

激光熔覆纯镍熔池底部组织生长的相场法模拟

孙道金 刘继常 李钦栋

(湖南大学汽车车身先进设计制造国家重点实验室, 湖南 长沙 410082)

摘要 对纯镍同轴送粉激光熔覆过程中宏观温度场与熔池底部微观组织生长进行了二维耦合模拟计算。首先利用标志变量法计算因粉末的加入而产生的边界动态改变,进行宏观温度场模拟,再取熔池底部一宏观单元进行网格细化,作为微观模拟区域,并通过插值计算获得微观模拟区域的初始温度条件,同时在计算中用宏观单元温度实时修正微观计算区域温度边界条件。在微观区域底部设置晶核,确定相场初始条件,并采用相场法进行微观区域的相场、温度场耦合计算,获得微观组织形貌。最后进行试验,在镍板基底上熔覆镍粉,模拟所得微观组织形貌与试验所得基本吻合,验证了模拟结果的正确性。

关键词 激光技术; 激光熔覆; 相场法; 宏微观耦合; 数值模拟

中图分类号 TN249; TN241 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/CJL201340.0403005

Phase-Field Method Simulation of Microstructure Evolution at the Bottom of Melt Pool in Coaxial Laser Cladding

Sun Daojin Liu Jichang Li Qindong

(State Key Laboratory of Advanced Design and Manufacturing for Vehicle Body, Hunan University, Changsha, Hunan 410082, China)

Abstract Two-dimensional macroscopic temperature field of the work-piece and evolution of the microstructure which is located at the bottom of the melt pool in coaxial laser cladding are calculated. Formation of the clad bead due to powder feeding is simulated. Macroscopic temperature field is computed. Then, one macroscopic cell at the bottom of the melt pool is re-meshed for calculation of the microstructure evolution. Initial temperature conditions are calculated with interpolation method among the temperatures of its nearest neighbor macroscopic cells. Its four boundary temperatures can be considered as the same as its four neighbors' temperatures. Crystal nucleus is set in the lower boundary of microscopic domain. Finally, phase field and temperature field are calculated using phase-field method. The calculation results agree with the experimental results, which proves the validity of the macro and micro coupling model.

Key words laser technique; laser cladding; phase-field method; macro-micro coupling; numerical simulation

OCIS codes 140.3390; 140.6810; 020.2930

1 引言

激光熔覆技术作为表面改性和快速成型的一种重要方法,具有生产效率高,成本低,基本上无污染、无噪声等优点,具有很好的应用前景。但是激光熔覆过程涉及激光与材料的相互作用、粉末与基底的相互作用,存在能量传输、溶质传递、金属熔液的流

动与凝固等复杂现象,难以采用试验方法对激光熔覆过程熔池内部进行研究,也难以建立有关解析模型。因此国内外众多学者采用数值模拟方法对激光熔覆过程中温度场、溶质场和流场进行了研究^[1~8],属于宏观模拟,但对激光熔覆过程中微观组织生长的模拟以及宏观微观耦合模拟研究较少。而熔覆形

收稿日期: 2012-11-13; **收到修改稿日期**: 2012-12-24

基金项目: 国家自然科学基金(51075134)资助课题。

作者简介: 孙道金(1988—),男,硕士研究生,主要从事激光熔覆微观组织生长方面的研究。E-mail: 542459397@qq.com

导师简介: 刘继常(1968—),男,博士,教授,主要从事激光制造技术、先进成型及模具技术等方面的研究。

E-mail: liujichang2003@sohu.com

成的微观组织直接影响着激光熔覆质量,如能提出一种激光熔覆过程中微观组织演化的计算模型,对激光熔覆过程中微观组织演化过程进行模拟研究,以便获得不同工艺参数对激光熔覆微观组织形貌的影响,进而实现熔覆过程微观组织形貌的预测与控制,对于激光熔覆技术的工业化过程必然能起到推动作用。本文采用金属凝固过程相场模型,利用 Visual C++ 编写了激光熔覆宏观温度场及微观组织演化计算程序,实现了激光熔覆过程微观组织生长的宏微观耦合模拟,属于前期理论研究阶段。

2 物理模型

图 1 为连续移动同轴送粉激光熔覆过程的二维瞬态示意图^[6]。激光从上方垂直照射基体表面,形成熔池,同时同轴送入金属粉末,随着激光束的移动,熔池凝固形成熔覆带。

