各向异性相态场模型的 Gibbs-Thompson关系*

刘深泉
(北京航空航天大学应用数理系, 北京 100083)

陆启韶
(北京航空航天大学应用数理系, 北京 100083; 中国科学院理论物理研究所, 北京 100080)

摘 要 本文利用奇异摄动的内、外解匹配方法, 分析了各向异性时在相态场模型的边界层上表面张力、法向速度、平均曲率和各向异性函数的影响, 得到了各向异性时的 Gibbs-Thompson 关系, 以及边界层所满足的方程.

关键词 各向异性, 相态场, Gibbs-Thompson 关系, 奇异摄动, 内、外解匹配

1 引言

纯晶体在熔点附近的液、固态变化模型的经典描述为不考虑表面张力的 Stefan 模型, 这个模型的缺点是, 在某些条件下, 该边界问题的解不稳定. 最近, 在考虑表面张力和稳定因素的情况下, 人们提出了相态场 (phase field) 模型. 相态场模型首先考虑了在温度影响下的内部热扩散, 得到 [1]:

$$u_t = D\nabla^2 u + l\psi_t, \tag{1.1}$$

其中 u 表示晶体的温度, $u > 0$ 表示液态, $u < 0$ 表示固态, 在边界层上 $u = 0$, D 为扩散系数, l 是潜热项, ψ 是引入的参数场, $\psi = 1$ 表示液态, $\psi = -1$ 表示固态. 在温度为 u 时, 参数场的无量纲自由能量泛函为 [1]:

$$F(\psi, u) = \int \left[\frac{1}{2}\bar{\varepsilon}^2|\nabla\psi|^2 + \hat{\bar{f}}(\psi, u)\right] \mathrm{d}x. \tag{1.2}$$

然后用 Ginzburg-Landau 方法, 参数场的变化可用下式表示:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} \propto \frac{\delta F(\psi, u)}{\delta\psi}, \tag{1.3}$$

从而由 (1.2) 和 (1.3) 得到参数场的方程为:

$$\tau\frac{\partial\psi}{\partial t} = \bar{\varepsilon}^2\nabla^2\psi + \bar{f}(\psi, u), \tag{1.4}$$

本文 1997 年 10 月 13 日收到.
* 国家自然科学基金和航空科学基金资助项目.

方程 (1.1),(1.4) 合称为相态场方程，当加上普通的初始条件和 Neumann 边界条件时，可以证明它有解 [1]，由于能量最低，所以它描述的状态是稳定的.

对此方程，当 $\bar{\varepsilon}$ 与空间方向无关时称为各向同性，否则称为各向异性．在各向同性时，许多文章讨论了相态场方程解的性质和结构，特别是建立在边界上的 Gibbs-Thompson 关系．最近，文献 [2] 和 [3] 在未考虑物理背景的情况下，考虑了各向异性的情形，他们假设小参数 $\bar{\varepsilon}$ 与空间方向有关，特别是与边界有关时，计算出了边界层的树形结构和雪花形状．这一结果引起了广泛的兴趣．首先，这些结构是从相态场方程计算出的，表明相态场模型可以很好地用来描述晶体的固、液态变化，从而增加了人们对相态场模型的研究信心．其次，各向异性对边界的影响在计算中起着关键的作用，但其物理背景是什么，如何在边界层上起作用等等．这些刚刚提出的问题都与晶体结晶的实际过程紧密相关，如何解决这些问题受到普遍关注．一旦这些问题得到解决，我们不仅可进一步完善相态场方程的分析，而且可更好地理解晶体结晶的内在变化机理.

本文主要讨论各向异性时，在边界层上的曲面张力、法向速度、平均曲率和各向异性对边界层的影响，得到了各向异性相态场的 Gibbs-Thompson 关系．利用此关系我们还得到边界层所满足的方程.

2 理论分析

对方程 (1.2)，我们假设小参数 $\bar{\varepsilon}$ 与空间有关，即 $\bar{\varepsilon}=\bar{\varepsilon}(x,y,t)$ 不失一般性，可设 $\bar{\varepsilon}=\varepsilon\eta(x,y,t)$，其中 ε 是小参数， $\eta(x,y,t)$ 在远离边界层时很小，在边界层上 $\eta(x,y,t)$ 的大小直接影响边界层的变化．为研究对边界的影响，我们设 $\eta=\eta(\theta)$，θ 表示边界在 (x,y) 点的法线方向和水平 x 轴的夹角.

