

基于改进元胞自动机模型的三元合金枝晶生长的数值模拟*

石玉峰 许庆彦[†] 柳百成

(清华大学机械工程系, 先进成形制造教育部重点实验室, 北京 100084)

(2011年8月9日收到; 2011年9月22日收到修改稿)

在二元合金元胞自动机模型的基础上, 通过耦合多元合金热力学相平衡求解器 PanEngine, 建立了三元合金改进的元胞自动机模型, 可模拟初生相枝晶的生长过程. 模型考虑了曲率过冷和成分过冷对界面平衡溶质成分的影响, 通过不同组元的无量纲溶质过饱和度方程和界面溶质守恒方程之间的耦合来求解界面生长速率, 并通过 PanEngine 计算界面处的液相线温度. 采用本模型模拟了 Al-7%Si- x Mg 三元合金自由枝晶的生长形态, 结果表明 Mg 含量的增加会抑制枝晶一次臂的生长和二次臂的产生. 同时模拟了不同抽拉速度下 Al-7%Si-0.5%Mg 合金柱状枝晶的竞争生长过程, 随着抽拉速度的增大, 柱状枝晶一次枝晶臂间距逐渐减小, 与 Hunt 理论模型符合较好.

关键词: 改进的元胞自动机, 三元合金, 枝晶生长

PACS: 81.10.Aj, 61.50.Ah

1 引言

合金凝固过程中的微观组织形态是影响铸件性能的重要因素之一. 实际生产中应用的合金大多为多元体系, 其凝固路径、溶质再分配与微观偏析的变化规律在材料科学和凝聚态物理学领域受到较为强烈的关注.

早期研究合金凝固组织演变以及微观偏析多采用实验方法和解析方法, 产生了一些描述溶质场、温度场与初生相界面参数(固相分数、枝晶尖端半径、尖端生长速率等)之间关系的模型, 其中有描述二元合金初生相凝固过程的 Scheil 方程^[1]及其相关的改进方程^[2,3], 目前通过将相图计算和 Scheil 方程结合起来, 可将 Scheil 方程推广至分析多元合金的凝固路径和微观偏析^[4]. 在枝晶生长研究方面出现了描述枝晶尖端半径、尖端生长

速率和过冷度之间关系的 LGK (Lipton-Glicksman-Kurz) 解析模型^[5]和 KGT (Kurz-Giovanola-Trivedi) 解析模型^[6]; 同时有学者通过实验研究, 提出了一些理论解析模型来预测合金凝固过程中枝晶一次臂间距和温度梯度以及溶质成分之间的关系^[7,8].

使用解析模型难以描述多元合金枝晶的形貌特征, 而数值模拟方法能够将复杂的数学模型进行离散求解, 已经逐步成为预测合金凝固过程枝晶形貌和微观偏析的重要工具, 目前最常用的微观组织数值模拟方法主要有相场法 (phase field, PF)^[9-12]和元胞自动机方法 (cellular automaton, CA)^[13,14]. 其中 CA 方法由于其具有较高的计算效率, 得到了广泛的应用, 已经有很多学者提出了不同的改进 CA 模型; 但是这些模型主要用来模拟二元合金枝晶生长^[15-19]. 由于实际合金多为三元甚至更高

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2005CB724105 和 2011CB706801)、国家自然科学基金 (批准号: 10477010 和 51171089)、国家高技术研究发展计划 (批准号: 2007AA04Z141) 和国家科技重大专项 (批准号: 2009ZX04006-041-04 和 2011ZX04014-052) 资助的课题.

[†] E-mail: scjxqy@mail.tsinghua.edu.cn

元,不同组元对枝晶形貌和微观偏析的影响是不同的,因此CA模型需要向多元方向发展.近年来,国内一些学者^[20,21]在CA模型中引入一个界面动力学系数来获取枝晶生长速率,使用PanEngine预先计算若干成分的热力学数据作为数据表,其余成分的热力学数据通过数据表间接插值获得,模拟了Al-15%Cu-1%Mg合金和Al-4.5%Cu-0.5%Mg-1%Si合金(质量分数)的枝晶生长过程.Michelic等^[22]建立基于CA方法的改进VFT(virtual front-tracking)模型,模拟了Fe-C-Si-Mn-P多元合金枝晶的生长过程,但是模型人为引入了界面平衡溶质成分和周围液相溶质成分之间的外插函数来求解各组元的界面平衡溶质成分,算法较为复杂.

本文将已有的二元合金CA模型扩展到三元合金系,直接耦合PanEngine获得固液界面前沿溶质组元的平衡液相线温度以及液相线斜率,将固液界面溶质守恒方程和溶质过饱和度方程结合起来求解枝晶尖端生长速率,建立了描述三元合金枝晶生长的改进的CA(MCA)模型.选择Al-7%Si- x Mg三元合金,模拟了Mg的溶质成分变化对枝晶生长形态的影响;同时模拟了不同抽拉速度作用下Al-7%Si-0.5%Mg合金定向凝固过程中柱状枝晶的生长过程.

