

基于元胞自动机方法的定向凝固枝晶竞争生长数值模拟*

陈瑞 许庆彦[†] 柳百成

(清华大学材料学院, 先进成形制造教育部重点实验室, 北京 100084)

(2014年2月16日收到; 2014年5月16日收到修改稿)

通过耦合温度场模型、溶质扩散方程以及枝晶生长动力学方程等重要因素, 建立了一种改进的元胞自动机模型. 该模型通过采用偏心算法消除网格各向异性, 实现了二维尺度上任意角度枝晶生长的模拟, 同时适用于模拟三维尺度上枝晶的生长过程. 利用建立的模型开展了定向凝固枝晶竞争生长过程的数值模拟. 为了体现本模型的有效性, 模拟了透明合金的竞争生长过程, 并与实验结果符合良好. 镍基高温合金汇聚竞争和发散竞争的模拟结果清楚地展现了不同抽拉速度和枝晶优先生长角度下枝晶的竞争生长过程, 并且模拟结果与理论模型相符合. 三维枝晶生长的模拟结果表明本模型可以用来模拟三维枝晶一次臂间距的调整过程.

关键词: 元胞自动机, 定向凝固, 竞争生长, 镍基高温合金

PACS: 81.10.-h, 64.70.-D, 61.50.Ah

DOI: 10.7498/aps.63.188102

1 引言

金属的凝固是一个复杂的过程, 其形成的微观组织直接影响着铸件最终的力学性能. 枝晶作为最常见的一种凝固组织, 是目前研究的热点. 通过深入了解和掌握凝固过程中枝晶的演化规律, 有助于控制枝晶的形成过程, 进而达到对铸件性能进行有效预测和控制的目的^[1]. 近年来, 基于计算机技术的快速发展, 数值模拟技术已成为一种预测凝固过程中枝晶组织演变的有效途径. 目前, 微观组织数值模拟的主要方法有元胞自动机(CA)法和相场(PF)法, 其中, CA方法具有较高的计算效率, 通过耦合热扩散、溶质扩散以及枝晶生长动力学等, 建立较复杂的描述枝晶固/液界面形态以及溶质分布的数学方程, 从而实现对枝晶形貌演化过程的模拟^[2]. 近年来, 许多学者针对CA方法进行了不同的改进, 建立了能够模拟不同凝固条件下枝

晶演化过程的CA模型. Wang等^[3]借鉴了Gandin和Rappaz^[4]提出的偏心正方捕获算法, 通过耦合溶质扩散方程, 实现了立方晶系任意角度枝晶的生长模拟, 同时研究了定向凝固一次枝晶臂间距的选择过程. Yang等^[5]和Dong等^[6,7]利用该方法分别研究了镍基高温合金单晶叶片熔模铸造过程中杂质缺陷形成机理和定向凝固工艺参数对柱状晶向等轴晶转变的影响. 基于Beltran-Sanchez和Stefanescu模型^[8], Zhu和Stefanescu^[9]提出了一种改进的CA模型(ZS模型), 该模型把界面中的实际溶质成分和界面平衡溶质成分的差值作为枝晶生长的驱动力, 从而避免了求解界面生长速度, 并且该模型耦合了虚拟界面追踪技术(VFT), 实现了不同角度枝晶生长过程的模拟. 石玉峰等^[10]以透明合金NH₄Cl-H₂O水溶液定向凝固实验结果为基础, 采用CA模型模拟和分析了不同温度梯度、枝晶择优取向以及不同抽拉速度对柱状晶生长形态的影响.

* 国家重点基础研究发展计划(批准号: 2011CB706801)、国家自然科学基金(批准号: 51374137, 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: 2012ZX04012-041-04, 2011ZX04014-052)资助的课题.

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

定向凝固铸造单晶高温叶片具有优异的高温力学性能, 是目前的重点研究领域. 在制备单晶叶片时, 通过选晶法或籽晶法, 经过晶粒间的竞争淘汰作用, 以获得晶体取向一致的单晶晶粒是必要条件. 但是在定向凝固过程中, 常常会由于各种工艺参数的波动, 触发大角度晶界和杂晶等缺陷的形成, 而这些缺陷的形成与合金定向凝固过程中枝晶的竞争生长过程密切相关. 因此, 研究不同取向枝晶之间的竞争淘汰机制, 对于实现单晶叶片的生产具有重要的理论指导意义. Walton 和 Chalmers^[11] 根据枝晶尖端相对位置以及尖端过冷度的分析, 定性描述了不同取向枝晶之间的竞争生长过程, 认为择优取向枝晶一定会淘汰非择优取向枝晶, 但是该模型忽略了凝固工艺参数以及枝晶臂间距等参数的影响. 近些年, Zhou 等^[12,13] 通过籽晶法, 设置汇聚双晶和发散双晶来研究枝晶的竞争生长过程. 对于双晶发散生长, 实验结果与 Walton-Chalmers 模型相一致; 而对于双晶汇聚生长, 在低拉速条件下, 出现的结果与 Walton-Chalmers 模型相反, 即非择优取向枝晶淘汰了择优取向枝晶. Zhou 等通过枝晶尖端溶质交互作用定性解释了出现这种反常竞争生长现象的原因. Li 等^[14,15] 基于相场模型对汇聚竞争生长过程进行了量化的模拟研究, 详细分析了一次枝晶臂间距、抽拉速度等对枝晶竞争生长过程的影响, 解释了反常竞争生长现象产生的原因. 此外, 对于发散竞争生长, 宇红雷等^[16] 利用透明合金 SCN-1.7%Eth 溶液实验研究了不同抽拉速度、不同枝晶取向角对竞争生长过程的影响. 目前, 对于定向凝固过程中不同工艺参数以及不同枝晶取向对枝晶间竞争生长过程的研究较少. 因此利用数值模拟技术对枝晶竞争生长过程开展相关研究具有重要的理论意义和工程价值, 同时可以为实验中观察到的现象做出合理的解释和理论验证.

本文通过消除网格各向异性的影响, 建立能够描述任意角度枝晶生长的改进 CA (MCA) 模型, 开展了定向凝固枝晶竞争生长过程的数值模拟. 利用 MCA 模型模拟了枝晶汇聚竞争和发散竞争的淘汰过程, 同时探究了不同抽拉速度和优先生长角度对枝晶竞争淘汰过程的影响. 此外, 利用该模型模拟了镍基高温合金三维枝晶形貌, 初步研究了三维枝晶竞争生长过程.

2 MCA 数值模型描述

本文研究定向凝固条件下枝晶形貌的演化过程, 主要基于以下合理假设: 1) 由于微观计算域很小, 在 mm 尺度, 可以考虑溶质扩散在微观计算域内满足溶质守恒, 即采用封闭边界条件; 2) 定向凝固熔体比较平稳, 可以不考虑液相流动的影响; 3) 忽略动力学过冷度, 因此模型只适用于模拟低 Péclet 数 ($Pe = DV/\alpha$) 条件下的枝晶生长; 4) 材料的热物性参数假定是常数.

