

三维枝晶生长的相场法数值模拟研究^{*}

朱昌盛^{1,2)†} 冯 力¹⁾ 王智平¹⁾ 肖荣振¹⁾

1) 兰州理工大学甘肃省有色金属新材料省部共建国家重点实验室, 兰州 730050)

2) 兰州理工大学 CAD 中心, 兰州 730050)

(2009 年 1 月 9 日收到, 2009 年 2 月 12 日收到修改稿)

基于薄界面限制、耦合界面能各向异性的相场模型, 采用动态计算区域的加速算法, 对纯物质的三维枝晶生长进行了定量模拟, 真实再现了枝晶的生长过程. 对枝晶尖端进行了剖切分析, 表明主枝截面上各向异性没有主枝方向各向异性明显, 对枝晶尖端生长速度、尖端半径、Peclet 数及临界稳定性参数 σ^* 进行模拟计算, 并与同条件下报道值进行了对比分析, 两者符合良好, 并得到了与结晶理论相一致的枝晶生长规律, 证实了相场方法模拟三维空间枝晶生长可行有效.

关键词: 相场方法, 枝晶生长, 微观组织, 三维数值模拟

PACC: 8130, 6480G, 7115Q, 8140

1. 引 言

凝固学的中心任务是探索凝固组织的形成规律和控制方法, 一直是冶金和材料科学工作者十分关注的重要问题. 随着计算机技术在铸造行业的应用, 凝固过程的计算机数值模拟成为解决这一问题的重要方法, 这种方法能有效克服数学解析和实验研究的困难. 因此, 对凝固过程的枝晶生长过程进行数值模拟, 不仅具有工程应用前景, 而且具有重要的理论价值^[1].

三维枝晶生长相场法模拟由于计算量巨大, 同时无法证明微观可解理论是否适用于三维相场模型, 因此, 对该领域的研究相对较少且进展缓慢. 三维枝晶相场法数值模拟始于 Karma 和 Rappel^[1] 的研究, 他们用相场方法证明了三维枝晶生长过程中, 微观可解理论照样适用, 从而为微观组织三维定量模拟的开展奠定了基础. 此后, Karma 和 Rappel 分析了相场方法的计算效率并对枝晶生长进行了二维、三维的定量模拟, 分析了网格和扩散边界层厚度对模拟结果的影响^[2]. Tong 等研究了对流与相场的耦合, 模拟了二维和三维情况下对流对枝晶生长的方向和

形貌的影响等^[2]. 目前, 相场法已成为三维枝晶生长模拟的主要手段^[1-3].

在 80 年代后期, 微观可解理论表明界面能各向异性在枝晶的演变过程中起着重要作用, 但不考虑界面能各向异性时枝晶尖端会出现分裂现象. 此后, 开发了不同的计算方法来模拟自由枝晶时演变过程. 其中, 相场法已经成为模拟枝晶生长的强有力的工具, 这种方法避免了复杂的相界面跟踪, 可直接模拟宏观场作用下的枝晶生长, 目前正成为工业预测凝固微观组织的非常重要的手段之一^[4,5]. 然而, 国内该领域的研究决大部分模拟是二维的, 极少数是三维定量模拟.

与二维不同, 对任意非轴对称形状的三维枝晶的稳定生长方程很难通过边界积分方法获得数字解^[6], 但是, 可以通过所谓的轴对称逼近进行解析.

本文以薄界面限制的相场模型, 对自由枝晶生长过程进行了定量三维模拟, 模型中, 耦合了界面能各向异性. 为了提高计算效率, 提出了相场模型数值求解方法. 将枝晶尖端进行了剖切分析, 研究了各向异性对枝晶尖端的影响, 将模拟获得的枝晶尖端稳态参数与理论数据值、报道值等进行了比较, 数据符合良好.

^{*} 教育部博士点基金(批准号:20070231001), 甘肃省自然科学基金(批准号:096RJZA104)和兰州理工大学博士基金(批准号:SB14200801)资助的课题.