2 数学模型和数值算法

本文在二维微观尺度研究三元合金的初生相演化过程,引入下列假设:1)微观区域内溶质守恒;2)液相中溶质扩散系数比固相中高若干数量级,从而忽略固相溶质扩散;3)模型中忽略动力学过冷;4)液相溶质扩散系数随温度会发生变化.

2.1 溶质扩散控制方程

三元合金凝固初生枝晶相的形成过程中,设定溶质组元分别为B和C,忽略溶质组元之间的互扩散,得到组元的液相溶质扩散方程为

$$\frac{\partial C_{L,i}}{\partial t} = \nabla \cdot (D_{L,i} \nabla C_{L,i}) + C_{L,i}(1 - k_i) \frac{\partial f_S}{\partial t}, \quad (1)$$

$$C_{S,i} = k_i C_{L,i} \quad (2)$$

(1)式中, $C_{L,i}$ 是组元*i*(*i*表示B或C组元)的液相溶质成分,对于Al-Si-Mg三元合金来说,B代表Si组元,C代表Mg组元; $D_{L,i}$ 是组元*i*的液相溶质扩散系数; k_i 为组元*i*的溶质平衡分配系数,可以通过PanEngine求解器获得,PanEngine是美国CompuTherm公司开发的相图计算软件Pandata的核心部分; f_S 是固相分数;等式右边第二项表示随着界面固相率的增加,界面液相实际溶质成分不断升高.(2)式中的 $C_{S,i}$ 和 $C_{L,i}$ 分别是界面上组元*i*的固相和液相实际溶质成分.

2.2 温度场控制方程

由于三元合金热扩散系数比溶质扩散系数高若干数量级,故而认为在微观计算域中温度均匀,以确定的冷却速率(C_R)下降,从而计算域中温度场控制方程可简化为

$$T = T_0 - C_R t, \quad (3)$$

其中 T_0 和 T 分别为计算域初始时刻温度和 t 时刻的温度.

2.3 枝晶生长动力学模型

模型中将计算域划分成正方形的元胞,根据元胞的固相分数 f_S 来区分元胞所处的状态:液态($f_S = 0$),固态($f_S = 1$)和界面状态($0 < f_S < 1$).

1) 界面热力学平衡

由于成分过冷和曲率过冷的作用,界面元胞满足局部热力学平衡条件,其界面平衡温度与液相线温度之间满足如下关系

$$T = T_L(C_{L,B}, C_{L,C}) - \Delta T_C - \Delta T_R, \quad (4)$$

式中, T 为界面元胞的界面平衡温度,可通过(3)式获得; $T_L(C_{L,B}, C_{L,C})$ 是液相线温度,是实际液相溶质成分 $C_{L,B}$ 和 $C_{L,C}$ 的函数,可以通过PanEngine求解得到; ΔT_R 和 ΔT_C 分别表示曲率过冷和成分过冷.

2) 曲率过冷

在二维条件下,立方晶系三元合金枝晶生长过程中曲率过冷的计算方法为

$$\Delta T_R = \Gamma [1 - 15\epsilon \cos(4(\psi - \psi_0))] \cdot K, \quad (5)$$

式中, Γ 是 Gibbs-Thomson 系数, ε 为界面能各向异性系数, ψ 是固液界面元胞单位法向矢量所对应的平面角, ψ_0 是枝晶的择优生长取向, K 是界面曲率.

CA 界面元胞曲率 K 与元胞自身以及周围元胞的固相分数有关, 计算方法为

$$K = \left[1 - 2 \left(f_S + \sum_{i=1}^N f_S^i \right) / (N + 1) \right] / \Delta s, \quad (6)$$

式中, Δs 是元胞步长, f_S^i 是邻居元胞的固相分数, N 为界面元胞的周围邻居元胞个数, 二维条件下 N 取 8.

