

基于元胞自动机模型的铝合金晶粒尺寸预测

霍 鑫¹, 豆瑞锋^{1, 2}, 于 博¹, 温 治^{1, 2}, 刘训良^{1, 2}

(1.北京科技大学能源与环境工程学院,北京100083;2.北京科技大学冶金行业节能减排北京市重点实验室,北京100083)

摘要: 铸造过程期望获得细小均匀的等轴晶粒,但晶粒尺寸难以直接测量。因此,建立可靠的数学模型来预测晶粒尺寸是必要的。基于元胞自动机(CA)模型模拟枝晶生长,该模型在基于枝晶生长动力学基础上模拟铝合金凝固过程中的微观组织演变,以此获得平均晶粒尺寸。CA模型模拟结果与Lipton Glicksman Kurz(LGK)模型结果基本吻合,对AA5182铝合金搭建重力铸造实验,验证了模型的准确性。铸造过程中的晶粒形态根据温度梯度和冷却速度变化,进行一定规模计算总结平均晶粒尺寸与温度梯度、冷却速率的关系以预测铝合金铸件的平均晶粒尺寸。计算结果显示,降低温度梯度和增加冷却速度有助于细小晶粒尺寸的形成。 关键词: 元胞自动机模型;铸造;平均晶粒尺寸;铝合金;凝固微观组织

铸造作为一种铝合金加工技术,易产生裂纹和宏观偏析^[1]。铸件的凝固方式是 引起铸件产生热裂纹和宏观偏析的主要原因之一,凝固是铸造过程的关键步骤^[2]。铝 合金在凝固过程中形成的显微组织对力学性能有重要影响,晶粒尺寸是表征凝固组 织的重要参数^[3-4]。预测铝合金凝固组织的晶粒尺寸对铸造铝合金的生产具有重要意 义。

对于不透明的金属材料的晶粒尺寸早期可通过连续截面法^[5]和晶界渗镓法^[6]计 算,但是实验测量过程耗时长,需破坏试样。赵新兵^[7]、刘振宇^[8]、许云波^[9]等根 据相变动力学理论提出晶粒尺寸预测模型,然而该模型基于理论提出,计算精度不 高。崔建忠^[10]、安红萍^[11]、张勇^[12]等采用BP神经网络研究了合金凝固组织晶粒尺寸 预测。神经网络模型缺乏对机理的认识,必须依赖大量实测数据。寻找一种有效且 准确的方法来预测铝合金的凝固晶粒尺寸是必要的。

本文基于合金凝固热力学原理,再现铝合金凝固过程微观组织形貌,进而准确 预测晶粒尺寸随凝固工况的变化。该方法计算结果准确、不必依赖实验数据。确定 性方法、相场法和随机方法是凝固模拟研究中应用最广的数值模拟方法。随机方法 中的元胞自动机(CA)法规则简单,易于在计算机中实现,且物理意义相对明确, 计算效率高,被众多学者采用。Gandin和Rappaz^[13]最早将CA模型引入凝固组织模拟 中,并研究了Al-Si合金的凝固组织。随后,Rappaz和Gandin^[14-16]等继续对CA模型在 微观组织凝固模拟上进行研究,并有了一些突破性成就。此后,元胞自动机模型被 国内外学者应用于铝合金凝固模型中^[17-21]。

本文利用二维CA模型研究了不同温度梯度和不同冷却速率下铝合金凝固的微观 组织形貌,并研究了平均晶粒尺寸与温度梯度、冷却速率的关系。同时,本文搭建 了AA5182合金重力铸造实验平台观察铸态组织,将结果与仿真结果对比验证。

1 模型搭建

1.1 模型介绍

数学模型为二维,计算区域划分为大小均匀的正方形单元,每一单元称为元 胞。每个元胞空间存储元胞状态,状态参数包括温度、浓度、晶粒生长取向、生

作者简介:

霍鑫(1997-),女,硕士 生,研究方向为铝合金凝 固过程微观组织演变。电 话:010-62332741,E-mail: 1010092854@qq.com 通讯作者: 豆瑞锋,男,副教授。E-mail: douruifeng@ustb.edu.cn

中图分类号:TG113.12; TG111.4 文献标识码:A 文章编号:1001-4977(2022) 03-0323-08

基金项目:

北京市自然科学基金资助 项目(3192023)。 收稿日期: 2021-08-30收到初稿, 2021-11-09收到修订稿。

324 70 566 有色合金

长速度、固相分数以及物性参数(导热系数、扩散系数、比热容、密度、凝固潜热)等,赋予每个元胞初始状态,0为液相,1为固相,0-1为界面状态。实际凝固涉及热扩散、溶质扩散、界面能以及动力学等复杂的物理现象,根据枝晶生长的特点,对CA模型进行假设:

(1)由于溶质扩散系数比热扩散系数小3~4个数量级,认为元胞单元内部温度的分布是均匀的;

(2)忽略动力学过冷对界面稳定的影响,仅考虑 模型在低Peclet数条件下的生长;

(3)不考虑液相流动对晶粒生长的影响;

(4)忽略固相的重熔。

1.2 形核模型

形核模型采用异质形核,液相单元通过外来质点 或衬底发生形核过程,形核率随过冷度的变化大多采 用瞬时形核^[22]和连续形核^[23]。本文采用基于高斯分布 的连续形核模型,该模型认为形核发生在一系列的形 核位置上,形核质点为连续而非离散的分布函数(式 1)。

$$\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}\left(\Delta T\right)} = \frac{n_{\max}}{\sqrt{2\pi} \cdot \Delta T_{\sigma}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta T - \Delta T_{\max}}{\Delta T_{\sigma}}\right)^{2}\right) \quad (1)$$

式中: *n*_{max}、 *T*_{max}和 *T*_o分别为最大晶粒密度、平均形 核过冷度、过冷度标准差,这三个参数只能通过理论 和实验分析进行估算。

晶粒的形核是随机过程,晶核密度可表示为式(2)。

$$n (\Delta T) = \int_{0}^{\Delta T} \frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d} (\Delta T)} \mathrm{d} (\Delta T) \qquad (2)$$

1.3 温度场模型

忽略熔体对流,温度场的控制方程为:

$$\rho C_{\rm p} \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \nabla^2 T + \rho L \frac{\partial f_{\rm s}}{\partial t} \tag{3}$$

式中: ρ 为密度,kg·m⁻³;*L*为凝固潜热,J·kg⁻¹;*C*_p 是比热,J·kg⁻¹·K⁻¹; λ 为导热系数,W·m⁻¹·K⁻¹;*T* 为温度,K;*t*为时间,s。

边界条件为第三类边界条件。规定了边界上物体与周围流体的对流传热系数h及环境温度T , 表达式为:

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = h \left(T - T_{\infty} \right) \tag{4}$$

1.4 溶质场模型

假设固液界面两侧始终保持局部平衡,即满足式 (5)。 (5)

式中:k为溶质分配系数; C_{s}^{*} 和 C_{1}^{*} 是界面固相和液相溶质浓度。

 $C_{s}^{*} = kC_{1}^{*}$

固相或液相溶质扩散方程为式(6)。

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i \cdot \nabla^2 C_i \tag{6}$$

式中: C_i 为溶质质量浓度; D_i 为溶质扩散系数, $\mathbf{m}^2 \cdot \mathbf{s}^{-1}$; 下标:表示为s(固相)或l(液相)。

凝固过程由于相变界面单元向邻居液相单元排出 溶质,固液界面的控制方程见式(7)。边界为零流条 件。

$$\frac{\partial C_{1}}{\partial t} = D_{1} \cdot \nabla^{2} C + C_{1} (1-k) \frac{\partial f_{s}}{\partial t}$$
 (7)

