

# 铝硅合金微观组织数值模拟的研究现状及发展趋势

张梦军, 游志勇, 张云冠, 艾雨蒙, 牛城毅, 牛晓峰

(太原理工大学, 山西太原 030024)

**摘要:** 随着计算材料的发展, 数值模拟技术已在铝硅合金凝固过程微观组织的研究中发挥了重要作用。本文就数值模拟技术应用于铝硅合金凝固过程微观组织的形成过程, 综述了模拟铝硅合金微观组织形成过程必要的形核与生长模型; 着重描述了广泛应用于模拟铝硅合金微观组织形成过程的方法, 如元胞自动机法和相场法; 最后展望了未来铝硅合金数值模拟技术的发展趋势。

**关键词:** 铝硅合金; 数值模拟; 数学模型; 元胞自动机; 相场法

作者简介:

张梦军(1998-), 男, 硕士, 主要研究方向为铝硅合金细化机制数值模拟及机器学习。E-mail: zmj1750658320@163.com

通讯作者:

游志勇, 男, 副教授, 硕士生导师。电话: 13603511486, E-mail: 13603511486@163.com

中图分类号: TG146.2

文献标识码: A

文章编号: 1001-4977(2023)11-1391-08

基金项目:

2021 中央引导地方科技发展资金项目(YDZJSX2021 A008)。

收稿日期:

2022-10-13 收到初稿,  
2023-06-03 收到修订稿。

现代制造业向着轻量化、高性能化和数字化发展, 也对材料及其成形工艺提出了新的要求<sup>[1-3]</sup>。铝硅(Al-Si)合金是一种廉价且应用广泛的合金, 由于其密度低、比强度、比刚度高、耐热性和耐腐蚀性等优异性能已经被广泛应用于汽车、航天航空和军工等领域<sup>[4-5]</sup>。因此, Al-Si合金凝固特性的研究和加工技术的发展正在成为世界各国的重要国家计划<sup>[6-9]</sup>。一般来讲, 在对铝硅合金进行热加工之前, 可以通过相图的方式了解其形成过程, 进而获得需要的组织结构来达到其对应的性能要求。Al-Si合金共晶点等特征值如图1<sup>[4]</sup>所示。铝硅合金相图是由相 $\alpha$ 和 $\beta$ 相组成的简单二元共晶相图。 $\alpha$ 相是Si溶于Al形成的固溶体, 因在室温下Si在Al中的溶解度为0.05%, 在共晶温度时达到最大也仅1.65%, 所以 $\alpha$ 相的性能与纯铝相似, 具有良好的强度和韧性。 $\beta$ 相是Al溶于Si形成的固溶体, 同样 $\beta$ 相中可溶解的Al也极少, 因此可以近似看作纯Si, 直接用Si相来表示 $\beta$ 相, 所以 $\beta$ 相的脆性较大<sup>[10]</sup>。

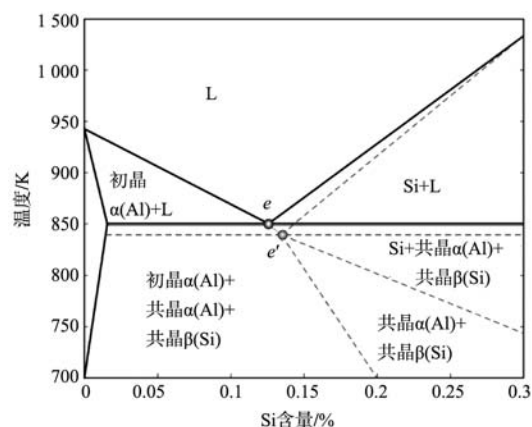


图1 Al-Si合金相图

Fig. 1 Phase diagram of aluminum silicon alloy

从共晶相图中可以看出, 铝硅合金的组织是由具有韧性的 $\alpha$ 相和硬脆的 $\beta$ 相组成, 铝硅合金虽然力学强度较高, 但由于硅相的存在降低了它的塑性变形能力。在对铝硅合金的热加工过程中人们发现共晶硅相在自然条件下将会长成层片状, 这种

形态的共晶硅相易割裂 $\alpha$ 相的基体,而且在其尖角部位还会引起应力集中,从而降低该合金的力学性能,使合金的塑性下降,所以铝硅合金的力学性能取决于共晶Si的形态<sup>[9-11]</sup>。因此对共晶硅的精炼和细化是提高铝硅合金力学性能的有效方式。迄今为止,关于Al-Si合金的研究大多关注通过加入微量元素对铝硅合金的晶粒细化改性来提高合金的力学性能,比如文献[12-18]分别添加Sc、Na、P、Sr、Ce使共晶Si的晶粒细化来提高铝硅合金的力学性能。众所周知,微观结构是由凝固过程成分演变所决定的,所以想要达到对微观结构的深入了解,就要对凝固过程进行详细研究。然而,由于微观结构的物理尺度很小,尤其是共晶结构,它们比初晶小得多,所以用现有的表征仪器对微观结构形成的动态行为通常很难直接观察到<sup>[19]</sup>。

