凝固前沿和气泡相互作用的大密度比格子 玻尔兹曼方法模拟^{*}

陈海楠1) 孙东科2) 戴挺1) 朱鸣芳1)*

1)(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)

2)(东南大学机械工程学院,南京 211189)(2013年1月17日收到;2013年3月3日收到修改稿)

建立了二维双组分两相流的大密度比格子玻尔兹曼方法 (lattice Boltzmann method, LBM) 模型. 该模型基于改进的 Shan-Chen 伪势多相流 LBM 模型,结合采用不同时间步长的方法,实现密度比达 800 以上的气液两相流模拟.为了对模型进行验证,模拟了在不同气液相互作用系数和密度比条件下气泡内外压力差与其半径之间的关系,其结果满足 Laplace 定律. 将所建立的大密度比 LBM 与介观尺度的元胞自动机 (cellular automaton, CA) 和有限差分法 (FDM) 相耦合,用 LBM 模拟气液两相流,用 CA 方法模拟固相生长,用有限差分法模拟温度场,采用 LBM-CA-FDM 耦合模型对定向凝固过程中凝固前沿的气泡与液 - 固界面之间的相互作用进行模拟研究. 结果表明,绝热气泡的存在影响了温度场分布,使得凝固前沿接近气泡时,液 - 固界面凸起,在不同的固相生长速度条件下,出现凝固前沿淹没气泡或气泡脱离凝固前沿的不同情况,模拟结果与实验结果符合良好.

关键词:格子玻尔兹曼方法,元胞自动机,凝固,气泡 PACS: 05.20.Dd, 81.30.Fb

DOI: 10.7498/aps.62.120502

1 引 言

在金属凝固过程中,由于气体组元在固-液相 中的溶解度不同,会伴随着凝固过程使液相溶解的 过饱和气体析出形成气泡.凝固结束后这些气泡就 成为凝固组织中的显微气孔缺陷,直接影响到材料 的力学性能.

凝固过程中气泡的产生及其与液 - 固界面的 相互作用现象和机制的研究吸引了材料科学和凝 聚态物理领域众多学者的兴趣.研究者们采用透 明合金原位观察^[1,2]或X射线实时观察技术^[3]开 展了相关的实验研究,发现气泡的运动以及与液 -固界面的相互作用对气泡的形貌和分布,以及液 -固界面的形貌有重要影响.但由于该物理过程的影 响因素多且相互作用关系复杂,开展精确定量实验 研究的难度较大,对其相互作用机制尚难以准确描 述. Hadji^[4]和 Kao 等^[5]建立了气泡表面和液-固 界面距离的计算公式,通过解析方法^[4]和数值边界 积分方法^[5]研究了定向凝固温度场条件下,气泡 存在对凝固前沿形貌的影响,以及热和溶质毛细管 作用与气泡运动之间的关系.但由于在凝固过程中 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,在理论分析中往往要 做很多的简化假设.例如在 Hadji^[4]和 Kao 等^[5]的 解析模型中,假定气泡形状是不变的球形,不考虑 Marangoni运动和边界的影响.此外,解析模型的分 析结果不能描述液-固界面以及气泡形状和位置的 动态变化.

随着计算机技术的发展,数值模拟技术成为材 料科学与工程领域不可或缺的研究手段. 学者们 提出了各种数值模型^[6-9]对凝固过程中的显微气 孔形成和演化进行模拟研究,但大多数模型都忽 略气泡的运动. Karagadde 等^[10]采用水平集方法

*国家自然科学基金(批准号: 50971042)和江苏省先进金属材料高技术研究重点实验室开放课题(批准号: AMM201005)资助的课题.

[†]通讯作者. E-mail: zhumf@seu.edu.cn

(level-set method, LSM), 模拟研究了单个气泡由于 氢气扩散而长大以及在浮力作用下的向上运动. 但 该模型仅考虑气液界面的变化, 而未考虑固相的 存在. 因此, 不能描述气泡和凝固界面的相互作用 关系.

格子 Boltzmann 方法 (LBM) 是近 20 年间发展 起来的一种新的流体力学数值模拟方法. 由于该 方法的微观本质和介观特点,以及可以处理复杂 的边界问题,非常适合多相流的模拟,因而受到广 泛的关注,近年来得到迅速发展,国内外学者们采 用多相流 LBM 模型对气液或液固系统中的各种 物理现象进行了模拟研究. 张新明等 [11] 采用基于 Shan-Chen 模型的单组分多相流 LBM 方法对水体 中的三维空化现象进行了数值模拟,成功再现了低 压下水体中微小气核发展成气泡的过程. 曾建邦 等^[12] 在单组分多相 LBM 模型的基础上耦合能量 方程,并考虑流体与固壁间的相互作用力来调节气 泡与固壁间的接触角,模拟了池沸腾中气泡生长过 程. Huang 等^[13]把 Shan-Chen 模型运用于气-液-固 三相系统,研究了气 - 液和气 - 固相互作用系数对 液滴在固相表面的润湿性的影响. Kim 等^[14] 和 Yu 等^[15]运用 LBM 方法模拟微型管道中的多相流,分 别研究了水-油体系中表面张力、水流速度对液 滴长度和液滴间距的影响和气 - 液体系中流体速 度、不同组合形状对气泡形状、尺寸、形成机制的 影响.本课题组的前期工作中基于 Shan-Chen 多相 流模型,建立了双组分两相流 LBM 和元胞自动机 (cellular automaton, CA) 的耦合模型,模拟了枝晶生 长和气泡形成运动的演化过程^[16].但是该模型中 的两相密度比低于 40. 这是因为一般的 Shan-Chen 多相流模型在相界面上的虚速度会随着两相密度 比的增大而增大,导致计算发散.

