

枝晶生长和气泡形成的数值模拟*

吴伟 孙东科 戴挺 朱鸣芳†

(东南大学江苏省先进金属材料高技术重点实验室, 南京 211189)

(2011 年 10 月 27 日收到; 2011 年 12 月 30 日收到修改稿)

本文建立了二维的格子玻尔兹曼方法-元胞自动机 (lattice Boltzmann method-cellular automaton, LBM-CA) 耦合模型, 对凝固过程中枝晶生长和气泡形成进行模拟研究. 本模型采用 CA 方法模拟枝晶的生长, 根据界面溶质平衡法计算枝晶生长的驱动力. 采用基于 Shan-Chen 多相流的 LBM 模拟气泡在液相中的生长和运动. 在 LBM-CA 的耦合模型中包含了固-液-气三相之间的相互作用. 应用 Laplace 定理和模拟气-液-固三相之间的润湿现象对模型进行了验证. 应用所建立的 LBM-CA 耦合模型模拟研究了气-液相互作用系数对单气泡生长的影响. 发现单气泡的生长速度和平衡半径随气-液相互作用系数的增大而增大. 定向凝固过程中枝晶和气泡生长的模拟结果再现了枝晶的择优生长、气泡的优先形核位置、气泡的长大、合并、在枝晶间受挤变形以及在液相通道中的运动等物理现象, 与实验结果符合良好. 此外, 初始气体含量越高, 凝固结束时气泡的体积分数也相对较高. 本模型的模拟结果可以揭示在凝固过程中气泡形核、生长和运动演化以及与枝晶生长相互作用的物理机理.

关键词: 格子玻尔兹曼方法, 元胞自动机, 枝晶, 气泡

PACS: 05.20.Dd, 81.10.-h

1 引言

枝晶组织是在金属凝固过程中所形成的一种最常见的显微组织. 熔融的金属液中会不可避免地含有一定的气体组元, 如铝、镁、铜基合金中的氢. 由于气体组元在固、液相中的溶解度不同, 它会随着枝晶生长而使液相中溶解的过饱和气体析出而形成气泡, 造成凝固组织中的显微气孔缺陷. 显微气孔的形貌和分布直接影响了材料的力学性能, 尤其是造成其强度、韧性和疲劳寿命的降低, 严重制约了此类合金的工业应用. 另一方面, 枝晶和气泡的耦合生长也是在非平衡物理体系中物质如何从简单的初始态演变成复杂形态的一个很好的研究实例. 因此, 关于凝固过程中枝晶和气泡的形成和演变机理是长期以来学术界和实际应用两方面都非常感兴趣的研究课题之一.

为了探明凝固过程中气孔产生、演化以及和枝晶生长相互作用机理, 学者们开展了相关的实验

研究. Han^[1] 实验观察了透明材料环己烷在凝固过程中糊状区的气泡形成和演化过程. 发现在糊状区形成蠕虫状 (worm-like) 气泡, 这些气泡可在糊状区或凝固前沿迁移. 他认为气泡的最终分布取决于气泡在两相区的运动. 但对枝晶生长形貌和气泡的析出、演化迁移之间的相互作用机制尚难以准确描述. Zhao 等人^[2] 采用 X 射线实时观察技术研究了在合金定向凝固过程中气泡的形成和长大. 但由于金属材料的不透明性, 以及较难精确控制相关的实验参数, 如初始含气量等, 使开展精确定量实验研究的难度较大. 另一方面, 由于在凝固过程中气-液-固三相共存相变以及耦合热、溶质和动量传输的相互作用关系非常复杂, 也为理论分析研究造成了很大的困难. 至今还没有比较成熟的理论能对枝晶/气泡的形成及其相互作用过程进行描述.

当今, 数值模拟是和理论研究和实验技术并行发展的第三种科学研究方法. 它已成为分析研究凝固显微组织演变形成机理的一个强大和重要的工具. 研究者们提出了相关的数值模型^[3], 如气体

* 国家自然科学基金 (批准号: 50971042) 资助的课题.

† E-mail: zhmf@seu.edu.cn

扩散控制气孔生长模型和显微组织耦合气孔生长模型. 气体扩散控制气孔生长模型可根据不同初始含气量和凝固速度对显微气孔的体积分数进行估算预测, 但不能描述显微组织和气泡形貌. 显微组织耦合气孔生长模型是将介观尺度的元胞自动机 (cellular automaton, CA) 和有限差分方法相耦合, 考虑凝固过程中氢气的再分配和扩散, 可以模拟晶粒组织耦合气泡生长的形貌^[3,4]. 但由于该模型没有考虑合金溶质场在凝固过程中的变化, 且假定形成的气泡是固定不动的, 因而不能描述枝晶形貌、气泡的演化迁移、以及两者间的相互作用现象.

以微观分子动力学和介观动理论方程为基础的格子玻尔兹曼方法 (lattice Boltzmann method, LBM) 是 20 多年来发展起来的一种新的流体数值计算新方法^[5,6]. 该方法从微观角度将流体抽象为由大量虚拟粒子所构成的离散系统, 每个流体粒子做无规则的热运动, 并通过相互碰撞交换动量和能量, 从而表现为宏观的流体流动现象. 因此, LBM 提供了联系流体流动的宏观现象和微观本质的桥梁. 由于其微观粒子特性以及可以处理任意复杂的边界问题, LBM 非常适用于模拟复杂介质中的单相或者多相流体行为^[7-10]. 近年来, 在显微组织的模拟领域, LBM 已被应用于模拟对流作用下的枝晶生长规律^[11-13], 以及偏晶合金中的液-液分离现象^[14]. 但尚未见到应用 LBM 对气-液-固三相共存体系中的枝晶生长和气泡形成进行模拟研究的文献报道.