随着计算机技术的成熟,通过建立合理的物理和数学模型,依托计算机强大的计算服务系统,即可达到对微观组织凝固过程进行量化、数据化和可视化的处理,进而推断出对应条件下合金的力学性能,从而帮助科研人员更好地对产品进行设计和优化。对于铝硅合金而言,其凝固过程微观组织模拟的方法早已取得很好的进展,无论是确定性方法还是随机性方法或者相场法,都能够一定程度上比较准确地模拟合金的凝固组织。不过随着工程要求的提高以及数值模拟技术的更新,目前在凝固过程微观组织模拟领域,应用最多的方法是元胞自动机法和相场法。Wang等人<sup>[20]</sup>采用多相场(MPF)方法与CALPHAD热力学和原子迁移率的耦合,在考虑凝固过程潜热的条件下研究了过共晶Al-16%Si合金的凝固顺序、微观结构演变、共晶硅形态和温度演变等。Kim等人<sup>[21]</sup>采用弛豫方程替换传统相场法求解等扩散电位条件(EDP)的方法来提高计算效率,并且利用相场法与弛豫方程的耦合模拟了Al-Si合金中枝晶的生长,并将结果与用热力学数据库模拟的结果进行了比较,两者结果非常吻合。然而,由于相场法模拟需要亚微米的网格分辨率和相当复杂的物理计算,因此它的计算域较小,而且计算效率较低,计算成本很高。元胞自动机作为一种简单、直观的方法可以较好地揭示系统整体的性质。Wang等人<sup>[22]</sup>利用元胞自动机成功预测了不同合金和不同冷却速率下的微孔演变,结果表明,随着冷却速率的增大,微孔的形核率增大,生长速度减慢;Cu和Si的添加会降低氢的溶解度,溶解度越低,微孔形核时间越早,尺寸越大。

## 1 铝硅合金微观组织模拟的数学模型

铝硅合金微观组织在凝固形成过程中主要分为形核与生长阶段。形核方式又分为均质形核和异质形

核,本文只描述了模拟实际凝固过程中所经历的异质形核过程所用到的数学模型;生长方式根据铝硅合金在凝固过程主要形成的微观结构分为枝晶生长和共晶生长,本文对模拟铝硅合金微观组织的枝晶生长和共晶生长所用到的相关数学模型进行了阐述。

### 1.1 形核模型

铝硅合金的形核根据其形成方式可分为均质形核和异质形核。均质形核由原子团自发形成,形核过程需要较大的过冷度,一般为 $0.2 T_L$ 左右( $T_L$ 为液相线温度);异质形核在固液界面处生成,形核过程不需要太大的过冷度。在合金的实际凝固过程中常常是较小的过冷度下就已经形核生长,所以对铝硅合金来说,只考虑它的异质形核过程。本文给出了一些在实验数据基础上归纳出来的异质形核计算方法。它们可分为两类:连续形核和瞬时形核。

1966年,Oldfield首先提出了适用于灰铸铁共晶生长的连续形核模型,见式(1)。因为形核的驱动力为过冷度的大小,于是该模型用过冷度与形核密度函数来表示形核过程,但该模型只能适用于较小过冷度,当过冷度较大时,该模型并不适合描述形核过程<sup>[23]</sup>。

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -2K_1 (\Delta T) \frac{\partial T}{\partial t} \quad (1)$$

式中: $\frac{\partial n}{\partial t}$ 为形核率; $K_1$ 为由实验确定的常数; $\Delta T$ 为过冷度; $\frac{\partial T}{\partial t}$ 为凝固速率。

1984年,Hunt在模拟二维等轴共晶生长时提出了瞬时形核模型,见式(2)。由模型得出形核率与过冷度呈指数关系,它对固相率的计算是比较方便且准确的,但对晶粒度的预测有失偏颇<sup>[24]</sup>。

$$\frac{\partial n}{\partial t} = K_1 (n_0 - n_t) \exp \left[ -\frac{K_2}{T(\Delta T)^2} \right] \quad (2)$$

式中: $\frac{\partial n}{\partial t}$ 为形核率; $K_1$ 、 $K_2$ 为常数; $n_0$ 为初始形核基底密度; $n_t$ 为 $t$ 时刻晶粒形核密度; $\Delta T$ 为过冷度。

实际形核过程应该是连续渐进的过程,而不是瞬时突变的过程。所以1989年,Rappaz、Thevoz等认为在某一个过冷度下,形核密度是具体某一分布函数(如高斯分布)的积分。因为该模型用连续的分布函数描述形核特征,所以也被称为准连续形核模型<sup>[25-26]</sup>,见式(3)。目前可以在大量文献中看到此模型应用最广且较为准确,对工程需求具有实际指导意义。

$$\frac{\partial n}{\partial (\Delta T)} = \frac{n_{\max}}{\sqrt{2\pi} \Delta T_\sigma} \int_0^{\Delta T} \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{\Delta T - \Delta T_{\text{muc}}}{\Delta T_\sigma} \right)^2 \right] d(\Delta T) \quad (3)$$

式中: $\frac{\partial n}{\partial (\Delta T)}$ 为形核密度; $n_{\max}$ 为初始形核基底数;

$\Delta T_{\text{muc}}$ 为平均过冷度;  $\Delta T_{\sigma}$ 为标准方差过冷度。

## 1.2 生长模型

铝硅合金微观组织的生长模型按照其生成方式可以分为共晶合金和枝晶合金两大类。其中枝晶合金在微观组织中占比较大,且凝固生长情况更为复杂,所以对枝晶生长的研究也更为聚焦。

### 1.2.1 枝晶生长

枝晶生长的驱动力由熔体过冷度  $\Delta T$  决定,如式(4)。

$$\Delta T = \Delta T_c + \Delta T_r + \Delta T_k + \Delta T_f \quad (4)$$

式中:  $T_c$ 、 $\Delta T_r$ 、 $\Delta T_k$ 、 $\Delta T_f$  分别为成分过冷、固液界面的曲率过冷、生长动力学过冷和热过冷。

