

# 基于 MeshTV 界面重构算法的二元合金自由枝晶生长元胞自动机模型\*

魏雷 林鑫<sup>†</sup> 王猛 黄卫东

(西北工业大学凝固技术国家重点实验室, 西安 710072)

(2011 年 6 月 1 日收到; 2011 年 9 月 7 日收到修改稿)

本文基于 MeshTV 界面重构算法, 发展了二元合金凝固自由枝晶生长的元胞自动机 (cellular automaton, CA) 模型. 通过采用 MeshTV 界面重构算法, 在细化的界面元胞内重构出了固液界面的位置. 在此基础上, 发展了一种同时适合描述纯物质与合金凝固界面生长的动力学模型. 与非界面重构的 CA 模型相比, 本文所发展的模型可以在较大的网格尺寸下实现模型的收敛, 同时网格各向异性不明显, 且能够反映界面能各向异性参数  $\varepsilon$  对自由枝晶生长的影响. 在  $\varepsilon = 0.02$  时, 通过与描述自由枝晶生长的 LGK 理论模型相比较, 发现计算的枝晶尖端速度与 LGK 理论模型的预测符合较好, 而计算的枝晶尖端半径比 LGK 理论预测值大于约 20%.

**关键词:** 元胞自动机, 枝晶生长, 各向异性

**PACS:** 81.30.-t, 68.70.+w

## 1 引言

枝晶生长是凝固科学研究的一个重要内容. 目前, 采用理论分析模型和实验研究已可对稳态枝晶生长进行定量的描述<sup>[1-7]</sup>. 但面对完整从形核到枝晶生长的复杂演化过程, 理论分析面临很多的困难, 因此利用计算机模拟枝晶生长过程成为了理解枝晶演化行为的一个重要途径. 目前, 在枝晶生长的计算机模拟方面, 应用最广的主要是相场模型 (phase field, PF)<sup>[8,9]</sup> 及元胞自动机模型 (cellular automaton, CA)<sup>[10-28]</sup>.

CA 模型是最近十几年发展起来的凝固组织模拟方法. 与相场模型比较, CA 模型的优势在于计算效率高以及计算区域较大, 不足之处在于模型定量模拟的能力较弱. 其中的一个特征是: 使用相场法可以定量模拟界面能各向异性参数在枝晶生长中的作用, 而在 CA 模型中, 几乎没有见到相关的文献. 其主要原因是 CA 模型具有较强的网格各向异性. 这也使得, 在 CA 模型的不断 development 过程中, 网格各向异性的问题一直被研究者所关注.

上世纪 90 年代, Nastac<sup>[10]</sup> 采用 CA 模型模拟

了枝晶生长以及柱状晶/等轴晶转变 (columnar-to-equiaxed transition, CET), 但是, 他所模拟的枝晶只能沿坐标轴方向生长, 也就是说, 他的 CA 模型具有很强的网格各向异性. Belteran-Sanchez 和 Stefanescu (BSS)<sup>[11,12]</sup> 认为 Nastac 模型网格各向异性的问题主要源自其所采用 CA 模型的俘获规则以及界面曲率的算法. 因此, 他们进一步采用虚拟跟踪方法对界面俘获规则进行了改进, 并优化了界面曲率算法. 可以说, BSS 模型提供了解决 CA 模型网格各向异性的思路和方法, 并在一定程度改善了 CA 模型所存在的网格各向异性问题. 但是, BSS 模型所采用的生长动力学模型仅适用于描述稳态的合金枝晶生长, 且曲率计算中加入了经验性质的判定法则. 近年来, Zhu 和 Stefanescu(ZS)<sup>[13]</sup> 在 BSS 模型的基础上, 采用了新的生长动力学模型, 使其适用于同时描述非稳态和稳态合金枝晶生长. 但是, 其方法无法用于描述纯物质枝晶生长. 在网格各向异性上, ZS 的模型与 BSS 模型相当, 两者使用相同的界面俘获规则以及界面曲率算法. 总体来说, 目前的 CA 模型在网格各向异性上的处理上已经有所改进, 但目前的模型并未考察在 CA 模型中界面

\* 国家自然科学基金 (批准号: 50771083 和 50901061), 国家重点基础研究发展计划 (973)(批准号: 2011CB610402), 高等学校学科创新引智计划 (批准号: 08040) 和西北工业大学凝固技术国家重点实验室基金 (批准号: 02-TZ-2008) 资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: xlin@nwpu.edu.cn

能各向异性对枝晶生长的影响, 而这对验证其网格各向异性的影响及全面准确地把握枝晶生长行为是非常重要的. 最近, 本文作者基于常规正交网格在界面俘获行为所存在的典型各向异性问题, 开发了可以显著减小网格各向异性的 zigzag 俘获规则, 并基于这条俘获规则, 采用 CA 模型分析了纯物质过冷熔体枝晶生长过程中界面能各向异性参数对枝晶生长行为的影响 [25,26].

近年来, 随着界面重构技术 (material interface reconstruction, MIR) 的发展, 通过基于元胞本身及其周围元胞相分数的关系计算, 界面重构技术已经能够在单个界面元胞内, 准确描述元胞内界面的位置和形态 [29-31]. 既然 CA 模型是以界面俘获为基础的明锐界面模型, 因此, 界面重构技术有望进一步提高 CA 模型的计算精度, 并进一步减小 CA 模型所存在的网格各向异性. 基于此, 本文拟以界面重构技术为基础, 应用自主开发的 zigzag 俘获规则, 建立不受网格各向异性制约的二元合金自由枝晶生长 CA 模型.

## 2 数学物理模型

### 2.1 温度场和浓度场

考虑二维枝晶生长, 温度场的控制方程为

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + \frac{L}{\rho C_p} \frac{\partial f_s}{\partial t}, \quad (1)$$

其中,  $T$  是温度,  $t$  是时间,  $\alpha$  是导温系数,  $L$  是凝固潜热,  $C_p$  是热容,  $\rho$  是密度,  $f_s$  为固相分数.

对于合金凝固, 浓度场的控制方程为

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i \left( \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_i}{\partial y^2} \right), \quad (2)$$

其中,  $C$  是浓度, 下标  $i$  代表固相或者液相,  $D_i$  表示溶质扩散系数.

由于浓度场在固液界面是不连续的, 不同的 CA 模型对固液界面有着不同的处理方法, 本文采取文献 [13] 的方法.

### 2.2 边界条件及固液界面的处理

对于温度场, 采用第一类边界条件

$$T_\Gamma = T_0, \quad (3)$$

其中,  $T_\Gamma$  为边界的温度值,  $T_0$  为过冷熔体的初始温度.

