

相场参数对强制流动下枝晶生长影响的模拟研究

陈 志, 陈长乐, 郝丽梅

(西北工业大学, 陕西 西安 710072)

摘 要: 基于相场方法对强制流动下的纯物质凝固过程进行数值模拟, 研究流速、过冷度、耦合参数、各向异性参数对枝晶生长的影响。结果表明: 强制流动下的晶核生长为非对称的枝晶, 迎流方向的枝晶臂尖端生长得到促进、逆流方向的受到抑制、垂直流方向则影响很小; 随着过冷度、耦合参数、各向异性值的增大, 3 个方向的枝晶臂生长速度均增加。

关键词: 相场法; 枝晶生长; 尖端速度; 过冷度; 耦合参数; 各向异性

中图分类号: TG 244

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2009)07-1209-05

枝晶生长是材料与应用物理科学中一个重要的研究方向。凝固过程中枝晶的形成至关重要, 是一个复杂的物理过程, 同时熔体流动在凝固过程中不可避免, 它强烈地影响着枝晶形貌和材料的微观和宏观特性^[1,2], 因此理解和掌握强制流动下枝晶生长的规律显得尤为重要。在过去的十几年里, 数值模拟枝晶生长正发挥着越来越重要的作用^[3,4]。研究人员用相场法^[5]、Level Set 法^[6]、元胞法^[7]、lattice Boltzmann 法^[8]和前沿跟踪法^[9]等数值方法对无流动下的枝晶生长作了大量的研究, 并将这些方法扩展到包含强制流动作用的枝晶生长形貌研究。Tong 等利用相场法^[10]、Zhu 利用元胞法^[11,12]、Zabaras 利用 Level Set 法^[13]、Medvedev 利用 lattice Boltzmann 法^[14]以及 Al-Rawahi N 利用前沿跟踪法^[1,15]等对强制流动下的枝晶生长进行了模拟研究。在这些方法中, 相场法具有避免跟踪复杂的界面, 将曲率的计算、各向异性 and 动力学等影响因素隐性的包含在相场方程中等优点, 逐渐成为一种重要的研究方法^[16]。但在早期的相场法应用中存在很多问题, 其中最重要的就是薄界面厚度 W 需要选择远比毛细管尺度小以满足尖锐界面, 这使得模拟需要很长的计算时间。Karma 和 Rappel 通过选取合适的参数以消除界面动力学效应^[17], 得到与毛细管尺度同一量级的 W , 至此相场法取得很大的进展^[18,19]。本研究基于 Tong 提出的相场模型^[10], 详细讨论流速、过冷度、耦合参数和各向异性值 4 个相场参数对强制流动下枝晶生长形貌的影响。

1 相场模型

本研究采用 Tong 等提出的模型, 其中假定固、液相的扩散系数相等, 材料的物性参数不变, 流体为不可压缩型。 ϕ 代表相场, 其中 $\phi=1$ 为固相, $\phi=-1$ 为液相, 在扩散界面区域 $\phi=-1\sim 1$ 连续变化。相场、温度场、质量守恒方程和动量方程为^[12]:

$$\begin{aligned} \tau(\vec{n}) \frac{\partial \phi}{\partial t} = & \vec{v} \cdot [W(\vec{n})^2 \vec{\nabla} \phi] + \partial_x \left[|\vec{\nabla} \phi|^2 W(\vec{n}) \frac{\partial W(\vec{n})}{\partial (\partial_x \phi)} \right] \\ & + \partial_y \left[|\vec{\nabla} \phi|^2 W(\vec{n}) \frac{\partial W(\vec{n})}{\partial (\partial_y \phi)} \right] + \phi - \phi^3 \\ & - \lambda \theta (1 - \phi^2)^2 \end{aligned} \quad (1)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{1}{2} (1 - \phi) \vec{v} \cdot \nabla \theta = \alpha \nabla^2 \theta + \frac{1}{2} \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \left[\frac{1}{2} (1 - \phi) \vec{v} \right] = 0 \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \partial_i \left[\frac{1}{2} (1 - \phi) \vec{v} \right] + \frac{1}{2} (1 - \phi) \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} = & - \frac{1}{2} (1 - \phi) \nabla P / \rho \\ & + \nabla \cdot [\nu \nabla \left(\frac{1}{2} (1 - \phi) \vec{v} \right)] \\ & + \vec{M}_i^d \end{aligned} \quad (4)$$

