

文章编号: 1673-5196(2015)04-0001-05

基于自适应有限元法的纯物质三维枝晶生长模拟

朱昶胜^{1,2}, 李椿茂¹, 冯力², 肖荣振²

(1. 兰州理工大学 计算机与通信学院, 甘肃 兰州 730050; 2. 兰州理工大学 省部共建有色金属先进加工与再利用国家重点实验室, 甘肃 兰州 730050)

摘要: 基于高性能计算特性的自适应有限元方法, 较大尺度地求解三维相场模型, 定量模拟纯物质三维枝晶的凝固过程, 研究过冷度、各向异性系数等相场参数对三维枝晶的影响。结果表明: 过冷度和各向异性系数越大, 三维枝晶生长速度越大, 侧向分枝越发达, 二次枝晶间距越小, 并得到与结晶理论相一致的枝晶生长规律。此外, 在 CPU 耗费时间上自适应有限元方法比均匀网格方法降低一个数量级, 并且当系统尺寸越大时越能体现出自适应有限元方法的优越性, 为大尺度多场耦合相场模型的模拟提供便利。

关键词: 自适应有限元法; 过冷度; 侧向分枝; 相场模型

中图分类号: TG244; O242 **文献标识码:** A

Simulation of three-dimensional dendrite growth of pure material with adaptive finite element method

ZHU Chang-sheng^{1,2}, LI Chun-mao¹, FENG Li², XIAO Rong-zhen²

(1. College of Computer and Communication, Lanzhou Univ. of Tech., Lanzhou 730050, China; 2. State Key Laboratory of Advanced Processing and Recycling of Nonferrous Metals, Lanzhou Univ. of Tech., Lanzhou 730050, China)

Abstract: On the basis of adaptive finite element method with high-performance computing feature, the three-dimensional phase-field model with larger scale is solved, the solidification process of the dendrite growth of pure material is simulated quantitatively, and the influence of the phase-field parameters such as supercooling degree and anisotropy coefficient on the growth of three-dimensional dendrite is investigated. The results showed that the greater the supercooling degree and anisotropy coefficient were, the greater the rate of three-dimensional dendrite growth would be, the more the side-branching was developed, the smaller the arm spacing of secondary dendrite would be, and thus the dendrite growth pattern is obtained, which is consistent with the crystalline theory. In addition, the adaptive finite element method can be used to reduce CPU time consuming by one order of magnitude when compared with uniform grid approach, and the larger the system size was, the better the superiority of adaptive finite element method would be manifested, offering convenience for simulating the dendrite growth phase-field model coupled with multi-field in large-scale domain.

Key words: adaptive finite element method; supercooling degree; side-branching; phase-field model

自适应理论被引入有限元计算是从 20 世纪 70 年代开始的^[1], 其主导思想就是减少计算前处理的工作量, 运用网格的离散和动态调整, 实现以最小的网格进行数值模拟, 以提高计算效率, 为大型数值模拟提供可能。

相场方法以金兹堡-朗道理论 (Ginzburg-Landau) 为基础, 引入随时间和位置变化的序参数, 建立自由能函数, 避免在整个计算过程中跟踪固-液界面的复杂数学问题, 该方法被广泛应用到枝晶生长演化模型模拟中^[2-3]。基于均匀网格剖分的有限差分法, 由于理论研究较为成熟, 且程序结构简单, 被广泛应用于模拟枝晶生长。随着相场模型研究的不断深入, 三维模型逐渐被引起重视, 但在进行数值模拟过程中, 计算量大、计算周期长一直困扰着该领域的

收稿日期: 2014-11-10

基金项目: 国家自然科学基金(51161011, 11364024), 甘肃省科技支撑计划(1204GKCA065)

作者简介: 朱昶胜(1974-), 男, 甘肃秦安人, 教授, 博导。

深入研究. 即使为降低计算量而采用等温模拟, 计算量也非常巨大, 同时采用高性能的计算机又不能真正解决大尺度的数值模拟.

