文章编号:1673-5196(2016)04-0016-07

强迫对流影响枝晶生长的三维相场法模拟 路 ^{阳1,2}, 王刚刚¹, 冯 力^{1,2}, 朱昶胜², 胡海皇¹

(1. 兰州理工大学 材料科学与工程学院,甘肃 兰州 730050; 2. 兰州理工大学 省部共建有色金属先进加工与再利用国家重点实验室,甘肃
 兰州 730050)

摘要:将计算流体的三维模型与模拟枝晶生长的三维相场模型进行耦合,建立强迫对流环境下枝晶等温生长的三 维 PF-LBM 模型,以 Al-Cu 合金为例研究液态金属流动时枝晶的生长行为、不同流速下枝晶的生长行为并在相同 模拟参数条件下将三维模拟与二维模拟进行对比.结果表明:液态金属的流动显著改变了三维枝晶原有的对称生 长形貌.不同流速下枝晶的生长形貌和溶质场分布不同,流动速度越大,迎流方向主枝晶越粗,逆流方向主枝晶越 细.流动速度对尖端曲率半径的影响大于对尖端生长速度的影响,大的流动速度对逆流方向枝晶的影响比对迎流 方向枝晶影响严重.三维模拟中液态金属的流动状况比二维模拟中复杂;相同模拟参数下三维模拟中液态金属的 流动对枝晶生长的影响比二维模拟中影响大.

关键词: PF-LBM 模型; 等温生长; 强迫对流; 生长速度

中图分类号: TG21 文献标志码: A

Simulation of dendrite growth under influence of forced convection with three-dimensional phase-field method

LU Yang^{1,2}, WANG Gang-gang¹, FENG Li^{1,2}, ZHU Chang-sheng², HU Hai-huang¹

(1. College of Materials and Engineering, Lanzhou Univ. of Tech., Lanzhou 730050, China; 2. State Key Laboratory of Advanced Processing and Recycling of Nonferrous Metals, Lanzhou Univ. of Tech., Lanzhou 730050, China)

Abstract: A three-dimensional PF-LBM model was established by coupling three-dimensional model for computational fluid and three-dimensional phase field model of dendritic crystal growth to simulate the iso-thermal growth of dendritic crystal in the condition of forced convection. Taking Al-Cu alloy as an example, the dendritic crystal growth behavior in liquid metal flow with different velocity was investigated. Under the condition of identical simulation parameters, the two-dimensional simulation was compared with the three-dimensional one. The results indicated that the original symmetric growth morphology of three-dimensional dendritic crystal would be changed noticeably by the current of liquid metal. Dendritic crystal morphologies and solute field distributions were different under different flow velocities. When the flow velocity increased, the principal dendritic crystal would become thicker downstream and thinner upstream. The flow velocity of liquid metal had more effect on radius of curvature of tip than growing velocity of it and high flow velocity would have more effect on dendritic crystal upstream than downstream. The current of liquid metal in three-dimensional simulation was more complicated than that of two-dimensional simulation; the current of liquid metal would have more effect on dendritic crystal growth in three-dimensional simulation.

Key words: PF-LBM model; isothermal growth; forced convection; growth speed

在实际凝固过程中液态金属的流动会影响枝晶 生长界面前沿的溶质场和温度场分布,最终对枝晶 的生长形貌产生重要影响^[1].采用相场法模拟研究 枝晶生长,不仅有利于在描述凝固过程中界面的移 动和固液界面的形态时,避免了对复杂固液界面的 跟踪,而且能耦合流场,溶质场,温度场等其他外场, 可以有效对凝固过程中枝晶的演化行为进行真实的

收稿日期:2015-09-01

基金项目:国家自然科学基金(11504149,11364024)

作者简介:路 阳(1957-),女,辽宁辽阳人,教授,博导.

模拟研究^[2].

