

宏微观耦合模拟熔池不同区域中枝晶竞争生长过程*

韩日宏 董文超 陆善平[†] 李殿中 李依依

(中国科学院金属研究所, 沈阳材料科学国家(联合)实验室, 沈阳 110016)

(2014年5月27日收到; 2014年7月3日收到修改稿)

针对熔化焊过程建立了宏微观耦合模型, 模拟了熔池内不同区域凝固过程中随机取向枝晶的竞争生长过程. 通过宏观三维有限元模型计算熔池中瞬态的传热传质过程, 利用双线性插值算法将凝固参数传递给微观组织模型. 采用元胞自动机法模拟随机取向的枝晶在熔池凝固条件下的竞争生长过程. 模拟结果表明, 所建立的微观模型能够精确模拟任意生长取向的枝晶. 凝固条件中最大温度梯度方向对枝晶竞争过程有明显选择作用, 生长方向与最大温度梯度方向相同或接近的枝晶在竞争中具有更大优势. 焊缝中的晶粒组织由枝晶簇发展形成, 晶粒组织的形貌演变取决于相邻枝晶簇之间的竞争过程, 具有择优取向的枝晶簇会逐渐排挤非择优取向的枝晶簇并最终将其阻挡在凝固组织内部, 宏观晶粒的取向与其内部枝晶簇的生长方向并不一定相同. 熔池中心线附近区域在焊接过程中具有更小的温度梯度、更大的凝固速率以及更大的局部冷却速率, 凝固后可以获得更加细小的焊缝枝晶组织. 枝晶间距的模拟结果与相应凝固条件下的试验数据符合较好.

关键词: 焊接熔池, 枝晶形貌, 竞争生长, 元胞自动机

PACS: 81.20.Vj, 02.60.Cb, 61.50.Ah, 81.30.Fb

DOI: 10.7498/aps.63.228103

1 引言

熔焊技术作为一种重要的材料加工方法在工业生产中得到了广泛应用. 焊接过程中的凝固行为能够决定焊缝凝固组织, 进而影响接头的最终力学性能. 因此研究熔池中的凝固行为、预测焊缝凝固组织可以为焊接工艺参数的优化提供重要信息. 焊缝凝固组织的形貌主要取决于熔池中不同取向枝晶之间的竞争生长过程, 而不同焊接工艺可以通过改变熔池中的温度梯度、凝固速率等凝固条件来影响枝晶竞争生长过程, 从而进一步影响焊缝凝固组织和接头力学性能. 调整焊接工艺参数、控制焊缝凝固组织、提高焊接接头质量是焊接工程人员和研究人员共同追求的目标. 其中深入认识熔池凝固过程中的基本规律是实现从宏观工艺调整到微观组织性能控制的基础. 由于焊接是一个动态、高度

非线性、多物理场耦合的复杂过程, 并且熔池中还存在着激烈的对流运动, 导致直接测量熔池中动态变化的凝固条件、预测焊缝凝固组织形貌变得十分困难.

随着计算机硬件和数值模型的不断发展, 利用数值模拟已经能够直接再现凝固过程中枝晶形貌的演变过程. 相场(PF)法^[1-3]和元胞自动机(CA)法^[4-8]是两种最常用的枝晶生长模拟方法. 通过不断改进模型, 目前已经可以实现对多组元合金^[9,10]、三维尺度^[11-13]以及流场作用下^[14,15]枝晶形貌的模拟. 其中PF法可以实现对枝晶生长过程的精确定量模拟, 但其需要的计算量较大, 因此只能模拟较小的区域. 而CA法与PF法相比, 计算量大为减少, 可以模拟更大区域. 但CA法计算中会引入网格各向异性, 从而在一定程度上影响计算精度. 国内外已经应用PF法和CA法对熔池凝固过程中的枝晶形貌开展了相关研究工作. Pavlyk和

* 国家自然科学基金(批准号: 51104142)资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: shplu@imr.ac.cn

Dilthey^[16]采用CA法模拟了熔池中不同部位的枝晶生长过程,并比较了枝晶间距的变化情况,模型中设定计算区域中的枝晶生长取向全部相同. Yin和Felicelli^[17]将CA模型与宏观有限元模型耦合起来模拟了LENS (laser-engineered net shaping) 过程中工艺参数对熔池凝固枝晶组织的影响,模型中考虑了不同生长取向的枝晶,并提出了一个描述冷却速率和枝晶间距之间关系的经验公式. Tan等^[18]采用CA-PF耦合模型模拟了激光熔覆过程中凝固组织的形貌,模型中采用一维PF方法计算枝晶生长动力学,同时采用基础CA技术跟踪固液界面. Farzadi等^[19]使用PF法模拟了铝铜合金焊接熔池中的枝晶形貌,并研究了焊接参数对枝晶间距的影响,模型中的枝晶生长取向相同并且垂直于所模拟局部区域的熔池边界. Fallah等^[20]将PF模型与有限元模型相耦合,模拟了Ti-Nb合金激光粉末沉积过程中熔池内枝晶组织的形貌. 黄安国等^[21]考虑了晶粒的概率性成核,建立二维CA模型模拟了熔池中的凝固枝晶组织. Wei和Zhan^[22-24]使用CA模型模拟了Ni-Cr合金钨极氩弧焊(GTAW)熔池中枝晶的生长过程,并且提出了一种新的可以模拟有限多种枝晶生长取向的方法. 马瑞和董志波^[25]进一步将CA模型与流体力学计算相结合,研究了熔池中剪流作用下的枝晶生长和溶质分布情况. Zheng等^[26]考虑了熔池中随时间变化的凝固条件,模拟了铝合金焊接熔池内平面晶-胞状晶-树枝晶的转变过程,重点研究了枝晶尖端生长速率、界面前沿过冷度以及界面平衡溶质浓度随时间的变化情况,并将模拟所得的枝晶间距与试验结果进行了对比. 综上所述,通过已有对熔池凝固过程中枝晶形貌的研究工作,获得了很多重要结论,研究重点主要集中在不同凝固条件下熔池中枝晶形貌特征尤其是枝晶间距的变化情况,大多数研究都假定计算区域中枝晶的生长取向相同^[16,19,20,25,26],考虑了熔池凝固过程中随机取向枝晶竞争生长的模型则较少^[17,18]. 实际焊接熔池内,凝固过程往往开始于熔合线上的外延形核. 枝晶生长取向遗传自半熔化的母材晶粒,因此是随机的. 在熔池中复杂凝固条件作用下,不同取向枝晶之间发生竞争生长. 而熔池中不同取向枝晶的竞争生长过程可以决定焊缝凝固组织的形貌和性能. 因此,建立凝固过程中的枝晶生长模型、模拟熔池中不同取向枝晶之间的竞争生长及凝固组织演变过程,对深入理解焊接熔池的凝固行为、准确预测不同焊接工艺下的焊缝凝固组织具有重要的意义.

而针对焊接熔池内不同取向枝晶竞争生长过程中枝晶及晶粒组织形貌演变的系统研究目前尚未见报道.

