

文章编号: 1000-5013(2009)03-0239-05

过冷熔体枝晶生长的相场法数值模拟

刘晶峰, 赵紫玉, 方建成, 江开勇

(华侨大学 机电及自动化学院, 福建 泉州 362021)

摘要: 利用相场法模拟纯物质过冷熔体中的枝晶生长过程, 研究各向异性强度、过冷度、扰动等对枝晶生长的影响。结果表明, 扰动会促使侧向分枝的形成, 但不影响枝晶尖端的稳态生长行为; 随着各向异性强度的增大, 枝晶尖端生长速度加快, 枝晶结构特征愈加明显; 过冷度的增加, 枝晶尖端稳定性遭到破坏, 甚至出现分叉。讨论网格步长对模拟结果的影响, 指出在兼顾精度与效率的同时应优先选取粗网格。

关键词: 相场法; 过冷熔体; 枝晶生长; 数值模拟

中图分类号: TG 111.4; TB 115

文献标识码: A

近年来, 金属凝固过程数值模拟技术取得了很大的进展, 并逐步应用到实际生产中, 而微观组织的数值模拟也取得了成功。一般来说, 微观组织的数值模拟方法主要有确定性方法、随机性方法及相场方法。相场方法是模拟单个枝晶生长的新方法^[1-9], 由引入的新变量——相场 $\varphi(\mathbf{r}, t)$ 而得名。相场是一个序参量, 表示系统在时间和空间的物理状态(固态、液态和固液界面)。这里, \mathbf{r} 为空间向量, t 代表凝固时间; 相场变量对应于固、液态为定值(如: $\varphi = 0$ 表示液态, $\varphi = 1$ 表示固态), 而对应于固液界面, 则有 $0 < \varphi < 1$ 。相场理论以 Ginzberg-Landau 相变理论为基础, 通过微分方程反应扩散、有序化势及热力学驱动力的综合作用。相场方程的解可以描述金属系统中固液界面的状态、曲率以及界面的移动。把相场方程与外场(温度场、溶质场、速度场)耦合, 则可以对金属凝固过程中的枝晶生长行为进行真实的模拟。本文根据文[2]建立的相场模型, 对纯金属镍(Ni)过冷熔体中的枝晶生长进行了数值模拟。

1 计算模型

1.1 控制方程

采用文[2]提出的相场模型, 这是基于热力学一致性建立起来的。相场及温度场的控制方程为

$$\frac{\varepsilon^2}{m} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \varphi(1 - \varphi) \left[\varphi - \frac{1}{2} + 30\alpha \Delta u \varphi(1 - \varphi) \right] + \varepsilon^2 \dot{\gamma}^2 \varphi, \quad (1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{\Delta} p'(\varphi) \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \dot{\gamma}^2 u. \quad (2)$$

上式中, $p(\varphi) = \varphi^3(10 - 15\varphi + 6\varphi^2)$, $p'(\varphi)$ 表示函数 $p(\varphi)$ 对相场变量 φ 求导; ε 是一个与界面厚度、各向异性有关的参数, 满足 $\varepsilon = \varepsilon(1 + \gamma \cos k\theta)$ 。其中, γ 为各向异性强度, k 为各向异性模数(一般取4或6), θ 为固液界面上分析点处的法向量 \mathbf{n} 与 x 轴正向之间的夹角, $\bar{\varepsilon}$ 为 ε 的平均值; Δ 为无量纲过冷度, 满足 $\Delta = c \Delta T / L$, 其中, c 为比热容($\text{J} \cdot (\text{K} \cdot \text{cm}^3)^{-1}$), L 为单位体积潜热($\text{J} \cdot \text{cm}^{-3}$), ΔT 为材料的实际过冷度(K)。 $\alpha = \frac{\sqrt{2}wL^2}{12c\sigma T_M}$, $m = \frac{\mu\sigma T_M}{\kappa L}$, $\bar{\varepsilon} = \frac{\delta}{w}$ 。其中, δ 为界面厚度(cm), w 为特征比例长度(cm), σ 为界面能($\text{J} \cdot \text{cm}^{-2}$), κ 为热扩散率($\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$), μ 为移动率($\text{cm} \cdot (\text{K} \cdot \text{s})^{-1}$), T_M 为金属的熔点(K)。

方程(1)为相场控制方程, 方程(2)为温度场控制方程, 两者耦合计算后就可以逼真地再现过冷熔

收稿日期: 2008-01-03

通信作者: 刘晶峰(1964-), 男, 讲师, 工学博士, 主要从事铸造 CAD/CAE 及计算机图形学的研究。E-mail: liujf@hqu.edu.cn.

