

受迫流动下的枝晶生长相场法模拟研究*

朱昌盛^{1)2)†} 王军伟¹⁾ 王智平¹⁾ 冯 力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 10 月 9 日收到;2009 年 12 月 5 日收到修改稿)

基于耦合流场和热噪声的相场模型及合理高效的三维动态求解域加速算法,定量模拟了在受迫流动下枝晶的非对称生长及流速对迎流、背流两侧的温度分布和层流层分布的影响. 计算结果表明,受迫流动使迎流、背流两侧温度的分布与层流层分布呈现不对称状态,导致迎流侧与背流侧的过冷度不同,而熔体施加于枝晶界面前沿迎流侧的力还不足以抑制过冷度的作用,结果造成枝晶迎流方向优先生长,从而产生倾向于散热方向的倾斜;同时,由于迎流侧的实际过冷度大于背流侧,有利于促进迎流一侧枝晶生长速度以及稳定侧向分枝生长,从而导致了侧向分枝的非对称生长. 随着流速的增加,枝晶倾斜程度越大,枝晶的不对称性越明显.

关键词: 相场方法, 受迫流动, 枝晶生长, 数值模拟

PACC: 8130, 6480G, 7115Q, 8140

1. 引 言

枝晶是金属凝固界面形态最典型的结构特征,它的生长是一个受传热、传质、界面曲率及动力学等因素综合影响的复杂的物理过程^[1]. 晶体生长输运过程对其生长速率起到限制作用,并影响到生长界面的稳定性. 对流在金属的凝固过程中是始终存在的,对流影响凝固微观组织形貌已是不容置疑的事实. 由于金属液对流强烈地改变了凝固过程中浓度场和温度场的分布,进而对枝晶的生长形貌产生非常重要的影响,直接影响到溶质偏析、凝固疏松及空洞等凝固缺陷的分布,并对金属凝固后的组织和成分偏析有着重要的影响^[2]. 因此,对凝固过程中流动作用的研究具有重要意义. 但是,由于包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、热及质量的传输过程之间的非线性耦合关系,使得其研究过程存在很大的困难^[3].

近年来,采用计算机模拟技术研究对流条件下凝固过程组织形成的规律是金属凝固研究领域中的热点和前沿课题之一. 在纯扩散条件的凝固模型基础上,熔体的对流被逐步耦合到相场方程中,对

于模拟对流条件下凝固过程的界面形态演化也取得了较大进展^[1,2]. 基于 Karma 的相场模型, Tong 和 Beckermann^[1] 提出了考虑流场的相场模型并进行了定量模拟,所得枝晶生长 Peclet 数和流动 Peclet 数间的关系与 Bouissou 和 Pelce 预测模型符合良好; Lan 和 Shin^[4] 首次模拟了强迫对流对 Ni-Cu 二元合金非等温自由枝晶的影响; Nestler 等^[5] 利用相场法模拟了对流对偏晶合金共晶层片间距的影响; Li 和 Beckermann^[6] 建立了流动对合金枝晶生长影响的静止薄膜模型,并将其与丁二腈-丙酮合金的已有实验数据进行比较,结果表明对流模型在溶质浓度较低时与实验测量的枝晶尖端速度和半径非常吻合. 由于相场法计算量大,计算方法是该领域的研究热点之一. Jeong 等^[2] 用并行算法,使用自适应有限元法模拟了流动对三维枝晶生长的影响,结果表明流动对三维枝晶生长的影响要比对二维的影响大; Tönhardt 和 Amberg^[7] 用自适应有限元法对自然对流和强迫对流两种情况下的枝晶生长进行了模拟; Lu 等^[8] 采用多重网格法,用有限差分法解相场方程和能量方程,定量模拟了强迫对流对三维枝晶生长的影响.

本文基于耦合流场和热噪声的相场模型,采用自行研制的动态求解域加速算法(AADCR),成功地

* 国家自然科学基金(批准号:10964004)、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)和甘肃省高等学校研究生导师科研计划(批准号:0903-03)资助的课题.

