

doi: 10.3969/j.issn.2095-1744.2024.08.005

# 颗粒对 Al-4.5 wt% Cu 合金定向凝固汇聚生长的元胞自动机模拟研究

傅瑜峰<sup>1</sup>, 葛鸿浩<sup>2</sup>, 蒋波<sup>3</sup>, 任凤丽<sup>1</sup>, 倪益华<sup>1</sup>

(1. 浙江农林大学 光机电工程学院, 杭州 311300;

2. 浙江工业大学 机械工程学院, 杭州 310014;

3. 杭州汽轮铸锻股份有限公司, 杭州 310022)

**摘要:** 定向凝固是制备单晶的重要技术之一, 被广泛应用于航空航天、能源、电子、医疗器械等领域。但是在定向凝固过程中难免会出现杂晶、夹杂等缺陷, 因此研究颗粒对枝晶竞争生长机制的影响对制备高品质单晶试样具有重要意义。基于欧拉多相流模型与元胞自动机方法, 通过构建 Al-4.5 wt% Cu 合金枝晶生长模型, 比较不同取向枝晶在相同条件下获得的枝晶前沿溶质分布和枝晶长度差异来验证模型的可靠性, 然后开展了定向凝固双晶粒凝固组织演化和颗粒对枝晶生长影响的研究。模拟结果表明, 无颗粒影响的汇聚竞争生长中非择优取向枝晶压制择优取向枝晶生长, 再现了反常淘汰现象。但是通过将颗粒引入合金定向凝固汇聚生长的晶界附近后, 颗粒的存在干扰了非择优生长取向枝晶生长, 亦可提高择优取向枝晶生长稳定性, 实现了对反常淘汰现象的控制。

**关键词:** 元胞自动机; 定向凝固; 汇聚生长; 模拟研究

中图分类号: TG111.4

文献标志码: A

文章编号: 2095-1744(2024)08-0039-08

## Cellular Automata Simulation Study of Particles on the Convergent Growth of Al-4.5 wt% Cu Alloys for Directional Solidification

FU Yufeng<sup>1</sup>, GE Honghao<sup>2</sup>, JIANG Bo<sup>3</sup>, REN Fengli<sup>1</sup>, NI Yihua<sup>1</sup>

(1. College of Optical, Mechanical and Electrical Engineering, Zhejiang A & F University, Hangzhou 311300, China;

2. College of Mechanical Engineering, Zhejiang University of Technology, Hangzhou 310014, China;

3. Hangzhou Steam Turbine Power Group Co., Ltd., Hangzhou 310022, China)

**Abstract:** Directional solidification is one of the important techniques for the preparation of single crystals, which is widely used in aerospace, energy, electronics, medical devices and other fields. However, defects such as stray crystals and inclusions inevitably occur during directional solidification, so it is important to study the effect of particles on the competitive growth mechanism of dendrites for the preparation of high-quality single-crystal specimens. In this paper, based on the Eulerian multiphase flow model and the metacellular automata method, the reliability of the model is verified by constructing a dendrite growth model for Al-4.5 wt% Cu alloys, and comparing

收稿日期: 2024-03-13

基金项目: 国家自然科学基金青年项目(52304415); 浙江省自然科学基金(LQ22E040002)

**Fund:** Supported by the National Natural Science Foundation of China Under Grant(52304415); Zhejiang Provincial Natural Science Foundation of China Under Grant(LQ22E040002)

**作者简介:** 傅瑜峰(2000—), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为铝合金凝固组织的模拟及调控。

**通信作者:** 任凤丽(1988—), 女, 博士, 主要研究方向为材料加工过程中传热与传质。

**引用格式:** 傅瑜峰, 葛鸿浩, 蒋波, 等. 颗粒对 Al-4.5 wt% Cu 合金定向凝固汇聚生长的元胞自动机模拟研究[J]. 有色金属工程, 2024, 14(8): 39-46.

FU Yufeng, GE Honghao, JIANG Bo, et al. Cellular Automata Simulation Study of Particles on the Convergent Growth of Al-4.5 wt% Cu Alloys for Directional Solidification[J]. Nonferrous Metals Engineering, 2024, 14(8): 39-46.

the differences in the solute distribution along the front of the dendrite and the length of the dendrite obtained from dendrites with different orientations under the same conditions, and then carrying out a study on the evolution of the solidification organisation of the two grains during the directional solidification and the effect of the particles on the growth of the dendrites. The simulation results show that non-optimally oriented dendrites suppress the growth of optimally oriented dendrites in the convergent competitive growth without the influence of particles, reproducing the anomalous elimination phenomenon. However, by introducing particles into the alloy near the grain boundaries of directional solidification convergent growth, the presence of particles interferes with the growth of non-optimally oriented dendrites and improves the stability of optimally oriented dendrites, thus controlling the anomalous elimination phenomenon.