本文针对熔化焊过程,建立了宏微观耦合模型,模拟了熔池内不同区域凝固过程中随机取向枝晶的竞争生长过程;其中宏观有限元模型用于计算熔池中瞬态的传热传质行为,采用二维CA模型模拟随机取向枝晶的竞争生长过程;通过宏观有限元模型获得整个熔池中瞬态的凝固条件并利用双线性插值算法传递给微观组织模型;分析了熔池内枝晶竞争生长过程的模拟结果,系统研究了焊缝中枝晶及晶粒组织的形成机理及其形貌演变过程,讨论了凝固条件对焊缝凝固组织选择作用的具体机理;对比研究了焊接过程中熔池内不同区域的局部凝固条件及凝固组织形貌的差别,并将枝晶间距的模拟结果与相应凝固条件下的试验结果进行了对比.

2 宏微观耦合模型

2.1 三维熔池模型

熔池中枝晶的竞争生长过程以及最终的凝固组织形貌取决于熔池中瞬态的凝固条件. 焊接过程是一个高度非线性的多物理场耦合过程,熔池中存在着激烈的对流运动,这使得熔池内部的传热传质行为变得更为复杂. 为了准确获得熔池中不同位置的瞬态凝固条件,首先建立了可以考虑熔池中复杂对流运动的三维有限元模型. 模型中存在以下基本假设: 1) 熔池内液态金属为层流、不可压缩的Newton流体,其流动和传热过程在焊缝中心两侧是对称的; 2) 熔池的自由表面为平面,不考虑其在焊接过程中的变形; 3) 不考虑熔池表面上方电弧力的影响; 4) 来源于电弧的热流密度分布和电流密度分布呈径向对称的Gaussian分布.

在满足上述基本假设的前提下,要获得熔池内部液态金属瞬态的流场和整个焊接工件上的温度场,则需要在求解域内求解质量、动量和能量守恒方程. 三维笛卡尔直角坐标系下的具体表达式如下^[27]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} &= 0, \\ \rho \left[\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right] \\ &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) \end{aligned} \quad (1)$$

$$+ \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + S_x, \quad (2)$$

$$\begin{aligned} & \rho \left[\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right] \\ &= - \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) + S_y, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} & \rho \left[\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right] \\ &= - \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial z} \right) + S_z, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} & \rho C_p \left[\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} + w \frac{\partial T}{\partial z} \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial T}{\partial y} \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial T}{\partial z} \right) + S_H, \end{aligned} \quad (5)$$

(1) 式为质量守恒方程, 式中 ρ 为金属的密度; u , v , w 为液态金属在三个方向上的速度分量; (2)—(4) 式为动量守恒方程, 式中 S_x , S_y 和 S_z 分别表示液态金属在三个方向上所受到的体积力; (5) 式是能量守恒方程, 式中 K 为热传导率, C_p 为比热容, S_H 为熔化潜热. 计算中采用的热源模型具体表达式如下:

$$q(x, y, t) = \frac{3\eta UI}{\pi r_0^2} \exp \left(-3 \frac{x^2 + (y - Vt)^2}{r_0^2} \right), \quad (6)$$

(6) 式中 r_0 为电弧作用范围的半径, U 为焊接电压, I 为焊接电流, η 为热效率系数, V 是焊接速度, t 是焊接时间. 模型中其他边界条件的设置以及守恒方程中源项的具体表达式在已发表的工作中有详细描述 [28,29].

通常焊接过程中熔池内的传热传质行为是三维问题, 使得枝晶竞争生长过程变得复杂. 当焊接工件很薄并且采用全焊透工艺时, 工件上的温度场分布在厚度方向上变化不大, 可以近似简化为二维问题. 此时焊缝凝固组织形貌也近似呈二维分布, 可以利用二维枝晶生长模型来预测实际焊缝凝固组织的形貌. 宏观模型中所用工件为 $60 \text{ mm} \times 20 \text{ mm} \times 2 \text{ mm}$ 的碳素钢薄板, 计算所用的材料热物性参数详见文献 [30]. 为保证形成全焊透的焊缝, 焊接电流为 150 A 、焊接速度为 $2 \text{ mm} \cdot \text{s}^{-1}$. 图 1 所示为焊接工件以及宏观网格剖分, 模型中采用规则的六面体网格, 以便与微观模型相耦合, 网

格尺寸为 0.2 mm .

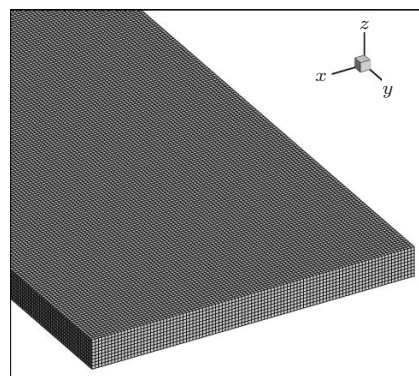


图 1 焊接工件及网格剖分

2.2 枝晶生长模型

枝晶生长过程采用 CA 法模拟, 该方法早期主要用于晶粒组织的模拟. 随着 CA 模型不断发展, 已能够模拟枝晶形貌的演变过程 [4-7,31], 在焊接领域中也得到了成功应用 [16,17,22-25]. 微观模型求解域的尺寸为 $0.6 \text{ mm} \times 0.6 \text{ mm}$, 所用元胞尺寸为 $1 \mu\text{m}$, 模型中所采用的 Fe-0.6% C 合金材料的凝固属性如表 1 所示.

表 1 Fe-0.6% C 合金物理属性 [7,31]

物理属性	取值
液相线, $T_L / ^\circ\text{C}$	1490
液相线斜率, $m_1 / \text{K} \cdot \text{wt.}\%^{-1}$	-80
溶质平衡分配系数, k	0.34
Gibbs-Thomson 系数, $\Gamma / \text{K} \cdot \text{m}$	1.9×10^{-7}
液相扩散系数, $D_L / \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	2×10^{-9}
固相扩散系数, $D_S / \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	5×10^{-10}
初始溶质浓度, $C_0 / \text{wt.}\%$	0.6

CA 模型模拟枝晶生长的具体过程如下 [5-7]:

$$C_s = k \cdot C_l, \quad (7)$$

(7) 式中 k 是溶质平衡分配系数, C_s 和 C_l 分别是固液界面两侧固相和液相中的平衡溶质浓度. 随着枝晶的生长, 溶质原子不断被排出并在界面前富集. 在溶质浓度梯度的驱动下, 溶质原子向远处的液相中扩散, 求解域中的溶质浓度分布通过求解溶质扩散方程得到:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i \cdot \nabla^2 C_i + C_i \cdot (1 - k) \frac{\partial f_s}{\partial t}, \quad (8)$$

(8) 式中 C 是溶质浓度, D 是溶质扩散系数, 下标 i 表示液相或者固相, f_s 为元胞的固相分数. 通过有限差分法求解溶质扩散方程, 在求解域边界上采用

零通量条件. 在枝晶生长过程中, 局部的枝晶形貌通过改变曲率过冷来影响凝固过程, 曲率大的部位熔点会降低. 模型在每个求解步中通过 (9) 式对所有界面态元胞的局部曲率进行求解^[5,7]. 考虑了热过冷和曲率过冷对界面平衡条件的影响, 固液界面处的平衡溶质浓度可以通过 (10) 式求解^[5]:

