

相场法模拟对流速度对上游枝晶生长的影响^{*}

陈玉娟 陈长乐[†]

(西北工业大学凝聚态结构与性质陕西省重点实验室 西安 710072)

(2007 年 7 月 17 日收到, 2007 年 12 月 6 日收到修改稿)

基于 Tong 和 Beckermann 等提出的耦合流场的相场模型, 采用有限差分法对纯金属凝固过程进行二维模拟计算, 研究了不同对流速度对金属枝晶生长的影响. 结果表明: 在有对流情况下, 上游及下游枝晶呈现不对称形貌, 上游枝晶生长速度明显比下游方向生长速度快. 随着对流速度的增大, 上游尖端过冷度也增大, 枝晶生长也越快. 这是由于流体速度越大, 对上游枝晶冲刷越强, 上游枝晶尖端实际过冷度越大, 枝晶生长越迅速.

关键词: 相场法, 对流速度, 上游枝晶

PACC: 7865E, 8110F, 4725Q

1. 引 言

由对流引起的金属液体流动是金属凝固过程中不可避免的现象, 它对凝固后的组织和成分偏析有着重要的影响, 因此对耦合流场的金属凝固过程的模拟研究成为国内外学者广泛研究的热点. 在国外, Tong 等^[1,2]和 Beckermann 等^[3]基于 Karma^[4]的纯扩散相场模型, 提出了考虑流场的相场模型, 定量模拟了在强迫对流下流速、流动方向和各向异性强度对枝晶形貌的影响, 以及尖端的稳态行为和侧向分支; Tönhardt 和 Amberg^[5-7]将对流简化为剪切流, 模拟了剪切流作用下的枝晶生长过程, 发现在上游促进枝晶生长, 在下游抑制枝晶生长; Goldenfeld, Jeong, Dantzig^[8,9]使用自适应有限元法模拟了流动对三维枝晶生长的影响, 发现与二维时有很大的不同, 并且分析了其原因, 国内在模拟金属凝固过程方面也逐渐开始考虑流场^[10-13]. 但是, 由于含对流的金属凝固过程的理论研究必须处理复杂的流体流动、相变、热和质量的传输过程之间的非线性耦合关系, 使得模拟其过程存在很大困难, 人们对流场作用下枝晶生长规律的了解仍然非常缺乏^[7,9].

本文利用 Tong 和 Beckermann^[3]提出的相场耦合流场方程, 用有限差分方法对二维纯金属凝固过程进行模拟计算, 研究了在不同对流速度下金属的枝晶生长形貌, 并计算了不同对流速度下上游枝晶尖

端过冷度及尖端生长速度随时间的变化.

2. 相场模型^[3]

相场模型中包含两个变量, 一个是无量纲温度场 u , 另一个是相场变量 ψ . $\psi = -1$ 表示液相, $\psi = 1$ 表示固相, 固液界面层内 ψ 在 $-1 \rightarrow 1$ 之间连续变化.

2.1. 相场控制方程

相场控制方程可表达为

$$\begin{aligned} \tau(\mathbf{n}) \partial_t \psi &= \psi - \lambda u (1 - \psi)^2 (1 + \psi) \\ &+ \mathbf{V} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{n}) \nabla \psi \\ &+ \partial_x (|\nabla \psi|^2 u(\mathbf{n}) \partial_x u(\mathbf{n})) \\ &+ \partial_y (|\nabla \psi|^2 u(\mathbf{n}) \partial_y u(\mathbf{n})), \end{aligned} \quad (1)$$

式中 ψ 是相场变量, 无量纲温度 u 定义为 $(T - T_m)(L/C_p)$, 其中 T_m 为熔点温度, L 和 C_p 分别为潜热和比热, λ 表征相场和温度场耦合强度的常数, d_0 为毛细长度, 弛豫时间 $\tau(\mathbf{n})$ 和界面厚度 $u(\mathbf{n})$ 分别是各向异性因子的函数, $u(\mathbf{n}) = w_0 A_s(\mathbf{n})$, $\tau(\mathbf{n}) = \tau_0 [A_s(\mathbf{n})]^2$, 各向异性因子取为

$$A_s(\mathbf{n}) = (1 - 3\epsilon) + 4\epsilon(\psi_x^4 + \psi_y^4) |\nabla \psi|^4, \quad (2)$$

ϵ 为各向异性强度, w_0 和 τ_0 为常数.

2.2. 耦合流场的扩散方程

耦合流场的温度场控制方程为

^{*} 国家自然科学基金重点项目(批准号: 50331040)资助的课题.

