

Ni 基耐热合金凝固过程的元胞自动机方法模拟 *

张 林^{1,2)} 王元明²⁾ 张彩砮¹⁾

1) 东北大学理学院, 沈阳 110004

2) 中国科学院金属研究所固体原子像开放研究实验室, 沈阳 110016

摘 要 以温度扩散方程、多组元的溶质扩散方程以及枝晶尖端生长的 LGK 模型为基础, 建立了 Ni 基耐热合金凝固过程的元胞自动机模型。利用这个模型模拟了凝固过程中不同冷却速率下晶粒微观结构的演化。对模基表面与铸件内部的均匀形核、晶粒生长、扩散过程以及固/液界面的曲率等对凝固过程中晶粒微观结构演化的影响分别进行了讨论。

关键词 元胞自动机, 晶粒生长, 凝固, 枝晶

中图分类号 O242, TG244.3

文献标识码 A

文章编号 0412-1961(2001)08-0882-07

MODELLING SOLIDIFICATION PROCESS FOR NICKEL-BASED SUPERALLOY BY CELLULAR AUTOMATA

ZHANG Lin^{1,3)}, WANG Yuanming²⁾, ZHANG Caibe¹⁾

1) College of Science, Northeastern University, Shenyang 110004

2) Laboratory of Atomic Imaging of Solids, Institute of Metal Research, The Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016

Correspondent: ZHANG Lin. Tel: (024)23843531-55942, Fax: (024)23891320, E-mail: ymwang@imr.ac.cn
Manuscript received 2000-10-10, in revised form 2001-03-29

ABSTRACT A cellular automaton model is developed to study the solidification process for a Ni-based superalloy, based on the temperature diffusion equation, multi-component solute diffusion equation and LGK model used in the growth ahead of dendritic tips. The model is used in simulating the evolution of grain structures in the solidification process under a selected undercooling rate. The heterogeneous nucleation on the mould surface and in the volume of melt, the grain growth, the diffusion procedure and the solid/liquid interface curvature which affect the evolution of the grains microstructure in solidification are discussed respectively.

KEY WORDS cellular automata, grain growth, solidification, dendrite

在耐热合金的凝固过程中, 由于晶粒结构对铸件的抗高温及耐腐蚀性能影响很大, 因此, 对晶粒结构的控制非常重要。传统的试样晶粒尺寸控制方法主要是通过过程参数的选择、计算等实现, 这种方法需要大量的实验积累。尽管这种建立在实验基础上的近似方法有助于解决一些实际问题, 但它不能给出耐热合金晶粒结构的形成及晶粒生长的具体过程。

Brown 和 Spittle^[1] 采用 Monte-Carlo 方法研究了合金构成、模块温度及液相线斜率等因素对晶粒结构的影响。Zhu 和 Smith^[2] 采用元胞自动机方法模拟了 Al 样品铸件的晶粒生长过程, 在模拟中, 他们考虑了均匀形核

与晶粒生长过程中表面能及体自由能的变化。尽管他们的模型得到了与实验观察相似的晶粒结构, 但是没有充分考虑枝晶生长过程中物理因素的影响。Rappaz 和 Caudin^[3,4] 提出了一个元胞自动机概率模型, 并用于模拟具有温度均匀的小块合金试样中晶粒的形核、晶粒的生长及定向凝固过程中柱状晶向等轴晶的转化等。随后, Gandin 和 Rappaz^[4] 又利用这个模型模拟了 Ni 基合金在凝固过程中的晶粒结构, 并得到了与实验显微照片横端面相似的结构, 但是他们的模型没有考虑到溶质扩散、温度扩散以及界面局部曲率等对于枝晶结构演化的影响。本文除对流效应外, 考虑到上述各种物理因素的作用后, 建立了一个二维元胞自动机模型, 并模拟了 Ni 基耐热合金叶片凝固过程中晶粒结构演化过程。

1 模型的物理过程描述

图 1 显示了一个铸件的三个不同结构区域^[5], 在模

* 国家自然科学基金 G2000067104 资助项目

收到初稿日期: 2000-10-10, 收到修改稿日期: 2001-03-29

作者简介: 张 林, 男, 1972 年生, 博士生

基表面或贴近模基表面成核的晶粒迅速的形成一个外层等轴晶区域, 随后, 只有那些平行于热流方向生长的晶粒才能够存在下来, 并形成柱状晶区域. 一旦在熔体内部的过热消散后, 柱状枝晶前沿的熔体变得过冷, 等轴晶开始生长, 形成内部等轴晶区. 以下介绍各演化过程中涉及的物理过程.

