

微观孔洞形成机理及预测模型研究进展

高志明 牛智民 高中堂 张 耿 王 展 张雨晨 张传伟

(西安科技大学机械工程学院, 西安 710054)

摘 要 近年来, 航空航天、汽车及其他领域对低成本、轻质、高强度铸造合金提出了越来越高的要求, 而铸造缺陷中的微观孔洞是当前研究的热点。对微观孔洞各类凝固缺陷进行了全面总结, 分析了国内外当前微观孔洞的形成机理及预测模型的局限性和存在问题, 提出了未来凝固缺陷预测模型的发展方向。

关键词 微观孔洞; 形成机理; 预测模型

中图分类号 TG213; G353.11

文献标志码 A

DOI: 10.15980/j.tzzz.T20240245

Research Progress in Formation Mechanism and Prediction Model of Microporosity

GAO Zhiming, NIU Zhimin, GAO Zhongtang, ZHANG Geng, WANG Zhan, ZHANG Yuchen,

ZHANG Chuanwei

(College of Mechanical Engineering, Xi'an University of Science and Technology, Xi'an 710054)

Abstract: In recent years, aerospace, automotive and other fields have put forward demanding requirements for low-cost, lightweight, high-strength casting alloys, and microporosity of casting defects were current research hotspot. Various solidification defects of microporosity were comprehensively reviewed. The current formation mechanism of microporosity as well as the limitations and existing problems of prediction models were analyzed, and the future development direction of prediction models of solidification defects were prospected.

Key Words: Microporosity, Formation Mechanism, Prediction Model

在铸造工业中, 与微观孔洞相关的缺陷是导致铸件报废和返工的主要原因, 而微观孔洞是所有凝固产品(包括铸件、焊缝和增材制造的部件)中观察到的主要缺陷之一。凝固产品中的孔隙缺陷(如缩孔或气孔)会降低其力学性能和物理性能, 特别是抗拉强度、伸长率、抗疲劳性和耐腐蚀性^[1-2], 从而导致疲劳寿命降低、拉伸和蠕变能力下降, 以及受压部件可能出现泄漏等问题。研究发现, 微观孔洞是导致疲劳失效的主要因素, 其尺寸直接影响材料的疲劳寿命^[3]。通过对凝固过程中微观孔洞形成及预测进行模拟研究, 可实现高性能合金的要求。因此, 了解和准确预测微观孔洞缺陷的形成和演变对于提高凝固产品的质量以及降低因微观孔洞过多而导致成为废品的生产成本具有积极意义。

自20世纪60年代以来, 铸件孔隙率成为研究热点。LEE P D等^[4]、STEFANESCU D M^[5]对孔隙形成的理解和建模方面取得的进展进行了详细的阐述, 对比了5种孔隙模拟方法的优缺点, 改进了与糊状区流动有关的液体压降的描述, 发现新型或改进模型的热力

学近似, 此外, 还对凝固过程进行了原位孔隙测量。张昂等^[6]、朱鸣芳等^[7]对凝固组织和气孔演化的模拟方法也进行了详细的阐述, 包括相场法在求解枝晶、共晶组织和气孔等缺陷方面的研究; 纯扩散和对流作用下的枝晶生长、共晶凝固、多元合金中的热力学和动力学耦合、枝晶耦合凝固气孔的生长以及多尺度的耦合模拟等。

本研究综述了国内外关于微观孔洞凝固缺陷的形成机理、发展历程和凝固过程中的缺陷预测方法, 分析总结了当前微观孔洞的形成机理及预测模型的局限性和存在的问题, 并展望了未来的发展方向。

1 微观孔洞的形成机理

1.1 铸件中微观孔洞缺陷的形成机理

铸件在凝固过程中形成微观孔洞通常是由于凝固收缩和气体析出。由于部分合金的宽凝固温度范围特点, 合金在其凝固过程中存在液-固两相混合的糊状

收稿日期: 2024-06-06; 修订日期: 2024-10-08

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(5210042349)

第一作者简介: 高志明, 男, 1989年出生, 副教授, E-mail: gaozm@xust.edu.cn

引用格式: 高志明, 牛智民, 高中堂, 等. 微观孔洞形成机理及预测模型研究进展[J]. 特种铸造及有色合金, 2025, 45(7): 977-987.

GAO Z M, NIU Z M, GAO Z T, et al. Research progress in formation mechanism and prediction model of microporosity[J]. Special Casting & Nonferrous Alloys, 2025, 45(7): 977-987.

区,且液固两相有密度差,液-固相的转变过程会产生体积收缩,当缺少足够的金属液来补偿凝固区域的体积收缩时,会导致糊状区产生局部压力降,从而使凝固组织中形成缩孔(或缩松)^[8],其通常在凝固后期形成,此时固体枝晶网络具有低渗透率和刚性。因此,孔隙呈现出树突间剩余空间的弯曲形状。合金在熔化过程中一般溶解有一定量的气体,如铝合金和铜合金溶解的气体主要是氢^[9]。为合理表征铝合金凝固过程中气孔的形成和枝晶的相互作用,了解氢含量的演变至关重要,而氢含量的演变受固/液和气/液界面上氢分配的影响。

然而,目前对凝固过程中氢含量的实时准确测量仍然无法实现。KANG Y等^[10]考虑液固相变对孔隙形核和长大影响提出了一种详细的三相计算方法,认为由于气液表面张力的影响,孔隙在被液体包裹时呈球形增大,在与晶粒接触后,孔隙的生长空间受到复杂的枝晶网络限制,孔隙形状变得不规则。在真实的铸件中,微观孔洞通常呈非球型,见图1^[8]。缩孔形貌极不规则,通常被枝晶约束并占据枝晶臂之间的空间,呈枝晶形貌,见图1a;气孔表面圆滑,通常为球形或椭球型,见图1b。YOUSSEFIAN P等^[11]认为,孔隙的最终形状并不一定表明孔隙形成的根本原因,树突的存在与否仅表明了孔隙生长的时间。假设孔隙在凝固早期形成,无论孔隙的增长是由收缩还是气体驱动的,都呈圆形,因为孔隙会在液体中自由生长;若孔隙在凝固后期形成,由于周围枝晶对空隙的冲击,其将出现尖头(无论是收缩还是气体驱动)。然而,在实际的凝固组织缺陷中,单纯的缩孔和气孔十分罕见,两者通常发生在同一部位,共同造成孔洞。因此,本研究将其统称为“微观孔洞”,在不同的凝固条件下,二者中仅有一种机制起支配作用。

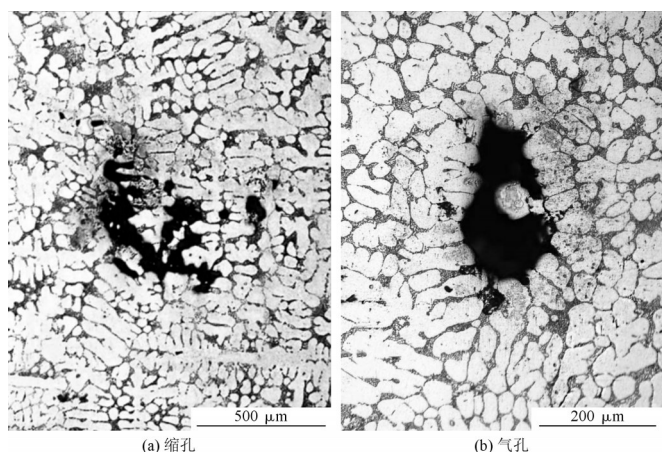


图1 A357合金凝固组织中的微观孔洞^[8]

Fig.1 Shrinkage cavity and gas hole in solidified structure of A357 alloy^[8]

