

С.ГЛАДКОВ, ICAMS Bochum/TU Dortmund, Германия;
Р.СПАТЧЕК, Dr. rer. nat, ICAMS Bochum, Германия;
И.ШТАЙНБАХ, Dr. rer. nat, ICAMS Bochum, Германия;
Б.СВЕНДСЕН, Dr. rer. nat., TU Dortmund Германия

КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАТВЕРДЕВАНИЯ БИНАРНОГО СПЛАВА НА МЕЗО УРОВНЕ

У статті наведено чисельну процедуру для рішення задачі твердіння бінарного сплаву засновану на прямому методі Ейлера в часі та монолітичному лінійному методі скінченних елементів в просторі. Також наведені приклади використання даного методу для моделювання росту дендритів в переохолодженому розплаві.

In the article numerical procedure for solution of the equiaxial solidification problem which is based on the forward Euler method in time and monolithic linear finite element formulation in space is described. Numerical examples consist of simulation of the dendritic growth of the initially disk-like solid inclusion in the undercooled melt.

1 Введение. Литье и последующее затвердевание материала играет важную роль в формировании микроструктуры, которая в свою очередь оказывает влияние на термомеханические свойства финального изделия, готового для дальнейшей технологической обработки. Поэтому корректное моделирование затвердевания и роста дендритов основанное на эффективных численных методах требует разработки, анализа и проверки. На данный момент разработано большое количество численных методов для задач затвердевания, в основном основывающихся на различных вариациях метода конечных разностей с одной стороны, и техниках метода поверхностей уровня и метода фазового поля с другой. Различные подходы к моделированию задач затвердевания представлены в нескольких замечательных обзорах [1-6]. В данной работе мы представляем наши разработки по применению метода конечных элементов для задач затвердевания. Эта работа является в некотором роде продолжением работ начатых в статьях [7-9].

Физическая модель, рассматриваемая в этой работе, была разработана Аланом Кармой [10] с использованием метода фазового поля, где интерфейс между жидкой и твердой фазами «размазан» в пространстве. Таким образом интерфейс не представляет собой скачкообразную (и соответственно не дифференцируемую) функцию, а плавно меняется в пространстве, но по очень узкой ширине и с высокими градиентами. Детали этой модели представлены в следующей части статьи.

2 Формулировка модели. Как было сказано во введении, модель А. Кармы [10] для двумерного роста дендритов использована в этой работе. Это реалистичная модель низколегированного бинарного сплава с неравными ли-

ниями ликвидуса и солидуса. Модель также включает в себя кристаллическую анизотропию и член «анти-захвата» примеси корректирующий поток массы. Эта модель основана на методе фазового поля и использует двухямный потенциал.

Модель состоит из двух уравнений в частных производных:

$$\begin{aligned}\tau(\theta)\dot{\phi} &= -D_\phi f(\phi) - \frac{\lambda}{1-k} D_\phi g(\phi) [\exp u(\phi, c) - 1] + \nabla \cdot [W(\theta)^2 \nabla \phi] \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x} \left[W(\theta) D_\theta W(\theta) \frac{\partial \phi}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[W(\theta) D_\theta W(\theta) \frac{\partial \phi}{\partial x} \right], \\ \dot{c} &= -\nabla \cdot \mathbf{j},\end{aligned}\quad (1)$$

где $\phi \in [-1, 1]$ – это фазовое поле ($\phi = 1$ соответствует твердой, а $\phi = -1$ жидкой фазе), $c \in [0, 1]$ – это концентрация определенная как молевая фракция В в бинарном сплаве А и В,

$$\mathbf{j}(\phi, c) = -Dc q(\phi) \nabla u - aW c_l^0 (1-k) \exp u(\phi, c) \dot{\phi} \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} - \quad (2)$$

это диффузионный поток с дополнительным членом «анти-захвата»,

$$\theta = \arctan \frac{\partial_y \phi}{\partial_x \phi} - \quad (3)$$

это угол между направлением нормали фазового поля и осью x ,

$$a_s(\theta) = 1 + \epsilon_4 \cos(4\theta) - \quad (4)$$

это функция, описывающая кристаллическую анизотропию (предпочтительное направление роста – вдоль координатных осей),