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

$$C_1^* = C_0 + \frac{T^* - T^{\text{eq}}}{m_l} + \frac{\Gamma K_c f(\varphi, \theta)}{m_l}, \quad (10)$$

(10) 式中 C_0 是初始溶质浓度, T^* 是局部界面处的实际温度, T^{eq} 是初始溶质浓度对应的平衡液相线温度, m_l 是液相线斜率, Γ 是 Gibbs-Thomson 系数, K_c 是局部的界面曲率. $f(\varphi, \theta)$ 是界面能各向异性函数, 其具体表达式为

$$f(\varphi, \theta) = 1 - \delta \cos[4(\varphi - \theta)], \quad (11)$$

(11) 式中, θ 是晶体生长取向与 x 轴正方向的夹角, φ 是固液界面局部法线方向与 x 轴正方向的夹角, δ 是各向异性系数. 计算过程中, 当新晶核形成后, 模型会随机产生一个生长取向赋予该晶核, 在后续的生长过程中其生长取向保持不变. 生长角度 φ 在枝晶生长过程中是随着固液界面的推移而不断变化的, 因此需要在每一个求解步中对所有界面态元胞进行重新计算, 计算原理基于界面上局部固相分数的变化率. 具体表示为

$$\varphi = \cos^{-1} \left[\frac{\partial f_s / \partial x}{((\partial f_s / \partial x)^2 + (\partial f_s / \partial y)^2)^{1/2}} \right]. \quad (12)$$

在每个求解步长中, 界面元胞的生长速率通过求解固相分数的增量确定. 固相分数的增量直接取决于由固液界面向液相中扩散的溶质的质量, 而凝

固参数可以通过改变固液界面处的平衡溶质浓度来影响溶质扩散过程和枝晶生长过程. 界面态元胞中固相分数增量的计算如 (13) 式所示^[5,32]:

$$\Delta f_s = (C_1^* - C_l) / (C_1^* \cdot (1 - k)). \quad (13)$$

早期的 CA 模型中, 界面元胞转变为固态元胞时将其近邻的四个或者八个液态元胞捕捉成为新的界面元胞, 依靠这种元胞状态的逐层传递来实现固液界面的推进. 但这种捕捉算法会引入较严重的网格各向异性, 导致枝晶只能沿坐标轴或者与坐标轴成 45° 角生长. 为了减弱网格各向异性, 近年发展出一种新的界面捕捉规则^[33,34], 其捕捉新界面的过程如图 2 所示. 计算开始时在中心元胞中放置一个正方形种子, 对角线方向与预先设置的枝晶生长取向相同, 如图 2(a) 所示. 随着中心元胞固相分数的增加, 正方形种子的尺寸不断增加, 对角线长度 L 与中心元胞固相分数的关系如 (14) 式所示:

$$L = \sqrt{2} \cdot f_s \cdot \Delta x, \quad (14)$$

式中 f_s 为界面元胞的固相分数, Δx 为元胞尺寸. 当正方形种子的顶点进入相邻液相元胞时, 将液相元胞捕捉为新的界面元胞, 如图 2(b) 所示. 新界面元胞中, 以原始种子的顶点为核心形成新的种子, 新种子根据所在界面元胞固相分数的增加而不断生长, 如图 2(c) 中所示. 这样就实现了元胞状态的逐层传递以及枝晶的生长过程.

2.3 宏微观耦合算法

宏观有限元模型中所采用的网格尺寸为 0.2 mm, 而微观枝晶生长模型中所采用的元胞尺寸为 1 μm , 二者相差两个数量级以上. 为了将随时间变化的宏观数据准确地传递给每一个微观元胞, 模型中采用空间上的双线性插值以及时间上的线性插值算法进行数据的传递, 如图 3 所示.

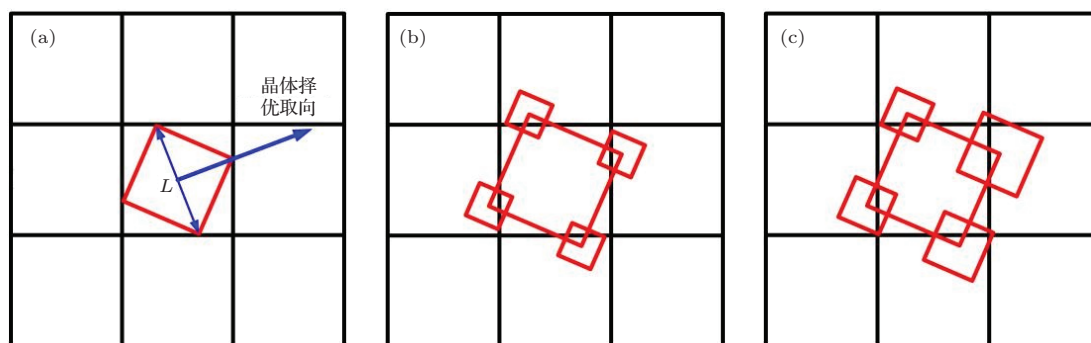


图2 界面捕捉规则示意图 (a) 放置原始种子; (b) 捕捉界面元胞; (c) 新种子继续生长

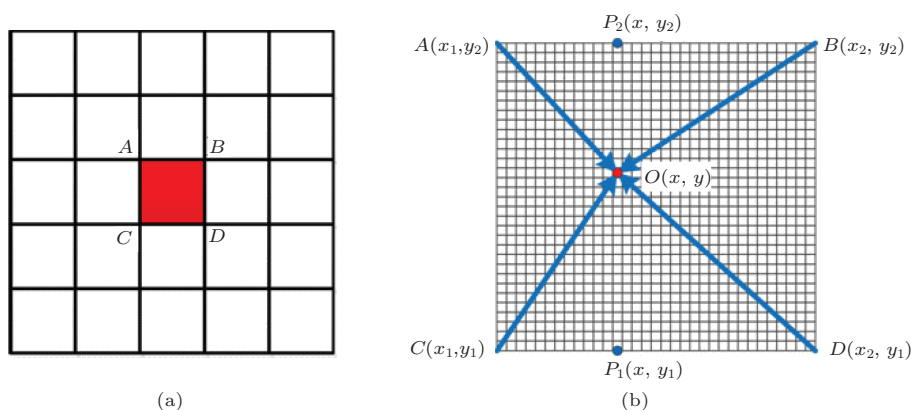


图3 (网刊彩色) 宏微观数据双线性插值算法示意图 (a) 宏观有限元网格; (b) 微观 CA 网格

图3(a)中红色区域为一个宏观网格, 如果已知四个端点 A, B, C, D 处的坐标和数据值, 通过双线性插值算法可以得到其内部任意坐标处的数据值, 如图3(b)中所示. 设点 A, B, C, D 的坐标分别为 $(x_1, y_2), (x_2, y_2), (x_1, y_1), (x_2, y_1)$, 数值分别为 $f(a), f(b), f(c)$ 和 $f(d)$, 待求点 O 的坐标为 (x, y) . 空间插值计算中, 首先计算 x 方向插值, 得到中间点 $P_1(x, y_1)$ 和 $P_2(x, y_2)$ 的数值, 如(15)和(16)式所示. 得到 P_1 和 P_2 两点数值后, 再进行 y 方向的插值计算, 得到待求点 $O(x, y)$ 的数值, 如(17)式所示.