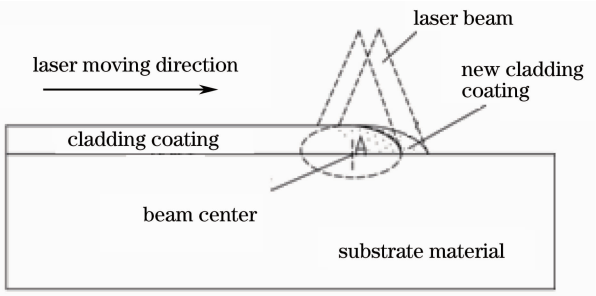


图 1 同轴送粉激光熔覆模型

Fig. 1 Model of coaxial laser cladding

因激光熔覆过程涉及变量较多,建模时作如下简化^[9]:

- 1) 假设材料热物性参数如比热、密度、热传导系数等均为常数,取室温条件下的参数值;
- 2) 不计算熔池内流场,熔体流动对温度场的影响通过适当增大熔池区域热传导系数体现;
- 3) 粉末初始温度设为 25 °C,送粉时粉末的温升通过适当增加材料对激光的吸收率体现^[10];
- 4) 假定基体熔化区域才能获得粉末;
- 5) 假定室温环境为 25 °C。

3 数学模型

3.1 激光熔覆宏观传热模型

能量控制方程为

$$\frac{\partial(\rho \cdot h)}{\partial t} = \nabla(k \cdot \nabla T) + \nabla q. \quad (1)$$

1) 在激光照射区域,边界条件为激光热流、材料表面与环境的对流换热、辐射换热:

$$q = Q(x) - A \cdot (T - T_0) - \sigma \cdot \epsilon \cdot [(T + 273)^4 - (T_0 + 273)^4]. \quad (2)$$

2) 在非激光照射区域,边界条件为材料与环境的对流换热,辐射换热:

$$q = -A \cdot (T - T_0) - \sigma \cdot \epsilon \cdot [(T + 273)^4 - (T_0 + 273)^4], \quad (3)$$

3) 在材料内部

$$q = 0. \quad (4)$$

以上各式中 ρ 为材料密度,单位 g/cm^3 ; h 为热焓,

$$h = \int_{T_0}^T c dT + h(T_0), \text{ 取 } T_0 = 25 \text{ °C 时为参考点,计}$$

$h(T_0) = 0$; k 为材料热导率; $Q(x)$ 为坐标 x 处激光功率密度,本文激光功率密度分布为高斯分布, $Q(x) = 2P\eta_l / (\pi R^2) \exp[-2(x - x_0 - vt)^2 / R^2]$; A 为材料与环境的对流换热系数; σ 为史蒂芬-玻尔兹曼系数; ϵ 为发射率; P 为激光功率; η_l 为激光吸收率; R 为激光作用半径; x_0 为激光初始加载位置; v 为激光扫描速度。

3.2 熔覆层边界动态改变的计算模型

定义标志变量 $F^{[6]}$, 记录边界层单元格体积分, $F=1$ 表示单元格完全由材料占据, $F=0$ 表示单元格没有材料, F 介于 1 和 0 之间表示单元格仅部分由材料占据。对每一单元柱的 F , 其值初始化为 1。另定义变量 N_{grid} , 表示单元柱内含有材料的单元格个数。初始化为未加入粉末时单元柱包含单元格数量, 取为 250。

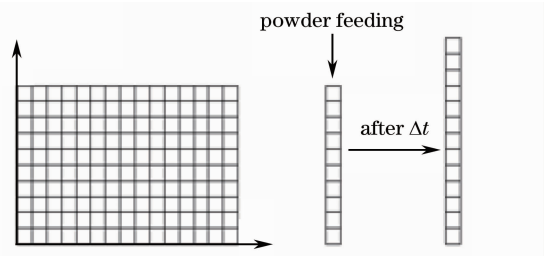


图 2 单元柱网格数改变示意图

Fig. 2 Graphic of change of grid number

当表层单元温度高于液相线温度时,

$$\begin{cases} F_i^{+\Delta t} = F_i + M_i / (\rho \cdot V_c) = F_i + m \cdot \Delta t / (\rho \cdot \Delta x) \\ F_i^{+\Delta t} = F_i^{+\Delta t} - Z \end{cases}, \quad (5)$$

$$\begin{cases} N_{\text{grid}}^{+\Delta t} = N_{\text{grid}} + Z & (F_i^{+\Delta t} > 0) \\ N_{\text{grid}}^{+\Delta t} = N_{\text{grid}} + Z - 1 & F_i^{+\Delta t} = 1 \quad (F_i^{+\Delta t} = 0) \end{cases}, \quad (6)$$

