

文章编号: 1000-5013(2010)01-0006-06

# 枝晶生长的相场法数值模拟

刘晶峰, 赵紫玉, 蹇崇军, 江开勇

(华侨大学 机电与自动化学院, 福建 泉州 362021)

**摘要:** 利用一个简单的相场模型,对过冷熔体中枝晶的生长形貌进行数值模拟,定性分析各向异性强度、无量纲潜热及扰动因子等对枝晶形貌的影响。结果表明,枝晶主干生长速度随着各向异性强度的增大而增大,并且枝晶结构强烈依赖于各向异性强度;随着无量纲潜热的增大,晶体生长过程中枝晶结构特征愈加明显;扰动对枝晶结构特征有一定的影响,随着扰动因子的增加,枝晶间竞争生长加剧。

**关键词:** 枝晶生长; 相场法; 过冷熔体; 数值模拟; 形貌

**中图分类号:** TG 111.4

**文献标识码:** A

金属凝固过程微观组织数值模拟技术,是以金属凝固理论为基础,利用数值计算技术和计算机技术发展的最新成果,逼真地再现金属凝固过程中的晶体生长过程。枝晶生长方式是晶体生长的典型方式。凝固组织中的柱状晶和等轴晶,就是枝晶生长方式的不同表现。研究枝晶生长规律,预测凝固过程复杂的枝晶形貌,已经成为微观组织数值模拟研究领域的热点。目前,凝固过程微观组织数值模拟主要有确定性方法(Deterministic Method)、随机性方法(Stochastic Method)和相场方法(Phase-Field Method)等。确定性方法以凝固动力学为基础,符合晶体生长物理背景。但由于它不能处理晶体生长过程中的一些随机过程,所以无法再现凝固时枝晶的生长过程及预测枝晶的具体形貌。随机性方法考虑了晶体生长过程中的随机过程,利用概率统计理论研究晶粒的形核和长大,适用于柱状晶组织的形成及柱状晶与等轴晶相互转变的模拟。但该方法只能模拟枝晶的近似形状,而不能模拟复杂枝晶的形貌。相场法通过引入有序化变量——相场变量,克服了跟踪复杂固液界面的困难,在模拟枝晶生长方面有着其他方法无可比拟的优势。因此,该方法已经成为研究枝晶生长规律的主流方法<sup>[1-9]</sup>。本文利用相场法,对过冷熔体中的枝晶生长行为进行研究。

## 1 计算模型

采用的相场模型由 Kobayashi<sup>[1]</sup>提出,是基于自由能泛函得到的,关于纯物质过冷熔体中枝晶生长的相场模型。该模型包括相场及温度场两个控制方程。

相场控制方程为

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\nabla^2 \phi - f. \quad (1)$$

式(1)中:  $\phi$  为常数,  $f$  为函数  $f(\phi, m)$  关于相场变量的偏导数。

在二维直角坐标系中,方程(1)具有的形式为

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \nabla^2 g(\phi, \nabla^2 \phi) + (1 - \phi) \left( -\frac{1}{2} + m \right). \quad (2)$$

引入各向异性参数,则有

收稿日期: 2008-09-10

通信作者: 刘晶峰(1964-),男,副教授,工学博士,主要从事材料成形 CAD/CAE 及计算机图形学的研究。E-mail: ljf\_027@163.com.

基金项目: 福建省科技计划重点项目(2008H0028); 华侨大学高层次人才科研启动项目(07BS202)

$$= \bar{\epsilon}(\theta) = \bar{\epsilon} [1 + \cos(k(\theta - \theta_0))] \quad (3)$$

式(3)中:  $\bar{\epsilon}$  为各向异性强度,  $k$  为各向异性模数(一般取 4 或 6),  $\theta$  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,  $\bar{\epsilon}$  为  $\epsilon$  的平均值,  $\theta_0$  则是与固液界面层厚度有关的参数(取值一般很小)。

在考虑各向异性的影响后,方程(2)变形为

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = - \nabla^2 \phi + \frac{\partial}{\partial x} \left( \epsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \epsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \epsilon^2 \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \epsilon^2 \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + (1 - \phi) \left( -\frac{1}{2} + m \right) \quad (4)$$

由焓守恒定律,可以推导出温度场的演化方程为

$$\frac{\partial u}{\partial t} + K \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla^2 u \quad (5)$$

