

基于 CA 模拟焊缝凝固过程枝晶生长的分析

魏艳红^{1,2}, 占小红¹, 董志波², 马 瑞², 王 勇²

(1. 南京航空航天大学 材料科学与技术学院, 南京 210016;

2. 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)

摘 要: 将元胞自动机方法用于焊缝金属凝固组织演变的模拟中, 不仅为焊缝微观组织演变的数值模拟开辟了一种新的途径, 同时也有助于研究焊接接头组织并依此优化工艺来提高焊件质量. 文中研究了焊缝凝固过程中的溶质扩散问题, 构建了基于元胞自动机的焊缝枝晶生长速度模型, 在此基础上进行了焊缝中心等轴晶和熔池边缘柱状晶生长的模拟. 初步计算了焊缝中心等轴晶和熔池边缘柱状晶的生长形态, 计算结果明显再现了二次、三次枝晶的生长及竞争生长等微观现象. 结果表明, 元胞自动机方法是研究和模拟焊缝微观组织的有效手段之一.

关键词: 焊缝凝固; 晶粒生长; 数值模拟; 元胞自动机

中图分类号: TG401 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-360X(2009)03-0013-04



魏艳红

0 序 言

焊缝的微观组织对焊接接头的性能有着重要影响. 焊缝组织的形成过程复杂, 受诸多因素影响. 因此, 焊缝凝固过程中微观组织演变的研究是一个复杂而重要的领域. 该领域的研究, 以往主要是采用试验的方法. 但试验研究费用高、工作量大、周期长, 并且由于焊缝凝固过程的复杂性, 试验研究方法的应用受到一定的限制. 近来计算机技术的发展, 推动了数值模拟方法在该领域的应用, 基于微观和介观尺度进行焊缝凝固过程的晶粒生长的模拟计算已经成为可能^[1].

元胞自动机应用于凝固过程组织模拟时, 主要以凝固热力学、晶粒形核和生长动力学为依据, 考虑了形核位置与生长取向的随机性, 它克服了 monte carlo 方法物理基础不明确等缺点, 并且能考虑过冷度和溶质扩散等多重因素的影响. Lee^[2], Brown^[3], Gandin 和 Rappaz^[4], 柳百成^[5]、朱鸣芳^[6]、兰勇军^[7]等人在该领域进行了卓有成效的工作, 他们建立了元胞自动机与有限差分(CA-FD)、元胞自动机与有限单元法(CA-FE)的联合模型, 并能基于三维非均匀温度场计算, 初步取得了比较满意的结果. 但其研究几乎都局限于铸造领域, 而没有涉及焊缝凝固.

鉴于焊缝凝固过程的复杂性, 对其各个不同阶

段分别建立合适的物理模型, 借助于热力学和统计物理的概念, 进行半唯象的处理, 是一种可行的研究方法^[8]. 文中将元胞自动机应用于焊缝凝固过程晶粒生长的计算, 基于溶质扩散模型和生长速度模型, 模拟了焊接熔池中轴晶与柱状树枝晶的生长. 初步计算结果再现了二次、三次枝晶臂生长, 以及不同晶粒之间的竞争生长等微观现象.

1 模型的建立

文中将处于生长状态的元胞作为一个整体来考虑其与邻居之间的溶质再分配. 凝固的微观表现为一个时间步内生长状态的元胞固相分数的增加, 这会导致枝晶前沿溶质浓度的改变, 从而出现不平衡. 于是, 浓度梯度的存在导致了扩散.

(1) 液固界面平衡式, 即

$$C_s^* = k C_l^* \quad (1)$$

式中: C_s^* 和 C_l^* 分别为固、液相界面平衡浓度.

(2) 液相区溶质再分布控制方程, 即

$$\frac{\partial C_l}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} [D_l \frac{\partial C_l}{\partial x}] + \frac{\partial}{\partial x} [D_l \frac{\partial C_l}{\partial y}] \quad (2)$$

式中: C_l 为液相元胞浓度; D_l 为液相溶质扩散系数.

(3) 固相区溶质再分布控制方程, 即

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} [D_s \frac{\partial C_s}{\partial x}] + \frac{\partial}{\partial x} [D_s \frac{\partial C_s}{\partial y}] \quad (3)$$

式中: C_s 为固相元胞浓度; D_s 为固相溶质扩散系数.