[†] E-mail: zhucs@lut.cn

2. 数学模型及其解

对三维自由边界问题, 方程为^[1]

$$\partial_t T = D \nabla^2 T, \quad (1)$$

$$L v_n = c_p D (\partial_n T|_S - \partial_n T|_L), \quad (2)$$

$$T_l - T_M = -\frac{T_M}{L} \sum_{i=1}^2 \left[\gamma(\mathbf{n}) + \frac{\partial^2 \gamma(\mathbf{n})}{\partial \theta_i^2} \right] \frac{1}{R_i}, \quad (3)$$

$$\begin{aligned} a_s(\mathbf{n}) &= (1 - 3\epsilon_4) \left[1 + \frac{4\epsilon_4}{1 - 3\epsilon_4} \frac{(\partial_x \phi)^4 + (\partial_y \phi)^4 + (\partial_z \phi)^4}{|\nabla \phi|^4} \right] \\ &= (1 - 3\epsilon_4) \left[1 + \frac{4\epsilon_4}{1 - 3\epsilon_4} (\cos^4 \bar{\theta} + \sin^4 \bar{\theta} \{1 - 2\sin^2 \bar{\phi} \cos^2 \bar{\phi}\}) \right]. \end{aligned} \quad (4)$$

对于三维空间 界面处 Gibbs-Thomson 条件可表示为

$$\begin{aligned} u_i &= -d_0 \sum_{i=1}^2 [a_s(\mathbf{n}) + \partial_{\theta_i}^2 a_s(\mathbf{n})] / R_i - \beta(\mathbf{n}) V \\ &= -\frac{a_1}{\lambda} \sum_{i=1}^2 [W(\mathbf{n}) + \partial_{\theta_i}^2 W(\mathbf{n})] / R_i - \beta(\mathbf{n}) V. \end{aligned} \quad (5)$$

相场法数值模拟中, 当界面厚度趋于无穷小时, 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 提出的薄界面渐进分析, 通过只考虑垂直于界面法向的平界面的移动来得出 $\beta(\mathbf{n})$ 的表达式

$$\beta(\mathbf{n}) = \frac{a_1}{\lambda} \frac{\tau(\mathbf{n})}{W(\mathbf{n})} \left[1 - a_2 \lambda \frac{W(\mathbf{n})^2}{D_T \tau(\mathbf{n})} \right], \quad (6)$$

与 Gibbs-Thomson 条件标准形式相对应得

$$d_0(\mathbf{n}) = \frac{a_1}{\lambda} \sum_{i=1}^2 [W(\mathbf{n}) + \partial_{\theta_i}^2 W(\mathbf{n})], \quad (7)$$

这样, 材料的热物性参数就与相场模型参数通过(6)式和(7)式联系起来.

相场控制方程和温度场方程可分别表达为

$$\begin{aligned} \tau(\mathbf{n}) \partial_t \phi &= [\phi - \lambda u (1 - \phi^2)] (1 - \phi^2) + \nabla \cdot [W^2(\mathbf{n}) \\ &\quad \times \nabla \phi] + \partial_x \left(|\nabla \phi|^2 W(\mathbf{n}) \frac{\partial W(\mathbf{n})}{\partial (\partial_x \phi)} \right) \\ &\quad + \partial_y \left(|\nabla \phi|^2 W(\mathbf{n}) \frac{\partial W(\mathbf{n})}{\partial (\partial_y \phi)} \right) \\ &\quad + \partial_z \left(|\nabla \phi|^2 W(\mathbf{n}) \frac{\partial W(\mathbf{n})}{\partial (\partial_z \phi)} \right), \end{aligned} \quad (8)$$

$$\partial_t u = D \nabla^2 u + \partial_t \phi / 2, \quad (9)$$

式中, 无量纲温度 $u = \frac{(T - T_M)}{(L/C_p)}$, λ 为耦合常数,

τ 和 W 都是界面法向矢量 \mathbf{n} 的函数.

式中, T 为温度场, T_l 为界面温度, T_M 为熔体温度, D 为热扩散系数, L 和 c_p 分别为潜热和比热, v_n 为界面法向速度, θ_i 为法向 \mathbf{n} 与边界上两主轴方向间的夹角, R_i 主曲率半径. 枝晶生长主要由温度 $\Delta = (T_M - T_\infty)/(L/C_p)$ 控制, 其中 T_∞ 为初始熔体温度, $\gamma(\mathbf{n})$ 为立体对称晶体的界面能, $\gamma(\mathbf{n}) = \gamma_0 a_s(\mathbf{n})$, 其中 $a_s(\mathbf{n})$ 为立方对称体的表面能

Karma 和 Rappel 等对在相场模型中耦合热噪声进行了研究^[7]. 在他们的模型中, 非能量守恒扰动 (nonconserved noise) 和能量守恒扰动 (conserved noise) 分别以 θ 和 q 加入到相场方程和温度场控制方程中, θ 和 q 均表示热噪声矢量, 各自遵循下述高斯分布

$$[\theta(\mathbf{r}, t) \theta(\mathbf{r}', t)] = 2F_\theta \delta_m \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'), \quad (10)$$

$$\begin{aligned} [q_m(\mathbf{r}, t) q_n(\mathbf{r}', t)] &= 2Dk_B \frac{C_p T_M^2}{L^2} \delta_m \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ &\quad \times \delta(t - t'), \end{aligned} \quad (11)$$

