

金属凝固显微组织的计算机模拟

朱鸣芳¹, 于金¹, 洪俊杓²

(1. 东南大学, 南京 210096; 2. 延世大学, 韩国汉城 120749)

[摘要] 应用计算机数值模拟技术研究金属凝固显微组织的形成规律是材料科学发展的重要前沿领域之一。文章对该领域的最新研究进展作了简要评述; 重点介绍了作者发展的一个改进的 MCA (modified cellular automaton) 模型的特点以及应用该模型在合金凝固组织数值模拟方面的一些主要工作。

[关键词] 凝固; 显微组织; 计算机模拟; cellular automaton 模型

[中图分类号] TG11; O242; TP18 **[文献标识码]** A **[文章编号]** 1009-1742(2004)05-0008-09

1 引言

显微组织是材料科学和工程的核心, 是材料工艺过程和性能之间最重要的连接点。对绝大多数金属材料而言, 凝固是最重要的工艺过程之一。因此, 对金属凝固显微组织的有效控制是获得高质量金属制品的一个重要前提^[1]。而对凝固过程中显微组织的演变的预测是有效控制合金凝固组织的一个关键。近年来, 利用计算机数值模拟先进技术研究金属凝固过程是材料科学发展的重要前沿领域之一。它已成为揭示凝固过程规律, 对各种凝固过程中显微组织演变进行预测的一个强大和重要的工具。随着计算机技术及数值计算方法的不断发展, 对凝固过程中的传热、传质、对流的计算机模拟分析已经达到了一个相当高的水平。在此基础上, 研究者们发展了各种各样的用以模拟预测凝固显微组织的确定性和随机性模型。

笔者首先对各种凝固组织数值模拟的模型进行简要的评述, 然后介绍笔者发展的一种改进的 MCA (cellular automaton) 模型以及采用该模型对各种凝固组织进行模拟预测的应用实例。

2 凝固组织模拟的确定性和随机性模型

基于求解一组连续性方程的确定性模型, 是最早发展起来用以描述等轴晶在凝固过程中形核和生长的数值模拟技术。确定性模型与宏观的温度场计算相耦合, 可以成功地预测晶粒大小、二次枝晶臂间距以及偏析等显微组织的特征^[2~4]。然而, 确定性模型一般只能给出凝固前沿与凝固时间的大致关系, 而不能模拟出可视性的显微组织。

随机性模型与确定性模型相比较, 具有能够将显微组织形象地模拟出来的优点。其中一种随机性模型是基于 Monte Carlo (MC) 方法。MC 方法引入了概率论的思想, 对形核位置的分布与晶粒生长的择优取向进行随机处理, 考虑了扩散、固液界面原子的沉积和逸出, 并采用最小自由能变化的算法。研究者们应用 MC 模型模拟预测了再结晶的显微组织^[5]、柱状晶向等轴晶和柱状晶-等轴晶转变 (CET) 等凝固晶粒组织^[6,7], 以及规测共晶组织^[8]。最近 Das 等人将 MC 模型耦合了流场的作用, 模拟了强制对流条件下枝晶和玫瑰花状等凝固显微组织的形成^[9]。然而, MC 方法存在一些固有

[收稿日期] 2003-12-18; 修回日期 2004-02-23

[基金项目] 国家自然科学基金资助项目 (50371015); 教育部留学回国人员科研启动基金资助项目

[作者简介] 朱鸣芳 (1957-), 女, 浙江省义乌市人, 东南大学教授

缺陷，如 MC 模型并未明确地考虑晶体在固/液界面的生长动力学，MC 计算的时间步长与实际凝固时间无关，因此 MC 法不能定量地描述凝固组织的演变。此外，用 MC 方法模拟的共晶和枝晶组织的图形效果也不是很理想。

Rappaz 和 Gandin 等人首先将另一种随机模型——CA (cellular automaton) 法应用于凝固晶粒组织的模拟^[10~12]。该方法综合考虑了非均质形核、晶体生长动力学和生长择优取向等凝固过程中的物理现象，它还包含了晶粒间的竞争生长机制。因此 CA 技术可以对凝固晶粒组织随时间的变化进行定量预测，模拟柱状晶、等轴晶的形成以及柱状晶向等轴晶的转变。随后，一系列的文献报道了采用 CA 模型对各种凝固过程中晶粒组织的形貌进行模拟预测^[13~21]。比较有代表性的有 Rappaz 及其合作者将二维和三维的 CA 模型耦合有限元法的宏观温度场计算，对透明模型合金在定向凝固过程中柱状晶的竞争生长和气轮机叶片单晶选择生长进行了模拟^[11,15]，耦合晶核随热对流的运动，模拟出了和实验结果很相似的常规铸锭中沉淀在下部的细晶区和上部的柱状晶区^[16]。Rappaz 课题组最近的一项工作是在晶体生长的动力学中考虑了流场的作用，用该模型对速凝带的偏转柱状晶形貌进行了模拟预测^[17]。另外，Hong 等人应用二维和三维 CA 模型耦合有限体积法的宏观温度场计算，模拟了定向凝固、挤压铸造、薄带快速凝固、气雾化快速凝固等过程的显微组织以及在流场作用下的柱状晶的偏斜生长形貌^[18~21]。