3) 成分过冷

界面前沿的成分过冷与界面实际溶质成分以及平衡溶质成分有关

$$\Delta T_C = m_{L,B}(C_{L,B} - C_{L,B}^*) + m_{L,C}(C_{L,C} - C_{L,C}^*), \quad (7)$$

$$m_{L,B} = \frac{\partial T_L(C_{L,B}, C_{L,C})}{\partial C_{L,B}}, \quad (8)$$

$$m_{L,C} = \frac{\partial T_L(C_{L,B}, C_{L,C})}{\partial C_{L,C}},$$

$$\text{其中} \begin{cases} n_x = (-\partial f_S / \partial x [(\partial f_S / \partial x)^2 + (\partial f_S / \partial y)^2]^{-1/2}) = \cos \psi \\ n_y = (-\partial f_S / \partial y [(\partial f_S / \partial x)^2 + (\partial f_S / \partial y)^2]^{-1/2}) = \sin \psi \end{cases}, \quad (11)$$

由此得到 v_n 的表达式为

$$v_n C_{L,i}^* (1 - k_i) = -D_{L,i} \left(\frac{\partial C_{L,i}}{\partial x} n_x + \frac{\partial C_{L,i}}{\partial y} n_y \right). \quad (12)$$

5) 界面前沿溶质过饱和度

初生相枝晶生长过程中, 不考虑组元之间的互扩散, 并且溶质 Péclet 数小于 1, 故而对于组元 i 来说, 其界面前沿溶质过饱和度 Δ_i 满足方程^[23]

$$\Delta_i = \frac{C_{L,i}^* - C_{0,i}}{C_{L,i}^* (1 - k_i)} = Iv(Pe_i), \quad (13)$$

$$\text{其中 } Iv(Pe_i) = Pe_i \exp(Pe_i) \int_{Pe_i}^{\infty} \frac{\exp(-x)}{x} dx, \quad (14)$$

$$Pe_i = v_n R / (2D_{L,i}), \quad (15)$$

式中 $C_{0,i}$ 是组元 i 的初始液相溶质成分; $Iv(Pe_i)$ 是组元 i 的 Ivantsov 函数, Pe_i 是组元 i 对应的溶质 Péclet 数, R 是枝晶尖端半径; 由于 $Pe_i < 1$, 可得 $Iv(Pe_i) \approx -Pe_i \ln Pe_i - 0.5772 Pe_i$ ^[24].

其中, $m_{L,B}$ 和 $m_{L,C}$ 分别是组元 B 和 C 的液相线斜率; $C_{L,B}^*$ 和 $C_{L,C}^*$ 分别是组元 B 和组元 C 的界面平衡液相溶质成分. 三元合金凝固过程中溶质组元的液相线斜率与二元合金不同, 不再是定值, 而是沿液相面和固相面轨迹而变化, 是温度和溶质成分的函数, 模型中 $m_{L,B}$ 和 $m_{L,C}$ 通过 PanEngine 求解. 通过 (7) 式不能直接求出组元 B 和 C 的界面平衡溶质浓度, 需要联立其他方程求解.

4) 界面生长速率

三元合金枝晶生长过程中, 固液界面上存在溶质质量守恒, 得到界面元胞的法向生长速率 v_n 为

$$v_n C_{L,i}^* (1 - k_i) = -D_{L,i} \nabla C_{L,i} \cdot \mathbf{n}, \quad (9)$$

式中, $C_{L,i}^*$ 是组元 i 的界面平衡液相溶质浓度; $\mathbf{n}$ 为界面元胞的单位法向量, 其表达式为

$$\mathbf{n} = -\nabla f_S / \|\nabla f_S\| = n_x \mathbf{i} + n_y \mathbf{j}, \quad (10)$$

6) 界面固相分数增量

当求解得到 v_n 以后, 可得界面元胞的固相分数增量 Δf_S 为

$$\Delta f_S = (v_n \Delta t) / L, \quad (16)$$

$$\text{其中 } L = \Delta s / [\max(|\cos \psi|, |\sin \psi|)], \quad (17)$$

$$f_S^{n+1} = f_S^n + \Delta f_S, \quad (18)$$

式中, $\Delta s = \Delta x = \Delta y$, Δt 是时间步长, L 是界面元胞法向的空间步长, f_S^n 和 f_S^{n+1} 分别表示当前时刻和下一时刻界面元胞的固相分数. 当 $f_S = 1$ 时, 成为固相元胞, 开始俘获周围液相元胞, 使其转变成新的界面元胞.

7) 时间步长选择

为了保证溶质扩散方程求解的收敛, 时间步长 Δt 的计算方法如下

$$\Delta t = \min \left(\frac{\Delta s^2}{5D_{L,B}}, \frac{\Delta s^2}{5D_{L,C}} \right). \quad (19)$$

2.4 数值求解流程

1) 将计算域划分成 $M \times N$ 个 CA 元胞, 在计算域中随机选择一个或若干个元胞作为形核核心, 形核核心俘获周围的液相元胞, 使其转变为界面元胞;

2) 通过方程 (3) 求得元胞温度 T ;

3) 通过联立方程 (5) 和 (6) 计算得到 ΔT_R ;

4) 通过方程 (1) 计算 $C_{L,B}$ 和 $C_{L,C}$, 进而通过 PanEngine 得到 $T_L(C_{L,B}, C_{L,C})$ 以及 $m_{L,B}$ 和 $m_{L,C}$;

5) 通过方程 (4) 计算得到 ΔT_C , 联立方程 (7), (9) 和 (13) 求得 $C_{L,i}^*$, 代入方程 (12) 中求得 v_n ;

6) 通过方程 (16)–(18) 求得 Δf_S 以及 f_S^{n+1} , 若 $f_S^{n+1} = 1$, 则界面元胞成为固相元胞, 俘获周围液相元胞. 若 $f_S^{n+1} < 1$, 则重复步骤 2–6.