式中, k_B 为 Boltzmann 常数, δ 为 delta 函数, 将其中的一些变量按下述形式无量纲化: $\frac{\mathbf{r}}{W_0} \rightarrow \mathbf{r}$, $\frac{t}{\tau} \rightarrow t$,

$$\begin{aligned} \frac{D\tau_0}{W_0^2} \rightarrow d, \quad \tau\theta \rightarrow \theta, \quad q\tau_0/W_0 \rightarrow q \end{aligned} \quad \text{热噪声矢量将变成}$$

$$[\theta(\mathbf{r}, t) \theta(\mathbf{r}', t)] = 2F_\theta \delta_m \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'), \quad (12)$$

$$[q_m(\mathbf{r}, t) q_n(\mathbf{r}', t)] = 2DF_u \delta_m \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'), \quad (13)$$

式中, F_u 是热噪声幅值, 可以写成以下形式:

$$F_u = \frac{k_B C_p T_M^2}{L^2 W_0^2} = \frac{k_B C_p T_M^2}{L^2 d_0^2} \left(\frac{d_0}{W_0} \right)^2 = F_{\text{exp}} \left(\frac{d_0}{W_0} \right)^2. \quad (14)$$

3. 模型的数值求解和模拟参数的取值

3.1. 初始条件和边界条件

取半径为 r_0 的初始球形晶核:

$$\begin{aligned} \phi &= 1, u = 0, & x^3 + y^3 + z^3 &\leq r_0^3, \\ \phi &= -1, u = -\Delta, & x^3 + y^3 + z^3 &> r_0^3, \end{aligned} \quad (15)$$

式中, x, y, z 分别代表坐标轴 (100) (010) (001) 方向, 为了减少计算量, 本文置初晶核于计算区域一角 ($x, y, z \geq 0$)。取晶核的 1/8 作为模拟对象。设枝晶轴对应于直角坐标系的 x 轴、 y 轴和 z 轴, 初始界面采用球体形状, 它代表凝固开始时的晶核。为了减小计算量, 模拟计算取八分之一正方体区域 ($x, y, z \geq 0$)。

在计算区域的边界 (Oxy 面, Oyz 面, Oxz 面) 上, 相场和温度场均采用 Zero-Neumann 边界条件^[8]。

3.2. 数值求解方法

相场和温度场方程采用有限差分法求解 (9) 式采用 Euler 算法 (10) 式采用 ADI 算法, 采用均匀网格, 为了获得可靠和稳定的计算结果, 取空间步长 $\Delta x = \Delta y = \Delta z$, $\Delta x \leq W_0$, 时间步长为 Δt , 取值要满足稳定性条件。

为了解决三维相场法模拟计算量巨大的问题, 模拟中采用基于动态计算区域的加速算法求解相场模型^[7], 即将某一时刻枝晶主枝尖端温度场前沿所在的网格数作为下一时刻的计算网格数, 如此反复动态查找任一计算时刻的网格数即可获得不同计算时刻的计算区域, 该区域动态由小增大, 计算时间也成正比逐渐增加, 该算法可大大减小计算时间, 加速效果明显。

3.3. 枝晶尖端半径的计算

可以将模拟计算结果与尖锐界面边界条件的计算结果相比较以检验模拟结果, 通过观察枝晶尖端 ($\phi = 0$) 处的无量纲过冷度与半径, 并把尖端速度与枝晶生长理论求得的速度相比较。沿 z 轴方向生长的枝晶尖端半径可在 $y-z$ 面内进行计算。通过设置 $\phi = 0$ 枝晶尖端界面的曲率可表示为^[2]

$$\kappa_{\text{tip}} = \frac{1}{\rho_{\text{tip}}} = \frac{\partial_y^2 \phi(0, 0, z_{\text{tip}})}{\partial_z \phi(0, 0, z_{\text{tip}})}. \quad (16)$$

