科学通报 2014 年 第 59 卷 第 10 期：845 ~ 853
专题："材料基因组"计算模拟应用 评 述 www.scichina.com csb.scichina.com
《中国科学》杂志社 SCIENCE CHINA PRESS

凝固过程数值模拟的研究进展和发展趋势

黄卫东[①②*]，王猛[①②]

① 凝固技术国家重点实验室，西安 710072;
② 西北工业大学材料学院，西安 710072
* 联系人，E-mail: huang@nwpu.edu.cn

2013-04-10 收稿，2013-06-05 接受，2013-08-08 网络版发表
国家重点基础研究发展计划(2011CB610402)资助

摘要 回顾了凝固过程理论描述及数值模拟的发展历史，对其研究现状和存在问题进行了评述，重点分析了与凝固组织形成相关联的理论研究要点，对目前已经建立的宏微观结合/耦合凝固过程描述及模拟方法进展进行了归纳总结，在此基础上对凝固过程精确理论描述和数值模拟的前景及趋势进行了展望.

关键词
凝固过程
精确理论描述
数值模拟
宏微观耦合

凝固在自然界及人类生产实践中占有十分重要的地位. 从熔岩冻结为地壳到海洋中冰山浮现，都是自然演进历程中凝固过程的重要体现. 而在人类的生产实践中，从矿石冶炼到金属构件的铸造成形、焊接组合，无一不涉及到凝固过程. 作为从液态金属到最终构件的最直接成形途径，铸造同时也是现有材料成形方法中最为复杂的工艺过程. 使特定成分合金液在外场约束条件下完成凝固过程，可以获得具备不同内部组织及外部形态的铸件. 深入理解并准确掌握外场约束条件下的凝固过程，是实现铸件性能控制和优化的前提. 建立凝固过程的精确理论描述和可靠数值模拟，在此基础上实现凝固过程的精巧控制，获得铸造工艺和铸件性能的最佳优化，已经成为了当前物理冶金学家及材料研究学者的关注热点.

1 凝固过程的早期理论描述

凝固过程的早期理论描述主要基于热分析、流动分析、形核理论、凝固形态学等而建立. 通过理论描述与生产实践的相互结合、印证，已经能够在一定程度上实现对铸件典型组织和缺陷的定性预测和控制. 以下将对凝固过程早期理论描述的发展进行简要回顾.

致密组织是保证良好铸件性能的基础. 大多数合金在凝固过程中均伴随着体积收缩，可能因此导致铸件在不良凝固条件下的组织疏松. 为了避免此类缺陷，人们通过对铸造过程进行热分析来预测铸件内部疏松发生的概率及位置，进而优化温度场来获得致密的铸件. 热节圆法、模数法在早期用于铸件凝固过程的热分析，如周尧和等人[1]就基于模数法分析提出了后续在钢铁铸件生产中广泛应用的保温冒口工艺. 随着数值计算方法的发展，人们进一步通过耦合流动及相变过程的温度场数值计算方案来开展更为精确的铸件凝固过程热分析，可以实现铸件疏松缺陷的良好预测. 与此同时，通过在铸件热分析过程中耦合应力场分析，可以实现铸件热裂倾向的预测；通过分析充型流动，可以考察夹杂物的运动状态，从而实现夹杂分布缺陷的预测.

铸件凝固条件的差异会导致不同的凝固组织形成，进而对应不同的铸件性能. 沿壁厚方向由外向内铸件中通常形成表面激冷晶、定向柱状晶、中心粗大等轴晶 3 个晶区分布：铸件表层冷却强度高，大量晶粒快速形核从而形成了细小等轴晶区；因结晶潜热

引用格式：黄卫东，王猛. 凝固过程数值模拟的研究进展和发展趋势. 科学通报, 2014, 59: 845–853
英文版见：Huang W D, Wang M. Progress and development trends in the numerical modeling of solidification. Chin Sci Bull, 2014, 59, doi: 10.1007/s11434-013-0092-6

释放及导热条件改变, 铸件稍内层的冷却强度降低, 形核难度增大, 而局部较大的温度梯度促进了柱状晶的单向生长; 逼近铸件心部位置, 因热流方向性减弱, 冷却速度降低, 发展为铸件中心的粗大等轴晶区[2]. 凝固界面形态及其演化现象是铸件凝固组织多样性的根源之一. 凝固界面形态由温度场及溶质场条件控制, Tiller 等人[3]早在 1953 年就描述了因溶质富集而导致的液固界面失稳现象, 揭示了凝固界面形态从平面到胞/枝晶演变的控制条件. 基于凝固过程的相关理论描述及相关实验证据, 研究者们还进一步给出了不同冷却条件下单相凝固组织及其特征尺度的选择图谱.

基于早期建立的凝固理论描述, 铸造工作者能够实现一定程度的铸件凝固组织调控. 如通过铸件壁厚设计、铸型材料选择、浇注温度与铸型温度设定以及冷铁应用来控制铸件成形过程中的凝固速度, 通过铸件壁厚过渡、铸型材料的分区应用、浇冒口与冷铁的协同设计、加热或强制冷却装置等手段来控制温度梯度; 通过低温浇注、形核孕育处理、振动或搅拌工艺来获得细小晶粒, 满足常规服役环境下的优良铸件性能; 通过单向热流控制并结合较高界面推进速度以获得细小挺直的树枝晶组织, 以定向凝固方式满足航空发动机叶片单向性能强化的需求.

然而由于早期所建立的理论描述更多地注重于凝固子过程规律的分立定性解释, 缺乏对于凝固过程的全局定量把握, 在此基础上建立的凝固过程干预手段相当有限, 不能满足复合外场耦合作用下复杂合金凝固组织调控的需要. 为此, 有必要建立迈向精确量化的凝固过程理论描述方案, 实现复杂温度场及流场作用下多组分合金凝固过程中涵盖晶粒、枝晶、缺陷在内的多场多尺度描述及预测, 从而为更为广泛的铸造生产实践提供精确理论指导.

