

基于元胞自动机法的高温合金凝固组织数值模拟研究进展

李澳奇, 孙 逊, 荆高扬, 关 洋, 税国彦, 孙 龙, 金 磊

(中国机械总院集团沈阳铸造研究所有限公司, 高端装备铸造技术全国重点实验室, 辽宁沈阳 110022)

摘要: 铸件性能与其凝固组织密切相关, 准确认识和理解铸造合金凝固微观组织的形成机理与控制途径, 有助于提高铸件的本体性能。元胞自动机法在合金凝固组织数值模拟方面具有极大潜力。本文综述了近年来该方法在铸造高温合金凝固组织数值模拟方面的研究和应用现状及存在问题, 并展望了其未来走向。

关键词: 铸造高温合金; 凝固组织; 晶粒形貌; 数值模拟; 元胞自动机法

高温合金具有优异的力学性能和化学稳定性, 被广泛应用于航空航天等重要领域^[1-2]。新一轮的科技革命和产业变革推动我国高端装备制造业向着数字化、信息化、智能化以及绿色化等方向发展, 铸造高温合金材料对高端装备发展至关重要。材料的性能在很大程度上取决于材料的微观组织结构, 因此, 对铸造高温合金凝固组织的分析、设计和控制成为材料研发的重要环节^[3-5]。

传统铸件凝固微观组织的研究主要是通过开展多次试验来探索其形成规律, 存在资源消耗大, 试验周期长以及难以对组织进行针对性控制等问题, 采用试验研究的方法已经完全不能满足降低新品试制成本、缩短新品试制周期的要求^[6]。

随着计算机运算能力的提高, 计算材料学快速发展, 推动了材料研发以及产品研制由“经验+试错”的模式向计算驱动的模式转变。依托计算机强大的计算能力及合理的物理和数学模型, 即可对铸件凝固过程的微观组织进行数据化和可视化处理, 进而帮助人们深入理解凝固过程微观组织的形成机制, 为材料设计、产品研制以及工艺改进提供新的科学依据^[7-8]。

在过去几十年内, 国内外学者对凝固组织数值模拟做了大量研究工作^[3-4, 7]。目前, 凝固过程中微观组织的数值模拟计算方法主要分为确定性方法、相场法、蒙特卡洛法以及元胞自动机法^[9]。对于铸造高温合金而言, 无论是那种方法, 都能在一定程度上准确地模拟铸件的凝固微观组织。但是, 元胞自动机法因其模型准确, 算法简单以及计算效率高等优势, 在凝固过程微观组织的数值模拟方面得到广泛应用^[10]。

本文总结了几种常见微观组织数值模拟方法及其在高温合金方面的应用, 之后, 重点介绍了凝固过程中基于元胞自动机法数值模拟技术的发展历史及其在铸造高温合金方面的应用现状, 最后, 展望了该技术的未来走向。

1 金属凝固微观组织数值模拟方法

1.1 确定性方法

确定性方法是建立在经典金属凝固理论基础上的的一种微观组织数值模拟方法。在确定性方法中, 晶粒的形核密度及生长情况采用确定性的函数, 晶核的形状需要人为设定, 如等轴晶为球状、柱状晶为圆柱状, 凝固过程中晶粒一旦形核, 便以确定的速度进行生长^[11-12]。

作者简介:

李澳奇 (1999-), 男, 硕士, 主要研究方向为高温合金精密铸造技术。E-mail: 2629978503@qq.com

通信作者:

孙逊, 男, 正高级工程师。E-mail: sx@foundrynations.com

中图分类号: TG113.1

文献标识码: A

文章编号: 1001-4977 (2025)

05-0578-10

收稿日期:

2024-08-19 收到初稿,

2024-09-29 收到修订稿。

确定性方法符合合金凝固的物理背景,且可以计算金属凝固过程中的固相分数。但是,确定性方法忽略了凝固过程中的随机性因素,如晶粒的形核位置以及择优生长方向等等,使其应用具有很大的局限性,此外,确定性方法由于忽略了晶体学因素的影响,不能预测柱状晶向等轴晶的转变过程,也不能预测每个晶粒的具体形貌^[8, 13]。

1.2 相场法

相场法(Phase Field, PF)法是20世纪80年代为了解决铸件凝固微观组织数值模拟中难以追踪固-液界面的形状和位置的问题发展而来^[14]。PF法通过引入相场变量 $\Phi(x, t)$ 来表征材料的计算域(x 表示位置, t 表示时间),当 $\Phi(x, t)=1$ 时表示固相,当 $\Phi(x, t)=0$ 时表示液相,这样,凝固过程中固-液界面的不断推进即可用相场变量 $\Phi(x, t)$ 从0~1的连续变化来表征,即固-液界面就变成了一个具有一定厚度的薄层,从而避免了直接追踪固液界面的形状和位置^[8, 15-16]。

陈云等为解决凝固过程固液界面演化规律的Stefan自由边界问题,利用自适应有限元法求解了单质镍的相场模型的控制方程,研究了大计算域和薄界面情况下枝晶的生长特点及演化机理^[17]。Wang等利用定量相场法,研究了各向异性、冷却速率、温度梯度和取向角等多参数因素对定向凝固工艺中柱状树突形态和生长的影响^[18]。

PF法在处理复杂固液界面问题以及耦合外部场方面具有明显优势,但是对网格划分精度要求高,计算效率低,计算复杂,相场模型的计算尺度小,仅有几十微米^[8, 19],Yang等虽然利用图像处理单元(graphic processing unit, GPU)开发了一种异步并行算法来规避相场法效率不足的问题,并模拟了镍基高温合金DD6在三维凝固过程中微观组织的形成,但计算尺度仍然很小,如图1所示(计算域 $768\mu\text{m} \times 768\mu\text{m} \times 768\mu\text{m}$;计算步长 8×10^5 ;不同的颜色表示具有不同方向的树突),使得PF法很难应用于大尺寸铸件凝固微观组织数值模拟^[20]。