但是，由于传统的 CA 模型只考虑了温度场，而未考虑溶度场和界面曲率对凝固组织的影响，因此它只能预测晶粒组织的形貌，而不能描述晶粒内枝晶组织的形貌以及微观成分偏析和共晶或包晶组织的形成。为了克服这一局限性，近年来，研究者在传统 CA 的基础上，发展了改进的 MCA 模型。MCA 模型可成功地描述枝晶的生长过程，包括一次枝晶臂的生长和粗化，二次和三次枝晶臂的分枝以及溶质再分配。MCA 模型已被应用于模拟合金凝固过程中单枝晶和多枝晶的生长形貌^[22~26]，半固态工艺过程中非枝晶或颗粒组织的形成^[27]，规则和非规则共晶以及包晶合金的显微组织^[28~31]。

另一方面，phase field (PF) 模型也已成为凝固显微组织模拟的一个重要工具。它能成功地进行枝晶、共晶和包晶组织的模拟^[32~35]。尤其是 PF

模型能对枝晶尖端的生长速度和形状进行定量的模拟预测，其模拟预测的结果与理论计算值非常吻合。最近，Tong 和 Beckermann 等人将 PF 模型耦合流场的计算，模拟了纯物质在流场作用下枝晶的不对称生长形貌^[36~38]。但由于 PF 模型必须采用非常小的网格尺寸，以保证计算的稳定性以及所需的大内存容量和计算效率低，目前 PF 模型局限于很小的计算区域。有关专家认为 PF 模拟方法很难应用于工业实践^[39]。

3 MCA 模型

3.1 模型的描述

CA 技术关于凝固过程组织演变的模拟包括网格的几何形状；网格的状态；邻位的配置；网格状态转变的规则。MCA 模型保留了传统 CA 模型中有关非均质形核和晶核的择优生长方向的随机性概念，但与传统 CA 不同的是，MCA 模型不仅考虑了液/固界面的热力学过冷，还考虑了凝固过程中界面曲率的变化，溶质再分配以及溶质在固、液两相中的扩散。在 MCA 模型中一般将二维和三维的计算区域剖分成均匀的正方形和正方体的网格，每个网格均被赋值于温度、浓度、晶体取向、固相分数等变量，并标明其状态（固态、液态或界面）。当进行共晶和包晶模拟时，固态网格还要识别出 α 相或 β 相。邻位的配置包含了最近的 8 个邻位（二维）和 26 个邻位（三维）。在离散的时间步长中，MCA 网格的状态根据一定的形核和生长规则而变化。下面分别介绍计算形核、长大、温度场、浓度场和流场的控制方程和算法。

3.2 形核和生长

在 MCA 中采用连续形核模型来描述非均质形核。在连续形核模型中，晶核的密度随过冷度增加服从于下述的高斯分布^[40]：

$$\frac{dn}{d(\Delta T)} = \frac{n_{\max}}{\sqrt{2\pi}\Delta T_0} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta T - \Delta T_{mn}}{\Delta T_0}\right)^2\right] \quad (1)$$

式中 ΔT_{mn} 为平均形核过冷度， ΔT_0 为标准差， n_{\max} 为最大晶核密度，这些形核参数取决于合金成分和凝固工艺参数。

一个网格一旦形核后，它将沿着随机给定的择优方向生长，其生长速度取决于液/固界面的过冷度。在 MCA 模型中，液/固界面的过冷度包括温度、浓度和曲率三部分作用，因此在一定时间 t 时

的过冷度 $\Delta T(t)$ 可根据下式计算:

$$\Delta T(t_n) = T_0 - T(t_n) + m[C(t_n) - C_0] - \Gamma \bar{K}(t_n) \quad (2)$$

式中 T_0 和 C_0 为合金的液相线温度和初始成分。进行共晶或包晶模拟时, T_0 为共晶或包晶温度, C_0 为共晶或包晶成分。 m 为相图的液相线斜率, Γ 为 Gibbs-Thomson 系数。 $\bar{K}(t_n), C(t_n), T(t_n)$ 分别为在时间 t 时, 固/液界面的平均曲率、浓度和温度。当采用式 (2) 求得界面过冷度后, 枝晶尖端的生长速度 $v[\Delta T(t_n)]$ 可根据 KGT (Kurz-Giovanola-Trivedi) 模型^[41] 或 LKT (Lipton-Kurz-Trivedi) 模型^[42] 进行计算。然后根据下式计算界面网格的生长长度:

$$l(t_n) = (\cos \theta + |\sin \theta|)^{-1} \left(\sum_{n=1}^N \{v[\Delta T(t_n)] \times \Delta t_n\} \right) \quad (3)$$

式中 Δt_n 为时间步长, θ 为一个固相网格的择优生长方向与该固相网格和它的液相邻位网格的连接线之间的夹角, N 为迭代次数。因此, 在某一时刻时, 一个网格的固相分数 $f_s(t_n)$ 为:

$$f_s(t_n) = \frac{l(t_n)}{L} \quad (4)$$

式中 L 为 CA 网格间距。当 $f_s(t_n) \geq 1$ 时, 就意味着固相网格的生长前沿已达到了其邻位液相网格的中心, 该邻位网格的状态就从液态转变为固态, 并获得与原来的固相网格相同的择优生长方向。有关二维和三维枝晶的生长算法的详细介绍见文献 [24, 25]。当进行非规则共晶组织的模拟时, 针对非规则共晶中非小平面的 α 相和小平面的 β 相要采用不同的生长算法, 详见文献 [29, 30]。

3.3 界面曲率

界面上某一具有固相分数为 $f_s(i)$ 的网格 i 的曲率根据下式计算^[23]:

$$\bar{K}(i) = \frac{1}{\Delta x} \left[1 - 2 \frac{f_s(i) + \sum_{j=1}^n f_s(j)}{n+1} \right] \quad (5)$$