CA 方法能对各种显微组织进行模拟并具有较高的计算效率, 因而在组织模拟方面得到了较快的发展^[15,16]. 本文将模拟两相流的 LBM 和模拟枝晶生长的 CA 方法相耦合, 建立一个二维的 LBM-CA

耦合模型, 对凝固过程中枝晶生长和气泡析出、长大和运动演化的现象和规律进行模拟研究.

2 模型及算法

2.1 气-液两相流 LBM 模型

如前所述, 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 中用分布函数来代表微观虚拟粒子. 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. 基于 Shan-Chen 单松弛的二维九速 (D2Q9) 多相流 LBM 模型^[17,18], 在考虑相变的情况下, 气液两相流动的格子 Boltzmann 演化方程可表示为^[14]

$$\begin{aligned} f_i^\sigma(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i^\sigma(\mathbf{x}, t) \\ = -\frac{1}{\tau^\sigma} [f_i^\sigma(\mathbf{x}, t) - f_i^{\sigma(\text{eq})}(\mathbf{x}, t)] + \omega_i \Delta \rho^\sigma, \\ \sigma = 1, 2, \quad i = 0, 1, \dots, 8, \end{aligned} \quad (1)$$

式中, $\sigma = 1$ 与 $\sigma = 2$ 分别表示两个不同的流体相, 在本文中 $\sigma = 1$ 时为液相, $\sigma = 2$ 时为气相; $f_i^\sigma(\mathbf{x}, t)$ 和 $f_i^{\sigma(\text{eq})}(\mathbf{x}, t)$ 分别为 σ 相流体的粒子分布函数和平衡分布函数; τ^σ 是无量纲的参数, 表示 σ 相流体粒子的分布函数达到平衡态的松弛时间; $\Delta \rho^\sigma$ 表示在一个时间步长之内由相变引起的 σ 相粒子密度的变化量; ω_i 为权重系数, 对于 D2Q9 模型, $\omega_0 = 4/9$, $\omega_{1-4} = 1/9$, $\omega_{5-8} = 1/36$; $\mathbf{e}_i$ 为粒子在 i 方向的运动速度, 定义为

$$\mathbf{e}_i = c \cdot \begin{cases} (0, 0), & i = 0, \\ (\cos[\pi(i-1)/2], \sin[\pi(i-1)/2]), & i = 1, 2, 3, 4, \\ (\cos[\pi(i-5)/2 + \pi/4], \sin[\pi(i-5)/2 + \pi/4]), & i = 5, 6, 7, 8, \end{cases} \quad (2)$$

式中, $c = \Delta x / \Delta t$, 为格子速度, Δx 为空间步长, Δt 为时间步长. (1) 式中粒子平衡分布函数 $f_i^{\sigma(\text{eq})}(\mathbf{x}, t)$ 由各相的密度 $\rho^\sigma(\mathbf{x}, t)$ 和速度 $\mathbf{u}^\sigma(\mathbf{x}, t)$ 所确定,

$$\begin{aligned} f_i^{\sigma(\text{eq})}(\mathbf{x}, t) = & \omega_i \rho^\sigma(\mathbf{x}, t) [1 + 3(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}^\sigma(\mathbf{x}, t)) / c^2 \\ & + 4.5(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}^\sigma(\mathbf{x}, t))^2 / c^4 \\ & - 1.5(\mathbf{u}^\sigma(\mathbf{x}, t))^2 / c^2]. \end{aligned} \quad (3)$$

各相流体的实际密度 $\rho^\sigma(\mathbf{x}, t)$ 和两相流体的平均速度 $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ 可由粒子分布函数求出,

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

$$\rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\sigma=1}^2 \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i f_i^\sigma(\mathbf{x}, t), \quad (5)$$

其中 $\rho(\mathbf{x}, t)$ 表示两相流体的整体密度,

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{\sigma=1}^2 \sum_{i=0}^8 f_i^{\sigma}(\mathbf{x}, t). \quad (6)$$

各相平衡分布函数中的速度 $\mathbf{u}^{\sigma}(\mathbf{x}, t)$ 可由下式计算:

$$\begin{aligned} & \rho^{\sigma}(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}^{\sigma}(\mathbf{x}, t) \\ &= \rho^{\sigma}(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \tau^{\sigma} \mathbf{F}^{\sigma}(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (7)$$

其中 $\mathbf{F}^{\sigma}(\mathbf{x}, t)$ 表示作用在气液两流体相上的作用力.

在 Shan-Chen 多相流模型中^[17,18], 两个流体相间的作用力用 $\mathbf{F}_c^{\sigma}(\mathbf{x}, t)$ 表示, 其定义为

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_c^{\sigma}(\mathbf{x}, t) &= -G_c \psi^{\sigma}(\mathbf{x}, t) \sum_{i=0}^8 \omega_i \psi^{\bar{\sigma}} \\ &\times (\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t) \mathbf{e}_i, \end{aligned} \quad (8)$$

式中, $\psi^{\sigma}(\mathbf{x}, t)$ 表示流体的有效密度, 它是流体密度的函数, 在本文中取 $\psi^{\sigma}(\mathbf{x}, t) = \rho^{\sigma}(\mathbf{x}, t)$. 因子 G_c 是气-液相互作用系数, 与界面张力相关. 此外, 在某一时刻、某一位置处流体所受到的压力 $p(\mathbf{x}, t)$ 可由流体的密度 $\rho(\mathbf{x}, t)$ 以及有效密度函数 $\psi^{\sigma}(\mathbf{x}, t)$ 进行计算, 其表达式为

$$p(\mathbf{x}, t) = \frac{\rho(\mathbf{x}, t)}{3} + \frac{G_c}{3} \psi^{\sigma}(\mathbf{x}, t) \psi^{\bar{\sigma}}(\mathbf{x}, t). \quad (9)$$

考虑到液-气相转变时, 气相的增加意味着液相的减少, 故 (1) 式中由相变引起的气、液相粒子密度变化量的关系为 $\Delta \rho^g = -\Delta \rho^l$, 本文中 $\Delta \rho^g$ 用下式计算:

$$\Delta \rho^g = -(\rho^g + \rho^l) \Delta \phi, \quad (10)$$

式中, $\Delta \phi$ 表示液相转变为气相的量, 与液相转变为固相的量相关: $\Delta \phi = A \Delta f_s$, 其中 Δf_s 表示液相转变为固相的量, A 为系数, 本文取 $A = 10^{-6}$.

