

CA-LBM 模型模拟自然对流作用下的枝晶生长*

杨朝蓉 孙东科 潘诗琰 戴挺 朱鸣芳

(东南大学江苏省先进金属材料高技术研究重点实验室, 南京 211189)

摘要 建立了一个基于二维的元胞自动机-格子 Boltzmann 方法 (cellular automaton-lattice Boltzmann method, CA-LBM) 的耦合模型, 对自然对流作用下枝晶的生长行为进行模拟研究. 本模型采用 CA 方法模拟枝晶的生长, 采用 LBM 对自然对流及由对流和扩散控制的溶质和热传输进行数值计算. 通过计算方腔自然对流问题对模拟自然对流、溶质和热传输的 LB 模型进行了验证. 应用所建立的 CA-LBM 耦合模型模拟研究了合金中单枝晶和多枝晶在自然对流作用下的生长规律, 并将单枝晶上游尖端的稳态生长模拟数据与解析模型的预测结果进行了比较. 结果表明, 模拟结果与理论预测值吻合良好, 自然对流会对枝晶的生长产生重要影响.

关键词 枝晶生长, 自然对流, 元胞自动机, 格子 Boltzmann 方法, 数值模拟

中图分类号 TG111.4

文献标识码 A

文章编号

0412-1961(2009)01-0043-08

CA-LBM MODEL FOR THE SIMULATION OF DENDRITIC GROWTH UNDER NATURAL CONVECTION

YANG Chaorong, SUN Dongke, PAN Shiyan, DAI Ting, ZHU Mingfang

Jiangsu Key Laboratory for Advanced Metallic Materials, Southeast University, Nanjing 211189

Correspondent: ZHU Mingfang, professor, Tel: (025)83793355, E-mail: zhumf@seu.edu.cn

Supported by National Natural Science Foundation of China (No.50671025), Natural Science Foundation of Jiangsu Province (No.BK2006105) and China Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education (No.20070286021)

Manuscript received 2008-06-19, in revised form 2008-10-06

ABSTRACT A two-dimensional (2-D) model coupling cellular automaton-lattice Boltzmann method (CA-LBM) was developed for the simulation of dendritic growth in the presence of natural convection. The present model adopts the CA approach for the simulation of dendritic growth and the LBM for the numerical solution of flow dynamics as well as the species and heat transports controlled by both diffusion and convection. The validation of the LBM was performed by testing the calculated natural convection in a square cavity. The CA-LBM model was applied to simulate single and multi-dendritic growth in alloys under natural convection. The simulated single dendritic steady-state growth data of the upstream tip can be compared well with the analytical predictions. It is found that the dendritic growth is obviously influenced by natural convection.

KEY WORDS dendritic growth, natural convection, cellular automaton, lattice Boltzmann method, numerical simulation

符号说明

c LB 中的格子速度, $c=\Delta x/\Delta t$, m/s
 c_p 质量定压热容, J/(kg·K)
 D 溶质扩散系数, m^2/s
 \vec{g} 重力加速度, m/s^2

H 计算区域高(长)度, m
 K 界面曲率, m^{-1}
 k_p 溶质平衡分配系数
 L 凝固潜热, J/kg
 m 液相线斜率, K/(mass fraction, %)
 Nu 热壁 Nusselt 数, $Nu = \frac{-1}{T_h - T_c} \int_0^H \frac{\partial T}{\partial x} |_{\text{hot wall}} dy$
 Pe_C 浓度 Peclet 数, $Pe_C = v_s r_s / 2D$
 Pe_T 温度 Peclet 数, $Pe_T = v_s r_s / 2\alpha$
 Pr Prandtl 数, $Pr = \nu/\alpha$
 Ra_C 浓度 Rayleigh 数,
 $Ra_C = g\beta_C(w_{\max} - w_{\min})H^3/\nu D$

* 国家自然科学基金项目 50671025 和江苏省自然科学基金项目 BK2006105 以及高等学校博士学科点专项科研基金项目 20070286021 资助

收到初稿日期: 2008-06-19, 收到修改稿日期: 2008-10-06

作者简介: 杨朝蓉, 女, 1984 年生, 硕士生

Ra_T	温度 Rayleigh 数, $Ra_T = g\beta_T(T_{\max} - T_{\min})H^3/\nu\alpha$
r_s	稳态枝晶尖端半径, m
Sc	Schmidt 数, $Sc = \nu/D$
T, T_0	温度和初始温度, K
T_h, T_c	热壁和冷壁的温度, K
$T_m, \Delta T$	纯物质的熔点和过冷度, K
T_{\max}, T_{\min}	计算区域中流体的最高和最低温度, K
u, v	x 和 y 方向的速度分量, m/s
v_g	固/液界面法向生长速度, m/s
v_s	稳态枝晶尖端生长速度, m/s
w, w_0	浓度和初始浓度, 质量分数 (%)
w_{\max}, w_{\min}	计算区域中流体的最高和最低浓度, 质量分数 (%)
x, y	平面直角坐标的两个方向
α	热扩散率, m^2/s
β_C	浓度体积膨胀系数, (mass fraction, %) $^{-1}$
β_T	温度体积膨胀系数, K^{-1}
\bar{G}	平均 Gibbs-Thomson 系数, m·K
Δt	时间步长, s
Δx	空间步长, m
δ_T, δ_C	温度场和浓度场边界层厚度, m
ε	表面能各向异性强度系数
θ	固/液界面法向与水平方向的夹角, deg
θ_0	枝晶的择优生长方向, deg
μ_k	界面动力学系数, m/(s·K)
ν	运动黏度, m^2/s
ρ, ρ_0	密度和初始密度, kg/m^3
$\tau, \tau_\alpha, \tau_D$	流场、温度场和浓度场的无量纲松弛 时间
φ_S	固相体积分数
ω_i	权重系数, $i=0-8$

