

热扰动对过冷熔体中二次枝晶生长影响的相场法模拟^{*}

杨 弘 张清光 陈 民[†]

(清华大学工程力学系, 北京 100084)

(2004 年 10 月 19 日收到 2005 年 3 月 11 日收到修改稿)

用相场法模拟了过冷纯物质二次枝晶的生长过程,并定量地研究了过冷度、各向异性、热扰动振幅等参数对二次枝晶的影响.通过加入热扰动,相场法能更真实地模拟过冷熔体中二次枝晶的生长,计算得到的二次枝晶间距和幅值与由 Wentzel-Kramers-Brillouin 方法得到的结果符合较好.模拟结果表明,过冷度和各向异性对二次枝晶有较大影响.当过冷度增大时,二次枝晶间距随之减小;当各向异性增大时,二次枝晶间距随之增大,但二次枝晶幅值则随之减小.热扰动振幅主要影响二次枝晶幅值,而对二次枝晶间距影响较弱.

关键词:相场法,热扰动,枝晶生长,二次枝晶

PACC: 6150, 6470, 8140

1. 引言

枝晶生长是凝固过程中十分常见的现象,它对凝固产品的性能有重要的影响,同时枝晶生长也是非平衡系统中自由生长的典型例子.对这一过程的理解无论是在理论上还是在实际应用中都具有十分重要的意义.模拟枝晶生长的困难在于如何处理具有复杂形状的固液界面,而相场法通过引入相场变量 ϕ ,能避免直接跟踪固液界面,提高计算效率,因此是介观组织模拟中的研究热点^[1,2].1993 年 Kabayashi^[3]利用含有各向异性的相场模型对二维纯金属过冷熔体中的枝晶生长进行了模拟,首次实现了复杂形状枝晶生长的模拟. Karma 等^[4-6]对相场模型进行了薄界面渐进分析,提出了界面厚度可以大于毛细长度的观点,这极大地提高了相场模型的计算效率.之后他们又利用耦合热扰动的相场模型研究了边枝的生长,并证明自己的模拟结果和由 Wentzel-Kramers-Brillouin(WKB)方法得到的解是一致的.于艳梅等^[7,8]利用相场模型研究了各向异性、界面动力学系数,热扩散系数和界面能对枝晶尖端状态的影响.本文主要利用耦合热扰动的相场模型

来模拟二次枝晶的生长,并讨论了各种参数对二次枝晶生长的影响.

2. 理论模型和数值求解

相场模型是以金兹堡-朗道理论为基础,用有序参量 $\phi(\mathbf{r}, t)$ 来表示物质在不同时刻、不同位置相的状态.在液相区相场变量 $\phi = 0$,在固相区 $\phi = 1$.这样固液界面就是 $\phi = 0$ 到 1 光滑变化,具有一定厚度的扩散区域.利用自由能减小原理并与热扩散方程耦合就能构造无对流条件下的二维相场模型,其方程如下:

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

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

式中 $u = \frac{T - T_m}{L/c_p}$ 为无量纲温度, T_m 为熔点, L 为潜热, c_p 为比热容; D 为热扩散率; $h(\phi)$ 是与潜热有关的函数; λ 是热扩散场和相场的耦合系数; $\tau(\mathbf{n})$ 为

^{*} 国家自然科学基金重大项目(批准号 50395101)资助的课题.

[†] E-mail: mchen@tsinghua.edu.cn

表征固液界面原子运动时间的变量, $W(\mathbf{n})$ 是界面厚度, $n = \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}$. 定义各向异性因子

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

式中 ϵ 是各向异性系数. 则 $\tau(\mathbf{n}), W(\mathbf{n})$ 可以分别表示为

$$\tau(\mathbf{n}) = \tau_0 (A_s(\mathbf{n}))^2, \quad (4)$$

$$W(\mathbf{n}) = W_0 A_s(\mathbf{n}), \quad (5)$$

其中 W_0, τ_0 均为常数. \mathbf{q} 是以 Langevin 力形式耦合进热扩散方程的能量守恒的热扰动, 在这里忽略了相场方程中非能量守恒的扰动. \mathbf{q} 服从高斯分布, 均值为零, 方差如下:

$$\langle q_m(\mathbf{r}, t) q_n(\mathbf{r}', t') \rangle = 2DF_u \delta_{mn} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'), \quad (6)$$

$$F_u = \frac{k_B T_m^2 c_p}{L^2 W_0^d}, \quad (7)$$

式中 k_B 为 Boltzmann 常量, δ 为冲击函数, F_u 为热扰动振幅.