$$\tau(\theta) = \tau a_s(\theta)^2, \quad (5)$$

$$D_\phi f(\phi) = \phi^3 - \phi, \quad (6)$$

$f(\phi)$ – это двухямный потенциал с минимумами при $\phi = \pm 1$,

$$D_\phi g(\phi) = (1 - \phi^2)^2, \quad (7)$$

$$u(\phi, c) = \ln \frac{2c/c_l^0}{1+k - (1-k)\phi} - \quad (8)$$

это безразмерная величина отклонения химического потенциала от равновесия,

$$W(\theta) = W a_s(\theta), \quad (9)$$

$$D_\theta W(\theta) = -4W \epsilon_4 \sin(4\theta), \quad (10)$$

$$q(\phi) = \frac{1 - \phi}{1+k - (1-k)\phi}, \quad (11)$$

$$\nabla u(\phi, c) = D_\phi u \nabla \phi + D_c u \nabla c, \quad (12)$$

$$D_\phi u(\phi, c) = \frac{1-k}{1+k - (1-k)\phi}, \quad (13)$$

$$D_c u(\phi, c) = \frac{1}{c}. \quad (14)$$

Постановка задачи должна быть дополнена начальными и краевыми условиями. Начальные условия будут указаны в следующей части статьи, вместе с численными примерами. Краевые же условия приняты однородными

условиями Неймана¹, то есть

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \cdot \nabla \phi &= 0, \\ \mathbf{n} \cdot \mathbf{j} &= 0. \end{aligned} \quad (15)$$

Слабая формулировка уравнений (1) с учетом краевых условий (15) ведет к следующим вариационным уравнениям:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \tau(\theta) \phi^* \dot{\phi} dx &= \int_{\Omega} \left(-\phi^* D_{\phi} f(\phi) - W(\theta)^2 \nabla \phi^* \cdot \nabla \phi \right. \\ &\quad - \frac{\lambda}{1-k} \phi^* D_{\phi} g(\phi) [\exp u(\phi, c) - 1] \\ &\quad \left. + W(\theta) D_{\theta} W(\theta) \left[\frac{\partial \phi^*}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{\partial \phi^*}{\partial y} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] \right) dx \\ &\quad + \int_{\partial \Omega} \phi^* W(\theta) D_{\theta} W(\theta) \left[\frac{\partial \phi}{\partial x} n_2 - \frac{\partial \phi}{\partial y} n_1 \right] da, \quad (16) \\ \int_{\Omega} c^* \dot{c} dx &= \int_{\Omega} \left(-Dc q(\phi) \nabla c^* \cdot (D_{\phi} u \nabla \phi + D_c u \nabla c) \right. \\ &\quad \left. - a W c_l^0 (1-k) \exp u(\phi, c) \dot{\phi} \nabla c^* \cdot \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right) dx, \end{aligned}$$

где $\{\phi, c\}$ – это неизвестные функции, $\{\phi^*, c^*\}$ – это тестовые функции и n_1, n_2 – это компоненты внешней нормали к границе области.

3 Численные примеры. Решение связанной вариационной задачи (16) численно производится с применением прямого метода Эйлера во времени и билинейных конечных элементов в пространстве. Эти результаты также сравниваются с результатами полученными методом конечных разностей на более густой сетке.

Производная по времени от фазового поля $\dot{\phi}$ входящая в уравнения (1₂, 16₂) (член «анти-захвата») и является той величиной которая делает проблему связанной, что в свою очередь ведет к тому что глобальная матрица «масс» системы будет несимметричной. Для решения системы линейных алгебраических уравнений с несимметричной матрицей специальные решатели должны быть использованы. В данной работе использован итерационный BiCGstab (bi-conjugate gradient stabilized, стабилизированный метод бисопряженных градиентов). Следует отметить, что несимметричные решатели типа BiCGstab работают намного медленнее симметричных итерационных решателей типа CG (conjugate gradient, метод сопряженных градиентов). По этой причине стоит рассмотреть в будущем применение методов расщепления для данной проблемы, которые приведут к последовательному решению двух симметричных линейных задач.

¹ Также следовало бы рассмотреть периодические краевые условия для этой задачи, но на данной стадии это не нужно так как рассматриваемые поля фактически «не дотрагиваются» до границы вычислительной области.