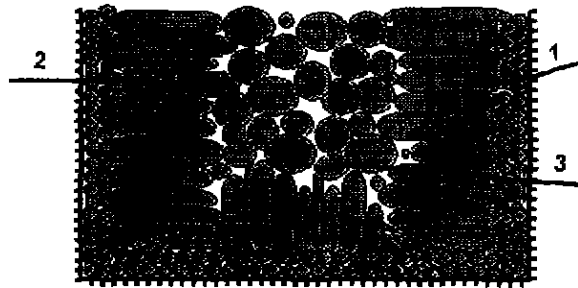


图 1 铸件的三个不同结构区域
Fig.1 The three different zones in casting
1—outerequiaxed zone 2—columnar zone
3—inner equiaxed zone

1.1 均匀形核

假设在过冷度 ΔT 时, 在所研究的液态熔体内部, 以成核点密度 $n(\Delta T)$ 成核瞬间完成. 对于一个过冷度的增加 $d(\Delta T')$, 成核密度的增长 dn 可以用一个连续性的成核分布 $\frac{dn}{d(\Delta T')}$ 描述^[3]. 在本模型中, 以 Gauss 分布描述在模基表面与熔体内部的均匀成核. 这样在给定的过冷度下, 成核密度表示为

$$n(\Delta T) = \int_0^{\Delta T} \frac{dn}{d(\Delta T')} d(\Delta T') \quad (1)$$

$$\frac{dn}{d(\Delta T')} = \frac{n_{max}}{\sqrt{2\pi} \cdot \Delta T_{\sigma}} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\Delta T' - \Delta T_{max}}{\Delta T_{\sigma}}\right)^2\right] \quad (2)$$

其中 ΔT_{max} 为过冷度峰值, ΔT_{σ} 是标准均方差, n_{max} 为最大成核密度. 图 2 示意表示了熔体内部的密度函数分布, 其相关参量 (用下标 v 表示) 分别是: $\Delta T_{s,max}$ 为 0.5°C , $\Delta T_{s,\sigma}$ 为 0.1°C , $n_{s,max}$ 为 $4.0 \cdot 10^6 \text{ m}^{-3}$, 模基表面密度函数分布的相关参量 (用下标 s 表示) 分别

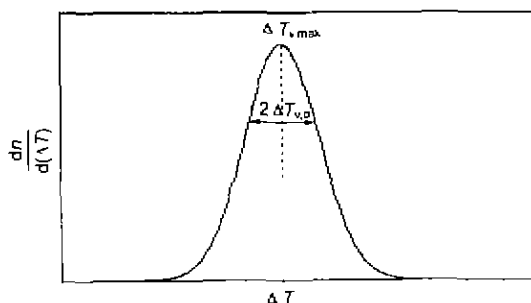


图 2 熔体内部的密度函数的 Gauss 分布
Fig.2 Gauss distribution of nucleation site in melt

是: $\Delta T_{v,max}$ 为 6.5°C , $\Delta T_{v,\sigma}$ 为 0.5°C , $n_{v,max}$ 为 $2.5 \times 10^{10} \text{ m}^{-3}$

1.2 枝晶的生长方向

在二维情况下, 存在四个可能的 $\langle 10 \rangle$ 方向. 对于在模基表面与熔体内部已形核的晶粒, 等几率地具有上述四种结晶取向, 因此在角度范围 $[\theta, \theta + d\theta]$ 之间新成核晶粒的概率为

$$dp(\theta) = \frac{2}{\pi} d\theta \quad (3)$$

式中 $2/\pi$ 是考虑了枝晶的四重对称性后得到的.

1.3 溶质扩散与温度场的扩散

枝晶生长过程中热量与溶质的传输可以用温度及溶质扩散的连续性方程加以描述

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_T \nabla^2 u \quad (4)$$

$$\frac{\partial C_{l,k}}{\partial t} = D_{c,k} \nabla^2 C_{l,k} \quad (5)$$

由于 INCO718 耐热合金是多组元的系统, 需要考虑不同组元在液体中扩散能力的差别. $D_{c,k}$ 是液态中组元 k 的溶质扩散常数, $C_{l,k}$ 是液态中组元 k 的溶质浓度. 因为溶质在固态中的扩散率远低于在液态中的扩散率, 所以模型中忽略溶质在固态中的扩散. 模型中假设在液体与固体中温度的扩散率相同. u 是无量纲的温度场, D_T 是温度场的扩散常数, 这个温度场由以下方程确定^[6]:

$$u = (T - T_{\infty}) / (L / C_p) \quad (6)$$

式中 L 是潜热, C_p 是常压下的热容量, 模型中取 L 与 C_p 为常量. T 是温度, T_{∞} 是无穷远边界面 I 上的温度, 见图 3, 图中 \vec{n} 表示枝晶生长的法线方向.