基于现有的形核理论,微观孔洞的形核过程可分为非均质形核及均质形核。在铸造合金的实际凝固过程中,大部分的形核都是异质形核,这主要是因为铸件内壁表面的凹凸不平及不熔颗粒等杂质的存在。在铸件或者铸锭的凝固过程中,由于固液相的密度差引起体积收缩,因此其通过从邻近区域吸取液体来补偿或“补充”这种收缩;在宽凝固范围的合金中,液体通过小的枝晶间通道穿过糊状区来进行补缩,随着凝固过程的进行和枝晶通道尺寸的减小,补缩受阻,且由于溶解度低,被固相排斥的氢原子不断富集,导致液相中的气体浓度持续增加。孔隙的形核有两个条件,一是液态金属中必须含有过饱和气体,二是需要满足孔隙形核的能量条件。早期的研究者将微孔曲率半径简单处理为与微观组织尺寸和固相分数相关的函数^[5],但由于微孔形貌尺寸演化与凝固组织演化紧密相关,上述简化处理会导致微孔预测产生较大偏差。LIK D等^[12]描述了A356合金凝固过程中气孔形核过程中的温度范围、形核时固相分数和形核所需氢的过饱和度。CARRÉ A等^[13]描述了纯铝在凝固过程中气孔的形核和生长,但只是通过简化固相形状来关注被困气孔与固液界面之间的相互作用。伴随着凝固过程中气体的不断析出,凝固收缩和局部拉伸变形得不到外部液相的充分补充,都为气泡的持续生长提供了驱动力。而气泡生长还需要克服外部施加的阻力,包括环境压力、液体金属压头压力以及气-液表面张力^[12-14]。为提高计算效率,不考虑重力,孔隙的内压也受标准大气压和表面张力的影响。假设气泡生长所需的气体过饱和度很小,即孔洞的内外压力达到准平衡状态,见图2^[14],则:

$$P_g = (P_{atm} + P_{st} + P_\sigma) - P_{shr} - P_\epsilon \quad (1)$$

式中, P_g 为气泡内部压力; P_{atm} 为环境压力; P_{st} 为金属压头压力; P_σ 为气液表面张力; P_{shr} 为凝固收缩造成的压降; P_ϵ 为拉伸形变或热收缩引起的压降。气-液表面张力与气液表面能 σ 和孔洞的曲率半径 r_1 、 r_2 有关,则:

$$P_\sigma = \sigma(1/r_1 + 1/r_2) \quad (2)$$

由于枝晶间残余液相空间的约束,且微观孔洞的形核和生长主要集中在晶界处或分散在二次枝晶根部,随着冷却速率增加,微观孔洞呈细小弥散分布^[5]。对于球形的微观孔洞, $r_1 = r_2$,因此微观孔洞表面张力为 $P_\sigma = 2\sigma/r_1$;对于以柱状晶组织凝固的铸件来说,微观孔洞贴合枝晶间沟槽空隙, $r_1 \gg r_2$,微观孔洞表面张力 $P_\sigma = \sigma/r_1$ 。

微观孔洞的曲率半径与液相体积分数 f_l 、微观组织尺寸、微观组织形貌和初始气体含量等因素有关。对于柱状枝晶凝固,研究发现,二次枝晶臂之间的间距是

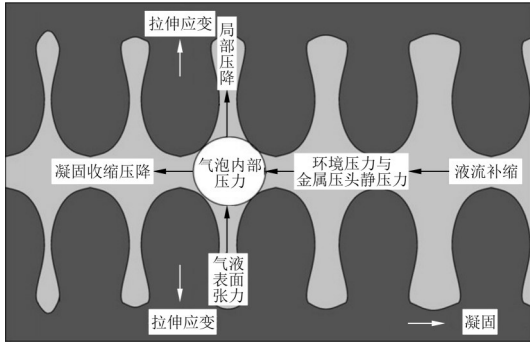

 图2 微观孔洞形成的压力条件^[14]

 Fig.2 Pressure condition for pore formation^[14]

微孔形核的合适位置^[14]。MEIDANI H等^[15]建立了一种相场模型来描述受枝状固体网络约束的孔隙形态,研究了枝晶臂间距(DAS)和固相分数对孔隙状态的影响,发现在狭窄的液体通道中受约束生长的孔隙比不受约束的孔隙具有更高的平均曲率、更大的压力和更小的体积。KUBO K等^[16]认为Al-4.5Cu合金组织中微观孔洞大小与一次枝晶间距相当, $r_1=\lambda_1/2$ 。赵海东等^[17]认为在柱状晶区域的微观孔洞更依赖于二次枝晶间距,因此微观孔洞的曲率半径为 $r(f_1, \lambda_1, \lambda_2)=\max(f_1\lambda_1/2; \lambda_2/2)$ 。LI X X等^[18]采用三维多组分元胞自动机(CA)模型,结合热力学计算,模拟和预测了Al-Cu-Li三元合金凝固过程中初生相组织的演变、形核和长大以及氢微孔隙的动力学增长,认为凝固过程中孔隙的等效半径与枝晶臂间距密切相关。

孔隙生长符合热力学理想气体方程:

$$P_p V_p = nRT \quad (3)$$

$$P_p = P_m + \frac{2\gamma}{r_p} \quad (4)$$

式中, T 和 P_p 分别为局部温度和压力; n 为氢气的物质的量; V_p 为孔隙体积; P_m 为外部金属压力; γ 为气液表面能; r_p 为孔隙半径。

近期,TIRYAKIOGLU M^[19]和 YOUSEFIAN P等^[11]基于经典形核理论及理论裂缝压力计算,发现即使Al液中有溶解的氢,孔隙在Al液中也不能形核。针对孔隙形成的原位研究结果表明,孔隙出现在低氢过饱和水平,完全绕过形核。并认为Al在凝固过程中孔隙形成的唯一机制是薄膜的存在,薄膜会由于压力降低或氢偏析而膨胀且孔隙的形成不涉及形核,是一个纯粹的生长过程。

此外,由于孔隙的形核问题是一个难点,很多模拟和预测没有考虑形核,是因为目前没有统一的解释来描述孔隙形核。有些研究以过饱和度、压力差等来刻画孔隙形核,这些只能归为一种简化处理条件。

1.2 气体在合金中的溶解度

溶解在液态金属中的气体对孔隙形成的影响可以从两方面考虑:①通过改变凝固金属的表面能来影响孔隙的稳定性;②增加液体的内压。对于铝合金而言,Al液与大气中的水蒸气发生反应,生成 Al_2O_3 和 H_2 ,氢在液相和固相中的溶解度 $H_{l,solu}$ 和 $H_{s,solu}$ 可用Sievert定律来表示:

$$H_{l,solu} = K_l \sqrt{P_g} \quad (5)$$

$$H_{s,solu} = K_s \sqrt{P_g} \quad (6)$$

式中, K_l 、 K_s 为氢在液相和固相中的溶解度系数。

随着凝固进行,固相将排出过饱和的氢,从而使液相中的氢富集,当液相中的氢含量超过 $H_{l,solu}$ 时,则会有:

$$H_l - H_{l,solu} = \Delta H_{nuc} > 0 \quad (7)$$

式中, H_l 为液相中的氢含量; ΔH_{nuc} 为氢气孔形核的临界过饱和度。

因此,当液相中的氢含量 H_l 超过其溶解度的时候,即 $\Delta H_{nuc} \geq 0$,微观孔洞即可形核开始生长,根据氢的过饱和量、压力与温度,微观孔洞形核时的体积分数 $f_{p,nuc}$ 可由下式得出:

$$f_{p,nuc} = (H_l - H_{l,solu}) f_l \rho_l \left(\frac{T}{P_g} \right) \quad (8)$$

式中, ρ_l 为液相密度。

秦颐鸣等^[20]通过对Al液氢溶解度的数值模拟,发现当压力、温度降低时,Al液中氢的溶解度也会随之而降低,并可通过对熔池高度、真空度的改变,来调整Al液中氢的溶解度至较低范围。SU Y Q等^[21]通过理论分析研究了氢在TiAl合金熔体中的溶解度,认为氢溶解度与合金熔体的活度系数有关,计算结果与试验结果一致;氢在TiAl熔体中的溶解度随氢分压的升高而增大,随温度的升高而减小。空位团簇的形成仍然是孔隙的形核机制,溶解的气体只是增加了孔隙的稳定性并推动了空隙的生长,任何由于溶解气体(如铝中的氢)而导致的表面能降低,只会使均匀形核变得更困难。

2 微观孔洞的预测模型综述

为了详细描述凝固进程中孔隙的形成与演变机制,需综合考量多个物理场的动态演变,合金溶质及原子氢的扩散与迁移行为,以及晶粒在多物理场中复杂交互作用下的形核与生长过程。同时,还需关注孔隙的形核及其在固相网络压迫下的形态变化与收缩过

