

# 三维溶质枝晶生长数值模拟<sup>\*</sup>

潘诗琰 朱鸣芳<sup>†</sup>

(东南大学江苏省先进金属材料高技术重点实验室, 南京 211189)

(2008 年 12 月 22 日收到, 2009 年 1 月 21 日收到修改稿)

建立了在低 Péclet 数条件下三维溶质枝晶生长的数值模拟模型. 该模型采用 Zhu 和 Stefanescu 提出的溶质平衡方法, 即根据固/液界面的平衡浓度和实际浓度之差计算固/液界面演化的驱动力. 界面的平衡浓度由界面温度和曲率所确定, 实际浓度通过采用有限差分法对溶质扩散控制方程进行数值求解而获得. 该方法能够合理定量地描述枝晶从初始的非稳态到稳态的生长过程, 并且具有较高的计算效率. 为了描述具有不同晶体学取向的三维枝晶生长, 提出了一种权值平均曲率算法用于计算固/液界面的曲率, 在权值平均曲率的算法中耦合了界面能各向异性的因素. 该算法简单易实现, 并易于从二维推广到三维系统. 为了对模型进行验证, 将模拟的枝晶尖端稳态生长数据和理论模型的预测结果进行了比较. 结果表明, 模拟的 Al-2wt% Cu 合金枝晶尖端稳态生长速率和半径随过冷度的变化接近于 Lipton-Glicksman-Kurz 解析模型的预测结果. 模拟分析了稳态枝晶尖端的形貌, 发现三维枝晶尖端是非轴对称的, 以四次对称的方式偏离旋转抛物面. 最后, 应用所建立的模型模拟出具有发达分枝和不同晶体学取向的三维等轴多枝晶生长形貌.

关键词: 微观组织模拟, 溶质枝晶生长, 权值平均曲率, 三维

PACC: 8110F

## 1. 引 言

随着凝固理论和数值模拟技术的不断发展, 凝固过程中微观组织形貌的模拟研究已成为可能并日趋完善. 近年来二维枝晶生长的数值模拟研究已取得了很大的进展, 相比较之下三维枝晶模拟的难度仍然较大. 数值模拟基于数学物理模型, 在现今描述合金凝固组织的数学物理模型中, 总体上可分为相场(PF)模型和尖锐界面模型两大类.

PF 模型利用能量密度泛函统一处理各种复杂的热力学体系问题, 自动生成弥散的界面. 国内外已开展利用各种 PF 模型模拟纯物质或合金中三维枝晶生长的研究<sup>[1-5]</sup>. 但是, PF 模型的界面厚度约束限制了其模拟尺度, 而且为了缩短计算时间, PF 模拟常采用高于常规铸造工艺条件下的大过冷度. 目前 PF 方法对三维枝晶的模拟研究主要针对纯物质单枝晶的定量模拟<sup>[1]</sup>, 或对合金中的单枝晶和多枝晶的形貌进行定性模拟<sup>[2-5]</sup>.

尖锐界面模型有元胞自动机(CA)方法、水平集(LS)方法、界面追踪方法. Tan 和 Zabaras<sup>[6,7]</sup>运用 LS 方法追踪界面, 模拟了纯金属和合金凝固的三维枝晶形貌. 但 LS 方法需要在每一时间步长下重新初始化 LS 函数和延拓界面法向速度, 因此算法较复杂、计算效率较低. CA 方法能模拟实验所观测到的各种凝固微观组织特征且算法较简单, 具有较高的计算效率, 已发展出各种 CA 模型, 成功模拟了实际铸件凝固条件下单枝晶自由生长和多枝晶的竞争生长过程<sup>[8-10]</sup>. 但至今 CA 方法的三维枝晶模拟主要还局限于定性的形貌模拟.

将尖锐界面模型从二维推广到三维的关键问题是合理描述与界面能各向异性相关的三维枝晶沿不同择优取向生长. 根据界面的 Gibbs-Thomson 关系, 晶体生长的曲率过冷度取决于包含了界面能各向异性作用的权值平均曲率. 在界面物理化学中, 权值平均曲率被定义为各向异性界面能对界面面积的一阶变分导数<sup>[11]</sup>. 在三维空间中, 用曲率线网作为参数曲线网 $(\theta, \phi)$ , 权值平均曲率可以表示为