国外 Rappel 等^[3] 对三维枝晶生长进行模拟研 究,为耦合其他外场影响三维微观组织奠定理论基 础. Tong 等^[4] 建立了三维强迫对流相场模型,模拟 了强迫对流环境下流速、流动方向、各向异性对枝晶 生长的影响. C. Beckermann 等^[5] 采用 SIMPLE 算 法与相场模型进行耦合,模拟了流场与三维枝晶之 间的相互影响,国内近年来对三维相场模型模拟研 究微观组织进行了较多的报道^[6-7],但在耦合流体方 面还是主要集中在二维方面, 吕冬兰等^[8] 采用 SIM-PLE 算法与相场模型进行耦合,研究了强迫对流、 扰动强度以及各向异性强度对枝晶生长形貌的影 响. 然而,采用 SIMPLE 算法计算流场的缺点是计 算速度慢和计算量大.近年来,LatticeBoltzmann方 法(LBM)快速发展为一种新的计算流体方法并得 到了广泛的应用^[9]. LatticeBoltzmann 方法(LBM) 与其他的流场数值计算流体的方法相比较,LBM 方 法具有物理图像清晰,边界条件易处理,天生的并行 特性,精度高,速度快等优点^[10].因此采用 LBM 算 法计算流体耦合相场模型研究微观组织已成为国内 外研究热点[11-12]. 目前该方法已经在多孔介质 流^[13],多相多质流^[14],粒子悬浮流^[15],磁流体^[16]等 诸多领域得到应用.考虑到 LBM 自身的优越条件, 兰州理工大学路阳^[17]和王智平等^[18]采用 LBM 算 法与相场模型进行耦合,建立了二维 PF-LBM 模 型,研究了强迫对流对单晶粒和多晶粒枝晶生长的 影响.二维模拟中枝晶的生长方向具有局限性并且

 $E = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$

式中: $c = \Delta x / \Delta t$; Δx 为三维空间网格步长; Δt 为三 维空间时间步长.

其中平衡态分布函数为

$$f_{0}^{eq}(r,t) = \frac{1}{3}\rho - \frac{1}{2c^{2}}\rho u \cdot u \qquad (\alpha = 0) \qquad (2)$$

$$f_{a}^{eq}(r,t) = \frac{1}{18}\rho + \frac{1}{6c^{2}}\rho e_{a} \cdot u + \frac{1}{4c^{4}}\rho (e_{a} \cdot u)^{2} - \frac{1}{12c^{2}}\rho u \cdot u \qquad (\alpha = 1 \sim 6) \qquad (3)$$

$$f_{a}^{eq}(r,t) = \frac{1}{36}\rho + \frac{1}{12c^{2}}\rho e_{a} \cdot u + \frac{1}{8c^{4}}\rho (e_{a} \cdot u)^{2} - \frac{1$$

$$\frac{1}{24c^2}\rho u \cdot u \qquad (\alpha = 7 \sim 18) \tag{4}$$

根据流体流动过程中的质量、动量及能量守恒 法则可以求得模型的宏观密度、宏观速度和宏观压 模拟结果只能够定性地描述平面枝晶的生长形貌和 特征,三维模拟中枝晶的生长方向具有任意性并且 三维模拟更加接近实际金属凝固过程,更能真实地 描述枝晶的生长形貌和特征.

本文将计算流体的三维 LatticeBoltzmann(LBM) 模型与基于 KKS^[19]三维相场模型进行耦合,建立 模拟过冷二元合金熔体在强迫对流环境下枝晶等温 生长的三维 PF-LBM 模型.将 Al-Cu 作为模拟对 象,模拟研究强迫对流环境下二元合金单晶粒的生 长形貌和特征.

1 数学模型

1.1 LBM 模型

在不考虑外力作用下,计算流体的方程应用最 广泛的是 LBGK 方程^[10]:

$$f_{a}(r+e_{a}\Delta_{t},t+\Delta_{t}) - f_{a}(r,t) = -\frac{1}{\tau} [f_{a}(r,t) - f_{a}^{eq}(r,t)]$$
(1)

式中: $\alpha = 0 \sim 18$ 表示不同格点的离散速度方向;r 为 格点所在的位置; τ 为无量纲松弛时间; $f_a(r,t)$ 和 $f_a^{eq}(r,t)$ 分别为第 α 个方向上速度为 e_a 相对应的粒 子的分布函数和平衡态分布函数.

20 世纪 90 年代, Qian 等^[20]提出了 DdQm 模型 (*d* 维空间,*m* 个离散速度),本文采用 D3Q19 模型 来计算流体.