浓度场的边界条件采用零通量条件. 除此之外, 在固液界面上温度场和浓度场还同时应满足

$$T^* = T_L^{eq} + (C_L^* - C_0)m_L - \Gamma K f(\varphi, \theta_0), \quad (4)$$

$$C_S^* = k_0 C_L^*, \quad (5)$$

其中,  $T^*$  为界面温度,  $T_L^{eq}$  为纯物质熔点,  $C_L^*$  和  $C_S^*$  分别为界面处的液相和固相浓度,  $C_0$  为合金液相浓度,  $m_L$  为液相线斜率,  $\Gamma$  是 Gibbs-Thomson 系数,  $K$  为界面曲率,  $f(\varphi, \theta_0) = 1 - 15\varepsilon \cos(4 \times (\varphi - \theta_0))$ ,  $\varepsilon$  为界面能各向异性参数,  $\varphi$  为界面法向,  $\theta_0$  为枝晶优先生长方向,  $k_0$  为溶质分配系数.

对于合金凝固, 朱鸣芳 [13] 基于合金凝固过程中溶质扩散比热扩散慢很多, 以溶质扩散作为影响枝晶生长的主要决定因素, 进而采用计算后的界面元胞液相溶质浓度  $C_L^*$  与该元胞的液相实际溶质浓度  $C_L$  之间的差值作为计算  $\Delta f_s$  的依据. 但该方法对纯物质凝固模拟不适用. 本文对  $\Delta f_s$  的求解采用离散化迭代的方法. 即首先赋予  $\Delta f_s$  一个微小量, 在这个微小的  $\Delta f_s$  基础上, 根据下式去修正  $T^*$  以及  $C_L^*$ :

$$T^{n+1} = T^n + \frac{L}{c_p} \Delta f_s, \quad (6)$$

$$C_L^{n+1} = C_L^n \times (1 + (1 - k_0) \times \Delta f_s / (1 - f_s)), \quad (7)$$

其中,  $T^n, T^{n+1}$  分别为该元胞在  $t = t_n$  和  $t = t_{n+1}$  时刻的温度值,  $C_L^n$  和  $C_L^{n+1}$  分别为两个时刻的浓度值.

根据修正的  $T^{n+1}$  以及  $C_L^{n+1}$  去验证是否满足界面界面局域平衡条件, 即 (4) 式. 如果不满足, 继续增加一个微小的  $\Delta f_s$ , 并修正  $T^{n+1}$  以及  $C_L^{n+1}$ , 直到满足 (4) 式. 该方法仅依赖于界面平衡条件, 其不仅仅可以描述二元合金凝固的界面平衡, 而且同样适用于纯物质. 如在纯物质情况下, 仅通过 (6) 式, 即可进行界面局域平衡条件的修正计算 [25,26].

## 3 CA 模型

### 3.1 CA 的邻居

zigzag 邻居规则的定义如图 1(a) 所示. 每一个元胞除了具有固相、界面和液相的不同状态之外, 界面元胞还有两种状态的区分: 如图所示的黑色元胞和白色元胞. 这两种界面元胞在计算固液界面生长时没有任何分别, 仅在生长结束后确定如何俘获周围液相元胞的方式上有区别. 黑色元胞只能俘获周围最近邻的四个元胞作为白色界面元胞, 而白色

元胞只能俘获周围四个角上的元胞为黑色界面元胞. 在 zigzag 邻居规则下, 假如界面沿水平方向生长时, 元胞可以按多种方式捕捉生长, 图 1(b) 仅展示其中一种可能. 同理, 在其他生长方向, 同样存在多种俘获方式. 因而 zigzag 邻居规则能够保证元胞在每个方向上的生长行为都相似, 消除了由网格带来的各向异性.

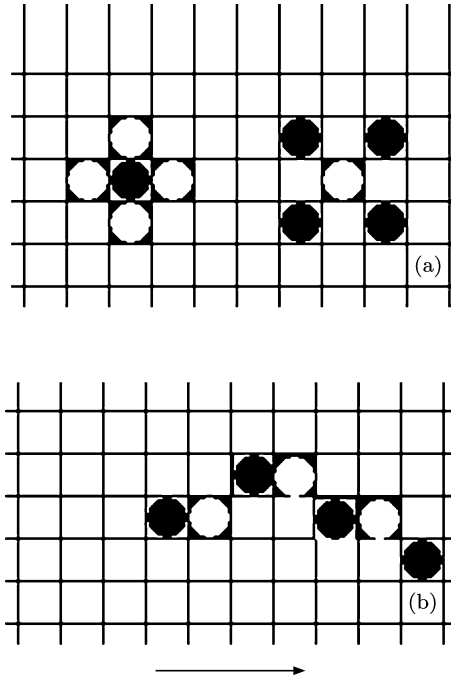


图 1 zigzag 邻居规则以及该规则下的生长方式 (a) zigzag 邻居规则; (b) zigzag 邻居规则下的水平生长方式

### 3.2 曲率计算

基于界面重构后的界面形态, 在界面元胞内部, 如图 2 所示, 以经细化的元胞中心为原点, 3.5 倍网格尺寸为半径, 作出图中虚线所表示的圆, 该圆所覆盖元胞的体积分数即为元胞的权重  $M_{i,j}^w$ . 本文在界面重构时对界面元胞按照  $10 \times 10$  的矩阵细化, 因此在计算曲率时网格尺寸应为界面元胞尺寸的  $1/10$ . 根据周围三层元胞的权重  $M_{i,j}^w$  以及各自的固相分数  $f_{i,j}$  计算曲率值, 具体计算方法如下:

$$S = \sum_{i,j=-3}^3 M_{i,j}^w = 38.484, \quad (8)$$

$$|\mathbf{F}_s| = \sum_{i,j=-3}^3 f_{i,j} M_{i,j}^w, \quad (9)$$

$$A = \sum_{i=-3}^{-1} \sum_{j=-3}^3 M_{i,j}^w = 15.754, \quad (10)$$

$$B = \sum_{j=-3}^3 M_{0,j}^w = 6.976, \quad (11)$$

$$\kappa = \frac{A + Bf_{sc} - |\mathbf{F}_s|}{S} \frac{2}{dx}, \quad (12)$$

其中,  $S$  为图 2 中元胞权重的求和, 相当于半径为 3.5 的圆面积;  $|\mathbf{F}_s|$  为元胞权重与固相分数乘积的求和, 相当于固相所占圆的面积. 在对曲率计算时, 当  $|\mathbf{F}_s|$  小于  $A + Bf_{sc}$  时, 界面是外凸的, 曲率值为正; 当界面为平界面时, (12) 式恒等于零; 当  $|\mathbf{F}_s|$  大于  $A + Bf_{sc}$  时, 界面是内凹的, 曲率值为负. 上述算法在原理上类似于数元胞算法<sup>[10]</sup>, 只是该算法的计算更为精确.

