

纯金属 TIG 焊熔池等轴晶生长的相场法模拟

魏艳红^{1,2}, 王 勇¹, 董志波¹, 马 瑞¹, 占小红²

(1. 哈尔滨工业大学 现代焊接生产技术国家重点实验室, 哈尔滨 150001;

2. 南京航空航天大学 材料科学与技术学院, 南京 210016)

摘 要: 焊接熔池冷却速度快、凝固时间短、过冷度大, 结合以上特点构建相场法与有限差分的耦合数学模型, 对 TIG 焊接熔池中等轴晶生长过程进行研究。首先, 利用该模型成功模拟了纯镍焊接熔池中心区域单个等轴晶生长过程形态演变。进一步研究了不同过冷条件下, 等轴枝晶生长形貌和生长行为的变化规律, 模拟结果符合固液界面形貌稳定性理论。同时, 初步计算了多晶粒竞争生长形态, 计算结果清晰再现了不同晶粒间侧枝的竞争生长微观现象, 为更深入的研究工作奠定了基础。

关键词: 熔池凝固; 相场法; 微观组织; 数值模拟

中图分类号: TG111.4 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-360X(2011)03-0001-04



魏艳红

0 序 言

焊接构件中, 接头微观组织的尺寸、形貌等对其性能产生重要影响。焊接过程的高温、动态、瞬时性等特点制约了以试验方法对熔池微观组织演变过程的观察和研究。目前主要采用数值模拟方法结合计算机的卓越计算能力实现对凝固过程中微观组织演变和晶粒生长的计算和分析。国内外很多学者已采用蒙特卡罗和元胞自动机等数值模拟方法^[1]对微观组织演变进行了大量研究, 然而, 在取得显著成果的同时也遇到了固液界面跟踪复杂、物理基础不明确、温度场、流场以及应力应变场耦合困难等有待突破的难点。新兴的相场法以凝固热力学和动力学为依据, 引入有序化势参量实现对非平衡状态下相界面演变的描述, 无需复杂的固液界面跟踪处理, 同时可实现多因素场隐式耦合, 从而克服以往研究方法的缺点, 成为目前优势突出的模拟方法, 其产生与发展对于结合现有的数值方法, 实现微观组织演变过程由微观、介观到宏观多个尺度级别的研究提供了

一条新的思路。

基于相场法对熔池凝固问题展开研究有助于真实再现焊缝凝固过程和定量描述微观组织形态, 有利于揭示熔池晶粒的形核和生长规律。为此, 文中构建了一个适用于纯镍焊接熔池内等轴晶生长的相场模型, 并基于该模型研究不同冷却条件下枝晶形貌和生长行为的变化规律以及多晶粒间竞争生长行为。

1 模型建立

焊接过程冷速快, 熔池金属在较大的过冷度下开始凝固, 因而过冷度较小的铸造凝固过程数学模型不再适用。为此, 基于 Karma 等人^[2]二维纯金属相场模型基本形式, 改用 Tong 等人^[3]提出的双稳态势函数(以 $\varphi=1$ 表示固相; $\varphi=0$ 表示液相; 固液界面上 φ 的值在 0~1 之间连续变化)构建模型, 以满足熔池金属凝固时间短、初始过冷度大的特点。

1.1 相场控制方程

相场控制方程表达式为

$$\tau \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \nabla [\varepsilon_0^2 a_s^2(\mathbf{n}) \nabla \varphi] - \frac{\partial}{\partial x} \left[\varepsilon_0^2 a_s(\mathbf{n}) a'_s(\mathbf{n}) \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\varepsilon_0^2 a_s(\mathbf{n}) a'_s(\mathbf{n}) \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right] + 2\varphi(1-\varphi)[2\varphi-1-4\lambda\varphi(1-\varphi)u] \quad (1)$$

式中: φ 是相场参量; $a_s(\mathbf{n}) = 1 + \gamma \cos k(\theta)$ 为晶粒生长的各向异性因子; $\mathbf{n}$ 为固液界面法向; γ 是表征各向异性强度的系数; k 为晶体对称度; $\theta = \arctan$