3 模拟结果与讨论

模型仅计算三元合金初生相形核及长大过程, 参数如表 1 所示.

表 1 Al-Si-Mg 合金热物性参数 [10,25]

参量	取值
热扩散系数 $\alpha_T / \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	2.6×10^{-5}
Si 的液相溶质扩散系数 $D_{L,\text{Si}} / \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	$0.11 \times 10^{-4} \exp(-2856/T)$
Si 的固相溶质扩散系数 $D_{S,\text{Si}} / \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	$2.02 \times 10^{-4} \exp(-16358/T)$
Mg 的液相溶质扩散系数 $D_{L,\text{Mg}} / \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	$0.99 \times 10^{-4} \exp(-8610/T)$
Mg 的固相溶质扩散系数 $D_{S,\text{Mg}} / \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	$0.37 \times 10^{-4} \exp(-14854/T)$
Gibbs-Thomson 系数 $\Gamma / \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	1.7×10^{-7}
各向异性系数 ϵ	0.04

3.1 Al-7%Si- x Mg 枝晶生长形态

本节研究 Al-7%Si- x Mg (质量分数) 三元合金中 Mg 组元溶质成分变化对枝晶生长形貌的影响. 选取计算域元胞数量为 400×400 , $\Delta s = 0.5 \mu\text{m}$, $T_0 = 878 \text{ K}$, $C_R = 5 \text{ K/s}$, 计算域中心形核并不断

长大. 分别选择 Al-7%Si-0.1%Mg, Al-7%Si-0.5%Mg 和 Al-7%Si-2.0%Mg 三种合金, 通过 PanEngine 计算得到它们的初始液相线温度分别为 889, 887 和 882 K (图 1).

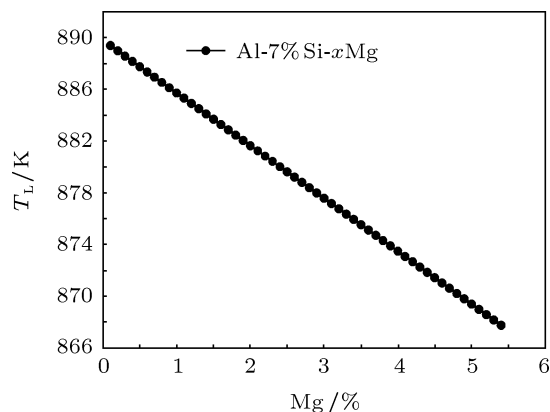


图 1 PanEngine 计算的 Al-7%Si- x Mg 合金液相线温度变化

图 2 为不同 Mg 含量的三元铝合金自由枝晶生长形貌, Al-7%Si- x Mg 合金保持立方晶系特征, 枝晶臂之间夹角为 90° . 如图 2(a1, a2) 所示, 当 Mg 含量较少时, 枝晶出现了较为发达的二次臂; 而 Mg 含量增加时, 如图 2(b1, b2) 所示, 枝晶二次臂相对不太发达; 当 Mg 含量继续增加, 如图 2(c1, c2) 所示, 枝晶二次臂受到抑制.

如图 3 所示, 随着 Mg 含量的增加, 一次枝晶臂尖端生长速率 (v_{tip}) 逐渐降低, 这是由于 Mg 含量的增加使得 Al-7%Si- x Mg 三元合金的液相线温度降低 (如图 1 所示), 导致凝固过程中 Al-7%Si-0.1%Mg 枝晶界面前沿的过冷度高于 Al-7%Si-0.5%Mg 和 Al-7%Si-2.0%Mg 枝晶, 从而 Al-7%Si-0.1%Mg 合金的 v_{tip} 相对较高. 从图 2(a1) 与 2(b1) 和 2(c1) 的比较中也可以看到, 较高的 v_{tip} 使得 Al-7%Si-0.1%Mg 合金的凝固时间大为缩短, 一次臂生长较为迅速, 界面上富集的溶质无法及时排出到周围液相中, 同时由于一次臂主干附近溶质富集程度的波动, 溶质成分梯度不均匀, 导致二次臂分枝的出现, 并且随着时间推移, 枝晶间的溶质富集加剧, 二次臂更加发达. 而 Al-7%Si-2.0%Mg 合金的 v_{tip} 很小, 凝固时间相对很长, 有利于液相溶质的充分扩散, 枝晶间溶质富集较少, 从而二次臂分枝受到抑制.

