  $\Delta f_s$  上乘以形如  $1+A(1-2\text{Rand}())$  的扰动函数来施加扰动, 其中  $A$  为随机扰动的振幅,  $\text{Rand}()$  为能产生  $[0,1]$  之间随机数的函数。

### 2.3.4 溶质再分配

溶质的再分配问题是整个模型中非常重要的一个环节, 但这一问题在以往的研究中几乎没有得到合理的解决。尽管在界面胞内部, 可以将其看成由成分为  $C_s$  的固相  $f_s$  份和成分为  $C_L$  的液相  $(1-f_s)$  份组成, 并用  $C = C_s f_s + C_L (1-f_s)$  来计算其平均成分, 但需要注意的是:

首先, 界面胞的  $C_s$  和  $C_L$  并不必须满足  $C_s = k_0 C_L$  的关系, 换句话说, 界面胞的平均成分并不能由

$$C = C_L [1 - (1 - k_0) f_s] \quad (2.36)$$

来表示, 因为只有对于界面处才满足

$$C_s^* = k_0 C_L^* \quad (2.37)$$

而对于所有的尖锐界面模型来说，界面没有厚度的。(2.36)式意味着将整个界面胞的尺寸视为界面厚度，这就违背了尖锐界面模型的基本假设，并且从计算的准确性上来说，必须对胞元尺寸进行限制。Sasikumar 等人<sup>[66,105]</sup>用这种方式处理溶质的再分配，有欠合理。

其次， $C_L$  并不必须等于  $C_L^*$ 。若假定在每一时间步内，将界面胞剩余液相成分  $C_L$  均视为  $C_L^*$ ，仍然违背了尖锐界面的基本假设，因为这意味着界面厚度至少是  $\Delta x(1-f_S)$ 。并且会造成溶质不守恒的矛盾，因为一方面有

$$\Delta C = C_L^*(1 - k_0) \Delta f_S \quad (2.38)$$

而另一方面从图 2-8 中，可以将界面胞新旧时刻的成分变化写成

$$\begin{aligned} \Delta C &= C_L^0(1 - f_S^0) - [k_0 C_L^* \Delta f_S + C_L^*(1 - f_S^0 - \Delta f_S)] \\ &= (C_L^0 - C_L^*)(1 - f_S^0) + C_L^*(1 - k_0) \Delta f_S \end{aligned} \quad (2.39)$$

式中

$C_L^0$ ——界面胞在上一时刻的液相成分；

$f_S^0$ ——界面胞在上一时刻的固相份数。

这意味着若视界面胞液相成分为  $C_L^*$  则用 (2.38) 式来计算需要排出的溶质则必然违背溶质守恒。李强等人<sup>[107]</sup>用浓度势的办法来计算溶质的扩散，将界面胞的浓度势视为  $C_L^*$ ，并且用连续性方法来处理对包含多相组成的复杂扩散体系，但对于界面胞来说，通过与邻胞的浓度势梯度排走的溶质很难保证满足 (2.39) 式。

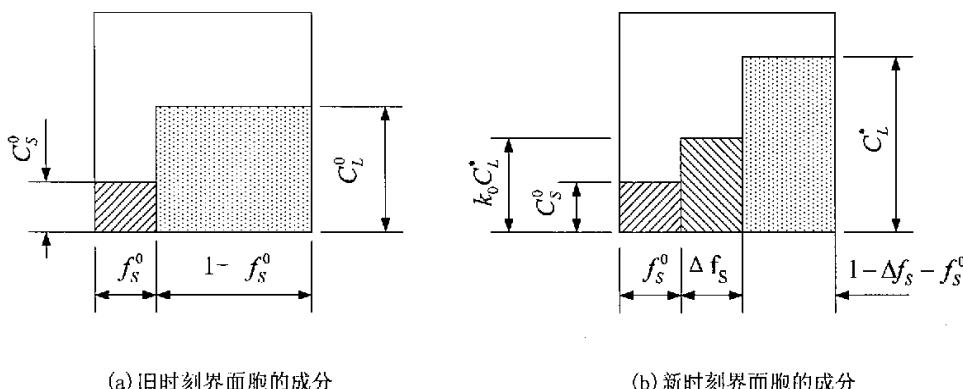


图 2-8 界面胞的成分

Fig. 2-8 Concentration of interfacial cell

第三，多余溶质  $\Delta C$  不仅可能排到界面胞剩余液相中，而且可能排到周围的液相邻胞中。若界面胞在生长过程中需要排走的多余溶质总是排到本胞的剩余液相中，将会

使本胞的液相成分不断升高，甚至升高到比当前的界面平衡液相成分  $C_L^*$  还要高。尤其需要注意的是当本胞剩余液相份数非常少时，会使得  $1 - f_s^0 - \Delta f_s \leq 0$ ，在数值计算中这会造成剩余液相成分不正常的跳动，严重影响计算结果。Lazaro 和 Stefanescu 等人<sup>[88,89]</sup>只是将界面胞产生的多余溶质排到本胞内部，但并未考虑剩余液相不足的情况。Artemev 等<sup>[132,133]</sup>则注意到了这一情况，但他们的处理方法是在界面胞剩余液相份数少于 0.5 时，多余溶质排入本胞，而大于 0.5 时其中一部分多余溶质排入到液相邻胞。这一处理方法很难说是合理的，并且在界面胞的生长速度非常快以至于在某个时间步内的固相转变份数  $\Delta f_s$  仍然超过剩余液相份数  $1 - f_s^0$  时，显然是无效的。

考虑到以往的研究中出现的这些问题，本文在保证溶质守恒的前提下，首次提出了一种相对合理的溶质再分配方法，其具体的处理方法如下：

设界面胞在上一时刻的固相成分为  $C_s^0$ ，固相份数为  $f_s^0$ ，液相成分为  $C_L^0$ ，液相份数为  $1 - f_s^0$ 。当界面胞在新时刻发生  $\Delta f_s$  的固相转变时，首先判断界面胞剩余液相是否足以完成  $\Delta f_s$  的转变，当  $\Delta f_s \geq 1 - f_s^0$  时，将其修正为

$$\Delta f_s = 1 - f_s^0 \quad (2.40)$$

此时界面胞已无剩余液相，令其液相成分  $C_L = 0$ ，而  $\Delta f_s$  转变需要排出的多余溶质为

$$\Delta C = C_L^0 (1 - k_0) \Delta f_s \quad (2.41)$$

这部分溶质将由界面胞以外的液相邻胞吸收。同时还需要注意， $\Delta f_s$  虽然是根据  $C_L^*$  计算出的，但对于界面胞来说， $C_L^*$  只存在于一个没有厚度的界面上，因此界面胞新增的固相只能从界面前成分为  $C_L^0$  的液相中产生，这样才能保证溶质守恒。

当界面胞剩余液相足以完成  $\Delta f_s$  的转变，即液相还有剩余时，则首先认为多余溶质完全排到剩余液相内部，使其成分升高到

$$C_L = \frac{C_L^0 (1 - f_s^0) - k_0 C_L^0 \Delta f_s}{1 - f_s^0 - \Delta f_s} \quad (2.42)$$

若此成分低于界面液相平衡成分  $C_L^*$ ，则意味着多余溶质可以完全被当前胞剩余液相吸收。若此成分高于  $C_L^*$  则将其进行修正

$$C_L = C_L^* \quad (2.43)$$

这意味着由于多余溶质排入剩余液相后，造成剩余液相成分的升高，但由于界面平

衡液相成分最多为  $C_L^*$ ，剩余液相已经不可能再吸收更多的溶质，因此需要排到界面胞以外的溶质为

$$\Delta C = (C_L - C_L^*)(1 - f_s^0 - \Delta f_s) \quad (2.44)$$

这部分溶质将由界面胞的液相邻胞吸收。

由 (2.41) 式或 (2.44) 式计算出的需要排到液相邻胞中的溶质将被这些液相邻胞均分。而界面胞的固相成分和固相份数则按下式进行更新

$$C_s = \frac{C_s^0 f_s^0 + k_0 C_L^* \Delta f_s}{f_s^0 + \Delta f_s} \quad (2.45)$$

$$f_s = f_s^0 + \Delta f_s \quad (2.46)$$

最后，由于在界面胞的生长过程中，可能有部分多余的溶质被排出到周围的液相邻胞中，因此还需要对液相胞进行溶质扩散计算。由于扩散只发生在液相胞之间，因此处理相对简单。只需要求解标准的二维非稳态扩散方程

$$\frac{\partial C_L}{\partial t} = D_L \left( \frac{\partial^2 C_L}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_L}{\partial y^2} \right) \quad (2.47)$$

在以往的研究中，溶质扩散和再分配问题常常需要处理固相胞元、液相胞元和界面胞元之间复杂的多相交互扩散。而本文提出的这种方法巧妙地避免了这一点，将界面胞元和液相胞元分开处理，在严格保证溶质守恒的条件下，使得整个溶质再分配问题得到了简单而合理的解决。

## 2.4 本章小结

(1) 对现有的枝晶生长理论进行了总结，比较了 IMS、MSC 和 IFW 理论在解释枝晶尖端的稳态生长以及非稳态的分枝形成机制时的不同观点。根据 IMS 理论推导了枝晶尖端稳态生长的理论模型，通过实际计算比较了理论模型之间的差异，并对枝晶生长尖端的过冷度进行了定量的计算，为以后数值模型的建立以及与数值模拟结果的比较打下了基础。

(2) 根据对理论模型的研究并进行适当的简化，建立了以溶质扩散为基础的枝晶生长数值模型，这一模型考虑了曲率过冷、成分过冷、界面能各向异性以及界面扰动等影响枝晶生长的主要因素，并采用胞元自动机方法将固液界面处的锐变转化为界面胞元固相份数的渐变，很好地处理了尖锐界面模型和扩散界面模型之间的关系。

(3) 提出了两种计算界面胞元固相份数增量的方法。一种方法基于对界面推进速度的求解，并由分段线性思想进行界面重建，从而准确合理地计算出因界面推进而新增的固相份数。另一种方法则避免求解界面推进速度，而直接通过界面胞元与其液相邻胞

之间的扩散来获得新增固相。

(4) 对枝晶生长数值模型中溶质再分配这一重要环节进行了详细的讨论, 分析了已有的数值模型中对这一环节的处理中存在的问题, 并提出了简单且合理的溶质再分配数值算法。这一方法避免了处理固相、液相和界面胞元之间复杂的多相扩散问题, 而将液相胞元与界面胞元的扩散分开处理, 并保证了整个计算中严格的溶质守恒。

## 第三章 枝晶生长模型的数值求解

### 3.1 数值计算问题

#### 3.1.1 界面曲率的计算

在用 (2.30) 式计算界面平衡液相成分时, 需要用到界面曲率。在界面跟踪法中, 由于界面是用一系列的锚点来描述的, 所以利用锚点的座标或参数方程在数学上可以很容易地得到界面处的曲率。但对于 CA 方法, 关于界面位置和形状的信息只能从胞元的固相份数  $f_s$  中得到。

Sasikumar 等人<sup>[64]</sup>采用了一种基于经验的方法, 在界面处画三倍于网格间距的圆, 通过计算圆内平界面和实际界面所包括的固相胞元数目差值来衡量界面曲率的相对大小。Dilthey 等人<sup>[63]</sup>采用了  $F$  向量法来计算界面曲率, 这种方法也是以界面胞为圆心,  $R$  为半径画圆,  $F$  向量的大小将由圆内的固相份数和圆面积比值决定, 而其方向则从圆内固相的质心指向当前界面胞。曲率值由  $F$  向量、 $R$  值和其它一些经验参数计算得到。Nastac 通过对 Sasikumar 方法的改进提出了用计数法 (Counting) 计算曲率<sup>[63]</sup>, 并被很多人采用, 这个公式是

$$K = \frac{1}{\Delta x} \left( 1 - 2 \frac{f_s + \sum_{k=1}^N f_s(k)}{N+1} \right) \quad (3.1)$$

式中

$N$ ——当前胞元的邻胞数, 如果取两层邻胞, 则  $N=24$ , 包括了当前胞元第一层的 8 个邻胞的第二层的 16 个邻胞;

$f_s(k)$ ——第  $k$  个邻胞的固相份数;

这个公式计算的曲率值在  $-1/\Delta x$  到  $1/\Delta x$  之间。

Kevin<sup>[134]</sup>则采用了一种基于模板的方法。它的思想是设计一个  $5 \times 5$  的模板代表当前胞元及其两层邻胞, 模板的数值代表权重系数, 系数模板总和的一半代表平界面时的计算值, 而系数模板和邻胞  $f_s$  值矩阵的点积则代表实际界面的计算值, 通过二者之间的差值就可以衡量界面的曲率。这种方法也只是一种定性的描述, 并且很难和曲率的物理意义发生联系, 而系数模板的设计也带有很大的人为因素。

事实上, 如图 3-1 所示, 若将界面看成由连续函数  $f_s(x, y)$  表示的曲线  $C$ , 则界面处的法向量可由函数  $f_s(x, y)$  在  $x$ 、 $y$  方向的偏导数表示。若规定法向量指向液相且将曲线

C 的正方向规定为逆时针方向, 则法向量可表示为

$$\vec{n} = n_x \vec{i} + n_y \vec{j} = -\frac{\partial f_s}{\partial x} \vec{i} - \frac{\partial f_s}{\partial y} \vec{j} \quad (3.2)$$

沿曲线正向的切向量为

$$\vec{T} = -n_y \vec{i} + n_x \vec{j} = \frac{\partial f_s}{\partial y} \vec{i} - \frac{\partial f_s}{\partial x} \vec{j} \quad (3.3)$$

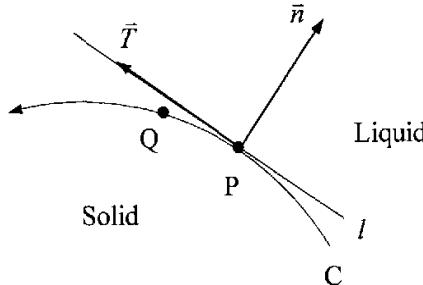


图 3-1 曲率计算公式的推导

Fig. 3-1 Derivation of curvature calculation

沿 C 的正方向取 2 点 P、Q, 若有函数  $u$  在 P、Q 点的取值分别为  $u(P)$ 、 $u(Q)$  且弧 PQ 的长度为  $ds$ , 则由数学分析<sup>[135]</sup>可得到当 Q 无限趋近于 P 时, 函数  $u$  沿曲线的方向导数  $du/ds$  就等于函数  $u$  沿 P 点切线  $l$  (正方向) 的方向导数  $du/dl$ 。若令函数

$$u(x, y) = \arctan\left(\frac{\partial f_s}{\partial y} / \frac{\partial f_s}{\partial x}\right) \quad (3.4)$$

则  $u(x, y)$  代表曲线上点  $(x, y)$  处法线与坐标轴正向的夹角。由曲率的定义可知曲率  $K=du/ds=du/dl$ 。于是由方向导数的定义可得到

$$\begin{aligned} K &= \frac{\partial u}{\partial x} \cos \alpha + \frac{\partial u}{\partial y} \sin \alpha \\ &= \frac{\partial u}{\partial x} \frac{-n_y}{\sqrt{n_x^2 + n_y^2}} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{n_x}{\sqrt{n_x^2 + n_y^2}} \end{aligned} \quad (3.5)$$

其中  $\alpha$  为切向量与坐标轴正向的夹角。将 (3.3) 式、(3.4) 式代入 (3.5) 式并进行整理后最终得到

$$K = \frac{2 \frac{\partial f_s}{\partial x} \frac{\partial f_s}{\partial y} \frac{\partial f_s}{\partial y \partial x} - \frac{\partial^2 f_s}{\partial x^2} \left(\frac{\partial f_s}{\partial y}\right)^2 - \frac{\partial^2 f_s}{\partial y^2} \left(\frac{\partial f_s}{\partial x}\right)^2}{\left[\left(\frac{\partial f_s}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial f_s}{\partial y}\right)^2\right]^{3/2}} \quad (3.6)$$

Kothe 等<sup>[136]</sup>在处理流体自由表面的重建问题时, 用流体体积份数来计算界面处法

向量  $\bar{n}$ ，并将曲率表示为单位法向量的散度

$$K = \nabla \cdot (\bar{n} / |\bar{n}|) \quad (3.7)$$

若令  $\bar{n} = \nabla f_s$  则整理后同样能得到 (3.6) 式的结果。

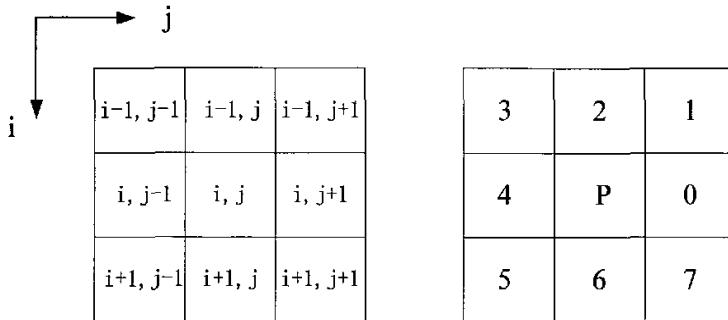


图 3-2 当前胞及其 8 邻域

Fig. 3-2 The current cell and its 8 neighbours

若将当前胞及其 8 邻域的空间位置做如图 3-2 的标记，则 (3.6) 式的计算中各阶偏导数的离散格式可以写成

$$\frac{\partial f_s}{\partial x} = \frac{f_s(0) - f_s(4)}{2\Delta x} \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial f_s}{\partial y} = \frac{f_s(2) - f_s(6)}{2\Delta x} \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial^2 f_s}{\partial x^2} = \frac{f_s(0) + f_s(4) - 2f_s(2)}{\Delta x^2} \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial^2 f_s}{\partial y^2} = \frac{f_s(2) + f_s(6) - 2f_s(4)}{\Delta x^2} \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial^2 f_s}{\partial y \partial x} = \frac{f_s(1) - f_s(3) - f_s(7) + f_s(5)}{4\Delta x^2} \quad (3.12)$$

由 (3.6) 式以及 (3.8) 式~(3.12) 式计算得到的曲率具有严格的数学基础，能够比较准确地反映界面形状的变化，并且也能够进行相应的三维推广，因此本文采用这种方法进行曲率计算。

此外，本文还提出一个简单的查找表算法。由于计算中需要的曲率实际上是局部曲率，首先在当前界面胞的 8 邻域范围内寻找上下 2 个相邻的界面胞，当前胞和 2 邻界面胞之间的位置关系只有如图 3-3 示的 5 种。确定 3 点的位置关系后，界面可以视为当前胞和 2 邻胞之间的连线。根据三点之间的折线关系用差分来近似微分可以粗略地估计出在当前胞位置处的一阶和二阶导数值。这样由曲率的数学表达式就可以求得当前胞处的

曲率。事先将所有可能的情况算好保存在如表 3-1 的这样一张查找表上, 计算时直接根据 2 邻胞在 8 邻域中的位置数找到相应的值即可。

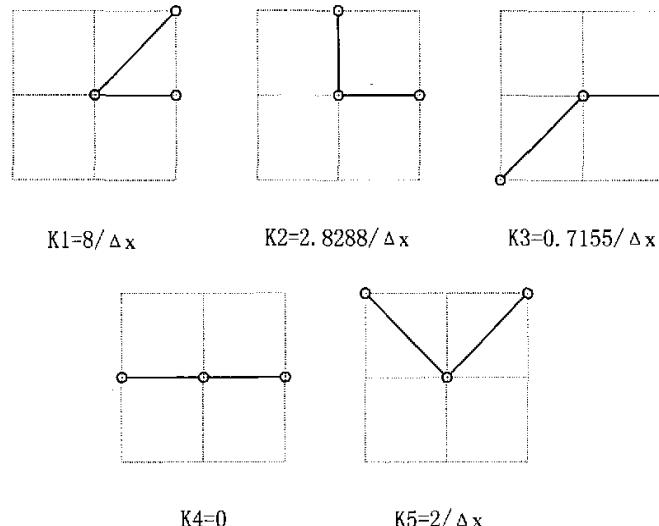


图 3-3 局部曲率

Fig. 3-3 Local curvature

表 3-1 曲率计算的查找表

Table 3-1 Lookup table for curvature calculation

$\backslash$ pos2 pos1	0	1	2	3	4	5	6	7
0	—	$-K_1$	$-K_2$	$-K_3$	$K_4$	$K_3$	$K_2$	—
1	—	—	$-K_1$	$-K_5$	$-K_3$	$K_4$	$K_3$	$K_5$
2	$K_2$	—	—	$-K_1$	$-K_2$	$-K_3$	$K_4$	$K_3$
3	$K_3$	$K_5$	—	—	$-K_1$	$-K_5$	$-K_3$	$K_4$
4	$K_4$	$K_3$	$K_2$	—	—	$-K_1$	$-K_2$	$-K_3$
5	$-K_3$	$K_4$	$K_3$	$K_5$	—	—	$-K_1$	$-K_5$
6	$-K_2$	$-K_3$	$K_4$	$K_3$	$K_2$	—	—	$-K_1$
7	$-K_1$	$-K_5$	$-K_3$	$K_4$	$K_3$	$K_5$	—	—

寻找 2 邻胞可以采用图像处理中的跟踪算法<sup>[137]</sup>, 如图 3-4 所示。首先, 从当前胞的 8 邻域中 0 位置开始按逆时针方向直到找到第一个固相胞为止, 记录其位置数; 其次, 从这个固相胞的位置数开始按逆时针方向寻找界面胞, 将遇到的第一个界面胞位置数记为 pos1; 第三, 从固相胞位置数开始按顺时针方向寻找界面胞, 将遇到的第一个界面胞位置数记为 pos2。这样, 从 pos1 所在位置围绕当前胞沿逆时针方向旋转到 pos2 所在

位置时, 所包围的区域即为固相, 以外的区域为液相区域, 若规定法向量指向液相, 则曲率的正负也可同时确定确定。

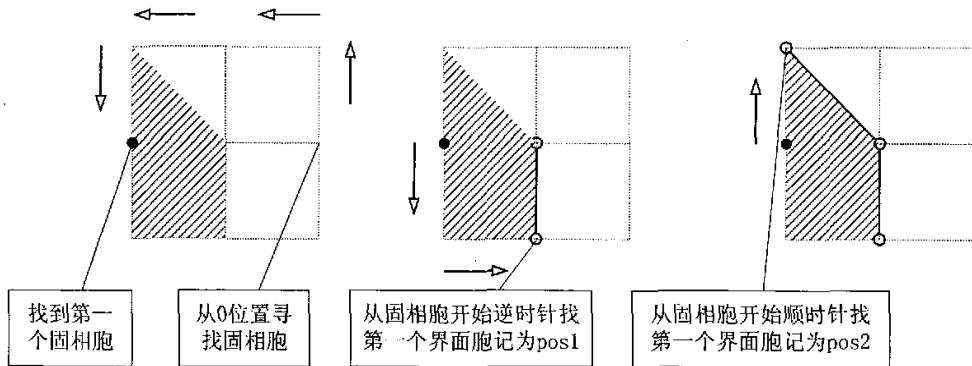


图 3-4 跟踪算法

Fig. 3-4 Tracing algorithm

### 3.1.2 界面速度与固相增量

在式 (2.31) 界面速度的计算中需要得到液相成分沿界面法线方向的偏导数, 这里也有 2 种方法。第一种方法是分别得到液相成分  $C_L$  沿  $x$ 、 $y$  方向的偏导数, 若已知法线方向的夹角  $\theta$ , 则  $C_L$  沿法线方向的偏导数为

$$\frac{\partial C_L}{\partial n} = \frac{\partial C_L}{\partial x} \cos \theta + \frac{\partial C_L}{\partial y} \sin \theta \quad (3.13)$$

第二种方法是从当前胞沿界面法线方向延伸  $\Delta x$  距离找到一个假想点, 该点的成分  $C$  由其邻近 4 点进行插值得到。由界面平衡液相成分  $C_L^*$  和法线方向假想点的成分  $C$  就可以得到所需的法向偏导数。事实上若记当前界面胞位置为  $(x_0, y_0)$ , 假想点位置为  $(x_0+h, y_0+k)$ , 则把  $C(x_0+h, y_0+k)$  在  $(x_0, y_0)$  处进行泰勒展开

$$C(x_0+h, y_0+k) = C(x_0, y_0) + \left( h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \right) C(x_0, y_0) + R_1 \quad (3.14)$$

略去余项  $R_1$  并注意到  $h = \Delta x \cos \theta$ ,  $k = \Delta x \sin \theta$ , 就可以得到

$$\frac{C(x_0+h, y_0+k) - C(x_0, y_0)}{\Delta x} = C_x(x_0, y_0) \cos \theta + C_y(x_0, y_0) \sin \theta \quad (3.15)$$

这说明在计算法向偏导时, 两种方法在数学上其实是一致的。Udaykumar 等人<sup>[54]</sup>认为采用沿法线方向 2 点探求, 并用双线性插值来估计法向 2 点的数据可以保证最终的计算结果具有二阶精度。但在数值计算时, 由于只能认为网格结点处的数据是准确的, 因此第二种方法在估计  $C$  时本身就有了误差, 而采用差分格式处理一阶导数时又会带来误差。第一种方法的数据本身来自准确的网格点, 只是差分格式带来误差, 处理起来也相对简单。因此本文采用第一种方法, 并以二阶精度的离散格式来计算法向偏导数

$$\frac{\partial C_L}{\partial x} = \frac{-3C_L(j,i) + 4C_L(j+1,i) - C_L(j+2,i)}{2\Delta x} \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial C_L}{\partial y} = \frac{-3C_L(j,i) + 4C_L(j,i-1) - C_L(j,i-2)}{2\Delta x} \quad (3.17)$$

在得到界面速度后, 需要由 (2.33) 式确定在一个时间步长内的固相份数增量。为此, 首先需要采用 PLIC 算法 (Piecewise Linear Interface Calculation) 来进行界面重建。PLIC 算法原本用在流体的自由表面处理上, 最早由 Young 提出<sup>[138]</sup>, 并在流体计算的 VOF (Volume of Fluid) 方法中得到广泛应用<sup>[139-141]</sup>。它的主要思想是用分段线性的办法把复杂的流体自由表面用每个界面网格内的一段直线段来近似。具体的做法是由界面网格流体体积份数的 9 点算子来计算界面法向量, 在已知界面网格的法向量和流体体积份数后, 界面线段在每个界面网格内的具体位置则可以唯一地确定。