我们仍用 Ginzburg-Landau 方法，则有：

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}\propto\frac{\delta F(\psi,u)}{\delta\psi}. \tag{2.1}$$

从一般的变分计算可知：

$$k\frac{\partial\psi}{\partial t}=\varepsilon^2\nabla(\eta^2\nabla\psi)-\varepsilon^2\frac{\partial}{\partial x}\Big(\eta\eta'\frac{\partial\psi}{\partial y}\Big)+\varepsilon^2\frac{\partial}{\partial y}\Big(\eta\eta'\frac{\partial\psi}{\partial x}\Big)+\bar{f}(\psi,u). \tag{2.2}$$

我们设 $k=\alpha\varepsilon^2\eta^2$，则由 (1.1) 和 (2.2) 得到如下小参数化的相态场方程：

$$\begin{cases}\dfrac{\partial u}{\partial t}=D\nabla^2u+l\dfrac{\partial\psi}{\partial t},\\ \alpha\varepsilon^2\eta^2\dfrac{\partial\psi}{\partial t}=\varepsilon^2\nabla(\eta^2\nabla\psi)-\varepsilon^2\dfrac{\partial}{\partial x}\Big(\eta\eta'\dfrac{\partial\psi}{\partial y}\Big)+\varepsilon^2\dfrac{\partial}{\partial y}\Big(\eta\eta'\dfrac{\partial\psi}{\partial x}\Big)+\bar{f}(\psi,u).\end{cases} \tag{2.3}$$

对此相态场方程，我们用内、外解匹配的方法，由 (2.3) 的 $O(\varepsilon)$ 近似得到各向异性时边界层的 Gibbs-Thompson 关系．一般地，我们设 $\bar{f}(\psi)=f(\psi)+u$，且函数 $f(\psi)$ 为双稳势函数．下面我们分别讨论内、外解.

先构造外解．设方程 (2.3) 的外解为：

$$\begin{cases}\psi=\psi_0+\varepsilon\psi_1+\varepsilon^2\psi_2+\cdots,\\ u=u_0+\varepsilon u_1+\varepsilon^2u_2+\cdots,\end{cases} \tag{2.4}$$

将 (2.4) 代入 (2.3)，得到：

对 $O(1)$ 阶有

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u_0}{\partial t} = D\nabla^2 u_0 + l\dfrac{\partial \psi_0}{\partial t}, \\ f(\psi_0) + u_0 = 0. \end{cases} \tag{2.5}$$

对 $O(\varepsilon)$ 阶有

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u_1}{\partial t} = D\nabla^2 u_1 + l\dfrac{\partial \psi_1}{\partial t}, \\ f'(\psi_0)\psi_1 + u_1 = 0. \end{cases} \tag{2.6}$$

对 $O(\varepsilon^2)$ 阶有

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u_2}{\partial t} = D\nabla^2 u_2 + l\dfrac{\partial \psi_2}{\partial t}, \\ \alpha\eta^2\dfrac{\partial \psi_0}{\partial t} = \nabla(\eta^2\nabla\psi_0) - \dfrac{\partial}{\partial x}\Big(\eta\eta'\dfrac{\partial \psi_0}{\partial y}\Big) + \dfrac{\partial}{\partial y}\Big(\eta\eta'\dfrac{\partial \psi_0}{\partial x}\Big) + \dfrac{1}{2}f''(\psi_0)[\psi_2]^2 + u_2. \end{cases} \tag{2.7}$$