液态金属凝固过程中除了由于电磁搅拌、超声振动等外力场作用所形成的强制对流之外, 还存在由温度梯度和浓度梯度引起的自然对流, 这些流动将直接影响到材料凝固后的组织, 包括成分偏析以及凝固疏松和孔洞等缺陷的分布. 近年来, 国内外学者针对纯金属和合金, 应用相场 (phase field, PF) 模型、前沿跟踪 (front tracking, FT) 模型或元胞自动机 (cellular automaton, CA) 模型耦合基于 Navier-Stokes(NS) 方程的流场数值计算方法研究了对流作用下枝晶的生长规律^[1-8]. 但传统流体力学计算模型是建立在宏观连续介质的假设条件下的, 比较适合用于计算单相流体流动, 而在凝固过程中存在固、液两相, 当固相分数较大时, 流场计算不易收敛, 影响了计算效率. 此外, 利用 NS 方程方法计算自然对流步骤复杂, 较难实现.

格子 Boltzmann 方法^[9](lattice Boltzmann method, LBM) 是近 20 年来迅速发展起来的一种流体力学数值计算的新方法. 该方法介于流体力学的微观分子

动力学模型和宏观连续模型之间, 兼具两者优点, 并具有计算效率高、数值稳定性好、本质并行、易于处理外力源项和任意复杂的边界问题以及计算速度与空间复杂程度无关等许多传统方法无法比拟的独特优势. 目前, LBM 在热流动、多相流及多孔介质流等众多领域中都得到了比较成功的应用^[10]; 近年来, LBM 在凝固领域也逐渐得到了应用^[11-15]. 但关于应用 LBM 模拟合金在自然对流作用下枝晶生长规律方面的报道还较少.

CA 模型能模拟实验所观测到的各种凝固微观组织特征并且具有较高的计算效率, 因而近年来在微观组织模拟方面备受关注并得到了较大的发展^[16-18]. 本工作将计算枝晶生长的 CA 方法与计算流场、浓度场和温度场的 LBM 进行耦合, 建立了一个二维的 CA-LBM 模型, 对合金凝固过程中在自然对流作用下单枝晶和多枝晶的生长规律进行了模拟研究.

1 模型与算法

1.1 模拟自然对流的格子 Boltzmann 模型

与传统的计算流体力学的建模思想不同, 格子 Boltzmann 方法 (LBM) 将流体抽象为由大量虚拟粒子所组成的集合体. 这些虚拟粒子按一定的方式在离散格子上进行碰撞和迁移演化而形成了宏观的流体流动现象. 在 LBM 中虚拟粒子用一种分布函数来表示, 在一个满足一定的对称性条件的规则网格中对 Boltzmann 方程进行离散求解来描述虚拟粒子分布函数的演化规律, 并根据分布函数计算流体的密度和速度. 因此, 该方法称为格子 Boltzmann 方法. 本文采用基于 Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) 假设的单步松弛时间的二维九速 (D2Q9)LB 模型^[19,20]来计算二维的流动问题, 其分布函数的演化方程如下:

$$f_i(\vec{x} + \vec{e}_i\Delta t, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t) = -\tau^{-1}.$$

$$[f_i(\vec{x}, t) - f_i^{\text{eq}}(\vec{x}, t)] + F_i \quad (1)$$

式中, $f_i(\vec{x}, t)$ 为虚拟粒子的分布函数, 代表了在位置 \vec{x} 和时间 t 出现一个虚拟粒子的概率. $f_i^{\text{eq}}(\vec{x}, t)$ 为相应的平衡分布函数, F_i 为外力分量, \vec{e}_i 为虚拟粒子沿 i 方向的离散速度. 在 D2Q9 模型中, 一个虚拟粒子共有 9 个离散速度 (即 $i=0-8$), 则 \vec{e}_i 的大小由下式给出:

$$\vec{e}_i = \begin{cases} \{0, 0\} & (i = 0) \\ c\{\cos[(i-1)\pi/2], \sin[(i-1)\pi/2]\} & (i = 1-4) \\ \sqrt{2}c\{\cos[(2i-9)\pi/4], \sin[(2i-9)\pi/4]\} & (i = 5-8) \end{cases} \quad (2)$$

式 (1) 中的平衡分布函数 $f_i^{\text{eq}}(\vec{x}, t)$ 由密度 ρ 和速度 \vec{u} 决定如下:

$$f_i^{\text{eq}}(\vec{x}, t) = \omega_i \rho \left[1 + 3 \frac{\vec{e}_i \cdot \vec{u}}{c^2} + 4.5 \frac{(\vec{e}_i \cdot \vec{u})^2}{c^4} - 1.5 \frac{|\vec{u}|^2}{c^2} \right] \quad (3)$$

式中, ω_i 为权重系数: $\omega_0=4/9$, $\omega_{1-4}=1/9$, $\omega_{5-8}=1/36$.

式 (3) 中的 ρ 和 \vec{u} 可由粒子分布函数 $f_i(\vec{x}, t)$ 分别求出如下:

$$\rho = \sum_{i=0}^8 f_i(\vec{x}, t) \quad (4)$$

$$\rho \cdot \vec{u} = \sum_{i=0}^8 \vec{e}_i f_i + \frac{\Delta t}{2} \vec{F} \quad (5)$$

式 (1) 中的无量纲单步松弛时间 τ 与流体的运动黏度 ν 有如下关系:

$$\tau = 3\nu/(c^2 \Delta t) + 0.5 \quad (6)$$

根据 Boussinesq 近似, 浮力项中的密度 ρ 为温度梯度和浓度梯度的线性函数^[9]. 因此, 产生自然对流的浮力

$$\vec{F} = \vec{g} \rho_0 \beta_T (T - T_0) + \vec{g} \rho_0 \beta_C (w - w_0) \quad (7)$$

