

过冷熔体中枝晶生长的相场法数值模拟^{*}

于艳梅 杨根仓 赵达文 吕衣礼

(西北工业大学凝固技术国家重点实验室,西安 710072)

A. Karma

(Department of Physics and Center for Interdisciplinary Research on Complex Systems, Northeastern University, Boston, Massachusetts 02115, USA)

C. Beckermann

(Department of Mechanical Engineering, The University of Iowa, Iowa city, IA 52242, USA)
(2001 年 6 月 1 日收到, 2001 年 7 月 3 日收到修改稿)

利用相场法模拟了过冷纯金属熔体中的枝晶生长过程,研究了各向异性、界面动力学、热扩散和界面能对枝晶生长的影响.结果表明,热噪声可以促发侧向分支的形成,但不影响枝晶尖端的稳态行为.随着各向异性的增加,枝晶尖端生长速度增加,尖端半径减小.当界面动力学系数减小及在界面动力学系数小于 1 的条件下热扩散系数减小时,枝晶尖端生长速度随之减小,而尖端半径相应增大.界面能趋于增大枝晶尺度并保持界面在扰动下的稳定,界面能越大,形成侧向分支的趋势越小.

关键词:过冷,枝晶生长,相场法,数值模拟

PACC:6150,6470,8140

1 引 言

迄今为止,对于深过冷熔体中的枝晶生长行为的研究尚有许多问题急待解决,而纯数学解析和物理实验已无力解决这些问题^[1].近年来,随着计算机技术和计算材料科学的迅速发展,使人们可以借助数值模拟方法真实再现枝晶生长过程,从而完成过冷熔体中枝晶生长行为的研究^[2].基于尖锐界面模型的传统枝晶生长模拟必须准确跟踪复杂固-液界面,计算难度较大.近年来在国际上兴起的相场法通过建立相场模型,避免了跟踪复杂界面的困难而成为模拟枝晶生长的一种有效方法.然而,国内尚未见有关相场法模拟枝晶生长过程的报道.作为相场法数值模拟研究工作的起点,本文利用相场法模拟了过冷纯金属熔体中的枝晶生长过程,并研究了界面微观效应和热扩散对枝晶生长的影响.

2 纯金属的相场模型

相场法通过引入相场变量 ϕ ,将界面抽象为从

$\phi = 1$ 到 -1 光滑渐变、具有一定厚度的空间扩散区域($\phi = 1$ 表示固相; $\phi = -1$ 表示液相).这样,利用 ϕ 变量可以准确建立描述界面微观效应的相场方程,并与热扩散方程耦合就构造了纯金属熔体中枝晶生长的相场模型,其一般通式表示如下:

$$\tau(\theta) \partial_t \phi = \nabla \cdot (W(\theta)^2 \nabla \phi) - \frac{\partial F(\phi, \lambda u)}{\partial \phi} + \partial_x \left(|\nabla \phi|^2 W(\theta) \frac{\partial W(\theta)}{\partial \phi_x} \right) + \partial_y \left(|\nabla \phi|^2 W(\theta) \frac{\partial W(\theta)}{\partial \phi_y} \right), \quad (1)$$

$$\partial_t u = D \nabla^2 u + \frac{1}{2} \partial_t h(\phi), \quad (2)$$

式中 t 为时间; F 为体系的自由能; λ 为表示相场与温度场耦合强度的常量; ϕ_x, ϕ_y 为变量 ϕ 对坐标 x 和 y 的求导; u 为无量纲温度; D 为热扩散系数; $h(\phi)$ 为考虑枝晶生长时界面释放潜热而构造的函数.

通过定义 $W(\theta) = W_0 a_s(\theta)$ 及 $\tau(\theta) = \tau_0 a_s(\theta)^2$ 引入界面各向异性. W_0 为界面厚度; τ_0 为表征固液界面原子运动时间的变量; $a_s(\theta)$ 为各向异性因子,其表达式为

^{*} 国家自然科学基金(批准号:59971037)及西北工业大学学位论文创新基金资助的课题.

$$a_s(\theta) = 1 + \varepsilon \cos[k(\theta - \theta_0)], \quad (3)$$

式中 θ 为枝晶主轴方向与界面法向之间的夹角, $\theta = \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}$; θ_0 为枝晶主轴与界面切向的夹角, 文中取 $\theta_0 = 45^\circ$; ε 为各向异性指数; k 为各向异性的模数, 文中取 $k = 4$.

