

凝固过程动力学与 界面稳定性理论导引

●徐鉴君 著



科学出版社
www.sciencep.com

凝固过程动力学与 界面稳定性理论导引

徐鉴君 著

科学出版社

北 京

内 容 简 介

凝固过程以及相伴而来的相界面微结构图案的形成是材料制备、加工工业以及自然界中出现的一类极为常见的非线性现象,也是材料科学、凝聚态物理学领域中极为重要的课题之一。本书从实际观察到的凝固现象出发,由浅入深、循序渐进、逐步建立与完善有关物理现象的数学模型,再通过采用统一的应用数学方法,对各种典型问题进行数学求解以及将理论预测与实验结果进行对比,逐步深入地揭示这类非线性动力学现象的物理本质及其产生的控制因素。本书力求系统地讲述凝固动力学中重要的基础理论概念与近代成果,阐明平直界面的Mullins-Sekerka不稳定性理论,探讨定向凝固过程中胞晶生长的物理机制,介绍与评述枝晶生长动力学的各种近代解析理论,并系统地讲解枝晶生长的最新的理论——界面波理论。本书通过实例讲解量纲分析、求相似性解、渐近匹配、多重变量渐近展开、非线性分岔理论等应用数学中的重要解析方法,同时讲解目前已被广泛地用于数值模拟的相场模型的基本概念与理论基础。

本书可作为材料科学、物理学、应用数学等有关领域内以晶体生长、材料加工制备为专业方向的高年级大学生、研究生的教材或教学参考书,也可供从事材料科学的数学理论研究的研究人员及高校教师参考。

图书在版编目(CIP)数据

凝固过程动力学与交界面稳定性理论导引/徐鉴君著. —北京:科学出版社, 2006

ISBN 7-03-017641-3

I. 凝… II. 徐… III. 材料科学—研究 IV. TB3

中国版本图书馆CIP数据核字(2006)第078749号

责任编辑:陈玉琢/责任校对:赵燕珍

责任印制:安春生/封面设计:王浩

科学出版社出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

双青印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2006年12月第一版 开本:B5(720×1000)

2006年12月第一次印刷 印张:13 3/4

印数:1—2 500 字数:258 000

定价:32.00元

(如有印装质量问题,我社负责调换(双青))

目 录

第 1 章 绪论	1
第 2 章 纯熔体的凝固过程	4
§ 2.1 数学模型建立	4
2.1.1 建立在相体积内的控制方程	4
2.1.2 界面条件	5
§ 2.2 从过冷边界开始的熔体的一维凝固过程(I): 相似性解	6
2.2.1 问题的数学提法	6
2.2.2 量纲分析与相似解法	7
2.2.3 小结	9
§ 2.3 由过冷边界引起的熔体凝固过程(II): 非相似性解	10
2.3.1 时间意义上的内解	11
2.3.2 时间意义上的外解	13
§ 2.4 过冷熔体的一维凝固过程	15
§ 2.5 界面动力学对一维过冷熔体凝固过程的影响	18
§ 2.6 弯曲界面上的热力学平衡条件	21
§ 2.7 在过冷熔体中的晶核成长	27
2.7.1 时间意义上的外解	29
2.7.2 时间意义上的内解	32
§ 2.8 各向异性的表面张力系数	33
2.8.1 表面能与界面动力系数	33
2.8.2 晶体平衡态的 Wulff 结构	36
2.8.3 几种特例	39
§ 2.9 各向异性介质与各向异性标量函数	40
第 3 章 具有平直液-固界面的凝固过程的稳定性	45
§ 3.1 不定常凝固过程的一般数学提法	45
§ 3.2 运动坐标下的问题提法	47
§ 3.3 基态解	49
§ 3.4 线性扰动方程与边界条件	50
§ 3.5 解的多重变量渐近展开式	52
3.5.1 零级近似解	53