$$f(P_1) = \frac{x_2 - x}{x_2 - x_1} f(c) + \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} f(d), \quad (15)$$

$$f(P_2) = \frac{x_2 - x}{x_2 - x_1} f(a) + \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} f(b), \quad (16)$$

$$f(O) = \frac{y_2 - y}{y_2 - y_1} f(P_1) + \frac{y - y_1}{y_2 - y_1} f(P_2). \quad (17)$$

与空间尺度类似, 宏观模型的求解步长也要远大于微观模型的求解步长, 因此宏微观耦合过程中在时间轴上也要进行插值处理. 对于求解域中任意一点, 设相邻两次宏观求解时间依次为 t_1 和 t_2 , 输出的结果分别为 $f(t_1)$ 和 $f(t_2)$, 则宏观求解步长为 $t_2 - t_1$. 对于 t_1 和 t_2 之间任意时刻 t 的解, 可以通过(18)式计算得到. 为保持空间插值和时间插值的精度, 应注意控制宏微观网格尺寸和求解步长的数量级, 使其在满足计算量要求的基础上尽量接近.

$$f(t) = f(t_1) + \frac{f(t_2) - f(t_1)}{t_2 - t_1} (t - t_1). \quad (18)$$

3 模拟结果与分析

3.1 温度场模拟结果

图4是工件上表面温度场模拟结果, 由于采用薄板全焊透工艺, 温度场在焊接工件厚度方向上变

化不大. 因此可以用上表面的温度场近似反映整个工件上的温度场, 通过上表面的焊缝凝固组织来近似代表整个焊缝中凝固组织的形貌. 为了研究熔池中不同部位的局部凝固条件以及其对枝晶竞争生长过程和焊缝凝固组织的影响, 在熔池不同部位选取两处 $0.6 \text{ mm} \times 0.6 \text{ mm}$ 的区域作为微观枝晶模型的求解区域, 如图4中黑色区域所示. 其中靠近熔合线的区域定义为A区域, 靠近焊缝中心线的区域定义为B区域.

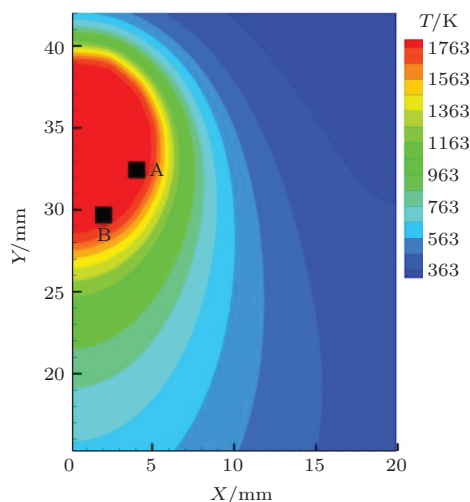


图4 (网刊彩色) 工件上表面焊接温度场结果

通过上文1.3节中所述的双线性插值算法, 可以由宏观有限元模拟结果得到区域A, B中所有元胞在凝固过程中任意时刻的温度场. 如图5中所示的是区域A, B在凝固过程开始前的温度场, 其中图5(a)为区域A的温度场, 图5(b)为区域B的温度场. 通过对比可以发现, A, B两区域在熔池中所处的位置不同, 最大温度梯度的方向明显不同. 整个熔池沿焊接方向的移动速度是相同的, 造成A, B两区域的局部凝固速率不同. 由于区域A靠

近熔合线, 离熔池外部冷金属较近, 区域A中的温度梯度明显高于区域B. 两区域中不同的凝固条件将会影响凝固过程中不同取向枝晶的竞争生长过程以及凝固后的焊缝组织. 区域A, B的平均温度梯度分别为 2.5×10^5 和 $1.7 \times 10^5 \text{ K}\cdot\text{s}^{-1}$, 凝固速率分别为 0.78 和 $1.7 \text{ mm}\cdot\text{s}^{-1}$, 冷却速率分别为 195 和 $289 \text{ K}\cdot\text{s}^{-1}$.

3.2 不同取向的等轴枝晶

相比于铸造过程, 焊接熔池体积小, 但凝固条件复杂, 导致焊缝的凝固组织也变得复杂. 熔池凝固过程中, 不同取向枝晶间的竞争过程可以决定焊缝凝固组织的形貌, 凝固条件通过控制不同取向枝晶的竞争结果来影响焊缝凝固组织的形貌. 要准确