式中 Z 为 $F_i^{+\Delta t}$ 的整数部分。当表层单元温度不高于液相线温度时,

$$\begin{cases} F_i^{t+\Delta t} = F_i^t \\ N_{gridi}^{t+\Delta t} = N_{gridi}^t \end{cases} \quad (7)$$

以上各式中上标 t 表示各变量在 t 时刻的取值,下标 i 表示第 i 个单元柱,如 M_i 为 i 单元柱 Δt 时间内获得的粉末质量; Δt 、 Δx 分别表示宏观模拟的时间步长、空间步长; m 表示同轴送粉粉末质量分布;本文中采用高斯分布, $m = 2 \cdot M / (\pi \cdot R_2 \cdot R_2) \cdot \exp[-2 \cdot$

$(x - x_0 - v \cdot t)^2 / (R_2 \cdot R_2)]$,其中 M 为送粉率, R_2 为粉末作用半径, x 为激光中心坐标, x_0 为激光初始加载位置, v 为激光扫描速度。按照上述计算公式,每一时间步长更新一次边界,得到新的覆熔层形状。

3.3 相场模型

考虑各向异性的相场控制方程和能量控制方程为^[9~12]

$$\begin{aligned} \tau_0 a^2(\theta) \frac{d\varphi}{dt} &= W_0^2 \nabla[a^2(\theta) \cdot \nabla\varphi] + \\ &[\varphi - \lambda \cdot u \cdot (1 - \varphi^2)] \cdot (1 - \varphi^2) - \frac{\partial}{\partial x} \left[W_0^2 \cdot a(\theta) \cdot a'(\theta) \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[W_0^2 \cdot a(\theta) \cdot a'(\theta) \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right], \quad (8) \\ \frac{\partial u}{\partial t} &= \alpha \cdot \nabla^2 u + \frac{1}{2} \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad (9) \end{aligned}$$

式中 φ 为相场变量,固相为 1,液相为 -1,固液相界面在 -1 ~ 1 之间连续变化; $a(\theta) = \gamma \cdot \cos 4\theta + 1$, γ 为各向异性系数, $\theta = \arctan(\varphi_y / \varphi_x) - \theta_n$, θ 为界面法向与枝晶主轴方向夹角; θ_n 为基准角度,本文取 $\theta_n = \arctan(T_y / T_x)$ 为宏观单元处温度梯度方向与 x 轴夹角; τ_0 为表征固液原子运动时间的变量; W_0 为界面厚度; λ 为相场与温度场耦合系数; u 为无量纲温度, $u = (T - T_M) / (L_p / c)$, T_M 为金属熔点; L_p 为体积潜热; c 为等压比热; α 为热扩散系数。

4 计算参数

1) 材料参数如下:

$\rho = 8.902 \text{ g/cm}^3$, $L_p = 264 \text{ J/g}$, $c = 0.61 \text{ J/(g} \cdot \text{K)}$, $k = 0.907 \text{ W/(cm} \cdot \text{K)}$, $T_M = 1728 \text{ K}$ 。

2) 相场计算参数无量纲化取值如下:

$\tau_0 = 1$, $W_0 = 1$, 微观时间步长 $\delta t = 0.008$, $X = Y = 0.4$, $\alpha = 4$, $\gamma = 0.03$, $\lambda = 6.3826$ 。

3) 激光参数如下:

$P = 1800 \text{ W}$, $R = 0.15 \text{ cm}$, $\eta_l = 0.30$, $v = 0.6 \text{ cm/s}$ 。

4) 粉末参数如下:

$M = 0.16 \text{ g/s}$, $R_2 = 0.2 \text{ cm}$ 。

5 定解条件

对于宏观温度场模拟,取空间步长 Δx 为 $40 \mu\text{m}$,时间步长 Δt 为 10^{-6} s ,计算区域被划分为均匀的网格,其中 1000×250 表示基体材料,初始温度为 $25 \text{ }^\circ\text{C}$,环境温度为 $25 \text{ }^\circ\text{C}$,边界条件如前文所述。