式中 $\tau(\vec{n}) = \tau_0 a_s^2(\vec{n})$ 为依赖于方向的驰豫时间, $a_s(\vec{n}) = 1 + \gamma \cos(4\phi)$ 为界面能各向异性函数; γ 为无量纲各向异性参数; 界面厚度 $W(\vec{n}) = W_0 a_s(\vec{n})$, $\vec{n} = -\vec{\nabla} \phi / |\vec{\nabla} \phi|$ 为垂直界面的法线方向; $\phi = \arctan(\partial_y \phi / \partial_x \phi)$ 为界面法线与水平轴间的夹角; $\alpha = \tilde{\alpha} \tau_0 / W_0^2$ 为无量纲化温度扩散系数; $\lambda = \alpha / a_2$ 为耦合系数; 界面驱动力

收到初稿日期: 2008-06-20; 收到修改稿日期: 2008-08-11

基金项目: 国家自然科学基金资助(50331040, 60171034)

作者简介: 陈 志, 男, 1979 年生, 博士生, 讲师, 西北工业大学理学院, 陕西 西安 710072, 电话: 029-88493979, E-mail: c2002z@nwpu.edu.cn

$\bar{M}_i^d = -\frac{1}{4}h(1+\phi)^2(1-\phi)\bar{V}/w_0^2, h = 2.757, p, \rho$ 和 v 分别为压强, 密度和动力学黏度; $pr=v/\alpha$ 为 Prandtl 数; t 为时间; 以下变量通过 $V\tau_0/W_0 \rightarrow V, v\tau_0/(W_0) \rightarrow v, (p/\rho)(\tau_0/W_0)^2 \rightarrow (p/\rho)$ 进行无量纲化。

无量纲化的温度变量由式(5)给出:

$$\theta = \frac{T - T_m}{L/C_p} \tag{5}$$

式中 L 为凝固释放潜热, C_p 为定压比热容。

根据 Gibbs-Thomson 方程^[17]将式(1)引入到尖锐界面模型中, 具体为:

$$\theta = -d_0[W(\phi) + W''(\phi)]\kappa - \beta(\phi)v_n \tag{6}$$

式中 κ 为界面曲率半径, d_0 和 β 分别为毛细管长度和界面动力学系数, 其表达式分别为:

$$d_0 = a_1W_0/\lambda \tag{7}$$

$$\beta = a_1 \frac{\tau(\bar{n})}{\lambda W} [1 - a_2 \frac{\lambda W^2}{\tau(\bar{n})\alpha}] \tag{8}$$

式(8)中的 a_1 和 a_2 取值依赖于相场模型中双势阱和其它函数的选择; 根据文献[5]选取 $a_1=0.8839, a_2=0.6267$ 。

2 数值求解

2.1 初始条件和边界条件

模拟区域如图 1 所示。初始晶核半径为 r 并置于区域中心, 过冷熔体以一均匀流速 U 从左边界进入并从右边界流出, 区域的上和下边界采用周期性的边界条件, 并有: $\begin{cases} x^2 + y^2 \leq r^2, \phi = 1, \theta = 0 \\ x^2 + y^2 > r^2, \phi = -1, \theta = \Delta \end{cases}$

