

过冷纯物质凝固的相场法的自适应有限元模拟*

赵达文¹ 杨根仓¹ 王锦程¹ 朱耀产¹ 于艳梅²

1. 西北工业大学凝固技术国家重点实验室, 西安 710072; 2. 北京凝聚态物理国家实验室, 北京 100080

摘要 采用自适应有限元法求解了过冷纯物质凝固相场模型. 以 Zienkiewicz 方法进行误差估计, 以四分树作为自适应网格数据结构, 采用网格细分法生成并动态调整自适应网格. 同时采用高阶插值方法精确计算了枝晶生长速度 V_{tip} 和枝晶尖端半径 ρ_{tip} . 结果表明, 采用自适应网格可将计算时间和存储空间降低一阶. 在枝晶生长初期的瞬态过程中, 枝晶尖端生长速度比尖端半径更快达到稳态值.

关键词 相场模型 枝晶生长 自适应网格 有限元

组织的形成和演化是材料科学和工程的核心内容之一. 在数学上, 组织演化是一个典型的自由边界问题, 其数值求解过程中必须使用复杂算法追踪移动界面. 相场模型的出现^[1]避免了数值计算中追踪液/固界面的困难; 同时还提供了一个合适的理论框架, 可以将影响凝固过程的各种因素方便地引入到模型中. 因此, 近年来相场模型在组织演化模拟中得到了广泛应用^[2-6].

20世纪90年代初期, 对相场方程的求解是基于均匀规则网格剖分^[2-5]. 求解过程的计算量随计算区域的增加而急剧增大, 同时对存储空间的巨大需求也限制了所能够计算尺度的大小, 所以只能用于小区域内的凝固组织演化模拟. 随着自适应网格技术的出现及日臻成熟, 相场方程计算量巨大的问题可以在一定程度上得到解决, 同时可极大地降低模拟计算对内存的需求, 从而拓展了能够计算的尺度, 该技术对于大尺度(时间, 空间)以及三维的相场方程模拟提供了坚实的基础. 近年来国外已有相关的研究工作不断出现^[7-10]. 本文采用自适应有限元方法求解了纯物质凝固的相场模型, 模拟了过冷条件下自由枝晶生长行为.

1 纯物质凝固相场模型

本文采用 Karma 等提出的纯物质凝固的二维相场模型^[4, 5]:

$$\tau(\mathbf{n})\partial_t\phi = \nabla \cdot W(\mathbf{n})^2 \nabla\phi + [\phi - \lambda u(1 - \phi^2)](1 - \phi^2) + \partial_x \left(W(\mathbf{n}) |\nabla\phi|^2 \frac{\partial W(\mathbf{n})}{\partial(\partial_x\phi)} \right) +$$

$$\partial_y \left(W(\mathbf{n}) |\nabla\phi|^2 \frac{\partial W(\mathbf{n})}{\partial(\partial_y\phi)} \right), \quad (1)$$

$$\partial_t u = D\nabla^2 u + \frac{1}{2}\partial_t\phi, \quad (2)$$

其中 $W(\mathbf{n})$ 为界面厚度, $\tau(\mathbf{n})$ 为弛豫时间, 是界面法向矢量 \mathbf{n} 的函数, 均选择为具有四重对称性:

$$W(\mathbf{n}) = W_0 a_s(\mathbf{n}),$$

$$\tau(\mathbf{n}) = \tau_0 a_s(\mathbf{n})^2,$$

$$a_s(\mathbf{n}) = W_0(1 - 3\epsilon_4) \cdot$$

$$\left[1 + \frac{4\epsilon_4}{1 - 3\epsilon_4} \frac{(\partial_x\phi)^4 + (\partial_y\phi)^4}{|\nabla\phi|^4} \right],$$

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|},$$

2005-06-03 收稿, 2005-12-05 收修改稿

* 国家自然科学基金资助项目(批准号: 50271057)

E-mail: dwzhao@163.com

其中 ϕ 为相场, $u \equiv (T - T_M)/(H/c_p)$, 为无量纲温度场, D 为热扩散系数, λ 为耦合因子, ϵ_i 为各向异性强度, T 为热力学温度, T_M 为熔点, H 为结晶潜热, c_p 为等压热容.