式(5)中:  $u$  为无量纲温度,对应于特征过冷温度,  $u$  等于 0; 对应于结晶平衡温度,  $u$  等于 1;  $K$  是无量纲潜热,正比于材料的结晶潜热,反比于材料的过冷度。

必须指出的是,上面的方程中,  $t$  代表时间,  $m$  是一个与界面驱动力有关的参数。即有

$$m = (\mu_0 / \epsilon) \cot(\mu_0 u) \quad (6)$$

式(6)中:  $\mu_0$  为常数;  $\epsilon$  是一个正常数,满足  $\epsilon < 1$ 。这样的限制条件,能够确保对于任意的温度值  $u$ ,其关系式  $|m| < \frac{1}{2}$  成立。

方程(4),(5)构成二维直角坐标系下相场模型的控制方程,前者为相场控制方程,后者为温度场控制方程。两者耦合计算后,就可以定性地再现过冷熔体中的枝晶生长过程。

计算时,在界面处施加微小的扰动,这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  $r_n$ ,按照形式

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + A_n r_n (1 - \phi) \quad (7)$$

为系统添加扰动。其中:  $A_n$  为扰动因子,随机数序列  $r_n$  是位于区间  $[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$  上的均匀分布。

关于控制方程,可以采用有限差分法求解,并基于均匀网格技术对控制方程(4),(5)进行离散。其中:方程(4)选择显示差分格式,方程(5)选择交替方向隐式格式(Alternating Direction Implicit Method)——ADI 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<sup>[10]</sup>。

在以下所有计算中的参数取值:计算区域尺寸为  $9.0 \times 9.0$ ,时间步长为 0.000 2,网格数为  $300 \times 300$ ,  $\bar{\epsilon} = 0.01$ ,  $\epsilon = 0.000 3$ ,  $\theta_0 = 0.9$ ,  $\mu_0 = 10.0$ 。

## 2 结果及讨论

### 2.1 各向异性强度对枝晶形貌的影响

计算时,其他参数均为固定值,只改变各向异性强度  $\bar{\epsilon}$  的值。即  $k = 4$ ,  $\theta_0 = 0$ ,  $K = 2.0$ ,  $A_n = 0.01$ ,凝固经历时间  $t$  为 0.8 s。各向异性强度与枝晶形貌之间的关系的计算结果,如图 1 所示。

从图 1(a)可知,在界面处不存在各向异性,即晶体生长完全是各向同性的,此时得到的晶体形貌类似于涂满粘胶的手指形状。图 1(b)表明,晶体形貌兼具各向同性和枝晶结构的特征,在水平方向已经出现了枝晶主干,其他方向仍呈各向同性。从图 1(c)中可知,枝晶结构特征比较明显,枝晶主干比较发达,其上的二次侧枝几乎沿最优化方向生长,尤其是水平主干上的侧枝间隔比较均匀,侧枝生长速度也呈现出差异,侧枝之间的竞争倾向已经初步显现。

从图 1(d)~(g)可以看出,随着各向异性强度的增加,枝晶结构特征越来越明显。具体表现是:枝晶主干越来越发达,侧枝之间的竞争倾向越来越显著,而且晶体生长时择优倾向十分明显。尤其值得一提的是,在图 1(g)中,枝晶生长时择优倾向最为明显,垂直于最优化方向的二次和三次枝晶的生长受到强烈地抑制,甚至出现了枝晶的熔断脱落现象。此外,还可以明显地看出,尖端生长速度随着各向异性强

度的增加而逐渐加快.