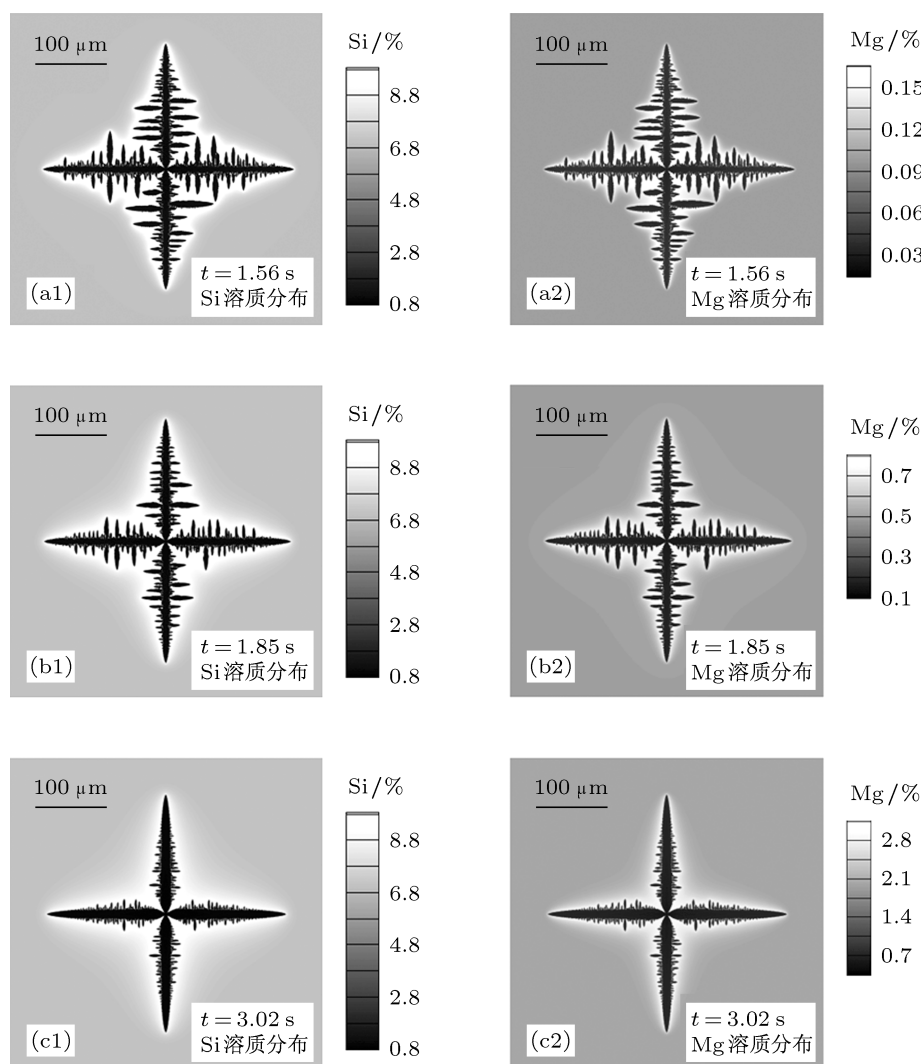


图2 不同Mg含量的Al-7%Si-xMg三元合金自由枝晶形貌和溶质分布 (a1, a2) Al-7%Si-0.1%Mg; (b1, b2) Al-7%Si-0.5%Mg; (c1, c2) Al-7%Si-2.0%Mg

3.2 不同抽拉速度对定向凝固柱状枝晶一次臂间距的影响

本节研究定向凝固过程中铝基三元合金柱状枝晶在不同抽拉速度 (V_p) 作用下一次臂间距的变化情况. 针对 Al-7%Si-0.5%Mg 合金, 选择计算域大小为 400×600 , $\Delta s = 1 \mu\text{m}$. 初始时刻计算域底部温度 T_0 为 886 K, 由于温度梯度 (G) 方向竖直向上, 故而 (x, y) 处的初始温度为 $T_0(x, y) = T_0 + Gy$. $G = 50 \text{ K/mm}$, 计算域以确定的 V_p 移动, 从而 $C_R = GV_p$, (x, y) 处在任意时刻 t 时的温度 $T(x, y) = T_0 + Gy - C_R t$. 初始时刻计算域底部铺满晶核, 在 V_p 作用下晶核沿着温度