**Key words:** cellular automata method; directional solidification; convergent growth; simulation studies

金属及合金的大多数现象都是由其内部结构决定的,金属及合金的宏观特性是由其微观结构决定的<sup>[1]</sup>,在金属凝固过程中,晶体的形成是一个关键且复杂的过程,对材料的性能和微观结构具有重要影响。随着科学技术的不断进步,对金属凝固过程的理解和控制也变得日益重要。定向凝固在金属凝固中是个备受关注的方向,广泛应用在航空航天、能源、电子、医疗器械等领域<sup>[2]</sup>。通过定向凝固技术制备出的高温合金已经成为现代航空发动机和燃气轮机叶片的主要材料<sup>[3]</sup>。此外,定向凝固还可用于生产半导体材料和医疗植入材料等。近年来,利用先进的数值模拟方法和实验手段,研究人员不断深入探索定向凝固过程中的物理机制和控制方法,以期实现更高效、更精确的材料制备的目标。

虽然定向凝固在单晶制备中应用广泛,但是也会有杂晶的出现,有关杂晶与择优取向枝晶间的竞争生长研究非常重要。WALTON 和 CHALMERS 提出的 Walton-Chalmers 模型<sup>[4]</sup>多年以来一直是研究定向凝固过程中晶粒竞争生长问题的基础。D'SOUZA 等<sup>[5]</sup>做的实验对 Walton-Chalmers 模型预测的结果进行了证实。还有一些早期的实验结果<sup>[5-6]</sup>也符合 Walton-Chalmers 模型的预测。随着对定向凝固的研究不断深入,发现在某些情况下的实验结果并不符合 Walton-Chalmers 模型所预测的竞争生长的结果。如 ZHOU 等<sup>[7]</sup>通过研究镍基高温合金的定向凝固双晶生长实验发现与 Walton-Chalmers 模型的描述截然相反的反常淘汰现象,即非优先取向的枝晶在某些时刻可能超越晶界处优先取向的枝晶尖端,从而将优先取向的枝晶淘汰。此外,优先取向的晶粒无法向非优先取向的晶粒一侧发展出新的次级枝晶臂,从而会导致非优先取向的晶粒能够取代优先取向的晶粒。MENG 等<sup>[8]</sup>通过宏观模拟实验进一步发现,定向凝固中的汇聚双晶竞争生长,会出现择优取向晶粒被非择优取向晶粒

淘汰的现象。

上述实验研究都只能通过后期试样解剖来猜测,无法获得凝固过程的竞争生长现象。随着计算机硬件和数学模型的发展,数值模拟技术在高温合金定向凝固的研究、工艺设计中得到了广泛应用<sup>[9]</sup>,包括适用于 CPU 的并行算法 MPI<sup>[10]</sup>和自适应网格算法<sup>[11]</sup>等。数值模拟技术的不断发展为获得凝固过程的竞争生长现象提供了有效手段,如王锦程等<sup>[12]</sup>采用相场法数值模拟<sup>[13]</sup>和透明合金原位观测<sup>[14]</sup>的方法研究了二维条件下双晶定向凝固汇聚生长过程中的反常淘汰现象,提出具体反常淘汰发生过程。TAKAKI 等<sup>[15]</sup>利用图形处理单元(GPU)加速的并行计算进行了大规模相场法数值模拟,观察到在三维情况下同样存在类似于二维情况的反常淘汰现象。张勇佳等<sup>[16]</sup>对定向凝固枝晶生长与溶质对流进行模拟研究,研究不同晶体取向角度与取向差条件下的枝晶形貌、对流速度及溶质羽流的演变规律。郭春文<sup>[17]</sup>分析了二维及三维条件下的汇聚双晶竞争生长行为,发现其晶粒淘汰过程是以一次枝晶臂间相互阻挡的方式来完成的。

但是在单晶凝固过程中难免会有夹杂或者高温析出相的存在,上述研究中均未考虑颗粒的出现对组织竞争生长的影响,本研究将欧拉多相流模型与元胞自动机方法相结合,构建了 Al-4.5 wt% Cu 合金的枝晶生长模型,开展了定向凝固双晶粒凝固组织演化和颗粒对枝晶生长影响的研究。通过 PC-SIMPLE 算法耦合求解获得各相温度场、溶质场与速度场等信息,再根据晶体学特征制定合理的元胞捕捉规则,实现了枝晶的生长模拟,从而完成对颗粒汇聚生长中枝晶演化影响的研究。

## 1 数值模型

本文将欧拉多相流模型与元胞自动机方法相结合<sup>[18-20]</sup>,构建了 Al-4.5 wt. % Cu 合金的枝晶生长

模型,开展对定向凝固双晶粒凝固组织演化及颗粒对枝晶生长影响的研究。模型主要假设如下:模型中只考虑液相( $f_l$ )和固相( $f_s$ ),且两相体积分数之和为 1;固液相为静止相,不考虑熔体流动对枝晶生长的影响;本模型不考虑固液相密度差及凝固收缩,各热物性参数都为常数。

### 1.1 控制方程

#### 1.1.1 质量守恒方程

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_l \rho_l) = -M_{ls} \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_s \rho_s) = M_{ls} \quad (2)$$

式中,下标  $l$ 、 $s$  分别代表液相和固相; $\rho$  为密度; $f$  为体积分数; $M_{ls}$  为液相向固相的传质速率,表达式为  $M_{ls} = \frac{\Delta f_s \cdot \rho_l}{\Delta t}$ 。

#### 1.1.2 溶质守恒方程

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_l \rho_l c_l) = \nabla(f_l \rho_l D_l \nabla c_l) - C_{ls} \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_s \rho_s c_s) = \nabla(f_l \rho_l D_s \nabla c_l) + C_{ls} \quad (4)$$

式中, $c$  为各相的溶质浓度; $C_{ls}$  为液相向固相的溶质传输量。

#### 1.1.3 温度场求解

模拟合金定向凝固时还需求解能量守恒方程,鉴于本研究模拟尺寸较小,因此为了简化模型,本系类算例中温度计算采用冻结近似处理(Frozen Temperature Approximation)<sup>[21]</sup>,具体处理方法如下公式: $T = T_0 - \sum(\dot{T} \cdot \Delta t) + G(y - y_0)$ ,其中  $T_0$  为参考平面处初始温度, $y_0$  为参考平面处坐标, $\dot{T}$  为冷却速度, $\Delta t$  为时间步长, $G$  为温度梯度。