程。这一系列因素的交织作用,使得数理模型的构建变得极为复杂,且对模拟参数精确性提出了更高要求。自21世纪初起,针对微孔缺陷的数值建模研究聚焦于3大核心模型:①基于氢扩散机制的微孔生长模型,该模型侧重于探讨氢元素扩散对微孔形成与扩展的调控作用;②随机模型,该模型通过引入随机性因素来模拟微孔缺陷在材料中的非均匀分布与动态变化;③相场模型,该模型则利用相场理论来捕捉并描述微孔缺陷在凝固或相变过程中形态与分布的演变规律。这3种模型共同构成了当前微孔缺陷数值建模研究的主要框架。相场法(PF)和元胞自动机(CA)是当前凝固组织模拟方法的主流,PF法是以金兹堡-朗道理论为基本思想,通过微分方程来实现微观组织的模拟计算,通过构建多相场模型,引入多相场变量、气泡相场变量,构建固态相变模型,实现了对共晶、包晶、气泡、固态相变等运动过程的数值模拟,但跟CA模型相比,相场模型通常需要相当高的计算量。相对于PF法来说,CA法起步较晚,但该方法是一种描述离散复杂系统演化规律的数学算法,严格地说,CA方法不仅属于数学建模,而且可以看作是一种数值计算方法^[22],因为其类似于有限差分法,将研究区域离散化。在计算材料科学中,CA法主要用于模拟金属凝固过程中具有介观尺度的相变,如枝晶生长、再结晶和位错模式演变,还可以模拟熔池凝固过程的微观组织,扩大了计算尺度,能跟踪到固液界面,直观地反映出凝固过程中温度、溶质浓度的变化^[23],但由于对计算量要求很高,很难应用于模拟预测较大的铸件。

目前,数值模拟预测凝固缺陷的方法已经成为与试验和理论研究并行发展的重要研究方法,如基于气体扩散的微孔生长模型和显微组织耦合气孔的生长模型。气体扩散控制气孔生长模型可以通过不同的初始含气量和凝固速率来预测显微气孔的体积分数,但无法反映显微组织和气泡形貌。近年来,有研究者将晶格玻尔兹曼(LBM)方法引入到CA模型和相场模型中,研究对流对枝晶生长及气孔等缺陷的影响^[24-28],将其流体概念化为一个由无数虚拟粒子组成的离散体系,每个粒子均经历着热运动,并通过相互作用机制实现能量与动量的交换,从而在宏观层面上展现出流体的流动特性。因此,LBM是一种将宏观与微观相结合的方法,具有微观颗粒特征,能够处理各种复杂的边界问题,非常适用于模拟复杂介质中的单相或者多相流体行为^[29-30]。

随着计算技术的发展,数值模拟作为一种重要的手段方法被广泛应用于研究合金凝固过程中微孔隙形成和显微组织的演变^[15,31-39]。基于CA法、PF法、LBM

等的各种数值模型被研究和开发,能够可视化显示合金凝固过程中的孔隙形核和生长,以及孔隙与凝固组织间的相互作用。

2.1 缩孔预测模型

STEFANESCU D M^[5]根据问题的物理假设,总结了缩孔缺陷预测的不同方法:①热模型;②热/体积计算模型;③热/流体流动模型;④运输/应力分析模型;⑤孔隙形核与长大模型。WU S P等^[40]在精细CA单元的基础上,设计了一种改进的钢锭顶部缩孔模拟方法,该方法避免了使用较粗的FDM网格造成的缩孔形貌畸变。

采用经验推导的Niyama准则定性地预测铸件缩孔率的存在和严重程度被广泛使用。由于Niyama准则不利用材料特性或凝固路径信息,因此用于检测缩孔率开始的临界值 N_y ,其值取决于铸造合金和工艺,必须根据经验确定,且Niyama准则不能用于定量地确定孔隙的数量,也不能区分气孔和缩孔。随后,CARLSON K D等^[41]提出了一种预测缩孔率的新方法,开发了一种无量纲的Niyama准则,基于达西定律建立了金属进给量的微分方程,该准则结合了糊状带物理和合金特性,可直接预测整个铸造过程中收缩孔隙的体积分数,并了解合金的固体分数-温度曲线和总凝固收缩率,但该方法不适用于复杂铸件宏观孔隙率的预测。JAKUMEIT J等^[42]采用BLJ准则能够基于温度随时间变化的数据,识别出材料在特定工艺过程中可能形成缩孔的两个不同区域,但该准则无法预测孔隙体积分数,且由于复杂形状的铸件几何系数计算困难,其在加工复杂形状方面的优势并不明显。

REIS A等^[43-44]采用流体体积(VOF)方法跟踪凝固过程中液体表面的运动,预测了缩孔的形成。发现在宽凝固范围的合金中,收缩缺陷倾向于在铸件的外表面形成,而在短凝固范围的合金中,这种缺陷倾向于以内部孔隙的形式出现。AWANO Y等^[45]对不同Al-Si合金铸件的缩孔形成进行了原位试验研究,发现在熔体中不含任何气体的情况下,缩孔和表面凹陷是在凝固初期形成的。WU M等^[46]采用四相欧拉体积平均法模拟宏观偏析和缩孔,该模型适用于形状简单的大型铸锭,不适用于形状复杂的小铸件。SUTARIA M P等^[47]、ZHOU J X等^[48]提出了另一种考虑馈电路径的方法,认为缩孔往往出现在进料路径交叉处。这种方法不计算缩孔的体积或形状,仅基于缩孔形成前的温度场和速度场,而缩孔实际上会影响温度。LING Y等^[49]通过数值模拟计算金属内部的压力,认为缩孔最可能存在的位置是在最小压力处或液体与其他介质的界面

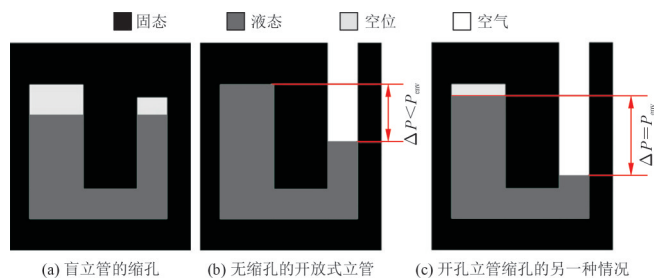

 图3 缩孔分布的3种情况^[49]

 Fig.3 Three kinds of states of shrinkage distribution^[49]

处,其规律见图3^[49],在大多情况下, P_{env} 为大气压力。

尽管孔隙率模型在预测铸件缩孔缺陷方面取得了一些成功,但很多模型侧重于对最终微观结构中不同大小孔隙的孔隙率和分布进行统计分析,不能提供缩孔孔隙和微观结构的图形视图,且缺乏一个考虑整个凝固系统中的缩孔并预测铸件表面沉降和内部孔隙率的模型。KHALAJZADEH V等^[50]应用实时射线照相技术来研究铸件上缩孔的形核、生长和分布,将缩孔细分为表面沉降和内部孔隙率,见图4^[50],建立了预测缩孔率形核和增长的计算模型,但该模型不适用于具有多个热点的复杂铸件几何形状,并且没有计算压力和进料速度分布,图中 g_s 为合金固相分数, $g_{s,sur}$ 为临界固相分数。

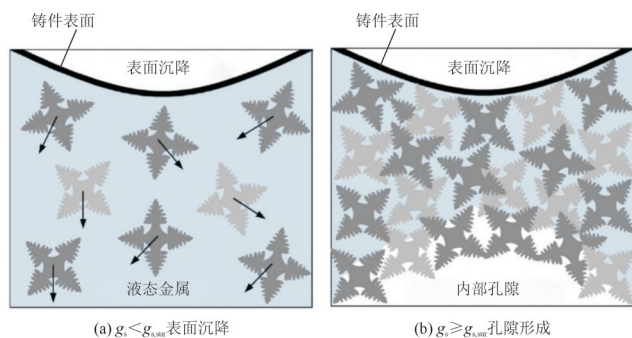

 图4 表面沉降和内部孔隙形成示意图^[50]

 Fig.4 Schematic diagram of surface sink and internal porosity formation^[50]

综上,虽然目前在预测铸件缩孔缺陷方面取得了一些进展,但是对于轻质合金来说,忽略气孔可能是一种过度简化。

2.2 气孔预测模型综述

2.2.1 CA方法

氢气孔是铸造轻质合金中最常见的凝固缺陷之一,其存在会导致铸件使用性能降低。近年来,研究者在铸件孔隙率模型的发展方面取得了一些进展。SEE D等^[51]以微观孔洞为基础,建立了一种新的元胞自动机(CA)模型,用于数值模拟凝固过程中晶粒与孔隙的三维形核和生长。与已有的数值计算方法相比,CA模型能反映孔洞生长与局部区域枝晶生长的相互作用,模