本文借鉴了这种做法来处理界面胞的生长。在由 (3.2) 式获得界面胞法向量后, 首先由法向量在  $x$ 、 $y$  轴上的分量  $n_x$ 、 $n_y$  得到界面角  $\alpha$

$$\alpha = \arctan \left( \frac{\min(|n_x|, |n_y|)}{\max(|n_x|, |n_y|)} \right) \quad (3.18)$$

当界面胞固相份数  $fs < 0.5 \tan \alpha$  时, 固相部分为三角形; 当  $fs > 1 - 0.5 \tan \alpha$  时, 固相部分为不规则四边形;  $fs$  在此之间则固相部分为梯形。这样就可以由界面胞的固相份数  $fs$ 、法向分量  $n_x$  和  $n_y$  以及界面角  $\alpha$  唯一地确定界面位置。图 4-4 给出了所有可能的界面分割模式。

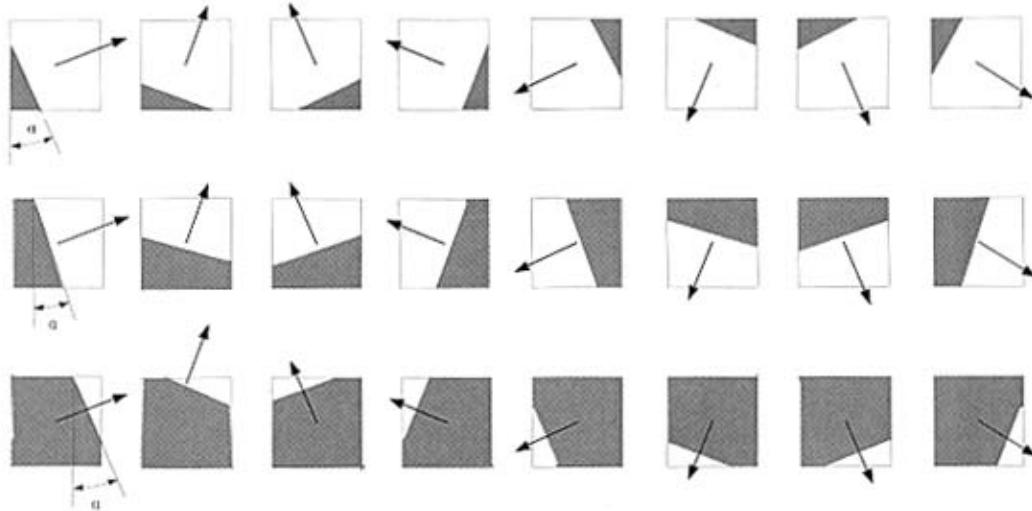


图 3-5 所有可能的界面分割模式

Fig. 3-5 All possible mode for interface segmentation

在界面位置确定以后, 还需要计算当界面以  $V_n$  速度在  $\Delta t$  时间内沿法线方向移动时扫过的面积  $S(V_n, \Delta t)$ , 因为这一面积与胞元面积的比值代表了每一时间步内因界面推进

而新增的固相份数  $\Delta f_s$ 。如图 3-6 所示, 这一计算略显复杂, 因为要处理不同的界面分割模式和不同的阶段。对于图 3-5 中第一行的分割模式, 也即  $f_s < 0.5 \tan \alpha$  时, 界面的推进将分为三个阶段。第一阶段固相仍保持三角形的形状, 第二阶段固相将保持梯形的形状, 第三阶段固相为不规则的四边形。对于图 3-5 中第二行的情况, 将只会出现第二和第三阶段的情形。而对应于图 3-5 第三行的情况则只有第三阶段出现。表 4-2 给出了在不同情况下的临界时间段, 具体计算时可以根据临界时间段和实际时间步长的关系来判定界面移动时所经历的阶段及在每个阶段内对应的固相面积变化。

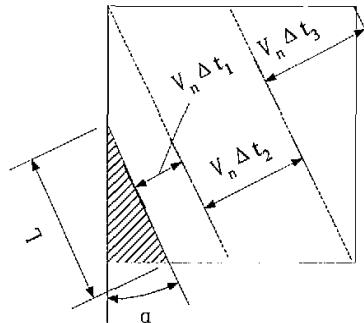


图 3-6 界面推进的三个阶段

Fig. 3-6 Three stages during the advance of interface

表 3-2 界面分割模式与临界时间段

Table 3-2 Interface segmentation and critical time duration

	$f_s \leq 0.5 \tan \alpha$	$0.5 \tan \alpha < f_s < 1 - 0.5 \tan \alpha$	$f_s \geq 1 - 0.5 \tan \alpha$
$L$	$\Delta x \sqrt{2 f_s / (\sin \alpha \cos \alpha)}$	$\Delta x / \cos \alpha$	$\Delta x \sqrt{2(1 - f_s) / (\sin \alpha \cos \alpha)}$
$\Delta t_1$	$(\Delta x - L \cos \alpha) \sin \alpha / V_n$	$\Delta x (1 - f_s - 0.5 \tan \alpha) \cos \alpha / V_n$	$L \sin \alpha \cos \alpha / V_n$
$\Delta t_2$	$\Delta x (1 - \tan \alpha) \cos \alpha / V_n$	$\Delta x \sin \alpha / V_n$	—
$\Delta t_3$	$\Delta x \sin \alpha / V_n$	—	—

## 3.2 初始条件与边界条件

在  $t=0$  时刻, 在计算区域的中心放置一个初始生长半径为  $R_0$  的小晶体作为种子, 各胞元的状态值以及成分、固相份数等数据将根据  $R_0$  值获得。

若假定在  $ij$  座标系中核心胞元的座标为  $(i_0, j_0)$ , 则对于如图 3-7 所示的胞元  $(i, j)$ , 其矢径  $r$  和夹角  $\theta$  分别为

$$r = \sqrt{(i - i_0)^2 + (j - j_0)^2} \quad (3.19)$$

$$\theta = \arctan \left( \frac{|i - i_0|}{|j - j_0|} \right) \quad (3.20)$$

严格地说来, 界面胞元的固相份数应该由图 3-7 中胞元网格中的阴影面积与网格面积的比值得到, 但为简化计算, 我们将胞元内部的圆弧界面视为直线段, 并由界面沿矢径方向的位置来确定界面与胞元的关系并以此计算界面胞元的  $f_s$ 。由简单的几何运算可以得到

$$\Delta r = \frac{\sqrt{2}}{2} \Delta x \cos(\frac{\pi}{4} - \theta) \quad (3.21)$$

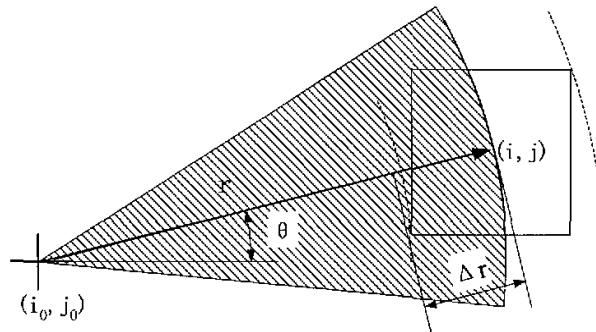


图 3-7 胞元初值的设定

Fig. 3-7 Setting the initial value for cell

对于任意胞元  $(i, j)$ , 可以由以下三种情况确定其归属, 并设定其初值:

- (1) 当  $R_0 \geq r - \Delta r$  时, 该胞元完全在界面内部, 其初值设定为  $State = SOLID$ ,  $f_s = 1$ ,  $C_s = k_0 C_0$ ,  $C_L = 0$ ;
- (2) 当  $R_0 \leq r + \Delta r$  时, 该胞元完全在界面之外, 其初值设定为  $State = LIQUID$ ,  $f_s = 0$ ,  $C_s = 0$ ,  $C_L = C_0$ ;
- (3) 当  $r - \Delta r < R_0 < r + \Delta r$  时, 该胞元部分被界面所分割, 其初值设定为  $State = MUSHY$ ,  $f_s = (R_0 - r + \Delta r) / (2 \Delta r)$ ,  $C_s = k_0 C_0$ ,  $C_L = C_0$ 。

边界条件的设定需要根据具体的情况来处理。若设置为零通量的第二类边界条件, 则整个计算区域为一个封闭系统, 便于进行守恒检验。但随着枝晶的生长, 潜热和固相中析出的溶质不断地在界面前方积累, 将会使枝晶的生长速度逐渐减慢。这种情况比较符合真实铸件中等轴晶的生长, 因为晶粒长到一定尺寸时, 相邻晶粒之间的扩散场会发生交叠而使晶粒的生长受阻。

但在计算区域有限的条件下, 若希望模拟过冷熔体中枝晶的稳态生长, 则应该保证界面前沿的溶质扩散和热扩散足够充分, 不受边界影响, 在远离生长界面处, 熔体仍然保持原始的成分和温度。在这种情况下, 将边界设置为具有恒定值的第一类边界条件则更为合理。

### 3.3 模拟程序与计算流程

由于扩散方程的求解采用显式格式，所以在计算开始之前，首先要由离散方程的稳定性条件来得到时间步长，此外时间步长还需要满足 CA 方法的原则，即在一个时间步内，当前胞元只能对其第一层邻近胞元产生影响，而不能同时影响更外层的胞元状态。这两个条件确定的时间步长可以表示为

$$\Delta t \leq \min\left(\frac{\Delta x^2}{4D_L}, \frac{\Delta x}{V_{\max}}\right) \quad (3.22)$$

整个程序分为四个主要的模块：

- (1) 初始化模块 (Initial)。根据胞元的数据结构和用户给定的计算区域分配胞元动态数组的存储空间，接收用户设定的各种计算参数，设定胞元各变量的初始值，计算时间步长，设定当前为 0 时刻；
- (2) 生长模块 (Grow)。生长模块对所有被标记为 MUSHY 的界面胞元进行循环，根据 2.3.3 小节的叙述，计算并保存界面胞元在一个时间步内的固相增量  $\Delta f_s$ ，更新界面胞元的成分，将多余溶质排出到液相邻胞中；
- (3) 扩散模块 (Diffuse)。对所有标记为 LIQUID 的液相胞元循环，采用显式格式计算在一个时间步内的溶质在液相中扩散的情况，更新液相胞元成分；
- (4) 转变模块 (Transition)。对所有标记为 MUSHY 的胞元的界面胞元进行循环，由生长模块得到的  $\Delta f_s$  更新其固相份数  $f_s$ ，若大于 1 则置为 1，将其状态值标记为 SOLID，并将其液相邻胞标记为 MUSHY。

整个程序和主要计算模块流程图如图 3-8、图 3-9、图 3-10 所示。当到达用户指定的时间  $t_h$  或循环次数后整个计算结束。胞元的数据将被写成数据文件保存到用户指定的文件夹中。用户可以使用比较成熟的商用软件如 Matlab、Tecplot 和 Origin 等对于数据文件进行后续的处理、分析或可视化显示，具体的处理方法可以参考相关的软件使用手册或帮助文件<sup>[142,143]</sup>，本文不再赘述。

模拟程序是用 Visual C++6.0 开发的基于 MFC (Microsoft Foundation Class) 的 Windows 应用程序<sup>[144]</sup>，采用了动态数组和多线程技术。传统的数组使用时必须在源代码中通过预先定义的常量来设定数组大小，当用户需要改变计算区域的大小时，必须在源代码中更改。而使用 MFC 提供的动态数组时，程序会根据用户通过界面输入的变量而自动地分配计算所需要的数组空间，并提供了许多安全机制。本研究使用的多线程技术充分利用了 Windows 这样一个多任务操作系统的优点，在主线程中创建了一个辅助的工作线程进行后台计算，而主线程则负责处理来自用户的响应，两个线程共享系统资源并通过事件对象进行同步。这就避免了在单线程程序中 CPU 在进行长时间计算时几乎无法更新界面或对用户界面的输入做及时响应的情形，用户可以通过界面及时地了解计算进度，甚至可以随时中止计算线程。程序的运行界面如图 3-11 所示。

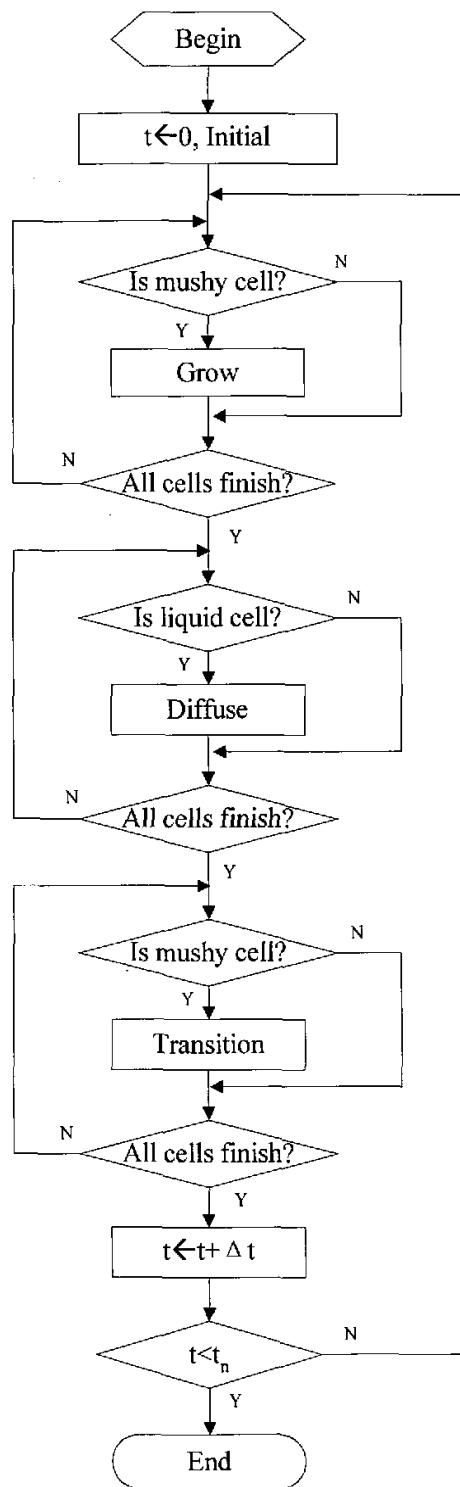


图 3-8 主程序的流程图

Fig. 3-8 The flow chart of main program

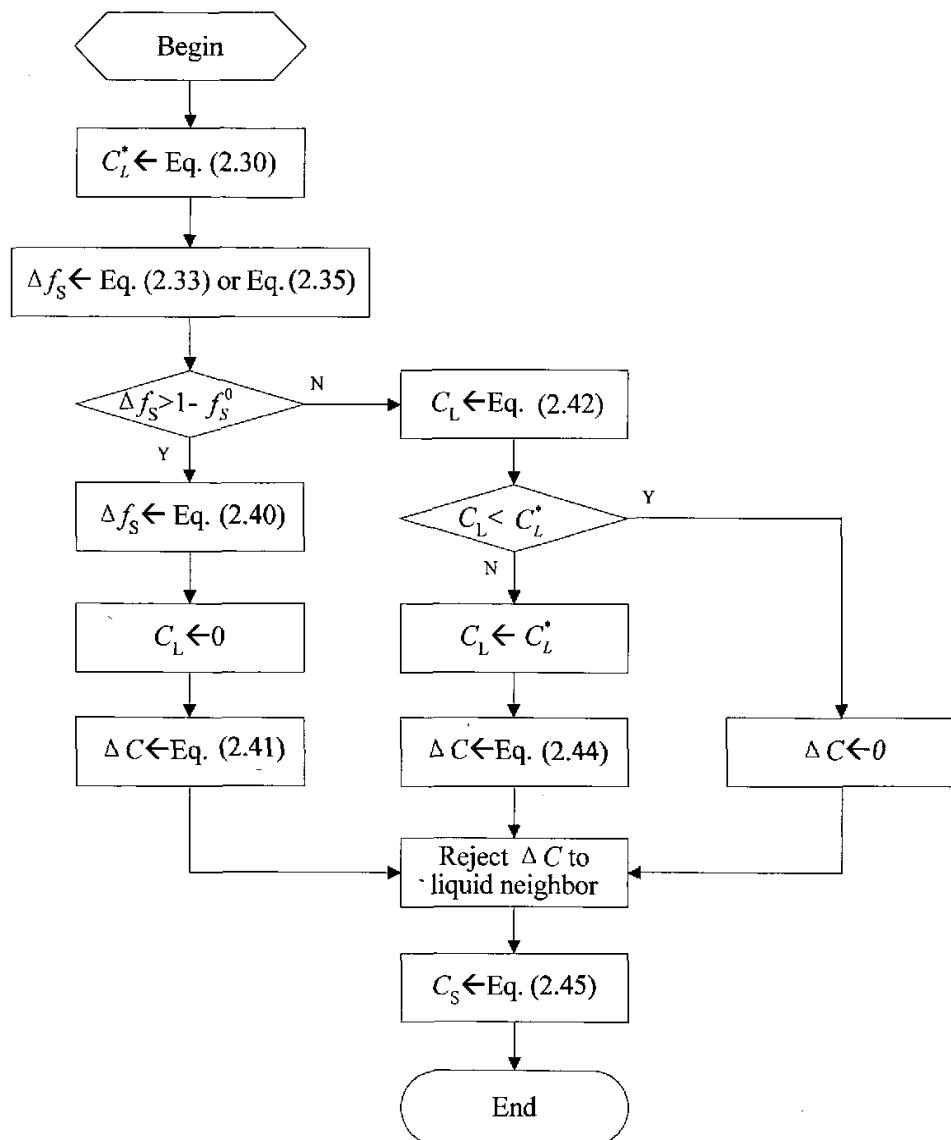


图 3-9 生长模块的流程图  
Fig. 3-9 The flow chart of grow module

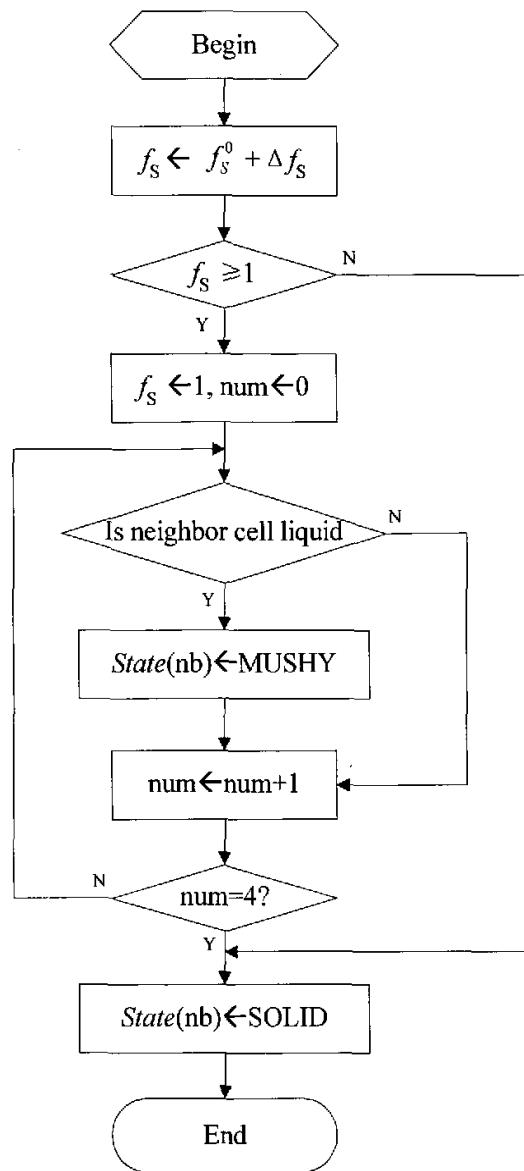


图 3-10 转变模块的流程图  
Fig. 3-10 The flow chart of transition module



图 3-11 枝晶生长模拟程序运行界面

Fig. 3-11 Program interface for simulation of dendritic growth

### 3.4 本章小结

(1) 由于曲率计算的准确与否在枝晶生长模拟中起着重要作用, 因此本章对枝晶生长模型数值求解过程中的曲率计算问题进行了详细的讨论。分析了前人研究中采用的曲率计算方法, 并在此基础上通过严格的数学推导给出了比较准确的曲率计算公式及其

相应的离散格式。此外,本文还从局部曲率的概念出发,提出了一个简单而直观的查找表方法进行曲率计算,并给出了相应的查找表。

(2) 讨论了枝晶生长界面处液相成分梯度的两种数值计算方法,从数值计算精度的角度比较了两种方法的异同,并给出了保证二阶精度的界面梯度计算公式。

(3) 获得界面胞元固相增量的变化是 CA 方法模拟枝晶生长中关键的一步。本章详细地说明了在将界面推进速度转化为固相增量的过程中,如何利用流体自由表面重建的 PLIC 算法来实现这一转化。给出了所有可能的 24 种界面分割模式,并采用分时间段的办法来计算因界面移动时所对应的固相增量。这一计算方法相对前人的研究更为合理和准确。

(4) 对数值计算中的初始条件和边界条件的设定做了说明,对枝晶生长模拟程序中采用的编程技术及后续的数据处理、分析和可视化显示方法进行了说明,并给出了整个程序和主要计算模块的流程图以及程序的运行界面。

## 第四章 晶粒组织模拟的模型与数值求解

### 4.1 晶粒组织的形成与演变

#### 4.1.1 典型晶区的形成机理与控制

在 1.1 节本文曾提到典型晶粒组织中的三个晶区，但对于典型晶区形成原因的解释却还没有得到统一。一般传统理论认为表层的细晶区是由两个原因造成：首先，型壁处可能有大量的异质形核基底，使得贴近型壁处的液体金属中能够产生大量晶核；其次，当金属液浇入铸型时，与型壁接触的液体受到强烈的冷却，因此获得了很大的过冷度。这两个原因使型壁处在很短时间内形成众多的晶核，并迅速向各个方向生长，但很快就彼此碰撞而无法继续生长，因此形成一层很薄的细晶区。此外，也有研究者<sup>[145]</sup>认为对流对细晶区的形成有很重要的影响。流体的冲刷和金属液内部因温度差异形成的对流会造成表层晶体的脱落和以后的增殖，使细晶区内大量形核。

细晶区的形成所释放的大量潜热使得前方液相的温度升高，很难形成新的晶核，于是只能靠细晶区内的某些晶粒以枝晶状向前延伸。而那些择优生长方向与热流方向平行的分枝有更为优越的生长条件因而阻止了其它分枝的生长，从而形成具有方向性的柱状晶区。柱状晶的生长将一直向铸件内部伸展直到被其它晶粒阻止。

对于内部等轴晶区的形成，则有不同的解释。但总的说来，中心等轴晶是在液体内部独立形核和长大的，其可能的形核途径包括液体内部的异质形核基底、型壁晶体脱落后的卷入、枝晶分枝的熔断与脱落，以及冷却的液面上部晶体的沉积。这些机理在不同的实际凝固条件下可能都会存在并起作用。

由于表层的细晶区比较薄，很难对铸件的机械性能产生决定性影响，因此研究者更多关注的是柱状晶区和等轴晶区的比例。为了得到全部细小的等轴晶组织，可以采用很多的工艺手段，但总的说来，一方面是增加核心的数量，包括添加形核剂、搅拌或震动使枝晶破碎以及快速凝固等，另一方面则是抑止晶核的长大使形核数量相对提高。而要获得单向生长的柱状晶则要尽量避免前方液相中产生新的晶核，并且尽量保证金属的单向散热，以避免侧壁的形核和长出新的晶体。

#### 4.1.2 柱状—等轴转变

晶粒组织中的柱状—等轴转变 (CET) 引起了很多研究者的兴趣<sup>[146-152]</sup>。Gandin 等人对定向凝固条件下的 CET 做了研究<sup>[148,149]</sup>，但对 CET 的实验和模拟研究表明现有的模型和理论对这个问题的处理并不理想，他认为 CET 和液体内部的流动有很大关系，

而且 CET 的观测标准也带有很大的主观性, 这使得定量评估很难进行。Kurz 和 Trivedi 等人则对 CET 及界面前方过冷熔体中的形核问题做了半定量的推导<sup>[150,151]</sup>, 最终以不同工艺手段下的分区图的形式给出了研究结果。尽管对于内部等轴晶的产生机制还存在分歧, 但不管内部等轴晶核是如何形成的, 在其形核并长大到一定程度后, 都会阻挡柱状晶的生长从而出现 CET。基于这一考虑, Hunt<sup>[16]</sup>于 1984 年提出了一个数学模型来定量描述了这种转变。

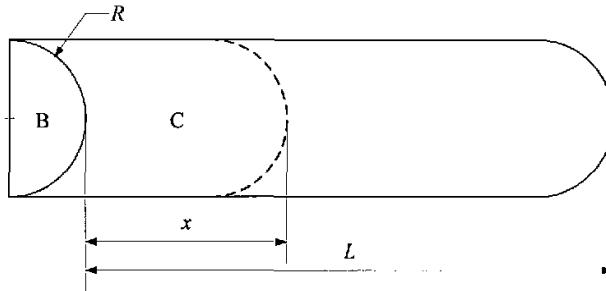


图 4-1 CET 的数学模型

Fig. 4-1 Mathematical model for CET

设一柱状晶在半径为  $R$  的管道内生长, 若能从 B 空间进入 C 空间, 生长  $x$  长度, 则意味着在 C 空间没有一个等轴晶核, 否则其生长将被阻挡, 此概率为  $(1-x/L)$ 。又设等轴晶形核密度为  $n$ , 则在此管道内共有晶核  $\pi R^2 L n$  个, 这些晶核都不在 C 空间的概率为  $(1-x/L)^{\pi R^2 L n}$ 。若将柱状晶生长长度用一随机变量  $X$  表示, 则其分布函数为

$$F(x) = P(X \leq x) = (1 - \frac{x}{L})^{n\pi R^2 L} \quad (4.1)$$

于是其密度函数为

$$f(x) = -n\pi R^2 (1 - \frac{x}{L})^{n\pi R^2 L - 1} \quad (4.2)$$

柱状晶生长的平均长度可视为随机变量  $X$  的均值

$$\bar{X} = E(X) = \int_0^L x f(x) dx = \frac{1}{n\pi R^2 + 1/L} \quad (4.3)$$

当  $L \rightarrow \infty$  时  $\bar{X} = \frac{1}{n\pi R^2}$ , 而此时晶核体积份数  $\varphi_E = \frac{4}{3}\pi R^3 n$ , 于是有

$$\frac{\bar{X}}{R} = \frac{4}{3\varphi_E} \quad (4.4)$$

当  $\frac{\bar{X}}{R} \leq 2$  也即  $\varphi_E \geq \frac{2}{3}$  时柱状晶将没有足够的空间生长, 此时宏观组织全部表现为等轴晶。而当  $\frac{\bar{X}}{R} \geq 100$  也即  $\varphi_E \leq \frac{4}{300}$  时, 可认为宏观组织全部表现为柱状晶。