2.2 模拟枝晶生长的 CA 模型

在 CA 模型中, 采用界面局部溶质平衡法计算枝晶生长的驱动力^[19], 即枝晶生长速度正比于固-液界面的平衡液相成分与实际液相成分之差. 根据界面的溶质平衡条件, 在一个时间步长 Δt 中, 固-液界面网格中的固相分数增量 Δf_s 可由下式计算:

$$\Delta f_s = (C_1^{\text{eq}} - C_1) / [C_1^{\text{eq}}(1 - k_p)], \quad (11)$$

式中 C_1^{eq} 为固-液界面处液相的平衡成分; C_1 为固-液界面处液相的实际成分, k_p 为恒定的溶质

分配系数. 根据固-液界面处热力学平衡的 Gibbs-Thomson 关系, (11) 式中的固-液界面处的液相平衡成分 C_1^{eq} 可由下式计算:

$$C_1^{\text{eq}} = C_0 + [(T_1^* - T_{1,0}^{\text{eq}}) + \Gamma K(t_n)] / m_1, \quad (12)$$

式中 T_1^* 为界面温度, $T_{1,0}^{\text{eq}}$ 为 C_0 初始成分合金的平衡液相线温度, m_1 为液相线斜率; Γ 为 Gibbs-Thomson 系数, $K(t_n)$ 为时刻 t_n 时的固-液界面曲率, 根据界面的固相分数梯度计算

$$\begin{aligned} K(t_n) &= \left[\left(\frac{\partial f_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial f_s}{\partial y} \right)^2 \right]^{-3/2} \\ &\times \left[2 \frac{\partial f_s}{\partial x} \frac{\partial f_s}{\partial y} \frac{\partial^2 f_s}{\partial x \partial y} - \left(\frac{\partial f_s}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2 f_s}{\partial y^2} \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{\partial f_s}{\partial y} \right)^2 \frac{\partial^2 f_s}{\partial x^2} \right]. \end{aligned} \quad (13)$$

为了描述枝晶择优生长的各向异性, 在模型中考虑界面能的各向异性. (12) 式中的 Gibbs-Thomson 系数 Γ 由以下式子计算:

$$\Gamma = \bar{\Gamma} \{1 - \delta_t \cos[4(\theta - \theta_0)]\}, \quad (14)$$

式中 $\bar{\Gamma}$ 和 δ_t 分别为平均 Gibbs-Thomson 系数和界面能的各向异性强度, θ_0 为晶体的择优生长方向, θ 为固-液界面的法向方向与水平方向的夹角, 由下式计算:

$$\theta = \arctan \left(\frac{\partial f_s / \partial y}{\partial f_s / \partial x} \right). \quad (15)$$

通过求解区域内的浓度场来确定 (11) 式中的固-液界面处的液相实际成分 C_1 . 在本模型中不考虑流场对浓度场的影响. 采用有限差分法计算区域内的溶质扩散, 其控制方程为

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \cdot \nabla^2 C + C(1 - k_p) \frac{\partial f_s}{\partial t}, \quad (16)$$

式中 D 为溶质扩散系数, 在液相和固相中分别取为 D_l 和 D_s , 而在界面上用权重法进行确定. (16) 式中右边第二项为由于固相分数的变化在固-液界面溶质再分配的量. 采用显式有限差分法对溶质的扩散进行数值计算. 采用零扩散的边界条件处理位于计算区域边界的网格.

2.3 气-液两相流 LBM 模型与枝晶生长 CA 模型的耦合

将上述所描述的气-液两相流的 LBM 模型和模拟枝晶生长的 CA 模型相耦合. 作用于流体相 (包括气相和液相) σ 上的力为流-流作用力和流-固作

用力的合力, 即 (7) 式中的不同相之间的相互作用力 $\mathbf{F}^\sigma(\mathbf{x}, t)$ 可表示为 [17]

$$\mathbf{F}^\sigma(\mathbf{x}, t) = \mathbf{F}_c^\sigma(\mathbf{x}, t) + \mathbf{F}_{\text{ads}}^\sigma(\mathbf{x}, t), \quad (17)$$

式中流 - 流作用力 $\mathbf{F}_c^\sigma$ 由 (8) 式计算; 流 - 固作用力 $\mathbf{F}_{\text{ads}}^\sigma$ 由下式计算:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{\text{ads}}^\sigma(\mathbf{x}, t) = & -G_{\text{ads}}^\sigma \rho^\sigma(\mathbf{x}, t) \sum_{i=0}^8 \omega_i \\ & \times s(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t) \mathbf{e}_i, \end{aligned} \quad (18)$$

式中 $s(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t)$ 为标示函数, 当固相和液相时分别为 1 和 0. G_{ads}^σ 为流 - 固之间的相互作用系数.

模拟开始时, 在计算区域的底部放置数个枝晶核心. 用 CA 方法模拟枝晶的生长, 随枝晶的生长, 液相中的含气量不断增加而开始析出气泡. 用气 - 液两相流的 LBM 模型模拟气泡的生长和运动. 将枝晶标示为固相, 气、液流体的分布函数遇到固相后发生反弹. 作用在流体上的力 $\mathbf{F}^\sigma(\mathbf{x}, t)$ 由 (17) 式进行计算, 根据这一作用力计算出新的流体演化分布函数. 而当枝晶遇到气泡时停止生长. 由此实现枝晶和气泡生长运动相互作用的耦合.