第 4 章 具有等曲率弯曲界面凝固过程的稳定性	58
§ 4.1 问题的数学提法	58
§ 4.2 基态解	60
4.2.1 $O(\epsilon^0)$: 零级近似	60
§ 4.3 扰动态	61
4.3.1 $O(\epsilon^0)$: 零级近似	63
第 5 章 二元系的凝固动力学	69
§ 5.1 二元系热力学平衡相图	69
§ 5.2 二元系凝固过程的数学模型	70
§ 5.3 二元系的定向凝固过程	71
§ 5.4 定常基态解	73
§ 5.5 非定常扰动态的解	74
5.5.1 零级近似解	76
5.5.2 一级近似解	80
5.5.3 长波段的渐近解 $k=O(\epsilon)$	82
§ 5.6 绝对稳定性判据	87
5.6.1 情形(I)	87
5.6.2 情形(II)	90
§ 5.7 定向凝固的弱非线性理论简述	92
5.7.1 单一模式的扰动态的非线性演化	99
5.7.2 具有连续谱模式的扰动态的非线性演化	102
§ 5.8 定向凝固的强非线性理论	106
第 6 章 枝晶生长动力学	108
§ 6.1 引言	108
§ 6.2 单一枝晶自由生长的数学模型	110
§ 6.3 定常针晶生长的 Ivantsov 解	112
§ 6.4 Nash-Glicksman 关于定常针晶生长的模型	114
§ 6.5 定常针晶生长的临界稳定性假说(1978)	115
§ 6.6 微观可解性条件(MSC)理论	117
§ 6.7 界面波理论(IFW)	118
6.7.1 枝晶生长的基态解	119
6.7.2 枝晶生长的扰动态	120
6.7.3 扰动态解在外部区域的渐近展开式	122
6.7.4 解在奇点 $\xi=\xi_c$ 附近的内部区域的渐近展开式	133
6.7.5 尖端前缘的内解	136

6.7.6 整体波动模式解与量子化条件	138
6.7.7 界面波理论推导过程的小结	142
6.7.8 枝晶界面波理论与实验结果的比较	142
§ 6.8 从过冷熔体内的二维枝晶生长	143
6.8.1 二维定常针状晶体生长的 Ivantsov 相似性解	145
6.8.2 二维针状晶体生长基态解的线性稳定性	146
6.8.3 表面张力各向异性参数对枝晶生长的影响——低频不稳定性	150
§ 6.9 二元合金或混合溶液的三维枝晶生长	153
6.9.1 问题的数学提法	154
6.9.2 表面张力为零时的定常针晶生长解	155
6.9.3 表面张力参数异于零情形下的线性化扰动系统	156
6.9.4 整体振荡模式解与量子化条件	158
6.9.5 理论结果与实验的比较	161
§ 6.10 枝晶生长与外源信号共振	162
§ 6.11 几点注释	163
第 7 章 相场理论简介	164
§ 7.1 引言	164
§ 7.2 相场理论发展简介	166
§ 7.3 单一成分的两相系统的相场模型的理论	166
7.3.1 内能表达式以及内能改变率	167
7.3.2 复杂系统中总熵 S^* 与总自由能 F^* 的变化率	169
7.3.3 相场模型控制方程	171
7.3.4 相场模型的极限形式	177
§ 7.4 各向异性材料的相场理论	187
第 8 章 附录	190
§ 8.1 非线性偏微分方程研究的应用数学方法	190
§ 8.2 线性化理论	191
§ 8.3 弱非线性理论	194
8.3.1 特征函数展开法	194
8.3.2 中心流形方法	196
8.3.3 多重变量(多尺度)渐近展开方法	200
8.3.4 非线性方程在分岔点附近的解的一般特性	203
参考文献	206
索引	210

第1章 绪 论

凝固、结晶、熔解、熔化是存在于大自然以及工业生产领域的一类极为广泛的动力学现象。地球的形成,地壳的演变,矿物的生成,冬季的漫天飞雪,春季的河冰消融,无一不展示大自然中的这类动力学现象的存在;半导体晶体的生长,金属材料的制备与加工,这些材料科学的核心部分,无一不显示凝固溶解这类现象的重要性。在古代,冶金学俗称“炼丹术”,古典意义上的材料制备过程是一种纯粹的“艺术”,常称“工艺”。近年来,材料科学已迅速地由经验科学向精密科学转化,其指导思想就是从材料科学研究的特定现象出发,根据物理学原理,对问题加以正确的数学描述,建立描述过程与现象的有效的数学模型,然后利用应用与计算数学中发展起来的一切有效手段,包括分析的和数值的手段,对问题进行求解,建立起刻画过程与现象的物理本质的数学理论,并将其结论及预测与实验观察及测量数据进行直接或间接的比较。根据比较结果的符合程度进一步改善数学模型,总结出一般规律,从而可对实验、实践进行有力的理论指导。这是自牛顿以来国际上关于应用数学的主流思想,也是国内优秀科学家,诸如钱伟长、林家翘等人所一贯倡导的“应用数学过程”。目前在材料科学的领域内,伴随实验材料科学的迅速发展,在这种指导思想下一门交叉学科“数学材料科学”正在崛起与成长。材料加工、制备,晶体生长动力学这类材料科学的核心课题,凝聚态物理中远离热力学平衡态所观察到的众多宏观动力学现象,均是数学材料科学的重要研究对象。

