

强迫对流作用下AZ91镁合金 α -Mg枝晶生长相场法模拟

冯素蕊¹, 陈伟鹏¹, 裴嘉琪¹, 孙开心¹, 赵宇宏^{1,2,3}

(1. 中北大学 材料科学与工程学院 新材料智能铸造先进成型山西省重点实验室
教育部共建高性能铝/镁材料开发应用协同创新中心, 山西 太原 030051)

(2. 北京科技大学 北京材料基因工程高精尖创新中心, 北京 100083)

(3. 辽宁材料实验室 材料智能技术研究所, 辽宁 沈阳 110004)

摘要: 在合金凝固过程中, 熔体流动会显著改变枝晶生长的热动力学, 从而影响构件的微观组织和力学性能。本工作建立了强迫对流作用下Mg-9.0wt%Al-1.0wt%Zn合金 α -Mg枝晶生长的相场-格子Boltzmann耦合模型, 主要研究了熔体对流对 α -Mg枝晶生长的影响。结果表明, 熔体对流会导致枝晶生长的不对称形态, 上游的枝晶生长速率大于下游, 且流速越大枝晶的不对称形态越显著。通过对不同流速方向的模拟, 发现枝晶臂长度会随流速方向与水平方向夹角的增大而增大, 而溶质富集层厚度则会随夹角的增大而减小, 当夹角为90°时, 枝晶臂受到剪切力最大, 偏转角度也最大。此外, 三维模拟结果证实, 强迫对流作用下 α -Mg枝晶的不对称生长行为在三维模拟中同样存在, 表现为下游溶质富集程度更大, 而凝固潜热主要集中在上游。

关键词: 相场法; AZ91镁合金; 枝晶生长; 强迫对流; 格子Boltzmann方法

中图分类号: TG111.5; TG146.22

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2026)05-1250-09

1 引言

镁合金作为轻型结构材料以其优异的性能(例如高比强度、高比刚度、良好的可回收性)而备受关注^[1-4], 广泛应用于汽车^[5-6]、航空航天^[7-8]以及电子产品^[9-11]中。常用镁合金主要有AZ系列(Mg-Al-Zn)、AM系列(Mg-Mn)和ZK系列(Mg-Zn-Zr)。其中AZ系列中的AZ91镁合金应用最为广泛, 占有所有Mg铸造产品的90%, 其中Al和Zn的添加可以提高镁合金的铸造性能和强度^[12-13]。AZ91镁合金的微观组织主要由 α -Mg枝晶构成, 其最终的性能与凝固枝晶演化的过程息息相关^[14-16]。

尽管应用广泛, AZ91镁合金在高温和室温下的机械性能仍然逊色于铝合金^[17]。随着轻量化需求的日益增长, 各国科研机构纷纷加大对高性能镁合金体系的探索力度。AZ91镁合金属于铸造镁合金, 常见的AZ91镁合金铸造工艺有高压压铸(HPDC)、砂型铸造(重力铸造)、半固态铸造、挤压铸造等。Wang等^[18]通过在HPDC工艺中施加真空, 发现真空压铸生产的试样可以减少合金中的孔隙率。Fan等^[19]利用砂型铸造研究了Mg晶粒细化剂添加对AZ91镁合金微观组织、铸造流动性和力学性能的影响, 发现Al-CeO₂-Mg晶粒细化剂对铸态AZ91镁

合金具有晶粒细化、增强铸造流动性和改善拉伸性能的作用。Marodkar等^[20]研究了挤压铸造条件下Ca和Sr的添加对AZ91镁合金力学性能的影响, 得出当添加1wt% Ca和0.9wt% Sr时材料的拉伸性能最好的结论。Shabestari等^[21]研究了转速对旋转容器工艺半固态铸造AZ91镁合金组织和凝固参数的影响, 发现AZ91的冷却速率随着转速的增大而显著增大, 导致最大凝固范围增大至15.9℃。上述铸造工艺均涉及熔体流动过程, 这种流动行为会显著影响凝固组织的形成与演变, 从而对材料的最终力学性能产生影响。遗憾的是, 传统的实验研究方法难以实现对这一复杂物理过程的精确表征和定量分析。

目前已经有很多的专家学者利用数值模拟技术^[22-34]来研究凝固过程中的枝晶演变, 提出了相场法(phase-field method, PFM)、元胞自动机、前沿追踪法等多种计算方法。其中, 相场法作为一种更有潜力的方法, 通过避免跟踪固-液界面而大大提高了计算效率。Navier-Stokes(N-S)方程可与相场模型相结合来研究熔体对流条件下凝固枝晶生长的过程^[35-36], 但N-S求解器效率较低, 当固相分数较大时, 流量计算极易发散^[37], 这大大影响了对枝晶生长中熔体对流的深入研究。近几十年来, 格子

收稿日期: 2025-08-02

基金项目: 国家自然科学基金(52375394, 52275390, U23A20628, 52305429); 山西省科技重大专项(202301050201004); 2023年山西省研究生科研创新项目(2023SJ202)

作者简介: 冯素蕊, 女, 1999年生, 博士生, 中北大学材料科学与工程学院, 山西 太原 030051, E-mail: zhaoyuhong@nuc.edu.cn

Boltzmann方法(lattice Boltzmann method, LBM)由于其数值稳定性更好、计算成本低和可并行化等特性广受欢迎。LBM通过离散动力学方程来定义粒子分布函数,模拟虚拟粒子群在网格上的迁移和碰撞实现宏观流动,从而避免了对N-S方程的直接求解^[38-39]。考虑到PFM和LBM的优点,已经开发了一些用于枝晶生长的PF-LBM模型^[40]。然而,由于六方密排(hexagonal close-packed, hcp)结构合金具有更为复杂的各向异性特征,现有研究对于熔体对流作用下三维多元hcp合金的枝晶演化行为仍缺乏系统性探索。

本研究以AZ91镁合金为研究对象,通过建立相场-格子Boltzmann耦合模型,系统研究了强迫对流作用下AZ91镁合金凝固过程中 α -Mg枝晶的生长行为。首先,对比了有无强迫对流作用下的 α -Mg枝晶生长溶质分布和温度分布,并从热力学角度揭示了枝晶不对称生长的内在机制。其次,深入研究了不同流速大小及方向对枝晶形貌、溶质分布和温度分布的影响。最后,通过三维数值模拟,阐明了熔体对流与hcp结构各向异性耦合作用下AZ91镁合金 α -Mg枝晶的三维演化特征,为理解对流条件下镁合金的凝固组织调控提供了理论依据。

2 数值模型

2.1 相场模型

本研究在Karma模型^[22,41-42]的基础上,构建了描述 α -Mg枝晶生长的定量多元相场模型。此模型引入反溶质截留项以抵消固-液界面处产生的虚假溶质捕获效应,引入相场序参量 ϕ 来表示固-液两相以避免尖锐界面模型中复杂的界面追踪。无量纲溶质浓度 U_i 和温度 \tilde{T} 方程如下所示:

$$U_i = \frac{1}{1 - k_i} \cdot \left[\frac{2c/c_{0,i}}{(1 + k_i) - (1 - k_i)\phi} - 1 \right] \quad (1)$$

$$\tilde{T} = \frac{T - T_m - \sum_{i=1}^n m_i c_{0,i}}{\Delta T_{0,1}} \quad (2)$$

