

高温合金定向凝固数值模拟研究进展

任 能¹ 杨绿伟¹ 李 军^{1,2} 曾 龙¹ 夏明许^{1,2} 李建国^{1,2}
(1.上海交通大学材料科学与工程学院; 2.上海交通大学上海市先进高温材料及其精密成形重点实验室)

摘 要 高温合金定向凝固过程中存在着传热、流动、传质的宏观传输,凝固收缩、补缩,溶质再分配、迁移,晶粒生长和熔化等行为共同作用下的多相共存、多物理场耦合作用、跨尺度的复杂过程,导致复杂形状叶片铸件中频繁出现杂晶、雀斑、小角度晶界、条纹晶等缺陷。由于过程的不透明以及合金的高成本,发展数值模拟技术对深入认识高温合金定向凝固过程的机理、建立精准有效的控制方法具有重要意义。综述了近年来在镍基高温合金定向凝固数值模拟领域相关的研究进展,并对其应用进行了展望。

关键词 定向凝固;高温合金;数值模拟;多物理场;微观组织

中图分类号 G353.11 文献标志码 A

DOI:10.15980/j.tzzz.2023.010.004

开放科学(资源服务)标识码(OSID):

Research Progress in Numerical Simulation of Superalloys during Directional Solidification

Ren Neng¹, Yang Lüwei¹, Li Jun^{1,2}, Zeng Long¹, Xia Mingxu^{1,2}, Li Jianguo^{1,2}
(1.School of Materials Science and Engineering, Shanghai Jiaotong University; 2.Shanghai Key Laboratory of Advanced High Temperature Materials and Precision Forming, Shanghai Jiaotong University)

Abstract: In the directional solidification of superalloy, there exists a complicated process of multi-phase coexistence, multi-physical field interaction and cross-scale interaction under the synergy of heat transfer, flow, mass transfer, solidification shrinkage, reinforcement, solute redistribution, migration, grain growth and melting, leading to frequent defects such as mixed crystal, freckle, small angle grain boundary and striation in blade castings with complex shape. Due to the oblique process and high cost of superalloys, numerical simulation technique is of great significance for the in-depth understanding and establishing specific and effective control of directional solidification process. The research progress in numerical simulation of superalloys during directional solidification were reviewed, and the application was prospected.

Key Words: Directional Solidification, Superalloy, Numerical Simulation, Multi-physical Fields, Microstructure

镍基高温合金因其在高温高压条件下优异的抗蠕变断裂性能和抗腐蚀性,而被广泛用于航空发动机热端涡轮叶片的制造中。由于涡轮叶片复杂的几何形状以及空腔结构,目前主要通过布里奇曼法定向凝固采用熔模铸造的方式直接成形。裂纹是叶片零件失效的主要原因之一,研究发现,在叶片服役过程中裂纹是沿着晶界萌生和扩展的^[1-3],因此减少铸件单位体积内的晶界会显著提高其在高温高压工作条件下的蠕变寿命。因而在涡轮叶片的发展中,铸件晶粒组织从等轴晶、柱状晶逐渐发展为单晶组织^[4]。

在采用熔模铸造法制备零件过程中,完成零件的精

确成形、保证几何形状复杂的铸件中只有一个晶粒非常困难。在单晶的生长过程中,枝晶臂的变形断裂或是新晶粒的形核长大都会导致叶片铸件中出现杂晶、雀斑、小角度晶界和条纹晶缺陷^[5]。由于某些镍基单晶高温合金完全移除了晶界强化元素^[6-7],新晶粒的存在会对叶片铸件的力学性能产生更为不利的影响。铸造缺陷导致实际生产时叶片铸件成品率低下,给叶片的稳定生产带来巨大挑战,会大幅提升航空发动机的制造和维护成本。

提升叶片的成品率需要科研人员对其凝固过程建立起充分的认识和理解,但目前难以实时观测凝固过程,缺乏实用、高效的方法对凝固过程信息进行采集。

收稿日期:2023-08-20
基金项目:国家自然科学基金重大研究计划资助项目(91860121);国家自然科学基金资助项目(52074182)
第一作者简介:任能,男,1993年出生,助理研究员,上海(200240),E-mail: ren_neng@sjtu.edu.cn
通信作者:李军,男,1984年出生,副教授,上海(200240),E-mail: li.jun@sjtu.edu.cn
引用格式:任能,杨绿伟,李军,等. 高温合金定向凝固数值模拟研究进展[J]. 特种铸造及有色合金,2023,43(10):1 336-1 350.
REN N, YANG L W, LI J, et al. Research progress in numerical simulation of superalloys during directional solidification[J]. Special Casting & Nonferrous Alloys, 2023, 43(10):1 336-1 350.

而且高温合金价格尤为昂贵,开展多次重复试验进行工艺的摸索的代价较大。计算机硬件和数学模型的迅速发展,为数值模拟方法探究缺陷形成机理、开展工艺参数研究、探索工艺控制方法提供了强有力的工具,为构建单晶叶片制备过程的数字孪生奠定坚实的基础。针对高温合金定向凝固过程中所发生的传热、流动、微观组织演变、应力应变等现象,简要介绍了数学模型的发展,典型的数值模拟成果,以及基于数值模拟方法对机理的探究和对制备工艺的发展,并对数学模型的未来发展以及数值模拟的进一步应用进行了展望。

1 布里奇曼炉内的热量传输

1.1 辐射传热的计算模型

在布里奇曼炉的设计中,热量在型壳和加热器之间以辐射的形式传递,在型壳、金属液和结晶器之间以导热的方式传递,其中热辐射的传递是数值模拟中的重点和难点。目前在工业上以及大部分的研究中,单晶叶片熔模铸造的浇注及定向凝固过程温度场的数值模拟主要采用 Surface to Surface 法来计算热辐射。借助基于有限元法的 ProCAST 软件,可以模拟整个炉膛腔体内的辐射传输以及叶片铸型的凝固过程,因此得到了非常广泛的应用。在早期的数值模拟工作中,型壳的密度、比热容甚至是体积往往被忽略,而是用虚拟型壳法以等效热阻对其在热量传递过程中的作用进行描述^[8],但研究表明,由于型壳的比热容较大,会对其中金属液的凝固过程产生显著的影响^[9-10]。不考虑型壳的体积时,也就无法模拟型壳预热过程,无法预测预热结束时型壳和籽晶的温度分布。在近年来的数值模拟工作中^[11],将型壳的几何结构与炉膛内腔、叶片铸型都包含在计算域内,见图 1。该方法在叶片铸型几何形状特别复杂时会大幅提升计算资源的消耗,受到网格量以及计算耗时的限制,因此在以往的研究中几何形状非常复杂的叶片铸型通常被极大甚至是过度简化,因此难以得到参考价值更高的结果。

与 Surface to Surface 法相比,离散坐标法(Discrete Orientation, DO)占用的计算资源更少,适用于多种条件下的辐射计算^[12-13]。该方法假定辐射各个表面均为漫灰表面,辐射在炉膛腔体内没有发生散射和衰减,然后将立体角划分为若干离散的角度,对每一个离散的角度方向将复杂的积分微分辐射传递方程化为一个偏微分方程进行求解,不同离散方向的辐射强度通过源项耦合^[12]。通过在空间内划分若干方向,进而求解辐射沿某一方向上的传输。辐射计算的结果由像素格子点决定,炉膛内离散坐标法的精度由方向的离散阶数

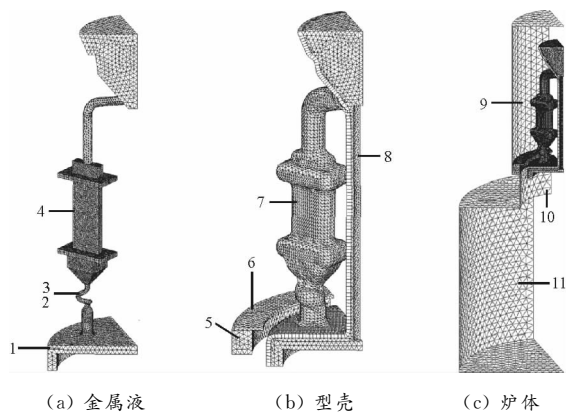


图 1 布里奇曼炉内辐射温度场预测的有限元网格^[11]

Fig.1 Finite-element mesh predicted by radiant temperature field in Bridgman furnace^[11]

1.激冷盘 2.选晶段 3.起始段 4.叶片 5.保温材料 6.辐射隔热板 7.型壳 8.支柱 9.加热区 10.冷却环 11.冷区

所控制。在布里奇曼炉炉膛内的辐射温度场模拟中,该方法也可以达到较为理想的精度^[14-15]。

在型壳-金属液、型壳-铸件、型壳-籽晶、金属液-结晶器、籽晶-结晶器、金属液-籽晶界面,由于润湿性和不充分接触,这些固-固、固-液界面处均会存在热阻,合理估计各个界面的传热系数对于叶片铸件温度场演变的准确预测尤为重要。界面传热系数需要通过进行试验采集型壳及金属液的温度值,再进行反向求解计算得到^[16]。另外,由于单晶叶片制备过程中存在固液相变,在宏观温度场的模拟中还需要描述金属液凝固过程中的潜热释放。一般采用基于热焓法的能量方程作为传热的控制方程^[17]。由于计算资源和时间的限制,假设固相率与温度呈线性关系,采用杠杆定理描述合金液凝固的进程。在以整个炉膛腔体作为计算域的模拟算例中,一般不考虑合金液的流动以及凝固过程中的溶质传输^[18-19]。

1.2 叶片定向凝固的温度场特点

在布里奇曼法中,整个系统主要分为加热区、温度梯度区和冷却区,铸件从加热区向下逐渐被拉至冷却区,热量沿轴向向下传递,在宏观固液界面处提供较大的温度梯度,宏观固液界面维持在中间的温度梯度区。定向凝固控制了晶体的生长方向,避免了一般的铸造过程中金属液中的热量向四周散失而在多处形成新的晶核,确保了单晶可以沿热流的反方向持续生长最终填充整个铸件。尽管布里奇曼炉通过侧向的热辐射对型壳侧壁进行保温,以尽可能地制造与铸件定向凝固方向平行的温度梯度,但炉膛内的温度分布与所设计的理想状态存在一定的差异^[20]。

在金属液充型及铸件刚开始下拉时,炉膛的冷热区之间的热辐射仅仅能通过结晶器与冷热区隔板的狭缝

传递,因此热区的热辐射分布较为均匀。选晶器的横截面积较小,因而其几乎没有对辐射温度场产生显著影响。在选晶器内,由于型壳的热导率较小、型壳与合金液之间存在较大的接触热阻,固液界面以垂直于型壳/金属液界面的方向在型壳内推进。当过渡段和叶身被抽拉至冷热区隔板附近时,石墨加热体向型壳中心处各表面尤其是叶身阴面的辐射传热极大程度上被叶身阳面阻挡,叶身阳面和阴面两侧的辐射强度的差异显著加大。型壳底部的起始段和选晶器等结构并不能像型壳底盘一样有效地阻碍热区沿轴向向下的辐射传热,因此炉膛中心处的辐射温度降低要明显更快一些,导致辐射的径向分布变得更为不均匀。受到辐射传输和热传导演变的直接影响,在定向凝固过程中,在型壳内固液界面的形貌以及固液界面在炉膛内的相对位置也都发生了显著的变化。叶片薄侧的热量散失要比厚侧快很多,因而固液界面在薄侧向上推进得更快。