从而, 式 (1) 中的外力分量 F_i 可由下式计算:

$$F_i = (1 - \frac{1}{2\tau}) \omega_i \left[3 \frac{\vec{e}_i \cdot \vec{u}}{c^2} + 9 \frac{\vec{e}_i \cdot \vec{u}}{c^4} \right] \Delta t \cdot \vec{F} \quad (8)$$

1.2 模拟溶质和热传输的格子 Boltzmann 方程

LBM 也可应用于计算受对流和扩散控制的浓度场和温度场的变化. 与流体的分布函数演化方程相类似, 浓度场和温度场的分布函数演化方程分别如下^[21]:

$$g_i(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - g_i(\vec{x}, t) = -\tau_D^{-1} \cdot [g_i(\vec{x}, t) - g_i^{\text{eq}}(\vec{x}, t)] + G_i \quad (9)$$

$$h_i(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - h_i(\vec{x}, t) = -\tau_\alpha^{-1} \cdot [h_i(\vec{x}, t) - h_i^{\text{eq}}(\vec{x}, t)] + H_i \quad (10)$$

式中, $g_i(\vec{x}, t)$ 和 $h_i(\vec{x}, t)$ 分别为浓度和温度的分布函数; G_i 和 H_i 分别为枝晶生长过程中由于溶质再分配和释放凝固潜热而造成的溶质源项和温度源项, 分别由以下两式求得:

$$G_i = \omega_i w (1 - k_p) \Delta \varphi_S \quad (11)$$

$$H_i = \omega_i \Delta \varphi_S L / c_p \quad (12)$$

式中, $\Delta \varphi_S$ 为一个时间步长内一个界面网格中的固相分数增量. 与 $g_i(\vec{x}, t)$ 和 $h_i(\vec{x}, t)$ 相对应的平衡分布函数 $g_i^{\text{eq}}(\vec{x}, t)$ 和 $h_i^{\text{eq}}(\vec{x}, t)$ 分别如下:

$$g_i^{\text{eq}}(\vec{x}, t) = \omega_i w \left[1 + 3 \frac{\vec{e}_i \cdot \vec{u}}{c^2} + 4.5 \frac{(\vec{e}_i \cdot \vec{u})^2}{c^4} - 1.5 \frac{|\vec{u}|^2}{c^2} \right] \quad (13)$$

$$h_i^{\text{eq}}(\vec{x}, t) = \omega_i T \left[1 + 3 \frac{\vec{e}_i \cdot \vec{u}}{c^2} + 4.5 \frac{(\vec{e}_i \cdot \vec{u})^2}{c^4} - 1.5 \frac{|\vec{u}|^2}{c^2} \right] \quad (14)$$

式 (11—14) 中的权重系数 ω_i 与式 (3) 中的相同. 式 (13) 和式 (14) 中包含速度 \vec{u} 的项代表了对流作用对溶质和热传输的贡献. 浓度 w 和温度 T 可由其相应的分布函数求出如下:

$$w = \sum_{i=0}^8 g_i(\vec{x}, t) \quad (15)$$

$$T = \sum_{i=0}^8 h_i(\vec{x}, t) \quad (16)$$

式 (1—16) 构成了一个计算由温度梯度和浓度梯度而产生自然对流以及受自然对流和扩散控制的温度场和浓度场的 LBM 模型.

边界条件的处理方法在 LBM 数值计算中起着重要作用. 在本工作中, 对于流场计算, 采用反弹格式^[22] 处理固/液界面和计算区域的 4 个边界上的无滑移边界条件. 对于浓度场计算, 计算区域的 4 个边界采用无扩散的边界条件. 因为本工作主要考察溶质在液相中受自然对流和扩散控制的传输及其对枝晶生长的影响, 而不涉及关于固相扩散对溶质在固相中微观偏析的影响. 为了简化处理, 可忽略固相中的溶质扩散, 采用反弹格式处理固/液界面处的浓度变化. 对于温度场计算, 假设固相和液相热传导相同, 并将计算区域的 4 个边界温度设定为常数, 采用文献^[23] 中的非平衡外推方法实现.

1.3 模拟枝晶生长的元胞自动机方法

在 CA 方法中, 枝晶的生长由局部过冷度所驱动. 在 t_n 时刻, 局部过冷度

$$\Delta T(t_n) = T_m - T(t_n) + m \cdot w(t_n) - \Gamma(\theta) K \quad (17)$$

式中, $T(t_n)$ 和 $w(t_n)$ 分别为 t_n 时刻的界面温度和浓度, $\Gamma(\theta)$ 为考虑了界面能各向异性因素的 Gibbs-Thomson 系数. 界面曲率

$$K = \left[\left(\frac{\partial \varphi_S}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi_S}{\partial y} \right)^2 \right]^{-3/2} \cdot \left[2 \frac{\partial \varphi_S}{\partial x} \cdot \frac{\partial \varphi_S}{\partial y} \cdot \frac{\partial^2 \varphi_S}{\partial x \partial y} - \left(\frac{\partial \varphi_S}{\partial x} \right)^2 \cdot \frac{\partial^2 \varphi_S}{\partial y^2} - \left(\frac{\partial \varphi_S}{\partial y} \right)^2 \cdot \frac{\partial^2 \varphi_S}{\partial x^2} \right] \quad (18)$$

本模型采用传统的尖锐界面模型计算界面生长速度与过冷度之间的关系如下:

$$v_g = \mu_k \Delta T(t_n) \quad (19)$$

式中, 界面动力学系数 μ_k 通过一种反推法进行确定. Zhu 和 Stefanescu^[24] 提出了一个基于界面平衡浓度与实际浓度之差确定界面生长动力学的 ZS 模型. 因此, 该模型不需