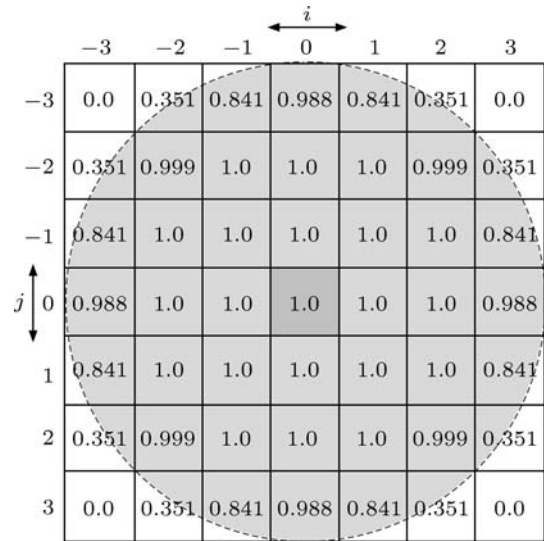


图 2 曲率计算方法的示意图 (以周围三层元胞的固相分数为计算依据)

### 4 MeshTV 界面重构算法

MeshTV 界面重构算法的思路是, 基于界面元胞及其周围元胞的固相和液相分数, 分别对该界面元胞内部进行两次双线性插值. 对于界面元胞内任意一块区域, 如果固相分数的插值大于液相分数的插值, 那么认为此区域为固相, 如果相反则认为是液相, 因此, 通过适当细分元胞内的区域, 即可以在元胞内构建出较为准确的固液界面位置和形状. 由于双线性插值的结果具有二阶精度, 因此 MeshTV 算法所得的界面形态具有二次曲线的形式, 有利于 CA 模型对各种复杂的固液界面形态重构出较为精确的固液界面. 因此, 本文选择使用 MeshTV 界面重构算法, 而没有选择其他的诸如分段线性插值的界面重构算法<sup>[30,31]</sup>.

被插值界面元胞可以按图 3 所示, 分成  $2 \times 2$  的矩阵. 根据节点位置不同, 分别定义为: node 节点, edge 节点和 cell 节点. 其中, node 节点的数值可以由周围四个元胞数值的平均值求得, edge 节点的数值由相邻两个元胞数值求平均值, cell 节点数值为被插值元胞的数值. 然后在节点数值的基础上, 对界面元胞内部的区域进行双线性插值, 进而通过 MeshTV 算法得到界面元胞内经重构的固液界面 [29].

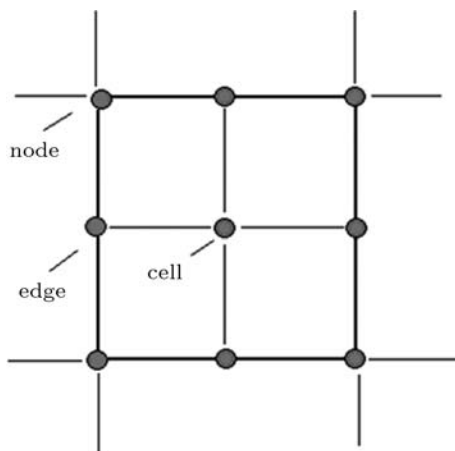


图 3 界面重构的元胞分成  $2 \times 2$  的区域 (根据节点位置不同分为: node, edge 和 cell)

### 5 模型检验

模型计算采用丁二腈 -0.1 mol%丙酮 (SCN-0.1 mol%acetone) 合金, 物性参数如文献 [5] 所示. 在计算中, 网格尺寸选择在  $2.0\text{--}4.0\ \mu\text{m}$ . 计算区域的中心设一固相元胞作为籽晶. 初始液相的过冷度为 1.0 或 2.0 K, 由于枝晶尖端生长速度在 mm/s 的量级, 计算中忽略动力学效应.

#### 5.1 模型的检验 —— 网格尺寸以及网格各向异性的影响

网格各向异性一直是 CA 模型难以避免的因素. CA 模型的网格各向异性不仅来源于界面元胞的俘获规则 [25,26], 也会来自于界面元胞的溶质分配方式 [24]. 因此, 首先有必要定量检验模型的网格相关性 (网格尺寸, 网格各向异性). 对模型的网格相关性的检验主要有两部分: 一是检验在没有界面能各向异性情况下界面形态是否接近圆; 二是在不同网格尺寸的情况下, 模拟的枝晶形态是否有显著差距.

图 4 所示为不同界面能各向异性参数情况下丁二腈 -0.1 mol%丙酮 (SCN-0.1 mol%acetone) 合金

在  $\Delta T = 1\ \text{K}$  的过冷熔体中的生长形态. 图 4(a) 中界面能各向异性参数  $\varepsilon = 0.01$ ,  $\theta_0$  与坐标轴方向相同; 图 4(b) 中界面能各向异性参数  $\varepsilon$  同样是 0.01, 但是  $\theta_0$  与坐标轴呈  $45^\circ$ ; 图 4(c) 中采用界面能无各向异性条件. 可以看出, 在界面能各向异性参数  $\varepsilon = 0.01$  时, 枝晶在沿  $\theta_0$  四次旋转对称的方向上优先生长; 而当界面能无各向异性时, 晶体几乎没有明显的优先生长方向, 模拟形态接近圆. 因此可以说明, 本文所发展的 CA 模型, 由网格引起的各向异性不明显.