基金项目: 福建省自然科学基金资助项目(2006J0166); 华侨大学科研启动基金资助项目(07BS202)。

体中的枝晶生长过程.

1.2 数值求解

基于均匀网格技术对控制方程(1)进行离散, 其中, 方程(1)选择显式差分格式, 方程(2)选择交替方向隐式格式. 在计算区域边界, 相场计算采用 Zero Neumann 边界条件, 温度场计算采用绝热边界条件^[3]. 计算开始时, 假定整个长方形计算域充满均匀的过冷熔体($u = -1, \varphi = 0$), 初始晶核位于区域的左侧中央($u = -1, \varphi = 1$). 计算时, φ 在界面处施加微小的扰动, 对于得到真实的枝晶形貌是很必要的. 借助一个随机数序列 r_n , 按照下述形式将 $A_n r_n$ 添加到方程(1)中等式右边的第 1 项, 则有

$$\varphi(1-\varphi)\left[\varphi-\frac{1}{2}+30\alpha\Delta t\varphi(1-\varphi)+A_n r_n\right].$$

其中, A_n 为扰动因子, 随机数序列 r_n 是位于区间 $[-0.5, 0.5]$ 上的均匀分布.

1.3 参数取值

选择的结晶材料是纯金属镍. 计算所需的材料热物性参数: $\sigma = 3.70 \mu\text{J} \cdot \text{cm}^{-2}, T_M = 1728 \text{ K}, L = 2.350 \text{ kJ} \cdot \text{cm}^{-3}, c = 5.42 \text{ J} \cdot (\text{K} \cdot \text{cm}^3)^{-1}, \mu = 285 \text{ cm} \cdot (\text{K} \cdot \text{s})^{-1}, K = 0.155 \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$. 其他固定参数: $w = 2.1 \mu\text{m}, \alpha = 400, m = 0.05$. 如无特别说明, 过冷度 Δ 取值 0.5. 计算域大小为 $4.5 \text{ cm} \times 2.25 \text{ cm}$, 网格数 900×450 , 由此得到空间步长和时间步长的大小, 即 $\Delta x = 50 \mu\text{m}, \Delta t = 0.1 \text{ ms}$. 各向异性参数一般取值: $\gamma = 0.01, k = 4$; 而其均值 $\varepsilon = \Delta x$. 考虑扰动影响时, 扰动因子 A 的大小为 0.01.

2 结果及讨论

2.1 各向异性强度对晶体生长的影响

保持其他参数不变, 依次改变各向异性强度 γ 的值, 计算结果如图 1 所示. 图 1 中, 凝固经历时间 (t) 均为 0.40 s. 从图 1 可以看出, 随着 γ 值的增加, 晶体生长形状从最初的粘性手指形状逐渐演变为典型的枝晶结构. 主干越来越发达, 生长速度越来越快; 侧枝逐步蜕化直至消失, 择优生长倾向愈加明显. 此外, 某些异常发达侧枝均位于主干表面形状发生突变处, 而在表面平滑处侧枝非常瘦小.

