

## 溶质再分配系数对激光熔覆溶质分布的影响

张曹伟<sup>1,2,3</sup>, 葛鸿浩<sup>1,2,3\*</sup>, 方豪<sup>1,2,3</sup>, 张群莉<sup>1,2,3</sup>, 姚建华<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>浙江工业大学机械工程学院, 浙江 杭州 310014;

<sup>2</sup>浙江工业大学激光先进制造研究院, 浙江 杭州 310014;

<sup>3</sup>高端激光制造装备省部共建协同创新中心, 浙江 杭州 310014

**摘要** 为了提高沉积层溶质分布的预测精度,研究溶质再分配系数对沉积层溶质分布的影响机制,本研究团队将体积平均法和非平衡溶质再分配系数计算方法相结合,分别建立动态溶质再分配系数凝固模型和恒定溶质再分配系数凝固模型,模拟 45 钢表面 316L 不锈钢涂层的激光熔覆过程,分析熔覆过程中的流动、传热和传质现象。结果表明:两种模型预测的温度场分布、熔池形貌、熔池流场等结果的差异性并不明显,但在元素分布方面,动态溶质再分配系数凝固模型的误差更小,更接近实验结果。分析后认为,溶质再分配系数在沉积层溶质分布过程中起主导控制作用,动态溶质再分配系数更接近真实的熔池凝固过程,从而使预测准确性更高。

**关键词** 激光技术; 激光熔覆; 溶质再分配系数; 溶质分布; 数值模拟

**中图分类号** TN249; TG111.4 **文献标志码** A

**doi:** 10.3788/CJL202249.0202012

### 1 引言

激光熔覆技术是指以不同的填料方式在基体表面添加涂层材料,涂层材料在激光的辐照下与基体表面同时熔化并快速凝固后形成与基体呈冶金结合的表面涂层制备技术<sup>[1-3]</sup>。利用激光熔覆技术制备的与基体呈冶金结合的沉积层组织致密<sup>[4]</sup>,具有优良的耐磨和耐蚀性,因此,激光熔覆技术已被广泛应用于激光表面改性、激光修复等领域。沉积层的性能主要受元素分布的影响<sup>[6]</sup>。目前,通过实验方法分析元素分布机制不仅费时费力,还无法直接观察沉积层中元素的演化过程。因此,通过构建合理的数值模型<sup>[7]</sup>,并结合实验验证,不仅可以研究元素分布的演化过程,还可以实现沉积层元素的精确预测,具有重要意义和应用价值。

国内外研究人员针对激光熔覆过程建立了多种传热传质模型,但大多数模型均未考虑溶质再分配系数在传质过程中的影响。如:戴德平等<sup>[8]</sup>利用 Abaqus 软件模拟了激光熔覆过程中的温度场与应

力场,结果表明,模拟结果与实验数据比较吻合,但存在一定误差;Zhao 等<sup>[9]</sup>针对中碳钢和高速钢建立了不同激光熔覆工艺参数的多组分多相模型,但其在模拟过程中的凝固温度是根据平衡相图得到的,未考虑溶质再分配系数的变化;Mirzade 等<sup>[10]</sup>认为影响熔池凝固速率和熔池温度的主要因素是送粉量、激光功率和扫描速度,但他们在仿真模拟中没有考虑非平衡凝固下溶质再分配系数对传热及溶质传输的影响。

在激光熔覆过程中,熔池的凝固较快,固液界面往往存在着溶质截留现象,导致溶质再分配系数随着凝固速率的进一步增大而趋近于 1<sup>[11]</sup>。因此,构建激光熔覆模型时有必要考虑动态溶质再分配系数的影响。Aziz 等<sup>[12]</sup>提出的连续增长模型(CGM)以凝固速率理论和界面平衡原理为基础,并考虑了非平衡溶质再分配系数,因此被广泛应用到了快速凝固过程的仿真模拟中。Pinomaa 等<sup>[13]</sup>对 CGM 进行了优化,在二元合金的相场微观模型中考虑了非平衡凝固下的溶质再分配系数,并定量绘制出了溶质

收稿日期: 2021-06-21; 修回日期: 2021-07-16; 录用日期: 2021-08-03

基金项目: 国家自然科学基金(51804274, 52035014)、浙江省属高校基本科研业务费专项资金资助项目(RF-C2019003)