式中 x, y 分别代表横轴(100)和纵轴(010)晶轴方向^[18,19], 无量纲流速采用 Ud_0/α 。

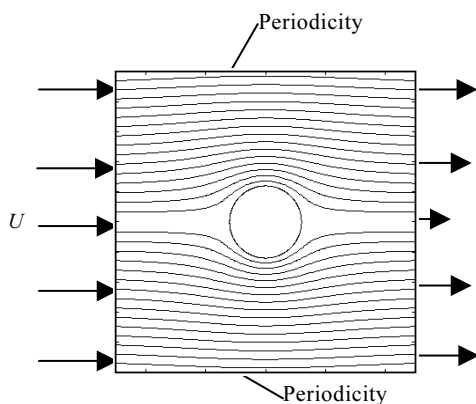


图 1 模拟区域及边界条件示意图

Fig.1 Simulation domain and boundary conditions

2.2 数值方法

式(1)~式(4)采用有限差分离散, 时间步长采用 Euler 算法, $\nabla^2\phi$ 用最近邻和次近邻的九点公式来离散以减小离散中所引起格点的各向异性^[5]。网格区域选为 500×500 , 时间步长 $\Delta t = 0.008$, 空间步长 $\Delta x = \Delta y = 0.4, \tau_0 = 1, d_0 = 0.139, W_0 = 1, \alpha = 4, \Delta = -0.55, \lambda = 6.383, pr = 0.035, \rho = 8.9, \gamma = 0.05, t = 20\ 000\Delta t$, 如不说明以上参数均不变^[11]。

3 结果与讨论

3.1 流速的影响

图 2 为不同流速 Ud_0/α 下等温线围绕枝晶相场形貌图。从图中可以看出, 在流动的作用下, 晶核生长为非对称的枝晶。随着流速的增强, 迎流臂枝晶周围的等温线变得密集, 温度梯度增加, 尖端速度增大, 其生长得到不断促进; 垂直流方向的温度梯度基本不变, 尖端速度也未发生明显变化; 而逆流方向的等温线变得稀疏, 温度梯度减小, 尖端速度减慢, 生长受到抑制的程度逐渐加强。其原因主要是由于迎流臂生长产生的大量潜热被流体携带绕过垂直臂聚集到逆流枝晶臂周围, 结果逆流枝晶臂的温度梯度变小, 生长减慢。以上结论与文献[20]一致。

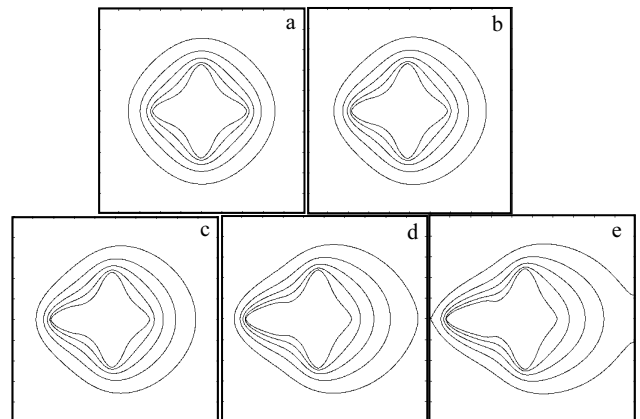


图 2 不同流速 Ud_0/α 下等温线围绕枝晶相场形貌图

Fig.2 Interface shape of isotherms around the phase field at various forced flow: (a) 0.01; (b) 0.06; (c) 0.09; (d) 0.16; and (e) 0.20

图 3 为枝晶臂尖端相对稳态速度与流速的关系图。随着流速的增大, 迎流臂尖端相对稳态速度线性递增, 而逆流臂和垂直臂尖端相对稳态速度则递减。对比流速 0.2 与 0.01 得: 迎流臂尖端相对稳态速度增大了 0.87 倍, 逆流臂减小了 53/100, 垂直臂减小了 1/10。