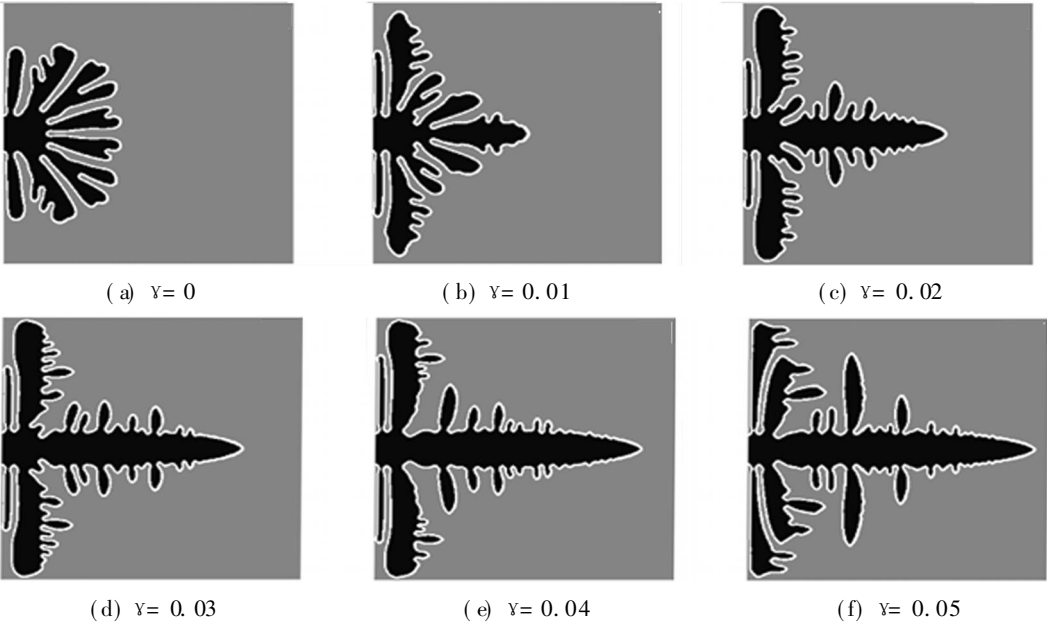


图 1 不同 γ 值对应的晶体生长形貌

Fig. 1 Morphologies of dendritic growth for various values of γ

2.2 无量纲过冷度对晶体生长形貌的影响

保持其他参数不变, 改变无量纲过冷度 Δ 的值, 计算结果如图 2 所示. 从图 2 可以看出, 随着 Δ 值的增加, 主干越来越不稳定, 表现为侧枝生长越来越活跃. 当 $\Delta \geq 0.55$ 时, 主干已经开始分叉, 其他分枝也异常活跃, 尤其是分枝生长速度越来越快, 出现了各向分枝快速深入过冷熔体的所谓“疯长”现象. 在一定的条件下, 生长最优方向上完整的主枝会产生分离现象. 根据计算, 当过冷度较大, 各向异性强度

较小时, 主枝会分叉. 文[10]认为基本原因是由于生长竞争的存在, 界面各处过冷度的不同引起优先方向的转移, 产生了整体上的分离现象.