界面动力学系数, 并已经过验证, 具有良好的定量模拟能力. 将 CA-LBM 和 ZS 模型在完全相同的纯扩散条件下进行模拟计算, 比较两个模型计算的枝晶尖端速度, 以此确定在本工作的物性参数计算条件下取 $\mu_k=0.8 \times 10^{-2}$ m/(s·K). 为考虑界面能的各向异性因素, Gibbs-Thomson 系数

$$\Gamma(\theta) = \bar{\Gamma}\{1 - 15\epsilon\cos[4(\theta - \theta_0)]\} \quad (20)$$

式中, 界面法向方向与水平方向的夹角

$$\theta = \arctan\left(\frac{\partial\varphi_S/\partial y}{\partial\varphi_S/\partial x}\right) \quad (21)$$

1.4 模型的耦合

本工作通过以下步骤将 CA 与 LBM 相耦合:

(1) 选取流场计算的无量纲单步松弛时间 $\tau=2.0$, 根据材料的 Sc 数和 Pr 数, 通过 $\tau_D = (\tau - 0.5)/Sc + 0.5$ 和 $\tau_\alpha = (\tau - 0.5)/Pr + 0.5$ 关系分别求出计算浓度场和温度场的松弛时间 τ_D 和 τ_α .

(2) 用 LBM 对式 (1—16) 进行数值计算, 获得每个时间步长的流场、温度场和浓度场分布. 由式 (1, 7, 8) 可知, 自然对流受温度梯度和浓度梯度的影响. 而由式 (9, 10, 13, 14) 可知, 自然对流的存在又影响了温度场和浓度场的分布.

(3) 用式 (17—21) 计算枝晶生长. 式 (17) 中界面温度 $T(t_n)$ 和界面浓度 $w(t_n)$ 由 LBM 对式 (1—16) 进行数值计算而获得. 在枝晶生长过程中, 界面网格固相分数的增加将产生溶质再分配和释放潜热, 利用式 (9) 和式 (11) 将释放出的溶质增量加给同网格的剩余液相的溶质分布函数, 利用式 (10) 和式 (12) 将释放的潜热转化为温度增量加给同网格的温度分布函数, 从而实现枝晶生长对浓度场和温度场分布所产生的影响. 此外, 流场计算在固/液界面的无滑移边界条件使得不断长大的枝晶对流场的分布产生了影响. 从而实现了由 LBM 计算的流场、温度场、浓度场和由 CA 计算的枝晶生长的完全耦合.

(4) 重复步骤 (2) 和步骤 (3), 直至模拟结束.

1.5 解析模型

为了对 CA-LBM 模型进行验证, 根据 Cantor 和 Vogel^[25] 推导对流条件下修正的三维 Ivantsov 解的方法, 推导出包含对流作用的修正二维 Ivantsov 解, 即考虑对流作用时二维的无量纲温度过冷度 Ω_T 和浓度过饱和度 Ω_C 可由下式计算:

$$\Omega_T = \sqrt{\pi Pe_T} e^{Pe_T} [\operatorname{erfc}(\sqrt{Pe_T}) - \operatorname{erfc}(\sqrt{Pe_T(1 + 2\delta_T/r_s)})] \quad (22)$$

$$\Omega_C = \sqrt{\pi Pe_C} e^{Pe_C} [\operatorname{erfc}(\sqrt{Pe_C}) - \operatorname{erfc}(\sqrt{Pe_C(1 + 2\delta_C/r_s)})] \quad (23)$$

再根据 Li 和 Beckermann^[26] 描述的方法将修正的二维 Ivantsov 解代入二维的 Lipton-Glicksman-Kurz (LGK) 模型^[27] 的过冷度计算中, 建立如下计算自然对流作用下枝晶生长的解析模型:

$$\Delta T = \left(\frac{L}{c_p}\right)\Omega_T + \frac{k_p\Delta T_e\Omega_C}{1 - (1 - k_p)\Omega_C} + \frac{\Gamma}{r_s} \quad (24)$$

式中, $\Delta T_e = mw_0(1 - 1/k_p)$, 为平衡凝固温度区间.

2 结果与讨论

2.1 LB 模拟自然对流的验证

为了验证计算自然对流的 LB 模型的正确性, 本文对封闭方腔中的自然对流问题进行了模拟计算, 并将模拟结果与文献中的结果进行比较. 该流动问题的几何构形为一个水平放置的二维方腔, 方腔的左壁和右壁温度恒定, 且左壁的温度 T_h 高于右壁温度 T_c , 而将上、下两壁设置为绝热 (见图 1).

初始条件如下:

$$u = v = 0, T_0 = (T_h + T_c)/2$$

边界条件如下:

$$\text{左壁} \quad u = v = 0, T = T_h$$

$$\text{右壁} \quad u = v = 0, T = T_c$$

$$\text{上、下壁} \quad u = v = 0, \text{绝热边界}$$

在模拟中取 $Pr=0.71$, Ra_T 在 10^3 — 10^6 范围内取不同的初始值, 速度和温度的初始分布函数分别取其平衡态分布函数的值. 流场在边界上的分布函数采用反弹方法确定, 温度场在边界上的分布函数采用非平衡外推方法确定.

图 2 为不同 Ra_T 条件下流动达到稳态时的流线分布. 该结果与文献 [28] 的结果相符.