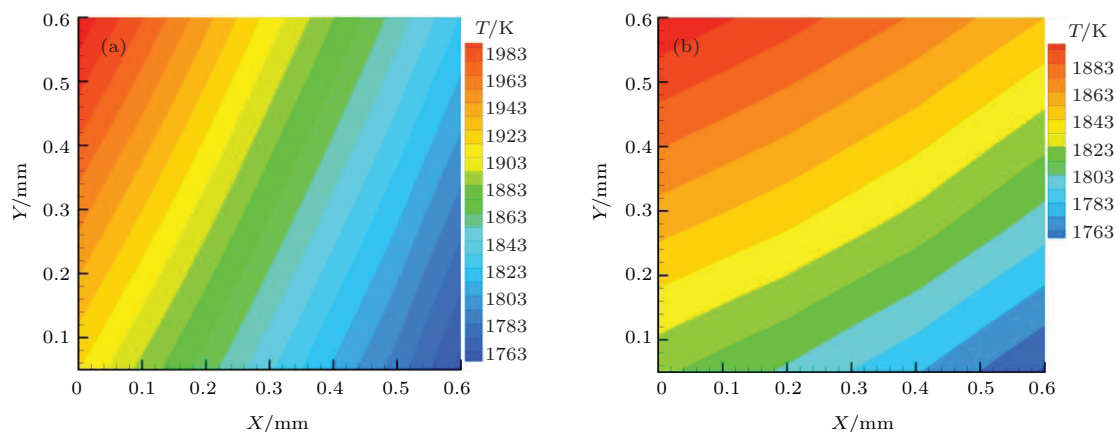


图5 (网刊彩色) 通过双线性插值获得的微观求解域温度场 (a) 区域A 温度场; (b) 区域B 温度场

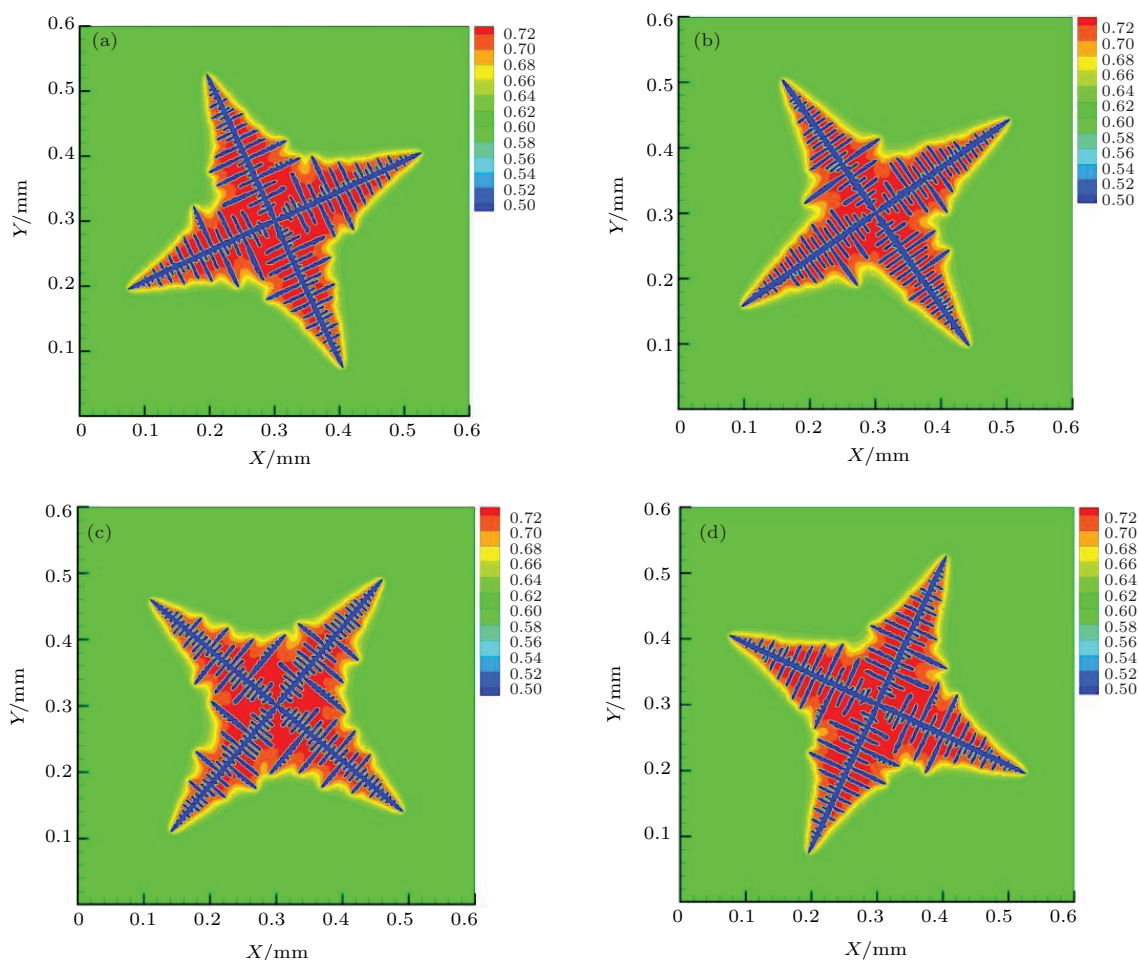


图6 (网刊彩色) 不同生长取向的等轴枝晶 (a) 与 x 轴正方向夹角为 25° ; (b) 与 x 轴正方向夹角为 35° ; (c) 与 x 轴正方向夹角为 50° ; (d) 与 x 轴正方向夹角为 65°

模拟熔池中不同凝固条件下的枝晶竞争生长过程以及预测焊缝凝固组织形貌, 首先必须能够精确模拟出任意生长取向的枝晶. 由于网格各向异性的干扰, 精确模拟任意生长取向的枝晶一直是CA方法的一个难点. 为验证所建立的微观枝晶模型的准确性, 以便能够准确模拟熔池中不同取向枝晶的竞争生长过程, 首先对不同生长取向的等轴枝晶进行了计算, 结果如图6中所示. 计算域大小为 $600\ \mu\text{m} \times 600\ \mu\text{m}$, 元胞尺寸为 $1\ \mu\text{m}$, 过冷度为 8 K, 枝晶生长取向与 x 轴正方向的夹角分别为 25° , 35° , 50° 和 65° . 通过对模拟结果的实际生长角度进行测量并与预设生长取向进行比较可以发现, 对于不同生长取向的等轴枝晶, 实际生长角度都与预设的生长取向完全一致, 而且不同取向等轴枝晶的一次主干长度基本一致, 表明所建立的枝晶生长模型可以准确模拟任意取向的枝晶.

3.3 枝晶竞争生长

熔池中不同生长取向的枝晶在特定凝固条件下的竞争生长过程不仅可以决定焊缝中枝晶组织的形貌, 而且还可以决定晶粒组织的形貌. 图7所示为焊接时区域A中自凝固开始0.3, 0.5, 0.7以及0.9 s时枝晶和晶粒组织的形貌. 图8所示为焊接时区域B中自凝固开始0.2, 0.3 0.4以及0.5 s时枝晶和晶粒组织的形貌. 凝固开始前在微观模型求解区域的底边和右侧边界上预先设置晶核, 晶核的生长取向随机赋予, 晶核间距为 $35\ \mu\text{m}$, 用于表征进入求解域之前的熔池内晶粒尺寸. 求解域A, B中的温度场分别如图5(a)和(b)所示.

由图7和图8中的模拟结果可知, 随着凝固过程的进行, 熔池尾部边界开始扫过微观模型求解域, 方向由右下方向左上方. 随着熔池边界的推进, 求解域中右下方区域最先处于过冷区域, 处于此区域的晶核在过冷度的驱动下开始沿着自身的生长取向生长. 随着凝固过程的继续进行, 越来越多的晶核开始生长. 由于每个枝晶在生长过程中都必须保持自身的生长取向, 因此不同取向的枝晶在生长过程中会不可避免地相遇, 即发生竞争生长. 在枝晶竞争生长过程中, 局部凝固条件中最大温度梯度方向能够直接影响竞争结果. 由图5中所示的温度场结果以及图7中的枝晶竞争结果可知, 生长取向与最大温度梯度方向重合或者接近的枝晶在竞争

中更容易取得优势, 而生长取向与最大温度梯度方向相差较大的枝晶在竞争过程中会被阻挡. 在最终的凝固组织中存在的都是生长取向接近最大温度梯度方向的枝晶, 这就是凝固条件对枝晶竞争生长的选择作用. 进一步分析选择作用的机理可知, 熔池中存在很大的正温度梯度, 而枝晶的生长过程则需要过冷度来驱动, 因此枝晶尖端不可能超过液相线而存在于熔池过热区域中. 凝固过程中枝晶尖端离液相线更近的枝晶因其前方不可能存在其他枝晶的阻碍而具有更大的竞争优势. 由于液相线在凝固过程中是不断向前推移的, 前进方向便是局部的最大温度梯度方向. 生长取向与最大温度梯度方向也就是液相线推移方向重合的枝晶可以沿着更短的路径更快地到达凝固前沿, 从而在竞争生长中占据优势.

