# 枝晶生长的扩散界面格子Boltzmann方法

**湛承杰[1]，柴振华[1]，施保昌[1]，蒋平[2]，耿韶宁[2]，孙东科[3]**

1华中科技大学 数学与统计学院，武汉 430074

2华中科技大学 机械科学与工程学院，武汉 430074

3东南大学 机械工程学院，南京 211189

zhancj@hust.edu.cn

## 介绍/亮点 Introduction/Highlight

本文提出了一种热溶质对流下枝晶生长的扩散界面模型。其中相场模型用于刻画枝晶的固液界面变化；温度浓度方程从原始有量纲方程重新无量纲化，得到更简单的对流扩散形式；相场方程中的序参量合并到流固相互作用所产生的力，避免了对复杂流固界面的处理。为了求解具有热溶质对流的枝晶生长模型，我们提出了扩散界面多松弛格子Boltzmann (LB)方法，在统一框架下设计了相场方程、浓度方程、温度方程和Navier-Stokes方程的四个LB模型。最后对各种耦合情况的枝晶生长问题进行了数值模拟，验证了本文方法的正确性，并且数值计算结果与前人的研究结果吻合较好。

## 研究方法 Methods

相场法因其热力学自洽性和无需显式界面跟踪等优点，被广泛应用于枝晶生长的研究中。其中序参数从固相的1平滑的变化到液相的-1用于描述固液界面，控制方程可表示为

$$\tau_0 a_s^2(\mathbf{n})\frac{\partial\phi}{\partial t}=W_0^2\nabla\cdot\left[a_s^2(\mathbf{n})\nabla\phi+\mathbf{N}\right]+Q_\phi, \qquad (1)$$

其中 $a_s(\mathbf{n})=(1-3\varepsilon_s)\left[1+\frac{4\varepsilon_s}{1-3\varepsilon_s}\sum_{\alpha=1}^{d}n_\alpha^4\right]$ 为界面各向异性函数，$\varepsilon_s$ 为各向异性强度，$\mathbf{N}$为与 $a_s(\mathbf{n})$ 相关的各向异性向量， $N_\alpha=|\nabla\phi|^2 a_s(\mathbf{n})\frac{\partial a_s(\mathbf{n})}{\partial(\partial_\alpha\phi)},\quad \alpha=1,2,\cdots,d.$

耦合温度和浓度的源项为 $Q_\phi=\phi(1-\phi^2)-\lambda(\theta+Mc_\infty U)(1-\phi^2)^2$，其中$\theta$为无量纲温度，$U=\dfrac{\dfrac{2c/c_\infty}{1+k-(1-k)\phi}-1}{1-k}$ 为过饱和。

为了更简单地求解浓度温度输运，并正确地考虑熔体对流的影响，本文采用了如下修正的溶质和热传递以及不可压Navier-Stokes方程，

$$\frac{\partial C}{\partial t}+\nabla\cdot(C\mathbf{u})=(1-k)\nabla\cdot\left[D\tilde{q}(\phi)\nabla U-\mathbf{J}_{at}\right],$$

$$\frac{\partial H}{\partial t}+\nabla\cdot(H\mathbf{u})=\alpha\nabla^2\theta,$$

$$\nabla\cdot\mathbf{u}=0,$$

$$\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t}+\nabla\cdot(\mathbf{uu})=-\nabla p+\nabla\cdot\nu\nabla\mathbf{u}+\mathbf{F}+\left[1-\tilde{q}(\phi)\right]\mathbf{f},$$

其中 $C=c/c_\infty$ 为无量纲浓度，$H=\theta-\phi/2$，$\tilde{q}(\phi)=(1-\phi)/2$，$\mathbf{f}$为流固相互作用。

接下来我们建立了一个扩散界面LB方法，统一的LB模型为

$$f_i(\mathbf{x}+\mathbf{c}_i\Delta t,t+a_n\Delta t)=f_i(\mathbf{x},t)-\Lambda_{ij}\left(f_j-f_j^{eq}\right)(\mathbf{x},t)+\Delta t\left(F_i+\frac{\Delta t}{2}\hat{D}_iF_i\right)(\mathbf{x},t)+\Delta t\left(\delta_{ij}-\frac{\Lambda_{ij}}{2}\right)G_j(\mathbf{x},t),$$