对于微观温度场模拟,取一宏观单元进行网格细化,如图 3 所示,取界面厚度为 10^{-5} cm ,因 $X/W_0 = 0.4$,所以均匀网格空间步长为 $4.0 \times 10^{-6} \text{ cm}$,微观计算区域为 1000×1000 均匀网格,微观时间步长 δt 为 $2.5 \times 10^{-11} \text{ s}$,微观区域初始温度由相邻宏观单元通过插值计算得到,表达式为

$$T = \sum_{i=1}^n l_i^{-1} \cdot T_i / \sum_{i=1}^n l_i^{-1}, \quad (10)$$

式中 l_i 为周围第 i 个宏观单元与微观单元之间的距离, T_i 为第 i 个宏观单元的温度, n 为周围宏观单元数,因本文为二维模拟,所以 n 为 4。在计算过程中,每经过一宏观时间步长,与宏观单元接触的区域内的单元温度,即温度边界条件由以上插值模型计算更新一次,在宏观时间步长内边界保持定温。

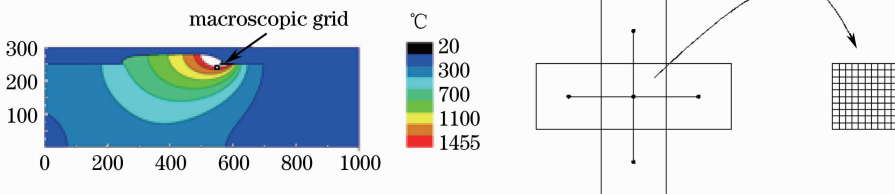


图 3 宏观单元网格细化
Fig. 3 Re-meshing of macroscopic grid

对于相场计算,因所取宏观单元位于熔池底部,可知晶粒形核为非均质形核,核心位于计算区域底部边界上,假定存在三个初始核心,它们均布于底部边界上,可得相场计算初始条件,在核心处 $\varphi=1$,其余区域 $\varphi=-1$,相场边界条件采用绝热边界条件^[9]。

6 模拟结果及讨论

图 4 给出了激光熔覆纯镍过程中 6 个时刻的温度分布,可清楚地看到熔覆层的动态生长、熔池轮廓,另外还可看出随着激光作用时间的增加,材料整

体温度呈逐渐增加趋势,并且沿激光扫描方向激光前方温度梯度明显高于后方。

当 $t=120000 \Delta t$ 时,如图 4(d) 所示,可认为激光熔覆过程达到准稳态,模拟所得熔覆层高度为 1.12 mm,试验后测量结果为 1 mm,并且模拟所得熔池自由表面形状(图中白色区域上边界)与西北大学陈静等^[13]拍摄的熔池照片(其试验时参数值与本文相差不大,功率密度相近,送粉量、扫描速度基本相同)基本吻合(图 5),表明了宏观温度场模拟的可行性。