式中 Δx 为网格尺寸, n 为所包括的邻位数。

3.4 溶质再分配

假定在凝固过程中固/液界面的固、液相成分保持平衡:

$$C_s^* = k C_l^* \quad (6)$$

式中 K 为溶质分配系数, C_s^* 和 C_l^* 分别为固、液相在界面上的平衡浓度。

当一个网格通过形核或生长从液态转变为固态时, 它的成分将根据式 (6) 发生变化, 因此它将释放出 $\Delta C = (1-k)C_l^*$ 溶质的量。假定这部分释放出的溶质分散给了它的液相邻位, 随后对整个区域内的溶质扩散进行计算。溶质再分配的控制方程为

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \cdot \nabla^2 C + C(1-k) \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (7)$$

式中 t 为时间, D 为溶质扩散系数, f_s 为固相分数, K 为溶质分配系数。采用显式有限差分法对溶质的扩散进行数值计算。对位于计算区域边界的网格可采用零扩散的边界条件进行处理。

3.5 温度场的计算

用于热传导数值计算的控制方程为

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \cdot \nabla^2 T + \rho \Delta H \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (8)$$

式中 T 为温度, ρ 为密度, C_p 为热容, λ 为导热率, ΔH 为凝固潜热。式 (8) 也同样采用显式有限差分法进行数值计算。

由于金属的热扩散速率比溶质扩散速率大 3~4 个数量级, 为了节省内存和提高计算效率, 可将计算区域剖分成控制体积进行宏观温度场计算, 每个控制体积又进一步剖分成更细的 MCA 网格进行微观组织计算, 并可采用两种不同的时间步长。关于宏观温度场和 MCA 微观组织计算之间的耦合方法见文献 [24]。

3.6 MCA 耦合流场的计算

当考虑金属液的流动时, 质量传输将由对流和扩散所控制。求解流场的控制方程为:

$$\text{连续性方程} \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (9)$$

动量方程

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla P + \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}) \quad (10)$$

式中 \mathbf{u} 为速度矢量, ρ 为密度, P 为压力。

在流场作用下, 质量传输的控制方程为:

$$\rho \frac{\partial C}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla C = \rho D \cdot \nabla^2 C + \rho C(1-k) \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (11)$$

动量方程和连续性方程采用基于交错网格的 SIMPLE 算法进行求解。根据所计算的速度场, 包含了对流和扩散的质量传输方程采用隐式格式的有限差分法进行求解, 并采用混合格式计算其中的对流项和扩散项。根据所计算的浓度场, 液/固界面网格的过冷和生长就可由式 (2) 至式 (4) 求得。

4 MCA 模型的应用实例

4.1 二维枝晶和非枝晶组织的模拟

图 1 为模拟的 $w(\text{Cu})$ 为 3% 的铝合金具有不同择优生长方向的单个枝晶形貌 (0° , 30° , 45°)。图 1 的模拟条件为：将二维的计算区域划分成 200×200 个均匀正方形网格，网格尺寸为 $0.4 \mu\text{m}$ 。假定整个区域范围内温度均匀恒定，并取热过冷度为 12°C 。从图 1 可以看出，本模型可以成功地模拟出不同择优取向的枝晶形貌以及溶质分布情况。

众所周知，合金凝固过程中初生相的演变和冷却速度紧密相关。笔者应用二维的 MCA 模型对 $w(\text{Si})$ 为 7% 的铝合金在接近液相线温度 (893°C) 浇注后，以不同凝固速度冷却的显微组织进行了模拟，并将模拟结果和试验结果进行了比较，结果见图 2。图 2 的模拟条件为：假定整个区域内温度均匀分布，并以 $0.3^\circ\text{C}/\text{s}$, $3^\circ\text{C}/\text{s}$, $10^\circ\text{C}/\text{s}$, $30^\circ\text{C}/\text{s}$ 的冷却速度冷却。从图 2 中可以明显看出，随冷却速度增加，初生相形貌逐步从颗粒状转变为玫瑰花状，最后为树枝晶状，并且冷却速度越快，枝晶越细。

4.2 三维枝晶组织的模拟

图 3 为采用三维 MCA 模型模拟的 Al-15wt% Cu 合金在热过冷度为 10°C 的过冷熔体中三维单个枝晶的生长形貌：二维 X-Y 剖面枝晶显示，三维枝晶显示。图 3 的计算区域由 $160 \times 160 \times 160$ 个均匀正方体网格所组成，网格尺寸为 $1 \mu\text{m}$ ，热过冷度为 10°C 。枝晶的择优生长方向为三个欧拉角均取为零。

三维 MCA 模型也可和宏观温度场数值计算相结合，模拟非均匀温度场条件下多枝晶的显微组织。图 4 为模拟和试验的 Al-10wt% Cu 合金雾化速凝颗粒的枝晶形貌，图 4 为不同直径颗粒的二维剖面显微组织，最右边的为雾化颗粒的三维外观形貌，图 4 中不同的颜色表示不同择优生长取向的晶粒。该模拟的计算区域由 491 864 个均匀立方体网格所组成，网格尺寸为 $1 \mu\text{m}$ 。其他计算条件为：空气温度 25°C 、金属液滴的过热度 30°C 和金属液滴/空气之间的界面传热系数为 $5000 \text{ W}/\text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C}$ 。由图 4 可以看出，三维 MCA 模型也如同二维 MCA 模型，不仅能模拟出凝固晶粒组织，还能很好地模拟出晶粒内的枝晶形貌。

