

激光立体成形中熔池凝固微观组织的元胞自动机模拟

魏雷 林鑫 王猛 黄卫东

Cellular automaton simulation of the molten pool of laser solid forming process

Wei Lei Lin Xin Wang Meng Huang Wei-Dong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 018103 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.018103

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.018103>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I1>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于体积平均法模拟铸锭凝固过程的可靠性分析

The reliability analysis of using the volume averaging method to simulate the solidification process in a ingot

物理学报.2014, 63(12): 128103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.128103>

二元层片共晶凝固过程的特征尺度选择

Characteristic scale selection of lamellar spacings in binary eutectic solidification

物理学报.2014, 63(6): 068104 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.068104>

抽拉速度对 SCN-DC 共晶生长形貌的影响

Influence of pulling velocity on microstructure and morphologies of SCN-DC eutectic alloy

物理学报.2013, 62(21): 218103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.218103>

强磁场对 Mn-Sb 包晶合金相变及凝固组织的影响

Influence of high magnetic fields on phase transition and solidification microstructure in Mn-Sb peritectic alloy

物理学报.2013, 62(20): 208106 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.208106>

晶体取向对定向凝固枝晶生长的影响

Effect of crystallographic orientation on dendrite growth in directional solidification

物理学报.2013, 62(10): 108103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.108103>

# 激光立体成形中熔池凝固微观组织的元胞自动机模拟\*

魏雷<sup>1)2)</sup> 林鑫<sup>2)†</sup> 王猛<sup>2)</sup> 黄卫东<sup>2)</sup>

1)(西北工业大学机电学院, 西安 710072)

2)(西北工业大学凝固技术国家重点实验室, 西安 710072)

(2014年5月30日收到; 2014年8月25日收到修改稿)

本文通过采用自适应网格技术, 将激光立体成形的宏观温度场模型和凝固微观组织的低网格各向异性元胞自动机模型 (cellular automaton, CA) 结合, 建立了适用于激光立体成形的集成数值模型. 模型包括基材的温度场分布, 熔池形貌和熔凝过程的凝固微观组织. 模拟了激光扫描速度为 15 mm/s 时, 激光作用在 Fe-C 单晶基材上形成熔池的形状以及熔池内凝固微观组织. 计算结果揭示了熔池内固液界面从平界面失稳到胞\枝晶的非稳态凝固过程, 并得到了平界面组织形成的白亮带. 白亮带上方形成了外延生长的枝晶列.

**关键词:** 元胞自动机, 凝固微观组织, 激光立体成形

**PACS:** 81.30.Fb, 81.16.Mk, 68.70.+w

**DOI:** 10.7498/aps.64.018103

## 1 引言

激光立体成形技术是在上个世纪90年代中期以来发展起来的一项金属高性能激光增材制造技术<sup>[1-9]</sup>, 解决了兼顾复杂形状和高性能金属构件快速制造的技术难题而受到了国内外厂商和研究机构的重视. 这项技术主要是在应对航空航天高技术需求的背景下诞生的. 对于激光立体成形这一类的金属高性能增材制造技术, 其制造过程涉及到了极多影响成形过程与最终效果的因素, 只凭经验式的盲目摸索绝难成功, 成熟的制造工艺只能建立在系统深入的科学认识基础上. 对于激光立体成形过程来说, 建立起能够准确描述熔池传输和凝固组织演化过程的数学模型则至关重要.

最近几十年凝固科学发展, 使得人们定量描述凝固过程成为可能. 同时, 计算机模拟凝固过程的技术也随之发展<sup>[10-23]</sup>. 激光立体成形熔池相

对较小, 仅需从微观凝固组织考虑, 无需多层次耦合. 因此激光立体成形能够直接应用最为先进的凝固微观组织模拟技术. 目前, 凝固微观组织模拟采用的方法主要有两种: 相场法 (phase field, PF) 和元胞自动机法 (cellular automaton, CA). Fallah 等<sup>[14]</sup> 采用 PF 法模拟了 Ti-Nb 合金激光立体成形的凝固微观组织. 其中, 熔池的温度场由有限元 (finite element method, FEM) 模型计算. 在熔池固-液界面, 根据 FEM 模型计算的温度梯度, Fallah 等将其简化成局部定向凝固的形式研究 Ti-Nb 合金激光立体成形的凝固微观组织演化行为. Yin 等<sup>[15]</sup> 则采用 CA 法模拟了 Fe-0.13 wt.%C 合金的激光立体成形的组织演化, 并考察了激光立体成形工艺参数对熔池凝固枝晶一次间距的影响. CA 模型与 PF 模型相比, 由于 CA 模型受到网格各向异性的影响, 导致 CA 模型精度不如 PF 模型, 但 CA 模型计算速度快, 模拟的尺度相对较大. PF 模型计

\* 中国博士后科学基金 (批准号: 2013M540771)、国家自然科学基金 (批准号: 51271213), 国家重点基础研究发展计划 (973) (批准号: 2011CB610402)、国家高技术研究发展计划 (863 计划) (批准号: 2013AA031103) 和高等学校博士学科点专项科研基金 (批准号: 20116102110016) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: xlin@nwpu.edu.cn

算量大, 仅能模拟有限的凝固区域. 金属高性能增材制造的熔池有几毫米的宽度, 因此对于PF法而言计算量过大, 无法满足模拟的需要. 近年来本课题组在揭示网格各向异性的影响机理的基础上, 提出并建立了低网格各向异性的CA模型<sup>[19-23]</sup>, 使得CA模型的精度得到了显著提高.