2 相场模型的自适应有限元求解

2.1 误差估计

本文采用 Zhu 和 Zienkiewicz 提出的误差估计方法^[11, 12], 以直接计算与光滑化后的梯度场差值作为误差函数. 本文中分别对相场 ϕ 与温度场 u 进行误差估计, 使生成的网格同时保证两者的精度要求.

对于某标量场 ψ , 定义误差函数为:

$$e = q_s - q_c, \quad (3)$$

其中 q_s 为光滑化后的梯度场 $\nabla\psi$, q_c 为由节点 ψ 值插值得到的 $\nabla\psi$.

$$q_s = NQ_s, \quad (4)$$

$N = (N_1, \dots, N_n)^T$, N_i 为形函数, Q_s 为光滑化后各节点处 $\nabla\psi$ 的 x 和 y 方向分量.

为使单元内误差函数 e 最小, 采用 Galerkin 加权余量法,

$$\int_{\Omega_e} N^T e \, d\Omega = \int_{\Omega_e} N^T (NQ_s - q_c) \, d\Omega = 0,$$

即线性方程:

$$\int_{\Omega_e} N^T N \, d\Omega Q_s = \int_{\Omega_e} N^T q_c \, d\Omega. \quad (5)$$

求解上式得 $\{Q_s\}$. 为方便使用, 对估计误差进行归一化处理:

$$E_c^2 = \frac{\int_{\Omega_e} |(q_s - q_c)|^2 \, d\Omega}{\sum_c \int_{\Omega_c} |q_c|^2 \, d\Omega}. \quad (6)$$

2.2 自适应网格的生成与动态调整

自适应网格的主要思想是按照误差估计的结果, 在各个场梯度较大的部分采用较细的网格以保

证计算精度, 而在其他部分采用较粗的网格以降低计算量. 本文中采用单元细化法生成自适应网格.

采用四分树作为自适应网格的数据结构, 每个四分树对应一个单元, 并按照细分程度赋予不同的细化级别. 设定误差上限 E_1 、误差下限 E_2 . 如图 1(a) 中, 单元 3 的估计误差 $E_c > E_1$, 则将单元 3 等分为四个子单元, 同时将比本单元细化级别低的相邻单元 1, 2 细化(图 1(a), (b)). 如果相同父单元的 4 个子单元的误差 $E_c < E_2$, 并且这 4 个子单元的所有相邻单元的细化级别均大于或等于此单元, 则把 4 个子单元 1—4 合并为一个单元 5(图 1(c), (d)). 为使相邻单元粗细平滑过渡, 避免细化级别相差较大的单元相互接触, 规定相邻四边形单元细化级别差值最大为 1. 对于含有悬挂节点的单元, 将依据其个数和分布进一步剖分为三角形单元或四边形单元, 如图 2(c) 所示.

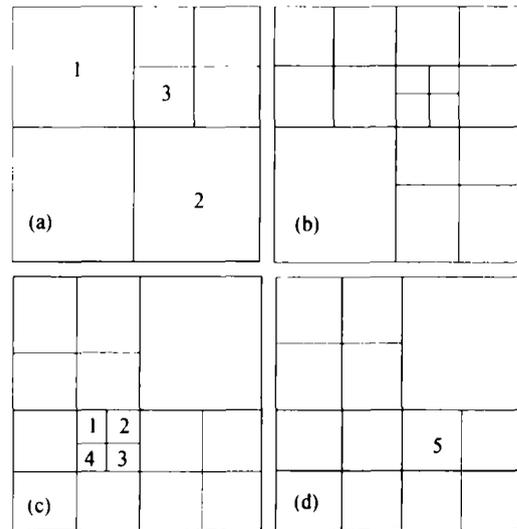


图 1 单元细化与合并示意图

2.3 相场方程的离散与求解

采用 Galerkin 加权余量法离散微分方程. 在单元内, $\phi = \sum_{i=1}^n N_i \phi_i^e, u = \sum_{i=1}^n N_i u_i^e, N_i$ 为形函数, 对于三角形单元, $n = 3$, 四边形单元, $n = 4$.