3 结果及讨论

3.1 气 - 液两相流 LBM 模型的 Laplace 定律验证

首先用 Laplace 定律对气 - 液两相流的 LBM 模型进行验证. 单气泡的 Laplace 定律为

$$\Delta p = \frac{2\gamma}{R}, \quad (19)$$

式中, γ 为界面张力, R 为气泡半径, Δp 为气泡内外压强差. 如前所述, 气 - 液相互作用系数 G_c 与界面张力 γ 的大小相关. 改变气 - 液相互作用系数 G_c 值就可以实现改变界面张力 γ 值. 设定模拟区域为 $200 \times 200 \text{ lu}^2$ (lu 为无量纲网格尺寸单位), 气泡初始半径为 5 lu . 计算区域四周采用周期性边界条件 [6]. 两相的松弛时间 τ^σ 都取 1.0. 图 1 为不同相互作用系数 G_c 值时, Δp 与 $1/R$ 的关系. 从图 1 可以看出, 取不同 G_c 值时, Δp 与 $1/R$ 均成线性关系. 表明气 - 液两相流 LBM 模型的模拟结果符合 Laplace 定律. 验证了气 - 液两相流 LBM 模型和程序代码的正确性. 此外, 随着 G_c 值的增大, Δp 与 $1/R$ 的比值也增大, 说明气 - 液相互作用系

数 G_c 与界面张力 γ 之间成正比关系.

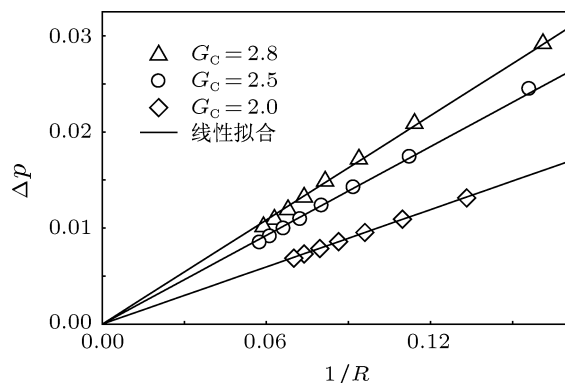


图 1 单气泡内外压力差与半径的关系

3.2 气 - 液 - 固三相之间润湿性的模拟

为了验证 LBM-CA 耦合模型, 采用所建立的耦合模型对气 - 液 - 固三相之间的润湿现象进行模拟. 根据杨氏方程, 图 2 中所示的气 - 液 - 固三相接触角可由下式计算:

$$\sigma_{gl} \times \cos \theta + \sigma_{gs} = \sigma_{ls}, \quad (20)$$

式中, θ 为气 - 液 - 固三相接触角; σ_{gl} , σ_{gs} 和 σ_{ls} 分别为气 - 液、气 - 固和液 - 固的界面张力, 与气 - 液、气 - 固和液 - 固之间的相互作用系数相关.

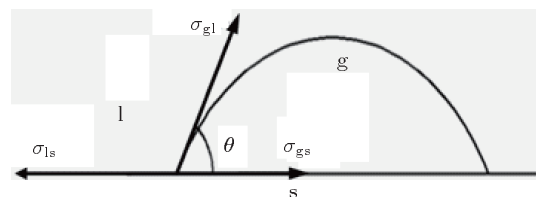


图 2 气 - 液 - 固三相接触角示意图

Sukop 等人 [20] 和 Huang 等人 [17] 将杨氏方程中流 - 固各相间的界面张力与多相流 LBM 模型中的流 - 固各相间的相互作用系数和流体密度相关联. 我们根据 Sukop 和 Huang 等人的思想, 在气 - 液 - 固三相体系中, 润湿角由下式进行计算:

$$\cos \theta = (G_{ls} - G_{gs}) / \left(G_c \frac{|\rho_g - \rho_f|}{2} \right), \quad (21)$$

式中 G_{gs} 和 G_{ls} 分别为气 - 固和液 - 固相互作用系数; ρ_g 和 ρ_f 分别为气相和液相密度.

应用气 - 液 - 固三相 LBM 模型模拟了不同流 - 固相互作用系数时的接触角. 模拟条件为: 计算区域为 $110 \times 110 \text{ lu}^2$, 计算时间为 80000 ts (ts 为无量

纲时间步长). 计算区域四周采用反弹格式的边界条件^[6]. 取气-液相互作用系数 $G_c = 1.0$, 气相密度 $\rho_g = 0.1$, 液相密度 $\rho_l = 3.0$, 两相的松弛时间 τ^σ 都取 1.0, 气-固相互作用系数 G_{gs} 与液-固相互作用系数 G_{ls} 的关系为 $G_{ls} = -G_{gs}$. 模拟结果如图 3 所示. 可以看出随着液-固相互作用系数 G_{ls} 的增

大, 气-液-固三相的接触角逐渐减小, 即流体相与固相之间的润湿性逐渐增加.