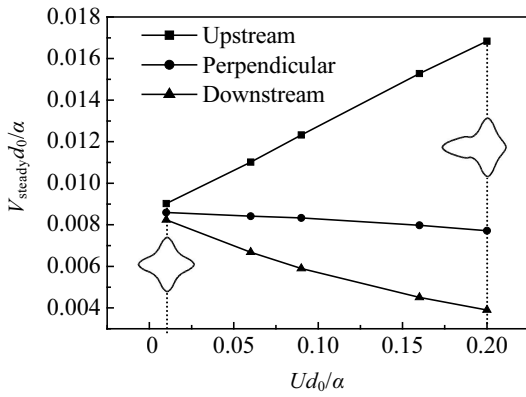


图 3 迎流，垂直流和逆流枝晶臂尖端相对稳态速度与流速关系图

Fig.3 Tip relative steady velocities versus time for upstream, perpendicular and downstream dendritic arms

3.2 过冷度的影响

图 4 为 $Ud_0/\alpha=0.09$ ，不同过冷度下等温线围绕枝晶相场形貌图。随着过冷度的增大，枝晶由近似对称的枝晶变为非对称的枝晶，同时枝晶两臂间的曲率也逐渐增大。

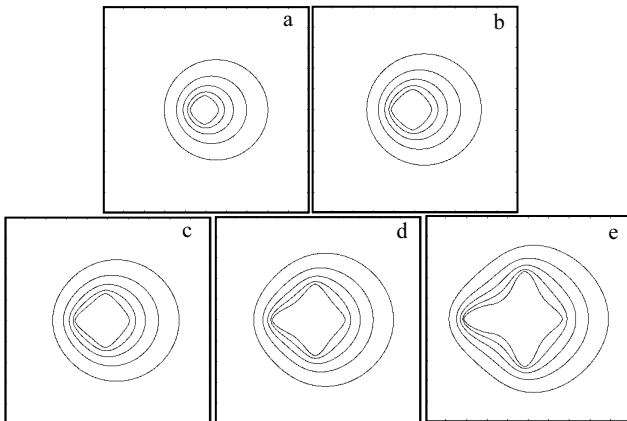


图 4 $Ud_0/\alpha=0.09$ ，不同过冷度 Δ 下等温线围绕枝晶相场形貌图

Fig.4 Interface shape of isotherms around the phase field for $Ud_0/\alpha=0.09$, at various undercooling: (a) -0.15 ; (b) -0.25 ; (c) -0.35 ; (d) -0.45 ; and (e) -0.55

图 5 为不同过冷度下枝晶臂尖端速度与时间的关系图。从图中可以看出，随着过冷度的增大，迎流，垂直流和逆流枝晶臂尖端速度均增加。所不同的是，迎流臂尖端速度增加趋势最大，垂直流臂次之，逆流枝晶臂的最小，正如图 6 所示。进一步对比过冷度 0.55 与 0.15 得出：迎流臂尖端相对稳态速度增大 4.95 倍，垂直臂增大 4.08 倍，逆流臂增 3.28 倍。

