

# 一个新的用于元胞自动机模拟微观组织的 溶质分配模型及其计算验证\*

李日† 沈焕弟 冯长海 潘红 冯传宁

(河北工业大学, 材料成型及控制工程重点实验室, 天津 300130)

(2013年5月24日收到; 2013年6月14日收到修改稿)

在已有的几种溶质再分配计算模型的基础上, 建立了一个新的更为合理的溶质再分配模型. 该模型充分考虑了枝晶生长过程中可能出现的固/液界面元胞的各种状态及其邻居元胞的各种状态, 根据这两者的不同状态, 分别建立不同的计算公式展开计算. 利用所建立的模型消除了原有的扩散控制的元胞自动机 (CA) 生长模型存在的在晶界处元胞不凝固的缺陷. 接着, 为了进一步验证模型的可靠性, 在 Kurz-Giovanola-Trivedi 方法控制的 CA 生长模型中引入新的溶质再分配计算模型, 对 Al-4.7 wt%Cu 合金铸锭进行了模拟计算, 并与实验结果进行了金相组织和成分分布两方面的对比, 表明新模型具有较好的精确性.

**关键词:** 元胞自动机方法, 微观组织模拟, 溶质再分配

**PACS:** 81.30.-t

**DOI:** 10.7498/aps.62.188106

## 1 引言

金属材料的微观组织对其机械性能有很大影响<sup>[1]</sup>. 合金微观组织的形成除受温度的制约外, 凝固过程中溶质分布的变化是另一个重要的影响因素. 陈福义和介万奇<sup>[2]</sup>利用计算相图软件与 Scheil 模型耦合的方法对合金属凝固过程中溶质的分布进行计算. 李强等<sup>[3]</sup>采用浓度势计算溶质的扩散. 关于溶质再分配的计算, 文献 [4,5] 认为固液界面处元胞因凝固产生的多余的溶质仅被排到本胞的液相中. 文献 [6,7] 的计算方法是根据固液界面元胞中液相分数的多少来确定该元胞中多余的溶质是否要排到液相邻居元胞中. 陈晋<sup>[8]</sup>建立的模型相对于以往的溶质再分配模型有很大的改进, 他将界面元胞液相中溶质的含量与平衡溶质含量进行对比来确定溶质是否要排到液相邻居元胞中, 但对于固液界面多余溶质排放只考虑了有液相邻居元胞的情况, 而没有考虑到邻居元胞均为固相

这一情况.

在前人提出的用于元胞自动机 (CA) 方法中计算溶质分配模型的基础上, 提出了一种新的更为详细合理的溶质再分配模型.

## 2 形核与生长

本文的形核模型采用的是 Rappaz 和 Gandin<sup>[9]</sup>提出的基于高斯分布的连续型形核模型.

枝晶的生长主要与界面前沿的结构、温度条件和溶质分布情况及合金本身的性质有关, 目前计算枝晶生长的模型主要有两种. 一种是 Kurz-Giovanola-Trivedi (KGT) 模型<sup>[10,11]</sup>, 相对于其他模型, 该模型的网格尺寸可以在较大范围内变化, 计算速度较快, 可用于计算介观范围的枝晶形貌和分布. 另外一种是利用溶质扩散计算生长模型<sup>[8,12]</sup>, 这种模型要求较小的网格尺寸, 所以一般用来计算单个晶粒或几个晶粒的形貌. 本文采用了这两种计算枝晶生长的模型.

\* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2011CB610402) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: sdzllr@163.com

### 3 新的溶质再分配模型及溶质场计算

#### 3.1 新的溶质再分配模型

在计算溶质分布时,一般地,由于溶质在液相中的扩散系数比在固相中高出3个数量级,所以在建立溶质再分配计算模型时,会忽略溶质在固相中的扩散;同时不考虑溶体的流动.本文所建立的溶质再分配模型也是基于这个假设.

假设固液界面元胞A在上一时刻的固相成分为 $C_s^0$ ,固相分数为 $f_s^0$ ,液相成分为 $C_L^0$ ,液相分数为 $1-f_s^0$ .当界面元胞A在下一时刻发生 $\Delta f_s$ 的固相转变时,溶质再分配的计算可以分为以下情况.