### 1.2 凝固传质模型

凝固过程中,固液界面处始终保持局部平衡和溶质质量守恒,方程表示为:

$$c_s^* = kc_1^* \quad (5)$$

式中, $c_s^*$  和  $c_1^*$  分别为固液相界面处的平衡浓度,而  $k$  为溶质再分配系数,其中  $c_1^* = \frac{T - T_f + TK(1 - 15\epsilon \cos[4(\varphi - \theta)])}{m_1}$ ,  $T$  为单元温度, $T_f$  为纯铝的熔点, $K$  为固液界面曲率定义公式,

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

$\varphi$  为界面单元的法向方向角  $\varphi =$

$$\cos^{-1} \left[ \frac{\frac{\partial f_s}{\partial x}}{\left[\left(\frac{\partial f_s}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial f_s}{\partial y}\right)^2\right]^{1/2}} \right], \theta$$

为晶粒择优取向与  $x$  轴夹角。

根据固液界面的溶质平衡条件,在一个时间步长  $\Delta t$  内,固液界面中固相体积分数增量计算如下<sup>[22]</sup>:

$$\Delta f_s = \{1 + 15\epsilon \cos[4(\varphi - \theta)]\} \cdot g \cdot \frac{c_1^* - c_1}{c_1^* (1 - k)} \quad (6)$$

式中, $g$  表示形状因子,针对本文二维模型其计算方法如下所示:

$$g = \min \left( \left( \sum_{m=1}^4 S_m^I + \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{m=1}^4 S_m^{II} \right) / 2, 1 \right) \quad (7)$$

式中, $S^I$  和  $S^{II}$  分别为元胞最近邻和次近邻元胞的状态参数<sup>[23]</sup>,式中  $\epsilon$  为各向异性参数。

### 1.3 元胞捕捉规则及算法

本模型采用正方形网格,元胞邻居定义为 von Neumann 类型,每个元胞存储三种状态:液态胞、界面胞和固态胞。当液态胞被界面胞捕捉时才会转变成界面胞,凝固传质过程只发生在界面胞中,且当界面胞完全凝固即液相体积分数小于阈值( $f_l < 1.0 \times 10^{-3}$ )时转变成固态胞,元胞捕捉规则及算法详见相关研究<sup>[24]</sup>。

### 1.4 数值求解

本研究边界和初始条件如图 1 所示,计算域尺寸为  $5 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$ ,网格尺寸为  $10 \mu\text{m} \times 10 \mu\text{m}$ 。初始

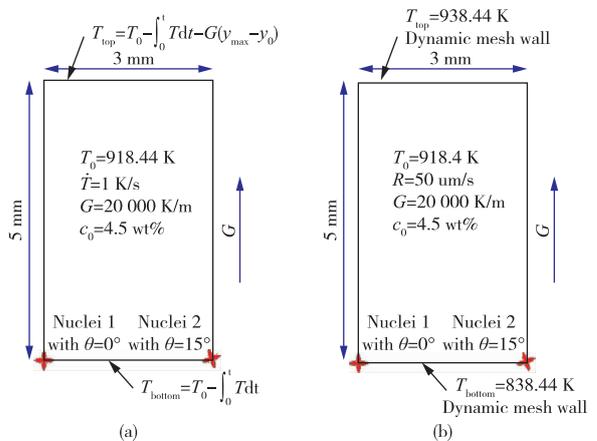


图 1 计算域的边界条件和网格:(a)抽拉时间小于 80 s 时边界;(b)抽拉时间大于 80 s 时的动网格边界

Fig. 1 Boundary conditions and mesh of the computational domain:(a) boundary for pumping times less than 80 s;(b) dynamic mesh boundary for pumping times greater than 80 s

温度 918.44 K, 计算域温度梯度为  $G=200.00 \text{ K/m}$ , 冷却速度为  $1 \text{ K/s}$ , 初始铜浓度为  $4.5 \text{ wt}\%$ 。凝固初期, 在计算域左/右下角区域分别放置择优取向为  $0^\circ$  和  $15^\circ$  的初始晶核, 使其随着温度场和溶质场变化开始汇聚生长并进行竞争。此外, 在保证模拟效率的基础上详细研究合金在抽拉过程中的凝固组织演化, 模型顶部和底部边界根据时间进行动态调整。当抽拉时间小于  $80 \text{ s}$  时, 模型顶部和底部为壁面, 左右边界为对称面, 计算域冷却速度为  $1 \text{ K/s}$ 。当抽拉时间大于  $80 \text{ s}$  时, 顶部和底部边界动态调整为动网格边界, 整个计算域随着铸锭抽拉开始向上移动, 但是左右边界仍为对称面, 通过此方法处理可以获得任意长度试样达到稳定后的凝固组织结果。

本模型采用 PC-SIMPLE 算法求解上述控制方程, 时间步长设置为  $2 \times 10^{-3} \text{ s}$ , 对每个时间步长, 设置最大迭代次数为 60 次, 保证计算的稳定性。该模型在 4 个超线程 CPU (AMD EPYC 3.0 GHz) 上并行运算 24 h。计算时所用的热物性参数如表 1<sup>[25]</sup> 所示。