式中, k_i 为平衡分配系数, $c_{0,i}$ 为远离固-液界面的溶质浓度, T_m 为纯Mg的熔点, m_i 为液相线斜率, $\Delta T_{0,1} = |m_1|(1 - k_1)c_{0,1}/k_1$ 为与 $c_{0,1}$ 相关的平衡冷却温度区间,其中,参数 k_i 、 T_m 、 m_i 均由相图计算得出。固相中 $\phi = +1$,液相中 $\phi = -1$,在固-液界面上 ϕ 由+1到-1平滑变化,序参量 ϕ 的演化方程如下所示:

$$\begin{aligned} & a_s^2(\mathbf{n}) \left\{ \frac{1}{Le} + \sum_{i=1}^n M_i c_{0,i} [1 + (1 - k_i)U_i] \right\} \frac{\partial \phi}{\partial t} \\ & = \nabla \cdot [a_s^2(\mathbf{n}) \nabla \phi] + \sum_{\eta=x,y,z} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[|\nabla \phi|^2 a_s(\mathbf{n}) \frac{\partial a_s(\mathbf{n})}{\partial \left(\frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right)} \right] \quad (3) \\ & + \phi(1 - \phi^2) - (1 - \phi^2)^2 \left(\lambda_1 \tilde{T} + \sum_{i=1}^n \lambda_i M_i c_{0,i} U_i \right) (1 + \xi) \end{aligned}$$

其中, n 为溶质数量, $n=1,2$ 分别表示Al和Zn, $Le = \frac{D_T}{D_{l,1}}$ 为Lewis数, D_T 为热扩散系数, $D_{l,i}$ 为第 i 种溶质在液相中的扩散系数, M_i 为液相线斜率的标度值, t 为时间, η 代表空间方向, λ_i 为时间和空间的耦合系数。 $\xi = 0.5\Delta x\beta$ 为噪声项^[43], Δx 表示一个网格的宽度, β 为一个在 $[-0.5,0.5]$ 范围内平坦分布产生的随机数。 $a_s(\mathbf{n})$ 为各项异性系数,在二维模拟中, $a_s(\mathbf{n}) = 1 + \varepsilon_0 + \varepsilon_6 \cos[6(\varphi - \alpha_0)]$,在三维模拟中

$a_s(\mathbf{n}) = 1 + \varepsilon_1(3\cos^2\theta - 1)^2 + \varepsilon_2(\sin^3\theta\cos^3\varphi - 3\sin^3\theta\sin^2\varphi\cos\varphi)^2 \cdot (9\cos^2\theta - 1 - \varepsilon_3)^{2[44]}$,其中, $\theta \in [0, \pi]$ 和 $\varphi \in [0, 2\pi]$ 为球坐标转角, α_0 为取向差角, $\varepsilon_0, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_6$ 为各向异性强度系数, $\mathbf{n} = -\nabla\phi/|\nabla\phi|$ 为固-液界面的单位法向量。 U_i 的演化方程如下所示,

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1+k_i}{2} - \frac{1-k_i}{2}\phi \right) \frac{\partial U_i}{\partial t} = \nabla \cdot [D_i q(\phi) \nabla U_i - \mathbf{j}_{at}] \\ & + \frac{1}{2} [1 + (1 - k_i)U_i] \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (4) \\ & - \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{v}} \cdot \{ [1 + k_i - (1 - k_i)\phi] \nabla U \\ & - [1 + (1 - k_i)U_i] \nabla \phi \} \end{aligned}$$

其中 $D_i = D_{l,i}\tau_0/W_0^2$ 为无量纲溶质扩散系数, $\tau_0 = a_2 W_0^2 \sum_{i=1}^n \lambda_i / D_{l,i}$ 为弛豫时间, $W_0 = d_{0,i} \lambda_i / a_1$ 为界面宽度, $d_{0,i} = \Gamma_i / \Delta T_{0,i}$ 为化学毛细管长度, Γ_i 为Gibbs-Thomson系数, $a_1 = 0.8839$ 和 $a_2 = 0.6267$ 为常数, $q(\phi) = \frac{(1 - \phi)}{2} + kD_{s,i}(1 + \phi)/(2D_{l,i})$ 为插值函数, $\mathbf{j}_{at} = -\frac{1}{2\sqrt{2}}(1 - k_i D_{s,i} / D_{l,i}) [1 + (1 - k_i)U_i] \frac{\partial \phi}{\partial t} \cdot \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}$ 为反溶质截留项, $D_{s,i}$ 为固相溶质扩散系数。 $\tilde{\mathbf{v}} = \mathbf{v}\tau_0/W_0$ 为无量纲熔体流动速度,其中 \mathbf{v} 为熔体流动速度。 \tilde{T} 的演化方程如下所示:

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + \frac{1 - \phi}{2} \tilde{\mathbf{v}} \cdot \nabla \tilde{T} = \alpha \nabla^2 \tilde{T} + \frac{1}{2} \cdot \frac{L_f/c_p}{\Delta T_{0,1}} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (5)$$

其中 $\alpha = D_T \tau_0 / W_0^2$ 为无量纲热扩散系数, L_f 为熔化潜热, c_p 为合金的比热容。

在本模型中,耦合了温度场以考虑凝固潜热及热扩散的影响。尽管本研究涉及的凝固速率不属于快速凝固范畴,但引入温度场对于实现本研究的目标至关重要:即揭示在对流作用下凝固过程中,潜热释放与热-溶质双扩散耦合对枝晶生长的影响。传统的等温模型(固定过冷度)假设热扩散速度远快于溶质扩散,可以被忽略,无法描述局域潜热释放对界面过冷度调节作用。

2.2 格子Boltzmann模型

熔体流动过程的计算采用格子Boltzmann模型。这种模型是在介观尺度上通过碰撞和迁移来追踪流体粒子在不同方向上的分布函数,对所有方向上的分布函数进行求和进而计算得到宏观的流体密度和速度等数据^[45-46]。本工作采用lattice-Bhatnagar-Gross-Krook

(LBGK)模型来求解流体动力学相关问题。LBGK 模型 的分布函数表示如下^[47-48]:

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{\tau_{\text{LBM}}} [f_i(\mathbf{r}, t) - f_i^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t)] + F_i(\mathbf{r}, t) \Delta t \quad (6)$$

其中, $f_i(\mathbf{r}, t)$ 表示在位置 \mathbf{r} 处, 时间 t 时在第 i 个方向上的粒 子分布密度, $f_i^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t)$ 为平衡分布函数, $\tau_{\text{LBM}} = \frac{3\nu}{c_s^2 \Delta t} + 0.5$ 为单一弛豫时间, ν 为运动粘度, $c_s = \Delta x / \Delta t$ 为格子声速, \mathbf{e}_i 为离散粒子速度, 密度 ρ_{LB} 和流速 $\tilde{\mathbf{v}}$ 由下式给出:

$$\rho_{\text{LB}} = \sum_{i=0}^{Q-1} f_i(\mathbf{r}, t) \quad (7)$$

$$\rho_{\text{LB}} \tilde{\mathbf{v}} = \sum_{i=0}^{Q-1} \mathbf{e}_i f_i(\mathbf{r}, t) \quad (8)$$

其中 Q 为离散速度的个数, 二维模拟时采用 D2Q9 模型 ($Q = 9$), 三维模拟时采用 D3Q19 模型 ($Q = 19$)。平衡 分布函数 $f_i^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t)$ 表示如下:

$$f_i^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) = w_i \rho_{\text{LB}} \left[1 + \frac{3(\mathbf{e}_i \cdot \tilde{\mathbf{v}})}{c_s^2} + \frac{9(\mathbf{e}_i \cdot \tilde{\mathbf{v}})^2}{2c_s^4} - \frac{3\tilde{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\mathbf{v}}}{2c_s^2} \right] \quad (9)$$