针对以上问题, 本文采用基于动态调整网格的自适应有限元法模拟三维相场模型, 通过网格的剖分和动态调整技术, 使剖分网格的密度随物理量的梯度大小自动调整, 实现以较少的网格数即能给出较高精度的解, 减少了网格数量, 缩短了 CPU 时间, 为大区域的数值模拟提供了可能.

1 相场模型

研究基于 Karma 和 Rappel 提出的纯物质凝固的三维相场模型^[4-5], $\varphi = 1$ 表示固相, $\varphi = -1$ 表示液相, 固-液界面处相场变量连续地从 -1 变到 1 , 将连续变化的扩散层定义为固-液界面, 相场和温度场控制方程为:

$$\begin{aligned} \tau(\mathbf{n}) \frac{\partial \varphi}{\partial t} &= [\varphi - \lambda u(1 - \varphi^2)](1 - \varphi^2) + \\ &\nabla \cdot [W^2(\mathbf{n}) \nabla \varphi] + \\ &\frac{\partial}{\partial x} \left[|\nabla \varphi|^2 W(\mathbf{n}) \frac{\partial W(\mathbf{n})}{\partial \varphi_x} \right] + \\ &\frac{\partial}{\partial y} \left[|\nabla \varphi|^2 W(\mathbf{n}) \frac{\partial W(\mathbf{n})}{\partial \varphi_y} \right] + \\ &\frac{\partial}{\partial z} \left[|\nabla \varphi|^2 W(\mathbf{n}) \frac{\partial W(\mathbf{n})}{\partial \varphi_z} \right] \end{aligned} \quad (1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\Delta u + \frac{1}{2} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \quad (2)$$

其中, $W(\mathbf{n})$ 为界面厚度, $\tau(\mathbf{n})$ 为弛豫时间, 是界面法向量 \mathbf{n} 的函数.

$$W(\mathbf{n}) = W_0 a(\mathbf{n}) \quad (3)$$

$$\tau(\mathbf{n}) = \tau_0 a(\mathbf{n})^2 \quad (4)$$

$$\begin{aligned} a(\mathbf{n}) &= (1 - 3\epsilon_4) \times \\ &\left[1 + \frac{4\epsilon_4}{1 - 3\epsilon_4} \frac{(\partial_x \varphi)^4 + (\partial_y \varphi)^4 + (\partial_z \varphi)^4}{|\nabla \varphi|^4} \right] \end{aligned} \quad (5)$$

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|} \quad (6)$$

其中, φ 为相场, 无量纲温度 $u = (T - T_M)/(H - c_p)$, 热扩散系数为 D , 耦合因子为 λ , 各向异性强度 ϵ_4 , 热力学温度为 T , 熔点为 T_M , 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法求解

2.1 自适应网格的生成和动态调整

自适应有限元法就是将边界问题转化为变分问题, 在求解区域中离散有限个单元, 然后在每个单元上做多项式的插值, 使相邻单元的公共边界上满足

某种连续性条件^[6]. 采用几何等级遗传树作为自适应有限元的数据结构, 通过网格的动态调整技术进行网格的加密操作, 其步骤如下^[7]:

1) 局部粗化. 每个单元网格记作 σ , 每个网格单元的指示子记作 E_σ , 通过自适应子和阈值的比较, 如果 $E_\sigma > 2^{N+a}\epsilon$, 那么该网格将会被粗化, 该网格所有子网格的指示子设为 $E_\sigma/2^{N+a}$, N 和 a 为控制常数, ϵ 为自适应容忍值.

2) 局部细化. 对于一个单元 σ , 如果所有网格都是当前网格单元, 并且 $\sum_{\tau \in \text{Child}(\sigma)} E_\tau < 2^{-a}\epsilon$, 就合并网格, 设定其指示子为 $E_\sigma = 2^a \sum_{i \in \text{Child}(\sigma)} E_i$, 这里 $\text{Child}(\sigma)$ 为 σ 的所有子单元的集合.