对于枝晶生长模型目前比较常见且应用较广泛的有LGK模型和KGT模型。Lipton, Glicksman和Kurz于1984年结合Ivantsov函数,开发了针对稳态自由晶生长的模型<sup>[27]</sup>,见式(5)。并于1987年在原有模型的基础上推导出了枝晶尖端生长速度与尖端半径 $R$ 的关系<sup>[28]</sup>,见式(6), (7)。

$$v = 2D_L P_c / R \quad (5)$$

$$R = 2\pi \sqrt{\frac{\Gamma}{m_L G_c \xi_c - G}} \quad (6)$$

$$\xi_c = 1 - \frac{2k}{[1 + (2\pi/P_c)^2]^{1/2} - 1 + 2k} \quad (7)$$

式中:  $v$ 为枝晶尖端生长速度;  $D_L$ 为液相中溶质扩散系数;  $P_c$ 为溶质Péclet数;  $R$ 为枝晶尖端半径;  $\Gamma$ 为Gibbs-Thomson系数;  $m_L$ 为液相线斜率;  $G_c$ 为枝晶尖端前熔体中的溶质浓度梯度;  $G$ 为温度梯度;  $k$ 为溶质平衡分配系数。

KGT模型是Kurz、Giovanola和Trivedi于1986年在忽略了式(4)中 $\Delta T_r$ 、 $\Delta T_k$ 和 $\Delta T_f$ 的影响上建立的针对定向凝固条件下枝晶的生长模型。最后还给出了枝晶尖端生长速率与过冷度之间的简化关系式<sup>[29]</sup>,见式(8)。

$$v = \alpha \Delta T^2 + \beta \Delta T^3 \quad (8)$$

式中:  $\alpha$ 和 $\beta$ 为枝晶生长系数。

### 1.2.2 共晶生长

共晶合金凝固涉及从液相中形成两个固相的共同生长过程。对于约束条件下的柱状晶生长( $G > 0$ ),两种固相垂直于固液界面呈片状和棒状生长。生长速率 $v$ 、过冷度 $\Delta T$ 和晶体层片间距Jackson和Hunt模型<sup>[30]</sup>(式9, 10)。

$$\lambda^2 v = K_i / K_c \quad (9)$$

$$(\Delta T_{E,c})^2 v = \frac{K_i K_c}{4} \quad (10)$$

式中:  $\lambda$ 为晶体层片间距;  $v$ 为生长速率;  $K_i$ 、 $K_c$ 为共晶生长系数;  $\Delta T_{E,c}$ 为共晶温度。

## 2 铝硅合金微观组织模拟方法

之前已提到目前常用的微观组织模拟方法有元胞自动机法和相场法,元胞自动机法首先要建立组元之间的相互作用规则,其次让晶粒按照这一规则随机形核与生长,最后直观形象地体现晶粒的生长竞争过程以及它们的形貌变化。相场法在整个求解域中采用统一的数值计算方法来求解相场的分布,这种方法不需要刻意跟踪固液界面,所以其克服了原有模拟方法带来的形状误差,大大提高了计算模拟结果的精度,这种方法能够准确描述晶粒的演变进程,尤其是微观组织的三维形貌,但其计算域较小,计算效率低,计算成本高。

### 2.1 元胞自动机法

20世纪90年代初,Hesselbarth和Gobel<sup>[31]</sup>在研究再结晶的过程中提出了一种新的随机性方法。该方法也是以随机概念为基础,相邻组元之间遵循一定的相互作用规则,具有一定的物理基础,最后能够简单直观展现系统整体性质的方法,即元胞自动机法(Cellular Automaton, CA)。Rappaz等<sup>[32]</sup>首次建立了能够模拟实际结晶过程中晶粒演变的CA计算模型。该CA模型用上述形核模型中的式(3)来计算晶粒密度,通过该模型成功预测了结晶过程中柱状晶到等轴晶的转变过程,模拟结果与试验结果相吻合。

目前,元胞自动机在关于铝硅合金的数值模拟研究方面对于铝硅合金中共晶的生长与微孔的形成这两个方面的研究比较广泛。比如Ao等人<sup>[4]</sup>研究了铝硅合金中的不规则共晶在5~20 K大范围过冷条件下的演变过程。结果如图2所示<sup>[4]</sup>,随着过冷度的增加,共晶Si的生长速度显著加快,在固液界面前沿吸收更多的固溶Si,从而增强了对共晶Al相的形核限制,因此,增加冷却速度将有利于细化共晶Si的尺寸并缩小它们的间距。Chen等人<sup>[33]</sup>则研究了不规则共晶硅分别在有无Sr改性条件下的凝固过程,模拟结果同样证明了对于未改性的合金,越高的过冷度,共晶的生长速度越快,组织越细化,层间距越窄;改性后合金中共晶硅呈明显的纤维状态。

另一方面是研究微孔的形成和生长。微孔的形成机制主要有两种:(1)由于凝固合金的收缩和凝固过程中的补料不足导致的缩孔;(2)由于空气滞留或氢气等不溶性气体引起的气孔。Gu等人<sup>[34]</sup>开发了一个三