从尺度上讲,凝固过程或晶体生长过程出现的各种现象或界面上的细微结构,可分为厘米级(工业宏观尺度)和微米级(10^{-6}m)以及纳米级(10^{-9}m)。从动力学上讲,晶体生长系统涉及物质输运过程、动量输运过程、能量输运过程,以及物质在界面上的相变过程,它综合了这些宏观输运过程的相互作用。因此,凝固系统往往是一个涉及多尺度、多成分的复杂动力学系统,由此引出的数学问题往往是非线性的,对它们的求解具有相当大的难度,因此必须首先对逐个典型案例着手求解,由简及繁,逐步积累。在这里,人们可以从数学流体力学的发展得到启示。数学流体力学是伴随实验流体力学与实验空气动力学的发展而形成并逐渐成熟起来的。数学流体力学的发展过程充分体现了前面阐述的指导思想,在其漫长的发展进程中,研究工作者分析与求解了一个又一个典型的流体力学现象。在获得诸如Stokes小球绕流解、儒可夫斯基机翼绕流解、普朗特平板边界层理论的Blasius解,以及卡门涡列、平面激波、点爆破等著名解析解之后,才逐步积累了对实验观察到的流体力学现象的深

刻的、本质性的认识。

在百余年来航空航天工业的举世瞩目的辉煌成就的背后,有着数学流体力学不可磨灭的伟大历史功绩。从某种意义上讲,近代数学材料科学的发展也正沿着数学流体力学发展的历史轨迹进行。

一个在凝固与晶体生长过程中所观察到的十分普遍的动力学现象是:在凝固过程中,在一定条件下液-固界面上会呈现出复杂的微细结构,这种结构图案在系统处于热力学平衡态时是看不到的,这是远离平衡态的动力学过程所出现的特有现象。这种微细结构在晶体生长过程中可以最终发展成指状(称为胞晶结构),也可发展成树枝状(称为枝晶结构),并受许多物理参数的影响。这种生长过程中自然形成的结构图案将极大地影响终端产品的质量,包括机械性能与电学性质。正因为如此,这些现象出现的物理机制和数学表现形式一直是材料科学与凝聚态物理学等领域所关心的核心课题。为了控制这种微结构按照人们期望的方向演变,人们必须对它的形成机制有比较完整的理解,这对数学材料科学研究者来说是一个重大的挑战。

目前国内有关凝固过程理论的系列参考书甚缺。在材料科学学院中所采用的关于凝固过程的教材与教学参考书大都限于现象的表面描写,缺乏对现象本质与机制的理论分析与探讨。有的教学参考书对某些重要凝固现象的理论解释已显得陈旧过时,甚至谬误不当。因此,为刚进入或准备进入此领域的科学研究人员、理、工科大学与学院的青年教师、研究生、大学生提供一本反映该领域最新成果的教学与科研的入门参考书实属必要。鉴于这种情况,2004年与2005年,南开大学数学科学学院与北京科技大学材料科学院联合,先后举办了两届“凝固过程动力学与界面稳定性的数学理论暑期培训班”。作者在为暑期培训班编写的讲义的基础上加以修改、补充写成此书,以饕读者。作者希望本书能在一定程度上填补国内在材料科学中关于凝固过程动力学基础的系列教学参考书上的空缺。

由于所涉及的范围很广,本书不可能面面俱到。在本书中作者将注意力集中在讨论与阐明凝固过程中出现的某些重要界面现象的物理本质,系统地讨论在凝固过程中普遍出现的枝晶生长现象,揭示其产生的物理机制。我们将从实际观察的凝固现象出发,由浅入深、由简至繁,逐步建立与不断完善描述有关物理现象的数学模型;通过对各种典型问题的数学求解以及与相应实验结果的对比,逐步深入地探讨控制现象的内在的物理机制。本书力求采用统一的应用数学方法,诸如求相似解、多尺度展开、渐近匹配等方法,对各类问题进行分析处理;力求系统地讲述与讨论凝固过程中出现的一些最重要的问题、概念以及相应的数学解答。

本书内容是这样安排的:第2章介绍单元凝固系统凝固过程的数学模型以及几种典型凝固过程的数学解。第3章至第4章讨论平直与等曲率界面的稳定性问题,推导平直界面的 Mullins-Sekerka 不稳定性机制。第5章用类似的数学方法讨论二

元系的凝固过程动力学以及界面稳定性问题,概述胞晶生长的数学理论在当前发展的情况,着重讲解发展弱非线性理论所需的数学工具.第6章系统地讨论凝固过程中最为重要的课题——枝晶生长动力学,阐述枝晶生长的“界面波理论”.讨论表面张力各向异性系数、界面动力学系数对枝晶生长的影响,以及枝晶与周期振动外源之间的共振现象.第7章介绍相场模型的理论基础.

