

自由枝晶生长相场模型的自适应有限元法模拟^{*}

陈 云 康秀红 李殿中[†]

(中国科学院金属研究所, 沈阳材料科学国家(联合)实验室, 沈阳 110016)

(2008 年 2 月 27 日收到, 2008 年 5 月 16 日收到修改稿)

采用自适应有限元方法求解了相场模型的控制方程, 利用自适应有限元法在求解效率和精度上的优势, 模拟了计算域较大, 界面层厚度较薄的情况下镍过冷熔体中单个完整等轴晶的演化过程, 使相场模型模拟结果更接近于真实物理模型, 并探讨了二次枝晶臂的演化机理. 模拟结果表明, 二次枝晶臂的演化主要由热扩散控制, 并受随机扰动影响, 在四个象限内呈现出不对称生长. 同时, 受枝晶臂生长时排出的潜热积聚作用, 同一侧的枝晶臂对新的二次枝晶臂的产生有促进作用. 此外, 二次枝晶臂出现合并、缩颈熔断、轴向熔化和径向熔化等四种粗化方式.

关键词: 自由枝晶生长, 相场, 自适应有限元法

PACC: 6150, 6470, 8110

1. 引 言

为解决凝固过程中固液界面演化规律的 Stefan 自由边界问题, 经典的明锐界面模型是在固相和液相中分别求解扩散方程, 将界面作为边界条件加入, 因此需要时刻跟踪移动界面的位置, 给数学求解带来了很大的不便^[1,2]. 相场模型采用 Ginzburg-Landau 或者 Cahn-Hilliard 在研究有序化相变时使用的自由能函数形式, 引入一个随时间和位置变化的序参量 $\varphi(x, t)$, 建立系统整体的自由能函数, 来考察自由能的变化, $\varphi = 0$ 表示固相, $\varphi = 1$ 表示液相, 0—1 之间为固液界面. 相场模型是在整个计算域内求解控制方程, 并把固液界面看作是具有一定厚度和物理意义的扩散区域, 即扩散界面, 来表现固液界面的移动规律, 不用时刻跟踪界面位置, 自动满足能量和物质守恒方程^[1-4].

凝固过程的相场模型最初由 Langer^[5] 将 Halperin, Hohenberg 和 Ma^[6] 提出的解决动态临界现象的 Model C 移植到凝固过程中, 解释固液界面的 Gibbs-Thomson 方程问题. 后经过 Wheeler^[4,7], Warren^[3] 等人的渐近分析及 Karma, Rappel^[8,9] 的薄界面分析, 通过与明锐界面模型进行比较确定模型参量, 已经发展得比较成熟, 可以很好地模拟纯物质、

合金等凝固过程中的组织演化规律, 再现了等轴晶^[2,3,9-11], 柱状晶^[12], 共晶^[13,14] 等凝固组织的生长过程. 相场模型中的固液界面层是相场变量梯度不为 0 的区域, 并假定在这个区域内体系的自由能密度与序参量梯度的二次方相关. 模型参数是在界面层厚度 $\delta \rightarrow 0$ 时推导出来, 要求界面区域内温度变化要远小于界面动力学过冷度, 因此界面区域厚度应与毛细管长度处于同一尺度, 并要求计算域应尽可能的大^[8]. 但是当界面层厚度较小时, 为了满足精度要求, 要求网格间距相应也很小, 与 δ 处于同一量级, 这样空间剖分的网格数量剧增, 给计算带来了巨大困难. 因此, 大部分二维模拟只考虑四分之一象限的等轴晶生长状况, 然后根据对称性研究整个晶体的生长. 实际上, 由于热扰动的随机性, 二次枝晶臂在四个象限内并不是完全对称生长. 另一方面, 考虑到计算效率问题, 界面层厚度平均值 $\bar{\delta}$ 取值也都比较大, $L/\bar{\delta} \approx 10^2 - 10^3$, 其中 L 为求解计算域的大小. 接近真实物理模型, 能够反映整个自由枝晶生长的 $L/\bar{\delta}$ 大致在 $10^3 - 10^4$ ^[15,16]. 采用普通的有限差分或者有限元算法对相场模型进行求解时, 是在整个计算域内对控制方程进行同尺寸的均匀离散, 但相场方程的解只在界面处变化剧烈, 在远离界面处, 方程的解保持不变, 只需在界面处进行细剖就可同样满足计算要求. 自适应有限元方法, 克服了普通计算方

^{*} 中国科学院知识创新工程重要方向项目(批准号: KGCXZ-YW-206)资助的课题.

[†] E-mail: dzli@imr.ac.cn

法效率和精度较低的缺点,可以在界面处对网格进行加密,在远离界面处进行粗化,极大地提高计算效率和求解精度^[11,17-20]。

本文利用局部加密和稀疏化的自适应有限元方法求解了相场模型的控制方程,研究了计算域较大,界面层厚度较薄,边界条件影响较小的情况下自由枝晶的生长特点以及二次枝晶臂的演化机理。

2. 相场模型和数值模拟

2.1. 模型控制方程

根据 Ginzburg-Landau 理论,对一个体积 V 的封闭体系,其系统的总熵 S 可表示为

$$S = \int_V \left[s(e, \varphi) - \frac{1}{2} \varepsilon^2 (\nabla \varphi)^2 \right] dv, \quad (1)$$