1.4 固 / 液界面曲率的影响

考虑到固 / 液界面曲率所引起的 Gibbs-Thompson

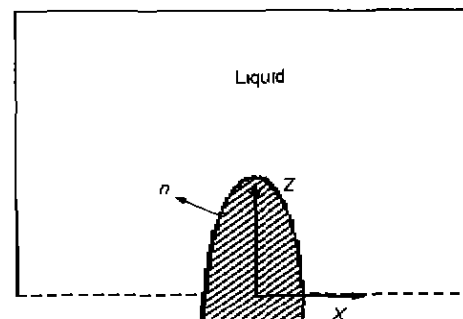


图 3 在过冷液体中枝晶生长过程的图示
Fig.3 A schematic diagram of dendrite growth in the undercooling liquid. z represents the growed direction of dendrite and \vec{n} is the direction perpendicular to the solid/liquid interface

效应、枝晶尖端液体的平衡温度及各组元的平衡溶质浓度分别为

$$C_{eq,k} = C_{l,k} - \gamma_{c,k} \kappa \quad (7)$$

$$u_{eq} = u - \gamma_T \kappa \quad (8)$$

其中, u_{eq} 与 $C_{eq,k}$ 分别是平衡温度及各组元的平衡溶质浓度, γ_T 与 $\gamma_{c,k}$ 分别是温度与组元溶质浓度的表面张力长度, κ 是界面的局域曲率.

1.5 枝晶尖端的生长动力学

对于多组元的合金系统, 模型采用扩展的 LGK^[7] 模型加以计算

$$\Omega_{c,k} = Iv(P_{c,k}) = P_{c,k} \exp(P_{c,k}) E(P_{c,k}) \quad (9)$$

式中 $\Omega_{c,k}$ 是组元 k 的溶质过饱和度, $P_{c,k}$ 是枝晶尖端溶质组元 k 的 Péclet 数, $Iv(P_{c,k})$ 是 Ivantsov 函数, $E(P_{c,k})$ 是指数积分.

由 LGK 模型, 组元 k 的溶质过饱和度 $\Omega_{c,k}$ 以及枝晶尖端溶质组元 k 与温度场的 Péclet 数 $P_{c,k}$ 和 P_T 可以由下列方程计算得到

$$\Omega_{c,k} = \frac{C_{l,k,eq} - C_{0,k}}{C_{l,k,eq}(1 - k_{0,k})} \quad (10)$$

$$P_{c,k} = \frac{Rv}{2D_{l,k}} \quad (11)$$

$$P_T = \frac{Rv}{2D_T} \quad (12)$$

其中 $C_{l,k,eq}$ 是枝晶尖端溶质组元 k 的平衡溶质浓度, $C_{0,k}$ 是组元 k 的初始溶质浓度, $k_{0,k}$ 是组元 k 的平衡溶质分配系数, R 与 v 分别是枝晶尖端半径与枝晶尖端生长速率

$$R = 2\pi \left[\frac{\Gamma_G}{\sum_{k=1}^N m_k G_{c,k} - G} \right]^{1/2} \quad (13)$$

$$-D_{c,k} G_{c,k} = v C_{l,k,eq} (1 - k_{0,k}) \quad (14)$$

$$G = -\frac{2P_T L}{C_p} R \quad (15)$$

式中 G 与 $G_{c,k}$ 分别是固 / 液界面的温度梯度与组元 k 的溶质梯度, m_k 是组元 k 的液相线斜率, 模型中取为常数, Γ_G 是 Gibbs-Thomas 常数.

在已知枝晶尖端液态溶质浓度的条件下, 通过求解方程 (9) — (15) 可以解出枝晶尖端生长速率、尖端半径、温度场的 Péclet 数, 以及固 / 液界面的各溶质的溶质梯度和温度梯度

2 元胞自动机

根据 Hesselbarth 与 Göbel 的叙述^[8], 元胞自动机具有如下的性质: (a) 所研究的区域可分成规则的元胞

网格; (b) 每个元胞的状态由一些变量表示; (c) 每个元胞具有确定数目的邻居; (d) 元胞变量及状态的变化由演化规则决定.