† E-mail: zhucs@lut.cn

定量模拟了强迫对流对三维枝晶体生长的影响及枝晶的非对称生长,力求得到与结晶理论相一致的枝晶生长规律,采用数值模拟方法来全面表征复杂体系的凝固特性.

2. 数学模型

2.1. 相场方程和温度场方程

耦合热噪声的相场方程和温度场控制方程可表示为:

$$\begin{aligned} \tau(\mathbf{n})\partial_t\phi &= [\phi - \lambda\mu(1 - \phi^2)](1 - \phi^2) \\ &+ \nabla[W^2(\mathbf{n})\nabla\phi] \\ &+ \sum_{m=x,y} \partial_m[|\nabla\phi|^2 W(\mathbf{n}) \frac{\partial W(\mathbf{n})}{\partial(\partial_x\phi)}] \\ &+ \theta(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\nabla^2 u + \frac{1}{2} \frac{\partial p(\phi)}{\partial t} - \nabla \cdot \mathbf{q}(\mathbf{r}, t), \quad (2)$$

其中, D 为热扩散系数, λ 为耦合常数, 无量纲温度 $u = (T - T_M)/(L/C_p)$, 式中 T_M, L 和 C_p 分别是金属熔点、潜热和比热. τ 和 W 分别表示界面动力学各向异性及界面能各向异性, 都是界面法向矢量 \mathbf{n} 的函数:

$$\tau(\mathbf{n}) = \tau_0 \left[1 + \frac{4\varepsilon_4}{1 - 3\varepsilon_4} \frac{(\partial_x\phi)^4 + (\partial_y\phi)^4}{|\nabla\phi|^4} \right], \quad (3)$$

$$\begin{aligned} W(\mathbf{n}) &= W_0(1 - 3\varepsilon_4) \\ &\times \left[1 + \frac{4\varepsilon_4}{1 - 3\varepsilon_4} \frac{(\partial_x\phi)^4 + (\partial_y\phi)^4}{|\nabla\phi|^4} \right]. \end{aligned} \quad (4)$$

θ 和 \mathbf{q} 均表示热噪声矢量, 各自遵循下述 Gauss 分布:

$$\begin{aligned} \langle \theta(\mathbf{r}, t)\theta(\mathbf{r}', t') \rangle \\ = 2F_\phi\delta_{mn}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta(t - t'), \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \langle q_m(\mathbf{r}, t)q_n(\mathbf{r}', t') \rangle \\ = 2Dk_B \frac{C_p T_M^2}{L^2} \delta_{mn}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta(t - t'), \end{aligned} \quad (6)$$

其中, k_B 为 Boltzmann 常数, δ_{mn} 为 Kroecker 函数, δ 为 Delta 函数, 将其中的一些变量按下述形式无量纲化: $\mathbf{r}/W_0 \rightarrow \mathbf{r}, t/\tau \rightarrow t, D\tau_0/W_0^2 \rightarrow D, \tau\theta \rightarrow \theta, \mathbf{q}\tau_0/W_0 \rightarrow \mathbf{q}$, 热噪声矢量将变成:

$$\begin{aligned} \langle \theta(\mathbf{r}, t)\theta(\mathbf{r}', t') \rangle \\ = 2F_\phi\delta_{mn}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta(t - t'), \end{aligned} \quad (7)$$

$$\langle q_m(\mathbf{r}, t)q_n(\mathbf{r}', t') \rangle$$

$$= 2DF_u\delta_{mn}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta(t - t'), \quad (8)$$

其中, F_u 是热噪声幅值, 可以写成以下形式:

$$\begin{aligned} F_u &= \frac{k_B T_M^2 C_p}{L^2 w_0^2} = \frac{k_B T_M^2 C_p}{L^2 d_0^2} \left(\frac{d_0}{w_0} \right)^2 \\ &= F_{\text{exp}} \left(\frac{d_0}{w_0} \right)^2. \end{aligned} \quad (9)$$

2.2. 质量和动量守恒方程

质量守恒方程与动量方程由以下的方式耦合到相场方程中, 为统一描述液相区和枝晶间液体金属的流动, 假定凝固过程中流动不引起晶粒位置的变化^[1].