基于温度场的模拟结果,还可以获得叶片凝固过程中的温度分布^[21]、温度梯度及冷却速率分布^[18,22]、固液界面形貌演变过程^[9],其中固液界面的形貌演变受到了重点关注。铸件的几何形状尤为复杂,其横截面沿定向凝固方向剧烈变化,在某些横截面处还存在薄壁、空腔以及尖角等几何特征。由于辐射传热条件的特点,叶片中的等温面以及糊状区的形貌在定向凝固过程中呈现出剧烈变化的趋势,见图 2。叶片铸件的截面突变处还会提前向外损失热量而使局部金属液温度降低。在液相线等温面尚未从叶身推进到榫头时,榫头处金属液就已经具有一定的过冷度而形成“过冷区”。过冷区的存在极易导致新晶粒的形核长大,成为最终叶片铸件中的杂晶缺陷,当过冷区的过冷度达到高温合金的临界形核过冷度时,过冷区内发生形核^[23],并且新晶核在较高的过冷度下迅速生长成为新的晶粒而占据过冷区的空间,即成为最终叶片铸件中的杂晶^[24],见图 3。

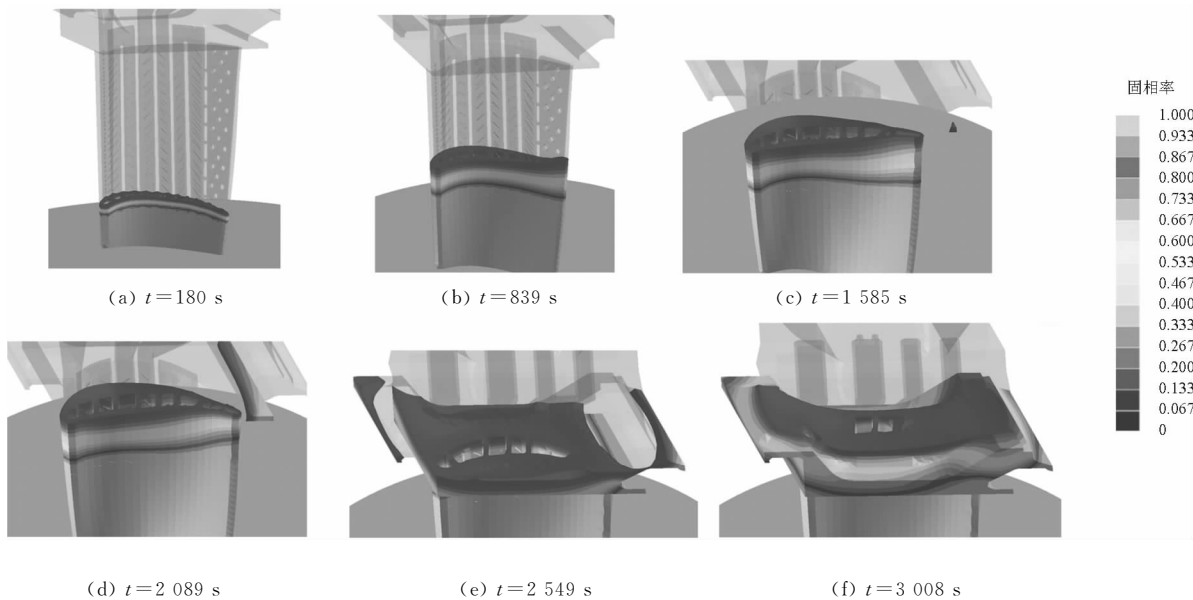


图 2 单晶叶片定向凝固过程中的糊状区及固液界面演变^[9]

Fig.2 Evolutions of mushy zone and solid-liquid interface in single-crystal blade during directional solidification^[9]

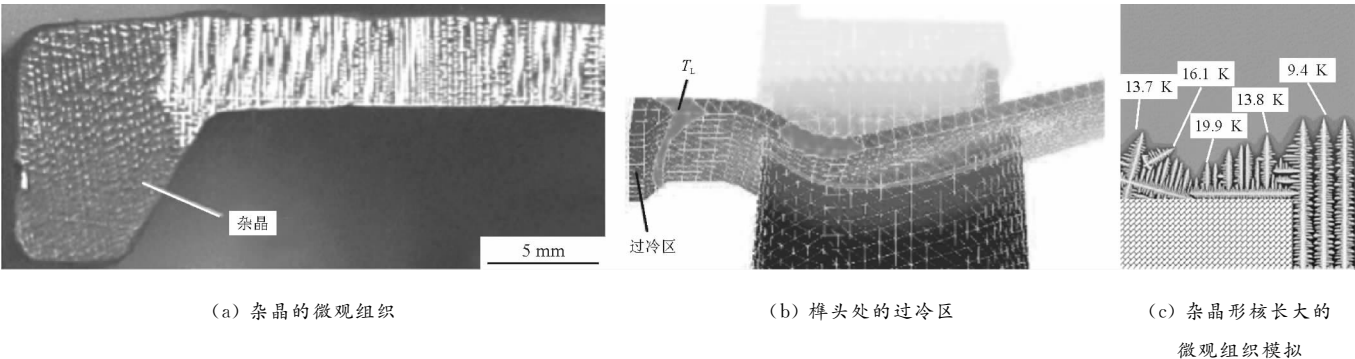


图 3 镍基单晶高温合金中的杂晶缺陷^[24-25]

Fig.3 Stray grain defect in nickel-based superalloy^[24-25]

在温度场演变的数值模拟中,液相线等温面的下凹和不连续性可以用以描述和衡量棒头处过冷区^[19]。而在棒头这种铸件截面积剧烈变化的区域,固液界面呈现出复杂的形貌,难以简单地用曲率等物理量对杂晶的形核长大几率进行定量的描述。本研究团队提出以固液界面的高度差,即固液界面最高点和最低点的高度差,描述固液界面和炉膛辐射温度场的倾斜程度,进而衡量过冷区及其过冷度的大小。

1.3 温度场模拟在工艺优化中的应用

温度场是工艺优化最直接、最易于实行的控制目标。通过试验验证,温度场的数值模拟结果可为工程应用提供参考,还可基于对模拟结果的分析对工艺进行改进,并通过数值模拟进行预验证,这对于工艺优化及其进一步应用具有重要价值。基于以上对叶片定向凝固过程温度场演变过程的理解,发展出了引晶条、反向提拉^[26]、导热块、型壳厚度设计以及变速抽拉多种不同方法,改善叶片的局部温度场以消除叶片铸件中的杂晶。

根据对温度场演变特点的理解,杂晶的形成和长大体现于单晶生长直至充满整个铸型过程在空间上的不

连续性。在叶片铸件上设计从底部延伸至棒头等极易形成杂晶处的引晶条,尽管截面突增处因温度下降较快而易于形成过冷区,但单晶可以通过引晶条这一路径生长至此并与叶片中的分支汇合,因此避免了新晶粒的形核^[27-29]。MENG X B等^[30]通过数值模拟,论证了引晶条的位置和数量在消除棒头杂晶中的作用。金属液中不均匀的温度分布是由型壳表面不均匀的温度分布所决定的。在不均匀的辐射温度场下,叶身尖锐特征及截面突增处型壳表面的温度降低更快,通过设计厚度不均匀分布的型壳以及可脱离式隔热板可以减弱叶片温度场的不均匀性^[9,31],QIN L等^[9]通过数值模拟的方法讨论了型壳设计对温度梯度和固液界面形貌的影响,见图4。MA D X等^[25]在棒头处用导热性能良好的石墨块连接截面突变处与叶身处型壳,通过数值模拟论证了用温度降低相对较为缓慢的叶身处型壳的热量去平衡温度降低较快的截面突变处型壳的可行性。模拟和试验结果表明,导热块起到了很好的改善型壳局部温度场的作用,减小了杂晶形核长大的区间,成功消除了叶片棒头处的杂晶。

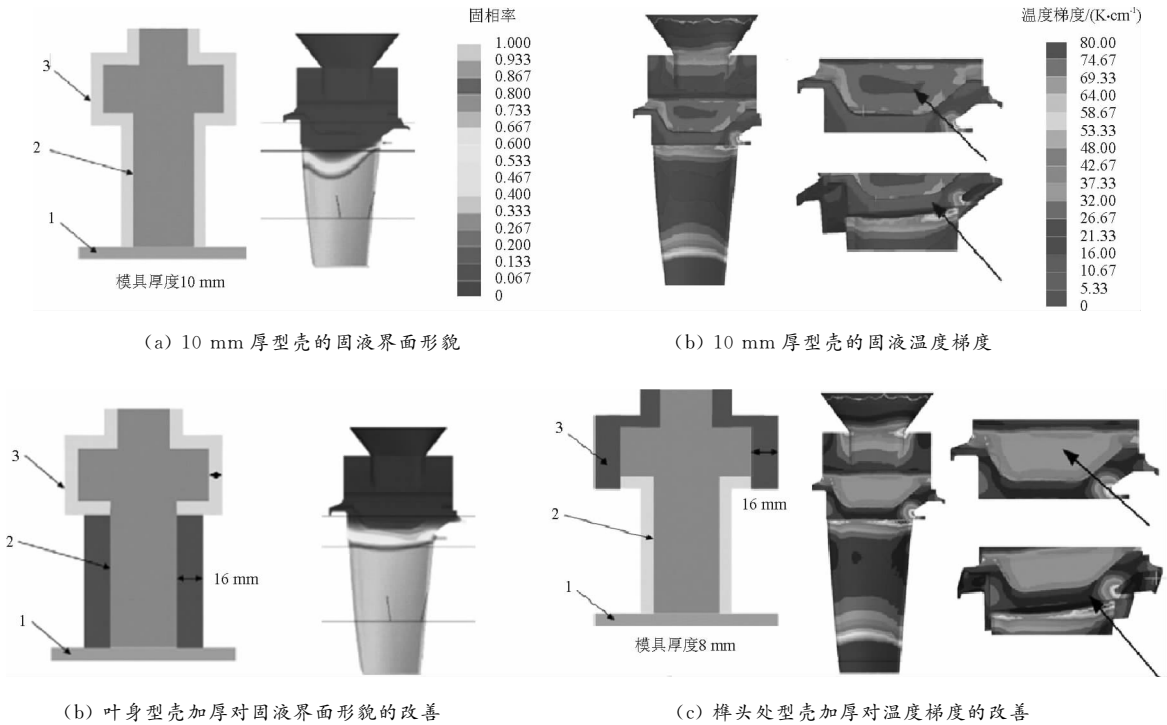


图4 型壳厚度设计对固液界面及温度梯度的改善^[9,25]

Fig.4 Improvements of solid-liquid interface and temperature gradient using mould thickness design^[9,25]

1.冷却板 2.叶片 3.模具

数值模拟研究表明,固液界面推进速率与引晶速率存在一定的差异,其在炉膛内的相对位置呈现出上下波动的趋势。当固液界面推进速率低于引晶速率时,过冷区的形成将会更早,过冷度也会更大。REN N等^[14]提

出基于减小固液界面的高度差和位置波动建立拉速调节的方法,通过数值模拟的方法实时调节输出工艺曲线,数值模拟和试验结果证实该方法可以有效缩小棒头处的过冷区并减小过冷区的过冷度,见图5。