(1)与(2)式构成了纯金属熔体的相场模型. 为了求解该模型, 需要确定相场参数 $W(\theta)$, $\kappa(\theta)$ 和 λ .

相场法数值模拟中, 当界面厚度 W_0 趋于无穷小时, 相场模型将归结为尖锐界面模型, 称之为渐进分析. 利用 Karma 与 Rappel^[3]提出的薄界面渐进分析, 将相场参量与尖锐界面模型中的参量联系起来, 即

$$\kappa(n) = a_1 \frac{W(\theta)}{\lambda}, \quad (4)$$

$$\beta(\theta) = \frac{a_1}{\lambda} \frac{\tau_0}{W(\theta)} \left[1 - a_2 \lambda \frac{W(\theta)}{D\tau_0} \right], \quad (5)$$

式中 $\kappa(\theta)$ 和 $\beta(\theta)$ 分别为考虑了各向异性的毛细长度和界面动力学系数. (4)–(5)式等号左边为材料参量, 右边为相场参量. 这样, 对于一定的材料, 界面厚度 W_0 确定后, 可根据(4)–(5)式来确定相场参量 $W(\theta)$, $\kappa(\theta)$ 和 λ .

3 相场模型的数值求解

3.1 初始条件和边界条件

假设初始晶核半径为 r , 则

$$x^2 + y^2 \leq r^2 \text{ 时, } \phi = 1, u = 0; \quad (6)$$

$$x^2 + y^2 > r^2 \text{ 时, } \phi = -1, u = -\Delta, \quad (7)$$

式中 x, y 分别为横、纵坐标; Δ 为无量纲过冷度, u 为无量纲温度. 为了减少计算量, 将初始晶核置于计算区域的一角, 取其 1/4 开始计算.

在计算区域的边界上, ϕ 和 u 采用 Neumann 边界条件.

3.2 数值求解方法

利用有限差分法求解(1)和(2)式.(1)式采用 Euler 算法, (2)式采用 ADI 算法. 为了提高计算效率, 采用双重均匀剖分网格, 即温度场和相场采用不同的空间步长. 在利用(1)式求解相场时, 只对界面附近相场梯度变化较大的节点进行迭代. 初始网格节点数为 200×200 , 随着计算的进行, 枝晶长大, 网格节点数逐渐增加.

3.3 参量的取值

1. 界面厚度的取值 相场法中, 界面厚度 W_0 的取值不仅影响计算效率, 而且影响模拟结果的可靠性. 为了获得可靠的模拟结果, W_0 的取值应足够小. 本文通过逐渐减少 W_0 直到获得光滑的枝晶形貌(在没有扰动的情况下)及收敛的枝晶尖端生长速度与尖端半径的方法来确定合理的 W_0 值.

2. 空间步长和时间步长的取值 为了获得可靠和稳定的计算结果, 空间步长 ΔX 和时间步长 Δt 应分别满足 $\Delta X \leq W_0$ 和 $\Delta t \leq \frac{\tau_0 \Delta X^2}{5 W_0^2}$.

4 结果与讨论

4.1 过冷熔体中枝晶生长的二维形貌及其温度场

图 1 为计算获得的 1/4 枝晶形貌, 即沿 45° 方向的一个一次枝晶臂. 图 1(a) 为相场, 其中黑色为固相, 白色为液相. 在无扰动条件下, 枝晶臂非常光滑, 没有侧向分支. 图 1(b) 为温度场. 由图 1 可见, 固相的温度较高, 经过固液之间的热扩散层, 温度降低到液相的初始温度. 枝晶尖端温度梯度最大, 根部则最小. 图 2 为同时获得的该枝晶的无量纲尖端生长速度 V_{tip} 和尖端半径 R_{tip} . 由图 2 可见, 随着时间的推