1.5 固相分数的计算

固液界面单元界面局部平衡认为界面液相溶质浓度与界面实际溶质成分的溶质差是枝晶生长的驱动力^[24]。界面液相溶质浓度*C*^{*}₁表达式如下:

$$C_{\rm l}^* = C_{\rm o} + \frac{T^* - T^{\rm eq}}{m_{\rm l}} + \frac{\Gamma \cdot K \cdot f(\theta, \theta_{\rm o})}{m_{\rm l}} \qquad (8)$$

式中: T^* 是界面平衡温度,K; m_1 是液相线斜率;K是 固液界面曲率; $f(\theta, \theta_0)$ 是界面能的各向异性函数; Γ 是Gibbs-Thomson系数。

根据界面局部平衡,固相单元的增量表达式见式 (9),可以在没有人为扰动时模拟二次枝晶臂甚至多 次枝晶臂的生长。

$$\Delta f_{\rm s} = \frac{C_{\rm l}^{*} - C_{\rm l}}{C_{\rm l}^{*} (1 - K)} \tag{9}$$

1.6 枝晶生长动力学

采用平均计数法求解界面曲率:

$$K = \frac{1}{\mathrm{d}x} \left[1 - \frac{2}{N+1} \left(f_{\mathrm{s}} + \sum_{k=1}^{N} f_{\mathrm{s}}^{k} \right) \right] \qquad (10)$$

式中:dx为空间步长;N为当前元胞的邻胞数; f_s^* 为第K个邻胞的固相分数。

对于具有四重对称轴的立方晶体,界面各向异性^[25] 计算如下:

 $f(\theta, \theta_0) = 1 - 15\epsilon \cos [4(\theta - \theta_0)]$ (11) 式中: θ 为固液界面法向向量与坐标轴正向的夹角,可 由式(12)得出, θ_0 为枝晶最优生长角, ϵ 为界面能各 向异性强度。

$$\theta = \cos^{-1} \left(\frac{\partial f_{s} / \partial x}{\sqrt{(\partial f_{s} / \partial x)^{2} + (\partial f_{s} / \partial y)^{2}}} \right)$$
(12)

1.7 时间步长计算

时间步长的选择关系到数值模拟的稳定性和计算 时间,本文对时间步长的设定见式(13)。



$$\Delta t = \operatorname{Min}\left(\frac{1}{5}\left(\frac{\Delta x^2}{D_1}, \frac{\Delta x}{V_{\max}}\right)\right) \quad (13)$$

式中: *V*_{max}为计算区域内所有界面元胞中最大的速度; 系数1/5表示每次界面移动的距离最多为元胞长度的 1/5。

2 模型理论验证

2.1 与 LGK 模型对比

LGK模型^[26]是描述枝晶尖端生长速率和半径的 经典解析模型,它考虑了枝晶尖端的热过冷和曲率过 冷。为了定量验证,将仿真结果与LGK模型进行了比 较。CA模型基于参考文献 [24]建立,本文采用该文 献给出的物性参数进行CA模型模拟,并与给出的LGK 模型比较。图1显示了Al-4%Cu合金与LGK模型的枝晶 尖端生长速率的比较。凝固开始时,枝晶尖端的生长 速率较高,生长速率逐渐降低至约330 µm・s⁻¹的稳定 水平。CA模型模拟晶粒生长的数值解与解析解基本一



图1 Al-4%Cu合金枝晶尖端生长速度与LGK模型计算结果比较 Fig. 1 Comparison between growth rate of the dendrite tip and the results simulated by LGK model for Al-4%Cu alloy 致,验证了模型的合理性。改变铝合金的成分以及物 性参数,CA模型可实现该合金的晶粒生长。

2.2 CA 模型模拟结果图

首先,模拟单个晶粒在计算区域的生长。物性参数如表1,计算区域为2 500 μm×2 500 μm,网格数量为500×500,元胞尺寸为5 μm。计算区域的中心设置一个溶质溶度为*kC*₀、随机生长角为0的固相元胞。图2为均匀温度场下Al-4.5%Mg合金单晶生长结果图。可以