结合周围网格点, 通过线性差值求解平均曲率

$$\bar{\kappa}, \text{ 则枝晶尖端半径为 } \bar{\rho} = \frac{1}{\bar{\kappa}}.$$

3.4. 枝晶生长的形态选择

枝晶作为一种典型的非平衡自组织形态, 多年来引起了材料学家、物理学家和应用数学家等的广泛关注^[14]。在过去的几十年中, 学者分别提出了微观可解性 (MSC) 理论和界面波 (IFW) 理论两种自由枝晶生长解析理论, 试图解决枝晶生长的操作点选择问题和解释枝晶形态形成的物理本质。早期, Ivantsov 在研究过冷熔体中枝晶凝固问题时指出, 当凝固过程只受热扩散的影响时 (忽略表面张力和表面动力的影响), 枝晶的尖端是抛物面状的, 并计算出不同曲率尖端的半径值和相应的尖端生长速率。根据 Ivantsov 的结论, 在给定的过冷度条件下, 一系列具有不同尖端曲率及相应速率的枝晶可以共存。

著名的 Ivantsov 关系为^[9]

$$\Delta = P_{\text{IV}} \exp(P_{\text{IV}}) \int_{P_{\text{IV}}}^{\infty} ds \frac{\exp(-s)}{s}, \quad (17)$$

该式表示了枝晶尖端生长速度 V_{tip} , 尖端半径 ρ_{tip} 的抛物面的 Peclet 数和无量纲过冷度 $u = \frac{(T - T_M)}{(L/C_p)}$ 间的关系, 枝晶生长的临界稳定性参数 σ^* 及 Peclet 数可表示为

$$\sigma^* = \frac{2Dd_0}{\rho_{\text{tip}}^2 V_{\text{tip}}}, \quad (18)$$

$$P = \frac{\rho_{\text{tip}} V_{\text{tip}}}{2D}. \quad (19)$$

3.5. 热物性参数

选择纯 Ni 作为模拟对象, 结合 Ni 的热物性参数, 在三维情况下使用相场法对过冷金属熔体中的镍枝晶的生长行为进行模拟。Ni 的热物性参数值如表 1 所示。

相场参数及模拟计算参数取值如表 2 所示。

表 1 纯 Ni 的热物性参数^[10]

参数	T_m/K	$L(\text{J}/\text{cm}^3)$	$C_p(\text{J}/\text{cm}^3 \cdot \text{K})$	$\beta(\text{s}/\text{cm})$	$\sigma(\text{J}/\text{cm})$	$K(\text{cm}^2/\text{s})$	$D_T(\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1})$	$d_0(\text{cm})$
值	1728	2350	5.42	0.1572	3.75×10^{-5}	0.155	1.55×10^{-9}	0.778×10^{-7}

表 2 相场参数及计算参数 (无量纲)

参数	ϵ	Δ	d_0/W_0	D	τ_0	λ	$\Delta x = \Delta y = \Delta z$	Δt
值	0.05	-0.55	0.139	1	1	6.4	0.4	0.016

4. 结果及讨论

4.1. 三维枝晶形貌及其温度场

图 1(a)(b)分别为典型三维枝晶在生长时间 $t = 8000 \times \Delta t$ 时的形貌和温度场模拟结果,图 1(c), (d)分别为图 1(a)(b)的对应的截面图($X = 20$)模拟

计算网格数为 $300 \times 300 \times 300$,三个枝晶尖端沿主 100 方向生长.可以看出,获得的枝晶形貌十分逼真,当没有加入噪声时,枝晶形貌比较光滑,而当加入噪声时,枝晶具有发达的二次晶臂,同时还可以观察到二次晶臂的竞争生长,二次枝晶臂的生长会使枝晶主干变细,同时二次枝晶臂的根部也明显比枝晶臂干要窄.同时,在一次枝晶臂根部出现明显的颈缩现象,枝晶臂生长方向的垂直截面也有明显的颈缩现象.