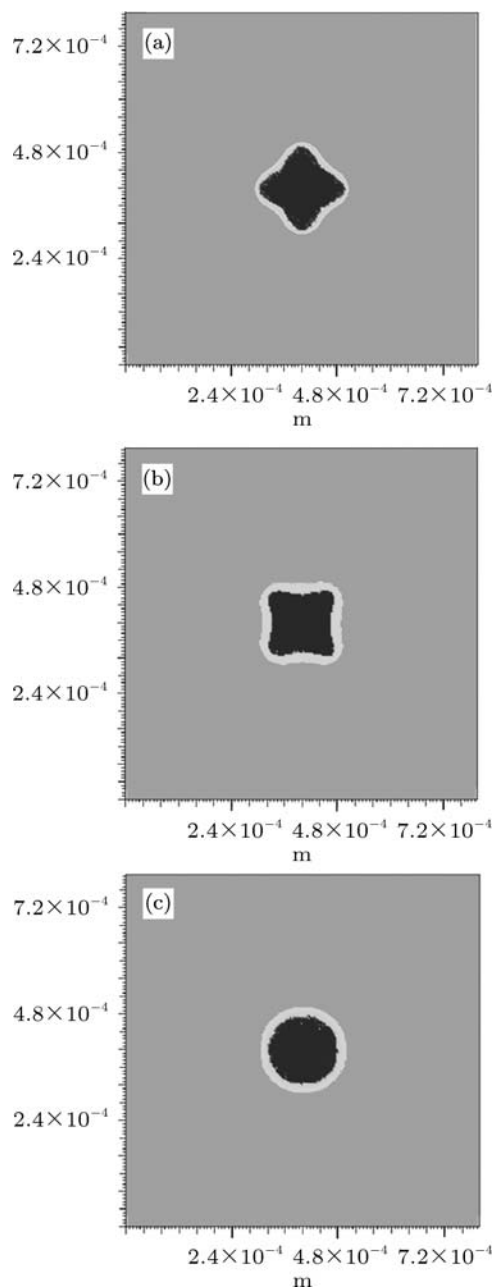


图 4 网格相关性的检验 (a) 界面能各向异性大小 0.01, 方向  $45^\circ$ ; (b) 界面能各向异性大小 0.01, 方向  $0^\circ$ ; (c) 界面能无各向异性

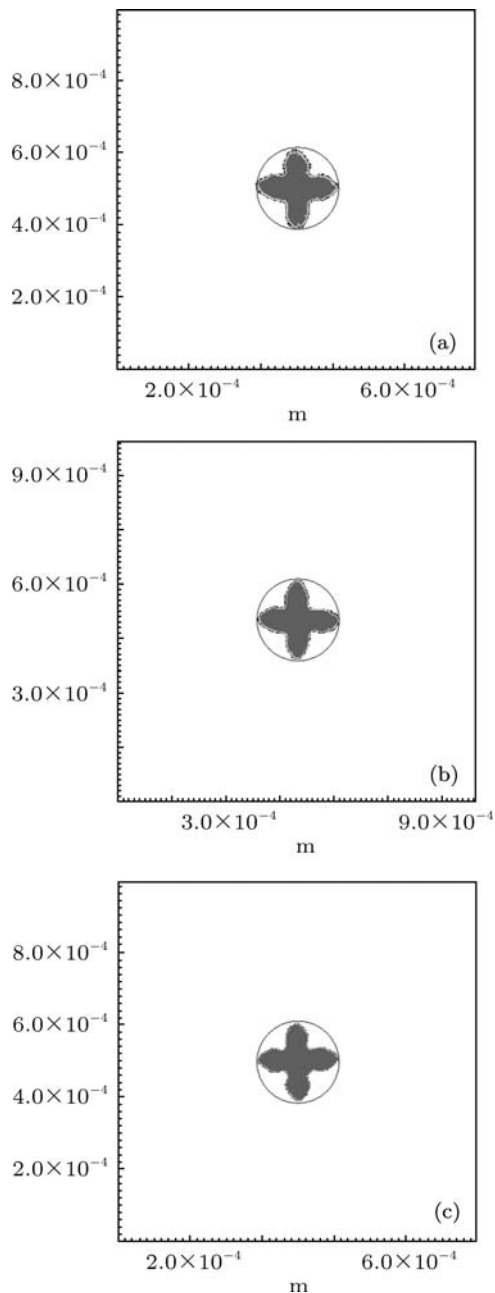


图5 SCN-0.1 mol% acetone 合金在不同网格尺寸下的自由枝晶生长形态 ( $\Delta T = 2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0.02$ ,  $\theta_0 = 0^\circ$ ,  $t = 0.05 \text{ s}$ ) (a)  $\Delta s = 4.0 \mu\text{m}$ ; (b)  $\Delta s = 3.0 \mu\text{m}$ ; (c)  $\Delta s = 2.0 \mu\text{m}$

图5所示是在不同网格尺度下 SCN-0.1 mol% acetone 合金, 过冷熔体自由枝晶生长形态. 实际计算区域  $1 \text{ mm} \times 1 \text{ mm}$ , 图5(a), (b) 和 (c) 的网格尺寸分别为  $4.0 \mu\text{m}$ ,  $3.0 \mu\text{m}$  和  $2.0 \mu\text{m}$ . 图中, 三个枝晶外面的圆圈为相同半径的圆, 便于比较三个枝晶的大小. 从图5看出, 在不同网格尺寸的情况下, CA 模型计算出的枝晶形态区别不大. 图5(a) 的枝晶外廓尺寸稍微小于图5(b) 和图5(c). 图5(b) 和图5(c) 的两个枝晶形态差距不大.

图6所示为 SCN-0.1 mol% acetone 合金稳态枝晶尖端生长速度随网格尺度的变化曲线. 可以看出, 当网格尺度小于  $4 \mu\text{m}$  时, 模型所计算的稳态枝晶尖端生长速度的计算值基本变化不大, 达到了收敛的条件.

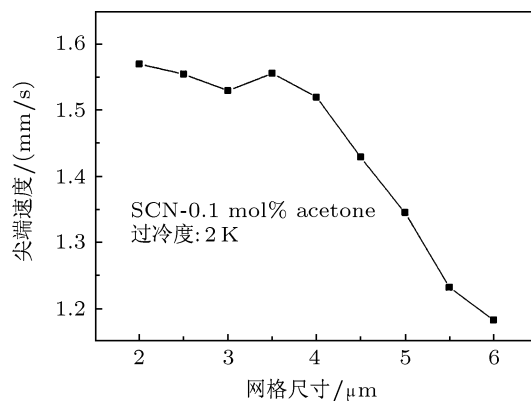


图6 SCN-0.1 mol% acetone 合金稳态枝晶尖端速度随网格尺寸的变化曲线 ( $\Delta T = 2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0.02$ ,  $\theta_0 = 0^\circ$ )

## 5.2 界面能各向异性参数对枝晶生长的影响

在枝晶的生长中, 界面能各向异性参数是一个非常物理量. 图7所示的是 SCN-0.1 mol% acetone 合金在不同界面能各向异性参数  $\varepsilon$  下的模拟形态. 从图7(a) 到 (e) 的界面能各向异性参数  $\varepsilon$  分别为: 0.0, 0.01, 0.02, 0.03 和 0.04. 可以看出, 随着界面能各向异性参数逐渐增大, CA 模型的模拟形态也逐渐更具各向异性.