其中 $\hat{D}_i=a_n\partial_t+\gamma\mathbf{c}_i\cdot\nabla$，$a_n$ 为时间步长的松弛，当给定相应的矩条件即可得到不同物理场的LB模型。具体 $a_n=1$ 即退化为标准的LB模型，可以用来模拟温度、浓度以及流场；$a_n=a_s^2(\mathbf{n})$ 再经过离散即得到相场的演化方程。

相场分布函数为 $f_i^{eq}=\omega_i\phi,\quad F_i^\phi=\omega_i\frac{Q_\phi}{\tau_0},\quad G_i^\phi=-\frac{\omega_i\mathbf{c}_i\cdot\mathbf{N}}{a_s^2(\mathbf{n})}.$

序参数及其梯度的局部计算格式为 $\phi=\sum_i f_i,\quad \nabla\phi=-\frac{s_1^\phi}{c_s^2\Delta t}\left(\sum_i\mathbf{c}_if_i+\frac{W_0^2\mathbf{N}}{\tau_0}\right)$，其中 $s_1^\phi=1/\left[a_s^2(\mathbf{n})W_0^2/\tau_0c_s^2\Delta t+0.5\right]$ 为松弛参数。

浓度场分布函数为 $f_i^{eq}=\begin{cases}C+(\omega_i-1)\tilde{q}(\phi)U, & i=0\\ \omega_i\tilde{q}(\phi)U+\dfrac{\omega_i\mathbf{c}_i\cdot C\mathbf{u}}{c_s^2}, & i\neq 0\end{cases},\quad F_i=0,\quad G_i=\omega_i\mathbf{c}_i\cdot\left\{\frac{\partial_t(C\mathbf{u})}{c_s^2}+U\nabla\tilde{q}(\phi)+\frac{\mathbf{J}_{at}}{D}\right\}.$

宏观量计算为 $C=\sum_i f_i,\quad U=\dfrac{\dfrac{2C}{1+k-(1-k)\phi}-1}{1-k}.$ 温度场与浓度场类似不再详细介绍。

流场中流固相互作用离散为 $\mathbf{f}=(\mathbf{u}_s-\mathbf{u}^*)/\Delta t$，分布函数为

$$f_i^{eq}=\sigma_i+\omega_i\left[\frac{\mathbf{c}_i\cdot\mathbf{u}}{c_s^2}+\frac{\mathbf{uu}:(\mathbf{c}_i\mathbf{c}_i-c_s^2\mathbf{I})}{2c_s^4}\right],\quad \sigma_i=\begin{cases}(\omega_0-1)p/c_s^2+\rho_0, & i=0\\ \omega_ip/c_s^2, & i\neq 0\end{cases},\quad F_i=\omega_i\mathbf{c}_i\cdot\frac{\mathbf{F}+\left[1-\tilde{q}(\phi)\right]\mathbf{f}}{c_s^2},\quad G_i=0,$$

宏观量计算为 $\mathbf{u}^*=\sum_i\mathbf{c}_ih_i+\frac{\Delta t}{2}\mathbf{F},\quad \mathbf{u}=\mathbf{u}^*+\frac{\Delta t}{2}\left[1-q(\phi)\right]\mathbf{f},\quad p=\frac{c_s^2}{1-\omega_0}\left(\sum_{i\neq 0}h_i-\omega_0\frac{\mathbf{u}\cdot\mathbf{u}}{2c_s^2}\right).$