式中 w_i 为权重函。二阶精度的离散外力 $F_i(\mathbf{r}, t)$ 由下式 给出,

$$F_i(\mathbf{r}, t) = w_i \rho_{\text{LB}} \left[3 \frac{\mathbf{e}_i \cdot \tilde{\mathbf{v}}}{c_s^2} + 9 \frac{(\mathbf{e}_i \cdot \tilde{\mathbf{v}}) \mathbf{e}_i}{2c_s^4} \right] \cdot F_{\text{D}}(\mathbf{r}, t) \quad (10)$$

式中,

$$F_{\text{D}}(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{2\rho_{\text{LB}} \nu h}{W_0^2} \right) \cdot \left(\frac{1 - \phi}{2} \right)^2 \tilde{\mathbf{v}} \quad (11)$$

其中, $F_{\text{D}}(\mathbf{r}, t)$ 为耗散拖曳力, $h=2.757$ 为一个无量纲常数。 相关计算参数如表 1 所示^[49]。本研究的模型求解工作基 于本课题组自主开发的 EPhase 相场软件包中的凝固模 块。在此工作中, 二维模拟区域设置为 $600\Delta x \times 600\Delta x$ (单 晶) 和 $800\Delta x \times 800\Delta x$ (多晶), 三维模拟区域设置为 $350\Delta x \times 350\Delta x \times 350\Delta x$ 。相场和溶质场方程采用 Zero- Neumann 边界条件, 温度场采用常数边界条件 ($T_{\text{boundary}} = T_0$)。 晶核半径大小设置为 $r_0 = 5\Delta x$ 。本工作中入口流速大小 设置为 v_{in} , 参考速度值设置为 $v_0=0.012 \text{ m/s}$, 以无量纲参 量 $v_{\eta}=v_{\text{in}}/v_0$ ($\eta=x, y, z$) 表示 x, y 和 z 方向的初始流速。

3 结果与分析

为了研究熔体对流对 AZ91 镁合金枝晶生长的影 响, 对比了有无强迫对流作用下枝晶生长(0001)晶面的 溶质分布, 如图 1 所示。图 1a 和图 1b 分别为有无强迫对 流作用下枝晶生长 Zn 元素的溶质分布图。可以发现枝 晶在(0001)晶面均为 6 个一次枝晶臂以及多个二次枝晶 臂, 凝固过程中的溶质再分配导致溶质在固-液界面产生 富集。图 1a 枝晶为六重对称形态生长, 且每个一次枝晶

表 1 与 AZ91 镁合金相关的物理参数

Table 1 Physical parameters related to AZ91 magnesium alloy^[49]

Parameter	Value
$m_1/\text{K}\cdot\text{wt}\%^{-1}$	-5.2031
$m_2/\text{K}\cdot\text{wt}\%^{-1}$	-3.6324
k_1	0.2900
k_2	0.0562
$D_{1,1}/\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$	4.3910×10^{-9}
$D_{1,2}/\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$	4.6763×10^{-9}
$D_{s,1}/\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$	5.1889×10^{-14}
$D_{s,2}/\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$	6.8042×10^{-15}
$L_i/\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}$	3.66×10^5
$c_p/\text{J}\cdot(\text{kg}\cdot\text{K})^{-1}$	1360
$D_T/\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$	3.6071×10^{-9}
T_m/K	923

臂的发达程度基本相同。而图 1b 的上游(流速流入区域 的一侧定义为上游, 流速流出的一侧定义为下游, 下同) 枝晶臂比图 1a 更长, 二次枝晶臂更多, 甚至出现三次枝 晶臂, 下游枝晶臂比图 1a 更短, 且二次枝晶臂较少。图 1c 对比了 $t=10000\Delta t$ 时, 有无强迫对流条件下枝晶(0001) 晶面上沿白色虚线的 Zn 元素溶质分布, 发现强迫对流作 用下枝晶上游的溶质富集层厚度约为无强迫对流的 70% (x_1/x_2), 最高溶质浓度更低(相差 0.086); 下游的溶质富 集层厚度约为无强迫对流的 330% (x_3/x_4), 最高溶质浓度 也更高(相差 0.303)。这是由于 AZ91 镁合金相图斜率为 负, 熔体流动将上游溶质冲刷到下游, 导致溶质分布不均 匀, 上游溶质浓度降低, 熔点升高, 成分过冷度增大, 枝晶 生长速度加快, 而下游枝晶由于溶质过多富集, 成分过冷 度减小, 枝晶生长速度减缓, 进而出现枝晶形态严重不对 称的现象。

图 2 为有无流场作用下, AZ91 镁合金枝晶生长温度 分布对比。能够看到凝固潜热在枝晶处向四周辐射状均 匀释放, 但由于凝固潜热产生的速度大于热扩散的速度, 导致大量热量堆积于模拟区域的中心(图 2a₁~2a₄、 图 2b₁~2b₄)。与无强迫对流条件不同的是, 当存在强迫 对流时, 模拟区域内的热量会大量聚集于上游, 最高温度 比无强迫对流条件下高 0.1 K, 下游的温度较无强迫对流 作用时更低。这是由于熔体对流将上游的凝固潜热带到 下游, 导致上游温度梯度增大, 产生较大的过冷度, 枝晶 生长速率加快, 下游的温度梯度减小, 枝晶生长速率减 缓, 从而上游枝晶较下游枝晶更加发达。当 $t < 8000\Delta t$ 时, 枝晶生长释放凝固潜热, 热量释放过快而无法全部扩 散, 导致上游热量不断聚集, 温度不均匀加剧。 $t > 8000\Delta t$ 时, 上游枝晶生长基本完成, 潜热释放量降低, 随着热量 不断向外扩散, 整个模拟域内的温度更加均匀。

过冷度的存在是金属凝固的主要原因之一。在对流 作用下, 凝固过程枝晶生长所产生不对称形态的主要原

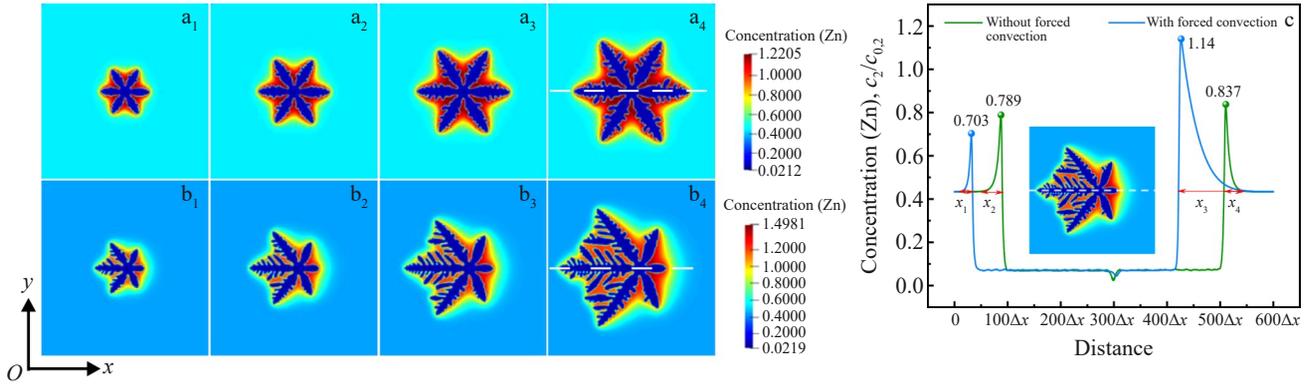


图1 有强迫对流和无强迫对流条件下AZ91镁合金枝晶生长Zn元素溶质分布对比

Fig.1 Comparison of Zn solute distribution in dendrite growth of AZ91 magnesium alloy with (a₁-a₄) and without (b₁-b₄) forced convection: (a₁, b₁) $t=4000\Delta t$, (a₂, b₂) $t=6000\Delta t$, (a₃, b₃) $t=8000\Delta t$, and (a₄, b₄) $t=10\ 000\Delta t$; Zn solute distribution along the white dotted line on the dendrite (0001) plane at $t = 10\ 000\Delta t$ (flow velocity is directed horizontally to the right along the x-axis, with a magnitude of $\tilde{v}_x = 0.5$) (c)