接着来构造内解．内解存在于边界层内，假设边界层的厚度为小参数 ε. 当 ε 很小时，边界层很薄，我们必须用扩大的标度来观察．为此我们引进新的坐标．设 $r(x,y,t,\varepsilon)$ 是 (x,y) 点距边界 Γ 的距离，在 Γ 上的点 (x,y) 有 $r(x,y,t,\varepsilon)=0$ 而且 $|\nabla r|=1$ (单位化), $\Delta r = K$ (K 平均曲率). 我们定义 $s(x,y,t,\varepsilon)$ 为 Γ 上某一点开始的弧长，则 (r,s) 是 Γ 邻域内的一个局部移动坐标系，在新的坐标系下：

$$\begin{cases} \nabla r\cdot\nabla s = 0, \\ \nabla^2 u = u_{rr} + u_{ss}|\nabla s|^2 + u_r\Delta r + u_s\Delta s, \\ \dfrac{\partial u}{\partial t}\Big|_{(x,y)} = \dfrac{\partial u}{\partial t}\Big|_{(r,s)} + \dfrac{\partial u}{\partial r}r_t + \dfrac{\partial u}{\partial s}s_t. \end{cases} \tag{2.8}$$

对此边界层的内解，我们设在 Γ 的切线方向上变化很小，在法线方向用扩大的标度 $z=r/\varepsilon$, 在新的标度下，方程 (2.3) 的第一式变为：

$$u_t + \frac{1}{\varepsilon}r_t u_z + s_t u_s = D\Big(\frac{1}{\varepsilon^2}u_{zz} + u_{ss}|\nabla s|^2 + \frac{1}{\varepsilon}u_z\Delta r + u_s\Delta s\Big) + l\Big(\psi_t + \frac{1}{\varepsilon}r_t\psi_z + s_t\psi_s\Big), \tag{2.9}$$

方程 (2.3) 的第二式为：

$$\begin{aligned} &\alpha\eta^2\varepsilon^2\Big(\psi_t + \frac{1}{\varepsilon}r_t\psi_z + s_t\psi_s\Big) \\ =&\varepsilon^2\Big[\frac{1}{\varepsilon^2}\frac{\partial(\eta^2)}{\partial z}\psi_z + \frac{\partial(\eta^2)}{\partial s}|\nabla s|^2\psi_s + \eta^2\Big(\frac{1}{\varepsilon}\psi_{zz} + \psi_{ss}|\nabla s|^2 + \frac{1}{\varepsilon}\psi_z\Delta r + \psi_s\Delta s\Big) \\ &+ \frac{1}{\varepsilon}\Big(\psi_z\frac{\partial(\eta\eta')}{\partial s} - \psi_s\frac{\partial(\eta\eta')}{\partial z}\Big)(r_x s_y - r_y s_x)\Big] + f(\psi) + u. \end{aligned} \tag{2.10}$$

我们假设：

$$\begin{cases} \psi = \Psi_0 + \varepsilon\Psi_1 + \varepsilon^2\Psi_2 + \cdots, \\ u = U_0 + \varepsilon U_1 + \varepsilon^2 U_2 + \cdots, \end{cases} \tag{2.11}$$

则内解的各阶近似为：

对 $O(1)$ 阶有：

$$\begin{cases} U_{0zz} = 0, \\ \eta^2\Psi_{0zz} + \dfrac{\partial(\eta^2)}{\partial z}\Psi_{0z} + f(\Psi_0) + U_0 = 0. \end{cases} \tag{2.12}$$

对 $O(\varepsilon)$ 阶有：

$$\begin{cases} r_tU_{0z}=U_{1zz}+\Delta rU_{0z}+lr_t\Psi_{0z}, \\ \alpha\eta^2r_t\Psi_{0z}=\dfrac{\partial(\eta^2)}{\partial z}\Psi_{1z}+\eta^2\Psi_{1zz}+\eta^2\Delta r\Psi_{0z} \\ \qquad +\Big(\dfrac{\partial(\eta\eta')}{\partial s}\Psi_{0z}-\dfrac{\partial(\eta\eta')}{\partial z}\Psi_{0s}\Big)(r_xs_y-r_ys_x)+f'(\Psi_0)\Psi_1+U_1=0. \end{cases} \tag{2.13}$$