质量守恒方程(连续性方程)为

$$\nabla \cdot ((1 - \phi)\mathbf{V}) = 0, \quad (10)$$

其中, \mathbf{V} 为流动速度.

动量守恒方程为

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [(1 - \phi)\mathbf{V}] + \mathbf{V}(1 - \phi) \cdot \nabla \mathbf{V} \\ = -\frac{1}{\rho}(1 - \phi)\nabla P + \nabla[\mu\nabla(1 - \phi)\mathbf{V}] \\ - m\mathbf{V}, \end{aligned} \quad (11)$$

其中, P 为无量纲压力; μ 为运动黏度; ρ 为密度, 这里假定固液相密度相同; m 为界面拖动系数, 其取值为

$$m = h \frac{\mu\phi^2(1 - \phi)}{W^2}, \quad (12)$$

其中, h 是在 2.55—2.757 之间与界面厚度有关的无量纲常数.

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

对半径为 r_0 的初始晶核:

$$\begin{aligned} \phi &= 1, u = 1, V_x = 0, V_y = 0, \\ p &= 0 \quad (x^2 + y^2 \leq r_0^2); \\ \phi &= -1, u = -\Delta, V_x = 0, V_y = 0, \\ p &= U \quad (x^2 + y^2 > r_0^2). \end{aligned} \quad (16)$$

其中, x, y 分别代表横坐标、纵坐标, V_x, V_y 分别为 x, y 方向上的分速度. 初始界面采用圆形形状, 它代表凝固开始时的晶核.

在计算区域的边界上, 相场、温度场、流场及压力场均采用 Zero-Neumann 边界条件^[9]. 模拟采用的

相场参数及计算参数如表 1 所示.

表 1 相场参数及计算参数

参数	ε	Δ	d_0/W_0	D	τ_0	λ	$\Delta x = \Delta y$	Δt
值	0.06	-0.65	0.277	1	1	6.4	0.4	0.016

3.2. 数值求解方法

上述方程采用有限差分法求解, (1) 式采用 Euler 算法, (2) 式采用 ADI (alternating direction implicit) 算法, 采用基于同位网格的 Simple 算法求解流场控制方程. 相场法计算效率低, 占用内存资源很大, 特别是对耦合流动场的三维枝晶生长模型. 研究求解的有效计算方法, 在保证计算精度的前提下, 对极大地提高计算规模和效率具有重要意义. 本研究采用三维动态求解域加速算法 (3D

accelerated algorithms of dynamic computing regions, 简记为 3DAADCR), 该计算方法的思想如图 1 所示. 设某时刻温度场上游枝晶尖端、下游枝晶尖端及对流法向枝晶尖端所在网格数分别为 UGN , DGN , NGN , 由于上游枝晶较下游枝晶和对流法向枝晶生长快, $UDG \geq NGN \geq DGN$ (当无对流时, 等号成立). 基于此, 以初始晶核为中心, $2 \times UGN$ 长度为边长的立方体区域为求解域 (图 1 (b) 实线立方体), 该区域完全包含当前计算时刻枝晶溶质场的变化区域, 随着枝晶长大求解域动态增加, 由于 UGN 小于实际计算区域 AGN , 如图 1 (b) 虚线立方体, 因此可大大减少计算时间, 加速效果明显. 特别是计算初期求解域比较小时, 加速效果更加显著, 如图 1 (c) 所示. 由于该算法只是计算域的重新设定, 因此不会降低精确度.