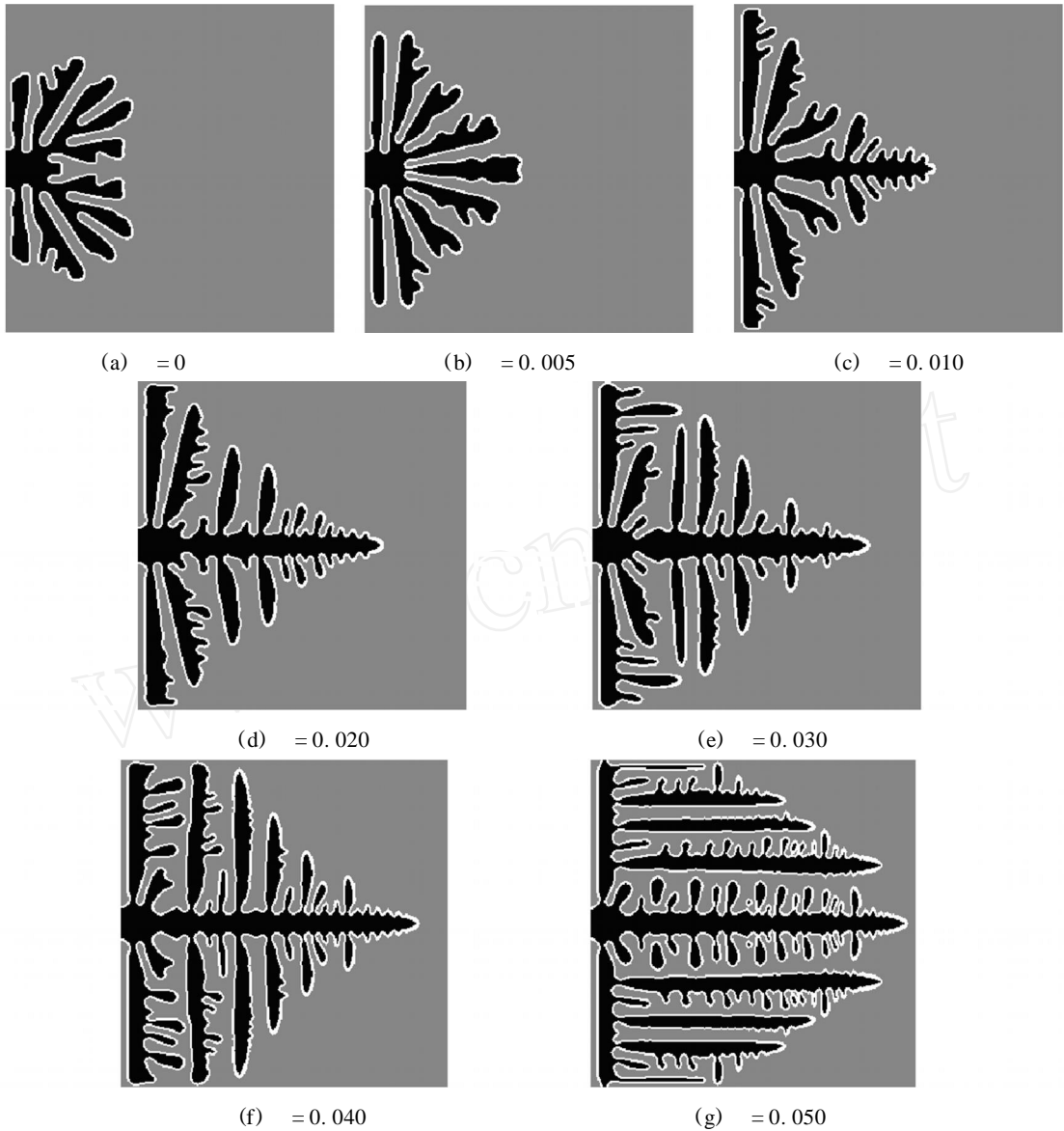
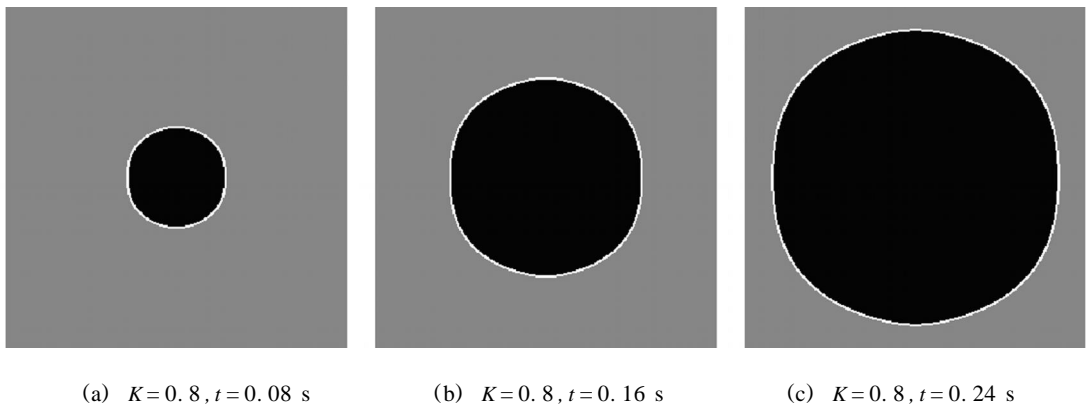