## 5.3 在 $C_0$ 变化时, CA 模型与 LGK 理论模型比较

LGK 理论模型适用于 Peclet 数小于 1 的合金凝固, 并可以得到枝晶尖端生长速度和尖端半径的数值解. 过冷度  $\Delta T$  在接近 3 K 时, LGK 理论预测 SCN-acetone 合金的 Peclet 数仍远小于 1<sup>[5]</sup>. 在本文的 CA 模拟中, 所采用的过冷度一般不超过 3 K, 因此可以采用 LGK 理论进一步检验本文所发展的 CA 模型. 具体的比较思路如下:

1) 固定过冷度  $\Delta T$ , 比较不同的合金浓度  $C_0$  下两种模型的枝晶尖端生长速度.

2) 固定合金浓度  $C_0$ , 比较不同的过冷度  $\Delta T$  下两种模型的尖端生长速度及尖端半径.

在上述对比中, 界面能各向异性参数取值为 Ramirez 和 Beckermann<sup>[9]</sup> 在合金相场模型中使用的  $\varepsilon = 0.02$ .

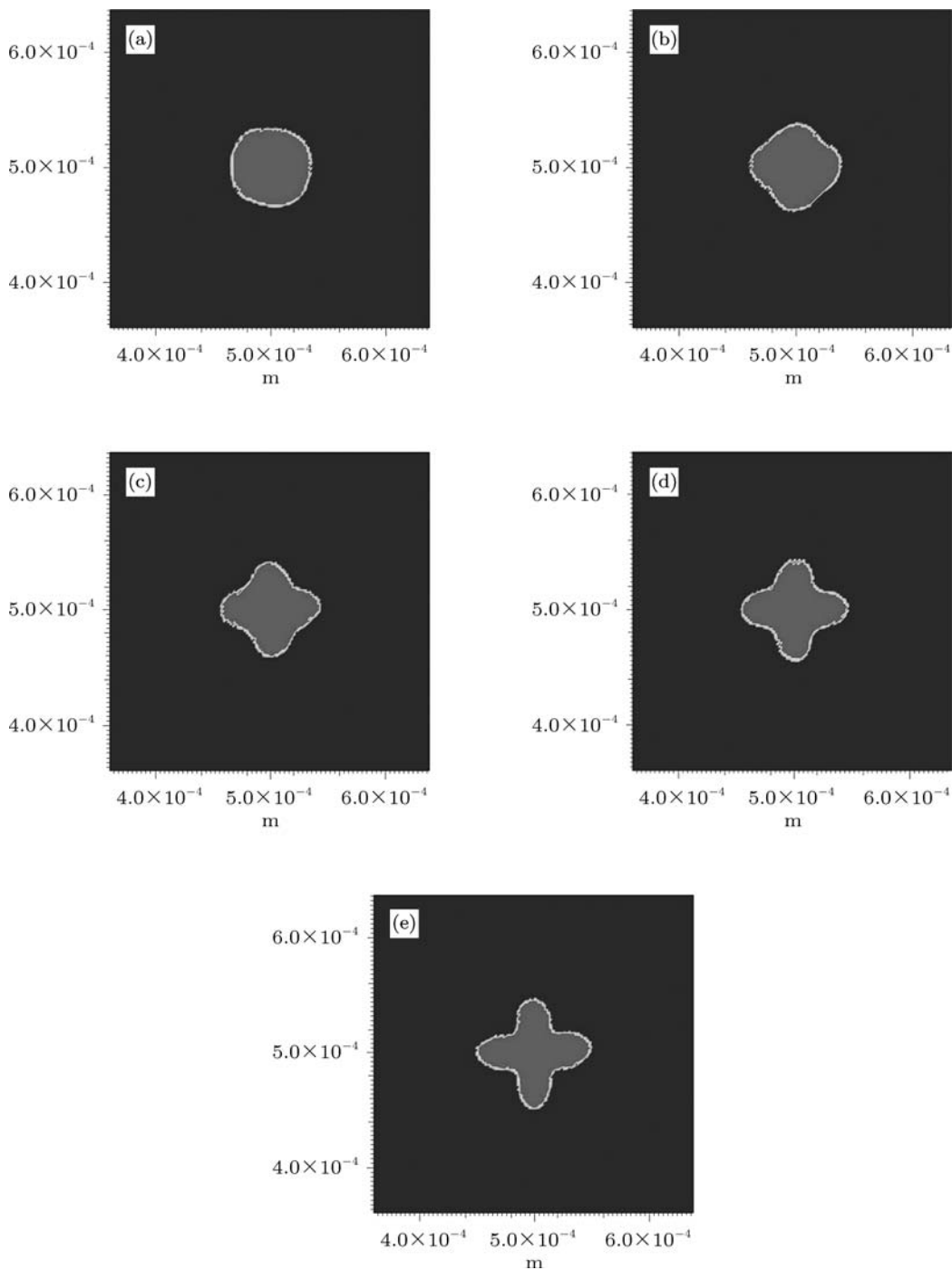


图 7 不同界面能各向异性参数下 SCN-0.1 mol% acetone 过冷熔体自由生长形态 ( $\Delta T = 2 \text{ K}$ ,  $\Delta s = 2.0 \text{ }\mu\text{m}$ ,  $t = 0.01 \text{ s}$ ) (a)  $\varepsilon = 0.0$ ; (b)  $\varepsilon = 0.01$ ; (c)  $\varepsilon = 0.02$ ; (d)  $\varepsilon = 0.03$ ; (e)  $\varepsilon = 0.04$

图 8 所示的是 SCN-0.3 mol% acetone 合金的过冷熔体自由枝晶生长时的温度场和浓度场. 可以看出, 温度场的扩散边界层远大于浓度场的扩散边界层.

图 9 所示的是图 8(a) 中  $y = 1.0 \times 10^{-3} \text{ m}$ ,  $x \in (0, 2.0 \times 10^{-3}) \text{ m}$  时的浓度分布曲线. 在  $x =$

$1.0 \times 10^{-3} \text{ m}$  处, 表示的是形核位置. 从图中可以看出, 随着枝晶的长大, 固相溶质分布先增大然后趋于平稳. 原因是凝固初期, 界面生长速度快, 导致界面溶质富集, 固相浓度显著增加, 随着枝晶尖端生长速度减小至稳态生长时, 固相溶质的分布也趋于平稳.