从Fallah<sup>[14]</sup>和Yin等<sup>[15]</sup>的工作可以发现, 目前无论是采用PF模型还是CA模型, 其对激光立体成形过程的凝固组织数值模拟基本采用以下的形式: 采用有限元方法计算出熔池的温度场和熔池形貌. 在有限元模型的基础上, 根据熔池固-液界面处的温度梯度和方向建立定向凝固的生长条件, 从而以定向凝固<sup>[24,25]</sup>的微观组织间接描述熔池内的凝固微观组织. 这种方法可以确定枝晶一次间距等凝固信息, 但无法真实反映熔池内自基材外延生长的枝晶取向研究, 以及随熔池温度梯度变化而产生熔池顶部的枝晶转向或CET (columnar to equiaxed transition) 现象. 上述通过有限元模型计算温度场分布和熔池形貌, 以定向凝固形式研究凝固组织的研究方法, 在激光立体成形技术中的应用范围有限, 无法深入解决很多工艺科学问题. 本文通过采用自适应网格技术, 将宏观温度场和微观凝固组织CA模型耦合, 从而建立能够模拟整个熔池内凝固微观组织的数值模型.

## 2 模型描述

### 2.1 激光立体成形过程温度场的数值模型和边界条件

本文在不考虑marangoni对流的情形下, 以增加熔池内热传导率的大小, 来近似模拟流动对熔池内温度场的影响. 激光立体成形熔池凝固过程数值模型采用扩散场的形式模拟温度场的分布. 温度场的扩散控制方程为

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + Q_1 = \frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t}, \quad (1)$$

其中,  $k$  (W/m·K) 是热导率,  $Q_1$  (W/m<sup>3</sup>) 是能量输入,  $c_p$  (J/g·K) 是热容,  $\rho$  (g/m<sup>3</sup>) 是密度. 温度场的初始条件为室温  $T_0$ , 边界条件为对流和辐射的边界条件

$$k(\nabla T \cdot n) = [-h(T - T_0) - \varepsilon_R \sigma_R (T^4 - T_0^4)], \quad (2)$$

其中,  $\nabla T$  为温度梯度,  $T_0$  (K) 是环境温度,  $h$  (W/m<sup>2</sup>·K<sup>4</sup>) 是对流换热系数,  $\varepsilon_R$  是辐射率,  $\sigma_R$  是

斯特藩-玻尔兹曼常数 ( $5.67 \times 10^{-8}$  W/m<sup>2</sup>·K<sup>4</sup>). 激光光斑内, 能量输入的边界条件为

$$k(\nabla T \cdot n) = [\beta I - h(T - T_0) - \varepsilon_R \sigma_R (T^4 - T_0^4)], \quad (3)$$

其中,  $\beta$  是激光吸收率,  $I$  (W/m<sup>2</sup>) 激光功率分布.

对于合金凝固, 浓度场的控制方程为

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i \left( \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_i}{\partial y^2} \right), \quad (4)$$

其中,  $C$  是浓度, 下标  $i$  代表固相或者液相,  $D_i$  表示溶质扩散系数.

为了有效模拟激光立体成形凝固过程, 对激光立体成形过程设定了如下的假设条件<sup>[13]</sup>:

1) 激光功率分布采用高斯分布

$$I(r) = \frac{2P_L}{\pi r_L^2} \exp\left(-\frac{2r^2}{r_L^2}\right), \quad (5)$$

其中,  $r_L$  是光斑直径,  $r$  是离光斑中心的距离,  $P_L$  是激光功率.

2) 激光能量吸收率假设为30%.

3) 对流换热系数设为  $40$  W/m<sup>2</sup>·K.

4) 熔化潜热通过对材料热容的修正<sup>[11-13]</sup>.

$$c_p^* = \frac{L_f}{T_m - T_0} + c_p, \quad (6)$$

其中,  $c_p$  是热容系数,  $c_p^*$  修正的热容系数,  $L_f$  是熔化潜热,  $T_m$  是熔点.

通过上述假设, 建立激光立体成形温度场分布的数值模型, 并在此基础上结合凝固微观组织模拟的CA模型, 模拟激光立体成形熔池内凝固微观组织.

### 2.2 凝固微观组织模拟的元胞自动机模型

元胞自动机模型 (cellular automaton, CA) 模型从最初的建立到目前的发展<sup>[16]</sup>, 其所预测的组织演化行为往往容易受到网格各向异性的影响, 进而制约了CA模型预测的物理准确性以及精度. 本课题组开发了低网格各向异性CA模型, 并优化了CA模型的物理基础.

#### 2.2.1 元胞俘获规则的改进

采用最小邻居固相分数法<sup>[21]</sup> (limited neighbor solid fraction, LNSF) 减小冯·诺依曼俘获规则带来的网格各向异性. 最小邻居固相分数法的操作流程如下:

1) 计算一个液相元胞周围邻居固相分数的平均值  $f_{s_{ave}}$ . 二维模拟中, 可以采用周围4个冯·诺依曼方式邻居固相分数之和的平均, 也可以采用 Moore 邻居周围8个元胞的固相分数的平均.