该模型的离散速度为

-1	1	-1	1	-1	0	0	0	0 7
-1	0	0	0	0	1	-1	1	-1 c
0	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
力,其	t分	别为						

$$\rho = \sum_{a=0}^{18} f_a, \quad u = \frac{1}{\rho} \sum_{a=0}^{18} f_a e_a, \quad p = \frac{1}{3} \rho c^2$$
(5)

流体的粘度系数与无量纲松弛因子关系式如下:

$$\nu = \frac{1}{6} (2\tau - 1)c^2 \Delta t \tag{6}$$

1.2 相场和溶质场控制方程

相场模型采用的是 KKS 模型^[21],三维枝晶相 场控制方程为

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = M(\varepsilon_{(\theta)}^{2} \nabla^{2} \varphi + \frac{\partial}{\partial x} \Big(|\nabla \varphi|^{2} \varepsilon_{(\theta)} \frac{\partial \varepsilon_{(\theta)}}{\partial (\varphi_{x})} \Big) + \frac{\partial}{\partial y} \Big(|\nabla \varphi|^{2} \varepsilon_{(\theta)} \frac{\partial \varepsilon_{(\theta)}}{\partial (\varphi_{y})} \Big) + \frac{\partial}{\partial z} \Big(|\nabla \varphi|^{2} \varepsilon_{(\theta)} \frac{\partial \varepsilon_{(\theta)}}{\partial (\varphi_{z})} - f_{\varphi} \Big)$$
(7)

式中:*M* 是固液界面迁移速率;*t* 为时间变量; $\epsilon(\theta)$ 是 与界面能有关的参数; Φ_x, Φ_y, Φ_z 表示相场变量 Φ 对 三维空间坐标 x, y, z 的一阶导数; f_{ϕ} 表示自由能密 度对相场变量 Φ 的一阶导数. M, f_{ϕ} 分别表示如下: $M^{-1} = \frac{\epsilon^2}{\sigma} \left(\frac{RT}{V_{\rm m}} \cdot \frac{1-k^{\rm e}}{m^{\rm e}} \beta + \frac{\epsilon}{D_L \sqrt{2W}} \cdot \xi \cdot (c_{\rm S}^{\rm e}, c_{\rm L}^{\rm e}) \right)$ (8)

$$f_{\varphi} = \frac{RT}{V_{\rm m}} h'(\varphi) \ln \frac{(1 - c_{\rm S}^{\rm e})(1 - c_{\rm L})}{(1 - c_{\rm L}^{\rm e})(1 - c_{\rm S})} + Wg'(\varphi) \quad (9)$$

式中: T 为温度; R 为气体常数; V_m 指摩尔体积; g(Φ)为剩余自由能函数, 且 $g(\Phi) = \Phi^2(1-\Phi)^2$; $h(\Phi)$ 为势函数, 且 $h(\Phi) = \Phi^3(10-15\Phi+6\Phi^2)$; c 代 表摩尔分数; 上标 e 代表平衡状态; 下标 S, L 代表固 相和液相; W 指相场参数; c 是与界面能有关的参数.

金属凝固过程液态金属总是流动的,因此在模 拟研究枝晶生长过程中耦合了流动场.受流场影响 的溶质扩散方程如下:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla(u \cdot c) = \nabla \cdot \left\{ (D_{\rm L} + h(\varphi)(D_{\rm S} - D_{\rm L})) \cdot \left(1 - c_{\rm S} \right) \right\} + \left(1 - h(\varphi) \right) \frac{1}{c_{\rm L}(1 - c_{\rm L})} \right] \nabla c - \left(D_{\rm L} + h(\varphi)(D_{\rm S} - D_{\rm L}))c(1 - c)h'(\varphi) \times \left[\ln \frac{(1 - c_{\rm L}^{\rm e})c_{\rm S}^{\rm e}}{(1 - c_{\rm S}^{\rm e})c_{\rm L}^{\rm e}} + \ln \frac{(1 - c_{\rm S})c_{\rm L}}{(1 - c_{\rm L})c_{\rm S}} \right] \nabla \varphi$$
(10)

式中:u 是熔体的流动速度矢量; D_L 、 D_s 分别为液相和固相中的溶质扩散系数.

2 数值计算

2.1 初始条件和边界条件

采用 D3Q19 模型来计算流体的流动速度,如图 1 所示,采用式有限差分法对溶质和相场方程进行 求解. 将流场与相场模型进行耦合建立三维 PF-LBM 相场模型.