拟了凝固过程中孔洞的演变^[52-53]。ATWOOD R C等^[52]将固-液相的相互作用纳入Al-Si合金模型,发现当固相含量增大时,孔隙的形貌会发生相应改变,即两者之间相互作用会改变微观孔洞的表面曲率,因此孔隙的曲率半径(r_1)由固体边界形状和界面能决定,即

$$r_1 = \frac{r_1^0(1-f_s)}{2\cos\theta} \quad (9)$$

式中, θ 为固-液-气的接触角; r_1^0 为初始枝晶间距; f_s 为含有孔隙元胞的固相分数。

PEQUET C等^[1]开发出一种三维模型,该模型对半固态糊状区应用了动态网格细化的算法。CARLSON K D等^[41,54]开发的三维多相模型预测了合金凝固过程中的进料速度、液体压力和孔隙率分布,但是未区分表面沉降和内部孔隙形成。这些模型既适用于收缩孔隙,也适用于溶解气孔隙,提供了一种计算平均孔隙体积分数和代表性体积单元内孔隙最大尺寸的方法,然而,这些模型都忽略了凝固过程中的气泡运动。KARAGADDE S等^[55]提出了一种解决铝铸件凝固过程中气孔生长和运动的新方法,采用水平集方法来处理这种多相现象,认为该模型如果与凝固模型相结合,可以模拟被困在枝晶之间的非球形孔隙。

HU Y Y等^[35]将CA方法与反向传播神经网络机器学习模型相结合,模拟了铝合金的晶粒和孔隙度增长,且在不求解高维控制方程的情况下,模拟了凝固过程中气孔的形状和含量。

一般而言,使用CA方法模拟枝晶形态通常会失去其原有的晶体取向^[56-58],且很多模型仅限于二元合金系统,目前,对三元铝基合金凝固过程中由初生枝晶和不规则共晶组成的显微组织以及微孔隙的演变进行的模拟研究报道较少。GU C等^[2,34]和HU M D等^[59]建立了结合CA技术和FDM技术的二维多相模型来研究铝合金中氢气孔隙的形成,见图5^[34,59],但后者模型采用了三元亚共晶Al-Si-Mg合金,并考虑了枝晶生长和共晶凝固两个阶段,发现共晶凝固阶段对最终微孔的形貌和数量有显著影响。

元胞自动机模型可预测二元及多元合金凝固组织中的孔隙大小、固相、形貌演变及分布,还可以得到初始含气量、合金含量及凝固时间等因素对合金凝固组织的影响。但实际的凝固过程往往涉及复杂的理化和力学相互作用,以及非均匀的温度场、溶质场等条件,因此元胞自动机预测模型仍需改善。目前CA模型存在的问题主要有3方面。

(1)计算资源与时间需求大 CA模拟凝固过程需处理大量的元胞状态更新和相互作用,通常需要大量

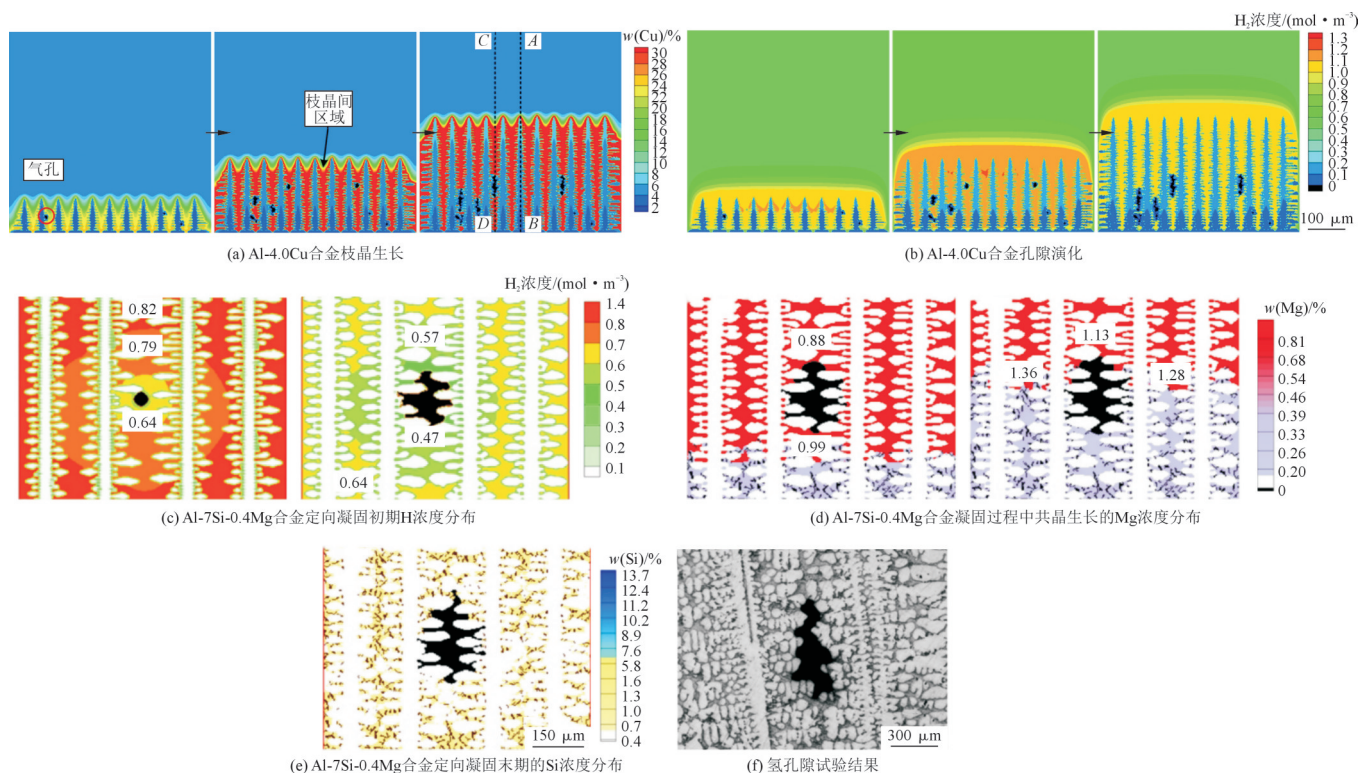

 图5 CA模型定向凝固过程中气孔与枝晶的形态演变^[34,59]

Fig.5 Morphological evolution of pores and dendrites in CA model during directional solidification

的计算资源和时间。随着模拟区域和精度的增加,计算成本会急剧上升,限制了模型在更大规模和更高精度模拟中的应用。

(2)缺乏多物理场耦合能力 CA模型往往只关注其中一个或少数几个物理场,缺乏全面的多物理场耦合能力,这限制了模型在复杂凝固过程模拟中的应用范围和准确性。

(3)模型扩展性和灵活性不足 难以适应新的模拟需求和挑战,需要不断对模型进行改进和扩展,以提高其适应性和实用性。

2.2.2 PF方法

采用相场法可以从热力学的角度来研究凝固机理。现有的基于相场法的孔隙模拟方法主要有:FELBERBAUM M等^[60]提出的守恒相场建模(PFM)和MEIDANI H等^[61]提出固-液-气三相PFM,但在模拟中没有考虑气泡膨胀引起的液体流动,从而没有考虑氢气的对流输运,因此只讨论模拟的稳态解。采用守恒PFM模型用于追踪气-液界面的演化过程,可用来研究液相中气孔的生长和变形,固-液-气三相PFM模型侧重于求解气孔前沿的枝晶生长问题。

对于气液两相流守恒的PFM模型来说,在只有扩散通量的情况下,相场方程可以表达为:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\nabla \cdot j_d = -\nabla \cdot (M_c \nabla \varphi) \quad (10)$$

式中, j_d 和 M_c 分别为扩散通量和界面迁移率; φ 为相场的辅助变量; ∇ 为拉普拉斯算子。

当考虑需要考虑相分离通量 j_s 和外界流场引起的对流通量时,得相场模型为^[62]:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \nabla \cdot (v \varphi) = \nabla \cdot (M_c \nabla \varphi) - j_s \quad (11)$$