2.1 温度场的简化模型

由于热扩散速率比溶质扩散速率高若干个数量级, 故而认为在枝晶尺度上热量的扩散保持平衡态, 即可认为初始成分液相线等温面 $T_{liq}(w_0)$ 维持水平状态, 如图 1 所示. 在固定的温度梯度 G 和抽拉速度 V 的作用下, 整个计算域的温度以均匀的冷却速度 $C_R = G \cdot V$ 开始下降. 假设在时间 t_0 时, 液相线等温面 $T_{liq}(w_0)$ 的位置在 $y = y_0$ 处, 因而可以得到时间 t 时每个点的温度值. 以点 (x, y) 为例, 其温度值为

$$T(t) = T_{liq}(w_0) + G \cdot (y - y_0) - G \cdot V \cdot t. \quad (1)$$

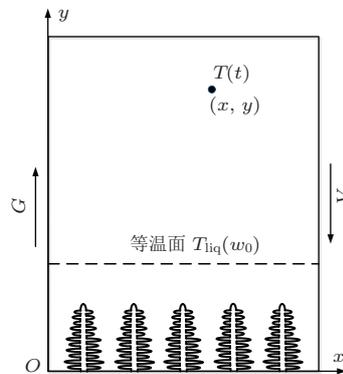


图1 温度场计算示意图

2.2 溶质控制方程

微观 CA 单元有液态、固态和固/液界面 3 种状态. 由于界面单元固相率的增加排出溶质, 使得界面前沿存在溶质梯度, 从而推动溶质的扩散. 每种状态 CA 单元的溶质扩散过程都可以统一用以下的控制方程来表示:

$$\frac{\partial w_i}{\partial t} = \nabla \cdot (D_i \nabla w_i) + w_L (1 - k_0) \frac{\partial f_S}{\partial t}, \quad (2)$$

式中, w 表示元胞中的溶质溶度, 下标 i 表示为液相 (L) 或是固相 (S); D 为溶质扩散系数; k_0 为溶质平衡分配系数; f_S 为固相分数; t 为时间. (2) 式右边第二项表示固/液界面单元由于固相率增加排出的溶质含量, 所以对于液相或是固相单元, 该项为 0. 对于固/液界面单元, 满足如下溶质再分配方程:

$$w_S = k_0 w_L. \quad (3)$$

为了保证界面单元的连续性, 引入了当量成分 w_e 和当量溶质扩散系数 D_e , 具体的处理方式参见文献 [9].

2.3 枝晶生长动力学

对于界面单元, 成分过冷和界面曲率的作用可以使界面单元满足局部热力学平衡条件, 因而界面单元平衡溶质成分为

$$w_L^* = w_0 + \frac{1}{m_L}(T^* - T_{liq}(w_0) + \Gamma wmc), \quad (4)$$

式中, w_0 为初始成分; m_L 为液相线斜率; T^* 为界面平衡温度, 通过 (1) 式计算得到; $T_{liq}(w_0)$ 为初始

成分 w_0 下的液相线温度; Γ 为 Gibbs-Thomson 系数; wmc 为加权平均曲率. 对于界面元胞的曲率计算, 有多种方法. 考虑到文献 [17] 中的平均计数法存在严重的网格尺寸依赖性, 并且缺乏物理基础, 所以本文采用文献 [18, 19] 中的三维加权平均曲率 wmc , 其计算公式为

$$\begin{aligned} wmc &= \kappa f(\phi, \theta) \\ &= (3\varepsilon - 1)(\partial_x n_x + \partial_y n_y + \partial_z n_z) \\ &\quad - 48\varepsilon(n_x^2 \partial_x n_x + n_y^2 \partial_y n_y + n_z^2 \partial_z n_z) \\ &\quad + 12\varepsilon Q(\partial_x n_x + \partial_y n_y + \partial_z n_z) \\ &\quad + 12\varepsilon(n_x \partial_x Q + n_y \partial_y Q + n_z \partial_z Q), \end{aligned} \quad (5)$$

式中, ε 为各向异性系数; $n_x = \partial_x f_S / |\nabla f_S|$, $n_y = \partial_y f_S / |\nabla f_S|$, $n_z = \partial_z f_S / |\nabla f_S|$, 其中: $|\nabla f_S| = \sqrt{(\partial_x f_S)^2 + (\partial_y f_S)^2 + (\partial_z f_S)^2}$; 参数 Q 定义为 $Q = n_x^4 + n_y^4 + n_z^4$. 方程 (5) 的推导以及具体求解可以参见文献 [19]. 在二维条件下, 方程 (5) 可以简化为

$$wmc = \kappa \cdot f(\varphi, \theta) = \kappa \cdot (1 - 15\varepsilon \cos[4(\varphi - \theta)]), \quad (6)$$

$$\varphi = \begin{cases} \cos^{-1} \left(\frac{\partial f_S / \partial x}{[(\partial f_S / \partial x)^2 + (\partial f_S / \partial y)^2]^{1/2}} \right) \frac{\partial f_S}{\partial x} \geq 0 \\ 2\pi - \cos^{-1} \left(\frac{\partial f_S / \partial x}{[(\partial f_S / \partial x)^2 + (\partial f_S / \partial y)^2]^{1/2}} \right) \frac{\partial f_S}{\partial x} < 0 \end{cases}, \quad (7)$$

式中, $f(\varphi, \theta)$ 是与界面法向角 φ 和枝晶优先生长角度 θ 相关的界面张力各向异性函数, φ 值通过方程 (7) 求得; κ 为二维局部界面平均曲率, 可以通过以下公式计算得到:

$$\begin{aligned} \kappa &= \left[\left(\frac{\partial f_S}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial f_S}{\partial y} \right)^2 \right]^{-3/2} \\ &\quad \times \left[2 \frac{\partial f_S}{\partial x} \frac{\partial f_S}{\partial y} \frac{\partial^2 f_S}{\partial x \partial y} \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{\partial f_S}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2 f_S}{\partial y^2} - \left(\frac{\partial f_S}{\partial y} \right)^2 \frac{\partial^2 f_S}{\partial x^2} \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

界面单元固相分数的计算主要有两种方法, 一种是基于固/液界面推移过程中溶质守恒方程求解枝晶生长速度, 从而得到固相率的增加量; 另一种是考虑界面局部平衡, 认为界面平衡溶质成分和界面实际溶质成分的差值是枝晶生长的驱动力, 从而

利用局部杠杆定律直接求得固相分数的增量, 避免了求解枝晶生长速度, 计算效率高. 在文献 [9] 中, 对于这两种方法进行了详细的比较. 本文采用第二种方法来计算 CA 单元的固相分数, 其计算公式为

$$\Delta f_S = \frac{w_L^* - w_L}{w_L^*(1 - k_0)}, \quad (9)$$

式中, 界面平衡溶质溶度 w_L^* 和该单元的实际溶质溶度 w_L 分别通过方程 (4) 和方程 (2) 计算得到.

2.4 网格各向异性的处理

凝固过程中, 枝晶的优先生长方向是随机的, 但是由于 CA 网格的各向异性, 会导致枝晶的生长方向偏离其优先生长方向, 只沿着 0° 或是 45° 方向生长. 为了消除网格各向异性给枝晶生长带来的固有影响, 本文采用了偏心算法来实现任意角度枝晶

生长的模拟. 偏心算法首先由 Gandin 和 Rappaz^[4] 提出, 经过 Wang 等^[3] 的改进, 是目前模拟多角度枝晶生长的理想方法. 图 2 所示为描述四重对称枝晶生长的偏心算法, 假设元胞 (i, j) 形核, 其状态值从液相转变为固/液界面, 并随机赋予一个优先生长角度 θ . 形核后的 (i, j) 单元受到溶质扩散以及枝晶生长动力学的驱动, 固相分数不断增加. 在每一时间步长内, 根据单元 (i, j) 的固相分数构造一个具有倾斜角度 θ 的正方形, 如图 2 中灰色填充的正方形所示, 并且该正方形的半边长可以根据以下式子计算得到:

$$L(t + \Delta t) = L(t) + \Delta x \cdot \Delta f_S. \quad (10)$$

随着单元 (i, j) 固相分数的增加, 该倾斜的正方形会不断扩大, 当该正方形的四个顶点接触到周围的单元时(图 2 中实线倾斜正方形所示), 就把被碰到的单元捕获为界面单元(如图 2 中单元 $(i - 1, j)$, $(i + 1, j)$, $(i, j - 1)$, $(i, j + 1)$), 并把优先生长角度 θ 赋予被捕获单元. 这些被捕获单元的核心位置分别位于图 2 中虚线正方形的四个顶点处(虚线正方形大小等于 CA 网格尺寸), 然后以同样的方式进行生长和捕获. 对于单元 (i, j) , 当其固相分数达到 1 时, 搜索周围 8 个单元中剩余的液相单元, 并把它们转变为界面单元.