2.1 元胞近邻的定义及边界条件的确定

本模型在生长过程中选取 von Neumann 的近邻定义, 即元胞的最近邻定义. 图 4 是模型中枝晶定向生长过程所用的元胞网格, C 是中心元胞, W, E, N, S 分别是中心元胞的四个 von Neumann 近邻. 元胞网格的底部与两边紧挨着模基表面, 在网格的最上部, 采用对称性边界条件.

2.2 元胞状态的确定

在本模型中, 元胞的状态由元胞的状态数 (取 0—100, 其中 0 表示液态, 1—100 表示晶粒的结晶取向)、生长状态数 (取 0 表示没有生长, 1 表示正在生长, 2 表示完成生长)、生长的长度、不同组元的溶质浓度以及温度场值确定

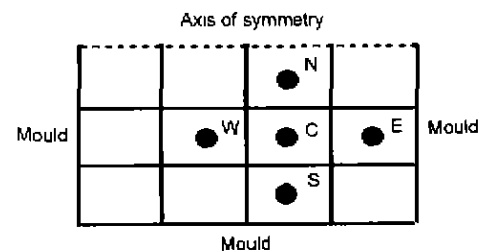


图 4 模型中的元胞格子

Fig. 4 The cell lattice used in the model. Labels N, S, W and E are the neighbourhood cells of cell C

2.3 元胞演化模拟

本模拟在 1200×1200 的元胞网格中进行, 每个元胞赋以同样的初始温度与初始溶质浓度, 这时状态数为 0. 如果以一个确定的冷却率 \dot{T} 下降, 当温度下降到低于液相线上的凝固温度后, 就开始了成核、生长过程以及温度与溶质的扩散. 所有元胞按时间步根据演化规律改变它们的状态.

2.3.1 成核过程 成核采用概率性均匀成核^[3]. 在一个时间步, 在熔体体积与模基表面内, 新晶粒的成核密度分别增加 δn_v 与 δn_s , 其表达式为

$$\delta n_s = \int_{\Delta T}^{\Delta T - \delta(\Delta T)} \frac{dn_s}{d(\Delta T)} d(\Delta T') \quad (16)$$

$$\delta n_v = \int_{\Delta T}^{\Delta T + \delta(\Delta T)} \frac{dn_v}{d(\Delta T)} d(\Delta T') \quad (17)$$

这里 $\delta(\Delta T) > 0$, 是导致密度增加的过冷度增加值. 与 (16) 与 (17) 式相对应, 在熔体内部及模型表面的成核概率 p_v 与 p_s 分别由下式给出

$$p_v = \delta n_v V \quad (18)$$

$$p_s = \delta n_s S \quad (19)$$

方程中 V 、 S 分别代表样品的熔体体积与模基表面积。对于每一个元胞, 取一个随机数 $r(0 \leq r < 1)$, 如果该随机数小于成核概率, 这个元胞由液态转变为固态, 同时生长状态数变为 1(表示开始生长), 状态数随机取一个从 1 到 100 的正数, 代表某一结晶取向。固化的元胞向近邻液态元胞析出溶质, 保留在固态元胞中的各组元溶质含量分别由相图中的固相线确定。

2.3.2 扩散过程及界面曲率的影响 (1) 溶质的扩散: 元胞变为固态后, 其近邻的第 i 个液态元胞组元 k 的溶质浓度 $C_{i,t,k}$ 变为

$$C_{i,j,k} \rightarrow C_{i,j,k} + C_{\text{reject},k} \quad (20)$$

$$C_{\text{reject},k} = \sum_j (C_{0,j,k} - C_{s,j,k}) \quad (21)$$

式中, $C_{\text{reject},k}$ 是由固态元胞析出的组元 k 的溶质, $C_{0,j,k} - C_{s,j,k}$ 是近邻第 i 个液态元胞的第 j 个已经固化的液态元胞在凝固前后的溶质改变。求和遍及所有这种刚固化的元胞

使用图 5a 的表示, 方程 (5) 的离散形式为^[9]

$$C_{1,i,k} = C_{1,i,k} + \alpha(\langle C_{1,k} \rangle - 6C_{1,i,k}) \quad (22)$$