3) 细化过程中, 检查所有三角形面, 要求每个三角形边只允许有一条边加点, 或一个面的 3 条边都加点, 如图 1 所示.

4) 细化过程中, 检查所有四面体单元, 要求每个四面体单元的 6 条边只允许一条边或同一个三角面的 3 条边或 6 条边都加点, 如图 2 所示.

5) 在这个剖分结果中, 对于边界上的加密边, 要保证加密点落在边界上.

6) 计算细网格上的相场解.

7) 返回步骤 2.

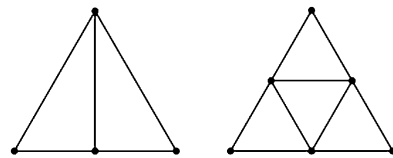


图 1 三角形面剖分的 2 种情况

Fig. 1 Two cases of triangular subdivision

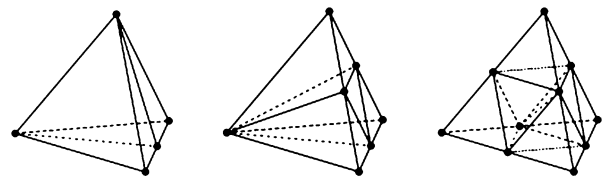


图 2 四面体剖分的 3 种情况

Fig. 2 Three cases of tetrahedral subdivisions

2.2 相场方程的离散和求解

根据自适应有限元方法, 引入试探函数 $\varphi(x, y, z), v(x, y, z)$, 在时间域进行相场方程离散, 根据格林公式写为弱解形式:

$$\begin{aligned} \int \tau(\mathbf{n}) \frac{\varphi^{n+1} - \varphi^n}{\Delta t} \varphi d\vec{x} = \\ \int \{L(\varphi^n)\varphi - (W^n(\mathbf{n}))^2 \nabla \varphi^{n+1} \cdot \nabla \varphi - \end{aligned}$$

$$H \nabla \varphi W^n(\mathbf{n}) \cdot \nabla \varphi \} d\vec{x} \quad (7)$$

$$\int \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} v d\vec{x} = \frac{1}{2} \int \frac{\varphi^{n+1} - \varphi^n}{\Delta t} v - D \int \nabla u^1 \cdot \nabla v d\vec{x} \quad (8)$$

$$L(\varphi) = \varphi - \lambda u(1 - \varphi^2)](1 - \varphi^2) \quad (9)$$

$$H = |\nabla \varphi|^2 \left(\frac{\partial W(\mathbf{n})}{\partial(\partial_x \varphi)}, \frac{\partial W(\mathbf{n})}{\partial(\partial_y \varphi)}, \frac{\partial W(\mathbf{n})}{\partial(\partial_z \varphi)} \right)^T \quad (10)$$

$$\vec{x} = (x, y, z) \quad (11)$$

2.3 平台搭建与主要操作

采用 GNU/Linux 操作系统,在内存为 20 G,处理器为 2.3 GH 的计算机上进行数值模拟,采用李若等开发的 AFEPack^[8]软件包为基础,运用 C++ 语言求解三维相场模型,并用专业的数据图形处理软件 Opendx 进行后处理操作.其主操作过程如下:

1) 生成并读取网格数据.

2) 建立参考单元.参考单元=几何信息+(四面体形状+计算体积的函数+数值积分信息)+坐标转换(映射参考单元和真实单元之间的点)+自由度+基函数.

3) 建立有限元空间.有限元空间=网格+参考单元.

4) 建立刚度矩阵.每个试函数得到一个方程,形成一个线性代数系统,系数矩阵就是代数矩阵.

5) 求解相场和温度场方程.

6) 网格自适应调整也就是引入不规则网格和指示子.