对于焊缝晶粒组织而言, 其形成过程也取决于不同取向枝晶的竞争生长. 晶粒由具有相同生长取向的枝晶簇发展形成. 枝晶簇可以起源于外延形核时的半熔化基体晶粒, 也可以由一个晶核通过不断分枝发展而来. 如图7和图8中的模拟结果所示, 焊缝中晶粒组织的形貌在凝固过程中也是不断发展的, 发展过程取决于相邻不同取向枝晶簇之间的竞争结果. 由于生长取向与最大温度梯度方向相近的枝晶在竞争生长中更有优势. 因此对于不同取向的枝晶簇, 定义与最大温度梯度方向相同或相近的生长取向为择优取向, 而相差较大的生长方向为非择优取向. 具有择优取向的枝晶簇会逐渐排挤其他非择优取向的枝晶簇, 并通过不断分出新的枝晶分枝来占据更大的空间, 使最终形成的晶粒组织不断粗化. 而非择优取向的枝晶簇则会逐渐被阻挡, 生长空间逐渐被压缩, 形成的晶粒最终也会被其他晶粒所包围. 晶粒组织中晶界的走向取决于相邻枝晶簇的竞争结果, 并不一定与其内部枝晶簇的生长取向一致. 即凝固后晶粒组织的宏观取向与其内部枝晶簇的生长取向可能不同, 如图7中晶粒H和图8中晶粒G所示.

对比分析图7和图8中的模拟结果可知, 区域A, B中枝晶竞生长以及凝固组织的形成过程是相同的, 由于凝固条件尤其是最大温度梯度方向的变化, 导致区域B中的凝固组织取向与区域A相比发生变化. 为进一步比较研究熔池中不同部位的具体

凝固条件以及其对焊缝凝固组织的影响, 对图7和图8中枝晶组织的平均一次枝晶间距 (PDAS) 和二

次枝晶间距 (SDAS) 进行统计, 并结合两区域各自的局部凝固条件, 结果如表2所示.

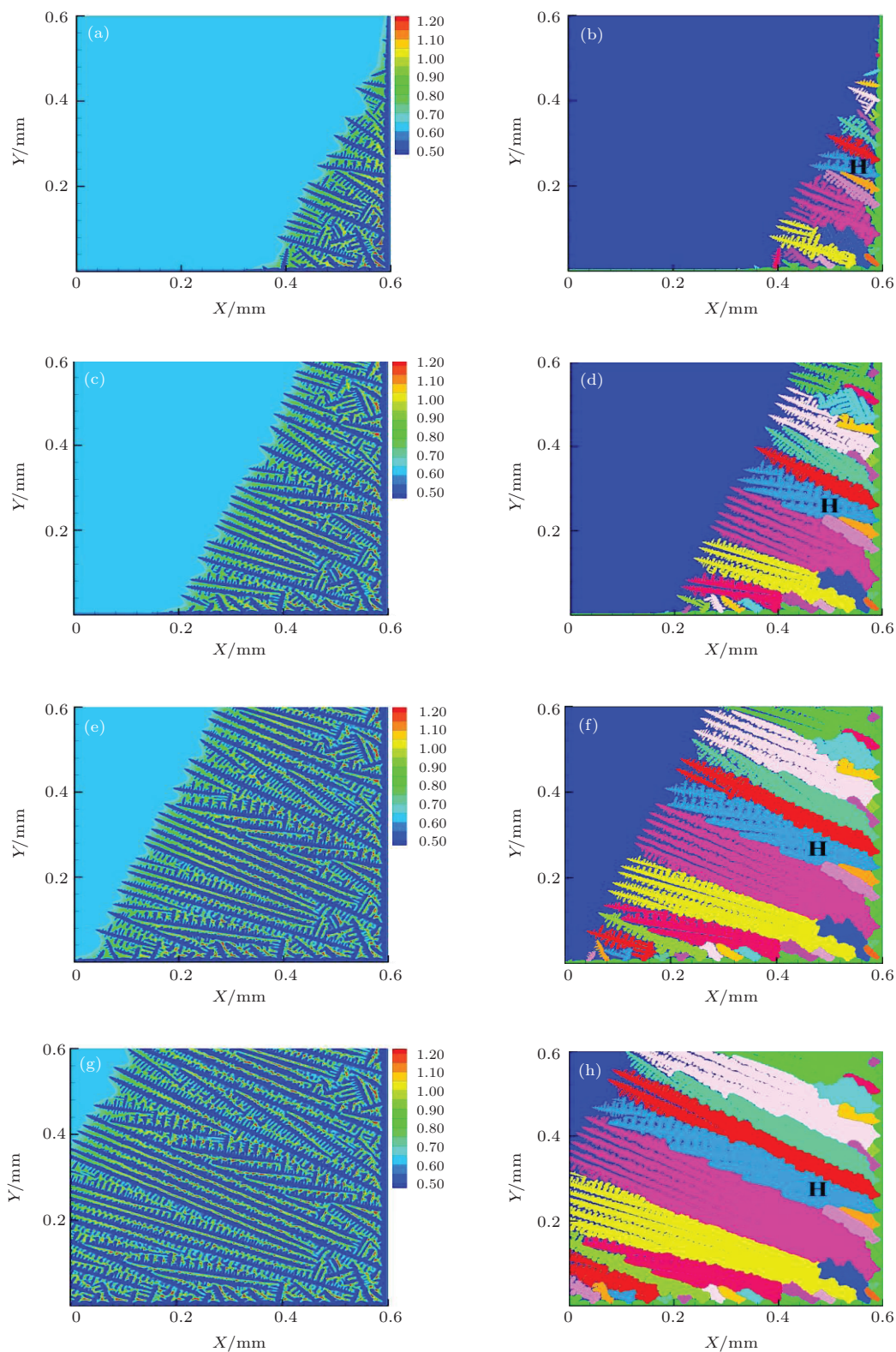


图7 (网刊彩色) 区域A中枝晶和晶粒组织的形貌演变过程 (a) $t = 0.3$ s时的枝晶形貌; (b) $t = 0.3$ s时的晶粒组织形貌; (c) $t = 0.5$ s时的枝晶形貌; (d) $t = 0.5$ s时的晶粒组织形貌; (e) $t = 0.7$ s时的枝晶形貌; (f) $t = 0.7$ s时的晶粒组织形貌; (g) $t = 0.9$ s时的枝晶形貌; (h) $t = 0.9$ s时的晶粒组织形貌