2 凝固过程精确理论描述的研究进展

计算机数值仿真技术的发展, 提供了精确定量地描述凝固过程的手段. 凝固过程数值仿真经历了从简单到复杂的进步过程. 凝固过程是温度场、流场、浓度场、应力场和相变相耦合的过程, 有的特殊工艺过程中还涉及到电磁场或化学反应. 要对实际铸件的凝固过程进行精确的数值仿真, 必须完全耦合所有这些因素, 这对数值仿真来讲也是极为艰巨, 是还需要经过相当长时间的努力才能完成的任务. 最初的凝固过程仿真只单一地计算温度场, 虽然同早期的传热过程数学分析方法相比能够更为准确地反映铸造过程的温度场, 但由于大多数实际凝固过程都伴随着显著的以致强烈的液相对流, 针对静止流体的温度场计算同实际的温度场必然相差很远. 因此第二阶段的凝固过程数值仿真耦合了温度场与流场, 它可以给出相当准确的温度场信息, 这是铸造商业软件当前的发展水平. 由于不涉及凝固过程的计算, 目前的商业软件不能给出宏观偏析和材料组织状态的信息, 而这正是理解和控制铸件性能最重要信息. 本文所指的凝固过程精确理论描述, 最低限度应该是耦合了温度场、流场、浓度场和相变过程的数值仿真, 这是当前凝固科学界正在努力的方向, 这方面的研究进展使面向实际铸件的复杂凝固过程的精确理论描述曙光初现. 凝固过程精确的数值仿真依赖于计算机能力、数值模拟方法和凝固理论 3 个方面的发展, 下面将综述后两方面的一些主要进展情况.

2.1 深刻认识凝固组织形成原理: 凝固过程精确描述的科学基础

对凝固组织形成原理的深刻认识是实现凝固过程精确描述的科学基础. 近几十年来, 凝固理论研究一直聚焦于深刻理解凝固组织的形成原理. 可以说, 我们对凝固过程中出现的绝大多数类型的组织形态都已经有了相当全面深入的认识, 使得我们今天可以提出对复杂的实际凝固过程进行精确描述这样一个过去不可想象的艰巨任务.

自成分过冷理论作为理解凝固组织的第一个科学理论被提出之后, 凝固理论不断取得新突破, 对于凝固过程的定量化理解也不断得到深化, 如: MS 理论[4]进一步给出了界面失稳的尺度描述, 成功地预言了随着生长速度的提高, 固液界面形态将经历从平界面→胞晶→树枝晶→胞晶→带状组织→绝对稳定平界面的转变.

一次枝晶间距选择是凝固微观组织花样形成中最重要的问题之一. 早期所建立的几个一次枝晶间距理论模型都潜在地假定一次枝晶间距与凝固系统的当前状态具有确定的单值对应关系, 而其预测与实验结果之间存在较大的偏差. 黄卫东[5]从耗散结构论的基本原理出发, 提出枝晶一次间距的选择具有历史相关性, 从而存在一个分布范围的观点, 并通过实验予以证实. 基于一次枝晶间距选择存在一个分

布范围的观点, Warren 和 Langer[6]对枝晶列稳态扩散场进行线性稳定性分析, 得出了一次间距分布范围下限的分析模型; Lu 和 Hunt[7]基于同样的观点, 应用数值模拟技术给出了一次间距分布范围下限的数值模型. 此后, 枝晶/胞晶一次间距选择的容许范围的精确实验结果[8]则导致了在凝固界流行了多年的确定性凝固理论彻底退出历史舞台, 并推动了以非平衡自组织理论为指导的新的凝固理论的发展.

对于柱状晶/等轴晶转变(columnar to equiaxed transition, CET)机制的认识不断深化. Hunt 模型[9]是第一个较为成熟的考虑 CET 的理论模型, 该模型认为在定向生长条件下, 如果凝固界面前沿的最大局域过冷度高于形核过冷度, 就有可能形核并发生等轴晶生长; 当等轴晶的体积分数小于 0.49%时, 凝固组织可能为柱状晶, 而当其大于 49%时, 凝固组织可能为等轴晶, 等轴晶的体积分数在两个临界值之间时会形成柱状晶和等轴晶混合的生长形态. 此后, Gäumann 等人[10,11]在 Hunt 的 CET 模型基础上, 将描述定向凝固的 KGT 模型和描述过冷熔体生长的 LKT 模型相结合, 发展了一个考虑快速凝固非平衡效应的更为完备的 CET 模型, 并将其成功运用于外延激光金属成形单晶的研究中. Lin 等人[12]在考虑合金组元效应局部线性叠加的基础上, 结合计算相图, 发展了一个适用于多元合金凝固 CET 的理论模型, 该模型能够很好地描述 316L 不锈钢及 Rene95 高温合金激光快速成形过程中的凝固组织演化.

对凝固过程中不同固相形核、生长之间的耦合、竞争行为有了更为深入的认识. 基于热力学及动力学分析, 可以实现典型凝固条件下共晶组织[13]及包晶组织[14,15]形成的预测. 通过求解包晶合金定向凝固过程中竞争生长相的界面响应函数, 同时考虑界面前沿成分过冷区的形核竞争问题, 王猛等人[16]建立了 Zn-Cu 包晶合金定向凝固条件下的组织选择图, 所预测的组织选择图谱与定向凝固实验结果取得了很好的吻合.