3 模拟结果与分析

本文模拟内容主要分为三部分: 首先模拟结果和透明合金实验结果进行比较, 验证模型的可靠性; 然后基于验证后的模型模拟了二维条件下镍基高温合金定向凝固枝晶竞争生长过程; 最后描述了镍基高温合金三维枝晶形貌以及枝晶的竞争生长过程. 本文定义优先生长角度 θ 值较小的枝晶为择优取向枝晶, 标记为晶粒 A, θ 值较大的标记为晶粒 B, 为非择优取向枝晶. 模拟所用到的合金成分及热物性参数如表 1 中所示.

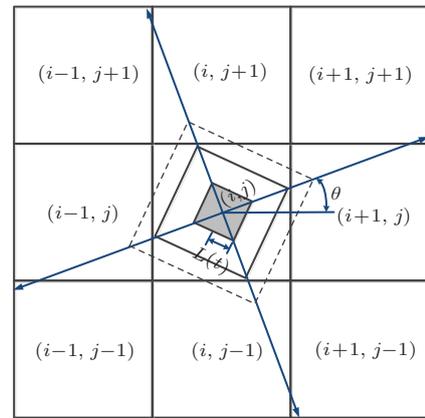


图 2 CA 单元捕获和生长规则示意图

表 1 模拟所用到的合金成分和材料的热物性参数

| 变量及物理意义 | 丁二腈-丙酮溶液 ^[20] | Ni-Nb 二元合金 ^[3] |
|--------------------------------------|--------------------------|---------------------------|
| 初始合金成分, w0/wt. % | 1.3 | 4.85 |
| 平衡液相线温度, $T_{liq}(w0)/K$ | 60.6 | 1609 |
| 液相线斜率, $m_L/K \cdot \%^{-1}$ | -2.97 | -10.9 |
| 平衡溶质分配系数, k_0 | 0.124 | 0.48 |
| 液相溶质扩散系数, $D_L/m^2 \cdot s^{-1}$ | 1.27×10^{-9} | 3×10^{-9} |
| 固相溶质扩散系数, $D_S/m^2 \cdot s^{-1}$ | 1.27×10^{-12} | 3×10^{-12} |
| Gibbs-Thomson 系数, $\Gamma/m \cdot K$ | 6.62×10^{-8} | 1.0×10^{-7} |

3.1 透明合金竞争生长模拟

由于实际合金的不透明性, 很难实时观测到枝晶的竞争生长过程, 而在低温下凝固的透明合金具有与实际合金类似的枝晶形貌特征和生长动力学行为, 可以代替实际合金研究枝晶形貌演化过程和竞争淘汰机制. 图 3(a), (b) 所示分别为透明合金 SCN-1.3 wt. % Aceton 定向凝固竞争生

长模拟结果和实验结果^[21]. 模拟选取的计算域大小为 $3.6 \text{ mm} \times 4.8 \text{ mm}$, CA 单元的网格尺寸为 $4 \mu\text{m}$, 在计算域底部等间距放置 19 个晶核, 划分为 A, B, C 三个晶粒区, 优先生长角度分别设为 4° , 25° , 8° . 在抽拉速度 $V = 86 \mu\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ 和温度梯度 $G = 1.9 \text{ K} \cdot \text{mm}^{-1}$ 的作用下, 枝晶从底部开始向上生长. 根据实验和模拟结果可以发现, 一次枝晶臂沿着各自的优先生长方向生长, 同时柱状晶一次臂

上出现了二次臂甚至更高次臂, 且与主干之间保持 90° 方向, 呈现立方晶系四重对称特征. 同时可以看到, 枝晶的生长方向并没有因网格各向异性的影响而改变, 体现了模型对于描述任意角度枝晶生长的有效性.

在固定的温度梯度和抽拉速度作用下, 柱状晶一次枝晶臂间距存在一个稳态区间 $\lambda_{\min} - \lambda_{\max}$. 当枝晶臂间距 $\lambda < \lambda_{\min}$, 由于相邻枝晶臂之间强烈的溶质交互作用, 会出现竞争生长, 通过湮灭机制来调整枝晶臂间距至稳态区间; 当枝晶臂间距 $\lambda > \lambda_{\max}$, 枝晶间的溶质成分富集较低, 过冷度大, 有利于通过侧向分叉机制产生新的枝晶臂来降低枝晶臂间距. 如图 3 (a) 中的模拟结果所示, 由于 B 区枝晶和 C 区枝晶的优先生长角度不一致, 随着两个靠近竞争区枝晶的推进, 界面前沿会形成“V”形空间 (“V”形空间指的是晶粒 A, B 的枝晶在晶界处所形成的区域). 在未形成一次枝晶臂之前, 随着凝固的进行, 晶界处相邻枝晶臂间距增大, 过冷度增加, 因此在该区域会由 B 区晶粒或是 C 区晶粒发展出的三次枝晶臂来占据该空间, 降低该处的枝晶臂间距. 文献 [16] 利用 SCN-1.7%Eth 透明合金进行了大量定向凝固发散双晶竞争生长实验, 结果显示, 在“V”形区域, 不管是择优取向枝晶还是非择优取向枝晶, 它们发展出的大部分三次枝晶臂受到自身二次枝晶臂的封锁和相邻不同取向枝晶臂的阻挡, 生长受到抑制, 只有少数的三次枝晶臂能够发展成为稳定的枝晶主轴, 在图 3 (a) 的模拟结果中也可以看到这样的现象. 此外, 由图 3 中可以看到, B 区晶粒新形成的枝晶臂间距 λ_B 要大于 C 区晶粒新形成的枝晶臂间距 λ_C , 这种现象可以通过 Hunt 模型 [22] 来解释. 当生长方向与温度梯度成夹角 θ 时, 沿着一次枝晶臂生长方向温度梯度为 $G \cos \theta$, 所以可以得到一次臂与温度梯度、生长速度的关系为

$$\lambda_1 = 2.83[\Gamma D m_L w_0 (1 - k_0)]^{0.25} \times (G \cos \theta)^{-0.5} v^{-0.25}. \quad (11)$$

根据 (11) 式可以看出, 对于恒定的温度梯度和生长速度, 当 θ 增大时, $\cos \theta$ 减小, 从而使得一次臂间距 λ_1 增大.

根据图 3 中的模拟结果和实验结果可以看到, 经过竞争生长后, 非择优取向晶粒 B 最终被淘汰. 对于汇聚竞争生长晶粒 A 和晶粒 B, 晶粒 B 枝晶

尖端由于 A 区枝晶一次臂的阻挡, 生长受到抑制, 同时 A 区枝晶臂由于受到晶粒 B 枝晶尖端的限制作用, 不能形成新的一次臂, 所以最终 A 和 B 之间的晶界沿着 A 晶粒的优先生长方向, 这与 Walton-Chalmer 提出的汇聚竞争生长模型相一致. 对于发散竞争生长, B 和 C 区晶粒都形成了新的稳定一次枝晶臂, 但是由于 B 区晶粒受到 C 区晶粒空间上的限制, 最终被淘汰, 因此其晶界由晶粒 C 向晶粒 B 方向倾斜. 模拟和实验结果的对比如验证了本模型可以用来模拟不同角度枝晶竞争生长过程, 为后面镍基高温合金竞争生长的模拟奠定了基础.