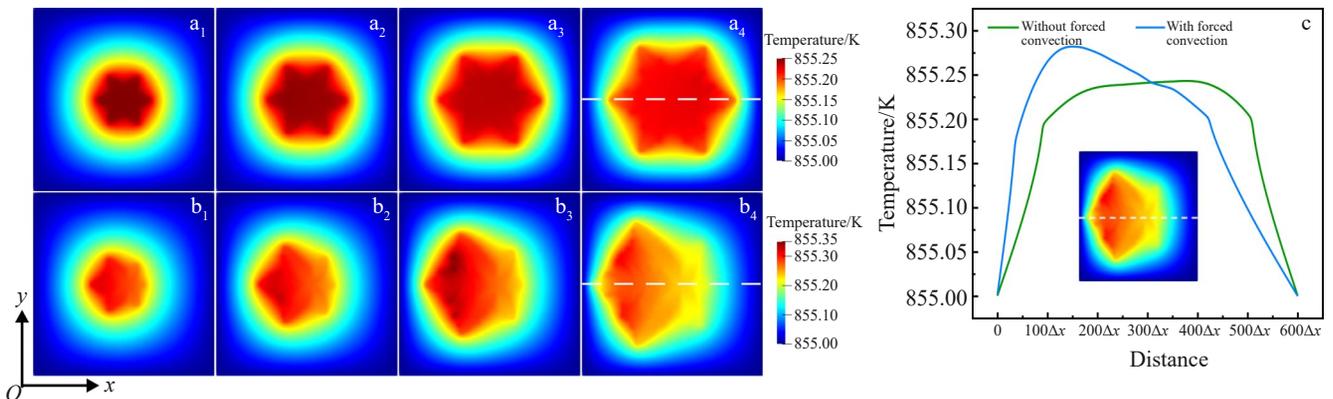


图2 有强迫对流和无强迫对流条件下AZ91镁合金枝晶生长温度分布对比

Fig.2 Comparison of temperature distribution in dendrite growth of AZ91 magnesium alloy with (a₁-a₄) and without (b₁-b₄) forced convection: (a₁, b₁) $t=4000\Delta t$, (a₂, b₂) $t=6000\Delta t$, (a₃, b₃) $t=8000\Delta t$, and (a₄, b₄) $t=10\ 000\Delta t$; temperature distribution along white dotted line on dendrite (0001) plane at $t=10\ 000\Delta t$ (flow velocity is directed horizontally to the right along the x-axis, with a magnitude of $\tilde{v}_x = 0.5$) (c)

因为熔体流动导致的成分过冷和温度过冷,上游的枝晶由于成分过冷度和温度过冷度增大而加快了生长速率,下游的枝晶由于溶质和热量的堆积导致成分过冷度和温度过冷度减小,生长速度缓慢。

强迫对流作用下,AZ91镁合金凝固多晶粒枝晶生长Al元素溶质分布如图3a₁~3a₅所示。可以发现,在凝固刚刚开始时,每个枝晶的溶质场是相互独立的(如图3a₁所示),随着凝固的进行,枝晶间距减小,不同枝晶的溶质场开始发生重叠,且上游的枝晶与下游枝晶相比更加发达(如图3a₂、3a₃所示)。凝固继续进行,枝晶间溶质场相互作用导致枝晶间溶质浓度急剧上升,析出的溶质在上游富集(如图3a₄、3a₅所示),熔体流动将上游溶质冲刷到下游,上游溶质梯度增大,熔点升高,产生的成分过冷促进了枝晶生长,但由于枝晶生长过快,析出的溶质过多且受到固相和模拟边界的阻碍作用导致溶质扩散困难,进而在上游产生堆积。

图3b₁~3b₅为AZ91镁合金凝固多晶粒枝晶生长温度

分布,由于中心位置热量扩散较四周更难,热量主要集中于模拟域中心区域。多晶粒凝固过程主要分为3个阶段:第1阶段: $t = 0$ 至 $t = 4000\Delta t$,凝固过程中枝晶释放潜热,模拟域内温度升高,使得温度场分布更加不均匀(如图3b₂);第2阶段: $t = 4000\Delta t$ 至 $t = 6000\Delta t$,由于枝晶生长速度减缓,热量由中心区域向四周扩散导致中心温度降低(如图3b₃)。第3阶段: $t = 6000\Delta t$ 至 $t = 10\ 000\Delta t$,枝晶凝固基本完成,潜热释放量降低,热量不断扩散,使得整个模拟区域内的温度趋于均匀^[49]。

4 讨论

4.1 不同流速大小对AZ91镁合金凝固微观组织的影响

图4a₁~4a₄、4b₁~4b₄、4c₁~4c₄、4d₁~4d₄分别为 $\tilde{v}_x = 0$ 、 $\tilde{v}_x = 0.3$ 、 $\tilde{v}_x = 0.5$ 、 $\tilde{v}_x = 0.7$ 等不同流动速度下模拟的二维枝晶形貌。将生长方向水平向左的一次枝晶臂编号为①,按顺时针方向依次将其他5个一次枝晶臂编号,如图

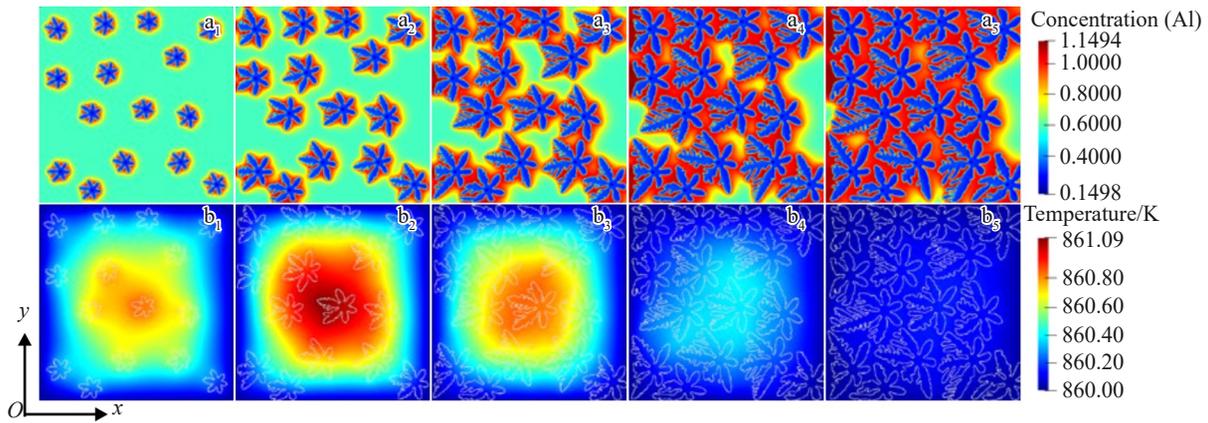


图3 强迫对流作用下AZ91镁合金凝固多晶粒枝晶生长Al元素溶质分布和温度分布

Fig.3 Solute distribution of Al element (a_1 – a_5) and temperature distribution (b_1 – b_5) during dendrite growth of multiple solidification grains of AZ91 magnesium alloy under forced convection: (a_1, b_1) $t=2000\Delta t$, (a_2, b_2) $t=4000\Delta t$, (a_3, b_3) $t=6000\Delta t$, (a_4, b_4) $t=8000\Delta t$, and (a_5, b_5) $t=10\ 000\Delta t$ (flow velocity is directed horizontally to the right along the x -axis, with a magnitude of $\tilde{v}_x = 0.5$)