纳观界面结构对微观-宏观组织形态影响的认识趋于明晰. 棱面相与非棱面相在凝固过程中的不同本征特性及形态可以通过纳观尺度的界面结构特征来加以阐述[17], 棱面相生长形态主要受控于纳观界面原子附着过程中的能量变化, 而非棱面相生长则在更大程度上受温度场及溶质场的影响; 据此人们能够更好地理解一些重要的金属材料如 Al-Si 合金、Fe-C 合金中的典型凝固组织形成规律. 相关研究也表明, 微量元素对棱面相生长形态有显著影响, 通过添加适量的微量合金化元素, 有助于优化凝固组织中棱面相的生长形态从而提升铸件性能[18,19].

2.2 体积平均法: 宏观凝固过程与微观结晶行为双向耦合模拟的可行途径

在常见的铸件尺度上, 早期对于凝固过程的描述主要集中于宏观温度场及流动场的分析, 借助于经验性判据可以实现宏观层面液相区、糊状区、固相区构成及细微组织特征的粗略说明. 而精确的可视化凝固过程描述要求就固相形核、晶粒生长形态、溶质排出、晶粒漂移、液相流动、温度分布等不同层次的诸多问题形成准确认识, 建立可靠的物理模型. 通过耦合宏微观不同层次凝固过程的数理描述, 借助计算机模拟实现获得图形化的组织形成过程演示, 则是验证并加深凝固过程精确描述体系认识的重要手段.

凝固过程宏微观耦合的计算量控制是需要特别考虑的问题. 为了实现凝固过程宏微观的双向耦合模拟, 研究者们开展了大量工作. Beckermann 课题组[20,21]首先将多相流动分析用于凝固过程的模拟, 把凝固过程中涉及到的物相区分为液相、固相及枝晶间液相, 分别求解各相的质量、动量、溶质、热焓守恒方程, 并以模型化方式考虑相间作用及转变. 然而这一方案因缺少一个合理的形核模型, 且过度追求统一性而变得复杂, 难于实际操作.

此后, Beckermann 的模型被 Ludwig 和 Wu[22~24]进一步修改并应用到等轴球晶的凝固过程模拟当中. 在 Ludwig 和 Wu[23]建立的多相模型中, 他们对各相同时求解质量、动量、热量、组分方程与一组密度守恒方程; 对于各相的生核规律、生长动力学、潜热释放、溶质分布和机械作用等问题, 则通过相应的传输方程和数学模型来加以整合. 为了实现宏微观凝固过程的双向耦合, Wu 和 Ludwig[25]基于体积平均法, 采用如图 1 所示的处理方案来实现跨层次的参数传递, 在宏观层面采用欧拉多相模型完成熔体、不同物相等轴晶、柱状晶、固相之间相互作用的描述, 并以此作为微观层次模拟的外部条件; 微观层次模拟中应用界面跟踪法或其他较为精确的凝固理论模型来获得可接受的固相生长具体形态的描述; 对具体的固相生长形态, 采用包络平均的方法来概括其宏观

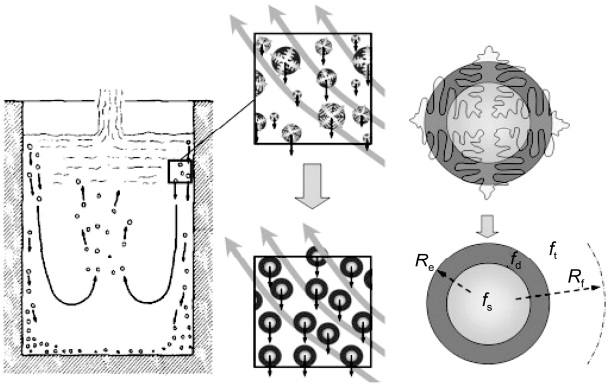

图 1 基于体积平均法的凝固过程欧拉多相模型
Reprinted from [25] with permission from Elsevier

量化特征, 并将所提取的特征参数返回到宏观凝固过程的计算模拟中, 从而实现宏微观的双向耦合模拟计算.

基于其发展的凝固模型, Wu 等人[26]对铸锭凝固过程中的微观组织分布、宏观偏析的数值模拟, 均与实际铸锭的浇铸结果取得了较好的吻合(图 2). 模拟结果证实凝固过程中不同物相之间的相对运动对铸件成分及组织分布产生了显著的影响, 这也说明了凝固宏微观双向耦合描述的必要性.

体积平均法能够实现铸件尺度的双向宏微观耦合计算, 并且具备较为开放的微观凝固模型扩展特性, 极有希望首先进入包含凝固过程计算, 从而可以提供一定的凝固组织和成分偏析信息的铸造仿真商业软件. 然而, 体积平均法还只是对凝固组织及成分偏析的间接计算, 它所依赖的凝固组织模型还有相当大程度的简化特性, 直接的凝固组织模拟计算需要借助于下面两节所述的相场法和元胞自动机方法来进行.

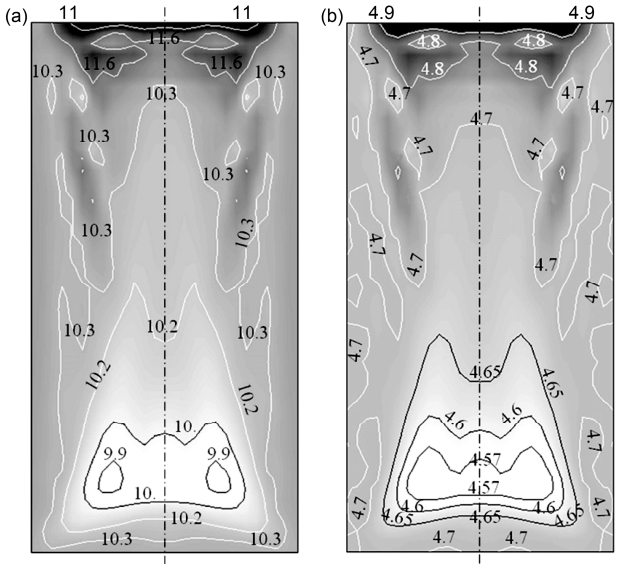

图 2 凝固微观组织及宏观偏析预测结果
(a) 共晶相体积分数; (b) 宏观偏析. Reprinted from [26] with permission from Elsevier

2.3 液固转变过程的相场法模拟: 具有明确物理基础的相变过程模拟方法

相场法(phase field, PF)[27]通过引入相场变量 Φ(当 Φ=1 时, 表示固相; Φ=−1 或 0 时, 表示液相), 建立热质传输耦合方程来求解相场变量, 并通过相场变量的连续变化来求解固液界面位置并描述界面形态和界面移动. 相场方法通过直接求解相场变量 Φ并将其值为 1/2 处认定为界面位置, 避免了传统相变计算中复杂固液界面跟踪的困难.