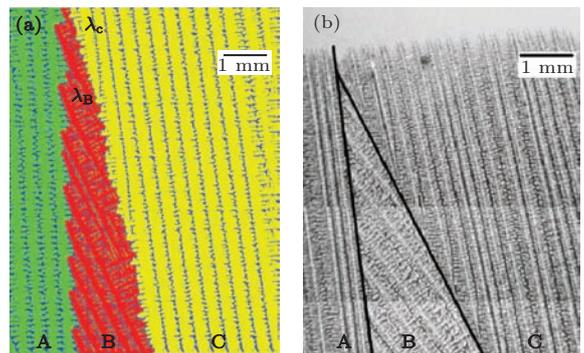


图 3 (网刊彩色) 透明合金 SCN-1.3 wt.% Aceton 定向凝固竞争生长模拟结果 (a) 与实验结果 [21] (b) 对比 (a) 中不同颜色代表不同优先生长角度的枝晶

3.2 镍基高温合金汇聚双晶竞争生长模拟

镍基高温合金的竞争生长过程是目前的一个研究重点, 通过深入了解枝晶之间的竞争淘汰机制有助于实现单晶高温合金叶片的生产 and 杂晶缺陷的控制. 二维条件下, 枝晶的竞争生长主要分为两种形式: 一种是汇聚竞争生长, 另一种是发散竞争生长. 对于汇聚竞争生长情况, Walton-Chalmers 模型基于尖端过冷度的分析, 认为择优取向枝晶最终会淘汰非择优取向枝晶, 这一模型已经过了一些实验 [23] 和模拟 [24] 的证实. 但是, Zhou 等 [12,13] 的一些实验显示, 在低拉速条件下, 非择优取向枝晶能够淘汰择优取向枝晶, 并提出了与 Walton-Chalmers 相反的汇聚竞争生长模型, 如图 4 (a) 所示. 图 4 (b) 是实验观察到的非择优取向枝晶 B 淘汰择优取向枝晶 A 的实验结果 [25]. 针对这一问题, Li 等 [14,15] 采用 PF 方法解释了汇聚竞争生长机理, 详细分析了枝晶尖端过冷度大小和相邻枝晶之间溶质交互作用对于反常竞争生长现象 (即非择优取向枝晶淘汰择优取向枝晶) 的影响.

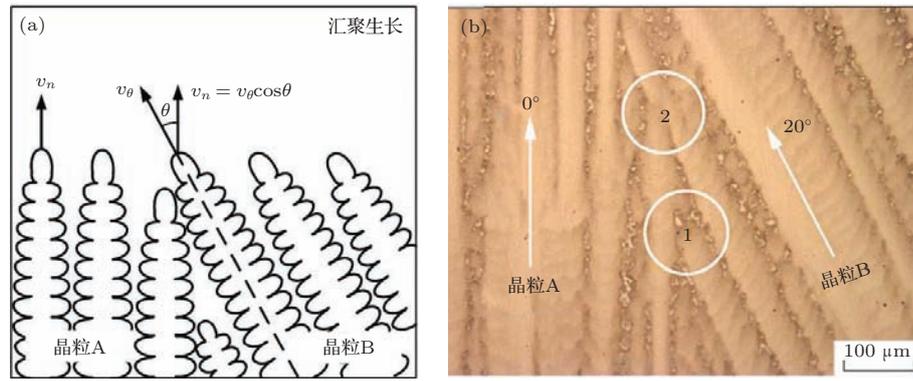


图4 定向凝固汇聚双晶竞争生长机制示意图(a)及实验结果^[25](b)

模拟结果显示, 在低拉速条件下 ($60 \mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$), 由于比较大的溶质扩散距离 ($\delta \sim \nu^{-1}$), 晶界周围枝晶尖端溶质交互作用加强, 出现不同取向枝晶之间的交替阻挡, 如图4(b)中的圆圈所示, 最终出现非择优取向枝晶淘汰择优取向枝晶现象. 而在拉速等于 $1000 \mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时, 模拟结果与 Walton-Chalmers 模型的解释相一致, 即择优取向枝晶淘汰非择优取向枝晶, 晶界沿着择优取向枝晶生长方向. Zhang 等^[26] 通过实验对比了不同拉速 ($1 \text{ mm}\cdot\text{min}^{-1}$, $6 \text{ mm}\cdot\text{min}^{-1}$) 下镍基高温合金竞争生长过程, 结果与 Li 等^[14] 模拟得到的结论相一致. 在拉速为 $1 \text{ mm}\cdot\text{min}^{-1}$ 时, 取向偏离热流方向大的晶粒 ($\theta_B = 14^\circ$) 淘汰了取向偏离热流方向小的晶粒 ($\theta_A = 0^\circ$). 考虑到目前的模拟实验研究大部分只考虑择优取向枝晶的优先生长角度 $\theta_A = 0^\circ$ 的情况, 因此本文为了体现本模型对于汇聚竞争生长过程模拟的适用性, 模拟了择优取向枝晶优先生长角度 θ_A 不为 0° 时的竞争生长过程. 本文选取 Ni-Nb 二元合金作为模拟对象, 具体热物性参数见表 1, 模拟计算域选取为 $2.4 \text{ mm} \times 4 \text{ mm}$, 网格尺寸为 $4 \mu\text{m}$, 抽拉速度和温度梯度分别为 $V = 150 \mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, $G = 12 \text{ K}\cdot\text{mm}^{-1}$, 冷却速度 $C_R = G \cdot V = 1.8 \text{ K}\cdot\text{s}^{-1}$. 模拟结果和枝晶生长方向如图 5 所示. 同时为了体现优先生长方向的变化对枝晶竞争生长的影响, 定义了晶界偏离度 θ_{GB} , 由公式 $\theta_{GB} = \arctan((L_2 - L_1)/H)$ 求得, 其中 L_1, L_2 的选择如图 5(a) 中的黑色实线所示, H 为计算域的长度. 若晶粒 B 在该计算域内被晶粒 A 完全淘汰, 则 $\theta_{GB} = \arctan(L_2/H)$, H 为晶粒 B 沿热流方向的考察距离. 在图 5(a) 中可以看到, 不但晶粒 A 的枝晶臂能够阻挡晶粒 B 枝晶尖端的生长,

晶粒 B 也能够阻挡晶粒 A 的生长, 其竞争过程与图 4(a) 中的演化机理相一致, 最终非择优取向枝晶 B ($\theta_B = -20^\circ$) 在竞争过程中胜出, 淘汰了择优取向枝晶 A ($\theta_A = -3^\circ$), 晶界的偏离度 $\theta_{GB} \approx -9.4^\circ$, 位于 θ_A 和 θ_B 之间. 而由图 5(b) 的结果可以看到, 晶粒 A 和晶粒 B 之间的阻挡过程交替进行, 在该计算域范围内, 两晶粒最终没有出现明显的被淘汰趋势, 晶界偏离角度 $\theta_{GB} \approx 0^\circ$, 基本沿着热流方向. 图 5 中的模拟结果说明枝晶间的竞争淘汰过程与枝晶的优先生长方向密切相关. 此外, 图 5 中的两种模拟结果在周亦甬等^[13] 的实验中也出现了类似的现象.