1) 当元胞A的邻居元胞有液相元胞而且 $\Delta f_s \geq 1-f_s^0$ 时,将 $\Delta f_s$ 修正为 $\Delta f_s = 1-f_s^0$ ,此时元胞A中已无剩余液相,即该元胞中的 $f_L = 0$ ,相应地,可以认为在该元胞中,溶质在液相中的含量 $C_L = 0$ ,固相转变排出溶质的量为

$$\Delta C = C_L^0(1-k)\Delta f_s, \quad (1)$$

此时元胞A的固相成分为

$$C_s = C_s^0 f_s^0 + k C_L^0 \Delta f_s, \quad (2)$$

液相成分为 $C_L = 0$ .

2) 当元胞A的邻居元胞有液相元胞而且 $\Delta f_s < 1-f_s^0$ (即元胞A足以完成 $\Delta f_s$ 的固相转变)时,首先假设多余溶质完全排到元胞A中的液相中,则得到:

$$\begin{aligned} & C_L^0(1-f_s^0) + C_s^0 f_s^0 \\ & = C_L(1-f_s^0 - \Delta f_s) + C_s^0 f_s^0 + C_s \Delta f_s, \end{aligned} \quad (3)$$

把 $C_s = k C_L$ 代入(3)式可得到下一时刻元胞A液相中溶质含量 $C_L$ :

$$C_L = \frac{C_L^0(1-f_s^0)}{1-f_s^0 - \Delta f_s + k \Delta f_s}. \quad (4)$$

若 $C_L$ 高于界面液相平衡成分 $C_L^*$ ,则意味着剩余液相不足以吸收排出的溶质,部分溶质会被排到液相邻居元胞中,将 $C_L$ 修正为: $C_L = C_L^*$ .排到液相邻居元胞中的溶质量 $\Delta C$ 为

$$\Delta C = C_L^0(1-f_s^0) - C_L(1-f_s^0 - \Delta f_s + k \Delta f_s), \quad (5)$$

此时该元胞的固相溶质含量 $C_s$ 为

$$C_s = \frac{C_s^0 f_s^0 + k C_L \Delta f_s}{f_s^0 + \Delta f_s}. \quad (6)$$

3) 元胞A的邻居元胞无液相元胞并且 $\Delta f_s \geq 1-f_s^0$ 时,同1)一样将 $\Delta f_s$ 修正为 $\Delta f_s = 1-f_s^0$ ,此时溶质排出量为 $\Delta C = 0$ ,元胞A中的液相分数 $f_L = 0$ ,则可以认为该元胞中的液相溶质含量 $C_L = 0$ ,固相溶质含量 $C_s$ 为

$$C_s = C_L^0(1-f_s^0) + C_s^0 f_s^0. \quad (7)$$

4) 元胞A的邻居元胞中无液相元胞并且 $\Delta f_s < 1-f_s^0$ 时,溶质排出量为 $\Delta C = 0$ ,液相和固相成分分别为

$$C_L = \frac{C_L^0(1-f_s^0)}{1-f_s^0 - \Delta f_s + k \Delta f_s}, \quad (8)$$

$$C_s = \frac{C_s^0 f_s^0 + k C_L \Delta f_s}{f_s^0 + \Delta f_s}. \quad (9)$$

如果元胞A的邻居元胞中有液相元胞,排出溶质 $\Delta C$ 根据加权值 $w_i$ 分别排到液相邻居元胞中,即液相邻居元胞 $i$ 的溶质成分为 $C_i = C_i^0 + w_i \Delta C$ ,其中, $C_i^0$ 为液相邻居元胞 $i$ 的原始成分, $C_i$ 为排出溶质后元胞 $i$ 的溶质成分, $\Delta C$ 为元胞A排出溶质的量, $w_i$ 值的计算根据 $w_i = \frac{C_i^0 - C_L}{\sum(C_i^0 - C_L)}$ , $C_i^0 - C_L$ 为液相邻居元胞与元胞A的液相溶质成分之差, $\sum(C_i^0 - C_L)$ 为所有液相邻居元胞溶质成分与元胞A液相成分差值之和.

#### 3.2 溶质场计算

由于界面元胞的生长,其浓度按照液固界面溶质的局部平衡发生变化,向周围液态邻居元胞排出溶质,使得溶质在整个计算区域上分布不均匀,需要进行溶质扩散计算.基于上面的假设,溶质的扩散计算只在液相元胞之间进行,扩散符合二维溶质扩散方程:

$$\frac{\partial C_L}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_L \frac{\partial C_L}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D_L \frac{\partial C_L}{\partial y} \right). \quad (10)$$

### 4 对新的溶质再分配模型的计算验证

#### 4.1 验证用算例及计算参数设置

浇铸一个 $\Phi 50 \text{ mm} \times 100 \text{ mm}$ 的铸锭,铸型材料为湿型硅砂,铸件材料为Al-4.7 wt.%Cu合金.