在该模型中,通常使用LBM来计算流场速度,这时所受到的外力矢量 F 与枝晶的求解方式有所不同,这是由气-液两相密度差异所引起的浮力以及气泡边界上的表面张力所引起的。

DU L F等^[63]和ZHANG A等^[37]分别采用相场法研究了纯铝凝固过程中气泡形核和长大的微观组织演变过程和氢气孔与微观结构演变的相互作用,见图6,前者引入了压力修正方程,后者建立了两种模型来计算流场,研究发现气泡与液相熔体之间的压力差会显著影响气体原子在气液界面附近的扩散,从而导致气泡生长速度的变化。气孔对固相的影响主要取决于固液界面形貌、气孔尺寸及气孔中心与枝晶尖端之间的相对位置。

现有的三相PFM模型未考虑凝固过程固相和氢气孔的形核以及固相与气相之间的相互作用,并且忽略了固相对气孔的影响,因此要研究凝固过程中固-液-气之间的相互作用还需要更加严谨的物理模型。然而,多相相互作用问题仍然是很大挑战,因为大多数模

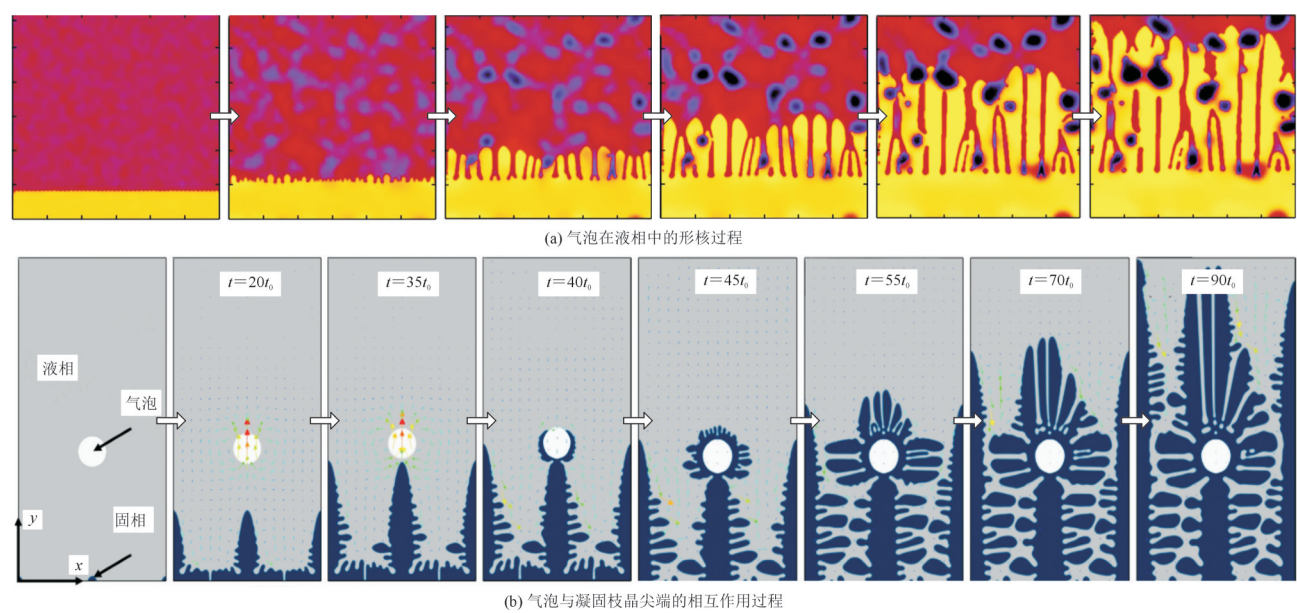


图6 PFM模型气孔与多相之间的相互作用^[37,63]

Fig.6 Interactions between pores and multi-phase in PFM models^[37,63]

型都是基于纯扩散条件,而实际条件下很少出现无对流的情况,这使得多相相互作用问题的实际适用性受到质疑。由于耦合的质量和动量输运增加了长度和时间尺度,这与纯扩散条件下的模式有很大的不同。为了解决增加的尺度,即液气两相流动(熔体对流和气泡上升),主要有两种数值方法,即 Navier Stokes 求解法和晶格玻尔兹曼法(LBM)。考虑到复杂的枝晶边界和气泡界面的柔性变形能力,基于动力学的LBM具有边界设置容易和良好的稳定性,显示出更大的优势。因此LBM和PFM的结合引起了研究者对模拟对流下晶体生长的广泛兴趣。

2.2.3 LBM方法

近几十年来,晶格玻尔兹曼(LBM)模型在气液固共存体系中多相流动的模拟中受到了广泛关注^[64-65]。LBM是一种基于离散网格的数值模拟方法,其将连续介质近似离散为离散的空间和时间步长网格,并利用颗粒的微观速度分布函数来描述流体动力学行为,具有并行性强、易于处理复杂几何形状和边界条件等特点。为了研究气泡在凝固过程中的运动和聚并行为,将CA技术与多相LB模型相结合,陈海楠等^[66]建立了CA-LBM模型来反映凝固过程中气孔在枝晶间挤压变形以及在液相流动等物理现象。但是,LBM属于无量纲模型,在提高气液两相流的密度比及量化计算方面仍需深入研究。吴伟等^[67]和SUNDK等^[27]利用LBM-CA耦合模型对凝固过程中的枝晶生长和气孔形成进行了数值模拟,见图7。前者认为气-液相互作用系数越大,气孔生长速度越快,气孔的平衡半径也越大,但没有考

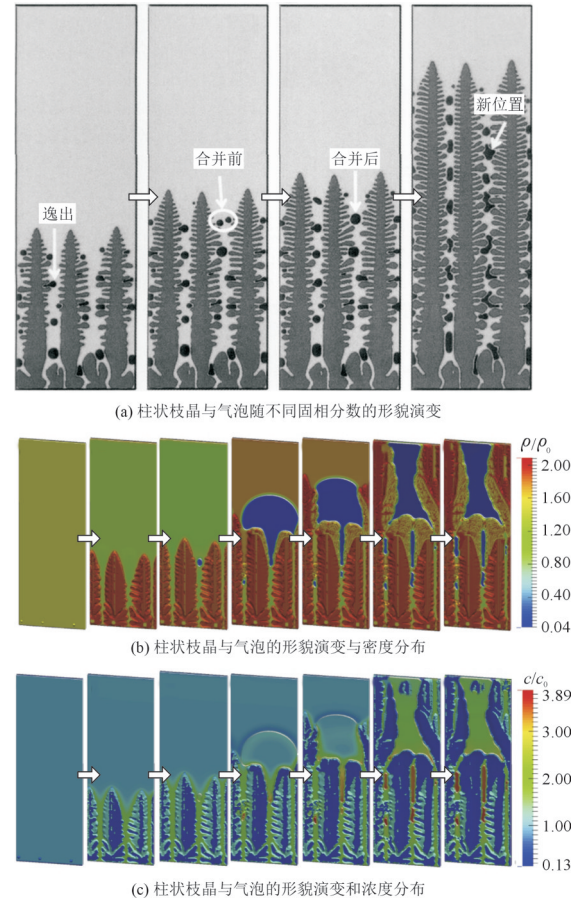


图7 CA-LBM模型气泡与枝晶之间的相互作用^[27,67]

Fig.7 Interaction between pores and dendrites in CA-LBM model^[27,67]

虑氢在固/液界面的分配效应,不能恰当地描述凝固过程中氢浓度的演变。后者将CA-LBM模型推广到三维系统,且考虑了密度分布和浓度分布。但由于LBM模

型采用无量纲参数计算,并没有针对冷却速率和初始氢含量等因素对微观孔洞的形成规律进行定量模拟研究。

ZHANG Q Y等^[68]建立了一个耦合晶格玻尔兹曼-元胞自动机-有限差分(LB-CA-FD)模型,用于二维和三维模拟Al-4Cu合金凝固过程中氢微孔隙形成的过程,将氢分配的影响纳入固液界面,详细分析了二维和三维模拟结果的差异。LEE W等^[28]建立了多相晶格玻尔兹曼方法-元胞自动机(LBM-CA)模型,研究了凝固Al-Cu合金枝晶生长和孔隙演化的微观组织形态,认为由于生长时间不足,在较高的冷却速率下,孔隙尺寸减小。显然,初始氢浓度越高、孔隙率越高,然而,这个模型并没有考虑到凝固收缩形成的孔隙,只考虑了气孔。最近,LU W J等^[24]使用二维耦合晶格玻尔兹曼-元胞自动机-有限差分(LB-CA-FD)模型来模拟润湿性对树突和孔隙形态的影响,发现润湿性差时发生固气耦合生长,润湿性好时气孔被生长的枝晶吞没。