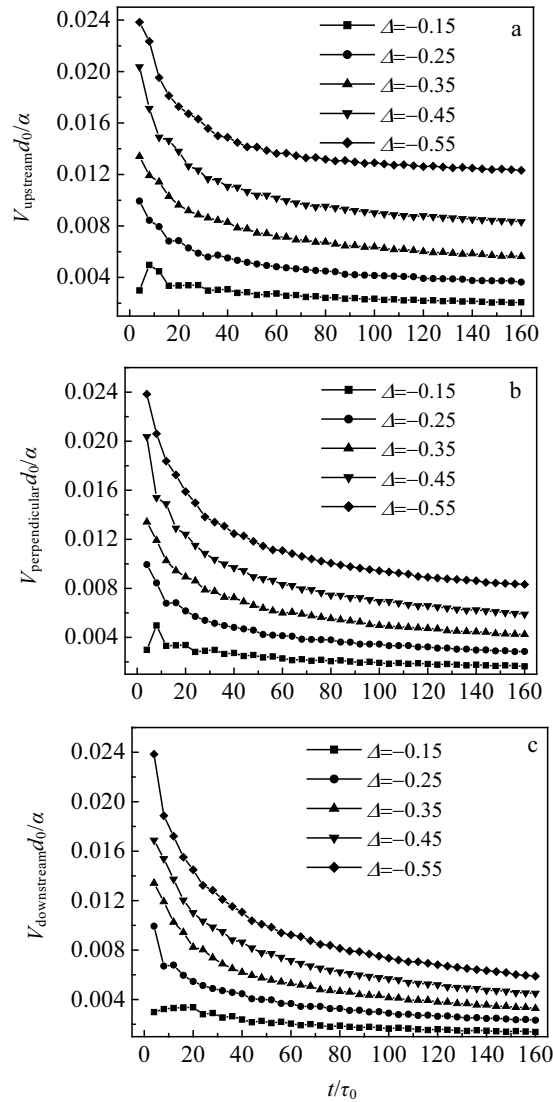


图 5 不同过冷度下不同方向枝晶臂尖端速度与时间关系图
Fig.5 Tip velocities versus time for different dendritic arm directions at various undercooling: (a) upstream; (b) perpendicular; and (c) downstream

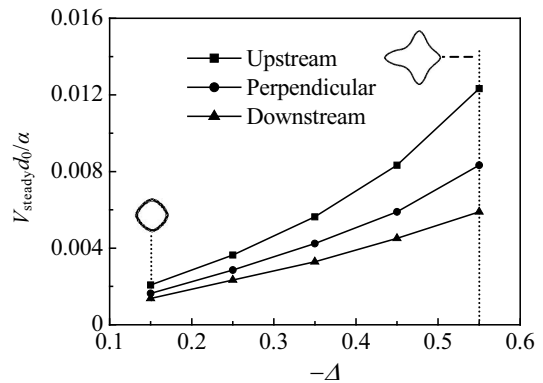


图 6 不同方向枝晶臂尖端相对稳态速度与负过冷度关系图
Fig.6 Tip relative steady velocities versus negative undercooling for different dendritic arms directions

3.3 耦合参数的影响

耦合参数是相场模拟中另一个重要参数,它对枝晶生长形貌有着很大的影响。图 7 为流速 0.09,不同耦合参数下的等温线围绕枝晶相场形貌图。从图可以看出:迎流臂周围的等温线最密集,垂直流方向的次之,逆流方向的最稀疏。随着耦合参数的增大,迎流枝晶臂尖端的生长速度增长最快,垂直流的次之,逆流方向的增长最慢,这一结论可从图 8 不同方向枝晶臂尖端相对稳态速度与耦合参数关系图直接看出。对比耦合参数 7.979 与 1.596 得出:迎流臂尖端相对稳态速度增大 1.36 倍,垂直臂增大 0.79 倍,逆流臂增大 0.46 倍。

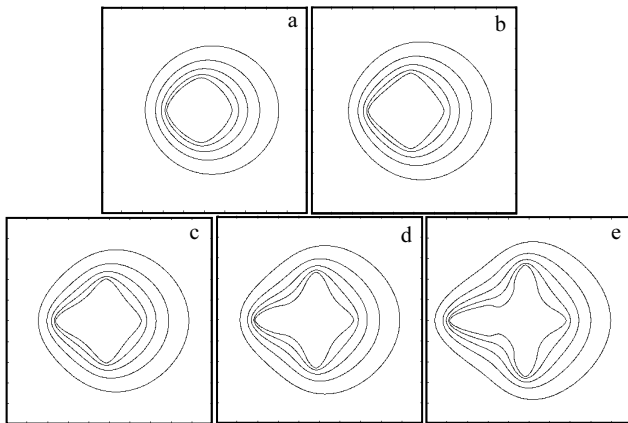


图 7 $Ud_0/\alpha=0.09$,不同耦合参数 λ 下等温线围绕枝晶相场形貌图
Fig.7 Interface shape of isotherms around the phase field for $Ud_0/\alpha=0.09$, at various coupling parameter: (a) 1.596; (b) 3.192; (c) 4.787; (d) 6.383; and (e) 7.979