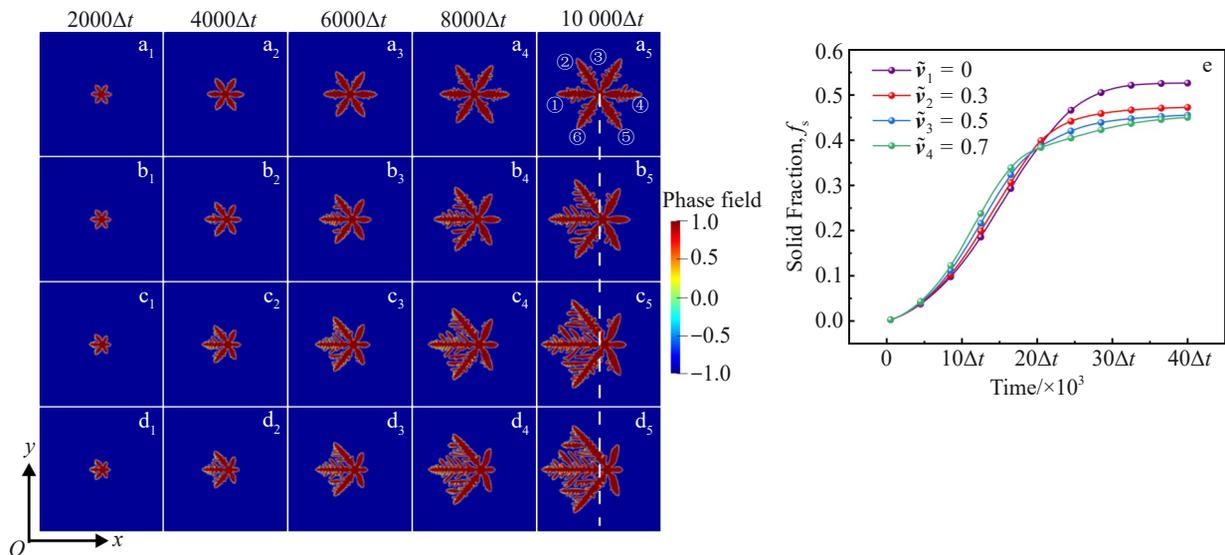


图4 流速大小对AZ91镁合金枝晶形貌的影响及不同对流速度作用下AZ91镁合金随时间变化的固相分数曲线

Fig.4 Effect of flow rate on dendrite morphology of AZ91 magnesium alloy: (a_1 – a_5) $\tilde{v}_x = 0$, (b_1 – b_5) $\tilde{v}_x = 0.3$, (c_1 – c_5) $\tilde{v}_x = 0.5$, and (d_1 – d_5) $\tilde{v}_x = 0.7$; solid fraction curves of AZ91 magnesium alloy with time under different convection velocities (flow velocity is directed horizontally to the right along the x -axis, with a magnitude of $\tilde{v}_x = 0.5$) (e)

4a₅所示。可以发现对流作用下,枝晶呈现出左右不对称形态,上游枝晶生长速率更大,枝晶更加发达,下游枝晶的生长速率较缓,枝晶生长受到抑制^[50]。

图4a₅~4d₅为 $t=10\ 000\Delta t$ 时,不同流速时枝晶生长的形貌图,当 $\tilde{v}_x = 0.3$ 、 $\tilde{v}_x = 0.5$ 、 $\tilde{v}_x = 0.7$ 时,①号枝晶臂长度分别比 $\tilde{v}_x = 0$ 时增长23.28%、46.55%、50.86%。无对流条件下,6个一次枝晶臂的夹角均为60°,当 $\tilde{v}_x = 0.3$ 时,②号、⑥号枝晶臂偏转约4°,③号、⑤号枝晶臂偏转约3°;当 $\tilde{v}_x = 0.5$ 时,②号、⑥号枝晶臂偏转约5°,③号、⑤号枝晶臂偏转约5°;当 $\tilde{v}_x = 0.7$ 时,②号、⑥号枝晶臂偏转约7°,③号、⑤号枝晶臂偏转约6°。枝晶的④号枝晶臂长度分别比 $\tilde{v}_x = 0$ 时减少38.79%、50.86%、59.48%。可

见随着流速的增加,枝晶臂的偏转角度也会增加,上游枝晶的枝晶臂逐渐增长,逐渐生长出三次枝晶臂,而下游枝晶臂逐渐缩短,二次枝晶臂也逐渐消失。

图4e为不同流动速度下AZ91镁合金随时间变化的固相分数曲线。可以看到,在 $t < 20\ 000\Delta t$ 时,有对流作用的枝晶占模拟区域面积更大,并且流动速度越大,固相分数也越大,这说明对流对上游枝晶生长的促进作用比下游枝晶的抑制作用更大。当 $t > 20\ 000\Delta t$ 时,有对流作用的凝固过程固相分数逐渐趋于平缓,低流速条件下枝晶占比高于高流速,这种现象可归因于上游凝固过程基本完成,而下游的凝固还在继续进行,由于高流速对下游枝晶生长的阻碍作用更大,枝晶生长速度也更加缓慢;而

此时无对流作用的枝晶生长还在继续,且不存在对流的抑制作用所以枝晶占比逐渐高于有对流的情况。除此以外,熔体流动会导致枝晶位置随着流速方向产生偏移,流动速度越大,枝晶的偏移程度也会越大。

4.2 不同流速方向对AZ91镁合金凝固微观组织的影响

为了研究不同对流方向对Zn元素溶质分布的影响,

设置了如图5e所示等4种不同的对流方向,其中 \tilde{v}_1 方向为水平向右, $\tilde{v}_1 = \tilde{v}_2 = \tilde{v}_3 = \tilde{v}_4 = 0.5$ 。由图可见,由于熔体对流将上游溶质冲刷至下游,导致3种不同的对流条件下,上游的溶质富集层厚度均远远小于下游。