(φ_y/φ_x) 为 $\mathbf{n}$ 与参考坐标系 x 轴的夹角; $\tau = \tau_0 [1 + \gamma \cos k(\theta)]^2$ 为固液界面原子运动时间; τ_0 是表征界面原子运动时间的常量; $\varepsilon = \varepsilon_0 [1 + \gamma \cos k(\theta)]$ 为固液界面厚度; ε_0 是表征界面厚度的常量; τ 和 ε 均经无量纲化处理; $u = (T - T_M)/(L/c_p)$ 为无量纲

温度; L 和 c_p 分别为凝固时的潜热和比定压热容; T 为温度; T_M 为材料熔点; t 表示无量纲时间; λ 是表征相场与温度场耦合强度的常数, 它的取值由材料本身物理性能决定, 文中按照 Karma 渐进分析法^[2] 所得 $\lambda = 0.8839(\varepsilon_0/d_0)$, $d_0 = \sigma_0 T_M c_p / L^2$ 为毛细长度, σ_0 为具有立方对称性的各向同性晶粒的界面自由能。

1.2 能量守恒方程

在导热微分方程中添加噪声扰动项和结晶潜热项, 得到能量守恒方程, 即

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_T \nabla^2 u + \frac{\partial h(\varphi)}{\partial t} + \xi \varphi (1 - \varphi) \alpha \quad (2)$$

式中: D_T 为热扩散系数; ξ 为取值于 x 轴上的符合高斯分布的随机数; $\alpha = \partial \alpha / \partial t$ 是高斯热扰动强度因子, 即噪声振幅, 用 $\varphi(1 - \varphi)$ 项来强制扰动仅在固液界面出现; 用 $h(\varphi) = \varphi$ 表示固液两相能量势垒函数。

2 数值求解条件

2.1 初始条件与边界条件

以熔池中心处微小区域作为计算域, 假设整个区域内充满着均匀一致且具有较大初始过冷度的金属液, 区域中心即坐标原点有一半径为 r 的圆盘状初始晶核, 晶轴沿 x 和 y 轴方向, 初始条件表达如下

$$x^2 + y^2 \leq r^2 \text{ 时, } \varphi = 1, u = 0 \quad (3)$$

$$x^2 + y^2 > r^2 \text{ 时, } \varphi = 0, u = \frac{T_0 - T_M}{(L/c_p)} = -\Delta \quad (4)$$

式中: T_0 为开始凝固温度, 取决于焊接速度和热输入; Δ 表示无量纲过冷度。

对能量守恒方程采用 Zero-Neumann 温度边界条件, 相场控制方程采用零通量边界条件, 即

$$\frac{\partial u}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0 \quad (5)$$

2.2 熔池冷却条件分析

采用 Marc 软件建立纯镍平板堆焊有限元模型, 计算焊接速度为 2 mm/s, 焊接电流和电弧电压分别为 120 A, 14 V 条件下的温度场, 模拟结果如图 1 所示。熔池中心处某节点的焊接热循环曲线如图 2 所示。

对纯镍熔点 1 455 °C 附近两个较短时间区间 $\Delta t_1 = 0.25$ s 和 $\Delta t_2 = 1$ s 内分别提取冷却速度的平均值, 得 $v_{c1} = 337.84$ °C/s, $v_{c2} = 226.34$ °C/s。冷却速度仍处于亚快速凝固范围。为简化分析, 将熔池中心部金属从熔点开始降温约 0.1 ~ 0.15 s 的短时凝固过程近似为在一个在较大初始过冷条件下的凝固过程。参考亚快速凝固过程^[4], 选定 105 ~ 250 °C 为熔池中心部凝固时的初始过冷度计算范围。