微分方程(1)和(2)离散后的方程矩阵形式为:

$$\int_{\Omega_e} NN^T \tau(n) \partial_i \{\phi\}_e \, d\Omega = \int_{\Omega_e} N [\phi - \lambda u (1 - \phi^2)] (1 - \phi^2) \, d\Omega -$$

$$\int_{\Omega_c} W^2(\mathbf{n})(N_x N_x^T + N_y N_y^T) d\Omega(\phi)_c + \int_{\Omega_c} W \frac{\partial W}{\partial \theta} (N_x N_y^T - N_y N_x^T) d\Omega(\phi)_c, \quad (7)$$

$$\int_{\Omega_c} \mathbf{N} \mathbf{N}^T \partial_t \{u\}_c d\Omega = - \int_{\Omega_c} D(N_x N_x^T + N_y N_y^T) \{u\}_c d\Omega + \frac{1}{2} \int_{\Omega_c} \mathbf{N} \mathbf{N}^T \partial_t (\phi)_c d\Omega, \quad (8)$$

其中 θ 为单位法矢量 \mathbf{n} 与 x 轴的夹角, $\mathbf{N}_x = (N_{1x}, \dots, N_{nx})^T$, $\mathbf{N}_y = (N_{1y}, \dots, N_{ny})^T$, \mathbf{N}_x^T , \mathbf{N}_y^T 为两者的转置.

针对 Galerkin 方法离散生成的系数矩阵的对称性和稀疏性特点, 采用非零元素存储法进行存储, 并采用 ICCG 法求解线性方程组. ϕ 和 u 在时间域均采用向前差分格式.

由于微分方程的空间对称性, 本文中仅计算枝晶在第一象限内的部分, $0 \leq x \leq L$, $0 \leq y \leq L$, L 为计算区域边长. 初始晶核为半径为 r_0 的 $1/4$ 圆. 初始条件为:

$$\begin{aligned} \phi &= 1, & u &= 0 & r &\leq r_0, \\ \phi &= -1, & u &= \Delta & r &> r_0, \end{aligned}$$

在本文计算中 ϕ 和 u 均采用 Zero-Neumann 边界条件:

$$\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = 0.$$

2.4 计算参数的确定

由薄界面渐近分析可以得到相场模型与尖锐界面模型中参数关系^[4-6]:

$$d_0 = a_1 \frac{W}{\lambda}, \quad (9)$$

$$\beta = a_1 \left[\frac{\tau}{\lambda W} - a_2 \frac{W}{D} \right], \quad (10)$$

其中 d_0 为毛细长度, $d_0 = \gamma_0 T_m c_p / H^2$, γ_0 为液固/界面能. β 为动力学系数. a_1 , a_2 与相场模型所采用的多项式函数相关, 在本文采用的相场模型中,

$$a_1 = 0.8839, \quad a_2 = 0.6267.$$

本文中, 固定 $W_0 = 1$, $\tau_0 = 1$, 按照(9), (10)式选择 λ 值使动力学系数 $\beta = 0$. 选择空间步长 Δx 时, 以 0.1 为间隔减小 $\Delta x / W_0$, 直到计算得到的枝晶尖端速度 V_{tip} 变化值小于 5%, 最终确定 $\Delta x / W_0 = 0.4$. 按照计算稳定性要求选取时间步长 $\Delta t / \tau_0 = 0.008$. 计算区域大小 $L_x = L_y = 409.6$, 计算结果表明, 在温度场未到达计算边界前, 枝晶已处于稳态生长状态, 见 3.3 节生长速度曲线.