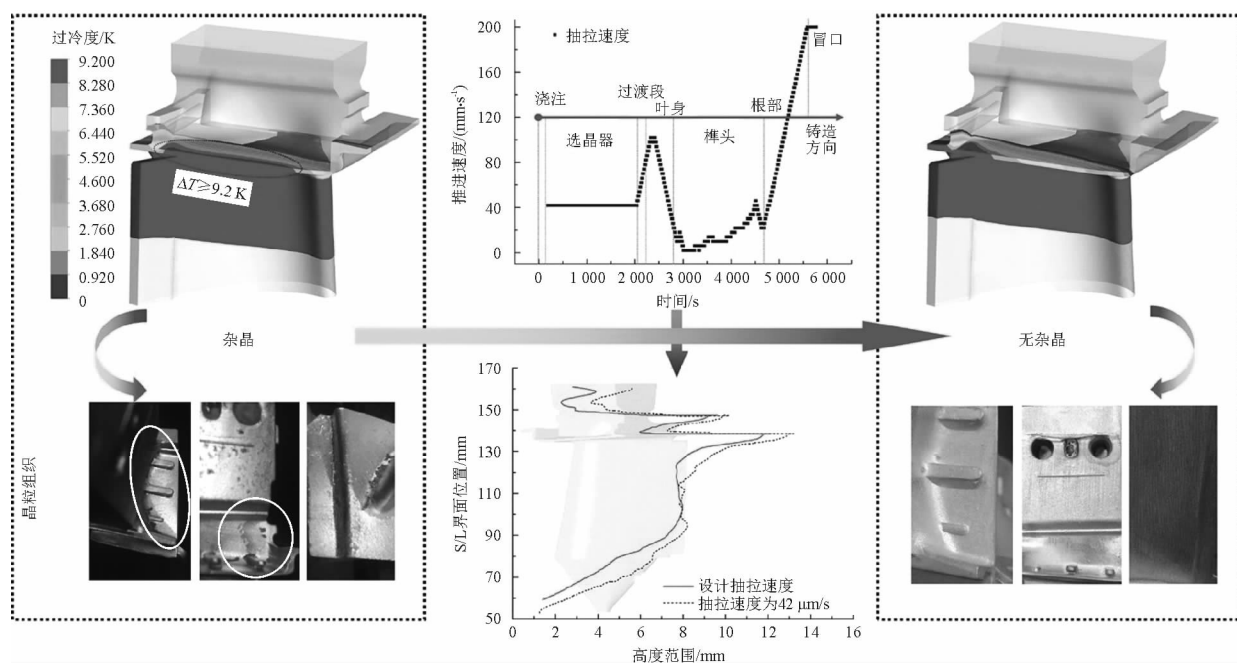

 图 5 变抽拉速率单晶叶片制备的数值模拟与试验^[14]

 Fig.5 Numerical simulation and experiments of single-crystal blade fabricating with variable withdrawal rate^[14]

2 金属液流动和溶质传输

2.1 流动和传质的耦合计算模型

高温合金的定向凝固过程还伴随着金属液的流动,以及由金属液流动而引起的溶质输运,因此铸件中会出现呈通道状的宏观偏析形貌。在宏观尺度的偏析预测模型中,凝固前沿糊状区内的树枝晶结构一般被简化为多孔介质^[17,32-33],在此多孔介质中发生溶质再分配以及流动的衰减,进而模拟得到溶质羽流和偏析通道。通道偏析的产生是一个尤为复杂的过程,伴随着固液相变、熔体流动以及传热传质等复杂的物理现象。

WORSTER M G^[34]认为凝固过程中被排出至液相中的溶质所引起的密度反转是通道偏析形成的驱动力,将凝固前沿的羽状流归类为糊状区内溶质富集引起的 Rayleigh-Bernard 流,而热质对流极大地促进了枝晶的熔断和雀斑缺陷的形成。因此,BECKERMANN C 等^[35]提出以糊状区 Rayleigh 数评估雀斑形成的可能性。Rayleigh 数被定义为热导率、金属液黏度、糊状区平均渗透率以及密度差的函数:

$$R_{ah} = \frac{(\Delta\rho/\rho_0)gKh}{\alpha\nu} \quad (1)$$

式中, R_{ah} 为糊状区无量纲雷诺数; $\Delta\rho$ 为因溶质成分偏析而导致的液相密度变化; ρ_0 为标准成分下的液相密度; K 为糊状区平均渗透率; h 为糊状区高度; α 为合金的热扩散系数; ν 为液态金属的运动黏度。

根据数值模拟的结果以及之前的试验结果,基于此 Rayleigh 数判据的方法,研究者们评估了多种成分的镍

基单晶高温合金的雀斑形成能力^[36-37],Rayleigh 判据在合金成分设计中起到了非常显著的效果。然而在 Rayleigh 数的定义式中,仅有糊状区高度这一参数可以体现冷却条件对雀斑形成的影响,其他均为合金本身的物性参数。糊状区高度对应凝固过程中的温度梯度,但试验以及工业生产中发现存在温度梯度高的时候依然形成了雀斑,但温度梯度低的时候雀斑反而消失的情况^[38]。实际应用过程中以 Rayleigh 数为判据预测雀斑的方法存在着较大的偏差,在使用基于 Rayleigh 数预测雀斑的方法时,需要根据其实际情况修改对应的 Rayleigh 数表达式以及临界值^[39-41]。此外,布里奇曼炉内辐射温度场条件以及叶片铸件的几何形状较为复杂,这些因素无疑会导致理论分析与实际情况存在较大偏差,需要数值模拟对这一现象建立更为深入的理解。

FELICELLI S D 等^[42]、SUNG P K 等^[43]运用 Continuum Mixture Model 模型,采用 Navier-Stokes 方程描述金属液的流动,采用 Bousinesq 近似描述其中因溶质浓度和温度变化所引起的金属液密度变化。凝固潜热的释放则是根据单位体积单位时间内的固相分数转变求得,溶质再分配过程则是以溶质源项的形式加载到组分传输方程中。糊状区内的枝晶结构近似看作多孔介质,其特征长度采用枝晶间距^[17],金属液的动量至此逐渐衰减至 0。由于叶片铸件中的树枝晶呈现出固定的取向,需要采用各向异性的糊状区渗透率^[44];平行于定向凝固方向以一次枝晶间距作为特征长度,垂直于定向凝固方向以二次枝晶间距作为特征长度^[45]。

SCHNEIDER M C 等^[46]、GU J P 等^[47]则是将柱

状晶(单晶)相和金属液相作为两个流体相,建立了一个基于体积平均法的固液两相传输模型。在单晶叶片中,由于叶身的柱状晶或单晶的晶粒取向为<001>或十分接近<001>,可将宏观尺度下糊状区内的树枝晶简化为交错排列的圆柱体^[48-49],由铸件底面沿竖直方向向上延伸至铸件中心。固液相的质量传输速率可由固、液界面推进速率以及固、液界面的表面积计算得来,凝固速率作为质量源项加载到连续性方程中^[50-51]。基于凝固前沿的固液界面平衡状态条件,以扩散以及质量守恒计算固液界面推进速率。

高温合金为复杂的多元体系,在数值模拟中一般需要对其进行二元线性简化。将多元体系简化成八个线性二元体系,假设这些二元体系的溶质分配系数和液相线斜率均为常数^[52],进而求得等效二元合金体系 Ni-X 的等效初始浓度、等效溶质平衡分配系数、等效液相线斜率和等效溶质膨胀系数^[53-55]。

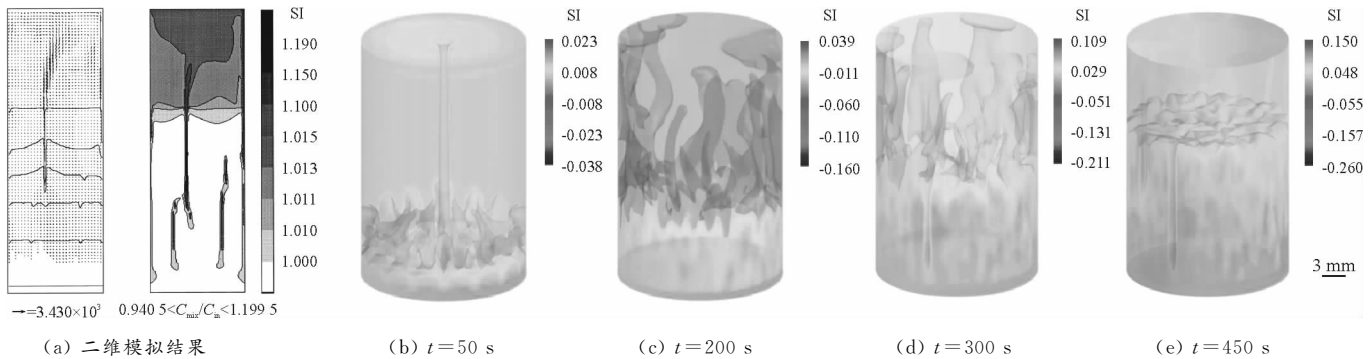


图 6 宏观尺度模拟的流场、溶质场以及通道偏析^[46,56]

Fig.6 Flow pattern, solute field, and channel segregation in macroscale simulation^[46,56]

在特征几何形状铸件以及实际叶片铸件中,相关的数值模拟^[57-58]再现了 MA D X 等^[59-61]在镍基高温合金 CMSX-4 定向凝固的试验中发现的通道偏析分布特点,并从流动稳定性的角度揭示了该分布规律的内在机理,见图 7。研究表明,定向凝固过程中的侧向热流是诱发

2.2 金属液流动和溶质传输

数值模拟可以很好地展示出镍基高温合金定向凝固过程中的流动、传热和传质现象,并获得最终的通道偏析形貌,见图 6。研究表明,尽管凝固过程中形成了多股烟囱流,但是并不是所有烟囱流下方都形成了能够稳定发展的偏析通道^[56]。在糊状区内金属液流动的不均匀性及其所带来的扰动,对富集溶质的积累产生了干扰,进而抑制了通道偏析的持续发展。但是一旦形成了稳定的通道偏析,糊状区内排出的溶质将在热质对流的作用下持续地流入偏析通道内,造成通道内的溶质进一步富集,从而使通道偏析得以稳定地持续发展。铸件表面由于存在着侧向热损失,且局部的流场受到主液相区的流动影响更小,更易形成稳定持续发展的通道偏析,通道偏析反而不易于在铸件中心持续地向上发展。相较于三维算例,二维算例缩小了熔体中流动扰动的幅度,因而未能准确地复现偏析通道的分布特点^[46]。

雀斑链在铸件表层形成的重要原因,通道偏析的分布规律对凝固过程中的冷却条件和铸件的几何形状非常敏感。铸件横截面积增大时,金属液中的溶质被稀释,因而铸件中不易形成雀斑链,而横截面积的减小促进了溶质富集以及通道偏析的形成。在铸件的几何尖锐和薄壁特征处,由溶质富集所引起的烟囱流局部流场受到主液相区内的流动扰动较弱,溶质得以持续地在其底部富集,并且此类特征处树枝晶的生长速率明显较高,这都推动了通道偏析的形成和持续发展。除了成分偏析以外,金属液中溶质元素输运及其所产生的扰动还会对微观组织产生影响,严重时甚至导致枝晶熔断。

3 晶粒的形核与生长

3.1 晶粒组织预测模型

尽管温度场以及溶质元素分布可以在一定程度上体现出杂晶和雀斑缺陷形成的几率,但在工程实际中需要以更为直观、定量的方式判断铸件的晶粒组织是否为单晶组织,这需要进一步地发展应用晶粒组织预测模