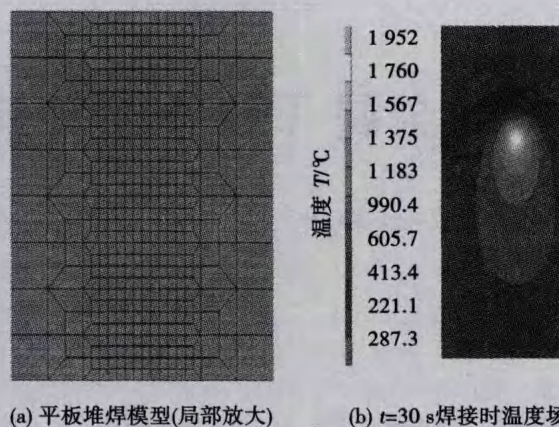


图 1 模拟纯镍焊接温度场结果

Fig. 1 Simulated macro temperature field of pure Nickel

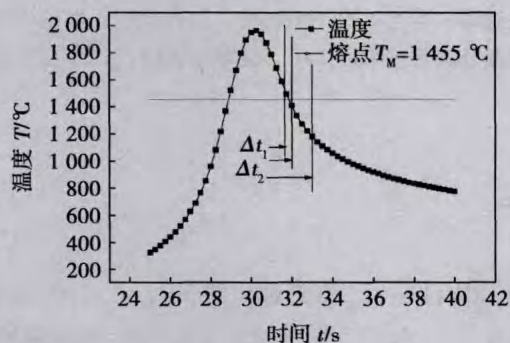


图 2 熔池中心区域热循环曲线

Fig. 2 Thermal cycle curve of central area in molten pool

2.3 计算参数选取

取无量纲的界面厚度参数 $\varepsilon_0 = 1$, 空间步长 $\Delta x = 0.4\varepsilon_0$, 晶体对称度 $k = 4$, 各向异性系数 $\gamma = 0.05$, 过冷度 $\Delta = 0.555$, 高斯热噪声振幅 $\alpha = 0.01$, 其它热物理性能的选取参照纯镍热物理性能参数^[5], 见表 1。

表 1 纯镍热物理性能参数

Table 1 Thermo-physical parameters of pure nickel

界面能	熔点	潜热	比定压热容	热扩散系数
$\sigma_0 / (\text{J} \cdot \text{cm}^{-2})$	T_M / K	$L / (\text{J} \cdot \text{cm}^{-3})$	$c_p / (\text{J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{cm}^{-3})$	$D_T / (\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1})$
3.7×10^{-5}	1 728	2 350	5.42	0.155

3 结果与讨论

3.1 单个等轴晶自由连续生长

图 3 所示为模拟所得单个等轴晶自由生长形态。可以看出: 随时间推移, 圆盘形晶核逐渐呈现各向异性生长, 随生长速度增加, 主轴快速拉长, 当主轴生长到一定长度时, 二次枝晶出现, 不断长大粗

化,根部出现明显的颈缩。当生长进行到 $t = 95\,000\Delta t$ 时刻,在与主轴成 45° 方向出现二次枝晶的竞争生长,在相遇后,其生长偏离原方向,这是由于两者温度场互相干涉,在 45° 方向重叠,导致该处温度升高迫使二次枝晶转向于过冷度较大的方向继续生长。在距离主轴尖端较远的几个波长范围内的界面上始终光滑未出现波动,同时无侧枝生长。