表 1 示出用 LBM 计算的不同温度 Rayleigh 数 Ra_T 下热壁 Nusselt 数 Nu 的计算结果, 并与文献 [29] 中使用流函数-涡量差分方法得到的标准解进行了比较. 结果表明, 本文的 LB 模型的计算结果与该文献中给出的标准

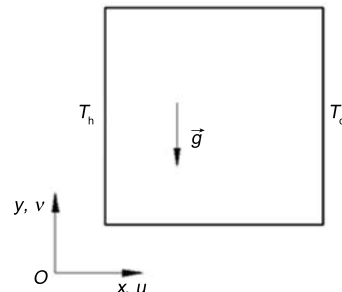


图 1 方腔自然对流体示意图

Fig.1 Illustration of natural convection in a square cavity

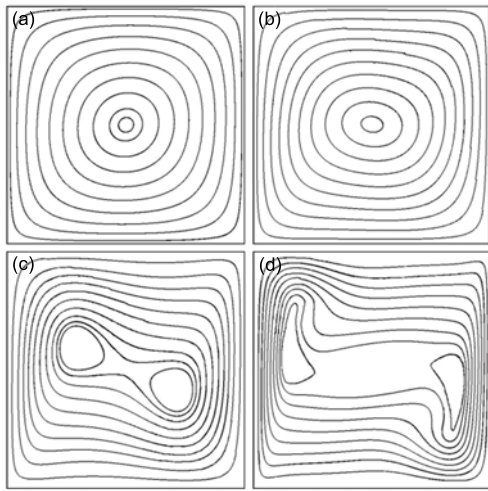


图 2 不同温度 Rayleigh 数下稳态流场的流线

Fig.2 Streamlines of the steady flow with different thermal Rayleigh numbers (Ra_T)
 (a) $Ra_T=10^3$ (b) $Ra_T=10^4$
 (c) $Ra_T=10^5$ (d) $Ra_T=10^6$

表 1 不同 Rayleigh 数 Ra_T 时 Nusselt 数 Nu 的比较

Table 1 Comparison of Nusselt numbers (Nu) computed at different Rayleigh numbers (Ra_T) with the results presented in Ref.[29]

Ra_T	Ref.[29]	Present work	Error, %
10^3	1.117	1.116	0.09
10^4	2.238	2.223	0.67
10^5	4.506	4.437	1.60
10^6	8.817	8.565	2.80

解吻合良好。

从上述的比较和分析可以看出，应用本文的 LBM 模型和算法计算自然对流是可行的，所得模拟结果是可信的。

2.2 纯扩散条件下单枝晶的生长

首先应用 CA-LBM 模型模拟了纯扩散条件下单枝晶生长的形貌。计算参数取： $k_p=0.103$, $m=-2.16$ K/(mass fraction, %), $T_m=331.24$ K, $\bar{T}=6.62 \times 10^{-8}$ m·K, $\varepsilon=0.0267$, $L=5 \times 10^3$ J/kg, $c_p=1937.5$ J/(kg·K), $\nu=6.0 \times 10^{-9}$ m²/s, $D=1.0 \times 10^{-9}$ m²/s, $\alpha=3.0 \times 10^{-9}$ m²/s。将计算区域划分成 400×400 个均匀正方形网格，网格尺寸 $\Delta x=0.4$ μm 。模拟开始时，在计算区域的中心放置一个成分为 $w_0 k_p$ 及择优取向 $\theta_0=0^\circ$ 的晶核。图 3 示出在模拟纯扩散条件下，合金初始成分 $w_0=0.3$ (质量分数, %)、过冷度 $\Delta T=1$ K 和凝固时间 $t=34.0 \times 10^{-2}$ s 时单枝晶的形貌、浓度场和温度场的分布。从图可以看出，在纯扩散条件下枝晶的形貌、浓度场及温度场的分布都是对称的。

2.3 自然对流作用下单枝晶的生长

图 4 为模拟自然对流作用下且凝固时间 $t=31.0 \times$

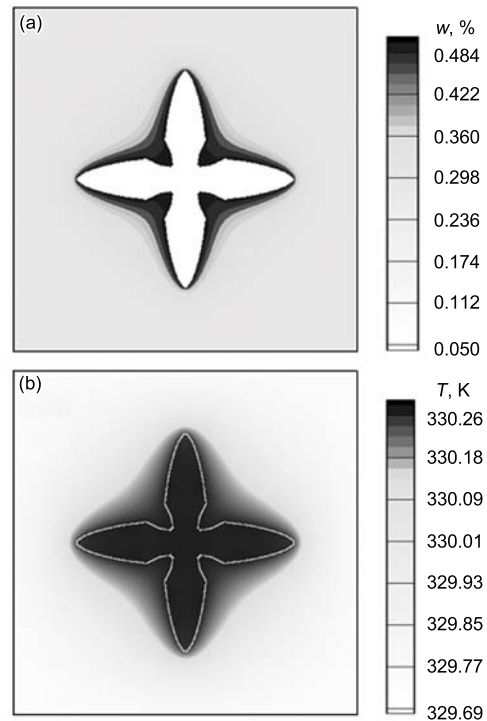


图 3 模拟纯扩散条件下过冷熔体中的单枝晶生长形貌

Fig.3 Simulated dendritic morphology ($t=34.0 \times 10^{-2}$ s, $\varphi_S=0.1$) in an undercooled melt without flow ($w_0=0.3\%$, $\Delta T=1$ K)
 (a) concentration field (w —mass fraction, %)
 (b) temperature field

10^{-2} s 时的单枝晶生长形貌 ($Ra_T = Ra_C=5 \times 10^3$, 其它计算条件同图 3)。比较图 4 与图 3 可见，在自然对流作用下，枝晶生长的对称性被破坏。枝晶生长时，在固/液界面上溶质和潜热的释放造成了凝固前沿的温度和浓度梯度，在重力作用下就引起了自然对流，即形成如图 4 中所示的流场。由图可见，自然对流改变了温度场和浓度场的分布，从而对枝晶生长形貌产生了很大影响：垂直向下枝晶臂的生长得到了促进，而垂直向上枝晶臂的生长受到了抑制。此外，当枝晶生长到相同的固相分数 $\varphi_S=0.1$ 时，自然对流作用下所需的凝固时间为 31.0×10^{-2} s，比纯扩散条件下所需的凝固时间 (34.0×10^{-2} s) 略短。这是因为自然对流的存在加快了溶质和热在熔体内的传输速度。