浇注后在纵截面上做金相分析,发现整个断面均为等轴晶,本文沿纵向截取一半即  $50\text{ mm} \times 50\text{ mm}$  的矩形区域作为二维微观组织模拟的区域,如图 1 所示.

图 2(a) 为实验测得的  $50\text{ mm} \times 50\text{ mm}$  的矩形区域内的晶粒组织,全部为等轴晶. 图 2(b) 为单个晶粒的成分分布的线扫描情况.

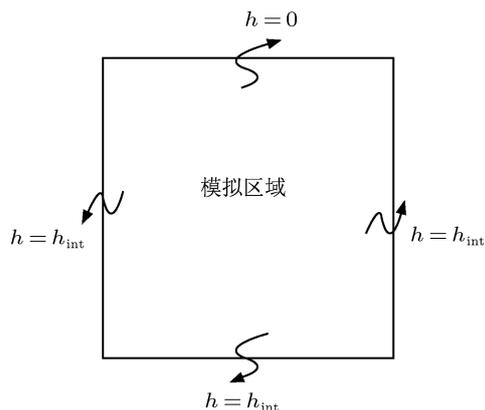


图 1 微观组织计算模型

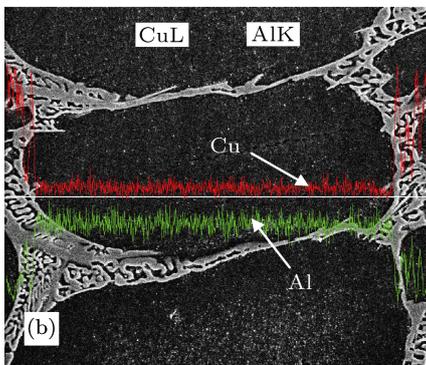
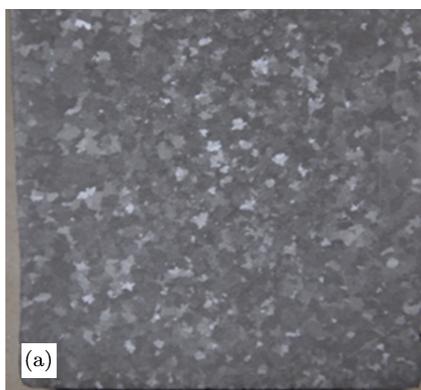


图 2 对 Al-4.7 wt.%Cu 合金铸锭界面的组织分析及成分检测 (a) 等轴晶形貌; (b) 线扫描分析单个晶粒的溶质分布

进行微观组织模拟时,所采用的组织模拟参数见表 1,所采用的有关 Al-4.7 wt.%Cu 合金的相关物

性参数见表 2,其中的初始条件和边界条件与实际浇注的铸锭条件相一致.

表 1 模拟微观组织参数

参数名称	符号	单位	数量
金属-铸型界面换热系数	$h_{\text{int}}$	$\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$	500
铸件初始温度	$T_0$	K	950
环境温度	$T_f$	K	298
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	$\Delta T_{\sigma,V}$	K	2
熔体内部的形核基底密度	$n_{\text{max},V}$	$\text{m}^{-3}$	$3.6 \times 10^8$
铸件表面的形核过冷均值	$\Delta T_{N,s}$	K	0.5
铸件表面的形核过冷方差	$\Delta T_{\sigma,s}$	K	2
铸件表面的形核基底密度	$n_{\text{max},s}$	$\text{m}^{-2}$	$1.8 \times 10^6$

表 2 铝铜合金的物性参数

参数名称	符号	单位	数量
原始成分	$C_0$	mass%	4.7
平衡分配系数	$k$	—	0.145
液相比热	$c_{p,L}$	$\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	1080
固相比热	$c_{p,s}$	$\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	900
液相导热系数	$\lambda_L$	$\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	77
固相导热系数	$\lambda_s$	$\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	153
液相密度	$\rho_L$	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	2606
固相密度	$\rho_s$	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	2743
潜热	$L$	$\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}$	397000
液相扩散系数	$D_L$	$\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$	$3 \times 10^{-9}$
液相线斜率	$m_L$	$\text{m}\cdot\text{K}/\%$	-3.44
液相线温度	$T_L$	K	917
固相线温度	$T_s$	K	821
共晶温度	$T_E$	K	821.4
共晶成分	$C_E$	mass%	32.6

## 4.2 新溶质分配模型在扩散控制的 CA 生长模型中的计算表现

对上述  $50\text{ mm} \times 50\text{ mm}$  的矩形区域按照表 1 和表 2 所列举的参数分别用以往的溶质扩散模型<sup>[4-8]</sup>和本文提出的新的溶质计算模型进行微观组织模拟,然后截取区域内的一小块  $5\text{ mm} \times 5\text{ mm}$  区域观察计算结果.