注意到不可能所有的等轴晶核同时占有  $4\pi R^3/3$  的体积, 而是先后长大, 因此还需要对假想转变份数  $\varphi_E$  进行 Johnson-Mehl 修正<sup>[14]</sup>得到实际转变份数

$$\varphi = 1 - \exp(-\varphi_E) \quad (4.5)$$

这样, 当  $\varphi_E=2/3$  和  $4/300$  时, 分别得到  $\varphi=0.49$  和  $0.01$ 。

以上结果说明, 当凝固过程中等轴晶体积份数超过 0.49 后将得到完全的等轴晶组织, 而当等轴晶体积份数不足 0.01 时, 将形成完全的柱状晶组织。

尽管 Hunt 本人也承认这个模型在很大程度上只是一种数学偶然, 但它确实抓住了 CET 问题的本质, 即在界面前沿液相中等轴晶和柱状晶的竞争生长, 并在相关文献中得到广泛的应用。

## 4.2 宏观温度场的数值求解

### 4.2.1 凝固潜热

对于单个枝晶的生长来说, 溶质扩散是主要的控制环节, 但对于晶粒组织而言, 铸件内部的温度分布和热扩散则对晶粒组织的形成和演变有很大影响, 而且晶粒的形核和生长等微观动力学过程都需要用到温度场信息。因此, 为进行晶粒组织的模拟, 首先需要求解宏观温度场。

对于凝固过程中的热传导来说, 在二维直角坐标系下的基本控制方程可以写成

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \rho L \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (4.6)$$

式 (4.6) 中等号右边最后一项代表因凝固潜热的释放而产生的源项。在传统的温度场计算中, 常常将潜热项进行变换并整理得到

$$\rho c_{Eq} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) \quad (4.7)$$

式中  $c_{Eq} \equiv c_p - \rho L \frac{\partial f_s}{\partial T}$  为等价比热。对于具有一定凝固温度范围的合金, 只需要将比热  $c_p$  替换为等价比热  $c_{Eq}$  即可。而固相率随温度的变化关系  $f_s(T)$  可以由杠杆定律或 Sheil 方程得到

$$f_s = \frac{1}{1 - k_0} \frac{T_L - T}{T_M - T_L} \quad (4.8)$$

$$f_s = 1 - \left( \frac{T_M - T}{T_M - T_L} \right)^{1/(k_0-1)} \quad (4.9)$$

这种方法被称为等价比热法。此外, 也可以采用热焓法或温度回复法来处理潜热问

题<sup>[153,154]</sup>。但在宏微观耦合的计算中,若固相份数在单位时间内的变化情况可以由形核生长计算得到,则可以直接求解(4.6)式,而无需对源项进行特别的处理。

#### 4.2.2 数值求解方法

对(4.6)式的数值求解可以采用显式或隐式两种方法。两种方法的离散格式都可以方便地由控制容积法的热流平衡得到。对于如图4-2所示的计算单元,若采用显式计算,则有

$$\frac{\rho c_p \Delta x \Delta y}{\Delta t} (T_p - T_p^0) = q_e + q_w + q_n + q_s + \rho L \frac{\Delta f_s}{\Delta t} \Delta x \Delta y \quad (4.10)$$

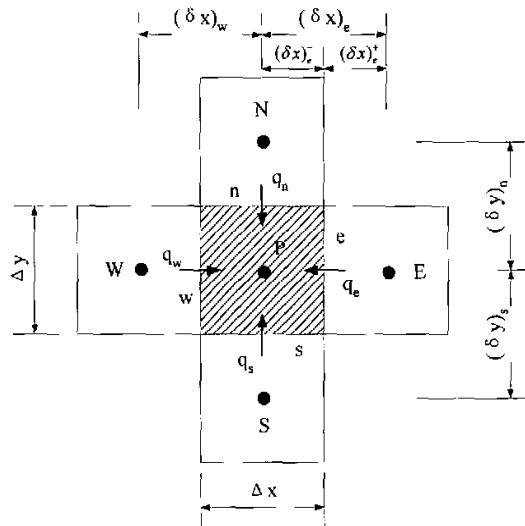


图 4-2 控制容积及其热流平衡

Fig. 4-2 Control volume and its heat flow balance

(4.10)式表明了当前结点的温度变化和外来热流以及内部潜热释放之间达成的热平衡。对于内部结点P,来自邻结点E、W、N、S并通过面e、w、n、s传入的热流q可以写成

$$q_e = \lambda_e \frac{T_e^0 - T_p^0}{(\delta x)_e} \Delta y \quad (4.11)$$

$$q_w = \lambda_w \frac{T_w^0 - T_p^0}{(\delta x)_w} \Delta y \quad (4.12)$$

$$q_n = \lambda_n \frac{T_n^0 - T_p^0}{(\delta y)_n} \Delta x \quad (4.13)$$

$$q_s = \lambda_s \frac{T_s^0 - T_p^0}{(\delta y)_s} \Delta x \quad (4.14)$$

而对于边界结点则需要根据条件做适当的变化。考虑如图 4-3 所示的典型情况，可以有四种类型的边界结点。

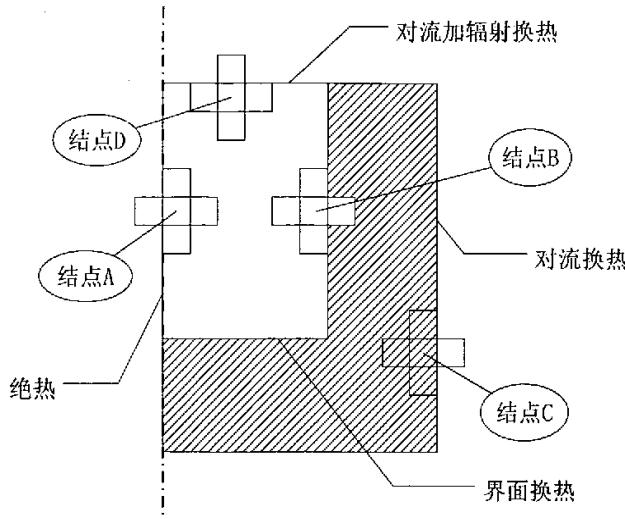


图 4-3 典型边界条件及代表结点

Fig. 4-3 Typical boundary condition and representative node

结点 A 代表绝热边界条件，此时有

$$q_w = 0 \quad (4.15)$$

结点 B 代表界面换热条件，此时有

$$q_e = h_{int}(T_E^0 - T_P^0)\Delta y \quad (4.16)$$

式中

$h_{int}$ ——金属—铸型界面换热系数；

结点 C 代表对流换热条件，此时有

$$q_e = h_{air}(T_f - T_P^0)\Delta y \quad (4.17)$$

式中

$h_{air}$ ——空气的对流换热系数；

$T_f$ ——外界环境温度；

结点 D 代表对流加辐射的换热条件，此时有

$$q_n = h_{air}(T_f - T_P^0) + \varepsilon\sigma[T_f^4 - (T_P^0)^4]\Delta x = h(T_P^0 - T_f)\Delta x \quad (4.18)$$

式中

$h$ ——综合换热系数， $h = \varepsilon\sigma[(T_P^0)^2 + T_f^2](T_P^0 + T_f)$ ；

$\varepsilon$ ——物体的发射率或称黑度；

$\sigma$ ——Stefan-Boltzmann 常数，其值为  $5.67 \times 10^8 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$

已知  $t$  时刻各结点的温度时, 利用 (4.10) 式~(4.18) 式可以方便地求得  $t+\Delta t$  时刻的各结点温度。但为了保证差分格式的稳定性, 显式计算的时间步长和空间步长之间需要满足如下关系

$$\Delta t \leq \frac{\rho C_p}{2\lambda} \left( \frac{1}{1/\Delta x^2 + 1/\Delta y^2} \right) \quad (4.19)$$

(4.19) 式表明显式计算的时间步长会随着空间步长的减小而减小。尽管空间步长的减小会使计算精度相对提高, 但时间步长的减小和结点数目的增加则会造成计算效率的降低。因此在实际计算时, 要考虑到计算精度和计算效率之间的关系选择适当的时间和空间步长。

当采用隐式格式时, (4.10) 式等号右边  $q$  项中的温度将全部采用当前时刻的温度。为便于计算, 通常将 (4.10) 式整理成如下的形式

$$a_p T_p = a_E T_E + a_W T_W + a_N T_N + a_S T_S + b \quad (4.20)$$

对于内部结点, 可以根据 (4.11) 式~(4.14) 式将 (4.20) 式中的各系数表示为

$$a_E = \frac{\lambda_e}{(\delta x)_e} \Delta y, a_W = \frac{\lambda_w}{(\delta x)_w} \Delta y, a_N = \frac{\lambda_n}{(\delta y)_n} \Delta x, a_S = \frac{\lambda_s}{(\delta y)_s} \Delta x \quad (4.21a)$$

$$a_p^0 = \frac{\rho c_p \Delta x \Delta y}{\Delta t}, b = \frac{L}{c_p} a_p^0 + a_p^0 T_p^0 \quad (4.21b)$$

$$a_p = a_E + a_W + a_N + a_S + a_p^0 \quad (4.21c)$$

而对于边界结点则不能直接套用 (4.21) 式, 而需要根据图 4-3 所示的情况对 (4.20) 式中的系数进行相应的变化。

隐式计算是绝对稳定的, 因此没有对时间步长的限制, 但每个结点的温度无法独立求解, 必须通过联立方程组同时求解。一般而言, 可以采用迭代法<sup>[155]</sup>。在具体计算时, 若当前时刻的温度用矩阵  $[T]$  表示, 则还需要 2 个温度矩阵  $[T1]$ 、 $[T2]$  辅助计算。首先令  $[T1]=[T]$ , 将其各结点值代入 (4.20) 式右边进行计算得到  $[T2]$ , 若两次计算的结果之差已经小于控制精度  $eps$ , 即  $||[T2]-[T1]|| < eps$ , 则认为收敛, 令  $[T]=[T2]$ , 此时的  $[T]$  即为新时刻的温度值; 否则, 令  $[T1]=[T2]$  继续进行迭代计算。

### 4.2.3 初始条件与热物参数

在实际的凝固过程中, 初始时刻铸件和铸型的温度实际上是不均匀的, 准确地计算初始温度场需要从充型开始。但对于较小的铸件并且浇铸时间很短时, 一般当作瞬时充型处理。考虑到本文的主要研究方向, 在温度场计算中对初始温度场进行了简化处理, 将所有的铸件网格设为浇铸温度  $T_0$ , 而所有的铸型网格初始温度则设为环境温度  $T_f$ 。

此外,对于包含固液两相的计算单元,其热物参数如密度、比热、导热系数等一般是根据固液两相的热物数据由固相份数进行算术平均得到

$$\rho = f_S \rho_S + (1 - f_S) \rho_L \quad (4.22)$$

$$C_p = f_S C_{p,S} + (1 - f_S) C_{p,L} \quad (4.23)$$

$$\lambda = f_S \lambda_S + (1 - f_S) \lambda_L \quad (4.24)$$

界面处的导热系数则由界面两侧结点的导热系数进行调和平均得到

$$\frac{(\delta x)_e}{\lambda_e} = \frac{(\delta x)_e^-}{\lambda_p} + \frac{(\delta x)_e^+}{\lambda_E} \quad (4.25)$$

### 4.3 微观模型与算法

在实际模拟晶粒组织时,本文采用了 Rappaz 等提出的准瞬时形核模型<sup>[17]</sup>。如图 4-4 所示,这一模型认为形核并不是一个完全的瞬时过程,而是随着过冷度变化的一个渐进过程,形核率随过冷度的变化可以用由三个参数给定的正态分布曲线来描述。

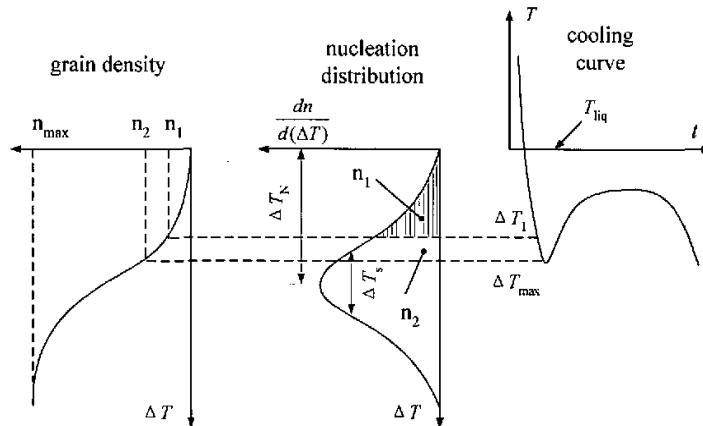


图 4-4 准瞬时形核模型<sup>[18]</sup>

Fig. 4-4 Quasi-instantaneous nucleation model

在给定的过冷度  $\Delta T$ , 晶核密度由这一分布曲线积分得到

$$n(\Delta T) = \int_0^{\Delta T} \frac{n_{\max}}{\sqrt{2\pi}\Delta T_{\sigma}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta T - \Delta T_N}{\Delta T_{\sigma}}\right)^2\right] d(\Delta T) \quad (4.26)$$

式中

$n(\Delta T)$ ——在  $\Delta T$  过冷度下的晶核密度;

$n_{\max}$ ——初始形核基底数;

$\Delta T_N$ ——正态分布曲线的形核过冷度均值;

$\Delta T_{\sigma}$ ——正态分布曲线的形核过冷度方差；

考虑到型壁和液相内部异质形核基底的差异很大，因此采用两组不同参数的正态分布来进行控制。正态分布的参数一般只能通过参照和估计来确定，在具体的模拟中可以根据不同工艺条件对形核的影响进行调整。

这一形核模型的具体实现一般是预先按照分布参数把形核位置和形核过冷随机分配到胞元中去，这样在计算开始之后只需要比较当前胞元的实际过冷和核心胞元的形核过冷就可以判断是否形核。分配方式如下：

(1) 首先根据计算区域的大小和  $n_{\max}$  来确定液相中应该产生的晶核总数  $N_{\text{nuc}}$ 。由于形核参数  $n_{\max}$  往往是以三维形式给定，所以在使用之前需要由下式先转换为二维数据

$$n_{s,\max} = \frac{\pi}{4} [n_{s,\max}^*]^2 \quad (4.27)$$

$$n_{v,\max} = \sqrt{\frac{\pi}{6}} [n_{v,\max}^*]^{3/2} \quad (4.28)$$

式中下标 s 和 v 分别代表型壁和内部，上标\*代表三维数据值。

(2) 产生  $N_{\text{nuc}}$  个随机整数，这些整数值将代表计算区域中胞元的位置索引，而这些位置的胞元将作为形核胞元。

(3) 产生  $N_{\text{nuc}}$  个服从给定参数的正态分布随机数  $\Delta T_{\text{nuc}}$ ，作为随机形核过冷。其中服从正态分布随机数的产生算法可参考文献[156]。

(4) 将这些随机形核过冷分配给形核胞元，若有胞元被多次分配，则取最小被分配值。

对于现有的晶粒生长模型和捕获算法，在本文 1.4 节中已经进行了详细说明。尽管这些方法都取得了一定成功，但它们都是基于对晶粒外形的人为假设。为了避免这一点，本文将前两章中提出的枝晶生长模型直接应用到晶粒组织模拟中，这样就无需对晶粒形状做任何人为假设，而完全由枝晶本身的生长条件得到最终的晶粒形状。

## 4.4 宏微观耦合

### 4.4.1 温度的获得

在进行微观形核生长计算时，必须要用到温度，而微观计算使用的胞元网格往往尺寸较小，若采用显式方法进行温度场计算，为满足稳定性要求将会使时间步长非常小，这使得要得到有意义的结果将会使计算时间无比漫长。为解决这个问题，可以采用隐式方法来求解温度场，但隐式计算在每一时间步都需要迭代求解，并且在不同的控制精度下，得到的结果也有比较明显的差别。表 4-1 是对于  $100 \times 100$  的正方形计算区域，采用通常的微观计算空间步长  $\Delta x = 10 \mu\text{m}$ ，并设所有的网格均为液相，初始温度  $925\text{K}$ ，边界保持恒定的  $921\text{K}$ ，计算只进行了一个时间步长  $\Delta t = 0.008$  秒后，以计算区域中心温度

为标准对不同迭代方法和计算精度进行的比较。这一简单条件下的计算表明,为了得到相对准确的结果至少需要两次迭代的控制误差  $\text{eps} < 1 \times 10^{-6}$ , 而在这样的精度要求下, 每一时间步将需要数千次迭代。这样一来, 采用显式格式在时间步长上的优越性已经完全被冗长的迭代计算所抵消, 整个计算效率仍然非常低。

表 4-1 隐式计算的精度与迭代次数

Table 4-1 Accuracy and iteration times of implicit scheme

控制误差 $\text{eps}$	Jacobi 迭代		Gauss-Seidel 迭代	
	中心温度	迭代次数	中心温度	迭代次数
$1 \times 10^{-3}$	923.7389	1848	922.7216	1617
$1 \times 10^{-4}$	922.0127	6083	921.9244	3655
$1 \times 10^{-5}$	921.8569	10148	921.8451	5687
$1 \times 10^{-6}$	921.8380	14213	921.8372	7720
$1 \times 10^{-7}$	921.8365	18277	921.8364	9752

为解决这个问题, 可以考虑采用两套不同的网格, 尺寸较大的单元网格用于温度场计算, 而尺寸较小的胞元网格则用于形核生长的微观计算, 胞元的温度可以由宏观单元温度在空间和时间上进行插值得到。若已知  $t$  时刻各单元的温度, 则在  $t$  时刻胞元的温度由其邻近 4 个单元的温度进行双线性插值得到。可以采用如下的具体算法

- (1) 由胞元位置  $(i, j)$  找到该胞元所在的单元  $(I, J)$ , 得到该单元  $E_1$  及其温度  $T_1$ ;
- (2) 由  $X = \Delta X(J+0.5)$  和  $Y = \Delta Y(I+0.5)$  计算  $E_1$  的中心坐标, 由  $x = \Delta x(j+0.5)$  和  $y = \Delta y(i+0.5)$  计算胞元的中心坐标, 其中  $\Delta X$ 、 $\Delta Y$  为单元尺寸,  $\Delta x$ 、 $\Delta y$  为胞元尺寸;
- (3) 根据  $(x, y)$  和  $(X, Y)$  的相对位置按照逆时针方向找到当前胞元的其余 3 个邻近单元  $E_2$ 、 $E_3$ 、 $E_4$ , 得到其温度  $T_2$ 、 $T_3$ 、 $T_4$ 。其中 4 个单元的位置关系有如图 4-5 所示的 4 种情况;
- (4) 由  $a = |X-x|/\Delta X$  和  $b = |Y-y|/\Delta Y$  以及图 4-5 的 4 种情况分别计算胞元的温度  $T$ 。对于图 4-5a 而言有  $T = (1-a)(1-b)T_1 + (1-a)(b)T_2 + (ab)T_3 + (1-b)(a)T_4$ 。

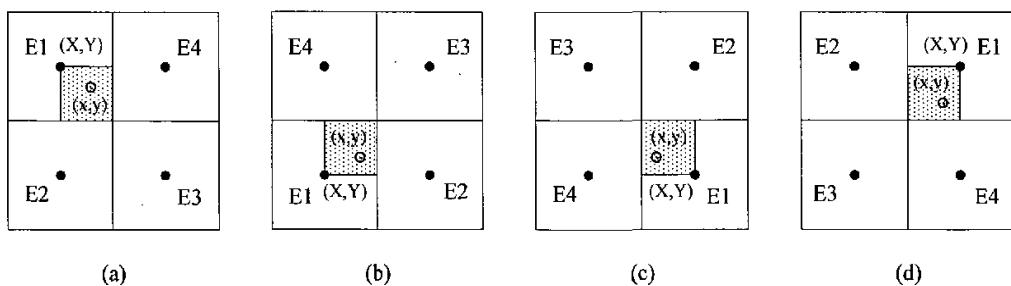


图 4-5 胞元及其邻近单元的位置关系

Fig. 4-5 The relative position of between cell and its neibour elements

胞元温度在时间上的插值则相对简单, 若在  $\Delta t$  时间内胞元的温度变化为  $\Delta T$ , 则在  $\delta t$  时间内胞元的温度变化  $\delta T = \Delta T \cdot \delta t / \Delta t$ 。

#### 4.4.2 潜热的处理

在温度场计算中, 潜热的释放速率是作为输入条件进入计算, 而计算出的温度场变化又将作为输入条件进入微观形核生长计算从而影响潜热的释放, 因此如何利用潜热进行宏微观耦合就成为一个非常关键的问题。根据对这个问题的处理可以分成三种耦合方法。

第一种方法直接采用传统的等价比热法求解宏观温度场, 当温度下降到液相线以下时, 进入微观计算。这实际上意味着耦合是从宏观到微观的单向过程, 微观计算的结果不对宏观温度场产生影响。这种方法实施时比较简单, 可以预先将温度场算好, 在进行微观模拟时, 可以针对所关注的一个局部小区域, 直接调用该处已经得到的温度场或冷却曲线来进行微观计算。Sasikumar 等人的研究<sup>[157]</sup>表明, 这种方法在模拟微观偏析、计算二次臂时比较适合, 因为在这种情况下凝固路径或冷却曲线对微观动力学过程会有很大影响, 而二次臂的粗化以及固相扩散等微观动力学过程则不足以引起温度场或冷却曲线的显著变化。但对于晶粒的形核和生长而言, 微观动力学过程显然会对温度场产生极大的影响, 因此这种方法就不够准确。

第二种方法即 Rappaz 和 Thevoz 等人采用的两时间步长法<sup>[17,31]</sup>。这种方法采用较大的空间步长和较大的时间步长  $\Delta t$  进行宏观温度场计算, 当温度降至液相线以下, 进入微观生长过程后, 将宏观时间步长  $\Delta t$  分成  $N$  个较小的微观时间步长  $\delta t$ , 微观形核生长计算按照  $\delta t$  的步长来进行, 所需的温度值按照 4.2.1 的方法插值得到。当计算  $N$  次后, 累加得到的  $\Delta f_s$  将作为输入返回到宏观计算, 从而开始下一个  $\Delta t$  的计算, 其流程图如图 4-7 所示。

与第一种方法相比, 这种方法可以称为双向的耦合, 因为它考虑了微观过程对宏观计算的影响。但仔细分析它的耦合过程, 可以发现这实际上只是部分的双向耦合, 因为在  $\delta t$  时间实际上只有宏观对微观的影响, 微观对宏观的影响则是在  $N$  个  $\delta t$  后一总产生作用。这意味着微观对宏观的影响程度小于宏观对微观的影响程度。

第三种方法则对宏微观计算采用同样的时间步长, 在每一时步内, 微观计算得到的  $\Delta f_s$  都将作为输入返回宏观计算。这是一种完全的双向耦合。尽管 Thevoz 等人称第二种方法取得了很好的效果, 但 Sasikumar 等人<sup>[158]</sup>的计算表明, 微观对宏观的影响程度与宏观对微观的影响程度同样强烈, 并且用第二种方法计算时, 可靠的收敛值只有在双时间步变为单时间步时才能得到, 也即部分的双向耦合成为完全的双向耦合。基于以上考虑, 本文采用第三种方法进行宏微观耦合。

#### 4.5 程序与算法

与枝晶生长的模拟不同, 在晶粒组织模拟中本文采用两套网格来进行计算。其中较

大的单元网格用于宏观温度场计算，而较小的胞元网格则用于形核生长计算。整个计算区域划分为  $M \times N$  个单元，每个单元则由  $m_0 \times n_0$  个胞元组成。单元网格需要保存的变量包括温度  $T$ ，材质属性（铸件或铸型）*State*，固相份数  $f_S$  以及固相增量  $\Delta f_S$ 。胞元网格的变量则除 3.2.1 节中枝晶生长模拟时提及的之外，还需要包括温度  $T$ ，形核过冷  $\Delta T_N$ ，择优生长位向  $\theta$ 。整个计算由如下几个主要的模块组成：

(1) 初始化 (Initial)。这一模块需要完成的工作包括按照用户设定的计算区域大小分配单元和胞元的存贮空间，并分别对单元和胞元进行初始化。其中单元的初始化主要是根据 4.2.3 小节的说明设定初始温度，以及根据单元位置标记其材质属性。胞元的初始化则除 3.2 节中初值的设定之外，还需要按照 4.3 节的算法设定胞元的形核过冷，对于非形核胞元，可以将其形核过冷设为一个很大的值。此外，在这一模块中还需要根据

$$\Delta t = \min(\Delta t_1, \Delta t_2, \Delta t_3) \quad (4.29)$$

式中

$\Delta t_1$ ——根据合金的热物参数由 (4.19) 式得到的时间步长；

$\Delta t_2$ ——根据铸型的热物参数由 (4.19) 式得到的时间步长；

$\Delta t_3$ ——由 (3.22) 式得到的微观计算时间步长

来确定宏微观计算统一的时间步长。

(2) 温度场计算 (Explicit)。这一模块将按照 4.2 节的说明采用显式方法由 (4.6) 式计算所有单元在经过一个时间步长  $\Delta t$  之后的温度。其中潜热项直接根据微观计算输出的  $\Delta f_S$  来获得。