为了进一步定量研究自然对流对枝晶生长的影响，分别将自然对流作用下和纯扩散条件下枝晶尖端生长速度 (v_{tip})、温度 (T_{tip}) 和溶质浓度 (w_{tip}) 随时间变化的模拟计算结果进行了分析 (将垂直向下、垂直向上和水平方向生长的枝晶尖端分别定义为上游尖端 (v_{up})、下游尖端 (v_{do}) 和水平尖端 (v_{ho}))，结果如图 5 所示。从图 5a 可以看出，在凝固的初始阶段，所有尖端都以一个较快的速度生长，随着枝晶生长的进行，溶质再分配及潜热的释放富集在固/液界面，导致枝晶尖端前沿的浓度和温度迅速增加，尖端生长速度因而迅速下降。经过一段短暂的时间，溶质和潜热在界面前沿的释放与通过对流和扩散的传输

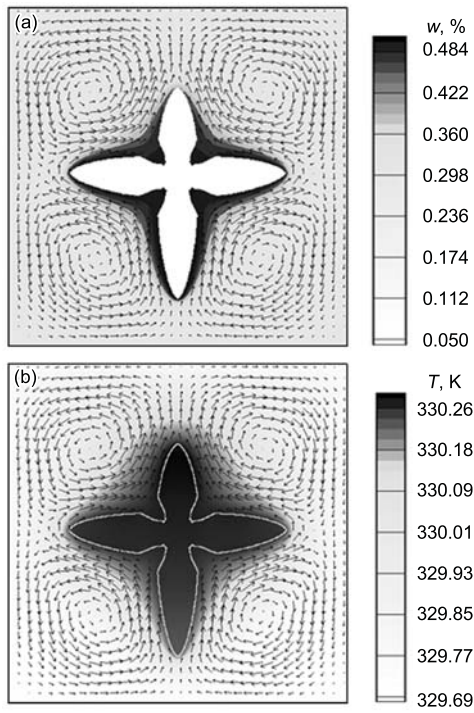


图 4 模拟自然对流作用下过冷熔体中的单枝晶生长形貌

Fig.4 Simulated dendritic morphology ($t=31.0 \times 10^{-2}$ s, $\varphi_S=0.1$) in an undercooled melt with natural convection ($w_0=0.3\%$, $\Delta T=1$ K, $Ra_T=Ra_C=5 \times 10^3$)
(a) concentration field (b) temperature field

基本达到平衡, 枝晶尖端的生长也达到一个大致稳态速度. 上游尖端的稳态生长速度最高; 下游尖端的稳态生长速度最低; 而水平尖端介于两者之间, 与纯扩散的情况大致相当. 由图 5b, c 可以看出, 当有自然对流存在时, 达到稳态时枝晶上游尖端温度 (≈ 330.12 K) 低于下游尖端温度 (≈ 330.30 K); 由于上游尖端生长快, 释放出的溶质多, 尽管有对流的作用, 上游尖端浓度 ($\approx 0.47\%$) 仍略高于下游尖端浓度 ($\approx 0.41\%$); 而上、下游尖端的曲率基本相同. 通过式 (17) 可以估算出, 上游尖端的总过冷度大于下游尖端. 因此, 上游尖端生长速度大于下游尖端, 正如图 5a 所示.

为了对 CA-LBM 模型进行验证, 将模拟结果与包含对流作用的修正 LGK 模型的预测结果进行了比较. 图 6 示出对应于图 4 中上游尖端生长速度随时间的变化曲线和修正的 LGK 模型所预测的尖端稳态生长速度. 从图中可以看出, 上游尖端的稳态生长速度与解析模型的预测结果很接近. 表 2 为不同初始成分时, 上游枝晶尖端的稳态生长参数 (v_s, r_s, Pe_T) 与相应解析解的比较. 从表中可以看出, 随着初始浓度的增加, 两种模型得出的尖端稳态生长参数 v_s, r_s 和 Pe_T 的变化趋势相同, CA-LBM 模型的数值计算结果与理论模型的预测结果吻合较好.

2.4 自然对流作用下多枝晶的生长

应用所建立的 CA-LBM 模型模拟研究了自然对流作用下多枝晶的生长行为. 将计算区域划分为 450×450

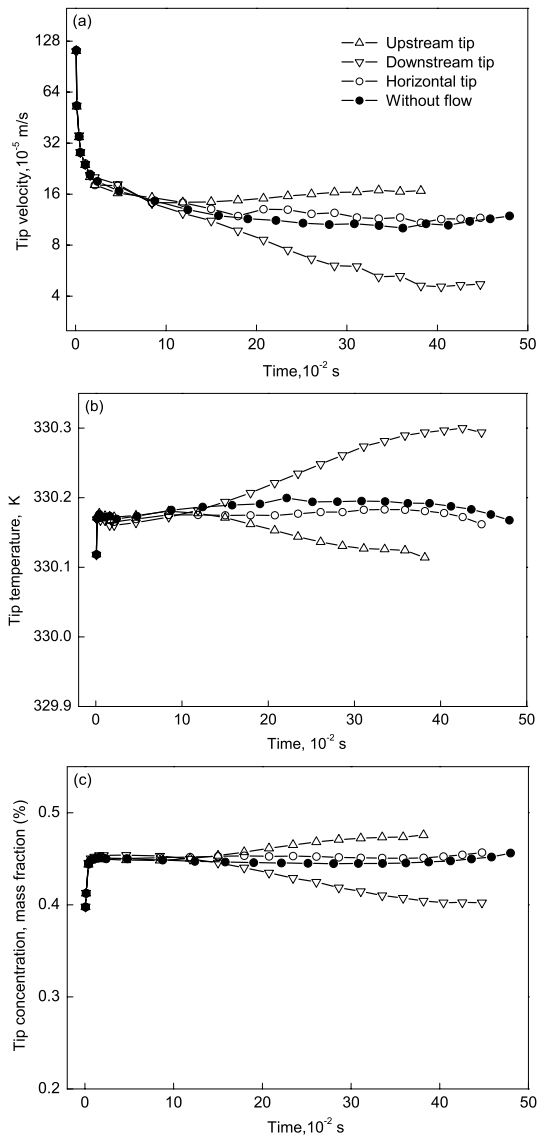


图 5 对应于图 3 和图 4 中单枝晶尖端生长速度、温度和浓度与凝固时间的关系

Fig.5 Time histories of tip velocity (a), tip temperature (b) and tip concentration (c) for the cases of Figs.3 and 4