式中 $s(e, \varphi)$ 为与体系的内能 e 和相场变量 φ 有关的熵密度函数, ε 为梯度能系数,将方程(1)对时间求偏导得

$$\dot{S} = \int_V \left[\left(\frac{\partial s}{\partial e} \right)_\varphi \dot{e} + \left(\frac{\partial s}{\partial \varphi} \right)_e \dot{\varphi} + (\varepsilon^2 \nabla^2 \varphi) \dot{\varphi} - \varepsilon^2 \nabla \cdot (\dot{\varphi} \nabla \varphi) \right] dv. \quad (2)$$

对体系中的任意小体积 v 的内能随时间的变化为

$$\dot{e} = -\nabla \cdot \mathbf{q}, \quad (3)$$

其中 \mathbf{q} 为任意小体积 v 在其表面法线方向上的能量通量.将方程(3)代入方程(2)中并对积分函数的部分进行高斯积分变换

$$\begin{aligned} \dot{S} &= \int_A \left[\left(\frac{\partial s}{\partial e} \right)_\varphi \mathbf{q} + \varepsilon^2 \dot{\varphi} \nabla \varphi \right] \cdot \mathbf{n} dA, \\ &= \int_V \left[\mathbf{q} \cdot \nabla \left(\frac{\partial s}{\partial e} \right)_\varphi + \left(\frac{\partial s}{\partial \varphi} \right)_e \dot{\varphi} + (\varepsilon^2 \nabla^2 \varphi) \dot{\varphi} \right] dv. \end{aligned} \quad (4)$$

方程(4)中左端两项分别表示系统内熵产生和熵流对系统总熵的贡献.根据热力学第二定律,体系的熵变始终大于等于0,因此方程(4)的左端必须非负,这样有

$$\int_V \left\{ \mathbf{q} \cdot \nabla \left(\frac{\partial s}{\partial e} \right)_\varphi + \left[\left(\frac{\partial s}{\partial \varphi} \right)_e + (\varepsilon^2 \nabla^2 \varphi) \right] \dot{\varphi} \right\} dv \geq 0. \quad (5)$$

假定体系的内能为相场变量 φ 和熵密度 s 的函数 $e = e(\varphi, s)$,那么得到

$$de = \left(\frac{\partial e}{\partial s} \right)_\varphi ds + \left(\frac{\partial e}{\partial \varphi} \right)_e d\varphi, \quad (6)$$

在 φ 不变的情况下仍然有 $(\partial e / \partial s)_\varphi = T$,其中 T 为温度,代入方程(5),

$$\int_V \left\{ \mathbf{q} \cdot \nabla \left(\frac{1}{T} \right) + \left[\left(\frac{\partial s}{\partial \varphi} \right)_e + (\varepsilon^2 \nabla^2 \varphi) \right] \dot{\varphi} \right\} dv \geq 0. \quad (7)$$

为了确保体系的熵变一直大于等于0,方程(7)中的每一项必须均大于0,因此只能

$$\mathbf{q} = M_T \nabla \left(\frac{1}{T} \right), \quad (8)$$

$$\dot{\varphi} = M_\varphi \left[\left(\frac{\partial s}{\partial \varphi} \right)_e + \varepsilon^2 \nabla^2 \varphi \right], \quad (9)$$

这里假定系数 $M_T > 0, M_\varphi > 0$.将方程(8)代入方程(3)(6)式经过变换与方程(9)联立,就得到相场控制方程的初始形式

$$\dot{e} = -\nabla M_T \nabla \left(\frac{1}{T} \right), \quad (10)$$

$$\dot{\varphi} = M_\varphi \left[-\frac{1}{T} \left(\frac{\partial e}{\partial \varphi} \right)_s + \varepsilon^2 \nabla^2 \varphi \right], \quad (11)$$

设凝固潜热为 $L(T)$,热容为 c ,这样体系的内能 e 可以表示为^[1,3]

$$\begin{aligned} e(T) &= e_s(T_m) + e(T - T_m) \\ &\quad + p(\varphi)L(T), \end{aligned} \quad (12)$$

方程(12)中 T_m 为熔点,函数 $p(\varphi)$ 在 $\varphi = 0$ 时 $p(\varphi) = 0$, $\varphi = 1$ 时 $p(\varphi) = 1$.将方程(12)代入方程(10)中,

$$\begin{aligned} [c + p(\varphi)L'(T)] \frac{\partial T}{\partial t} \\ + p'(\varphi)L(T) \frac{\partial \varphi}{\partial t} = D \nabla^2 T, \end{aligned} \quad (13)$$

$p'(\varphi)$ 为 $p(\varphi)$ 对 φ 的导数, D 为导热系数,可以发现 $M_T = DT^2$,由 $D > 0$ 则 $M_T > 0$,与初始 $M_T > 0$ 的假设一致.将方程(11)中的内能用亥姆霍兹自由能 f 和熵 s 表示 $e = f + Ts$,即将亥姆霍兹自由能密度与相场变量关联起来.根据吉布斯-亥姆霍兹关系,经过一系列变换很容易得到

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} &= M_\varphi [p'(\varphi) \alpha(T) \\ &\quad - C'(\varphi) + \varepsilon^2 \nabla^2 \varphi], \end{aligned} \quad (14)$$