[†] E-mail: chencl@nwpu.edu.cn

$$\partial_t u + (1 - \phi) \mathbf{V} \cdot \nabla u = D \nabla^2 u + \partial_t \phi, \quad (3)$$

其中 $\phi = (1 + \psi)/2$, $\phi \in [0, 1]$ 是固相分数, \mathbf{V} 为流速, D 是热扩散率.

2.3. 质量及动量方程

流体速度满足质量守恒和 Navier-Stokes 方程, 将其与相场方程耦合得到如下形式:

$$\nabla \cdot [(1 - \phi) \mathbf{V}] = 0, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} & \partial_t [(1 - \phi) \mathbf{V}] + (1 - \phi) \mathbf{V} \cdot \nabla \mathbf{V} \\ & = -(1 - \phi) \nabla P / \rho + \nabla \cdot [\nu \nabla (1 - \phi) \mathbf{V}] + M_l^d, \end{aligned} \quad (5)$$

式中 ρ, P, ν 分别为密度, 压强和流体的运动粘性系数, M_l^d 为单位体积的界面耗散力, 定义为 $M_l^d = -\nu \frac{2h\phi^2(1-\phi)}{w_0^2} \mathbf{V}$, 保证流速在固相 ($\phi \rightarrow 1$) 时为 0, 在液相 ($\phi = 0$) 中衰减, 常数 h 为 2.757.

3. 计算方法

3.1. 数值计算方法

对控制方程均采用有限差分法进行离散, 其中一阶偏导数采用中心差分格式进行离散,

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}}{2\Delta x}, \quad \frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j-1}}{2\Delta y}, \quad (6)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x}, \quad \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2\Delta y}, \quad (7)$$

$$\frac{\partial V_x}{\partial x} = \frac{V_{x,i+1,j} - V_{x,i-1,j}}{2\Delta x}, \quad \frac{\partial V_x}{\partial y} = \frac{V_{x,i,j+1} - V_{x,i,j-1}}{2\Delta y}, \quad (8)$$

$$\frac{\partial V_y}{\partial x} = \frac{V_{y,i+1,j} - V_{y,i-1,j}}{2\Delta x}, \quad \frac{\partial V_y}{\partial y} = \frac{V_{y,i,j+1} - V_{y,i,j-1}}{2\Delta y}. \quad (9)$$

3.2. 材料物性参数

本文模拟的是金属镍的凝固过程, 其物性参数^[14]如表 1.

表 1 镍的物性参数

T_m / K	$L / (J/kg)$	$C_p / (J \cdot kg/K)$
1728	2.922×10^5	735

3.3. 初始条件和边界条件

如图 1, 半径为 r 的晶核种子位于计算区域中心, 过冷熔液以一定速度 U 从计算区域上边界流入, 从下边界流出.

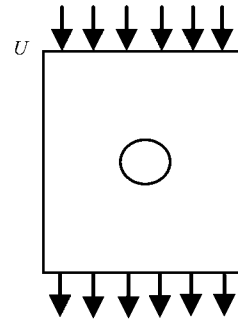


图 1 计算区域初条件

当 $x^2 + y^2 \leq r^2$ 时, $\phi = 1, u = 0, V_x = 0, V_y = 0, p = 0$;

当 $x^2 + y^2 > r^2$ 时, $\phi = -1, u = -\Delta, V_x = 0, V_y = U, p = 0$.

在计算边界上, 相场、温度、速度及压强均采用 Neumann 条件.

3.4. 计算稳定性

由于所有控制方程均采用有限差分格式进行计算, 时间步长受到空间步长限制, 即 $\Delta t \leq (\Delta x)^2 / 4$, 在我们的计算中取 $\Delta x = \Delta y = 0.4, \Delta t = 0.016$, 计算网格为 600×600 .

4. 模拟结果与分析

4.1. 计算参数的选取

Karma 和 Rappel^[15] 的渐近分析, 将相场参数和尖锐界面模型中的参数联系起来: $d_0(n) = a_1 \frac{u(n)}{\lambda} \beta(n) = \frac{a_1 \tau(n)}{\lambda u(n)} [1 - a_2 \lambda \frac{u(n)^2}{D\tau(n)}]$, 其中

毛细长度 $d_0 = \frac{\sigma T_m c_p}{L^2}$, $\beta(n)$ 为各向异性界面动力学系数, $a_1 = 0.8839, a_2 = 0.6267$. 由此得出 $\lambda = 0.8839 w_0 / d_0$, 本文计算中采用的各无量纲参数如下: $\epsilon = 0.03, w_0 = \tau_0 = 1, d_0 = 0.139, Pr = \nu / D = 23.1, \lambda = 6.359, D = 4, \Delta = 0.55$. 在计算中加入无量纲流速分别为 $U d_0 / D = 0.027, 0.035, 0.07$ 的强制对流, 计算时间为 $10000 \times \Delta t$.