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号: 50671025)、江苏省自然科学基金(批准号: BK2006105)和高等学校博士学科点专项科研基金(批准号: 20070286021)资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: zhumf@seu.edu.cn

$$K_{WM} = \left( \alpha(\hat{n}) + \frac{\partial^2 \alpha(\hat{n})}{\partial \theta^2} \right) K_1 + \left( \alpha(\hat{n}) + \frac{\partial^2 \alpha(\hat{n})}{\partial \phi^2} \right) K_2, \quad (1)$$

式中,  $\alpha(\hat{n})$  是界面能各向异性参数,  $K_1$  和  $K_2$  分别为沿  $\theta$  和  $\phi$  两个主方向上所对应的主曲率. 对于利用欧拉方法描述的三维枝晶生长问题, 仅有每一时刻三维空间界面上的固相分数信息, 而不能用确定的参数方程进行描述. 因此, 求解 (1) 式的难度很大.

本文在 CA 方法基础上, 建立了一个适用于模拟低 Péclet 数条件下溶质枝晶生长的三维模型. 该模型采用 Zhu 和 Stefanescu (ZS)<sup>[12]</sup> 提出的界面溶质平衡方法计算枝晶生长动力学. 为了描述不同择优取向的三维枝晶生长, 提出了一种计算界面权值平均曲率的新算法. 该算法基于求解 Cahn-Hoffman 向量  $\xi$  在直角坐标系下的曲面散度<sup>[13, 14]</sup>, 为计算三维各向异性晶体生长的曲率过冷度提供了一种易于实现的新途径.

## 2. 模型与算法

### 2.1. 模型描述

本文工作针对二元合金在低 Péclet 数条件下溶质枝晶的生长, 将三维计算区域划分为均匀的正方体网格, 每个网格被赋予多个不同的变量, 如温度、浓度、固相分数等, 并标明其状态, 如液态 ( $f_s = 0$ ), 固态 ( $f_s = 1$ ) 或界面 ( $0 < f_s < 1$ , 其中  $f_s$  为固相分数). 在模拟开始时, 计算区域内充满了具有相同初始温度和浓度的液相, 将一个或多个给定了随机择优取向的晶核放置于计算区域中. 当晶核处于过冷溶剂中时, 对于液相线斜率为负的亚共晶成分合金, 晶核界面上的局部平衡液相成分大于局部实际液相成分. 为了达到平衡成分, 晶体开始生长. 因此, 界面局部平衡液相成分和实际液相成分之差为晶体生长提供了驱动力, 这就是 ZS 模型中用溶质平衡方法计算枝晶生长动力学的基本思想<sup>[12]</sup>. 在 ZS 模型中, 界面局部平衡液相成分由界面温度和曲率所确定, 而实际液相成分则通过在整个区域中求解溶质扩散方程获得. 考虑到铝铜合金的热扩散系数比溶质扩散系数大 4 个数量级左右, 可以认为在一个微观的计算区域内热扩散能够充分进行, 枝晶生长主要受溶质扩散所控制. 因此, 为了减少三维模型的计算量, 我们对模型进行简化: 假定在计算区域内温度场均

匀恒定或以一定的冷却速度下降, 从而不需耦合温度场计算而只需求解枝晶生长过程中的浓度场变化. 下面介绍计算浓度场、枝晶生长动力学和界面权值平均曲率的控制方程及算法.

### 2.2. 浓度场计算

在枝晶生长过程中, 根据  $C_s = kC_l$  计算固/液界面处的溶质再分配, 其中  $k$  为恒定的溶质分配系数. 溶质扩散方程为

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \nabla \cdot (D_i \nabla C_i) + C_i(1 - k) \frac{\partial f_s}{\partial t}, \quad (2)$$

式中,  $t$  为时间,  $C_i$  为成分,  $D_i$  为溶质扩散系数, 下标  $i$  表示固相、液相, 即  $i = s, l$ . 方程 (2) 的右边第二项表示固/液界面处排出的溶质量. 方程 (2) 采用显式有限差分法进行求解, 差分时间步长由液相中溶质扩散系数  $D_l$  所确定.