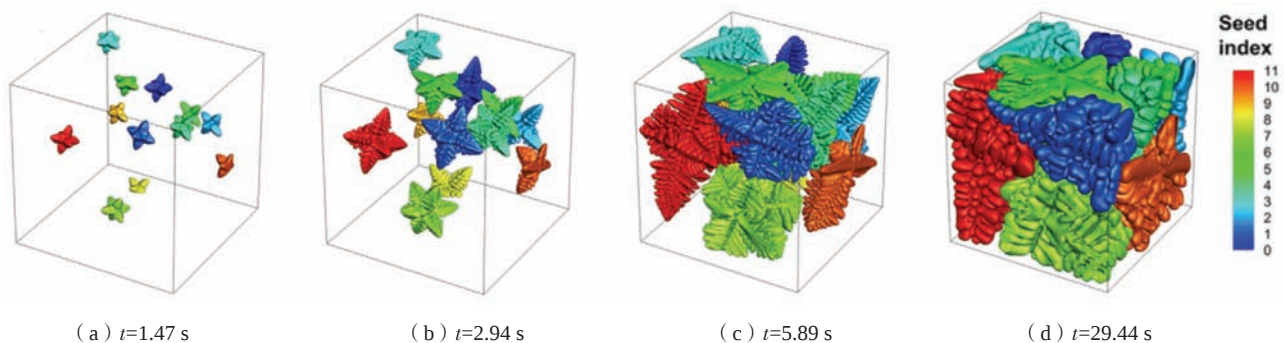


图1 DD6高温合金在1 K/s的冷却速率下的枝晶生长形态

Fig. 1 Dendrite growth morphologies of DD6 superalloy at a cooling rate of 1K/s

1.3 随机性方法

金属凝固过程中存在许多随机性因素,如晶核位置的随机分布和晶粒取向的随机选择以及凝固过程的传质、能量起伏和结构起伏等。采用随机性方法能够更真实地模拟微观组织的实际凝固过程。目前,随机性微观组织数值模拟方法主要有蒙特卡洛(Monte Carlo, MC)法和元胞自动机(Cellular Automaton, CA)法^[14, 21]。

1.3.1 蒙特卡洛法

MC法以概率统计理论为基础,基于体系界面能最低原理,以随机抽样为主要手段。以二维MC法为例,通过将微观结构映射到离散的三角形或多边形网格上,每一个网格赋予一个初始索引值 $P=0$,表示液态,当某一个网格的温度低于液相线时,在网格中选取单元 i ,计算其形核概率 $P_n(t+\Delta t)$:

$$P_n(t+\Delta t) = \delta N \cdot V_m \quad (1)$$

式中: V_m 为网格单元的体积; δN 为 t 到 $t+\Delta t$ 时刻单元体积熔体的形核数目,其值可由Oldfield连续形核模型求出。

将 $P_n(t+\Delta t)$ 与一个随机数发生器 n ($0 \leq n \leq 1$)作比较,若 $P_n(t+\Delta t) > n$,则该单元开始形核凝固,状态发生改变的同时被赋予非0索引,表示非液态。随机赋予 P_i 一个从1到 Q 的正整数晶向值(Q 为可取的晶向数),表示晶向。根据界面能最小原理,计算其长大概率 $P_g(t+\Delta t)$ ^[22]:

$$P_g(t+\Delta t) = \begin{cases} 0 & \Delta T \leq 0 \\ \exp(-\Delta F_g/kT) & \Delta T > 0 \end{cases} \quad (2)$$

$$\Delta F_g = \Delta F_v + \Delta F_s \quad (3)$$

式中: ΔF_g 为总自由能变化; ΔF_v 为过冷度决定的体积自由能变化; ΔF_s 为不同界面造成的界面能变化; k 为玻耳兹曼常数。

MC法最早由Anderson用于模拟再结晶过程中晶粒的长大及尺寸分布^[23-24]，之后，Brown和Spittle等利用MC法模拟了凝固过程晶粒的生长以及晶粒之间的相互作用，发现柱状晶前沿等轴晶的体积分数为50%时，会发生柱状晶向等轴晶转变（Columnar to Equiaxed Transition, CET）^[25]。钟晓征和陈伟元等考虑界面能和迁移率各向异性对能量体系的影响，利用MC法模拟了多晶材料的正常长大和异常长大^[26-27]。王岗等为了更加直观地显示晶粒生长过程中系统能量的变化，建立了晶界能各向同性情况下晶粒生长的MC模型，

并对等温情况下晶粒的生长进行数值模拟，计算结果与晶粒尺寸变化相符合，如图2所示（数值模拟点阵为 100×100 ，取向值为32，步数为 1×10^3 ），在0~200 s范围内晶粒快速生长，400 s后，晶粒尺寸基本稳定^[28]。

MC法基于能量最小原理计算晶粒的生长概率，缺乏对晶粒生长物理机制的考虑，如晶粒的择优取向生长方向、枝晶尖端生长动力学等问题。此外，MC法中没有明确体现凝固时间的因素，当所有计算单元被随机抽样完毕后即结束数值模拟过程。

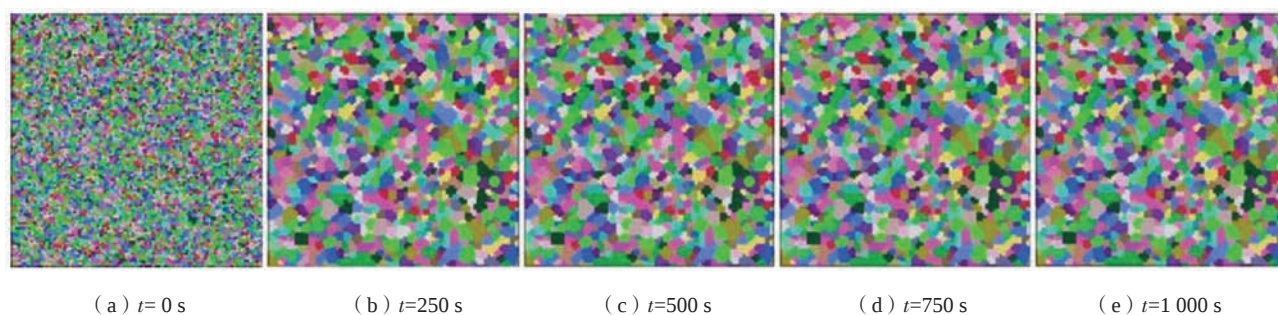


图2 晶粒形貌随等温时间的变化

Fig. 2 Changes of grain morphologies with isothermal time

1.3.2 元胞自动机法

CA法整合了随机性方法与确定性方法的优点，该法综合考虑了非均质形核、晶体生长动力学和晶体的择优生长取向以及晶粒间的竞争生长机制等凝固过程中的物理现象，因此，采用CA法可以对凝固过程晶粒组织的变化进行定量数值模拟^[29]。

李殿中等利用CA法对K417镍基高温合金涡轮叶片的组织演变过程和热加工过程中的再结晶组织进行数值模拟，计算结果与实测结果吻合良好^[30]。Carter等基于CA模型，通过采用商用单晶铸造炉和测温试验，优化了界面传热系数，进而使数值模拟结果与试验结果更加吻合^[31]。

CA法以形核的物理机理和晶体生长动力学理论为基础，并且将枝晶尖端的生长动力学引入到数学模型，计算得到的微观组织不依赖计算过程中的单元网格划分结构。CA法数值模拟结果虽然与MC法相似，但是它能够定量反映过冷度和溶质浓度对材料热物理性能的影响，从而对合金凝固过程进行控制，更加接近实际凝固过程。