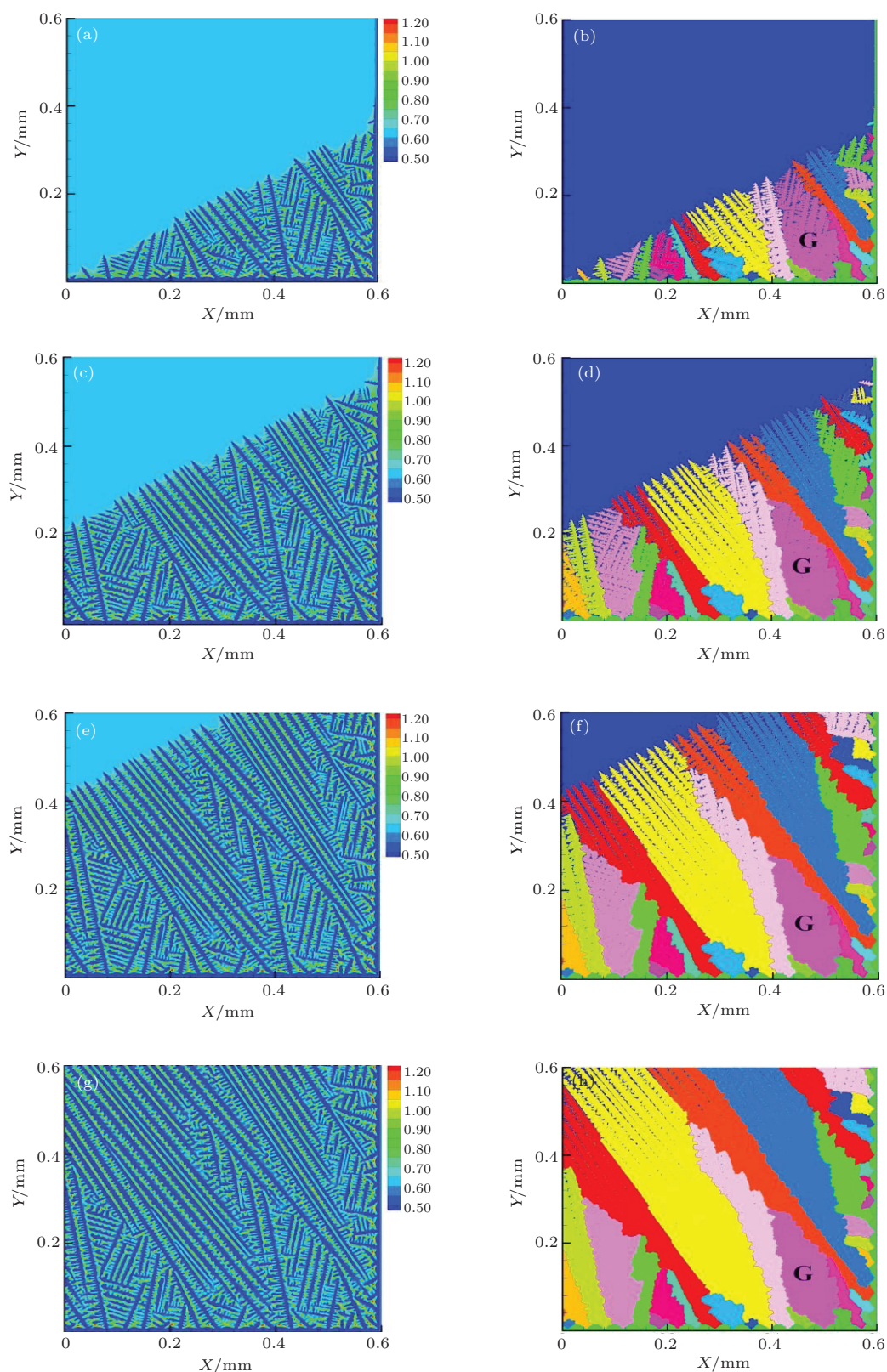


图8 (网刊彩色) 区域B中枝晶和晶粒组织的形貌演变过程 (a) $t = 0.2$ s时的枝晶形貌; (b) $t = 0.2$ s时的晶粒组织形貌; (c) $t = 0.3$ s时的枝晶形貌; (d) $t = 0.3$ s时的晶粒组织形貌; (e) $t = 0.4$ s时的枝晶形貌; (f) $t = 0.4$ s时的晶粒组织形貌; (g) $t = 0.5$ s时的枝晶形貌; (h) $t = 0.5$ s时的晶粒组织形貌

由表2可知, 区域A由于靠近熔合线边缘, 外部紧邻冷金属, 因此具有更大的温度梯度. 由于局部最大温度梯度方向与焊接方向夹角较大, 因而

具有更小的局部凝固速率. 相比于区域A, 区域B的温度梯度更小而凝固速率更大. 通过计算温度梯度与凝固速率的乘积可以得到两区域的局部冷

却速率. 由计算结果可知, 区域 A, B 的局部冷却速率分别为 195 和 289 $\text{K}\cdot\text{s}^{-1}$. 枝晶间距统计结果表明, 区域 B 中凝固枝晶组织的 PDAS 和 SDAS 均小于区域 A, 即区域 B 中凝固枝晶组织较区域 A 中更加细小. 为验证模拟结果的准确性, 将模拟所得的 PDAS 和 SDAS 结果与文献中报道的不同冷速下枝晶间距的试验结果^[35]进行了比较, 结果如图 9 所示. 由图 9 中试验结果可知, 随着冷却速率的增加, SDAS 不断减小, 表明凝固枝晶组织更加细小, 与模拟结果所得的趋势一致. 对具体数值进行比较可知, 模拟所得的 SDAS 与对应冷却速率下的试验结果符合较好, 表明凝固组织的模拟结果是

较为准确的.

与枝晶间距的变化趋势不同, 图 7 和图 8 中的模拟结果表明, 冷却速率的增加并没有明显细化焊缝中的晶粒组织, 这是由于晶粒的尺寸主要取决于其内部枝晶簇与其他枝晶簇的竞争结果. 在相同的空间中, 竞争幸存的晶粒越少, 其平均尺寸越大. 即使在更大的冷却速率下, 枝晶簇的枝晶间距减小, 枝晶簇还可以通过分出新的分支来扩大所形成晶粒的尺寸. 因此在没有新晶粒形成的情况下, 焊缝中晶粒组织的尺寸并不一定随着冷速的增加而减小.

表 2 区域 A, B 中局部凝固条件与枝晶间距

位置	温度梯度/ $\text{K}\cdot\text{m}^{-1}$	凝固速率/ $\text{mm}\cdot\text{s}^{-1}$	冷却速度/ $\text{K}\cdot\text{s}^{-1}$	一次枝晶间距/ μm	二次枝晶间距/ μm
A	2.5×10^5	0.78	195	23	10.7
B	1.7×10^5	1.7	289	17	8.67

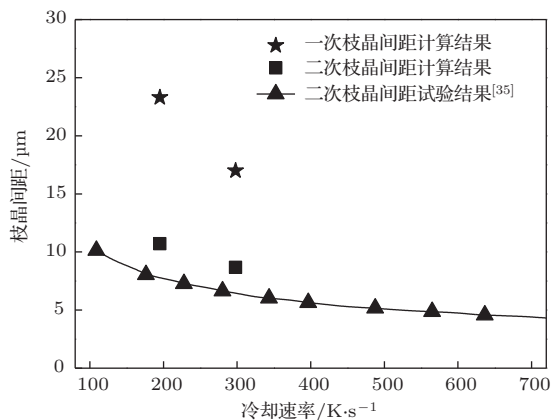


图 9 不同冷速下的枝晶间距

4 结 论

建立了宏微观耦合模型, 模拟了熔池内不同部位凝固过程中随机取向枝晶的竞争生长过程. 模拟结果表明: 1) 所建立的枝晶生长模型能够准确模拟任意生长取向的枝晶; 2) 凝固条件中最大温度梯度方向对枝晶竞争结果有明显的选择作用, 生长取向与最大温度梯度方向相同或接近的枝晶在竞争中具有更大优势, 而生长取向与最大温度梯度方向相差较大的枝晶在凝固过程中会被阻挡; 3) 晶粒组织由枝晶簇发展形成, 晶粒组织的形貌演变取决于相邻枝晶簇之间的竞争过程, 具有择优取向的枝晶簇会逐渐排挤非择优取向的枝晶簇并最终将其阻挡在凝固组织内部, 宏观晶粒的取向与其内部枝晶簇

的生长取向不一定相同; 4) 靠近焊缝中心的区域 B 在焊接过程中具有更小的温度梯度、更大的凝固速率以及更大的局部冷却速度, 凝固后可以获得更加细小的焊缝枝晶组织. 枝晶间距的模拟结果与相应凝固条件下的试验数据符合较好.