对 $O(\varepsilon^2)$ 阶有：

$$\begin{cases} U_{0t}+r_tU_{1z}+s_tU_{0s}=D(U_{2zz}+U_{0ss}|\nabla s|^2+\Delta rU_{1z}+U_{0s})+l(\Psi_{0t}+r_t\Psi_{1z}+s_t\Psi_{0s}), \\ \alpha\eta^2(\Psi_{0t}+r_t\Psi_{1z}+s_t\Psi_{0s}) \\ =\dfrac{\partial(\eta^2)}{\partial z}\Psi_{2z}+\Psi_{0s}\dfrac{\partial(\eta^2)}{\partial s}|\nabla s|^2+\eta^2(\Psi_{2zz}+\Psi_{0ss}|\nabla s|^2+\Delta r\Psi_{1z}+\Psi_{0s}\Delta s) \\ \quad +\Big(\dfrac{\partial(\eta\eta')}{\partial s}\Psi_{1z}-\dfrac{\partial(\eta\eta')}{\partial z}\Psi_{1s}\Big)(r_xs_y-r_ys_x)+\frac{1}{2}f''(\Psi_0)[\Psi_2]^2+U_2. \end{cases} \tag{2.14}$$

下面我们来匹配各阶近似的内外解：

$O(1)$ 阶近似

显然，对外解我们可从 (2.5) 的第二式分别解出 ψ_0 的最大解和最小解 $\psi_0=\psi_{0\pm}(u_0)$，并代入 (2.5) 的第一式得：

$$\frac{\partial u_0}{\partial t}=D\nabla^2u_0+l\frac{\partial\psi_{0\pm}}{\partial t}, \tag{2.15}$$

解此方程可得 $u_{0\pm}$. 注意到上式中外解 $\psi_0=\psi_{0\pm}(u_0)$ 分别在 1 和 -1 的邻域内，中间有一边界层，需要用内解匹配连接两边的外解. 下面我们来看内解.

对内解 (2.12)，在扩大的标度下， $z\in(-\infty,+\infty)$. 取 $U_0=0$，则 Ψ_0 满足的方程为：

$$\eta^2\Psi_{0zz}+\frac{\partial(\eta^2)}{\partial z}\Psi_{0z}+f(\Psi_0)=0, \tag{2.16}$$

对此方程我们和外解加如下匹配条件：

$$\lim_{z\to-\infty}\Psi_0(z)=\psi_{0-}|_\Gamma,\qquad \lim_{z\to+\infty}\Psi_0(z)=\psi_{0+}|_\Gamma. \tag{2.17}$$

另外，我们对外解 $u_{0\pm}$ 和内解 U_0 加边界条件 $u_{0\pm}|_\Gamma=0$，于是，我们就完成了 $O(1)$ 阶的近似内外解的匹配.

$O(\varepsilon)$ 阶近似

对外解 (2.6)，我们类似 $O(1)$ 阶的求法得到. 对内解，我们将已知 U_0,Ψ_0 代入并整理得：

$$\begin{cases} U_{1zz}+lr_t\Psi_{0z}=0, \\ \eta^2\Psi_{1zz}+\dfrac{\partial(\eta^2)}{\partial z}\Psi_{1z}+f'(\Psi_0)\Psi_1+U_1 \\ =\alpha\eta^2r_t\Psi_{0z}-\Delta r\eta^2\Psi_{0z}-\Big(\dfrac{\partial(\eta\eta')}{\partial s}\Psi_{0z}-\dfrac{\partial(\eta\eta')}{\partial z}\Psi_{0s}\Big)(r_xs_y-r_ys_x). \end{cases} \tag{2.18}$$

由 (2.18) 第一式得： $U_{1zz}=-lr_t\Psi_{0z}$，其中 Ψ_0 由 (2.16) 给出. 此式我们对 z 积分一次得：

$$U_{1z}=-lr_t\Psi_0+c_1(s,t), \tag{2.19}$$

此式表示 U_1 在转变层内的变化．因为 U_1 关于 z 有界，所以 $c_1(s,t)=0$. 在 (2.19) 式中令 $z\to\pm\infty$ 并利用匹配条件 (A2) 得：

$$u_{0r}|_{\Gamma_\pm}=-lr_t\psi_{0\pm}|_\Gamma=-lr_ta_\pm, \tag{2.20}$$

其中， $a_\pm=\psi_{0\pm}|_\Gamma$.