2 凝固组织数值模拟CA法的发展历史

2.1 凝固组织数值模拟 CA 法的提出

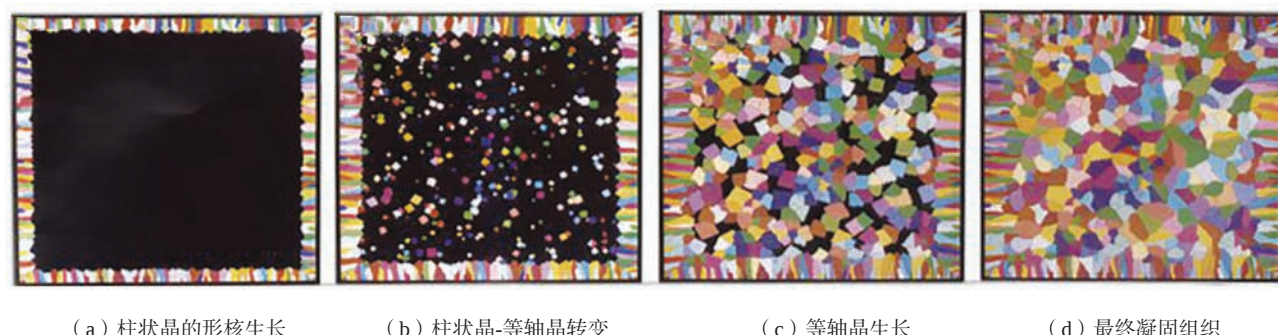
CA法最早是在20世纪50年代由著名的数学家John von Neumann和Stanislaw Ulam在对自重复图灵自动机和粒子演化问题的模拟时提出，当时，CA法是作为纯

数学的属性进行研究，并没有引起其他领域研究人员广泛关注。直到20世纪70年代英国数学家John Horton Conway基于CA理论提出“生命游戏”模型，Gardner Martin将这一模型通过程序可视化，使得CA法引起了研究人员的广泛关注^[32-33]。20世纪80年代，CA法开始在物理领域崭露头角，其中，最具代表性的人物Stephen Wolfram系统地研究了各种演化的元胞自动机行为，为预测微观结构演变提供了重要的理论基础^[34]。

20世纪90年代初，Hesselbarth和Goebel首先采用CA法模拟了静态晶粒的再结晶过程，并讨论了不同模型参数与算法对再结晶过程中形核及长大动力学的影响^[35]。1993年，Rappaz和Gandin把CA法引入到二维金属凝固组织数值模拟计算中，并借助基于Gauss分布的连续形核模型和KGT生长模型，计算了均匀温度场下不同质量分数Al-Si合金的晶粒组织，如图3所示（计算域： $5 \times 5 \text{ mm}^2$ ）^[8, 36-37]。之后，Spittle和Brown提出了一种用于模拟二元合金定向凝固过程中稳态柱状晶生长的二维CA模型，并通过试验准确地验证了这一模型^[38]。Rappaz等人的一系列试验研究证明了CA法可以用于模拟凝固组织的演变过程。

2.2 凝固组织 CA 模型

凝固过程微观组织的数值模拟主要是对凝固过程晶粒的形核和长大过程进行简化或近似处理，然后，利用计算机数值处理技术预测铸件的凝固过程。



(a) 柱状晶的形核生长

(b) 柱状晶-等轴晶转变

(c) 等轴晶生长

(d) 最终凝固组织

图3 Al-7Si合金凝固过程晶粒的形核及长大过程

Fig. 3 Nucleation and growth processes of grains during solidification of Al-7%Si alloy

在高温合金结构件设计越来越复杂的今天,与金属液流动和凝固相关的问题变得愈发重要。铸件的凝固过程是一个复杂的过程,它涉及热量传输、动量传输和溶质传输等过程,因此,准确的凝固组织演变数学模型和高效的数值计算方法对铸件微观组织形成的数值模拟至关重要。

2.2.1 凝固过程晶粒的形核模型

形核是凝固过程的第一步,是准确预测微观组织的前提条件,合适形核模型的建立对后续微观组织的模拟至关重要^[39]。金属的形核可以分为均质形核和异质形核,在CA模型中,金属凝固过程的形核通常采用异质形核,对于异质形核,通常采用连续形核模型^[40]。

连续形核模型假设形核数与过冷度保持连续的相关关系。1966年,Oldfield等在模拟激冷灰铸铁的共晶生长时,提出了一种连续形核模型,该连续形核模型假设形核数与过冷度保持连续指数关系^[8],即:

$$N = A \cdot (\Delta T)^m \quad (4)$$

式中: N 为单位体积内熔体形核数目; A 为取决于试验条件的常数; ΔT 为熔体过冷度; m 为指数。该模型在过冷度较小时比较准确,当过冷度增大时,则不适合

描述形核过程。

在Oldfield连续形核模型基础上,1989年,Thévoz等^[41]提出了一种基于Gauss分布的连续形核模型,该模型假设形核发生在由连续的而非离散的分布函数 $dN/d(\Delta T)$ 基底上,如图4所示。在某一过冷度 ΔT 下,晶粒密度 $N(\Delta T)$ 可由相应的分布函数曲线积分求得:

$$N(\Delta T) = \int_0^{\Delta T} \frac{dN}{d(\Delta T')} \quad (5)$$

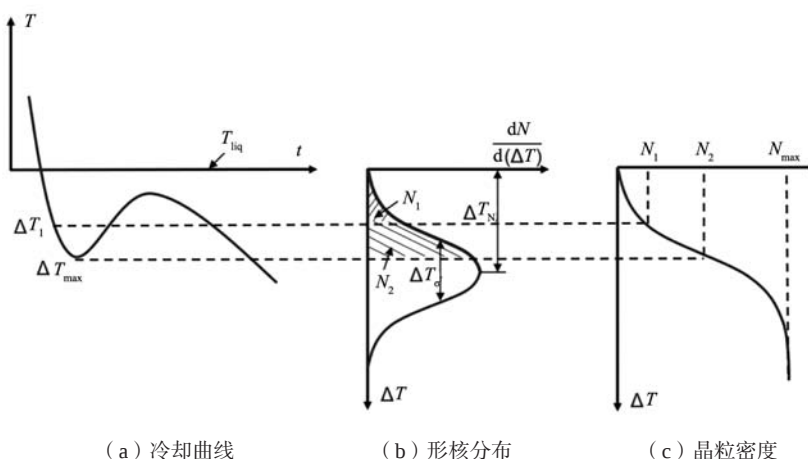
由式可知,只要得到形核分布的积分表达式,即可求得形核晶粒数,形核分布的积分表达式为:

$$\frac{dN}{d(\Delta T')} = \frac{N_{\max}}{\sqrt{2\pi} \Delta T_{\sigma}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\Delta T - \Delta T_N}{\Delta T_{\sigma}} \right)^2 \right] \quad (6)$$

式中: ΔT_N 为平均形核过冷度; ΔT_{σ} 为标准曲率过冷度; $N_{\max}$ 为异质形核衬底的最大密度。该模型可以准确地反映形核过程的实际情况,目前在工程技术领域应用最为广泛。