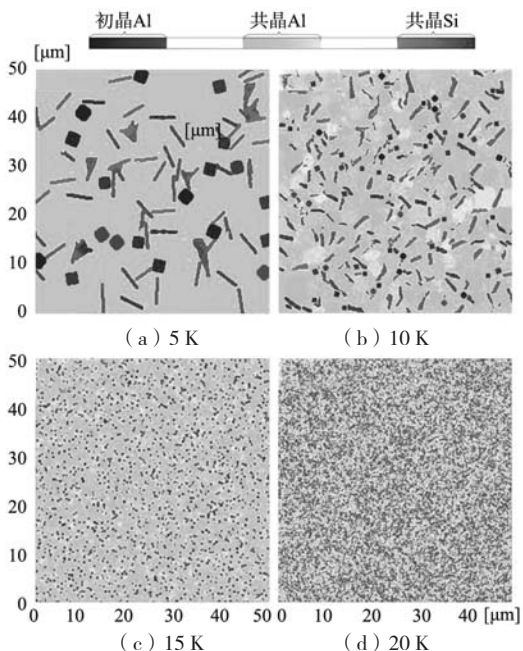
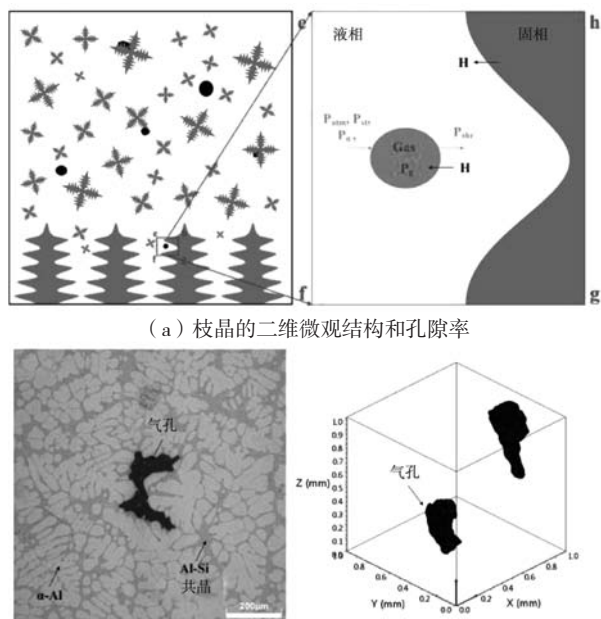


图2 Al-12.6 wt% Si 共晶微观组织在不同过冷度下的形态  
Fig. 2 Morphologies of Al-12.6 wt% Si eutectic microstructure under different undercooling

维 (3-D) 元胞自动机 (CA) 模型来模拟凝固组织和微孔的形成和演变, 如图3所示<sup>[34]</sup>。其中氢致孔隙率和收缩孔隙率以及凝固过程中的枝晶生长都被纳入3-D CA模型。并且作者应用该模型同时模拟了凝固枝晶和微孔随时间的演变, 研究和讨论了不同初始条件 (例如冷却速率、收缩压力和初始氢浓度) 对孔隙演化的



(a) 枝晶的二维微观结构和孔隙率  
(b) Al-Si合金的光学显微照片 (c) X射线显微计算机断层扫描的3-D孔隙形态  
图3 枝晶生长和气孔形成示意图

Fig. 3 Schematic diagram of dendrite growth and pore formation

影响。

图4展示了当温度降低到共晶温度点时孔隙率和枝晶在50 K/s、20 K/s和5 K/s不同凝固速率下的模拟形态以及氢浓度<sup>[34]</sup>。结果表明, 随着冷却速度的降低, 孔隙总数减少, 而平均孔径增加。相反, 较高的冷却速度将导致晶核增加, 枝晶生长速度更快, 枝晶生长时间更短, 因此晶粒尺寸更细或二次枝晶臂间距更小。而枝晶数量的增加和复杂的枝晶形态又会阻碍孔隙的生长和氢在剩余液体中的扩散。局部富氢浓度导致孔隙核数量增加, 因为熔体来不及进行孔生长和氢扩散, 导致孔半径更小, 孔数量增加。

图5绘制了孔隙率百分比随温度、不同收缩压力和不同初始氢浓度的变化曲线<sup>[34]</sup>。很明显, 最终孔隙率随着收缩压力的增加而增加。可以得出, 收缩压力的变化不影响孔的形成。

另外, Wang<sup>[22]</sup>等人除了考虑冷却速度对孔隙形成的影响, 还利用元胞自动机的方法模拟了合金添加对铝硅合金微孔隙度形成的影响。从图6可以看出<sup>[35]</sup>, 随着Si元素和Cu元素的添加, 微孔的尺寸增大, 这是因为合金元素的添加导致氢的溶解度降低, 这意味着微孔成核所需要的氢过饱和浓度降低, 这就增加了Al-Si合金中微孔的生长时间, 因此, Al-7.3Si-1.5Cu的微孔尺寸明显大于其他两种合金。除此之外, 还可以看到微孔的形貌变化也很大, Al-7.3Si-1.5Cu中的微孔具有较大的球形度, 形貌接近椭圆形, 这是由于微孔的生长受枝晶的限制较少。Al-5.3Cu和Al-4.3Cu合金的共晶成分相对较小, 可以看出, 微孔形成于后期。此时, 微孔只能在枝晶之间生长, 形成复杂的形貌。总之, 向铝合金中添加溶质元素, 进而影响氢溶解度, 从而影响氢致孔隙的成核时间, 还会对共晶分数产生影响。因此, 合金成分对微孔的大小和形貌影响很大。

## 2.2 相场法

相场方法由于其本身的特性, 不需要跟踪固/液界面, 可以描述枝晶的形貌, 尤其是三维形貌, 所以研究者们将相场法大多应用在模拟微观组织的三维形貌上。Das等人<sup>[35]</sup>利用三维相场模拟了Al-7Si-0.3Mg合金半固态加工过程中球状晶粒形成的过程, 旨在深入了解这种工艺的微观结构演化机制。图7<sup>[36]</sup>展示了保温7 min后未经处理的浆料和用精炼和改性剂处理的浆料的模拟显微照片, 并与它们的实验对应物进行了比较。可以很明显的看出, 目前的3D模型能够对浆液的液体含量和初级固体小球的微观结构形态达到了近乎准确的预测。