此式就是各向异性时的最低阶 Stefan 边界条件，此条件确定了 Stefan 问题的边界．特别当各向同性时，可得 $a=\psi_{0+}|_\Gamma-\psi_{0-}|_\Gamma=2$, 即普通 Stefan 边界条件．

我们分析 (2.18) 第二式必须满足的边界条件，注意到： $r_t=V$, $\nabla^2r=K$ 分别表示边界层的法向速度和平均曲率， β 表示 Γ 的切线和 x 轴的夹角， $|\nabla r|=1$, 则有 $\theta=\frac{\pi}{2}+\beta$, $r_x=\cos(\frac{\pi}{2}+\beta), r_y=\sin(\frac{\pi}{2}+\beta)$, 所以

$$r_xs_y-r_ys_x=-\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}\boldsymbol{p}},$$

其中 $\boldsymbol{p}$ 表示边界 Γ 的切线方向．从而

$$\frac{\partial(\eta\eta')}{\partial s}(r_xs_y-r_ys_x)=-\frac{\mathrm{d}(\eta\eta')}{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}, \tag{2.21}$$

此式几何上表示 $\eta\eta'$ 在 Γ 切线方向的方向导数．假设边界层在切线方向变化很小，省略 Ψ_{0s} 项，则可将 (2.18) 第二式写为：

$$\eta^2\Psi_{1zz}+\frac{\partial(\eta^2)}{\partial z}\Psi_{1z}+f'(\Psi_0)\Psi_1+U_1=\Big(\alpha\eta^2V-K\eta^2+\frac{\mathrm{d}(\eta\eta')}{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}\Big)\Psi_{0z}. \tag{2.22}$$

令 $\Lambda=\eta^2\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{\partial(\eta^2)}{\partial z}\frac{\partial}{\partial z}+f'(\Psi_0)$, 则 (2.22) 可写成：

$$\Lambda\Psi_1=-U_1+\Big(\alpha\eta^2V-K\eta^2+\frac{\mathrm{d}\,(\eta\eta')}{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}\Big)\Psi_{0z}. \tag{2.23}$$

注意到 Λ 是 $L_2(-\infty,+\infty)$ 上的线性算子，在原点处有单重零特征根且特征函数为 Ψ_{0z}, 所以 $\Lambda\xi=\eta$ 有解的条件为 η 与此特征函数正交．即：

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\Big(-U_1+\Psi_{0z}\Big(\alpha\eta^2V-K\eta^2+\frac{\mathrm{d}\,(\eta\eta')}{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}\Big)\Big)\Psi_{0z}\,\mathrm{d}z=0. \tag{2.24}$$

下面我们确定 U_1.

从 (2.19) 可知： $U_{1z}=-lV\Psi_0$, 所以

$$U_1=-lV\int_0^z\Psi_0(z)\,\mathrm{d}z+c_2(s,t), \tag{2.25}$$

将上式写成：

$$U_1=lV\int_0^z[\mathrm{sgn}(h)a_\pm-\Psi_0(h)]\,\mathrm{d}h-lVa_\pm|z|+c_2(s,t). \tag{2.26}$$

令 $z\to\pm\infty$, 利用匹配条件 (A2) 及 (2.20) 得：

$$u_1|_{\Gamma_\pm}=lV\int_0^{\pm\infty}\big(\mathrm{sgn}(h)a_\pm-\Psi_0(h)\big)\,\mathrm{d}h+c_2(s,t), \tag{2.27}$$

此表达式可唯一确定 $c_2(s,t)$. 这样 U_1 可完全由 (2.26) 确定. 在等号 (2.25) 两边乘 Ψ_{0z}, 并从 $-\infty$ 积分到 $+\infty$ 得:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} U_1\Psi_{0z}\,\mathrm{d}z = -lV\int_{-\infty}^{+\infty}\Big(\Psi_{0z}\int_0^z \Psi_0(z)\,\mathrm{d}z\Big)\,\mathrm{d}z + c_2\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_{0z}\,\mathrm{d}z. \tag{2.28}$$

记 $\delta=\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_{0z}\,\mathrm{d}z = a_+ - a_-$, 将 (2.24) 代入则有:

$$c_2\delta = lV\int_{-\infty}^{+\infty}\Big(\Psi_{0z}\int_0^z \mathrm{d}z\Big)\,\mathrm{d}z + \Big(\alpha V\eta^2 - K\eta^2 + \frac{\mathrm{d}(\eta\eta')}{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}\Big)\sigma, \tag{2.29}$$