### 2.3. 生长动力学和固相分数的计算

根据以上模型描述, 枝晶生长速率正比于固/液界面平衡液相成分与实际液相成分之差. 根据界面的溶质平衡条件, 在一个时间步长  $\Delta t$  中, 固/液界面网格中的固相分数增量  $\Delta f_s$  可由下式计算:

$$\Delta f_s = (C_1^{eq} - C_l) [C_1^{eq}(1 - k)], \quad (3)$$

式中,  $C_1^{eq}$  为固/液界面处液相的平衡成分,  $C_l$  为固/液界面处液相的实际成分, 通过求解溶质扩散方程 (2) 获得. 再根据固相分数增量, 由  $V_n = \Delta f_s \Delta x / \Delta t$  计算界面的生长速率, 其中  $\Delta x$  为空间步长,  $\Delta t$  为时间步长. 在  $t = t_n$  时, 如果界面网格的固相分数  $f_s = 1$ , 界面网格完成凝固. 此时网格状态改变成固相, 再重新显式追踪界面. 实际的固/液界面前沿由每个界面网格中的固相分数隐式确定. 根据固/液界面处热力学平衡的 Gibbs-Thomson 关系 (3) 式中的固/液界面处的液相平衡成分  $C_1^{eq}$  可由下式计算:

$$C_1^{eq} = C_0 + \frac{T_1^* - T_{lD}^{eq}}{m_1} + \frac{\Gamma K_{WM}}{m_1}, \quad (4)$$

式中,  $T_1^*$  为界面温度,  $T_{lD}^{eq}$  为  $C_0$  初始成分合金的平衡液相线温度,  $m_1$  为液相线斜率,  $\Gamma$  为 Gibbs-Thomson 系数,  $K_{WM}$  为耦合了界面能各向异性因素的固/液界面的权值平均曲率, 其算法在下面进行详细讨论.

### 2.4. 固/液界面权值平均曲率和界面能各向异性计算

在本文中我们不直接求解 (1) 式, 而是通过计算

Cahn-Hoffman 向量  $\xi$  的曲面散度来得到权值平均曲率<sup>[13,14]</sup>

$$K_{\text{WM}} = -\nabla_s \cdot \xi(\hat{n}), \quad (5)$$

式中  $\nabla_s$  为曲面散度算符. 由(5)式计算得到的权值平均曲率  $K_{\text{WM}}$  完全等同于(1)式. Cahn-Hoffman 向量  $\xi$  可以表示为

$$\xi(\hat{n}) = \tilde{\nabla} (|\nabla f_s| \cdot a(\hat{n})), \quad (6)$$

式中  $a(\hat{n})$  为界面能各向异性参数, 是固/液界面法向量  $\hat{n}$  的函数. 对于具有四次对称性的立方晶系,  $a(\hat{n})$  可以表示为

$$a(\hat{n}) = (1 - 3\epsilon) \left[ 1 + \frac{4\epsilon}{1 - 3\epsilon} (n_x^4 + n_y^4 + n_z^4) \right], \quad (7)$$

式中  $\epsilon$  为界面能各向异性系数, 固/液界面单位法向量  $\hat{n} = \nabla f_s / |\nabla f_s| = n_x \mathbf{i} + n_y \mathbf{j} + n_z \mathbf{k}$ , 在直角坐标系中的三个分量分别为

$$\begin{aligned} n_x &= \partial_x f_s / |\nabla f_s|, \\ n_y &= \partial_y f_s / |\nabla f_s|, \\ n_z &= \partial_z f_s / |\nabla f_s|. \end{aligned}$$

定义  $Q \equiv n_x^4 + n_y^4 + n_z^4$ , 可得到(5)式的展开形式为

$$\begin{aligned} K_{\text{WM}} &= -\nabla_s \cdot \xi(\hat{n}) = (3\epsilon - 1) (\partial_x n_x + \partial_y n_y + \partial_z n_z) \\ &\quad - 48\epsilon [n_x^2 \partial_x n_x + n_y^2 \partial_y n_y + n_z^2 \partial_z n_z] \\ &\quad + 12\epsilon Q (\partial_x n_x + \partial_y n_y + \partial_z n_z) \\ &\quad + 12\epsilon [n_x \partial_x Q + n_y \partial_y Q + n_z \partial_z Q]. \end{aligned} \quad (8)$$

(8)式可以在直角坐标系下根据界面的固相分数梯度直接求解. 值得一提的是, 用(8)式计算的权值平均曲率可以统一处理计算二维和三维界面曲率过冷度的问题, 算法也很简便.