20 世纪 80 年代, Collins 和 Levine [28], Caginalp 等人[29~31]与 Langer[32]在前期研究的基础上将相场序参量的概念引入到凝固过程中并进行了二维尺度的模拟, 定性说明了微观组织形成的一些特征. 通过细致的数学分析, Caginalp 和 Fife[33], Fife 和 Gill[34]证明了在界面厚度趋于零时相场模型与尖锐界面模型的一致性, 同时在相场模型中引入了各向异性. 随后, Kobayashi[35,36]通过数值求解各向异性的相场模型, 首次得到了过冷纯物质熔体凝固时的复杂枝晶形态, 其二维及三维的模拟结果均与真实凝固组织定性相似.

然而早期的相场模型的热力学基础较为薄弱, 无法与经典的热力学中的熵增大原理或者自由能减小原理对应起来; 同时其计算结果对界面厚度有显著的依赖性, 这使得计算结果受到相场模型参数取值的强烈控制. 针对这些问题, Penrose 和 Fife[37]首先提出了热力学一致的相场模型, 奠定了相场模型的热力学基础, 随后, Wang 等人[38]等对热力学一致模型做了进一步的完善. Wheeler 等人[39]则完善了 Kobayashi 提出的模型, 在一定参数条件下达成了模拟结果与 Ivantsov 解和微观可解性的吻合, 并对过冷纯 Ni 熔体的枝晶生长做了定量模拟. 此后, Karma 和 Rappel[40]于 1996 年对相场模型进行了薄界面限制下的渐进分析, 建立了相场模型的参数与材料物性参数之间的联系, 显著地降低了计算结果对界面厚度取值的依赖性, 使得真实再现小过冷度纯物质自由枝

晶生长成为可能. 基于新相场模型, Karma 和 Rappel[41] 对低过冷度下界面动力学系数为零的纯金属自由枝晶的生长进行了二维和三维数值模拟, 枝晶尖端速度和尖端半径的计算结果与稳态枝晶生长的格林函数数值解一致.

对于合金的凝固问题, 1992 年 Wheeler 等人[39] 首先建立了二元合金等温近似条件下的相场模型, 并给出了尖锐界面渐进分析, 但由于在其模型中忽略了溶质梯度项, 导致结果与快速凝固过程中所发生的溶质截留效应不符合. 为了真实再现高生长速度下二元合金凝固的溶质截留现象, Wheeler 等人[42] 在模型中引入溶质梯度, 从而得到了与实验一致的溶质偏析计算结果. 进一步的研究发现, 相场计算中弥散界面是溶质截留现象的主要因素之一, 不考虑溶质梯度项, 一定界面厚度也可以引起溶质截留现象[43,44]. 1995 年, Warren 和 Boettinger[45]模拟了 Ni-Cu 合金在等温条件下枝晶的凝固过程, 成功描述了二次臂粗化过程及溶质偏析状况. 虽然早期合金相场模型在一定界面厚度下可以描述枝晶形貌, 但固-液界面上非正常的溶质拖拽现象却导致了非真实的溶质偏析. 2001 年, Karma[46]通过引入反溶质截留项给出了单向二元合金的定量相场模型, 消除了界面厚度引起的非平衡效应. 此后, Kim[47]将反溶质截留项引入到单相多元合金相场模型. Ohno 和 Matsuura[48] 则将二元合金定量相场模型进一步拓展, 实现了固相扩散的考虑. 为了减小计算量, 早期应用相场模型模拟二元单相合金凝固组织演化时, 通常假定二元合金的凝固在等温条件下进行, 并忽略结晶潜热的释放. Mullis 和 Cochrane[49]则对二维 Ni-Cu 合金的非等温凝固进行了模拟, 发现了高过冷度下动力学效应导致了枝晶尖端的不稳定现象. 王锦程等人[50]将相场模拟方法应用于定向凝固等过程中的界面形态演化的模拟, 比较了不同抽拉速度和不同温度梯度下一次间距、沟槽深度以及有效溶质分配系数等参数, 实现了高抽拉速度和高温度梯度条件下的绝对稳定性预测, 模拟结果与 M-S 稳定性理论吻合良好.

Steinbach 等人[51]在 1996 年提出多相场法, 随后 Steinbach 和 Pezzolla[52], Eiken 等人[53]对其进行了持续的发展和完善. 通过应用多相场模型, Böttger 等人[54]实现了对工业镁合金以及铝合金多晶多相凝固过程的模拟, 得到了与实际合金组织形貌相似的定性模拟结果(图 3). 描述共晶、包晶以及偏晶凝固过程的多相场模型在单相合金模型的基础上于 1998 年后陆续出现. Nestler 等人[55,56]先后构造了包含各向异性的多相场模型和热力学一致的多相场模型, 成功地模拟了共晶、包晶以及偏晶生长.

Kim 等人[57]在 KKS 单相场模型的基础上提出了化学势相等的多相场模型; Folch 和 Plapp[58]提出了考虑反溶质截留项的定量多相场模型; Lewis 等人[59]将晶粒取向的概念延伸至液相, 建立了耦合取向场的共晶多相场模型.