表1 Al-4.5%Mg合金物性参数 Table 1 Physical parameters of Al-4.5 %Mg alloy

符号	参数名称及单位	值	
k	平衡分配系数	0.46	
m_1	液相斜率 (K·mass % ⁻¹)	-5.58	
$D_{\rm s}$	固相扩散系数(m ² ・s ⁻¹)	3.2×10^{-12}	
D_1	液相扩散系数 $(m^2 \cdot s^{-1})$	3.2×10^{-9}	
з	各向异性强度	0.3	
Г	Gibbs-Thomson系数	2.4×10^{-7}	



图2 Al-4.5%Mg合金单个枝晶生长图 Fig. 2 Single dendrite growth of Al-4.5%Mg alloy



(a)凝固时间0.6s

f间0.6 s (b)凝固时间1.0 s (c)凝固时间1.3 s 图3 冷却速率为5 K/sAl-4.5%Mg合金多晶生长形貌 Fig. 3 Simulation results of the multiple grains of Al-4.5 %Mg alloy at cooling rate of 5 K/s

326 (1993) (1970年) 有色合金

看出,晶粒为四重对称结构;同时可以看出,二次枝 晶臂甚至多次枝晶臂的生长。

凝固过程枝晶沿着随机生长方向自由生长,图3为 Al-4.5%Mg合金在相同生长条件、不同生长方向的枝晶 生长模拟图。可以看出,模型能够很好地实现不同生 长取向的多晶生长。枝晶生长过程,一次枝晶臂沿主 干方向生长并不断粗化。同时观察到枝晶间相互接触 并竞争生长,最终形成不规则的枝晶形貌。

图4为Al-4.5%Mg合金在冷却速率为5 K/s、温度梯 度为2 000 K/m的柱状晶生长。凝固初期在计算区域底 部设置9个晶核开始生长,温度场自上而下逐渐降低。 可以看出,晶粒沿着有利于枝晶生长方向持续生长并 呈现出柱状晶形貌。从以上结果得出,CA模型可以很 好地模拟单晶、多晶和柱状晶的生长。

3 试验验证

3.1 试验材料及方法

搭建重力铸造实验平台来验证CA模型。所用材料 为AA5182合金,化学成分见表2。

首先将熔融的铝液浇入模具中,浇注温度为680 。 其中,模具材料为304不锈钢。待充型结束后,采 用空冷方式使铸件逐渐冷却凝固。凝固成形后,将 铸锭从模具中取出。图5为铝合金试验采用的模具和 充型完成的铸件。为观察合金凝固组织,对铸件进 行取样、镶样、磨平、抛光、腐蚀。使用Keller试剂 (HF:HCl:HNO₃:H₂O=2:3:5:190)对铸件表面 进行腐蚀,并在光学显微镜上观察铸件的晶粒组织, 采用截距法计算平均晶粒尺寸分布。



图4 冷却速率为5 K/s、温度梯度为2 000 K/m Al-4.5%Mg合金柱状晶生长形貌 Fig. 4 Simulation results of Al-4.5%Mg alloy with a cooling rate of 5 K/s and a temperature gradient of 2 000 K/m

Table 2 Chemical composition of AA5182 alloy								<i>w</i> _B /%
Zn	Cr	Si	Fe	Mn	Mg	Ti	Cu	Al

0.20~0.50

▲▲5182铝合全的化学成分

まっ

 $0 \sim 0.35$



0.20

0.25

0.10

图5 铝合金浇注试验模具和成形件 Fig. 5 Mold and castings in casting experiment of the aluminum alloy

3.2 试验与模拟结果的对比

 $4.0 \sim 5.0$

平均晶粒尺寸是表征凝固组织的重要参数,通过 比对模拟与试验结果可以验证模型的合理性。图6为打 磨试样中心处的晶粒组织。结果显示,铸锭的晶粒尺 寸约为112 μm。实际AA5182合金成分复杂,数值模拟 中可忽略微量元素,将其简化为二元铝镁合金。提取 该位置的温度场数据,与CA模型耦合模拟计算。模拟 结果图如图7,5182合金的平均晶粒尺寸约为123 μm。 二者在平均晶粒尺寸方面吻合较好。