2) 确定一个液相元胞被俘获的最小固相分数  $f_{s_{LNSF}}$ . 检验表明: 该数值越小, 网格各向异性越倾向于  $\langle 100 \rangle$  方向; 数值越大, 网格各向异性越倾向于  $\langle 110 \rangle$  方向. 因此可以选择一个恰当的数值, 可以减小来自  $\langle 100 \rangle$  和  $\langle 110 \rangle$  方向的网格各向异性. 本文模拟中

$$f_{s_{LNSF}} = 0.225.$$

3) 当一个液相元胞有冯·诺依曼方式的固相邻居, 且它的  $f_{s_{ave}} > f_{s_{LNSF}}$  时, 该液相元胞才能被俘获成界面元胞.

在上述流程中, 冯·诺依曼俘获规则决定着元胞自动机模型是一个明锐界面模型, 而最小邻居固相分数法决定着每一个被俘获的液相元胞都是基于相同条件, 因此可以显著减小网格各向异性.

### 2.2.2 界面曲率计算的改进

在枝晶生长的 CA 模型中, 固液界面曲率过冷度以及界面法向量等重要参数均需要 CA 模型中的固相分数计算. 目前, CA 法精度不高的原因是从固相分数计算界面曲率数值过程中存在较大的误差. 另外, 由界面局域平衡假设,

$$T^* = T_L^{eq} + (C_L^* - C_0)m_L - \Gamma K f(\varphi, \theta), \quad (7)$$

可以看出, 如果界面曲率计算不精确, 那么界面能各向异性参数  $f(\varphi, \theta)$  无法准确反映在曲率过冷度上. (7) 式中,  $T^*$  为界面温度,  $T_L^{eq}$  为纯物质熔点,  $C_L^*$  和  $C_S^*$  分别为界面处的液相和固相浓度,  $C_0$  为合金液相浓度,  $m_L$  为液相线斜率,  $\Gamma$  是 Gibbs-Thomson 系数,  $K$  为界面曲率,

$$f(\varphi, \theta_0) = 1 - 15\varepsilon \cos(4 \times (\varphi - \theta_0)),$$

$\varepsilon$  为界面能各向异性参数,  $\varphi$  为界面法向,  $\theta_0$  为枝晶优先生长方向,  $k_0$  为溶质分配系数.

目前 CA 模型主要有两种曲率的算法: 一种是数元胞 (counting cells) 方法 [16],

$$\bar{K}(A) = \frac{1}{\Delta_s} \left[ 1 - \frac{2}{n+1} \left( f_s + \sum_{i=1}^n f_s(i) \right) \right], \quad (8)$$

其中,  $\Delta_s$  为网格尺寸,  $n$  为邻居个数,  $f_s$  为元胞固相分数. 另一种是固相分数偏导数 (derivative fraction of solid, dfs) 的方法 [17,18]

$$K =$$

$$2 \frac{\partial f_s}{\partial x} \frac{\partial f_s}{\partial y} \frac{\partial^2 f_s}{\partial x \partial y} - \left( \frac{\partial f_s}{\partial y} \right)^2 \frac{\partial^2 f_s}{\partial x^2} - \left( \frac{\partial f_s}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2 f_s}{\partial y^2} \frac{1}{\left[ \left( \frac{\partial f_s}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial f_s}{\partial y} \right)^2 \right]^{3/2}}, \quad (9)$$

(9) 式是相场法和 CA 法共同采用的方法. 其中, CA 法采用是固相分数, 相场法采用的是序参数. 相场法中序参数是弥散界面, 因而可以更为准确的计算序参数的偏导数. 由于 CA 法是明锐界面, 无法准确的计算固相分数的偏导数.

为了精确计算固相分数的偏导数, 采用流体力学中对流体体积 (volume of fluid) 偏导数的求解方法 [26], 精确求解固相分数的偏导数, 如以下各式:

$$f_{s_{x,i+1/2,j+1/2}} = \frac{1}{2\Delta x} (f_{s_{i+1,j}} - f_{s_{i,j}} + f_{s_{i+1,j+1}} - f_{s_{i,j+1}}), \quad (10)$$

$$f_{s_{y,i+1/2,j+1/2}} = \frac{1}{2\Delta y} (f_{s_{i,j+1}} - f_{s_{i,j}} + f_{s_{i+1,j+1}} - f_{s_{i+1,j}}), \quad (11)$$

$$f_{s_{x,i,j}} = \frac{1}{4} (f_{s_{x,i+1/2,j+1/2}} + f_{s_{x,i-1/2,j+1/2}} + f_{s_{x,i+1/2,j-1/2}} + f_{s_{x,i-1/2,j-1/2}}), \quad (12)$$

$$f_{s_{y,i,j}} = \frac{1}{4} (f_{s_{y,i+1/2,j+1/2}} + f_{s_{y,i-1/2,j+1/2}} + f_{s_{y,i+1/2,j-1/2}} + f_{s_{y,i-1/2,j-1/2}}). \quad (13)$$

## 3 计算结果和分析

计算中忽略激光立体成形过程中粉末添加过程, 因此本文针对激光立体成形的数值模拟等同于激光熔凝过程. 基材合金采用的是 Fe-0.1%C 合金, 材料的物性参数见文献 [17, 18]. 基材设为单晶, 晶体取向与坐标轴相同. 计算中采用的激光功率为 1000 W, 光斑直径 2 mm, 扫描速度 15 mm/s. 二维计算的区域为 8.192 mm × 32.768 mm, 网格尺寸最小为 1 μm, 时间步长为 1 × 10<sup>-5</sup> s. 计算初始时, 基材的温度设为室温, 激光光斑垂直向下照射基材, 并从基材的右边向基材的左边移动. 在计算中设定, 如果基材中某个网格单元的温度高于 Fe-C 合金的熔点 1490°C, 则该网格由固相转变为液相; 反之, 如果熔池中某个网格单元温度低于熔点, 则该网格的凝固过程由 CA 模型计算. 本文由于采



用了自适应网格技术 [21], 模拟计算效率很高. 所有计算结果均在个人计算机单核 AMD Phenom 3.30GHz CPU 中计算完成, 计算时间小于 24 h.