目前, 凝固过程相场模型的基础已经确立, 从纯物质到二元及多元合金、从单相到多相、从单个晶粒长大到多晶生长, 相场模型在凝固方面的应用范围逐渐拓展. 作为一个开放的计算平台, 相场模型可以耦合考虑多种物理效应, 实现流动、电磁场、杂质颗粒、晶粒取向等对凝固过程影响的研究. 然而由于相场模拟巨大的计算量导致目前大多数研究仍侧重于微观组织演化机理的分析与研究, 距离预测真实大尺寸的凝固组织还有很长的路要走.

2.4 晶粒生长的元胞自动机方法模拟: 局域凝固组织模拟的解决方案

尽管相场方法具有明确的物理基础, 其模拟结

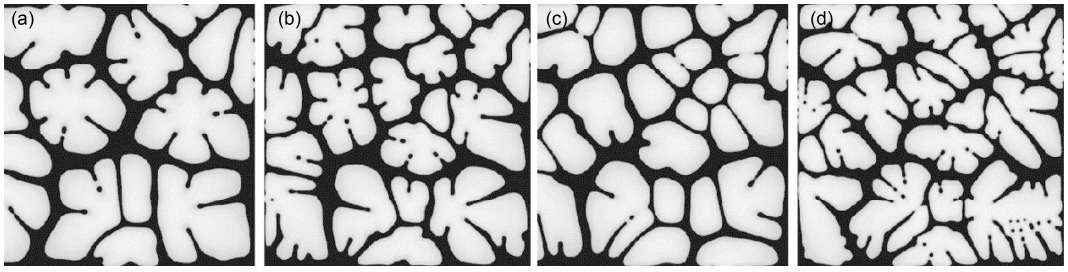

图 3 Ag-Cu 共晶等轴晶凝固过程示意图

(a) AZ31 合金; (b) 提高铝含量; (c) 提高孕育质点密度; (d) 提高冷却速度. Reprinted from [54] with permission from Elsevier

果相对可靠, 但由于计算量过大、运行效率低、可模拟区域小, 使其难于应用到大尺度范围内的凝固组织模拟. 元胞自动机方法(cellular automaton, CA)是目前被用于微观凝固组织形成过程的另一种重要的计算机模拟方法, 其引人注意的特点正在于其比相场法的模拟速度显著更快.

CA 方法是一种利用简单编码与仿细胞繁殖机制的分析方法, 大量元胞依据确定的局部规则, 通过简单的相互作用实现动态系统的复杂演化, 因此可用于特定空间及时间范围内复杂演化过程的描述. 采用 CA 方法模拟介观尺度的凝固组织演化一般通过 2 个步骤来实现: (1) 凝固区域首先被划分为较粗的网格, 然后采用有限元(FE)或有限差分(FD)方法来计算宏观温度场、流场及溶质场; (2) 将第一步的网格划分成更细的节点, 在各节点上采用 CA 算法进行形核和生长计算, 从而定量描述晶粒形核及长大的过程.

瑞士的 Rappaz 和 Gandin[60]最早将 CA 方法用于凝固微观组织演化的模拟, 在考虑非自发形核的基础上, 基于生长过程的物理机制模拟了铝硅合金在均匀温度场下凝固的晶粒组织. 随后 Rappaz 和 Gandin[61]又对较大型铸件进行了 FE 和 CA 的耦合计算, 成功地模拟了非均匀温度场下的铝硅合金晶粒组织的形成. Rappaz 研究组[62,63]在 CA 模拟方面的开创性工作, 为后人的进一步研究奠定了基础.

Zhu 等人[64,65]对 CA 模型进行了改进(modified cellular automaton model, MCA), 以便更好地描述枝晶的生长形态. MCA 在传统 CA 方法的基础上进一步求算固相和液相中的溶质场分布, 考虑界面曲率以及固液相之间的溶质再分配对界面形态演化的影响, 因而不仅能够实现晶粒生长的模拟, 还能实现晶粒内部枝晶形貌的模拟, 可以描述完全柱状晶、完全等轴晶、柱状晶到等轴晶的转变过程. 此外 MCA 模型还能拓展到三维条件下, 从而实现三维枝晶演化过程的模拟[66], 其模拟结果与实验结果取得了很好的吻合. 为了预测对流熔体中的枝晶生长形貌, Zhu 等人[67]进一步耦合 MCA 与动量传输模型, 很好地模拟出了对流情况下枝晶的迎流生长现象. 然而在 MCA 模型中将仅适用于枝晶尖端的 KGT 模型用于描述整个枝晶的生长行为, 在物理机制上存在一定的偏差.

凝固过程的宏微观耦合计算一直是人们关注的重点. Wang 等人[68]将 CA 与 FD 耦合计算, 较好地模拟了航空涡轮机叶片材料(镍基超高温合金)的凝固微观组织. 清华大学柳百成课题组[69]将 CA 模型与宏观传热计算相耦合, 采用正交网格与六边形网格嵌套网格模型对铸造镁合金凝固过程中的枝晶形貌演化进行模拟计算, 其模拟结果与镁合金浇注试样的凝固组织吻合良好.

与相场法相比较, CA 方法具有较快的计算速度, 这使得它能够更好地适应于较大尺度范围内凝固过程的计算模拟, 成为了材料研究学者青睐的局域凝固组织演化模拟解决方案, 被较好地应用于合金熔体的自由枝晶生长、对流条件下的自由生长、定向凝固, 以及 CET 转变等凝固过程的数值模拟. 然而前期所建立的 CA 模型存在物理机制不够明确, 以及无法消除 CA 模型中网格各向异性的问题. Nastac 研究组[70,71], Stefanescu 研究组[72,73], 单博炜等人[74]则进一步改进了 CA 模型, 使凝固 CA 模拟向着具有更明确的物理机制方面发展.