为了相对有效地扩大沿流场方向的计算模拟网 格区域,模拟研究了枝晶四分之一形貌的演化行为. 模拟区域采用 $251\Delta x \times 131\Delta y \times 131\Delta z$ 的三维网格, 空间步长 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 1 \times 10^{-8}$ m,过冷熔体以速 度 *u* 沿 *x* 方向从左向右流入,从右边界流出,模拟区 域的恒定温度 *T*=900 °C.初始条件设置如图 2 所示, 设定初始晶核的半径为 *R*,初始条件如下:

$$\begin{cases} \varphi = 1, \quad c = 0.02, \quad u_x = 0, \quad u_y = 0, \quad u_z = 0 \\ & x^2 + y^2 + z^2 \leqslant R^2 \\ \varphi = 0, \quad c = 0.02, \quad u_x = U, \quad u_y = 0, \quad u_z = 0 \\ & x^2 + y^2 + z^2 > R^2 \end{cases}$$
(11)

在模拟区域边界条件上,相场和溶质场均采用 Zero-Neumann 边界条件;流场边界条件采用反弹 格式,其优点在于操作简便,能严格保证系统的质量 和动量守恒.



图 2 初始条件设置

Fig. 2 Initial conditions setting

2.2 合金物性参数

以 w(Cu) = 4.5%的 Al-Cu 合金为例,模拟研究 凝固过程中枝晶生长的演化过程.该合金的物性参数 如表 1 所示.

表1 Al-Cu合金的物性参数

Tab. 1 Physical property parameters of Al-Cu alloy

物性参数	Al-Cu
液相的溶质扩散系数 $D_{ m L}/({ m m}^2 m{\cdot} { m s}^{-1})$	3.0×10^{-9}
固相的溶质扩散系数 $D_{ m s}/({ m m}^2 m \cdot { m s}^{-1})$	3.0×10 ⁻¹³
平衡常数 k ^e	0.14
凝固潜热 L/(kJ・kg ⁻¹)	389
熔点温度 T _m /K	933.3
液相线斜率 m ^e	620
热导率 $k/(W \cdot (mK)^{-1})$	192.6
界面能 $\sigma/(J \cdot m^{-1})$	0.093

3 模拟结果与分析

3.1 模拟结果与实验结果的比较

实际凝固过程中材料微观组织是三维结构组 织,就微观组织综合信息的表征问题,用二维信息来 认识真实的微观组织是明显不够甚至完全错误^[22], 因此研究三维组织显得更加接近实际情况.图 3a 是 本文研究所得三维模拟枝晶组织,图 3b^[23]是法国 CNRS的研究者们采用 SEM 技术观察到 Co-Cr 合 金的树枝晶组织,图 3c^[24]是美国 Glicksman 采用倾 倒法获得 Al-Cu 合金的枝晶组织,从以上实验结果 可以看出,本文模拟的枝晶生长形貌与实验结果相



(a) Al-Cu树枝晶
 (b) Co-Cr枝晶组织
 (c) Al-Cu枝晶组织
 图 3 三维枝晶生长组织

Fig. 3 Three-dimensional dendritic growth structure 3.2 不同流速下枝晶的生长形貌以及溶质场分布

模拟中枝晶的 3 个主枝晶尖端生长方向与 <100>、<010>、<001>方向平行,对流方向沿<100>方 向,计算参数的取值如表 1 所示.图 4 是液态金属的 流动速度为 0、0.001、0.003、0.005、0.007和 0.009 m/s,生长时间均为 1 700Δt 时刻下二元合金等温凝 固的枝晶生长形貌.由图可以看出,液态金属的流动 显著地改变了三维枝晶原有的对称生长形貌,迎流 方向的主枝晶比逆流方向的主枝晶生长发达,枝晶 的这种生长趋势与二维模拟中枝晶的生长趋势相 同^[11].如图所示,液态金属的流动为 0.009 m/s 时, 迎流方向的主枝晶生长最发达,主枝晶相对其他流 速下的主枝晶要粗一些;逆流方向的主枝晶生长最 缓慢,主枝晶相对其他流速下的主枝晶要细一些,迎 流方向和逆流方向的主枝晶生长相差最大.液态金



属的流动速度为 0.001 m/s 时,迎流方向的主枝晶 相对其他流速下迎流方向的主枝晶生长缓慢,并且 相对也细一些;逆流方向的主枝晶相对其他流速下 逆流方向的主枝晶生长发达,相对也粗一些,迎流方 向和逆流方向的主枝晶生长相差较小.由此可以表 明,大的流动速度会促进迎流方向主枝晶的生长,主 枝晶也相对较粗,会抑制逆流方向主枝晶的生长,主 枝晶相对也较细,使枝晶的不对称生长形貌更明显.