## 2 模拟结果与讨论

### 2.1 纯扩散不同取向单枝晶生长验证

由于元胞自动机方法在模拟过程中容易出现网

表 1 模型中的热物性参数

Table 1 Thermophysical parameters in the mode

Parameters	Values
Melting point/ $(T_l \cdot \text{K}^{-1})$	933.65
Reference density $\rho_l, \rho_s / (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$	2460
Liquid slope $m_l / (\text{K} \cdot (\text{wt}\%)^{-1})$	-338
Partition coefficient $k$	0.178
Diffusion coefficient in liquid phase $D_l / (\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1})$	$3.4 \times 10^{-9}$
Diffusion coefficient in solid phase $D_s / (\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1})$	$3 \times 10^{-13}$
Gibbs-Thomson coefficient/ $(\text{m} \cdot \text{K})$	$2.4 \times 10^{-7}$

格各向异向引起的枝晶生长速度差异, 即枝晶在正交网格中倾向于沿  $0^\circ$  和  $45^\circ$  方向生长, 因此在模拟不同枝晶取向生长时需要对其进行网格无关性验证。首先在计算域为  $200 \text{ um} \times 200 \text{ um}$  区域中心放置择优取向分别为  $0^\circ$ 、 $10^\circ$ 、 $20^\circ$ 、 $30^\circ$  和  $40^\circ$  的初始晶核, 熔体初始成分为  $\text{Al-4.5 wt}\% \text{ Cu}$  合金, 初始过冷度为  $5 \text{ K}$ , 网格尺寸为  $1 \text{ um}$ 。模拟开始后晶核生长并出现 4 重对称枝晶结构, 当生长时长达到  $0.08 \text{ s}$  时统计各不同择优取向时的枝晶长度。模拟结果如图 2 所示。图 2a 至 2e 为不同择优取向的枝晶固相体积分云图。此外, 通过提取各枝晶轮廓曲线比较枝晶尖端位置及枝晶形貌, 其结果如图 2f 所示。模拟结果显示各枝晶都能保持择优取向生长并在

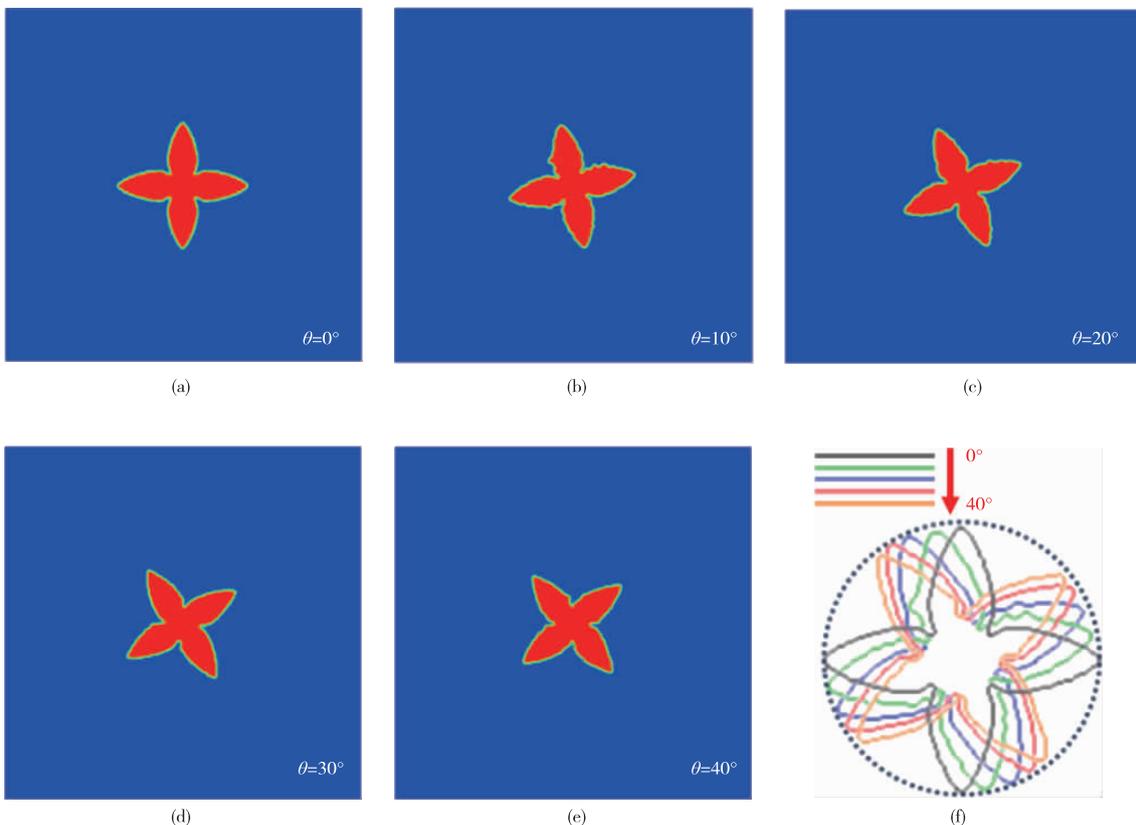


图 2 不同择优取向的枝晶固相体积分云图

Fig. 2 Cloud of dendritic solid-phase volume fractions with different optimal orientations

0.08 s 时枝晶长度相近。此外,通过统计各对角枝晶前沿的浓度场分布结果可定量分析各取向枝晶的生长差异,统计结果如图 3 所示。五种不同择优取向枝晶前端最高铜含量浓度为 5.57%,最低浓度为 5.48%,浓度相差 1.6%。五种不同择优取向枝晶长度最大为 75.37  $\mu\text{m}$ ,最小为 73.88  $\mu\text{m}$ ,相差 2.0%。因此,模拟结果表明不同择优取向晶核在相同过冷度下生长 0.08 s 后不仅保持固有的择优取向,枝晶呈现了四重对称结构,而且各不同择优取向枝晶生长误差较小,对网格敏感性较低,未出现网格各向异向引起的枝晶生长速度不一致的问题,验证了本模型在模拟不同择优取向枝晶生长过程中具有较好的精度。