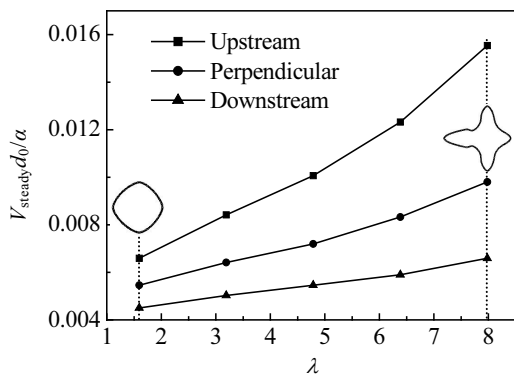


图 8 不同方向枝晶臂尖端相对稳态速度与耦合参数关系图
Fig. 8 Tip relative steady velocities versus coupling parameter for different dendritic arms directions

3.4 各向异性的影响

通常 γ 表示固/液界面的表面张力和界面动力学各向异性程度,反映原子间或分子间的平均结合能与局

部界面的动力学方向性的依赖程度, γ 控制着枝晶的生长方向^[21]。

图 9 为流速 0.09,不同各向异性值下的等温线围绕枝晶相场形貌图。随着各向异性值的增大,枝晶由一圆形枝晶变成非对称的枝晶。当 $\gamma=0$ 时,无流动作用下的枝晶生长为一圆形^[22],而在有流动的作用,迎流方向的枝晶臂生长最快,且随着各向异性值的增强,这一现象更加明显。图 10 为不同方向枝晶臂尖端稳态速度与各向异性值关系图。从图中看出 3 个方向的枝晶臂尖端相对稳态速度随着各向异性值的增大均呈递增趋势,进一步对比各向异性 0.06 与 0,迎流臂尖端相对稳态速度增大了 1.15 倍,垂直臂增大 0.64 倍,逆流臂增大 0.51 倍。

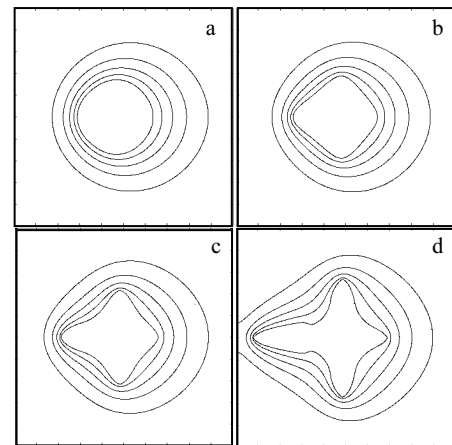


图 9 $Ud_0/\alpha=0.09$,不同各向异性 γ 下等温线围绕枝晶相场形貌图
Fig.9 Interface shape of isotherms around the phase field for $Ud_0/\alpha=0.09$, at various anisotropy parameter: (a) 0; (b) 0.02; (c) 0.04; and (d) 0.06

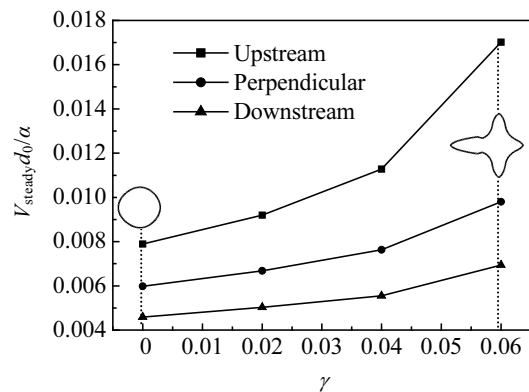


图 10 不同方向枝晶臂尖端相对稳态速度与各向异性值的关系图
Fig. 10 Tip relative steady velocities versus anisotropy for different dendritic arms directions