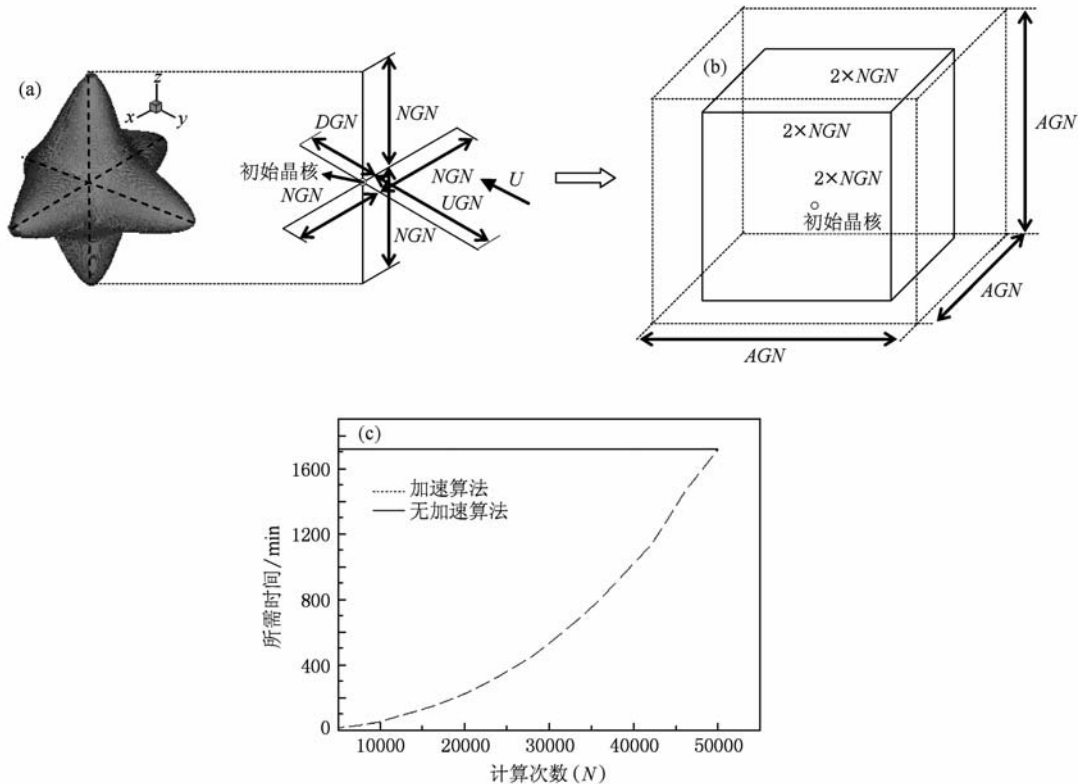


图 1 3DAADCR 原理示意图 (a) 温度场, (b) 动态求解区域与实际计算区域比较, (c) 3DAADCR 加速效果

4. 结果及讨论

4.1. 二维枝晶形貌及其温度场

图 2 (a) 为生长时间 $t = 7000\Delta t$, 热噪声幅值 $F_n = 10^{-4}$, 无流动时的枝晶形貌. 可以看出, 枝晶在优

先生长方向上均衡生长, 各枝晶尖端附近的扩散层分布也相同, 枝晶呈现对称形貌. 图 2 (b) 为生长时间 $t = 7000\Delta t$, 无热噪声, 流动速度为 $Ud_0/D = 0.027$ 时的枝晶形貌. 可以看出, 当加入流场后, 虽然没有引入热噪声, 但流动也触发了侧向分枝, 侧向分枝在迎流侧比较发达, 而在背流侧没有呈现, 从而枝晶在各优先生长方向上呈现非对称性. 图 2 (c) 为生

长时间 $t = 7000\Delta t$, 热噪声幅值 $F_u = 10^{-4}$, 流动速度为 $Ud_0/D = 0.027$ 时的枝晶形貌. 可以看出, 在流动和热噪声的作用下, 枝晶各个方向生长速度不同, 迎流枝晶的生长得到促进, 背流枝晶的生长受到抑制, 迎流枝晶明显比背游及对流方向的枝晶生长

快, 迎游枝晶臂最长, 背游枝晶臂最短, 水平方向枝晶臂介于两者之间. 另外, 一次枝晶干和二次枝晶臂都明显朝着迎游方向偏斜, 迎游方向的二次枝晶臂比背游的二次枝晶臂要发达.