0.10

0.15

余量





图6 AA5182合金铸锭微观组织金相观察 Fig. 6 Optical microstructure of the AA5182 alloy



图7 打磨试样CA模型模拟微观组织结果图 Fig. 7 Simulation microstructure result of the sample coupled with the CA model



图8 DC铸造简化模型 Fig. 8 Simplified model of billet DC casting

4 结果与讨论

4.1 半连续铸造过程铝合金凝固微观结构

建立AA5182合金圆铸坯DC铸造的传热模型,模型简化图如图8所示。圆柱坯半径为100 mm,网格尺寸为5 mm,采用动网格的方法,根据拉坯速度增加网格,模拟DC铸造过程。DC铸造可以得到铸坯任意点温度随铸造时间的变化,该结果可以与现有的CA模型中温度场模型进行耦合,从而得出该点的微观组织形貌。

图9为铸坯在拉坯速度为60 m/min、浇注温度为 660 ℃、铸坯长度为0.8 m的温度分布。将该结果与CA 模型耦合,图10为铸件在不同位置耦合的仿真结果, 图10a-d在铸件中的位置分别对应图9的A、B、C、D。 结果表明,CA模型可以模拟铸件典型晶区的晶粒生 长,包括细等轴晶、等轴晶向柱状晶转变、柱状晶和 粗大的等轴晶。

4.2 晶粒尺寸与冷却速度、温度梯度的关系

凝固过程冷却速度^[27]和温度梯度^[28]影响合金的微 观组织,进而影响铸件的力学性能。本文研究温度梯 度在0~10 K/mm、冷却速率为0.1~30 K/s范围的微观组



图9 圆柱坯纵向刨面温度分布图 Fig. 9 Temperature distribution of the longitudinal section surface of cylindrical billet



(a) 细小的等轴晶

(b)等轴晶向柱状晶的转变(c)柱状晶图10 铝合金铸造过程凝固组织的典型晶区

(d) 粗大的等轴晶

Fig. 10 Typical crystal region of the solidification microstructure during casting process of the aluminum alloy

328 有色合金

织演变,并得出晶粒尺寸与冷却速度、温度梯度之间 的关系。

图11显示了不同冷却速率和温度梯度下平均晶粒 尺寸的变化。冷却速率越高、温度梯度越小,晶粒尺 寸越小。当温度梯度小干4 K/mm 时,平均晶粒尺寸的 变化率较高。这是因为柱状枝晶区域随着温度梯度的



图11 Al-4.5% Mg合金平均晶粒尺寸与不同冷却速率、不同温度 梯度的关系图

Fig. 11 Average grain sizes of different temperature gradients and cooling rates

增加而增加。图12显示随着温度梯度的增加,已经形 核的晶粒向周围生长的速度加快。当温度梯度大于4 K/mm 时,柱状晶粒面积增大,其他晶粒的生长受到阻碍。 图13显示了不同冷却速率下微观组织的演变。当冷却 速率为0.1、1、10、20 K/s时,相应的平均晶粒尺寸分 别为227、156、96、92 µm。冷却速度越高,形核数越 高,平均晶粒尺寸越小。高冷却速度有利于细晶粒的 形成。

在已知温度梯度和冷却速度的情况下,在图11 的关系图中使用插值法可以预测铸件的平均晶粒尺 寸。在本试验中用于金相观察的试样平均温度梯度为 275.94 K/m、平均冷却速率为8.59 K/s,预测得出平均 晶粒尺寸约为103.94 μm。试样的实际平均晶粒尺寸为 112 µm, 预测结果与实验结果吻合良好。

此外,提取图9中铸件0.151 m截面径向位置的温度 场并代入图11,平均晶粒尺寸分布如图14所示。铸件 从表面到中心的平均晶粒尺寸先增大后减小,这与参 考文献 [29] 的结论一致。