图 1 不同各向异性强度对应的枝晶形貌

Fig. 1 Dendritic patterns for various values of strength of anisotropy

## 2.2 无量纲潜热对枝晶形貌的影响

计算时,其他参数不变,而与前面不同的固定参数:  $\epsilon = 0.01, k = 6, \theta_0 = \pi/2$ . 对应于不同的  $K$  值,分别选取了若干结晶时刻的数值画面,研究无量纲潜热与枝晶生长形貌变化的关系,如图 2 所示. 需要说明的是,初始晶核位于计算区域的中央,也就是说,结晶过程是从中央开始的.



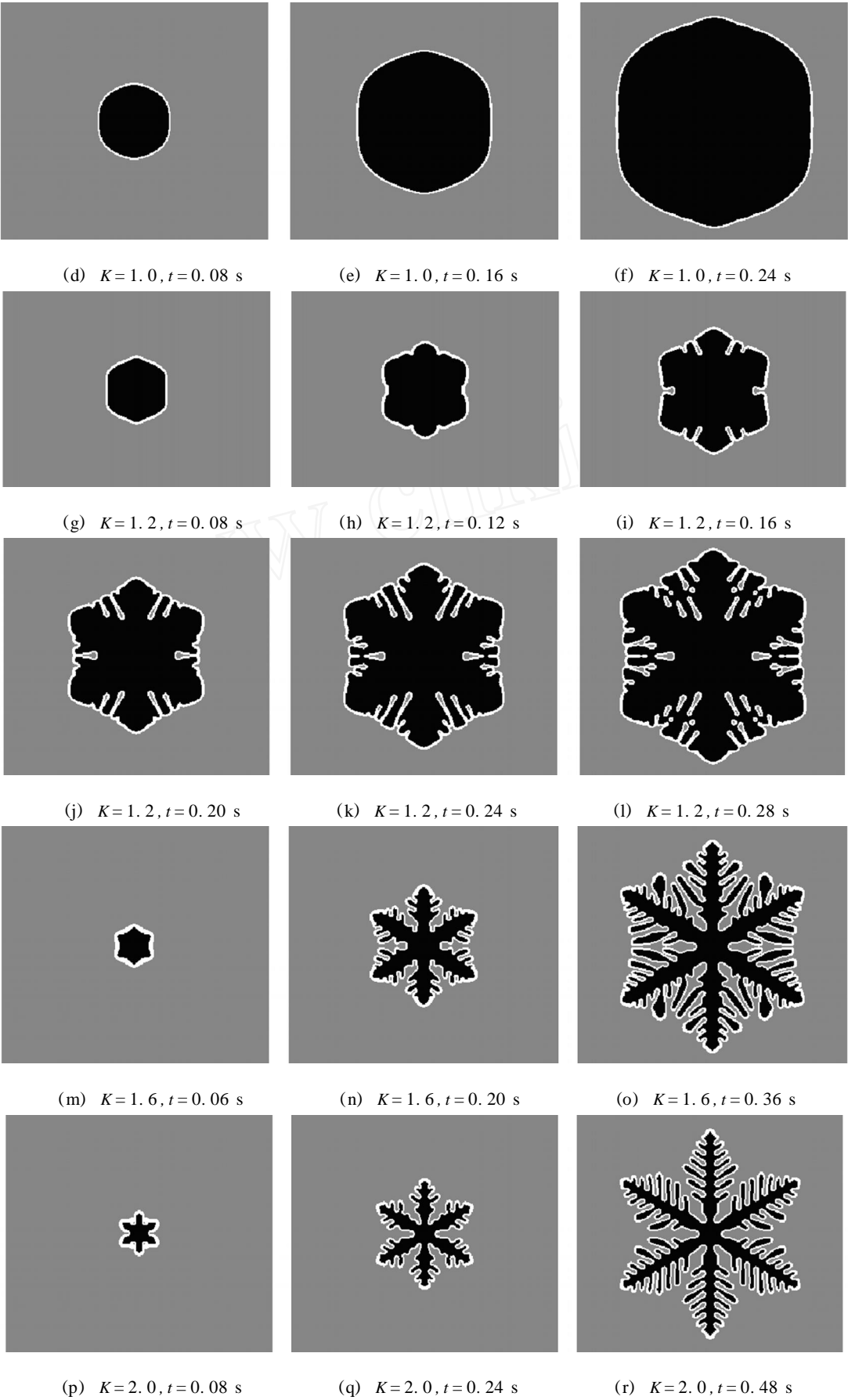


图 2 不同  $K$  值所对应的晶体生长形貌

Fig. 2 Morphologies of grain growth for various values of  $K$

从图2可以看出,当 $K=0.8$ 时,晶体呈圆形,但当 $K=1.0$ 时,晶体形状已经变成了凸的六边形了.对于 $K=1.2$ ,晶体生长期间形状变化较为显著.从图2(g)~(l)中首先可以看到的是一个六边形,接着六边形各边的中央出现了凹痕;然后,凹痕发展成狭长的裂缝,紧接着裂缝顶端又出现了横褶;最后,形成一幅由几个粗分枝构成的图案.