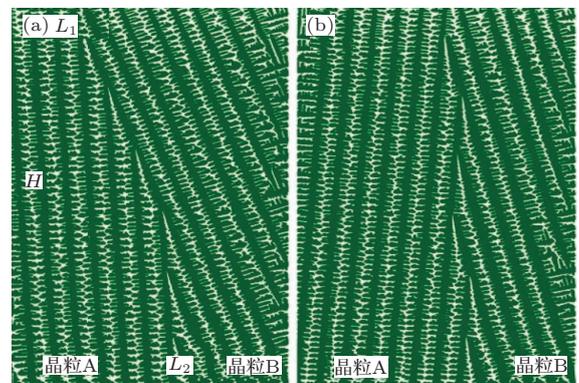


图5 两种不同优先生长角度汇聚双晶竞争生长模拟结果 (a) $\theta_A = -3^\circ, \theta_B = -20^\circ$; (b) $\theta_A = 4^\circ, \theta_B = -16^\circ$

3.3 镍基高温合金发散双晶竞争生长模拟

目前, 对于发散双晶竞争生长过程, 人们的认识基本一致, 都认为择优取向枝晶通过不断生成新的一次枝晶臂来压缩非择优取向枝晶的生长空间, 最终使得非择优取向枝晶被淘汰. 发散双晶竞争生长机制如图 6(a) 所示, 其中图 6(b) 为实验结果^[25], 可以看到晶粒 A 和晶粒 B 都会在晶界区域

形成新的枝晶臂, 调整枝晶臂间距, 同时实现枝晶的竞争生长过程. 但是目前的研究大部分都局限于定性的认识, 对于不同拉速和不同优先生长角度的影响研究很少. 同时考虑到实际铸件中择优取向枝晶的生长方向往往与热流方向也存在一定的偏差角度, 所以本节基于MCA模型研究了不同抽拉速度和优先生长方向对发散双晶竞争生长过程的影响. 同样选取Ni-Nb二元合金作为模拟对象, 模拟计算域为 $2.4\text{ mm} \times 8\text{ mm}$, 网格尺寸为 $4\text{ }\mu\text{m}$, 温度梯度恒定为 $G = 12\text{ K}\cdot\text{mm}^{-1}$. 首先, 在计算域底部等间距放置13个晶核, 初始间距为 $200\text{ }\mu\text{m}$, 根据优先生长方向 θ 的不同, 分为A晶粒区(8 dendrites)和B晶粒区(5 dendrites). 图7所示为不同优先生长角度枝晶在不同抽拉速度下的竞争生长模拟结果. 从图7中可以看到, 随着凝固的进行, 在枝晶二次臂上形成大量三次枝晶臂, 其中一些

被淘汰(如图7(a-1)中圆圈所示), 另一些则沿着凝固方向发展成为稳定的一次枝晶臂. 由于晶粒B的三次臂生长方向与热流方向的夹角比晶粒A大, 导致B晶粒三次枝晶臂尖端的过冷度比晶粒A大^[27], 所以晶粒B二次臂上更容易生成新的枝晶主轴, 如图7所示. 以图7(a-1), (a-2)为例, 比较两组不同抽拉速度下枝晶竞争生长结果, 可以看到, 当 $V = 300\text{ }\mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时, 晶粒A和晶粒B演化出的三次枝晶臂能够突破封锁发展成为新的枝晶主轴的数目较多, 枝晶臂较细, 在“V”形区域形成的一次枝晶臂间距较小. 图7中的模拟结果和现有发散双晶竞争生长理论(Walton-Chalmers和Zhou模型)相符合, 即择优取向晶粒A淘汰非择优取向晶粒B. 为了定量表征抽拉速度的变化对枝晶竞争过程的影响, 图8给出了晶界偏移角度随抽拉速度的变化曲线. 从图8中可以看出, 抽拉速度的变化会

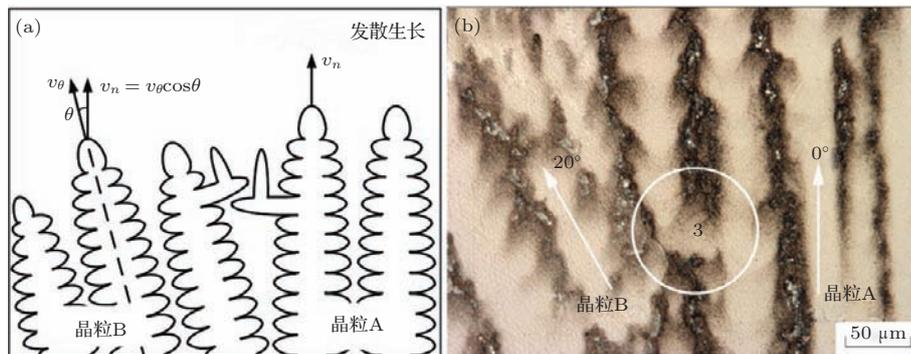


图6 定向凝固发散双晶竞争生长机制示意图(a)及实验结果(b)^[25]



图7 不同优先生长角度和不同抽拉速度下发散双晶竞争生长模拟结果 (a-1) $V = 150\text{ }\mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, $\theta_A = 3^\circ$, $\theta_B = 20^\circ$; (a-2) $V = 300\text{ }\mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, $\theta_A = 3^\circ$, $\theta_B = 20^\circ$; (b-1) $V = 150\text{ }\mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, $\theta_A = -3^\circ$, $\theta_B = 20^\circ$; (b-2) $V = 300\text{ }\mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, $\theta_A = -3^\circ$, $\theta_B = 20^\circ$; (c-1) $V = 150\text{ }\mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, $\theta_A = -6^\circ$, $\theta_B = 20^\circ$; (c-2) $V = 300\text{ }\mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, $\theta_A = -6^\circ$, $\theta_B = 20^\circ$

引起晶界偏离角度发生变化. 以 $\theta_A = -3^\circ$ 为例, 当抽拉速度从 $100 \mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ 增大到 $200 \mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, θ_{GB} 由 8° 减小至 3° , 当抽拉速度超过 $200 \mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时, θ_{GB} 开始增大, 由 3° 增至 5° , 而当抽拉速度大于 $300 \mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时, θ_{GB} 重新开始减小. 从图8中三组不同优先生长角度下的结果可以看到, θ_{GB} 值随抽拉速度的增大都出现了减—增—减的变化趋势.

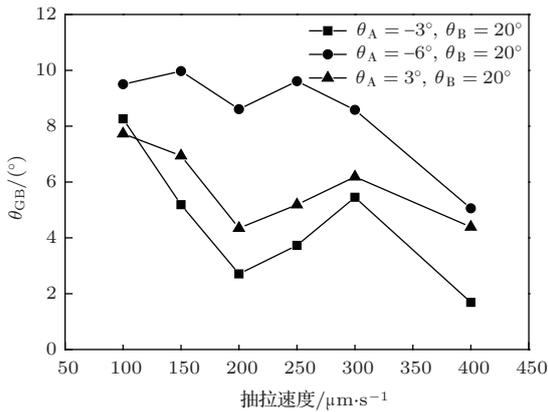


图8 不同优先生长方向晶界偏移角随抽拉速度的变化

根据文献[16]的分析, 发散双晶的晶界偏移角度由两部分组成, 分别为晶粒A优先生长方向偏离热流方向所引起的位移量 ΔL 和晶粒A在“V”形区域新形成的一次枝晶臂所引起的偏移量 ΔR , 并且满足如下关系式:

$$\begin{aligned} \theta_{GB} &= \arctan((\Delta R - \Delta L)/H) \\ &= \arctan(n\lambda / \cos\theta_A - \tan\theta_A), \end{aligned} \quad (12)$$