为了真实体现凝固过程固液界面能及其各向异性对晶粒生长形态的影响, 首先必须抑制 CA 模型网格剖分及界面捕获规则带来的计算各向异性. 为此, Wei 等人[75]考察了不同网格捕获规则对二维及三维枝晶生长 CA 模拟的影响, 分别采用随机折线捕获规则和最小邻居固相分数法(limited neighbor solid fraction, LNSF)实现了二维及三维条件下的网格各向异性抑制, 建立了不引入网格各向异性的溶质分配算法(图 4). 此外, 魏雷[76]在 CA 算法方面也进行了改进, 基于双线性差值对固相分数偏导数求解, 提高了界面曲率计算的精度; 建立了包含界面重构的二维凝固 CA 模型, 实现了对更加复杂的界面形态的描述; 针对传统 CA 模型采用两种途径分别处理纯物质凝固和合金凝固的问题, 通过改进凝固 CA 模型的生长动力学算法, 实现了合金凝固 CA 模型在合金名义成分趋于零时向纯物质凝固 CA 模型的收敛; 采用自适应网格技术建立了三维凝固 CA 模型, 显著减少三维 CA 模型的计算量, 进一步提升了凝固过程宏微观双向耦合模拟的实现可能性.

3 总结与展望

包括体积平均法、相场法、元胞自动机方法在内的数值模拟方法已经在凝固过程模拟中得到了应用, 不同尺度的凝固现象均在一定程度上获得了可量化的描述. 在目前可接受的计算负荷下, 基于体积平均法可获得典型凝固现象的较精确描述, 对其进行可

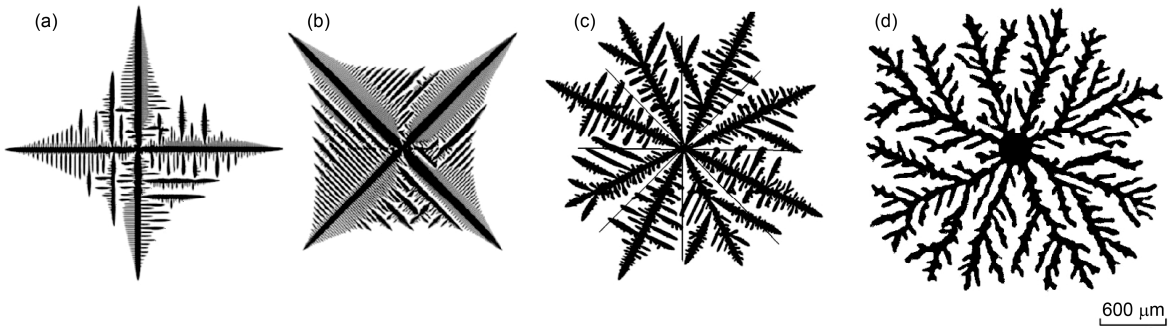

图 4　不同界面捕获规则条件下过冷熔体中的二维固相生长

界面能各向异性为 0, 分别采用(a) 冯诺依曼规则, (b) 摩尔规则, (c) 折线邻居规则, (d) 随机折线邻居规则进行界面捕获. Reprinted from [75] with permission from Springer

视化的展示, 据此实现铸造过程的优化控制, 因此体积平均法将有望在铸造过程数值模拟中得到优先应用. 与相场法相比较, 元胞自动机方法因其计算强度较低, 在与体积平均法整合并描述微观组织演化方面具备一定优势. 而相场法因其较明确的物理基础, 则更适宜于强化凝固理论方面的认识, 并与微观实验观察结果进行对比、验证.

宏微观耦合的数值模拟为全面精确的凝固过程理论描述提供了基础. 但是也应当认识到, 精确定量的凝固过程全局化理论描述仍然路途漫漫、任重道远.

首先, 凝固科学基础理论还需要进一步完善. 初始熔体结构对于后续凝固过程至关重要, 而现有的对于熔体结构的认识还相当粗浅, 亟待加深; 形核是凝固相变的起点, 而对于形核过程, 尤其是依附于已有界面而发生的异质形核过程的认识仍然不够明晰, 形核理论尚需要进一步深化; 面对复杂组元多相合金的凝固问题, 合金多元素间的热力学及动力学交互作用机制也需要进一步明确.

其次, 要进一步完善凝固过程各层次的描述方法. 以微观组织模拟描述为例, 目前采用的计算域离散化处理不可避免地引入网格剖分及计算时序, 计算噪声与物理噪声对界面及晶粒形态的不同作用同时也对晶粒生长行为产生不可忽略的影响, 导致计算模拟可靠性的降低. 如何通过计算方法的改进来消除这些偏差, 是今后一段时期努力的方向.

第三, 多尺度跨层次耦合模拟方法仍有待于持续改进. 以体积平均法为基础的多相凝固模型目前正在逐步完善, 并已在简单合金凝固条件下获得宏微观双向耦合模拟应用, 但是受理论基础和现有计算能力的限制, 针对复杂合金和实际铸件的计算模拟仍然存在一定困难, 有待于进一步优化. 相信随着凝固基础理论认识的不断深化、计算方法的不断改进、计算处理能力的不断加强, 目前所存在的困难也将会逐步得到解决, 更为精确的全局凝固过程理论描述方案将不断被提出、建立和完善.