7) 多重网格运算.

2.4 初始半径选取

初始晶核半径为 R_0 ,初始条件为

$$\begin{cases} \varphi = 1, u = 0, x^3 + y^3 + z^3 \leq R_0 \\ \varphi = -1, u = -\Delta, x^3 + y^3 + z^3 > R_0 \end{cases} \quad (12)$$

式中: x, y, z 分别代表坐标轴 $\langle 100 \rangle, \langle 010 \rangle, \langle 001 \rangle$ 方向.为减少计算量,设置初始晶核于计算区域一角 ($x, y, z \geq 0$),取晶核的八分之一作为模拟对象,设枝晶轴对应于直角坐标系的 x 轴, y 轴, z 轴,初始界面采用球体形状,代表凝固开始时的晶核,为了减小计算量,模拟计算取八分之一正方体区域 ($x, y, z \geq 0$).

在计算中 φ 和 u 均采用 Zero-Neumann 边界条件:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial n} = 0 \quad (13)$$

2.5 计算参数确定

由薄界面渐进分析可以得到相场模型与尖锐界

面模型的参数关系^[9-11]:

$$d_0 = a_1 \frac{W}{\lambda} \quad (14)$$

$$\beta = a_1 \left[\frac{\tau}{W} - a_2 \frac{W}{D} \right] \quad (15)$$

其中, d_0 为毛细长度, $d_0 = \gamma_0 T_m c_p / H^2$, γ_0 为固-液界面能, 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.采用的相场模型中 $\alpha_1 = 0.8839$, $\alpha_2 = 0.6267$.按照式(14,15),令动力学系数 $\beta = 0$ 选择 λ 值.选择空间步长时, $\Delta x / W_0 = 0.8$.按照计算的稳定性选取时间步长 $\Delta t / \tau_0 = 0.1$,计算区域 $L_x = L_y = L_z = 600$.其中相关计算参数如表 1 所示.

表 1 相场数值模拟的计算参数

Tab. 1 Parameters of phase-field numerical simulation

参数	W	D	τ_0	Δt	ϵ_1	I
值	1	3.5	1	0.1	0.05	$2\sqrt{2}/3$
参数	Δ	J	F	K	R_0	a_2
值	0.45	16/15	$\sqrt{2} \log 2$	0.136 04	15	0.626 7

3 计算结果与讨论

3.1 相场及温度场的模拟结果

图 3 显示了表 1 参数下,计算得到的枝晶相场和温度场演化过程以及相对应的自适应网格.

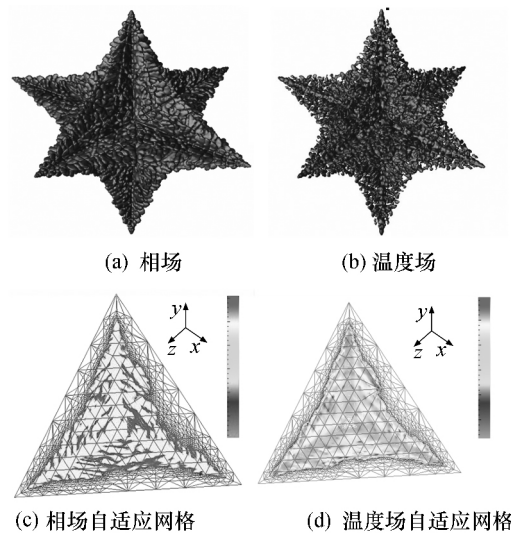


图 3 $t = 300\Delta t$ 时相场和温度场的枝晶形貌

Fig. 3 Dendrite morphology of phase field and temperature field at $t = 300\Delta t$