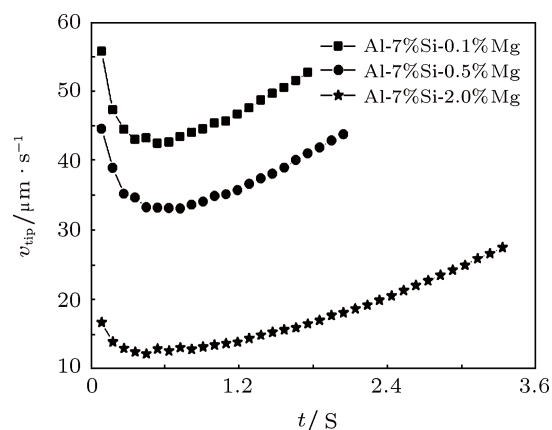


图3 Al-7%Si-xMg三元合金枝晶 v_{tip} 随时间变化的模拟结果

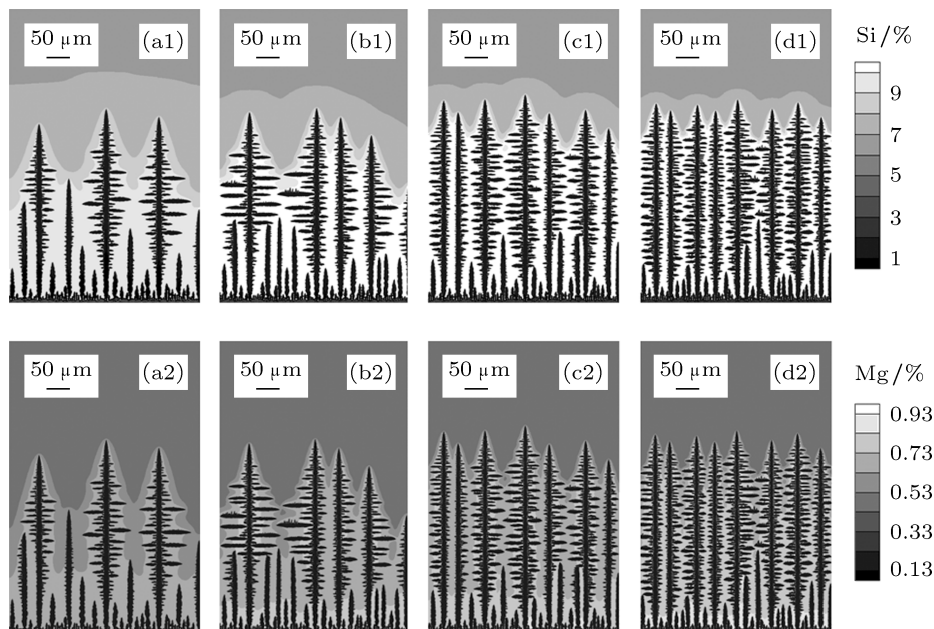


图4 Al-7%Si-0.5%Mg合金不同抽拉速度下定向凝固柱状枝晶竞争生长模拟结果 (a1, a2) $V_p = 0.2 \text{ mm/s}$, $t = 2136 \text{ s}$; (b1, b2) $V_p = 0.6 \text{ mm/s}$, $t = 691 \text{ s}$; (c1, c2) $V_p = 0.15 \text{ mm/s}$, $t = 2.83 \text{ s}$; (d1, d2) $V_p = 0.3 \text{ mm/s}$, $t = 134 \text{ s}$

梯度方向生长, 经过一段时间的竞争生长, 柱状枝晶达到稳态时 (此时生长速率 $V \approx V_p$) 的模拟结果如图4所示.

从图4可得, V_p 越大, 柱状晶一次臂间距 λ_1 越小. Hunt模型^[7,8]认为, 当 G 一定时, λ_1 与 V 近似满足 $\lambda_1 \propto V^{-1/4}$, V 的增大会导致 λ_1 减小. 图5所示为模拟得到的 λ_1 随 V_p 变化的模拟结果, 近似满足 $\lambda_1 \approx 225.4V_p^{-1/4}$, 从而MCA模型的模拟结果与Hunt模型基本一致.

固相无扩散和液相充分混合条件下, 多元合金中组元 i 的Scheil方程表达式^[26]为

$$C_{L,i} = C_{0,i}(1 - f_s)^{k_i - 1}, \quad (20)$$

式中, i 表示组元Si或Mg.