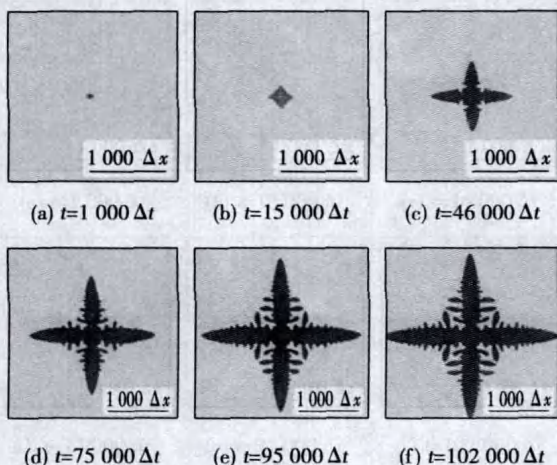


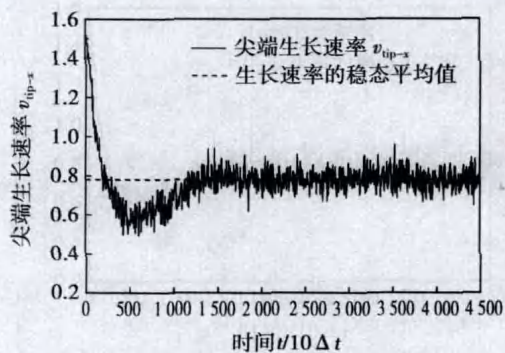
图3 不同时刻枝晶生长形态变化(相场图)

Fig. 3 Evolution of dendrite morphologies obtained by simulations at different time (phase-field)

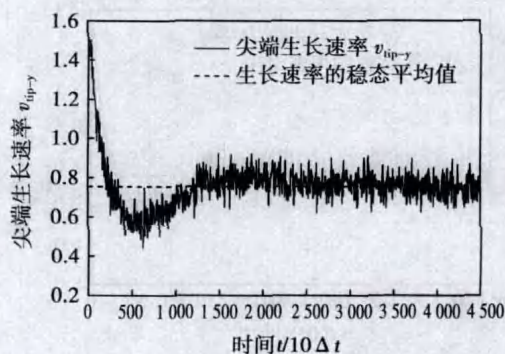
枝晶两主轴即 x, y 轴尖端生长速率 v_{ip} 和曲率半径 R_{ip} 呈现差异,如图4和图5所示。稳态生长阶段, x 轴尖端生长速率和曲率半径的统计平均值都高于 y 轴数据。同时,提取枝晶尖端位置坐标,发现 x 轴尖端比 y 轴尖端更远离于对称中心。重复数据模拟计算多次后证实:两主轴尖端实时数据不重合,稳态平均值总存在小幅度差异。枝晶尖端生长状态呈现随机性波动,两主轴生长速度并不完全相等,但最终都趋于稳定。

3.2 不同过冷条件下等轴晶生长行为

设置无量纲过冷度 $\Delta = 0.25, 0.45, 0.555, 0.58$, 进行模拟计算,枝晶形貌如图6所示。不同过冷度下,枝晶形貌出现较大差别。在图6a,b小过冷条件下,枝晶尺寸小且界面光滑,无二次枝晶产生;但在图6c,d两个较高过冷条件下,距离主轴尖端几个波长的位置开始出现二次分支。过冷度越大,二次枝晶生长越发达,甚至出现三次枝晶臂,如图6d中 y 轴根部接近晶核位置处长出一个较粗大的二次枝晶,并且仅在该二次枝晶的单侧界面上出现微小的三次枝晶,这种现象与 Glicksman 等人^[6]的试验相符合。二次枝晶间彼此相互影响,沿 x 轴方向排列的二次枝晶受到 y 轴根部粗大侧枝的压迫而转向