图5a₅~5d₅为 $t=10\ 000\Delta t$ 时不同对流方向Zn元素溶质分布图,统计了4个晶粒(24个枝晶臂)的枝晶臂长度、

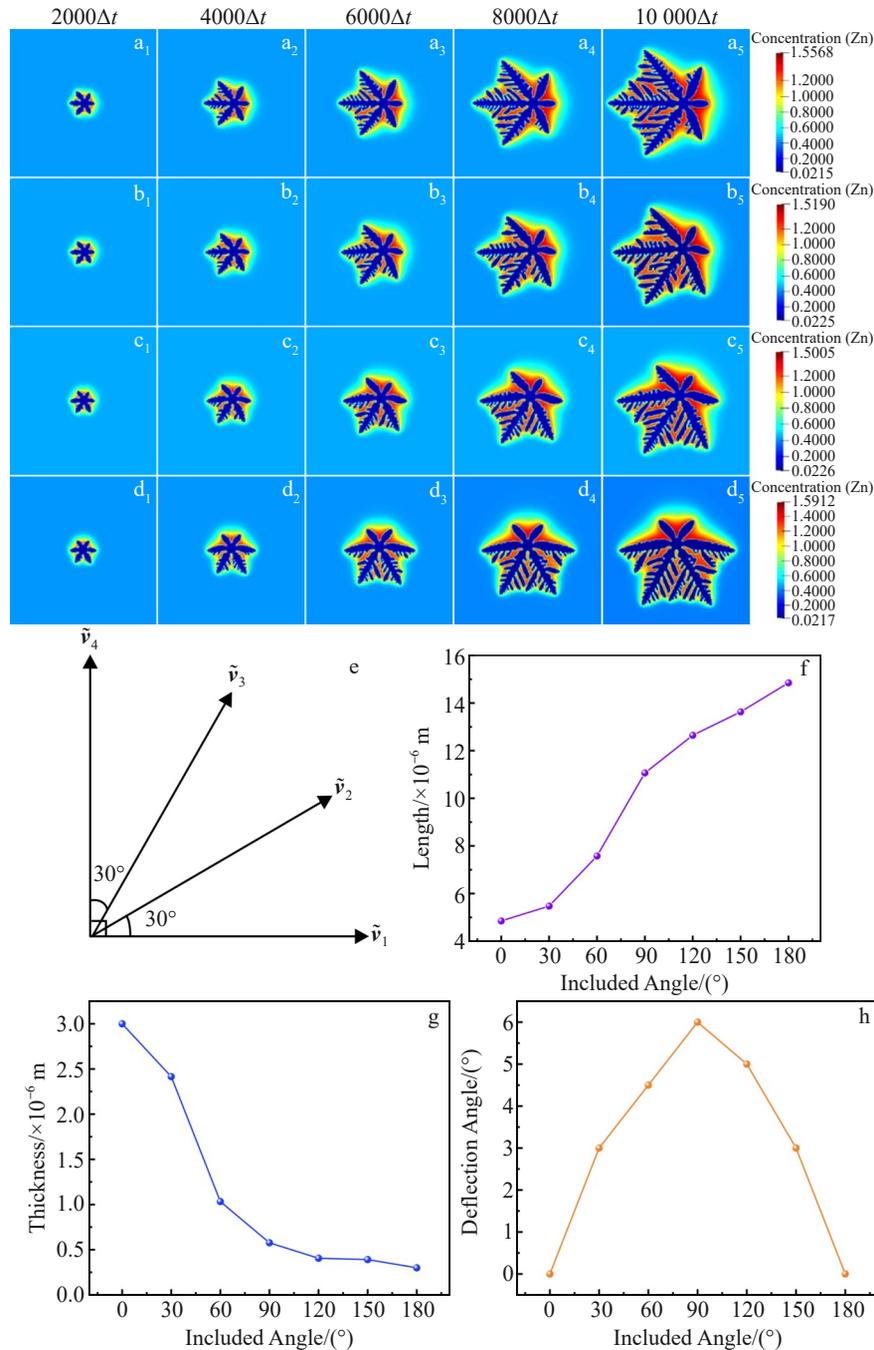


图5 流速方向对Zn元素溶质分布的影响及枝晶臂长度、溶质富集层厚度与枝晶臂偏转角度随枝晶生长方向(无对流条件下)和速度方向夹角变化的曲线

Fig.5 Solute distributions of element Zn corresponding to velocity \tilde{v}_1 (a₁-a₅), \tilde{v}_2 (b₁-b₅), \tilde{v}_3 (c₁-c₅) and \tilde{v}_4 (d₁-d₅)($\tilde{v}_1 = \tilde{v}_2 = \tilde{v}_3 = \tilde{v}_4 = 0.5$); schematic diagram of four speed directions (e); curves of dendritic arm length (f), solute enrichment layer thickness (g), and dendritic arm deflection angle (h) with the included angle between dendritic growth direction (without convection) and velocity direction

溶质富集层厚度、枝晶臂偏转角度,并做出了它们随枝晶生长方向(无对流条件下)与速度方向夹角(以下简称夹角)大小变化的曲线(如图 5f、5g 所示),对于夹角相同的多个枝晶臂的数据进行均值处理。根据曲线分析发现,枝晶臂长度会随夹角的增大而增长,溶质富集层厚度会随夹角的增大而变薄。当夹角为 0° 时,枝晶臂长度最小约为 4.85×10^{-6} m,溶质富集层厚度最大约为 3.0×10^{-6} m;当夹角为 180° 时,枝晶臂长度最大约为 14.85×10^{-6} m,溶质富集层厚度最小约为 0.3×10^{-6} m。这是由于夹角大于 0° 小于 90° 时,枝晶臂处于下游,上游带来的溶质及热量在此处大量堆积,溶质富集层厚度增加,成分过冷度和温度过冷度降低,导致枝晶生长速率缓慢,枝晶臂较短;反之,当夹角大于 90° 小于 180° 时,枝晶臂处于上游,凝固析出的溶质和释放的潜热被流动的熔体带走,溶质富集层厚度减小,成分过冷度和温度过冷度增大,导致枝晶生长速率加快,枝晶臂较长。而枝晶臂偏转角度则会随着夹角从 0° 到 180° 先变大后变小,夹角等于 90° 时,枝晶臂偏转

角度最大约为 6° ,当夹角为 0° 或 180° 时,枝晶臂偏转角度为 0° 。这是因为,当夹角为 90° 时,枝晶受到的横向剪切力最大,向流速方向偏转的幅度也越大。

4.3 强迫对流对三维 AZ91 镁合金凝固微观组织的影响

为了更加贴近实际凝固过程,建立了 AZ91 镁合金三维凝固模型。如图 6 所示为 $\tilde{v}_x = 0.5$ 时, AZ91 镁合金凝固枝晶生长三维模拟结果。图 6a 展示了 AZ91 镁合金三维枝晶形貌,可以发现三维枝晶共有 18 个一次枝晶臂,其中 (0001) 晶面共有 6 个一次枝晶臂均沿 $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 方向生长,其余 12 个枝晶臂均沿 $\langle 11\bar{2}3 \rangle$ 方向生长,且沿 $\langle 11\bar{2}3 \rangle$ 方向生长的枝晶生长速度要慢于 $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 方向^[51]。图 6b₁~6b₅ 为 Zn 元素溶质分布图,可以看到 Zn 元素在固-液界面处富集,导致出现浓度差,切面处表现为接近枝晶根部溶质浓度高,远离枝晶根部溶质浓度低,三维结果表现为凹谷处溶质浓度高,凸起处溶质浓度低。