对相场方程和热扩散方程采用均匀网格的二阶精度中心差分格式进行离散. 为了提高计算效率, 采用双重网格法, 即热扩散场空间步长是相场空间步长的 5 倍. 各种物性参数均不随时间变化. 计算区域为 800×800 的网格, 相场和热扩散场均采用绝热边界条件 (Neumann 边界条件). Δ 为无量纲过冷度. 初始晶核半径为 r_0 , 置于计算区域的左下角, 则

$$x^2 + y^2 \leq r_0 \quad (\phi = 1, u = 0), \quad (8)$$

$$x^2 + y^2 > r_0 \quad (\phi = 0, u = -\Delta). \quad (9)$$

同时为了保证收敛性, 空间步长、时间步长应满足如下条件:

$$\Delta x < W_0/2, \quad (10)$$

$$\Delta t < \Delta x^2/4D. \quad (11)$$

为了计算二次枝晶臂间距 $\lambda(z)$ 和幅值 $A(z)$, 首先要计算一个无热噪声稳态的枝晶主干尖端形状 $x_0(z)$, 然后再计算含有热噪声的枝晶主干尖端形状 $x(z, t)$, 则

$$A(z) = \sqrt{\langle [x(z, t) - x_0(z)]^2 \rangle}, \quad (12)$$

$$\langle \lambda(z) \rangle = \frac{2V(t_2 - t_1)}{N(z)}, \quad (13)$$

式中 z 是距枝晶主干尖端的距离, V 是枝晶主干尖端速度, $N(z)$ 表示在距枝晶主干尖端 z 处在 $(t_2 - t_1)$ 时间内曲线 $x(z, t)$ 极值点的个数. x, z 的具体

关系如图 1 所示 (其中 ρ 为枝晶尖端半径).

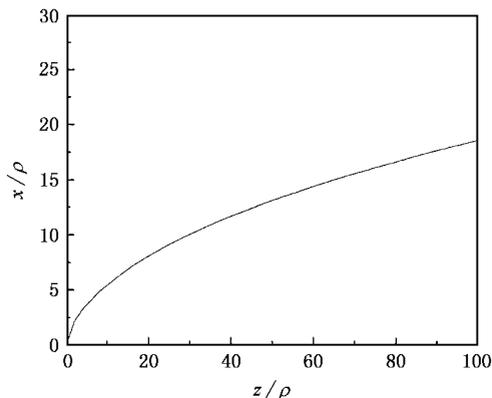


图 1 $x-z$ 关系曲线

3. 计算结果和分析

3.1. 过冷熔体中枝晶生长的形貌及其温度场

图 2 是无噪声条件下计算得到的枝晶尖端生长速度 $v_{tip} = \frac{Vd_0}{D}$ 和枝晶尖端半径 $\rho_{tip} = \frac{\rho}{d_0}$ (其中 d_0 是毛细长度). 由图 2 可见, 随着时间的逐步推移, 枝晶尖端生长速度和半径都逐渐收敛, 而且收敛后的枝晶尖端生长速度和微观可解理论 (MSC) ^[5] 符合得较好. 这就证明了本文的模拟是正确可信的.