2.5 枝晶尖端生长速度和半径的确定

由于液/固界面定义为 $\phi = 0$ 等值线, 必须用插值来确定枝晶尖端位置, 不同的插值公式会导致不同精度的计算结果. 本文采用高阶多项式插值确定枝晶尖端位置. 以 x 方向枝晶臂为例, 取枝晶尖端相邻的 6 个点 $\phi(1) - \phi(6)$, 得 5 阶插值多项式 $\phi = f(x)$, 然后由割线法求解方程 $f(x) = 0$ 得到枝晶尖端位置 x . 枝晶尖端生长速度为

$$V_{tip} = (x_n - x_{n-1}) / \Delta t, \quad (11)$$

x_n , x_{n-1} 分别为当前时刻与前一时刻的枝晶尖端位置. 枝晶尖端半径的确定采用 Karma 等^[5]提出的方法. 在确定 x_n 后, 由枝晶尖端 x 方向相邻的 6 节点和 y 方向相邻 7 节点求得相应插值多项式, 进而求得 ϕ_x , ϕ_y 值, 由下式求得枝晶尖端半径:

$$\rho_{tip} = \frac{\phi_x}{\phi_{xy}}. \quad (12)$$

当枝晶尖端非常靠近节点时, 线性插值会导致 V_{tip} 值剧烈振荡, 而高阶插值则无此现象. 计算结果表明, 采用高阶插值得到的生长速度振幅 $\Delta V_{tip} = 0.003$, 比线性插值 $\Delta V_{tip} = 0.106$ 低一个数量级.

3 计算结果与讨论

图 2(a) - (d) 分别为计算得到的枝晶形态演化过程、温度场以及相应的自适应网格. 计算参数为 $\Delta = 0.85$, $\epsilon_4 = 0.05$, $\lambda = 1.5955$, 其他参数如 2.3 节所述.