图 3a、b 分别为典型三维枝晶在生长时间 $t = 300\Delta t$ 时的形貌和温度场模拟结果,图 3c、d 分别是与图 3a、b 相对应的自适应网格,模拟计算网格数为 600 个 \times 600 个 \times 600 个,3 个枝晶尖端沿主 $\langle 100 \rangle$ 方向生长.可以看出,由于引入噪声,三维枝晶具有发达的二次晶臂,同时还可看到二次晶臂的竞争生长,二次枝晶臂的生长会使枝晶主干变细,同时

二次枝晶臂的根部也明显比枝晶臂干要窄. 另外, 在一次枝晶臂根部以及枝晶臂生长方向的垂直截面都有明显的颈缩现象, 还可观察到侧向分枝根部的断裂和部分二次枝晶的合并现象.

同时还可看出, 温度的分布情况与枝晶生长吻合, 在固相区域因凝固潜热的释放, 使温度比液相中更高, 在固液界面处的温度比中心更高, 而且在二次枝晶生长比较快的固液界面温度最高, 在枝晶尖端由于界面移动速率大, 释放的潜热多, 热量来不及扩散, 因此温度梯度最大, 而在枝晶根部由于界面移动速率小, 因此温度梯度最小^[12]. 另外还可看到扰动的引入促进枝晶二次晶臂的生长, 使同一时刻固相的最高温度相应提高. 在晶体的生长过程中温度最高点的位置是不断变化的, 通常是位于被二次枝晶臂相向生长所包围的区域, 这是由于二次枝晶臂生长速度快, 释放较多的潜热, 并且此处的温度梯度小不易扩散, 导致温度升高^[13].

3.2 参数对三维枝晶生长的影响

采用表 1 所示的参数对系统进行模拟, 图 4a 为 $t=460\Delta t, \Delta=0.25$ 时所获得的三维枝晶形貌和温度场, 可以看出, 当过冷度比较低时, 主枝相对较粗, 侧向分枝不是很发达, 这主要是由于过冷度相对较

低时热扩散层也较厚, 而热扩散层对潜热的释放起到阻碍作用, 热扩散层越厚, 枝晶生长时通过热扩散层向熔体中释放潜热越困难, 侧向分枝的生长也被抑制^[14]. 图 4b 为 $t=301\Delta t, \Delta=0.45$ 时所获得的三维枝晶形貌和温度场, 可以看出, 随着过冷度的增高, 枝晶具有较发达的侧向分枝, 主要原因是当过冷度较高时, 热扩散层相对变薄, 这有利于潜热的释放, 促进了侧向分枝的生长, 因此出现了高度发达的枝晶形貌.

各向异性系数也对枝晶形貌有很大影响. 设定无量纲过冷度 $\Delta=0.25$, 其他参数如表 1 所示, 动力学各向异性系数 ϵ_4 分别取值 0.05, 0.15, 0.25, 0.35 对系统进行模拟. 结果如图 5 所示. 由图 5 可以看出, 当 ϵ_4 较小时, 三维枝晶的主枝及侧分枝都比较粗, 二次枝晶间距较大, 随着 ϵ_4 的增大, 枝晶的主轴和侧向分枝都变细, 二次枝晶间距也随之减小. 尤其当 $\epsilon_4=0.35$ 时更为明显, 二次枝晶臂的生长受到强烈的抑制, 并且出现了枝晶的熔断脱落现象. 这说明 ϵ_4 对枝晶的侧向分枝有明显的抑制作用, 随着 ϵ_4 的增大, 扰动更容易被放大, 界面将变得不稳定, 从而引起分枝的不断分裂.