许多学者针对提高 LBM 多相流的密度比问题开展了大量的研究. Inamuro 等^[17]和 Yan 等^[18]基于自由能模型,计算密度比达 700—800 左右的 气液两相流,但存在计算效率低的问题. Yuan 和 Schaefer^[19]研究了不同状态方程对 Shan-Chen 模型在模拟大密度比两相流的影响.发现 Carnahan-Starling (C-S)和 Peng-Robinson (P-R)方程能模拟密度比达到 1000 的气液两相流.但该模型仅考虑单组分两相流的情况,且气泡是静止的. Liu 等^[20]在 文献 [19] 的研究基础上提出新的状态方程,并用改进的多组分多相流 Shan-Chen 模型模拟了密度比为 105 的气泡运动情况.但该模型仍采用单组分多

相流的格点速度进行计算. Sbragaglia 等^[21]提出了 改进的 Shan-Chen 伪势模型,通过考虑次邻近格点 的影响,使得模型中相互作用力可调节性增强,提 高了模拟计算的稳定性,但该模型所模拟的两相流 最大密度比仍仅为 100 左右.

本文在本课题组前期工作基础上^[22],引入 Sbragaglia 等^[21]提出的考虑次近邻格点对相互作 用力影响的思想,并结合采用不同时间步长的方法, 建立大密度比双组分气液两相流的 LBM 模型模拟 气泡的运动,用介观尺度的 CA 方法模拟固相生长, 用有限差分方法 (FDM) 模拟温度场,将三种方法进 行耦合,对定向凝固过程中液 - 固界面的形貌和气 泡运动及其相互作用进行模拟研究.

2 模型及算法

2.1 大密度比的双组分两相流 LBM 模型

本文采用 Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) 的单 松弛 Shan-Chen 伪势多相流 LBM^[23], 双组分气 - 液 两相流的 LB 演化方程为

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

式中 $\sigma = 1$ 与 $\sigma = 2$ 分别表示流体相的两个组分, $f_i^{\sigma}(x,t)$ 为 σ 组分的粒子分布函数, $f_i^{\sigma(eq)}(x,t)$ 为 σ 组分的平衡态分布函数, e_i 为粒子在i方向的运 动速度. 每个格点的离散速度可表示为

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

式中 c 为格子速度. (1) 式中的平衡分布函数 $f_i^{\sigma(eq)}(x,t)$ 由各组分的数密度 $\rho^{\sigma}(x,t)$ 和速度 $u^{\sigma}(x,t)$ 所确定:

$$f_{i}^{\sigma(eq)}(\boldsymbol{x},t) = \omega_{i}\rho^{\sigma}(\boldsymbol{x},t) \left[1 + \frac{3(\boldsymbol{e}_{i} \cdot \boldsymbol{u}^{\sigma}(\boldsymbol{x},t))}{c^{2}} + \frac{4.5(\boldsymbol{e}_{i} \cdot \boldsymbol{u}^{\sigma}(\boldsymbol{x},t))^{2}}{c^{4}} - \frac{1.5(\boldsymbol{u}^{\sigma}(\boldsymbol{x},t))^{2}}{c^{2}} \right], \quad (3)$$

式中 ω_i 为权重系数,在本文所采用的二维九速度 (D2Q9)的网格模型中,权重系数为 $\omega_0 = 0$, $\omega_{1-4} = 1/9$, $\omega_{5-9} = 1/36$. 流体的各组分的数密度 $\rho^{\sigma}(x,t)$,真实密度 $\rho^{\sigma}_{real}(x,t)$ 和速度 $u^{\sigma}(x,t)$ 满足以下关系式^[23]:

$$\rho^{\sigma}(\boldsymbol{x},t) = \sum_{i=0}^{8} f_{i}^{\sigma}(\boldsymbol{x},t),$$

$$\rho_{\text{real}}^{\sigma}(\boldsymbol{x},t) = m^{\sigma} \sum_{i=0}^{8} f_{i}^{\sigma}(\boldsymbol{x},t),$$
(4)

$$\rho^{\sigma}(\boldsymbol{x},t)\boldsymbol{u}^{\sigma}(\boldsymbol{x},t)$$
$$=\rho^{\sigma}(\boldsymbol{x},t)\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},t)+\tau^{\sigma}\boldsymbol{F}^{\sigma}(\boldsymbol{x},t), \qquad (5)$$

式中 m^{σ} 是 σ 组分流体的分子质量,u(x,t)为两组 分混合流体的速度,可由下式进行计算:

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},t) = \frac{\sum_{\sigma=1}^{2} \left(m^{\sigma} \sum_{i=0}^{8} \frac{f_{i}^{\sigma}(\boldsymbol{x},t)\boldsymbol{e}_{i}}{\tau^{\sigma}} \right)}{\sum_{\sigma=1}^{2} \frac{m^{\sigma}}{\tau^{\sigma}} \sum_{i=0}^{8} f_{i}^{\sigma}(\boldsymbol{x},t)}.$$
 (6)

(5) 式中的 **F**^σ(**x**,t) 项体现了粒子团间的相互作用, 由流 - 流作用力和流 - 固作用力两部分组成. 根据 Sbragaglia 等 ^[21,24] 提出的改进伪势多相流 LBM 模 型, 流 - 流作用力由下式计算:

$$F_{c}^{\sigma}(\boldsymbol{x},t) = -\psi^{\sigma}(\boldsymbol{x},t)\sum_{i=0}^{8}\omega_{i}\Big[G_{1}\psi^{\overline{\sigma}}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{e}_{i}) + G_{2}\psi^{\overline{\sigma}}(\boldsymbol{x}+2\boldsymbol{e}_{i})\Big]\boldsymbol{e}_{i}, \qquad (7)$$