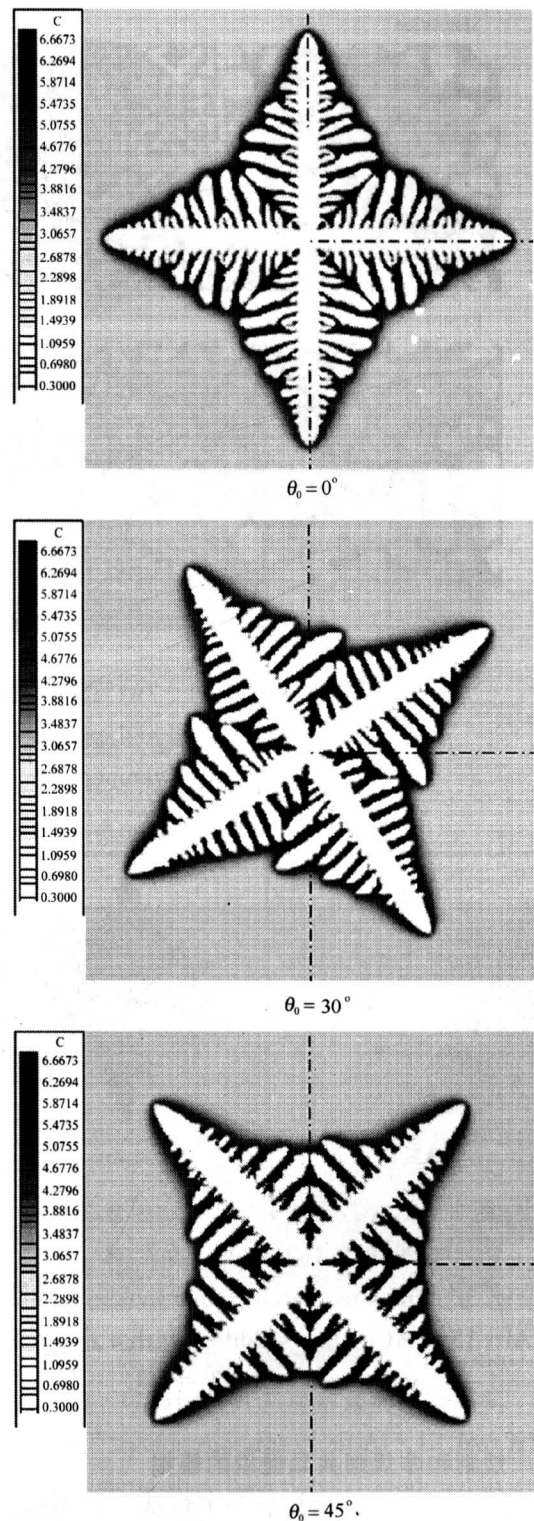


图 1 模拟的 Al-3wt% Cu 合金在热过冷度为 12°C 时不同择优取向的枝晶形貌和溶质分布
Fig.1 Simulated dendrite morphologies and solute profiles of an Al-3wt% Cu with a thermal undercooling of $\Delta T = 12^\circ\text{C}$ and various preferred growth orientations θ_0

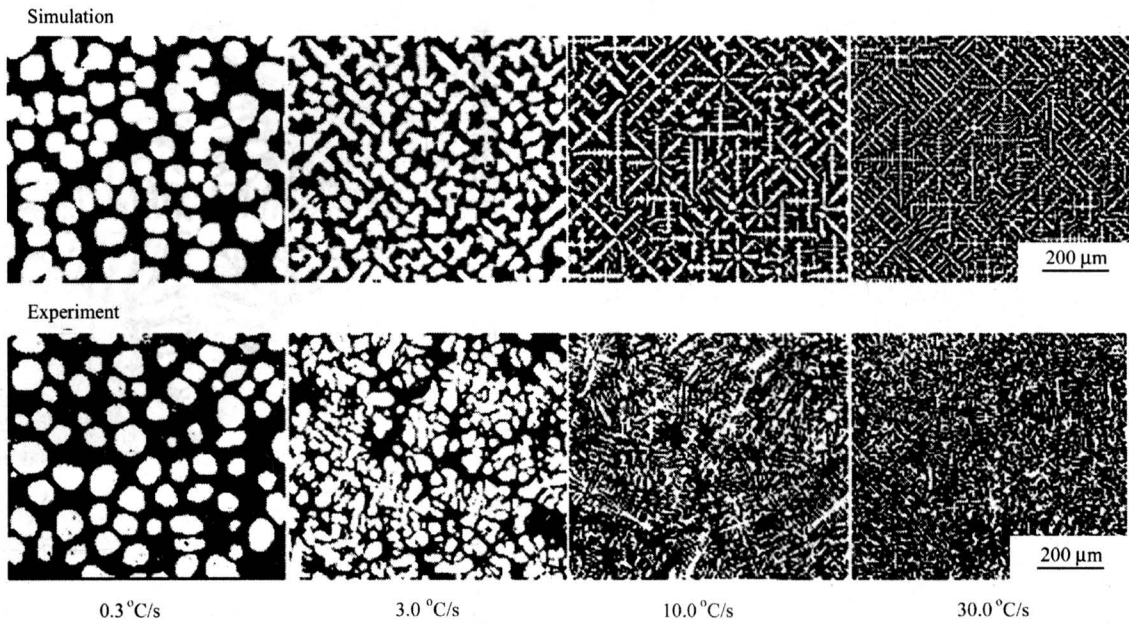


图 2 模拟和试验的 Al-7wt%Si 合金的显微组织 (浇注温度为 620℃, 不同冷却速度)

Fig.2 Simulated and experimental microstructures of an Al-7wt%Si alloy
(pouring temperature of 620℃ for different cooling rates)