通过改变不同的液-固相互作用系数 G_{ls} 模拟得到的接触角与通过 (21) 式计算得到的接触角的结果如图 4 所示. 从图 4 的数据可以看出 LBM 模拟得到的接触角与通过 (21) 式计算的接触角的值

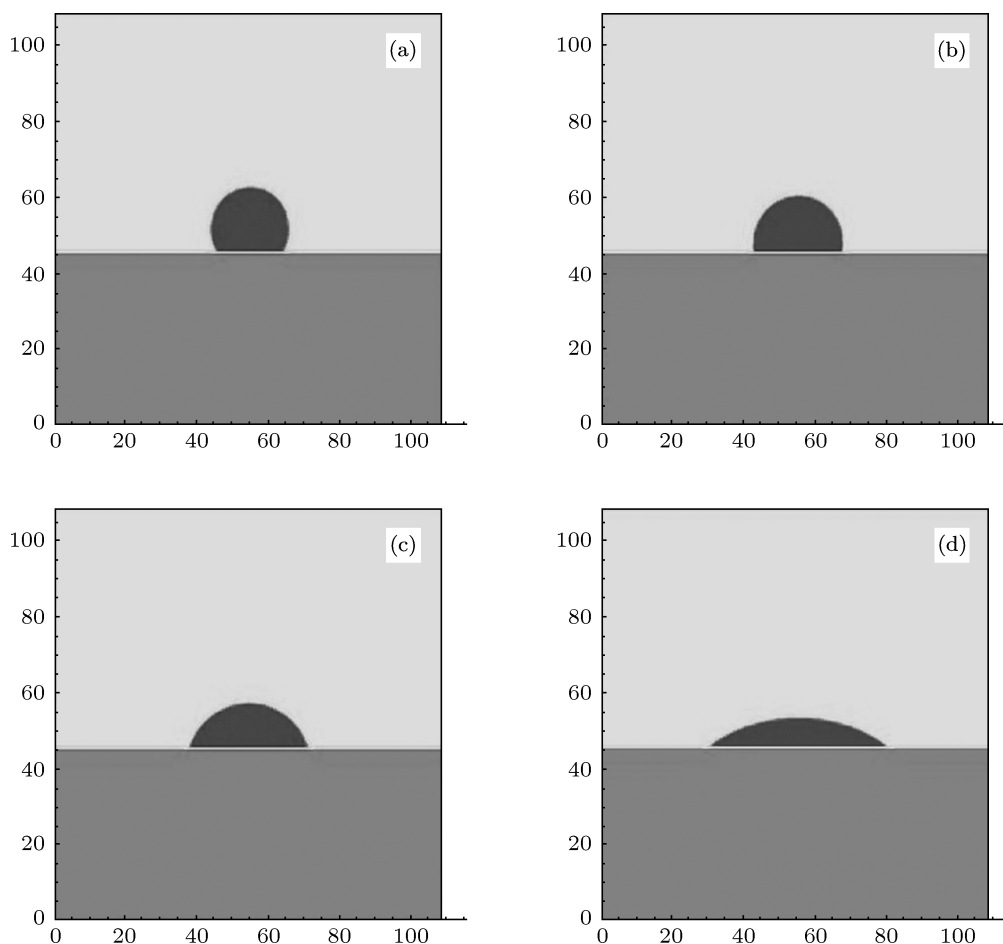


图 3 气-液-固三相接触角随液-固相互作用系数 G_{ls} 的变化 (a) $G_{ls} = -0.5$; (b) $G_{ls} = -0.2$; (c) $G_{ls} = 0.2$; (d) $G_{ls} = 0.5$

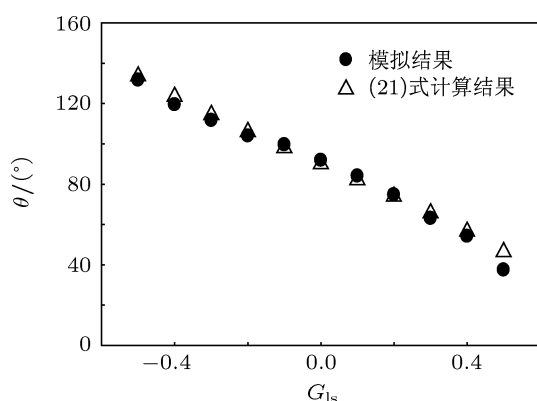


图 4 接触角随液-固相互作用系数 G_{ls} 的变化

符合良好. 表明气-液-固三相 LBM 模型可以对润湿现象进行合理的模拟预测, 从而验证了本模型的合理性以及程序代码的正确性. 此外, 通过该模拟认知了在气-液-固三相共存时, 不同相之间的相互作用系数对润湿性的影响规律, 为后续的模拟合理选取不同相之间的相互作用系数提供了参考和依据.

3.3 单气泡生长

气-液界面张力对气泡的生长有重要影响. 根

据图 1 的模拟结果, 气 - 液界面张力与气 - 液相互作用系数 G_c 之间存在线性正比关系. 因此, 通过考察 G_c 与平衡气泡大小之间的关系即可了解气 - 液界面张力对气泡生长的影响规律. 设定模拟区域为 $100 \times 100 \text{ lu}^2$, 区域四周采用反弹格式边界条件. 气、液两相的松弛时间均取为 1.0. 气泡初始半径为 5 lu , 图 5 为取不同的气 - 液相互作用系数 G_c 时, 气泡半径随时间的变化. 从图 5 中可以看出, 气泡半径随时间不断长大, 经过一段时间后, 气泡半径达到平衡. G_c 越大, 气泡长大速度越快, 气泡的平衡半径也越大. 这是因为气 - 液相互作用系数 G_c 越大, 气 - 液界面张力越大, 两相更易于分离, 分离出来的气相增多, 使气泡生长速度加快, 平衡气泡半径增大.