4 结 论

在强制流动作用下晶核生长为非对称的枝晶。随着流速的增大, 枝晶由近似对称的枝晶变为非对称的枝晶: 迎流臂枝晶尖端生长得到不断促进, 逆流方向的受到的抑制程度加强, 而垂直臂方向的无明显影响。过冷度, 耦合参数和各向异性值对不同方向枝晶臂的生长均有促进作用, 其中枝晶尖端相对稳态速度受过冷度的影响最大。

参考文献 References

- [1] Beckermann C, Diepers H J, Steinbach I *et al.* *J Comput Phys*[J], 1999, 154: 468
- [2] Lan C W, Liu C C, Hsu C M. *J Comput Phys*[J], 2002, 178: 464
- [3] Boettinger W J, Warren J A, Beckermann C *et al.* *Annu Rev Mater Res*[J], 2002, 32: 163
- [4] Ramirez J C, Beckermann C. *Acta Materialia*[J], 2005, 53: 1721
- [5] Karma A, Rappel W J. *Phys Rev E*[J], 1996, 53(4): R3017
- [6] Kim Y T, Goldenfeld N. *Physical Review E*[J], 2000, 62(2): 2471
- [7] Gandin C A, Rappaz M. *Acta Metal*[J], 1994, 42(7): 2233
- [8] Miller W, Succi S, Mansutti D. *Phys Rev Lett*[J], 2001, 86: 3575
- [9] Juric D, Tryggvasson G. *J Comp Phys*[J], 1996, 123: 127
- [10] Tong X, Beckermann C *et al.* *Phys Rev E*[J], 2000, 61(1): R49
- [11] Zhu Mingfang(朱鸣芳) *et al.* *Science in China Series E(中国科学 E)*[J], 2005, 35(7): 673
- [12] Zhu M F, Stefanescu D M. *Acta Mater*[J], 2007, 55: 1741
- [13] Zabarar N, Ganapathysubramanian B, Tan L J. *J Comput Phys*[J], 2006, 218: 200
- [14] Medvedev D, Fischaleck T, Kassner K. *Phys Rev E*[J], 2006, 74(3): 031 606
- [15] Al-Rawahi N, Tryggvason G. *J Comput Phys*[J], 2002, 180: 471
- [16] Tan L J, Zabarar N. *J Comput Phys*[J], 2006, 211: 36
- [17] Karma A, Rappel W J. *Phys Rev E*[J], 1998, 57(4): 4323
- [18] Rosam J, Jimack P K, Mullis A. *J Comput Phys*[J], 2007, 225: 1271
- [19] TÖnhardt R, Amberg G. *J Cryst Growth*[J], 1998, 194: 406
- [20] Udaykumar H S, Marella S, Krishnan S. *Int J Heat Mass Tran*[J], 2003, 46: 2615
- [21] Cinca R G, Piscina L R, Casademunt J *et al.* *J Cryst Growth*[J], 1998, 193: 712
- [22] Voorhees P W, Coriell S R, Mcfadden G B *et al.* *J Cryst Growth*[J], 1984, 67: 425

Effect of Phase Field Parameters on the Dendritic Growth in a Forced Convection

Chen Zhi, Chen Changle, Hao Limei

(Northwestern Polytechnical University, Xi 'an 710072, China)

Abstract: Numerical simulation based on the phase field method is developed to describe the solidification process of pure material in a forced convection. The effects of forced convection, undercooling, coupling parameter and anisotropy on the dendritic growth are investigated. These results indicate that the crystal grow exhibits an asymmetrical dendritic in a forced convection. The upstream arm tip growth is promoted and inhibited on the downstream arm, while restrained for the perpendicular arm. With the increase of undercooling, coupling parameter and anisotropy, the dendritic arm growth velocities increase in the three different directions.

Key words: phase field method; dendritic growth; tip velocity; undercooling; coupling parameter; anisotropy

Biography: Chen Zhi, Candidate for Ph. D., Lecturer, School of Science, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, P. R. China, Tel: 0086-29-88493979, E-mail: c2002z@nwpu.edu.cn