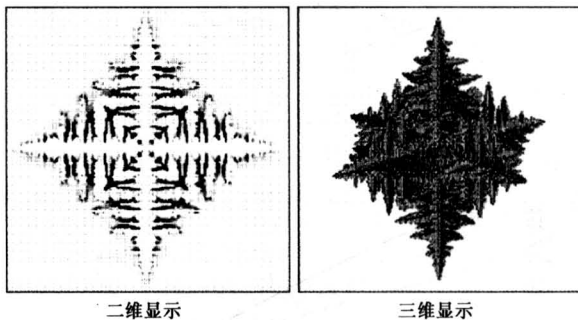


图 3 模拟的 Al-15wt%Cu 合金在热
冷度为 10℃ 时的枝晶形貌

Fig.3 Simulated dendrite morphology of an
Al-15wt%Cu alloy solidified with a thermal
undercooling of $\Delta T = 10^\circ\text{C}$

4.3 规则和非规则共晶组织的模拟

笔者将 MCA 模型扩展到了包括一个液相、两个固相的多相系统, 对规则共晶和非规则共晶进行了模拟。图 5 为模拟的 $\text{CBr}_4 - \text{C}_2\text{Cl}_6$ 透明合金的规则片状共晶组织和生长速度之间的关系。从图 5 中可以看出, 共晶的片间距和液/固界面形状由生长速度所控制。当共晶以较慢的速度 $v = 10 \mu\text{m}/\text{s}$ 生长时, 共晶以较宽的片间距稳态生长。随着生长速

度的提高, 层片状前沿的溶质过饱和度增加, 造成 α 相前沿凹坑的形成。如果生长速度进一步提高, 较宽的 α 片将发生分叉以调节片间距使之与生长速度相匹配而重新恢复稳态生长。此外, 模型还可以描述其他一些规则共晶生长的典型特征, 如共晶的摆动生长, 以及随生长速度的下降, 共晶片状的合并生长等^[28]。

多相系统的 MCA 模型也能够模拟非规则共晶的组织形貌。图 6 为模拟的和试验的, Al-12.6wt%Si 的定向凝固 Al-Si 共晶合金的显微组织。定向凝固的共晶生长始于底部, 然后被水淬所终止以保持共晶/液相界面的形貌, 图 6 上部的细枝晶是由于快速水淬而形成的。从图 6 中可以看出, 小平面的共晶 Si 片 (黑色相) 和非小平面的 α 相 (白色相) 基体同时生长。并且, 共晶 Si 的片间距和择优取向存在着一个较大的范围。此外, 模型也可应用于模拟初生的 α 枝晶和共晶组织共存的亚共晶合金的显微组织^[30]。

4.4 包晶组织的模拟

多相系统的 MCA 模型也可应用于包晶组织的模拟。图 7 为模拟的 Fe-0.3wt% C 合金在凝固过程中包晶组织的形成和演变。从图 7 中可以看出,

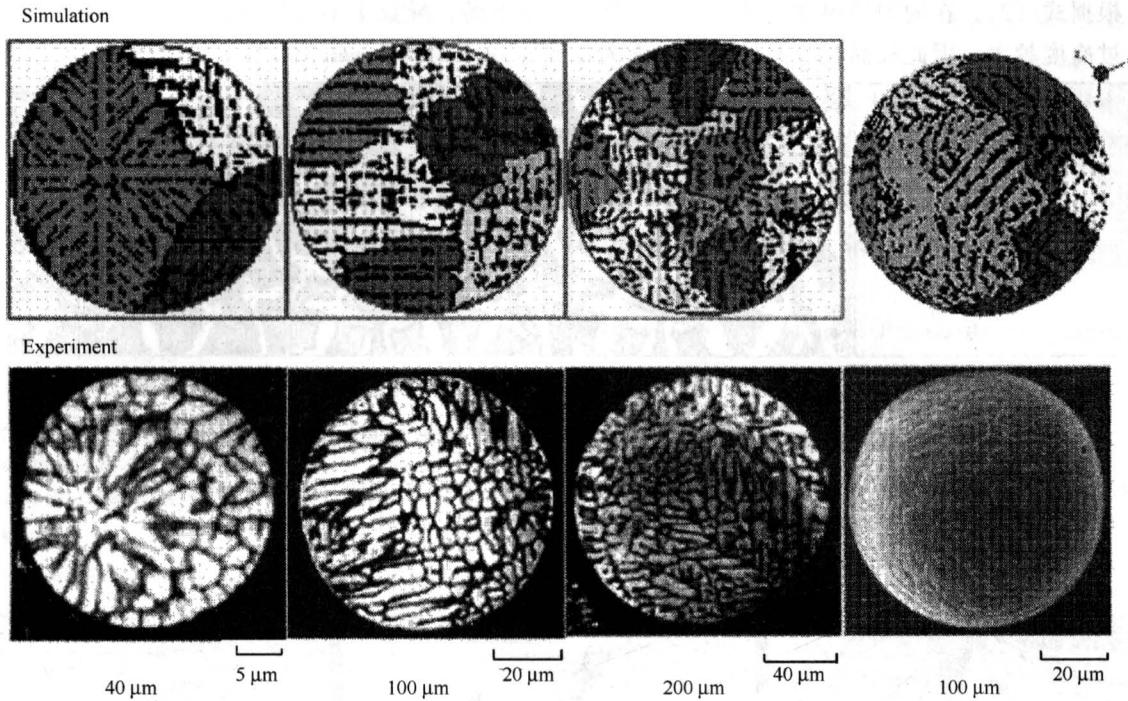


图 4 模拟和试验的 Al-10wt%Cu 合金不同直径的气雾化颗粒的显微组织

Fig.4 Simulated and experimental microstructures of atomized Al-10wt%Cu droplets with various droplet sizes