这里

$$\alpha = D_{c,k} \tau / \xi_0^2 \quad (23)$$

τ 是一个时间步的长度, $\langle C_{1,k} \rangle$ 表示最近邻的溶质平均值(见图 5), ξ_0 是邻近元胞中心点的距离(见图 7), $D_{c,k}$ 是液态中溶质组元的扩散系数。

在图 5a 中

$$\begin{aligned} \langle C_{1,k} \rangle &= a(C_1 + C_3 + C_5 + C_7)_k \\ &+ b(C_2 + C_4 + C_6 + C_8)_k \end{aligned} \quad (24)$$

引入对角加权因子 a 与 $b(a = \frac{1}{2}b)$, 是为了降低扩散的各向异性。当一些近邻元胞为固态时, 近邻元胞的溶质平均值(如图 5b 所示)为

$$\langle C_{1,k} \rangle = a(C_1 + C_5 + C_7)_k + b(C_6 + C_8)_k \quad (25)$$

(2) 温度场的扩散: 当液态元胞变为固态时, 它将释放凝固潜热, 其温度由 u_i 上升为 $u_i + l$, 其中 l 是无量纲潜热。

对于温度场扩散方程的离散化处理与溶质扩散相似, 扩散方程的离散形式为:

$$u_t = u_i + \alpha_T((u) - 6u_i) \quad (26)$$

其中,

$$\alpha_T = D_T \tau / \xi_0^2 \quad (27)$$

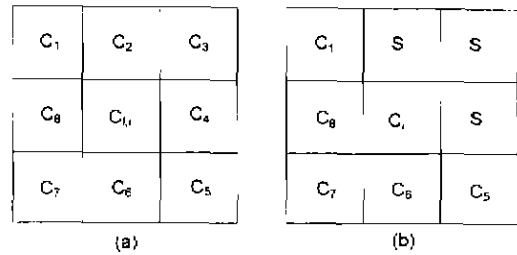


图 5 元胞 $C_{1,i}$ 、近邻 $C_{1-i}—C_{8}$ 与其加权平均值 $\langle C_{1,i} \rangle$ 的关系
Fig.5 The discretized diffusion operator can be written as a weighted average $\langle C_{1,i} \rangle$ of cell $C_{1,i}$ with its nearest neighbors $\{C_{1-i}—C_{8}\}$. These weightings change if any of the nearest neighbors is in solid (noted as S in Fig.5b)

扩散后元胞 i 的温度通过下式计算可得

$$T_i = T_{\infty} + L \cdot u_i / C_p \quad (28)$$

在每个时间步, 由于温度的下降, 温度变化为 $T_i \rightarrow T_i - \tau \cdot \dot{T}$.

2.3.3 表面曲率与各向异性 为确定一个液态元胞 k 与其邻近的固态元胞之间的局域表面曲率近似关系, 模型中只考虑了该液态元胞的第一近邻与第二近邻。对于这样一个给定的元胞, 方程 (7)、(8) 的数值形式为

$$C_{r,q,k} = C_{1,m} - \gamma_{c,k} \zeta(\bar{\kappa} - \sum_{j \in 1st} (\phi_j \varepsilon_j)) \quad (29)$$

$$u_{i,q} = u - \gamma_T \zeta(\bar{\kappa} - \sum_{j \in 1st} (\phi_j \varepsilon_j)) \quad (30)$$

这里求和遍及元胞所有第一及第二近邻 (1st nn 和 2nd nn), ε_j 是加权数, ε_j 的具体数值如图 6 所示, ϕ_j 是相值 ($\phi_j = 1$, 表示元胞为固态, $\phi_j = 0$, 表示元胞为液态), $\bar{\kappa}$

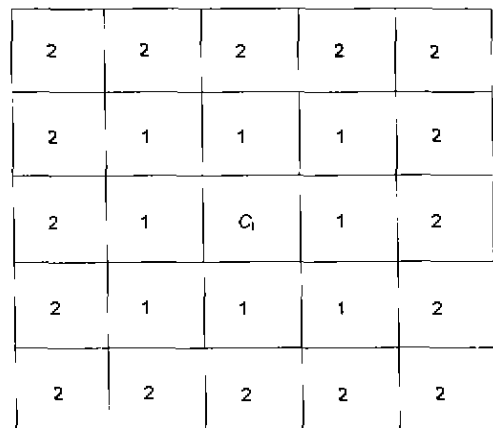


图 6 在固 / 液界面上的元胞 C_1 的第一及第二近邻的加权数 ε_j
Fig.6 Curvature scheme with their weighting values $\varepsilon_j = 1$ or 2 in first- or second- neighbors at the solid/liquid interface

值取为所有近邻加权因子和的一半, 在平界面处, $\zeta=0$; 对于凹界面, $\zeta=-1$; 对于凸界面, $\zeta=1$.