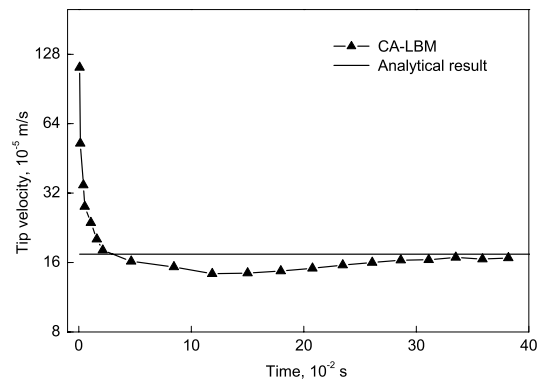


图 6 对应于图 4 自然对流作用下单枝晶上游尖端生长速度随凝固时间的变化

Fig.6 Upstream tip velocity v_s time for the case of Fig.4, solid line indicating the steady-state tip velocity predicted by the analytical model

表 2 自然对流作用下, 不同初始成分时上游枝晶尖端稳态生长参数的模拟结果与理论模型预测结果的比较

Table 2 Comparison between the simulations and the theoretical predictions for the steady-state growth parameters (v_s , r_s , Pe_T) of the upstream tip at various initial compositions (w_0) under natural convection

w_0 mass fraction, %	$v_s, 10^{-4}$ m/s		$r_s, 10^{-6}$ m		Pe_T	
	Theory	CA-LBM	Theory	CA-LBM	Theory	CA-LBM
0.1	2.44	2.13	1.808	1.741	0.0735	0.0618
0.2	2.03	1.99	1.687	1.512	0.0571	0.0501
0.3	1.74	1.67	1.632	1.391	0.0474	0.0387
0.4	1.52	1.38	1.602	1.375	0.0407	0.0316

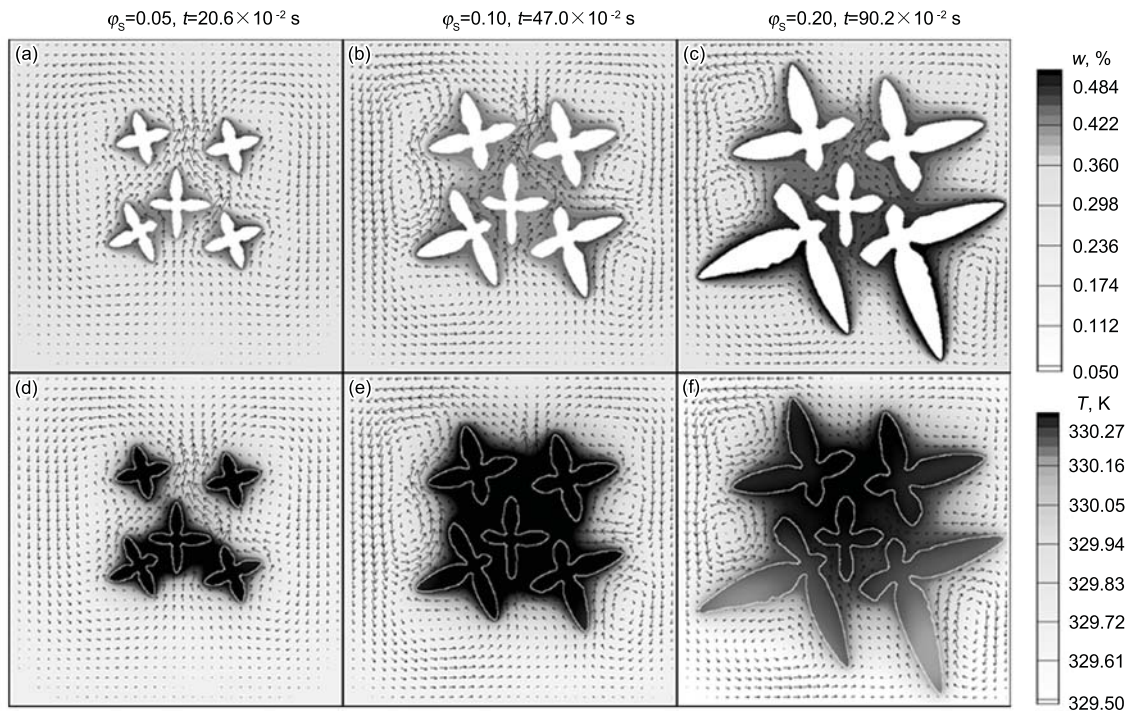


图 7 模拟自然对流作用下多枝晶生长的演变

Fig.7 Simulated evolution of multi-dendritic growth under natural convection

(a), (b), (c) concentration fields (d), (e), (f) temperature fields

个均匀正方形网格, 网格尺寸为 $0.8 \mu\text{m}$. 将 5 个随机分布的晶核置于计算区域中, 并随机地给予各晶核一个择优生长方向. 晶核的初始成分为 $w_0 k_p$, 其余液相的初始成分为 w_0 . 区域内温度场分布均匀, 初始过冷度为 1 K, 并以 0.1 K/s 的速率冷却. 取温度和浓度 Rayleigh 数 $Ra_T = Ra_C = 5 \times 10^3$. 图 7 为初始成分 $w_0 = 0.3\%$ 的合金在自然对流作用下多枝晶生长形貌演变过程的浓度场和温度场的模拟结果. 由图可以看出, 在多枝晶生长过程的初始阶段, 由于自然对流较弱, 枝晶生长受其影响不大, 即在上游和下游方向的枝晶生长较对称. 随着凝固的进行, 自然对流逐步增强. 枝晶间内部区域的枝晶臂生长主要受到相邻枝晶的影响, 而在外部区域受自然对流的影响更为显著 (即在上游 (下部) 区域的枝晶臂比下游 (上部) 区域的枝晶臂生长更快). 其机理与单枝晶生长相同. 自然对流将热和溶质从上游传输到下游, 使上游的固/液前沿局部过冷度高于下游, 从而加速了上游区域的枝晶

生长.