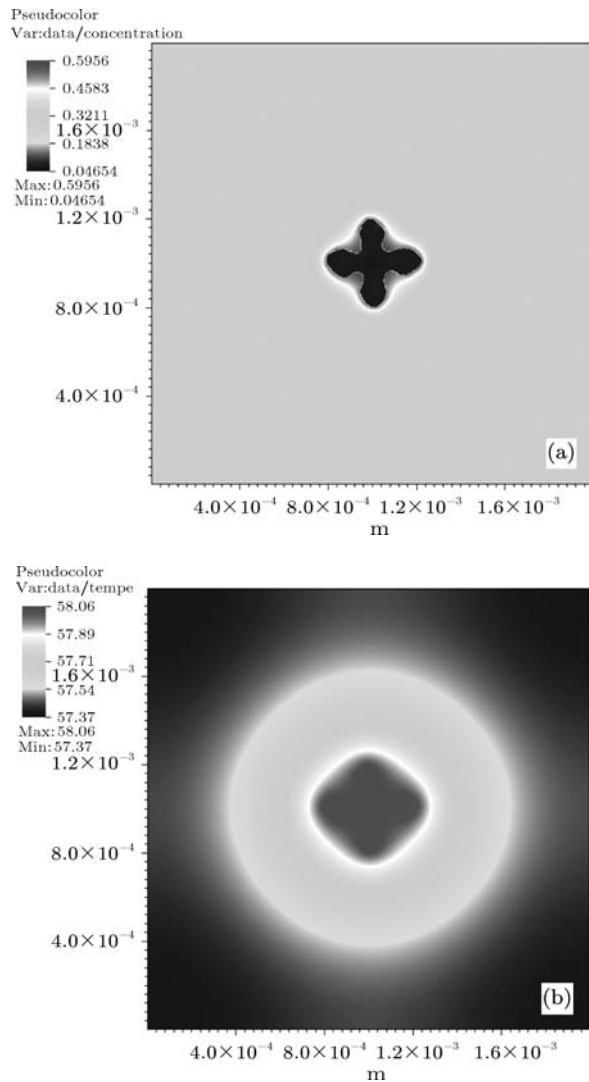


图 8 SCN-0.3 mol% acetone 合金过冷熔体自由生长浓度场和温度场分布 ( $\Delta T = 1 \text{ K}$ ,  $\Delta s = 4.0 \mu\text{m}$ ,  $t = 0.475 \text{ s}$ ) (a) 浓度场分布; (b) 温度场分布

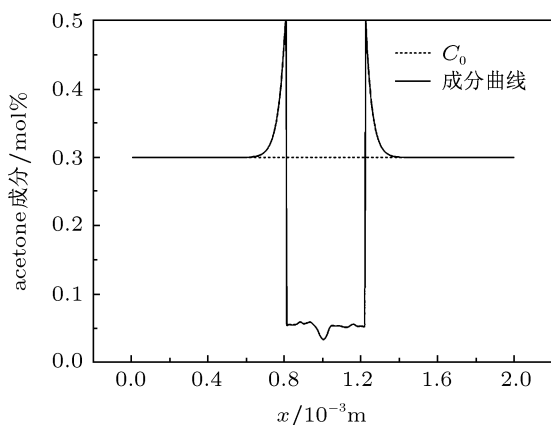


图 9 浓度分布曲线 (图 8(a) 中取  $y = 1.0 \times 10^{-3}$ ,  $x \in (0, 2.0 \times 10^{-3})$ )

图 10 所示的是 SCN-0.1 mol% acetone 合金当熔体过冷度  $\Delta T = 1 \text{ K}$  时枝晶尖端生长速度随时间变

化的曲线. 其中虚线为 LGK 理论模型预测的稳态速度值  $0.28 \text{ mm/s}$ , CA 模型在  $0.4 \text{ s}$  的尖端生长速度收敛于  $0.234 \text{ mm/s}$ .

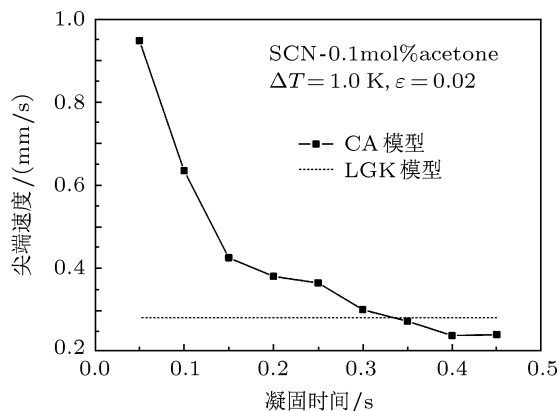


图 10 SCN-0.1 mol% acetone 合金枝晶尖端速度随时间的变化曲线 ( $\Delta T = 1 \text{ K}$ ,  $\Delta s = 4.0 \mu\text{m}$ )

图 11 所示的是丁二腈 - 丙酮合金在不同时刻下, 枝晶尖端生长速度随  $C_0$  的变化曲线. 可以看出, 在  $t = 0.175 \text{ s}$  时, 枝晶尖端生长速度随  $C_0$  的增加, 单调增加; 在  $t = 0.275 \text{ s}$  时, 枝晶尖端生长速度基本接近  $0.3 \text{ mm/s}$ , 且随  $C_0$  变化不大; 在  $t = 0.475 \text{ s}$  时, 也就是枝晶尖端速度达到稳态时, CA 模拟预测的稳态枝晶尖端生长速度随合金浓度  $C_0$  的增加, 先增大, 后减小, 稳态枝晶尖端生长速度的最大值出现在  $C_0 = 0.1 \text{ mol\%}$  处, 与 LGK 理论模型符合较好, 只是枝晶尖端生长速度变化的幅度小于 LGK 模型. 在凝固初期, 非稳态枝晶生长过程中,  $C_0$  越大, 枝晶尖端速度越大, 如图 11 中  $t = 0.175 \text{ s}$  时尖端速度随成分的变化.

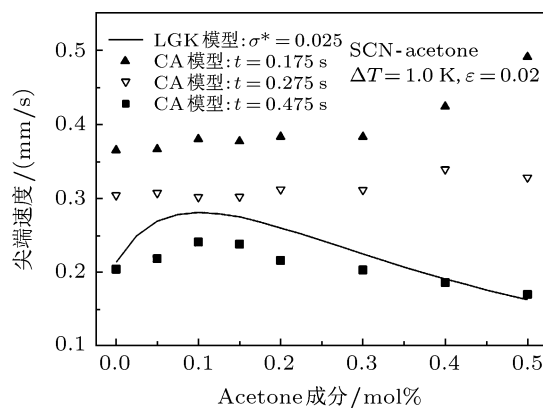


图 11 SCN-acetone 合金在不同时刻下, 枝晶尖端生长速度随合金浓度  $C_0$  的变化曲线 ( $\Delta T = 1 \text{ K}$ ,  $\Delta s = 4.0 \mu\text{m}$ )

图 12 所示的是纯 SCN 与 SCN-0.1 mol% acetone 合金在过冷熔体中自由枝晶生长的形态. 可以看出, 当丙酮的成分从  $0\%$  增加到  $0.15 \text{ mol\%}$ , 枝晶

的形态和大小都发生了显著变化.