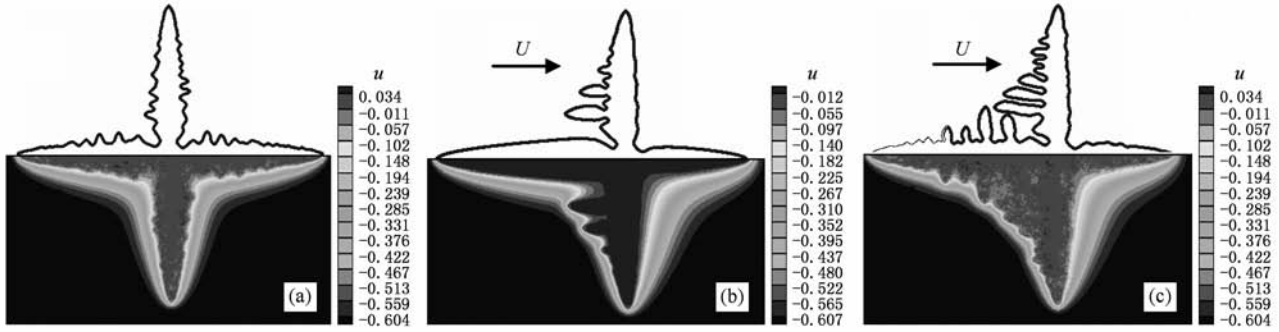


图 2 $t = 7000\Delta t$ 时的枝晶形貌及温度场 (a) 无流动, 有噪声; (b) 有流动, 无噪声; (c) 有流动, 有噪声

4.2. 三维枝晶形貌及其温度场

相场参数及计算参数的取值如表 1 所示. 3 个主枝晶尖端沿坐标轴 $\langle 100 \rangle$, $\langle 010 \rangle$, $\langle 001 \rangle$ 方向生长, 对流沿 $\langle 010 \rangle$ 方向, 大小为 $Ud_0/D = 0.035$ 时, 无热噪声. 图 3(a)–(d) 为不同生长时刻的三维枝晶形貌, 图 3(e) 为生长时间 $t = 21000\Delta t$ 时刻沿枝晶中心平行于 yoz 面的三维枝晶剖切图. 可以看出, 对流对三维枝晶的生长有较大的影响. 由于没有引入热噪声, 枝晶一直保持光滑, 但对流促成了晶体在择优生长方向上的非对称性, 迎游主枝明显比背游及流体方向的发达. 通过对比可发现, 在相同的计算参数条件下, 流动对三维枝晶生长的影响要比对二维的影响大, 这与 Jeong 等研究流动对三维枝晶生长的影响得出的结论相同^[2].

图 4(a)–(d) 为枝晶生长时间 $t = 1800\Delta t$ 时刻对应的温度场及沿枝晶中心平行于 yoz 面的三维温度场剖切图云图等值线、背流侧平行于 yoz 面距枝

晶中心 $30\Delta x$ 的剖切图线条等值线、沿枝晶中心平行于 yoz 面的三维温度场剖切图线条等值线以及迎流侧平行于 yoz 面距枝晶中心 $30\Delta x$ 的剖切图线条等值线. 可以看出, 当存在对流时, 包围迎游侧枝晶的热扩散层明显比无对流时包围枝晶尖端的温度扩散层薄, 温度梯度大; 相反, 当存在对流时, 包围背流侧枝晶的热扩散层明显比无对流时包围枝晶尖端的温度扩散层厚, 温度梯度较小.