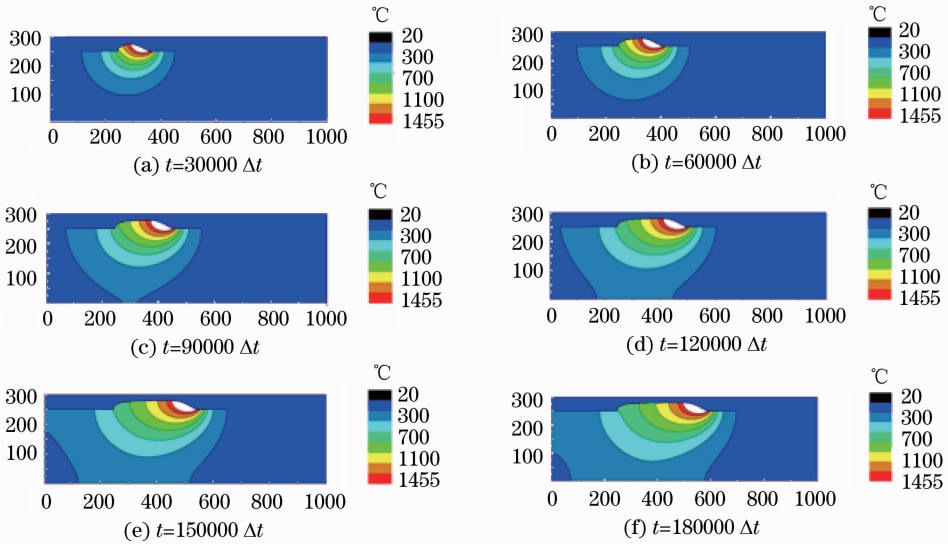


图 4 6 个时刻的温度分布

Fig. 4 Temperature field at six moments

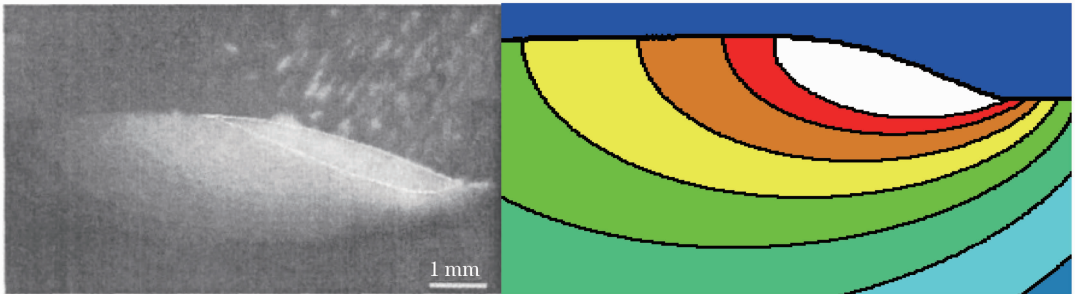


图 5 高速摄像机下的熔池侧视形貌与模拟所得形貌

Fig. 5 Molten pool side-glance topography and simulated result

图 6 给出了模拟获得的熔池底部微观组织演化过程中 6 个时刻的相场分布。可看出初始核心朝两个方向优先生长,一个是向熔液内部,一个是向两个侧向,由于微观计算区域底部温度低,微观模拟边界条件为定温边界条件,因此前者生长速度比后者小。当侧向生长至微观计算区域侧边界时,侧向主枝开始变粗,由于界面能各向异性的影响,生长速度迅速减慢,计算区域底部形成一定厚度的固相,而向熔液

内部生长的部分只形成了比较细小的柱状结晶。相对地,晶体向熔液内部生长的速度加快,并且逐渐变粗,柱状晶之间间隙逐渐减小,呈现了枝晶间的竞争生长,同时可以观察到其生长方向为熔池底部向顶部并略偏向激光扫描方向。

图 7 为 3 个和 4 个初始晶核条件下模拟所得的枝晶形貌。对比两图可以发现一些共性,两图中中间位置枝晶形状相同,两侧位置枝晶形状相近。中

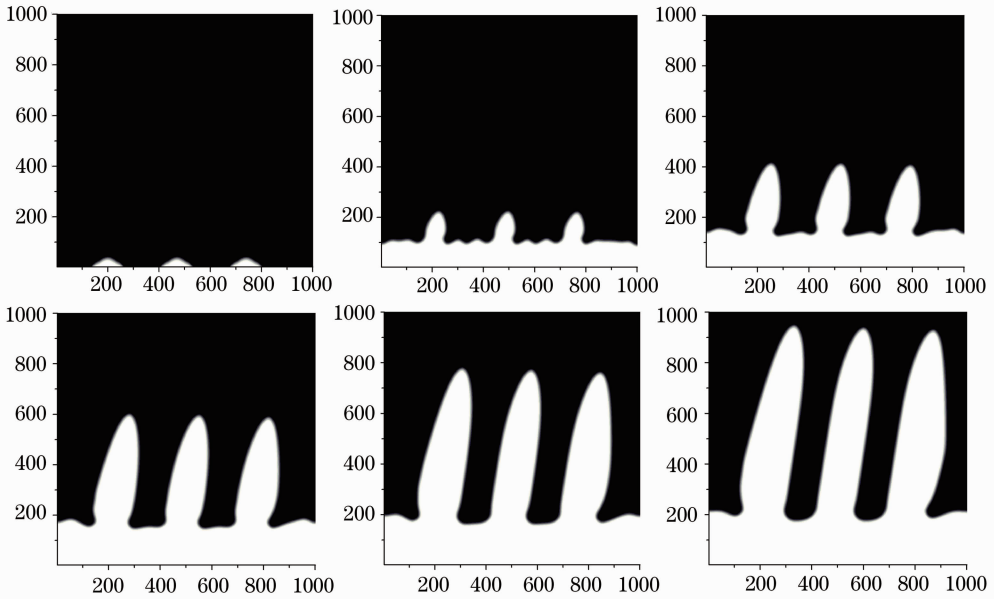


图 6 6 个时刻的相场分布

Fig. 6 Phase field distributions at six moments

间位置枝晶生长时与两侧枝晶存在竞争,其形貌比较对称,而两侧枝晶在生长过程中每个枝晶只有一侧受到竞争作用,因此其形貌不对称。出现这种情况是因为受到模拟区域大小的限制。可以预测,如果能够进行整个熔池内微观组织生长的模拟,所得枝晶形貌将与当前模拟所得中间位置枝晶形貌一致。形貌为由熔池底部向顶部并略偏向扫描方向的细长柱状枝晶。