式中 $\psi^{\sigma}(x,t)$ 表示 σ 相流体的有效密度, 它是流体 密度的函数, 在本文中取 $\psi^{\sigma}(x,t) = \rho^{\sigma}(x,t)$. 因子 $G_1 和 G_2 分别为最邻近和次邻近格点间气 - 液相互$ 作用系数. 流 - 固作用力由下式计算:

$$\boldsymbol{F}_{\mathrm{ads}}^{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{x},t) = -G_{\mathrm{ads}}^{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{\rho}^{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{x},t)\sum_{i=0}^{8}\omega_{i}s(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{e}_{i}\Delta t)\boldsymbol{e}_{i}, \quad (8)$$

式中 $s(x + e_i \Delta t)$ 是标示函数, 当固相和流体相时分 别取 1 和 0. G_{ads}^{σ} 为流 - 固之间的相互作用系数. 体 系总的作用力可用下式进行计算:

$$\boldsymbol{F}^{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{x},t) = \boldsymbol{F}_{c}^{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{x},t) + \boldsymbol{F}_{ads}^{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{x},t). \tag{9}$$

网格点处的局部压力可由流体的数密度和有效密 度进行计算,其表达式为

$$P(\boldsymbol{x},t) = \frac{\rho^{\sigma}(\boldsymbol{x},t)}{3} + \frac{(G_1 + 2G_2)}{6} \boldsymbol{\psi}^{\sigma}(\boldsymbol{x},t) \boldsymbol{\psi}^{\bar{\sigma}}(\boldsymbol{x},t). \quad (10)$$

基于上述的双组分两相流 LBM 模型,结合不同时间步长的方法建立大密度比的双组分两相流

LBM 模型. 其基本思想如下: 气、液双组分分别采 用不同时间步长 Δt^σ 进行迁移、碰撞和松弛计算. 在计算动量时考虑不同时间步长的影响, 混合流体 的速度由下式进行计算:

$$\boldsymbol{u}'(\boldsymbol{x},t) = \frac{\sum_{\sigma=1}^{2} \left(m^{\sigma} \sum_{i=0}^{8} \frac{f_{i}^{\sigma}(\boldsymbol{x},t)\boldsymbol{e}_{i}}{\tau^{\sigma}} \times \frac{1}{\Delta t^{\sigma}} \right)}{\sum_{\sigma=1}^{2} \frac{m^{\sigma}}{\tau^{\sigma}} \sum_{i=0}^{8} f_{i}^{\sigma}(\boldsymbol{x},t)}, \quad (11)$$

经过修正的 σ 组分的速度的表达式为

$$\boldsymbol{u}^{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{x},t) = \boldsymbol{u}'(\boldsymbol{x},t) \times \Delta t^{\boldsymbol{\sigma}} + \frac{\tau^{\boldsymbol{\sigma}} \boldsymbol{F}^{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{x},t)}{\boldsymbol{\rho}^{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{x},t)}.$$
 (12)

2.2 模拟固相生长的 CA 模型

在凝固过程中,固相生长的驱动力由液-固界面的过冷度决定.在 CA 模型中,液-固界面的过冷度由下式进行计算^[25,26]:

$$\Delta T(t_n) = T_m - T(t_n) + m \cdot C(t_n) - \Gamma(\theta)K, \quad (13)$$

式中 T_m 为纯物质熔点, m 为液相线斜率, $C(t_n)$ 为液 - 固界面的溶质成分, K 为界面曲率, $\Gamma(\theta)$ 为 Gibbs-Thomson 系数. K 和 $\Gamma(\theta)$ 由以下式子计算:

$$K = \left[\left(\frac{\partial f_{s}}{\partial x} \right)^{2} + \left(\frac{\partial f_{s}}{\partial y} \right)^{2} \right]^{-3/2} \times \left[2 \frac{\partial f_{s}}{\partial x} \frac{\partial f_{s}}{\partial y} \frac{\partial^{2} f_{s}}{\partial x \partial y} - \left(\frac{\partial f_{s}}{\partial x} \right)^{2} \frac{\partial^{2} f_{s}}{\partial y^{2}} - \left(\frac{\partial f_{s}}{\partial y} \right)^{2} \frac{\partial^{2} f_{s}}{\partial x^{2}} \right],$$
(14)

式中 f_s 为界面网格中的固相分数;

$$\Gamma(\theta) = \bar{\Gamma} \{ 1 - \delta_t \cos[4(\theta - \theta_0)] \}, \qquad (15)$$

式中 $\bar{\Gamma}$ 为平均 Gibbs-Thomson 系数, δ_i 为界面能的 各向异性强度系数, θ_0 为晶体的择优生长方向, θ 为固 - 液界面的法向方向和水平方向的夹角, 根据 下式计算

$$\boldsymbol{\theta} = \arctan\left(\frac{\partial f_{\rm s}}{\partial y} \middle/ \frac{\partial f_{\rm s}}{\partial x}\right). \tag{16}$$

采用传统的尖锐界面模型计算界面生长速度 V和过冷度之间的关系

$$V = \mu_k(\theta) \cdot \Delta T(t_n), \qquad (17)$$

式中 $\mu_k(\theta)$ 为界面动力学系数,由下面的式子计算:

$$\mu_k(\boldsymbol{\theta}) = \bar{\mu}_k \left\{ 1 + \delta_k \cos\left[4(\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}_0)\right] \right\}, \quad (18)$$

式中 $\bar{\mu}_k$ 为平均界面动力学系数, δ_k 为动力学各向 异性强度系数.界面网格在一个时间步长内固相分 数的增长由下式计算:

$$\frac{\Delta f_{\rm s}}{\Delta t} = g \frac{V}{\Delta x},\tag{19}$$

g为与邻位网格状态有关的几何参数,由下式进行 计算:

$$g = \min\left[1, \frac{1}{2}\left(\sum_{m=1}^{4} S_{m}^{\mathrm{I}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{m=1}^{4} S_{m}^{\mathrm{II}}\right)\right],$$

$$S_{m}^{\mathrm{I}}, S_{m}^{\mathrm{II}} = \begin{cases} 0, & f_{s} < 1, \\ 1, & f_{s} = 1. \end{cases}$$
(20)

式中 S_m^{I} 为最近邻的 4 个网格的状态参数, S_m^{II} 为次 近邻的 4 个网格的状态参数.