在等轴晶长大时排出的潜热需通过热扩散层向熔体中释放. 一方面由于对流对迎流侧枝晶的冲刷, 将凝固过程中释放的热量带走, 减少了迎流侧枝晶尖端的热扩散层厚度, 导致迎流侧枝晶尖端的实际过冷度增大, 枝晶生长迅速, 薄的热扩散层有利于潜热的释放, 促进了主枝及侧向分支的发展; 另一方面, 在背流侧, 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, 热扩散层阻碍了潜热的释放, 从而对界面的扰动起到抑制作用. 同时,

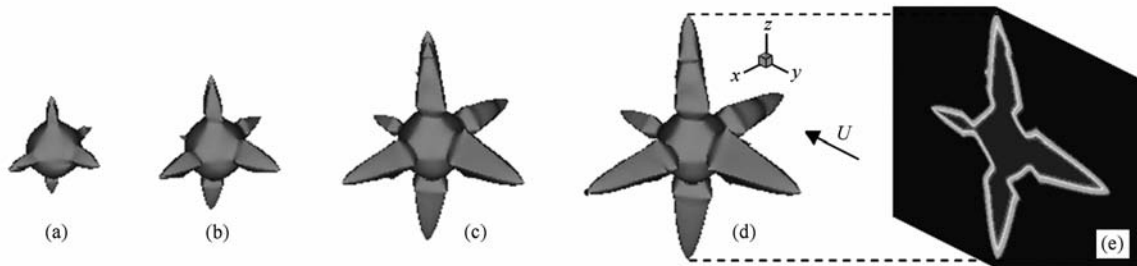


图 3 不同生长时刻的枝晶形貌 (a) $t = 9000\Delta t$, (b) $t = 15000\Delta t$, (c) $t = 18000\Delta t$, (d) $t = 21000\Delta t$, (e) $t = 21000\Delta t$ 时枝晶沿中剖切图

随着加入的强制流速度增大,流体对迎游枝晶尖端的冲刷增大,热量扩散加快,导致迎游枝晶尖端温

度迅速降低,从而使得迎游枝晶生长更快.

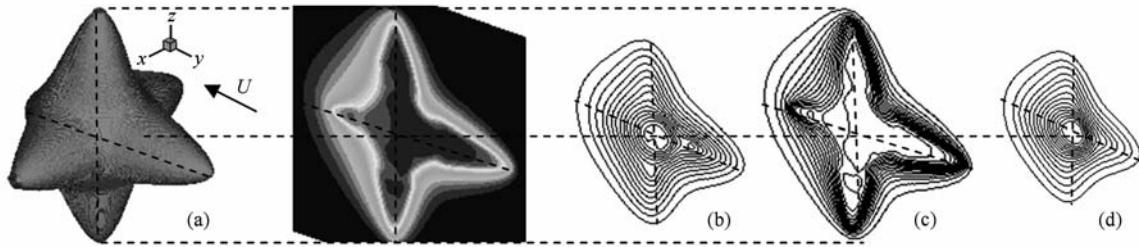


图4 三维枝晶生长温度场 (a) $t = 1500\Delta t$ 时温度场及中心剖切图, (b) $x = -30\Delta x$ 剖切图, (c) 沿枝晶中心剖切图, (d) $x = 30\Delta x$ 剖切图

4.3. 枝晶的非对称生长及迎流倾斜

枝晶在凝固过程中不断释放出热量,在前沿的液体内部形成一定厚度的扩散层,热量的不断扩散使得生长界面前沿的液相温度升高,而在前沿产生负温度梯度. 迎游侧冲刷来的过冷熔体即刻与迎游侧枝晶周围熔体进行热交换,使得迎游枝晶尖端周围的温度迅速下降而形成较大的温度梯度,如此,从迎游枝晶尖端处排出的热流能够迅速扩散而加快了迎游枝晶生长. 另外,不管是否考虑流动,在靠近生长界面前沿液相一侧还存在一层流边界层 δ ,在不考虑受迫流动或者自然对流较小的情况下,生长界面前沿迎流侧及背流侧的温度分布及层流边界层的分布如图 5(a) 所示. 可以看出,此时 δ 值比较大,枝晶之间温度的分布对称均匀^[10]. 当存在受迫流动时,层流边界层随流动的变化而变化,流速越大,迎流一侧层流边界层 δ 值越小,而温度梯度 G_L 值越大,造成生长界面前沿迎流侧及背流侧两侧的温度的分布和层流层 δ 的分布呈不对称状态,如图 5(b) 所示,使得生长界面前沿迎流侧及背流侧两侧的过冷度不同. 由于迎流侧的实际过冷度大于背流侧,有利于促进迎流一侧枝晶生长速度以及稳定侧向分枝生长,从而导致了侧向分枝的非对称生