2.2.2 凝固过程晶粒的生长模型

固相晶核形成后,会发生晶核的生长。目前,凝固微观组织的生长模型按照生长方式一般分为共晶生长和枝晶生长,其中,枝晶生长是较为常用也是较为



(a) 冷却曲线

(b) 形核分布

(c) 晶粒密度

图4 过冷度与形核位置分布及晶核密度的关系

Fig. 4 Relationship between supercooling and nucleation site distribution and nucleus density

复杂的。在CA微观组织数值模拟中，枝晶生长模型通常采用KGT模型。

Kurz、Giovanola、Trivedi等^[11]最早推导和建立了KGT模型，以计算枝晶尖端的生长速度。枝晶生长的核心是确定固-液界面的推进速度，而枝晶推进速度的驱动力主要由枝晶尖端的过冷度 ΔT 决定，即：

$$\Delta T = \Delta T_c + \Delta T_i + \Delta T_r + \Delta T_k \quad (7)$$

式中： ΔT_c 、 ΔT_i 、 ΔT_r 、 ΔT_k 分别为成分过冷、热力学过冷、固-液界面的曲率过冷和生长动力学过冷。对于大多数合金， ΔT_i 、 ΔT_r 、 ΔT_k 可以忽略。在此条件下，为了加快计算速度，对KGT模型进行拟合，得到了枝晶尖端生长速度表达式：

$$v(\Delta T) = a_2 \Delta T^2 + a_3 \Delta T^3 \quad (8)$$

式中： $v(\Delta T)$ 为枝晶尖端的生长速度， a_2 和 a_3 为拟合的多项式系数。

KGT模型未考虑凝固过程中的溶质再分配和界面曲率等因素，因而仅用于模拟枝晶形貌，而不能描述枝晶内部形态和微观偏析等细节，但该模型的计算效率高，可广泛应用于模拟大尺寸铸件的凝固过程^[10]。

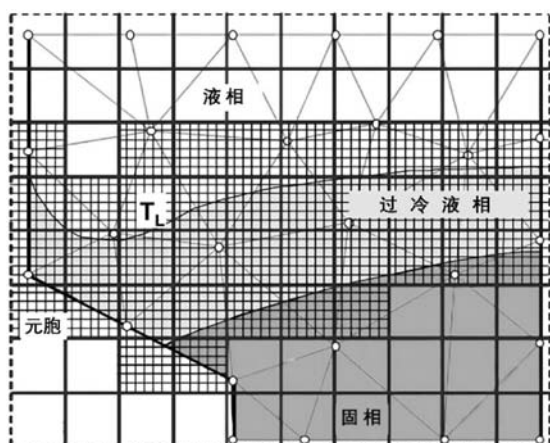
2.3 凝固组织数值模拟宏-微观耦合模型的发展

在实际生产过程中，铸件尺寸往往较大，受限于凝固过程物理模型和数学模型的复杂性以及计算机软硬件的发展水平，难以直接运用CA法对整个铸件的微观组织进行数值模拟。在此情况下，宏-微观耦合模型应运而生，借助宏观的传热、传质和传动量模型与CA模型相耦合的方法来提高计算效率，以实现CA法在实际工程领域的应用。

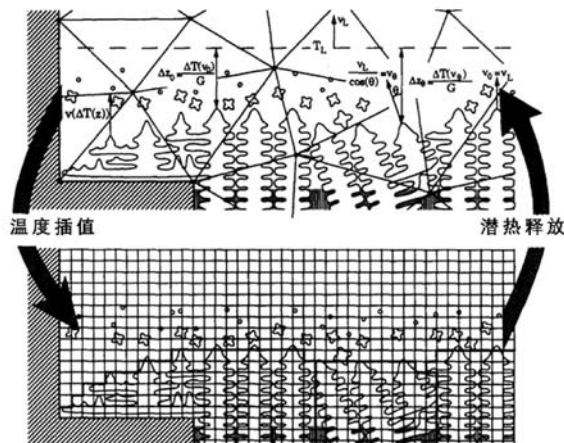
1994年，Gandin和Rappaz首次将CA法和有限元(Finite Element, FE)法相耦合，形成了高效率的

CA-FE模型^[18, 42]，如图5所示，该模型对温度场和晶粒生长采用不同的网格，即采用较大的网格计算温度场，然后用温度场去影响小网格晶体的形核和生长，CA-FE模型的建立是宏-微观耦合研究的开创性工作，为合金凝固组织的跨尺度研究奠定了基础。1996年，Nastac和Stefanescu利用微潜热(Micro-Latent Heat Method, MLHM)法实现了CA法和FE法的同时求解^[43-44]，并利用该模型成功模拟了IN718合金的凝固过程，与经典潜热法相比，该模型的计算效率提升了90%。之后，Gandin和Rappaz^[45-46]建立了预测凝固过程中树枝状晶粒结构的三维CA-FE模型，这标志着CA法可用于解决实际工程领域上的问题，CA法在微观组织数值模拟方面的应用开始展现。

21世纪初是CA法发展的高潮，研究人员为了更快、更准确地模拟凝固过程微观组织的演变过程，发展和完善了一系列基于CA法的宏-微观耦合数值模拟模型。Zhu M. F. 等^[29, 48-49]为了更快、更准确地研究晶粒内部的枝晶形貌，在考虑了固液界面曲率变化和溶质分配的前提下，提出了改进的CA模型(Modified Cellular Automata, MCA)，并通过和有限体积(Finite Volume, FV)法的耦合，定量地模拟了不同冷却速率下枝晶的生长演变过程，如图6所示。P. D. Lee和W. Wang等将CA法与有限差分(Finite Difference, FD)法相耦合，准确地模拟了多种合金的溶质扩散和枝晶生长以及孔隙率等的演变过程^[50-52]。Xu Q. Y. 等基于固/液界面平衡、热传输、溶质传输及晶粒生长过程，将FD法和改进的CA法相耦合，预测了定向凝固过程中柱状晶的竞争生长过程^[53-54]，研究发现在凝固初期，底部多晶粒的定向生长处于竞争非稳定生长状态，随着凝固的进行，晶粒生长区域稳定，与试验结果相符。



(a) CA-FE耦合模型动态分配图^[47]