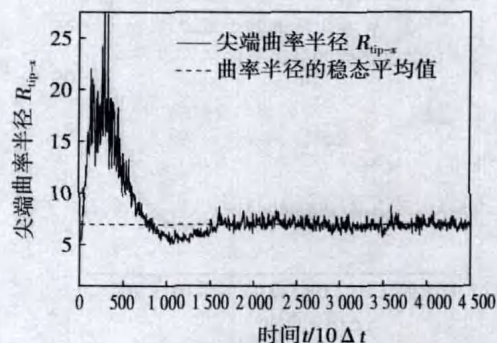
(a) x 轴尖端生长速率 v_{ip-x} 随时间变化



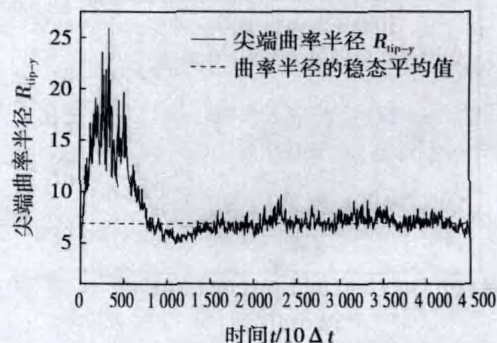
(b) y 轴尖端生长速率 v_{ip-y} 随时间变化

图4 枝晶尖端生长速率变化规律

Fig. 4 Regularity for change of growing velocity of dendrite tip



(a) x 轴尖端曲率半径 R_{ip-x} 随时间变化



(b) y 轴尖端曲率半径 R_{ip-y} 随时间变化

图5 枝晶尖端曲率半径变化规律

Fig. 5 Regularity for change of curvature radius of dendrite tip

有利于传热、促进自身生长的方向。

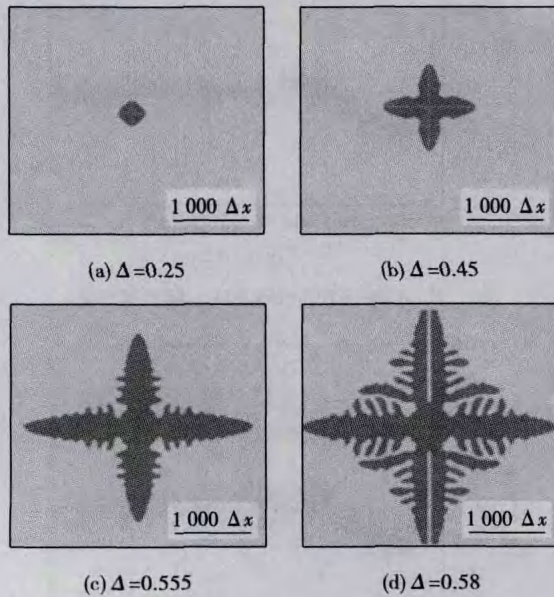


图6 不同过冷度下生长 65 000 Δt 时枝晶形貌

Fig. 6 Dendrite morphologies obtained by simulations under different undercooling degree after 65,000 time steps

提取枝晶主轴尖端生长速率 v_{tip} 和曲率半径 R_{tip} 的稳态平均值,如图7所示。可知,随过冷度增加,尖端稳态生长速率增加,而曲率半径递减。

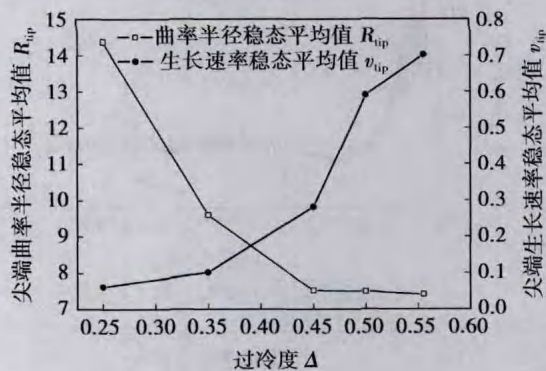


图7 v_{tip} 和 R_{tip} 的稳态平均值随过冷度变化规律

Fig. 7 Regularity for change of average curvature radius and average velocity of dendrite tip in steady state under different undercooling degree

3.3 多晶粒竞争生长的模拟

拟定区域中有三个初始晶核分别位于计算域边界中点和边角上。生长过程枝晶形貌演变如图8所示。分析三晶粒竞争生长形貌演化过程可知,各晶粒自身温度场之间会发生交互影响,同时高斯噪声扰动参与作用导致温度场波动剧烈,从而使得枝晶

形貌变化复杂。二次侧枝的生长不仅会与其邻近的侧枝发生竞争,造成初始细小的二次枝晶抑制相对粗大侧向晶臂生长的择优现象,同时还会呈现出抑制与其附近的其它晶粒主晶轴伸展的行为,见图8 h。