其中

$$\omega(T) = \int_{T_m}^T \frac{L(\xi)}{\xi^2} d\xi.$$

已经假定在 $\varphi = 0$ 和 $\varphi = 1$ 时分别表示固相和液相, 因此当 $\varphi = 0$ 和 $\varphi = 1$ 时亥姆霍兹自由能密度函数分别取得极小值, 保证处在固相或者液相状态下的部分能量有最小值, 并且在熔点 T_m 处, $f(0, T_m) = f(1, T_m)$, 因此根据以上条件, 取^[1]

$$\alpha(\varphi) = \frac{1}{4a}g(\varphi) = \frac{1}{4a}\varphi^2(1-\varphi)^2, \quad (15)$$

$$p(\varphi) = \varphi^3(10 - 15\varphi + 6\varphi^2), \quad (16)$$

常数 a 为与材料参数和界面层厚度有关的量. 根据文献 [14], 对相场方程进行一维求解, 得到 a 和 ϵ 的关系式

$$\epsilon^e = \delta^2/a, a = \frac{\sqrt{2}\delta T_m}{12\sigma}, \quad (17)$$

式中的 δ 为界面层厚度, σ 为界面能. 根据 Wheeler 等人^[4]对合金中纯组元渐进分析的结果, 方程(14)中的系数 M_φ 为

$$M_\varphi = \frac{\beta T_m^2}{6\sqrt{2}\delta L_m}, \quad (18)$$

其中 β 为线性动力学系数. 将(15)(16)(17)(18)式代入方程(14), 为了方便计算, 根据文献 [1] 取计算域的空间尺度为 l , 采用 $\tilde{t} = tD/(cl^2)$, $\tilde{x} = x/l$, $u = (T - T_m)/(T_m - T_0)$ 进行无量纲化处理, 并假设固相和液相中的热容相等且为常数, 有 $L(T) = L_m$, 其中 L_m 为凝固潜热, $L(u) \equiv 1$, 表明当某一位置的 φ 值由 1 变为 0 时就释放出单位 1 的潜热. 利用 $(T_m - T_0)/T_m \approx 0$ 进行近似, 有 $\omega(u) = u$. 经过这些处理后就得到 Wheeler 等人的纯物质相场模型控制方程^[10]

$$\frac{\partial u}{\partial \tilde{t}} + \frac{1}{\alpha}p'(\varphi)\frac{\partial \varphi}{\partial \tilde{t}} = \tilde{\nabla}^2 u, \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{\epsilon}^2}{m}\frac{\partial \varphi}{\partial \tilde{t}} &= 30\tilde{\epsilon}\alpha\lambda u g(\varphi) \\ &- \frac{1}{4}g'(\varphi) + \tilde{\epsilon}^2\tilde{\nabla}^2\varphi. \end{aligned} \quad (20)$$

方程(19)和(20)中的 $\alpha = \frac{c(T_m - T_0)}{T_m}$ 为过冷度, $\lambda =$

$\frac{\sqrt{2}L_m^2}{12\sigma T_m}$ 为毛细管长度的倒数, $\tilde{\epsilon} = \delta/l$, $m = \frac{\beta\sigma T_m}{D'L_m}$ 为

界面迁移系数, 式中的 $D' = D/c$. 当考虑界面的各向异性时, 方程(20)变为

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{\epsilon}^2}{m}\frac{\partial u}{\partial \tilde{t}} &= 30\tilde{\epsilon}\alpha\lambda u g(\varphi) \\ &- \frac{1}{4}g'(\varphi) + \tilde{\epsilon}^2\tilde{\nabla}\eta^2\tilde{\nabla}\varphi \\ &- \tilde{\epsilon}^2\frac{\partial}{\partial x}\left(\eta\eta'\frac{\partial \varphi}{\partial y}\right) \\ &+ \tilde{\epsilon}^2\frac{\partial}{\partial y}\left(\eta\eta'\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right), \end{aligned} \quad (21)$$

其中 $\eta = 1 + \gamma\cos(k\theta)$, $\eta' = d\eta/d\theta$, $\theta = \arctan(\varphi_y/\varphi_x)$, γ 为各向异性强度, k 为各向异性模数, $\varphi_x = d\varphi/dx$, $\varphi_y = d\varphi/dy$.

2.2. 自适应有限元方法

有限元方法就是将边值问题化为变分问题之后, 把求解区域离散成有限个单元, 然后在每个单元上作未知函数的某种多项式插值, 并且使它们在相邻单元的公共边界上满足某种连续性条件^[21]. 本文所采用的自适应有限元法是在普通有限元方法的基础上引入网格控制函数, 在每一个单元均添加一自适应指示子 E_τ , E_τ 为与求解函数的解和误差有关的量, 网格控制函数根据 E_τ 对网格单元进行实时的插入网格以细化或者删除网格以粗化来实现自适应调整. 有关网格自适应剖分过程的算法可参阅文献 [18]. 考虑到有枝晶臂熔化现象, 在计算中 E_τ 取为与 $(|\varphi_x\Delta y| + |\varphi_y\Delta x|)/2$ 相关的值, 其中 Δx , Δy 为每个单元的任意两点在 x , y 方向的距离, 这样不论单元的相场梯度是正还是负均能实现加密或粗化.

根据这种自适应有限元算法, 对温度场方程(19)和相场方程(21)进行求解, 两个方程均为复杂的非线性抛物型偏微方程. 首先引入试验函数 $\psi(x, y)$, $\psi(x, y)$ 略去 \sim , 时间上采用一阶离散, 间隔为 Δt , 写出它们的弱形式