2.3 模拟温度场的有限差分法

本模型中忽略对流和凝固潜热的作用,热传导的控制方程为^[27]

$$\rho C_{\nu} \frac{\partial T}{\partial t} = \boldsymbol{\nabla} \cdot (\boldsymbol{\lambda} \ \boldsymbol{\nabla} T), \qquad (21)$$

式中 ρ 为密度, C_v 为热容, λ 为导热系数. 采用显式 有限差分法对 (21) 式进行离散求解, 气泡与液相之 间采用绝热边界条件, 计算区域左右边界采用无扩 散边界条件, 上下边界采用恒定温度的边界条件.

2.4 模型的耦合

将 2.1—2.3 节所介绍的大密度比气液两相流 LBM 模型、模拟固相生长的 CA 模型和模拟温度 场的有限差分法用下述方法进行耦合.

1)用(21)式计算某个时刻区域内的温度分布.

2) 由 (13)—(16) 式计算液 - 固界面的局部过冷 度, (13) 式中的液 - 固界面局部温度 *T*(*t_n*) 由 (21) 式 的温度场计算而得, 本文模拟固相生长的 CA 模型 不考虑溶质浓度场的变化.因此, (13) 式中的 *C*(*t_n*) 即为初始成分 *C*₀. 然后, 用 (17)—(20) 式计算凝固 界面的固相生长速度.

3) 用耦合温度场的 CA 模型模拟固相生长,用 (1)—(5) 式和 (11)—(12) 式所描述的大密度比气 -液两相流 LBM 模型模拟气泡的运动. 气、液流体 的分布函数遇到固相后发生相互作用力,作用在流 体上的力由 (7)—(9) 式进行计算,根据这一作用力 计算出新的气 - 液两相流体的演化分布函数.

3 模型验证

3.1 两相密度比

首先模拟分析了不同条件下的两相密度比. 在划分为 $60 \times 60 \ln^2$ (lattice unit) 的计算区域中心 位置水平放置一个静止的气泡, 其初始半径设为 $R_0 = 10 \ln$, 采用周期性边界条件. 组分 1 和 2 的分 子质量 m^{σ} 分别为 1.2 和 0.0005. 在液相中组分 1 和 2 的体积分数分别为 0.95 和 0.05. 在气相中, 组 分 1 和 2 的体积分数分别为 0.01 和 0.99. 图 1 为计 算进行 40000ts (ts 为无量纲时间步长) 时的气泡和



图 1 时间为 40000*ts* 时气泡和密度分布曲线 (a) $G_1 = 2.5$, $G_2 = 0$, $\Delta t^1/\Delta t^2 = 1$ 条件下的气泡 (深色为液相, 浅色为气相); (b), (c), (d) 为 y = 30 lu 处的密度分布曲线; (b) 固定 $G_2 = 0.4$ 和 $\Delta t^1/\Delta t^2 = 10$, 改变 G_1 ; (c) 固定 $G_1 = 0.4$ 和 $\Delta t^1/\Delta t^2 = 10$, 改 变 G_2 ; (d) 固定 $G_1 = 0.4$ 和 $G_2 = 1.5$, 改变 $\Delta t^1/\Delta t^2$

和密度的分布曲线. 在图 1(a) 中, 深色代表液相, 浅 色代表气泡. 图 1(b), (c), (d) 为不同的相互作用系 数 G_1 和 G_2 , 以及不同时间步长比 $\Delta t^1/\Delta t^2$ 条件下 在纵坐标中心位置的水平线上两组分和密度的分 布图. 表 1 为不同相互作用系数和时间步长比条 件下模拟所得的密度比. 由图 1(b) 和 (c) 可以看出, 随着气 - 液相互作用系数 G_1 和 G_2 的增加, 气 - 液 两组分分离更加明显, 气泡半径变大, 气液两相密 度比也增大. 由表 1 可以看出在 $G_1 = 0.4$, $G_2 = 1.8$, $\Delta t^1/\Delta t^2 = 10$ 时液相区密度为 1.153, 气相区密度为 0.00137, 此时两相密度比达 841.6. 由图 1(d) 可以 看出,随着时间步长比的增大, 模型适用的密度比 范围也随之增大.