利用前人建立的溶质模型进行计算,在计算进

行到凝固完全结束后,在晶界处仍有液相存在如图3所示.用本文建立的溶质分配模型计算得到的结果如图4(a)所示,整个计算区域内不存在未凝固的网格,说明本文建立的模型更符合实际.图4(b)显示的是溶质的分布情况,与图4(a)对照,观察晶粒内部的溶质变化,可见在生长比较快的晶粒主干上,溶质的含量较低,随着晶粒的长大,溶质不断被排到周围的元胞网格,溶质的分布逐渐增加,在最后凝固的地方即晶界上的溶质含量最高.

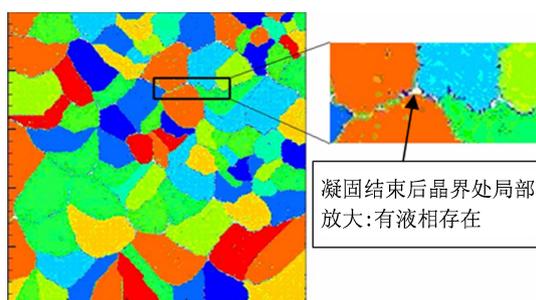


图3 利用以往模型计算得到的结果

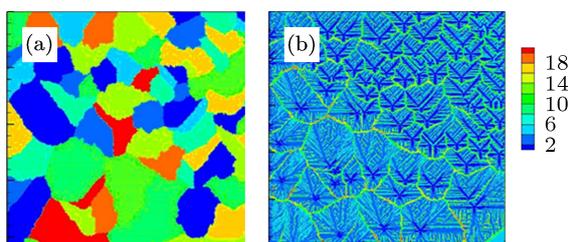


图4 改进模型的计算结果 (a) 晶粒形貌; (b) 溶质分布

### 4.3 新溶质分配模型在 KGT 方法控制的 CA 生长模型中的计算表现

当 CA 组织模拟中的晶体生长模型为 KGT 模型时,把新的溶质分配模型引入 CA 模型中计算溶质的动态推进过程及最终的溶质分布状态.

图5为对3.1节的铸锭计算模型的模拟结果.每幅图的左图为晶粒的推进和分布情况,右图为对应于左图的溶质浓度分布.

由图5(a1)—(a3)可以看到,等轴晶由铸锭表面逐步向中心推进,最后在整个界面上全部为等轴晶.该结果与实验以及凝固理论较为符合.模拟出的晶粒大小(图5(a3))与实验测出的晶粒大小(图2(a))基本符合,其中实测截面晶粒数为1070个,模拟出截面晶粒数为1100个.

由图5(b1)—(b3)可以看到溶质分布的变化情况.由图5(b1),图5(b2)可以看出,溶质在固液界面前沿的含量较其他位置高,这是因为 Al-4.7 wt%Cu 的固液界面分配系数  $k$  小于 1.如图5(b3),凝固结束时在晶界处有明显的溶质富集,这与图2(b)符合,说明新模型是合理的.

从图5(b3)的众多晶粒中随机取一个晶粒提取其溶质浓度,并与图2(a)中的一个位置相近的随机提取的晶粒的溶质含量做对比,结果见图6(b),可见,模拟得到的溶质分布曲线与实验曲线趋势相同,溶质量的分布也基本符合,只是在5点处即晶界处差别较大,这是因为模拟的过程中假设整个凝固过程为平衡凝固,同时不考虑共晶反应;而实验过程为非平衡凝固,并且在晶界处会出现金属间化合物  $Al_2Cu$  (本研究没有计算金属间化合物的组织生长),这可能导致了5点处的偏差.

## 5 结论

1) 提出了一个更为合理的溶质再分配计算模型,将该模型引入到晶体生长的溶质扩散模型中,对枝晶生长进行计算,可以消除以往模型的计算结果中晶界处元胞不凝固的缺陷.