(a) 1 K/mm (b) 2 K/mm (c) 4 K/mm (d) 10 K/mm 图12 Al-4.5% Mg合金在冷却速率为1 K/s、不同温度梯度的微观组织形貌图 Fig. 12 Microstructures of Al-4.5 % Mg alloys at a cooling rate of 1 K/s and different temperature gradients



(a) 0.1 K/s

(b) 1 K/s

(d) 20 K/s

图13 Al-4.5% Mg合金在均匀温度场和不同冷却速率的微观组织形貌 Fig. 13 Microstructure morphologies of Al-4.5% Mg alloys in uniform temperature field and different cooling rates

(c) 10 K/s







5 结论

本文搭建CA模型获得铝合金微观组织结构以预测 平均晶粒尺寸。这项工作的新颖之处在于建立了基于 合金凝固原理的数值模型来预测晶粒尺寸,并得出以 下结论:

(1)该模型基于凝固热力学原理,考虑了形核的 生长因素。通过与文献中LGK模型以及实验结果的对 比验证了模型的可靠性。仿真结果表明,CA模型可以 再现单晶、多晶和柱状枝晶的形貌。

(2)通过数值模拟研究了铝合金的凝固过程,总 结了晶粒尺寸与冷却速度和温度梯度的关系。降低温 度梯度和加快冷却速度有助于形成更小的晶粒。

参考文献:

- [1] 唐剑. 铝合金熔炼与铸造技术 [M]. 北京:冶金工业出版社, 2009.
- [2] 潘复生,张丁非.铝合金及应用 [M].北京:化学工业出版社,2006:347-386.
- [3] ESKIN D G. Physical metallurgy of direct chill casting of aluminum alloys [M]. CRC, 2008.
- [4] YJA, SWAB, DASC. Journal of alloys and compounds [J]. Journal of Alloys and Compounds, 2020 (821): 153504.
- [5] HUNDERI O, RYUM N. The kinetics of normal grain growth [J]. Journal of Materials Science, 1980, 15 (5): 1104-1108.
- [6] RHINES F N , CRAIG K R , ROUSSE D A. Measurement of average grain volume and certain topological parameters by serial section analysis [J]. Metallurgical Transactions A , 1976 , 7 (11) : 1729-1734.
- [7] 赵新兵, LÜCKE K. 计算晶粒尺寸分布的几何模型及实用方法 [J]. 金属学报, 1992 (8): 17-24.
- [8] 刘振宇,王国栋,张强.形变奥氏体连续冷却相变后 晶粒尺寸的预测 [J]. 金属学报,1995(10):468-472.
- [9] 訾炳涛,崔建忠,巴启先,等.基于人工神经网络的凝固组织晶粒尺寸预测[J].中国有色金属学报,2001(3):481-484.
- [10] 许云波,王国栋,刘相华.奥氏体低温变形相变 -Fe晶粒尺寸的预测模型[J].金属学报,2002(2):123-126.
- [11] 安红萍,李占伦.基于BP神经网络的2.25Cr-1Mo-0.25V钢热变形晶粒尺寸的预测[J].大型铸锻件,2015(5):4-8.
- [12] 张勇,李恒灿,梁明亮.基于PSO-BP神经网络的汽车用铸造AZ91镁合金晶粒尺寸的预测 [J]. 热加工工艺, 2019, 48(3):105-107, 111.
- [13] RAPPAZ M, GANDIN C A. Probabilistic modeling of microstructure formation in solidification process [J]. Acta Metallurgica et Materialia, 1993 (2): 345-360.
- [14] GANDIN C A, RAPPAZ M, TINTILLIER R. Three-dimensional simulation of the grain formation in investment castings [J]. Metallurgical & Materials Transactions A, 1994, 25 (3): 629-635.
- [15] GANDIN C A, RAPPAZ M. Coupled finite element-cellular automation model for the prediction of dendritic grain structures in solidification processes [J]. Acta Metallurgica Et Materialia, 1994, 42 (7) : 2233-2246.
- [16] GANDIN C A, DESBIOLLES J L, RAPPAZ M, et al. A 3D cellular automation-finite element model for the prediction of solidification grain structures [J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 1999, 30 (12) : 3153-3165.
- [17] NASTAC L. Numerical modeling of solidification morphologies and segregation patterns in cast dendritic alloys [J]. Acta Materialia , 1999 , 47 (17) : 4253-4262.
- [18] BELTRAN-SANCHEZ L, STEFANESCU D M. A quantitative dendrite growth model and analysis of stability concepts [J]. Metallurgical & Materials Transactions A, 2004, 35 (8): 2471-2485.
- [19] 许林,郭洪民,杨湘杰.元胞自动机法模拟铝合金三维枝晶生长[J].铸造,2005,54(6):575-578.
- [20] 陈晋,朱鸣芳,孙国雄. 过冷熔体中的树枝晶分枝机制模拟 [J]. 铸造, 2005, 54 (9): 895-898.
- [21] 于靖,许庆彦,崔锴,等.基于一种改进CA模型的微观组织模拟 [J].金属学报,2007,43(7):731-738.
- [22] HUNT J D. Steady state columnar and equiaxed growth of dendrites and eutectic [J]. Materials Science & Engineering , 1984 , 65 (1) : 75-83.
- [23] THéVOZ P , DESBIOLLES J L , RAPPAZ M. Modeling of equiaxed microstructure formation in casting [J]. Metallurgical and materials transactions A , 1989 , 20 (2) : 311-322.
- [24] ZHU M F, STEFANESCUD M. Visual front tracking model for the quantitative modeling of dendritic growth in solidification of alloys [J]. Acta Materialia 2007, 5: 1741-1755.