2.3.4 晶粒的生长 计算在固/液界面上液态元胞的温度及各组元的溶质含量后, 依据下述条件判定它们是否能够转化为固态: (a) 液态元胞近邻有固态元胞; (b) 液态元胞的平衡温度要低于凝固温度, 这个凝固温度由这个液态元胞中关键组元的平衡溶质浓度在合金相图上所对应的液相线上的温度确定; (c) 取一随机数 $r(0 \leq r < 1)$, 如果它小于该液态元胞近邻固态元胞在该方向的“捕获”概率, 这个液态元胞转化为固态, 同时这些液态元胞析出它们的溶质到近邻的液态元胞, 并释放凝固潜热. 对于已转化为固态的元胞, 要计算其捕获近邻液态元胞使之转化为固态的概率及向近邻液态元胞的生长速率. 模型中, 假设溶质只能从已固化的元胞向邻近液态元胞析出, 并且固态元胞不能再次转化为液态元胞;

下面介绍“捕获”概率的计算方法. 晶粒向近邻液态元胞方向上的生长长度 $\xi_i(t)$ 由下式计算可得

$$\xi_i(t) = \int_0^t v_i dt \quad (31)$$

式中 $i=0,1,2,3$ 分别表示图 4 中 E, S, W, N 四个方向. v_i 表示晶粒向四个近邻元胞方向的生长速率, t 表示生长的时间.

固态元胞向四个方向上的捕获概率 p_i 由下式给出:

$$p_i = \frac{\xi_i(t)}{\xi_\theta} \quad (32)$$

$$\xi_\theta = \xi_0 [\cos\theta + |\sin\theta|] \quad (33)$$

ξ_0 是元胞两个近邻格点间距离, 见图 7.

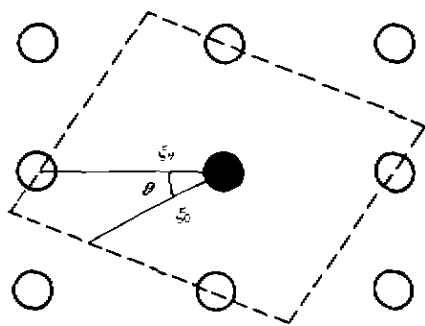


图 7 沿 θ 方向生长的元胞的生长长度与元胞近邻格点间距的关系

Fig.7 The growing length ξ_θ of the cell at the orientation θ and the distance ξ_0 between two adjacent cells

2.3.5 时间步长的确定 每一个时间步的长度由下

式给出

$$\tau = \frac{1}{10} \min\left(\frac{\xi_0}{v_{\max}}, \frac{\xi_0^2}{D_I}, \frac{\xi_0^2}{D_{c,1}}, \dots, \frac{\xi_0^2}{D_{c,n}}\right) \quad (34)$$

方程中的下标 n 表示溶质组元的总数, v_{\max} 是每一时间步上所有固态元胞枝晶尖端生长速率的最大值, $D_{c,1} \dots D_{c,n}$ 分别是溶液中溶质组元 $1 \dots n$ 的溶质扩散常数. 每一个时间步的长度 τ 取为溶液中各组元溶质扩散到距离为 ξ_0 的时间, 温度扩散到距离为 ξ_0 的时间以及枝晶尖端以最大生长速率生长到距离 ξ_0 所需时间的最小值的 $1/10$.

3 模拟结果与讨论

本模型计算了 Ni 基 INCO718 合金 (它的主要溶质) 元素成分 (质量分数, %, 下同) 是 Cr 21, Fe 20.5, Nb 5.5, Mo 3.3, Ti 1.15, Al 0.7) 在不同冷却率时的凝固过程. 模型中计算成核概率的相关参数列于表 1, 试样尺寸为 $20 \times 20 \text{ mm}^2$, 这时元胞网的分辨率为 $16 \mu\text{m}$. 图 8 中, 合金的液态用深衬度表示, 其它不同的灰度表示晶粒的不同结晶取向.