表 1	相互作用系数和时间步长比对密度比的影响

		液相密度 ρ_1	气相密度 ρ_2	密度比 (ρ_1/ρ_2
$C_{-0.4}$	$G_1 = 1.0$	1.099	0.01220	90.1
$O_2 = 0.4$ At ¹ /At ² = 10.0	$G_1 = 1.5$	1.124	0.00289	388.9
$\Delta t / \Delta t = 10.0$	$G_1 = 2.0$	1.134	0.00171	663.2
$C_{-0.4}$	$G_2 = 0.8$	1.121	0.00586	191.3
$O_1 = 0.4$ At ¹ /At ² = 10.0	$G_2 = 1.0$	1.137	0.00220	516.8
$\Delta t / \Delta t = 10.0$	$G_2 = 1.8$	1.153	0.00137	841.6
$C_{-0.4}$	$\Delta t^1 / \Delta t^2 = 1.0$	1.154	0.11700	9.9
$O_1 = 0.4$	$\Delta t^1 / \Delta t^2 = 5.0$	1.147	0.00313	366.5
$0_2 = 1.3$	$\Delta t^1 / \Delta t^2 = 10.0$	1.157	0.00140	826.4

3.2 虚速度

在多相流的 LBM 模拟过程中, 在不同密度的 两个流体相界面附近会产生一种现实情况下不存 在的虚速度. 虚速度的出现会影响界面数值计算的 稳定性. 随着两相密度比的增大, 虚速度明显增大, 导致计算发散. 这一问题严重制约了 LBM 在大密 度比多相流中的应用.我们针对虚速度问题,将本 文的改进模型和原先的 Shan-Chen 多相流模型进 行测试比较. 在划分为 60×60 lu² 的计算区域中 心位置水平放置一个静止的气泡,其初始半径设为 $R_0 = 10$ lu, 采用周期性边界条件. 原先的 Shan-Chen 多相流模型取气 - 液相互作用系数 G = 2.0, 两组 分相同的时间步长 $\Delta t^1 / \Delta t^2 = 1$; 本文的改进模型取 $G_1 = 0.4, G_2 = 1.5, \Delta t^1 / \Delta t^2 = 10$, 计算结果如图 2 所 示. 由图 2(a) 可以看出, 原先 Shan-Chen 模型所模 拟的两相密度低于 10. 若增加密度比,则 LBM 计 算发散.因此,只适用于低密度比的两相流模拟.另 一方面,在本文改进模型的数值计算中,最大虚速 度随着密度比的增大呈现增大趋势.在密度比为 826.4 时仍然能稳定地计算,相应的最大虚速度为 0.0334,与原先 Shan-Chen 多相流模型在密度比低 于 10 时的最大虚速度为相同水平.



图 2 不同密度比情况下的最大虚速度 (a) 原来的 Shan-Chen 模型, G = 2.0; (b) 本文改进的 Shan-Chen 模型, $G_1 = 0.4$, $G_2 = 1.5$, $\Delta t^1 / \Delta t^2 = 10$

3.3 Laplace 验证

将单气泡的模拟结果与 Laplace 定律进行比较,对大密度比气 - 液两相流 LBM 模型进行验证. Laplace 定律描述气泡内外压差 ΔP 和表面张力 γ 以及气泡半径 R 之间关系,在二维情况下 Laplace 定律由下式表示:

$$\Delta P = \frac{\gamma}{R},\tag{22}$$

式中 γ 为表面张力, R 为气泡半径. 表面张力 γ 与 LBM 模型中的气、液的相互作用系数 G_1 和 G_2 的 大小相关. 通过考察 ΔP 与 1/R 是否成线性关系来 验证气 - 液两相流 LBM 模型的正确性.

在划分为 100×100 lu² 的计算区域中心位置放 置一个静止气泡, 其初始半径设为 $R_0 = 5.5$ lu, 取 $\Delta t^1/\Delta t^2 = 10$, 计算时间为 40000ts, 采用周期性边界 条件, 两组分初始条件与图 1 中的相同. 图 3 为不 同气 - 液相互作用系数和不同密度比时气泡内外压 差 ΔP 与半径倒数 1/R 之间的关系. 从图中可以看 出 ΔP 与 1/R 成线性关系, 表明本文改进模型满足 Laplace 定律. 此外, 由图 3 还可看出, 随着相互作用 系数 G_1 和两相密度比 ρ_1/ρ_2 的增大, ΔP 与 1/R 的 线性斜率也增大. 根据 (22) 式, 图 3 中的斜率代表 了界面张力 γ . 说明界面张力 γ 随气 - 液相互作用 系数和两相密度比的增大而增大.



图 3 气泡内外压力差与气泡半径的关系 (a)两相密度比 $\rho_1/\rho_2 = 39.4$ 和不同的相互作用系数; (b) $G_1 = 1.9, G_2 = 0.2$ 和 不同的两相密度比

4 定向凝固过程中凝固前沿和气泡的 相互作用

在定向凝固过程中, 当凝固前沿接近气泡时, 气泡与凝固前沿产生相互作用, 凝固前沿的形貌 将发生变化, 气泡也随着凝固前沿的移动被吞没 或脱离凝固前沿. 应用所建立的 LBM-CA-FDM 模型对定向凝固过程中凝固前沿与气泡的相互 作用进行模拟. 用 CA 方法模拟固相生长. 模拟 的物性参数为: T_m = 933.6 K, m = -2.6 K/(mass%), $\bar{\Gamma}$ = 2.4 × 10⁻⁷ m·K, $\bar{\mu}_k$ = 0.008 m/(s·K), δ_t = 0.5, δ_k = 0.5, λ = 192.5 W/(m·K), ρ = 2870 kg/m³, C_v = 1086 J/(kg·K). 用双组分气 - 液两相流 LBM 模拟气 泡的演化. 取气液相互作用系数 G₁ = 0.4, G₂ = 1.0, $\Delta t^1 / \Delta t^2 = 10$,其他模拟条件与图 1 相同.在此条 件下,两相密度比约为500.将模拟区域划分为 100×200 的均匀正方格子, 网格尺寸为 40 µm. 在 模拟开始时,把计算区域的右侧一层设置为固相. 在计算区域中心放置一个半径为 800 μm 的气泡. 计算区域上下采用周期性边界条件,左右两边采用 反弹边界. 取液固相互作用系数 G_{ls} = -0.5, 气 - 固 相互作用系数 Ggs = 0.5, 此时, 气 - 固之间接触角接 近 122°. 用 FDM 进行温度场计算, 其计算条件为: 区域上下边界采用无扩散边界条件, 左右边界采用 给定温度的第一类边界条件,左右边界的温度分别 为 953 和 880 K. 设定气泡初始温度为 850 K, 液相 和气泡之间为绝热边界条件. 液 - 固界面的推移速 度为 23.6 µm/s, 其模拟结果如图 4 所示. 当凝固前 沿与气泡接触之前, 气泡呈圆形状. 液 - 固界面在中 部 (与气泡同一水平位置) 略微凸出 (图 4(a)). 这是 因为气泡的存在影响了凝固前沿的温度场.随时间 推移, 气泡略微长大, 凝固前沿与气泡接触并与其 竞争生长时, 气泡沿固相生长方向产生变形, 呈椭 圆形状 (图 4(b)). 凝固前沿越过气泡后, 气泡的左侧 呈圆锥状 (图 4(c)). 这是由于固相生长速度较快, 在 气泡与固相生长竞争时,固相的生长占据优势,气 泡被固相捕获. Catalina 等^[7] 通过 X 射线实时观察 技术研究纯铝定向凝固过程,在实验中也观察到类 似的结果.