(3) 胞元温度计算 (EleToCell)。这一模块根据 4.4.1 小节的说明将单元温度通过双线性插值来计算胞元的温度。

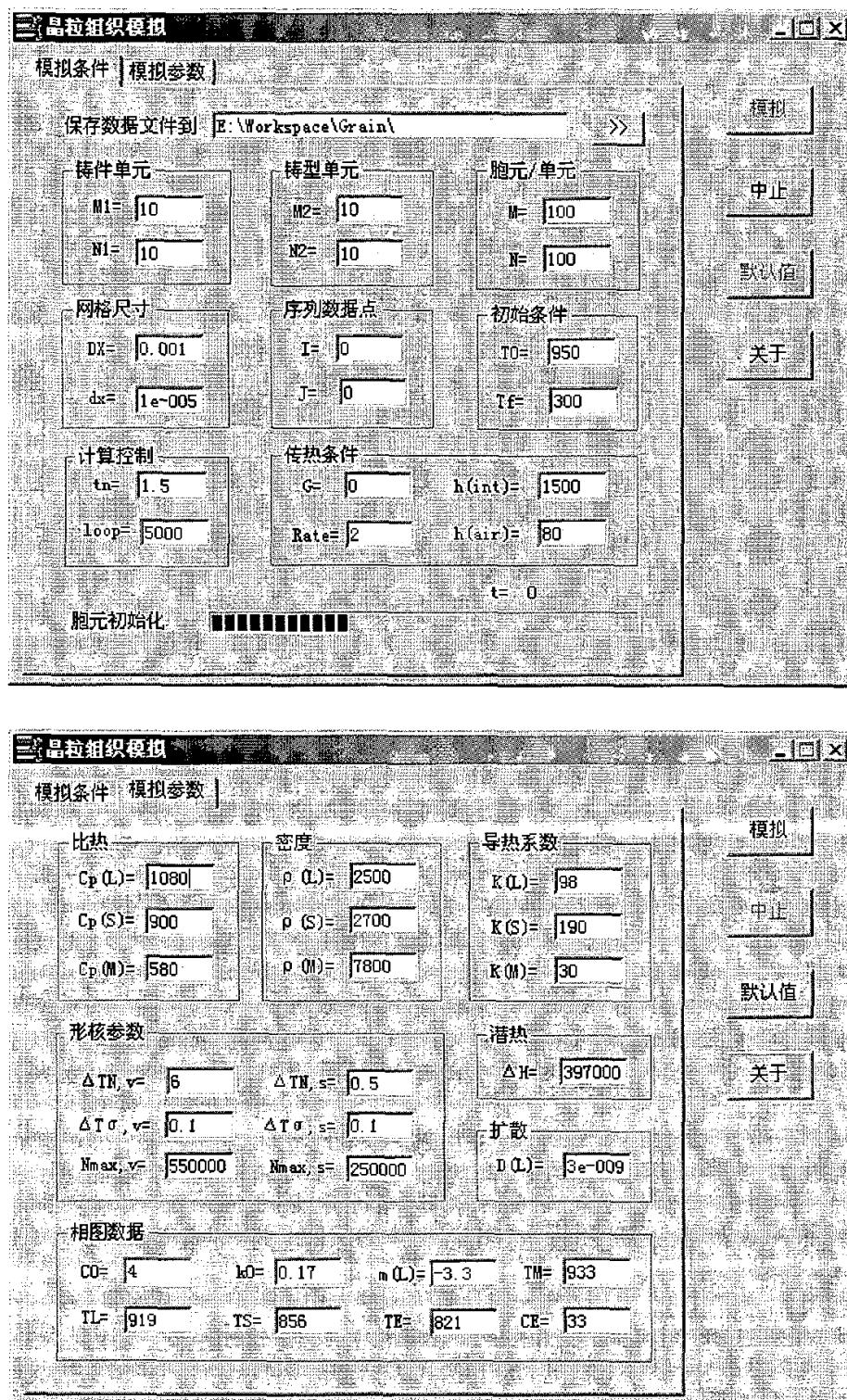
(4) 形核 (Nucleate)。这一模块根据胞元当前的成分计算其对应的液相线温度，并通过与胞元实际温度的比较确定是否达到形核过冷，一旦达到就将认为形核，并对有关变量进行相应的设定。

(5) 生长 (Grow)。这一模块与枝晶生长模拟中的相应模块类似，只是还需要处理发生共晶转变的可能性，当胞元的温度低于共晶温度且成分高于共晶成分时，认为共晶转变立即发生，胞元的所有剩余液相瞬时转变为固相。

(6) 扩散 (Diffuse)。这一模块与枝晶生长模拟中的相应模块相同。

(7) 转变 (Transition)。这一模块与枝晶生长模拟中的相应模块类似，只是还需要对胞元状态转变带来的单元固相份数的增量进行统计，以实现宏微观耦合。

整个程序界面如图 4-6 所示。图 4-8~图 4-11 给出了晶粒组织模拟主程序和主要计算模块的流程图。



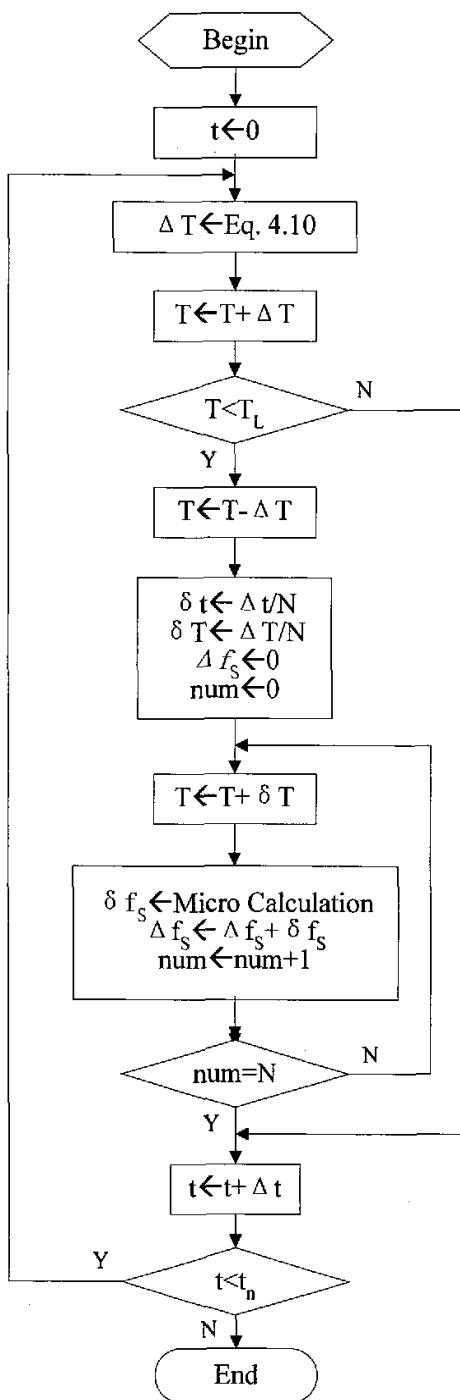


图 4-7 两时间步宏微观耦合流程图

Fig. 4-7 The flow chart of two timesteps coupling

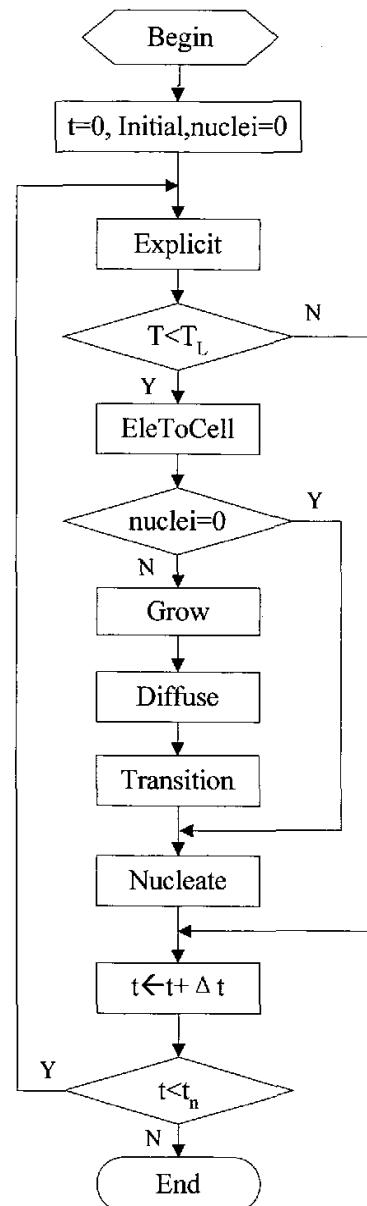


图 4-8 晶粒模拟程序主流程图

Fig. 4-8 The flow chart of main program for grain simulation

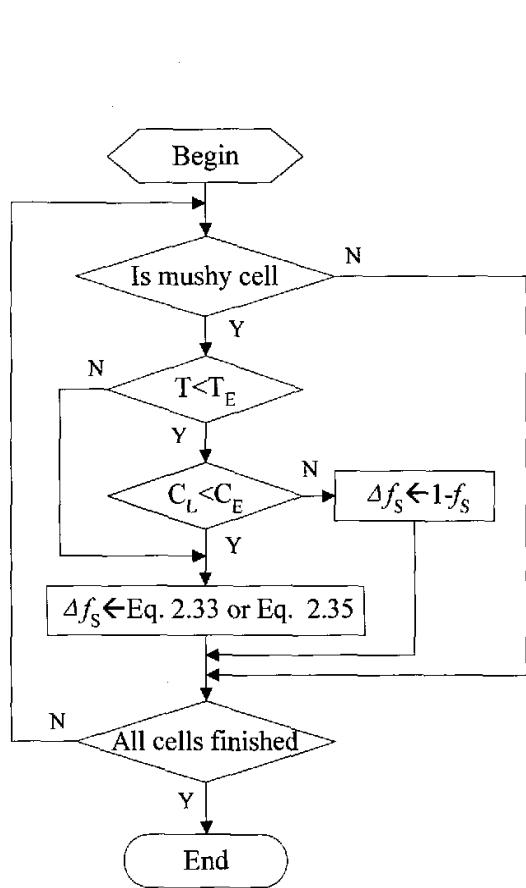


图 4-9 晶粒组织模拟中生长模块的流程图

Fig. 4-9 The flow chart of grow module for grain simulation

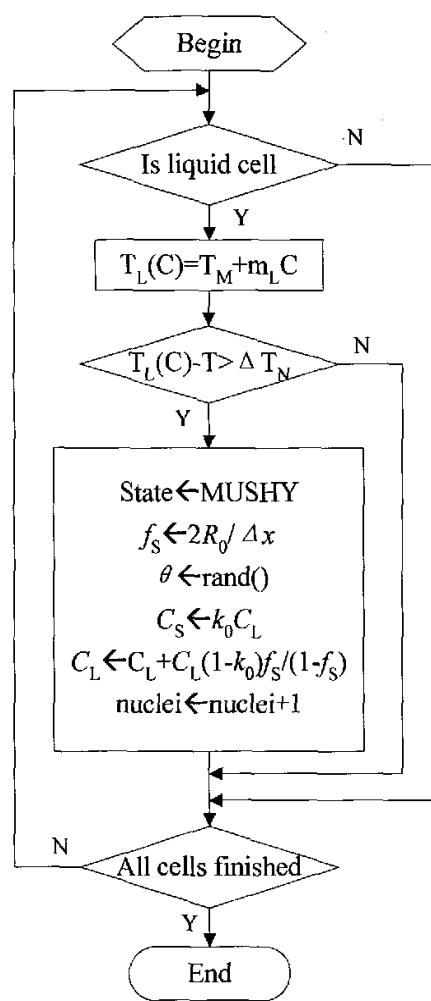


图 4-10 晶粒组织模拟中形核模块流程图

Fig. 4-10 The flow chart of nucleate module for grain simulation

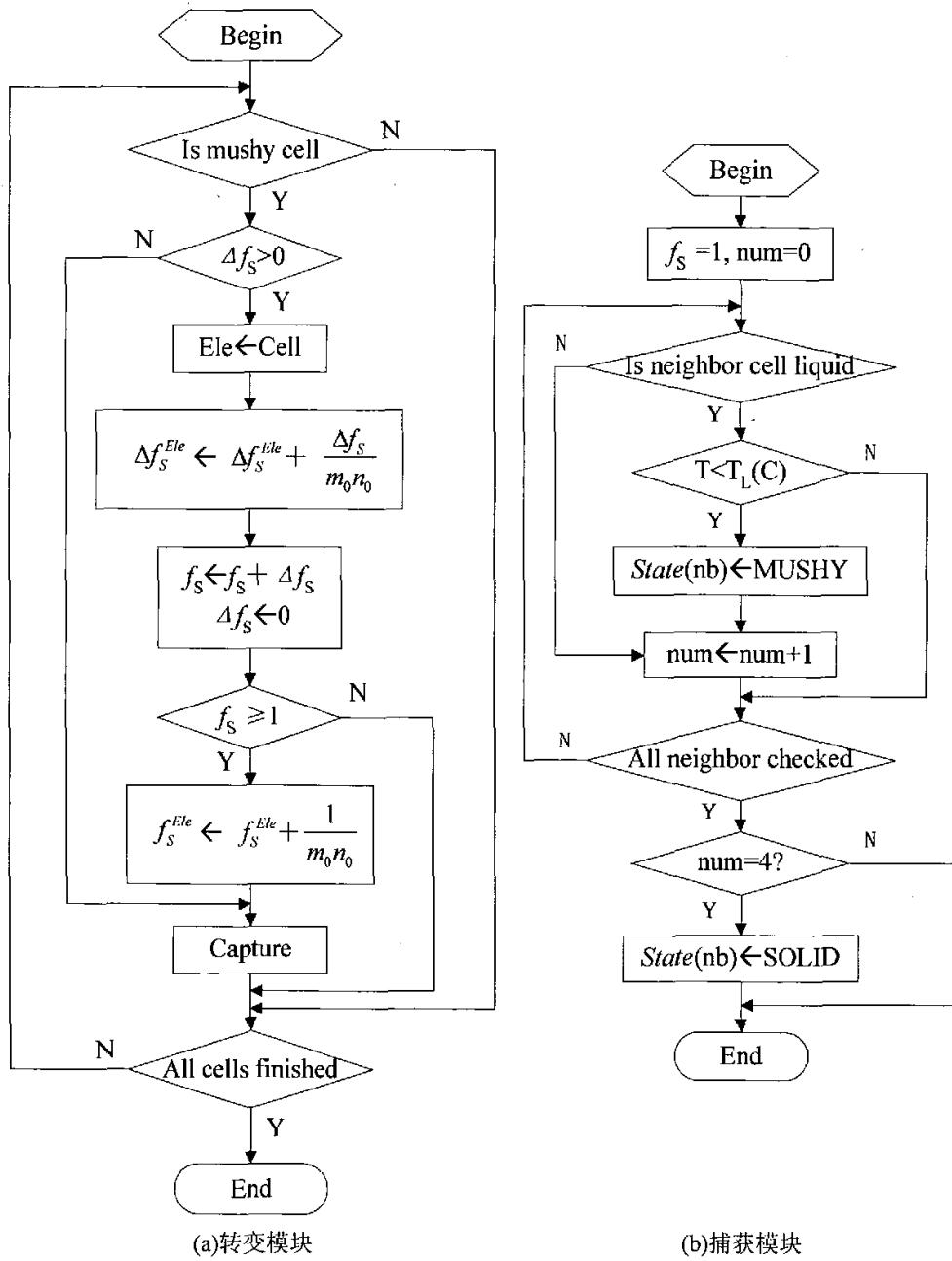


图 4-11 晶粒组织模拟中的转变模块流程图

Fig. 4-11 The flow chart of transition module for grain simulation with (a) for transition and (b) capture

## 4.6 本章小结

(1) 本章首先对凝固理论中关于典型晶粒组织(表层细晶区、柱状晶区、内部等轴晶区)形成演变机理进行了回顾和总结,在此基础上讨论了晶粒组织中的柱状—等轴转变,将 CET 的本质概括为柱状晶和等轴晶的竞争生长,并介绍了 Hunt 建立的定量描述 CET 的数学模型。

(2) 对晶粒组织模拟中宏观温度场计算的数学模型和数值算法进行了讨论。通过宏微观耦合的办法,避免了传统的温度场计算中对潜热项的特殊处理,而是直接将微观计算的结果代入潜热项求解温度场。对热传导方程的显式和隐式数值解法进行了讨论,给出了相应的离散格式,并对于典型边界结点的处理方法,热物参数的获得以及初始条件的应用进行了说明。

(3) 对微观形核模型的建立和具体的实现方法进行了说明,将基于溶质扩散的枝晶生长模型直接应用到微观生长计算中去,避免了传统的晶粒组织模拟中复杂的生长、捕获算法和对晶粒外形的人为假设。

(4) 讨论了宏微观耦合中关键问题的处理。通过采用单元和胞元两套不同大小的网格,并用双线性插值的办法由单元温度获得胞元温度,从而提高了温度场计算的效率。对三种不同的宏微观耦合方式进行了分析,并采用统一的时间步长来进行宏微观计算,避免了因为宏微观时间步长不同步而造成事实上的不完全耦合。

(5) 对晶粒组织模拟的整个计算方法和主要计算模块的功能进行了详细的说明,给出了相应的流程图和程序运行界面。

## 第五章 枝晶生长模拟

在第二和第三章中,本文分别对枝晶生长的数值模型及算法进行了详细的说明,本章将通过实际的模拟计算来验证这一枝晶生长模型的可靠性和适用性,并对枝晶的稳态生长及分枝机制进行讨论。计算选用的合金为 Al-Cu 合金,主要用到的物性参数如表 5-1 所示。

表 5-1 Al-Cu 合金物性参数  
Table 5-1 Physical properties for simulated Al-Cu alloy

参数名称	符号	单位	数量
原始成分	$C_0$	mass%	4
平衡分配系数	$k_0$	—	0.17
液相比热	$c_{p,L}$	$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$	1080
固相比热	$c_{p,S}$	$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$	900
液相导热系数	$\lambda_L$	$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$	98
固相导热系数	$\lambda_S$	$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$	190
液相密度	$\rho_L$	$kg \cdot m^{-3}$	2500
固相密度	$\rho_S$	$kg \cdot m^{-3}$	2700
潜热	$L$	$J \cdot kg^{-1}$	397000
液相扩散系数	$D_L$	$m^2 \cdot s^{-1}$	$3 \times 10^{-9}$
Gibbs-Tompson 系数	$\Gamma$	$m \cdot K$	$2.4 \times 10^{-7}$
液相线斜率	$m_L$	$K \cdot (mass\%)^{-1}$	-3.39
液相线温度	$T_L$	K	919
固相线温度	$T_S$	K	856
共晶温度	$T_E$	K	821
共晶成分	$C_E$	mass%	33

### 5.1 溶质守恒验证

在本文 2.3.4 小节曾指出,虽然界面处的扩散是根据  $C_L^*$  计算的,但由于这一成分只存在于一个没有厚度的界面上,因此实际发生转变的液相成分是由界面胞剩余液相成分  $C_L^0$  来计算的,当固相新增  $\Delta f_S$  时排出的溶质应该按照 (2.41) 式计算。而如果将实际转变的液相成分视为  $C_L^*$ ,并用 (2.38) 式计算应排出的多余溶质则会造成溶质的不守恒。从模拟结果来看,尽管用这两种方法计算得到的枝晶形貌似乎没有太多的差异,但在设置了零通量边界条件,并分别记录求解区域溶质平均成分随时间的变化后,从图 5-1 中就可以很清楚地看到这两种方法的差异。

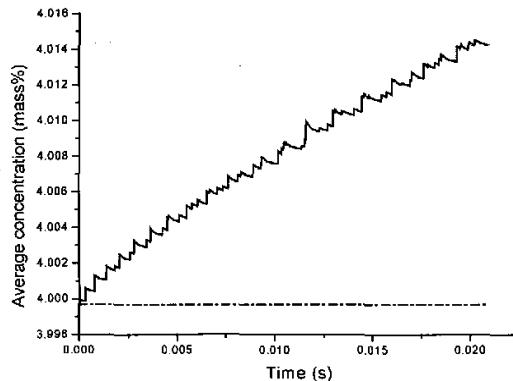


图 5-1 溶质平均成分随时间的变化

Fig. 5-1 The variation of average solute concentration with time

初始时刻, 由于核心胞元的成为  $k_0 C_0$ , 而其余胞元的的成为均为  $C_0$ , 所以熔体的初始平均成分略低于  $C_0$ 。随着新增固相的不断产生和多余溶质的排出, 当采用 (2.38) 式进行溶质再分配计算时, 熔体平均成分不断波动, 并逐渐偏离了初始平均成分呈现升高趋势, 如图 5-1 中实线所示。这是因为界面胞剩余液相成分实际上总是低于或最多等于界面平衡液相成分, 而用界面平衡液相成分来计算需要排出的溶质则使得在每个时间步长内, 计算区域的溶质总量被高估。显然, 用这种方法计算是不能保证溶质守恒的。而采用 (2.41) 式计算的结果则如图 5-1 中点划线所示, 可以看到溶质平均成分没有出现任何波动和偏离, 而是保证了严格的溶质守恒。

## 5.2 枝晶的稳态生长

### 5.2.1 成分分布

在保证溶质守恒的前提下, 本文对枝晶形貌的演变及枝晶生长过程中成分分布进行了模拟, 以此对模型的模拟能力和可靠性进行初步的验证。图 5-2 是在  $\Delta T=6\text{K}$  的过冷熔体中生长时枝晶形貌的演变, 图中的线条分别代表不同时刻的枝晶外形轮廓。图 5-3 是对应于图 5-2 的不同的时刻下, 沿枝晶主干臂的中心线方向成分分布的变化情况。

从图 5-3 中可以看出, 核心处首先生成的固相具有最低成分。随着生长的进行, 界面不断向前推进, 多余溶质也不断排出, 这使得界面前沿的液相成分逐渐升高, 因而生成的固相成分也相应提高。由于远方的熔体仍然保持着初始成分, 因此在界面前方的液相中形成了成分梯度。随着生长的继续进行, 界面前沿的液相成分基本保持稳定, 因而从液相中析出的固相成分也保持不变。这意味着界面前沿的液相成分已达到平衡液相成分, 枝晶进入了稳态生长。

从  $t=0.001$  秒、 $t=0.0042$  秒和  $t=0.0083$  秒三条界面前沿液相成分分布线的局部放大图中可以很清楚地看到生长初期界面前沿的液相成分逐渐升高的情形，而从  $t=0.0125$  秒、 $t=0.025$  秒和  $t=0.0375$  秒三条成分分布线的局部放大图中则可以看到生长后期界面前沿液相成分已基本保持稳定。此外，从局部放大图中还可以看到，在生长初期界面前沿液相中的成分梯度比生长后期要大，这意味着枝晶尖端的生长速度是从相对较高的水平逐渐降低并趋于稳定的。这一结论在随后的枝晶尖端速度模拟中得到证实。

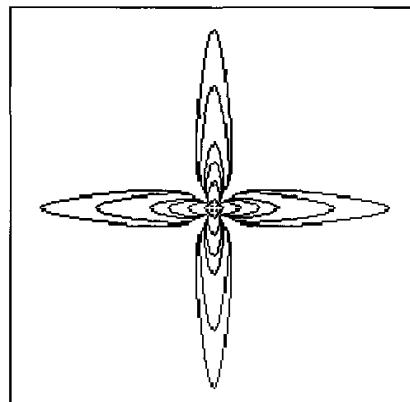


图 5-2  $\Delta T=6K$  下枝晶形貌的演变

Fig. 5-2 Evolution of dendrite morphology at the undercooling 6K

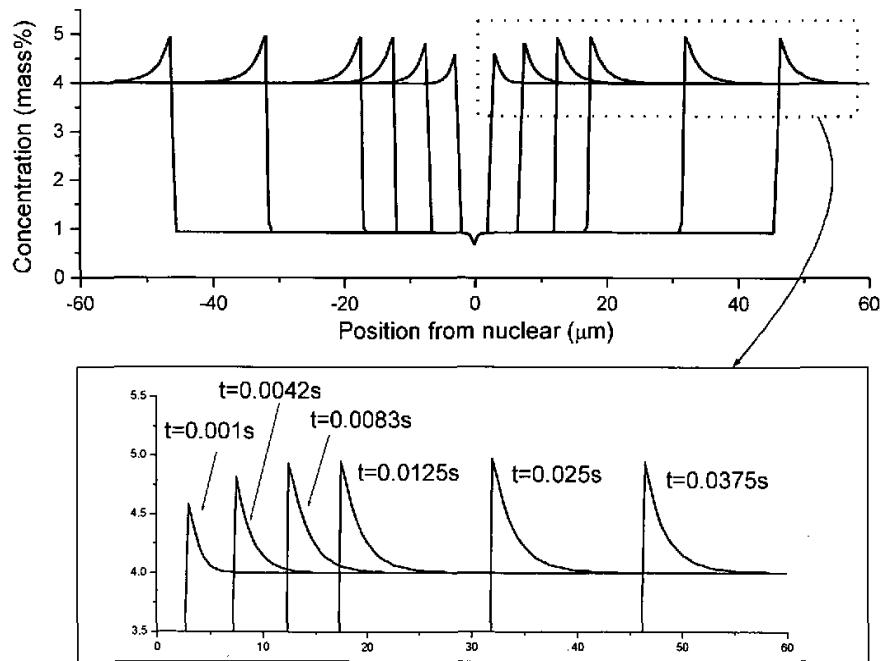


图 5-3 枝晶沿主干臂中心线方向在不同时刻的成分分布

Fig. 5-3 Evolution of concentration distribution at different time along the centerline of primary arm

图 5-4 是在不同过冷度下枝晶形貌的变化情况, 图中分别给出了  $t=0.025$  秒时在  $\Delta T=3K$  和  $\Delta T=6K$  条件下枝晶的外形轮廓, 可以很明显地看到因过冷度不同造成的枝晶生长速度差异。图 5-5 是对应于图 5-4 中不同过冷度下枝晶沿主干臂的中心线方向的成分分布。

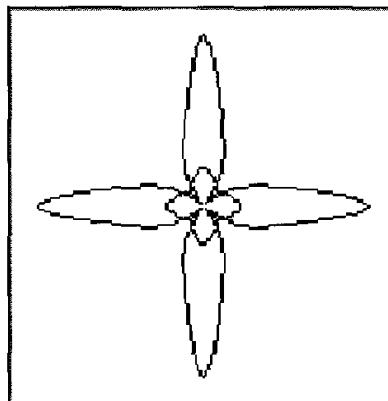


图 5-4  $\Delta T=3K$  和  $\Delta T=6K$  时的枝晶形貌

Fig. 5-4 dendrite morphology at the undercooling 3K and 6K

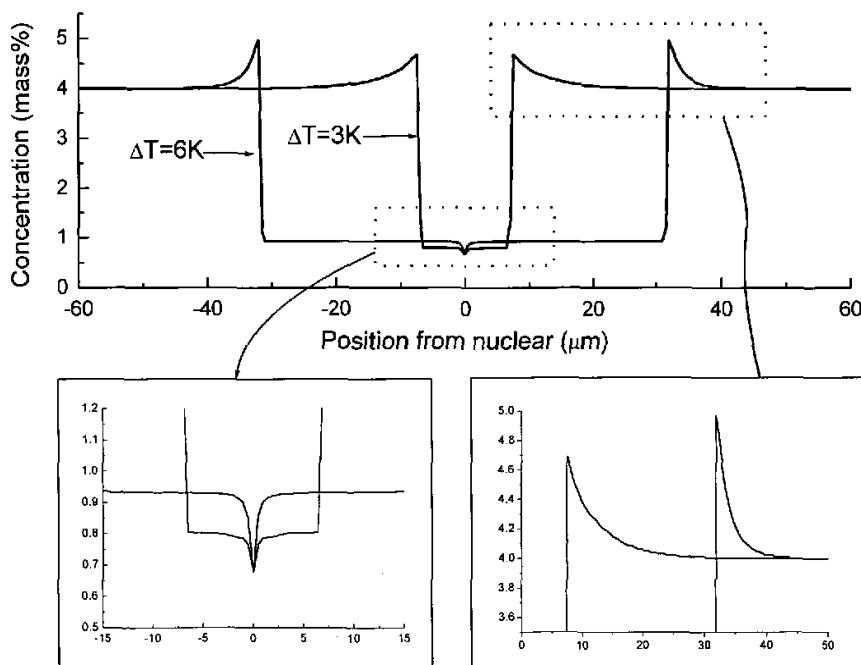


图 5-5 枝晶沿主干臂中心线方向在不同过冷度下的成分分布

Fig. 5-5 concentration distribution along the centerline of primary arm at the undercooling 3K and 6K