参考文献

1　周尧和, 张延威, 曲卫涛, 等. 保温冒口研究. 西北工业大学学报, 1979, 2: 21–31

2　Ohno A, Motegi T, Soda H. Origin of the equiaxed crystals in castings. Trans ISIJ, 1971, 11: 18–26

3　Tiller W A, Jachson K A, Rutter J W, et al. The redistribution of solute atoms during the solidification of metals. Acta Metall, 1953, 1: 428–437

4　Mullins W W, Sekerka R F. Morphological stability of a particle growing by diffusion or heat flow. Appl Phys, 1963, 34: 323–329

5　黄卫东. 凝固非稳态过程溶质再分配与形态选择研究. 博士学位论文. 西安: 西北工业大学, 1989

6　Warren J A, Langer J S. Stability of dendritic arrays. Phys Rev A, 1990, 42: 3518–3525

7　Lu S Z, Hunt J D. A numerical-analysis of dendritic and cellular array growth-the spacing adjustment mechanisms. J Cryst Growth, 1992, 123: 17–34

8　Huang W D, Geng X G, Zhou Y H. Primary spacing selection of constrained dendritic growth. J Cryst Growth, 1993, 134: 105–115

9　Hunt J D. Steady state columnar and equiaxed growth of dendrites and eutectic. Mater Sci Eng, 1984, 65: 75–83

10 Gäumann M, Trivedi R, Kurz W. Nucleation ahead of the advancing interface in directional solidification. Mater Sci Eng A, 1997, 226-228: 763–769
11 Gäumann M, Bezencon C, Canalis P, et al. Single-crystal laser deposition of superalloys: Processing-microstructure maps. Acta Mater, 2001, 49: 1051–1062
12 Lin X, Li Y M, Wang M, et al. Columnar to equiaxed transition during alloy solidification. Sci China Ser E: Technol Sci, 2003, 46: 475–489
13 Jackson K A, Hunt J D. Lamellar and rod eutectic growth. Trans Metall Soc AIME, 1966, 236: 1129–1142
14 Boettinger W J. The structure of directionally solidified two phase Sn-Cd peritectic alloys. Metall Trans, 1974, 5: 2023–2031
15 Kerr H W, Kurz W. Solidification of peritectic alloys. Int Mater Rev, 1996, 41: 129–164
16 王猛, 苏云鹏, 林鑫, 等. Zn-Cu 包晶合金定向凝固组织演化——Ⅱ. 相选择的改进分析. 金属学报, 2003, 39: 838–842
17 Jackson K A. Liquid Metals and Solidification, ASM. Ohio: Metals Park, 1958. 174
18 Napolitano R E, Meco H, Jung C. Faceted solidification morphologies in Al-Si eutectics at low growth rates. JOM, 2004, 56: 16–21
19 Lee Y, Irie Y, Yamamoto S, et al. Influences of Mg, S and graphitization rate on the spheroidization of graphite. J Jpn Inst Met, 1984, 48: 1041–1046
20 Beckermann C, Viskanta R. Mathematical modeling of transport phenomena during alloy solidification. Appl Mech Rev, 1993, 46: 1–27
21 Beckermann C. Modeling of macrosegregation: Applications and future needs. Int Mater Rev, 2002, 47: 243–261
22 Wu M, Ludwig A, Bührig-Polaczek A, et al. Influence of convection and grain movement on globular equiaxed solidification. Int J Heat Mass Transf, 2003, 46: 2819–2832
23 Ludwig A, Wu M. Modeling of globular equiaxed solidification with a two-phase approach. Metall Mater Trans A, 2002, 33: 3673–3683
24 Wu M, Ludwig A. Influence of phase transport phenomena on macrosegregation and structure formation during solidification. Adv Eng Mater, 2003, 5: 62–66
25 Wu M, Ludwig A. Modeling equiaxed solidification with melt convection and grain sedimentation—I. Model description. Acta Mater, 2009, 57: 5621–5631
26 Wu M, Ludwig A, Fjeld A. Modeling mixed columnar-equiaxed solidification with melt convection and grain sedimentation—Part II: Illustrative modeling results and parameter studies. Comput Mater Sci, 2010, 50: 43–58
27 Boettinger W J, Warren J A, Beckermann C, et al. Phase-field simulation of solidification. Annu Rev Mater Res, 2002, 32: 163–194
28 Collins J B, Levine H. Diffuse interface model of diffusion-limited crystal growth. Phys Rev B, 1985, 31: 6119–6122
29 Caginalp G. An analysis of a phase field model of a free boundary. Arch Ration Mech Anal, 1986, 92: 205–245
30 Caginalp G, Fife P. Higher-order phase field models and detailed anisotropy. Phys Rev B, 1986, 34: 4940–4943
31 Caginalp G, Fife P. Phase-field methods for interfacial boundaries. Phys Rev B, 1986, 33: 7792–7794
32 Langer J S. Lectures in the theory of pattern formation. In: Souletie J, Vannimenus J, Stora R, eds. Chance and Matter. Amsterdam: Elsevier Science Publishers, 1987. 692–711
33 Caginalp G, Fife P. Higher-order phase field models and detailed anisotropy. Phys Rev B, 1986, 34: 4940–4943
34 Fife P C, Gill G S. Phase-transition mechanisms for the phase-field model under internal heating. Phys Rev A, 1991, 43: 843–851
35 Kobayashi R. Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth. Physica D, 1993, 63: 410–423
36 Kobayashi R. A numerical approach to three-dimensional dendritic solidification. Exp Math, 1994, 3: 59–81
37 Penrose O, Fife P C. Thermodynamically consistent models of phase-field type for the kinetic of phase transitions. Physica D, 1990, 43: 44–42
38 Wang S L, Sekerka R F, Wheeler A A, et al. Thermodynamically-consistent phase-field models for solidification. Physica D, 1993, 69: 189–200
39 Wheeler A A, Boettinger W J, McFadden G B. Phase field model for isothermal phase transition in binary alloys. Phys Rev E, 1992, 45: 7424–7439
40 Karma A, Rappel W J. Phase field method for computationally efficient modeling of solidification with arbitrary interface kinetics. Phys Rev E, 1996, 53: 3017–3020
41 Karma A, Rappel W J. Quantitative phase-field modeling of dendritic growth in two and three dimensions. Phys Rev E, 1998, 57: 4323–4349
42 Wheeler A A, Boettinger W J, Mcfadden G B. Phase-field model of solute trapping during solidification. Phys Rev E, 1993, 47: 1893–1909
43 Ahmad N A, Wheeler A A, Boettinger W J, et al. Solute trapping and solute drag in a phase-field model of rapid solidification. Phys Rev E, 1998, 58: 3436–3450
44 Conti M. Solute trapping in directional solidification at high speed: A one-dimensional study with the phase-field model. Phys Rev E, 1997, 56: 3717–3720