图 5 是与图 4 相对应的不同流速下生长时间均 为 1 700△t 时枝晶尖端生长速率和尖端曲率半径的 对比.由图可以看出,随着流动速度的增加,迎流方 向枝晶尖端生长速率和曲率半径呈现增长趋势,逆 流方向枝晶尖端生长速率和曲率半径呈现增长趋势,逆 流方向枝晶尖端生长速率和曲率半径呈现缩小趋 势,但逆流方向尖端半径的缩小趋势比迎流方向尖端半径的增长趋势快,逆流方向尖端生长速率的增长趋势快,同 时迎流方向尖端半径的增长趋势相比生长速率的增 长趋势快,逆流方向尖端半径的缩小趋势相比生长 速率的缩小趋势快.由此可以表明,流动速度对尖端 曲率半径的影响大于对尖端生长速度的影响,大的 流动速度对逆流方向枝晶的影响比对迎流方向枝晶 影响严重.





图 6a~f 是与图 4a~f 相对应的不同流动速度 下生长时间均为 1 700Δt 沿(100)方向枝晶中心的 溶质场剖切图. 由图可以看出,存在熔体流动时固液 界面前沿溶质的分布是不均匀的,在逆流方向固液 界面溶质的富集比迎流方向固液界面溶质的富集严 重,逆流方向不同生长方向的 2 个枝晶根部之间溶 质的富集最严重并且溶质摩尔分数最高,这是由液 态金属的流动造成. 随着流动速度的增加,逆流方向 固液界面溶质的富集越严重,枝晶表面溶质富集越 多,枝晶生长得就越慢. 不同流速下这种凝固界面前





图 6 不同流速下枝晶中心的溶质场剖切图



3.3 耦合流场情况下枝晶生长的二维模拟与三维 模拟比较

图 7 是流动速度为 0.009 m/s,生长时间为 1 700 Δt 的三维模拟结果,其中图 7a、b 分别是枝晶 的生长形貌和溶质场分布,图 7c、d 是平行于 xoz 平 面且分别距 xoz 平面 $0\Delta y$ 、 $20\Delta y$ 的溶质场切片图,



in case of coupled flow field

图 7e、f 是平行于 xoy 平面且分别距 xoy 平面 $0\Delta z$ 、 20 Δz 的溶质场剖切图.为了对比熔体流动对枝晶生 长影响的三维模拟结果与熔体流动对枝晶生长影响 的二维模拟结果,在流动速度和模拟参数相同条件 下模拟了二维模拟结果如图 8 所示,其中:图 8a、b 分别表示 $t=1~700\Delta t$ 时刻枝晶的生长形貌和溶质 场分布.



对比熔体流动对枝晶生长影响的三维模拟结果 图 7a 和熔体流动对枝晶生长影响的三维模拟结果 图 8a. 发现,三维模拟中液态金属的流动状况比二 维模拟中液态金属的流动状况复杂,结合图 8b 可以 看出二维模拟中液态金属的流动状况;结合图 7c、 e、f、d 可以看出三维模拟中液态金属在不同取向的 流动状况.液态金属流过枝晶表面的复杂程度不同, 对枝晶产生的影响也不同.由此可以表明,三维模拟 中液态金属的流动对枝晶生长产生的影响与二维模 拟中液态金属的流动对枝晶生长产生的影响与二维模

给出流动速度为 0.009 m/s 和模拟参数都相同 条件下三维模拟和二维模拟中枝晶尖端半径和枝晶 尖端生长速度与生长时间的关系如图 9 所示(图 9a是枝晶尖端半径与生长时间的关系,图 9b 是枝晶尖 端生长速度与生长时间的关系). 由图可以看出,随 着枝晶的生长,三维模拟中上游和下游枝晶尖端半 径的差值、枝晶尖端生长速度的差值不断增加;二维 模拟中上游和下游枝晶尖端半径的差值、枝晶尖端 生长速度的差值从不变到微小浮动的增加.相同生 长时刻下,上游和下游枝晶尖端半径的差值三维比 二维大,上游和下游枝晶尖端半径的差值三维比二 维大.这是由于三维中枝晶的生长界面比二维中枝 晶的生长界面大、液态金属的流动比二维复杂、液态 金属的流动从上游冲刷到下游的溶质比二维中液态 金属的流动从上游冲刷到下游的溶质多,使得三维 中上游与下游溶质摩尔分数差异比二维大,上游与 下游溶质扩散层差异比二维大、上游与下游成分过 冷度差异比二维大,导致三维中上游和下游枝晶尖