上述研究都是采用将CA技术与多相LB模型相结合的方法,而利用PF方法来进行模拟的研究报道相对较少。TAKAKI T等^[69]用相场法和晶格玻尔兹曼法耦

合模型研究了自然对流对Al-3Cu合金在三维向上定向凝固过程中形成的枝晶形态的影响,并与二维(2D)模拟进行了比较,认为大于临界值的向上流动导致枝晶生长不稳定,形成羽流,产生凝固缺陷。ZHANG A等^[70]建立了固-液-气多相场晶格玻尔兹曼模型来描述凝固过程中复杂的多相相互作用,该模型成功地描述了气体孔隙度与镁枝晶之间的相互作用,量化了相分数对熔体过冷度、界面迁移系数和内部气泡压力等特征参数的依赖关系,探讨了多相平衡的问题。

ZHU C S等^[26]和朱昶胜等^[71]提出了一种多相场耦合晶格玻尔兹曼方法(PF-LBM)来模拟SCN-0.24%合金和Al-Cu合金气孔与枝晶间的相互作用,见图8,前者设置了不同的温度梯度,后者在3个不同区域设置了定向生长的枝晶核,模型中考虑了三相。结果表明,在柱状晶的定向生长过程中,气泡首先在枝晶的最底部缓慢析出,然后上升,不同的温度梯度会影响气孔的大小以及与枝晶间的相互作用,但没有对微观组织的形态演变进行模拟预测,且忽略了枝晶和气泡的形核过程。因此,结合PFM和LBM求解固液气相互作用过程中的液气两相流动成为解决多物理问题的关键。

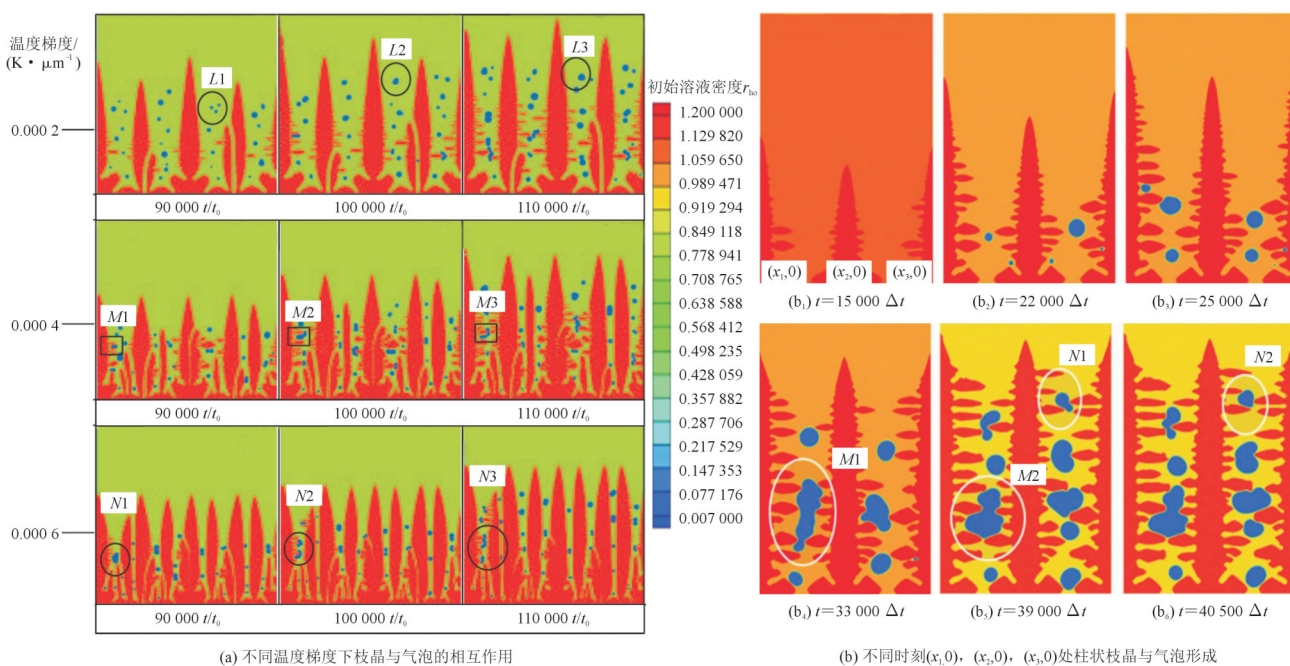


图8 PF-LBM模型模拟气泡与枝晶之间的相互作用^[26,71]

Fig.8 Interaction between pores and dendrites in PF-LBM model^[26,71]

在过去的二十多年里,研究通过各种理论方法^[72-73]、试验方法^[74-76]和数值方法^[4,51,53]对微孔隙的形成进行了研究。理论方法有助于预测微孔隙的位置和大小,但不能提供微观结构的具体形态。X射线断层扫描等技术的发展为验证孔隙形成理论和固化材料的实

际现象提供了研究手段。然而,由于合金的熔点普遍较高,很难观察到微观组织的形态演变。即使有原位观察设备^[77],但试样尺寸仅限于薄板。因此,对铸件组织进行数值模拟预测是研究铸件组织演变的必要手段。

3 结论与展望

关于凝固组织中微观孔洞的预测模型已经有了较快发展,创建了基于元胞自动机方法的预测模型,得到了很多重要信息,可以更加清楚地理解相变过程的内在机理。但是目前的预测模型中还存在着亟待解决的问题:①二维模型应向三维模型发展;②应考虑气体和溶质的扩散;③凝固收缩不应被忽略;④应考虑浮力、马兰戈尼对流以及其他外力;⑤应考虑共晶凝固的过程。

(1)多尺度模拟 现有的微观孔洞的多尺度耦合预测模型主要是流场、温度场和浓度场的宏观模拟和晶粒组织CA模拟的耦合。应扩大多尺度耦合的范围,如将分子动力学、微观尺度和介观尺度CA、FE或FD的模拟方法进行耦合。

(2)多物理场耦合模拟 近年来发展的许多凝固新技术通过施加超声、磁场、电流、脉冲、高压等来改善凝固组织。为了描述这些凝固过程,需要在模型中耦合磁场、电流场、外力场等因素对三场和相变及孔洞的影响。

(3)发展非平衡凝固的微观孔洞模型 近年来的许多试验研究发现,通过快速凝固、深过冷、超常凝固等方法,可使传统材料获得一些特殊的显微组织和优异性能。但目前的微孔模型一般都基于近平衡凝固的假设条件。因此,有必要发展能够描述快速凝固和其他极端凝固条件下显微组织演化的非平衡凝固微孔模型。

(4)耦合凝固/熔化效应 目前凝固组织的微观孔洞模型只能描述单纯的凝固过程,没有耦合熔化效应。但对于一般的中低速凝固过程,在糊状区的重熔效应是不可避免的。如组织粗化和枝晶臂熔断等现象都是在糊状区重熔和再凝固共同作用的结果。此外,如定向凝固、增材制造、焊接等许多工艺过程,都同时包括凝固和熔化效应。因此,有必要将目前描述单纯凝固过程的微孔模型进行推广,建立耦合凝固/熔化效应的微孔模型,对糊状区重熔/再凝固的显微组织演化和微观偏析进行模拟研究等。

(5)基础研究和实际应用 组织模拟本质上属于基础研究的范畴,但同时也要注重面向实际应用问题,应结合工业实际开展建模与模拟研究。

(6)组织模拟和性能预测 组织模拟的最终目标是实现对材料性能的预测和控制,今后要加强组织模拟和性能预测控制的关联与结合。

参 考 文 献

[1] PEQUET C, RAPPAZ M, GREMAUD M, et al. Modeling of microporosity, macroporosity, and pipe-shrinkage formation during

the solidification of alloys using a mushy-zone refinement method: Applications to aluminum alloys [J]. *Metallurgical and Materials Transactions*, 2002, A33(7): 2 095-2 106.

[2] GU C, RIDGEWAY C D, CINKILIC E, et al. Predicting gas and shrinkage porosity in solidification microstructure: A coupled three-dimensional cellular automaton model [J]. *Journal of Materials Science & Technology*, 2020, 49(1): 91-105.