(b) 定向凝固过程中柱状晶之间的竞争生长的CA-FE模型

图5 CA-FE耦合模型示意图

Fig. 5 Schematic diagram of CA-FE coupling model

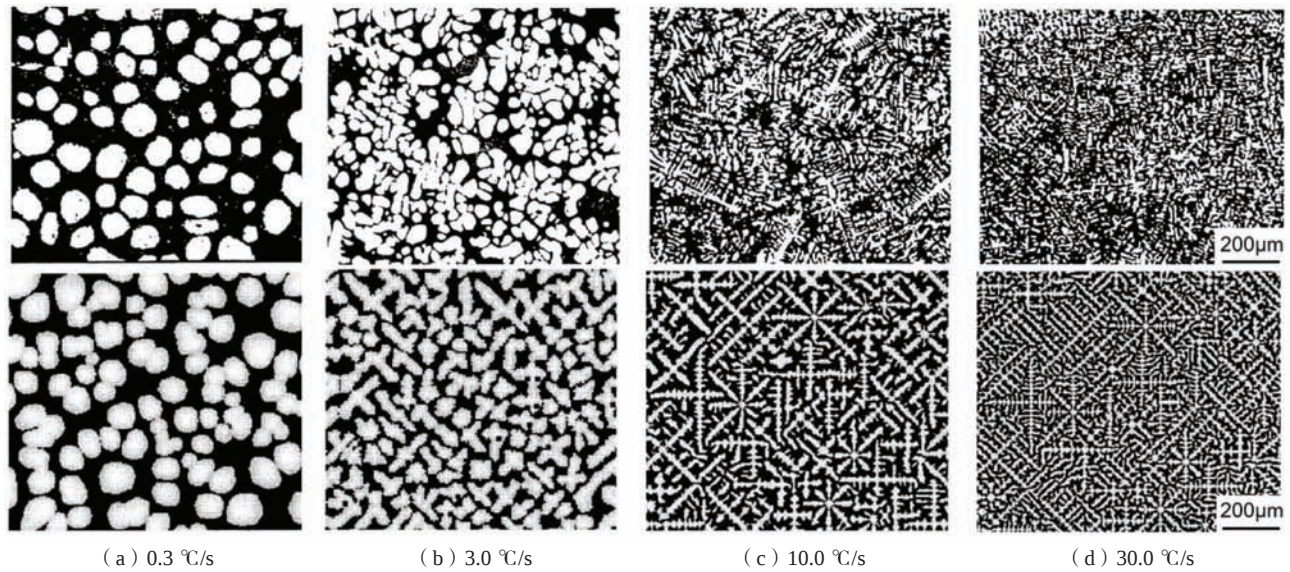


图6 不同冷却速率下Al-7%Si合金试验(上)和数值模拟(下)显微组织示意图

Fig. 6 Microstructural diagrams of the experiments (upper) and numerical simulations (lower) of the Al-7%Si alloy at different cooling rates

3 CA法在凝固组织数值模拟方面的应用现状

3.1 等轴晶组织数值模拟

铸造高温合金晶粒组织作为一种重要的微观组织特征,其大小与分布对铸件本体力学性能具有重要影响。借助耦合宏观传热、传质和传动力模型的CA法,可以很好地再现凝固过程高温合金的晶粒组织形貌^[55]。

鄯宇等采用FE耦合CA的方法,研究了K439B框型铸件两个特征部位温度梯度和冷却速率对晶粒组织变化的影响^[56];研究结果表明,高的冷却速率和低的温度梯度有利于等轴晶组织的形成,数值模拟与试验结果吻合较好。Seo等利用三维CA-FE模型研究了不同熔体过热温度(T_{sh})和型壳温度(T_{mold})对CM247LC圆柱试样和复杂涡轮叶片晶粒组织演变的影响,数值模拟与试验结果基本相似^[57],如图7所示。马祎炜

等利用ProCAST软件中的CA-FE模块模拟了热控法Udimet720Li高温合金整体叶盘的凝固过程和晶粒生长情况^[58],计算结果证明低的浇注温度和型壳预热温度可以满足整体叶盘缩松等级和晶粒尺寸的要求。郭钊等利用CA法对不同铸造工艺下K4169高温合金凝固过程中晶粒组织的生长过程进行数值模拟^[59];研究结果表明,细化剂可以促进晶粒形核,抑制凝固后期析出相的数量,通过与试验结果对比,证实了数值模拟结果的可靠性。

3.2 柱晶/单晶组织数值模拟

高温合金定向凝固是一个涉及宏观热量传递、溶质扩散和对流,以及晶粒的形核、生长、熔化和竞争淘汰等行为共同作用下多物理场耦合作用、跨尺度的复杂过程,导致复杂形状的定向/单晶铸件容易出现杂晶、雀斑、小角度晶界以及取向偏离等组织缺陷^[60]。

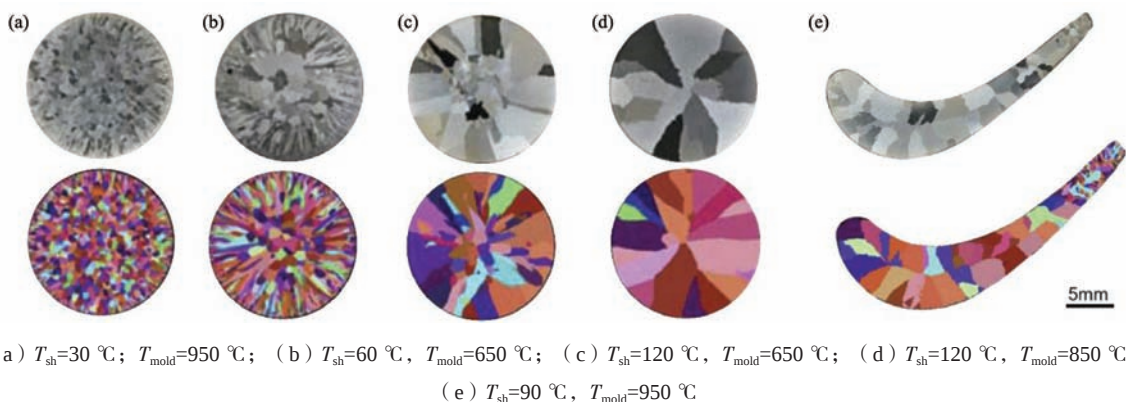


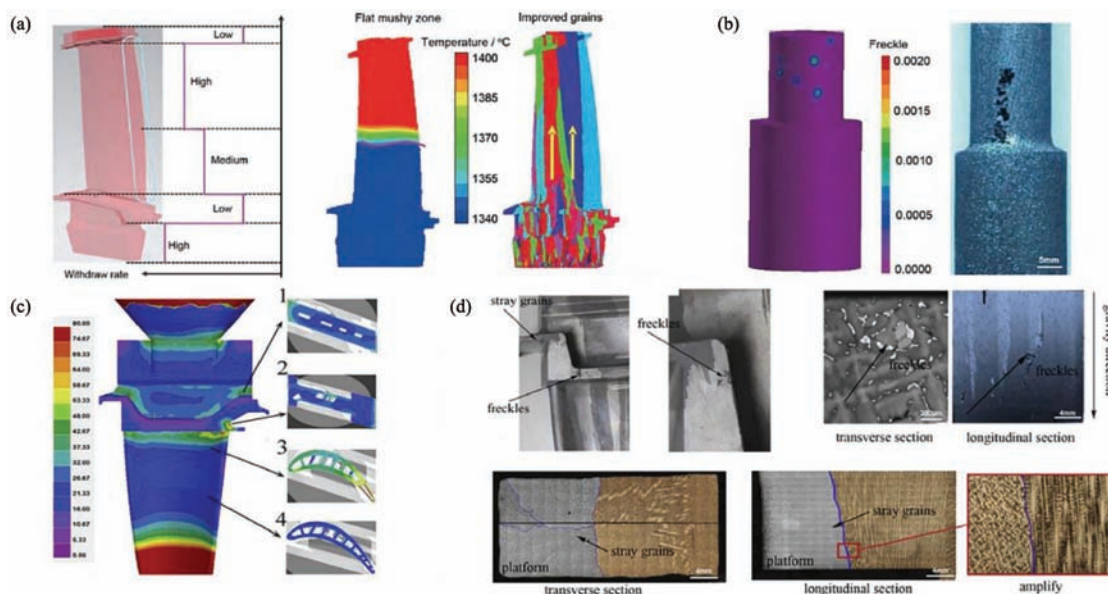
图7 CM247LC合金试验(上)和数值模拟(下)晶粒组织示意图

Fig. 7 Grain structure diagrams of the experiments (upper) and numerical simulations (lower) for CM247LC nickel-based superalloy