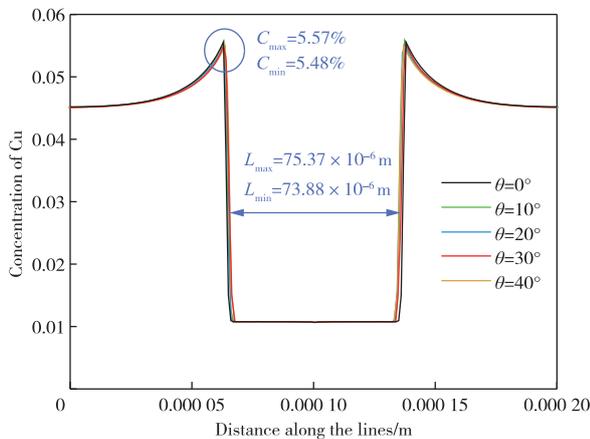


图 3 不同择优取向的枝晶前沿溶质浓度及枝晶长度比较

Fig. 3 Comparison of dendrite front solute concentration and dendrite length with different favorably orientations

## 2.2 定向凝固汇聚生长时的枝晶演化

ZHOU 等<sup>[7,26-27]</sup>研究镍基高温合金定向凝固时发现双晶汇聚生长时会出现反常淘汰现象。所谓反常淘汰现象指非择优生长枝晶在定向凝固某些时刻在晶界处的竞争生长过程中淘汰择优生长枝晶,使择优生长枝晶始终无法向非择优取向枝晶一侧发展二次或三次枝晶,最终非择优生长枝晶逐渐淘汰择优生长枝晶。图 4 为凝固进行 40、80、120 和 160 s 时的溶质场分布。随着凝固进行,如图 4(a)所示籽晶开始生长形成一次枝晶 A1 和 B3,并在二次枝晶臂上萌发出与一次枝晶具有相同择优取向的三次枝晶 A2、A3、A4、A5、B1、B2 等。同时由于凝固过程中存在溶质再分配,Cu 元素被排出并向远处扩散,因此各枝晶生长过程中排出的溶质存在相互影响。如图 4(b)所示,择优生长枝晶中的 A3 在与周围同取向枝晶竞争生长过程中受周围溶质场影响逐渐被

超越直至淘汰,最终使枝晶间距保持与温度梯度和冷却速度相匹配。本算例中的反常淘汰现象发生在枝晶 A4 的生长过程中。如图 4(a)所示,40 s 时枝晶 A4 在生成初期与 B1 和 B2 枝晶齐头并进,但是生长到如图 4(c)所示 80 s 时,A4 枝晶受到 A2 和 B1 枝晶共同影响已经落后于 B2 枝晶,而到 120 s 时 A4 枝晶被 B2 枝晶淘汰,出现了反常淘汰现象。当 A4 被淘汰后留下较大空间可供 A2 和 B2 生长,A2 与 B2 枝晶开始竞争生长。由于 A1 枝晶左侧为试样边界,溶质易出现富集,并受到 A2 枝晶生长时的溶质场影响,其生长一直落后于 A2 枝晶。但是 B2 枝晶与 A2 枝晶处境完全不同,其右侧枝晶 B3 远离试样边界,右侧有较大空间可供溶质存储,促进了 B3 枝晶生长,使得 B3 溶质场直接影响到 B2 生长,最终降低 B2 生长速度,使其在与 A2 的竞争生长中逐渐处于落后位置。最终如图 4(c)所示,B2 枝晶被 A2 枝晶阻挡并淘汰。如此竞争过程在本算例中随着试样抽拉凝固一直持续进行,非择优取向枝晶始终无法完全淘汰靠近试样壁附近的择优取向枝晶。在双高温合金晶粒汇聚竞争生长实验中也出现类似现象<sup>[28]</sup>,非择优取向枝晶压制择优取向枝晶生长,出现反常淘汰现象,但是始终难以完全淘汰靠近试样壁面附近的择优取向枝晶。

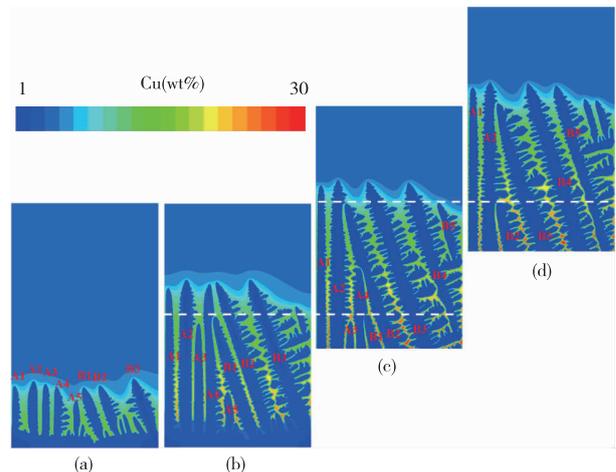


图 4 汇聚生长过程中的枝晶演化结果

Fig. 4 Results of dendrite evolution during convergent growth

## 2.3 颗粒对定向凝固汇聚生长的影响

为了研究颗粒对定向凝固汇聚生长的影响,在枝晶生长到 40 s 时引入直径为 100  $\mu\text{m}$  的球形颗粒,颗粒放置位置为 A 与 B 晶粒交界附近,分别开展了三个位置的模拟研究,分别为 B1、B2 和 A3 枝晶前沿。具体分析如下。