本书初稿作为讲义在2004年与2005年暑期培训班上使用,一些老师和同学曾指出不少文字上与内容上的失误.应该特别提出的有陈明文老师、褚佳强老师和陈永强同学.褚佳强老师和陈永强同学并为本书做了部分数值计算与制图.于艳梅老师阅读了第7章文稿,并在文字叙述上提出了宝贵的修改意见,戴世强教授阅读了原稿,并对全书提出了宝贵的建议与修改意见,在此一并表示衷心感谢.在写书过程中作者的夫人陈旭在精神上给予了巨大支持,并承担了很大一部分打字与校对工作.可以说,如果没有上述这些人员的鼎力帮助,本书至今不可能问世.

在本书撰写期间正值作者在南开大学工作,得到南开大学校方、物理学院、数学科学学院的大力支持与帮助.部分研究与学术活动经费来自国家自然科学基金和上海科学技术基金,对此作者表示深深的感谢.

本书的讲述内容与方法尚不够完善,错误肯定难免,望读者不吝指正,以求逐步改进.

第2章 纯熔体的凝固过程

§ 2.1 数学模型建立

2.1.1 建立在相体积内的控制方程

想像在熔体内划出一块任意确定的物质体积 $\Omega(t)$ (如图 2.1). 假设其边界面为 $\partial\Omega$. 随着熔体的运动, 这块体积将会变形与移动. 根据热量守恒定律可以写出

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \rho c_p T dv = - \int_{\partial\Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dS, \quad (2.1)$$

它表明体积内的内能增加等于通过边界流入的热量. 这里假定 ρ 是熔体密度, c_p 是定压比热, T 是温度, $(\rho c_p T)$ 是单位体积的内能. $\mathbf{q}$ 是热流矢量 (单位时间内通过单位面积的边界流出的热量), $\mathbf{n}$ 是外法向, dv 是体积微元, dS 是面积微元.

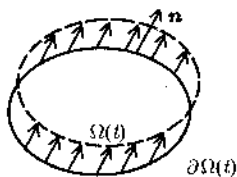


图 2.1 物质体积 $\Omega(t)$ 的边界 $\partial\Omega(t)$ 在熔体内随时间演化示意图

对于一般的光滑标量场 $F(\mathbf{x}, t)$ 而言, 根据输运理论有如下等式 (参看流体力学参考书, 例如: 刘应中, 缪国子, 高等流体力学 (第二版), §1.1, 上海交通大学出版 (2002)):

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} F(\mathbf{x}, t) dv = \int_{\Omega(t)} \frac{\partial F}{\partial t} dv + \int_{\partial\Omega} F \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS = \int_{\Omega(t)} \left[\frac{\partial F}{\partial t} + \nabla \cdot (F \mathbf{v}) \right] dv. \quad (2.2)$$

其次, 根据 Gauss 公式有

$$\int_{\partial\Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dS = \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{q} dv. \quad (2.3)$$

将式 (2.2) 和 (2.3) 代入式 (2.1), 即可推出

$$\int_{\Omega} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho c_p T) + \nabla \cdot (\rho c_p T \mathbf{v}) + \nabla \cdot \mathbf{q} \right] dv = 0. \quad (2.4)$$

由于 $\Omega(t)$ 是在熔体内任意设定的体积, 从式 (2.4) 推出熔体空间内的温度场处处满足方程

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho c_p T) + \nabla \cdot (\rho c_p T \mathbf{v}) = - \nabla \cdot \mathbf{q}. \quad (2.5)$$

从矢量分析可知

$$\nabla \cdot (\rho c_p T \mathbf{v}) = (\rho c_p T) \nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla (\rho c_p T),$$

又根据热传导的 Fourier 定律, 可把热流矢量写成正比于温度梯度, 即

$$\mathbf{q} = -k_T \nabla T,$$

其中 k_T 是热传导系数. 这样, 方程 (2.5) 便可改写为

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c_p T) + (\rho c_p T) \nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla (\rho c_p T) = \nabla \cdot (k_T \nabla T). \quad (2.6)$$

方程 (2.6) 普遍适用于任何有传热过程的连续介质, 包括气体、液体与固态变形体, 称之为热传导方程. 在一般情形下, 熔体可视为不可压缩的 Newton 流体. 根据不可压缩流体连续性方程 $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$, (2.6) 式可简化为

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c_p T) + \mathbf{v} \cdot \nabla (\rho c_p T) = \nabla \cdot (k_T \nabla T). \quad (2.7)$$

如果再假定介质 (熔体) 是静止的 ($\mathbf{v} = 0$), 热力学参数 ρ , c_p , k_T 均为常数, 便可得出

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa_T \nabla^2 T,$$

这里 $\kappa_T = k_T / (\rho c_p)$ 称为热扩散系数.