3 结论

(1) 将计算枝晶生长的元胞自动机 (CA) 方法与计算动量、质量及能量传输的格子 Boltzmann 方法 (LBM) 相耦合, 建立了一个适用于模拟自然对流作用下合金枝晶生长的 CA-LBM 模型.

(2) 通过模拟方腔自然对流问题验证了计算自然对流的 LB 模型的正确性. 将自然对流作用下, CA-LBM 模型模拟的不同初始成分合金的上游尖端稳态生长速度、半径和温度 Peclet 数与解析模型的预测结果进行了比较, 两者吻合较好.

(3) 应用所建立的 CA-LBM 模型模拟研究了在纯扩散和自然对流作用下的单枝晶和多枝晶的生长行为. 结果表明, 自然对流的存在加速了热和溶质在熔体内的传输, 并且将热和溶质从上游传输到下游, 使上游的固/液前沿

局部过冷度高于下游,从而加速了上游枝晶臂的生长,而下游枝晶臂的生长受到了抑制,形成了非对称的枝晶生长形貌.

衷心感谢德国 Max-Planck-Institut fuer Eisenforschung 的 Dierk Raabe 教授提供了计算流场的 LBM 基础源代码,感谢东南大学数学系杜睿博士关于 LBM 方面的有益讨论.

参考文献

- [1] Lan C W, Shih C J. *Phys Rev*, 2004; 69E: 031601
- [2] Tönhardt R, Amberg G. *Phys Rev*, 2000; 62E: 828
- [3] Zhu M F, Lee S Y, Hong C P. *Phys Rev*, 2004; 69E: 061610
- [4] Zhu M F, Dai T, Lee C Y, Hong C P. *Sci China*, 2005; 35E: 673
(朱鸣芳, 戴挺, 李成允, 洪俊杓. 中国科学, 2005; 35E: 673)
- [5] Lu Y, Beckermann C, Ramirez J C. *J Cryst Growth*, 2005; 280: 320
- [6] Al-Rawahi N, Tryggvason G. *J Comput Phys*, 2002; 180: 471
- [7] Zhang P W, Li D M, Li R. *Appl Math Model*, 2007; 31: 971
- [8] Kang X H, Du Q, Li D Z, Li Y Y. *Acta Metall Sin*, 2004; 40: 452
(康秀红, 杜强, 李殿中, 李依依. 金属学报, 2004; 40: 452)
- [9] Guo Z L, Zheng C G, Li Q. *The Lattice Boltzmann Method on Hydrokinetics*. Wuhan: Hubei Science and Technology Press, 2002: 53
(郭照立, 郑楚光, 李青. 流体动力学的格子 Boltzmann 方法. 武汉: 湖北科学技术出版社, 2002: 53)
- [10] Raabe D. *Modell Simul Sci Eng*, 2004; 12: 13
- [11] Miller W, Rasin I, Pimentel F. *J Cryst Growth*, 2004; 266: 283
- [12] Miller W, Succi S, Mansutti D. *Phys Rev Lett*, 2001; 86: 3578
- [13] Medvedev D, Fischaleck T, Kassner K. *J Cryst Growth*, 2007; 303: 69
- [14] Zhang X J, Shen H F. *Chin J Mech Eng*, 2006; 42(9): 154
(张小军, 沈厚发. 机械工程学报, 2006; 42(9): 154)
- [15] Huang J L, Chen L L. In: Jin J Z, Yao S, Hao H, Wang T M, eds., *Proc Modeling of Casting and Solidification Processes (VII)*, Dalian: Dalian University of Technology Press, 2007: 123
- [16] Yu J, Xu Q Y, Cui K, Liu B C. *Acta Metall Sin*, 2007; 43: 731
(于靖, 许庆彦, 崔锴, 柳百成. 金属学报, 2007; 43: 731)
- [17] Li Q, Li D Z, Qian B N. *Acta Metall Sin*, 2004; 40: 1215
(李强, 李殿中, 钱百年. 金属学报, 2004; 40: 1215)
- [18] Shan B W, Lin X, Lei W, Huang W D. *Adv Mater Res*, 2007; 26: 957
- [19] Guo Z L, Zheng C G, Shi B C. *Phys Rev*, 2002; 65E: 046308
- [20] Qian Y H, D'Humieres D, Lallemand P. *Europhys Lett*, 1992; 17: 479
- [21] Deng B, Shi B C, Wang G C. *Chin Phys Lett*, 2005, 22: 267
- [22] Nie D M, Lin J Z. *Chin J Comput Phys*, 2004; 21: 21
(聂德明, 林建忠. 计算物理, 2004; 21: 21)
- [23] Guo Z L, Zheng C G, Shi B C. *Chin Phys*, 2002; 4: 366
- [24] Zhu M F, Stefanescu D M. *Acta Mater*, 2007; 55: 1741
- [25] Cantor B, Vogel A. *J Cryst Growth*, 1977; 44: 109
- [26] Li Q, Beckermann C. *J Cryst Growth*, 2002; 236: 482
- [27] Lipton J, Glicksman M E, Kurz W. *Mater Sci Eng*, 1984; 65: 57
- [28] Kuznik F, Vareilles J, Rusaouen G, Krauss G. *Int J Heat Fluid Flow*, 2007; 28: 862
- [29] de Vahl Davis G. *Int J Numer Methods Fluids*, 1983; 3: 249