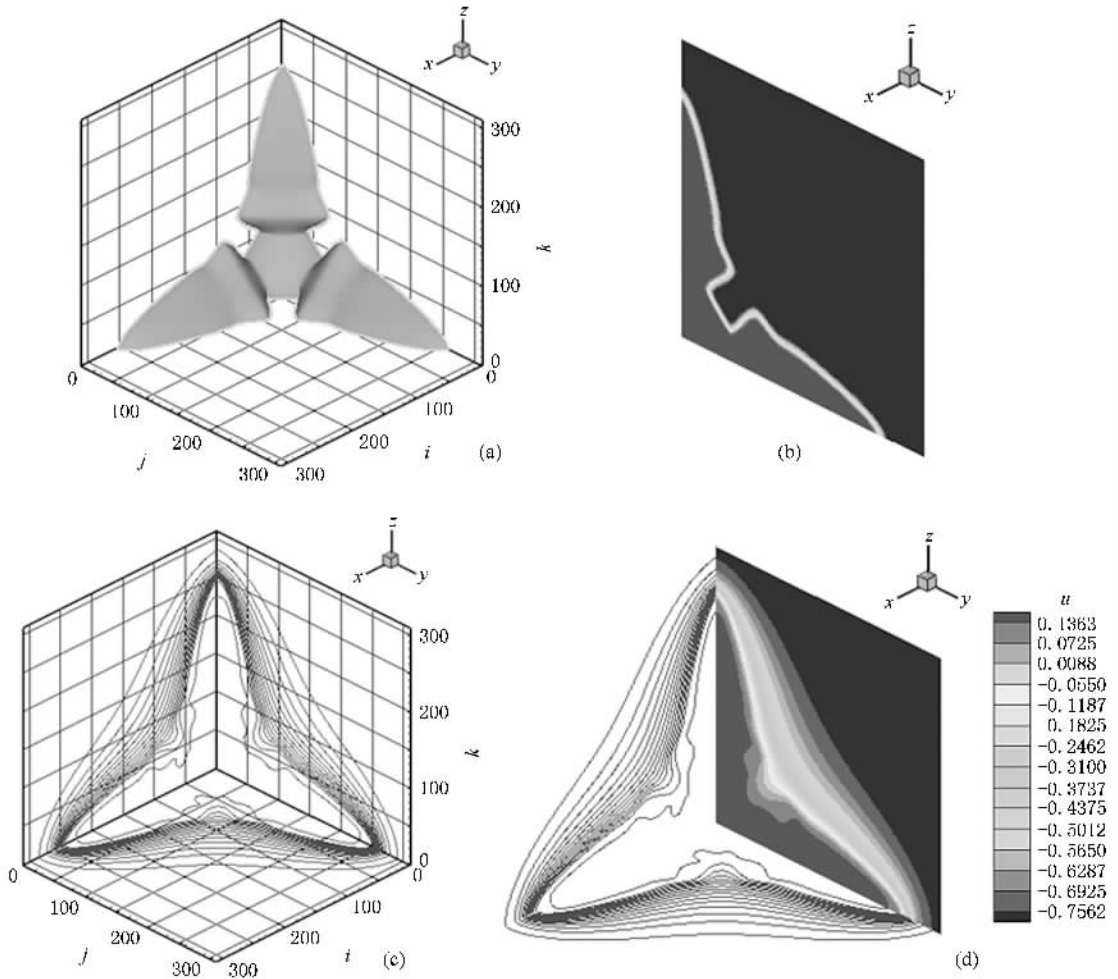


图 1 三维枝晶形貌、温度场及截面图($t = 8000 \times \Delta t$, 无噪声) (a) 枝晶形貌 (b) 枝晶形貌截面图($X = 20$) (c) 温度场 (d) 温度场截面图($X = 20$)

同时还可以看出,温度的分布情况与枝晶生长也是相吻合的,在固相区域由于凝固潜热的释放,从而使温度比液相中要高,并且在固液界面处的温度比中心要高,而且在二次枝晶生长比较快的固液界面温度最高,在枝晶尖端由于界面移动速率大,释放的潜热多,热量来不及扩散,因此温度梯度最大,在枝晶根部由于界面移动速率小,因此温度梯度最小^[13].

另外还可看到扰动的引入促进枝晶二次晶臂的

生长,使同一时刻固相的最高温度相应提高,但是没有改变其温度的分布规律,即枝晶尖端的温度梯度最大,根部的温度梯度最小.

在晶体的生长过程中温度最高点的位置是不断变化的,通常是位于被二次枝晶臂相向生长所包围的区域,这是由于二次枝晶臂生长速度快,释放较多的潜热,并且此处的温度梯度小不易扩散,导致温度升高^[15].