计算结果如图 1 所示. 图 1(a) 中, 绿色表示气相, 蓝色表示基材, 红色表示激光熔凝产生的熔池. 图 1(b) 表示计算过程中的温度场分布. 图 1(c) 为激光熔凝过程中的浓度场分布. 图 1(d) 为计算过程中的自适应网格分布. 可以看出, 在激光移动过程中, 基材受热形成熔池. 温度场分布与 Wang 等 [10] 采用有限元 (finite element method, FEM) 的计算结果相近. 在熔池移动过程中, 形成了细小的凝固微观组织, 图 1(c). 自适应网格技术很好的完成了基材宏观温度场和微观凝固组织的耦合. 计算过程中, 网格尺寸从最大 1024  $\mu\text{m}$ , 逐渐细化为熔池附近的 1  $\mu\text{m}$  网格, 图 1(d).

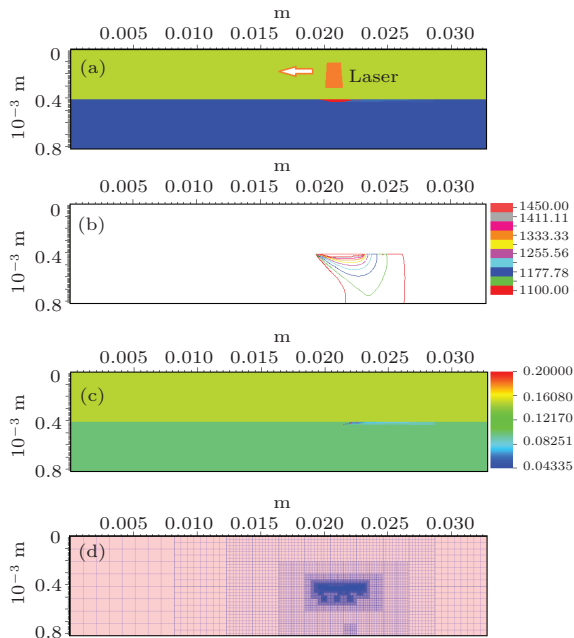


图 1 (网刊彩色) 激光熔凝过程的 CA 模型数值模拟 (a) 相分布 (绿色为气相, 蓝色为固相, 红色为液相); (b) 温度场分布; (c) 浓度场分布; (d) 自适应网格分布

图 2 为图 1 中熔池形貌和凝固微观组织的细致描述. 可以看出激光熔凝过程中, 熔池有 2.5 mm 长, 0.35 mm 深. 凝固微观组织在熔池尾部形成. 图 2(a) 中, 基材的熔凝深度保持稳定, 说明激光扫描已经达到稳态. 在图 2(c) 中, 可以清晰看到熔池底部的平界面生长状态. 在  $x$  坐标从 15.7 mm 到 16.0 mm 的 0.3 mm 区间内的熔池底部均为平界面生长状态. 在  $x$  坐标为 16.0 mm 到 16.6 mm 的区间, 平界面开始失稳形成了胞晶, 并通过竞争生长

形成了稳定的枝晶列. 熔池底部的平界面生长形成一条窄带, 也被称为白亮带. 白亮带在铁, 镍等金属材料激光立体成形过程中经常在熔池底部出现 [8,9,25]. 在本文的计算中, 白亮带从熔池底部开始生长, 当生长到 10  $\mu\text{m}$  左右的厚度时, 平界面开始失稳, 胞晶组织出现. 初始扰动产生的胞晶在熟化机理的作用下, 相互融合进一步增加了白亮带的厚度. 从熔池尾部可以看出, 最终白亮带厚度约为 20  $\mu\text{m}$ . 文献 [27] 中的图 8 为 SS316 合金激光立体成形实验, 实验结果显示白亮带厚度接近 15  $\mu\text{m}$ , 与本文计算的白亮带厚度符合. 李延民 [9] 在激光立体成形 316L 不锈钢的实验中, 发现熔池底部出现白亮带, 他采用凝固理论分析, 认为白亮带是由平界面失稳演化过程形成的, 与本文计算结果一致. 在白亮带的上面, 由于基材晶体取向为坐标轴方向, 产生了自下而上外延生长的枝晶列. Zhang 等 [27] 在激光立体成形 SS316 实验过程中, 枝晶一次间距在 10  $\mu\text{m}$  的量级范围内. 本文计算的枝晶一次间距同样为 10  $\mu\text{m}$  的量级, 与实验结果符合. 熔池顶部温度梯度的变化, 使得垂直生长的枝晶转向为水平生长的枝晶, 如图 2(c) 所示.