图 5 为模拟的温度场分布演化情况.由于凝固 界面前沿绝热气泡的存在使温度场分布发生变化, 温度分布等值线朝着气泡方向凸起 (图 5(a)).这是 由于左端高温热源向右传热时受到绝热气泡的阻 碍,导致气泡右方温度偏低,而在气泡左方温度偏 高,温度等值线向气泡方向凹陷 (图 5(b)).根据 (13) 式,温度越低,过冷度越大,即凝固的驱动力越大, 使与气泡右边相同水平部位的液 - 固界面生长加 快.因此,凝固前沿向着气泡方向凸起.

采用环己烷透明材料对水平定向凝固过程中 气泡和凝固前沿的相互作用进行原位实验观察.透 明合金定向凝固装置采用高精度低温恒温槽控制 高低温端温度.温度梯度为 3 K/mm,试样盒的抽拉 速度为 32 μm/s. 图 6 为透明合金定向凝固的实验 结果.图 6(a)中一个圆形气泡存在液相中,液-固界 面的中部也略凸出.但没有图 4(a)中的模拟结果那 样明显,这有可能是因为在实验中该气泡在凝固前 沿出现的时间较短,在图 6(a)的时刻该气泡对凝固 前沿的温度场影响还不明显.随着液-固界面与气泡的接触并竞争生长,气泡长大并变成椭圆形(图 6(b)). 当凝固前沿越过气泡时,气泡的左侧呈现圆锥状(图 6(c)).比较图 4 和图 6 可以发现,模拟的凝固前沿和气泡的相互作用演化过程基本一致.

随着液 - 固界面推移速度的变化, 气泡被捕获 后的形貌会发生变化. 将液 - 固界面的推移速度设 定为 15.7 μm/s, 其他模拟条件与图 4 相同, 其模拟 结果如图 7 所示. 由图可见, 凝固前沿与气泡接触 后,两者竞争生长,气泡左侧出现缩颈,气泡形状发 生变化,由于绝热气泡对温度场的影响,凝固前沿 产生弯曲(图 7(a)).随后由于液 - 固界面推移速度 减慢,气泡吸收凝固过程中分离出的气相,使气泡 得以长大(图 7(b)).凝固前沿越过气泡后,气泡停留 在固相中,形成不规则葫芦状气孔,由于温度场受 绝热气孔影响减小,凝固前沿形貌趋于平直,气孔 的左侧呈现圆锥状(图 7(c)),其原因与图 4 相同.



图 4 凝固速度较快条件下定向凝固前沿与气泡相互作用的模拟结果 (a) 凝固前沿与气泡接触前; (b) 固相和气泡竞争生长; (c) 气泡被固相吞没





图 5 气泡对凝固前沿温度场的影响 (a) 3.83 s; (b) 14.44 s



图 6 透明合金定向凝固原位观察实验结果 (a) 凝固前沿与气泡接触前; (b) 固相和气泡竞争生长; (c) 气泡被固相吞没



图 7 模拟的气泡与凝固前沿竞争生长 (a) 气泡左侧出现缩颈; (b) 气泡缩小后又长大; (c) 气泡被凝固界面吞没

图 8 为环己烷透明材料定向凝固原位实验观察结果,温度梯度为 3 K/mm,试样盒的抽拉速度为 24 μm/s. 由图可以看出,气泡与凝固前沿竞争生长,气泡向左侧延伸,气泡直径减小后又长大 (图 8(a)).随后气泡又被凝固前沿吞没,形成气孔,气孔呈现葫芦状的形态 (图 8(b)),与图 7 的模拟结果很相近.



图 8 气泡与凝固前沿竞争生长的实验结果 (a) 气泡缩小后 又长大; (b) 气泡被凝固界面吞没

如前所述, 气泡在与液 - 固界面相互作用过程 中, 其形状和体积均发生了变化. 我们考察了图 4 和图 7 两种不同生长速度情况下气泡体积分数随 时间的变化, 以气泡与液 - 固界面接触为时间的起 始点, 结果如图 9 所示. 由图可以看出, 当凝固速度 为 23.6 µm/s 时, 随着时间推移, 气泡体积逐渐增大, 这是由于气泡中吸收了在凝固过程释放出的气相 组元. 当液 - 固界面越过气泡, 气泡被固相捕获而形 成气孔, 其体积不再变化. 当凝固速度为 15.7 µm/s 时, 气泡与液 - 固界面接触后同样呈现增大的趋势, 并且由于凝固速度的减慢, 气泡与凝固界面的作用 时间延长, 气泡能吸收更多的气相, 使气泡生长速 度加快. 在约 98 s 时气泡出现缩颈, 气泡在短时间 内快速长大, 随后凝固界面越过气泡, 形成图 7 中 的葫芦状形貌, 气泡体积分数不再发生变化.