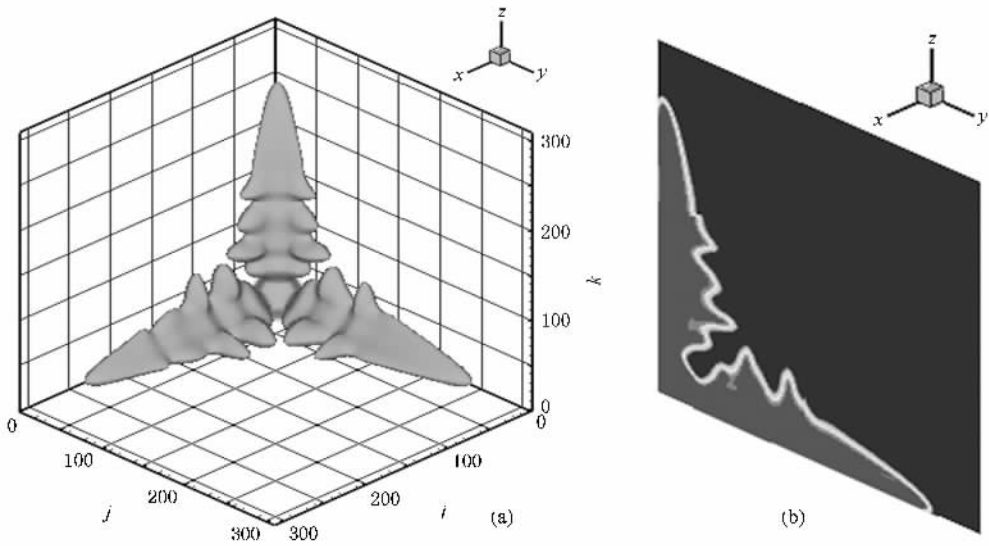


图 2 三维枝晶形貌及截面图($t = 8\,000 \times \Delta t$, 有噪声) (a) 枝晶形貌 (b) 枝晶形貌截面图($X = 20$)

4.2. 三维枝晶尖端形貌

相场参数及计算参数的取值如表 2 所示,三个主枝晶尖端沿坐标轴 $100, 010, 001$ 方向生长.图 3(a)为计算时间 $t = 4800\Delta t$ 时刻,无热噪声时的三维枝晶形貌轮廓,为了更清楚地了解三维枝晶尖端,图 3(b)为将枝晶尖端沿 z 轴方向等间距进行剖切,获得的 (100) 面等高线图,同时给出两个方向的投影视图并将其进行了放大.可以看出,靠近枝晶尖

端顶端获得的剖切面接近于圆,远离顶端等高线不再是圆,逐渐显示出各向异性,并且随着与顶端距离的增大,等高线形状与圆外型的偏离越大,说明界面各向异性影响越来越明显.因此,主枝截面上各向异性没有主枝方向各向异性明显,这与 Karma 等人的模拟结果符合^[2].图 3(b)右图为枝晶尖端在 (011) (Oyz 面)内的投影视图,将该曲线与同条件下使用格林函数方法获得数据进行比较,可以看出,两者符合良好.

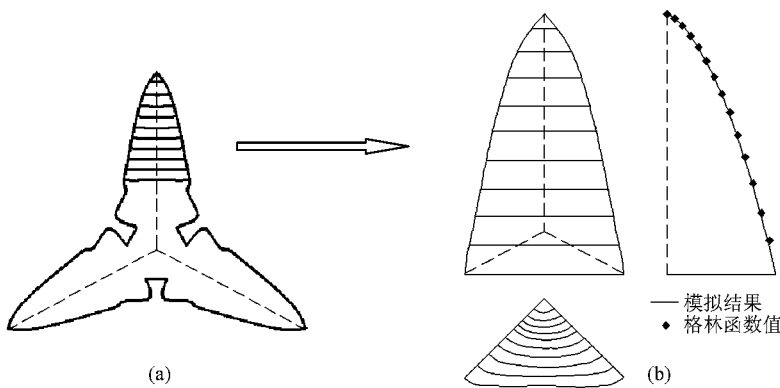


图 3 三维枝晶形貌及尖端投影视图 (a) 枝晶形貌 (b) 枝晶尖端形貌视图

4.3. 三维枝晶生长速度及尖端半径

晶粒生长过程中,主枝尖端的生长速度随时间的变化而变化.由于初始晶核随意设定,晶粒生长未达到稳定,生长速度不确定.当晶粒生长到一定时间,此时界面处过冷度不再发生太大变化,晶粒生长

达到相对稳定,当晶粒生长到接近网格边界时,由于设置边界条件的影响,并且边界过冷度比中心低,因此生长速度又有略为变大趋势,所以在研究中,当枝晶一旦达到稳定生长时,不再输出生长速度,以便节省计算时间.

图 4 为枝晶尖端生长速度随生长时间的变化曲

线 相场参数及计算参数取值如表 2 所示,可以看出 枝晶经过一定生长时间后逐渐达到稳定生长,计算生长速度没有奇异点,表明枝晶生长稳定,同时也说明了采用的加速算法没有导致计算异常.同时将模拟计算的生长速度数据与同条件下 Jeong 等的研究结果进行了比较,两者十分接近^[11].