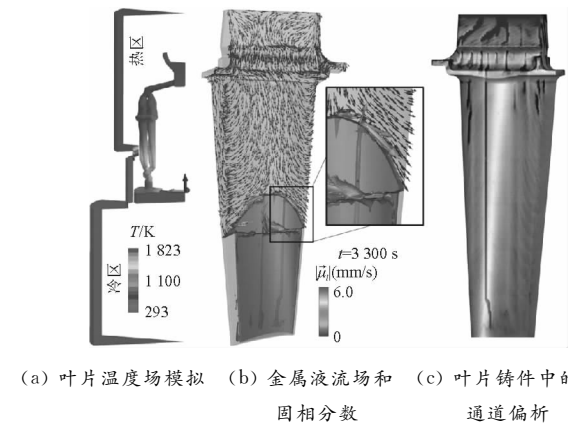


图 7 叶片铸件中的通道偏析的分布特征^[58]

Fig.7 Geometrical sensitivities of channel segregation in the blade castings^[58]

型。相场、界面追踪和元胞自动机是铸件晶粒组织模拟中最常用的方法,其中元胞自动机模型被广泛应用于树枝晶生长的模拟中。相比于相场法和界面跟踪法,其在计算效率方面有着尤为突出的优势,更适用于实际工程问题中。RAPPAZ M等^[62]、GANDIN C A等^[63]首先建立起较为完善的枝晶生长元胞自动机(Cellular automaton, CA)模型,成功预测了铸件的宏观晶粒组织。模型以偏心正八面体描述晶粒轮廓(二维为偏心正方形),八面体的六个角即树枝晶尖端的六个方向,在元胞内根据枝晶生长动力学理论计算枝晶臂的长度,当其长度超过元胞尺寸时即捕获相应邻域内的元胞。元胞自动机模型用于描述枝晶的生长,空间内的温度分布则是采用有限元法(Finite element, FE)进行求解,元胞内的温度值由有限元网格的温度值插值得到,大幅地降低了计算资源的消耗并提升了计算速度。CA-FE 的模型框架在 ProCAST 等铸造模拟软件中的晶粒组织预测模块中得到了广泛的应用。

WANG W 等^[53]、DONG H B 等^[64]进一步发展了 CA 模型,将凝固前沿的溶质再分配以及金属液中的溶质扩散耦合到模型中,通过模拟展现了枝晶竞争生长、高温合金定向凝固过程中一次枝晶间距随温度梯度的演变以及柱状晶向等轴晶转变等凝固行为,模型不仅可以模拟枝晶的一次枝晶臂、二次枝晶臂等微观组织形貌,还可以预测出枝晶干以及枝晶间的溶质偏析,模拟结果与同步辐射观测以及铸态晶粒组织非常接近,见图 8。模型以有限差分法(Finite difference, FD)求解能量和溶质浓度方程。基于此 CA-FD 模型框架,该研究还开发出了基于 C++ 的枝晶生长开源代码模拟软件

μ MatIC。ZHU M F 等^[65]在元胞自动机模型的基础上通过求解 Navier-Stokes 方程计算金属液的流场,再将流动耦合至温度场和溶质浓度场的求解中,实现了枝晶生长、熔体对流以及传热传质的耦合,研究了强制对流条件下的枝晶生长和溶质浓度演变规律。GUILLEMOT G等^[66]、SAAD A 等^[67]发展了之前所建立的 CA-FE 模型,在有限元网格上实现温度、流动和溶质的强耦合求解,根据有限元网格内元胞固相分数的体积平均值,以 Blake-Kozeny 模型描述金属液在枝晶结构中的动量衰减。模型在较大的空间尺寸下模拟得到了熔体中的溶质羽流(Solute plume 或 chimney)、定向凝固过程中的温度分布,以及凝固终了时的宏观晶粒组织,见图 9。YUAN L 等^[68-69]在 CA-FD 模型基础上加入了对流动方程的求解,模拟得到了定向凝固过程中热质对流下的微观组织演变。WANG W L 等^[70]、LUO S 等^[71]则是采用在流动问题求解中表现更好的有限体积法(Finite volume method, FVM)发展了 CA-FVM 模型。在上述方法中,计算域内同时存在两套网格,一套是网格尺寸较大的用于宏观温度场、溶质浓度场和流场耦合计算的有限差分/有限体积/有限元网格,另一套即用于描述枝晶生长的元胞,元胞内的温度和溶质浓度均是通过宏观网格插值得到。尽管宏微观尺度插值的方法可以提供高效的计算效率,但也会使微观组织周围复杂的溶质分布被体积平均而失真。REN N 等^[72]通过在欧拉多相流框架下将固液和液相作为独立的流体相,在亚格子尺度下描述固液相之间的相互作用,发展出了微观组织和多物理场的强耦合方法,成功地模拟出树枝晶的熔断过程。

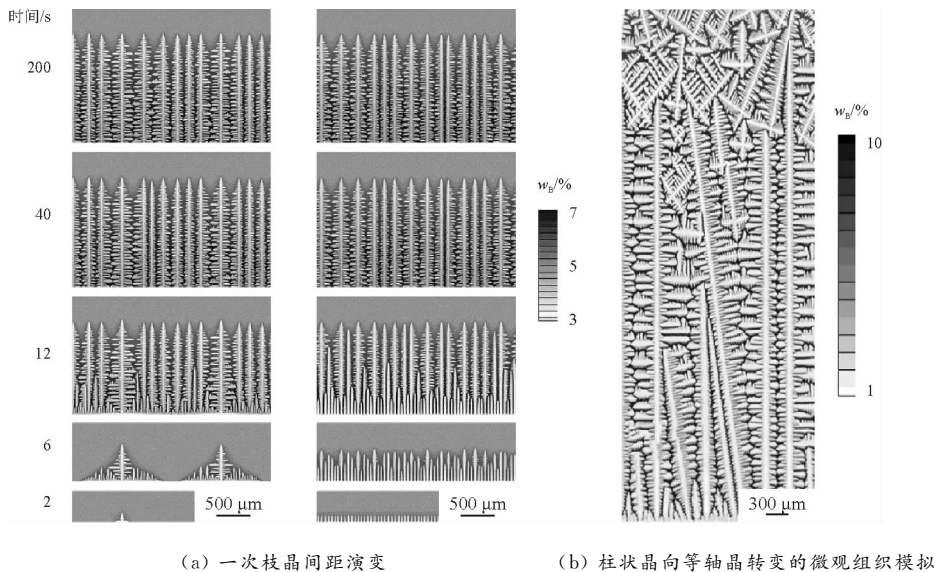


图 8 元胞自动机-有限差分模型的模拟^[53,64]

Fig.8 Model simulation of cellular automaton-finite difference model^[53,64]

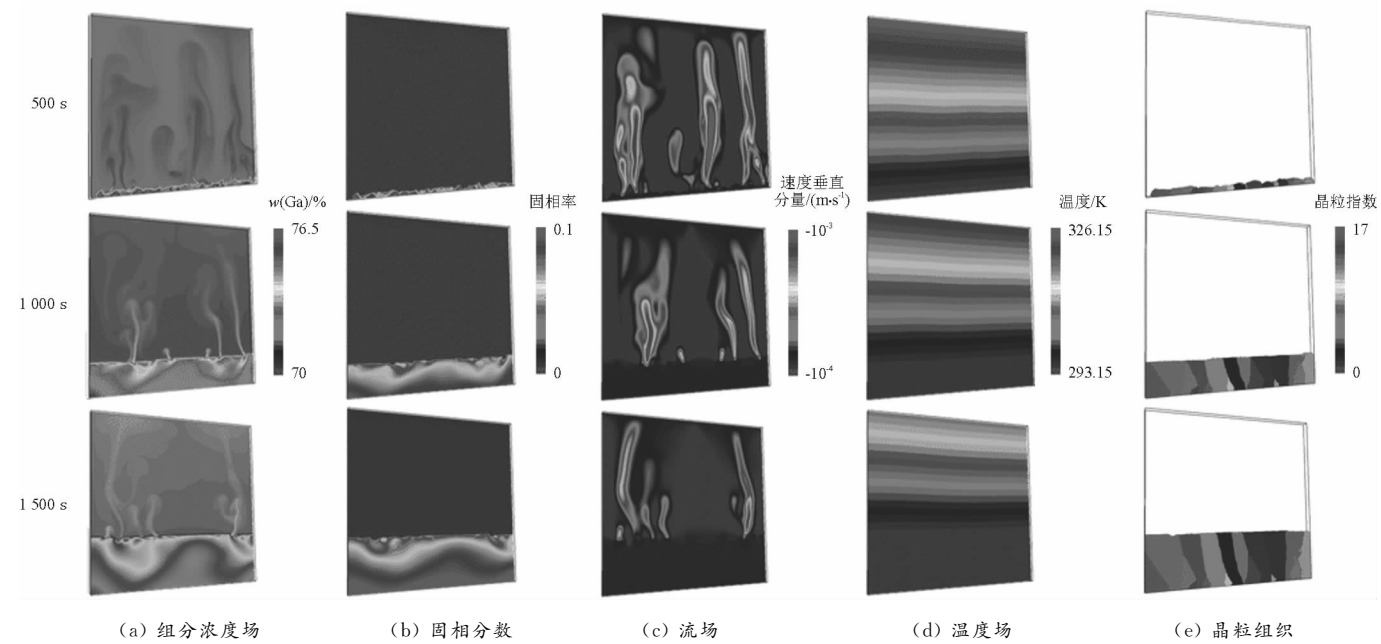


图9 耦合了金属液流动的元胞自动机-有限元模型模拟结果^[67]

Fig.9 Simulation results of cellular automaton-finite element model coupled with melt flow^[67]

3.2 晶粒形核与生长

单晶叶片制备的首要关键点就是要获得单个晶体<001>方向与最大应力方向平行的晶粒,目前主要有选晶法和籽晶法两种方法。DAI H J等^[73-74]采用 CA-FE 模型模拟了单晶叶片的选晶过程,再现了金属液在基板上激发形核形成任意取向的晶粒。这些晶粒在起始段中自由地生长相互挤压空间而相互淘汰;<001>方向与温度梯度方向夹角较小的晶粒淘汰掉夹角较大的晶粒;多个与温度梯度方向相近的晶粒进入螺旋结构的选晶器中;经过复杂的几何空间淘汰机制,最终只有一个晶粒生长而进入叶片。此外,研究了起始段高度和选晶器升角对选晶效果影响,建立对竞争生长和螺旋选晶更为直观且深入的认识,见图10。YANG X等^[75]、

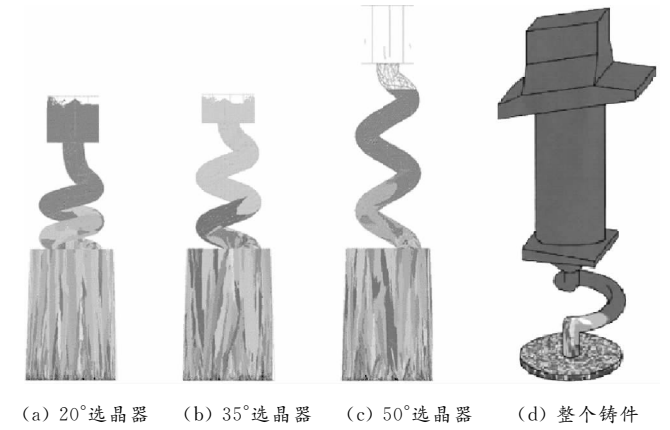


图10 选晶器及叶身的宏观晶粒组织模拟^[73-74]

Fig.10 Simulated grain macrostructure in grain selector and airfoil^[73-74]

D’SOUZA N等^[76]以 CA-FD 模型模拟了籽晶回熔过程中籽晶内部的枝晶熔化和溶质扩散,以及枝晶外延生长过程中微观组织形貌的演变,并评估了倾斜的宏观温度场对籽晶外延生长过程中杂晶的形核长大的影响。