2.1.2 界面条件

在移动的液-固界面, 热能量守恒条件必须满足. 令 V_I 为界面的局部运动速度 (local velocity). 通常设定界面速度沿界面法向方向, 所以界面的速度矢量可表示为

$$\mathbf{V}_I = V_I \cdot \mathbf{n}.$$

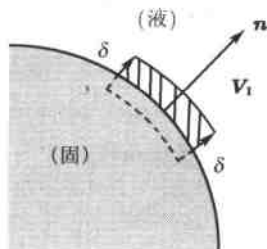


图 2.2 界面附近热量平衡条件

在界面两侧划出一块宽度为 $\delta \ll 1$ 微元的区域 (如图 2.2 阴影部分所示), 并考虑微元内的热平衡, 便可得出: 在 δt 的时刻内, 该微元内产生的热量必须等于净流出的热量. 即

$$\delta t (\Delta H V_I) = \delta t (k_S \nabla T_S - k_L \nabla T_L) \cdot \mathbf{n},$$

这里 ΔH 是单位体积内固相产生时所产生的潜热. 下标 “S” 表示固相, 下标 “L” 表示液相, 而 k_S , k_L 分别表示固相与液相中热传导系数 k_T 的值. 令 $\delta t \rightarrow 0$ 以及宽度 $\delta \rightarrow 0$, 遂得出热平衡条件:

$$1. \Delta H V_1 = (k_S \nabla T_S - k_L \nabla T_L) \cdot \mathbf{n}.$$

其次, 若界面是平面 (flat interface), 我们还可假定在界面上, 液 - 固两侧的温度为凝固点温度 T_M , 即

$$2. T_L = T_S = T_M.$$

§ 2.2 从过冷边界开始的熔体的一维凝固过程 (I): 相似性解

2.2.1 问题的数学提法

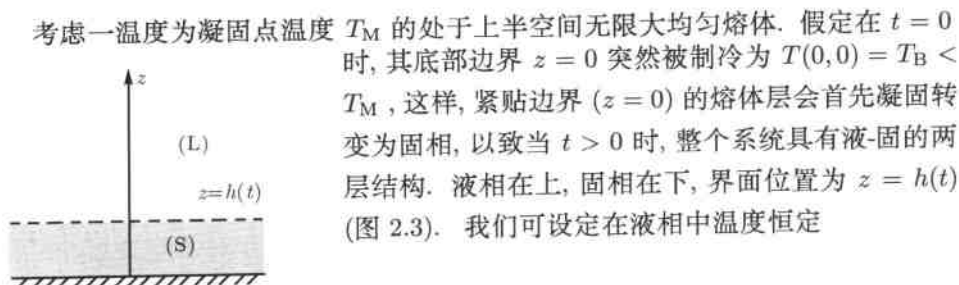


图 2.3 从过冷边界开始的一维凝固过程示意图

考虑一温度为凝固点温度 T_M 的处于上半空间无限大均匀熔体. 假定在 $t = 0$ 时, 其底部边界 $z = 0$ 突然被制冷为 $T(0, 0) = T_B < T_M$, 这样, 紧贴边界 ($z = 0$) 的熔体层会首先凝固转变为固相, 以致当 $t > 0$ 时, 整个系统具有液-固的两层结构. 液相在上, 固相在下, 界面位置为 $z = h(t)$ (图 2.3). 我们可设定在液相中温度恒定

$$T = T_M, \quad h(t) < z < \infty.$$

在固相中, 温度场非均匀, 它满足如下热传导方程:

$$\frac{\partial T_S}{\partial t} = \kappa_S \frac{\partial^2 T_S}{\partial z^2}, \quad 0 < z < h(t), \quad (2.8)$$

其中 κ_S 表示固相中热扩散系数 κ_T 之值.

在界面 $z = h(t)$ ($t > 0$) 上, 温度场满足以下边界条件:

1. 温度连续条件

$$T_L = T_S = T_M, \quad (2.9)$$

2. 热量守恒条件

$$\Delta H h'(t) = \kappa_S \frac{\partial T_S}{\partial z}, \quad (2.10)$$

这里 $V_1 = h'(t); \mathbf{n} = \mathbf{e}_z$.

此外还有初始条件

$$t \rightarrow 0, \quad h(t) \rightarrow 0, \quad T_S \rightarrow T_B. \quad (2.11)$$

以上偏微分方程动力系统包含未知温度场 $T_S(z, t)$, 还有一个未知的界面位置 $h(t)$, 故在数学上称为自由边界问题, 有别于数学物理中一般的初、边值问题.