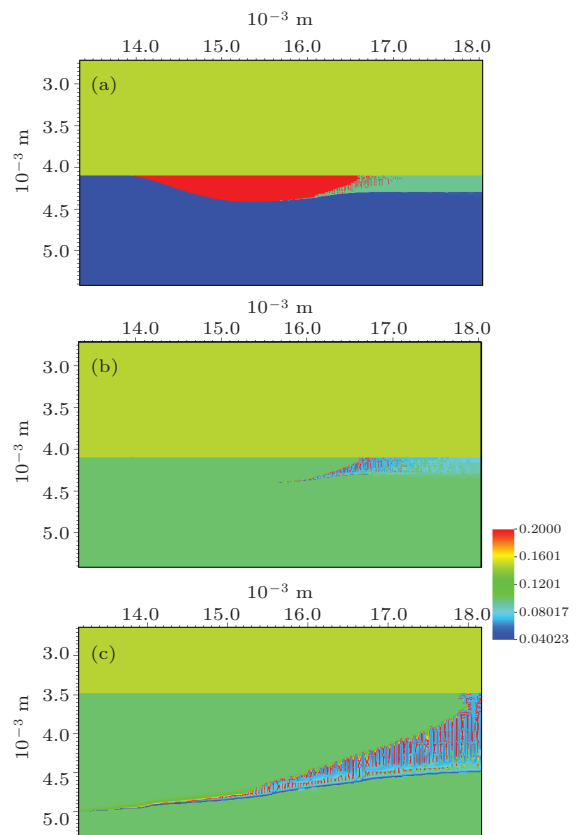


图 2 (网刊彩色) 熔池形态和凝固微观组织的细致描述 (a) 熔池形貌; (b) 激光熔凝后的基材浓度场分布; (c) 熔池尾部的凝固微观组织的浓度场分布

为了研究基材晶体取向对熔池凝固微观组织的影响,分别计算了基材晶体取向与坐标轴同向和基材晶体取向与坐标轴呈 $45^\circ$ 的激光立体成形过程.可以看出,当基材晶体取向与坐标轴同向时,外延生长的枝晶列的取向也与坐标轴同向,如图3所示;当基材晶体取向与坐标轴呈 $45^\circ$ 时,外延生长的枝晶列的取向也与坐标轴呈 $45^\circ$ ,如图4所示.比较图3(a)和图4(a),发现当基材晶体取向不同时,熔池自身的形貌则没有明显变化.

熔池形貌与激光工艺参数的关系对优化激光立体成形过程工艺参数数有重要意义.采用本文建立的模型可以计算激光工艺条件下不同时刻的熔池形貌.图5为激光从计算区域右边向左边扫描时,不同时刻的熔池形貌.图5(a)—(d)分别对应的时刻为0.2 s, 0.3 s, 0.4 s和0.5 s.当激光扫描时间小于0.2 s时,基材中没有产生熔池.随着时间的推移,熔池开始产生,如图5(a).当熔池开始产生时,熔池尾部的深度大于熔池前端的深度.熔池随着激光扫描速度向左推进时,熔池尾端的形状发生了变化,逐渐变细长,并且凝固微观组织开始生长,如图5(c)和(d)所示.在激光照射基材0.5 s以后,稳态的熔池形貌开始形成.

从图5分析可知,在激光扫描室温的Fe-C基材时,在距离基材右边界0.37 mm处开始形成熔池,因此基材的右边界不会熔化,也因而不会产生坍塌.上述计算结果解释了激光立体成形单道多层实验中,激光扫描开始处的边界成形质量高,而激光扫描结束处的边界成形质量不好的原因.因为在激光扫描结束时,很难精确控制激光参数使其不熔化基材边界,从而导致液态金属像蜡滴一样在基材边界处塌陷;而激光扫描开始的边界要形成熔池往往需要一定时间,如本文的计算结果.由于本文没有耦合计算流体力学(computational fluid dynamics, CFD)模型,无法模拟熔池内金属液的流动和熔池自由表面的形状.将目前的低网格各向异性CA模型与CFD模型耦合是未来工作的重点.耦合计算流体力学CFD模型,还可以模拟熔池内的金属粉末添加过程,进而建立更为真实模拟激光立体成形过程的数值模型.

本文模拟了Fe-C合金在激光立体成形下的熔池形貌和凝固微观组织.计算结果揭示了激光立体成形过程中熔池底部的白亮带产生过程,白亮带上面的枝晶列一次间距等特征尺度与实验结果符合.考察了不同基材晶体取向对凝固微观组织的影响.