3.3 枝晶熔断与雀斑缺陷

雀斑是高温合金铸件中常见的缺陷之一,在铸件的宏观晶粒组织检验中表现为沿凝固方向呈链状分布的细碎晶粒,主要由无特定晶体取向的等轴晶粒所组成,这些无特定取向的晶粒彼此之间的晶界与杂晶一样会对叶片的服役性能不利。

SHEVCHENKO N等^[77-78]用 X 射线成像的方法观察了熔点接近于常温的 Ga-In 合金体系的定向凝固过程,证实了溶质富集导致了偏析通道的形成和枝晶断裂、移动,进而形成了新的晶粒。REINHART G等^[79]采用同步辐射的方法首次观测了布里奇曼炉内镍基单晶高温合金 CMSX-4 的定向凝固过程,见图 11。试验观测到了近壁处偏析通道的形成,以及偏析通道内二次枝晶臂根部的断裂进而从一次枝晶臂脱离的过程,证实了布里奇曼炉内镍基单晶高温合金定向凝固过程中同样会形成偏析通道以及发生枝晶断裂。尽管上述方法可以为揭示雀斑晶粒的形成过程提供最为令人信服的依据,但受到试验条件本身的诸多限制,以高分辨率提取试验过程中的温度分布、流动速率、流动形貌以及溶质浓度分布的难度非常之大,尤其是在液相线温度较高的高温合金在不透明的型壳中凝固过程中。并且试验过程中的干扰因素众多,很难完全做到排除某一因素的干扰,如RUVALCABA D等^[80]无法完全排除流动应

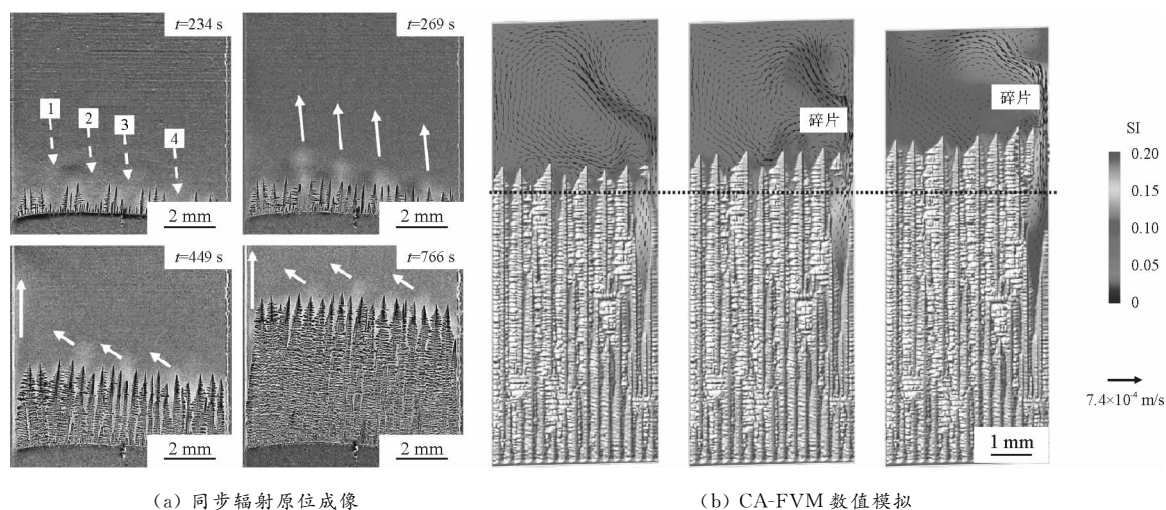

 图 11 晶粒组织尺度下高温合金定向凝固中的通道偏析和枝晶熔断过程^[56,79]

 Fig.11 Formation of channel segregation and remelting-induced dendritic fragmentation during directional solidification of superalloys at dendritic scale^[56,79]

力对枝晶熔断的影响。但通过数值模拟方法获取这些信息、排除某一物理因素的干扰就相对简单,并且数值模拟在某些情况还会得到试验中不易被发现的现象。因此作为试验方法的重要补充,数值模拟方法在过程的机理研究中扮演着越来越重要的角色。

在晶粒尺度下,KARAGADDE S 等^[81]、YUAN L 等^[82]采用耦合的元胞自动机-有限差分法揭示了 Pb-Sn 合金以及 Ga-In 合金定向凝固过程中通道偏析的孕育过程。结果表明,枝晶间生长速率的差异所引起的溶质富集导致了通道偏析的孕育。熔体对流对凝固前沿溶质分布所产生的扰动造成了枝晶臂之间生长速率的差异,溶质富集阻碍了当地枝晶尖端的生长进而导致了枝晶间距的加宽。随着周围的枝晶臂继续生长,溶质进一步富集于被抑制的枝晶臂前方,最终导致偏析通道的产生。REN N 等^[56]发现,高温合金定向凝固中的侧向热流使枝晶间富集的溶质逐步迁移至近壁处,从而形成稳定的通道偏析。通道偏析内富集的溶质使枝晶底部的金属液过热,熔化了枝晶臂主干而使枝晶尖端脱离成为游离的枝晶碎片,见图 11。尽管枝晶底部发生了熔断,但枝晶尖端仍处于过冷熔体中而持续生长。直到偏析通道被生长的侧向枝晶占据,偏析通道中熔体的过冷度始终未能达到高温合金的临界形核过冷度,即雀斑晶粒的来源为溶质富集熔断的树枝晶碎片而非新形核的晶粒。当侧向热流密度低于枝晶熔断发生窗口时,尽管铸件中仍会出现通道偏析,但其偏析度不足以使枝晶主干熔断,因而铸件中不会出现枝晶碎片。

4 叶片铸件的应力与应变

4.1 应力应变的数学模型

在高温合金制备过程中,叶片铸件本身的变形会造

成尺寸偏差。在冷却过程中局部温度场分布的不均匀及金属、模具和型芯的不同热收缩系数引起固体变形^[83],在凝固完成后大约 300 ℃ 的温度区间内一般会出现 2%~3% 的塑性应变累积^[84],进而导致后续热处理过程中发生再结晶。在凝固过程及随后冷却过程中,固体在冷却时的热膨胀、枝晶受到热溶质对流的冲击都会使树枝晶产生变形。除了晶粒的形核和熔断以外,晶粒的变形会导致条纹晶^[85-86]、取向偏离^[87]、小角度晶界^[88]等缺陷的形成,对铸件的性能造成影响。

叶片铸件的宏观应力及变形目前主要采用有限元法进行模拟分析,首先求解温度场然后将其作为热载荷输出到静应力过程的平衡方程、本构方程及变形协调方程。应力和应变之间通过本构方程联系,采用增量理论描述塑性本构关系。根据这些积分方程,采用位移基法进行离散求解固体变形行为。通过应用虚功原理和高斯定理求解式,可以从单元中的插值函数和节点位移导出单元内任意一点应变值。

对于晶粒组织尺度下的应力应变,PILLING J 等^[89]提出一个解析模型来研究在恒定流速下流动引发枝晶的变形。将枝晶简化为圆柱形,假设金属液流动速度方向恒定、大小均匀,应用纯弯曲应力公式,推导出流动作用于每个单位长度枝晶受到流动冲击作用的力。由于缺乏合金在熔点附近的断裂强度,基于合金熔点附近的断裂强度为 6 MPa 的假设,该模型得出流体流动难以引起枝晶的断裂的结论。YAMAGUCHI M 等^[90-91]耦合相场(Phase field)模型与物质点法(Material point method),模拟了单枝晶和多枝晶的变形,再现了晶界附近、晶界内、不同枝晶臂之间的薄连接处半固体结构的剪切作用,以及变形引起的枝晶臂内形成的小角度倾斜晶界,见图 12。REN J K 等^[92]通过矢量值相

场法、两相流模型和边界条件的设计,模拟将单个枝晶压缩成多晶结构的过程,所得的微观结构与金相分析吻合。模拟再现了变形将高度分枝的形状转变为树枝状

较少的形状,随后粉碎成粗壮的结构,最终导致了内部不同的晶粒取向边界,而分成多个晶粒的过程,见图 13。

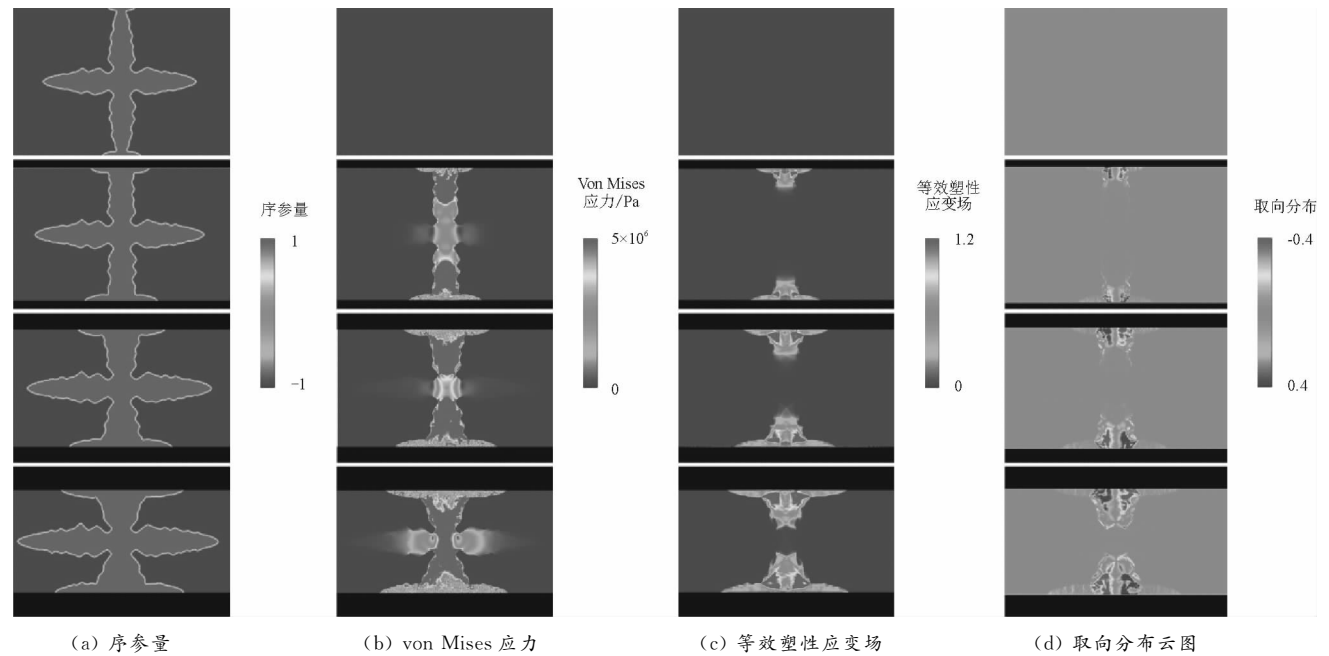


图 12 耦合相场及物质点法单枝晶压缩变形的模拟^[90-91]
Fig.12 Simulated dendritic deformation of single grain using coupled phase-field and material point method^[90-91]