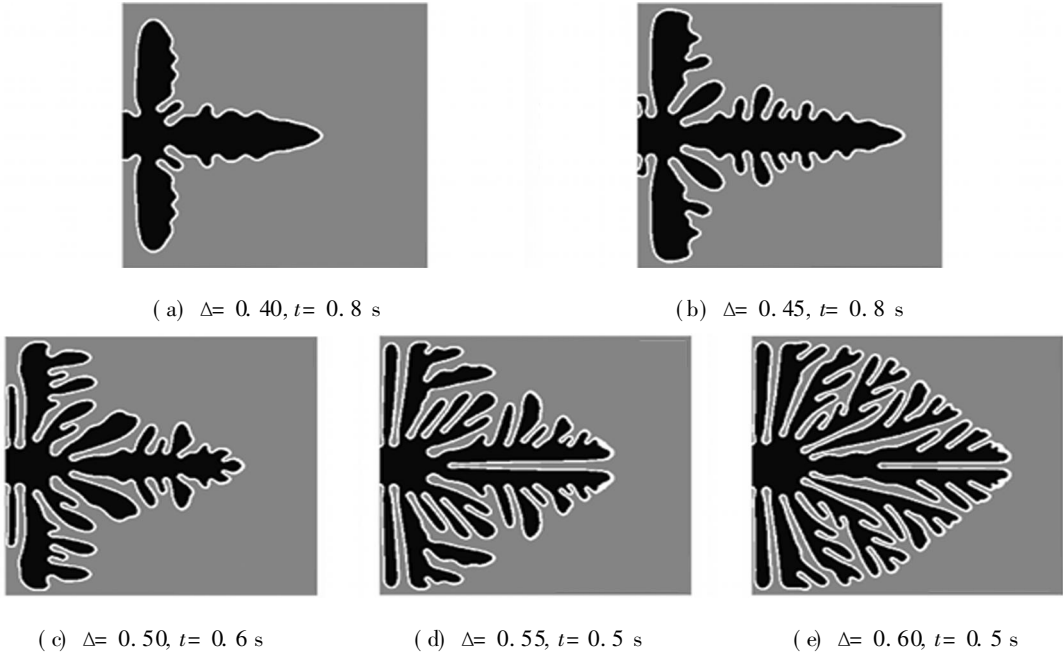


图 2 不同 Δ 值所对应的晶体生长形貌

Fig. 2 Morphologies of dendritic growth for various values of Δ

2.3 扰动对晶体生长的影响

在用相场法模拟枝晶生长时, 数值误差将在界面前沿形成扰动. 如果参数取值合理, 扰动不会随时间放大. 图 3 是无扰动时所得到的枝晶形貌以及相应的温度场, 其中 $\gamma=0.05$, $t=0.4\text{ s}$. 从图 3 可以看到, 枝晶臂比较光滑, 只是在远离尖端处有些轻微扰动, 并没有形成侧向分枝. 图 3 的右侧为温度场, 固相的温度较高(几乎接近结晶平衡温度), 经过固液之间的热扩散层, 温度降低到液相的初始温度. 枝晶尖端温度梯度最大, 根部则最小.

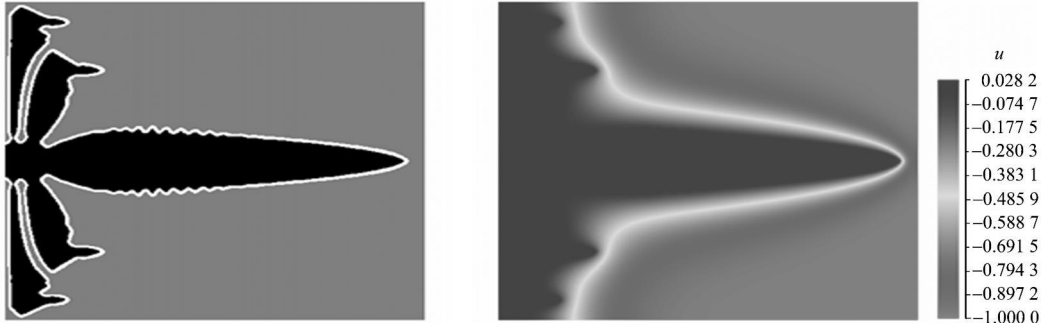


图 3 无扰动时获得的枝晶形貌和温度场

Fig. 3 Dendritic pattern and temperature field without a factor of noise

考虑扰动因素 $A_n=0.01$, 所获得的枝晶形貌和温度场如图 4 所示. 其中, $\gamma=0.05$, $t=0.4\text{ s}$. 从图 4 可见, 由于界面前沿添加了持续扰动, 引发了侧向分枝. 从图 4 右边的温度场可以知道, 扰动的引入使得最高温度($u=0.0501$)大于图 3 中的最高温度($u=0.0282$). 由于结晶尚未抵达右侧壁, 最低温度仍为初始熔体过冷温度($u=-1.0000$), 但这并未改变枝晶中的温度分布规律. 即固相具有最高的温度, 热量从固相向液相扩散, 在一次枝晶臂及二次枝晶臂的尖端具有最大的温度梯度, 在二次分枝的根部温度梯度最小. 可以看到, 温度梯度较高处的二次枝晶粗大, 生长速度较快. 在模拟枝晶形貌及温度场的同时, 可以获得枝晶主干尖端的生长状态, 如尖端温度、尖端速度和尖端半径. 图 3, 4 的数值画面对应于相同的凝固经历时间($t=0.4\text{ s}$), 经计算后得到的枝晶主干生长状态几乎完全相同. 这表明, 扰动对枝晶尖端稳态生长行为没有影响, 但引发了侧向分枝.