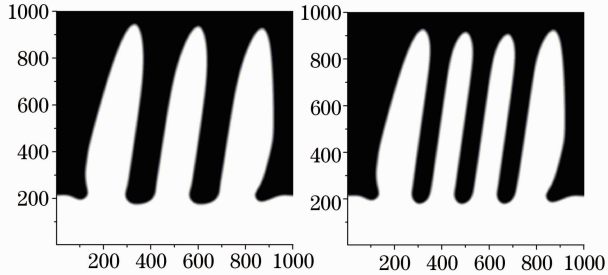


图 7 3 个和 4 个初始晶核条件下相场分布

Fig. 7 Phase field of three and four crystal nuclei

图 8 为试验所得熔池底部微观组织照片。由图 8 可以看到,有多种不同生长方向的柱状枝晶存在。这是因为在凝固过程中,熔池底部金属熔体与固相基体始终保持接触,基体界面提供了很好的形核基底,因此晶核将首先从熔池与基体界面处产生,使得熔池中凝固组织有典型的外延生长特性^[14],致使熔覆层微观组织受到基体多晶取向的影响。而同时可以看到虽然柱状枝晶生长方向有差异,但其总体趋势为由熔池底部向顶部并略偏向扫描方向,只是偏转角度大小略有差异,可以认为柱状枝晶生长方向与热流方向基本平行。这说明熔池内热流方向对激光熔覆过程中熔覆层枝晶生长起选择作用,只有晶粒取向与热流方向平行的晶核才最有可能生长成柱状枝晶。

对比模拟结果与试验结果,可得出模拟结果反映出了熔池内微观组织生长的总趋势,反映了热流对熔覆层内柱状枝晶生长方向的影响。

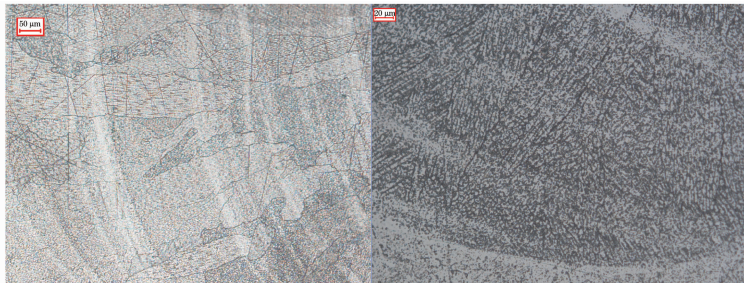


图 8 试验所得熔池底部微观组织照片(不同放大倍数)

Fig. 8 Microstructure of bottom of melt pool (different magnifications) obtained from test

7 结 论

采用宏观微观耦合的方法模拟了激光熔覆过程中宏观温度场与微观组织的演化,并采用纯镍作为试验材料进行了同参数条件下的熔覆试验,发现模拟计算所得微观组织形貌与试验所得有很多共性,并得出了以下结论:

1) 随着激光作用时间的增加,材料整体温度呈逐渐增加趋势,并且沿激光扫描方向激光前方温度梯度明显高于后方。

2) 熔池底部微观组织生长方向为熔池底部向顶部并略偏向激光扫描方向及微观组织之间的竞争生长,基本平行于热流方向。因此激光熔覆过程的温度分布是影响熔覆层内底部微观组织形貌的主要因素,这与基本的凝固理论中关于树枝晶凝固方式的结论一致,证明了模型的正确性。