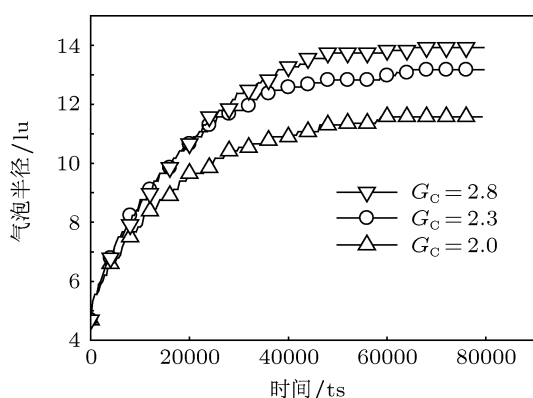


图 5 不同气 - 液相互作用系数 G_c 时气泡半径随时间的变化

3.4 枝晶和气泡生长及其相互作用

应用所建立的 LBM-CA 耦合模型, 对枝晶和气泡生长的演化过程进行模拟. 模拟枝晶生长的材料为 Al-Cu 系合金, 物性参数为: $k_p = 0.17$, $m_l = -2.6 \text{ K/(mass\%)}$, $\bar{\Gamma} = 2.4 \times 10^{-7} \text{ m}\cdot\text{K}$, $\delta_t = 0.3$, $D_l = 3 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$, $D_s = 3 \times 10^{-13} \text{ m}^2/\text{s}$. 考虑到气体与金属熔体间的润湿性较差, 不同相之间的相互作用系数分别取 $G_c = 2.0$, $G_{ls} = -0.9$, $G_{gs} = 0.9$, 使气 - 固之间的接触角接近 180° . 将模拟区域划分为 250×800 的均匀正方形网格, 格子尺寸为 $1 \mu\text{m}$. 本模型尚不考虑枝晶的形核. 初始时在区域底部设置 5 个不同择优取向的晶核. 图 6 为初始成分 $C_0 = 4 \text{ mass\%Cu}$, 初始气体含量为 4.8%, 初始过冷度为 3.0 K, 冷却速率为 4.0 K/s, 温度梯度为 20 K/mm 条件下的定向凝固时枝晶和气泡生长的形貌演化. 由图 6 可见, 初始时, 枝晶竞争生长, 3

个晶体取向与温度梯度方向基本一致的枝晶超过了其他枝晶而得到了优先生长, 并逐渐生长出二次枝晶臂. 由于气相在固相中的固溶度远低于在液相中的固溶度, 随着枝晶的生长, 液相中的气含量不断增加, 当固相分数 f_s 达到约 6% 时, 过饱和的气相开始从液相中析出而形成气泡. 大多数气泡先在枝晶根部或二次枝晶臂之间形成 (图 6(a)), 这是因为在枝晶根部和二次枝晶臂之间由枝晶生长而释放出的气相原子不易扩散出去而使得这些位置的气相原子浓度较为富集. 随后, 析出的气泡不断吸收液相中的过饱和气体而长大. 不断生长的气泡受到狭窄二次枝晶臂的挤压而使气泡的曲率半径减小. 根据 (19) 式, 曲率半径越小, 气泡的内外压差越大. 驱使二次枝晶臂之间的气泡不断逸出迁移至空间较大的两个枝晶间的液相通道. 如图 6(a) 中箭头所指的气泡正从二次枝晶臂之间开始逸出. 在界面张力的作用下, 游离在液相中的气泡以圆形长大. 有时邻近的气泡会发生合并, 如图 6(b) 中箭头所指的两个气泡合并成图 6(c) 中箭头所指的气泡. 还有一个值得注意的现象是在枝晶间有气泡存在的附近不易形成新的气泡核心, 后续的新气泡一般在枝晶尖端前沿的固 - 液界面析出. 这是因为枝晶间液相中的过饱和气相原子被已存在的气泡所吸收, 而枝晶尖端的固 - 液界面前沿已存在的气泡很少, 液相分数多, 可提供较多的过饱和气相原子, 有利于形成新的气泡核心. 随着凝固的进行, 枝晶间的液相分数减少, 不断长大的气泡受到周围枝晶的挤压而变形, 使曲率半径减小, 气泡内压力增大, 气泡不断吸收液相中的过饱和气体原子又使气泡内的压力进一步增大. 当气泡压力足够大时, 受挤压变形同时又在长大的气泡突破周围枝晶的阻力, 沿着复杂的枝晶间的液相通道向液相空间较大的方向游动和跳跃, 如图 6(c) 中合并后的气泡从原来的位置移动跳跃至图 6(d) 中的位置, 并受挤压变形. 而有些气泡的运动被枝晶臂所阻挡而停留在原处. 另一方面, 气泡的存在也阻碍了邻近枝晶的继续生长. 上述这些枝晶生长和气泡的形成及运动之间的相互作用最终形成了在枝晶间不规则形状和分布的显微气孔形貌, 如图 6(e) 所示.

图 7 为透明材料环己烷定向凝固时枝晶和气泡生长随时间演化的实验结果. 实验条件为: 温度梯度为 5 K/mm, 抽拉速度为 $30 \mu\text{m/s}$. 从图 7 中可以看出, 在初始的凝固阶段为单纯的枝晶生长 (图 7(a)). 随着凝固的进行, 液相中的气体浓度增

大, 当液相中的浓度富集到一定程度时, 气泡开始形核析出. 因气泡形核速度非常快, 很难捕捉气泡形核的瞬间, 但也可观察到气泡一般在枝晶根部以近似圆形析出, 如图 7(b) 中新形成的气泡 I. 随着枝晶和气泡的同时生长, 圆形的气泡生长空间受到限制, 气泡沿着枝晶间生长, 运动, 变形. 邻近的气泡还会聚和在一起, 如图 7(c) 中气泡 II 是由数个气泡合并而成. 随后的凝固过程中会有更多的气泡析出、生长以及合并, 形成沿着枝晶间不规则分布的气孔形貌. 将图 6 的模拟结果与图 7 的实验结果相比较可以看出, 本模型的模拟结果可以揭示气泡在

枝晶生长过程中形成、生长与运动演化以及与枝晶相互作用的机理.

为了分析初始含气量对气泡形成以及生长的影响, 我们考察了不同初始气体含量时形成的气泡体积分数随时间的变化, 结果如图 8 所示. 从图 8 中可以看出, 气泡的出现有一个孕育期. 一旦气泡开始形核, 气泡的体积分数随时间而增长, 在凝固后期气泡的体积分数逐步趋于稳定. 气体的初始含量越高, 孕育期相对较短, 气泡的生长速度越快, 相应的气泡体积分数的增长速度也越快, 凝固结束时的气泡体积分数也相对较高.