通信作者: \*gehh@zjut.edu.cn

再分配系数曲线图;这一研究的仿真模拟结果与实验数据基本吻合。Plapp<sup>[14]</sup>和 Eiken 等<sup>[15]</sup>考虑了非平衡凝固下的溶质再分配系数,构建了更为复杂的二元合金和多组元合金的相场微观模型。Yang 等<sup>[16]</sup>对枝晶生长动力学展开研究,计算并分析了界面速度与非平衡凝固下的溶质再分配系数之间的关系;结果显示,非平衡凝固下的溶质再分配系数对枝晶的生长、凝固速率具有重要影响。截至目前,针对快速凝固的模拟研究绝大部分建立在微观尺度上,很少有人将快速凝固引入到宏观传热传质模型中,研究非平衡凝固下的溶质再分配系数对激光熔覆过程中溶质分布的影响,并研究溶质的分布规律及提高预测的精准性。

本研究团队采用数值模拟方法,建立了基于体积平均法的固-液-气三相模型,研究了不同的溶质再分配系数模型对宏观温度场、流场和溶质场的影响,以期获得具有较高精度的沉积层元素预测模型。

## 2 实验材料及工艺参数

实验装置包括 2 kW 光纤耦合半导体激光器、六自由度机械手臂、同轴送粉喷嘴、双桶式送粉器。激光熔覆实验示意图如图 1 所示。实验基材选用

尺寸为 100 mm×50 mm×10 mm 的 45 钢,熔覆粉末选用 316L 不锈钢粉。基体和熔覆粉末的化学成分如表 1 所示。实验前,用角磨机去除 45 钢表面的氧化层,并将粉末置于 120 °C 的真空干燥箱内烘烤 2 h。

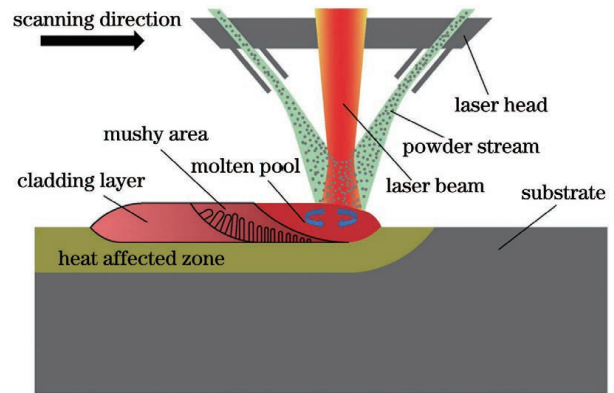


图 1 激光熔覆示意图

Fig. 1 Schematic of laser cladding

本文选用的激光熔覆工艺参数为:激光功率 1500 W,扫描速度 8 mm/s,送粉量 10 g/min。实验结束后,制备金相试样,然后利用光学显微镜(OM)观察金相试样的形貌,采用能谱仪(EDS)分析沉积层的元素分布。

表 1 45 钢和 316L 不锈钢粉末的化学成分

Table 1 Chemical composition of 45 steel and 316L stainless steel powder

Material	Mass fraction / %						
	C	Si	Mn	Cr	Ni	Mo	Fe
45 steel	0.45	0.20	0.60				Bal.
316L stainless steel powder	0.02	0.55	1.55	16.0	10.0	2.08	Bal.

## 3 模型的建立

### 3.1 理论模型

本研究团队基于 Eulerian-Eulerian 体积平均法<sup>[17]</sup>及非平衡溶质再分配系数计算方法<sup>[12]</sup>,将激光熔覆过程中的宏观物理现象耦合,建立三相(液相、固相和气相)混合凝固模型。为了简化模型,对模型做出如下假设<sup>[18-19]</sup>:

1) 模型考虑液相( $f_l$ )、固相( $f_c$ )和气相( $f_a$ )三相,三相体积分数之和为 1,即  $f_l + f_c + f_a = 1$ ;

2) 熔覆过程中,粉末以液体的形式进入熔池,且均匀分布;

3) 熔覆过程中的激光作用在熔池表层,且激光能量均匀分布;

4) 忽略粉末对熔池的冲击作用以及熔池的蒸发;

5) 忽略宏观尺度上的溶质扩散传输以及气相的质量传输;

6) 模拟计算时只考虑 Fe 元素和 Cr 元素,忽略其他元素对计算的影响;