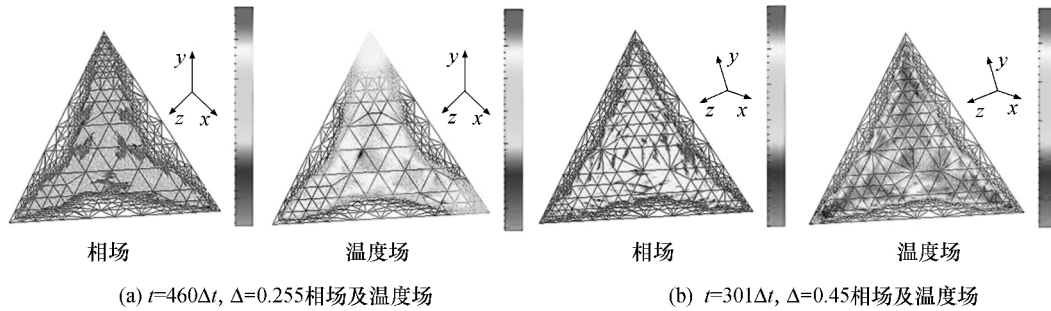


图 4 过冷度对侧向分枝的影响

Fig. 4 Effect of supercooling degree on side-branching

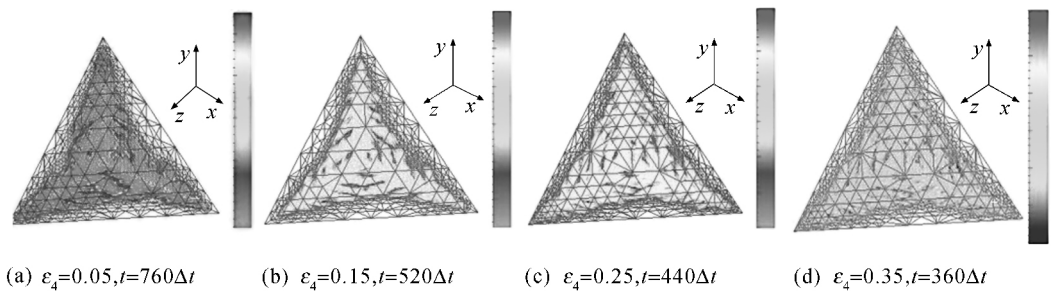


图 5 不同各向异性强度对应的枝晶形貌

Fig. 5 Dendrite morphology with different intensity of anisotropy

3.3 计算效率比较

为了实际铸件的微观组织模拟, 需要进行较大尺度的模拟以提高模拟能力. 采用自适应有限

元方法求解三维相场模型, 以解决其巨大的计算量导致的计算效率低, 内存需求容量大导致的计算规模小、求解精度低等问题. 图 6 和图 7 分别比较了采

用自适应有限元法和有限差分法在相同条件下进行数值模拟过程中系统尺寸与CPU时间及加速比的关系。从图中可以看出,采用自适应有限元法提高了计算效率,并且随着系统尺度的增加,加速比随之增大,在系统尺度为 $240 \times 240 \times 240$ 时加速比提高了10.11倍。表明采用自适应有限元法能够节省CPU时间,提高计算效率,为进行大尺度的数值模拟提供了可能。