2.2.2 量纲分析与相似解法

上述数学问题所包含的全部物理量都是有量纲的. 在进行物理问题的数学处理之前, 应用数学要求我们要设定适当的物理单位 (scales), 将各物理量无量纲化. 在本问题中没有固有的物理量可作为长度单位. 我们可选任一长度尺度 ℓ 作为长度单位; 选任一时间尺度 τ 作为时间单位. 并定义如下无量纲变量:

$$\bar{z} = \frac{z}{\ell}, \quad \bar{t} = \frac{t}{\tau}, \quad \bar{h} = \frac{h}{\ell}, \quad \bar{T}_S = \frac{T - T_B}{\Delta T},$$

这里 $\Delta T = T_M - T_B > 0$ 可视为底板的过冷度.

采用这些尺度之后, 方程与边界条件 (2.8)~(2.11) 便可无量纲化. 无量纲的控制方程为

$$\frac{\partial \bar{T}_S}{\partial \bar{t}} = \frac{1}{4\eta^2} \frac{\partial^2 \bar{T}_S}{\partial \bar{z}^2},$$

其中

$$\eta = \frac{\ell}{2\sqrt{\kappa_S \tau}};$$

无量纲的边界条件为

1. 在 $\bar{z} = 0$ 时, $\bar{T}_S = 0$,

2. 在 $\bar{z} = \bar{h}(\bar{t})$ 时,

(a)

$$\bar{T}_S = \bar{T}_L - 1, \quad (2.12)$$

(b)

$$\left(\frac{\Delta H \ell}{\tau} \right) \frac{d\bar{h}}{d\bar{t}} = \left(k_S \frac{\Delta T}{\ell} \right) \frac{\partial \bar{T}_S}{\partial \bar{z}},$$

或

$$\bar{h}'(\bar{t}) = \frac{1}{4\eta^2 S} \frac{\partial \bar{T}_S}{\partial \bar{z}}, \quad (2.13)$$

其中 $S = \Delta H / (c_p \rho \Delta T)$ 称为 Stefan 数.

上述无量纲系统包含两个无量纲参数 (η, S) 及两个无量纲未知函数: $\bar{T}_S(\bar{z}, \bar{t})$ 和 $\bar{h}(\bar{t})$. 这里无量纲数 S 是确定的常数, 综合了物质的热力学性质以及生长条件, 而参数 η 依赖于物理尺度、单位的选择.

假设上述数学问题之解是存在的 (物理问题的解应该总是存在的), 在物理时空内其无量纲解必定有如下形式:

$$\bar{T}_S = \Theta(\bar{z}, \bar{t}, S, \eta)$$

或

$$T_S(z, t) = (\Delta T)\Theta(\bar{z}, \bar{t}, S, \eta) + T_B.$$

注意到本问题的时间、长度单位 (τ, ℓ) 是任意选定的, 为求得在任意给定的时空点 (t, z) 上的温度场的值, 我们选择: $\ell = z, \tau = t$. 这样便得出

$$T_S(z, t) = T_B + \Delta T\Theta(1, 1, S, \eta),$$

其中

$$\eta = \frac{z}{2\sqrt{\kappa_S t}}.$$

在不同的时空点 (z, t) 上, 只要 η 值相同, 温度场的解 $T_S(z, t)$ 具有相同值, 这种解通常称为相似性解.

有了解的形式 $T_S(z, t) = T_B + \Delta T\Theta(S, \eta)$ 后, 从界面条件(2.12)可看出: 在界面 $\bar{z} = \bar{h}(\bar{t})$ 上或当 $\eta = \eta_S = h/2\sqrt{\kappa_S t}$ 时,

$$\bar{T}_S = \Theta(S, \eta_S) = 1.$$

由此得出, 在界面上, 参数 $\eta = \eta_S = \Lambda$, 必为一个仅依赖于参数 S 的常数, 因此界面的位置为

$$h(t) = 2\Lambda\sqrt{\kappa_S t}.$$

整个问题现在归结为求解 $\{\Theta(\eta), \Lambda\}$. 为求解, 令 $T_S = T_B + \Delta T\Theta(\eta)$ 以及 $\eta = z/2\sqrt{\kappa_S t}$. 不难从原来的有量纲系统(2.8)~(2.11)推得如下无量纲化方程:

$$\Theta''(\eta) + 2\eta\Theta'(\eta) = 0, \quad (2.14)$$

以及边界条件

1. 在底板上

$$\eta = 0, \quad \Theta(0) = 0. \quad (2.15)$$

2. 在界面 $\eta = \Lambda$ 上

(a)

$$\Theta = 1, \quad (2.16)$$

(b)

$$\Delta H \frac{2\Lambda\sqrt{\kappa_S}}{2t^{1/2}} = k_S \Delta T \Theta'(\eta) \frac{1}{2\sqrt{\kappa_S t}},$$