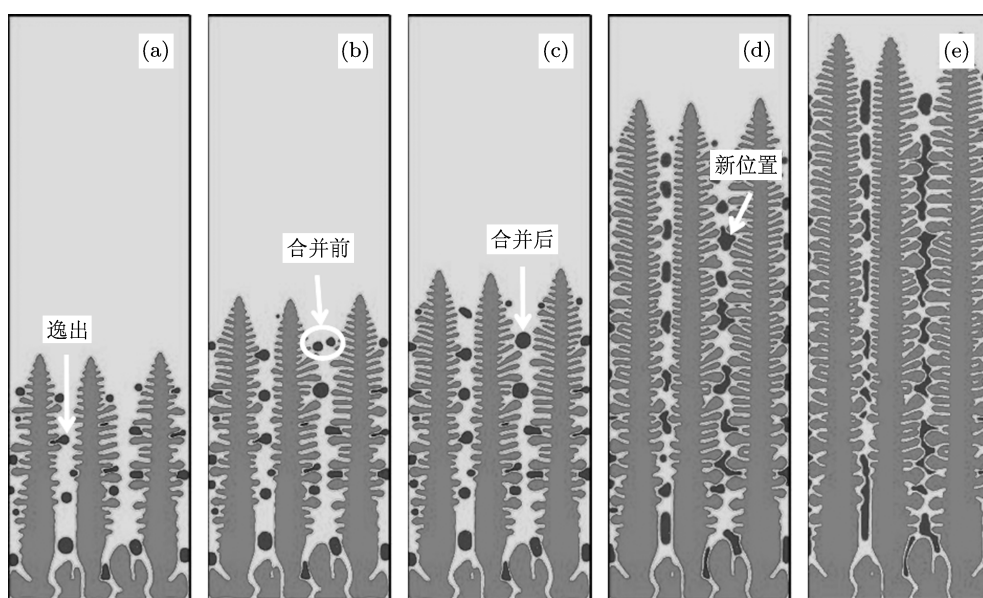


图 6 模拟的定向凝固时枝晶和气泡生长形貌演化 固相分数为 (a) 23%; (b) 30%; (c) 33%; (d) 55%; (e) 66%

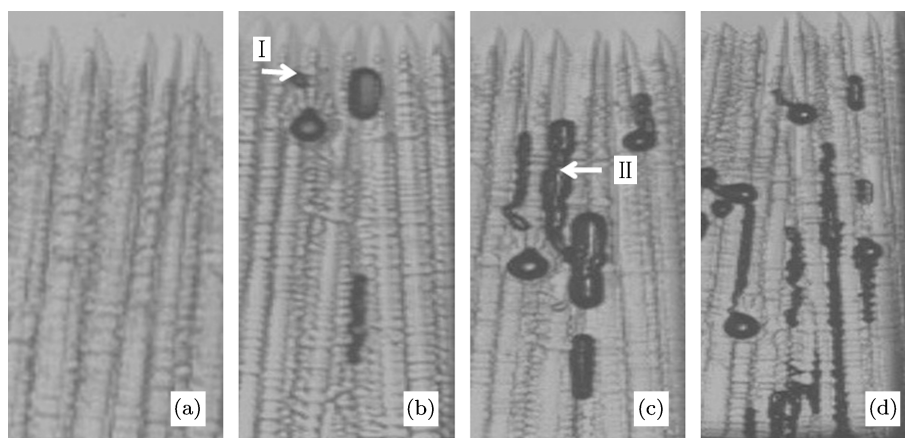


图 7 环己烷定向凝固时枝晶和气泡生长形貌随时间演化的实验结果 (a) 16 s; (b) 21 s; (c) 25 s; (d) 27 s

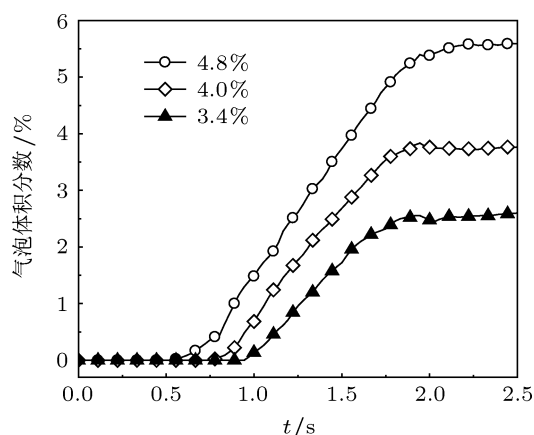


图8 不同初始气体含量时气泡的体积分数随时间的变化

4 结论

本文将多相流的 LBM 和 CA 方法相耦合, 建立了模拟枝晶和气泡生长的 LBM-CA 耦合模型. 通过模拟研究得到如下结论:

1. 模拟的气泡内外压强差 Δp 和气泡半径的倒数 $1/R$ 成线性正比关系, 与 Laplace 定律相符合. 此外, 随着气 - 液相互作用系数 G_c 的增大, Δp 与 $1/R$ 的比值也增大, 表明 G_c 与界面张力 γ 之间成正比关系.

2. 模拟了流 - 固相互作用系数对接触角的影响规律.

发现随液 - 固相互作用系数 G_{ls} 增大, 气相流体在固相表面的接触角逐渐减小, 即流体相与固相之间的润湿性逐渐增加. 模拟结果与基于杨氏方程所提出的的经验公式的计算结果符合良好.

3. 模拟分析了气 - 液相互作用系数 G_c 对单气泡生长的影响, 发现 G_c 越大, 气泡的生长速度越快, 气泡的最终平衡半径也越大.