(4) 固液共存区溶质再分布控制方程. 一般固

相元胞的邻居都是固相或生长态元胞;液相元胞的邻居都是液相或生长态元胞;而生长态元胞的邻居可能是固相元胞,也可能是液相元胞,还可能是生长态元胞。

以生长状态的元胞为中心计算扩散时,无论生长态元胞的邻居是固相元胞、是液相元胞,还是生长态元胞,其浓度都用有效浓度 C_E 来表示^[2] 为

$$C_E = C_L[1 - (1 - k)f_s] \quad (4)$$

显然,在极端情况, $f_s = 1$ 时: $C_E = C_S$; $f_s = 0$ 时: $C_E = C_L$. 于是,扩散平衡可表示为

$$\frac{\partial C_E}{\partial t} = \nabla \cdot (D_E \nabla \cdot C_E) \quad (5)$$

式中: D_E 为有效扩散系数^[2], 表示为

$$D_E = (1 - f_s)D_L + f_s k D_S$$

式中: f_s 为固相率; C_S 和 C_L 分别为该元胞的固、相中溶质浓度。

关于溶质扩散模型的详细描述, 见文献[8].

对于枝晶尖端生长速度计算, 目前 KGT 模型被广泛地应用. KGT 模型建立在“枝晶尖端拥有理想抛物线形状, 以稳定的速度生长”等假设的基础上, 并且动力学的过冷通常是被忽略的. 该模型对于一次枝晶的平均生长是非常有说服力的. 但是, 对于有复杂形式溶质场相互作用的二次枝晶臂和三次枝

晶臂的生长情况, KGT 模型往往是无效的^[2]. 文中参考了 Nastac 等人^[9] 的工作, 基于枝晶尖端溶质平衡, 建立了枝晶生长速度模型^[8]. 文中的模型虽然仍然存在一定局限性, 如溶质分配系数和液相线斜率等参数作为常数处理, 但该模型依然是焊缝凝固过程枝晶生长的理想近似. 关于速度模型的推导过程及详细描述, 见文献[8].

2 焊缝晶粒生长的模拟

焊接条件下, 熔池中存在两种形核现成表面: 一种是合金元素或杂质的悬浮质点, 一般情况下其作用不大; 另一种是熔合区附近加热到半熔化状态基体金属的晶粒表面, 非自发形核就附着在这个表面上, 并以柱状晶的形态向焊缝中心成长, 形成交互结晶(或称共生结晶).

文中考虑了晶粒生长过程的随机性, 初步模拟了镍基二元合金焊缝中心单个晶核的等轴晶和靠近熔池壁处的柱状晶的生长. 文中计算过程中所使用的物性参数如表 1 所示(表中 w 为质量分数, %)^[2]. 计算扩散的过程中, 在上述模型的基础上忽略了反扩散, 并且没有考虑焊接熔池中流场的影响.

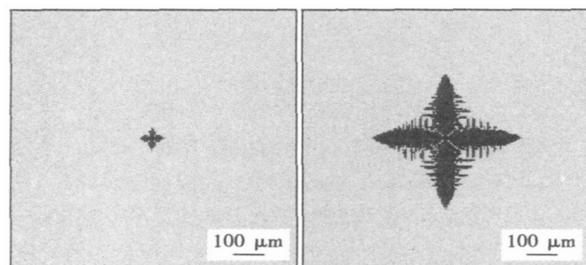
表 1 所使用的材料的性能和模拟参数

Table 1 Material properties and model parameters used in the simulations

液相线温度 T_{LQ}/K	液相线斜率 $m_L/(K \cdot w^{-1})$	溶质分配系数 k	液相扩散系数 $D_L/(m^2 \cdot s^{-1})$	固相扩散系数 $D_S/(m^2 \cdot s^{-1})$	Gibbs-Thomson 系数	初始浓度 C_0 (质量分数, %)	元胞尺寸 $a/\mu m$	时间步 $\Delta t/s$
1 609	-10.9	0.48	3.0×10^{-9}	3.0×10^{-12}	1.0×10^{-7}	4.85	5	$\leq \frac{1}{5} \min(\frac{a}{v_{max}}, \frac{a^2}{D_L})$