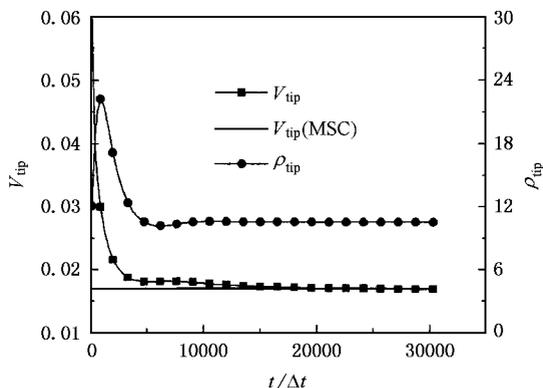


图 2 无量纲枝晶尖端生长速度和尖端半径随时间的推移而收敛 $\Delta = 0.55, d_0 = 0.139, \epsilon = 0.005, D = 4, W_0 = 1, \tau_0 = 1$

用相场法模拟枝晶生长时, 在无噪声条件下, 合理选择参数会消除由于数值误差引起的二次枝晶, 这时模拟得到的是光滑枝晶. 图 3 是加入热扰动 \mathbf{q} 以后形成的枝晶形貌和温度场的分布. 由图 3 可见, 加入热扰动后不但形成了二次枝晶, 而且在某些二次枝晶的一侧出现了三次枝晶. 值得注意的是三

次枝晶不是在二次枝晶的两侧同时出现,而只出现在一侧,这种特殊的现象已经得到了实验的证实^[9].在模拟中还观察到二次枝晶间的互相竞争,某些枝晶会抑制其临近枝晶的生长.同时由于凝固潜热的释放,一些地方出现了重熔现象.从图 3(b)可以看到,由于相变潜热的释放,固相中的温度要比液相高,热流是从固相流向液相.在枝晶尖端具有最大的温度梯度,而在枝晶根部温度梯度最小.同时,由于热扰动的出现使得最低温度低于初始过冷度.

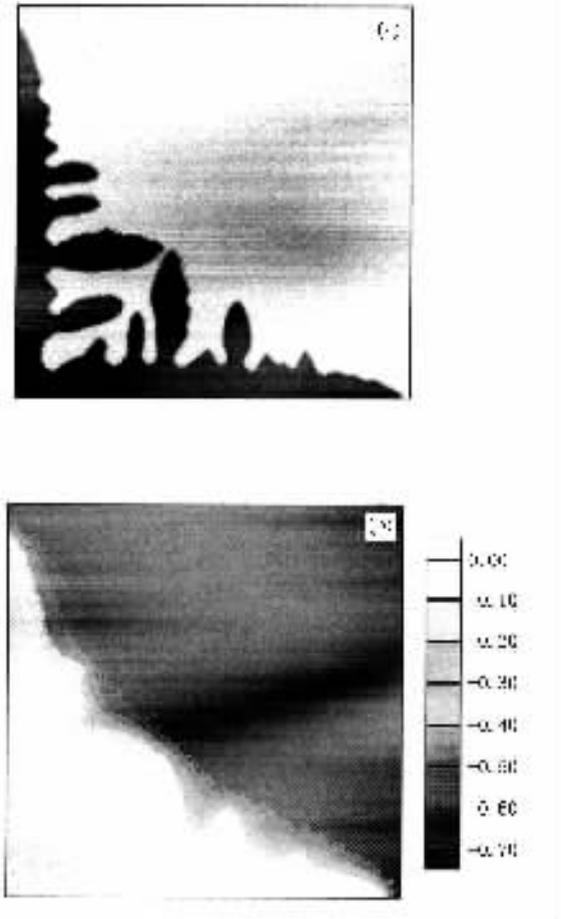


图 3 引入热噪声后枝晶形貌和温度场的分布 (a)相场 (b)温度场. $\Delta = 0.65$, $d_0 = 0.139$, $\varepsilon = 0.005$, $D = 4$, $W_0 = 1$, $\tau_0 = 1$

3.2. 相场参数对二次枝晶生长的影响

对于很多实际使用的合金,二次枝晶和合金的机械性能有着紧密的关系. Karma^[6]在 Langer 等工作的基础上,利用 WKB 近似法得到了不同形状针状枝晶二次枝晶间距和幅值的理论解.图 4 是计算得到的无量纲二次枝晶间距和幅值.从图 4(a)可以看到,模拟得到的二次枝晶间距和理论值相差近 50%,但考虑了枝晶生长过程中的拉伸效应

(stretching effect)后^[6],模拟结果和理论值就比较一致了.从图 4(b)可以看到,在枝晶尖端附近二次枝晶幅值几乎和理论值一样,但随着 z 的增大,模拟结果和理论值相差就越来越大,这主要是由于非线性效应和理论解的不完善性所引起的^[6].