端半径差值比二维大、上游和下游尖端生长速度的 差值比二维大.由此可以表明,流动速度和模拟参数 都相同条件下三维模拟中液态金属的流动对枝晶生 长的影响大于二维模拟中液态金属的流动对枝晶生 长的影响.结合图 7a 和图 8a 可以看出生长时刻同 为1 700△t 时,三维模拟中迎流方向和逆流方向枝 晶形貌的差异显著.





velocity on growth time

给出流动速度为 0.009 m/s,模拟参数相同条 件下生长时间均为 $1700\Delta t$ 时三维模拟结果图 7b 中y=0,z=0时枝晶中心的溶质分配曲线如图10a所示以及二维模拟结果图 8b + j = 0 时枝晶中心的 溶质分配曲线如图 10b 所示.图 10a 的横坐标表示 在图 7b 中 x 轴的网格数,纵坐标表示 Cu 的溶质摩 尔分数;图 10b 的横坐标表示在图 8b 中 x 轴的网格 数,纵坐标表示溶质 Cu 的摩尔分数. 从图 10a 发现 溶质的分布存在 a,b 2 处波峰,对比图 7c,发现图 10a 中 a 处波峰附近所在的区域对应的是三维模拟 中迎流方向枝晶尖端溶质富集的区域,b处波峰附 近所在的区域对应的是逆流方向枝晶尖端富集的区 域. 从图 10b 中发现溶质的分布也存在 a,b 2 处波 峰,对比图 8b 发现,图 10b 中 a 处波峰附近所在的 区域对应二维模拟中迎流方向枝晶尖端溶质富集的 区域,b处波峰附近所在的区域对应的是逆流方向 枝晶尖端富集的区域.对比图 10a 和图 10b 发现,三

维模拟中枝晶前沿溶质的分布与二维模拟中枝晶前 沿溶质的分布不相同. 从图 10a 中发现 a 波峰处溶 质摩尔分数值和 b 波峰处溶质 Cu 的摩尔分数值存 在差异,这种差异是由于流体的流动造成的,差异越 大,熔体的流动对枝晶前沿溶质分布的影响越大. 对 比图 10a 和 10b 发现,图 10a 中 a 波峰处溶质摩尔 分数值和 b 波峰处溶质摩尔分数值存在差异大于 10b 中 a 波峰处溶质摩尔分数值和 b 波峰处溶质摩 尔分数差异. 由此可以得出,流动速度和模拟参数相 同条件下三维模拟中液态金属的流动对枝晶前沿溶 质的影响程度大于二维模拟中液态金属的流动对枝 晶前沿溶质的影响程度.



图 10 耦合流场情况下枝晶生长的溶质分配曲线 Fig. 10 Solute distribution curve of dendritic growth in case of coupled flow field

4 结论

1) 将三维 LatticeBoltzmann(LBM)模型与基 于 KKS 的三维相场模型进行耦合,建立了强迫对 流环境下三维枝晶等温生长的 PF-LBM 模型,以 Al-Cu 二元合金为例,采用所建模型,实现了强迫对 流环境下三维枝晶生长的模拟.

2)液态金属的流动显著地改变了三维枝晶原有的对称生长形貌,枝晶在迎流方向的生长得到了促进,在逆流方向的生长得到了抑制.不同流速下枝晶的生长形貌和溶质场分布不同,流动速度越大,迎流方向主枝晶越粗,逆流方向主枝晶越粗,溶质在逆流方向界面前沿的富集越严重.流动速度对尖端曲

率半径的影响大于对尖端生长速度的影响,大的流动速度对逆流方向枝晶的影响比对迎流方向枝晶影响严重.

3) 三维模拟中液态金属的流动状况比二维模 拟中液态金属的流动状况复杂.在相同模拟参数条 件下三维模拟中液态金属的流动对枝晶生长的影响 比二维模拟中液态金属的流动对枝晶生长的影响 大.

致谢:本文得到兰州理工大学红柳青年人才基金(Q201114)的资助,在此表示感谢.