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega} \nu \frac{u^{t+\Delta t}}{\Delta t} d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \nu \cdot \nabla u d\Omega \\ &= \int_{\Omega} \nu \frac{u^t}{\Delta t} d\Omega - \int_{\Omega} \frac{1}{\alpha}p'(\varphi) \frac{\varphi^{t+\Delta t} - \varphi^t}{\Delta t} d\Omega \\ &+ \int_{\partial\Omega} \nu \frac{\partial u}{\partial n} dT, \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega} \psi \frac{\epsilon^2}{m} \frac{\varphi^{t+\Delta t}}{\Delta t} d\Omega + \int_{\Omega} \epsilon^2 \eta^2 \nabla \psi \cdot \nabla \varphi d\Omega \\ &- \int_{\Omega} \epsilon^2 \eta\eta' \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial y} d\Omega + \int_{\Omega} \epsilon^2 \eta\eta' \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \varphi}{\partial x} d\Omega \end{aligned}$$

$$= \int_{\Omega} \left[\psi \frac{\varepsilon^2}{m} \frac{\varphi'}{\Delta t} d\Omega + \int_{\Omega} \left[30\varepsilon\alpha\lambda u g(\varphi) - \frac{1}{4} g'(\varphi) \right] d\Omega + \int_{\partial\Omega} \psi \frac{\partial\varphi}{\partial n} d\Gamma \right] \quad (23)$$

对温度场和相场控制方程的弱形(22)和(23)式,利用 Li 等人编写的自适应有限元软件包 AFEPack^[22]提供的函数库在 GNU/Linux 平台进行编程求解。

2.3. 参数的选取与数值模拟

为了更好的与经典模拟结果进行比较,说明所采用自适应有限元方法求解相场方程的有效性,本文模拟的物质仍然是镍的过冷熔体中等轴晶的自由生长。模拟所用的物理参数如表 1 所示,把界面层厚度参量减小为文献 10 的二分之一,模拟的枝晶界面层厚度 $\delta = 5.25 \times 10^{-7}$ cm,与镍的近似毛细管长度 $d_0 = 1.0 \times 10^{-7}$ cm 处于同一数量级。表 1 中的 $\delta x, \delta y$ 为初始网格三角形单元的近似边长。为了研究二次枝晶臂的演化情况,在方程(21)中加入一随机扰动项

$$(\tilde{\varepsilon}^2/m) \partial\varphi/\partial\tilde{t} \rightarrow (\tilde{\varepsilon}^2/m) \partial\varphi/\partial\tilde{t} + \chi\zeta\tilde{\varepsilon} \alpha\lambda u g'(\varphi)\varphi(\varphi-1),$$

χ 为在 $[-1.0, 1.0]$ 之间的随机数, ζ 为扰动振幅,取为 0.60。扰动中加入 $\varphi(\varphi-1)$ 项的目的是使扰动限制在界面处。

边界条件均设为值为 0 的 Neumann 边值条件。模拟中 l_0 分别取为 1.5 2.0 3.0 4.0 的正方形计算域,初始晶核为在计算域中心,半径为 0.007 的圆。初始无量纲温度 $u_0 = -1.0$,由过冷度 $\alpha = 0.50$ 对应实际的初始温度 $T_0 = 1511$ K。模拟结果采用专业数据图形处理软件 OpenDX^[23]进行查看。

表 1 模拟所用的物理参数

T_m/K	1728	$\tilde{\varepsilon}$	0.0025
$L_m/(J/cm^3)$	2350	γ	0.05
$\sigma/(10^{-5} J/cm^2)$	3.70	k	4
$c/(J/cm^3)$	5.42	$\delta/10^{-7}$ cm	5.25
$D/(W/cm K)$	0.8401	Δt	6×10^{-6}
$\beta/(cm/K s)$	285	δx	0.05
$l/(10^{-4} cm)$	2.10	δy	0.05
α	0.05		

图 1 为采用 2.2 部分所给出的自适应算法得到的初生枝晶网格剖分图,图中灰度变化剧烈的地方

为固液界面区域。由图 1(a)可以看出,固液界面处实现了加密,而在远离界面处网格粗化至初始网格。图 1(b)为图 1(a)左侧上部枝晶根部放大后的网格情况,处在界面处网格加密还是比较均匀,并存在网格疏密梯度。计算域中网格的最小边长保持在 7.8×10^{-4} ,相场变量估计误差保持在 2.0×10^{-4} 左右波动,温度场在相对较粗的网格内求解,其误差约为相场的 2 倍。求解的节点数虽随着时间增加逐渐增加,但计算终止时对 $l_0 = 3.0$ 的计算域也仅有 1.2×10^5 个,远少于普通方法在同样的网格间距下所需要的 1.6×10^6 个节点。考虑网格各向异性会对枝晶生长产生影响,对计算参数进行试验,如图 2 所示,将各向异性强度 γ 取为 0,经过 $1800\Delta t$ 后晶体仍呈光滑的圆形生长,表明所采用的计算参数是适合于模拟枝晶的生长。

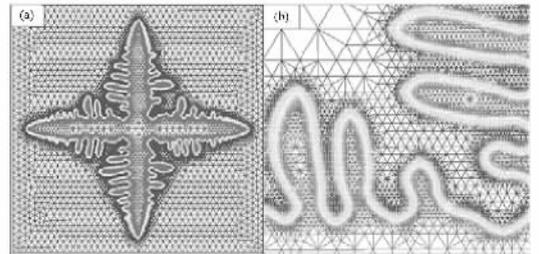


图 1 不同视角下的网格 (a) $40\delta x \times 40\delta y$ (b) $6.5\delta x \times 6.5\delta y$