为了验证三维结果的溶质分布是否能与二维结果相对应,我们研究了 $t=4000\Delta t$ 时 (0001) 晶面的剖面图,并分

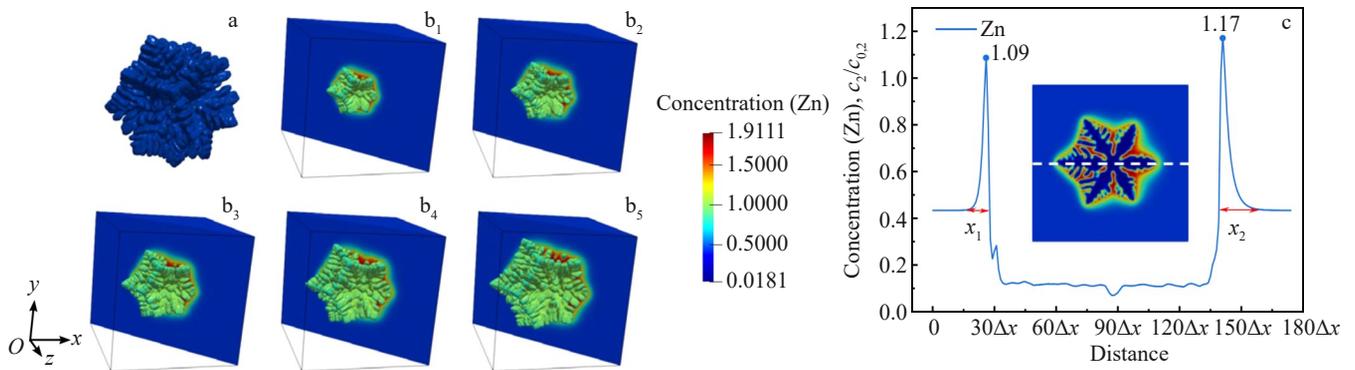


图 6 $\tilde{v}_x = 0.5$ 时 AZ91 镁合金凝固三维枝晶生长相场分布图及 Zn 元素溶质分布图

Fig.6 Phase field distribution of three-dimensional dendritic growth (a); Zn solute distribution diagrams (b₁–b₅) of AZ91 magnesium alloy solidification at $\tilde{v}_x = 0.5$: (a) $t=10\ 000\Delta t$, (b₁) $t=2000\Delta t$; (b₂) $t=2500\Delta t$, (b₃) $t=3000\Delta t$, (b₄) $t=3500\Delta t$, and (b₅) $t=4000\Delta t$; Zn solute distribution curve of (0001) crystal plane profile along white dotted line at $t=4000\Delta t$ (flow velocity is directed horizontally to the right along the x-axis, which is parallel to (0001) crystal plane) (c)

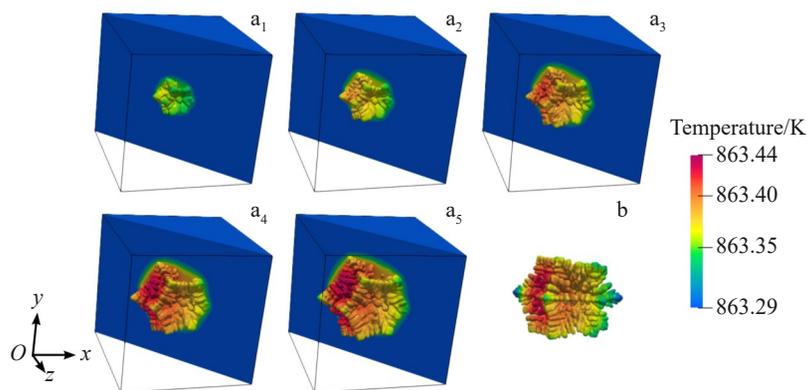


图 7 $\tilde{v}_x = 0.5$ 时 AZ91 镁合金凝固三维枝晶生长过程温度分布及 $t=4000\Delta t$ 时 (0001) 晶面枝晶形貌

Fig.7 Three-dimensional temperature distribution during dendrite growth process of solidified AZ91 magnesium alloy at $\tilde{v}_x = 0.5$: (a₁–a₅) temperature evolution process of dendrite growth of (0001) crystal plane; dendrite morphology of (0001) crystal plane at $t=4000\Delta t$ (flow velocity is directed horizontally to the right along the x-axis, which is parallel to the (0001) crystal plane) (b)

析了沿此剖面图水平中轴(白色虚线)的Zn元素分布曲线,如图6c所示。由剖面图可以看到,上游有较多的二次枝晶臂产生,而下游枝晶分布少量未长大的二次枝晶臂。由于对流对溶质的冲刷作用,下游枝晶前沿的溶质浓度更高,对应于曲线图右侧峰值高于左侧(溶质差为0.08)且溶质富集层厚度也大于左侧($x_2=9.70\Delta x > x_1=5.46\Delta x$),这与二维的模拟结果相符合。

图7为 $\tilde{v}_x = 0.5$ 时,AZ91镁合金凝固三维枝晶生长温度分布。如图7a₁~7a₅所示,随着枝晶生长,枝晶潜热释放,大量热量堆积在模拟域中心,导致中心温度升高。并且由于对流对枝晶凝固的影响,(0001)晶面与(00 $\bar{1}$ 0)晶面均为上游枝晶生长更为发达,热量在上游的堆积量大于下游,说明熔体流动对不同晶面作用相同,此结果与二维模拟结果相符合。

本研究采用的相场模型,其优势在于能够通过引入相应合金体系的热力学参数,实现对枝晶生长的定量模拟。这一特点使得该模型尤其适用于探究一系列具有重要应用价值但实验研究困难的稀有金属。

5 结论

1)熔体流动会导致枝晶形态不对称,这是因为流动的熔体将上游的溶质以及潜热冲刷到下游,导致上游的成分过冷度和温度过冷度增大,下游的成分过冷度和温度过冷度减小,促进了上游枝晶生长,抑制了下游枝晶生长,因此导致了枝晶生长为不对称形态。

2)流速越大导致的不对称形态越明显。 $t < 20\ 000\Delta t$ 时,对流对上游枝晶生长的促进作用比对下游枝晶的抑制作用更大,有对流作用的枝晶占模拟区域面积更大。熔体流动会导致枝晶位置随着流速方向产生偏移,流动速度越大,枝晶的偏移程度也会越大。

3)流动速度的方向不同对枝晶臂的形貌影响不同。枝晶生长方向(无对流条件下)与速度方向夹角越大,枝晶臂长度越大,溶质富集层厚度越薄;夹角越小,枝晶臂长度越小,溶质富集层厚度越大。当夹角为90°时,枝晶臂受到剪切力最大,此时偏转角度最大,当夹角为0°或180°时,枝晶臂偏转角度最小为0°。

4)三维AZ91镁合金枝晶共有18个一次枝晶臂。凝固过程中溶质会在枝晶根部富集。并且由于强迫对流的作用,三维枝晶也产生了不对称形态,并且溶质在下游富集程度更为严重,而凝固潜热大多堆积于上游,此作用对于三维枝晶的不同晶面影响趋势一致。

参考文献 References

[1] Cai X Y, Chen F K, Dong B L *et al. Journal of Materials Research and Technology*[J], 2024, 33: 3308
[2] Jing J H, Chen L W, Li Z Q *et al. Journal of Alloys and Compounds*[J], 2024, 1006: 176171