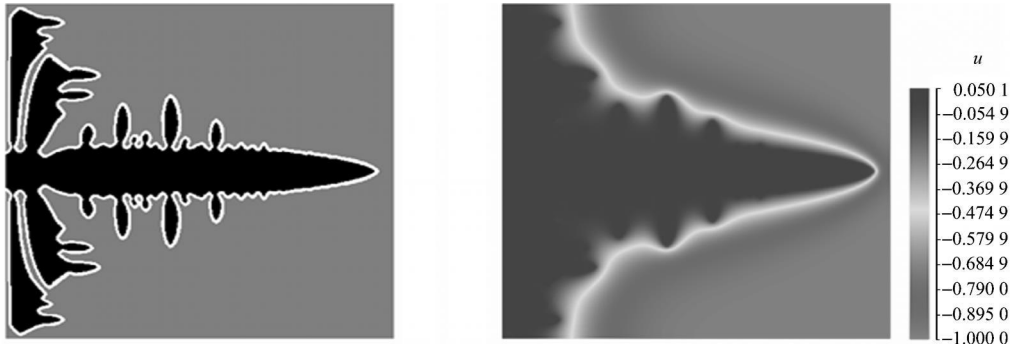


图 4 引入扰动因素后获得的枝晶形貌和温度场

Fig. 4 Dendritic pattern and temperature field with a factor of noise

2.4 网格步长对模拟结果与计算效率的影响

在求解相场控制方程时, 为了使迭代过程收敛, 要求 $\Delta t \leq (\Delta x)^2 / (5m)$. 一般来说, 为了获得理想的模拟结果, 网格步长应尽可能取得小一些, 越小越好. 为此进行了一系列数值计算, 选择的计算域大小为 $2.0\text{ cm} \times 1.0\text{ cm}$, $\Delta = 0.4$, $\gamma = 0.01$, $\varepsilon = 0.005$, $k = 4$, $A_n = 0$, 凝固经历时间均为 0.4 s , 依次改变网格步长, 计算结果如图 5 所示.