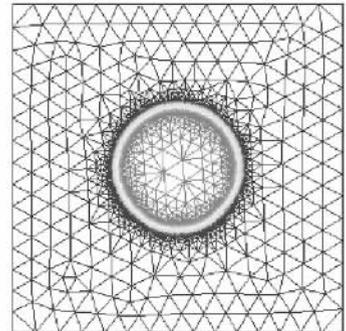


图 2 $\gamma = 0$ 时经过 $1800\Delta t$ 后的计算结果

模拟中采用下面公式计算枝晶尖端速度 v_{tip} ^[24]:

$$v_{tip} = - \frac{d\varphi/dt}{|\nabla\varphi|}. \quad (24)$$

3. 模拟结果与讨论

3.1. 模型参数对自由枝晶生长的影响及结果分析

Wheeler^[10], Karma^[9]等人对相场方程模拟纯物

质枝晶生长的准确性进行了深入研究,证实了相场模型的模拟结果与 Gibbs-Thomson 条件和经典微观可解性理论、临界稳定性理论符合良好,并能够准确地定量地模拟二维和三维枝晶的生长.文献 [11] 指出,在非等温情况下,由于热扩散速度比相场或者溶质场的移动速度快,枝晶生长很容易受到模拟计算域的边界限制.图 3 为在 $t = 0.033$ 时,不同计算域下的温度场分布情况,图中同一时刻不同大小的枝晶形貌是由于对小计算域下的枝晶进行了放大处理,实际上大计算域的轮廓要比小计算域的大.从图中等温线分布可以明显观察到当计算域较小时,计算域内的最低温度,即远离界面的大体积液相的温度很快升高,枝晶尖端温度梯度较小.在 $l_0 = 3.0, l_0 = 4.0$ 的计算域内,两者温度场分布几乎相同.对过冷熔体中纯物质的枝晶生长来说,枝晶生长主要由熔体中热扩散控制,固液界面移动伴随着潜热产生.在固液界面面积相同的情况下所释放的潜热量相同,而同样潜热都被整个模拟的体系所吸收,因此小计算域的温度应该更高一些,这样枝晶尖端的温度梯度会减小,尖端速度减小.此外对比不同计算域下一次枝晶臂尖端的生长速度随时间变化的关系可以发现,经过 $40\Delta t$ 后,所有计算域下尖端速度均达到稳态,但经过一定时间后,计算域较小的体系枝晶尖端速度低于计算域较大的体系,并降低至 0 附近,此时二次枝晶臂并不发达.因此计算域较大的体系中枝晶模拟结果才能更好地说明自由枝晶的生长状况.考虑到计算时间问题,模拟中选择 $l_0 = 3.0$ 的计算域研究枝晶臂的演化机理.

由明锐界面模型,固液界面处的温度 u_i 和界面移动的法向速度 v_i 可以表示为

$$v_i = D'(\partial_n u_i|^- - \partial_n u_i|^+), \quad (25)$$

$$u_i = -d_0/R - \beta v_i, \quad (26)$$

其中 d_0 为毛细管长度, R 为界面的曲率半径.由 (25) 式得到的枝晶尖端速度与该处温度场的法向梯度有关.图 4 为不同界面层厚度参数下 $l_0 = 3.0$ 的枝晶形貌,可以看出随着界面层厚度参数的增加,界面处相场变量梯度减小,枝晶生长速度降低,各向异性对枝晶臂的作用已不是很明显,枝晶臂根部缩颈位置逐渐被界面层所占据,二次枝晶臂数量减少,枝晶形状逐渐偏离实际的形貌.此外,当 $\tilde{\epsilon} = 0.0075$ 时,界面区域内温度 u_i 的变化已不能满足远小于 (26)

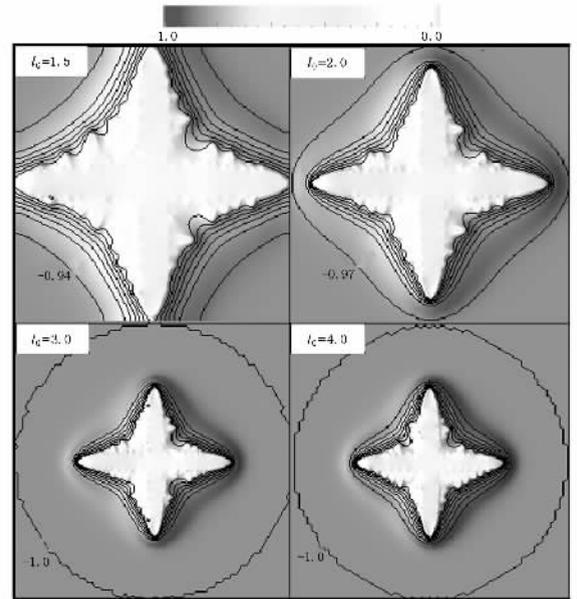


图 3 不同计算域下的温度场分布图

式中的动力学过冷度的要求[8].文献 [25] 在模拟合金定向凝固过程中同样也发现随着界面层厚度减小,枝晶尖端半径减小,界面易于失稳,树枝晶发达.图 5 为在 $t = 0.0504$ 时,在相场控制方程中不引入扰动和引入扰动的枝晶尖端温度场分布图.从图 5 (a) 可以看出,当不存在随机扰动时,枝晶尖端等温线平滑,无波动,最高温度处于平衡状态温度,并且其位置一直处在一次枝晶臂的根部.当存在扰动时,枝晶尖端等温线波动严重,如图 5 (b) 所示,最高温度达到 0.026,显然超出数值误差范围,高于熔点,必然会有部分区域熔化,而且其位置并非固定于某一点,总是在一次枝晶臂界面处移动[11].在多数情况下,存在扰动时最高温度会在距一次枝晶臂尖端一定距离的新的二次枝晶臂根部出现,即二次枝晶臂萌生的位置与尖端半径存在一定关系,这与文献 [26] 给出的理论结果一致.显然二次枝晶臂的萌生,也即是一次枝晶臂界面的失稳与扰动和界面处的温度梯度有关.