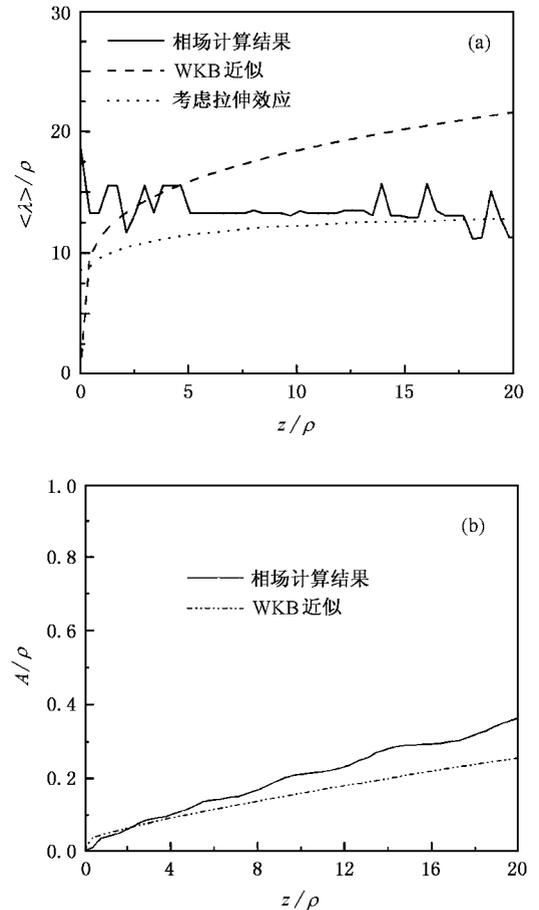


图 4 计算得到的无量纲二次枝晶间距、幅值和理论值的对比 (a)二次枝晶间距 (b)二次枝晶幅值. $\Delta = 0.55$, $d_0 = 0.139$, $\varepsilon = 0.005$, $D = 4$, $W_0 = 1$, $\tau_0 = 1$

图 5 比较了过冷度对二次枝晶间距和幅值的影响.过冷度是枝晶生长的驱动力,随着过冷度的增大,枝晶生长逐渐加快,从而影响到二次枝晶的生长.图 5(a)表明随着过冷度的增大,二次枝晶间距逐渐减小.图 5(b)表明在靠近枝晶尖端附近的地方,随着过冷度的增大,二次枝晶幅值逐渐减小;在离枝晶尖端较远的地方则反之.由于计算条件的限制,本文只统计了 $|z|/\rho = 20$ 以内的点,想要更清楚地了解过冷度和二次枝晶的关系,统计的距离应该更远,过冷度的范围也应该更大.

图 6 比较了各向异性对二次枝晶间距和幅值的影响.计算结果表明,随着各向异性增大,二次枝晶

间距显著地增大,但二次枝晶幅值则随之减小. 微观可解理论指出,枝晶尖端状态和各向异性有着密切的关系^[10],而图 6 则表明二次枝晶间距、幅值和各向异性也有着密切的关系.

图 7 比较了热扰动振幅对二次枝晶间距和幅值

的影响. 图 7(a)显示二次枝晶间距随热扰动振幅变化不大. 图 7(b)则表明二次枝晶幅值随着热扰动振幅的增大而增大. 热扰动振幅是体现热扰动强弱的物理量,热扰动振幅越大则热扰动越强,二次枝晶臂就生长得越大.