7) 熔池中的金属液体是不可压缩的、层流的牛顿流体。

熔覆过程有三大控制方程——溶质传输方程、动量传输方程和能量传输方程,下面逐一进行介绍。

#### 1) 溶质传输方程

该模块由质量守恒方程以及溶质守恒方程构成,即

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_l \rho_l) + \nabla \cdot (f_l \rho_l \mathbf{u}_l) = -M_{lc} + \dot{M}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_c \rho_c) = M_{lc}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_l \rho_l c_l) + \nabla \cdot (f_l \rho_l \mathbf{u}_l c_l) = -C_{lc} + \dot{C}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_c \rho_c c_c) = C_{lc}, \quad (4)$$

式中:下标  $c$  和  $l$  分别表示固相和液相; $f$  是体积分数; $\rho$  是固液相的密度; $\mathbf{u}$  是熔体的流速; $M_{lc}$  是液相向固相的质量传输速率; $\dot{C}$  是质量源项,即进入熔池的粉末质量; $t$  是时间; $c$  是溶质浓度; $\dot{C}$  是溶质源项,即熔覆添加的粉末; $C_{lc}$  是溶质从液相向固相传输的速率。这里只考虑了固液两相之间的质量传输,即不考虑气相中的质量传输。

另外,参考 Aziz 等<sup>[12]</sup>研究的连续增长模型,本文重点考虑凝固界面的溶质捕获,而控制溶质捕获的主要因素就是非平衡凝固下的溶质再分配系数  $k_v$ 。 $k_v$  的计算公式为

$$k_v = \frac{k_e + P_i}{1 + P_i}, \quad (5)$$

式中: $k_v$  为非平衡凝固下的溶质再分配系数; $k_e$  为平衡溶质再分配系数; $P_i$  为无量纲的固相生长速率。当  $P_i$  趋近于 0 时,熔体发生平衡凝固;当  $P_i \geq 1$  时,局部平衡消失;当  $P_i \gg 1$  时,熔体趋向于非平衡凝固。 $P_i$  的计算公式为

$$P_i = \frac{\delta_i v}{D_i}, \quad (6)$$

式中: $\delta_i$  为固液界面上成分调整的距离尺度; $v$  为固液界面推移速度的大小; $D_i$  为界面扩散系数。通常将  $\delta_i/D_i$  作为界面扩散速率进行研究,而不单独分析  $\delta_i$  和  $D_i$ 。

固液界面推移速度实时变化,并且无法测量,因此本文利用固相尖端网格的传质质量估算固液界面的推移速度。主要过程如下:首先通过固相体积分数找到尖端网格,然后获取该网格单位时间内的传质质量,最后根据假设的固液界面形状计算出固液界面的推移速度。如图 2 所示,方格代表某一凝固过程中的固相尖端网格,红色区域代表已生长的固相枝晶,蓝色区域代表一个时间步内固相枝晶生长的部分。根据模型实时获取的  $M_{lc}$  可以求得固相体积分数的变化值  $\Delta f_c$ ,而  $\Delta f_c$  又可以由固液界面的推移速度求得,即

$$\Delta f_c = \frac{M_{lc} \Delta t}{\rho_c}, \quad (7)$$

$$\Delta f_c = v \cdot S_{env} \cdot \Delta t, \quad (8)$$

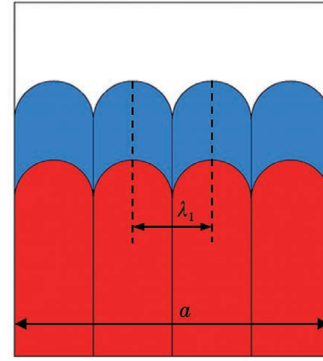


图 2 固相尖端网格内枝晶生长示意图

Fig. 2 Growth schematic of dendrite in solid tip grid

式中: $\Delta t$  为时间步长; $S_{env}$  为单元网格内固相的面密度。将(7)、(8)式整合可得

$$v = \frac{M_{lc}}{\rho_c S_{env}}. \quad (9)$$

为简化模型,假设固相均为顶部呈半球冠的柱状晶结构,且不考虑二次枝晶。根据面密度原理推导可得

$$S_{env} = \frac{S}{V} = \frac{\pi \cdot \lambda_1^2 \cdot n}{2a^2}, \quad (10)$$

$$n = \frac{a}{\lambda_1} \cdot \frac{1}{\lambda_1}, \quad (11)$$

式中: $S$  为柱状晶尖端的覆盖面积; $V$  为单元网格的体积; $\lambda_1$  为柱状晶的一次枝晶间距; $n$  为单元网格内的柱状晶个数。