采用数值模拟技术研究高温合金定向凝固过程杂晶和雀斑等组织缺陷的形成机理对于提高定向/单晶铸件的成品率具有重要意义。

许庆彦等使用耦合宏观温度场和溶质场以及流场的CA法,模拟了不同抽拉速率条件下,DZ466叶片糊状区形状以及晶粒形貌的变化,并设计了变抽拉速率定向凝固工艺,最终得到了平行度较好的柱状晶组织^[55, 61-62],如图8(a)所示。此外,基于Rayleigh数判据计算局部区域雀斑形成倾向,如图8(b)所示,从图中可以看出,在针对三维阶梯试件的数值模拟结果中,雀斑容易出现在铸件边缘的棱角处,雀斑的棱角效应与试验结果相吻合。Ling等综合考虑了定向凝固工

艺传热过程的边界条件,研究了温度梯度和界面形状变化对CMSX4叶片雀斑和杂晶等凝固缺陷的影响^[63],如图8(c)和(d)所示。由于叶片平台上存在较低的轴向温度梯度或呈凹形的S/L界面形状,导致在叶片平台处易产生新的晶核,从而导致雀斑、杂晶等缺陷的产生,基于数值模拟结果,设计了两种厚度不均匀的模具,显著减少了杂晶缺陷的产生。许自霖等使用CA-FE数值模拟和试验方法对DD6高温合金螺旋选晶器试样进行了研究^[64],研究对比了不同高度晶粒取向试验图像与数值模拟结果,计算与试验结果相符,在晶粒生长到29 mm高度时,大部分晶粒取向偏转角小于6°,为螺旋选晶器的设计提供了指导方案。



(a) 变抽拉速率条件下,叶片温度场与晶粒组织数值模拟结果;(b) 三维阶梯试样雀斑数值模拟和试验结果;
(c) 叶片轴向温度梯度分布;(d) 叶片表面及杂晶和雀斑缺陷

图8 高温合金定向凝固组织数值模拟和试验结果

Fig. 8 Numerical simulation and experimental results of directional solidification microstructures of superalloys

3.3 其他专业领域金属基体组织演变数值模拟

近年来,CA法不仅在铸造专业领域广泛应用,在增材制造和轧制以及焊接等相关领域应用也得到较快发展。

Lang Yuan等建立了一种基于CA模型的在高度上平行凝固的微观组织数值模拟模型,并通过与定向能量沉积(Directed Energy Deposition, DED)过程相耦合,预测了IN718合金单轨和多轨多层块的三维晶粒结构,并通过与试验结果对比校正,成功预测了晶粒的重熔、磊晶/外延生长以及CET过程^[65],为增材制造中材料设计和工艺开发提供了新的工具。王忠堂等采用CA法对IN690管材挤压变形过程中的动态再结晶组织演变过程进行了数值模拟^[66],并得出随着挤压比的增大,平均晶粒尺寸减少,数值模拟与试验结果相对误差

差小于16.6%。此外,Abha Rai^[67-70]等人在增材制造、轧制和直接金属沉积以及焊接等领域基于CA模型成功模拟了晶粒组织的演变过程。

4 结束语

经过三十多年的发展,铸件凝固组织数值模拟技术取得巨大进步,已经可用于三维复杂结构的等轴晶晶粒尺寸和形貌计算,等轴晶/柱状晶转变计算,高温合金定向凝固过程柱晶/单晶叶片的螺旋选晶和柱晶/单晶组织形貌演变计算等,在铸造工艺优化设计中逐步发挥重要作用,但现阶段仍存在高温合金定向凝固组织缺陷预测技术研究不全面,计算精度和效率低,计算参数数据库不足等问题,未来可能在以下方向深入发展。

(1) 发展和完善多尺度、多场耦合模型。目前,铸件凝固组织数值模拟多侧重于晶粒尺度和晶粒形貌研究,而在显微组织、微观偏析等微观尺度方面的研究较少,对高温合金定向凝固过程中小角度晶界以及取向偏离等组织缺陷判据的研究较少,仍需加强。

(2) 开发高效并行的跨尺度模型的计算方法。针对不同尺度模型耦合问题,数值模拟宏微观耦合CAFE/FD模型虽然在计算精度以及多尺度、多场耦合研究方面具有明显优势,但算法相对复杂,计算时间长,对于小尺寸叶片等高温合金精密铸件,尚可建立全尺寸模型,而对于大尺寸铸件只能选择特定区域计算,对机匣等大型或超大型高温合金结构精密铸造工艺的辅助设计能力有待加强。

(3) 结合大数据以及机器学习等技术,完善铸造

高温合金工艺数据库建设,丰富铸件质量预测手段。凝固过程微观组织数值模拟精度受到多项初始和边界条件以及假设条件的限制,模拟时很难获得且计入全面准确的凝固微观组织形成的影响因素,未来有必要结合大数据以及机器学习等先进技术,获得不同参数对数值模拟结果的影响比重。

(4) 加强和完善国产铸造数值模拟软件的开发和建设,特别是在基于有限元计算的,对薄壁复杂结构具有技术优势的数值模拟软件方面补足短板,不断将成熟的新模型、新算法和新数据,包括金属凝固微观组织演变数值模拟新发展融入其中,提高铸件结构设计和铸造工艺设计数字化智能化水平,包括高温合金铸件凝固组织数值模拟在内的集成计算材料学的工程应用水平。

参考文献:

- [1] KHATAVKAR NIKHIL, SINGH ABHISHEK KUMAR. Highly interpretable machine learning framework for prediction of mechanical properties of nickel-based superalloys [J]. *Physical Review Materials*, 2022, 6 (12): 123603.
- [2] BEHERA ASIT, SAHOO ASHOK K, MAHAPATRA S S. Application of Ni-based superalloy in aero turbine blade: a review [C]// *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part E: Journal of Process Mechanical Engineering*, 2023.
- [3] 李继红, 徐蔼彦, 汪强, 等. 基于元胞自动机法模拟凝固过程微观组织的研究进展 [J]. *热加工工艺*, 2014, 43 (15): 16-19, 23.
- [4] 单博炜, 魏雷, 林鑫, 等. 采用元胞自动机法模拟凝固微观组织的研究进展 [J]. *铸造*, 2006 (5): 439-443.
- [5] 张利欣, 车世界, 徐正光, 等. 基于残差网络的高温合金微观组织图像分割方法 [J]. *科学技术与工程*, 2020, 20 (1): 246-251.
- [6] 张宙庆, 张国伟, 侯华, 等. 铸件凝固过程的微观组织数值模拟研究进展 [J]. *华北工学院学报*, 2004, 25 (5): 386-390.
- [7] 张梦军, 游志勇, 张云冠, 等. 铝硅合金微观组织数值模拟的研究现状及发展趋势 [J]. *铸造*, 2023 (11): 1391-1398.
- [8] 王同敏, 魏晶晶, 王旭东, 等. 合金凝固组织微观模拟研究进展与应用 [J]. *金属学报*, 2018, 54 (2): 193-203.
- [9] 张昂, 郭志鹏, 蒋斌, 等. 合金凝固组织和气孔演变相场模拟研究进展 [J]. *中国有色金属学报*, 2021, 31 (11): 2976-3009.
- [10] 朱鸣芳, 汤倩玉, 张庆宇, 等. 合金凝固过程中显微组织演化的元胞自动机模拟 [J]. *金属学报*, 2016, 52 (10): 1297-1310.
- [11] KURZ W, GIOVANOLA, TRIVEDI R. Theory of microstructural development during rapid solidification [J]. *Acta Metallurgica*, 1986, 34 (5): 823-830.
- [12] 王磊. 2A14铝合金激光焊接熔池微观组织演变相场法研究 [D]. 南京: 南京航空航天大学, 2018.
- [13] 熊守美, 许庆彦, 康进武. 铸造过程模拟仿真技术 [M]. 北京: 机械工业出版社, 2004.
- [14] 宋迎德. 镁合金凝固组织模拟 [D]. 大连: 大连理工大学, 2012.
- [15] KARMA A, 于艳梅. 相场法凝固组织模拟的研究进展 [J]. *铸造*, 2000, 49 (9): 507-511.
- [16] 刘岩, 牛晓峰, 李文琪, 等. 相场法模拟316L不锈钢SLM过程中的微观组织演化 [J]. *特种铸造及有色合金*, 2023, 43 (7): 963-966.
- [17] 陈云, 康秀红, 李殿中. 自由枝晶生长相场模型的自适应有限元法模拟 [J]. *物理学报*, 2009, 58 (1): 390-398.
- [18] WANG Y B, WEI M G, LIU X T, et al. Phase-field study of the effects of the multi-controlling parameters on columnar dendrite during directional solidification in hexagonal materials [J]. *The European Physical Journal E*, 2020, 43 (7): 1-9.
- [19] ZHANG A, GUO Z, JIANG B. et al. Numerical solution to phase-field model of solidification: A review [J]. *Computational Materials Science*, 2023, 228: 112366.
- [20] YANG C, XU Q Y, LIU B C. GPU-accelerated three-dimensional phase-field simulation of dendrite growth in a nickel-based superalloy [J]. *Computational Materials Science*, 2017, 136: 133-143.
- [21] 郭钊. 航空镍基高温合金叶片定向凝固过程多尺度耦合数值模拟研究 [D]. 武汉: 华中科技大学, 2019.
- [22] 王同敏. 金属凝固过程微观模拟研究 [D]. 大连: 大连理工大学, 2000.
- [23] SROLOVITZ D J, ANDERSON M P, SAHNI P S, et al. Computer simulation of grain growth—II. grain size distribution, topology, and local dynamics [J]. *Acta Metallurgica*, 1984, 32 (5): 793-802.
- [24] ANDERSON M P, SROLOVITZ D J, GRETT G S, et al. Computer simulation of grain growth—I. kinetics [J]. *Acta Metallurgica*, 1984, 32 (5): 783-791.

- [25] BROWN S G R, SPITTLE J A. Computer simulation of grain growth and macrostructure development during solidification [J]. *Materials Science and Technology*, 1989, 5 (4): 362–368.
- [26] 钟晓征, 陈伟元, 王豪才, 等. 多晶材料晶粒生长的Monte Carlo计算机模拟方法 I 模拟正常晶粒生长 [J]. *功能材料*, 1999 (3): 9–12.
- [27] 钟晓征, 陈伟元, 王豪才, 等. 多晶材料晶粒生长的Monte Carlo计算机模拟方法 II 模拟异常晶粒生长 [J]. *功能材料*, 1999 (3): 13–15.
- [28] 王岗, 刘艳, 徐宗畅, 等. 晶粒正常生长的Monte Carlo模拟 [J]. *现代技术陶瓷*, 2016, 37 (6): 434–441.
- [29] 朱鸣芳, 于金, 洪俊杓. 金属凝固显微组织的计算机模拟 [J]. *中国工程科学*, 2004 (5): 8–16.
- [30] 李殿中, 杜强. 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.
- [31] CARTER P, COX D C, GANDIN C A, et al. Process modelling of grain selection during the solidification of single crystal superalloy castings [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2000, 280 (2): 233–246.
- [32] 王浩. 晶粒长大微观组织演化过程的元胞自动机模拟 [D]. 太原: 太原理工大学, 2015.
- [33] GARDNER MARTIN. Mathematical Games-The fantastic combinations of John Conway's new solitaire game "life" [J]. *Scientific American*, 1970, 223 (4): 120–123.
- [34] WOLFRAM STEPHEN. Cellular automata as models of complexity [J]. *Nature*, 1984, 311 (4): 419–424.
- [35] HESSELBARTH H W, GÖBEL I. R. Simulation of recrystallization by cellular automata [J]. *Acta Metallurgica et Materialia*, 1991, 39 (9): 2135–2143.
- [36] 张飞奇. 基于丝材电弧增材制造Ti6Al4V-xB合金的组织性能及模拟 [D]. 西安: 西安理工大学, 2017.
- [37] RAPPAZ M, GANDIN CH A. Probabilistic modelling of microstructure formation in solidification processes [J]. *Acta Metallurgica et Materialia*, 1993, 41 (2): 345–360.
- [38] SPITTLE J A, BROWN S G R. A cellular automaton model of steady-state columnar-dendritic growth in binary alloys [J]. *Journal of Materials Science*, 1995, 30 (16): 3989–3994.
- [39] CHEN R, XU Q, WU Q, et al. Nucleation model and dendrite growth simulation in solidification process of Al-7Si-Mg alloy [J]. *Acta Metallurgica Sinica: Chinese Edition*, 2015, 51 (6): 733–744.
- [40] NIKISHINA MARGARITA A, ALEXANDROV DMITRI V. Mathematical modeling of nucleation and growth processes of ellipsoidal crystals in binary melts [J]. *Crystals*, 2022, 12 (10): 1495.
- [41] THÉVOZ PH, DESBIOLLES J. L., RAPPAZ M. Modeling of equiaxed microstructure formation in casting [J]. *Metallurgical Transactions A*, 1989, 20 (2): 311–322.
- [42] GANDIN CH A, RAPPAZ M. A coupled finite element-cellular automaton model for the prediction of dendritic grain structures in solidification processes [J]. *Acta Metallurgica et Materialia*, 1994, 42 (7): 2233–2246.
- [43] NASTAC L, STEFANESCU D M. Macrotransport-solidification kinetics modeling of equiaxed dendritic growth: part I. model development and discussion [J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 1996, 27 (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]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 1996, 27 (12): 4075–4083.
- [45] GANDIN CH A, RAPPAZ M, TINTILLIER R. 3-Dimensional simulation of the grain formation in investment castings [J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 1994, 25 (3): 629–635.
- [46] GANDIN CH A, DESBIOLLES J L, RAPPAZ M, et al. A three-dimensional cellular automation-finite element model for the prediction of solidification grain structures [J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 1999, 30 (12): 3153–3165.
- [47] 朱蒙蒙. 基于CAFE法的真空自耗电弧熔炼TC4钛合金的微观组织数值模拟 [D]. 昆明: 昆明理工大学, 2023.
- [48] 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]. *ISI International*, 2001, 41 (9): 992–998.
- [49] ZHU M F, HONG C P. A Modified cellular automaton model for the simulation of dendritic growth in solidification of alloys [J]. *ISI International*, 2001, 41 (5): 436–445.
- [50] WANG W, KERMANPUR A, LEE P D, et al. Simulation of dendritic growth in the platform region of single crystal superalloy turbine blades [J]. *Journal of Materials Science*, 2003, 38 (21): 4385–4391.
- [51] WANG W, LEE P D, MCLEAN M. A model of solidification microstructures in nickel-based superalloys: predicting primary dendrite spacing selection [J]. *Acta Materialia*, 2003, 51 (10): 2971–2987.
- [52] ATWOOD R C, LEE P D. Simulation of the three-dimensional morphology of solidification porosity in an aluminum-silicon alloy [J]. *Acta Materialia*, 2003, 51 (18): 5447–5466.