从图 5 (b) 的结果以及上述分析得到,要使光滑界面某点出现高于其他部分的温度梯度,等温线出现波动,满足下面任意条件即可: 1) 等温线凸起的地方温度高于周围,如图 5 (b) 尖端附近的高温等温线; 2) 在等温线张开的方向已经形成的界面熔化或者界面的移动受到抑制.在本文的模拟中,由于刚形成的二次枝晶臂排出的潜热又向着一次枝晶臂尖端

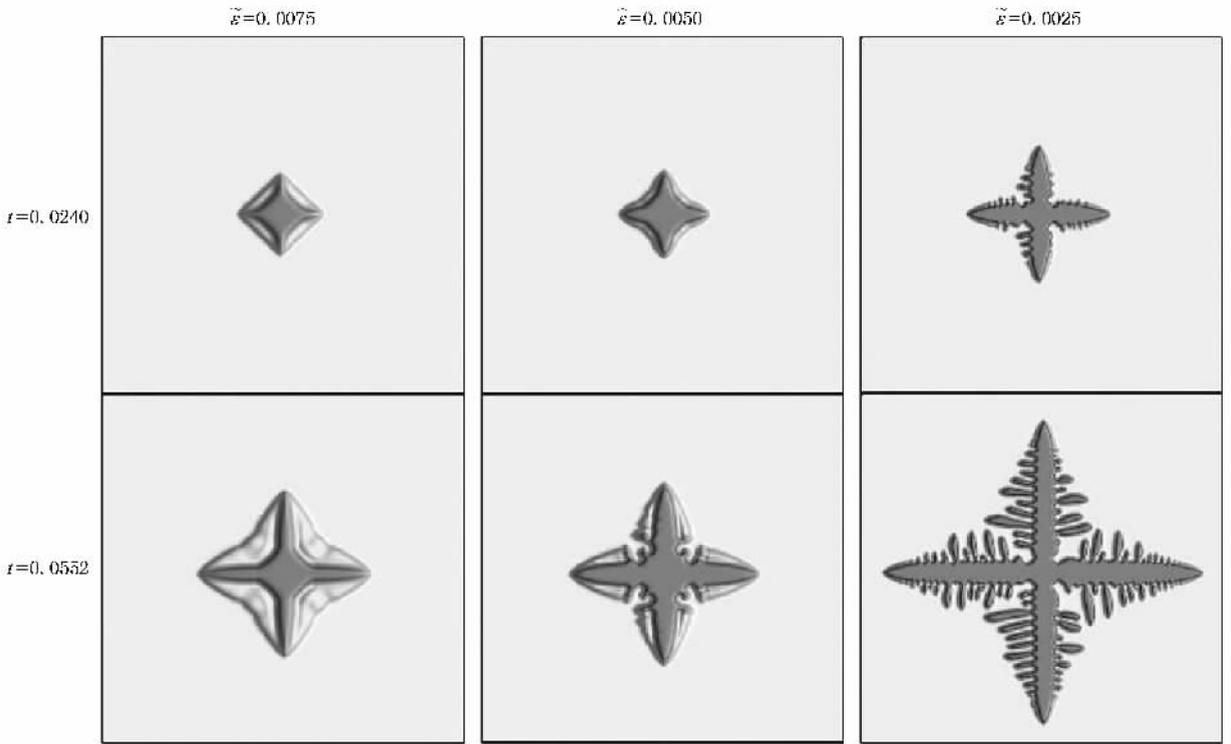


图 4 界面层厚度参数对枝晶形貌的影响

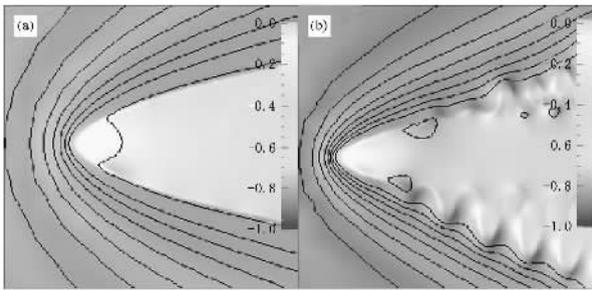


图 5 随机扰动对一次枝晶臂尖端温度场分布的影响 (a) 无扰动 (b) 有扰动

方向扩散,使这些地方温度有可能瞬间超过熔点,例如区域内最高温度达到 0.03,一次枝晶臂的界面在这些部位出现熔化现象.同时,由于熔化吸热作用导致周围界面温度降低致使在一次枝晶臂尖端方向等温线出现波动,获得更高的温度梯度,这样就促进了这些界面的快速凸出移动,于是原先一次枝晶臂的光滑界面失稳,新的二次枝晶臂萌生.二次枝晶臂一旦获得比周围界面高的温度梯度,将会具有很高的生长优势,向过冷熔体中突进.图 6 比较了 $\varphi = 0.5$ 的界面在不同时刻的最大移动速度与沿 x 轴正向的一次枝晶臂尖端速度.可以看出,在稳态下整体固

液界面的最大移动速度并不是如一次枝晶臂尖端的界面速度那样稳定,偶尔会出现较大的波动.界面处最大移动正的速度与一次枝晶臂尖端速度差值较大的地方应该为二次枝晶臂尖端的速度.图 6 中界面最大速度出现了负值,表明部分界面有熔化现象.