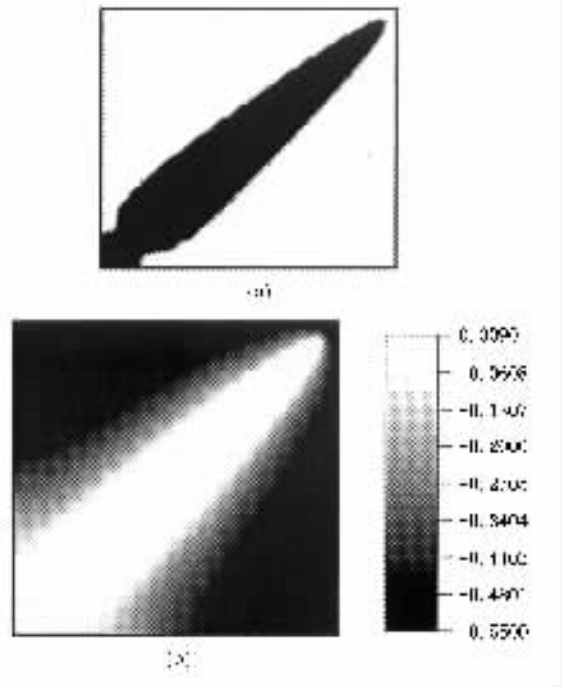


图 1 计算获得的光滑枝晶及其温度场 ($\Delta = 0.65$, $\varepsilon = 0.05$, $D = 4$, $d_0 = 0.139$, $\beta_0 = 0$, $W_0 = 7.19 d_0$) (a) 为相场 (b) 为温度场

移, V_{tip} 和 R_{tip} 逐渐收敛. 枝晶尖端进入稳态. 收敛后的 V_{tip} 与在相同条件下的微观可解性(MSC)结果^[3]接近, 从而验证了本文的计算结果.

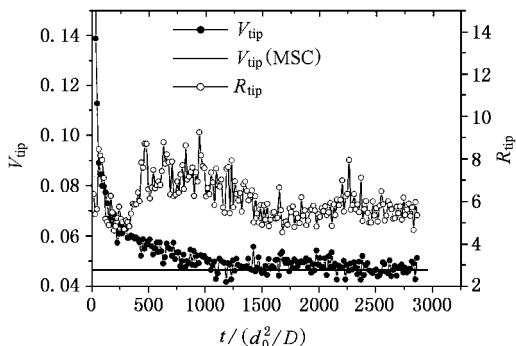


图2 无量纲枝晶尖端生长速度 V_{tip} 和尖端半径 R_{tip} 随时间 t 推移而收敛

在相场法模拟枝晶生长时, 数值误差将在界面前沿形成扰动. 在合理选取参量取值的情况下, 扰动不会随时间增强, 因此图1获得的枝晶是光滑的. 图3为温度场中加入热噪声后获得的枝晶形貌及其相应的温度场. 热噪声在界面前沿形成持续扰动, 引发了侧向分支. 由图3(a)可见, 枝晶具有发达的侧向分支. 在枝晶根部, 二次分支的生长受到计算区域边界的阻碍, 在其端部形成三次分支. 此外, 在二次枝

晶间距较大的区域, 也出现三次分支. 三次分支的生长阻碍了附近二次分支的生长, 从而调节二次枝晶间距. 从图3(b)可见, 热噪声的引入使最高温度大于图1(b)的最高温度, 最低温度低于初始过冷温度, 但这并未改变枝晶中的温度分布规律. 即固相具有最高的温度, 热量从固相向液相扩散. 在一次枝晶臂及二次分支的尖端具有最大的温度梯度, 在二次分支的根部温度梯度最小. 通过比较加入热噪声和未加热噪声两种条件下迭代相同时间后获得的枝晶生长形貌发现, 尽管引入热噪声后, 枝晶在距尖端3—4个扰动波长以后出现侧向分支, 但两种情况下获得的枝晶尖端相场重叠, 即它们的 V_{tip} 和 R_{tip} 相同. 这说明热噪声的引入引发了侧向分支, 但不改变枝晶尖端稳定行为.

4.2 界面特性及热物性参数对枝晶生长的影响

1. 各向异性系数对枝晶生长的影响 图4研究了各向异性系数 ϵ 对枝晶尖端稳态行为的影响. 图4(a)表明, 随着 ϵ 的增大, 尖端生长速度 V_{tip} 呈线性增大, 尖端半径 R_{tip} 则以抛物线方式减小. 图4(b)与(c)为计算所得不同 ϵ 值下的 Peclet 数和界面稳定性系数 σ^* 与 Ivantsov 理论和临界稳定性(MS)理论计算结果^[4]的比较. 结果表明, 利用相场法获得 Peclet 数随着 ϵ 的增大而减小, σ^* 随着 ϵ 的增大而增大. 并且随着 ϵ 的减小, Peclet 数和 σ^* 逐渐逼近 Ivantsov 理论和临界稳定性(MS)理论的计算结果. 当 $\epsilon = 0.007$ 时, 三者数值一致. 上述结果表明, ϵ 影响枝晶尖端稳态行为. Ivantsov 理论和临界稳定性理论因忽略 ϵ 对枝晶尖端作用的影响而只适用于 ϵ 较低的情况. 微观可解性(MSC)理论指出枝晶尖端稳态行为与 ϵ 相关^[5], 因此图4所示的结果与微观可解性理论一致.