这一成分分布与图 5-3 的结果类似, 固相成分从晶核处的最低值逐渐升高, 当界面前沿液相成分到达平衡液相成分并保持基本稳定后, 固相成分也相应地保持稳定。但从图中可以看出, 随着过冷度的增大, 界面前沿的液相成分和液相中的成分梯度也都随之增大, 因而稳态生长时的固相成分和枝晶尖端的稳态生长速度也都随着过冷度的增大而增大。从图 5-5 固相成分的局部放大图中还可以看到, 在过冷度较大或生长速度较快时, 枝晶能够比较快地进入稳态生长, 因而固相成分也能够较快保持稳定。

需要指出, 图 5-3 和图 5-5 的成分分布同李强等人采用浓度势和连续性方法<sup>[105,107]</sup>模拟得到的枝晶生长过程中沿主干臂的成分分布结果有所不同, 并没有在固相中出现先高后低甚至低于晶核成分的较大波动。显然, 根据凝固理论的分析, 本文得到的结果更为合理。

### 5.2.2 尖端速度

为了对模型的可靠性进行定量验证, 分别在不同过冷度下, 对枝晶尖端的生长速度进行了模拟计算, 并与理论模型进行了比较。在 2.1.2 小节本文给出了枝晶尖端生长的 LGK 理论模型与 KGT 理论模型, 尽管对于在过冷熔体中生长的枝晶来说, LGK 模型更为准确, 因为它考虑了枝晶尖端的热过冷。但由于本文采用的数值模型中假定熔体为等温, 忽略了热过冷, 因此模拟条件更接近  $G=0$  时的 KGT 模型。

文献[159]指出, 在过冷熔体中生长的球状晶体的特征半径  $R^*=2\Gamma/(T_M-T_\infty)$ , 其中  $T_M$  为纯组元熔点,  $T_\infty$  为熔体温度。当球晶生长到  $18.5R^*<R<36R^*$  时失去绝对稳定性, 却保持相对稳定性,  $R>36R^*$  时将会失去相对稳定性转为枝晶生长。根据计算这意味着晶体的初始生长半径不应超过  $1\mu\text{m}$ 。为使计算能尽量接近真实地从球晶开始, 胞元网格的尺寸也不宜超过  $1\mu\text{m}$ 。同时从数值计算的角度来看, 尽管本文采用的枝晶生长模型本身没有对胞元网格的大小提出限制, 但考虑到枝晶尖端半径大约在  $10^{-6}\text{m}$  的数量级, 因此胞元网格至少应该在这一尺度才有可能比较准确地体现出尖端曲率的影响, 从而得到相对准确的结果。

为了保证模拟条件接近理论模型中过冷熔体的生长条件, 将计算区域的边界设置为保持恒定原始成分的第一类边界条件。同时计算区域大小和计算时间的长短也以保证枝晶尖端与边界有足够的扩散距离为原则。

图 5-6 是分别采用不同的胞元尺寸, 对不同过冷度下枝晶尖端生长速度随时间变化的计算结果。从图中可以看到, 虽然在不同的网格尺寸下模拟计算的结果有所不同, 但在不同过冷度下尖端生长速度均表现出趋于稳定的态势, 并与理论值比较接近。在四个不同的胞元尺寸中  $\Delta x=0.5\mu\text{m}$  的模拟值表现出较好的稳定性和准确性。

在 3.2.2 小节中我们提出了两种计算固相增量的不同办法: 第一种方法由界面速度得到  $\Delta f_s$ , 第二种方法则直接通过界面胞与液相邻胞的扩散得到  $\Delta f_s$ 。图 5-7 是分别采用这两种不同的方法在  $\Delta x=0.5\mu\text{m}$  的网格尺寸下计算得到的尖端速度与 KGT 理论模型

的比较结果,可以看到计算值与理论值基本吻合。从两种计算  $\Delta f_s$  的不同方法比较来看,尽管用这两种方法模拟得到的枝晶形貌并无显著不同,但从图 5-7 与理论值的比较中可以看出,就尖端速度的计算而言,方法二似乎比方法一更为准确。

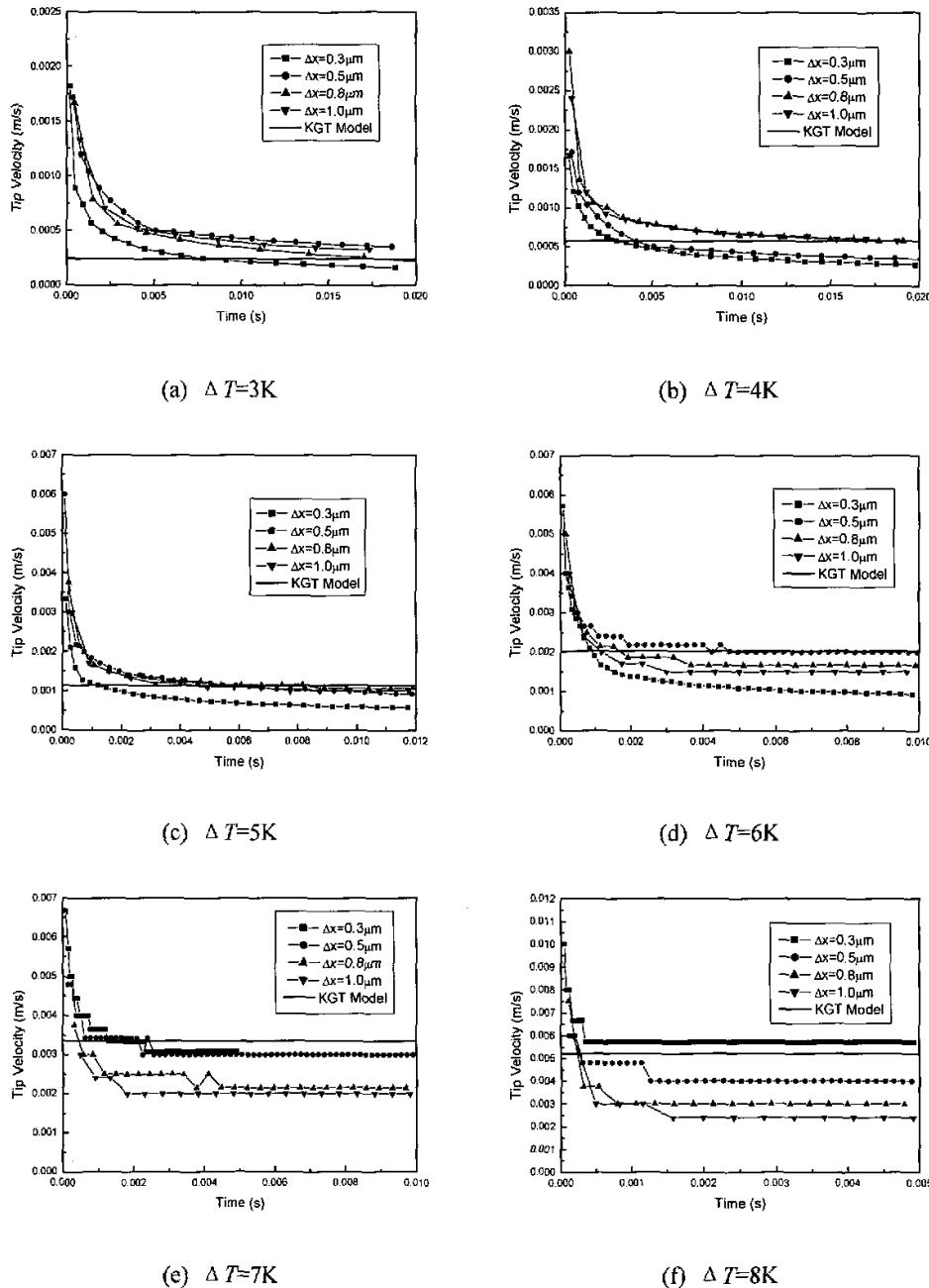
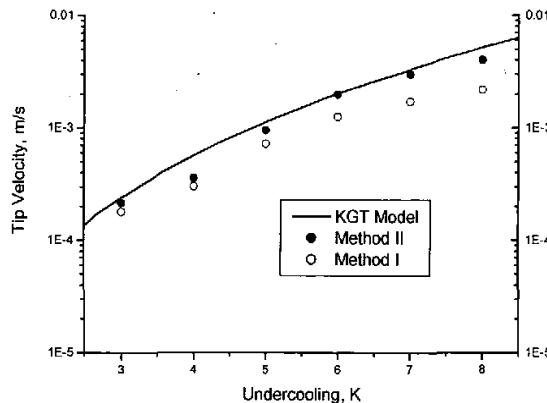


图 5-6 在不同过冷度和网格尺寸下枝晶尖端速度的计算结果

Fig. 5-6 The simulated dendrite tip velocity at different undercoolings with different cell sizes

图 5-7 枝晶尖端速度与 LGK 理论模型的比较 ( $\Delta x=0.5\mu\text{m}$ )Fig. 5-7 Simulated endrite tip velocity (with  $\Delta x=0.5\mu\text{m}$ ) and LGK theoretical model

### 5.3 枝晶的分枝

#### 5.3.1 分枝形貌

在 2.2 节本文曾提到, MSC 理论认为枝晶生长过程中分枝的产生与界面扰动有关, 在无界面扰动的情况下, 枝晶尖端将以光滑的旋转抛物面向前生长。从模拟的结果来看, 当不施加扰动时, 即使在较大过冷度下, 给予枝晶充分的生长时间, 也没有发现分枝的产生。这个模拟结果与 MSC 理论比较一致。而在施加扰动后, 则可以得到具有分枝的枝晶形貌。

图 5-8 是过冷度为 10K, 施加振幅为 0.01 的随机扰动后模拟得到的枝晶形貌及成分偏析。从图中可以看出因为施加了界面扰动, 枝晶已不再象图 5-2 或 5-4 那样仅仅以光滑的主干生长, 而是出现了分枝结构。这些分枝之间相互竞争生长, 并且由于分枝的端部具有较好的扩散条件, 因而往往端部则比较粗大, 而根部则呈颈缩状。在分枝之间则形成了溶质富集区, 这些富集区的液相具有较高的成分, 并且由于枝晶骨架的形成而进一步阻碍了溶质的扩散, 因而将成为最后凝固的部分。

此外, 另一个值得注意的现象是三次分枝只出现在二次分枝的一侧, 并且沿主干方向生长, 而不是在两侧同时生长。这一现象已在过冷熔体的枝晶生长实验中观测到<sup>[160]</sup>, 并与其它数值模拟的结果一致<sup>[60,79]</sup>。这种现象主要是由于分枝的外侧, 即朝向主干生长方向的一侧具有更好的扩散条件, 因而高次分枝倾向于沿这一方向生长。

图 5-9 是 Al-Si 合金在铸态下的枝晶  $\alpha$  组织<sup>[161]</sup>, 虽然二者的材料不同, 晶粒的大小也有差异, 但从对比中可以看到, 模拟的枝晶组织与实际枝晶组织的形貌具有大致相同的规律。

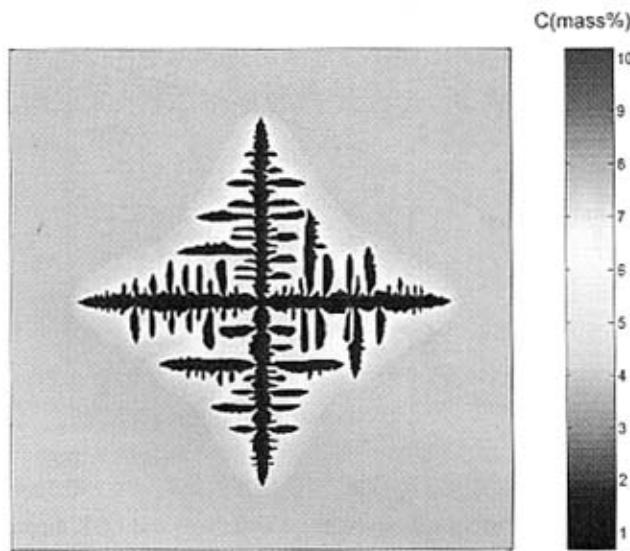


图 5-8 施加随机扰动后枝晶分枝的竞争生长及成分分布

Fig. 5-8 Competition growth of side branches and concentration profile with the introduction of random noise at interface  
(胞元尺寸  $\Delta x=0.5 \mu m$ , 计算区域为  $400 \times 400$  胞元, 生长时间 0.04 秒)

图 5-9 Al-Si 合金铸态下的枝晶  $\alpha$  组织<sup>[161]</sup>

Fig. 5-9  $\alpha$  dendrite in Al-Si alloy, as cast

### 5.3.2 分枝与界面扰动

尽管通过施加随机扰动可以模拟枝晶的分枝结构, 但为了进一步研究分枝和界面扰动之间的关系, 我们在界面上施加了一个形如 $[1+A\sin(\omega x)]$ 的扰动函数, 其中  $A$  为扰动

的振幅,  $\omega=2\pi/\lambda$  为扰动频率,  $x$  为界面位置。与随机扰动相比, 这一给定频率和振幅的正弦函数不但可以模拟界面的扰动, 而且可以通过控制扰动的强度和频率(波长)对界面扰动进行进一步的分析。

为便于对不同条件下枝晶的分枝程度进行比较, 本文采用文献[162]的做法, 用将枝晶与熔体分隔的界面长度与枝晶本身的面积比值来大致地衡量分枝的发达程度。这样, 通过施加不同波长(频率)和振幅的扰动就可以对枝晶的分枝程度进行定量的比较。在具体计算时, 界面胞元的位置  $x$  和给定的波长  $\lambda$  都以  $\Delta x$  为单位进行了无量纲处理, 界面胞元的位置坐标按照与核心胞元的相对距离, 并沿其靠近的枝晶主干生长方向来计算。为简化计算, 枝晶界面长度和枝晶面积分别由界面胞元数目和除液相胞以外的胞元数目比值  $f$  来近似。同时, 为避免不同凝固结束时间对计算结果的影响, 所有数据采用  $f/f_0$  的相对数值, 其中  $f_0$  为不施加扰动时的数目比。

图 5-10 是在不同过冷度下枝晶的分枝发达程度随扰动波长和振幅变化的计算结果。为便于比较, 所有计算的结束时间  $t_0=0.08$  秒, 只有在其中  $\Delta T=5\text{K}$  时, 由于枝晶的分枝不够明显, 为使其充分发展将  $t_0$  延长到了 0.12 秒。由图 5-10 可以看出, 当保持扰动振幅  $A=0.03$  不变, 而改变扰动波长  $\lambda$  时, 枝晶的分枝发达程度在不同过冷度下均表现出随着扰动波长的增加而达到峰值, 随后又逐渐衰减。同时还可以发现, 随着过冷度的增大, 峰值点出现后移的趋势, 也即对应的扰动波长变小; 此外, 随着过冷度的增大, 分枝程度也明显加剧。

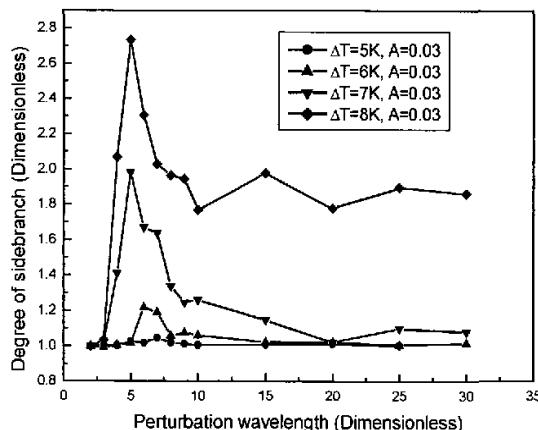


图 5-10 不同过冷度下枝晶分枝程度随扰动波长的变化

Fig. 5-10 Degree of sidebranch with the variation of perturbation wavelength

图 5-11 则对  $\Delta T=5\text{K}$  和  $\Delta T=7\text{K}$  条件下分枝程度随波长变化的变化规律在两组不同的振幅水平下进行了计算, 通过与图 5-10 的比较可以看出, 振幅的增加只是增加分枝的发达程度, 而不改变峰值点对应的波长位置。图 5-12 则给出了  $\Delta T=7\text{K}$  时, 在不同扰动波长  $\lambda$  下模拟得到的枝晶分枝形貌, 可以比较直观地看到随着  $\lambda$  的增加, 分枝程度先加剧, 而后又减弱。

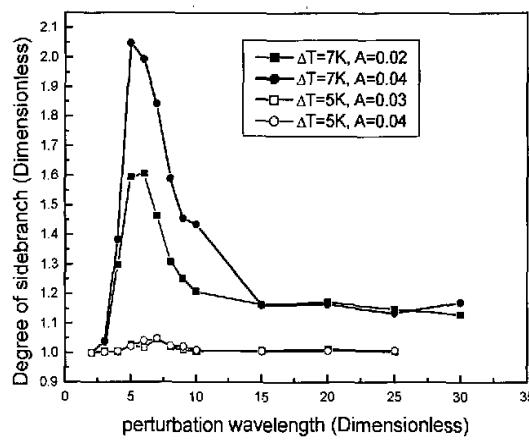


图 5-11 不同过冷度下枝晶分枝程度随扰动波长的变化

Fig. 5-11 Degree of sidebranch with the variation of perturbation amplitude

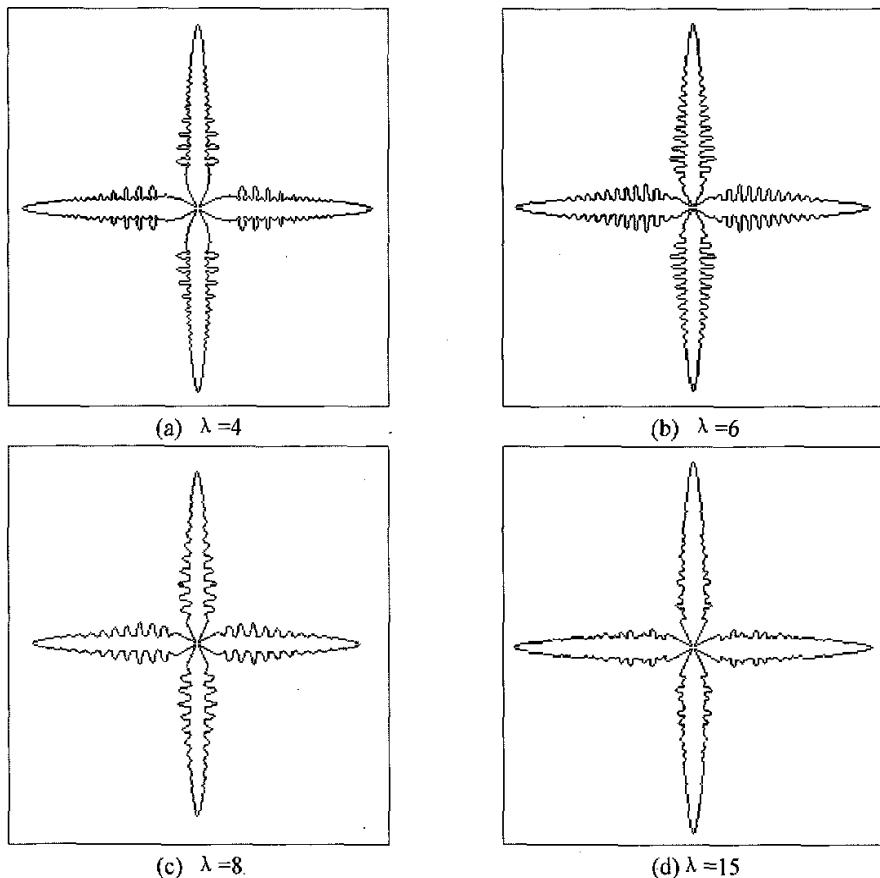
图 5-12  $\Delta T=7K$  下枝晶的分枝形貌随扰动波长的变化

Fig. 5-12 Evolution of sidebranch with the variation of perturbation wavelength at the undercooling 7K

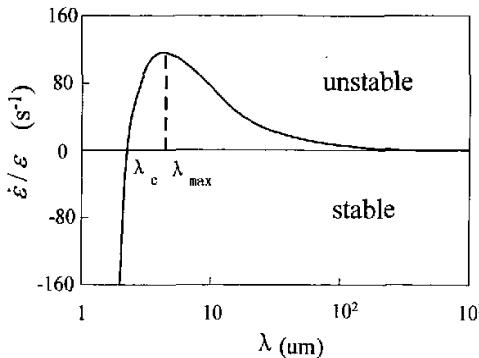


图 5-13 界面稳定性理论对单位扰动振幅随时间的变化率与正弦扰动波长关系的计算结果<sup>[8]</sup>

Fig. 5-13 The relationship between rate of development of perturbation and wavelength of sinusoidal perturbation at the interface

(图中  $\epsilon$  为正弦扰动的振幅,  $\dot{\epsilon} = d\epsilon/dt$ , 计算条件为 Al-2%Cu 合金,  $V=0.1\text{mm/s}$ ,  $G=10\text{K/mm}$ )

如图 5-13 所示, 凝固理论对于界面稳定性的分析表明<sup>[12]</sup>, 界面上实际存在的扰动能否发展起来并不取决于扰动振幅的大小, 而主要由扰动波长  $\lambda$  决定。当  $\lambda$  大于临界波长  $\lambda_c$  时, 扰动的单位振幅会随时间按指数增加; 当波长增加到  $\lambda_{\max}$  时, 单位振幅的增长率达到最大, 也即这种扰动对界面稳定性的威胁最大, 其对应频率  $\omega_{\max}$  称为危险频率; 当波长继续增加时, 扰动振幅又会由于溶质沿界面的长程扩散不足而衰减。这意味着枝晶分枝的发达程度会随扰动波长的变化而出现临界点和峰值点。对照图 5-10、图 5-11 的计算结果和图 5-12 模拟得到的枝晶形貌可以很清楚地看到这一点。

此外, 根据理论推导<sup>[13]</sup>  $\lambda_c = 2\pi(l_B d_0)^{1/2}$ , 其中  $l_B = D/V$  代表扩散特征长度,  $d_0 = T' \Delta T_0$  代表毛细长度。当其它条件不变而过冷度增大时, LGK 理论模型<sup>[14]</sup>的推导表明枝晶尖端的生长速度会随之增大, 从而使  $\lambda_c$  变小。这意味着界面上存在的一系列扰动可能在更小的波长下发展起来, 或者说界面更容易失稳, 这与图 5-10 随着过冷增大峰值后移的模拟结果是一致的。由于  $\lambda_c$  的大小与振幅无关, 所以改变扰动振幅并不造成峰值后移, 而只是对扰动的剧烈程度有影响。

## 5.4 界面能效应

在 2.1 节对枝晶生长理论的叙述中, 我们已经提到界面能枝晶生长的过程中起着重要作用。过冷造成的溶质扩散和热扩散总是使界面失稳, 而界面能则作为一种使得界面稳定化的因素存在。如果没有界面能, 界面上任何微小的扰动都会发展起来从而使枝晶不断分枝变细。除此之外, 根据 MSC 理论, 界面能的各向异性也是一个很重要的因素。从 (2.28) 式中我们可以看到, 当考虑了界面能的各向异性后, 枝晶生长界面实际上已经不是一个等温面, 这会对其周围的溶质场和温度场产生影响, 从而造成枝晶不同的生长位向。对于界面能的这两个效应, 本文也进行了模拟。

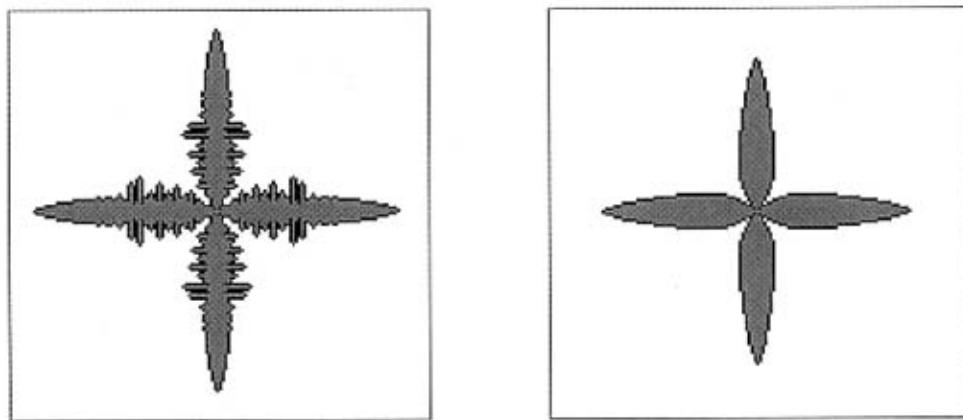


图 5-14 界面能的稳定效应

Fig. 5-14 Stabilizing effect of interfacial energy

图 5-14 是在  $\Delta x=1\mu\text{m}$ ,  $\Delta T=6\text{K}$  的计算条件下对枝晶形貌的模拟。图 5-14a 在计算中未考虑界面能造成的曲率过冷, 而图 5-14b 则考虑了曲率过冷。由于计算中未施加任何额外的界面扰动, 因此, 分枝的产生只能来自于数值计算的过程中舍入误差产生的微小扰动。在有界面能存在的情况下, 如图 5-14b 所示, 这种扰动完全被抑制, 因而枝晶以光滑的界面生长, 而无界面能存在时, 即使这样微小的数值计算扰动也会很快发展起来, 使枝晶生长界面出现分枝, 如图 5-14a 所示。

图 5-15 给出了在  $\Delta x=0.5\mu\text{m}$ ,  $\Delta T=3\text{K}$  的模拟条件下界面能各向异性对枝晶生长位向的影响, 在 (2.28) 式中设定不同的初始位向后, 枝晶的生长便表现出方向性。

但需要说明的是, 这种界面能各向异性的模拟在很大程度上受到了网格各向性的影响。由于模拟采用的是正方形的网格, 并且在使用 CA 方法时只考虑了 Von Neumann 邻域关系所定义的四个最近邻胞元, 这就不可避免地带来了网格各向异性。随着网格尺寸和生长速度的增大, 这种网格各向异性会很快抑制界面能各向异性使枝晶仍然按照网格的方向进行生长, 这一问题在本模型中尚未得到妥善解决。