图 8 展示了在不同冷却率下, 当过冷度为 ΔT_1 , ΔT_2 与 ΔT_3 时, 晶粒在模壁表面形核并向铸件内部生长过程. 图 8a-c 是冷却率为 0.001 s^{-1} 时, 随着温度的降低, 晶核首先在模基表面形成, 随后向铸件的内部生长过程. 由于温度下降的很慢, 铸件内部的液体温度达不到形核所需的过冷度, 因此不能在铸件内部形核, 已经在模基表面形核的晶粒以柱状晶的形式逆着热流方向垂直模壁生长, 一直延伸到铸件的中心. 在模基表面形核的晶粒具有不同的结晶取向, 这从图中不同的颜色能够反映出来. 如图所示, 柱状晶的表面凹凸不平, 有些部分向中心延伸较快. 这是由于在枝晶生长过程中, 溶质在枝晶前端分布不均匀引起的. 当枝晶生长时, 被“捕获”的液态元胞要向周围尚未转化为固态的液态元胞析出溶质, 溶质在液态中进行扩散, 这使枝晶尖端前的液态溶质浓度分布不均匀, 枝晶尖端向液态中的生长速率不同, 溶质富集的区域相应的过冷度较低, 枝晶生长的越快. 另外, 引起柱状晶前端溶质分布不均匀的一个原因来自于固/液界面的曲率影响, 它导致枝晶尖端的平衡溶质浓度不同, 使得枝晶尖端的生长速率不同, 另外也使得对应于不同溶质浓度的凝固温度不同. 这些因素使得枝晶尖端的液态元胞不可能同时转化为固态, 因此在图中表现为固/液界面不是均匀地向前推进, 而是有些部位生长的较快, 有些部位生长的较慢.

图 8d-f 与图 8g-i 是冷却率分别取为 0.07 s^{-1} 与 0.2 s^{-1} 时, 在冷却到不同过冷度 ΔT_1 , ΔT_2 和 ΔT_3 时的晶粒在模壁表面形核并向铸件内部生长过程. 在冷却率较大情况下, 当过冷度接近铸件内部液态成核所需的过冷度时, 柱状晶尚没有到达铸件的中心等轴晶就开始在铸件