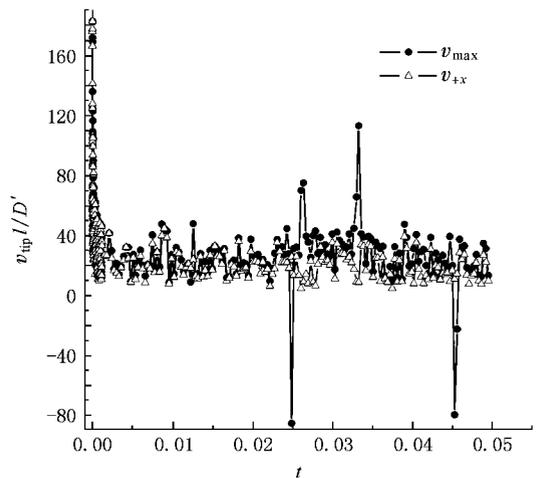


图 6 固液界面最大移动速度和沿 x 轴正向一次枝晶臂尖端速度

当两个生长着的枝晶臂排出的潜热扩散方向相

对时,那么在这两个扩散方向的交点处潜热会迅速增加,温度梯度迅速减小,造成生长速度减小,产生潜热积聚.潜热的积聚有两方面作用,当积聚的潜热过多且分布不均时,尤其是一次枝晶臂和二次枝晶臂之间的潜热积聚过多时,会使部分界面温度迅速升高,等温线出现较大波动,从而促进了新的二次枝晶臂萌生,当潜热的积聚不多时,潜热分布比较均匀,等温线相对比较光滑,二次枝晶臂的产生和生长会被抑制,这样导致更少的潜热产生.由图 3 ($l_0 = 3.0$) 温度场和图 4 ($\tilde{\epsilon} = 0.0025$) 的枝晶形貌可以进一步看出,二次枝晶臂的形貌在四个象限内是不完全对称的,在第二、三象限内,二次枝晶臂较发达,也就表明产生的潜热较多,等温线波动比较严重,在第四象限内二次枝晶臂最不发达,产生的潜热显然最少,等温线相对较光滑,说明由枝晶臂生长引起的潜热积聚对新的二次枝晶臂的产生有促进作用.

3.2. 二次枝晶臂的粗化

当计算时间足够长,一次枝晶臂足够大时,二次枝晶臂的产生受其他一次枝晶臂排出的潜热影响较小,在时间上呈现周期性,在空间上呈正弦波式发展.此时早期的二次枝晶臂出现粗化现象,在模拟中观察到二次枝晶臂有合并、缩颈熔断、轴向熔化和径向熔化^[27]等四种不同的粗化方式,如图 7 所示.图中从(a)到(c)随时间逐渐演化.从图 7(1)中的枝晶臂 A、B 可以看出,发生合并的枝晶臂主要是那些距离比较近,在初期竞争生长中都能同时生长,而且两者之间的固液界面曲率为负并且绝对值较大的枝晶臂.当这两个枝晶臂之间的固液界面移动速度快于任何一个枝晶臂生长速度时就出现合并现象.缩颈熔断型的二次枝晶臂主要是由于早期潜热积聚作用,自身根部较细,逐渐被积聚的潜热熔断,如图 7(2)中的 B 所示,同时跟踪观察 B 根部的温度发现其始终高于周围.图 7(3)为轴向熔化模式,由于受到枝晶臂 A 和 C 排出的潜热作用,同时自身尖端的曲率半径较小,根据(26)式,自身熔点较低,枝晶臂 B 尖端向过冷熔体中的生长被严重地抑制,逐渐被 A 和 C 淘汰.当枝晶臂 B 径向曲率半径较小时,一方面自身熔点较低,另一方面受到 A 和 C 径向界面移动排出的潜热作用,就会出现如图 7(4)所示的径向熔化现象,在这样情况下,枝晶臂 B 逐渐被 A 和 C 从径向和轴向吞并淘汰.

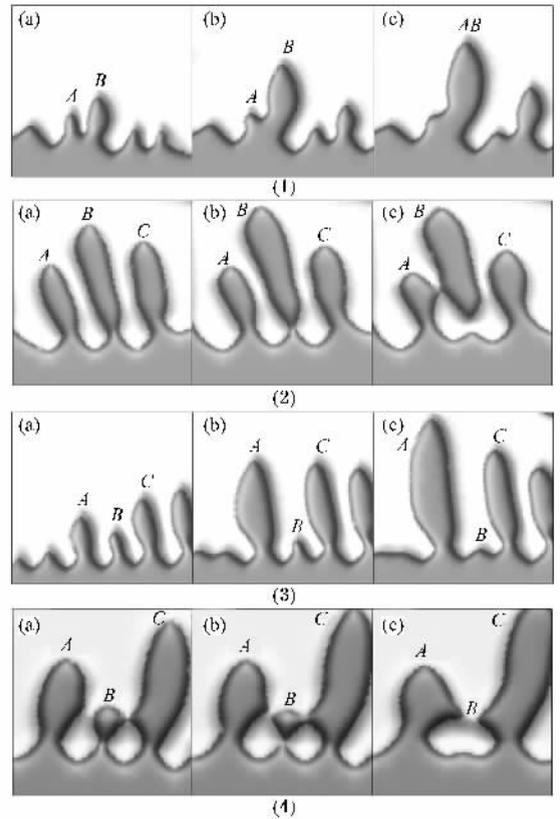


图 7 二次枝晶臂的四种粗化方式 (1)合并 (2)缩颈熔断 (3)轴向熔化 (4)径向熔化

4. 结 论

本文采用自适应有限元方法模拟了纯物质自由枝晶的生长过程,得出以下结论:

1. 当计算域较大,界面层厚度较小时,模拟结果比较真实地反映了实际自由枝晶的生长状况和枝晶形貌.
2. 存在扰动时,出现潜热积聚且分布不均,等温线波动较严重,出现较大的温度梯度.模拟区域内最高温度超过熔点.同时由于潜热积聚的作用,在四个象限内温度场呈现不对称分布,同一侧或同一象限内的枝晶臂促进了新的二次枝晶臂的萌生,从而形成了不完全对称的二次枝晶臂形貌,因此潜热积聚对二次枝晶臂的演化起着重要作用.
3. 受潜热和固液界面曲率的共同作用,模拟中观察到四种二次枝晶臂的粗化方式,分别为合并、缩颈熔断、径向熔化和轴向熔化方式.