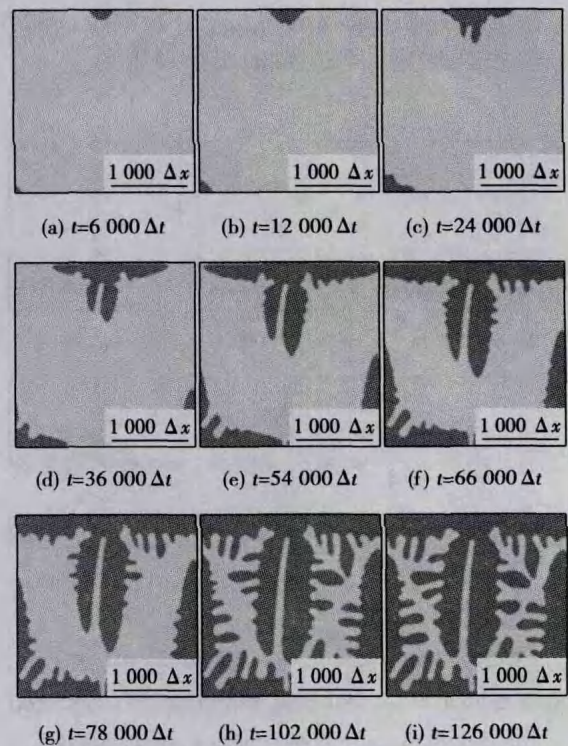


图8 三晶粒不同时刻下竞争生长形貌

Fig. 8 Evolution of dendrite morphologies of three grains during growing process at different time

4 结 论

(1) 构建了一个相场法与有限差分技术耦合的相场模型,并基于该模型模拟了纯金属焊接熔池中轴晶的生长过程。

(2) 成功模拟了不同冷却条件下等轴晶的生长过程,形貌演化趋势符合固液界面形貌稳定性。

(3) 高斯热噪声扰动对二次枝晶生长产生重要影响,同时导致了枝晶各主轴的尺度和尖端生长速度分别存在明显差异,出现不等速生长现象。

(4) 多晶粒竞争生长时,侧枝间择优现象突出,枝晶形貌变化复杂。

参考文献:

- [1] Spittle J A, Brown S G. Computer simulation of the effects of alloy variables on the grain structures of castings [J]. Acta Metall, 1989, 37(7): 1803-1810.

[下转第8页]