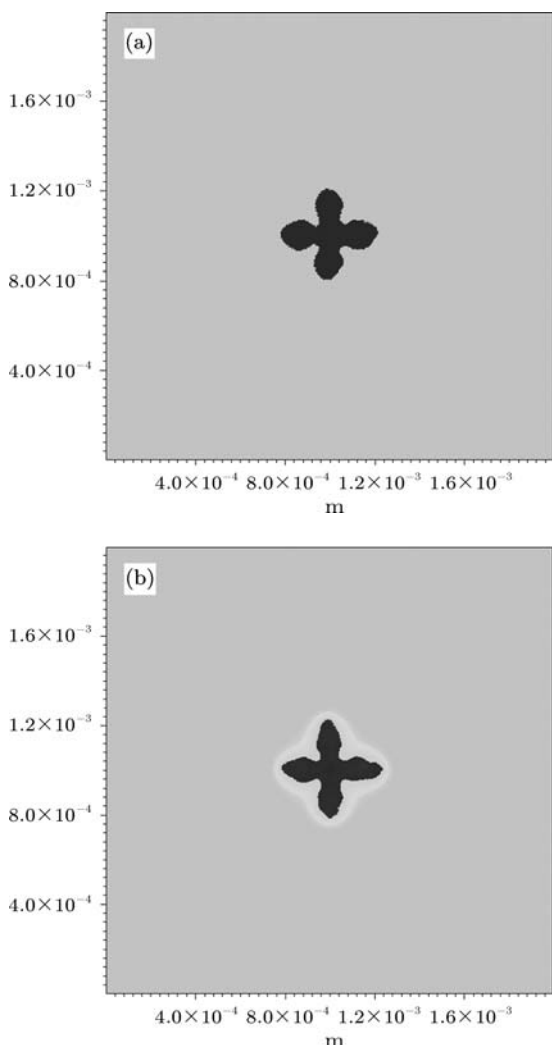


图 12 SCN 与 SCN-0.15 mol% acetone 合金枝晶生长形态 ( $\Delta T = 1$  K,  $\Delta s = 4.0 \mu\text{m}$ ,  $t = 0.475$  s) (a) SCN; (b) SCN-0.15 mol% acetone

### 5.4 在 $\Delta T$ 变化时, CA 模型与 LGK 理论模型的比较

图 13 所示的是 SCN-0.1 mol% acetone 合金稳态枝晶尖端生长速度随不同过冷度的变化曲线. 可以看出, 随着过冷度的增加, CA 模型所预测的稳态枝晶尖端生长速度与 LGK 理论模型符合很好.

图 14 所示的是 SCN-0.1 mol% acetone 合金稳态枝晶尖端半径随不同过冷度的变化曲线. 当过冷度在 1K 左右时, 尖端半径与 LGK 理论相差较大, 其原因可能是在过冷度减小的过程中, 枝晶尖端速度减小, 枝晶尖端半径变大. 在过冷度较小时, 由于枝晶尖端速度以及界面其他位置速度的降低, 导致枝晶尖端半径的调整需要更多的时间和空间, 因此可能存在尖端速度达到稳态, 而枝晶尖端半径却没

有达到稳态的情况.

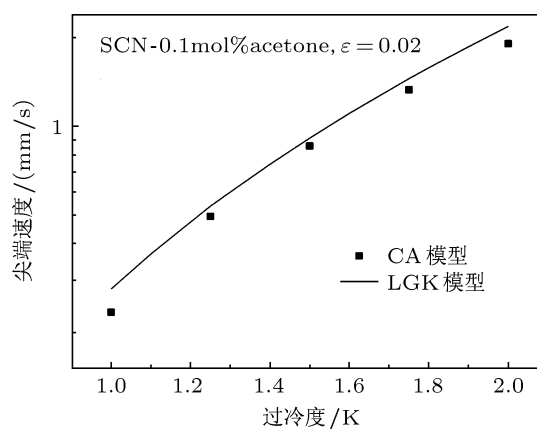


图 13 SCN-0.1 mol% acetone 合金在不同过冷度下的稳态枝晶尖端生长速度 ( $\Delta s = 2.0 \mu\text{m}$ )

图 15 所示的是 SCN-0.1 mol% acetone 合金稳态枝晶尖端液相浓度  $C_L^*$  随不同过冷度的变化曲线. 随着过冷度的增加,  $C_L^*$  也逐渐变大. CA 模型与 LGK 模型符合很好.

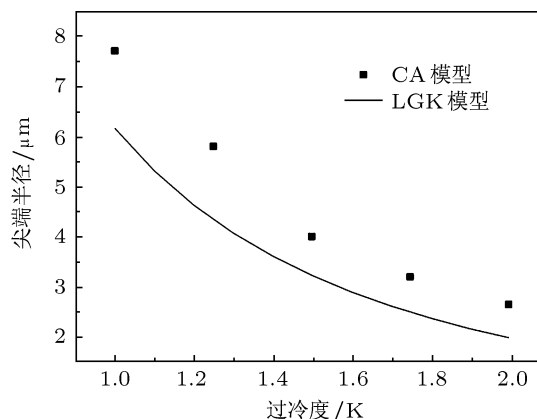


图 14 SCN-0.1 mol% acetone 合金在不同过冷度下的稳态枝晶尖端半径 ( $\Delta s = 2.0 \mu\text{m}$ )

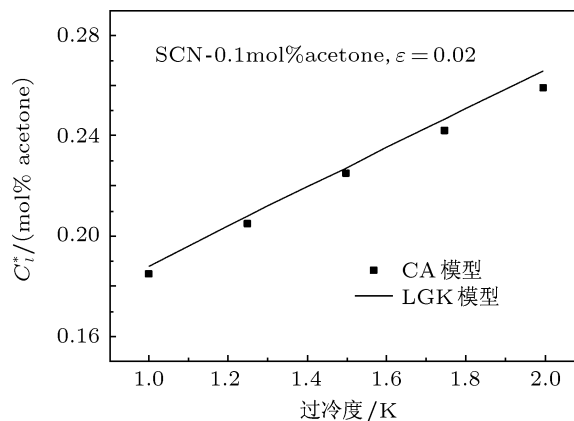


图 15 SCN-0.1 mol% acetone 合金在不同过冷度下的稳态枝晶尖端液相浓度 ( $\Delta s = 2.0 \mu\text{m}$ )



## 6 结论

本文采用自主开发的 zigzag 俘获规则, 建立了二元合金自由枝晶生长的元胞自动机模型. 模型中采用的生长动力学算法, 不仅适用于合金凝固, 也适用于纯物质凝固. 为了提高模型的精度, 采用了 MeshTV 界面重构技术, 在界面元胞内部构建固液界面的形态和位置.