指导,同时也感谢 Movingmesh 网站提供的学习平台和网站成 员们的热心帮助.

- [1] Wang S L ,Sekerka R F ,Wheeler A A ,Murray B T ,Coriell S R , Braun R J ,McFadden G B 1993 *Physica D* **69** 189
- [2] Kobayashi R 1993 *Physica D* **63** 410
- [3] Warren J A ,Boettinger W J 1995 *Acta Metall. Mater.* **43** 689
- [4] Wheeler A A ,Boettinger W J ,McFadden G B 1992 *Phys. Rev. A* **45** 7424
- [5] Langer J S 1986 *Direction in Condensed Matter Physics* eds. G. Grinstein ,G. Mazenko(World Scienc ,1986) 164
- [6] Halperin B I ,Hohenberg P C ,Ma S K 1974 *Phys. Rev. B* **10** 139
- [7] Wheeler A A ,Boettinger W J ,McFadden G B 1993 *Phys. Rev. E* **47** 1893
- [8] Karma A ,Rappel W J 1996 *Phys. Rev. E* **53** R3017
- [9] Karma A ,Rappel W J 1998 *Phys. Rev. E* **57** 4323
- [10] Wheeler A A ,Murray B T ,Schaefer R J 1993 *Physica D* **66** 243
- [11] Lan C W ,Chang Y C ,Shih C J 2003 *Acta Mater.* **51** 1857
- [12] Badillo A ,Beckermann C 2006 *Acta Mater.* **54** 2015
- [13] Kim S G ,Kim W T ,Suzuki T ,Ode M 2004 *J. Cryst. Growth* **261** 135
- [14] Nestler B , Wheeler A A , Garcke H 2002 *Computer Physics Communications* **147** 230
- [15] Hoyt J J ,Asta M ,Karma A 2003 *Mater. Sci. Eng. R* **41** 121
- [16] Boettinger W J ,Coriell S R ,Greer A L ,Karma A ,Kurz A ,Rappaz M ,Trivedi R 2000 *Acta Mater.* **48** 43
- [17] Wang H Y ,Li R ,Tang T 2008 *J. Computat. Phys.* **227** 5984
- [18] Li R 2005 *Journal of Scientific Computing* **24** 321
- [19] Provatas N ,Goldenfeld N ,Dantzig J 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 3308
- [20] Zhao D W 2005 *Ph. D. Thesis* (Northwestern Polytechnical University)(in Chinese) [赵达文 2005 博士论文(西北工业大学)]
- [21] Hu J W ,Tang H M 1999 *Numerical Method of Partial Differential Equations* (Beijing Science Press) p310 (in Chinese) [胡健伟、汤怀民 1999 微分方程数值方法(北京 科学出版社)第 310 页]
- [22] Li R ,Liu W B <http://circus.math.pku.edu.cn/AFEPack>
- [23] Inc. VIS <http://www.opendx.org/>
- [24] Boettinger W J ,Warren J A ,Beckermann C ,Karma A 2002 *Annu. Rev. Mater. Res.* **32** 163
- [25] Wang Z P ,Xiao R Z ,Zhu C S ,Xu J L ,Wang Y L 2006 *Rare Metal Materials and Engineering* **35** 369 (in Chinese) [王智平、肖荣振、朱昌盛、徐建林、王延露 2006 稀有金属材料与工程 **35** 369]
- [26] Hassen P 1998 *Phase Transformations in Materials* (Weinheim ,New York ,Basel ,Cambridge :VCH) p583
- [27] Hu H Q 2000 *Principle of Metal Solidification* 2nd ed (Beijing : China Machine Press) p120 (in Chinese) [胡汉起 2000 金属凝固原理 第二版(北京 机械工业出版社)第 120 页]

Phase-field modeling of free dendritic growth with adaptive finite element method^{*}

Chen Yun Kang Xiu-Hong Li Dian-Zhong[†]

(*Shenyang National Laboratory for Materials Science ,Institute of Metal Research ,Chinese Academy of Sciences ,Shenyang 110016 ,China*)

(Received 27 February 2008 ; revised manuscript received 16 May 2008)

Abstract

A simple derivation of phase-field model for pure materials based on entropy functional is provided and then solved by adaptive finite element method (AFEM) to simulate the free dendritic growth from undercooled nickel melt. To investigate the evolutions of the dendrite and reproduce the real physical process ,the modeling is performed in a larger domain and thinner interface with the highly computationally efficient and accurate AFEM. The simulated results show that the secondary arms grow in an unsymmetrical mode and their development is controlled by the thermal diffusion and affected by noises which are arbitrarily introduced in the phase-field governing equation. As the latent heat released during the migration of solid-liquid interface is accumulated sufficiently ,it prompted initiation of other secondary arms at the same side of the primary arm. As the computation proceeds ,the secondary arms become coarsened apparently through four different modes.

Keywords : free dendritic growth , phase-field , adaptive finite element method

PACC : 6150 , 6470 , 8110

^{*} Project supported by the Funds of the Chinese Academy of Sciences for Key Topics in Innovation Engineering (Grant No. KGCXZ-YW-206).

[†] E-mail : dzli@imr.ac.cn