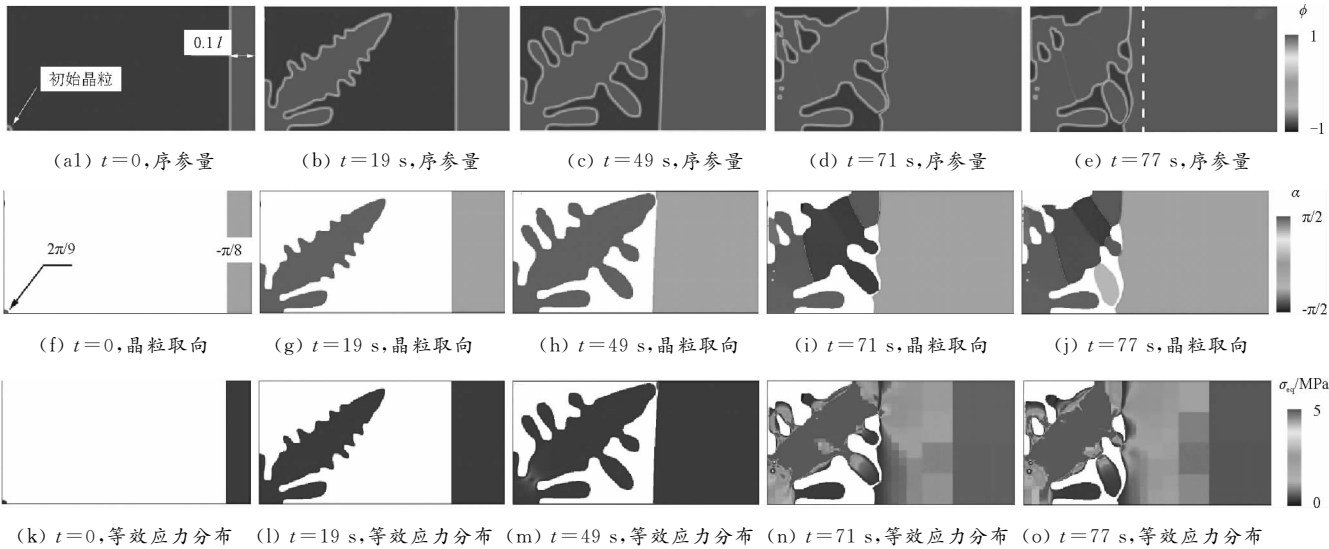


图 13 枝晶压缩模拟结果^[92]
Fig.13 Simulated dendritic deformation under compression^[92]

4.2 宏观热应力及铸件变形

AVESON J W 等^[93]模拟了高温合金单晶叶片在凝固过程中的宏观应力分布。收缩通道内的应力随着凝固的进行不断增大,当收缩通道完全凝固时,在最靠近籽晶中心轴通道一侧产生峰值约 100 MPa 的有效应力。在远离籽晶中心轴的一侧的有效应力较低,约 40 MPa。位置Ⅲ处的有效应力范围为 50~70 MPa,并且在该位置的应力随着凝固的进行不断减小,见图 14。条纹晶缺陷起源于收缩通道,与高应力区域对应。

HUANG Y Q 等^[94]将数值模拟与试验相结合,对单晶高温合金凝固过程的条纹晶缺陷形成及演化进行研究,发现条纹晶所在位置的应力达到糊状区的屈服强度(50~60 MPa),因此将条纹晶的形成归因于热收缩应力导致的枝晶变形。XU W L 等^[84]也观察到了单晶高温合金铸件中叶片凹面、前缘及凹面上都产生了条纹晶缺陷,并根据热应力模拟结果分析可知(见图 15),在单晶铸件定向凝固过程中,不均匀的应力分布所引起的枝晶变形和碎裂是条纹晶形成的原因,并确定枝晶碎裂

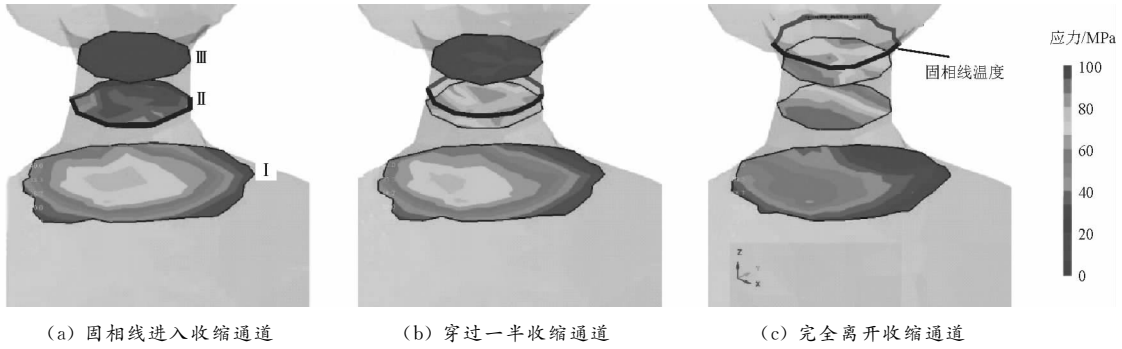


图 14 收缩截面处凝固过程中应力分布的有限元模拟^[93]

Fig.14 Finite element simulation of stress distribution in a concave geometry during solidification^[93]

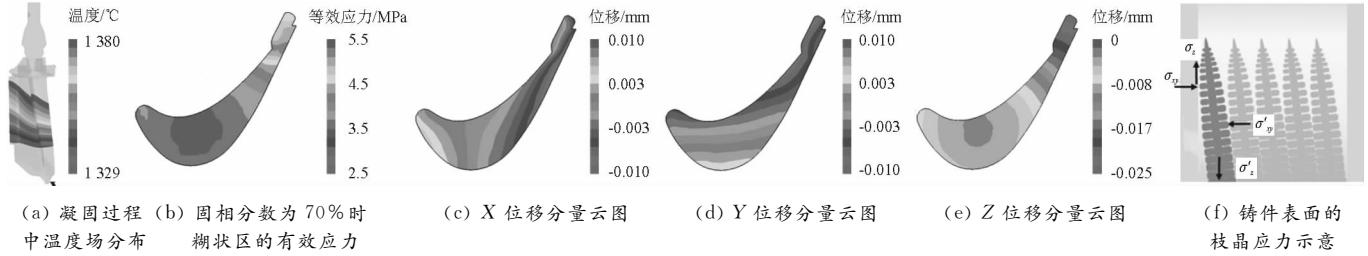


图 15 单晶叶片凝固过程温度场及应力分布模拟^[84]

Fig.15 Simulation of temperature and stress field of single-crystal blade during solidification^[84]

的固相分数范围为 60%~80%。

4.3 晶粒的变形及断裂

MULLIS A M 等^[95] 根据过冷度确定枝晶的微观尺寸参数,采用计算流体力学的方法计算枝晶边界处的流动冲击力,模拟了快速凝固下不同的过冷度下流体流动诱发的枝晶形变。随着进口速度的增加或者枝晶尖端半径的减小,枝晶的表面应力不断增加,见图 16。YANG L 等^[96] 结合元胞自动机-有限体积法(CA-FVM)与有限元法(FEM),将流固边界的流体应力张量作为有限元的载荷条件,模拟了不同进口速度下流动引发的枝晶变形。随着枝晶生长,局部流动的速度大小及方向逐渐复杂,熔体流动引发的枝晶变形等效应力和位移不断增大。枝晶弯曲主要发生在凝固早期,二次枝晶

尚未充分连接时。枝晶的二次枝晶搭桥使应力不再随着枝晶的生长线性增加,未被二次枝晶搭桥影响的区域发生塑性应变集中最终发生弯曲,见图 17。由于合金

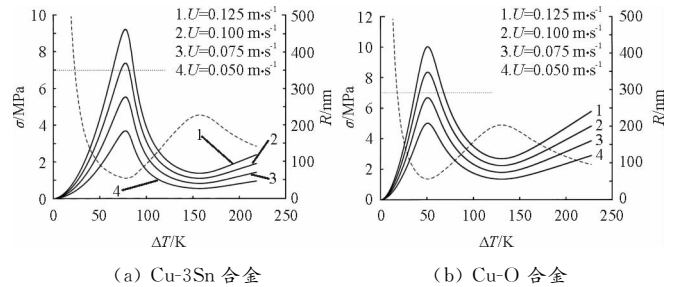


图 16 不同过冷度和流速条件下的枝晶表面应力^[95]

Fig.16 Stress on the surface of dendrites under different undercooling degrees and flow velocities^[95]

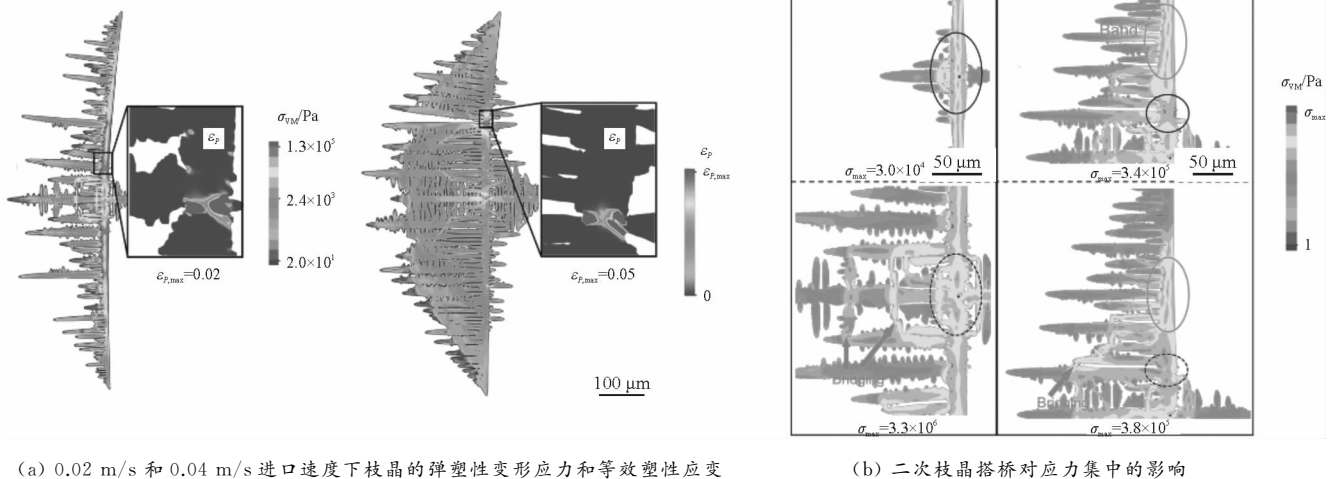


图 17 熔体流动诱发枝晶变形^[96]

Fig.17 Melt flow induced dendritic deformation^[96]

在凝固时其较低的屈服强度(约 0.1 MPa),熔体流动会使树枝晶发生形变,特别是铝合金在较大熔体速度影响下。然而由于缺少合金在凝固区间的力学性能(弹性模量、屈服强度及断裂强度)数据,对于高温合金目前仍需进一步研究。

5 总结与展望

随着计算机硬件和数学模型的发展,数值模拟技术在高温合金定向凝固的研究、工艺设计中得到了广泛应用。尽管数值模拟是一个非常强大的工具,其数学模型应该能够充分描述对应的物理现象,而凝固过程中出现的某些物理现象还无法为目前所发展的数学模型所描述,如高温合金单晶叶片中的大/小角度晶界、条纹晶等缺陷。此外,为保证模拟结果的准确性和可靠性,模拟过程中需要采用接近实际情况的定解条件(几何条件、初始条件和边界条件),一些物理现象的特殊规律受到这些条件的影响非常显著。过度地简化数值模拟过程可能会导致模拟结果与实际情况存在差异,难以满足对高温合金铸件精密控制的要求。在使用商业软件对叶片定向凝固过程进行模拟时,边界条件以及操作条件的设定只能基于软件的操作接口,而商业软件(如 ProCAST)所提供的数据交互接口较为有限。因此,目前仍需对这些商业软件进行二次开发工作,或者开发出更具兼容性的软件工具。