在对模型的检验中证实, 本文的 CA 模型基本消除了网格各向异性, 并能够恰当反映界面能各向异性在枝晶生长中的影响.

本文 CA 模型的模拟结果与 LGK 理论模型进行了多方面的比较. 在过冷度  $\Delta T = 1$  K 时, 考察了稳态枝晶尖端生长速度随初始浓度  $C_0$  的变化, 发现当合金成分  $C_0 < 0.1$  mol%, 稳态枝晶尖端速度随合金成分  $C_0$  增加而增加; 当合金成分  $C_0 > 0.1$  mol%, 稳态枝晶尖端速度随合金成分  $C_0$  增加而减小. 上述现象与 LGK 理论符合. 另外, 在相同初始浓度  $C_0$ , 不同过冷度  $\Delta T$  下, 稳态枝晶尖端速度和尖端半径以及液相浓度  $C_L^*$  同样与 LGK 理论符合.

- [1] Boettinger W J, Coriell S R, Greer A L, Karma A, Kurz W, Rappaz M, Trivedi R 2000 *Acta Mater.* **48** 43
- [2] Asta M, Beckermann C, Karma A, Kurz W, Napolitano R, Plapp M, Purdy G, Rappaz M, Trivedi R 2009 *Acta Mater.* **57** 941
- [3] Huang S C, Glicksman M E 1981 *Acta Metall. Mater.* **29** 701
- [4] Langer J S 1980 *Rev. Mod. Phys.* **52** 1
- [5] Lipton J, Glicksman M E, Kurz W 1987 *Metall. Trans. A* **18A** 341
- [6] Huang W D, Geng X G, Zhou Y H 1993 *J. Crystal Growth* **134** 105
- [7] Lin X, Huang W D, Feng J, Li T, Zhou Y H 1999 *Acta Mater.* **47** 3271
- [8] McFadden G B, Wheeler A A, Braun R J, Coriell S R 1993 *Phys. Rev. E* **48** 2016
- [9] Ramirez J C, Beckermann C 2005 *Acta Mater.* **53** 1721
- [10] Nastac L 1999 *Acta Mater.* **47** 4253
- [11] Beltran Sanchez L, Stefanescu D M 2003 *Metall. Mater. Trans. A* **34** 367
- [12] Beltran Sanchez L, Stefanescu D M 2004 *Metall. Mater. Trans. A* **35** 2471
- [13] Zhu M F, Stefanescu D M 2007 *Acta Mater.* **55** 1741
- [14] Dong H B, Lee P D 2004 *Acta Mater.* **53** 659
- [15] Kremeyer K 1998 *J. Computational Physics* **142** 243
- [16] Zhu M F, Lee S Y, Hong C P 2004 *Phys. Rev. E* **69** 061610
- [17] Wang W, Lee P D, McLean M 2003 *Acta Mater.* **51** 2971
- [18] Shan B W, Lin X, Wei L, Huang W D 2007 *Advan. Mater. Res.* **26-28** 957
- [19] BROWN S G 1998 *J. Mater. Sci.* **33** 4769
- [20] Zhu M F, Yu J, Hong C P 2004 *Engineering Science* **6** 8 (in Chinese) [朱鸣芳, 于金, 洪俊杓 2004 中国工程科学 **6** 8]
- [21] Pan S Y, Zhu M F 2009 *Acta Phys. Sin.* **58S278** (in Chinese) [潘诗琰, 朱鸣芳 2009 物理学报 **58** S278]
- [22] Shan B W, Lin X, Wei L, Huang W D 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1132 (in Chinese) [单博炜, 林鑫, 魏雷, 黄卫东 2009 物理学报 **58** 1132]
- [23] Shan B W, Wei L, Lin X, Huang W D 2006 *Foundry* **55** 439 (in Chinese) [单博炜, 魏雷, 林鑫, 黄卫东 2006 铸造 **55** 439]
- [24] Wei L, Lin X, Shan B W, Huang W D 2007 *Proceedings of the 5th Decennial International Conference on Solidification Processing Sheffield, England, July, 2007* p53
- [25] Lin X, Wei L, Wang M, Huang W D 2010 *Mater. Sci. Forum* **PRICM7** 1528
- [26] Wei L, Lin X, Wang M, Huang W D 2011 *Applied Physics A* **103** 123
- [27] Li Q, Li D Z, Qian B N 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 3477 (in Chinese) [李强, 李殿中, 钱百年 2004 物理学报 **53** 3477]
- [28] Sun D K, Zhu M F, Yang C R, Pan S Y, Dai T 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** S285 (in Chinese) [孙东科, 朱鸣芳, 杨朝蓉, 潘诗琰 2009 物理学报 **58** S285]
- [29] Meredith J 2002 *Genetic Algorithms and Genetic Programming at Stanford* (Custom Publishing) p139
- [30] Noh W F, Woodward P R 1976 *Lecture Notes in Physics* (Berlin/New York: Springer-Verlag) p330
- [31] Parker B J, Youngs D L 1992 *Technical Report 01/92* (Berkshire, U.K.: Atomic Weapons Establishment) p30

# Cellular automaton model with MeshTV interface reconstruction technique for alloy dendrite growth\*

Wei Lei Lin Xin<sup>†</sup> Wang Meng Huang Wei-Dong

(State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

(Received 1 June 2011; revised manuscript received 7 September 2011)

## Abstract

In this paper, cellular automata (CA) model for free dendritic growth of alloy is presented, in which the interface cell is refined by MeshTV interface reconstruction algorithm. In the present CA model, the growth kinetic for both pure material and alloy is used. The effect of interfacial energy anisotropy parameter  $\varepsilon$  is validated in the CA model. The dendrite tip growth velocity and tip radius are compared with those of the LGK theoretical model, when  $\varepsilon = 0.02$ .

**Keywords:** cellular automata, dendrite growth, anisotropy

**PACS:** 81.30.-t, 68.70.+w

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 50771083 and 50901061), the National Basic Research Program of China (Grant No. 2011CB610402), the Programme of Introducing Talents of Discipline to Universities (Grant No. 08040), and the fund of the State Key Laboratory of Solidification Processing in NWPU (Grant No. 02-TZ-2008).

<sup>†</sup> E-mail: xlin@nwpu.edu.cn