Wang等人<sup>[36]</sup>在利用相场法模拟铝硅合金枝晶形貌的过程中还考虑到了自然对流的影响, 采用晶格玻尔兹曼法 (LBM) 模拟了相场方程中的自然对流, 而

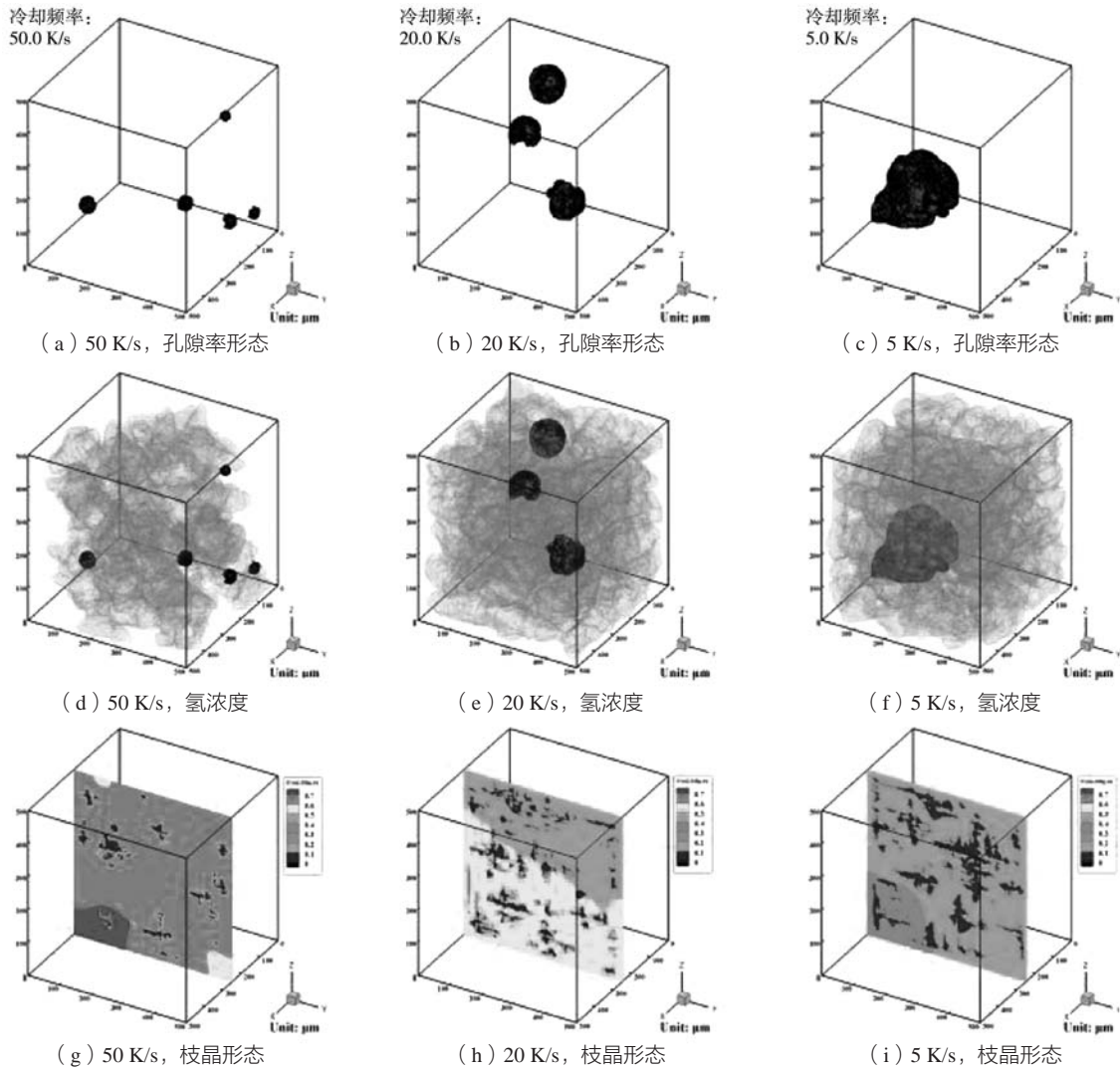
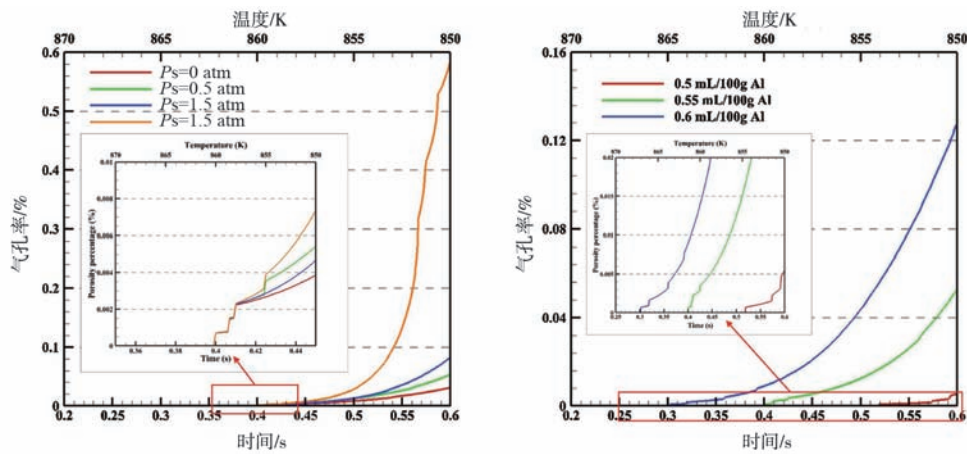