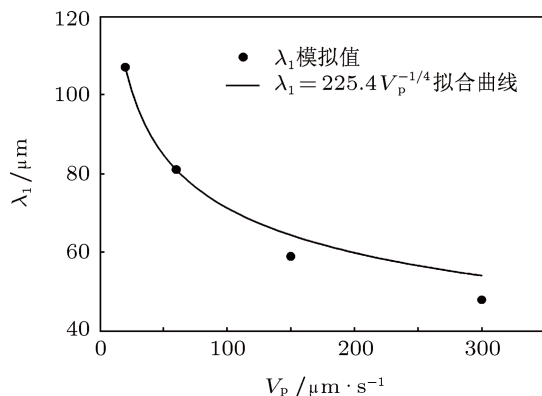


图5 平均一次臂间距随抽拉速度变化模拟结果

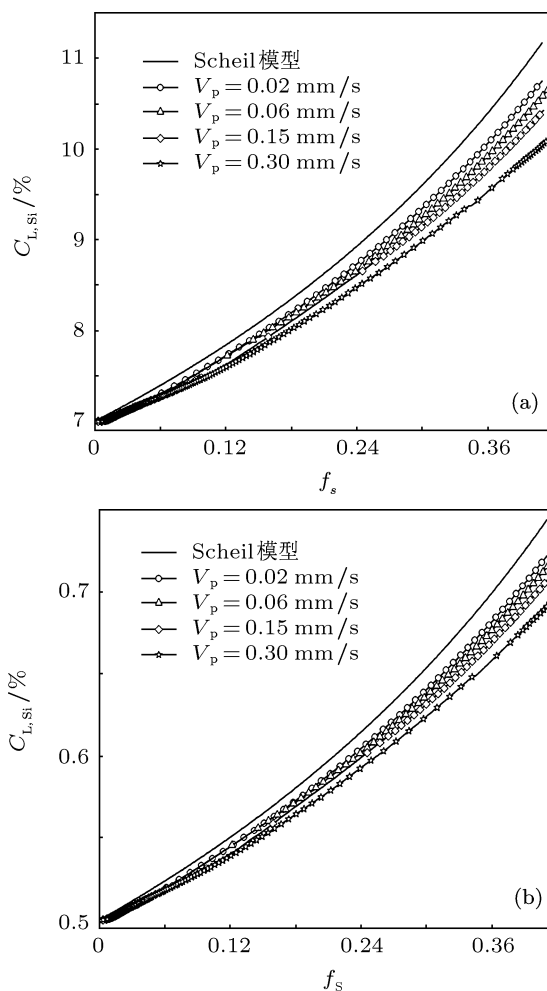


图6 不同 V_p 作用下 Al-7%Si-0.5%Mg 柱状枝晶界面前沿液相溶质成分随 f_s 变化的模拟结果与 Scheil 模型的对比

从图 6(a) 和 6(b) 中可以看到, $V_p = 0.30 \text{ mm/s}$ 条件下的 Si 和 Mg 液相溶质成分随 f_s 变化规律的模拟结果与 Scheil 模型差别最大, 这是由于此条件下凝固时间很短, 界面前沿富集的溶质无法充分向液相中混合; 随着 V_p 不断减小, 液相溶质扩散时间更加充足, 有利于液相溶质的均匀混合, 从而模拟结果与 Scheil 模型越来越接近. 从图 6 可知 $V_p = 0.02 \text{ mm/s}$ 的 Si 和 Mg 液相溶质成分随 f_s 变化规律更接近 Scheil 模型.

4 结 论

本文考虑三元合金各组元对成分过冷的影响, 以及各向异性界面能造成的曲率过冷, 结合液相溶质扩散方程和枝晶尖端生长动力学, 耦合 PanEngine, 建立了三元合金 MCA 模型以描述初生

枝晶相的形貌演化. 选择 Al-7%Si- x Mg 合金, 模拟等轴枝晶的自由生长, 结果表明, Mg 溶质含量的增加能够抑制一次枝晶臂尖端的生长以及二次枝晶臂的产生. 这是由于 Mg 的增加降低了合金的液相线温度, 导致生长速率降低, 一次枝晶臂生长受到抑制, 有利于界面前沿液相溶质扩散的充分进行, 溶质富集程度降低, 进而抑制 Al-7%Si- x Mg 合金二次枝晶臂的产生与发展. 同时使用本模型模拟了 Al-7%Si-0.5%Mg 合金定向凝固柱状枝晶的竞争生长过程, 结果表明, 随着抽拉速度的增加, 柱状晶一次臂间距减小, 模拟结果与 Hunt 模型结果较为一致; 并且随着抽拉速度降低, 柱状枝晶界面前沿液相溶质成分随固相分数的变化规律与 Scheil 模型越来越接近, 表明本模型能够再现定向凝固条件下铝基三元合金柱状枝晶的生长形貌演化.