## 结果/讨论 Results/Discussion

**算例1. 热枝晶生长**

首先考虑过冷引起的纯流体枝晶生长，纯扩散和熔体流动情况下的模拟结果如图1-2所示，与文献结果吻合较好。

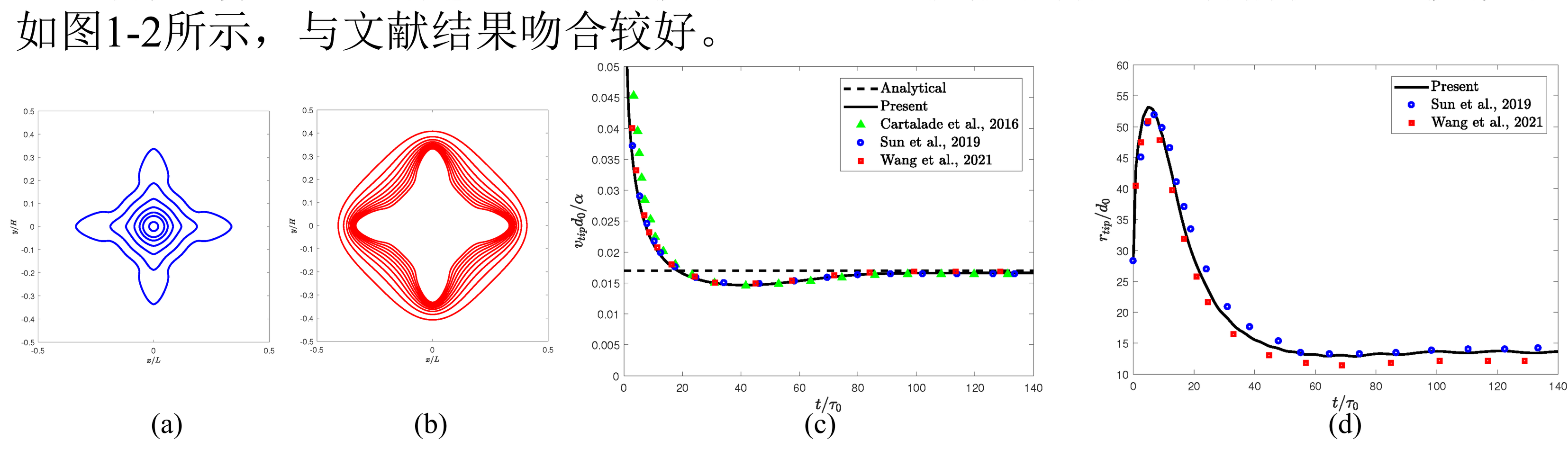

图1. 纯扩散热枝晶生长 [(a) 界面演化, (b) 等温线, (c) 尖端速度演化, (d) 尖端半径演化]

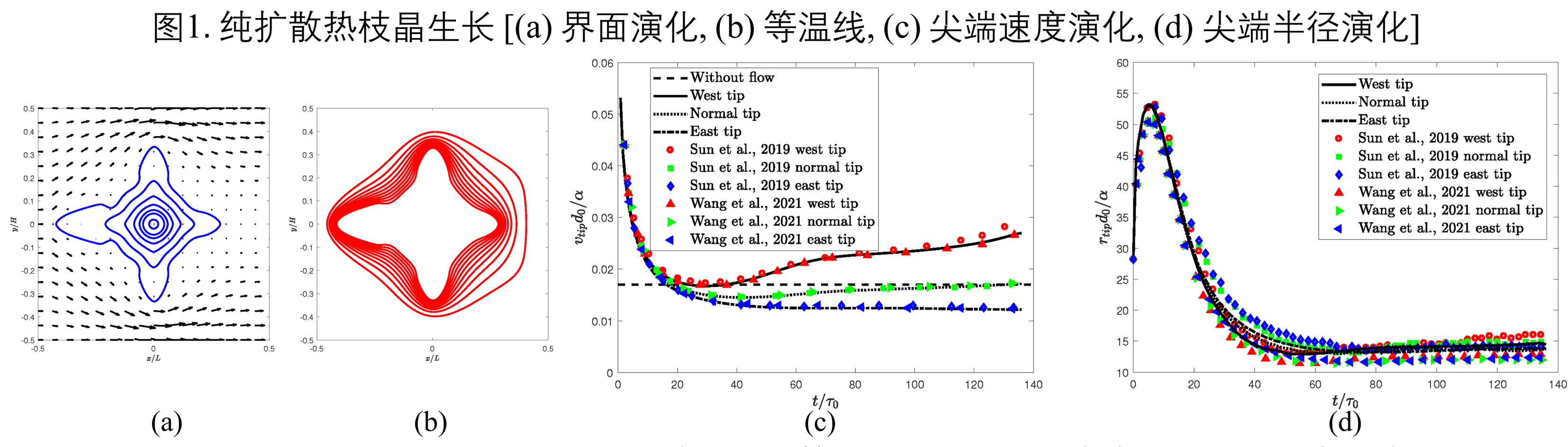

图2. 熔体流动热枝晶生长 [(a) 界面演化, (b) 等温线, (c) 尖端速度演化, (d) 尖端半径演化]