2. 界面动力学系数对枝晶尖端生长速度和半径的影响 随着初始过冷度的增大和枝晶生长速度的提高, 在界面前沿形成的动力学过冷度增大, 从而影响枝晶生长. 图5分析了深过冷熔体中, 界面动力学系数 β_0 对枝晶尖端生长速度 V_{tip} 和尖端半径 R_{tip} 的影响. 由图5可知, 随着 β_0 的增大, V_{tip} 减小, R_{tip} 增大.

3. 热扩散系数的影响 图6比较了热扩散系数 D 取不同值时获得的枝晶尖端生长速度 V_{tip} 和尖端半径 R_{tip} 与时间的关系. 图6表明, D 越大, V_{tip} 越小, R_{tip} 越大. 文献6指出, 当 β_0 大于1时, D 越大,

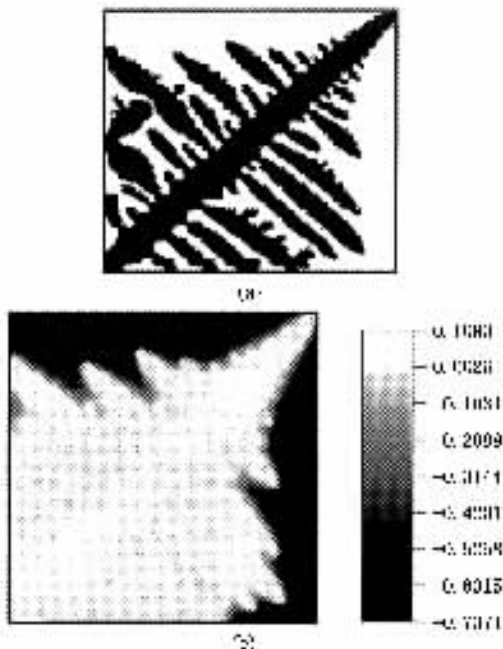


图3 引入热噪声后获得的枝晶形貌和温度场 ($\Delta = 0.65$, $\epsilon = 0.05$, $D = 4$, $d_0 = 0.139$, $\beta_0 = 0$, $W_0 = 7.19 d_0$) (a)为相场 (b)为温度场

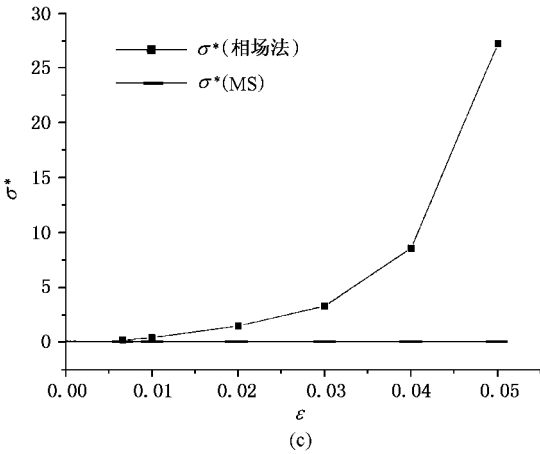
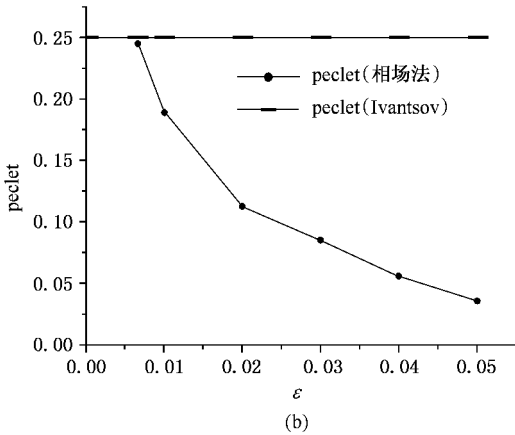
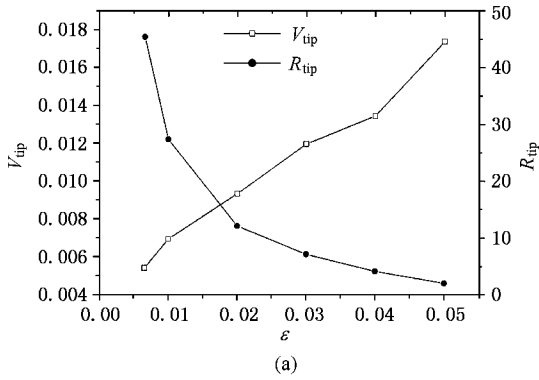