目前关于高温合金定向凝固的工艺优化仍然基于“经验+试错”的方法,尽管数值模拟的方法可以从时间和成本上减少工艺摸索的消耗,但也仍处于点对点式模式,划定的工艺窗口分辨率较为有限。数值模拟作为数字孪生的重要工具之一,在高温合金定向凝固领域,其作用还未能得到充分发挥。基于高精度高保真度的数值模拟,可以实现在模拟生产过程中的在线监测、实时调节,通过基于过程的物理意义制定工艺控制原则、策略的方式,在模拟过程中测试、实现工艺过程的自动调控。另外,随着数据驱动模型的发展,通过大批量、高密度的模拟算例建立数据库,推动数值模拟与机器学习在高温合金定向凝固中的结合应用,有望为精确划定工艺范围提供强有力的新工具。

参 考 文 献

- [1] ZHOU Z P, HUANG L, SHANG Y L, et al. Causes analysis on cracks in nickel-based single crystal superalloy fabricated by laser powder deposition additive manufacturing[J]. *Materials & Design*, 2018, 160: 1 238-1 249.
- [2] BRICKNELL R H, WOODFORD D A. Grain boundary embrittlement of the iron-base superalloy IN903[J]. *Metallurgical Transactions*, 1981, A12(9): 1 673-1 680.
- [3] WANG R Z, CHEN H, ZHANG Y, et al. Creep-fatigue life prediction in nickel-based superalloy GH4169 based on microstructural damage quantification with the help of electron backscatter diffraction[J]. *Materials & Design*, 2020, 195: 108 939.
- [4] QUESTED P N, OSGERBY S. Mechanical properties of conventionally cast, directionally solidified, and single-crystal superalloys[J]. *Materials Science and Technology*, 1986, 2(5): 461-475.
- [5] 朱鸣. 航空发动机用单晶叶片铸造缺陷解读[J]. *铸造技术*, 2017, 38(5): 986-989.
- [6] 王晓娟, 刘林, 黄太文, 等. 碳对镍基单晶高温合金凝固缺陷影响的研究进展[J]. *材料学报*, 2020, 34(2): 3 148-3 156.
- [7] 余竹焕, 刘林, 赵新宝, 等. 碳在镍基单晶高温合金中作用研究的进展[J]. *铸造*, 2009, 58(9): 918-924.
- [8] KERMANPUR 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]. *Metallurgical and Materials Transactions*, 2000, B31(6): 1 293-1 304.
- [9] QIN L, SHEN J, YANG G X, et al. A design of non-uniform thickness mould for controlling temperature gradient and S/L interface shape in directionally solidified superalloy blade[J]. *Materials & Design*, 2017, 116: 565-576.
- [10] MA D. Novel casting processes for single-crystal turbine blades of superalloys[J]. *Frontiers of Mechanical Engineering*, 2018, 13(1): 3-16.
- [11] SZEŁIGA D. Effect of processing parameters and shape of blade on the solidification of single-crystal CMSX-4 Ni-based superalloy[J]. *Metallurgical and Materials Transactions*, 2018, B49(5): 2 550-2 570.
- [12] MURTHY J Y, MATHUR S R. A finite volume method for radiative heat transfer using unstructured meshes[J]. *36th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, 1998, 12(3): 313-321.
- [13] RAITHBY G D, CHUI E H. A finite-volume method for predicting a radiant heat transfer in enclosures with participating media[J]. *Transactions of the ASME*, 1990, 112(2): 415-423.
- [14] REN N, LI J, WANG B Q, et al. Design of variable withdrawal rate for superalloy single-crystal blade fabrication[J]. *Materials & Design*, 2021, 198: 109 347.
- [15] WANG B, ZENG L, XIA M, et al. Substrate stimulating technique for Ni-based single crystal superalloy preparation during direction solidification[J]. *Materials & Design*, 2022, 224: 111 334.
- [16] DONG Y W, BU K, DOU Y Q, et al. Determination of interfacial heat-transfer coefficient during investment-casting process of single-crystal blades[J]. *Journal of Materials Processing Technology*, 2011, 211(12): 2 123-2 131.
- [17] BENNON W D, INCROPERA F P. Numerical analysis of binary solid-liquid phase change using a continuum model[J]. *Numerical Heat Transfer Applications*, 1988, 13(3): 277-296.
- [18] ELLIOTT A J, POLLOCK T M. Thermal analysis of the bridgman and liquid-metal-cooled directional solidification investment casting processes[J]. *Metallurgical and Materials Transactions*, 2007, A38(4): 871-882.
- [19] SZEŁIGA D, KUBIAK K, SIENIAWSKI J. Control of liquidus isotherm shape during solidification of Ni-based superalloy of single

- crystal platforms[J]. Journal of Materials Processing Technology, 2016, 234: 18-26.
- [20] 陈晶阳, 吴文津, 李青, 等. 采用低温度梯度 HRS 工艺制备的镍基单晶高温合金雀斑组织[J]. 中国有色金属学报, 2018, 28(12): 2 494-2 498.
- [21] YAN X W, ZHANG H, TANG N, et al. Multi-scale simulation of single crystal hollow turbine blade manufactured by liquid metal cooling process[J]. Progress in Natural Science Materials International, 2018, 28(1): 78-84.
- [22] 唐宁, 孙长波, 张航, 等. 高温合金单晶叶片定向凝固过程的宏观数值模拟[J]. 稀有金属材料与工程, 2013, 42(11): 2 298-2 303.
- [23] 马德新, 张琼元, 王海洋, 等. 高温合金单晶铸造中凝固条件的时空变化及对杂晶缺陷的影响[J]. 铸造, 2019, 68(2): 103-110.
- [24] YANG X L, DONG H B, WANG W, et al. Microscale simulation of stray grain formation in investment cast turbine blades[J]. Materials Science and Engineering, 2004, A386(1-2): 129-139.
- [25] MA D X, BÜHRIG-POLACZEK A. Application of a heat conductor technique in the production of single-crystal turbine blades[J]. Metallurgical and Materials Transactions, 2009, B40(5): 738-748.
- [26] WANG F, MA D X, ZHANG J, et al. Investigation of segregation and density profiles in the mushy zone of CMSX-4 superalloys solidified during downward and upward directional solidification processes[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2015, 620: 24-30.
- [27] HOBBS R A, TIN S, RAE C M F. A castability model based on elemental solid-liquid partitioning in advanced nickel-base single-crystal superalloys[J]. Metallurgical and Materials Transactions, 2005, A36(10): 2 761-2 773.
- [28] 马德新, 杨功显, 张琼元, 等. 消除单晶叶片中杂晶缺陷的方法: 中国, CN105108061A[P]. 2015-09-30.
- [29] XIAO J H, JIANG W G, HAN D Y, et al. Evolution of crystallographic orientation and microstructure in the triangular adapter of grain continuator of a 3rd-generation single crystal superalloy casting during directional solidification[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2022, 898: 162 782.
- [30] MENG X B, LI J G, ZHU S Z, et al. Method of stray grain inhibition in the platforms with different dimensions during directional solidification of a Ni-base superalloy[J]. Metallurgical and Materials Transactions, 2014, A45(3): 1 230-1 237.
- [31] 秦岭, 沈军, 杨功显, 等. 新型可脱式隔热板对燃气轮机叶片定向凝固过程的影响[J]. 稀有金属材料与工程, 2016, 45(5): 1 284-1 289.
- [32] BECKERMAN C. Modelling of macrosegregation: Applications and future needs[J]. Metallurgical Reviews, 2002, 47(5): 243-261.
- [33] THEVIK H J, MO A. The influence of micro-scale solute diffusion and dendrite coarsening upon surface macrosegregation[J]. International Journal of Heat & Mass Transfer, 1997, 40(9): 2 055-2 065.
- [34] WORSTER M G. Instabilities of the liquid and mushy regions during solidification of alloys[J]. Journal of Fluid Mechanics, 1992, 237: 649-669.
- [35] BECKERMAN C, GU J P, BOETTINGER W J. Development of a freckle predictor via rayleigh number method for single-crystal nickel-base superalloy castings[J]. Metallurgical and Materials Transactions, 2000, A31, 2 545-2 557.
- [36] TIN S, POLLOCK T M. Predicting freckle formation in single crystal Ni-base superalloys[J]. Journal of Materials Science, 2004, 39(24): 7 199-7 205.
- [37] AUBURTIN P, WANG T, COCKCROFT S L, et al. Freckle formation and freckle criterion in superalloy castings[J]. Metallurgical and Materials Transactions, 2000, B31(4): 801-811.
- [38] 傅恒志. 航空航天材料定向凝固[M]. 北京: 科学出版社. 2015.
- [39] RAMIREZ J C, BECKERMAN C. Evaluation of a rayleigh-number-based freckle criterion for Pb-Sn alloys and Ni-base superalloys[J]. Metallurgical & Materials Transactions, 2003, A34(7): 1 525-1 536.
- [40] VALDÉS J, KING P, LIU X. On the formulation of a freckling criterion for Ni-based superalloy vacuum arc remelting ingots[J]. Metallurgical & Materials Transactions, 2010, A41(9): 2 408-2 416.
- [41] PUSTAL B, MA D, WARNKEN N, et al. Criterion function for predicting freckles in CMSX-4 during directional solidification[J]. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 2016, 117(1): 012 060.
- [42] FELICELLI S D, SUNG P K, POIRIER D R, et al. Transport properties and transport phenomena in casting nickel superalloys[J]. International Journal of Thermophysics, 1998, 19(6): 1 657-1 669.
- [43] SUNG P K, POIRIER D R, FELICELLI S D. Simulating the initiation of a channel during directional solidification of a superalloy[J]. Metallurgical and Materials Transactions, 2001, A32(1): 202-207.
- [44] POIRIER D R. Permeability for flow of interdendritic liquid in columnar-dendritic alloys[J]. Metallurgical Transactions, 1987, B18(1): 245-255.
- [45] SUN Q Y, REN Y, LIU D R. Numerical investigations of freckles in directionally solidified nickel-based superalloy casting with abrupt contraction in cross section[J]. Results in Physics, 2019, 12: 1 547-1 558.
- [46] SCHNEIDER M C, GU J P, BECKERMAN C, et al. Modeling of micro- and macrosegregation and freckle formation in single-crystal nickel-base superalloy directional solidification[J]. Metallurgical and Materials Transactions, 1997, A28(7): 1 517-1 531.
- [47] GU J P, BECKERMAN C, GIAMEI A F. Motion and remelting of dendrite fragments during directional solidification of a nickel-base superalloy[J]. Metallurgical and Materials Transactions, 1997, A28(7): 1 533-1 542.
- [48] WU M, LUDWIG A, BÜHRIG-POLACZEK A, et al. Influence of convection and grain movement on globular equiaxed solidification[J]. International Journal of Heat & Mass Transfer, 2003, 46(15): 2 819-2 832.
- [49] LI J, WU M, HAO J, et al. Simulation of channel segregation using a two-phase columnar solidification model - Part I: Model description and verification[J]. Computational Materials Science, 2012, 55: 407-418.