- [3] 张 华, 林三宝, 吴 林, 等. 镁合金 AZ31 搅拌摩擦焊接温度场数值模拟[J]. 宇航材料工艺, 2004(6): 58-61.
Zhang Hua, Lin Sanbao, Wu Lin, *et al.* Temperature simulation of friction stir welded AZ31 aluminum alloy[J]. Aerospace Materials & Technology, 2004(6): 58-61.
- [4] 赵俊敏, 王 玉, 尹 欣, 等. TC4 钛合金搅拌摩擦焊温度场的数值模拟[J]. 机械工程材料, 2008, 32(5): 78-81.
Zhao Junmin, Wang Yu, Yin Xin, *et al.* Temperature simulation of friction stir welded TC4 magnesium alloy[J]. Materials for Mechanical Engineering, 2008, 32(5): 78-81.
- [5] 汪建华, 姚 舜, 魏良武, 等. 搅拌摩擦焊接的传热和力学计算模型[J]. 焊接学报, 2000, 21(4): 61-64.
Wang Jianhua, Yao Shun, Wei Liangwu, *et al.* Thermal and thermo-mechanical modeling of friction stir welding[J]. Transactions of the China Welding Institution, 2000, 21(4): 61-64.
- [6] 严 铿, 雷艳萍, 章 正, 等. 铝合金搅拌摩擦焊时焊接速度与热输入的关系[J]. 焊接学报, 2009, 30(1): 73-76.
Yan Keng, Lei Yanping, Zhang Zheng, *et al.* Relation of welding speed and heat input at aluminum alloy friction stir welding[J]. Transactions of the China Welding Institution, 2009, 30(1): 73-76.
- [7] Chen C M, Kovacevic R. Finite element modeling of friction stir welding-thermal and thermomechanical analysis[J]. International Journal of Machine Tools and Manufacture, 2003, 43: 1319-1326.
- [8] Colegrove P A, Shercliff H R. Two-dimensional CFD modelling of flow round profiled FSW tooling[J]. Science and Technology of Welding and Joining, 2004, 9(6): 483-492.
- [9] Chao Y J, Qi X, Tang W. Heat transfer in friction stir welding-experimental and numerical studies[J]. Journal of Manufacturing Science and Engineering-Transactions of the ASME, 2003, 125(1): 138-145.
- [10] Nandan R, Roy G G, Lienert T J, *et al.* Three-dimensional heat and material flow during friction stir welding of mild steel[J]. Acta Materialia, 2007, 55(3): 883-895.
- [11] Schmidt H, Hattel J. A local model for the thermomechanical conditions in friction stir welding[J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2005, 13(1): 77-93.
- [12] 张 昭, 别 俊. 搅拌摩擦焊接过程数值仿真的完全热力耦合模型[J]. 中国机械工程, 2008, 19(10): 1240-1245.
Zhang Zhao, Bie Jun. Fully coupled thermo-mechanical model for numerical simulation of friction stir welding process[J]. China Mechanical Engineering, 2008, 19(10): 1240-1245.
- [13] 张 昭, 刘亚丽, 陈金涛, 等. 搅拌摩擦焊接过程中材料流动形式[J]. 焊接学报, 2007, 28(11): 17-21.
Zhang Zhao, Liu Yali, Chen Jintao, *et al.* Material flow patterns in friction stir welding[J]. Transactions of the China Welding Institution, 2007, 28(11): 17-21.
- [14] 周 利, 刘会杰, 刘 鹏. 搅拌头受力模型及应用[J]. 焊接学报, 2009, 30(3): 93-96.
Zhou Li, Liu Huijie, Liu Peng. Model of forces on pin tool and its application[J]. Transactions of the China Welding Institution, 2009, 30(3): 93-96.
- [15] 张 昭, 陈金涛, 张洪武. 搅拌摩擦焊接中搅拌头受力和变形的计算方法[J]. 焊接, 2010(9): 29-32.
Zhang Zhao, Chen Jintao, Zhang Hongwu. Computational method for tool force and deformation in friction stir welding[J]. Welding & Joining, 2010(9): 29-32.
- [16] 张 昭, 刘亚丽. 预热时间对搅拌摩擦焊接的影响[J]. 机械工程学报, 2009, 45(4): 13-18.
Zhang Zhao, Liu Yali. Effect of preheating time on friction stir welding[J]. Journal of Mechanical Engineering, 2009, 45(4): 13-18.

作者简介: 张 昭,男,1979 年出生,博士,副教授. 主要从事计算工艺力学方面的科研和教学工作. 发表论文 50 余篇. Email: zhangz@dlut.edu.cn

[上接第 4 页]

- [2] Karma A, Rappel W J. Quantitative phase-field modeling of dendritic growth in two and three dimensions[J]. Physical Review E, 1998, 57(4): 4323-4349.
- [3] Tong X. In modeling of casting, welding and advanced solidification process VIII[M]. New York: TMS Publishers, 1998.
- [4] 王成全, 于 艳, 方 园, 等. 亚快速凝固技术的研究进展[J]. 钢铁研究学报, 2005, 17(5): 11-14.
Wang Chengquan, Yu Yan, Fang Yuan, *et al.* Development of near-rapid solidification technique[J]. Journal of Iron and Steel Research, 2005, 17(5): 11-14.
- [5] Wheeler A A, Murray B T, Schaefer R J. Computation of dendrites using a phase field model[J]. Physical D, 1993, 66(10): 243-262.
- [6] Glicksman M E, Winsa E A, Hahn R C, *et al.* Isothermal dendritic growth-A proposed micro-gravity experiment[J]. Metallurgical Transactions A, 1988, 19A: 1945-1952.

作者简介: 魏艳红,女,1965 年出生,博士,教授,博士生导师. 主要从事焊接过程数值模拟及仿真、数字化焊接以及焊接工程软件的研究工作. 发表论文 100 余篇,SCI 和 EI 检索 40 余篇. Email: yhwei@nuaa.edu.cn