参考文献:

- [1] 孙东科,朱鸣芳,杨朝荣,等.强迫对流和自然对流作用下枝晶 生长的数值模拟[J].物理学报,2009,58(6):285-291.
- [2] 王智平,张殿喜,石可伟,等.多元合金等温凝固相场法模拟 [J].兰州理工大学学报,2008,34(6):1-4.
- [3] KARMA A, RAPPEL W J. Numerical simulation of three-dimensional dendritic growth [J]. Physical Review Letter, 1996, 77(10):4050-4053.
- [4] TONG X, BECKERMANN C. Velocity and shape selection of dendritic crystals in a forced flow[J]. Physical Review E,2000, 61(1):49-52.
- [5] BECKERMANN C, SUN Y. Effect of solid-liquid density change on dendrite tip velocity and shape selection [J]. Crystal growth,2009,311(19):4447-4452.
- [6] 朱昌盛,冯 力,王智平,等.二元合金三维枝晶生长的相场法 数值模拟[J].机械工程学报,2009,45(1):88-93.
- [7] 朱昌盛,冯 力,王智平,等.三维枝晶生长的相场法数值模拟 研究[J].物理学报,2009,58(11):8055-8061.
- [8] 吕冬兰,龙文元,夏 春,等.强迫对流影响合金凝固过程枝晶 生长的数值模拟[J].特种铸造及有色合金,2009,29(11): 1012-1015.
- [9] TIEN C L, MAJUMDAR A, CAREY V P, et al. Molecular and microscale transport phnomena. A report on the 2nd US Japan joint seminar, Santa Barbara [J]. Microscale Thermophysical Engineering, 1997, 1(1):71-84.
- [10] 何雅玲,王 勇,李 庆.格子 Boltzmann 方法的理论及应用

[M].北京:科学出版社,2008.

- [11] 王智平,王喜君,冯 力,等.基于 LBM 算法的强迫对流合金 枝晶生长相场发模拟 [J]. 兰州理工大学学报,2014,40(2): 18-22.
- [12] Dmitry Medvedev, Klaus Kassner. Lattice-Boltzmann scheme for dendritic growth in presence of convection [J]. Journal of Crystal Growth, 2005, 275(1/2):1495-1500.
- [13] TANG G, TAO W, HE Y. Gas slippage effect on microscale porous flow using the lattice Boltzmann Method [J]. Physical Review E,2005,72(5):056301-056311.
- [14] 李维仲,李 爽. 用格子 Boltzmann 方法模拟液滴合并过程 [J]. 热科学与技术,2007,6(3):379-393.
- [15] LADD A J C, VERBERG R. Lattice-Boltzmann simulations of particle-fluid suspensions [J]. Journal of Statistical Physics, 2001,104(5/6):1191-1251.
- [16] CHEN S, CHEN H D, MARTINEZ D, et al. Lattice Boltzmann model for simulation of magnetohydrodynamics [J].
 Physical Review Letters, 1991, 67(27): 3776-3779.
- [17] 路 阳,安灵敏,王智平,等.强迫层流环境下多晶粒生长的相场法模拟[J].兰州理工大学学报,2014,40(3):10-15.
- [18] 王智平,张辛健,路 阳,等. PF-LBM 模型模拟强迫对流对二 元合金枝晶生长的影响 [J]. 兰州理工大学学报,2014,40 (4):13-17.
- [19] KIM S G,KIM W T,SUZUKIA T. Interfacial compositions of solid and liquid in a phase-field model with finite interface thickness for isothermal solidification in binary alloys [J]. Physical Review E,1998,58(3):3316-3323.
- [20] QIAN Y H, HUMIERES D, LALLEMAND P. Lattice BGK models for Navier-Stokes equation [J]. Europhysics Letters, 1992,17(6):479-484.
- [21] KIM S G, KIM W T, SUZUKIA T. Phase-field model for binary alloys [J]. Physical Review E, 1999, 60(6): 7186-7197.
- [22] 汪明月. α-Mg 枝晶凝固微观组织三维形貌研究 [D]. 北京:清 华大学,2011.
- [23] FLEURY V, GOUYET J F, LEONETTI M. Branching in nature [M]. France: Springer-Verlag Berlin Heidelbery, 2001.
- [24] GLICKSMAN M. Principles of solidification [M]. New York: Springer, 2010.