2.1 等轴晶生长的模拟

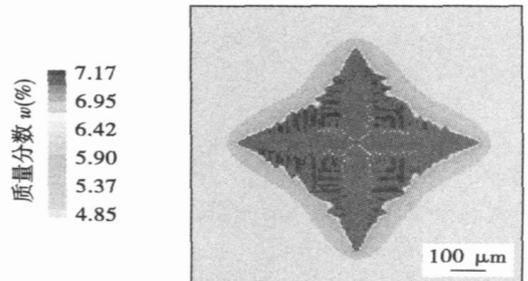
图 1 和图 2 分别给出了模拟得到的焊缝中心等轴晶在不同时刻的生长结果及溶质分布形态。



(a) 50 000 时间步的生长结果 (b) 150 000 时间步的生长结果

图 1 模拟得到的焊缝中心等轴晶生长结果

Fig. 1 Simulation results of equiaxed grain formation in weld solidification



纵向色标单位为质量分数, %

图 2 180 000 等轴晶溶质浓度分布

Fig. 2 Solute distribution at 180 000 CAs

为了重点考虑生长问题, 温度场的计算基于一定的假设和理想处理. 计算过程中, 假设计算域内的所有元胞在同一时刻具有相同的温度, 它们在一

定时间区间内遵循一定降温冷却规律. 该冷却规律是对焊接热循环曲线中对应部分的近似处理^[8]. 图1中给出了单个晶核的等轴晶的自由生长. 在生长的前期, 二次枝晶的生长并不明显, 如图1a. 随着生长的继续, 固液界面溶质堆积加剧, 成分过冷加大, 二次枝晶的生长明显加强, 如图1b所示.

图2中是180 000时间步的溶质分布形态. 由图中可见, 在二次枝晶甚至三次枝晶包围形成的区域中, 高浓度的溶质富集. 这是因为, 与枝晶尖端生长前沿相比, 上述偏析区域的溶质没有足够的扩散空间.

2.2 柱状晶生长的模拟

图3和图4分别是模拟得到的熔池边缘柱状树枝晶的生长结果及相对应的溶质分布形态^[10]. 模拟过程中的冷却速率也是对焊接热循环曲线中相对应部分的近似处理^[10].

一般说来, 焊缝中靠近熔合线的边缘区域往熔池中心方向依次由平面晶、胞状晶、柱状晶向等轴晶过度. 平面晶和胞状晶的出现是由于在焊缝熔合线附近朝熔池中心方向温度梯度大, 成分过冷小. 文中计算过程中, 只考虑熔池边缘柱状树枝晶的生长. 图3是熔池边缘柱状树枝晶的生长结果. 在图3a中, 晶粒形核于熔池边缘并往熔池中心的方向生长. 从图中能明显看到二次、三次枝晶臂的相互作用及竞争生长.

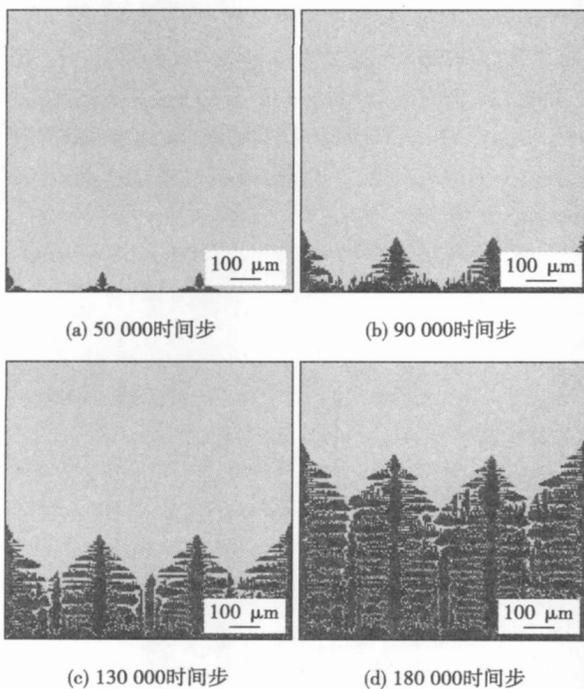


图3 模拟得到的不同时刻焊缝边缘柱状枝晶生长结果
Fig. 3 Simulation results of columnar dendritic grain formation in edge of molten pool at different time