此式中的 $\sigma=\int_{-\infty}^{+\infty}[\Psi_{0z}]^2\,\mathrm{d}z$ 表示边界上的曲面张力. 将 (2.27) 中的 c_2 代入上式得:

$$\begin{aligned} u_1|_{\Gamma_\pm} =& lV\int_0^{\pm\infty}(\mathrm{sgn}(h)a_\pm - \Psi_0(h))\,\mathrm{d}h + \frac{1}{\delta}lV\int_{-\infty}^{+\infty}\Big(\Psi_{0z}\int_0^z\Psi_0(z)\,\mathrm{d}z\Big)\,\mathrm{d}z \\ &+ \frac{1}{\delta}\Big[\alpha V\eta^2 - K\eta^2 + \frac{\mathrm{d}(\eta\eta')}{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}\Big]\sigma, \end{aligned} \tag{2.30}$$

这样我们得到了 $O(\varepsilon)$ 阶的 Gibbs-Thompson 关系. 若记

$$\int_0^{\pm\infty}(\mathrm{sgn}(h)a_\pm - \Psi_0(h))\,\mathrm{d}h = B_\pm, \qquad \int_{-\infty}^{+\infty}\Big(\Psi_{0z}\int_0^z\Psi_0(z)\,\mathrm{d}z\Big)\,\mathrm{d}z = B,$$

则有:

$$u_1|_{\Gamma_\pm} = lV\Big(B_\pm + \frac{1}{\delta}B\Big) + \frac{1}{\delta}\Big[\alpha V\eta^2 - K\eta^2 + \frac{\mathrm{d}(\eta\eta')}{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}\Big]\sigma, \tag{2.31}$$

此式就是在各向异性时的相态场模型边界层的 Gibbs-Thompson 关系, 它表示在边界层两边上的温度变化值受表面张力、平均曲率、法向速度和各向异性函数及其方向导数的影响. 考虑 $O(\varepsilon^2)$ 近似后还可得更精确的边界关系, 在此从略.

3 结论

从上面的分析可知, 在各向异性的相态场的 Gibbs-Thompson 关系 (2.31) 中, V 表示边界上的法向速度, K 表示边界上的平均曲率, σ 表示边界上的曲面张力, η 表示边界上的各向异性影响. 它们都影响状态函数在边界上的值. 从本文可知:

(1) 当各向同性时, 即 η 为常数, 此时 $\delta=2$, 我们的结论和文献 [2] 的结果一致, 都描述了边界层上的各个物理和几何量的关系.

(2) 当考虑到各向异性的影响时, 表达式 (2.31) 的各项有明显的物理意义, 即函数 u 在边界上的值受几个物理和几何量的影响. 特别是各向异性量 η^2 和 η^2 在 Γ 切线方向的方向导数. 显然这些影响综合考虑可使边界情况变得非常复杂.

(3) 利用 K 和 V 的表达式 (2.31), 我们可将边界满足的方程写成:

$$\frac{\alpha}{\delta}\eta^2\frac{\partial r}{\partial t} = \frac{\eta^2}{\delta}\nabla^2 r + u_1|_{\Gamma_\pm} - lV\Big(B_\pm + \frac{1}{\delta}B\Big) - \frac{\sigma}{\delta}\frac{\mathrm{d}(\eta\eta')}{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}. \tag{3.1}$$

注意到, r 表示边界 Γ 邻域内的点 (x,y) 到边界 Γ 的距离, 所以方程 (3.1) 解的零值线对应方程 (1.1) 边界层 Γ. 这样从理论上, 我们将确定边界的问题转化为方程 (3.1) 的求解问题. 但对该方程如何提出初始条件和边界条件仍需深入研究.

(4) 各向异性量 η 的选取应和实际背景相联系，并由具体问题来确定. 但从实验中来确定结晶边界层上的 η 值很困难，我们至今尚未见到这方面的实验结果. [2] 在没有物理意义的情况下，取 $\eta = 1 + \mu\cos n\theta$, 其中 θ 表示边界的法线与水平轴的夹角，当参数变化时，他们用相态场方程计算出了树形结构和雪花结构. 他们提出的边界关系是从二阶非线性常微分方程的本征值问题直接得到，与本文的计算方法完全不同，此外，他们的结果还忽略了边界上曲面张力这个重要因素的影响.