图 5-15 界面能各向异性对枝晶生长位向的影响

Fig. 5-15 The effect of interfacial energy anisotropy on the orientation of dendritic growth

## 5.5 本章小结

(1) 本章首先对枝晶生长模型的溶质守恒进行了验证。验证方法是在设置零通量的边界条件下, 对整个区域所有胞元平均成分随时间的变化计算计算。验证结果表明采用本文第二章中提出的溶质再分配办法能够严格地保证溶质守恒。而将界面胞元的液相成分始终视为平衡液相成分, 并以此计算生成的固相成分和需要排出的多余溶质时, 将可能造成溶质不守恒的情况。

(2) 在保证溶质守恒的前提下, 模拟了枝晶在不同过冷度下稳态生长时形貌的演变, 以及沿枝晶主干中心线方向的成分分布。这一成分分布表明枝晶初期的生长速度较快, 界面前沿的液相成分不断升高, 经过短暂的过渡段之后, 界面前沿的液相成分和成分梯度都基本保持不变, 尖端速度趋于稳定。

(3) 在不同过冷度下, 分别采用不同的胞元尺寸对枝晶尖端的稳态生长速度进行了模拟计算, 并与  $G=0$  条件下的 KGT 模型理论值进行了比较。计算结果表明, 在不同胞元尺寸和过冷度下, 枝晶都能够达到稳态生长, 其中在  $\Delta x=0.5 \mu m$  的网格尺寸下的计算值与理论值吻合较好。同时, 本文第二章提出通过排出溶质计算固相增量的方法要比通过界面速度计算固相增量的方法更接近理论值。

(4) 通过在界面上施加随机扰动模拟了枝晶的分枝形貌和竞争生长, 模拟结果与实际枝晶组织和其它数值模拟方法得到的结果类似。

(5) 通过在界面上施加给定振幅和波长的正弦扰动, 分别研究了在不同过冷度下扰动振幅和扰动波长对分枝程度的影响。研究结果表明枝晶的分枝程度随扰动波长的增加会出现一个峰值, 而峰值对应的扰动波长则随过冷度的增大而减小, 振幅的变化仅仅改变峰值的大小而不影响峰值对应的波长。

(6) 模拟了在不考虑曲率过冷和考虑曲率过冷的条件下枝晶的生长形貌, 验证了界面能对于枝晶生长界面的稳定作用。模拟了界面能各向异性对枝晶生长位向的影响, 并指出了本模型中目前尚未妥善解决的问题, 即网格各向异性对界面能各向异性的影响。

## 第六章 晶粒组织模拟

本文建立的枝晶生长模型不仅可以模拟单个枝晶在过冷熔体中的生长行为，而且可以进行扩展，用来模拟由多个晶粒组成的，在连续冷却和非均匀温度场条件下的凝固的晶粒组织。本章将利用这一枝晶生长模型来模拟定向凝固组织和铸件正常凝固时的典型晶区组织。

### 6.1 定向凝固组织

在过冷熔体中生长的枝晶，其生长行为主要受到过冷度的控制。而在定向凝固条件下枝晶的生长行为则受到温度梯度  $G$  和凝固速率  $V$  的共同影响。尽管如此，本文的枝晶生长模型稍做改动便可用来模拟定向凝固的晶粒组织。以下首先对模拟方法进行说明。

在基本模型的胞元信息变量中添加温度  $T$ ，初始时刻在计算区域的底部边界处放置若干作为生长种子的小晶体，并将底部边界的温度设置为液相线温度  $T_L$ ，其余各处的胞元温度可按照  $T_L$  和给定的温度梯度进行设定。计算开始后，令整个计算区域以  $\dot{T}$  的冷却速度降温，这就意味着枝晶将在温度梯度  $G$  和凝固速率  $V = \dot{T}/G_L$  的控制下生长。在这样的给定条件下，界面胞元将在  $\Delta T = T_L - T$  的过冷度下按照基本模型的处理方法生长。所不同的是，由于熔体已不再处于等温状态，界面胞元的液相邻胞可能并不总是处于过冷状态，所以在进行胞元捕获和状态转变时还需要根据液相胞元的实际温度  $T$  以及其成分  $C$  决定的液相线温度  $T_L(C)$  来判定是否处于过冷状态，只有过冷的液相邻胞才将被捕获。这一过程如图 4-11b 所示。计算仍然采用了表 5-1 中的合金参数，但为了能在相对较短的计算时间内得到比较完整的定向凝固组织，采用了  $\Delta x = 10 \mu\text{m}$  的网格从而使时间步长也可以相应增大。

#### 6.1.1 典型界面形貌

图 6-1 是初始时刻在计算区域的底部放置了两个种子后，在不同的  $G$  和  $V$  组合之下得到的三种典型的界面形貌。表 6-1 给出了对应与图 6-1 的模拟条件和模拟结果。此外，表 6-1 中还根据经典凝固理论中的成分过冷判据<sup>[12]</sup>对模拟参数和模拟结果进行了比较计算。

从表中的计算可以看出，要维持平界面的稳定性， $G/V$  值应大于  $2.2 \times 10^{10} \text{ K} \cdot \text{s} \cdot \text{m}^{-2}$ 。但严格的动力学理论已经指出，这一判据实际上并没有考虑到界面能、结晶潜热以及固

液界面的溶质扩散对平界面稳定做出的贡献<sup>[9]</sup>，而模拟计算采用的枝晶生长模型由于考虑到了界面能的作用，因此在  $G/V$  值略小于成分过冷判据给出的临界值时，就已经获得平界面。当保持平界面模拟时的温度梯度值而增大凝固速度，使  $G/V$  的模拟值比理论临界值小了一个数量级后，得到了胞状界面。而保持胞状界面模拟时的生长速度，减小温度梯度使  $G/V$  的模拟值与理论临界值小了两个数量级后，胞状界面就转为枝晶界面。

表 6-1 定向凝固条件下的典型界面形貌模拟

Table 6-1 Simulation on typical interfacial morphology during directional solidification

模拟条件 / 模拟结果	图 6-1a	图 6-1b	图 6-1c
$G$ (K/m)	$1 \times 10^5$	$1 \times 10^5$	$2.5 \times 10^4$
$\dot{T}$ (K/s)	8	1	8
$V$ (m/s)	$8 \times 10^{-5}$	$1 \times 10^{-5}$	$3.2 \times 10^{-4}$
$G/V$ (K·s·m <sup>-2</sup> )	$1.25 \times 10^9$	$1 \times 10^{10}$	$7.8 \times 10^8$
$\frac{ m_L C_0(1-k_0)}{D_L k_0}$	$2.2 \times 10^{10}$ K·s·m <sup>-2</sup>		
界面形貌	胞状	平界面	枝晶

从图 6-1 不同时刻界面形貌的演化中可以看到，在凝固初期  $t=2s$  时，计算区域底部预先放置的两个种子逐渐开始长大，但由于平界面前沿的温度梯度很大，因此枝晶无法向上生长，几乎只能以平界面方式向侧边展开。而在同一时刻，胞晶和枝晶界面则不但沿侧向展开，而且生出了向上的主干。随着凝固的进行  $t=5s$  时，生长界面沿侧向逐渐展开而占满了计算区域，与此同时，沿向上的方向出现了许多分枝。当界面前沿的过冷度比较大的时候，这些分枝上就又会产生高次分枝因而使界面以枝晶状生长，如图 6-1c 所示，而当过冷度较小时则不足以产生更多高次分枝，因而得到图 6-1a 的胞状界面。

从图中还可以看到，尽管最初只有两个晶核，根据计算条件这意味着初始一次臂间距大约为  $33\mu\text{m}$ ，但在改变  $G$  和  $V$  后，枝晶/胞晶的一次臂间距却发生了不同的变化。这些稳定发展的一次臂都来源于最初两个晶核的侧枝，但生长过程中，这些侧枝上又出现高次侧枝，有的侧枝被高次侧枝阻挡，因此无法继续生长，而有的侧枝则能够继续生长并得以发展。经过一段时间，在一定的生长条件下最终形成了相对稳定的一次臂间距。为此，本文进一步模拟了不同定向凝固工艺参数对一次臂间距的影响。

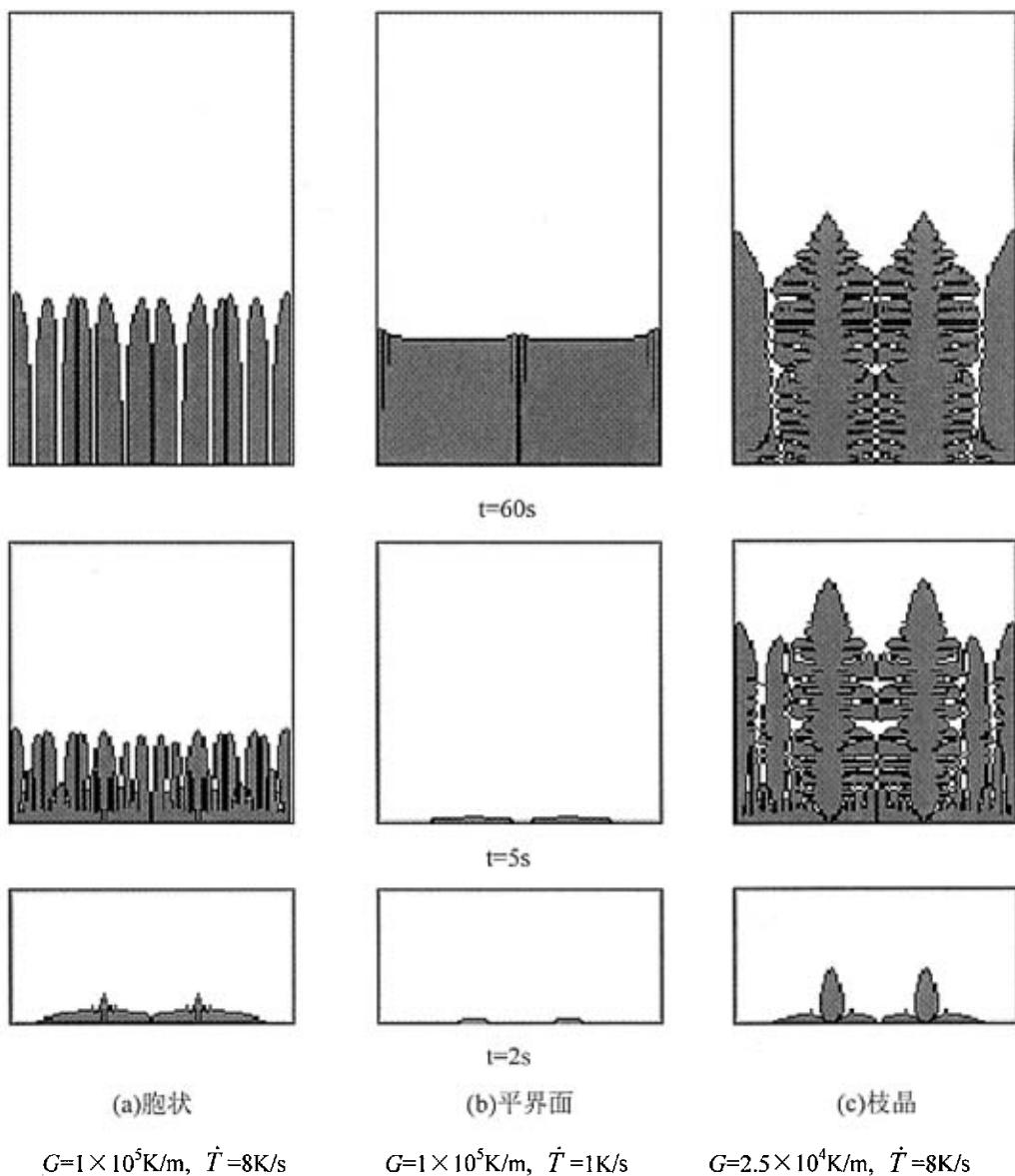


图 6-1 定向凝固时的典型界面形貌

Fig. 6-1 Typical interface morphology during directional solidification

### 6.1.2 一次臂间距

在 2.2 节本文已经提到枝晶的一次臂间距在生长过程中会随着生长条件的改变而通过分枝和淹没机制来自发调节，并且理论推导得到的结果认为  $\lambda_1 \propto G^{-0.5} V^{-0.25}$ 。为此，本文在保持  $G$  不变的条件下改变  $V$  得到了图 6-2 的模拟结果，由图中可以看出，当  $V$  逐渐增大时，枝晶的一次臂间距  $\lambda_1$  变小。在保持  $V$  不变而改变  $G$  的条件下也得到了类似的结果，即随着  $G$  的增大  $\lambda_1$  减小，如图 6-3 所示。从图 6-2a 和图 6-3b 中还可以看

到枝晶二次臂的粗化效应，在靠近尖端处，二次臂间距比较小，而随着凝固的进行，根部附近的二次臂变粗，二次臂间距也相应增大。

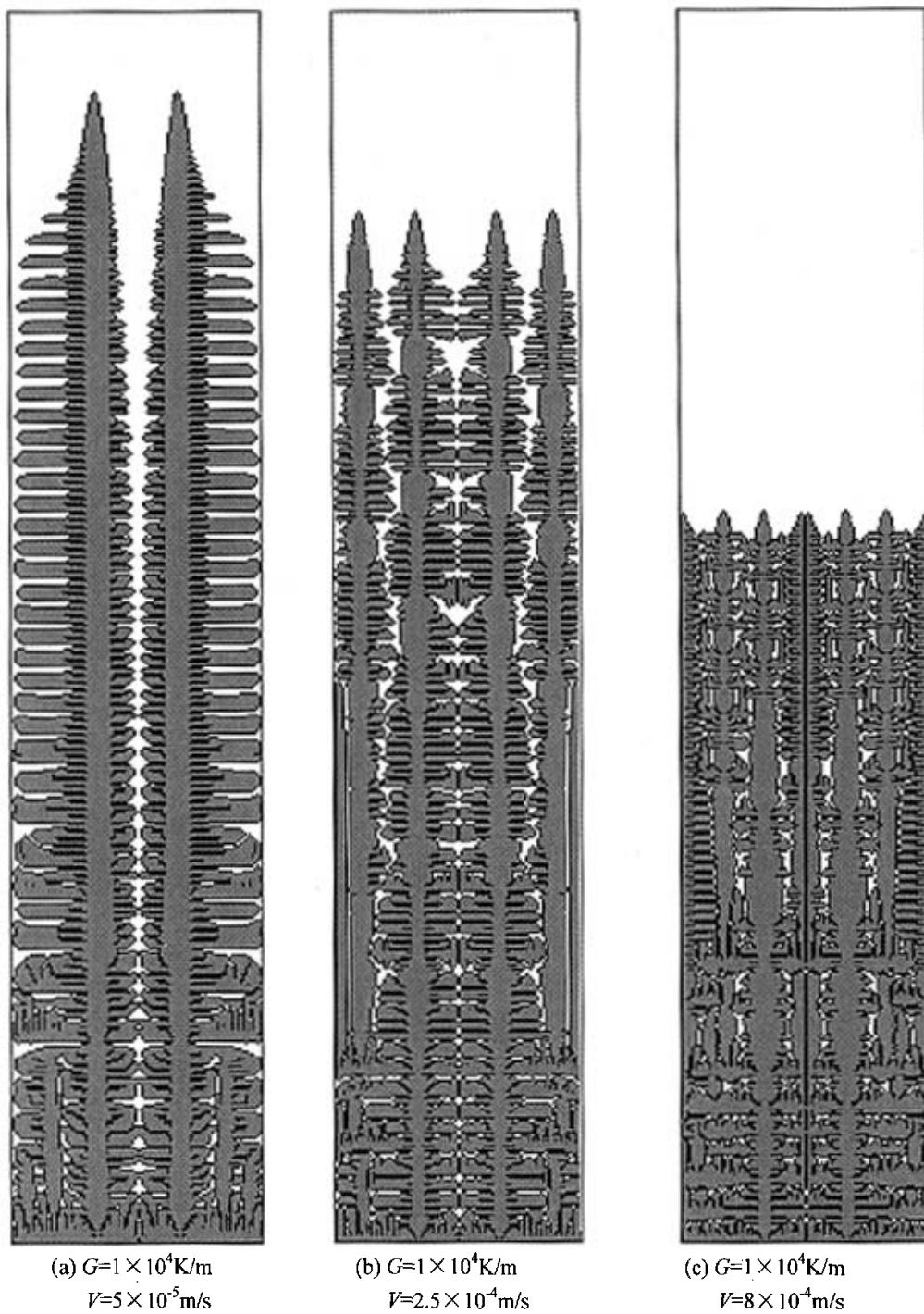


图 6-2 不同凝固速度下定向生长组织

Fig. 6-2 Microstructure during directional solidification with different solidification rate

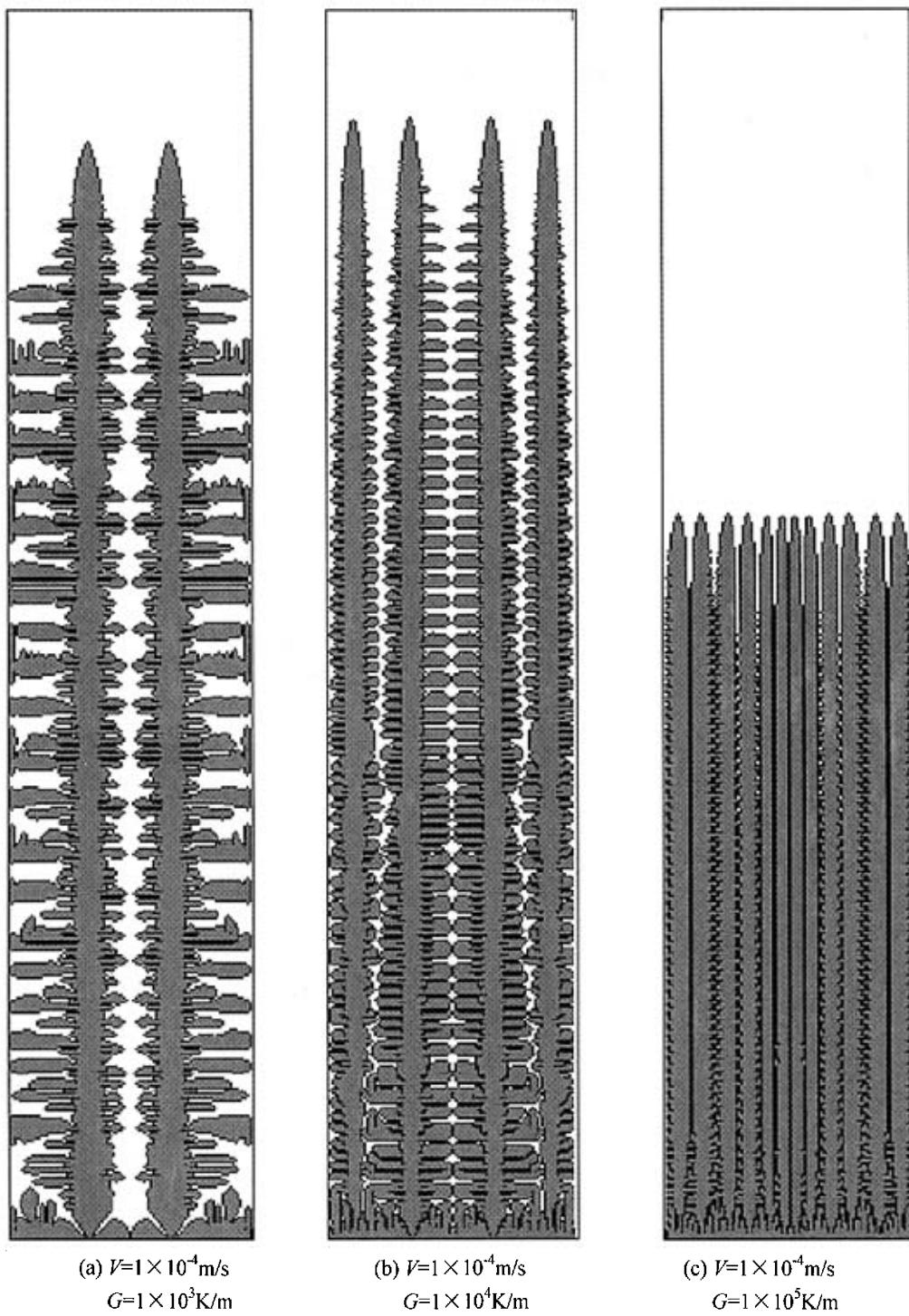


图 6-3 不同温度梯度下定向生长组织

Fig. 6-3 Microstructure during directional solidification with different temperature gradient

表 6-2 给出了对应于图 6-2 和图 6-3 的计算条件和模拟得到的  $\lambda_1$  值。图 6-4 和图 6-5 是根据表 6-2 绘制的  $V^{0.25}-\lambda_1$  和  $G^{0.5}-\lambda_1$  图, 从中可以看到模拟结果与理论预测基本吻合。

表 6-2 定向凝固参数对一次臂间距的影响

Table 6-2 The effects of parameters during directional solidification on the primary spacing

模拟条件 件模拟结果	$G(\text{K/m})$	$\dot{T}(\text{K/s})$	$V(\text{m/s})$	$\lambda_1(\mu\text{m})$
Fig. 6-13(a)	$1 \times 10^4$	0.5	$5 \times 10^{-5}$	33.3
Fig. 6-13(b)	$1 \times 10^4$	2.5	$2.5 \times 10^{-4}$	26.7
Fig. 6-13(c)	$1 \times 10^4$	8	$8 \times 10^{-4}$	16.7
Fig. 6-14(a)	$1 \times 10^3$	0.1	$1 \times 10^{-4}$	33.3
Fig. 6-14(b)	$1 \times 10^4$	1	$1 \times 10^{-4}$	26.7
Fig. 6-14(c)	$1 \times 10^5$	10	$1 \times 10^{-4}$	8.2

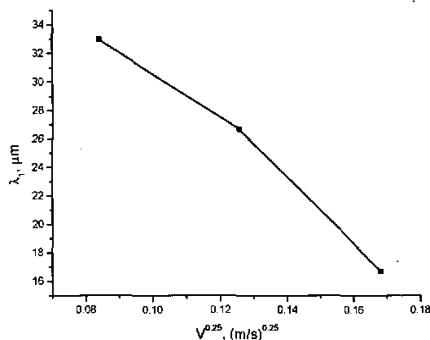


图 6-4 凝固速度对一次臂间距的影响

Fig. 6-4 The effect of solidification rate on primary arm spacing

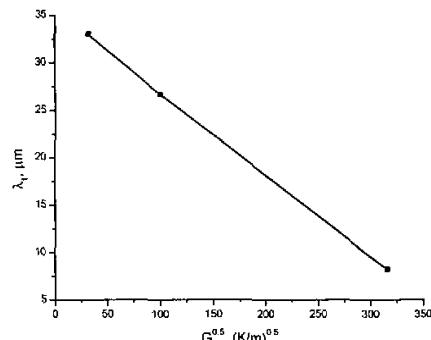


图 6-5 温度梯度对一次臂间距的影响

Fig. 6-5 The effect of temperature gradient on primary arm spacing

## 6.2 正常凝固晶粒组织

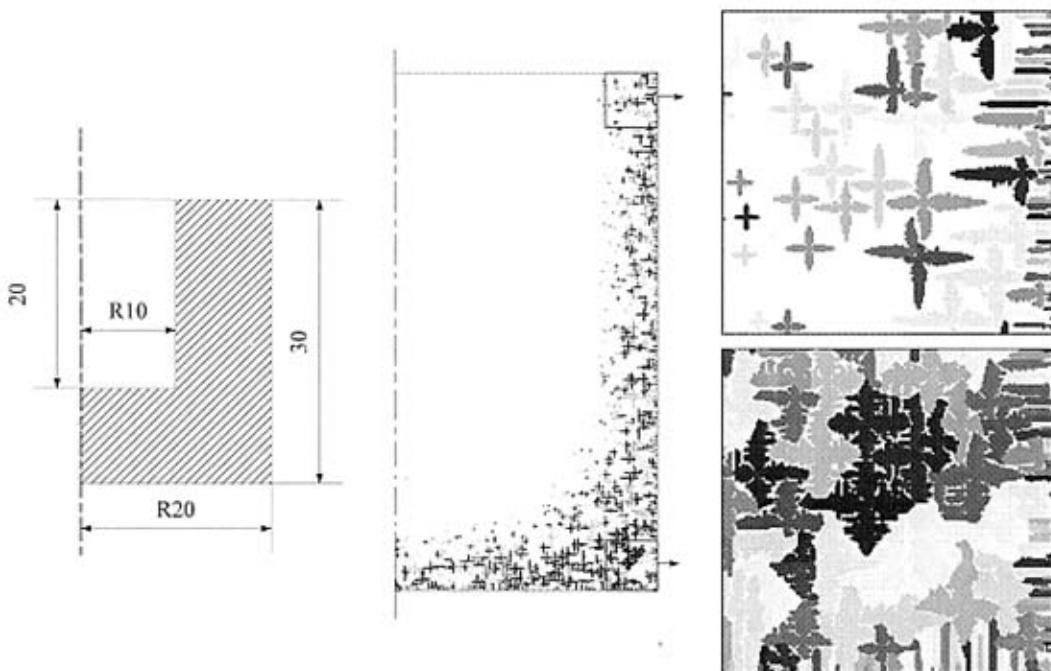
### 6.2.1 金属型凝固组织

在通常铸造条件下得到的凝固组织一般由柱状晶和等轴晶组成, 本文 4.1.1 小节已经对铸锭中典型晶区的演变和形成机理进行了理论上的分析, 本节将利用直接利用枝晶生长模型, 并结合第五章给出的形核模型和宏微观耦合算法对正常凝固条件下的晶粒组织进行模拟。考虑到传热计算的精度以及宏微观一致的时间步长, 模拟采用的单元网格为  $\Delta X=1\text{mm}$ , 胞元网格为  $\Delta x=10\mu\text{m}$ , 每个单元网格由  $100 \times 100$  个胞元网格组成。图 6-6 分别给出了铸型的尺寸以及  $t=2.45\text{s}$  时在金属型中凝固的晶粒组织图像和局部放大图。模拟采用的参数如表 6-3 所示。模拟计算采用了  $20 \times 30$  共 600 个宏观单元和  $2000 \times 1000$  共  $2 \times 10^6$  个微观胞元。

表 6-3 金属型凝固组织模拟参数

Table 6-3 Parameters used to simulate grain structure during metal mold solidification