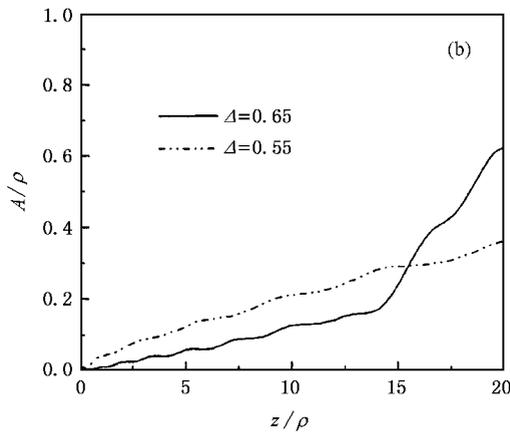
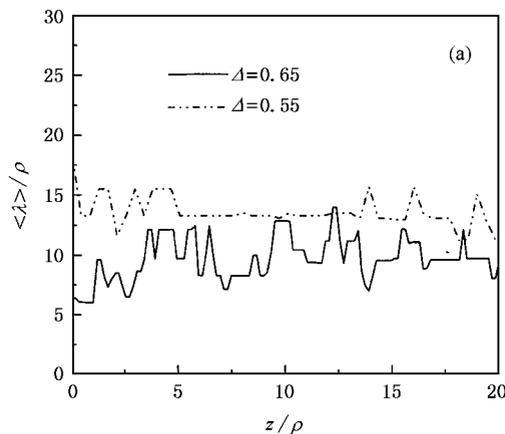


图 5 过冷度对二次枝晶间距和幅值的影响 (a)二次枝晶间距 (b)二次枝晶幅值. $d_0 = 0.139, \epsilon = 0.005, D = 4, W_0 = 1, \tau_0 = 1$

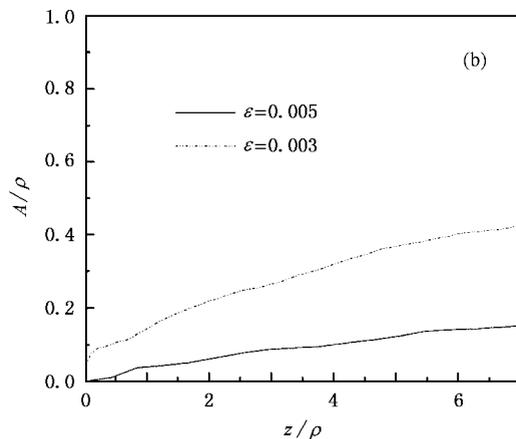
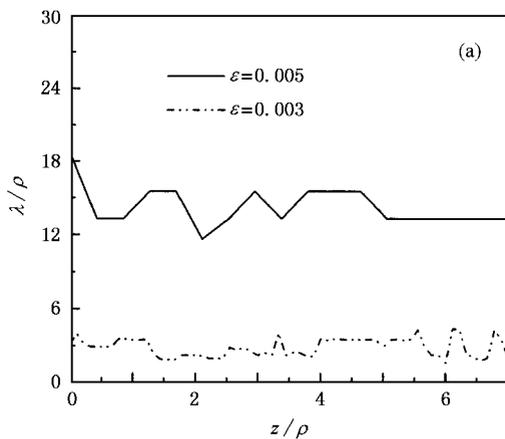


图 6 各向异性对二次枝晶间距和幅值的影响 (a)二次枝晶间距 (b)二次枝晶幅值. $\Delta = 0.55, d_0 = 0.139, D = 4, W_0 = 1, \tau_0 = 1$

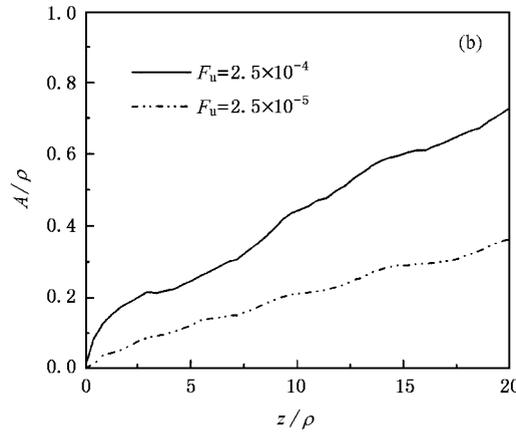
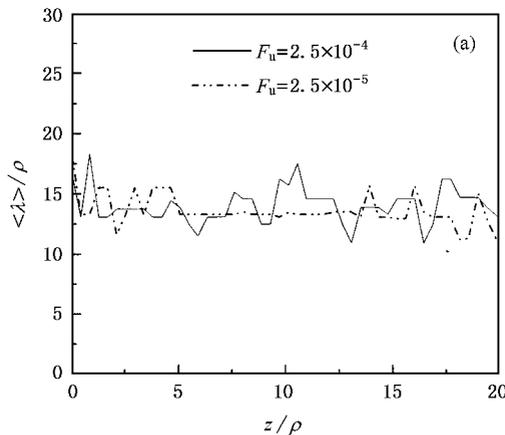