- [50] LI J, WU M, LUDWIG A, et al. Simulation of macrosegregation in a 2.45-ton steel ingot using a three-phase mixed columnar-equiaxed model[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2014, 72: 668-679.
- [51] NI J, BECKERMANN C. A volume-averaged two-phase model for transport phenomena during solidification[J]. Metallurgical Transactions, 1991, B22(3): 349-361.
- [52] SCHNEIDER M C, BECKERMANN C. Formation of macrosegregation by multicomponent thermosolutal convection during the solidification of steel[J]. Metallurgical and Materials Transactions, 1995, A26(9): 2 373-2 388.
- [53] WANG W, LEE P D, MCLEAN M. A model of solidification microstructures in nickel-based superalloys: Predicting primary dendrite spacing selection[J]. Acta Materialia, 2003, 51(10): 2 971-2 987.
- [54] ZHANG H, XU Q Y. Multi-scale simulation of directional dendrites growth in superalloys[J]. Journal of Materials Processing Technology, 2016, 238: 132-141.
- [55] ZHANG H, XU Q Y, SHI Z X, et al. Numerical simulation of dendrite grain growth of DD6 superalloy during directional solidification process[J]. Acta Metallurgica Sinica, 2014, 50(3): 345-354.
- [56] REN N, PANWISAWAS C, LI J, et al. Solute enrichment induced dendritic fragmentation in directional solidification of nickel-based superalloys[J]. Acta Materialia, 2021: 117 043.
- [57] REN N, LI J, PANWISAWAS C, et al. Insight into the sensitivities of freckles in the directional solidification of single-crystal turbine blades[J]. Journal of Manufacturing Processes, 2022, 77: 219-228.
- [58] ZHANG H, LIU X, MA D X, et al. Digital twin for directional solidification of a single-crystal turbine blade[J]. Acta Materialia, 2023, 244: 118 579.
- [59] MA D X, WU Q, BÜHRIG-POLACZEK A. Some new observations on freckle formation in directionally solidified superalloy components[J]. Metallurgical and Materials Transactions, 2012, B43(2): 344-353.
- [60] MA D X, BÜHRIG-POLACZEK A. The geometrical effect on freckle formation in the directionally solidified superalloy CMSX-4[J]. Metallurgical and Materials Transactions, 2014, A45(3): 1 435-1 444.
- [61] WANG F, MA D X, BÜHRIG-POLACZEK A. Effect of ceramic cores on the freckle formation during casting Ni-based single crystal superalloys[J]. Metallurgical and Materials Transactions, 2019, A50(2): 804-815.
- [62] RAPPAZ M, GANDIN C A. Probabilistic modelling of microstructure formation in solidification processes[J]. Acta Metallurgica et Materialia, 1993, 41(2): 345-360.
- [63] GANDIN C A, RAPPAZ M. A coupled finite element-cellular automaton model for the prediction of dendritic grain structures in solidification processes[J]. Acta Metallurgica et Materialia, 1994, 42(7): 2 233-2 246.
- [64] DONG H B, LEE P D. Simulation of the columnar-to-equiaxed transition in directionally solidified Al-Cu alloys[J]. Acta Materialia, 2005, 53(3): 659-668.
- [65] 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, 2004, E69(6): 061 610.
- [66] GUILLEMOT G, GANDIN C A, COMBEAU H. Modeling of macrosegregation and solidification grain structures with a coupled cellular automaton— Finite element model[J]. ISIJ International, 2006, 46(6): 880-895.
- [67] SAAD A, GANDIN CA, BELLET M, et al. Simulation of channel segregation during directional solidification of In-75Ga qualitative comparison with in-situ observations[J]. Metallurgical and Materials Transactions, 2015, A46(11): 4 886-4 897.
- [68] YUAN L, LEE P D. Microstructural simulations of the influence of solidification velocity on freckle initiation during directional solidification[J]. ISIJ International, 2010, 50(12): 1 814-1 818.
- [69] YUAN L, LEE P D, DJAMBAZOV G, et al. Numerical simulation of the effect of fluid flow on solute distribution and dendritic morphology[J]. International Journal of Cast Metals Research, 2009, 22(1-4): 204-207.
- [70] WANG W L, LUO S, ZHU M Y. Dendritic growth of high carbon iron-based alloy under constrained melt flow[J]. Computational Materials Science, 2014, 95: 136-148.
- [71] LUO S, WANG W L, ZHU M Y. Cellular automaton modeling of dendritic growth of Fe-C binary alloy with thermosolutal convection[J]. International Journal of Heat & Mass Transfer, 2018, 116: 940-950.
- [72] REN N, LI J, BOGDAN N, et al. Simulation of dendritic remelting and fragmentation using coupled cellular automaton and Eulerian multiphase model[J]. Computational Materials Science, 2020, 180: 109 714.
- [73] DAI H J, D'SOUZA N, DONG H B. Grain selection in spiral selectors during investment casting of single-crystal turbine blades: Part I. Experimental investigation[J]. Metallurgical and Materials Transactions, 2011, A42(11): 3 430-3 438.
- [74] DAI H J, DONG H B, D'SOUZA N, et al. Grain selection in spiral selectors during investment casting of single-crystal components: Part II. Numerical modeling[J]. Metallurgical and Materials Transactions, 2011, A42(11): 3 439-3 446.
- [75] YANG X, NESS D, LEE P D, et al. Simulation of stray grain formation during single crystal seed melt-back and initial withdrawal in the Ni-base superalloy CMSX4[J]. Materials Science and Engineering, 2005, A413-414: 571-577.
- [76] D'SOUZA N, JENNINGS P A, YANG X L, et al. Seeding of single-crystal superalloys-Role of constitutional undercooling and primary dendrite orientation on stray-grain nucleation and growth[J]. Metallurgical and Materials Transactions, 2005, B36(5): 657-666.
- [77] SHEVCHENKO N, BODEN S, ECKERT S, et al. Observation of segregation freckle formation under the influence of melt convection[J]. IOP Conference, 2012, 27(1): 12 085.
- [78] SHEVCHENKO N, BODEN S, GERBETH G, et al. Chimney formation in solidifying Ga-25In alloys under the influence of thermosolutal melt convection[J]. Metallurgical and Materials Transaction 2013, A44(8): 3 797-3 808.

- [79] REINHART G, GRANGE D, ABOU-KHALIL L, et al. Impact of solute flow during directional solidification of a Ni-based alloy: In situ and real-time X-radiography[J]. Acta Materialia, 2020, 194: 68-79.
- [80] RUVALCABA D, MATHIESEN R H, ESKIN D G, et al. In situ observations of dendritic fragmentation due to local solute-enrichment during directional solidification of an aluminum alloy[J]. Acta Materialia, 2007, 55(13): 4 287-4 292.
- [81] KARAGADDE S, YUAN L, SHEVCHENKO N, et al. 3D microstructural model of freckle formation validated using in situ experiments[J]. Acta Materialia, 2014, 79: 168-180.
- [82] YUAN L, LEE P D. A new mechanism for freckle initiation based on microstructural level simulation[J]. Acta Materialia, 2012, 60(12): 4 917-4 926.
- [83] COX D C, ROEBUCK B, RAE C M F, et al. Recrystallisation of single crystal superalloy CMSX-4[J]. Materials Science and Technology, 2003, 19(4): 440-446.
- [84] PANWISAWAS C, MATHUR H, GEBELIN J C, et al. Prediction of recrystallization in investment cast single-crystal superalloys[J]. Acta Materialia, 2013, 61(1): 51-66.
- [85] HAN D Y, JIANG W G, XIAO J H, et al. Investigating the evolution of freckles into sliver defects in Ni-based single-crystal superalloy castings[J]. Materials Today Communications, 2021, 27: 102 350.
- [86] XU W L, FU W, MA D X, et al. Sliver defect formation in single crystal Ni-based superalloy castings[J]. Materials & Design, 2020, 196: 109 138.
- [87] AVESON J W, REINHART G, NGUYEN-THI H, et al. Origins of misorientation defects in single crystal castings: A time resolved in situ synchrotron X-ray radiography study[J]. Mater Web of Conferences, 2014, 14: 05 003.
- [88] D'SOUZA N, NEWELL M, DEVENDRA K, et al. Formation of low angle boundaries in Ni-based superalloys[J]. Materials Science and Engineering, 2005, A413-414: 567-570.
- [89] PILLING J, HELLAWELL A. Mechanical deformation of dendrites by fluid flow[J]. Metallurgical and Materials Transactions, 1996, A27 (1): 229-232.
- [90] YAMAGUCHI M, BECKERMAN C. Simulation of solid deformation during solidification: Compression of a single dendrite[J]. Acta Materialia, 2013, 61(11): 4 053-4 065.
- [91] YAMAGUCHI M, BECKERMAN C. Simulation of solid deformation during solidification: Shearing and compression of polycrystalline structures[J]. Acta Materialia, 2013, 61(6): 2 268-2 280.
- [92] REN J K, CHEN Y, CAO Y F, et al. A phase-field simulation of the solidification process under compression[J]. Journal of Materials Research and Technology, 2021, 13: 2 210-2 219.
- [93] AVESON J W, TENNANT P A, FOSS B J, et al. On the origin of sliver defects in single crystal investment castings[J]. Acta Materialia, 2013, 61(14): 5 162-5 171.
- [94] HUANG Y Q, SHEN J, WANG D, et al. Evolution of sliver defect in Ni-based single crystal superalloy[J]. Metallurgical and Materials Transactions, 2020, A51(12): 6 364-6 372.
- [95] MULLIS A M, WALKER D J, BATTERSBY S E, et al. Deformation of dendrites by fluid flow during rapid solidification[J]. Materials Science and Engineering, 2001, A304-306: 245-249.
- [96] YANG L, REN N, PANWISAWAS C, et al. Melt flow-induced mechanical deformation of dendrites in alloy solidification: A coupled thermal fluid - solid mechanics approach[J]. Journal of Materials Research and Technology, 2023, 25: 4 094-4 109.

(编辑:彭瑾)

《特种铸造及有色合金》征订启事

《特种铸造及有色合金》杂志是中国科学技术协会主管、中国机械工程学会铸造分会和武汉机械工艺研究所共同主办的全国性科技期刊,是对国内外公开发行的中文核心期刊,中国科技论文统计与分析用刊,SA、CA、MA、AJ、Scopus 等国内外权威数据库及检索系统收录期刊,并获得全国优秀科技期刊一等奖、国家期刊奖、新中国 60 年有影响力的期刊、湖北省十大有影响力的自然学术期刊等。

本刊主要报道各种(黑色和有色合金)特种铸造方法、各种有色合金及复合材料成形的理论、工艺、设备、材料、测试与控制、计算机应用等方面的科技成果、生产技术和现场经验,并报道各相关学科和交叉学科,如挤压铸造(液态模锻)、半固态加工、电子封装、高熵合金、非晶合金(金属玻璃)、焊接、粉末冶金、合金化、热处理、表面处理等方面的学术研究和科技信息以及上述内容的国内外发展动向、行业活动、学术会议、消息动态等。

本刊诚征国内外广告,业务范围:铸造及有色合金材料、辅助材料、铸造及相关设备、铸造生产线、测控与控制设备、仪器仪表、计算机应用软件、铸造展会等。

本刊为月刊,标准(大)16 开,邮发代号 38-109。邮发订价每期 20 元,全年 240 元,如须快递,费用另计。全国各地邮局均可订阅,也可直接向本刊编辑部邮购,本刊还提供过刊、压铸宝典和年会专刊邮购服务。

特种铸造及有色合金杂志社(武汉)有限公司



地址:武汉市江岸区九万方路 26 号

邮编:430019

电话:027-85358206,85486024

传真:027-85358127

投稿网址:www.special-cast.com

邮箱:tzzz@special-cast.com