[3] 王兵, 王俊升. 铝合金凝固过程中缺陷预测模型研究进展 [J]. *航空制造技术*, 2022, 65(5): 76-86.

[4] LEE P D, HUNT J D. Hydrogen porosity in directionally solidified aluminium-copper alloys: A mathematical model [J]. *Acta Materialia*, 2001, 49(8): 1 383-1 398.

[5] STEFANESCU D M. Computer simulation of shrinkage related defects in metal castings-A review [J]. *International Journal of Cast Metals Research*, 2005, 18(3): 129-143.

[6] 张昂, 郭志鹏, 蒋斌, 等. 合金凝固组织和气孔演变相场模拟研究进展 [J]. *中国有色金属学报*, 2021, 31(11): 2 976-3 009.

[7] 朱鸣芳, 汤倩玉, 张庆宇, 等. 合金凝固过程中显微组织演化的元胞自动机模拟 [J]. *金属学报*, 2016, 52(10): 1 297-1 310.

[8] 高志明, 介万奇, 刘永勤, 等. 微观孔洞和逆偏析缺陷的形成机理与耦合预测研究进展 [J]. *金属学报*, 2018, 54(5): 717-726.

[9] TALBOT D E J. Effects of hydrogen in aluminium, magnesium, copper, and their alloys [J]. *International Metallurgical Reviews*, 2013, 20(1): 166-184.

[10] KANG Y, ZHAN X H, HE S, et al. Porosity-grain growth relationships in the laser beam deep penetration welding of 6061 aluminum alloy [J]. *Journal of Adhesion Science and Technology*, 2021, 35(13): 1 372-1 392.

[11] YOUSEFIAN P, TIRYAKIOGLU M. Pore formation during solidification of aluminum: Reconciliation of experimental observations, modeling assumptions, and classical nucleation theory [J]. *Metallurgical and Materials Transactions*, 2018, A49(2): 563-575.

[12] LI K D, CHANG E. Mechanism of nucleation and growth of hydrogen porosity in solidifying A356 aluminum alloy: An analytical solution [J]. *Acta Materialia*, 2004, 52(1): 219-231.

[13] CARRÉ A, BÖTTGER B, APEL M, et al. Phase-field modelling of gas porosity formation during the solidification of aluminium [J]. *International Journal of Materials Research*, 2010, 101(4): 510-514.

[14] GAO Z M, JIE W Q, LIU Y Q, et al. Solidification modelling for coupling prediction of porosity and segregation [J]. *Acta Materialia*, 2017, 127(1): 277-286.

[15] MEIDANI H, JACOT A. Phase-field simulation of micropores constrained by the dendritic network during solidification [J]. *Acta Materialia*, 2011, 59(8): 3 032-3 040.

[16] KUBO K, PEHLKE R D. Mathematical modeling of porosity formation in solidification [J]. *Metallurgical Transactions*, 1985, B16(2): 359-366.

[17] 赵海东, 吴朝忠, 李元元, 等. 垂直向上凝固Al-Cu铸件中微观孔洞形成的数值模拟 [J]. *金属学报*, 2008, 44(11): 1 340-1 347.

[18] LI X X, YANG X H, XUE C P, et al. Hydrogen microporosity evolution and dendrite growth during long solidification of Al-Cu-Li alloys: Modeling and experiment [J]. *Journal of Materials Processing Technology*, 2023, 321(3): 118-135.

[19] TIRYAKIOGLU M. The effect of hydrogen on pore formation in

- aluminum alloy castings: Myth versus reality [J]. *Metals*, 2020, 10(3):368-385.
- [20] 秦颐鸣, 庄林忠, 蒙志保, 等. 真空条件下Al液中氢溶解度的计算[J]. *特种铸造及有色合金*, 2020, 40(10): 1131-1134.
- [21] SU Y Q, LIU X W, LUO L S, et al. Hydrogen solubility in molten TiAl alloys [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2010, 35(15): 8008-8013.
- [22] ABDELLAOUI M, JAI A E, SHILLOR M, et al. Cellular automata model for a contact problem [J]. *Mathematical and Computer Modelling*, 2002, 36(1): 1099-1114.
- [23] 李继红, 徐嵩彦, 汪强, 等. 元胞自动机法模拟Al-Cu单相合金凝固组织[J]. *兵器材料科学与工程*, 2014, 37(3): 8-12.
- [24] LU W J, XING H, HU R, et al. The effect of wettability on gas porosity formation during directional solidification of alloys: Insights from lattice Boltzmann-cellular automata simulations [J]. *Journal of Materials Research and Technology*, 2023, 22(1): 424-431.
- [25] NABAVIZADEH S A, ESHRAGHI M, FELICELLI S D, et al. A comparative study of multiphase lattice Boltzmann methods for bubble-dendrite interaction during solidification of alloys [J]. *Applied Sciences*, 2019, 9(1):1-24.
- [26] ZHU C S, WANG L J, GAO Z H, et al. Exploration of the coupled lattice Boltzmann model based on a multiphase field model: A study of the solid-liquid-gas interaction mechanism in the solidification process [J]. *Chinese Physics*, 2024, B33(1):1-11.
- [27] SUN D K, ZHU M F, WANG J, et al. Lattice Boltzmann modeling of bubble formation and dendritic growth in solidification of binary alloys [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2016, 94(1): 474-487.
- [28] LEE W J, BAE J H, LEE H W, et al. Numerical simulation of dendritic growth and porosity evolution in solidification of Al-Cu alloy with lattice Boltzmann-Cellular automata method [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2022, 929(1):1-11.
- [29] CHEN H N, SUN D K, DAI T, et al. Modeling of the interaction between solidification interface and bubble using the lattice Boltzmann method with large density ratio [J]. *Acta Physica Sinica*, 2013, 62(12): 1205-1216.
- [30] GUO Z, ASINARI P, ZHENG C, et al. Lattice Boltzmann equation for microscale gas flows of binary mixtures [J]. *Physical Review*, 2009, E79(2): 702-711.
- [31] SASIKUMAR R, WALKER M J, SAVITHRI S, et al. Initiation of microporosity from pre-existing bubbles: A computational study [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2008, 16(3): 35-51.
- [32] REUTHER K, RETTENMAYR M. Perspectives for cellular automata for the simulation of dendritic solidification - A review [J]. *Computational Materials Science*, 2014, 95(1): 213-220.
- [33] ZHU M F, LI Z Y, AN D, et al. Cellular automaton modeling of microporosity formation during solidification of aluminum alloys [J]. *ISIJ International*, 2014, 54(2): 384-391.
- [34] GU C, WEI Y H, YU F Y, et al. Cellular automaton study of hydrogen porosity evolution coupled with dendrite growth during solidification in the molten pool of Al-Cu alloys [J]. *Metallurgical and Materials Transactions*, 2017, A48(9): 4314-4323.
- [35] HU Y Y, XIE J, LIU Z X, et al. CA method with machine learning for simulating the grain and pore growth of aluminum alloys [J]. *Computational Materials Science*, 2018, 142(1): 244-254.
- [36] ZHANG Q Y, WANG T T, YAO Z J, et al. Modeling of hydrogen porosity formation during solidification of dendrites and irregular eutectics in Al-Si alloys [J]. *Materialia*, 2018, 4(1): 211-220.
- [37] ZHANG A, DU J L, ZHANG X P, et al. Phase-field modeling of microstructure evolution in the presence of bubble during solidification [J]. *Metallurgical and Materials Transactions*, 2020, A51(3): 1023-1037.
- [38] KARAGADDE S, DUTTA P. A comparison of time-scales governing the interaction and growth of hydrogen bubbles with a solidifying front [J]. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 2016, 79(1): 16-20.
- [39] WU M, LUDWIG A, KHARICHA A, et al. A four phase model for the macrosegregation and shrinkage cavity during solidification of steel ingot [J]. *Applied Mathematical Modelling*, 2017, 41(1): 102-120.
- [40] WU S P, LIU D R, GUO J J, et al. Influence of process parameters on CET in Ti-Al alloy ingot with consideration of shrinkage cavity formation: A computer simulation [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2007, 441(1): 267-277.
- [41] CARLSON K D, BECKERMANN C. Prediction of shrinkage pore volume fraction using a dimensionless niyama criterion [J]. *Metallurgical and Materials Transactions*, 2009, A40(1): 163-175.
- [42] JAKUMEIT J, JANA S, BÖTTGER B, et al. Simulation-based prediction of micro-shrinkage porosity in aluminum casting: Fully-coupled numerical calculation vs. criteria functions [J]. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 2012, 27(1): 131-139.
- [43] REIS A, HOUBAERT Y, XU Z, et al. Modeling of shrinkage defects during solidification of long and short freezing materials [J]. *Journal of Materials Processing Technology*, 2008, 202(1): 428-434.
- [44] REIS A, XU Z, TOL R V, et al. Modelling feeding flow related shrinkage defects in aluminum castings [J]. *Journal of Manufacturing Processes*, 2012, 14(1): 1-7.
- [45] AWANO Y, MORIMOTO K. Shrinkage morphology of Al-Si casting alloys [J]. *International Journal of Cast Metals Research*, 2004, 17(1): 107-114.
- [46] WU M, KHARICHA A, LUDWIG A, et al. Using four-phase Eulerian volume averaging approach to model macrosegregation and shrinkage cavity [J]. *Materials Science and Engineering*, 2015, 84(1):6-14.
- [47] SUTARIA M P, GADA V H, SHARMA A K, et al. Computation of feed-paths for casting solidification using level-set-method [J]. *Journal of Materials Processing Technology*, 2012, 212(1): 1236-1249.
- [48] ZHOU J X, WANG M, YIN Y J, et al. Feed paths and hot spots computation based on a time gradient method in casting [J]. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2017, 93(1): 261-272.
- [49] LING Y, ZHOU J X, NAN H, et al. A shrinkage cavity prediction model for gravity castings based on pressure distribution: A casting steel case [J]. *Journal of Manufacturing Processes*, 2017, 26(1): 433-445.