或者

$$\Theta'(\eta) = 2\Lambda S. \quad (2.17)$$

方程 (2.17) 有通解

$$\Theta(\eta) = B + A \int_0^\eta e^{-t^2} dt.$$

从边界条件 (2.15) 推出 $B = 0$, 从边界条件 (2.16) 可以推出: $1 = A \int_0^\Lambda e^{-t^2} dt$ 或者 $A = \frac{2}{\sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\Lambda)}$. 再引用误差函数: $\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} dt$, 可将解写成如下形式:

$$\Theta(\eta) = \frac{\operatorname{erf}(\eta)}{\operatorname{erf}(\Lambda)}. \quad (2.18)$$

最后从式 (2.17) 可导出

$$2\Lambda S = Ae^{-\Lambda^2},$$

或者

$$\frac{1}{S} = \frac{\Delta T}{\Delta H/(c_p \rho)} = \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\Lambda) \Lambda e^{\Lambda^2}. \quad (2.19)$$

公式 (2.19) 确定了界面的运动与生长条件的关系: $\Lambda = \Lambda(S)$. 解 $\Theta(\eta)$ 以及函数 $\Lambda(S)$ 的曲线形状如图 2.4 所示.

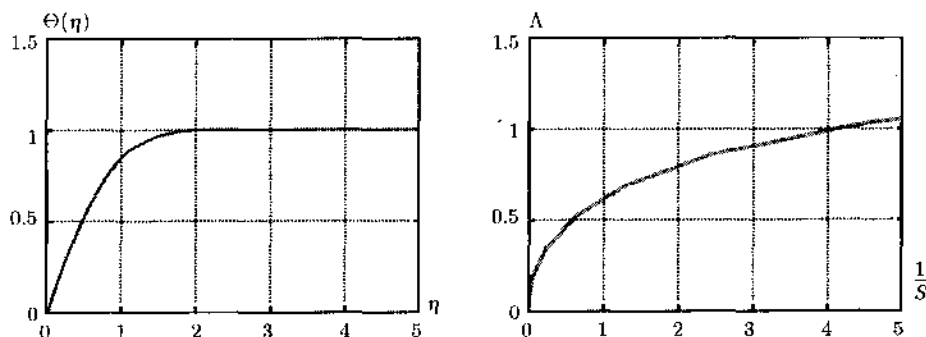


图 2.4 从过冷边界开始的一维凝固过程解示意图

2.2.3 小结

1. 从所得解 (2.18) 和 (2.19), 可以推出液 - 固界面的增长速度为

$$V_I = h'(t) = \Lambda \sqrt{\frac{\kappa S}{t}} \sim \frac{1}{t^{1/2}},$$

它由以 Stefan 数为代表的界面生长条件

$$\frac{1}{S} = \frac{\Delta T}{\Delta H/(c_p \rho)}$$

惟一确定. 此解推出: 在 $t = 0$ 时, 界面生长速度 $V_I = \infty$. 显然, 这个结果在物理上不合理. 它说明这里采用的数学模型还不够完善, 不能反映凝固过程开始的物理情况, 因而有待改善.

2. Stefan 数 S 越大 (表明过冷度 ΔT 越小或潜热越大), 界面增长速度越小.
3. 可算出在界面上的温度梯度

$$\begin{aligned} G_T &= \left. \frac{\partial T_S}{\partial z} \right|_{z=h} = \frac{\Delta T}{2\sqrt{\kappa_S t}} \Theta'(\eta) \Big|_{\eta=\Lambda} \\ &= \frac{\Delta T}{2\sqrt{\kappa_S t}} \Lambda S > 0, \end{aligned}$$

这是一个正值. 此结果表明界面是从低温区向高温区方向传播, 这符合我们的常识. 以后还将看到, 任何由低温区长入高温区的界面总是稳定的, 也将是光滑的.

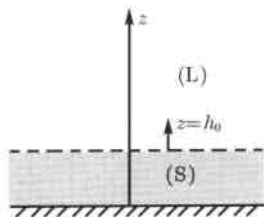


图 2.5 由过冷边界引起的一维凝固过程示意图

思考题:

1. 假定在初始时刻 $t = 0$, 液相温度 $T_L(z) = T_\infty > T_M$, 问题的解将为如何?
 $\{T_S = \Theta_S(\eta); T_L = \Theta_L(\eta)\}$
2. 假定在初始时刻 $t = 0$, 液相温度 $T_L = f(z) > T_M$ 不是均匀的, 问题的解将如何?
3. 试证明: 任意不定常的热传导方程解, 当边界条件是恒定时, 将趋于定常解, 即

$$\lim_{t \rightarrow \infty} T(z, t) = T_*(z),$$

其中, $T_*(z)$ 是相应问题的定常解.