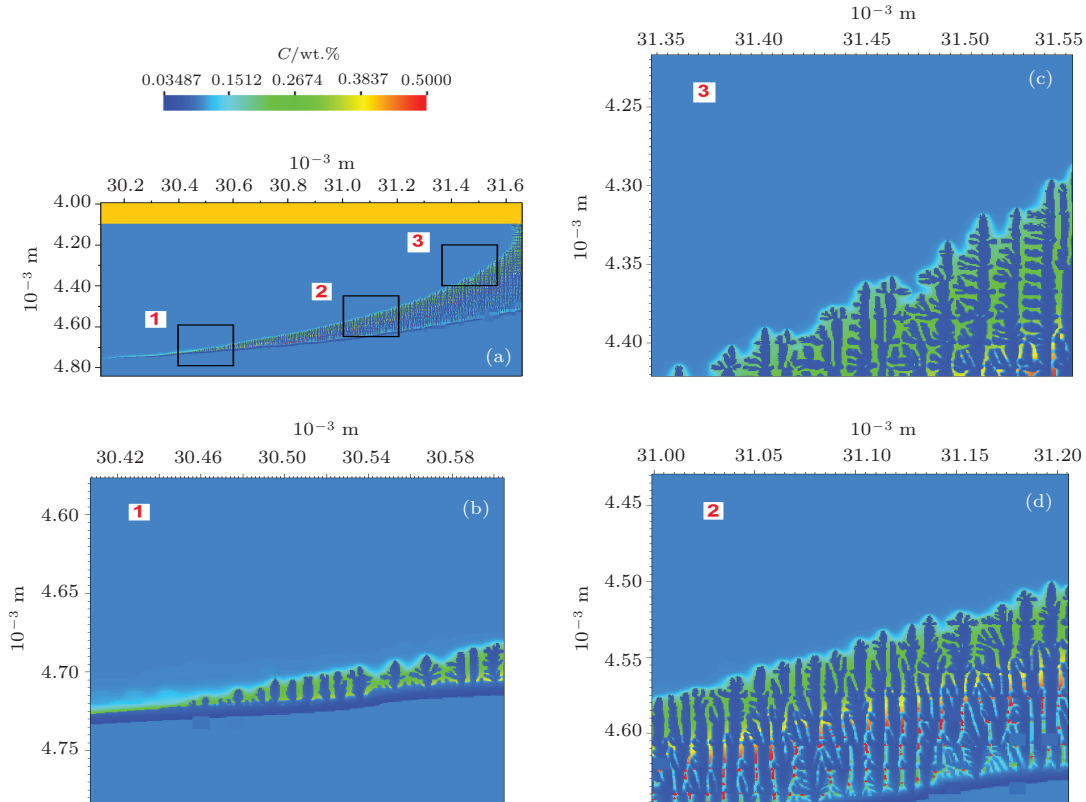


图3 (网刊彩色) 基材晶体取向对凝固微观组织的影响,晶体取向与坐标轴同向 (a) 整个熔池的凝固微观组织; (b) 熔池底部的凝固微观组织; (c) 熔池中部的凝固微观组织; (d) 熔池上部的凝固微观组织

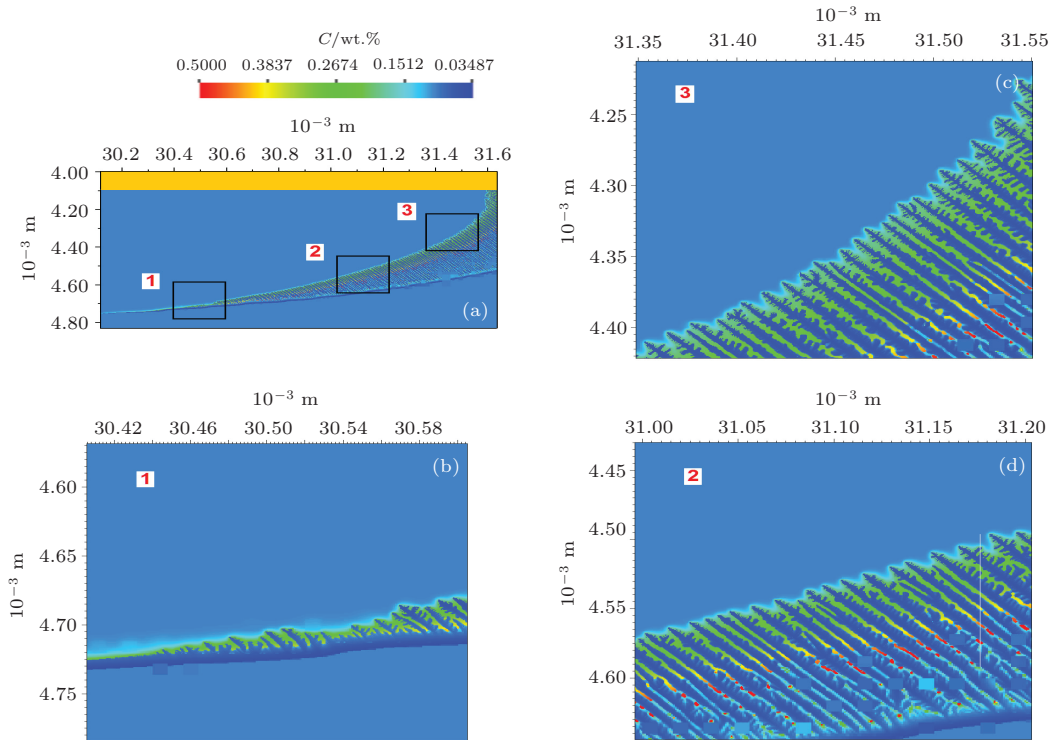


图4 (网刊彩色) 基材晶体取向对凝固微观组织的影响, 晶体取向与坐标轴呈  $45^\circ$  (a) 整个熔池的凝固微观组织; (b) 熔池底部的凝固微观组织; (c) 熔池中部的凝固微观组织; (d) 熔池上部的凝固微观组织