模拟参数	符号	单位	数量
金属-铸型界面换热系数	$h_{int}$	$W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$	1500
空气对流换热系数	$h_{air}$	$W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$	80
铸件初始温度	$T_0$	K	950
环境温度	$T_f$	K	300
熔体的发射率	$\epsilon$	-	0.6
铸型密度	$\rho_M$	$kg \cdot m^{-3}$	7800
铸型导热系数	$\lambda_M$	$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$	30
铸型比热	$c_{p,M}$	$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$	580
熔体内部的形核过冷均值	$\Delta T_{N,v}$	K	6
熔体内部的形核过冷方差	$\Delta T_{o,v}$	K	0.1
熔体内部的形核基底密度	$n_{max,v}$	$m^{-3}$	$3.5 \times 10^8$
型壁的形核过冷均值	$\Delta T_{N,s}$	K	0.5
型壁的形核过冷方差	$\Delta T_{o,s}$	K	0.1
型壁的形核基底密度	$n_{max,s}$	$m^{-3}$	$5.5 \times 10^{10}$



(a) 铸型尺寸

(b)  $t=2.45s$  的凝固组织

(c) 右上角和右下角的局部放大

图 6-6 金属型凝固条件下的晶粒组织

Fig. 6-6 Grain structure solidified in metal mold

从图 6-6b 中可以看到, 凝固开始后由于型壁处的形核过冷较低, 且形核基底较多, 因此出现了密集的晶核并向内部生长。但由于金属型的冷却速度较快, 液体金属的温度很快降低, 使型壁前方的液相中也产生了大量晶核, 阻碍了型壁晶核的生长, 因此最终得到的晶粒组织将会是等轴晶。

从图 6-6c 的局部放大图中可以看到, 由于本文直接应用了枝晶生长模型来进行微观生长计算, 因此能够更好地描述晶粒的形状细节。与传统的基于晶粒外形人为假设的模拟算法相比, 本文模拟得到的晶粒组织更加真实。

但需要指出, 由于本文采用的枝晶生长模型在较大的过冷度和网格尺寸下还不能避免网格各向异性对模拟结果的影响, 因此图中虽然将不同位向的晶粒用颜色进行了标识, 但从晶粒外形来看, 并没有很好地反映晶粒的择优生长位向。

### 6.2.2 柱状—等轴转变

由于宏微观耦合的计算需要耗用相当多的内存和计算时间, 因此采用了一个较小的  $300 \times 300$  胞元的计算区域来模拟柱状—等轴转变, 胞元网格的尺寸为  $\Delta x = 5\mu\text{m}$ , 整个区域从液相线温度开始冷却。在现有的模型和模拟条件下, CET 实际上取决于型壁向内生长的柱状晶和液相金属内部形核产生的等轴晶之间的竞争生长。

图 6-7 是在保持表 6-3 的形核参数和其它工艺条件不变而只改变冷却速度时模拟得到的柱状—等轴晶转变组织。从图中可以看出, 随着冷却速度的增大, 晶粒组织呈现从柱状到等轴的转变趋势, 柱状晶区的发展受阻而等轴晶区的发展占优。这是由于冷却速度缓慢时, 型壁处产生的晶核有充分的时间向液相内部生长, 而液相中的此时还很难有晶核形成, 因此柱状晶在没有受到阻碍的情况下能够深入到液相内部较长的距离。而在冷却速度较大时, 液相内部很快产生大量晶核, 型壁处晶核没有足够的生长时间深入到液相内部便被阻挡, 当继续冷却时, 晶粒组织便以等轴晶的方式发展。

文献[79,115]中模拟了浇铸温度对晶粒组织的影响, 在较高的浇铸温度下柱状晶区比较发达, 而较低的浇铸温度则容易得到发达的等轴晶组织。这一结论虽与通常的理论分析和工艺实践一致, 但其中的原因并非传统理论中所分析的那样, 在高温浇铸时细小晶粒重熔, 而低温浇铸时脱落的晶枝被液流卷入内部后重熔比较慢因而仍然能够成为核心。因为在文献[79,115]所采用的模拟计算中实际上并没有考虑晶粒重熔的问题, 也没有考虑对流对核心数量和位置的影响, 核心密度和过冷度都是预先设定好的。在这种情况下唯一起作用的便是柱状晶和等轴晶的竞争生长。

因此模拟得到的浇铸温度对晶粒组织的影响实际上体现为冷却速度对晶粒组织的影响。高温浇铸时, 在铸件尚未冷却到液相线以下时, 铸型已经被加热了一段时间导致其冷却速度降低。因此当温度下降到液相线以下真正开始发生形核生长时, 铸型的冷却能力已经减弱, 这就造成高温浇铸下的有效冷却速度实际上低于低温浇铸下的有效冷却速度, 因而使柱状晶的生长相对呈现优势。

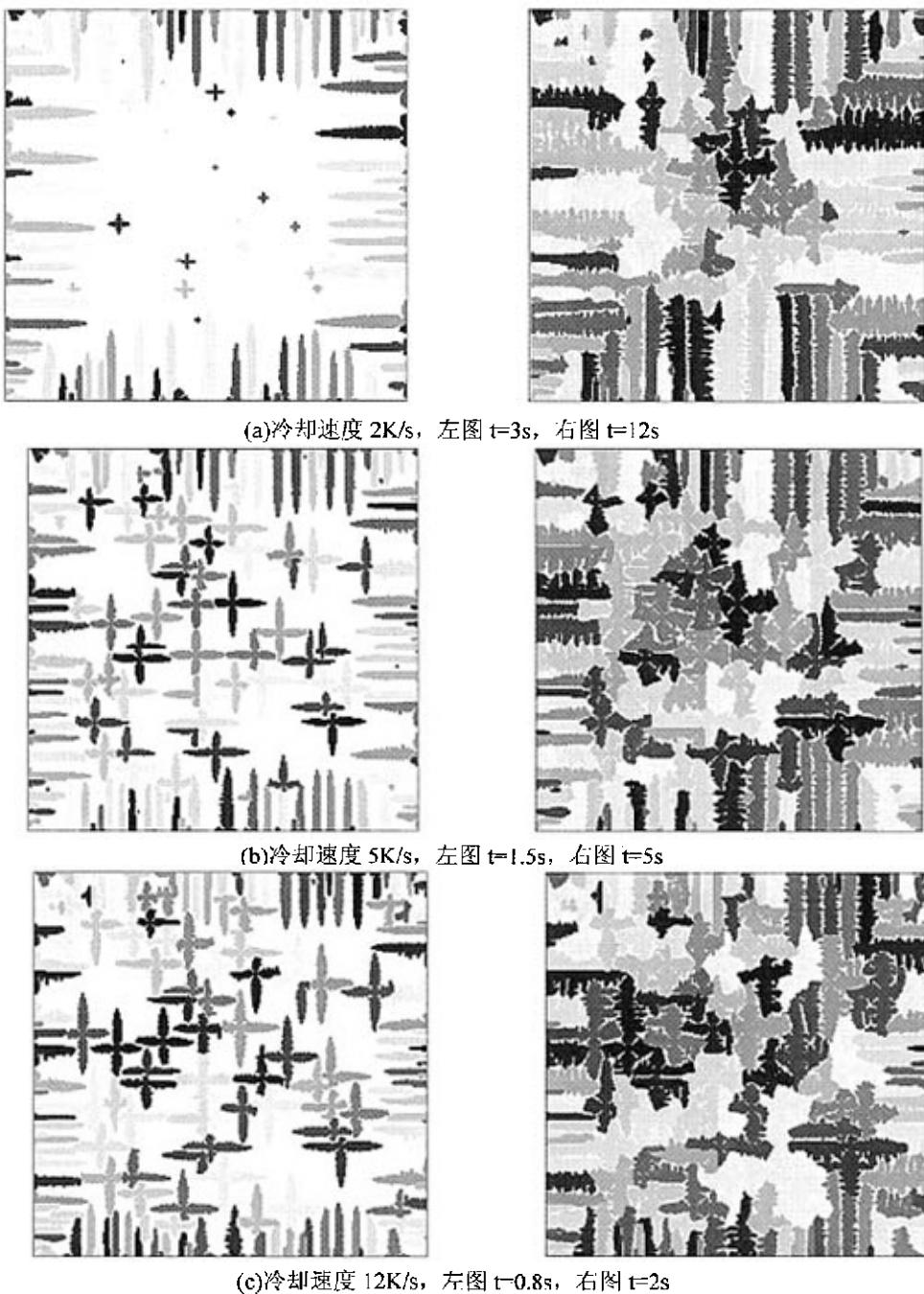


图 6-7 冷却速度对晶粒组织的影响

Fig. 6-7 The effects of cooling rate on the grain structure

图 6-8 的模拟条件与图 6-7b 基本相同, 只是从计算区域的四壁到内部中心施加了  $G=10^4\text{K/m}$  的正温度梯度。通过与图 6-7b 的比较就可以看出, 在施加温度梯度后柱状晶区的发展显然得到了加强。这说明除低的冷却速度外, 正的温度梯度也是有利于柱状晶发展的竞争优势。

根据这一结果，并从界面处的热平衡关系式  $\lambda_s G_s = V \rho L + \lambda_L G_L$  中可以知道，当合金的液相导热系数  $\lambda_L$  较小时，界面前沿的温度梯度  $G_L$  比较大，因此有利于形成柱状晶。而当铸件表层刚刚形成时， $G_s$  比较大，因此这时也最容易形成柱状晶。此外，在实际的工艺还曾采用将铸型加热到很高的温度并迅速取出在底部激冷的措施来保证液体金属中能够有足够的温度梯度，从而获得单向生长的柱状组织。



图 6-8 冷却速度 5K/s，温度梯度  $10^4\text{K/m}$  时的晶粒组织，左图  $t=2\text{s}$ ，右图  $t=5\text{s}$

Fig. 6-8 Grain structure with cooling rate 5K/s and temperature gradient  $10^4\text{K/m}$

除改变晶粒的生长条件外，改变晶粒的形核条件也会对 CET 产生影响。在模拟中，形核条件的改变可以通过形核参数的变化来实现。图 6-9 是在其它模拟参数与图 6-7b 相同的条件下，将内部形核基底密度由  $5.5 \times 10^{10}\text{m}^{-3}$  提高到了  $8.5 \times 10^{10}\text{m}^{-3}$ ，并且内部形核过冷均值  $\Delta T_{N,v}$  由 6K 降到了 3K 后模拟得到的结果。与这样的参数变化相对应的工艺包括添加形核剂、孕育处理等增强形核能力的措施。从图 6-9 与图 6-7b 的对比来看，在同样的冷却条件下，图 6-9 中已经看不出明显的柱状晶区，晶粒尺寸也比图 6-7b 小，整个晶粒组织几乎完全由细小的等轴晶组成。显然，形核因素在晶粒组织的形成中起着重要作用。



图 6-9 冷却速度 5K/s， $n_{max,v}=8.5 \times 10^{10}\text{m}^{-3}$ ， $\Delta T_{N,v}=3\text{K}$  时的晶粒组织，左图  $t=1.5\text{s}$ ，右图  $t=5\text{s}$

Fig. 6-9 Grain structure with cooling rate 5K/s and  $n_{max,v}=8.5 \times 10^{10}\text{m}^{-3}$ ， $\Delta T_{N,v}=3\text{K}$

图 6-11 是根据图 6-7 的模拟条件计算得到的固相份数随温度的变化情况。从图中可以看出, 曲线的前半段, 固相份数的变化偏离了 Sheil 方程的预测, 总体上滞后。但固相份数随温度的变化率逐渐增加, 尤其在液相过冷度到达形核模型所设定的形核过冷均值后, 由于液相内部大量形核使得固相份数迅速增加。而在曲线的后半段, 固相份数随温度的变化率减小, 曲线出现拐点, 固相份数基本按照 Sheil 方程的规律变化。

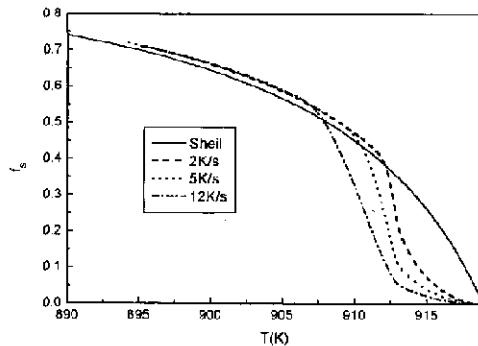


图 6-10 不同冷却速度下固相份数随温度的变化

Fig. 6-10 The variation of solid fraction with temperature at different cooling rate

显然, 这说明在凝固前后期, 引起固相份数增加的机制是不同的。前期固相份数的增加主要依靠新核心的产生和晶粒因生长而造成的外形尺寸变化。而后期则已经不再有新核的产生, 并且晶粒的外形尺寸也不再有明显的变化, 此时固相份数的增加主要以扩散主导的枝晶臂粗化为主。由于 Sheil 方程仅仅从扩散和生长的角度推导得到, 并未考虑实际的凝固过程中形核因素, 因此很难体现形核对固相份数增加做出的贡献, 这就造成了模拟曲线前半段和 Sheil 方程的偏差。

图 6-11 给出了图 6-10 中 2K/s 和 5K/s 两条曲线在拐点附近的溶质场分布。从图中可以看到大致在曲线拐点附近, 进入粗化生长阶段后, CET 的位置和晶粒尺寸大小就已经基本可以确定了, 此后固相份数的增加已经不再对 CET 有影响。

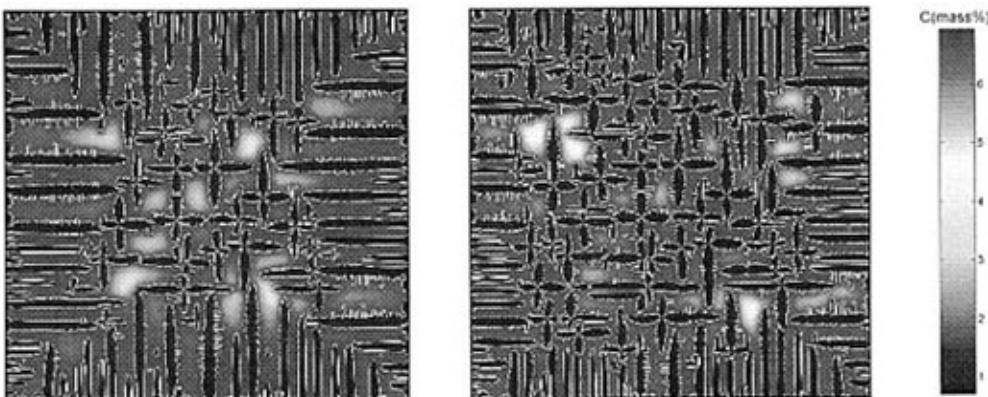


图 6-11 晶粒组织的溶质场, 左图为 2K/s, 右图为 5K/s

Fig. 6-11 Concentration field of grain structure

这意味着 CET 实际上并不是如 Hunt 模型<sup>[16]</sup>中所假定的那样因为柱状晶的生长被前方等轴晶体积堵塞的结果，而是在此之前就因为溶质场的交叠所致。这一分析与 Martorano 等人<sup>[52]</sup>对 CET 中溶质交互作用的模拟结果类似。由此看来，尽管 Hunt 模型抓住了 CET 中柱状晶和等轴晶的竞争生长这一本质，但准确的 CET 的模型还有待进一步发展。

### 6.3 本章小结

(1) 将过冷熔体中枝晶生长的基本模型进行了扩展，通过施加不同的温度梯度和冷却速度模拟了定向凝固条件下的晶粒组织，包括平界面、胞状和枝晶三种典型的界面形貌，一次臂间距的分枝与调整机制，以及二次臂的粗化。

(2) 采用过冷熔体中枝晶生长的基本模型，并结合宏观传热计算和基于正态分布的形核模型，对金属型中正常凝固条件下的晶粒组织进行了模拟。

(3) 在相对较小的区域内，通过改变冷却速度、温度梯度、形核参数等工艺参数，模拟了晶粒组织中的柱状—等轴转变，讨论了这些因素对柱状晶和等轴晶之间竞争生长的影响。

(4) 在凝固过程中不同阶段，引起固相份数增加的机制不同。凝固初期固相份数的增加主要由新核的形成和晶粒外形的长大引起，凝固后期固相份数的增加主要依靠枝晶臂的粗化。

## 第七章 总结与展望

### 7.1 总结

本文对微观组织模拟的研究进展与现状进行了系统的评述,对各种微观模拟方法的特点和应用背景进行了分析,并在前人研究的基础上,采用胞元自动机方法将枝晶生长模拟和晶粒组织的模拟进行了整合,开发了相应的模拟程序对枝晶生长和晶粒组织的演变进行了模拟计算。本文的主要研究工作总结如下:

(1) 提出了基于溶质扩散控制的枝晶生长数值模型与算法。这一模型综合考虑了成分过冷、曲率过冷、界面能各向异性以及界面扰动等影响枝晶生长的主要因素,并采用胞元自动机方法将固液界面两侧的锐变转化为界面胞元固相份数的渐变。这一方法既坚持以尖锐界面模型为基础,同时又避免了跟踪复杂的固液界面。

(2) 对于界面胞元固相份数增量的计算,本文提出了两种方法。一种方法通过线性分段的思想由界面法向量和固相份数进行界面重建,并通过计算界面沿法线方向移动扫过的面积来获得固相增量。另一种方法则避免直接求解界面速度和进行界面重建,而是通过界面胞元和液相邻胞的溶质扩散来获得固相增量。两种方法都能够较好地模拟枝晶生长。

(3) 对于枝晶生长过程中溶质场的计算及溶质再分配问题,本文避免了处理多相组成的胞元之间复杂的扩散关系,而是将界面胞元和液相胞元分开处理,并合理地解决了以往的研究中处理界面胞生长中的溶质扩散和再分配时存在的问题。在严格保证溶质守恒的前提下,采用简单而合理的方法体现出了溶质再分配的关键要素。

(4) 应用这一枝晶生长的基本模型编写了相应的模拟程序,对过冷熔体中枝晶的稳态生长行为进行了模拟计算。计算表明在不同过冷度下,枝晶尖端速度均表现出趋于稳定的态势,并且枝晶尖端生长速度与过冷度的关系和 KGT 理论模型的计算值取得较好的一致。

(5) 通过在界面上施加扰动模拟了枝晶的分枝机制及侧枝的竞争生长,并研究了扰动波长和振幅对枝晶分枝发达程度的影响。研究表明在不同过冷度下,枝晶的分枝程度都会随扰动波长的增加而增加,到达峰值后又逐渐衰减;随着过冷度的增加,峰值点也逐渐升高,而峰值对应的波长则逐渐减小;扰动振幅的增加会使峰值升高,但不改变峰值波长的位置。这一结果与界面稳定性理论的分析一致。

(6) 将过冷熔体中的枝晶生长模型进行了扩展并应用到了定向凝固组织的模拟中。模拟了定向凝固条件下在不同温度梯度和凝固速度的组合下出现的平界面、胞状和枝晶三种典型的界面形貌。通过改变定向生长中的控制参数模拟了枝晶定向生长中一次臂的

分枝与自我调整机制，并研究了温度梯度和凝固速度对一次臂间距的影响。模拟计算的结果与一次臂的理论模型预测基本一致。

(7) 将这一枝晶生长模型与基于正态分布的形核模型相结合，直接应用到了晶粒组织的模拟中去。这一方法避免了传统的晶粒组织模拟中通过假定晶粒外形为简单形状来进行捕获的处理方法，使得胞元自动机方法在枝晶生长模拟和晶粒组织模拟的层面上得到了统一。

(8) 通过施加不同的冷却速度和温度梯度和形核参数，模拟了晶粒组织中等轴晶和柱状晶的竞争生长。模拟结果表明低冷却速度和正的温度梯度有利于柱状晶区的发展。高温浇铸导致柱状晶区发达的部分原因在于铸型被加热从而使凝固过程中的实际冷却速度较低温浇铸时要小，因此对于柱状晶的生长更为有利。而形核能力的增强则有利于等轴晶区的发展。

(9) 对凝固过程中固相份数的变化规律的模拟计算表明，在凝固前后期引起固相份数增加的机制不同。前期固相份数的增加主要因为晶粒大量形核和生长造成的晶粒尺寸变化，后期则是由扩散控制的枝晶臂粗化造成固相份数的增加。

## 7.1 展望

从根本上说，微观组织模拟研究涉及到三个方面的问题：形核、生长和宏微观的耦合。从近十几年微观组织模拟的发展来看，尽管研究者提出了许多的方法和模型来解决这三个方面的问题，并取得了一定的成功，但目前看来微观组织模拟还有待进一步的发展和完善。

首先，形核问题仍然没有得到很好的解决。这一问题的难度主要在于现有凝固理论对于异质形核机理还并不是很清楚，对于晶核将会在何种条件下，何处形成，其数量和位置又会随时间发生怎样的变化，目前的形核理论也并不能给出很好地回答。因此在晶粒组织模拟中，形核模型的建立往往只能依赖于经验。在已有的各种形核模型中，Rappaz 等人提出的基于正态分布的准瞬时形核模型相对合理，并且有较多的可调参数来适应不同的工艺条件，因此在模拟中被广泛采用。但为了得到准确的晶粒尺寸预测结果往往需要用实验来校正形核参数，这使得模拟结果只有在确定的实验条件下才准确。这限制了微观组织模拟的实用性和可靠性。

其次，对于晶核形成之后的生长，目前在晶粒组织模拟中常常将晶粒的外形轮廓简化，并通过尖端的生长动力学来确定整个晶粒的外形。这种方法虽然取得了成功，但总带有人为的痕迹，而且无法描述枝晶的复杂外形和细节。相场方法采用的是可以描述枝晶复杂界面的更为准确的生长动力学模型，但由于相场模型本身对于界面厚度的限制，用相场方法来模拟晶粒组织的形成目前看来还不可能。本文的研究也是试图采用 CA 方法将更为准确的枝晶生长动力学模型嵌入到晶粒组织的模拟中去，但这种方法还有待进

一步改进。

第三，对于宏微观耦合的三种基本方法本文已经在第五章进行了详细的说明。在这一方面的突出的问题主要是完全耦合需要花费大量的计算时间，而不完全的耦合则不能充分体现微观组织转变对宏观传热的影响，从而影响计算的准确性。

对于枝晶生长的模拟来说，尽管近年来大多数关于枝晶生长模拟的研究都使用了相场方法，并且相场模型和算法都有了进一步完善和改进，但相场模型复杂的物理背景和相场模拟所需要的计算资源和计算量都限制了它的工程应用价值。本文采用的 CA 方法虽然在枝晶生长模拟和晶粒组织上都显示了适应性，但还存在着许多有待改进的地方。

首先，数学物理模型需要完善。与相场法相比，目前的 CA 方法没有考虑枝晶生长的动力学因素，对于大过冷度下的高速生长和动力学各向异性明显的合金体系，现有的模型就不足以描述影响枝晶生长的主要物理机制。此外，在枝晶的实际生长过程中流动几乎是不可避免的，所以建立一个通过溶质扩散计算界面生长并能耦合流场计算的模型将值得进一步的研究。

其次，数值计算方法需要改进。正如本文在 5.4 节所提出的，目前采用的这种方法中因为网格造成的各向异性还没有得到很好的解决，在多晶粒模拟时，就无法很好地体现热流的方向性和晶粒的择优生长位向之间的关系。对这一问题可能的解决办法是采用其它形状的网格或建立更复杂的胞元状态转变规则，但无论如何这需要进一步尝试。此外，对于单个枝晶的生长，曲率计算的准确性直接影响着模拟结果。现有的曲率计算方法虽然能够对界面形状的变化产生足够敏感的反应，但计算的准确程度仍然与网格尺寸有关，并且并不因网格的减小而提高精度。显然曲率的计算仍然未得到令人满意的解决。

## 参考文献

- [1] 周尧和, 胡壮麒, 介万奇编著. 凝固技术[M]. 北京: 机械工业出版社, 1998. 1
- [2] 帕坦卡. 传热与流体流动的数值计算[M]. 张政译. 北京: 科学出版社, 1984. 10-15
- [3] Rappaz M. Modeling of microstructure formation in solidification processes[J]. International Materials Reviews, 1989, 34(3): 93-122
- [4] 陶文铨编著. 数值传热学[M]. 第2版. 西安: 西安交通大学出版社, 2002. 15-18
- [5] Croft D R, Lilley D G. Heat transfer calculation using finite difference equations[M]. London: Applied science, 1977
- [6] 孔祥谦. 有限单元法在传热学中的应用[M]. 第3版. 北京: 科学出版社, 1998
- [7] 刘西云, 赵润祥. 流体力学中的有限元法与边界元法[M]. 上海: 上海交通大学出版社, 1993
- [8] Kurz W, Fisher D J. Fundamentals of solidification[M]. Third revised edition. Switzerland: Trans Tech Publications, 1989. 23-29, 57-59, 83-89, 207
- [9] 胡汉起主编. 金属凝固原理[M]. 北京: 机械工业出版社, 1991. 57-63
- [10] Trivedi R, Kurz W. Dendritic growth[J]. Int. Mat. Rev., 1994, 39(2): 49-74
- [11] 李庆春主编. 铸件形成理论基础[M]. 北京: 机械工业出版社, 1982. 157-171
- [12] Chalmers Bruce. Principles of solidification[M]. New York: John Wiley & Sons, 1964. 265-268
- [13] 大野笃美. 金属的凝固——理论、实践及应用[M]. 邢建东译. 北京: 机械工业出版社, 1990. 3-52
- [14] 费蒙文. 物理冶金学基础[M]. 卢光熙等译. 上海: 上海科技出版社, 1980. 172-175
- [15] Oldfield W. A quantitative approach to casting solidification freezing of cast iron[J]. ASM Trans, 1966, 59: 945-960
- [16] Hunt J D. Steady state columnar and equiaxed growth of dendrites and eutectic[J]. Materials Science and Engineering, 1984, 65(1): 75-83
- [17] Thevoz Ph, Desbiolles J L, Rappaz M. Modeling of equiaxed microstructure formation in casting[J]. Metallurgical Transactions, 1989, 20A(2): 311-322
- [18] Lipton J, Glicksman M E, Kurz W. Dendrite growth into undercooled alloy melts[J]. Mater Sci Eng, 1984, 65: 57-63
- [19] Glicksman M E. Free dendrite growth[J]. Mater Sci Eng, 1984, 65: 45-55
- [20] Kurz W, Giovanola B, Trivedi R. Theory of microstructural development during rapid solidification[J]. Acta Metall, 1986, 34(5): 823-830
- [21] Lipton J, Glicksman M E, Kurz W. Equiaxed dendrite growth in alloys at small supercooling[J]. Metall Trans, 1987, 18A(2): 341-345
- [22] Dustin I, Kurz W. Modeling of cooling curves and microstructures during Equiaxed dendritic solidification[J]. Z Metallkd, 1986, 77(5): 265-273