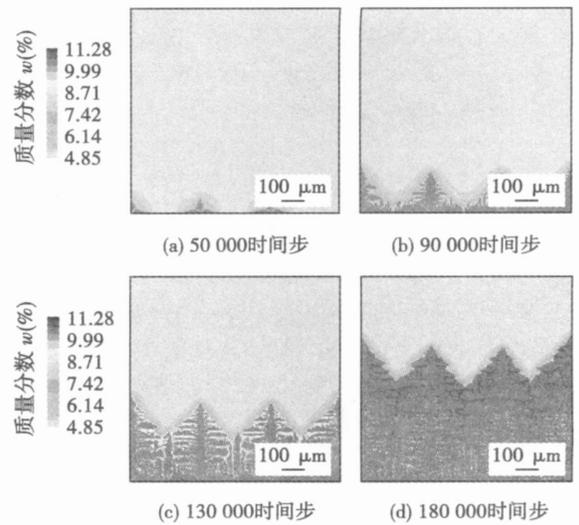


图4 模拟得到的溶质浓度分布结果
Fig. 4 Solute distribution at different time

图4是图3中对应的模拟条件下的溶质浓度分布. 由图中可见, 晶界偏析明显. 并且, 与图2中等轴晶的情况有一点类似之处的是, 高浓度的溶质富集于二次枝晶甚至三次枝晶包围形成的区域. 由此可见, 除了尽可能降低冷却速率以获得足够的溶质扩散时间以外, 凝固界面前沿足够的可用于扩散的空间是溶质得以充分扩散的又一条件.

3 结 论

(1) 用元胞自动机方法进行焊缝凝固过程的枝晶生长的数值模拟, 模拟结果展示了焊接熔池中心等轴晶和熔池边缘柱状晶的生长形态, 以及与之相关的溶质浓度分布.

(2) 焊接熔池凝固结晶过程中, 枝晶间的竞争生长激烈, 枝晶形态复杂, 晶界偏析显著.

(3) 用元胞自动机方法模拟焊缝凝固过程的枝晶生长是可行的, 但仍需要在模拟熔池内多角度复杂枝晶形态、考虑熔池内流场以及定量研究等方面进行更深入的研究工作.

参考文献:

[1] Koseki T, Inoue H, Fukuda Y, et al. Numerical simulation of equiaxed grain formation in weld solidification [J]. Science and Technology of Advanced Materials, 2003, 4: 183—195.
[2] Wang W, Lee P D, Mclean M. A model of solidification microstructures in nickel-based superalloys: predicting primary dendrite spacing selection [J]. Acta Mater, 2003, 51: 2971—2987.

- [3] Brown S G R. Simulation of diffusional composite growth using the cellular automaton finite difference (CAFD) method[J]. Journal of Materials Science, 1998, 33(19): 4769—4773.
- [4] Gandin Ch A, Rappaz M. A coupled finite element-cellular automaton model for the prediction of dendritic grain structures in solidification processes[J]. Acta Metallurgica et Materialia, 1994, 42(7): 2233—2246.
- [5] Xu Q Y, Liu B C. Modeling of cast microstructure of an alloy with a modified cellular automaton method[J]. Materials Transactions, 2001, 42(11): 2316—2321.
- [6] Zhu M F, Lee S Y, Hong C P. Modified cellular automaton model for the prediction of dendritic growth with melt convection[J]. Physical Review E, 2004, 69(6): 1—12.
- [7] Lan Y J, Li D Z, Li Y Y. Modeling austenite decomposition into ferrite at different cooling rate in low-carbon steel with cellular automaton method[J]. Acta Materialia, 2004, 52: 1721—1729.
- [8] Wei Y H, Zhan X H, Dong Z B, *et al.* Numerical simulation of columnar dendritic grain growth during weld solidification process[J]. Science and Technology of Welding and Joining, 2007, 2(12): 138—146.
- [9] Nastac L. Numerical modeling of solidification morphologies and segregation patterns in cast dendritic alloy[J]. Acta Materialia, 1999, 47(17): 4253—4262.
- [10] Zhan X H, Dong Z B, Wei Y H, *et al.* Dendrite grain growth simulation in weld molten pool based on CA—FD model[J]. Crystal Research and Technology, 2008, 43(3): 253—259.