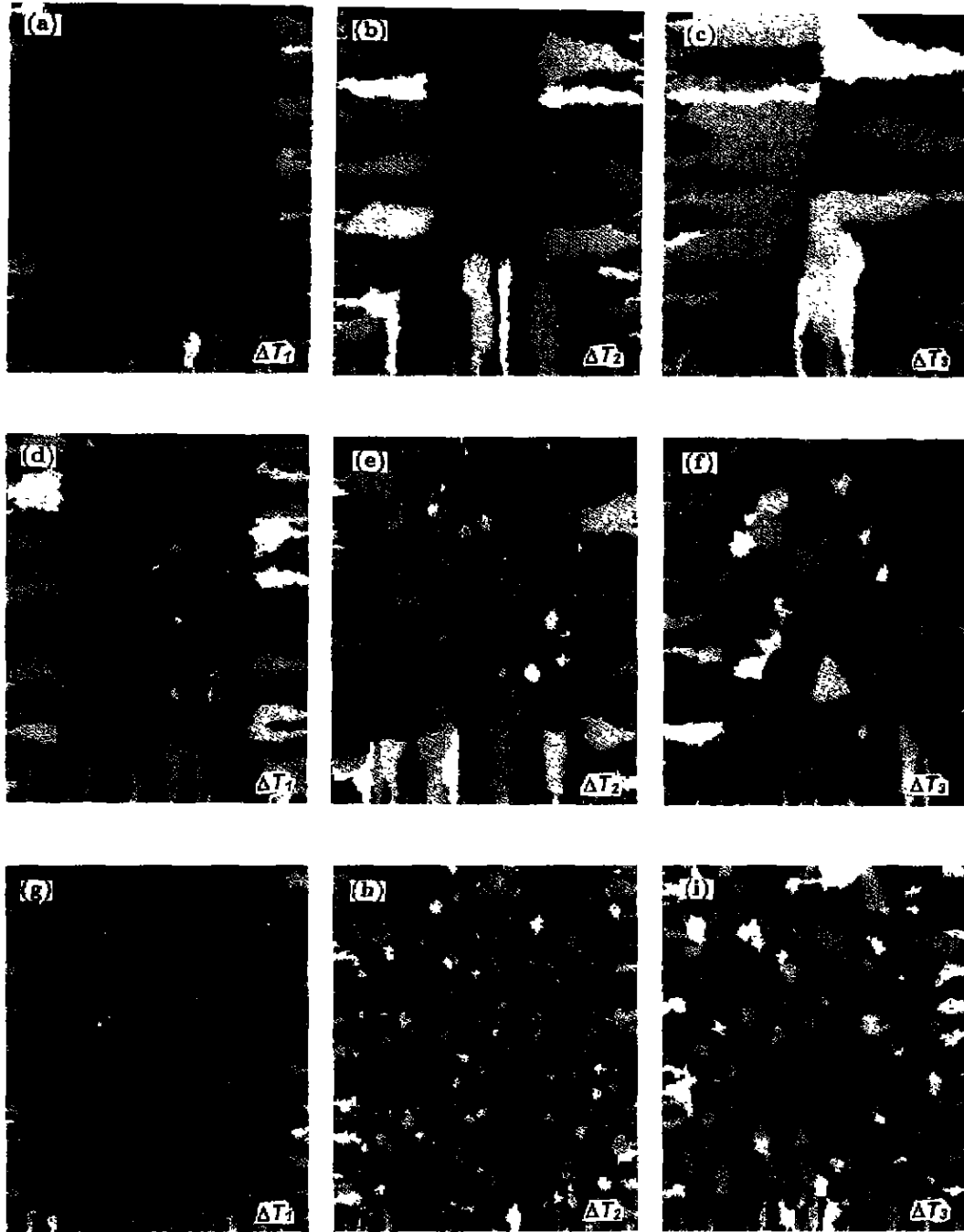


图 8 在不同冷却率下, 当过冷度为 ΔT_1 , ΔT_2 与 ΔT_3 时, 晶粒在模壁表面形核并向铸件内部生长的形貌
 Fig.8 The evolution of grain structures and the final two-dimensional micrographs at the undercooling ΔT_1 , ΔT_2 and ΔT_3 under the different cooling rates T

(a-c) $T=0.001 \text{ s}^{-1}$ (d-f) $T=0.07 \text{ s}^{-1}$ (g-i) $T=0.2 \text{ s}^{-1}$

内部形成。如图 8g—i 所示, 随着冷却率的进一步加大, 这一趋势变得更为明显, 柱状晶所达到的区域深度远小于在低冷却率时所达到区域深度, 并且柱状晶向等轴晶的转化在凝固的早期就开始了。图中可以看出, 枝晶表面形状不平滑, 这是因为枝晶尖端前沿溶质分布的不均匀以及固/液界面的曲率影响所致。

4 结论

在不同冷却率下, 用一种元胞自动机模型模拟了 Ni 基耐热合金凝固过程中晶粒微观结构的演化。这个模型考虑了在模基表面与铸件内部的均匀形核、晶粒的枝晶尖端生长动力学、温度场的扩散过程、合金中多组元溶质的扩散过程以及固/液界面的曲率影响。在本模型中, 液态元胞

转变为固态由下述三个条件决定:最近邻元胞的状态;液态元胞的平衡温度低于凝固温度;最近邻固态元胞的“捕获”概率。计算结果表明,当温度降低很慢时,在铸件内部来不及形核前,在模基表面形核的柱状晶就到达了铸件中心。当温度降低较快时,在柱状晶没有到达铸件的中心前,在铸件的内部发生形核,发生了柱状晶向等轴晶的转化。柱状晶所能达到铸件内的深度随冷却速率的不同而不同,冷却速率越大,柱状晶达到铸件内的深度越浅。

本模型是一个简化的二维模型,许多因素尚未考虑进来,如溶质在固态中的扩散,对流效应以及外加电场对于形核与晶粒生长过程的影响等。然而,用这个模型模拟的结果,近似地描述了实际的凝固过程。

参考文献

- [1] Brown S G R, Spittle J A. *Mater Sci Technol*, 1989; 5: 362
- [2] Zhu P, Smith W. *Acta Metall*, 1992; 40: 683
- [3] Rappaz M, Gandin Ch. -A. *Acta Metall*, 1993; 41: 345
- [4] Gandin Ch. -A, Rappaz M. *Metall Trans*, 1993; 24A: 467
- [5] Beckermann C, Viskanta R. *Appl Mech Rev*, 1993; 46: 1
- [6] Saito Y, Goldbeck-Wood G, Muller-Krumbhaar H. *Phys Rev A*, 1988; 38: 2148
- [7] Lipton J, Glicksman M E, Kurz W. *Mater Sci Eng*, 1984; 65: 57
- [8] Hesselbarth H W, Göbel I R. *Acta Metall*, 1991; 39: 2135
- [9] Kremeyer K. *J Comp Phys*, 1998; 142: 243