- [50] KHALAJZADEH V, GOETTSCH D D, BECKERMANN C, et al. Real-time X-ray radiography and computational modeling of shrinkage porosity formation in aluminum alloy castings [J]. *Metallurgical and Materials Transactions*, 2019, A50(2): 757-771.
- [51] SEE D, ATWOOD R C, LEE P D, et al. A comparison of three modeling approaches for the prediction of microporosity in aluminum-silicon alloys [J]. *Journal of Materials Science*, 2001, 36(14): 3 423-3 435.
- [52] ATWOOD R C, LEE P D. Simulation of the three-dimensional morphology of solidification porosity in an aluminium-silicon alloy [J]. *Acta Materialia*, 2003, 51(18): 5 447-5 466.
- [53] LEE P D, ATWOOD R C, DASHWOOD R J, et al. Modeling of porosity formation in direct chill cast aluminum-magnesium alloys [J]. *Materials Science and Engineering*, 2002, A328(1): 213-222.
- [54] CARLSON K D, LIN Z, BECKERMANN C, et al. Modeling the effect of finite-rate hydrogen diffusion on porosity formation in aluminum alloys [J]. *Metallurgical and Materials Transactions*, 2007, B38(4): 541-555.
- [55] KARAGADDE S, SUNDARRAJ S, DUTTA P, et al. Modeling growth of hydrogen bubbles in aluminum castings using the level-set method [J]. *Scripta Materialia*, 2009, 61(2): 216-229.
- [56] PAN S Y, ZHU M F. A three-dimensional sharp interface model for the quantitative simulation of solutal dendritic growth [J]. *Acta Materialia*, 2010, 58(1): 340-352.
- [57] CHEN R, XU Q Y, LIU B C, et al. A modified cellular automaton model for the quantitative prediction of equiaxed and columnar dendritic growth [J]. *Journal of Materials Sciences and Technology*, 2015, 30(12): 1 311-1 320.
- [58] ZHU M F, STEFANESCU D M. Virtual front tracking model for the quantitative modeling of dendritic growth in solidification of alloys [J]. *Acta Materialia*, 2007, 55(5): 1 741-1 755.
- [59] HU M D, WANG T T, FANG H, et al. Modeling of gas porosity and microstructure formation during dendritic and eutectic solidification of ternary Al-Si-Mg alloys [J]. *Journal of Materials Science & Technology*, 2021, 76(1): 76-85.
- [60] FELBERBAUM M, JACOT A. A phase field model for a geometrical description of micropores constrained by a solid network [J]. *The Minerals, Metals and Materials Society*, 2009, 12(1): 369-376.
- [61] MEIDANI H, DESBIOLLES J L, JACOT A, et al. Three-dimensional phase-field simulation of micropore formation during solidification: Morphological analysis and pinching effect [J]. *Acta Materialia*, 2012, 60(6): 2 518-2 527.
- [62] BECKERMANN C, DIEPERS H J, STEINBACH I, et al. Modeling melt convection in phase-field simulations of solidification [J]. *Journal of Computational Physics*, 1999, 154(2): 468-496.
- [63] DU L F, WANG L L, ZHENG B, et al. Phase-field modeling of microstructure evolution during solidification in presence of gas bubble [J]. *Computational Materials Science*, 2016, 114(1): 94-108.
- [64] ZHANG Q Y, SUN D K, ZHU M F, et al. A multicomponent multiphase lattice Boltzmann model with large liquid-gas density ratios for simulations of wetting phenomena [J]. *Chinese Physics*, 2017, B26(8): 4 701-4 710.
- [65] SUKOP M, JR D. Lattice Boltzmann modeling: An Introduction for geoscientists and engineers [Z]. JSTOR, 2006.
- [66] 陈海楠, 孙东科, 戴挺, 等. 凝固前沿和气泡相互作用的大密度比格子玻尔兹曼方法模拟 [J]. *物理学报*, 2013, 62(12): 502-513.
- [67] 吴伟, 孙东科, 戴挺, 等. 枝晶生长和气泡形成的数值模拟 [J]. *物理学报*, 2012, 61(15): 39-47.
- [68] ZHANG Q Y, SUN D K, PAN S Y, et al. Microporosity formation and dendrite growth during solidification of aluminum alloys: Modeling and experiment [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2020, 146(1): 1-12.
- [69] TAKAKI T, SAKANE S, OHNO M, et al. Large-scale phase-field lattice Boltzmann study on the effects of natural convection on dendrite morphology formed during directional solidification of a binary alloy [J]. *Computational Materials Science*, 2020, 171(1): 1-8.
- [70] ZHANG A, GUO Z P, JIANG B, et al. Multiphase and multiphysics modeling of dendrite growth and gas porosity evolution during solidification [J]. *Acta Materialia*, 2021, 214(1): 1-14.
- [71] 朱昶胜, 雷瑶, 雷鹏, 等. PF-LBM耦合模型下Al-Cu合金的枝晶生长和气泡形成 [J]. *兰州理工大学学报*, 2024, 50(1): 19-26.
- [72] SIGWORTH G K, WANG C. Mechanisms of porosity formation during solidification: A theoretical analysis [J]. *Metallurgical Transactions*, 1993, B24(2): 349-364.
- [73] HAN Q, VISWANATHAN S. Hydrogen evolution during directional solidification and its effect on porosity formation in aluminum alloys [J]. *Metallurgical and Materials Transactions*, 2002, A33(7): 2 067-2 072.
- [74] LEE P D, HUNT J D. Hydrogen porosity in directional solidified aluminium-copper alloys: in situ observation [J]. *Acta Materialia*, 1997, 45(10): 4 155-4 169.
- [75] MURPHY A G, BROWNE D J, HOULTZ Y, et al. In situ X-ray observations of gas porosity interactions with dendritic microstructures during solidification of Al-based alloys [J]. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 2016, 117(1): 1-6.
- [76] BHAGAVATH S, CAI B, ATWOOD R, et al. Combined deformation and solidification-driven porosity formation in aluminum alloys [J]. *Metallurgical and Materials Transactions*, 2019, A50(10): 4 891-4 899.
- [77] SHUAI S, WANG J, PHILLION A, et al. Synchrotron tomographic quantification of the influence of Zn concentration on dendritic growth in Mg-Zn alloys [J]. *Acta Materialia*, 2019, 165(1): 751-752.

(编辑:刘晨辉)

欢迎登陆期刊官网

投稿、查稿、审稿

2024年起,《特种铸造及有色合金》杂志新版网站正式上线,期刊论文彩色版本均可在网站免费在线阅读或下载pdf文件,并可体验AI导读功能,网址:www.special-cast.com,欢迎访问!