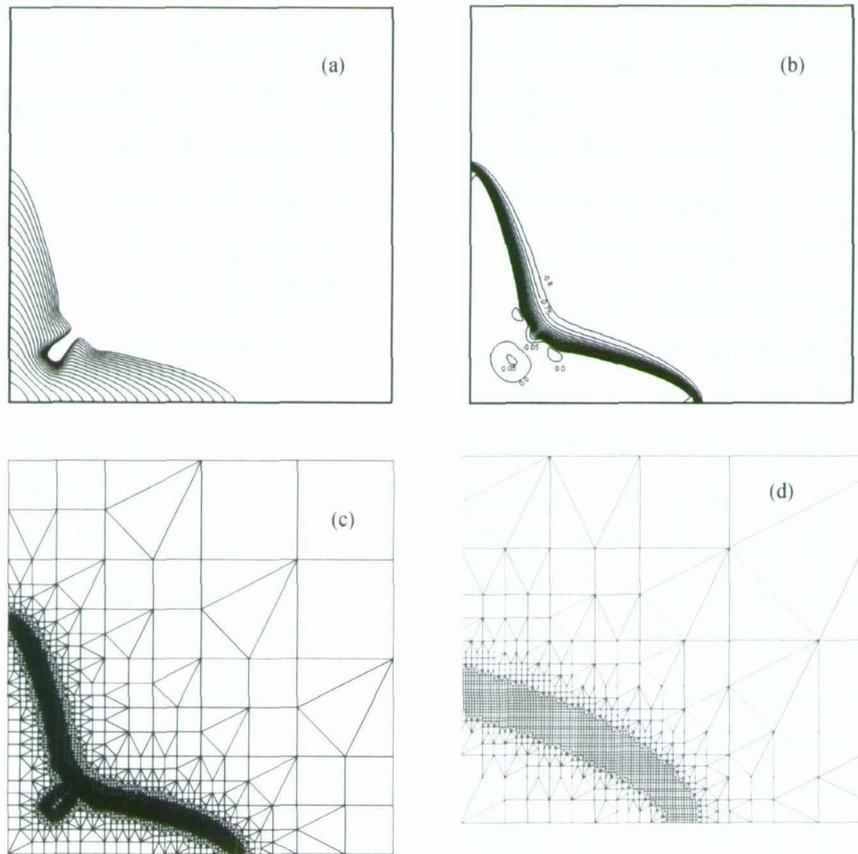


图2 计算得到的自由生长枝晶

(a) 1000 20000步不同时刻枝晶形态；(b) 20000步温度场；(c) 20000步的自适应网格；(d) 图(c)的局部细节

3.1 自适应网格

自适应网格的采用大大降低了网格中节点数目，即所求解的线性方程组的阶数 N ，提高每个时间步的求解速度。在二维自适应网格中， N 与液固界面长度 S 成正比；而 S_{\max} 与计算区域长度 L 成正比。在均匀网格中， N 与计算区域面积，亦即 L^2 成正比。在每一时间步中，采用自适应网格与均匀网格所求解线性方程组的阶数比值约为： $N_a/N_u \approx 1/L$ 。假设枝晶以恒定速度 V_{ip} 生长，则枝晶生长到边界的时间为 L/V_{ip} ，采用自适应网格所需的计算时间 $t_a \sim L^2$ ，而均匀网格计算时间为 $t_u \sim L^3$ 。自适应网格节点数 N 与一次枝晶臂长度 L_{arm} 增加而线性增加，如图3所示。表1为不同时刻自适应网格和均匀网格剖分的节点数。计算时间为20000步时，自适应网格的节点数 $N_a = 9483$ ，而均匀网格节点数为 $N_u = (2^{10} + 1) \times (2^{10} + 1) = 1050625$ 。

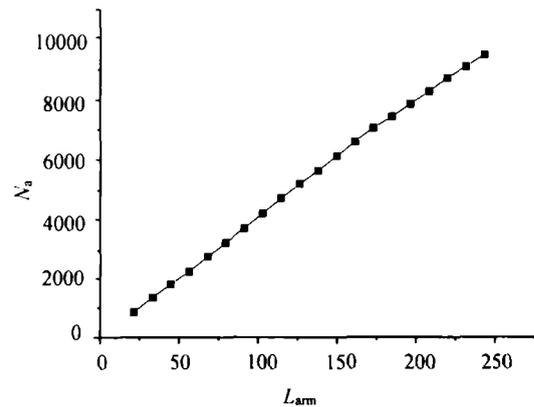


图3 自适应网格节点数目与枝晶臂长度关系

其次，采用自适应网格降低求解存储空间的需求。求解过程中内存占用取决于所储存的系数矩阵。在采用非零元素存储法时，自适应网格对应的系数矩阵占用的存储空间 $M_a \sim L$ ，较均匀网格占用的存储空间 $M_u \sim L^2$ 降低1阶。

表1 不同时刻自适应网格与均匀网格节点数

T/步	L_{arm}	N_a	N_u	N_a/N_u
0	21.21	211	1 050 625	0.000 2
2 000	33.25	1 352	1 050 625	0.001 29
4 000	44.70	2 238	1 050 625	0.002 13
6 000	56.18	3 216	1 050 625	0.003 06
8 000	67.79	4 196	1 050 625	0.003 99
10 000	79.46	5 191	1 050 625	0.004 94
12 000	91.14	6 122	1 050 625	0.005 83
14 000	102.81	7 061	1 050 625	0.006 72
16 000	114.48	7 861	1 050 625	0.007 48
18 000	126.15	8 727	1 050 625	0.008 31
20 000	137.82	9 483	1 050 625	0.009 03