### 3. 结果及讨论

#### 3.1. 过冷熔体中单枝晶的生长形貌

应用所建立的模型模拟了 Al-2wt% Cu 合金在过冷熔体中自由单枝晶的生长. 计算区域由  $250 \times 250 \times 250$  个均匀正方体网格组成, 取界面能各向异性系数  $\epsilon = 0.03$ . 其他 Al-Cu 合金的物性参数参照文献[15]. 在模拟开始时, 将一个浓度为  $kC_0$  的晶核置于计算区域的中心, 其他网格充满了初始浓度为  $C_0$  的液相. 图 1 为在过冷度  $\Delta T = 2.5$  K 和两种不同网格尺寸 ( $\Delta x = 0.2, 1 \mu\text{m}$ ) 条件下, 模拟得到 Al-2wt% Cu 合金的单枝晶形貌. 由于所采用的网格

数相同, 在  $\Delta x = 0.2 \mu\text{m}$  时的实际物理区域较小, 得到无二次分枝的针状枝晶形貌; 而当  $\Delta x = 1 \mu\text{m}$  时, 实际的物理区域相对较大, 从而形成了具有发达二次分枝的枝晶.

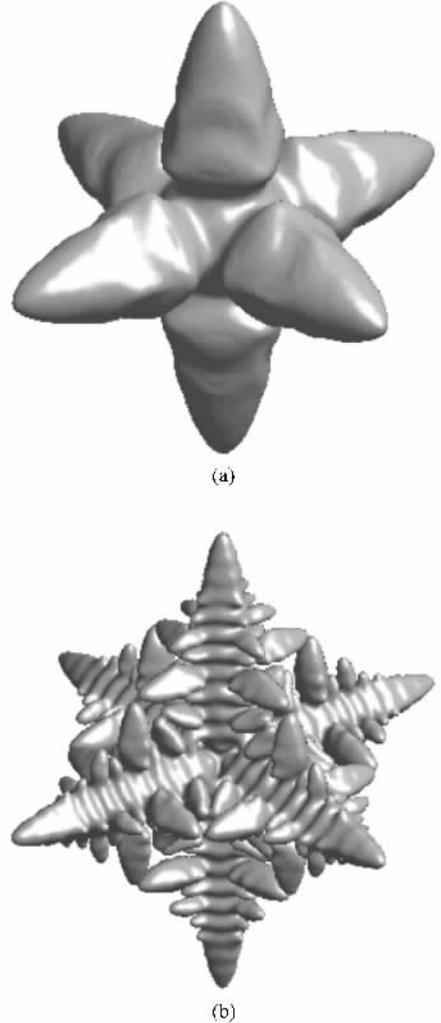


图 1 模拟得到 Al-2wt% Cu 合金在过冷度  $\Delta T = 2.5$  K 熔体中的单枝晶形貌 (a) 针状枝晶 ( $\Delta x = 0.2 \mu\text{m}$ ), (b) 具有发达二次分枝的枝晶 ( $\Delta x = 1 \mu\text{m}$ )

#### 3.2. 模拟结果与 LGK 理论模型比较

为了将模型进行定量验证, 将模拟得到的 Al-2wt% Cu 合金针状枝晶尖端稳态生长数据与 Lipton-Glicksman-Kurz (LGK) 理论模型<sup>[16,17]</sup>的预测结果进行比较. 因为本模型是针对纯溶质驱动的等温合金凝固的枝晶生长, 为了与 LGK 解析模型进行有效比较, 将 LGK 模型中的热过冷度设置为零. 此外, 由于枝晶尖端前沿不存在温度梯度, 纯溶质枝晶尖

端稳定性准则可表示为

$$\frac{1}{\sigma^*} = \frac{VR^2 |m| (1-k) C_0}{D_1 \Gamma [1 - (1-k) I_v(P_c)]}, \quad (9)$$

式中,  $V$  和  $R$  分别为尖端生长速率和尖端半径,  $P_c = VR(2D_1)$  为溶质 Péclet 数. 根据可解性理论, 择优参数  $\sigma^*$  为各向异性参数  $\epsilon$  的函数. 在本文中, 我们根据 Barbieri 和 Langer<sup>[18]</sup> 的线性可解性理论求解择优参数  $\sigma^*$ . 当  $\epsilon = 0.03$ , 根据三维的线性可解性理论可得相应的  $\sigma^* = 0.08469$ . 然后用该  $\sigma^*$  值, 将稳态枝晶尖端参数作为过冷度的函数进行求解, 得到

LGK 模型的理论预测值. 数值模拟区域由  $250 \times 250 \times 250$  个均匀正方体网格组成, 网格尺寸取为  $0.2 \mu\text{m}$ . 当枝晶生长达到稳态后测出枝晶尖端生长速率和半径, 其中尖端半径用四次多项式拟合枝晶尖端在  $\phi = 0^\circ$  的纵向截面获得. 图 2 为模拟的枝晶尖端稳态生长速率和半径随过冷度的变化, 并与 LGK 理论模型预测结果进行比较. 由图 2 可见, 两种模型所预测的枝晶尖端稳态生长速率随过冷度的升高而升高, 而尖端半径随过冷度的升高而降低. 模拟结果与 LGK 理论预测结果符合较好.