随后我们模拟了纵向定向凝固时液-固界面和 气泡的相互作用演化过程.计算区域由100×400的 均匀正方格子所组成.在模拟开始时,把计算区域 的最下一层设置为固相.取 *G*_{ls} = -0.5, *G*_{gs} = 0.5. 温度场计算的区域左右边界采用无扩散边界条件, 上下边界采用给定温度的第一类边界条件,上下边 界的温度分别为 953 和 905 K. 液 - 固界面的推移 速度为 3.1 μm/s. 其他模拟条件与图 4 的相同. 图 10 为纵向定向凝固时气泡与凝固前沿相互作用的 模拟结果. 由图 10 可以看出, 当液 - 固界面与气泡 相距较远时, 气泡呈圆形, 液 - 固界面基本保持平直 (图 10(a)). 随着凝固的进行, 当凝固前沿接近气泡 时, 受气泡附近温度场的影响, 液 - 固界面向着气泡 方向凸起, 呈现"驼峰"状. 当凝固前沿与气泡相遇 后, 固相围绕气泡生长 (图 10(b)), 气泡受到液 - 固 界面的作用力发生变形, 并被推离凝固前沿,略向 上弹起 (图 10(c)).



图 9 气泡体积分数随时间的变化

图 11 为赵磊^[28] 对 A356 铝合金在纵向定向凝 固时气泡和凝固界面前沿相互作用的 X 射线实时 观察结果. 图 11 的实验结果也显示出凝固前沿在 与气泡的接触前后从平直界面演化成类似"驼峰" 的形貌. 另一方面, 气泡存在于液相中为球状, 与凝 固前沿接触后发生变形, 随后弹起脱离液 - 固界面 (图 11 (c)).

出现图 4, 图 7 和图 10 中不同的情况, 是由 于凝固前沿的生长速度所造成的影响. 在图 4 中, 液 - 固界面向前推移速度较快, 液 - 固界面和气泡 的相互作用时间较短, 通过两者间的竞争生长, 凝 固前沿吞没气泡, 形成气孔. 在图 7 中, 液 - 固界面 推移速度减慢, 液 - 固界面和气泡作用时间延长, 液 - 固界面和气泡竞争生长, 形成不规则葫芦状的 气孔. 随着固相生长速度进一步减慢, 导致凝固前 沿与气泡间有足够的时间发生相互作用, 由于气相 与固相之间不润湿, 两者发生排斥, 固相不能捕获 气泡, 气泡被凝固前沿推开, 出现图 10 的结果. 因 此, 在定向凝固过程中, 控制适当的凝固速度有利 于将气泡排出固相之外, 获得致密的凝固组织.



图 10 凝固速度较慢条件下定向凝固前沿与气泡相互作用的模拟结果 (a) 凝固前沿与气泡接触前;(b) 液 - 固界面与气泡 接触后呈现"驼峰"状;(c) 气泡与液 - 固界面相互作用而变形并被推离液 - 固界面



图 11 定向凝固前沿与气泡相互作用的 X 射线实时观察实验结果^[28] (a) 凝固前沿与气泡接触前; (b) 凝固前沿与气泡接 触后呈现"驼峰"状; (c) 气泡受液 - 固界面影响而变形并被推离液 - 固界面

5 结论

本文基于改进的 Shan-Chen 伪势模型, 建立了 大密度比的气 - 液两相流 LBM 模型. 将大密度比 的两相流 LBM 和 CA 方法以及 FDM 相耦合, 建立 了 LBM-CA -FDM 耦合模型, 对定向凝固过程中凝 固界面和气泡相互作用进行模拟研究, 得到如下结 论.

1) 基于 Shan-Chen 伪势多相流 LBM 模型, 引入 Sbragaglia 等^[21] 提出的考虑次邻近格点的影响, 并采用两组分不同时间步长的方法, 建立大密度比 的气液两相流 LBM 模型. 随气 - 液相互作用系数 和时间步长比的增大, 气液两相密度比增大. 本文 的改进模型所模拟的运动和静止的气泡密度比分 别可达 500 和 800 以上.

2) 模拟分析了相界面处虚速度随密度比的变化. 发现虚速度随着两相间密度比的增大而增大. 本文的改进模型在两相密度比为 800 左右时的界面虚速度与原先的 Shan-Chen 模型在两相密度比 低于 10 时的虚速度相当, 表明本文的改进模型显 著提高了大密度比两相流的数值计算稳定性.

3) 模拟的单气泡内外压力差 ΔP 和半径倒数 1/R 成线性关系, 符合 Laplace 定律. 随着气 - 液两 相之间相互作用系数和两相密度比的增大, 气泡内 外的压力差增大.

4) 将大密度比的气 - 液两相流 LBM 模型与模 拟固相生长的 CA 方法以及模拟温度场的 FDM 相 耦合, 对凝固过程中液 - 固界面和气泡运动及其相 互作用进行模拟研究. 结果表明, 在凝固前沿接近 气泡时, 受气泡附近温度场的影响, 凝固前沿接近 气泡时, 受气泡附近温度场的影响, 凝固前沿逐步 凸起, 当凝固前沿与气泡相遇后, 随固相生长速度 从高到低变化, 凝固界面与气泡的相互作用变化趋 势为: 固相吞没气泡、固相和气泡竞争生长而形成 不规则气孔形貌、气泡被推离凝固前沿.