当 $K=1.6$ 时,晶体形状也呈分枝图案,但分枝已经大大细化了.随着 $K$ 值的增加,分枝变得越来越瘦小,以至于当 $K=2.0$ 时,所看到的是一幅典型的雪花状图案.于是,可以观察到随着 $K$ 值增加,晶体形状从圆形逐渐变化到凸六角形,再逐渐变化到分枝图案.

### 2.3 扰动对枝晶形貌的影响

数值计算结果还表明,固液界面处有、无扰动对枝晶结构有一定的影响,如图3所示.图3(a),(b)是无扰动时的数值画面,可以看出沿主干分布着均匀的二次枝晶.但是,由于彼此之间没有竞争倾向,所以它们的生长速度非常相近,其尖端的连线近乎一条斜直线.图3(c),(d)则是考虑扰动时的两幅数值画面,可以看出情形与前面的迥异.具体表现在二次枝晶分布不均匀,它们的生长速度各异,生长速度快的枝晶粗大,生长速度慢的枝晶瘦小.这就是所谓枝晶间的竞争生长现象.

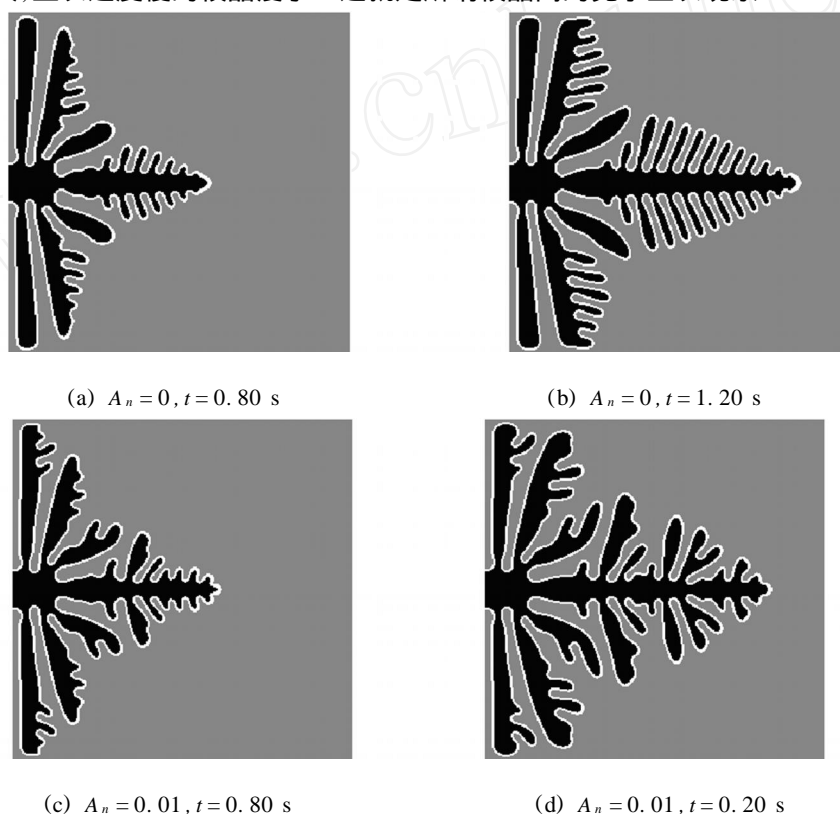


图3 扰动对枝晶形貌的影响

Fig. 3 Effects of noise factor on dendritic pattern

## 3 结论

(1) 用相场法对纯物质过冷熔体中的晶体生长过程进行了模拟,计算中将温度场与相场相耦合,真实地再现了金属凝固过程中树枝晶的生长过程.