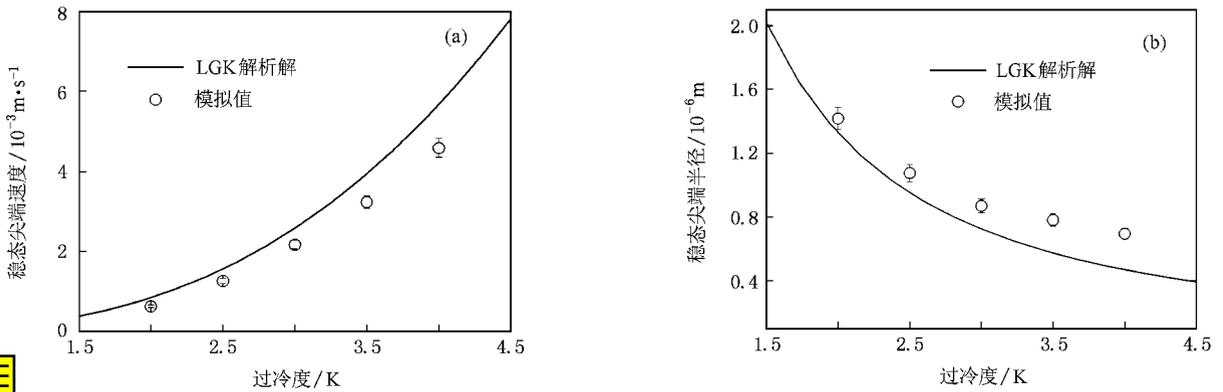


图 2 模拟得到枝晶尖端稳态生长参数随过冷度变化及与 LGK 模型预测结果的比较 (a) 尖端生长速率, (b) 尖端半径

### 3.3. 非轴对称针状枝晶尖端形貌分析

从图 1 的模拟结果可观察到枝晶尖端呈现出非轴对称的形貌. 为了便于分析枝晶的尖端形貌, 将直角坐标  $(x, y, z)$  转换为柱坐标  $(x, \phi, z)$ , 并用枝晶尖端半径进行归一化. 图 3 为沿  $z$  轴正向生长枝晶尖端的纵向截面, 其中空心点表示模拟的枝晶尖端界面上  $f_s = 0.5$  的等值点, 这些等值点通过对

界面附近网格的固相分数进行插值获得. 图 3(a) 为模拟得到的非轴对称枝晶尖端在  $\phi = 0^\circ$  和  $\phi = 45^\circ$  截面上用四次多项式进行拟合的结果. 由图 3(a) 可观察到, 在枝晶尖端附近  $\phi = 0^\circ$  和  $\phi = 45^\circ$  截面轮廓几乎重叠, 但在离开尖端部位, 两个截面轮廓逐渐分离. 这表明在尖端附近的枝晶形貌接近轴对称, 随后逐渐偏离轴对称, 形成凸缘状的非轴对称特征. 为了进一步分析枝晶尖端附近形貌, 将图 3(a) 中  $\phi = 0^\circ$