2) 将新模型引入到 CA 组织模拟的 KGT 模型中,以 Al-4.7 wt%Cu 二元合金为算例模拟了晶粒组织生长过程,并与实验结果进行了对比.对比结果表明,实验与模拟结果较为符合.模拟结果显示出,在晶粒生长过程中溶质被不断排出到固液界面处,凝固结束后溶质富集在晶界处,在晶粒内部的溶质含量较低.

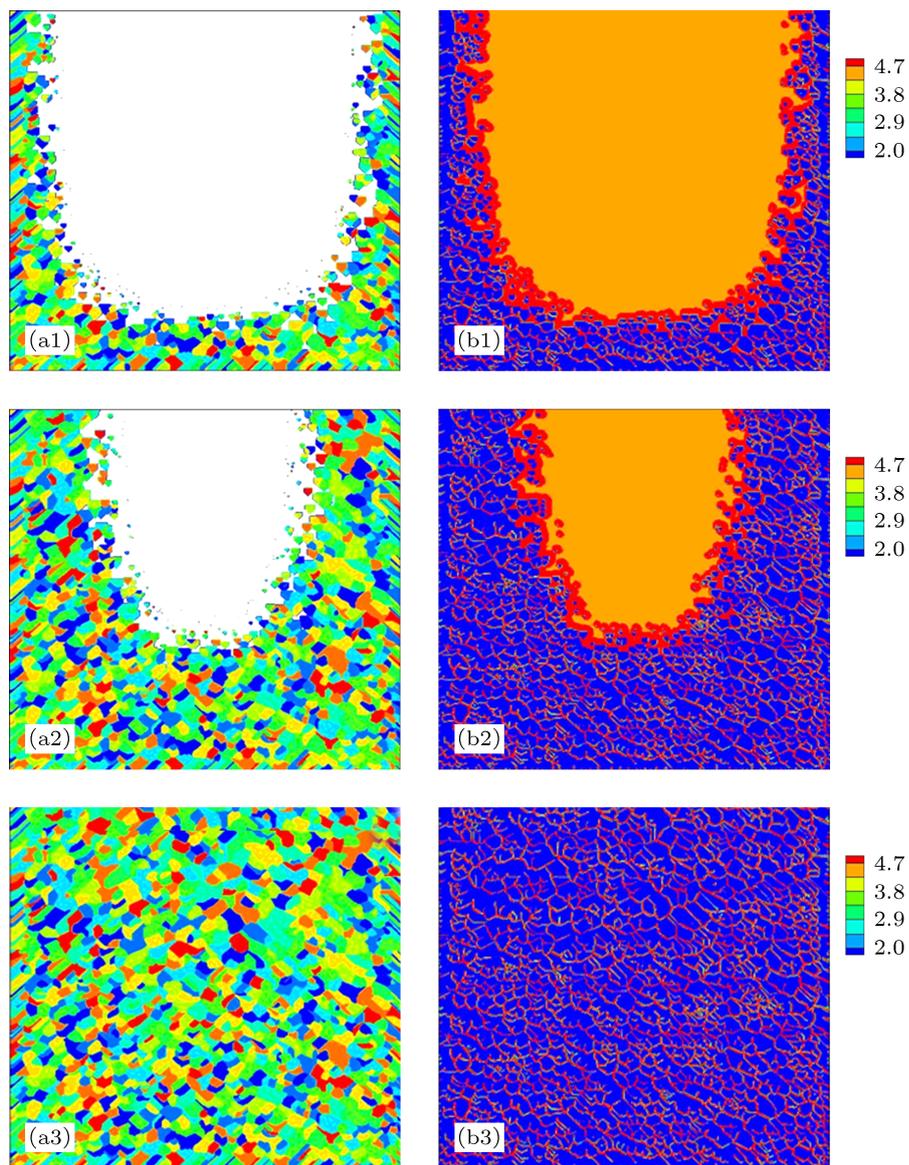


图5 新溶质分配模型在 KGT 方法控制的 CA 生长模型中的计算表现 凝固到 16.2 s 时 (a1) 枝晶形貌和 (b1) 溶质分布; 凝固到 26.2 s 时 (a2) 枝晶形貌和 (b2) 溶质分布; 凝固结束时的 (a3) 枝晶形貌和 (b3) 溶质分布