参 考 文 献

- 1 Yang Xianqun, Zhao Hongyun, Jiang Qiuyue *et al.*. Finite element analysis of temperature field in feeding powder laser cladding[J]. *Hot Working Technology*, 2007, **36**(23): 79~81
杨贤群, 赵洪运, 姜秋月 等. 送粉式激光熔覆温度场有限元分析[J]. *热加工工艺*, 2007, **36**(23): 79~81
- 2 Zhao Hongyun, Shu Fengyuan, Zhang Hongtao *et al.*. Simulation of temperature field in laser cladding based on life-death element technique[J]. *Transactions of the China Welding Institution*, 2010, **31**(5): 81~84
赵洪运, 舒风远, 张洪涛 等. 基于生死单元的激光熔覆温度场数值模拟[J]. *焊接学报*, 2010, **31**(5): 81~84
- 3 Zhao Hongyun, Zhang Hongtao, Xun Chunhua *et al.*. Temperature and stress fields of multi-track laser cladding[J]. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 2009, **19**(2): 495~501
- 4 A. Kumar, S. Roy. Effect of three-dimensional melt pool convection on process characteristics during laser cladding[J]. *Computational Materials Science*, 2009, **46**(2): 495~506
- 5 A. Kumar, S. Roy. Development of a theoretical process map for laser cladding using a three-dimensional conduction heat transfer model[J]. *Numerical Heat Transfer*, 2009, **56**(6): 478~496
- 6 Huang Yanlu, Zou Dening, Liang Gongying *et al.*. Simulation of flow field and temperature field on laser cladding process[J]. *Rare Metal Materials and Engineering*, 2003, **32**(5): 330~334
黄延禄, 邹德宁, 梁工英 等. 送粉激光熔覆过程中熔覆轨迹及流场与温度场的数值模拟[J]. *稀有金属材料与工程*, 2003, **32**(5): 330~334
- 7 Shi Shihong, Wang Chen, Xu Aiqin *et al.*. Temperature field numerical simulation of laser cladding based on internal powder feeding through a hollow laser beam[J]. *Chinese J. Lasers*, 2012, **39**(3): 0303002
石世宏, 王 晨, 徐爱琴 等. 基于环形光内送粉激光熔覆温度场的数值模拟[J]. *中国激光*, 2012, **39**(3): 0303002
- 8 Chen Lie, Gu Chengzhong, Xie Peilin. Numerical analysis of temperature field in laser cladding on tooth surface of helical gear shaft[J]. *Chinese J. Lasers*, 2011, **38**(3): 0303006
陈 列, 古成中, 谢沛霖. 斜齿轮轴齿面激光熔覆过程中温度场的数值分析[J]. *中国激光*, 2011, **38**(3): 0303006
- 9 Jin Shaowei, He Xiuli, Wu Yang *et al.*. Laser power attenuation by powder flow in coaxial laser cladding[J]. *Chinese J. Lasers*, 2011, **38**(9): 0903005
靳绍巍, 何秀丽, 武 扬 等. 同轴送粉激光熔覆中粉末流对光束能量的衰减作用[J]. *中国激光*, 2011, **38**(9): 0903005
- 10 Y. Cao, J. Cho. Multiscale modeling of solidification during laser cladding process [J]. *J. Laser Applications*, 2006, **18**(3): 245~257
- 11 Tian Weixing. Phase Field Method Research of Dendrite Growth Pure Metal Solidification[D]. Ji'nan: Shandong University, 2007
田卫星. 纯金属凝固过程枝晶生长的相场法研究[D]. 济南: 山东大学, 2007
- 12 Sun An. Phase Field Method is Used to Simulate the Pure Metal Dendritic Growth[D]. Yinchuan: Ningxia University, 2006
孙 安. 用相场方法模拟纯金属的枝晶生长[D]. 银川: 宁夏大学, 2006
- 13 Chen Jing, Tan Hua, Yang Haiou *et al.*. Real-time observational study of molten pool behavior in laser rapid forming process[J]. *Applied Laser*, 2005, **25**(2): 77~80
陈 静, 谭 华, 杨海欧 等. 激光快速成形过程熔池行为的实时观察研究[J]. *应用激光*, 2005, **25**(2): 77~80
- 14 Li Xinzhong, Guo Jingjie, Su Yanqing *et al.*. Phase field method simulation of Ti-44Al alloy microstructure in directional freezing [J]. *Special Casting and Non-Ferrous Alloy*, 2008, (s1): 93~95
李新中, 郭景杰, 苏彦庆 等. 过冷定向凝固 Ti-44Al 合金微观组织的相场法模拟[J]. *特种铸造及有色合金*, 2008, (s1): 93~95

栏目编辑: 宋梅梅