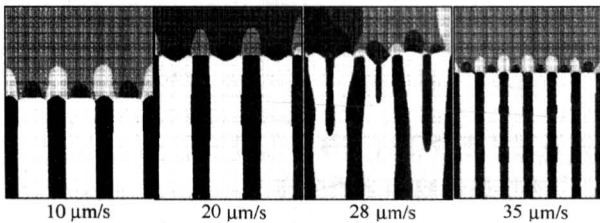


图 5 模拟的不同生长速度条件下的片状共晶显微组织

Fig.5 Simulated lamellar eutectic microstructures with various growth velocities

首先，初生的 δ 相枝晶（白色相）从液相中析出；当凝固时间为 1.25 s 时，温度降至包晶反应温度，在 δ /液相的界面上开始形成 γ 相的晶核（黑色相）；随着包晶反应的进行， γ 相以同时消耗 δ 相和液相方式生长。

4.5 流场作用下枝晶生长形貌的模拟

笔者用 MCA 模型耦合流场计算，研究流场作用下枝晶的生长规律^[44]。图 8 即为模拟的 Al-3wt%Cu 合金在强制对流条件下枝晶的生长形貌。在图 8 的计算中，流体的入口速度为 0.03 m/s，其他的计算条件均和图 1 相同。将图 8（封面右

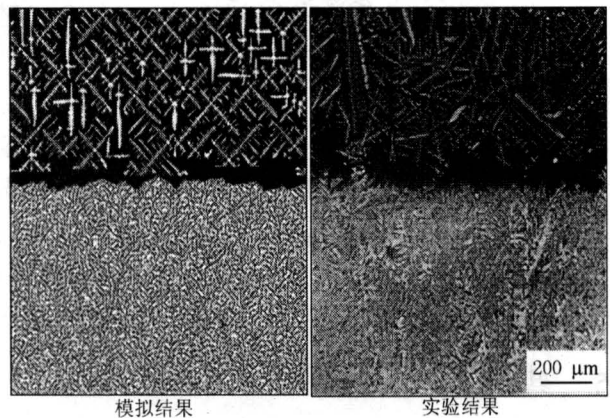


图 6 定向凝固（温度梯度为 15℃/mm）Al-12.6wt%Si 共晶合金的显微组织

Fig.6 microstructures of an Al-12.6wt%Si eutectic alloy directionally solidified at $G=15\text{ }^\circ\text{C}/\text{mm}$ and followed by water quenching

图)和图 1（封面左图）相比较可以发现，金属液的流动显著地改变了枝晶的形貌和溶质场的分布。枝晶的生长在上游方向得到了促进，而在下游方向受到了抑制。这是因为金属液的流动将溶质从上游冲刷到下游，使得上游液相的浓度低于下游液相的

浓度。根据式 (2), 在均匀的温度场条件下, 浓度于下游, 导致了不对称的枝晶生长形貌。越低, 过冷度越大, 因此枝晶在上游的生长速度大

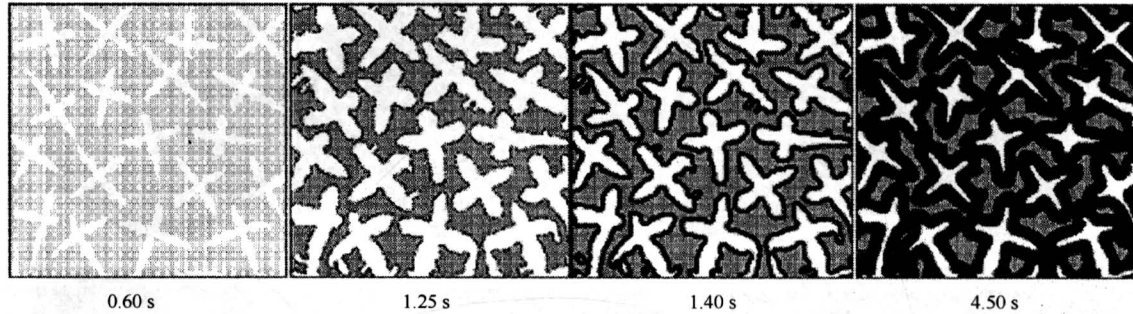


图 7 模拟的 Fe-0.3wt%C 合金在凝固过程中包晶显微组织的演变

Fig.7 Simulated peritectic microstructure evolution during the solidification of a Fe-0.3wt%C alloy with various elapsed times