4.2. 有无对流时的枝晶生长形貌

无对流时的相场和温度场分布如图 2(a)(b), 有对流时的相场及温度场分布如图 2(c)(d). 在无

对流时,金属枝晶在各个方向均衡生长,各尖端附近的扩散层分布也相同,枝晶呈现对称形貌,而在有对流时,枝晶各个方向生长速度不同,上游枝晶明显比

下游及与流体速度垂直方向上的枝晶生长快,并且在枝晶各尖端附近的扩散层厚度也不相同,在上游尖端扩散层较薄,在下游尖端附近的扩散层较厚。

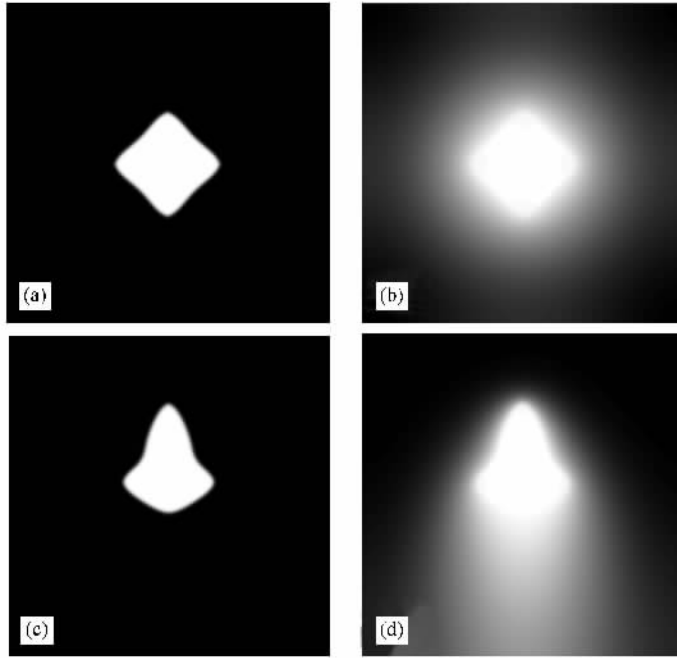


图2 有((c)(d))无((a)(b))对流时枝晶的相场及温度场分布

4.3. 对流速度对枝晶生长的影响

图3(a),(b),(c)分别表示了三个速度0.027,0.035,0.07下枝晶生长的相场分布.在对流情况下,随着流体速度的增加,枝晶生长速度加快.在计算时间相同时,枝晶形貌随着加入的流体速度的增加而增大.图3(d),(e),(f)分别是图3(a),(b),(c)对应的温度场分布.在流体的上游,枝晶尖端温度扩散层较薄,温度梯度大;在下游枝晶尖端扩散层较厚,温度梯较小.一方面由于外加强制流对上游枝晶的冲刷,将凝固过程中释放的热量带走,减少了上游枝晶尖端的热扩散层厚度,导致上游枝晶尖端的实际过冷度增大,枝晶生长迅速;另一方面,在下游,由于枝晶在凝固时释放的大量潜热来不及扩散,造成尖端扩散层很厚,温度梯度小,实际过冷度低,生长缓慢.同时,随着加入的强制流速增大,流体对上游枝晶尖端的冲刷增大,热量扩散加快,导致上游枝晶尖端温度迅速降低,从而使得上游枝晶生长更快.

为了定量分析对流速度对枝晶尖端生长的影响,我们计算了在三种不同对流速度 $Ud_0/D =$

0.027,0.035,0.07下,上游枝晶的尖端过冷度和尖端生长速度随时间的变化,并与无对流情况下进行了对比,结果见图4和图5.

从图4可以看出,在凝固的初始阶段,上游枝晶尖端前端的过冷度都很大,这是由于在枝晶生长初期驱动枝晶生长的过冷度为所施加的过冷度.随着枝晶的生长,枝晶凝固过程中释放大量热量,使得枝晶尖端前沿的过冷度迅速减小;之后,各枝晶尖端达到不同的稳态过冷度.同时,我们可以看出,有对流时的稳态尖端过冷度比无对流时的稳态尖端过冷度大,并且,加入的强迫流速越大,其稳态过冷度也越大.对流速度分别为0.07,0.035,0.027时其稳态过冷度比无对流时分别高488%,272%,214%.