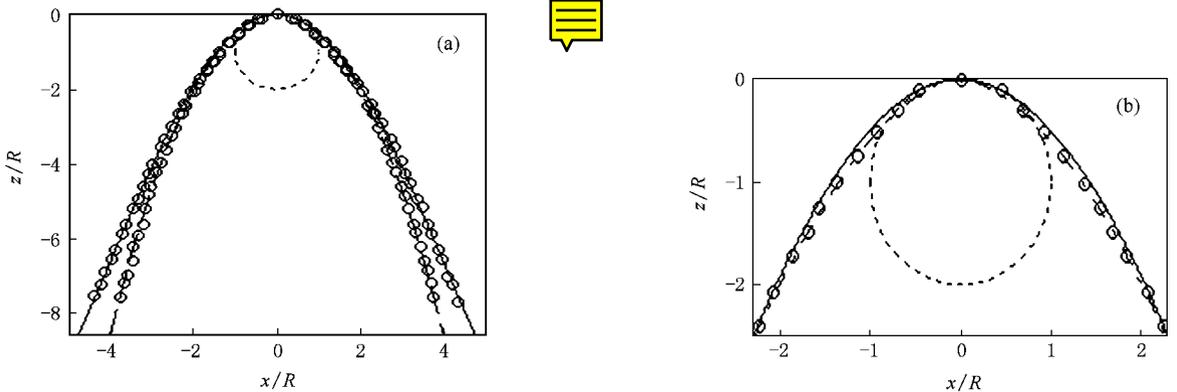


图 3 枝晶尖端的纵向截面 (a)  $\phi = 0^\circ$  和  $\phi = 45^\circ$  截面 (空心圆) 和四次多项式拟合结果 (实线为  $\phi = 0^\circ$  截面拟合结果, 虚线为  $\phi = 45^\circ$  截面拟合结果) (b)  $\phi = 0^\circ$  截面靠近尖端部位 (空心圆) 幂律拟合 (虚线) 和四次多项式拟合 (实线) 结果

的截面轮廓放大,并用幂律  $z = -\alpha |x|^\beta$  和四次多项式两种方法进行拟合,结果示于图 3(b).用幂律拟合时将  $\alpha$  和  $\beta$  均设为自由参数,结果得到  $\beta = 1.71$ ,非常接近于非轴对称枝晶可解性理论预测的理论值  $5/3^{[19]}$ .从图 3(b)可见,幂律拟合几乎与模拟的  $\phi = 0^\circ$  截面中  $f_s = 0.5$  的等值点重合,比四次多项式拟合的结果更精确.

图 4 为枝晶尖端沿  $z$  轴每间隔  $15\Delta x$  ( $\Delta x = 0.2 \mu\text{m}$ ) 截取的横向截面图,即每个截面位置为  $z_i = z_{\text{tip}} - 15\Delta xi$  ( $i = 1, \dots, 6$ ).图中空心圆圈表示模拟的固/液界面上  $f_s = 0.5$  的等值点,实线为用傅里叶级数的拟合结果.傅里叶级数可表示为<sup>[1]</sup>

$$r^2(\phi, z) = \sum_n A_n(z) \cos 4n\phi, \quad (10)$$

式中  $r$  是离  $z$  轴的径向距离.由图 4 可见,枝晶尖端附近的横向截面接近圆形,但离尖端较远时横向截面开始逐渐偏离圆形,与图 3(a) 中纵向截面的形状相对应.图 4 还显示出模拟的枝晶尖端横向截面形状与傅里叶级数拟合曲线符合很好,表明非轴对称的枝晶尖端以四次对称性偏离旋转抛物面.

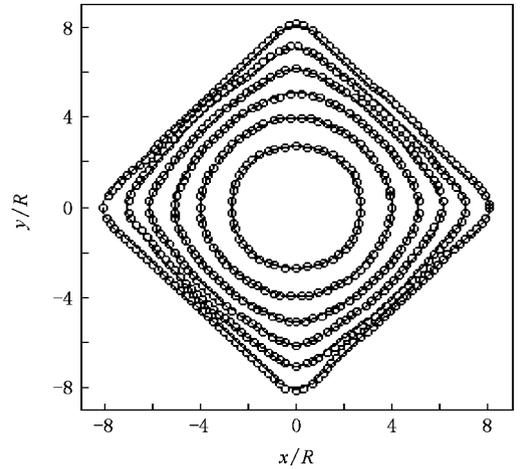


图 4 模拟得到枝晶尖端横向截面(空心圆)和傅里叶级数的拟合(实线)结果

### 3.4. 等轴多枝晶生长

图 5 为模拟得到 Al-2wt% Cu 合金在凝固过程中等轴多枝晶的演化.计算区域由  $250 \times 250 \times 250$  个均匀正方体网格组成,网格尺寸为  $1 \mu\text{m}$ .将 8 个