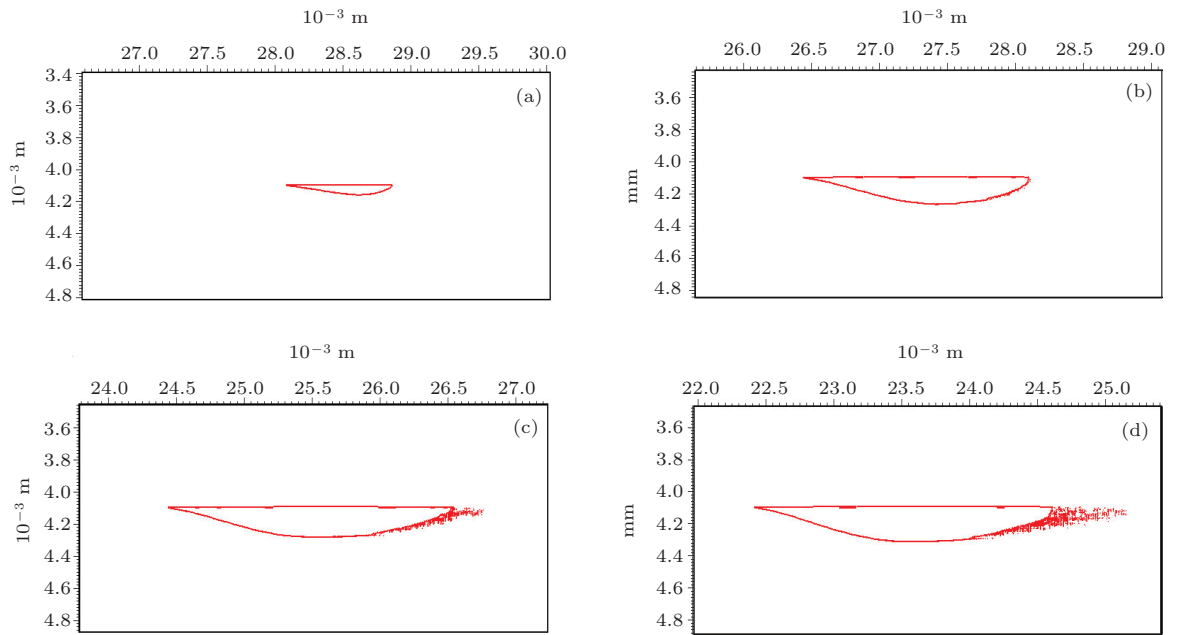


图5 激光从右向左以  $15 \text{ mm/s}$  的速度扫描后, 不同时刻的熔池形态 (a) 0.2 s; (b) 0.3 s; (c) 0.4 s; (d) 0.5 s

Yin 等<sup>[15]</sup> 同样采用了 CA 法模拟了 Fe-0.13 wt.%C 合金的激光立体成形的组织演化. 通过本文计算结果与 Yin 等的计算结果对比, 本文模型有如下优点:

1) 本文的 CA 模型减小了模型的网格各向异性, 具有更高的模型精度. Yin 的 CA 模型具有网格各向异性.

2) 本文采用自适应网格技术, 耦合了宏观温度场模型和凝固微观组织 CA 模型, 使得模型具备了模拟整个熔池内的凝固微观组织的能力(基材区域为  $8.192 \text{ mm} \times 32.768 \text{ mm}$ , 其中熔池内凝固微观组织区域约为  $2000 \mu\text{m} \times 1000 \mu\text{m}$ ). Yin 等的模型没有模拟整个熔池的凝固微观组织, 仅以宏观有限

元计算的温度场作为边界条件,局部的计算了二维  $100\ \mu\text{m} \times 100\ \mu\text{m}$  的区域. 本文的模型更接近实际激光立体成形过程.

3) 本文不仅得到枝晶间距的信息,同时可以模拟熔池底部平界面失稳过程,以及白亮带产生的过程和机理. 本文还模拟了基材不同晶体取向情况下的熔池凝固微观组织形貌. Yin 等的模型仅模拟了凝固组织的一次枝晶间距.

## 4 结 论

本文通过采用自适应网格技术,将激光立体成形的宏观温度场模型和凝固微观组织的低网格各向异性元胞自动机模型 (cellular automaton, CA) 结合,建立了适用于激光立体成形的集成数值模型. 模型包括基材的温度场分布,熔池形貌和熔凝过程的凝固微观组织. 该数值模型具有如下特点: 计算区域大 ( $8.192\ \text{mm} \times 32.768\ \text{mm}$ ), 计算效率高 (24 h 以内).

在基材为单晶,且晶体取向与坐标轴方向相同的情形下,通过计算  $15\ \text{mm/s}$  移动的激光光斑对熔池形态和凝固微观组织的影响,可以得出如下结论: 随着激光光斑的移动,熔池逐渐变深变长,且熔池的后端有胞\枝晶形态的凝固微观组织. 熔池内固液界面开始以平界面方式在熔池底部生长,然后熔池底部的固液界面开始失稳,且以竖直生长的定向凝固胞/枝晶为主. 熔池底部的平界面形成  $20\ \mu\text{m}$  宽的白亮带,计算结果与实验结果符合. 白亮带的数值模拟以及模拟整个熔池内的凝固微观组织在国内外均数首次. 考察了不同基材晶体取向对凝固微观组织的影响.

熔池表面张力驱动的 marangoni 对流可以使熔池内的温度更快的传递,从而可以更快的使熔池在温度场的驱动下的不断的扩张或缩小. 为了使模拟结果更接近真实情况,在模型中采取了一系列假设和修正条件,使得在避免模拟流场的情况下,模拟结果尽可能接近真实激光立体成形的物理条件. 在未来的研究中拟将 CA 模型与计算流体力学 (computational fluid dynamics, CFD) 模型耦合,从而建立更为精确的适用于激光立体成形的熔池凝固微观组织数值模型.