(2) 各向异性强度对枝晶形貌有一定影响.随着各向异性强度的增大,枝晶结构特征愈加明显,不仅主干越来越粗大,侧向分枝也越加发达,与此同时,枝晶尖端的生长速度也越来越大.

(3) 无量纲潜热对枝晶形貌的影响结果表明,枝晶结构特征对无量纲潜热的变化十分敏感.随着无量纲潜热值的递增,枝晶尖端的生长速度加快,晶体生长过程枝晶化倾向加剧,晶体生长过程中枝晶结构特征愈加明显.究其原因,主要是随着无量纲潜热的增大,过冷度也随之增加,从而导致晶体生长过程中枝晶化倾向的加剧.

(4) 扰动因素对枝晶形貌的影响表明,在固液界面处添加扰动,有利于获得理想的树枝状晶体.

(5) 采用的相场模型是一种较为理想化的模型,既未考虑对流等流体力学的影响,也未顾及相变引起的膨胀或收缩对结晶过程的影响.在下一步的研究中,应逐步完善包含流场等的多相场模型,以模拟出更接近实际凝固过程的枝晶生长形貌.

(6) 相场法模拟中计算量十分可观,基于此,模拟也是二维的.为了让模拟结果更加接近实际,进行三维模拟计算是非常必要的.重视相场算法,降低计算量,以及进行三维模拟是今后的研究重点.

#### 参考文献:

- [1] KOBAYASHI R. Modeling and numerical modeling simulations of dendritic crystal growth[J]. Physica (D), 1993, 63(3/4): 410-423.
- [2] WHEELER A A, MURRAY B T, SCHAEFER R J. Computation of dendrites using a phase field model[J]. Physica (D), 1993, 66(1/2): 243-262.
- [3] WHEELER A A, BOETINGER W J, MCFADDEN G B. Phase-field model of solute trapping during solidification[J]. Phys Rev (E), 1993, 47(3): 1893-1909.
- [4] WARREN J A, BOETINGER W J. Prediction of dendritic growth and microsegregation patterns in a binary alloy using the phase-field methods[J]. Acta Metall Mater, 1995, 43(2): 689-703.
- [5] CONTI M. Growth of a needle crystal from an undercooled alloy melt[J]. Phys Rev (E), 1997, 56(3): 3197-3202.
- [6] TIADEN J, NESTLER B, DIEPERS H J, et al. The multiphase-field model with an integrated concept for modelling solute diffusion[J]. Physica (D), 1998, 115(1/2): 73-86.
- [7] BECKERMANN C, DIEPERS H J, STEINBACH I, et al. Modeling melt convection in phase-field simulations of solidification[J]. J Comput Phys, 1999, 154(2): 468-496.
- [8] KARMA A, RAPPEL W J. Phase-field model of dendritic sidebranching with thermal noise[J]. Phys Rev (E), 1999, 60(4): 3164-3625.
- [9] LI Q, BECKERMANN C. Evolution of the sidebranch structure in free dendritic growth[J]. Acta Mater, 1999, 47(8): 2345-2356.
- [10] 于艳梅, 杨根仓, 赵达文, 等. 过冷熔体中枝晶生长的相场法数值模拟[J]. 物理学报, 2001, 50(12): 2423-2428.

## Numerical Simulation of Dendritic Growth Using Phase-Field Method

LIU Jing-feng, ZHAO Zi-yu,  
JIAN Chong-jun, JIANG Kai-yong

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

**Abstract:** By a simple phase-field model, a series of numerical simulations for dendritic growth into undercooled melt is performed to show the formation of various dendritic patterns. Qualitative analysis of the influence of the strength of anisotropy, dimensionless latent heat, and noise factor on the shape of crystal growth is given. The results show that the velocity of principal branch growth increases as strength of anisotropy increases and the branch structure is very strongly dependent on strength of anisotropy; as dimensionless latent heat increases, dendritic structures become obvious during grain growth; competition of branches growth becomes strong as noise factor increases.

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

(责任编辑: 陈志贤 英文审校: 郑亚青)