- [23] Rappaz M, Thevoz Ph. Solute diffusion model for equiaxed dendritic growth[J], *Acta Metall.*, 1987, 35(7): 1487-1497
- [24] Rappaz M, Thevoz Ph. Solute diffusion model for equiaxed dendritic growth: Analytical solution[J]. *Acta Metall*, 1987, 35(12): 2929-2933
- [25] Anderson M P, Srolovitz D J, Grest G S et al. Computer simulation of grain growth-I: Kinetics[J]. *Acta Metall*, 1984, 32(5): 783-791
- [26] Spittle J A, Brown S G R. A computer simulation of the influence of processing condition on as-cast grain structures[J]. *Journal of Materials Science*, 1989, 23: 1777-1781
- [27] Spittle J A, Brown S G R. Computer simulation of the effects of alloy variables on the grain structures of castings[J]. *Acta Metall*, 1989, 37(7): 1803-1810
- [28] Zhu Panping, Smith R W. Dynamic simulation of crystal growth by Monte Carlo Method—II. ingot microstructures[J]. *Acta Metall Mater*, 1992, 40(12): 3369-3379
- [29] Rappaz M, Gandin Ch-A. Probabilistic modeling of microstructure formation in solidification processes[J]. *Acta Metall Mater*, 1993, 41(2): 345-360
- [30] Gandin Ch-A, Rappaz M, Tintillier R. Three-dimensional probabilistic simulation of solidification grain structures: application to superalloy precision castings[J]. *Metall Trans*, 1993, 24A(2): 467-479
- [31] Gandin Ch-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
- [32] Gandin Ch-A, Rappaz M. A 3D cellular automaton algorithm for the prediction of dendritic grain growth[J]. *Acta Mater*, 1997, 45(5): 2187-2195
- [33] Gandin Ch-A., Desbiolles J L, Rappaz M et al., A three-dimensional cellular automaton-finite element model for the prediction of solidification grain structures[J]. *Metall Mater Trans*, 1999, 30A(12): 3153-3165
- [34] Wang C Y, Beckermann C. A multiphase solute diffusion model for dendritic alloy solidification[J]. *Metall Trans*, 1993, 24A(12): 2787-2802
- [35] Wang C Y, Beckermann C. A unified solute diffusion model for columnar and equiaxed dendritic alloy Solidification[J]. *Mater Sci Eng*, 1993, A171: 199-221
- [36] Wang C Y, Beckermann C. Prediction of columnar to equiaxed transition during diffusion-controlled dendritic alloy solidification[J]. *Metall Metal Trans*, 1994, 25A(5): 1081-1092
- [37] Wang C Y, Beckermann C. Equiaxed dendritic solidification with convection:Part I: Multiscale / Multiphase modeling[J]. *Metall Mater Trans*, 1996, 27A(9): 2755-2764
- [38] Wang C Y, Beckermann C. Equiaxed dendritic solidification with convection: Part II. Numerical simulations for an Al-4 Wt Pct Cu alloy[J]. *Metall Mater Trans*, 1996, 27A(9): 2765-2783
- [39] Wang C Y, Beckermann C. Equiaxed dendritic solidification with convection: Part III. comparisons with  $\text{NH}_4\text{Cl}-\text{H}_2\text{O}$  experiments[J]. *Metall Mater Trans*, 1996, 27A(9): 2784-2795

- [40] Stefanescu D M. Methodologies for modeling of solidification microstructure and their capabilities[J]. *ISIJ International*, 1995, 35(6): 637-650
- [41] Stefanescu D M, Pang H. Modeling of casting solidification stochastic or deterministic[J]. *Canadian Metallurgical Quarterly*, 1998, 37(3-4): 229-239
- [42] Nastac L, Stefanescu D M. An analytical model for solute redistribution during solidification of planar, columnar, or equiaxed morphology[J]. *Metall Trans*, 1993, 24A(9): 2107-2118
- [43] Nastac L, Stefanescu D M. Macrotransport-solidification kinetics modeling of equiaxed dendritic growth: Part I. Model development and discussion[J]. *Metall Mater Trans*, 1996, 27A(12): 4061-4074
- [44] Nastac L, Stefanescu D M. Macrotransport-solidification kinetics modeling of equiaxed dendritic growth: Part II. Computation problems and validation on INCONEL 718 superalloy castings[J]. *Metall Mater Trans*, 1996, 27A(12): 4075-4083
- [45] Nastac L, Stefanescu D M. Simulation of microstructure evolution during solidification of Inconel 718[J]. *AFS Trans*, 1996, 193: 425-434
- [46] Nastac L, Stefanescu D M. Stochastic modelling of microstructure formation in solidification processes[J]. *Modelling Simul Mater Sci Eng*, 1997, 5: 391-420
- [47] Meiron Daniel I. Selection of steady states in the two-dimensional symmetric model of dendritic growth[J]. *Physical Review A*, 1986, 33(4): 2704-2715
- [48] Kessler D A, Levine H. Velocity selection in dendritic growth[J]. *Phys Rev B*, 1986, 33(11): 7867-7870
- [49] Saito Y, Goldbeck-Wood G, Müller-Krumbhaar H. Numerical simulation of dendritic growth[J]. *Phys Rev A*, 1988, 38(8): 2149-2157
- [50] Shyy W, Udaykumar H S, Liang S-J. An interface tracking method applied to morphological evolution during phase change[J]. *Int J Heat Mass Transfer*, 1993, 36(7): 1833-1834
- [51] Udaykumar H S, Shyy W. Simulation of interfacial instabilities during solidification-I: Conduction and capillarity effects[J]. *Int J Heat Mass Transfer*, 1995, 38(11): 2057-2073
- [52] Ihle T, Müller-Krumbhaar H. Fractal and compact growth morphologies in phase transitions with diffusion transport[J]. *Phys Rev E*, 1994, 49(4): 2972-2991
- [53] Juric Damir, Tryggvason Gretar. A front-tracking method for dendritic solidification[J]. *Journal of Computational Physics*, 1996, 123: 127-148
- [54] Udaykumar H S, Mittal R, Wei Shyy. Computation of solid-liquid phase fronts in the sharp interface limit on fixed grids[J]. *Journal of Computational Physics*, 1999, 153: 533-574
- [55] Ye T, Mittal R, Udaykumar H S et al. An accurate cartesian grid method for viscous incompressible flows with complex immersed boundaries[J]. *J Comput Phys*, 1999, 156: 209-240
- [56] Wheeler A A, Ahmad N A, Boettigner W J et al. Recent developments in phase-field models of solidification[J]. *Adv Space Res*, 1995, 16(7): 163-172

- [57] Kobayashi Ryo. Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth[J]. *Physica D*, 1993, 63: 410-423
- [58] Wheeler A A, Murray B T, Schaefer R J. Computation of dendrites using a phase field model[J]. *Physica D*, 1993, 66: 243-262
- [59] 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): R3017-3020
- [60] Warren J A, Boettger W J. Prediction of dendritic growth and microsegregation patterns in a binary alloy using the phase-field method[J]. *Acta Metall Mater*, 1992, 43(2): 689-703
- [61] Lee J S, Suzuki T. Numerical simulation of isothermal dendritic growth by phase-field model[J]. *ISIJ International*, 1999, 39(3): 246-252
- [62] Dilthey U, Pavlik V. Numerical simulation of dendrite morphology and grain growth with modified cellular automata[C]. *Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes VIII*. Warrendale PA: TMS, 1998. 589-596
- [63] Nastac L. Numerical modeling of solidification morphologies and segregation patterns in cast dendritic alloys[J]. *Acta Mater*, 1999, 47(17): 4253-4262
- [64] Sasikumar R, Sreenivasan R. Two dimensional simulation of dendrite morphology[J]. *Acta Metall Mater*, 1994, 42(7): 2381-2386
- [65] Sasikumar R, Jacob E. Simulation of side branch evolution in thermal dendritic grains[J]. *Scripta Materialia*, 1996, 35(4): 505-510
- [66] Sasikumar R, Jacob E, George B. Simulation of dendrite growth in binary alloys[J]. *Scripta Materialia*, 1998, 38 (4): 693-701
- [67] Udaykumar H S, Mao L. Sharp-interface simulation of dendritic solidification of solutions[J]. *Int J Heat Mass Transfer*, 2002, 45: 4793-4808
- [68] Udaykumar H S, Marella S, Krishnan S. Sharp-interface simulation of dendritic growth with convection: Benchmarks[J]. *Int J Heat Mass Transfer*, 2003, 46: 2615-2627
- [69] ODE Machiko, Kim S G, SUZUKI. Recent advances in the phase-field model for solidification[J]. *ISIJ International*, 2001, 41(10): 1076-1082
- [70] Provatas N, Goldenfeld N, Dantzig J. Adaptive mesh refinement computation of solidification microstructures using dynamic data structures[J]. *Journal of Computational Physics*, 1999, 148: 265-290
- [71] Lo T S, Karma A. Phase field modeling of microstructural pattern formation during directional solidification of peritectic alloys without morphological instability[J]. *Phys Rev E*, 2001, 63(1): 031504-15
- [72] Nestler B, Wheeler A. A multi-phase-field model of eutectic and peritectic alloys: Numerical simulation of growth structures[J]. *Physic D*, 2000, 138: 114-133

- [73] Nestler B, Wheeler A, Ratke L et al. Phase-field model for solidification of a monotectic alloy with convection[J]. *Physic D*, 2000, 141:133-154
- [74] Karma A, Rappel W J. Phase-field simulation of three-dimensional dendrites: Is microscopic solvability theory correct?[J]. *Journal of Crystal Growth*, 1997, 174: 54-64
- [75] Karma A, Rappel W J. Quantitative phase-field modeling of dendritic growth in two and three dimensions[J]. *Phys Rev E*, 1998, 57(4): 4323-4349
- [76] Karma A, Lee Y H, Plapp Mathis. Three-dimensional dendrite-tip morphology at low undercooling[J]. *Phys Rev E*, 2000, 61(4): 3996-4006
- [77] Tong X, Beckermann C. Velocity and shape selection of dendritic crystals in a forced flow[J]. *Phys Rev E*, 2000, 61(1): R49-52
- [78] Wang W, Lee P D, Mclean M. A model of solidification microstructures in nickel-based superalloys: Predicting primary dendrite spacing selection[J]. *Acta Mater*, 2003, 51: 2971-2987
- [79] 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
- [80] 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
- [81] 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
- [82] Zhu M F, Hong C P. Modeling of microstructure evolution in regular eutectic growth[J]. *Phy Rev B*, 2002, 66: 155428
- [83] Zhu M F, Hong C P. Modeling of irregular eutectic microstructures in solidification of Al-Si alloys[J]. *Metall Mater Trans*, 2004, 35A(5): 1555-1563
- [84] Lee S Y, Lee S M, Hong C P. Numerical modeling of deflected columnar dendritic grains solidified in flowing melt and its experimental verification[J]. *ISIJ International*, 2000, 40(1): 48-57
- [85] Shin Y H, Hong C P. Modeling of dendritic growth with convection using a modified cellular automaton model with a diffuse interface[J]. *ISIJ International*, 2002, 42 (4): 359-367
- [86] Zhu M F, Lee S Y, Hong C P. Modified cellular automaton model for prediction of dendritic growth with melt convection[J]. *Phys Rev E*, 2004, 69, 061610
- [87] Jacot A, Rappaz M. A pseudo-front tracking technique for the modeling of solidification microstructures in multi-component alloys[J]. *Acta Mater*, 2002, 50:1909-1926
- [88] Lazaro Beltran-Sanchez, Stefanescu D M, Growth of Solutal Dendrites: A Cellular Automaton Model and Its Quantitative Capabilities[J]. *Metall. Mater. Trans.*, 2003, vol. 34A(2) : 367-381
- [89] Lazaro Beltran-Sanchez, Stefanescu D M, A quantitative dendrite growth model and analysis of stability concepts[J]. *Metall. Mater. Trans.*, 2004, vol. 35A(8) : 2471-2485
- [90] 许庆彦, 柳百成. 采用 Cellular Automation 法模拟铝合金的微观组织[J]. 中国机械工程, 2001, 12

(3): 328

- [91] 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
- [92] 李文珍. 铸件凝固过程微观组织及缩孔缩松形成的数值模拟研究[D]: [博士学位论文]. 北京: 清华大学机械工程系, 1995
- [93] 赵海东, 柳百成, 房贵如. 球墨铸铁微观组织数值模拟及其力学性能的研究进展[J]. 铸造, 1999(10): 51-55
- [94] 赵海东、柳百成等. 球墨铸铁件微观组织的数值模拟[J]. 机械工程学报, 2000, 36 (2): 76-80
- [95] Zhao H D, Liu B C. Modeling of stable and metastable eutectic transformation of spheroidal graphite iron casting[J]. ISIJ International, 2001, 41(9): 986-991
- [96] 金俊泽, 王宗延等. 金属凝固组织形成的仿真研究[J]. 金属学报, 1998, 34(9): 928-939
- [97] 王同敏, 金俊泽. 铸件凝固过程微观数值模拟研究进展[J]. 铸造, 1999(5): 41-47
- [98] 王同敏, 金俊泽, 郑贤淑. 金属凝固过程微观模拟的两个辅助算法[J]. 铸造, 2000, 49(8): 484-488
- [99] 王同敏. 金属凝固过程微观模拟研究[D]: [博士学位论文]. 大连: 大连理工大学材料工程系, 2000
- [100] 李殿中, 苏仕方, 徐雪华, 等. 镍基合金叶片凝固过程微观组织模拟及工艺优化研究[J]. 铸造, 1997(8): 1-7
- [101] 李殿中, 杜强等. 金属成形过程组织演变的 Cellular Automaton 模拟技术[J]. 金属学报, 1999, 35(11): 1201-1205
- [102] 李殿中. K417 合金精铸叶片组织形成过程数值模拟与质量控制[D]: [博士学位论文]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学材料工程学院, 1998
- [103] 康秀红, 杜强, 李殿中. 用元胞自动机与宏观传输模型耦合方法模拟凝固组织[J]. 金属学报, 2004, 40(5): 452-456
- [104] 李强, 李殿中, 钱百年. 应用连续性方法模拟枝晶生长[J]. 金属学报, 2004, 40(6): 634-638
- [105] 李强, 李殿中, 钱百年. 元胞自动机方法模拟枝晶生长[J]. 物理学报, 2004, 53(10): 3477-3481
- [106] 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, 7: 35-39
- [107] 李强, 李殿中, 钱百年. 枝晶凝固过程溶质浓度分布模拟[J]. 金属学报, 2004, 40(11): 1215-1220
- [108] 于艳梅. 过冷熔体中枝晶生长的相场法数值模拟[D]: [博士学位论文]. 西安: 西北工业大学
- [109] 于艳梅, 杨根仓, 赵文达等. 过冷熔体中枝晶生长的相场法数值模拟. 物理学报, 2001, 50(12): 2423-2428
- [110] 于艳梅, 杨根仓. 相场法模拟过冷熔体枝晶生长中的界面厚度参数的取值. 自然科学进展, 2001, 11(12): 1192-1197
- [111] YU Yan-mei, YANG Gen-cang etc., Effects of tempreature boundary conditions on equiaxed dendritic growth in phase-field simulations of binary alloys[J]. Trans. Nonferrous Met. Soc. China,

- 2000, 12(6):1063-1068
- [112] 刘永刚. 耦合相图计算的凝固过程显微偏析形成数值模拟[D]: [博士学位论文]. 南京: 东南大学材料科学与工程系, 2003
- [113] Numann J V. Theory of self-reproducing automaton. Champaign: Univ of Illinois Press, 1966: 30
- [114] Steinbach I, Beckermann, Kauerauf B et al. Three dimensional modeling of equiaxed dendritic growth on a mesoscopic scale[J]. *Acta Metall*, 1999, 47(3): 971-982
- [115] 陈军. 二元合金凝固过程显微组织数值模拟研究[D]: [硕士学位论文]. 南京: 东南大学机械工程系, 2001
- [116] Huang S-C, Glicksman. Fundamentals of dendritic solidification II: Development of side-branch structure[J]. *Acta Metall*, 1981, 29: 717-734
- [117] Glicksman M E, Koss M B, Bushnell L T et al. Dendritic growth of succinonitrile in terrestrial and microgravity conditions as a test of theory[J]. *ISIJ International*, 1995, 35(6): 604-610
- [118] Glicksman M E, Lupulescu A O. Dendritic crystal growth in pure materials[J]. *Journal of Crystal Growth*, 2004, 264: 541-549
- [119] Ivanstov G P. Temperature field around spherical, cylindrical, and needle-shaped crystals which grow in supercooled melts[J]. *Dokl Akad Nauk SSSR*, 1947, 58: 567-570
- [120] Langer J S, Muller-Krumbhaar H. Stability effects in dendritic crystal growth[J]. *Journal of Crystal Growth*, 1977, 42: 11-14
- [121] Mullins W W, Sekerka R F. Stability of planar interface during solidification of a dilute binary alloy[J]. *J Appl Phys*, 1964, 35: 444-451
- [122] Barbieri A, Hong D, Langer J S. Velocity selection in the symmetric model of dendritic crystal growth[J]. *Phys Rev A*, 1987, 35: 1802-1808
- [123] XU J J. Interfacial wave theory of pattern formation: Selection of dendritic growth and viscous fingering in a Hele-Shaw flow[M]. Berlin: Springer, 1997
- [124] XU Jian-jun, Yu Dong-sheng. Further examinations of dendritic growth theories[J]. *Journal of Crystal Growth*, 2001, 222: 399-413
- [125] Caroli B, Muller-Krumbhaar H. Recent advance in the theory of free dendritic growth[J]. *ISIJ International*, 1995, 35(12): 1541-1550
- [126] Hunt J D, LU S-Z. Numerical modeling of cellular/dendritic array growth: Spacing and structure predictions[J]. *Metall Mater Trans*, 1996, 27A(3): 611-623
- [127] Huang W D, Geng X G, Zhou Y H. Primary spacing selection of constrained dendritic growth[J]. *Journal of Crystal Growth*, 1993, 134: 105-115
- [128] 林鑫, 黄卫东, 潘清跃等. Al-4.5%Cu 单晶定向凝固一次枝晶间距研究[J]. 金属学报, 1997, 33(11): 1140-1146
- [129] Kim S G, Kim W T, Suzuki T. Interfacial compositions of solid and liquid in a phase-field model

- with finite interface thickness for isothermal solidification in binary alloys[J]. *Phy Rev E*, 1998, 58(3): 3316-3323
- [130] 柳百成, 荆涛. 铸造工程的模拟仿真与控制[M]. 北京: 机械工业出版社, 2001. 178
- [131] Trivedi R, Mason J T. The effect of interface attachment kinetics on solidification interface morphologies[J]. *Metall Mater Trans*, 1991, 22A(1): 235-249
- [132] Artemev A, Goldak. Cellular simulation of the dendrite growth in Al-Si alloys[J]. *Canadian Metallurgical Quarterly*, 1997, 36(1): 57-64
- [133] Martinez M. Three dimensional computer model of dendrite growth in tertiary Al-Cu-Si alloys[D]: [Thesis for degree of master of engineering]. Ottawa: Carleton University, 1999
- [134] Kremeyer Kevin. Cellular automata investigations of binary solidification[J]. *Journal of Computational Physics*, 1998, 142: 243-262
- [135] 谢树艺. 矢量分析与场论[M]. 第2版. 北京: 高等教育出版社, 1985. 27-29
- [136] Kothe D B, Mjolsness R C, Torrey M D. RIPPLE: A computer program for incompressible flows with free surface[R]. Technical Report LA-12007-MS, Los Alamos National Laboratory, 1991
- [137] 帕夫利迪斯 T. 吴成柯译. 计算机图形显示和图象处理的算法[M]. 北京: 科学出版社, 1987. 133-138
- [138] Youngs D L. Time-dependant multi-material flow with large fluid distortion[C]. In: Morton K W, Baines M J, eds. *Numerical Methods for Fluid Dynamics*. New York: Academic Press, 1982. 273
- [139] Rider W J, Kothe D B. Reconstruction Volume Tracking[J]. *Journal of Computational Physics*, 1998, 141:112-152
- [140] LU Mu-chen. Numerical modeling of multi-phase surface flow[D]: [Ph D Dissertation]. University of Texas at Arlington, 2000
- [141] TANG Hao, Wrobel L C, FAN Z. Tracking of immiscible interfaces in multiple-material mixing processes[J]. *Computational Materials Science*, 2004, 29:103-118
- [142] 陈桂明, 张明照, 戚红雨编著. 应用 MATLAB 语言处理数字信号与数字图像[M]. 北京: 科学出版社, 2000
- [143] 郝好伟, 施光凯编著. Origin 6.0 实例教程[M]. 北京: 中国电力出版社, 2002
- [144] Kruglinski D J, Wingo S, Shepherd G. *Visual C++6.0 技术内幕*[M]. 北京: 希望电子出版社, 1999
- [145] Flemings M. Solidification processing[M]. New York: McGraw-Hill, 1974. 154-157
- [146] Flood S C, Hunt J D. Columnar and equiaxed growth I. A model of columnar front with a temperature dependent velocity[J]. *Journal of Crystal Growth*, 1987, 82: 543-551
- [147] Flood S C, Hunt J D. Columnar and equiaxed growth II. Equiaxed growth ahead of a columnar front [J]. *Journal of Crystal Growth*, 1987, 82: 552-560
- [148] Gandin Ch-A. From constrained to unconstrained growth during directional solidification[J]. *Acta Mater*, 2000, 48: 2483-2501

- [149] Gandin Ch-A. Experimental study of the transition from constrained to unconstrained growth during directional solidification[J]. ISIJ International, 2000, 40(10): 971-979
- [150] Gaumann M, Trivedi R, Kurz W. Nucleation ahead of the advancing interface in directional solidification[J]. Materials Science and Engineering, 1997, A226-228: 763-769
- [151] Kurz W, Bezencon C, Gaumann M. Columnar to equiaxed transition in solidification processing[J]. Science and Technology of Advanced Materials, 2001, 2: 185-191
- [152] Martorano M A, Beckermann C, Gandin Ch-A. A solutal interaction mechanism for the columnar-to-equiaxed transition in alloy solidification[J]. Metall. Mater. Trans, 2004, 35A
- [153] 陈海清, 李华基, 曹阳. 铸件凝固过程数值模拟[M]. 重庆: 重庆大学出版社, 1991.92-94
- [154] 大中逸雄. 计算机传热凝固解析入门——铸造中的应用[M]. 许云祥译. 北京: 机械工业出版社, 1988. 280-288
- [155] 孙志忠, 袁慰萍, 闻震初. 数值分析[M]. 第2版. 南京: 东南大学出版社, 2002. 90-95
- [156] 徐士良主编. C常用算法程序集[M]. 第2版. 北京: 清华大学出版社, 2002. 321-323
- [157] Sasikumar R, Exner H E. Coupling of microsegregation models to heat flow simulations in castings[J]. Modeling Simul Mater Sci Eng, 1992, 1: 19-27
- [158] Sasikumar R, Kumar M. The strength of the coupling between macroscopic heat flow and equiaxed grain formation in castings[J]. Acta Metall Mater, 1995, 43(12): 4387-4392
- [159] 闵乃本. 晶体生长的物理基础[M]. 上海: 上海科技出版社, 1982. 230-233
- [160] Glicksman M E, Marsh S P. Handbook of Crystal Growth I, Part B[M]. Amsterdam: North-Holland, 1993, 1078
- [161] 吴振平. 提高近共晶 Al-Si-Mg 合金综合性能的研究[D]: [硕士学位论文]. 南京: 东南大学材料科学与工程系, 2005
- [162] Murray B T, Wheeler A A, Glicksman M E. Simulations of experimentally observed dendritic growth behavior using a phase-field model[J]. Journal of Crystal Growth, 1995, 154: 386-400

## 攻读博士学位期间发表的论文

- [1] 陈晋, 朱鸣芳, 孙国雄. 用 CA 方法模拟过冷熔体中的自由树枝晶生长. 金属学报 (已录用)
- [2] 陈晋, 朱鸣芳, 孙国雄. 过冷熔体中的树枝晶分枝机制模拟. 铸造 (已录用)
- [3] 陈晋, 朱鸣芳, 孙国雄. 元胞自动机方法在枝晶生长模拟中的应用. 铸造 (已录用)
- [4] 朱鸣芳, 陈晋, 孙国雄, 洪俊杓. 枝晶生长的数值模拟. 金属学报 (已录用)
- [5] 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. 铸造, 2003, 52(2): 123-125
- [6] Sun Yu, Chen Jin, Sun Guo-xiong. Variation of the second-phase morphology and its influence on mechanical properties and fracture behavior of Al-Si alloy. Journal of Southeast University (English Edition), 2004, 20(1): 53-58
- [7] 陶盼, 廖恒成, 陈晋, 孙国雄. 铸件充型过程数值模拟的发展. 铸造, 2005, 54(3): 257-278

## 致谢

本文的研究工作是在导师孙国雄教授的精心指导下完成的。导师严谨的治学作风、深厚的学术素养和积极宽厚的生活态度将使我终生受益。在论文完成之际，首先要对导师多年来一如既往的辛勤教诲表示最崇高的敬意和最衷心的感谢。

论文的研究工作在许多关键的时刻得到了朱鸣芳教授的指导和帮助，每次与朱老师的讨论和交流往往会给研究带来新的进展和突破，对此我深表感谢。

在我多年的学习生涯中，教研室的潘治教授、董寅生教授、廖恒成副教授和戴挺讲师都给予过帮助和支持，在此一并感谢。

与我一同在课题组学习的同门对我的研究工作和日常生活帮助不少，论文的完成也离不开他们的支持和鼓励。虽然罗列他们的名字对外人来说只是阅读没有太多意义的符号，但对我来说，这些名字都留给我一份独特的记忆。他们中包括已经毕业的刘永刚博士、李明喜博士，张传硕士、邱宗文硕士、张衍诚硕士和吴振平硕士，以及目前仍然再读的博士生孙瑜、蔡安辉、董光明，硕士生陶盼、陆韬、姜云峰、丁历、王春明。

感谢我的父母兄嫂和我的女友陈可佳，作为我的家人和亲人他们总是无条件地支持我、鼓励我，使我能够有信心和勇气克服一个个困难，最终完成这篇博士论文。

感谢论文评审专家在炎热的夏季里不辞辛苦付出的劳动！

陈晋

2005年6月于宿舍