3.2 枝晶形态演化过程

图4为不同时刻相场、温度场云图。初始枝晶为四分之一圆形晶核。由于界面能各向异性的作用，

一次枝晶臂沿着 $\langle 100 \rangle$ 晶向生长，但并没有立即达到稳态生长(图4(a), (b))。在图4(c)中，枝晶已经处于稳态生长阶段。与图4(c)相比，图4(d)中枝晶臂长度增加，枝晶尖端形状保持不变。由纯物质凝固的Stefan模型^[13]可知，液/固界面无量纲温度可表示为 $u_i = -d_0(n)/\rho$ ，由于界面能的作用，液/固界面温度与界面曲率有关，因此液/固界面并非为等温面，这体现在模拟结果中相场与温度场等值线并不一致。当曲率半径 ρ 为正时， $|\rho|$ 越大，界面温度 u_i 越小，如枝晶尖端曲率最大，其界面温度最低；而当曲率半径 ρ 为负时， $|\rho|$ 越小，界面温度 u_i 越高，如两枝晶臂相连处曲率半径为负且 $|\rho|$ 最小，故其温度最高。

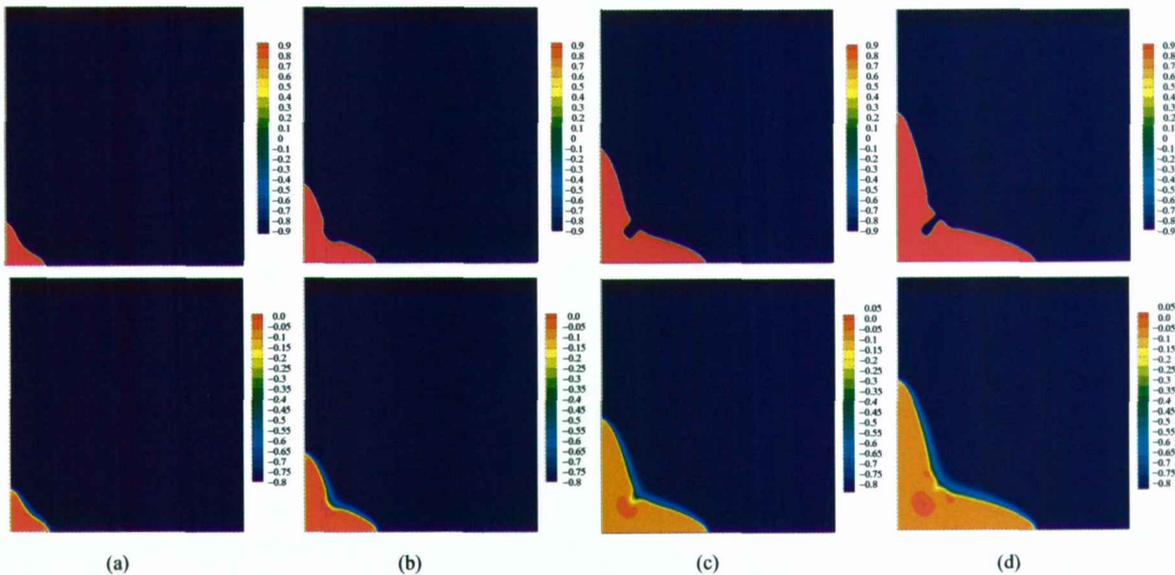


图4 不同时刻相场(上)、温度场(下)云图

(a) 5 000步；(b) 10 000步；(c) 15 000步；(d) 20 000步

3.3 自由枝晶生长的瞬态过程

图5为枝晶生长速度 V_{tip} 及尖端半径 ρ_{tip} 与时间关系。枝晶生长初期有一从非稳态到稳态生长的瞬态过程。由于所采用初始晶核半径 ρ_0 小于稳态生长枝晶尖端半径 ρ_{tip} ，其曲率过冷大于稳态值，使得枝晶生长驱动力——热过冷减小，从而使生长速度减小，枝晶尖端半径不断增加，直至枝晶达到稳定生长状态。另外，枝晶尖端生长速度达到稳态值所需时间小于尖端半径达到稳态值所需时间，这与Almgren等的理论预测一致^[14]。