长. 在受迫流动下还有一个因素影响枝晶生长的最后形态^[10],就是流动的熔体一直在生长界面前沿迎流一侧向枝晶施加一顺流方向的作用力,该作用力对枝晶的迎流生长起到抑制作用,流速越大,作用力越强,抑制作用越发明显. 顺流作用于枝晶的力与过冷度的综合作用导致了枝晶倾斜,从而产生了迎流生长的非对称枝晶.

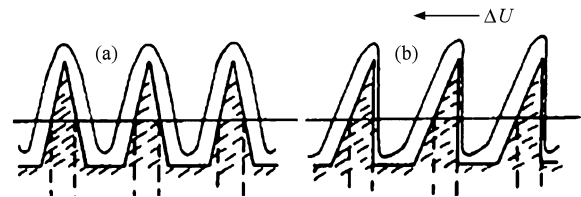


图5 受迫流动下的枝晶间层流边界层和温度分布示意图

图 7(a) — (f) 为生长时间 $t = 2000\Delta t$ 时,不同流动速度下的枝晶生长形貌. 可以看出,在没引入流动场时(如图 7(a) 所示),其枝晶间温度分布对称均匀(如图 6(a) 所示),枝晶一次主干与二次分枝相互垂直,主干两侧二次分枝呈对称生长. 随着强迫流动的引入,使得两侧的温度分布和层流层分布呈不对称状态(如图 6(b) 所示),迎流侧过冷度增加使枝晶迎流生长,而产生枝晶的非对称生长;另

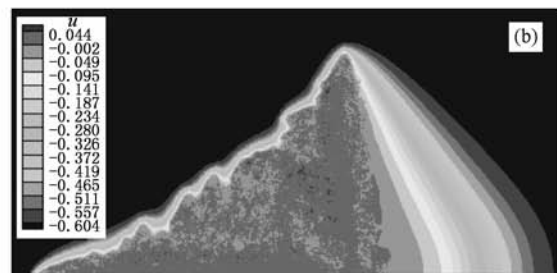
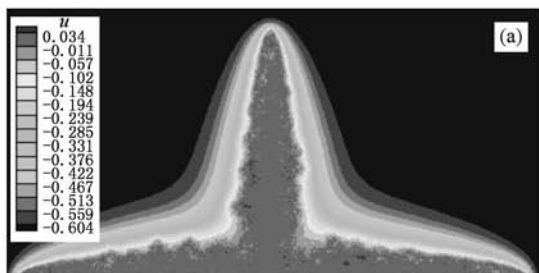


图6 生长时间 $t = 2000\Delta t$ 时的温度场 (a) $\varepsilon = 0.06$, 无流动; (b) $\varepsilon = 0.06$, 有流动

一方面,由于计算空间受限,本文研究引入流动流速较小,熔体施加于枝晶界前沿迎流侧的力还不足以抑制过冷度的作用,最终产生了相对于散热方向的倾斜而呈曲线生长,此时虽然二次分枝仍垂直

一次主干,但迎流侧的二次分枝长度明显大于背流侧.随着流速的增加,枝晶倾斜角度 α 越大,枝晶的不对称性越明显.