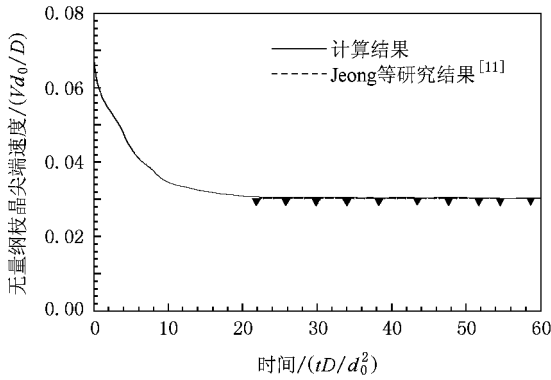


图 4 枝晶尖端生长速度曲线

图 5 所示为主枝尖端半径随时间的变化曲线,在生长的初始阶段,由于初始晶核的随意设定,晶粒生长未达到稳定,尖端半径不稳定,当晶粒生长到某时刻,晶粒生长达到稳定,枝晶尖端半径变得趋于稳定.同时也可以看出,模拟计算的枝晶尖端半径与同条件下 Jeong 等的研究结果十分接近^[11].

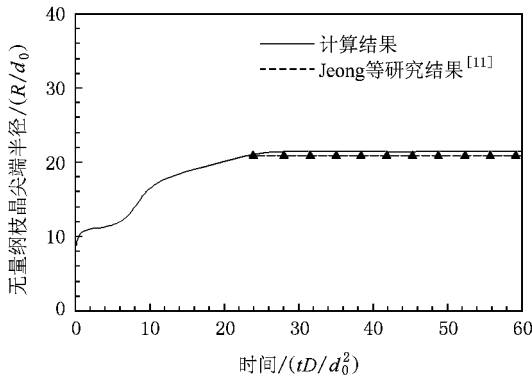


图 5 枝晶尖端半径曲线

4.4. 枝晶尖端稳态参数

图 6、图 7 分别为枝晶生长的临界稳定性参数 σ^* 及 Pecllet 数随生长时间的变化曲线,相场参数及计算参数取值如表 2 所示.可以看出,枝晶生长初期,由于生长速度和枝晶尖端半径还不稳定,致使 $\rho_{tip}^2 V_{tip}$ 的值也不稳定,即 σ^* 与 Pecllet 数之值不断变

化.当晶粒生长到某时刻,晶粒生长达到稳定, σ^* 与 Pecllet 数之值逐渐趋于稳定.同时也可以看出, σ^* 与 Pecllet 数之值与同条件下 Jeong 等的研究结果也十分接近^[11].

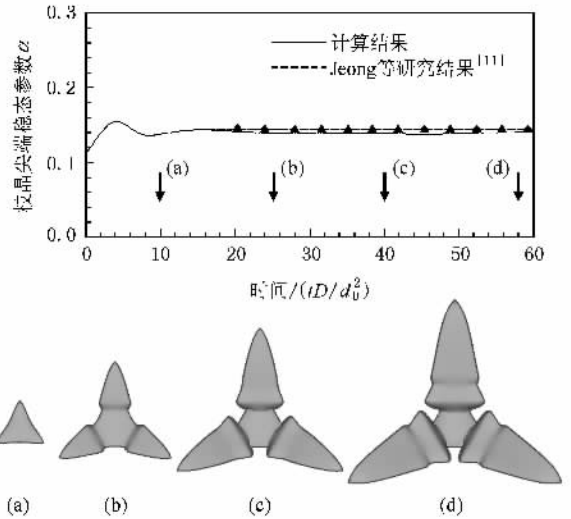


图 6 枝晶尖端稳态参数示意图

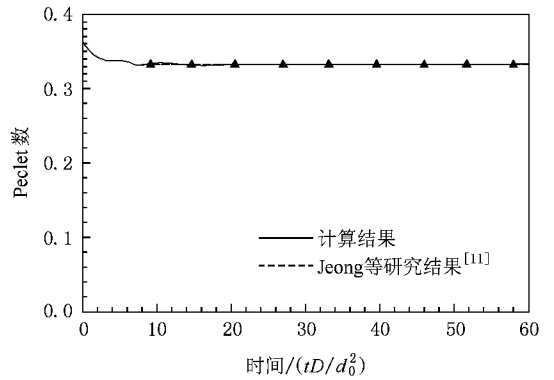


图 7 Pecllet 数示意图

5. 结 论

1. 基于薄界面限制、耦合界面能各向异性的相场模型,采用设计的动态计算区域的加速算法,对纯物质的三维枝晶生长进行了模拟,真实地再现了树枝晶的生长过程,并得到了与结晶理论相一致的枝晶生长规律,证实了相场方法模拟三维空间枝晶生长可行有效.