图 5 为当颗粒位于 B1 生长路径上的枝晶演化过程。颗粒的引入不仅阻碍了 A5 和 B1 枝晶的生长,而且改变了后期枝晶生长演化过程。一方面,由于 B1 生长过程中排出的溶质受到颗粒的影响无法向熔体远处扩散从而提高了 B1 枝晶周围的溶质浓度。另一方面,颗粒的存在物理阻碍了枝晶 B1 生长。在这两方面共同作用下实现了对 B1 枝晶生长的阻碍,当 80 s 时,B1 枝晶绕过颗粒后已经明显落后于 A4 枝晶,最终被其阻断淘汰。因此,B1 枝晶被阻断后留给 A4 和 B2 枝晶较大生长空间,A4 和 B2 枝晶开始竞争生长。但是由于 A4 在与择优生长取向枝晶竞争中占据优势淘汰了 A3 枝晶,提供了更大的生长空间,因此在后期与非择优取向的 B2 枝晶竞争生长中占据优势,使非择优取向枝晶始终无法超越择优取向的 A4 枝晶,维持该状态直至凝固后期。与前文无颗粒作用时的最终枝晶形貌相比较可发现,当在晶界处引入颗粒后择优取向枝晶区域有所扩大,有效阻止了反常淘汰现象出现。

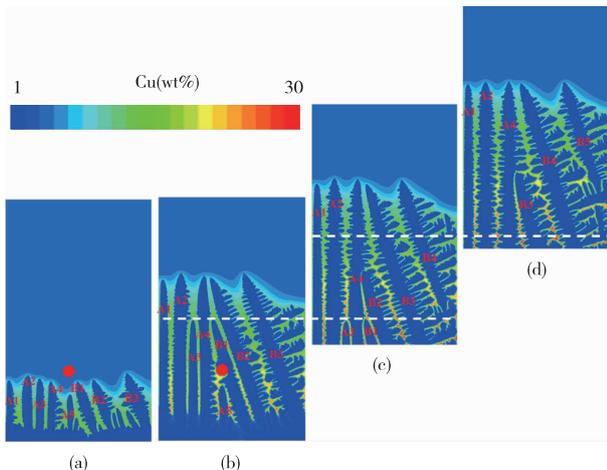


图 5 颗粒位于 B1 生长路径上的枝晶演化结果

Fig. 5 Dendrite evolution results when non-dissociated particles are located on B1 growth paths

但是当颗粒位于 B2 枝晶的生长前沿时却呈现不同的凝固组织演化过程。如图 6 所示,当颗粒阻挡 B2 枝晶生长时,并不影响 B1 枝晶的生长,因此 B1 枝晶始终与 A4 枝晶存在竞争生成。由于具有择优取向的 A4 枝晶在生长中受到 A2 和 A3 枝晶溶质场的影响,在与 B1 枝晶的竞争中逐渐处于弱势,并在如图 5(b)所示 80 s 后被 B1 枝晶淘汰,同理由于 A2 枝晶背靠试样壁面,具有较大的溶质存储空间,在与非择优取向枝晶竞争生长中逐渐处于优势状态,直至凝固后期也未被淘汰。此算例凝固的

结果与无颗粒影响时的凝固组织较为接近,不仅出现了反常淘汰现象,而且择优取向枝晶也难以被完全淘汰,颗粒对最终凝固组织的影响较小。

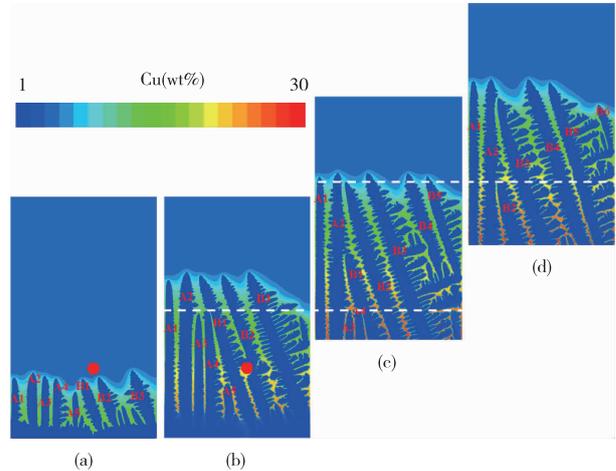


图 6 颗粒位于 B2 生长路径上的枝晶演化结果

Fig. 6 Dendrite evolution results when non-dissociated particles are located on B2 growth paths

实验中的颗粒不仅可能存在于非择优取向枝晶前沿,而且也可能存在于择优取向枝晶前沿。图 7 为颗粒放置在 A3 枝晶前沿后凝固组织演化结果。模拟结果显示,当 A3 枝晶被颗粒阻挡后,同时阻挡了 A2 枝晶溶质场向 A4 枝晶扩散。当 A5 枝晶被淘汰后留下较大空间可供 A4 和 B1 枝晶生长。由于 A4 枝晶左右两侧均出现较大的溶质扩散空间,导致 A4 在与 B1 枝晶的生长过程中占据领先优势,最后 A4 枝晶淘汰 B1 枝晶。而 B1 枝晶被淘汰后留下的空间又可供 A4 和 B2 枝晶生长,由于 A4 枝晶在 B2 枝晶靠近前已经生长到有利高度,因此 A4 枝