4. 模拟了定向凝固时的枝晶和气泡生长. 结果表明, 当枝晶生长至一定的固相分数时, 气泡开始从液相中析出并长大. 游离在液相中的气泡以圆形长大, 邻近的气泡会发生合并. 不断长大的气泡受到周围枝晶的挤压而变形, 使气泡内的压力增大, 驱使气泡沿着复杂的枝晶间的液相通道向液相空间较大的方向跃迁. 这些现象的综合结果形成了气泡在枝晶间不规则的分布和形貌. 模拟结果和实验结果符合良好.

5. 初始含气量越高, 气泡开始析出的孕育期越短, 气泡体积分数的增长速度越快, 凝固结束时气泡的体积分数也相对较高.

作者感谢德国 Max-Planck-Institut fuer Eisenforschung 的 Dierk Raabe 教授为我们提供了计算单相流的 LBM 基础源代码和美国 Purdue 大学的 Qingyou Han 教授的有益讨论. 本文的透明材料定向凝固实验工作在西北工业大学凝固技术国家重点实验室进行.

- [1] Han Q Y 2006 *Scripta Mater.* **55** 871
- [2] Zhao L, Liao H C, Pan Y, Wang L, Wang Q G 2011 *Scripta Mater.* **65** 795
- [3] Atwood R C, Lee P D 2003 *Acta Mater.* **51** 5447
- [4] Dong S Y, Xiong S M, Liu B C 2004 *Mater Sci Technol.* **20** 23
- [5] Raabe D 2004 *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **12** R13
- [6] Guo Z L, Zheng C G 2009 *Theory and Applications of Lattice Boltzmann Method* (Beijing: Science Press) p9–10, 61–63 (in Chinese) [郭照立, 郑楚光 2009 格子 Boltzmann 方法的原理和应用 (第一版) (北京: 科学出版社) 第 9—10, 61—63 页]
- [7] Zeng J B, Li R J, Liao Q, Jiang F M 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 066401 (in Chinese) [曾建邦, 李隆键, 廖全, 蒋方明 2011 物理学报 **60** 066401]
- [8] Wang W X, Shi J, Qiu B, Li H B 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 8371 (in Chinese) [王文霞, 施娟, 邱冰, 李华兵 2010 物理学报 **59** 8371]
- [9] Wang J F, Liu Y, Xu Y S 2009 *Biomed Microdevices* **11** 351
- [10] Guo Z L, Asinari, Pietro, Zheng C G 2009 *Phys. Rev. E* **79** 026702
- [11] Sun D K, Zhu M F, Pan S Y, Raabe D 2009 *Acta Mater.* **6** 1755
- [12] Yin H, Felicelli S D, Wang L 2011 *Acta Mater.* **59** 3124
- [13] Selzer M, Jainta M, Nestler B 2009 *Phys. Status Solid B* **246** 1197
- [14] Zhou F M, Sun D K, Zhu M F 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 3394 (in Chinese) [周丰茂, 孙东科, 朱鸣芳 2010 物理学报 **59** 3394]
- [15] Li Q, Ma Y C, Liu K, Kang X H, Li D Z 2007 *Acta Metall. Sin.* **43** 217 (in Chinese) [李强, 马颖澈, 刘奎, 康秀红, 李殿中 2007 金属学报 **43** 217]
- [16] Shan B W, Lin X, Wei L, Huang W D 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1132 (in Chinese) [单博炜, 林鑫, 魏雷, 黄卫东 2009 物理学报 **58** 1132]
- [17] Huang H B, Thorne D T, Jr, Schaap M G, Sukop M C 2007 *Phys. Rev. E* **76** 066701
- [18] Shan X W 2006 *Phys. Rev. E* **73** 047701
- [19] Zhu M F, Stefanescu D M 2007 *Acta Mater.* **55** 1741
- [20] Sukop M C, Thorne D T, Jr 2005 *Lattice Boltzmann Modeling-An Introduction for Geoscientists and Engineers* (2nd ed) (New York: Springer) p114

Modeling of dendritic growth and bubble formation*

Wu Wei Sun Dong-Ke Dai Ting Zhu Ming-Fang[†]

(*Jiangsu Key Laboratory for Advanced Metallic Materials, Southeast University, Nanjing 211189, China*)

(Received 27 October 2011; revised manuscript received 30 December 2011)

Abstract

A two-dimensional (2D) lattice Boltzmann method (LBM)-cellular automaton (CA) coupled model is developed for the simulation of dendritic growth and bubble formation during solidification. In the model, the dendritic growth is simulated by a CA approach. The driving force of dendritic growth is determined by a local solute equilibrium approach. The LBM based on the Shan-Chen multiphase flow scheme is adopted to simulate the growth and the motion of bubbles in liquid. The interaction mechanism between dendrites and bubbles is embedded in the model. Model validation is carried out by comparing the simulations with the Laplace law, and by simulating the wettability of a bubble on a smooth solid surface. The proposed model is used to study the effect of gas-liquid interaction coefficient on single bubble growth. It is found that the growth velocity and the equilibrium radius of bubble increase with the gas-liquid interaction coefficient. The simulations of the dendritic growth and bubble formation during directional solidification reproduce the physical phenomena, including dendritic competitive growth, the preferential nucleation locations of bubbles, and bubble growth, coalescence, deformation due to the squeeze of neighboring dendrites, as well as bubble motion in the liquid channels. The simulation results are compared reasonably well with the experimental results. In addition, gas pore volume fraction increases with the initial gas content. The simulations of the present LBM-CA model provide an insight into the physical mechanism of bubble nucleation, growth, and motion, as well as the interaction between the dendritic growth and bubble formation during solidification.

Keywords: lattice Boltzmann method, cellular automaton, dendrite, bubble

PACS: 05.20.Dd, 81.10.-h

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50971042).

[†] E-mail: zhurf@seu.edu.cn