图 4 各向异性系数 ϵ 对枝晶尖端稳态行为的影响 ($\Delta = 0.55, D = 4, d_0 = 0.139, \beta_0 = 0, W_0 = 7.19 d_0$) (a) 为 ϵ 对枝晶尖端生长速度 V_{tip} 和尖端半径 R_{tip} 的影响 (b) 为 ϵ 对 Peclet 数的影响 (c) 为 ϵ 对 σ^* 的影响

V_{tip} 越大, 当 β_0 小于 1 时, 则反之. 由于本文 β_0 小于 1, 故计算结果与文献 [6] 一致.

4. 界面能对枝晶形貌的影响 图 7 给出了毛细长度 d_0 取不同值时计算获得的枝晶形貌. 根据界面能公式 $\sigma = \frac{d_0 L^2}{T_M c_p}$ (L 为潜热, T_M 为熔点, c_p 为等压

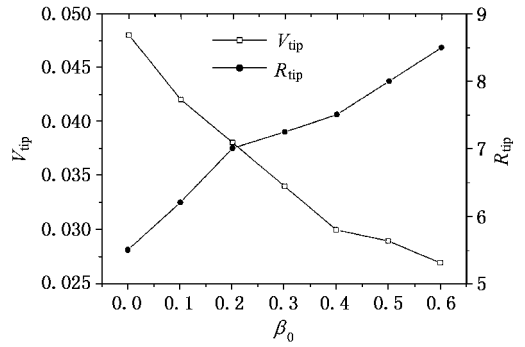


图 5 界面动力学系数 β_0 对枝晶尖端生长速度 V_{tip} 和半径 R_{tip} 的影响 ($\Delta = 0.80, D = 4, d_0 = 0.238, \epsilon = 0.05, W_0 = 1-3d_0$)

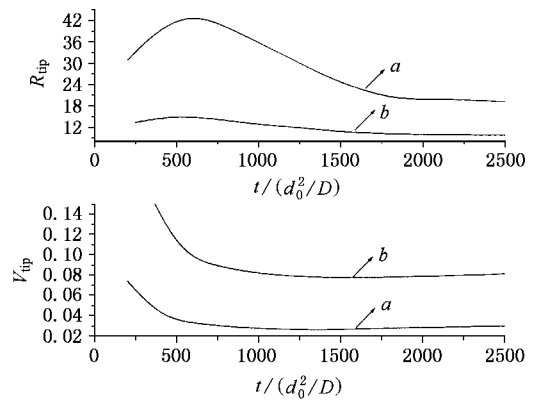


图 6 热扩散系数 D 对枝晶尖端生长速度 V_{tip} 和尖端半径 R_{tip} 的影响 ($\Delta = 0.80, \epsilon = 0.05, d_0 = 1.154, \beta_0 = 0.6, W_0 = 7.19 d_0$) 曲线 a 为 $D = 0$, 曲线 b 为 $D = 1$

热容) 可得, 当其他材料参量给定时, σ 取决于 d_0 值. 图 7 中, b 枝晶的 d_0 大于 a 枝晶的值, 所以

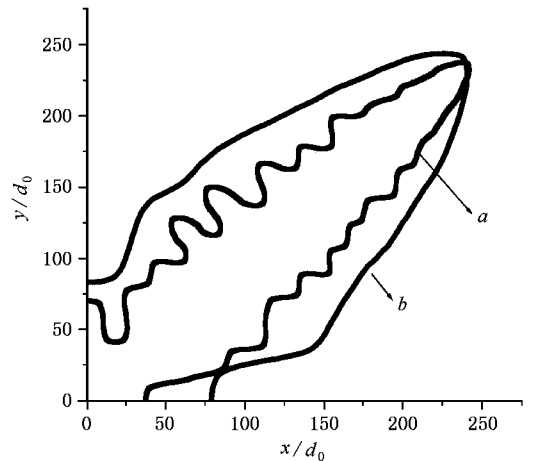


图 7 不同毛细长度 d_0 下的枝晶形貌 ($\Delta = 0.55, D = 4, \epsilon = 0.05, \beta_0 = 0, W_0 = 7.19 d_0$) 曲线 a 为 $d_0 = 0.139$, 曲线 b 为 $d_0 = 1.09$