图5是上游枝晶尖端生长速度随时间的变化曲线.对于纯金属,由于过冷度越大,枝晶生长越快,反之,过冷度越小,枝晶生长越慢.由图可知,在加入不同速度的对流时,枝晶尖端生长速度与图4变化趋势相似:初始阶段四种情况下枝晶生长速度都很快;随着枝晶生长时释放大量潜热,过冷度逐渐下降,生长速度也逐渐减小;当释放的潜热与对流交换热

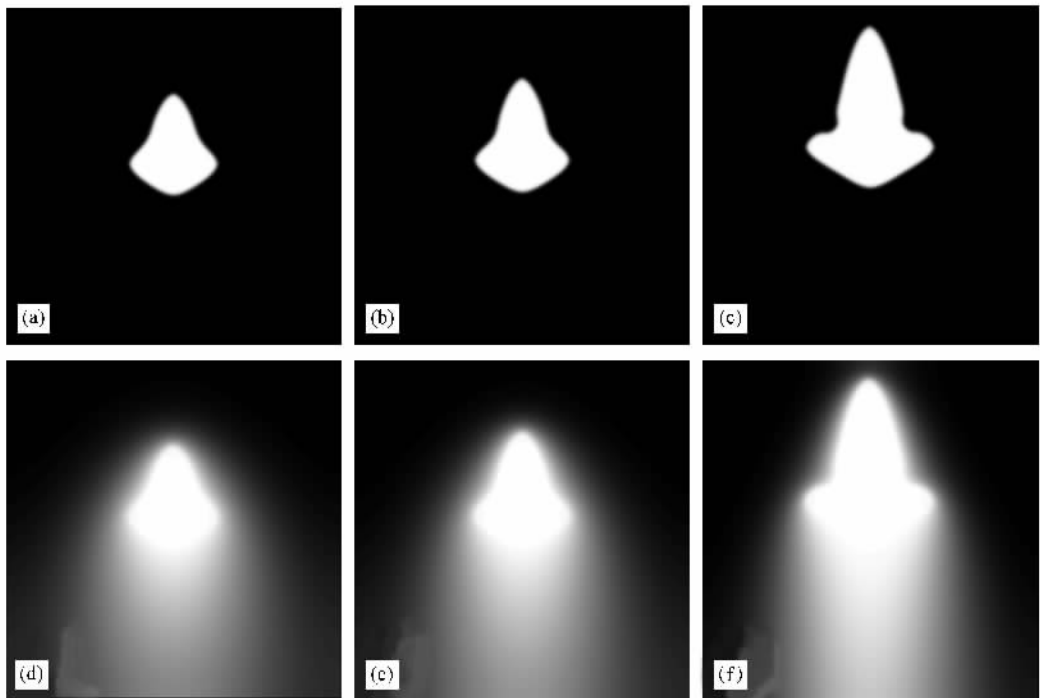


图 3 对流速度分别为 0.027 0.035 0.07 时的相场(a)(b)(c)及温度场(d)(e)(f)分布

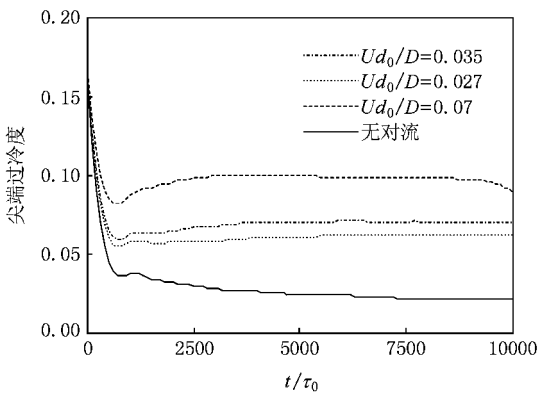


图 4 上游尖端过冷度与时间的关系($\times \Delta t$)

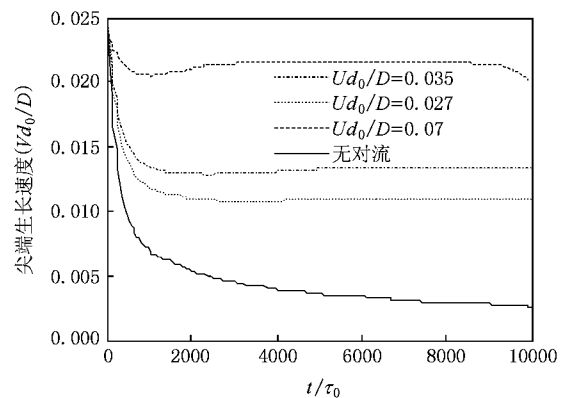


图 5 上游尖端生长速度与时间的关系($\times \Delta t$)