4 附录—边界上的匹配关系

我们只讨论沿边界的法线方向的匹配情况. 记边界层为 $Y(t)$, 宽度为 $O(\varepsilon)$. $u(x,t,\varepsilon)$ 在边界附近有定义.

外解 对 $x \neq Y(t)$, 设

$$u(x,t,\varepsilon) = u_0(x,t) + \varepsilon u_1(x,t) + \cdots$$

函数在 $Y(t)$ 两边的值分别为 $u_{0\pm}$, 在 $Y(t)$ 点可能不连续.

内解 设 $z = (x - Y(t))/\varepsilon$, $u = U(z,t,\varepsilon)$. 则有

$$U(x,t,\varepsilon) = U_0(x,t) + \varepsilon U_1(x,t) + \cdots.$$

匹配条件 在转变层附近，使上述两个展开式相等:

$$U(z,t,\varepsilon) = u\big(Y(t) + \varepsilon z, t, \varepsilon\big) = u(Y(t),t) + u'_x(Y(t),t)z\varepsilon + \frac{1}{2}u''_{xx}(Y(t),t)z^2\varepsilon^2 + \cdots,$$

从而得到匹配关系:

$$\begin{aligned}
&(\mathrm{A1}) \quad U_0(\pm\infty,t) = u_0(Y(t),t), \\
&(\mathrm{A2}) \quad U_1(\pm\infty,t) = u_1(Y(t),t) + zu_{0x}(Y(t),t), \qquad (z \to \pm\infty). \\
&(\mathrm{A3}) \quad U_2(z,t) = u_2(Y(t),t) + \frac{z}{2}u_{1x}(Y(t),t) + \frac{1}{2}z^2u_{0xx}(Y(t),t),
\end{aligned}$$

参　考　文　献

1 G. Caginalp. An Analysis of a Phase Field Model of a Free Boundary. *Arch. Ration. Mech. Analysis*, 1986, 92: 205–245

2 R. Kobayashi. Modeling and Numerical Simulations of Dendritic Crystal Growth. *Physica*, 1993, D63: 410–423

3 A. Wheeler, B. Murray, R. Schaefer. Computation of Dendrites Using a Phase Field Model. *Physica*, 1993, D66: 243–262

4 G. Caginalp. Stefan and Hele-Shaw Type Models as Asymptotic Limits of the Phase-field Equations. *Phys. Rev.*, 1989, A39: 5887–5897

5 A. Wheeler, W. Boettinger, G. McFadden. Phase-field Model for Isothermal Phase Transitions in Binary Alloys. *Phys. Rev.*, 1992, A45: 7424–7438

6 O. Penrose, P. Fife. Thermodynamically Consistent Models of Phase Field Type for the Kinetics of Phase Transitions. *Physica*, 1990, D43: 44–62

7 H. Lowen, J. Bechoefer, L. Tuckerman. Crystal Growth at Long Times: Critical Behavior at the Crossover from Diffusion to Kinetics-limited Regimes. *Phys. Rev.*, 1992, A45: 2399–2414

8 M. Amar. Dendritic Growth Rate at Arbitrary Undercooling. *Phys. Rev.*, 1990, A41: 2080–2090

9 A. Wheeler, G. McFadden, W. Boettinger. Phase-field Model for Solidification of a Eutectic Alloy. *Proc. R. Soc. Lond.*, 1996, A452: 495–525

THE GIBBS-THOMPSON RELATION FOR ANISOTROPY PHASE-FIELD MODEL

LIU SHENQUAN

(*Department of Applied Mathematics and Physics, Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing* 100083)

LU QISHAO

(*Department of Applied Mathematics and Physics, Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing* 100083; *Institute of Theoretical Physics, the Chinese Academy of Sciences, Beijing* 100080)

Abstract In this paper, the method of inner and outer matched asymptotic expansion is used to study the relationship of the surface tension, normal velocity, mean curvature and anisotropy function in the boundary of the anisotropy phase-field model. we obtain the anisotropy Gibbs-Thompson relation and the equation of boundary layer.

Key words Anisotropy, phase-field, Gibbs-Thompson relation, asymptotic perturbation, inner and outer matching