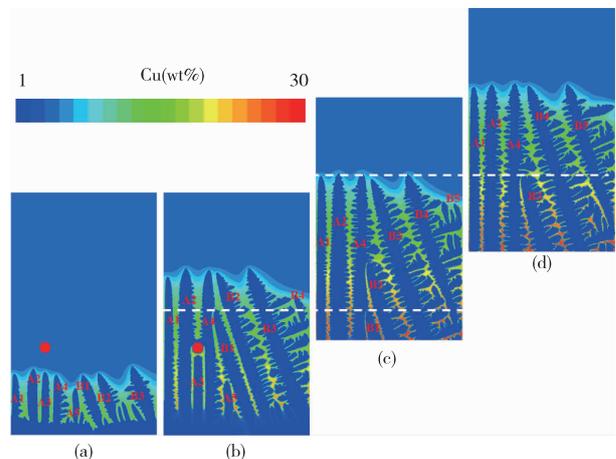


图 7 颗粒位于 A3 生长路径上的枝晶演化结果

Fig. 7 Dendrite evolution results when non-dissociated particles are located on the A3 growth paths

晶在后期的凝固生长中始终无法被淘汰,因此本算例中的反常淘汰现象也未出现。比较此算例凝固结果与无颗粒影响时的凝固组织发现,颗粒的引入可以抑制反常淘汰现象,为择优取向枝晶的生长提供稳定性。

综上所述,当颗粒引入合金定向凝固汇聚生长的晶界附近后,对后期的枝晶生长具有较大影响,不仅可干扰非择优生长取向枝晶,使其在与择优生长取向枝晶竞争生长中处于弱势,从而减轻汇聚生长过程中反常淘汰现象的出现。同时如处于合适的择优取向枝晶前沿有助于提高其生长稳定性,使其在与非择优取向枝晶竞争生长中处于领先地位,亦可减轻汇聚生长过程中反常淘汰现象的出现。

### 3 结论

为了研究颗粒对 Al-4.5 wt% Cu 合金定向凝固汇聚生长过程中枝晶演化的影响,建立了基于欧拉多相流技术与元胞自动机方法的定向凝固模型,通过比较不同取向枝晶前沿溶质分布及枝晶长度验证了模型的可靠性,系统研究了颗粒位置对汇聚生长中的枝晶演化的影响,主要结论如下:

1)不同取向的枝晶在相同条件下获得的枝晶前沿溶质分布和枝晶长度差异较小,其中溶质场误差小于 1.6%,枝晶长度误差小于 2.0%,验证了模型的可靠性。

2)无颗粒影响的汇聚竞争生长中非择优取向枝晶压制择优取向枝晶生长,再现了反常淘汰现象,由于边界效应的存在,非择优取向枝晶始终难以完全淘汰靠近试样壁面附近的择优取向枝晶。

3)颗粒引入合金定向凝固汇聚生长的晶界附近后,其对后期的枝晶生长具有较大影响,不仅可干扰非择优生长取向枝晶,也提高择优取向枝晶生长稳定性,实现反常淘汰现象的控制。

#### 参考文献:

[1] 唐玲. 过共晶 Mg-Cu 合金凝固组织中  $\alpha$ -Mg 相的形成机制[J]. 有色金属工程, 2015, 5(3): 5-9.  
TANG Ling.  $\alpha$ -Mg phase forming mechanism in solidified microstructure of hypereutectic Mg-Cu alloy[J]. Nonferrous Metals Engineering, 2015, 5(3): 5-9.

[2] 王妍, 崔春娟, 张凯, 等. 定向凝固金属间化合物的研究进展[J]. 材料导报, 2022, 36(24): 135-142.  
WANG Yan, CUI Chunjuan, ZHANG Kai, et al.

Research progress in directionally solidified intermetallic compounds [J]. Materials Reports, 2022, 36 (24): 135-142.

[3] 贾志宏, 朱翔, 马铭泽, 等. 热处理对定向凝固 CMSX-6 合金组织及拉伸性能的影响[J]. 有色金属(冶炼部分), 2014(6): 63-67.  
JIA Zhihong, ZHU Xiang, MA Mingze, et al. Effects of heat treatment on microstructure and tensile properties of directional solidification CMSX-6 alloy [J]. Nonferrous Metals (Extractive Metallurgy), 2014(6): 63-67.

[4] WALTON D, CHALMERS B. The origin of the preferred orientation in the columnar zone of ingots[J]. Trans. Metall, 1959, 215: 447-456.

[5] D'SOUZA N, ARDAKANI M G, WAGNER A, et al. Morphological aspects of competitive grain growth during directional solidification of a nickel-base superalloy, CMSX4 [J]. Journal of Materials Science, 2002, 37: 481-487.

[6] ESAKA H. Dendrite growth and spacing in succinonitrile-acetone alloys [D]. Lausanne, Switzerland. EPFL, 1986.

[7] ZHOU Y Z, VOLEK A, GREEN N R. Mechanism of competitive grain growth in directional solidification of a nickel-base superalloy [J]. Acta Materialia, 2008, 56(11): 2631-2637.

[8] MENG X B, LU Q, ZHANG X L, et al. Mechanism of competitive growth during directional solidification of a nickel-base superalloy in a three-dimensional reference frame [J]. Acta Materialia, 2012, 60(9): 3965-3975.

[9] 任能, 杨绿伟, 李军, 等. 高温合金定向凝固数值模拟研究进展[J]. 特种铸造及有色合金, 2023, 43(10): 1336-1350.  
REN Neng, YANG Lüwei, LI Jun, et al. Research progress in numerical simulation of Superalloys during directional solidification [J]. Special Casting and Nonferrous Alloys, 2023, 43(10): 1336-1350.

[10] GEORGE W L, WARREN J A. A parallel 3D dendritic growth simulator using the phase-field method [J]. Journal of Computational Physics, 2002, 177 (2): 264-283.