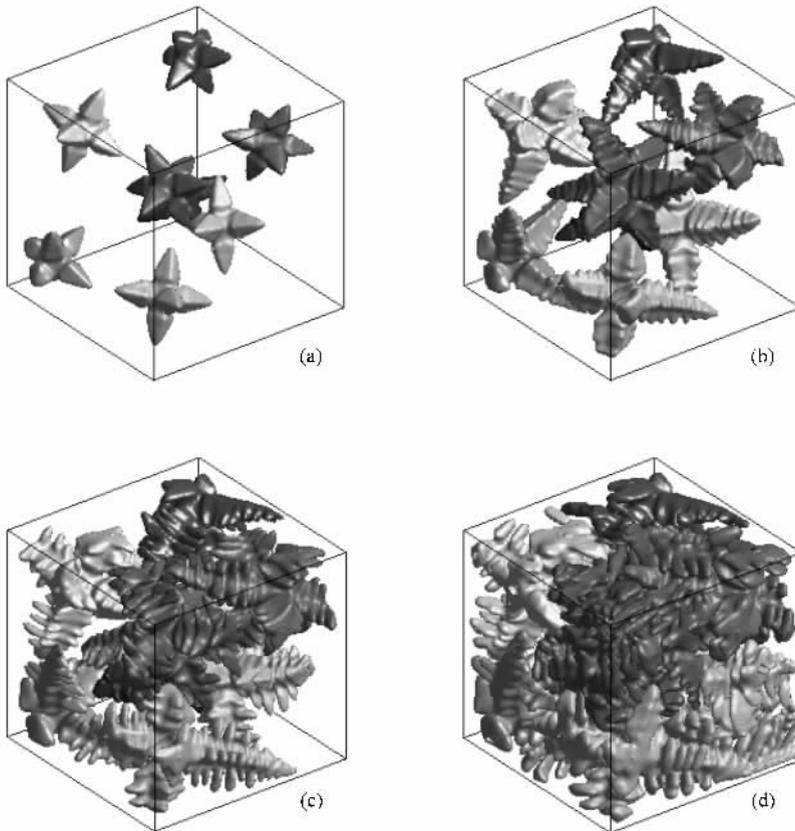


图 5 模拟得到 Al-2wt% Cu 合金在凝固过程中等轴晶的演变 (a)  $f_s = 5\%$ ,  $t = 0.17 \text{ s}$ ; (b)  $f_s = 15\%$ ,  $t = 0.25 \text{ s}$ ; (c)  $f_s = 25\%$ ,  $t = 0.3 \text{ s}$ ; (d)  $f_s = 45\%$ ,  $t = 0.44 \text{ s}$

晶核随机分布在计算区域中,并随机给予每个晶核一个择优取向(将每个晶核的 $[100]$ 、 $[010]$ 和 $[001]$ 晶向在固定直角坐标 $(x, y, z)$ 中的方向余弦定义为该晶核的择优取向的单位向量)。假设计算区域内温度均匀,取初始过冷度 $\Delta T = 1$  K,以 $5$  K/s的速率进行冷却。由图5可见,在凝固初始阶段,晶核沿着不同的择优取向生长。随着凝固的进行,枝晶主干进一步生长并在主干上出现明显的二次分枝。随后,枝晶的二次分枝加快生长,并且逐渐粗化。在凝固后期,枝晶臂互相接触交叠在一起。

本文发展的三维模型与二维ZS模型一样具有较好的计算效率。例如,图1和图5均使用计算机进行模拟计算,所需时间分别为7和31 h。显然比PF模型或LS模型的计算效率快得多。

## 4. 结 论

本文发展了一个适用于低Péclet数范围的三维

溶质枝晶的生长模型。该模型利用基于直角坐标系下求解Cahn-Hoffman向量 $\xi$ 的曲面散度方法,计算包含了界面能各向异性作用的权值平均曲率。该算法简便易实现,能成功地模拟具有不同择优取向的三维枝晶形貌,为计算三维各向异性晶体生长的曲率过冷度提供了一种新途径。本模型采用ZS提出的界面溶质平衡法计算枝晶生长动力学。该方法能够以一个较快的计算效率定量地描述枝晶从非稳态到稳态的生长过程,通过将模拟结果与理论模型的预测结果进行比较对模型进行了验证。结果表明,模拟的枝晶尖端稳态生长速率和半径随过冷度的变化与LGK解析模型的预测结果符合良好。对针状枝晶尖端的形貌进行了分析,发现三维枝晶尖端是非轴对称的,并以四次对称性偏离旋转抛物面。可用幂律 $z = -\alpha |x|^\beta$ 对 $\phi = 0^\circ$ 的凸缘纵截面进行很好拟合,拟合值与可解性理论的预测结果符合很好。利用该模型成功地模拟出具有不同择优生长方向的等轴多枝晶的形貌。