图4 不同冷却速率下孔隙率形态、枝晶形态和氢浓度的模拟结果

Fig.4 Simulated results of porosity morphology, dendrite morphology and hydrogen concentration with different cooling rates



(a) 不同收缩压力下的孔隙率

(b) 不同初始氢浓度下的孔隙率

图5 不同收缩压力和不同初始氢浓度下的孔隙率

Fig. 5 Percentage of porosity at different shrinkage pressures and different initial hydrogen concentrations

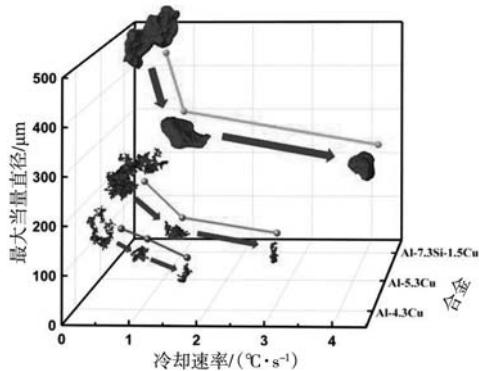


图6 冷却速率和合金添加对铝合金微孔最大当量直径的影响  
Fig. 6 Effects of cooling rates and alloying additions on the maximum equivalent diameter of microporosity in aluminum alloys

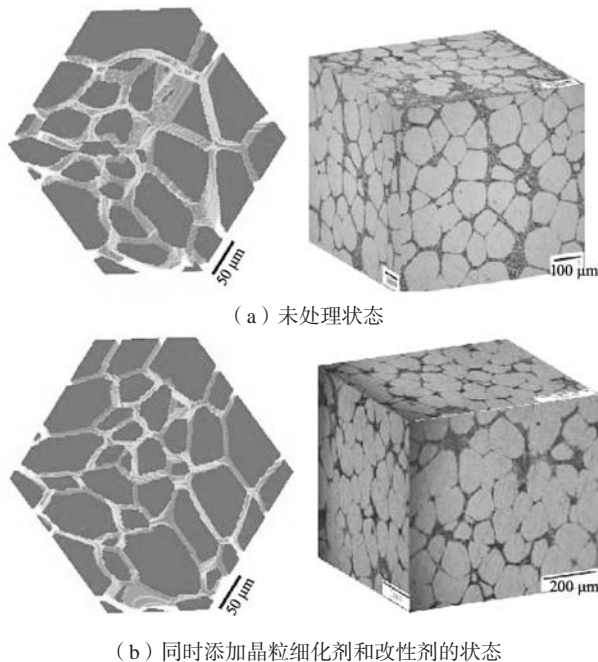


图7 浆料等温保持7分钟后模拟和实验显微照片的比较  
Fig. 7 Comparison of simulated and experimental micrograph after 7 min of isothermal holding of the slurry

且为了提高计算效率，通过耦合并行计算和自适应网格细化（AMR）算法的手段来保证模拟的可行性，最后从图8<sup>[36]</sup>中也可以看出，二次枝晶臂间距（SDAS）模拟结果与实验结果偏差不大，证明了该模型的可靠性。

但相场法的计算域较小，计算效率低，计算成本高，所以一些研究者在算法上对相场法进行了一些改进。由于大多数用于合金中扩散相变的相场模型（PFM）采用等扩散电位（EDP）条件来消除体自由能对界面能的贡献。然而，对于热力学性质通常由非常复杂的数据库给出的工程合金，求解EDP条件会大大限制PFM的计算效率。所以Kim等人<sup>[21]</sup>提出了一种有效解决EDP条件的方法，即通过修改有限界面耗散的PFM，

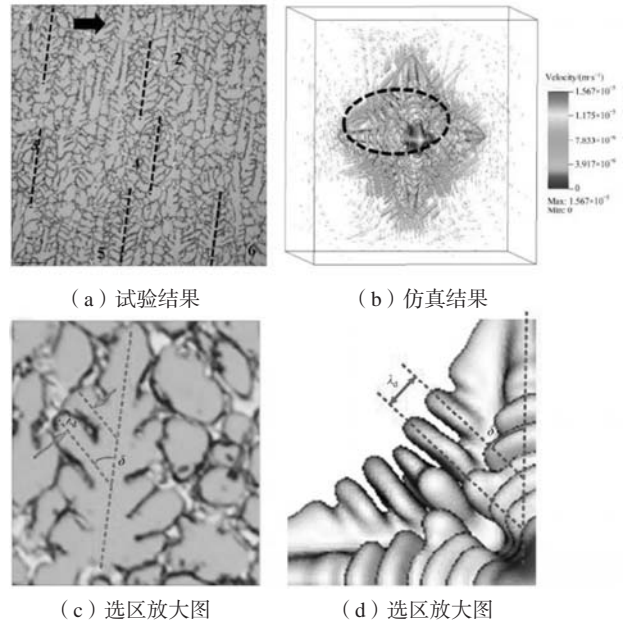


图8 实验与仿真得到的微观结构比较  
Fig. 8 Comparison of microstructures obtained by experiment and simulation

提取了分配系数的弛豫方程。将弛豫方程来代替传统PFM中的EDP条件，而且稀薄理想合金的弛豫方程似乎完全独立于相场和扩散场，因此可以解析求解。作者将使用PFM与弛豫方程相结合的模拟结果与使用完整的热力学数据库模拟Al-Si合金中的枝晶生长结果进行了比较，二者结果非常吻合。