[3] Xiao L, Liu T T, Chu Y *et al. Acta Metallurgica Sinica (English Letters)*[J], 2024, 37: 513
[4] Yuan Yuan(袁媛), Wang Jun(王俊), Zhang Ligang(章立钢) *et al. Materials China(中国材料进展)*[J], 2024, 43(11): 961
[5] Wang T, Yang L, Tang Z F *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2022, 844: 143042
[6] Wang Y N, Meng X K, Guo J H. *Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2025, 54(3): 612
[7] Song J F, Chen J, Xiong X M *et al. Journal of Magnesium and Alloys*[J], 2022, 10(4): 863
[8] Xin T Z, Zhao Y H, Mahjoub R *et al. Science Advances*[J], 2021, 7(23): eabf3039
[9] Fan X Z, Wang Y, Zou B L *et al. Applied Surface Science*[J], 2013, 277: 272
[10] Xin T Z, Tang S, Ji F *et al. Acta Materialia*[J], 2022, 239: 118248
[11] Xu Jinliang(许金良), Song Yifan(宋宜帆), Ding Ruizhi(丁睿智) *et al. Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程)*[J], 2024, 53(6): 1735
[12] Urtekin L, Özerkan H B, Cogun C *et al. Journal of Materials Engineering and Performance*[J], 2021, 30(10): 7752
[13] Guo Shuguo(郭树国), Liu Quan(刘全), Jia Zheng(贾征) *et al. Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程)*[J], 2025, 54(8): 2136
[14] Zhao Y H, Xin T Z, Tang S *et al. MRS Bulletin*[J], 2024, 49: 613
[15] Zhao Y H. *npj Computational Materials*[J], 2023, 9(1): 94
[16] Zhao Y H, Zhang B, Hou H *et al. Journal of Materials Science & Technology*[J], 2019, 35(6): 1044
[17] Pan F S, Yang M B, Chen X H *et al. Journal of Materials Science & Technology*[J], 2016, 32(12): 1211
[18] Wang X J, Zhu S M, Easton M A *et al. International Journal of Cast Metals Research*[J], 2014, 27(3): 161
[19] Fan W X, Bai Y, Hao H *et al. China Foundry*[J], 2024, 21: 667
[20] Marodkar A S, Patil H, Borkar H *et al. International Journal of Metal Casting*[J], 2023, 17: 2252
[21] Shabestari S G, Ghaniabadi E. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*[J], 2023, 33(2): 396
[22] Ramirez J C, Beckermann C, Karma A *et al. Physical Review E*[J], 2004, 69: 051607
[23] Chen L Q, Zhao Y H. *Progress in Materials Science*[J], 2022, 124: 100868
[24] Zhao Y H, Liu K X, Hou H *et al. Materials & Design*[J], 2022, 216: 110555
[25] Zhao Y H. *Materials Genome Engineering Advances*[J], 2024, 2(2): e44
[26] Guo Q W, Hou H, Wang K L *et al. npj Computational Materials*[J], 2023, 9(1): 185
[27] Xu X T, Song Z, Wang K L *et al. Journal of Materials Science & Technology*[J], 2025, 219: 307
[28] Pei X L, Pei J Q, Hou H *et al. npj Computational Materials*[J], 2025, 11(1): 27
[29] Li H Q, Zhao Y H, Song Z *et al. Acta Materialia*[J], 2025,

- 301: 121573
- [30] Sun D K, Zhu M F, Pan S Y *et al. Acta Materialia*[J], 2009, 57(6): 1755
- [31] Zhao Y H, Xing H, Zhang L J *et al. Acta Metallurgica Sinica (English Letters)*[J], 2023, 36: 1749
- [32] Long T, Pan J Y, Zaleski S. *Journal of Computational Physics*[J], 2024, 513: 113159
- [33] Zhang J B, Wang H F, Kuang W W *et al. Acta Materialia*[J], 2018, 148: 86
- [34] Kuang W W, Wang H F, Li X *et al. Acta Materialia*[J], 2018, 159: 16
- [35] Anderson D M, McFadden G B, Wheeler A A. *Physica D: Nonlinear Phenomena*[J], 2000, 135(1–2): 175
- [36] Tong X, Beckermann C, Karma A *et al. Physical Review E*[J], 2001, 63: 061601
- [37] Xing H, Dong X L, Sun D K *et al. Journal of Materials Science & Technology*[J], 2020, 57: 26
- [38] Zhang A, Du J L, Guo Z P *et al. Metallurgical and Materials Transactions B*[J], 2018, 49: 3603
- [39] Nabavizadeh S A, Eshraghi M, Felicelli S D *et al. International Journal of Multiphase Flow*[J], 2019, 116: 137
- [40] Miller W. *Journal of Crystal Growth*[J], 2001, 230(1–2): 263
- [41] Karma A. *Physical Review Letters*[J], 2001, 87(11): 115701
- [42] Zhang A, Jiang B, Guo Z P *et al. Advanced Theory and Simulations*[J], 2021, 4(3): 2000251
- [43] Ji K H, Dorari E, Clarke A J *et al. Physical Review Letters*[J], 2023, 130(2): 026203
- [44] Du J L, Zhang A, Guo Z P *et al. Acta Materialia*[J], 2018, 161: 35
- [45] Zhang A, Du J L, Guo Z P *et al. Metallurgical and Materials Transactions B*[J], 2018, 49: 3603
- [46] Zhang A, Du J L, Guo Z P *et al. Philosophical Magazine*[J], 2019, 99(23): 2920
- [47] Zhang A, Guo Z P, Jiang B *et al. Acta Materialia*[J], 2021, 214: 117005
- [48] Wu M W, Tian B H, Zhang A *et al. Transactions of Nonferrous Metals Society of China*[J], 2023, 33(6): 1629
- [49] Chen W P, Hou H, Zhang Y T *et al. Journal of Materials Research and Technology*[J], 2023, 24: 8401
- [50] Pei J Q, Chen W P, Zhang W D *et al. Journal of Materials Research and Technology*[J], 2023, 27: 5615
- [51] Sun K X, Chen W P, Pei J Q *et al. Journal of Materials Research and Technology*[J], 2024, 28: 2855

Simulation of α -Mg Dendrite Growth in AZ91 Magnesium Alloy Under Forced Convection Using Phase Field Method

Feng Surui¹, Chen Weipeng¹, Pei Jiaqi¹, Sun Kaixin¹, Zhao Yuhong^{1,2,3}

- (1. MOE Jointly Collaborative Innovation Center for High-Performance Al/Mg Based Materials, Shanxi Key Laboratory of Intelligent Casting and Advanced Forming for New Materials, School of Materials Science and Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, China)
- (2. Beijing Advanced Innovation Center for Materials Genome Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China)
- (3. Institute of Materials Intelligent Technology, Liaoning Academy of Materials, Shenyang 110004, China)

Abstract: During the solidification process of alloys, the flow of molten metal can significantly alter the thermodynamics of dendrite growth, thereby affecting the microstructure and mechanical properties of the components. This work established a phase field-lattice Boltzmann coupling model for the growth of α -Mg dendrites in Mg-9.0wt%Al-1.0wt%Zn alloy under forced convection, mainly studying the effect of melt convection on the growth of α -Mg dendrites. The results show that melt convection leads to asymmetric dendritic growth, with the upstream dendritic growth rate greater than the downstream one. This asymmetric morphology of dendrites becomes more pronounced with the increase in flow velocity. Through simulations of different flow velocity directions, it is found that the length of the dendrite arm is increased with the increase in angle between flow velocity direction and horizontal direction, while the thickness of the solute enrichment layer is decreased with the increase in angle. When the angle is 90°, the dendrite arm experiences the maximum shear force and deflection angle. In addition, the three-dimensional simulation results confirm that the asymmetric growth behavior of α -Mg dendrites under forced convection also exists in the three-dimensional simulation, manifested as a greater enrichment of solutes downstream and a concentration of solidification latent heat mainly upstream.

Key words: phase field method; AZ91 magnesium alloy; dendrite growth; forced convection; lattice Boltzmann method

Corresponding author: Zhao Yuhong, Ph. D., Professor, MOE Jointly Collaborative Innovation Center for High-Performance Al/Mg Based Materials, Shanxi Key Laboratory of Intelligent Casting and Advanced Forming for New Materials, School of Materials Science and Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, P. R. China, E-mail: zhaoyuhong@nuc.edu.cn