感谢德国 Max-Planck-Institut fuer Eisenforschung 的 Dierk Raabe 教授为本文提供了计算单相流的 LBM 基础 源代码和南京理工大学赵磊博士的有益讨论.

- [1] Han Q Y 2006 Scripta Mater. 55 871
- [2] Xing H, Wang J Y Chen C L Shen Z F, Zhao C W 2012 J. Cryst. Growth 338 256
- [3] Zhao L, Liao H C, Pan Y, Wang L, Wang Q G 2011 Scripta Mater. 65 795
- [4] Hadji L 2007 Phys. Rev. E 75 042602
- [5] Kao J C T, Golovin A A, Davis S H 2009 J. Fluid Mech. 625 299
- [6] Atwood R C, Lee P D 2003 Acta Mater. 51 5447
- [7] Catalina A V, Stefanescu D M, Sen S, Kaukler W F 2004 Metall Mater. Tran. A 35A 1525
- [8] Feng S D, Zhao Y, Gao X L, Ji Z Z 2002 Chin. Phys. Lett. 19 814
- [9] Yu Z Q, Zhang Z, Zhang B T 2002 Chin. Phys. Lett. 11 771
- [10] Karagadde S, Sundarraj S, Dutta P 2009 Scripta Mater. 61 216
- [11] Zhang X M, Zhou C Y, Islam S, Liu J Q 2009 Acta Phys. Sin. 58 8046 (in Chinese) [张新明,周超英, Islam S, 刘家琦 2009 物理学报 58 8046]
- [12] Zeng J B, Li L 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]
- [13] Huang H, Thorne Jr D T, Schaap M G, Sukop M C 2007 Phys. Rev. E 76 066701
- [14] Kim L S, Jeong H K, Ha M Y, Kim K C 2008 J. Mech. Sci. Technol. 22 770
- [15] Yu Z, Hemminger O, Fan L S 2008 Chem. Eng. Sci. 62 7172

- [16] Wu W, Sun D K, Dai T, Zhu M F 2012 Acta Phys. Sin. 61 150501 (in Chinese) [吴伟, 孙东科, 戴挺, 朱鸣芳 2012 物理学报 61 150501]
- [17] Inamuro T, Ogata T, Tajima S, Konishi N 2004 J. Comput. Phys. 198 628
- [18] Yan Y Y, Zu Y Q 2007 J. Comput. Phys. 227 763
- [19] Yuan P, Schaefer L 2006 Phys. Fluids 18 042101
- [20] Liu M, Yu Z, Wang T, Wang J, Fan L S 2010 Chem. Eng. Sci. 65 5615
- [21] Sbragaglia M, Benzi R, Biferale L, Succi S, Sugiyama K, Toschi F 2007 Phys. Rev. E 75 026702
- [22] 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]
- [23] Shan X, Chen H 1993 Phys. Rev. E 47 1815
- [24] Zhang J 2011 Microfluid Nanofluid 10 1
- [25] Yang Z R, Sun D K, Pan S Y, Dai T, Zhu M F 2009 Acta Metall. Sin.
 45 43 (in Chinese) [杨朝蓉, 孙东科, 潘诗琰, 戴挺, 朱鸣芳 2009 金 属学报 45 43]
- [26] Li Q, Li D Z, Qian B N 2004 Acta Phys. Sin. 53 3477 (in Chinese) [李强, 李殿忠, 钱百年 2004 物理学报 53 3477]
- [27] Yang Z R 2009 M. S. Dissertation (Nanjing: Southeast University) (in Chinese) [杨朝蓉 2009 硕士学位论文 (南京: 东南大学)]
- [28] Zhao L 2012 Ph. D. Dissertation (Nanjing: Southeast University) (in Chinese) [赵磊 2012 博士学位论文 (南京: 东南大学)]

Modeling of the interaction between solidification interface and bubble using the lattice Boltzmann method with large density ratio^{*}

Chen Hai-Nan¹⁾ Sun Dong-Ke²⁾ Dai Ting¹⁾ Zhu Ming-Fang^{1)†}

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

2) (School of Mechanical Engineering, Southeast University, Nanjing 211189, China)

(Received 17 January 2013; revised manuscript received 3 March 2013)

Abstract

A two-dimensional (2D) two-component and two-phase lattice Boltzmann method (LBM) with large density ratio is developed based on a modified Shan-Chen pseudopotential model combined with the deferent time step method. The present LBM model can simulate the gas-liquid two-phase flow with density ratio up to around 800. To validate the model, the pressure difference between the inside and outside of a bubble varying with its radius is simulated with different gas-liquid interact parameters and density ratios. The results are found to obey the Laplace law. Then, the LBM is coupled with the cellular automaton (CA) method used for simulating the solid phase growth, and the finite difference method (FDM) used for calculating the temperature field. The LBM-CA-FDM coupled model is used to simulate the interaction between bubble and the solidification interface. The results show that the existence of adiabatic bubble influences the distribution of temperature field in front of solidification interface, which leads to a bulge of the solid-liquid interface when it is close to the bubble. Under the conditions of different growth rates, the bubble is either engulfed or pushed away by the growing solid-liquid interface. The simulation results agree reasonably well with those observed experimentally.

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

PACS: 05.20.Dd, 81.30.Fb

DOI: 10.7498/aps.62.120502

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50971042) and the Jiangsu Key Laboratory for Advanced Metallic Materials, China (Grant No. AMM201005).

[†] Corresponding author. E-mail: zhumf@seu.edu.cn