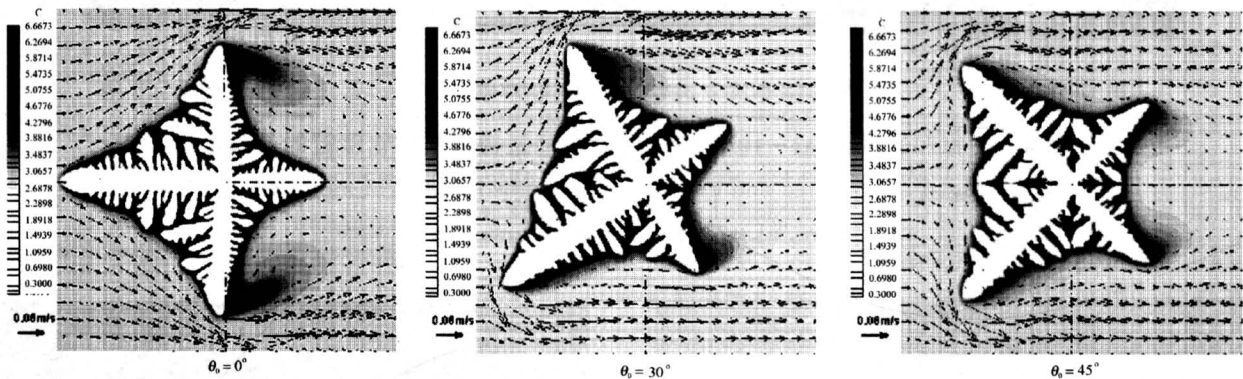


图 8 模拟的 Al-3wt%Cu 合金在金属液对流条件下 (流体的入口速度 $v_{in} = 0.03 \text{ m/s}$), 不同择优取向的枝晶形貌和溶质分布

Fig.8 Simulated dendrite morphologies and solute profiles of an Al-3wt%Cu solidified with melt convection ($v_{in} = 0.03 \text{ m/s}$) and various preferred growth orientations of θ_0

5 结语

笔者发展的一个改进的 MCA 模型, 包含了形核和生长动力学, 枝晶尖端的择优生长方向。除了温度过冷度之外, 还考虑了成分过冷度和曲率过冷度对凝固过程中晶体生长的作用。该 MCA 模型可成功地模拟二维和三维的单枝晶和多枝晶的生长形貌, 半固态工艺过程中非枝晶或颗粒状显微组织的演变, 规则和非规则共晶组织的生长形貌以及包晶显微组织的形成; 用于耦合流场的计算, 该 MCA 模型还可对在场作用下, 枝晶的不对称生长形貌进行模拟预测。

参考文献

- [1] Boettinger W J, Coriell S R, Greer A L, et al. Solidification microstructures: recent developments, future directions [J]. Acta Mater, 2000, 48(1): 43~70
- [2] Thevoz P H, Desbiolles J L, Rappaz M. Modeling of equiaxed microstructure formation in casting [J]. Metall Trans A, 1989, 20: 311~322
- [3] Wang C Y, Beckermann C. Equiaxed dendritic solidification with convection: part II. numerical simulations for an Al-4 wt pct Cu alloy [J]. Metall Mater Trans A, 1996, 27(9): 2765~2783

- [4] Schneider M C, Beckermann C, Lipinski D M, et al. Macrosegregation formation during solidification of complex steel castings: 3-D numerical simulation and experimental comparison [A]. Proceedings of the 8th international conference on modeling of casting and welding processes [C]. 1998, 257~264
- [5] Srolovitz D J, Grest G S, Anderson M P. Computer simulation of recrystallization-I. Homogeneous nucleation and growth [J]. Acta Metall, 1986, 34 (9): 1833~1845
- [6] Spittle J A, Brown S G. Computer simulation of the effects of alloy variables on the grain structures of castings [J]. Acta Metall, 1989, 37: 1803~1810
- [7] Zhu P, Smith R W. Dynamic simulation of crystal growth by Monte Carlo Method—II. Ingot microstructures [J]. Acta Metall Mater, 1992, 40: 3369~3379
- [8] Das A, Mittemeijer E J. Solidification-simulation of eutectic solidification structures of binary alloys: A multiparticle diffusion limited aggregation model [J]. Metall Mater Trans A, 2000, 31(8): 2049~2058
- [9] Das A, Ji S, Fan Z. Morphology development of solidification structures under forced fluid flow: A Monte Carlo simulation [J]. Acta Materialia, 2002, 50: 4571~4585
- [10] Rappaz M, Gandin Ch A. Probabilistic modelling of microstructure formation in solidification processes [J]. Acta Metall Mater, 1993, 41: 345~360
- [11] Gandin Ch A, Rappaz M. A coupled finite element-cellular Automaton Model for the prediction of dendritic grain structures in solidification processes [J]. Acta Metall Mater, 1994, 42: 2233~2246
- [12] Gandin Ch A, Rappaz M. A 3D Cellular Automaton algorithm for the prediction of dendritic grain growth [J]. Acta Mater, 1997, 45: 2187~2195
- [13] Rappaz M, Gandin Ch A, Desbiolles I L, et al. Prediction of grain structures in various solidification processes [J]. Metall Mater Trans A, 1996, 27: 695~705
- [14] Gandin Ch A, Desbiolles J L, Rappaz M, et al. A three-dimensional cellular automaton-finite element model for the prediction of solidification grain structures [J]. Metall Mater Trans A, 1999, 30 (12): 3153~3165
- [15] Kernanpur A, Varahram N, Davami P, et al. Thermal and grain-structure simulation in a land-based turbine blade directionally solidified with the liquid metal cooling process [J]. Metall Mater Trans B, 2000, 31(6): 1293~1304
- [16] Gandin Ch A, Jalanti T, Rappaz M. Modeling of dendritic grain structures [A]. Proceedings of the 8th international conference on modeling of casting and welding processes [C]. 1998, 363~374
- [17] Takatani H, Gandin Ch A, Rappaz M. EBSD characterisation and modelling of columnar dendritic grains growing in the presence of fluid flow [J]. Acta Mater, 2000, 48 (3): 675~688
- [18] Cho I S, Hong C P. Modeling of microstructural evolution in squeeze casting of an Al - 4.5mass% Cu alloy [J]. ISIJ Int, 1997, 37(11): 1098~1106
- [19] Lee K Y, Hong C P. Stochastic modeling of solidification grain structures of Al - Cu crystalline ribbons in planar flow casting [J]. ISIJ Int, 1997, 37 (1): 38~46
- [20] Chang Y H, Lee S M, Lee K Y, et al. Three-dimensional simulation of dendritic grain structures of gas-atomized Al-Cu alloy droplets [J]. ISIJ Int, 1998, 38(1): 63~70
- [21] Lee S Y, Lee S M, Hong C P. Numerical modeling of deflected columnar dendritic grains solidified in a flowing melt and its experimental verification [J]. ISIJ Int, 2000, 40(1): 48~57
- [22] Dilthey U, Pavlik V. Numerical simulation of dendritic morphology and grain growth with modified cellular automata [A]. Proceedings of the 8th international conference on modeling of casting and welding processes [C]. 1998, 589~596
- [23] Nastac L. Numerical modeling of solidification morphologies and segregation patterns in cast dendritic alloys [J]. Acta Mater, 1999, 47(17): 4253~4262
- [24] Zhu M F, Hong C P. A modified cellular automaton model for the simulation of dendritic growth in solidification of alloys [J]. ISIJ Int, 2001, 41(5): 436~445
- [25] Zhu M F, Hong C P. A three dimensional modified cellular automaton model for the prediction of solidification microstructures [J]. ISIJ Int, 2002, 42 (5): 520~526
- [26] Beltran-Sanchez L, Stefanescu D M. Growth of solutal dendrites-A cellular automaton model and its quantitative capabilities [J]. Metall Mater Trans A, 2003, 34: 367~382
- [27] 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]. ISIJ Int, 2001, 41: 992~998