-
- [1] Scheil E 1942 *Z. Metallkd* **34** 70
 - [2] Brody H D, Flemings M C 1966 *AIME Met. Soc. Trans.* **236** 615
 - [3] Clyne T W, Kurz W 1981 *Metall. Mater. Trans. A* **12** 965
 - [4] Chen F Y, Jie W Q 2004 *Acta Metall. Sin.* **40** 664 (in Chinese) [陈福义, 介万奇 2004 金属学报 **40** 664]
 - [5] Lipton J, Glicksman M, Kurz W 1984 *Mater. Sci. Eng.* **65** 57
 - [6] Kurz W, Giovanola B, Trivedi R 1986 *Acta Metall.* **34** 823
 - [7] Kurz W, Fisher D J 1981 *Acta Metall.* **29** 11
 - [8] Hunt J D, Lu S Z 1996 *Metall. Mater. Trans. A* **27** 611
 - [9] Wheeler A A, Murray B T, Schaefer R J 1993 *Physica D* **66** 243
 - [10] Kobayashi H, Ode M, Kim S G, Kim W T, Suzuki T 2003 *Scripta Mater.* **48** 689
 - [11] Suzuki T, Ode M, Kim S G, Kim W T 2002 *J. Cryst. Growth* **237–239** 125
 - [12] Zhang R J, Jing T, Jie W Q, Liu B C 2006 *Acta Mater.* **54** 2235
 - [13] Rappaz M, Gandin C A 1993 *Acta Metall.* **41** 345
 - [14] Gandin C A, Rappaz M 1994 *Acta Metall.* **42** 2233
 - [15] Nastac L 1999 *Acta Mater.* **47** 4253
 - [16] Beltran S L, Stefanescu D M 2004 *Metall. Mater. Trans. A* **35** 2471
 - [17] Wang W, Lee P D, McLean M 2003 *Acta Mater.* **51** 2971
 - [18] Liu Y, Xu Q Y, Liu B C 2006 *Tsinghua Sci. Tech.* **11** 495
 - [19] Pan S Y, Zhu M F 2010 *Acta Mater.* **58** 340
 - [20] Zhu M F, Cao W, Chen S L, Hong C P, Chang Y A 2007 *J. Phase Equilib. Diffus.* **28** 130
 - [21] Dai T, Zhu M F, Chen S L, Cao W S, Hong C P 2008 *Acta Metall. Sin.* **44** 1175 (in Chinese) [戴挺, 朱鸣芳, 陈双林, 曹伟生, 洪俊杓 2008 金属学报 **44** 1175]
 - [22] Michelic S C, Thuswaldner J M, Bernhard C 2010 *Acta Mater.* **58** 2738
 - [23] Rappaz M, Boettinger W J 1999 *Acta Mater.* **47** 3205
 - [24] Trivedi R, Kurz W 1994 *Int. Mater. Rev.* **39** 49
 - [25] Du Q, Jacot A 2005 *Acta Mater.* **53** 3479
 - [26] Jie W Q, Fu H Z, Zhou Y H 2010 *Mater. China* **29** 1 (in Chinese) [介万奇, 傅恒志, 周尧和 2010 中国材料进展 **29** 1]

Simulation of dendritic growth for ternary alloys based on modified cellular automaton model*

Shi Yu-Feng Xu Qing-Yan[†] Liu Bai-Cheng

(Key Laboratory for Advanced Materials Processing Technology, Ministry of Education, Department of Mechanical Engineering,
Tsinghua University, Beijing 100084, China)

(Received 9 August 2011; revised manuscript received 22 September 2011)

Abstract

Based on the binary cellular automaton method, a modified cellular automaton model for ternary alloys is developed to simulate dendrite growth controlled by solutal effects and microsegregation in the low Peclet number regime by coupling PanEngine, which is a multicomponent thermodynamic and equilibrium calculation engine. The model can be used to calculate the interfacial equilibrium composition by considering the influence of Gibbs-Thomson effect induced curvature undercooling, and multicomponents contributed constitutional undercooling. Meanwhile, the growth velocity of interface is determined by solving the solute conservation equation simultaneously with dimensionless solute supersaturation equation for each alloying element. Moreover, equilibrium liquidus temperature and equilibrium solid concentration at the interface are derived by PanEngine. Free dendrite growth of Al-7%Si- x Mg ternary alloys is simulated by the present model, which shows that the increase of solute Mg can suppress the growths of both primary and secondary dendrite arms. Meanwhile, constrained columnar dendrite growth of Al-7%Si-0.5%Mg with the increases of pulling velocity and constant thermal gradient during directional solidification is calculated. The results reveal the competitive growth of columnar dendrites, and demonstrate that the primary dendrite arm spacing would decrease as the pulling velocity increases, which accords well with the Hunt model.

Keywords: modified cellular automation, ternary alloys, dendrite growth

PACS: 81.10.Aj, 61.50.Ah

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant Nos. 2005CB724105, 2011CB706801), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10477010, 51171089), the National High Technology Research and Development Program of China (Grant No. 2007AA04Z141), and the Important National Science and Technology Specific Projects of China (Grant Nos. 2009ZX04006-041-04, 2011ZX04014-052).

[†] E-mail: scjxqy@mail.tsinghua.edu.cn