**算例2. 溶质枝晶生长**

对于等温情况下二元合金，过饱和也会引起枝晶生长，当前模型也可以很好的模拟此结果（如图3）。

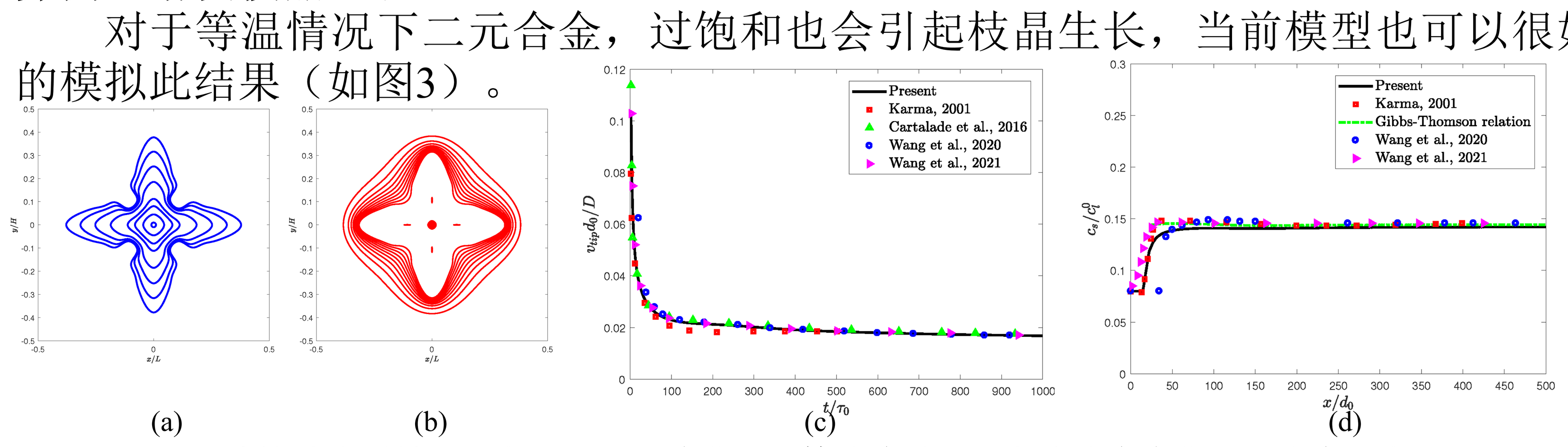

图3. 纯扩散溶质枝晶生长 [(a) 界面演化, (b) 等浓度线, (c) 尖端速度演化, (d) 浓度分布]