### 3 总结与展望

本文主要阐述了铝硅合金微观组织的数值模拟方法，其中包括晶粒的形核与生长的模拟，微孔的形成与生长的模拟以及枝晶形貌的模拟等。又对于铝硅合金微观组织模拟的常用方法，即元胞自动机法和相场法进行了详细的案例阐述。这两种方法各有各的好处和缺点，元胞自动机可以简单直观的通过对局部元胞的模拟推断得到系统整体的性质，通过对所选单元晶粒的生成过程模拟达到对材料宏观缺陷的分析，但这种方法需要追踪固/液界面，在模拟过程中会带来形状误差，降低了模拟结果的精度。相场模型本质上是扩散模型，在固相、液相和界面这个区域内用一个统一的非线性扩散方程来求解相场的分布，所以它不需要刻意跟踪固液界面即可计算出复杂的相变过程，非常适合模拟晶粒的演变过程，尤其是微观组织的三维模拟，虽然其计算精度高，但计算域小，计算效率低，计算成本高，不适用于大规模模拟。

不过随着数值模拟技术的成熟与研究的深入，微观模拟尺度已向纳米级水平发展，从研究晶体的形

核与生长,柱状晶和等轴晶的转变,微孔的形成与生长等到利用分子动力学模拟,密度泛函理论方法进行原子尺度的纳观模拟。纳观尺度的模拟从原子层面给出体系的组织演变过程,可以清楚得到原子的运动轨迹,进而解释铝硅合金凝固过程中宏观发生的现象及其作用。结构决定性质,原子或电子的迁移决定组成成分的结构变化,因此,纳米级尺度的模拟不仅可以更深层次的揭示铝硅合金凝固过程微观组织的变化规律,而且对实验或者工程制造过程中的缺陷修复、产品设计及优化都有实际指导意义,纳观模拟也随之成为目前数值模拟技术发展的方向与焦点。

当然,精度更好、基础更加扎实的微观尺度模拟确实能够指导人们对研究对象更加准确的理解和得到更加实际的结果,然而,这无疑增加了前处理的复杂性和计算量的庞大性,所以一般如果进行微观组织模拟都采用并行计算,否则无法实现;其次,单一

尺度量级的模拟必然有它的局限性,要么精度不够要么计算条件达不到。所以,必须要考虑采用既能得到反映不同尺度结构与性能的结果,又得保证适宜的计算量以免无法实现。于是,多尺度模拟可以将复杂材料中不同尺度上遇到的问题分别用该尺度上对应最佳的模拟方法进行模拟,比如简单的凝固过程可以用有限差分法或有限元的方法进行宏观模拟,对晶体缺陷或气孔形成可以用元胞自动机进行微观模拟,枝晶生长的三维模拟即可采用相场法,分子动力学又可以清楚看到原子的运动轨迹,同时不同尺度模拟得到的结果还可作为其他尺度的初始条件,这样就可达到物尽其用,事半功倍的效果。所以未来,建立跨越纳米尺度、微米尺度、介观尺度与宏观尺度等全尺度模拟的理论与方法是数值模拟发展方向,必将在合金的微观组织的模拟中发挥重要的作用。

#### 参考文献:

- [1] 马勇杰,张建成,刘欢.铝硅基精铸材料薄壁壳体成型多尺度分析[J].现代制造工程,2020(4):96-102.
- [2] 王震宏,张立同,苏斌,等.自然对流作用下Al<sub>7</sub>Si合金凝固过程的组织演变模拟[J].中国有色金属学报(英文版),2022,32(1):79-90.
- [3] 石玉峰,许庆彦,李忠林,等.基于CA方法的铝合金铸件微观组织的数值模拟[J].铸造,2011,60(12):1209-1213.
- [4] AO X, XIA H, LIU J, et al. A numerical study of irregular eutectic in Al-Si alloys under a large undercooling [J]. Computational Materials Science, 2021, 186: 110049.
- [5] ZHOU B, LASCHET G, EIKEN J, et al. Multiscale solidification simulation of Sr modified Al-Si-Mg alloy in die casting [C]//15th International Conference on Modelling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes (MCWASP), 2020.
- [6] HOSCH T, ENGLAND L G, NAPOLITANO R E. Analysis of the high growth rate transition in Al-Si eutectic solidification [J]. Journal of Materials Science, 2009, 44: 4892-4899.
- [7] LU Shu-zu, HELLAWEEL A. Modification and refinement of cast Al-Si alloys [M]. Berlin: Springer International Publishing, 2016.
- [8] HUANG Xiusong, DONG Xixi, LIU Lehua, et al. Liquid structure of Al-Si alloy: A molecular dynamics simulation [J]. Journal of Non-Crystalline Solids, 2019, 503: 182-185.
- [9] ZAGULIAEV D, KONOVALOV S, IVANOV Y, et al. Effect of electron alloying on structure and mechanical properties of Al-Si alloy [J]. Applied Surface Science, 2019, 498: 143767.
- [10] 石为喜,杜成武,李贵茂,等.LaCe混合稀土对过共晶A390合金微观组织和力学性能的影响[J].铸造,2018,67(9):828-830,835.
- [11] JIANG D, YU J. Simultaneous refinement and modification of the eutectic Si in hypoeutectic Al-Si alloys achieved via the addition of SiC nanoparticles [J]. Mater. Tech. 2019, 8(3): 2930-2943.
- [12] LU Z, ZHANG L, WANG J, et al. Understanding of strengthening and toughening mechanisms for Sc modified Al-Si-(Mg) series casting alloys designed by computational thermodynamics [J]. Journal of Alloys and Compounds, 2019, 805: 415-425.
- [13] HEGDE S, PRABHU KN. Modification of eutectic silicon in Al-Si alloys [J]. Mater. Sci., 2008, 43(9): 3009-3027.
- [14] 陈志强,贾锦玉,胡文鑫,等.Y与Sr协同作用对Al-Mg-Si合金微观组织和力学性能的影响[J].铸造,2020,69(4):367-373.
- [15] LIU Q, LIU M, XU C, et al. Effects of Sr, Ce and P on the microstructure and mechanical properties of rapidly solidified Al-7Si alloys [J]. Mater. Char., 2018, 140: 290-298.
- [16] NJUGUNA B K, LI J Y, TAN Y, et al. Grain refinement of primary silicon in hypereutectic Al-Si alloys by different P-containing compounds [J]. China Foundry, 2021, 18(1): 37-44.
- [17] LUDWIG T H, DAHLEN E S, SCHAFFER P L, et al. The effect of Ca and P interaction on the Al-Si eutectic in a hypoeutectic Al-Si alloy [J]. Alloy. Comp., 2014, 586: 180-190.
- [18] Q LI, XIA T, LAN Y, et al. Effect of rare earth cerium addition on the microstructure and tensile properties of hypereutectic Al-20%Si alloy [J]. Alloy. Comp., 2013, 562: 25-32.
- [19] CHEN R, XU Q, LIU B. A modified cellular automaton model for the quantitative prediction of equiaxed and columnar dendritic growth [J]. Mater. Sci. Tech. 2014, 30(12): 1311-1320.