2. 结合解析形式的现有模型,采用数值模拟方法来全面表征复杂体系的凝固特性,把相场模拟所

得的枝晶生长速度、尖端半径、Peclet 数及临界稳定性参数 σ^* 等与理论数据值、报道值进行了对比分析,两者符合良好。

3. 将枝晶尖端进行了剖切分析,研究了各向异性对枝晶尖端的影响,表明主枝截面上各向异性没有主枝方向各向异性明显。

- [1] Karma A , Rappel W J 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 4050
- [2] Karma A , Rappel W J 1998 *Phys. Rev. E* **57** 4323
- [3] Tong X , Beckermann C 2000 *Phys. Rev. E* **61** R49
- [4] Kobayashi R 1999 *Journal of Computation Physics* **154** 410
- [5] Murray B T , Wheeler A A , Glicksman M E 1995 *J. Cryst. Growth* **154** 386
- [6] Kessler D A , Levine H 1986 *Acta Metall* **36** 2693
- [7] Karma A , Rappel W J 1999 *Phys. Rev. E* **60** 3164
- [8] Zhu C S , Wang Z P , Jing T , Xiao R Z 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1502 (in Chinese) [朱昌盛、王智平、荆 涛、肖荣振 2006 物理学报 **55** 1502]
- [9] Zhu C S , Feng L , Wang Z P , Xiao R Z 2008 *Chinese Journal of Mechanical Engineering* **45** 30 (in Chinese) [朱昌盛、冯 力、王智平、肖荣振 2008 机械工程学报 **45** 30]
- [10] Conti M 1997 *Phys. Rev. E* **55** 765
- [11] Jeong , J H , Goldenfeld N , Dantzig Dantzig J A 2001 *Phys. Rev. E* **64** 041602
- [12] Ivantsov G P 1947 *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **58** 567
- [13] Long W Y , Cai Q Z , Chen L L , Wei B K 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 0256 (in Chinese) [龙文元、蔡启舟、陈立亮、魏伯康 2003 物理学报 **54** 0256]
- [14] Yu Y M , Yang G C , Zhao D W , Karma A , Beckermann C 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 2423 (in Chinese) [于艳梅、杨根仓、赵达文、Karma A , Beckermann C 2001 物理学报 **50** 2423]
- [15] Li M E , Yang G C , Zhou Y H 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 0454 (in Chinese) [李梅娥、杨根仓、周尧和 2005 物理学报 **54** 0454]

Numerical simulation of three-dimensional dendritic growth using phase-field method^{*}

Zhu Chang-Sheng^{1,2,†} Feng Li¹⁾ Wang Zhi-Ping¹⁾ Xiao Rong-Zhen¹⁾

1 *State Key Laboratory of Gansu Advanced Non-ferrous Metal Materials , Lanzhou University of Technology , Lanzhou 730050 , China*

2 *CAD Center , Lanzhou University of Technology , Lanzhou 730050 , China*

(Received 9 January 2009 ; revised manuscript received 12 February 2009)

Abstract

Quantitative numerical simulation of three-dimensional dendritic growth in pure undercooled melt is carried out based on phase-field model of thin-interface limit and incorporating interfacial energy anisotropy which is solved by an accelerated algorithm of the dynamic computing regions , the dendritic growth is faithfully described. The dendritic tip is analyzed by cutaway view , indicating that the anisotropy of main branches ' section is not more obvious than that of main branches . The dendritic tip growth speed , tip radius , tip Peclet number as well as classic stability parameter σ^* are simulated , compared with reported values under same condition , and they agree well with each other. Dendritic growth law that is in accordance with crystalline theory is achieved , and it is proved that it is feasible and effective to simulate three-dimensional dendritic growth using phase-field method.

Keywords : phase-field method , dendritic growth , microstructure , three-dimension numerical simulation

PACC : 8130 , 6480G , 7115Q , 8140

^{*} Project supported by the Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20070231001) , the Natural Science Foundation of Gansu Province (Grant No. 096RJZA104) and the Doctoral Fund of Lanzhou University of Technology (Grant No. SB14200801) .

[†] E-mail : zhucs@lut.cn