其中 n 为晶粒A在“V”形区域新形成的稳定一次枝晶臂数目, λ 为晶粒A新形成的平均一次枝晶臂间距. 根据(12)式可以看出, 晶界偏移角度只与 n , λ 以及 θ_A 这三个参数有关. 在固定的 θ_A 下, 抽拉速度的变化通过影响 n , λ 来影响枝晶之间的竞争生长过程, 进而改变晶界偏离角度. 图9和图10分别给出了不同抽拉速度下晶粒A在该计算域内新形成的一次枝晶臂数目以及平均一次枝晶臂间距. 从图9中可以看到, 当 $\theta_A = 3^\circ$ 时, 由于A, B晶粒所形成的“V”形区域比较小, 所以晶粒A形成的一次枝晶臂数目较少, 并且随着抽拉速度的增大, n 值在1—3范围内波动. 对于 $\theta_A = -3^\circ$ 和 $\theta_A = -6^\circ$ 两种情况, 随着抽拉速度的增大, 新形成的一次枝晶臂数目 n 值总体呈上升趋势, 且 θ_A 越大, n 值变

化越明显. 这说明只有当“V”形区域比较大时, 抽拉速度的增大对于晶粒A新增一次臂数目的影响比较明显. 从图10中可以看到, 一次枝晶臂间距随着抽拉速度的增大呈指数形式减小, 并且在低速阶段, λ 值的变化比较明显. 基于图9和图10的分析, 图8中晶界偏移角度出现减—增—减的变化趋势主要是由于抽拉速度的变化导致晶粒A新增一次枝晶臂数目和平均枝晶臂间距发生变化而引起的. 以图8中 $\theta_A = -3^\circ$ 为例, 在 V 从 $100 \mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ 增大至 $200 \mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时, 一次枝晶臂间距 λ 急剧减小(图10), 而 n 值表现为先增后减(图11). 可见, 在该阶段, 一次枝晶臂间距 λ 的变化是引起 θ_{GB} 减小的决定性因素. 在 $200 < V < 300 \mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ 阶段, λ 的变化相对较为平稳, 而 n 值随着抽拉速度的增大明显增加, 从而使得 θ_{GB} 值在该阶段呈现为增大趋势. 而当 $V > 300 \mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, 抽拉速度的增大使得 n 和 λ 值同时减小, 因此 θ_{GB} 减小.

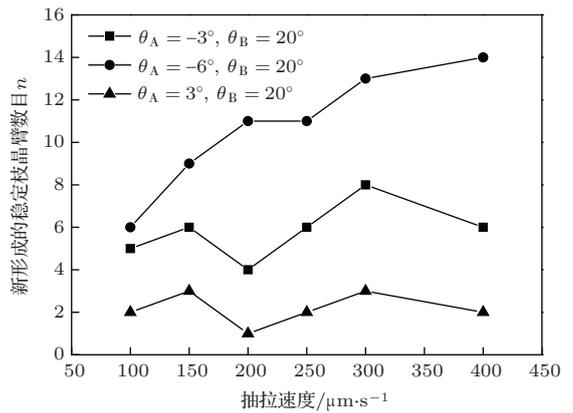


图9 晶界附近晶粒A新形成的一次枝晶臂数目随抽拉速度的变化

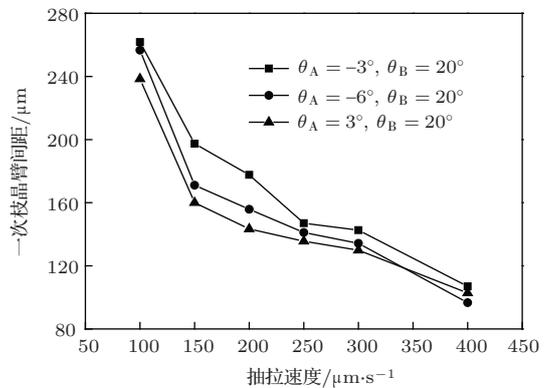


图10 晶粒A在晶界附近新形成的一次枝晶臂间距随抽拉速度的变化

为了分析晶粒A优先生长方向的差异对于A,

B晶粒之间竞争过程的影响,图11给出了在恒定抽拉速度 $V = 250 \mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ 下,晶界偏离角度 θ_{GB} 随晶粒A择优取向 θ_{A} 的变化曲线.从图11中可以看出,当 $\theta_{\text{A}} < 0$ 并且 θ_{A} 值在一定的范围之内 ($-8^\circ - 0^\circ$) 时,晶粒A偏离热流方向越大,非择优取向枝晶B被淘汰的速度越快.这主要是由于晶粒A和晶粒B的角度差 ($\theta_{\text{B}} - \theta_{\text{A}}$) 增大,使得晶粒A和晶粒B之间形成的“V”形空间变大,因此晶粒A枝晶臂上发展出的三次枝晶臂更容易突破周围枝晶臂的阻挡,达到稳态生长条件,表现为形成更多的稳定一次枝晶臂,如图7(b), (c)所示.文献[12]中通过实验 ($\theta_{\text{A}} = 0^\circ, 9^\circ < \theta_{\text{B}} < 20^\circ$) 也证实了角度差 ($\theta_{\text{B}} - \theta_{\text{A}}$) 的增大可以加速择优取向枝晶淘汰非择优取向枝晶.而当 $\theta_{\text{A}} < -8^\circ$ 时,由于晶粒A本身生长方向偏离热流方向所引起的位移量 ΔL 比较明显,使得 ($\Delta R - \Delta L$) 减小,从而 θ_{A} 开始下降.当 $\theta_{\text{A}} > 0$, 随着 θ_{A} 增大,晶界偏移角度不断增大,并且 θ_{GB} 处于 θ_{A} 和 θ_{B} 之间.对于 $\theta_{\text{A}} > 0$ 情况,由于“V”形空间较小,枝晶A相对难以形成稳定的一次枝晶臂,因此位移量 ΔL 的变化是影响枝晶淘汰的主要因素.

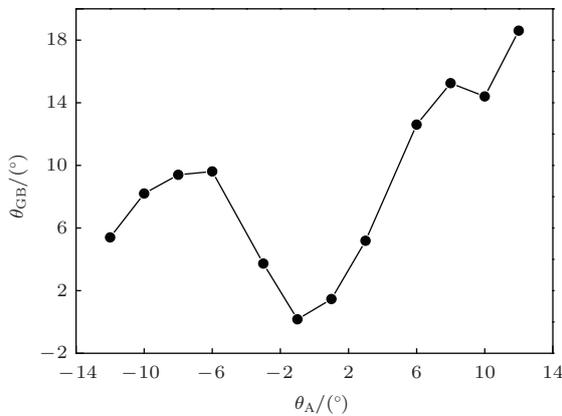


图11 恒定抽拉速度 $V = 250 \mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时,晶界偏移角度 θ_{GB} 随择优取向枝晶A优先生长角度 θ_{A} 的变化

枝晶之间的竞争过程与周围的溶质浓度、凝固条件等参数有关,温度场和溶质场的变化会改变枝晶凝固前沿的过冷度 ΔT 的大小,改变枝晶尖端的生长速度 ($\nu_n \propto \Delta T^2$), 从而影响枝晶的生长过程.为了进一步说明抽拉速度的变化对新增一次枝晶臂数目 n 和一次枝晶臂间距 λ 的影响,图12中呈现了两种不同拉速下枝晶稳态生长时,枝晶凝固前沿过冷度分布以及对应的溶质场分布图.本文定义过冷度为平衡液相线温度 $T_{\text{liq}}(w_{\text{L}})$ 与单元实际温度