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。

Email: yhwei@nuaa.edu.cn

MAIN TOPICS, ABSTRACTS & KEY WORDS

Resistance microwelding and its step-pulse output YANG Shitong¹, LI Yuanbo², LI Guangfan¹ (Guangzhou Micro Welding Equipment Co., Guangzhou 510385, China; 2. Guangdong University of Technology, Guangzhou 510006, China). p1-4

Abstract: The article brings forward the concept of microwelding in the field of resistance weld and discusses the requirement of welding power source for microwelding. The square pulse, which the adjustable minimum-setting scales are voltage amplitude of 0.01 V and pulse duration of 1 ms, is designed to step-pulse. The six adjustable parameters of the step-pulse include the pulse slip angle θ_1 , the first and second step voltage amplitude and duration of the step-pulse (U_1, t_1, U_2, t_2), and the pulse declining angle θ_2 . The function of the slip angle is to limit instant current impact, the first step-pulse is to strip or preheat, the second is to weld, and the declining angle is to postheat. Adapting to the requirement of stripping welding and microwelding for welding power, the step-pulse not only extends the life of welding tips for stripping weld, but also reduces spatter and improves welding quality.

Key words: microwelding; stripping weld; step-pulse; microwelding equipment

Analysis on temperature field in electrofusion joint for polyethylene pipes ZHENG Jinyang¹, SHI Jianfeng¹, GUO Weican^{1,2}, DING Shoubao², SHI Ping², WANG Hu¹ (1. Institute of Chemical Machinery and Process Equipment, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China; 2. Zhejiang Inspection Center of Special Equipment, Hangzhou 310020, China). p5-9

Abstract: The electrofusion (EF) technique for joining polyethylene (PE) pipe is widely used in the gas distribution pipes. The quality of the joint is heavily depended on the temperature field during welding. A model of transient heat transfer is established to analyze the temperature field in PE pipe joint during EF jointing process. The nonlinearities of material property, input power and thermal contact resistance are synthetically taken into consideration. The developed model is verified by experiments, and the results show good agreement. The model can help to determine the temperature distribution and optimize welding specifications.

Key words: polyethylene pipe; electrofusion joint; temperature field; numerical simulation

Technology of laser welding on Al-5Mg-0.3Sc SUN Fujuan, WEI Huakai (Qingdao Branch, Naval Aeronautical Engineering Academy, Qingdao 266041, China). p10-12

Abstract: Aiming at the deficiencies of the traditional weld

technology on aluminum alloys, laser welding was put forward. Through metallographic analysis on the weld of Al-5Mg-0.3Sc, tensile strength and micro-hardness test, technological parameters of laser were studied to improve the performance of the weld. The results show that because of rare Sc, weld without air holes and cracks can be obtained in the conditions of pretreatment, reasonable laser power, scanning velocity and the flow of shielded gas, which the sizes of center grains are 1/11 as large as that of substrate, micro-hardness achieves 95% and tensile strength achieves 88% of substrate's.

Key words: laserwelding; aluminum alloys; metallography; tensile strength

Simulation of microstructure during weld solidification based on cellular automaton WEI Yanhong^{1,2}, ZHAN Xiaohong¹, DONG Zhibo², MA Rui, WANG Yong² (1. College of Materials Science and Technology, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China; 2. The State Key Laboratory of Advanced Welding Production Technology, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China). p13-16

Abstract: The cellular automaton (CA) method has been successfully applied to simulate the microstructure evolution of welding solidification process, which is a powerful tool for simulating microstructure transformation of weld joint and helps to understand microstructure development so as to optimize process parameters and improve the quality of weldment. Solute diffusion during grain growing process in weld solidification is analyzed. A dendritic grain growth model based on CA method is developed to simulate the growths of the equiaxed grain in the center of the melt pool and the columnar grain near to HAZ, the grain morphologies of them are presented as the results of primary simulation, and the simulation results reproduce the growth of the secondary arms and the tertiary arms as well as competitive growing. The results show that the CA method is one of the effective ways to study and simulate the weld microstructure.

Key words: weld solidification; dendritic grain growth; numerical simulation; cellular automaton

Optimum parameters of short circuit droplet transfer gas metal arc welding LU Zhenyang¹, LI Yan¹, HUANG Pengfei¹, WEI Jian², YIN Shuyan¹ (1. Beijing University of Technology, Beijing 100022, China; 2. Natong Shunda Container Corporation Limited, Natong 226003, China). p17-20

Abstract: Short circuit droplet transfer control system was developed on the basis of single chip computer controlled inverter