[11] PROVATAS N, GOLDENFELD N, DANTZIG J. Efficient computation of dendritic microstructures using adaptive mesh refinement [J]. Physical Review Letters, 1998, 80 (15): 3308. DOI: 10. 1103/physrevlett. 80. 3308.

[12] 王锦程, 郭春文, 李俊杰, 等. 定向凝固晶粒竞争生长的研究进展[J]. 金属学报, 2018, 54(5): 657-668.

- WANG Jincheng, GUO Chunwen, LI Junjie, et al. Recent progresses in competitive grain growth during directional solidification[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2018, 54(5): 657-668.
- [13] LI J J, WANG Z J, WANG Y Q, et al. Phase-field study of competitive dendritic growth of converging grains during directional solidification [J]. *Acta Materialia*, 2012, 60(4): 1478-1493.
- [14] YU H L, LI J J, LIN X, et al. Anomalous overgrowth of converging dendrites during directional solidification[J]. *Journal of Crystal Growth*, 2014, 402: 210-214.
- [15] TAKAKI T, SAKANE S, OHNO M, et al. Large-scale phase-field studies of three-dimensional dendrite competitive growth at the converging grain boundary during directional solidification of a bicrystal binary alloy[J]. *Isij International*, 2016, 56(8): 1427-1435.
- [16] 张勇佳, 周建新, 殷亚军, 等. 高温合金定向凝固过程中枝晶生长与溶质对流数值模拟[J]. *精密成形工程*, 2023, 15(10): 13-20.
- ZHANG Yongjia, ZHOU Jianxin, YIN Yajun, et al. Numerical simulation of dendrite growth and solute convection during directional solidification of superalloy[J]. *Journal of Netshape Forming Engineering*, 2023, 15(10): 13-20.
- [17] 郭春文. 定向凝固双晶竞争生长的过程及机制[D]. 西安: 西北工业大学, 2020: 67-87.
- GUO Chunwen. Process and mechanism of Bi-crystal competitive growth during directional Solidification[D]. Xi'an: Northwestern Polytechnical University, 2020: 67-87.
- [18] REN N, LI J, BOGDAN N, et al. Simulation of dendritic remelting and fragmentation using coupled cellular automaton and Eulerian multiphase model[J]. *Computational Materials Science*, 2020, 180: 109714. DOI: 10.1016/j.commatsci.2020.109714.
- [19] 葛鸿浩, 王永新, 田锡天, 等. 基于欧拉多相流技术与元胞自动机方法的 Mg-9%Al 合金凝固组织模拟[J]. *中国有色金属学报*, 2023, 33(7): 2116-2124.
- GE Honghao, WANG Yongxin, TIAN Xitian, et al. Simulation on solidification microstructure of Mg-9% Al alloy based on Euler multiphase flow technique and cellular automata method[J]. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*, 2023, 33(7): 2116-2124.
- [20] 葛鸿浩, 王永新, 田锡天, 等. 强制流动对 Mg-9%Al 合金定向凝固组织演化的模拟研究[J]. *工程科学学报*, 2024, 46(4): 695-703.
- GE Honghao, WANG Yongxin, TIAN Xitian, et al. Simulation of forced flow on the evolution of directional solidification microstructure of Mg-9% Al alloy[J]. *Chinese Journal of Engineering*, 2024, 46(4): 695-703.
- [21] 袁训锋, 丁雨田, 胡勇. 铝-铜二元合金定向凝固的相场模拟[J]. *机械工程材料*, 2010, 34(1): 96-100.
- YUAN Xunfeng, DING Yutian, HU Yong. Phase-field simulation of Al-Cu binary alloy during directional solidification[J]. *Materials for Mechanical Engineering*, 2010, 34(1): 96-100.
- [22] 王韬涛. 铝合金显微气孔演化数值模拟及其软件开发[D]. 南京: 东南大学, 2017.
- WANG Taotao. Numerical modeling and simulation software development of microporosity evolution in aluminum alloy [D]. Nanjing: Southeast University, 2017.
- [23] ZHU M F, LEE S Y, HONG C P. Modified cellular automaton model for the prediction of dendritic growth with melt convection[J]. *Physical Review E Statistical Nonlinear & Soft Matter Physics*, 2004, 69 (6): 061610. DOI: 10.1103/PhysRevE.69.061610.
- [24] 宋迎德. 镁合金凝固组织模拟[D]. 大连: 大连理工大学, 2012.
- SONG Yingde. Microstructure simulation of magnesium alloy[D]. Dalian: Dalian University of Technology, 2012.
- [25] TAN W D, WEN S Y, BAILEY N, et al. Multiscale modeling of transport phenomena and dendritic growth in laser cladding processes [J]. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 2011, 42B: 1306-1318.
- [26] ZHOU Y Z, GREEN N R. Competitive Grain Growth in Directional Solidification of a Nickel-Base Superalloy[J]. *Superalloys*, 2008: 317-324.
- [27] 周亦青, 金涛, 孙晓峰. 双晶镍基高温合金定向凝固过程的结构演化[J]. *金属学报*, 2010, 46(11): 1327-1334.
- ZHOU Yizhou, JIN Tao, SUN Xiaofeng. Structure evolution in directionally solidified bicrystals of nickel base superalloys [J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2010, 46(11): 1327-1334.
- [28] CHEN C, SUN J, YANG Y, et al. Effect of dendrite arrays near grain boundary on the competitive growth of converging Ni-based bi-crystal superalloys [J]. *Materials Letters*, 2023, 344: 134477. DOI: 10.1016/j.matlet.2023.134477.