- [53] XU Q Y, LI B, LIU Y, et al. Numerical modelling of microstructure evolution and dendrite growth in alloy solidification process [J]. International Journal of Materials and Product Technology, 2008, 33 (1/2) : 37–49.
- [54] JING Y U, QINGYAN X U, KAI CUI, et al. Numerical simulation of microstructure evolution based on a modified ca method [J]. Acta Metallurgica Sinica, 2007, 43 (7) : 731–738.
- [55] 许庆彦, 杨聪, 闫学伟, 等. 高温合金涡轮叶片定向凝固过程数值模拟研究进展 [J]. 金属学报, 2019, 55 (9) : 1175–1184.
- [56] 鄯宇, 隋大山, 麻晋源, 等. K439B镍基合金精密铸造微观组织模拟与实验验证 [J]. 稀有金属, 2023, 47 (7) : 923–933.
- [57] SEO SEONG MOON, KIM IN SOO, JO CHANG YONG, et al. Grain structure prediction of Ni-base superalloy castings using the cellular automaton-finite element method [J]. Materials Science and Engineering A, 2007 (449–451) : 713–716.
- [58] 马祎炜, 姚志浩, 李大禹, 等. 高 γ' 含量高温合金整体细晶叶盘铸造凝固行为和组织特征模拟研究 [J]. 稀有金属材料与工程, 2022, 51 (12) : 4519–4526.
- [59] 郭钊, 秦蓉, 马鑫, 等. 不同铸造工艺下K4169高温合金涡轮机匣凝固组织模拟 [J]. 特种铸造及有色合金, 2023, 43 (11) : 1459–1462.
- [60] 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.
- [61] 王润楠, 许庆彦, 柳百成. 计算机模拟技术在航空发动机涡轮叶片制造中的应用 [J]. 自然杂志, 2017, 39 (2) : 79–86.
- [62] 闫学伟, 唐宁, 刘孝福, 等. 液态金属冷却定向凝固数值模拟与试验研究 [J]. 特种铸造及有色合金, 2016, 36 (1) : 1–4.
- [63] QIN L, SHEN J, YANG G X, et al. A design of non-uniform thickness mould for controlling temperature gradient and S/L interface shape in directionally solidified superalloy blade [J]. Materials & Design, 2017, 116: 565–576.
- [64] 许自霖, 李忠林, 张航, 等. DD6合金选晶器定向凝固的数值模拟与实验 [J]. 稀有金属材料与工程, 2017, 46 (7) : 1856–1861.
- [65] YUAN L, JU S, HUANG S, et al. Validation and application of cellular automaton model for microstructure evolution in IN718 during directed energy deposition [J]. Computational Materials Science, 2023, 230: 112450.
- [66] 王忠堂, 户金科, 王玲伊, 等. 基于CA法的高温合金IN690管材挤压变形动态再结晶组织演变规律研究 [J]. 稀有金属材料与工程, 2017, 46 (9) : 2512–2516.
- [67] RAI ABHA, MARKL MATTHIAS, KÖRNER CAROLIN. A coupled cellular automaton-lattice boltzmann model for grain structure simulation during additive manufacturing [J]. Computational Materials Science, 2016, 124: 37–48.
- [68] MAJTA JANUSZ, MADEJ ŁUKASZ, SVYETLICHNYI DMYTRO S, et al. Modeling of the inhomogeneity of grain refinement during combined metal forming process by finite element and cellular automata methods [J]. Materials Science and Engineering A, 2016, 671: 204–213.
- [69] ZHANG J W, LIOU FRANK, SEUFZER WILLIAM, et al. A coupled finite element cellular automaton model to predict thermal history and grain morphology of Ti-6Al-4V during direct metal deposition (DMD) [J]. Additive Manufacturing, 2016, 11: 32–39.
- [70] GU C, WEI Y, ZHAN X, et al. A three-dimensional cellular automaton model of dendrite growth with stochastic orientation during the solidification in the molten pool of binary alloy [J]. Science and Technology of Welding and Joining, 2017, 22 (1) : 47–58.

Evolution in Numerical Simulation of Solidified Microstructure of Superalloy Based on Cellular Automaton Method

LI Ao-qi, SUN Xun, JING Gao-yang, GUAN Yang, SHUI Guo-yan, SUN Long, JIN Lei

(National Key Laboratory of Advanced Casting Technologies, China Academy of Machinery Shenyang Research Institute of Foundry Co., Ltd., Shenyang 110022, Liaoning, China)

Abstract:

The performance of casting is closely related to its solidified microstructure. Accurately recognizing and comprehending of the formation mechanisms and control methods of cast alloy solidified microstructures are helpful to improve the body properties of castings. The cellular automaton (CA) method has great potential in numerical simulation of solidification microstructures of alloys, and this paper summarized current research and application situations of this method in the numerical simulation of cast superalloy microstructure in recent years and the existing problems, and looked forward to its future developing tendencies.

Key words:

casting superalloy; solidified microstructure; grain morphology; numerical simulation; CA method