参考文献

- [1] Echebarria B, Karma A, Plapp M 2004 *Phys. Rev. E* **70** 061604
- [2] Chen Y, Kang X H, Li D Z 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 390 (in Chinese) [陈云, 康秀红, 李殿中 2009 物理学报 **58** 390]
- [3] Karma A 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 115701
- [4] Nastac L 1999 *Acta Mater.* **47** 4253
- [5] Zhu M F, Stefanescu D M 2007 *Acta Mater.* **55** 1741
- [6] Beltran-Sanchez L, Stefanescu D M 2003 *Metall. Mater. Trans. A* **34** 367
- [7] Beltran-Sanchez L, Stefanescu D M 2004 *Metall. Mater. Trans. A* **35** 2471
- [8] Li Q, Li D Z, Qian B N 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 3477 (in Chinese) [李强, 李殿中, 钱百年 2004 物理学报 **53** 3477]
- [9] Shi Y F, Xu Q Y, Liu B C 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 108101 (in Chinese) [石玉峰, 许庆彦, 柳百成 2012 物理学报 **61** 108101]
- [10] Micheli S C, Thuswaldner J M, Bernhard C 2010 *Acta Mater.* **58** 2738
- [11] Li Y, Kim J 2012 *Int. J. Heat Mass Transfer* **55** 7926
- [12] Pan S Y, Zhu M F 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 278 (in Chinese) [潘诗琰, 朱鸣芳 2009 物理学报 **58** 278]
- [13] Pan S, Zhu M 2010 *Acta Mater.* **58** 340
- [14] Lu Y, Beckermann C, Ramirez J C 2005 *J. Cryst. Growth* **280** 320

- [15] Shi Y F, Xu Q Y, Liu B C 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 108101 (in Chinese) [石玉峰, 许庆彦, 柳百成 2012 物理学报 **61** 108101]
- [16] Pavlyk V, Diltthey U 2004 *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **12** S33
- [17] Yin H, Felicelli S D 2010 *Acta Mater.* **58** 1455
- [18] Tan W, Wen S, Bailey N, Shin Y C 2011 *Metall. Mater. Trans. B* **42** 1306
- [19] Farzadi A, Do-Quang M, Serajzadeh S, Kokabi A, Amberg G 2008 *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **16** 065005
- [20] Fallah V, Amoorezaei M, Provatas N, Corbin S, Khajepour A 2012 *Acta Mater.* **60** 1633
- [21] Huang A G, Yu S F, Li Z Y 2008 *Trans. China Weld. Inst.* **29** 45 (in Chinese) [黄安国, 余圣甫, 李志远 2008 焊接学报 **29** 45]
- [22] Wei Y, Zhan X, Dong Z, Yu L 2007 *Sci. Technol. Weld. Joi.* **12** 138
- [23] Zhan X, Wei Y, Dong Z 2008 *J. Mater. Process. Tech.* **208** 1
- [24] Zhan X, Dong Z, Wei Y, Ma R 2009 *J. Cryst. Growth* **311** 4778
- [25] Dong Z, Wang S, Ma R, Wei Y, Song K, Zhai G 2011 *J. Mater. Sci. Technol.* **27** 183
- [26] Zheng W J, Dong Z B, Wei Y H, Song K J, Guo J L, Wang Y 2014 *Comp. Mater. Sci.* **82** 525
- [27] Ye Y H, Chen X 2002 *Chin. Phys. Lett.* **19** 788
- [28] Dong W C, Lu S P, Li D Z, Li Y Y 2011 *Int. J. Heat Mass Transfer* **54** 1420
- [29] Lu S P, Dong W C, Li D Z, Li Y Y 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** S94 (in Chinese) [陆善平, 董文超, 李殿中, 李依依 2009 物理学报 **58** S94]
- [30] Shi Y, Han R H, Huang J K, Fan D 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 20205 (in Chinese) [石玓, 韩日宏, 黄健康, 樊丁 2012 物理学报 **61** 20205]
- [31] Luo S, Zhu M Y 2013 *Comp. Mater. Sci.* **71** 10
- [32] Yin H, Felicelli S D 2009 *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **17** 075011
- [33] Wang W, Lee P, McLean M 2003 *Acta Mater.* **51** 2971
- [34] Nakagawa M, Natsume Y, Ohsasa K 2006 *ISIJ Int.* **46** 909
- [35] Paul A, DebRoy T 1988 *Metall. Mater. Trans. B* **19** 851

Macro-micro coupled simulation of competitive dendrite growth in different areas of the welding pool^{*}

Han Ri-Hong Dong Wen-Chao Lu Shan-Ping[†] Li Dian-Zhong Li Yi-Yi

(Shenyang National Laboratory for Materials Science, Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences,
Shenyang 110016, China)

(Received 27 May 2014; revised manuscript received 3 July 2014)

Abstract

A macro-micro coupled model is developed to simulate the competitive dendrite growths in different areas of the welding pool in the solidification process. The transient solidification conditions in welding pool are obtained by the three-dimensional (3D) macro-scale FEM model. The thermal conditions used in the micro-scale cellular automata model is obtained from the macro-scale FEM model by using the interpolation algorithm. The simulation results indicate that the micro-scale cellular automata model developed in this paper can simulate the morphologies of dendrites with various growth directions accurately. The solidification conditions in welding pool have obvious effects on the competitive dendrite growth. The dendrites with their preferential orientations parallel to the direction of the highest temperature gradient are more competitive. The morphology of grain structure is determined by the competition among different dendritic arrays. The dendritic arrays with more favorable growth direction can gradually crowd out other dendritic arrays and occupy more space through dendrite branching. The area near the central line of welding pool has a lower temperature gradient, a higher solidification rate, and a higher cooling rate in the solidification process, and such solidification conditions lead to the finer microstructure. The simulation results of the secondary dendrite arm spacing are in agreement with the experimental results under the corresponding solidification conditions.

Keywords: welding pool, dendrite morphology, competitive growth, cellular automata

PACS: 81.20.Vj, 02.60.Cb, 61.50.Ah, 81.30.Fb

DOI: 10.7498/aps.63.228103

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51104142).

[†] Corresponding author. E-mail: shplu@imr.ac.cn