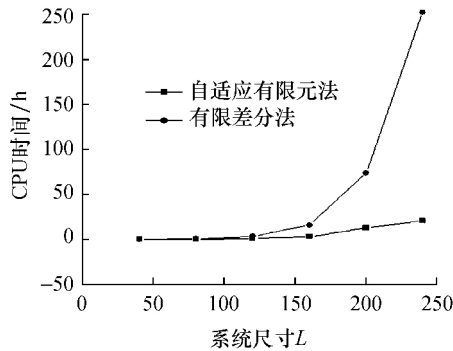


图6 不同方法系统尺寸与CPU时间关系

Fig. 6 Relationship of system size to CPU time

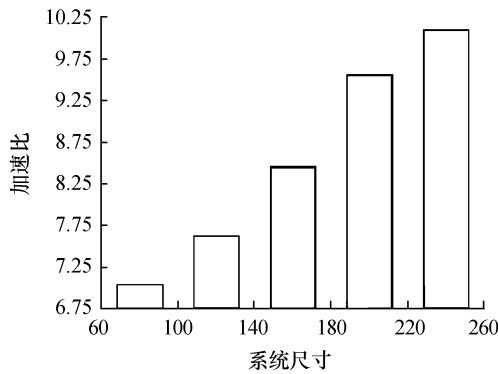


图7 加速比与系统尺寸的关系

Fig. 7 Relationship of system speed-up ratio to system size

4 结论

1) 采用自适应有限元法求解了三维相场模型,解决了有限差分法在求解三维相场时出现计算效率低,内存需求容量大进而导致的计算规模小、求解精度低等问题,实现了较大尺度模拟过冷度、各向异性系数等相场参数对三维枝晶生长的影响,结果发现,过冷度和各向异性系数越大,三维枝晶生长速度越大,侧向分枝越发达,二次枝晶间距越小。

2) 采用自适应有限元法在保证计算精度的同

时提高了计算效率,并且随着系统尺度的增加,加速比随之增大,在系统尺度为 $240 \times 240 \times 240$ 时加速比提高了10.11倍。

3) 鉴于自适应有限元法在进行三维相场模型模拟中优势,进行大尺度、溶质场、引力场等多场耦合的三维模型研究是今后研究的重点。

致谢:本文得到兰州理工大学红柳杰出人才基金(J201304)的资助,在此表示感谢。

参考文献:

- [1] BABUSKA I, RHEINBOLDT W C. A-posteriori error estimates for the finite element method [J]. *Int J Num Meth Eng*, 1978, 12(10): 1597-1615.
- [2] 朱昌盛, 王军伟, 王智平, 等. 受迫流动下的枝晶生长相场法模拟 [J]. *物理学报*, 2010, 59(10): 7417-7423.
- [3] 王智平, 张殿喜, 石可伟, 等. 多元合金等温凝固相场法模拟 [J]. *兰州理工大学学报*, 2008, 34(6): 1-4.
- [4] LI R. On multi-mesh H-adaptive method [J]. *Journal of Computing*, 2005, 24(3): 321-341.
- [5] WARREN J A, BOETTINGER W J. Prediction of dendritic growth and microsegregation patterns in a binary alloy using the phase-field method [J]. *Acta Metal Mater*, 1995, 43: 689-703.
- [6] WHEELER A A, BOETTINGER W J, MEFADDEN G B. Phase-field model for isothermal phase transitions in binary alloys [J]. *Phys Rev*, 1992, 45(10): 7424-7439.
- [7] 胡建伟, 汤怀民. 微分方程数值方法 [M]. 北京: 科学出版社, 1999.
- [8] 朱昶胜, 雷鹏, 冯力, 等. 纯物质过冷体中自由枝晶生长相场模型的自适应有限元法模拟 [J]. *兰州理工大学学报*, 2014, 40(4): 19-23.
- [9] KARMA A, RAPPEL W J. Quantitative phase-field modeling of dendritic growth in two and three dimensions [J]. *Phys Rev*, 1998, 57(4): 4323-4349.
- [10] KARMA A, RAPPEL W J. Phase-field method for computationally efficient modeling of solidification with arbitrary interface kinetics [J]. *Phys Rev Lett*, 1996, 53(4): 3017-3020.
- [11] KESSLER D A, LEVINE H. Velocity selection in dendritic growth [J]. *Phy Rev*, 1986, 33(1): 7867-7870.
- [12] 龙文元, 蔡启舟, 陈立亮, 等. 二元合金等温凝固过程的相场模型 [J]. *物理学报*, 2005, 54(1): 256-257.
- [13] 李梅娥, 杨根仓, 周尧和. 二元合金高速定向凝固过程的相场法数值模拟 [J]. *物理学报*, 2005, 54(1): 454-458.
- [14] 朱昌盛, 石科伟, 王智平, 等. 相场法模拟潜热的释放对多元合金凝固过程的影响 [J]. *兰州理工大学学报*, 2008, 34(2): 6-10.