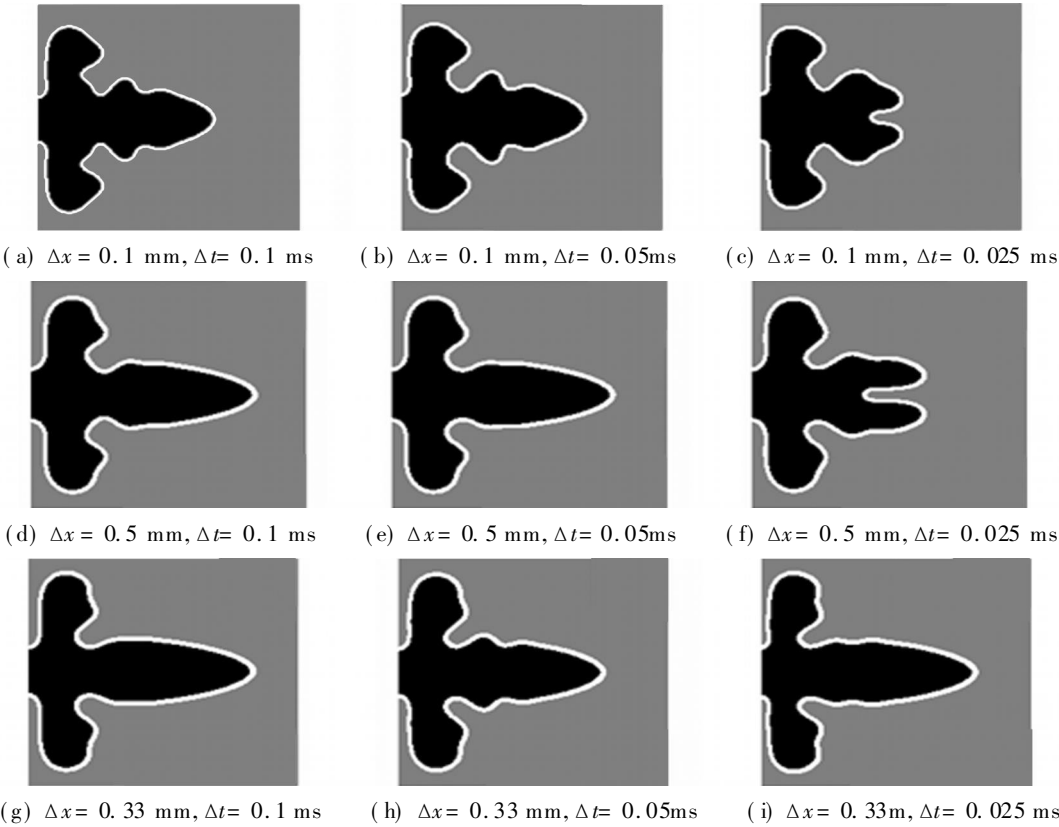


图 5 不同 Δx 值所对应的枝晶形貌

Fig. 5 Morphologies of dendritic growth for various values of Δx

从图 5 可看出, 空间、时间步长的选择对最终计算结果有较大的影响. 对于相同空间步长情况, 并不是时间步长越小越好. 由于计算误差的存在, 时间步长如果取得过小, 同样的凝固时间需要更多的计算次数, 从而造成误差累积过大, 导致枝晶形貌严重失真. 图 5(a), (b) 的计算结果相似, 但图 5(c) 则严重失真, 主干发生分叉; 在图 5(d) ~ (f) 中也可看到同样的情形. 根据结晶条件, 图 5(d), (e), (g) 接近实际结晶形貌, 其他图形都有不同程度的失真. 如果考虑计算效率, 那么图 5(d) 应该作为数值计算的范本. 尽管图 5(g) 的精度最高, 但其计算效率偏低, 完成计算所需时间几乎是图 5(d) 的 5 倍. 由此可以得出, 空间步长和时间步长并不是越小越好, 在兼顾精度和效率的前提下, 它们的取值可适当选择得稍大一些.

必须强调的是, 上述枝晶形貌及温度场的图形显示都是采用 OpenGL 技术实现的^[11].

3 结束语

本文利用纯物质相场模型, 模拟了纯金属镍过冷熔体中的二维枝晶生长行为. 研究了相关参数诸如各向异性强度、无量纲过冷度, 以及扰动等因素对枝晶生长的影响, 并讨论了空间步长的选择对数值计算精度及效率的影响.

参考文献:

- [1] KOBAYASHI R. Modeling and numerical simulations of dendritic crystal[J]. Physica (D), 1993, 63(10): 410-423.
- [2] WANG S L, SEKERKA R F, WHEELER A A, et al. Thermodynamically consistent phase-field models for solidification[J]. Physica (D), 1993, 69: 189-200.
- [3] WHEELER A A, MURRAY B T, SCHAEFER R J. Computation of dendrites using a phase field model[J]. Physica (D), 1993, 66(10): 243-262.
- [4] WHEELER A A, BOETINGER W J, MCFADDEN G B. Phase-field model for isothermal phase transition in binary alloys[J]. Physical Rev (E), 1992, 45(10): 7424-7439.
- [5] WARREN J A, BOETINGER W J. Prediction of dendritic growth and microsegregation patterns in a binary alloy using the phase-field method[J]. Acta Metall Mater, 1995, 43(2): 689-703.
- [6] CONTI M. Growth of a needle crystal from an undercooled alloy melt[J]. Phys Rev (E), 1997, 56(3): 3197-3202.
- [7] TIADEN J. Phase-field simulation of the peritectic solidification of Fe-C[J]. Journal of Crystal Growth, 1999, 198/ 199: 1275-1280.
- [8] BECKERMAN C, DIEPERS H J, STEUBBAC G I, et al. Modeling melt convection in phase field simulation of solidification[J]. J Comput Phys, 1999, 154: 468-496.
- [9] BOETTINGER W J, WARREN J A. Simulation of the cell to plane front transition during directional solidification at high velocity[J]. J Crystal Growth, 1999, 200: 583-591.
- [10] ZHAO D P, JING T, LIU B C. The effects of phase-field parameters on grain growth morphologies in the solidification[J]. Materials Transactions, 2003, 44(3): 367-371.
- [11] 刘晶峰, 李洪友, 方建成. 铸造 CAE 系统的网格剖分技术[J]. 华侨大学学报: 自然科学版, 2008, 29(3): 327-330.

Numerical Simulation of Dendritic Growth into Undercooled Melt Using Phase-Field Method

LIU Jing-feng, ZHAO Zi-yu,

FANG Jian-cheng, JIANG Kai-yong

(College of Mechanical Engineering and Automation, Huaqiao University, Quanzhou 362021, China)

Abstract: Based on a phase-field model, a series of numerical calculations of dendritic growth into undercooled melt for a pure material were performed, and the influence of some physical parameters, including anisotropy strength, undercooling and noise factor, on dendritic growth were investigated. Results showed that the noise could trigger the growth of side-branches, but this did not influence the selection of the tip operating state. The greater the anisotropy strength, the faster the tip velocity and the more obvious the characteristics of the dendritic structure. With the increase in undercooling, the stability of the tip operating state was gradually upset, and if seriously, branching-off of the dendrite tip could be seen. Finally, effect of mesh size on simulation result was discussed, and it was pointed out that the coarser mesh should be selected preferably when the resolution and time of computation is considered simultaneously.

Keywords: phase-field method; undercooled melt; dendritic growth; numerical simulation