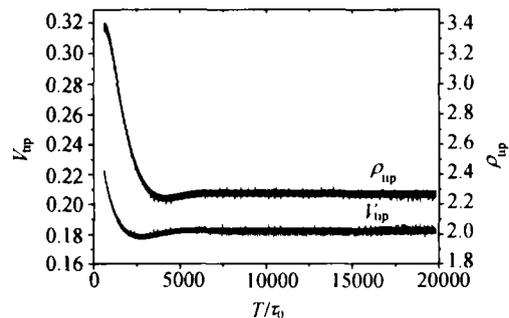


图5 枝晶生长速度、尖端半径与时间关系

4 结论

(1) 采用自适应有限元法求解过冷熔体凝固相场模型, 在保证计算精度前提下提高计算速度, 并降低存储需求. 采用自适应网格所需的计算时间为 $t_u \sim L^2$, 比均匀网格 $t_u \sim L^3$ 降低 1 阶. 同时占用的存储空间 $M_u \sim L$, 较采用均匀网格占用的存储空间 $M_u \sim L^2$ 降低一阶. 自适应网格节点数 N 与一次枝晶臂长度 L_{arm} 成线性关系.

(2) 采用高阶插值求枝晶生长的关键参数——枝晶尖端生长速度 V_{tip} 和半径 ρ_{tip} , 可以显著减小计算结果的震荡幅度.

(3) 枝晶生长初期存在生长速度 V_{tip} 减小、尖端半径 ρ_{tip} 增加, 并逐渐趋于稳态生长的瞬态过程, 枝晶尖端生长速度比尖端半径更快达到稳态值.

参 考 文 献

- Collins J B, Levine H. Diffuse interface model of diffusion-limited crystal growth. *Phys Rev B*, 1985, 31: 6119—6122
- Karma A. Phase-field model of eutectic growth. *Phys Rev E*, 1994, 49: 2245—2250
- McFadden G B, Wheeler A A, Braun R J, et al. Phase-field models for anisotropic interfaces. *Phys Rev E*, 1993, 48: 2016—2024
- Karma A, Rappel W J. Phase-field method for computationally efficient modeling of solidification with arbitrary interface kinetics. *Phys Rev Lett*, 1996, 53: 3017—3020
- Karma A, Rappel W J. Quantitative phase-field modeling of dendritic growth in two and three dimensions. *Phys Rev E*, 1998, 57: 4323—4349
- Almgren R F. Second-order phase-field asymptotics for unequal conductivities. *Siam J Appl Math*, 1999, 59: 2086—2107
- Braun R J, Murray B T. Adaptive phase-field computations of dendritic crystal growth. *J Crystal Growth*, 1997, 174: 41—53
- Provatas N, Goldenfeld N, Dantzig N. Efficient computation of dendritic microstructures using adaptive mesh refinement. *Phys Rev Lett*, 1998, 80: 3308—3311
- Provatas N, Goldenfeld N, Dantzig N. Adaptive mesh refinement computation of solidification microstructures using dynamic data structure. *J Comp Phys*, 1999, 148: 265—290
- Heong J H, Goldenfeld N, Dantzig J A. Phase field model for three-dimensional dendritic growth with fluid flow. *Phys Rev E*, 2001, 61: 041602
- Zienkiewicz O C, Zhu J Z. A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis. *Int J Numer Meth Eng*, 1987, 24: 337—357
- Zienkiewicz O C, Zhu J Z. Adaptive and mesh generations. *Int J Number Meth Eng*, 1987, 24: 377—398
- Langer J S. Instabilities and pattern formation in crystal growth. *Rev Mod Phys*, 1980, 52: 1—32
- Almgren R, Dai W-S, Hakim V. Scaling behavior in anisotropic Hele-Shaw flow. *Phys Rev Lett*, 1999, 71: 3461—3464