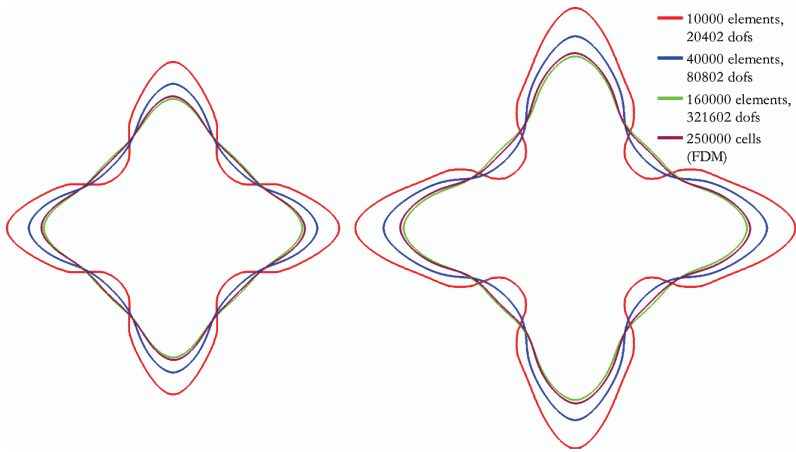


Рисунок 1 – Положение интерфейса в пространстве для $t = 1600$ (слева) и $t_{final} = 2400$ (справа)

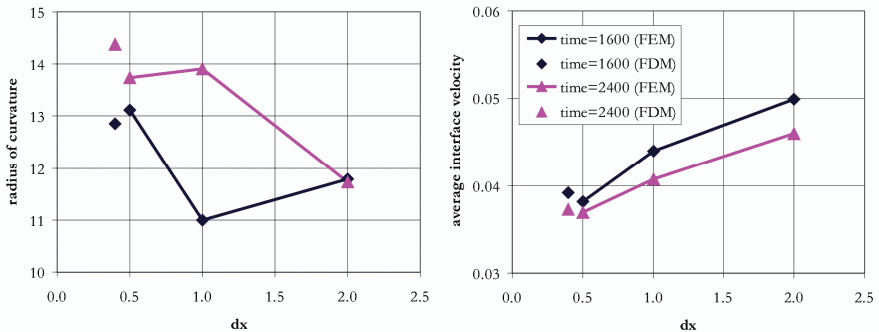


Рисунок 2 – Радиус кривизны (слева) и средняя скорость (справа) вершины дендрита для различных дискретизаций

Следующие численные параметры были приняты для вычислений согласно [10] (данная модель является безразмерной, поэтому все параметры приведены в безразмерном виде). Расчетная область $\Omega = [0, 200]^2$, постоянный шаг по времени $\Delta t = 0.008$, полное время $t_{final} = 2400$. Количество конечных элементов $N_{elements} = 100^2, 200^2, 400^2$ (декартова сетка), количество конечно-разностных ячеек $N_{cells} = 500^2$ и соответственно длина стороны элемента $dx = 2.0, 1.0, 0.5$, длина стороны ячейки $dx = 0.4$. Коэффициент распределения равный отношению концентраций на твердой и жидкой стороне интерфейса $k = 0.15$, $a = \frac{1}{2\sqrt{2}}$, толщина интерфейса $W = 1$, $\tau = 1$, параметр анизотропии $\epsilon_4 = 0.02$, коэффициент диффузии $D = 1$, $a_2 = 0.6267$, $c_l^0 = 0.5$, нормированное перенасыщение $\Xi = \frac{c_l^0 - c_\infty}{c_l^0(1-k)} = 0.55$ и $a_1 = 0.8839$.

Следующие параметры были вычислены: начальная концентрация $c_\infty = c_l^0(1 - \Xi(1 - k)) = 0.26625$, $\lambda = \frac{D\tau}{a_2W^2} = 1.595659805$, микроскопическая капиллярная длина $d_0 = \frac{a_1W}{\lambda} = 0.5539401301$ и радиус начального зерна $r_{seed} = 22d_0 = 12.18668286$.

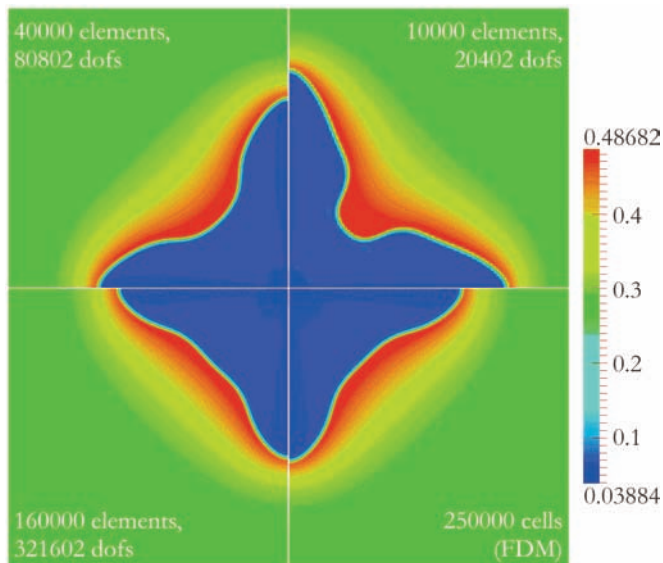


Рисунок 3 – Распределение концентрации в пространстве для различных сеток на последнем шаге по времени