45 Warren J A, Boettinger W J. Prediction of dendritic growth and microsegregation patterns in a binary alloy using the phase-field method. Acta Metal Mater, 1995, 43: 689–703

46 Karma A. Phase-field formulation for quantitative modeling of alloy solidification. Phys Rev Lett, 2001, 87: 115701

47 Kim S G. A phase-field model with antitrapping current for multicomponent alloys with arbitrary thermodynamic properties. Acta Mater, 2007, 55: 4391–4399

48 Ohno M, Matsuura K. Quantitative phase-field modeling for dilute alloy solidification involving diffusion in the solid. Phys Rev E, 2009, 79: 031603

49 Mullins A M, Cochrane R F. A phase field model for spontaneous grain refinement in deeply undercooled metallic melts. Acta Mater, 2001, 49: 2205–2214

50 王锦程, 李俊杰, 杨玉娟, 等. 定向凝固界面形态演化及其稳定性的相场法研究. 中国科学 E 辑: 技术科学, 2008, 38: 16–23

51 Steinbach I, Pezzolla F, Nestler B, et al. A phase field concept for multiphase systems. Physica D, 1996, 94: 135–147

52 Steinbach I, Pezzolla F. A generalized field method for multiphase transformations using interface fields. Physica D, 1999, 134: 385–393

53 Eiken J, Böttger B, Steinbach I. Multiphase-field approach for multicomponent alloys with extrapolation scheme for numerical application. Phys Rev E, 2006, 73: 066122

54 Böttger B, Eiken J, Steinbach I. Phase field simulation of equiaxed solidification in technical alloys. Acta Mater, 2006, 54: 2697–2704

55 Nestler B, Wheeler A A. A multi-phase-field model of eutectic and peritectic alloys: Numerical simulation of growth structures. Physica D, 2000, 138: 114–133

56 Nestle B, Wheeler A A, Ratke L, et al. Phase-field model for solidification of a monotectic alloy with convection. Physica D, 2000, 141: 133–154

57 Kim S G, Kim W T, Suzuki T, et al. Phase-field modeling of eutectic solidification. J Cryst Growth, 2004, 261: 135–158

58 Folch R, Plapp M. Quantitative phase-field modeling of two-phase growth. Phys Rev E, 2005, 72: 010602

59 Lewis D, Warren J, Boettinger W, et al. Phase-field models for eutectic solidification. JOM, 2004, 56: 34–39

60 Rappaz M, Gandin C A. Probabilistic modeling of microstructure formation in solidification progress. Acta Metall, 1993, 41: 345–360

61 Gandin C A, Rappaz M. A coupled finite element-cellular automaton model for the prediction of dendritic grain structures in solidification processes. Acta Metall, 1994, 42: 2233–2246

62 Rappaz M, Gandin C A, Desbiolles J L, et al. Prediction of grain structures in various solidification processes. Metall Mater Trans A, 1996, 27: 695–705

63 Gandin C A, Desbiolles J L, Rappaz M, et al. A three-dimensional cellular automaton-finite element model for the prediction of solidification grain structures. Metall Mater Trans A, 1999, 30: 3153–3165

64 Zhu M F, Hong C P. A modified cellular automaton model for the simulation of dendritic growth in solidification of alloys. ISIJ Int, 2001, 41: 436–445

65 Zhu M F, Kim J M, Hong C P. Modeling of globular and dendritic structure evolution in solidification of an Al-7mass% Si alloy. ISIJ Int, 2001, 41: 992–998

66 Zhu M F, Hong C P. A three dimensional modified cellular automaton model for the prediction of solidification microstructures. ISIJ Int, 2002, 42: 520–526

67 Zhu M F, Lee S Y, Hong C P. Modified cellular automaton model for the prediction of dendritic growth with melt convection. Phys Rev E, 2004, 69: 061610

68 Wang W, Kermanpur A, Lee P D, et al. Simulation of dendritic growth in the platform region of single crystal superalloy turbine blades. J Mater Sci, 2003, 38: 4385–4391

69 霍亮, 韩志强, 柳百成. 基于两套网格的 CA 方法模拟铸造镁合金凝固过程枝晶形貌演化. 金属学报, 2009, 45: 1414–1420

70 Nastac L. Numerical modeling of solidification morphologies and segregation patterns in cast dendritic alloys. Acta Mater, 1999, 47: 4253–4262

71 Nastac L, Stefanescu D M. Stochastic modelling of microstructure formation in solidification processes. Mode Simul Mater Sci Eng, 1997, 5: 391–420

72 Beltran-Sanchez L, Stefanescu D M. Growth of solutal dendrites—A cellular automaton model. Int J Cast Metals Res, 2002, 15: 251–256

73 Beltran-Sanchez L, Stefanescu D M. Growth of solutal dendrites—A cellular automaton model and its quantitative capabilities. Metal Mater Trans, 2003, 34: 367–382

74 单博炜, 黄卫东, 林鑫, 等. 元胞自动机模型模拟枝晶一次间距的选择. 金属学报, 2008, 44: 1042–1050

75 Wei L, Lin X, Wang M, et al. A cellular automaton model for the solidification of a pure substance. Appl Phys A, 2011, 103: 123–133

76 魏雷. 枝晶生长的元胞自动机模型研究. 博士学位论文. 西安: 西北工业大学, 2012