## 参考文献

- [1] Keicher D M, Smugeresky J E, Romero J A, Griffith M L, Harwell L D 1997 *SPIE* **2293** 91
- [2] Keicher D M, Smugeresky J E 1997 *JOM* **49** 51
- [3] Magee J, Watkins K G, Steen W M 1998 *Journal of Laser Application* **10** 235240
- [4] Lin X, Yue T M, Yang H O, Huang W D 2006 *Acta Mater.* **54** 1901
- [5] Gremaud M, Wagniere J D, Zryd A, Kurz W 1996 *Surface Engineering* **12** 251
- [6] Gaumann M, Henry S, Cleton F, Wagniere J D, Kurz W 1999 *Materials Science & Engineering A* **271A** 232
- [7] Tseng A A, Lee M, Zhao 1998 *Proceedings of the Third Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing*, Honolulu, Hawaii, USA, July 12–16, 1998 p1611–1618
- [8] Li Y M, Huang W D, Feng L P, Chen J 1999 *Acta Metall. Sinica (English Letters)* **12** 1025
- [9] Li Y M 2001 *Ph. D. Dissertation* (Xi'an: Northwestern Polytechnical University) (in Chinese) [李延民 2001 博士学位论文 (西安: 西北工业大学)]
- [10] Wang L, Felicelli S 2006 *Mater. Sci. Eng. A* **435–436** 625
- [11] Peyre P, Aubry P, Fabbro R, Neveu R, Longuet A 2008 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **41** 025403
- [12] Brown S, Song H 1992 *J. Eng. Ind. Trans. ASME* **114** 441
- [13] Fallah V, Alimardani M, Corbin SF, Khajepour A 2011 *Comput. Mater. Sci.* **50** 2124
- [14] Fallah V, Amoozazei M, Provas N, Corbin S F, Khajepour A 2012 *Acta Mater.* **60** 1633
- [15] Yin H, Felicelli S D 2010 *Acta Mater.* **58** 1455
- [16] Nastac L 1999 *Acta Mater.* **47** 4253
- [17] Sanchez LB, Stefanescu D M 2004 *Metall. Mater. Trans.* **35 A** 2471
- [18] Zhu M F, Stefanescu D M 2007 *Acta Mater.* **55** 1741
- [19] Wei L, Lin X, Wang M, Huang W D 2011 *Appl. Phys. A* **103** 123
- [20] Wei L, Lin X, Wang M, Huang W D 2012 *Comput. Mater. Sci.* **54** 66.
- [21] Wei L, Lin X, Wang M, Huang W D 2012 *Physica B* **407** 2471
- [22] Wei L, Lin X, Wang M, Huang W D 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 098104 (in Chinese) [魏雷, 林鑫, 王猛, 黄卫东 2012 物理学报 **61** 098104]
- [23] Zhang Y P, Lin X, Wei L 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 228106 (in Chinese) [张云鹏, 林鑫, 魏雷等 2012 物理学报 **61** 228106]
- [24] Wang L L, Wang Z J, Lin X, Wang M, Huang W D 2012 *Chin. Phys. B* **21** 066801
- [25] Wang Z J, Wang J C, Yang G C 2010 *Chin. Phys. B* **19** 017305
- [26] Gueyffier D, Li J, Nadim A, Scardovelli R, Zaleski S 1999 *J. Comput. Phys.* **152** 423
- [27] Zhang K, Wang S, Liu W, Shang X 2014 *Materials & Design* **55** 104



# Cellular automaton simulation of the molten pool of laser solid forming process\*

Wei Lei<sup>1)2)</sup> Lin Xin<sup>2)†</sup> Wang Meng<sup>2)</sup> Huang Wei-Dong<sup>2)</sup>

1) (School of Mechanical Engineering, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

2) (State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

( Received 30 May 2014; revised manuscript received 25 August 2014 )

## Abstract

A two-dimensional multiscale model is presented for simulating laser melting process, which is the same as laser solid forming (LSF) without the addition of metallic powders into the molten pool. The metallurgical process in molten pool is simulated, including the temperature distribution, the pool shape, and the solidification microstructure. The shape of the molten pool and the microstructure in Fe-C single crystal substrate at a laser scanning speed of 15 mm/s is simulated. Results reveal the instability from planar interface to cell\dendrite morphologies in the molten pool. At the bottom of the molten pool, the growth morphology is planar interface, which is also called bonding zone. Epitaxial dendrite arrays can be seen to grow above the bonding zone.

**Keywords:** cellular automaton, solidified microstructure, laser solid forming

**PACS:** 81.30.Fb, 81.16.Mk, 68.70.+w

**DOI:** [10.7498/aps.64.018103](https://doi.org/10.7498/aps.64.018103)

---

\* Project supported by the China Postdoctoral Science Foundation (Drant No. 2013M540771), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51271213), the National Basic Research Program of China (Grant No. 2011CB610402), the National High Technology Research and Development Program of China (Grant No. 2013AA031103), and the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education, China (Grant No. 20116102110016).

† Corresponding author. E-mail: [xlin@nwpu.edu.cn](mailto:xlin@nwpu.edu.cn)