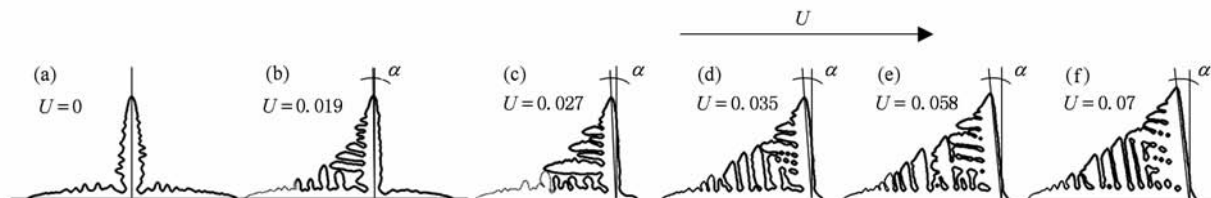


图7 生长时间 $t=2000\Delta t$ 时对应的温度场 (a) $U=0$, (b) $U=0.019$, (c) $U=0.027$, (d) $U=0.035$, (e) $U=0.058$, (f) $U=0.07$

5. 结 论

1) 基于耦合流场和热噪声的相场模型及自行设计的3DAADCR,定量模拟了在受迫流动下三维枝晶的非对称生长及流速对迎流、背流两侧的温度分布和层流层分布的影响,探讨了对流对枝晶组织的影响,并得到了与结晶理论相一致的枝晶生长规律.

2) 流动可使迎流侧与背流侧温度场的分布和层流层的分布呈现不对称状态,导致两侧的过冷度存在差异,结果导致枝晶迎流一侧优先生长,最终向散热方向倾斜.流速越大,枝晶倾斜程度越大,其不对称性越明显.

3) 由于迎流侧的实际过冷度大于背流侧,促进了枝晶生长速度和稳定侧向分枝生长,从而导致了二次枝晶的非对称生长.

[1] Tong X, Beckermann C 2000 *Phys. Rev. E* **61** R49
 [2] Jeong J H, Goldenfeld N, Dantzig J A 2001 *Phys. Rev. E* **64** 041602
 [3] Villers D, Platten J K 1992 *J. Fluid Mech.* **234** 487
 [4] Lan C W, Shin C J 2002 *J. Cryst. Growth* **241** 379
 [5] Nestler B, Wheeler A A, Ratke L 1999 *Physica D* **140** 133
 [6] Li Q, Beckermann C 2002 *J. Cryst. Growth* **236** 482
 [7] Tönhardt R, Amberg G 2000 *Phys. Rev. E* **62** 828

[8] Lu Y L, Beckermann C, Karma A 2002 *Mater. Res. Soc.* **22** 701
 [9] 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]
 [10] Jiao Y N, Liu Q M, Yang Y S, Ge Y L, Hu Z Q 1993 *J. Mater. Engng.* **7** 14 (in Chinese) [焦育宁、刘清民、杨院生、葛云龙、胡壮麒 1993 材料工程 **7** 14]

Dendritic growth in forced flow using the phase-field simulation *

Zhu Chang-Sheng^{1)2)†} Wang Jun-Wei¹⁾ Wang Zhi-Ping¹⁾ Feng Li¹⁾

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 October 2009; revised manuscript received 5 December 2009)

Abstract

The asymmetrical dendritic growth and the effect of flow velocity on the temperature distribution and laminar flow boundary layer of both facing-flow side and against-flow side has been investigated numerically based on the phase-field model which incorporates both fluid flow and thermal noise, as well as reasonably high efficiency 3DAADCR. The computed results indicate that, the forced flow causes the dissymmetry of the distribution of the temperature distribution and laminar flow boundary layer of both facing-flow side and against-flow side, leading to the different undercooling on either sides, as a result, the dendritic growth towards the flow and inclination relative to the dissipating heat direction appear. At the same time, the undercooling of facing-flow side is greater than that of against-flow side, which is helpful to accelerate dendritic growth rate and makes the sidebranching steady growth, accordingly, resulting in assymmetrical sidebranching growth. With the increase of flow velocity, the greater the inclination, and the more obvious the assymmetrical degree.

Keywords: phase-field method, force flow, dendritic growth, numerical simulation

PACC: 8130, 6480G, 7115Q, 8140

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10964004), the Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20070231001), the Natural Science Foundation of Gansu Province, China (Grant No. 096RJZA104) and the Research Project for Higher Education of Gansu Province, China (Grant No. 0903-03).

† E-mail: zhucs@lut.cn