- [28] Zhu M F, Hong C P. Modeling of microstructure evolution in regular eutectic growth [J]. *Physical Review B*, 2002, 66: 155428
- [29] Zhu M F, Nishido S, Hong C P. Modeling of eutectic structure formation by a modified Cellular automaton model [J]. *Int J Cast Metals Res*, 2002, 15 (3): 273 ~ 278
- [30] Zhu M F, Hong C P. Modeling of irregular eutectic microstructures in solidification of Al - Si alloys [J]. *Metall Mater Trans. A*, 2004, 35 (in press)
- [31] Zhu M F, Hong C P. Modeling of microstructure evolution in eutectic and peritectic solidification [A]. *Proceedings from the 10th international conference on modeling of casting welding and advanced solidification processes [C]*. 2003. 91 ~ 98
- [32] Karma A, Rappel W J. Quantitative phase-field modeling of dendritic growth in two and three dimensions [J]. *Physical Review E*, 1998, 57: 4323 ~ 4349
- [33] Boettinger W J, Warren J A, Beckermann C, et al. Phase-field simulation of solidification [J]. *Annu Rev Matter Res*, 2002, 32: 163 ~ 194
- [34] Nestler B, Wheeler A A. A multi-phase-field model of eutectic and peritectic alloys: Numerical simulation of growth structures [J]. *Physica D*, 2000, 138: 114 ~ 133
- [35] Lo T S, Karma A, Plapp M. Phase-field modeling of microstructural pattern formation during directional solidification of peritectic alloys without morphological instability [J]. *Physical Review E*, 2001, 63: 031504
- [36] Beckermann C, Diepers H J, Steinbach I, et al. Modeling melt convection in phase-field simulations of solidification [J]. *J Comp Phys*, 1999, 154: 468 ~ 496
- [37] Tong X, Beckermann C, Karma A, et al. Phase-field simulations of dendritic crystal growth in a forced flow [J]. *Phys Rev E*, 2001, 63: 061601
- [38] Tonhardt R, Amberg G. Dendritic growth of randomly oriented nuclei in a shear flow [J]. *J Cryst Growth*, 2000, 213: 161 ~ 187
- [39] Stefanescu D. *Science and engineering of casting solidification [M]*. New York: Kluwer Academic/Plenum. 2002
- [40] Sc Ph Thevoz. Dr Thesis No. 765, Swiss Federal Inst Tech, Lausanne, 1988
- [41] Kurz W, Giovanola B, Trivedi R. Theory of microstructure development during rapid solidification [J]. *Acta Metall*, 1986, 34: 823 ~ 829
- [42] Lipton J, Kurz W, Trivedi R. Rapid dendrite growth in undercooled alloys [J]. *Acta Metall*, 1987, 35: 957 ~ 964
- [43] Grugel R, Kurz W. Growth of interdendritic eutectic in directionally solidified Al - Si alloys [J]. *Metall Trans A*, 1987, 18: 1137 ~ 1142
- [44] 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*, 2004, 69: (in press)

Computer Simulation of Metal Solidification Microstructures

Zhu Mingfang¹, Yu Jin¹, Hong Chunpyo²

(1. Southeast University, Nanjing 210096, China; 2. Yonsei University, Seoul 120749, Korea)

[Abstract] Computer simulation has been one of the most important and advanced research fields in the materials science and engineering. It is playing an increasing important role in the studies of microstructural evolution during solidification of metals and alloys. In this paper, the recent progress in computer simulation of solidification microstructures is briefly reviewed. Various models including deterministic and stochastic approaches for the prediction of solidification microstructures are compared and assessed. Then, a modified cellular automaton (MCA) model developed by the authors is introduced and its predictive capabilities are described by presenting some examples including the modeling of 2D & 3D dendritic growth, non-dendritic or globular microstructure evolution in semi-solid process, eutectic and peritectic microstructure formation, as well as the asymmetric dendritic growth features in the presence of melt convection.

[Key words] solidification; microstructure; computer simulation; Cellular Automaton Model