- [25] BELTRAN-SANCHEZ L, STEFANESCU D M. A quantitative dendrite growth model and analysis of stability concepts [J]. Metallurgical & Materials Transactions A, 2004, 35 (8): 2471–2485.
- [26] LIPTON J, GLICKSMAN M E, KURZ W. Solidification microstructure: 30 years after constitutional supercooling dendritic growth into undercooled alloy metals [J]. 1984, 65 (1): 57–63.
- [27] 白帮伟,阿拉腾,吴群虎,等. 不同冷却速率对A356.2合金组织形貌的影响 [J]. 铸造, 2014, 63(11): 1158-1160.
- [28] 魏承炀,李赛毅.温度梯度对晶粒生长行为影响的相场模拟 [J].物理学报, 2011, 60 (10): 132-139.
- [29] 李宝绵,夏军,张海涛,等.DC铸造5182铝合金大尺寸扁锭偏析及微观组织的试验研究[J].轻合金加工技术,2020,48(12):25-31.

Prediction of Grain Size of Aluminum Alloy in Casting Process Based on Cellular Automaton Model

HUO Xin¹, DOU Rui-feng^{1, 2}, YU Bo¹, WEN Zhi^{1, 2}, LIU Xun-liang^{1, 2}

School of Energy and Environmental Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China;
Beijing Key Laboratory of Energy Saving and Emission Reduction for Metallurgical Industry, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China)

Abstract:

Fine and uniform equiaxed grains are expected to be obtained during the casting process, but the average grain size is difficult to measure directly. Therefore, establishing a reliable mathematic model to predict the grain size is necessary. In this research, a cellular automaton (CA) model was established. This model based on dendrite growth kinetics can simulate the microstructure evolution during solidification of aluminum alloy and obtain the average grain size. The simulation results were in agreement with Lipton Glicksman Kurz (LGK) model, and the growth of single dendritic, multi-dendritic and columnar crystals can be acquired by this model. A gravity casting experiment of AA5182 aluminum alloy was conducted to verify the accuracy of the model. The grain morphology during the casting process changes on the basis of the temperature gradient and cooling rate. An average grain size of the aluminum alloy castings. This map showed that decreasing the temperature gradient and increasing the cooling rate were contributed to the refinement of the grain size.

Key words:

cellular automaton model; casting; average grain size; aluminum alloy; solidification microstructure