b 枝晶的 σ 较 a 枝晶大,其相应的计算结果是 b 枝晶的外形尺度大于 a 枝晶.此外,在同等强度的热噪声下, a 枝晶界面失稳,形成侧向分支,而 b 枝晶界面光滑,未形成侧向分支.这表明 σ 趋于增大枝晶尺度并在扰动下保持界面的稳定. σ 越大,枝晶尺度越大,形成分支的趋势越小,这与 Mullins 和 Sekerka^[7]提出的表面张力稳定化效应一致.

纵观以上计算结果,可以看出本文的主要结果与 Ivantsov 理论、临界稳定性理论和微观可解性理论等经典枝晶生长理论相一致.本文以纯物质为例,未考虑溶质、流场及应力场,对枝晶生长的相场研究方法进行了初步的探索.实际上为表述枝晶生长的真实物理过程,还应考虑凝固过程中诸多复杂因素,其

相场模型仍需进一步完善.

5 结 论

1. 引入热噪声可以获得形貌逼真的具有高次分支的枝晶.热噪声引发侧向分支,但不改变枝晶尖端稳态行为.

2. 随着各向异性的增强,枝晶尖端生长速度 V_{tip} 增加,尖端半径 R_{tip} 减小.

3. 随着界面动力学系数 β_0 和热扩散系数 D (当 $\beta_0 < 1$ 时)减小时, V_{tip} 减小, R_{tip} 增大.

4. 界面能 σ 趋于增大枝晶尺度并保持界面在扰动下的稳定, σ 越大,形成侧向分支的趋势越小.

[1] S. C. Huang, M. E. Glicksman, *Acta. Metall.*, **29**(1981), 710.

[2] J. L. Liu, Y. Q. Zhang, H. W. Luo *et al.*, *Acta Phys. Sin.*, **47**(1998), 275 (in Chinese)[刘佳璐、张英青、罗惠文等, *物理学报*, **47**(1998), 275].

[3] A. Karma, W. J. Rappel, *Phys. Rev.*, **E53**(1996), R3017.

[4] W. Kurz, D. J. Fisher, *Fundamentals of Solidification*(Trans Tech Publications, Aedermannsdorf-Switzerland, 1984), p. 199.

[5] D. A. Kessler, J. Koplik, H. Levine, *Adv. Phys.*, **37**(1988), 255.

[6] R. Gonzalez-Cinca, L. Ramirez-Piscina, J. Casademunt, *J. Cryst. Growth*, **193**(1998), 712.

[7] W. W. Mullins, R. F. Sekerka, *J. Appl. Phys.*, **35**(1964), 444.

NUMERICAL SIMULATION OF DENDRITIC GROWTH IN UNDERCOOLED MELT USING PHASE-FIELD APPROACH^{*}

YU YAN-MEI YANG GEN-CANG ZHAO DA-WEN LÜ YI-LI

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

A. KARMA

(*Department of Physics and Center for Interdisciplinary Research on Complex Systems , Northeastern
University , Boston , Massachusetts 02115 , USA*)

C. BECKERMANN

(*Department of Mechanical Engineering , the University of Iowa , Iowa City , IA 52242 , USA*)

(Received 1 June 2001 ; revised manuscript received 3 July 2001)

ABSTRACT

Using the phase-field approach , the dendritic growth in the undercooled pure metal melt is simulated , and the dependence of dendritic growth upon the anisotropy , interfacial kinetics , thermal diffusivity and surface energy is investigated. The calculated results indicate that the heat noise can trigger the growth of side-branches , however this does not influence the selection of the tip operating state. The dimensionless tip velocity increases and the tip radius decreases with the increase of anisotropy . Correspondently , the dimensionless tip velocity decreases and tip radius increases when the interfacial kinetics or thermal diffusivity (when the interface kinetic coefficient is less than 1) increases . The surface energy tends to increase the size of dendrite and keeps the stability of interface under the disturbance of heat noise. The greater the surface energy , the weaker the tendency to form side-branches .

Keywords : undercooling , dendritic growth , phase-field approach , numerical simulation

PACC : 6150 , 6470 , 8140

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 59971037) and by the Doctoral Dissertation Innovation Foundation of Northwestern Polytechnical University , China .