$T_{ij}(t)$ 的差值:

$$\begin{aligned} \Delta T &= T_{\text{liq}}(w_{\text{L}}) - T_{ij}(t) \\ &= T_{\text{liq}}(w_0) + m_{\text{L}}(w_{\text{L}} - w_0) - T_{ij}(t). \end{aligned}$$

根据该公式,过冷度大小与局部溶质成分 w_{L} 和温度 $T_{ij}(t)$ 有关.从图12中可以看出,由于晶界处的“V”形区域落后于枝晶尖端,使得“V”形区域的温度值 $T_{ij}(t)$ 较低,热过冷度较大[28],从而使该处的局部冷度比枝晶尖端大,因此该处容易产生新的二次和三次枝晶臂来填充该区域.比较图12中两组不同抽拉速度下的模拟结果可以看到,当 V 从 $150 \mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ 增加至 $300 \mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时,由于冷却速度增大 ($C_{\text{R}} = G \cdot V$),所以在凝固至同一高度时,高拉速下的温度值 $T_{ij}(t)$ 要比低拉速下的低,从而枝晶凝固前沿的过冷度明显增大,最大过冷度从图12(a-1)中的12.8 K增大到图12(b-1)中的15.2 K.过冷度的增大促进了一次枝晶臂的形成(图9)和一次枝晶臂间距的减小(图10).

3.4 镍基高温合金三维枝晶模拟

本节应用建立的MCA模型模拟了Ni-Nb二元合金定向凝固三维枝晶形貌和竞争生长过程.模拟的计算域由 $300 \times 100 \times 400$ 个元胞组成,网格尺寸为 $4 \mu\text{m}$.假设初始时刻在计算域底部随机设置100个数溶质浓度为 $k_0 w_0$ 的形核核心,枝晶的优先生长方向沿着坐标轴方向.凝固过程中整个计算域以 $150 \mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ 的恒定速度沿着 $-z$ 方向抽拉,温度梯度为 $12 \text{K}\cdot\text{mm}^{-1}$.图13中显示的是模拟得到的不同时刻三维枝晶形貌以及对应于不同高度处的 xy 切片.可以看到,枝晶沿着温度梯度方向生长,并且从一次枝晶臂上发展出大量的二次枝晶臂.由于初始底部设置的晶核数目较多,一次枝晶臂间距较小,枝晶间的溶质富集程度高,相互之间的溶质交互作用强,从而会抑制二次三次枝晶臂的生长.所以图13(a-2)中的枝晶并没有形成明显的三次枝晶臂,并且二次臂也出现非对称生长.随着凝固的进行,枝晶间的竞争作用加强,不断淘汰掉一些一次枝晶臂(表现为图13(b-2)中的枝晶数目明显小于图13(a-2)中的枝晶数目),使得枝晶臂间距减小,溶质交互作用降低,枝晶二次臂的生长更趋于对称,如图13(b-2)中的 xy 切片所示.为了进一步说

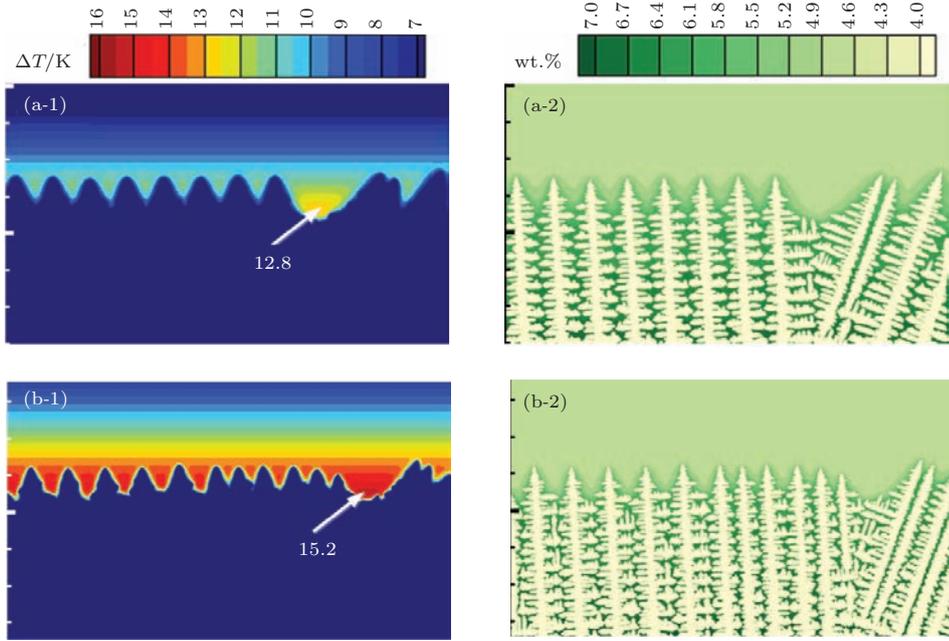


图12 (网刊彩色) 不同抽拉速度下枝晶凝固前沿局部过冷度分布 (a-1), (b-1) 以及对应的溶质场分布 (a-2), (b-2) (a-1), (a-2) $V = 150 \mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, $\theta_A = -3^\circ$, $\theta_B = 20^\circ$; (b-1), (b-2) $V = 300 \mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, $\theta_A = -3^\circ$, $\theta_B = 20^\circ$

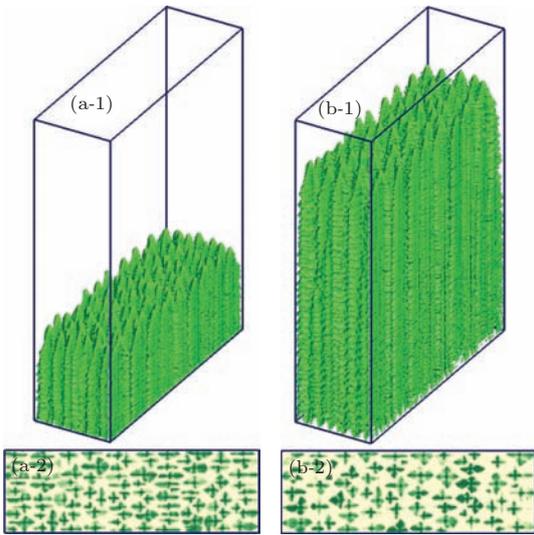


图13 模拟得到的Ni-Nb合金不同时刻的三维枝晶形貌以及对应不同高度的xy切片 (a-1), (a-2) $t = 1.4 \text{ s}$; (b-1), (b-2) $t = 4.9 \text{ s}$; (a-2) xy切片, $z = 0.36 \text{ mm}$; (b-2) xy切片, $z = 1.2 \text{ mm}$

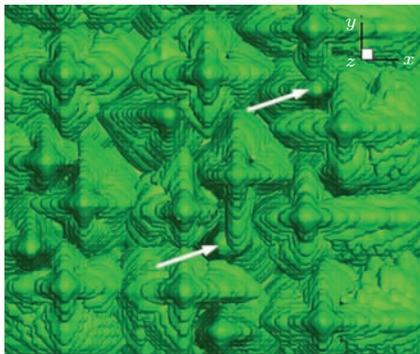


图14 三维枝晶竞争生长局部形貌

明三维枝晶的竞争生长过程, 图14呈现了某一局部的枝晶竞争淘汰过程, 可以看到相邻枝晶之间的生长相互影响, 生长快的枝晶通过发展出来的二次枝晶臂来阻挡周围其他枝晶的生长(如图中箭头所指的枝晶), 从而达到枝晶间距的调整. 以上模拟结果表明, 本模型能够比较准确地描述三维枝晶组织的演变过程.