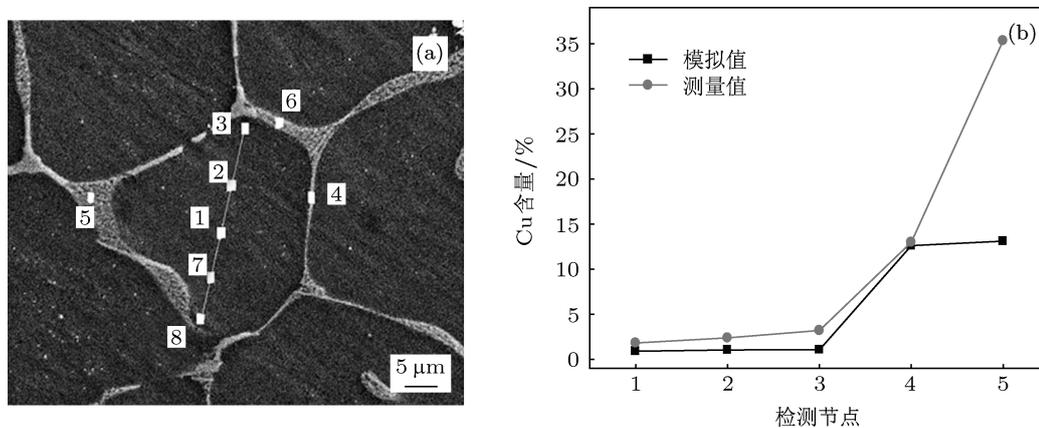


图6 实验结果与模拟结果的溶质量的分布对比 (b) 检测点选取; (b) Cu 含量对比

- [1] Lan Y J, Xiao N M, Li D Z 2005 *Acta Mater.* **53** 991
- [2] Chen F Y, Jie W Q 2004 *Acta Metall. Sin.* **40** 664 (in Chinese) [陈福义, 介万奇 2004 金属学报 **40** 664]
- [3] Li Q, Ma Y C, Liu K, Kang X H, Li D Z 2007 *Acta Metall. Sin.* **43** 217 (in Chinese) [李强, 马颖澈, 刘奎, 康秀红, 李殿中 2007 金属学报 **43** 217]
- [4] Beltran-Sanchez L, Stefanescu D M 2003 *Metall. Mater. Trans. A* **34** 367
- [5] Beltran-Sanchez L, Stefanescu D M 2004 *Metall. Mater. Trans. A* **35** 2471
- [6] Goldak A A 1997 *Can. Metall. Quart.* **36** 57
- [7] Gandin C A, Desbiolles J L, Rappaz M, Thevoz P 1999 *Metall. Mater. Trans. A* **30** 3153
- [8] Chen J 2005 *Ph. D. Dissertation* (Nanjing: Southeast University) (in Chinese) [陈晋 2005 博士学位论文 (南京: 东南大学)]
- [9] Rappaz M, Gandin C A 1993 *Acta Metall. Mater.* **41** 345
- [10] Kurz W, Giovanola B, Trivedi R 1986 *Acta Metall.* **34** 823
- [11] Gandin C A, Rappaz M 1994 *Acta Metall. Mater.* **42** 2233
- [12] Pan S Y, Zhu M F 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 278 (in Chinese) [潘诗琰, 朱鸣芳 2009 物理学报 **58** 278]
- [13] Wu M, Ludwig A, Fjeld A 2010 *Comput. Mater. Sci.* **50** 43

# A novel solute redistribution model for cellular automaton and its validation\*

Li Ri<sup>†</sup> Shen Huan-Di Feng Chang-Hai Pan Hong Feng Chuan-Ning

(Hebei University of Technology, Key Laboratory of Materials Processing and Control Engineering, Tianjin 300130, China)

(Received 24 May 2013; revised manuscript received 14 June 2013)

## Abstract

Based on the several solute redistribution models, a more reasonable solute redistribution model is presented. The cellular states on the solid/liquid interface and the states of its neighboring cells possibly occurring during the grain growth are fully considered in the model, and different formulas are built for different cases. Firstly, the simulation result shows that the disadvantage of the original cellular automaton (CA) model (its grain growth is controlled by solute distribution), in which the cells on the grain boundary are kept unsolidified all the time, is eliminated. Then, in order to verify the reliability of the new model, the new model is introduced into the CA model in which grain growth is controlled by Kurz-Giovanola-Trivedi model. The microstructure of the Al-4.7 wt%Cu ingot is calculated. The simulation results are in good accordance with experimental results in two aspects of microstructure morphology and concentration distribution.

**Keywords:** cellular automaton method, microstructure simulation, solute redistribution

**PACS:** 81.30.-t

**DOI:** 10.7498/aps.62.188106

\* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2011CB610402).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: sdzllr@163.com