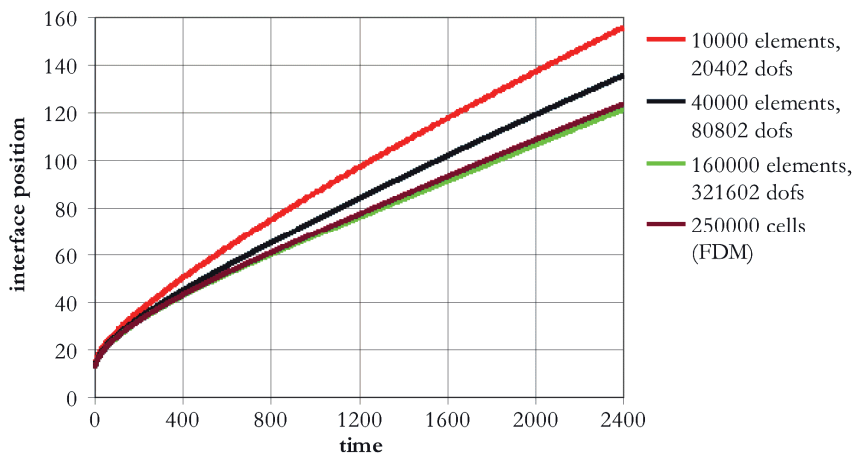


Рисунок 4 – Эволюция во времени вершины дендрита для различных сеток

Положение интерфейса ($\phi = 0$) для двух моментов времени и различных сеток показаны на рис. 1. Качественно из рисунка видно что решение посчитанное на самой густой КЭ-сетке очень близко к решению на еще более густой КР-сетке. Кроме того, беря во внимание графики для скорости вершины дендрита и радиуса его кривизны (рис. 2) можно заключить что КЭ-результат даже ближе к точному решению. Однако это требует более строгой проверки.

4 Выводы. В работе представлено численное решение задачи затвердевания бинарного сплава основанное на модели А. Кармы и методе конечных элементов. Численные примеры иллюстрируют правильность и сходимостъ метода, а также некоторые преимущества по сравнению с методом конечных разностей.

Замечание: эта статья была переведена с английского на русский язык и может ввиду этого содержать неточности.

Список литературы: 1. Boettinger W. J., Warren J. A., Beckermann C., Karma A. Phase-field simulation of solidification // Annual Review of Materials Research. – 2002. – Vol. 32. 2. Rafii-Tabar H., Chirazi A. Multi-scale computational modelling of solidification phenomena // Physics Reports. – 2002. – Vol. 365. 3. Hoyt J. J., Mark A., Karma A. Atomistic and continuum modelling of dendritic solidification // Materials Science and Engineering: R: Reports. – 2003. – Vol. 41. 4. Granasy L., Pusztai T., Warren J. A. Modelling polycrystalline solidification using phase field theory // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2004. – Vol. 16. 5. Hecht U., Granasy L. et al. Multiphase solidification in multi-component alloys // Materials Science and Engineering: R: Reports. – 2004. – Vol. 46. 6. Asta M., Beckermann C. et al. Solidification microstructures and solid-state parallels: Recent developments, future directions // Acta Materialia. – 2009. – Vol. 57. 7. Gladkov S., Stiemer M., Svendsen B. Phase-field-based modelling and simulation of solidification behavior of technological alloys // Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics. – 2008. – Vol. 8. 8. Gladkov S., Stiemer M., Grosse-Woehrmann A., Svendsen B. Numerical modelling of phase-separation in binary media based on the Cahn-Hilliard equation // Вестник НТУ «ХПИ». – 2009. – Vol. 30. 9. Stiemer M., Grosse-Woehrmann A., et al. Efficient and reliable finite element techniques for phase field models // International Journal of Materials Research. – 2010. – Vol. 101. 10. Karma A. Phase-Field Formulation for Quantitative Modeling of Alloy Solidification // Physical Review Letters. – 2001. – Vol. 87.

Поступила в редколлегию 10.11.2010