- [20] WANG K, ZHANG L. Quantitative phase field simulation of the entire solidification process in one hypereutectic Al-Si alloy considering the effect of latent heat [J]. *Progress in Natural Science Materials International*, 2021, 31 (3): 428–433.
- [21] KIM S G, KIM W T, CHA P R, et al. Phase field model with relaxation of the partition coefficient [J]. *Computational Materials Science*, 2021, 188: 1–14.
- [22] WANG B, ZHANG M, WANG J. Quantifying the effects of cooling rates and alloying additions on the microporosity formation in Al alloys [J]. *Materials Today Communications*, 2021, 28: 1–10.
- [23] OLDFIELD W. A Quantitative approach to casting solidification: freezing of cast iron [J]. *Transaction of ASM*, 1966, 59 (4): 945–961.
- [24] HUNT J. Steady state columnar and equiaxed growth of dendrites and eutectic [J]. *Materials Science and Engineering*, 1984, 65 (1): 75–83.
- [25] THÉVOZ P, DESBIOLLES J, RAPPAZ M. Modeling of equiaxed microstructure formation in casting [J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 1989, 20 (2): 311–322.
- [26] 柳百成, 荆涛. 铸造工程的模拟仿真与控制 [M]. 北京: 机械工业出版社, 2001.
- [27] LIPTON J, GLICKSMAN M, KURZ W. Dendritic growth into undercooled alloy metals [J]. *Materials Science and Engineering*, 1984, 65 (1): 57–63.
- [28] LIPTON J, GLICKSMAN M, KURZ W. Equiaxed dendrite growth in alloys at small supercooling [J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 1987, 18 (3): 341–345.
- [29] KURZ W, GIOVANO H B, TRIVEDI R. Theory of microstructural development during rapid solidification [J]. *Acta Metallurgica*, 1986, 34 (5): 823–830.
- [30] JACKSON K, HUNT J. Lamellar and rod eutectic growth [J]. *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*, 1966, 236 (8): 1129–1142.
- [31] HESSELBARTH H W, GOBEL I R. Simulation of recrystallization by cellular automata [J]. *Acta Metallurgica et Materialia*, 1991, 39 (9): 2135–2143.
- [32] GANDIN C A, RAPPAZ M, TINTILLIER R. 3-Dimensional simulation of the grain formation in investment casting [J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 1994, 25 (3): 629–635.
- [33] CHEN R, XU QY, LIU BC. Modeling of aluminum-silicon irregular eutectic growth by cellular automaton model [J]. *China Foundry*, 2016, 13 (2): 114–122.
- [34] 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: 91–105.
- [35] DAS P, DUTTA P. Three-dimensional phase field simulation of spheroidal grain formation during semi solid processing of Al-7Si-0.3 Mg alloy [J]. *Computational Materials Science*, 2020, 184: 1–13.
- [36] WANG Z H, ZHANG L T, SU B, et al. Simulation on microstructure evolution of Al-Si alloy under effect of natural convection during solidification [J]. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 2022, 32 (1): 79–90.

---

## Research Status and Trend of Numerical Simulation of Microstructure of Al-Si Alloy

ZHANG Meng-jun, YOU Zhi-yong, ZHANG Yun-guan, AI Yu-meng, NIU Cheng-yi, NIU Xiao-feng  
(Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, Shanxi, China)

### Abstract:

With the development of computational materials, numerical simulation technology has played an important role in the study of microstructure during solidification of Al-Si alloy. In this paper, the necessary nucleation and growth models for simulating the microstructure formation process of the Al-Si alloy were reviewed in terms of the application of numerical simulation technique to the microstructure formation process of the Al-Si alloy. These methods widely used to simulate the microstructure formation of the Al-Si alloy, such as cellular automata method and phase field method, were described emphatically. Finally, the development trend of the numerical simulation technology of the Al-Si alloy in the future is prospected.

### Key words:

Al-Si alloy; numerical simulation; mathematical model; cellular automata; phase field method