§ 2.3 由过冷边界引起的熔体凝固过程 (II): 非相似性解

前面已指出, 上节所采用的模型会导致 $t = 0$ 时 $V_I = \infty$ 的不合理结论. 在物理上定向凝固过程开始之前在过冷边界上有一个成核过程. 这点在上节的模型中是忽略掉的. 为了考虑这个因素, 应当认为在定向凝固过程开始时, 固相层已有一定厚度. 所以, 在 $t = 0$ 时, 液-固界面位置是 $z = h_0 > 0$. 其次, 在凝固过程开始时液、固两相内的温度分布 $\{T_L(z, 0); T_S(z, 0)\}$ 可以是不均匀的. 假定: $T_L(z, 0) > T_M$, $T_S(z, 0) < T_M$; 最后在固壁与界面上, $T_S(0, t) = T_B < T_M$, $T_L(h, t) = T_M$. 为简单起

见, 我们只讨论小过冷度情形, 同时假定初始液相内温度均匀: $T_L(z, 0) = T_M$. 这一问题有一个自然的长度尺度, 固相层的初始厚度 h_0 , 这样可选定长度单位 (尺度) 为 $\ell = h_0$, 时间单位 (尺度) 为 $\tau = \ell^2 / \kappa_S = \frac{h_0^2}{\kappa_S}$. 相应的无量纲量可设定为

$$\bar{z} = \frac{z}{\ell}, \quad \bar{t} = \frac{t}{\ell^2 / \kappa_S}, \quad \bar{T} = \frac{T - T_B}{\Delta T}, \quad \bar{h} = \frac{h}{h_0}.$$

在液相区域内, 可设定温度恒为常数: $T_L(z, t) = T_M$. 这样, 很容易得到 $\bar{T}_L \equiv 1$. 在固相区域内, 有无量纲方程

$$\frac{\partial \bar{T}_S}{\partial \bar{t}} = \frac{\partial^2 \bar{T}_S}{\partial \bar{z}^2} \quad (0 < \bar{z} < \bar{h}(\bar{t})), \quad (2.20)$$

以及边界条件

1. 固壁条件

$$\bar{z} = 0, \quad \bar{T}_S(0, \bar{t}) = 0. \quad (2.21)$$

2. 界面条件 $\bar{z} = \bar{h}(\bar{t})$,

(a)

$$\bar{T}_S = 1; \quad (2.22)$$

(b)

$$\bar{h}'(\bar{t}) = \frac{1}{4\eta^2 S} \frac{\partial \bar{T}_S}{\partial \bar{z}} = \frac{1}{S} \frac{\partial \bar{T}_S}{\partial \bar{z}} = \epsilon \frac{\partial \bar{T}_S}{\partial \bar{z}}. \quad (2.23)$$

(注意: $\tau = \frac{\ell^2}{\kappa_S}$, 故对此系统有 $\eta^2 = \frac{1}{4}$.)

3. 初始条件: 当 $\bar{t} = 0$, $0 < \bar{z} < \bar{h}(0) = 1$ 时, $\bar{T}_S(\bar{z}, 0) = \Theta_0(\bar{z})$.

此问题没有上节所给出的精确的分析解, 但可设法寻找一种近似的分析解——渐近解.

2.3.1 时间意义上的内解

我们讨论小过冷度的情形: 即 $\epsilon = \frac{1}{S} = \frac{\Delta T}{\Delta H / (c_p \rho)} \ll 1$. 令 $\epsilon \rightarrow 0$, 同时假定 $\frac{\partial \bar{T}_S}{\partial \bar{z}} = O(1)$. 由式 (2.23) 可得: $\frac{\partial \bar{h}}{\partial \bar{t}} \approx 0$, 所以界面近乎于定常不动. 这样可对解作如下正则渐近展开:

$$\begin{cases} \bar{h}(\bar{t}, \epsilon) = 1 + \epsilon \bar{h}_1(\bar{t}) + \epsilon^2 \bar{h}_2(\bar{t}) + \cdots \\ \bar{T}_S(\bar{z}, \bar{t}, \epsilon) = \bar{T}_{S0}(\bar{z}, \bar{t}) + \epsilon \bar{T}_{S1}(\bar{z}, \bar{t}) + \cdots \end{cases} \quad (\epsilon \rightarrow 0),$$

将此展开式代入系统 (2.27)~(2.30), 集合 ϵ 的同幂次项便可得出各级近似动力系统. $O(\epsilon^0)$: 在零级近似下, 若设定 $\epsilon=0$, 令 $\bar{T}_S = \bar{T}_{S0}$, $\bar{h} = \bar{h}_0 = 1$, 从 (2.20)~(2.33) 可推出方程

$$\frac{\partial \bar{T}_{S0}}{\partial \bar{t}} = \frac{\partial^2 \bar{T}_{S0}}{\partial \bar{z}^2},$$