4 结 论

本文通过耦合简化的温度场模型、溶质扩散方程以及枝晶生长动力学方程, 采用改进的偏心算法消除网格固有的各向异性对枝晶生长的影响, 建立了能够描述任意角度枝晶生长的MCA模型, 开展了定向凝固枝晶竞争生长过程的数值模拟研究. 利用本模型主要模拟了透明合金枝晶竞争淘汰过程, 以及镍基高温合金二维、三维枝晶竞争生长过程, 从而验证了本模型对于枝晶竞争生长过程描述的有效性.

透明合金的模拟和实验结果表明, 非择优取向枝晶在竞争过程中被淘汰, 符合Walton-Chalmers竞争生长模型. 此外, 枝晶生长方向与热流方向的偏差越大, 新形成的一次枝晶臂间距越大.

镍基高温合金汇聚竞争生长模拟结果表明, 在一定的条件下, 非择优取向枝晶能够淘汰择优取向

枝晶, 与 Zhou 等^[12,13] 的模型相符合. 当枝晶取向角在一定范围内时, 枝晶的淘汰过程不明显, 晶界基本沿着热流方向, 这与一些文献中实验结果相一致. 对于发散竞争过程, 择优取向枝晶能够淘汰非择优取向枝晶, 淘汰过程主要受抽拉速度和优先生长方向的影响. 抽拉速度主要通过影响择优取向枝晶新增一次枝晶臂数目以及平均枝晶臂间距来改变枝晶间的竞争生长过程. 此外, 枝晶的优先生长方向对于枝晶间的竞争过程也具有重要的影响.

三维镍基高温合金的模拟结果显示, 当枝晶臂间距超过稳态区间时, 枝晶会通过发展出的二次枝晶臂来限制周围一次枝晶臂的生长, 进而达到枝晶臂间距的调整.

参考文献

- [1] Boettinger W J, Corell S R, Greer A L, Karam A, Kura W, Rappaz M, Trivedi R 2000 *Acta Mater.* **48** 43
- [2] Shi Y F 2013 *Ph. D. Dissertation* (Beijing: Tsinghua University) (in Chinese) [石玉峰 2013 博士学位论文 (北京: 清华大学)]
- [3] Wang W, Lee P D, McLean M 2003 *Acta Mater.* **51** 2971
- [4] Gandin C A, Rappaz M 1994 *Acta Mater.* **42** 2233
- [5] Yang X L, Dong H B, Wang W, Lee P D 2004 *Mater. Sci. Eng. A* **386** 129
- [6] Dong H B, Lee P D 2005 *Acta Mater.* **53** 659
- [7] Dong H B, Yang X L, Lee P D, Wang W 2004 *J. Mater. Sci.* **39** 7207
- [8] Sanches L B, Stefanescu D M 2004 *Metall. Mater. Trans. A* **35** 2471
- [9] Zhu M F, Stefanescu D M 2007 *Acta Mater.* **55** 1741
- [10] Shi Y F, Xu Q Y, Gong M, Liu B C 2011 *Acta Metall. Sin.* **47** 620 (in Chinese) [石玉峰, 许庆彦, 龚铭, 柳百成 2011 金属学报 **47** 620]
- [11] Walton D, Chalmers B 1959 *Trans. Metall. Soc. AIME* **215** 447
- [12] Zhou Y Z, Volek A, Green N R 2008 *Acta Mater.* **56** 2631
- [13] Zhou Y Z, Jin T, Sun X F 2010 *Acta Metall. Sin.* **46** 1327 (in Chinese) [周亦胄, 金涛, 孙晓峰 2010 金属学报 **46** 1327]
- [14] Li J J, Wang Z J, Wang Y Q, Wang J C 2012 *Acta Mater.* **60** 1478
- [15] Wang Y Q, Wang J C, Li J J 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 118103 (in Chinese) [王雅琴, 王锦程, 李俊杰 2012 物理学报 **61** 118103]
- [16] Yu H L, Lin X, Li J J, Wang Y Q, Huang W D 2013 *Acta Metall. Sin.* **49** 58 (in Chinese) [宇红雷, 林鑫, 李俊杰, 王理林, 黄卫东 2013 金属学报 **49** 58]
- [17] Nastac L 1999 *Acta Mater.* **47** 4253
- [18] Pan S Y, Zhu M F 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** S278 (in Chinese) [潘诗琰, 朱鸣芳 2009 物理学报 **58** S278]
- [19] Pan S Y, Zhu M F 2010 *Acta Mater.* **58** 340
- [20] Li B 2013 *Ph. D. Dissertation* (Beijing: Tsinghua University) (in Chinese) [李斌 2013 博士学位论文 (北京: 清华大学)]
- [21] Esaka H, Shinozuka K, Tamura M 2005 *Mater. Sci. Eng. A* **413–414** 151
- [22] Hunt J D, Lu S Z 1996 *Metall. Mater. Trans. A* **27** 611
- [23] D'souza N, Ardakani M G, Wagner A, Shollock B A, Mclean M 2002 *J. Mater. Sci.* **37** 481
- [24] Zhu M F, Hong C P 2001 *ISIJ Int.* **41** 436
- [25] Yang C B, Liu L, Zhao S B, Wang N, Zhang J, Fu H Z 2013 *J. Alloys. Comp.* **573** 170
- [26] Zhang X L, Zhou Y Z, Jin T, Sun X F, Liu L 2013 *J. Mater. Sci. Technol.* **29** 879
- [27] Lee P D, Chirazi A, Atwood R C, Wang W 2004 *Mater. Sci. Eng. A* **365** 57
- [28] D'Souza N, Jennings P A, Yang X L, Dong H B, Lee P D, Mclean M 2005 *Metall. Mater. Trans. B* **36B** 657

Simulation of dendritic competitive growth during directional solidification using modified cellular automaton method*

Chen Rui Xu Qing-Yan[†] Liu Bai-Cheng

(School of Materials Science and Engineering, Key Laboratory for Advanced Materials Processing Technology, Ministry of Education, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

(Received 16 February 2014; revised manuscript received 16 May 2014)

Abstract

Investigating the dendritic competitive growth mechanism is of great importance for directional solidification, and the numerical simulation technique is regarded as an effective approach to a description of microstructural evolution. Therefore, a modified cellular automaton model with decentered square algorithm is developed for quantitatively simulating the dendritic competitive growth process. The model takes into account the simplified thermal field, solute diffusion, growth kinetics, etc., and the solid fraction increment calculation is achieved through local level rule method. The model is successfully used to describe the dendrites with various growth orientations and its availability in simulating dendritic competitive growth is verified by comparing with the experimental results of transparent alloy. For the nickel-based superalloy, the simulated results reveal that in the case of converging dendrites, the unfavorably oriented dendrite is able to overgrow the favorably oriented dendrite, which is dependent on the preferential growth angle. For the divergence case, the favorably oriented dendrite can overgrow the unfavorably oriented dendrite through side branching at the grain boundary. The competitive growth process is mainly controlled by the pulling rate and the preferential growth angle. Furthermore, the model is successfully extended to the simulation of three-dimensional dendritic competitive growth.

Keywords: cellular automaton, directional solidification, competitive growth, nickel-based superalloy

PACS: 81.10.-h, 64.70.-D, 61.50.Ah

DOI: [10.7498/aps.63.188102](https://doi.org/10.7498/aps.63.188102)

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2011CB706801), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51374137, 51171089), the High Technology Research and Development Program of China (Grant No. 2007AA04Z141) and the National Science and Technology Major Projects, China (Grant Nos. 2012ZX04012-041-04, 2011ZX04014-052).

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