**算例3. 热溶质枝晶生长**

最后考虑二元合金在过冷熔体中的枝晶生长，纯扩散情况结果与文献结果一致(如图4)，热和溶质以及熔体流动的共同作用会引起复杂的枝晶形貌(如图5)。

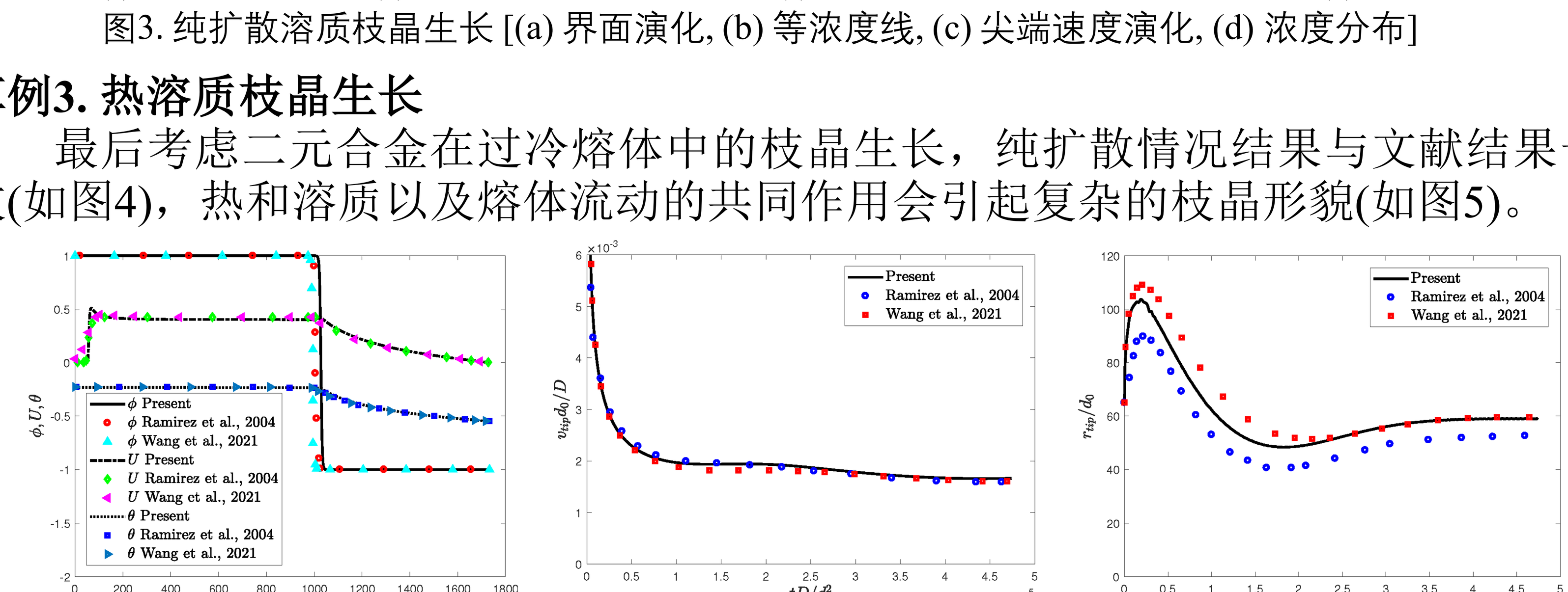

图4. 纯扩散热溶质枝晶生长 [(a) 界面剖面, (b) 尖端速度演化, (c) 尖端半径演化]

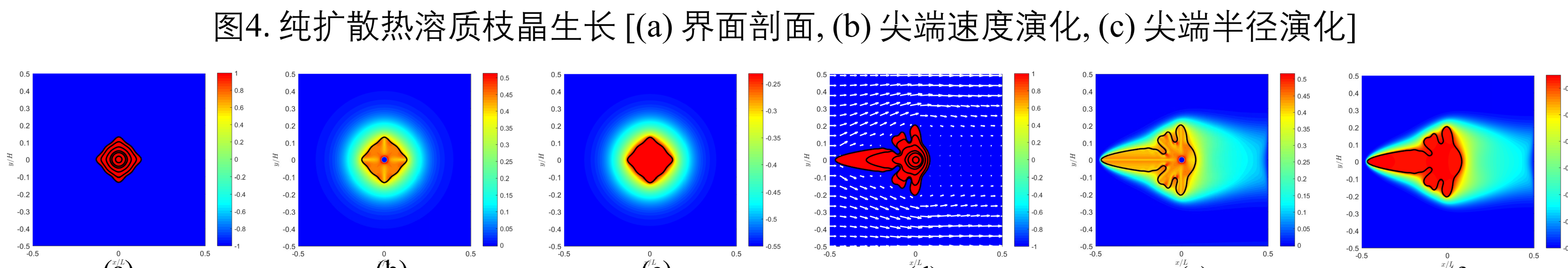

图4. 热溶质枝晶生长 [纯扩散 (a) 相场, (b) 浓度, (c) 温度； 熔体流动 (d) 相场, (e) 浓度, (f) 温度]

## 结论 Conclusions

本文提出了一种基于扩散界面的LB方法来计算具有热溶质对流的枝晶生长。我们首先从原来的一维控制方程推导出修正的对流扩散控制方程，它们是标准的对流扩散控制方程，可以在LB框架或其他方法中更简单有效地求解。然后采用扩散界面LB法处理流固相互作用，使用了更为简单的流固相互作用形式。之后利用此LB方法对纯扩散以及通体流动情况下的热枝晶生长、溶质枝晶生长和热溶质枝晶生长等经典问题进行了验证，数值结果与已有数据吻合较好。最后我们指出，本方法也适用于自由运动的枝晶生长问题，这将在之后的工作中加以考虑。