图 7 热扰动振幅对二次枝晶间距和幅值的影响 (a)二次枝晶间距 (b)二次枝晶幅值. $\Delta = 0.55, d_0 = 0.139, \epsilon = 0.005, D = 4, W_0 = 1, \tau_0 = 1$

4. 结 论

本文利用耦合热扰动的相场模型模拟了过冷熔体中二次枝晶的生长过程,讨论了相场参数对枝晶生长的影响,得到的主要结论如下:

1)相场法可以真实地模拟过冷熔体中二次枝晶的生长过程.通过加入热扰动,观察到了二次和三

次枝晶臂的出现、枝晶间的竞争生长、枝晶臂的粗化等现象,这些现象与实验是一致的.

2)过冷度和各向异性对二次枝晶的生长有着较大的影响.过冷度越大,二次枝晶间距就越小;各向异性越大,二次枝晶间距就越大,而二次枝晶幅值则减小.

3)热扰动振幅主要影响二次枝晶幅值,对二次枝晶间距影响相对较弱.

-
- [1] Boettinger W J *et al* 2000 *Acta Mater.* **48** 43
 [2] Boettinger W J *et al* 2002 *Annu. Rev. Mater. Res.* **32** 163
 [3] Kobayashi R 1993 *Phys. Rev. D* **63** 410
 [4] Karma A, Rappel W J 1996 *Phys. Rev. E* **53** R3017
 [5] Karma A, Rappel W J 1998 *Phys. Rev. E* **57** 4323
 [6] Karma A 1999 *Phys. Rev. E* **60** 3614
 [7] Yu Y M, Yang G C 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 2423 (in Chinese)
 [于艳梅、杨根仓 2001 物理学报 **50** 2423]
 [8] Yu Y M *et al* 2003 *Chin. Phys.* **12** 211
 [9] Zhang G Y 2002 *Ph. D. Thesis* (Beijing: Tsinghua University) (in Chinese) [张光跃 2002 博士学位论文(北京:清华大学)]
 [10] Kessler D A, Koplik J, Levine H 1988 *Adv. Phys.* **37** 255

A phase-field simulation on the influence of thermal fluctuation on secondary branch growth in undercooled melt *

Yang Hong Zhang Qing-Guang Chen Min

(Department of Engineering Mechanics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

(Received 19 October 2004; revised manuscript received 11 March 2005)

Abstract

The dendritic growth in an undercooled melt of pure substance is simulated by a phase-field model. The relationship between the dendritic growth and the parameters used in phase-field method (including undercooling, anisotropic coefficient, magnitude of thermal fluctuation) has been studied quantitatively. By employing the thermal fluctuations the birth of secondary branches has been successfully simulated. The spacing and amplitude of the secondary branches are obtained, which are in reasonable agreement with those by using the Wenzel-Kramers-Brillouin approach. Simulations indicate that the undercooling and the anisotropic coefficient have remarkable influence on the growth of the secondary branches, in which secondary branch spacing decreases with the increase of undercooling, but increases with the increase of anisotropic coefficient. The amplitude of the secondary branch decreases with the increase of anisotropic coefficient. Thermal fluctuations show strong influence on the amplitude of the secondary branch, however show less influence on the secondary branch spacing.

Keywords: phase-field method, thermal fluctuation, dendritic growth, secondary branch

PACC: 6150, 6470, 8140

* Project supported by the Major Program of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50395101).