量达到平衡时,过冷度不再变化,枝晶以恒定的速度生长,并且在有对流时上游枝晶尖端生长速度比无对流时要快.从图中我们可以看出,当外加强迫流速增大时,枝晶生长的稳态速度也增大.在外加流速为 0.07 时,枝晶生长的速度最快,比无对流时高 296%;在外加流速为 0.035 时次之,其尖端生长速度比无对流时高 183%;在 0.027 时生长速度最小,比无对流时高 153%.

5. 结 论

1. 在无对流时,金属枝晶各个方向生长速度相

同,整个枝晶形貌对称,枝晶各尖端附近扩散层分布相同,温度分布均匀.

2. 有对流时,枝晶各个方向生长速度不同.上游枝晶与下游呈现不对称形貌:上游枝晶生长速度最快,其枝晶最发达,与流体速度垂直方向及下游枝晶生长速度较慢,枝晶不发达.

3. 枝晶生长速度受外加强制流速的影响:上游枝晶尖端过冷度及生长速度都比无对流时大,并且外加流体速度越大,上游枝晶尖端稳态过冷度越大,枝晶生长越快.

- [1] Tong X ,Beckermann C , Karma A 2000 *Phys. Rev. E* **61** 49
- [2] Tong X ,Beckermann C ,Karma A , Li Q 2001 *Phys. Rev. E* **63** 061601
- [3] Beckermann C ,Diepers H J ,Steinbach I ,Karma A , Tong X 1999 *J. Comp. Phys.* **154** 468
- [4] Karma A , Rappel W J 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 4050
- [5] Tönhardt R , Amberg G 1998 *J. Cryst. Growth* **194** 406
- [6] Tönhardt R , Amberg G 2000 *J. Cryst. Growth* **213** 161
- [7] Tönhardt R , Amberg G 2000 *Phys. Rev. E* **62** 828
- [8] Jeong J H ,Goldenfeld N , Dantzig J A 2001 *Phys. Rev. E* **64** 041602
- [9] Jeong J H ,Goldenfeld N , Dantzig J A 2003 *Metall. Mater. Trans. A* **34** 459
- [10] Yu Y M ,Yang G C ,Zhao D W *et al* 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 2423 (in Chinese) [于艳梅、杨根仓、赵达文等 2001 物理学报 **50** 2423]
- [11] Zhao D P ,Jing T , Liu B C 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1737 (in Chinese) [赵代平、荆涛、柳百成 2003 物理学报 **52** 1737]
- [12] Long W Y ,Cai Q Z ,Chen L L , Wei B K 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 256 (in Chinese) [龙文元、蔡启舟、陈立亮、魏伯康 2005 物理学报 **54** 256]
- [13] Chen M W ,Wang Z D , Sun R J 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1819 (in Chinese) [陈明文、王自东、孙仁济 . 2007 物理学报 **56** 1819]
- [14] Willnecker R ,Herlach D M , Feuerbacher B 1989 *Phys. Rev. Lett.* **62** 2707
- [15] Karma A , Rappel W J 1996 *Phys. Rev. E* **53** 3017

Simulation of the influence of convection velocity on upstream dendritic growth using phase-field method^{*}

Chen Yu-Juan Chen Chang-Le[†]

(*The Laboratory of Condensed Matter Structures and Properties , Northwestern Polytechnical University ,Xi'an 710072 ,China*)

(Received 17 July 2007 ; revised manuscript received 6 December 2007)

Abstract

The phase-field model based on the Tong and Beckermann model coupled with the flow field is used to simulate two-dimensional microstructural dendrite growth of metal by way of finite difference method. The effect of different convection velocities on metal dendritic crystal growth is studied. The result shows that the upstream and downstream dendritic crystal present asymmetric pattern : the growth velocity of upstream is much faster than downstream. As the velocity of convection increases ,actual supercooling of upstream dendritic crystal increases ,the growth velocity of dendritic crystals also speeded up. This is because of the bigger convection velocity leads to stronger flushing to the upstream dendritic crystal and the greater actual supercooling of upstream dendritic crystal ,making the dendritic crystal to grow faster.

Keywords : phase-field method , convection velocity , upstream dendrite

PACC : 7865E , 8110F , 4725Q

^{*} Project supported by the State Key Program of National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50331040).

[†] E-mail : chencl@nwpu.edu.cn