- [ 1 ] Karma A ,Rappel W J 1998 *Phys. Rev. E* **57** 4323
- [ 2 ] George W L ,Warren J A 2002 *J. Comput. Phys.* **177** 264
- [ 3 ] Pusztai T ,Bortel G ,Granasy L 2005 *Europhys. Lett.* **71** 131
- [ 4 ] Pusztai T ,Bortel G ,Granasy L 2005 *Mater. Sci. Eng. A* **413—414** 412
- [ 5 ] Zhao H Z ,Jing T ,Liu B C 2005 *Acta Metall. Sin.* **41** 491 ( in Chinese )[ 赵红兆、荆涛、柳百成 2005 金属学报 **41** 491 ]
- [ 6 ] Tan L J ,Zabaras N 2006 *J. Comput. Phys.* **211** 36
- [ 7 ] Tan L J ,Zabaras N 2007 *J. Comput. Phys.* **221** 9
- [ 8 ] Wang W ,Lee P D ,McLean M 2003 *Acta Mater.* **51** 2971
- [ 9 ] Zhu M F ,Hong C P 2002 *ISIJ Int.* **42** 520
- [ 10 ] Liu Z Y ,Xu Q Y ,Liu B C 2007 *J. Tsinghua Univ. ( Sci. Tech.*

- Ed. ) **47** 1253 ( in Chinese )[ 刘志勇、许庆彦、柳百成 2007 清华大学学报(自然科学版) **47** 1253 ]
- [ 11 ] Taylor J E 1992 *Acta Metall. Mater.* **40** 1475
- [ 12 ] Zhu M F ,Stefanescu D M 2007 *Acta Mater.* **55** 1741
- [ 13 ] Cahn J W ,Hoffman D W 1972 *Surf. Sci.* **31** 368
- [ 14 ] Cahn J W ,Hoffman D W 1974 *Acta Metall.* **22** 1205
- [ 15 ] Belteran-Sanchez L ,Stefanescu D M 2004 *Metall. Mater. Trans. A* **35** 2471
- [ 16 ] Lipton J ,Clicksman M E ,Kurz W 1984 *Mater. Sci. Eng.* **65** 57
- [ 17 ] Lipton J ,Clicksman M E ,Kurz W 1987 *Metall. Trans. A* **18** 341
- [ 18 ] Barbieri A ,Langer J S 1989 *Phys. Rev. A* **39** 5314
- [ 19 ] Ben Amar M 1990 *Phys. Rev. A* **41** 2080

# Modelling of solutal dendritic growth in three dimensions<sup>\*</sup>

Pan Shi-Yan Zhu Ming-Fang<sup>†</sup>

(*Key Laboratory for Advanced Metallic Materials of Jiangsu Province, Southeast University, Nanjing 211189, China*)

(Received 22 December 2008; revised manuscript received 21 January 2009)

## Abstract

A three-dimensional (3D) model for the simulation of solutal dendritic growth in the low Péclet number region is presented. In the model is adopted a solutal equilibrium approach previously proposed by Zhu and Stefanescu to calculate the evolution of the solid/liquid (SL) interface, which allows the accurate simulation of dendritic growth from the initial unstable stage to the steady-state stage with a good computational efficiency. In this approach, the kinetics of dendritic growth is driven by the difference between the local equilibrium composition, calculated from the local temperature and curvature, and the local actual liquid composition, obtained by solving the solutal transport equation. To describe the specific crystallographic orientation of 3D dendritic growth, a weighted mean curvature (WMC) algorithm, which is incorporated with the anisotropy of surface tension, is proposed to calculate the local SL interface curvature. This approach is convenient to be implemented and to make the transformation for WMC calculation from two to three dimensions. The model is verified by the comparison of our numerical results with the analytical ones. The simulated steady-state tip velocity and radius varying with the degree of undercooling of an Al-2wt% Cu alloy are found to be close to the ones predicted by the Lipton-Glicksman-Kurz analytical model. The steady-state morphology of the needle dendrite tip is analyzed. It is found that the tip is nonaxisymmetric and deviates from a paraboloid in the manner of the fourfold symmetry. Finally, the simulated 3D multi-equiaxed dendrites with various crystallographic orientations are presented.

**Keywords:** microstructure modeling, solutal dendritic growth, weighted mean curvature, three dimensions

**PACC:** 8110F

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50671025), the Natural Science Foundation of Jiangsu Province, China (Grant No. BK2006105) and the Doctoral Program Foundation of Institution of Higher Education, China (Grant No. 20070286021).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: zhmf@seu.edu.cn