溶质再分配系数的变化会导致固液界面的浓度和液相线斜率发生改变,因此平衡相图在非平衡凝固过程中并不适用。模型需要能够实时反映液相线斜率变化的瞬时相图。

$$f(k_v) = \frac{k_e - k_v \left[ 1 - \ln\left(\frac{k_v}{k_e}\right) \right]}{1 - k_e}, \quad (12)$$

$$m' = m [1 + f(k_v)], \quad (13)$$

式中: $f(k_v)$  是关于  $k_v$  的函数; $m$  为平衡相图中液相线的斜率; $m'$  为非平衡相图中液相线的线斜率。模型能够实时获取熔覆过程中任意位置的温度、密度、溶质浓度等数据,并可根据瞬时相图计算得到液相线斜率,为后续计算溶质传输提供数据支持。

## 2) 动量守恒方程

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_l \rho_l \mathbf{u}_l) + \nabla \cdot (f_l \rho_l \mathbf{u}_l \otimes \mathbf{u}_l) = -f_l \nabla P + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}_l + f_l \rho_l \mathbf{g} - \mathbf{U}_{lc} - \mathbf{U}_{ln} + \mathbf{F}_M, \quad (14)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_a \rho_a \mathbf{u}_a) + \nabla \cdot (f_a \rho_a \mathbf{u}_a \otimes \mathbf{u}_a) = -f_a \nabla P + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}_a + f_a \rho_a \mathbf{g} + \mathbf{U}_{la} + \mathbf{U}_{ca}, \quad (15)$$

式中:下标 a 代表气相;  $P$  为压强;  $\bar{\boldsymbol{\tau}}$  为应力-应变张量;  $\mathbf{g}$  为重力加速度;  $\mathbf{U}_{lc}$ 、 $\mathbf{U}_{la}$ 、 $\mathbf{U}_{ca}$  为各相之间的动量交换项,其中固相液相之间的动量交换项  $\mathbf{U}_{lc}$  可根据 Blake-Kozeny 方法<sup>[20]</sup> 计算得到,气相液相之间的动量交换项  $\mathbf{U}_{la}$ 、固相气相之间的动量交换项  $\mathbf{U}_{ca}$  参考前人的研究<sup>[21]</sup> 获得;  $\mathbf{F}_M$  为 Marangoni

流驱动力,计算公式为  $\mathbf{F}_M = \nabla T_1 \cdot \frac{\partial \gamma}{\partial T}$ ,其中  $\nabla T_1$  为熔池表面液相的温度梯度,  $\frac{\partial \gamma}{\partial T}$  为熔池表面的温度张力系数。

3) 能量守恒方程

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_l \rho_l h_l) + \nabla \cdot (f_l \rho_l \mathbf{u}_l h_l) = \nabla \cdot (f_l k_l \nabla T_l) - Q_{lc} - Q_{la} + \dot{Q}_l, \tag{16}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_c \rho_c h_c) = \nabla \cdot (f_c k_c \nabla T_c) + Q_{lc} - Q_{ca} + \dot{Q}_c, \tag{17}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_a \rho_a h_a) + \nabla \cdot (f_a \rho_a \mathbf{u}_a h_a) = \nabla \cdot (f_a k_a \nabla T_a) + Q_{la} + Q_{ca}, \tag{18}$$

式中:  $h$  为焓;  $k$  为热导率;  $T$  为各相温度;  $Q_{lc}$ 、 $Q_{la}$ 、 $Q_{ca}$  为各相之间的能量交换项;  $\dot{Q}$  为能量源项,即吸收的激光能量,且固相、液相吸收的激光能量按照各自的体积分数分配。

3.2 物理模型

本文模型采用二维四边形网格,计算域大小为

50 mm × 11 mm。为提高计算效率,沉积层区域(空气域)选用均匀且较密的网格,其余(基体域)则选用自上而下由密到疏的网格分布。整体计算域设置为流体。计算域网格分布及边界条件如图 3 所示。

模型计算时需要使用的主要热物性参数如表 2 所示。

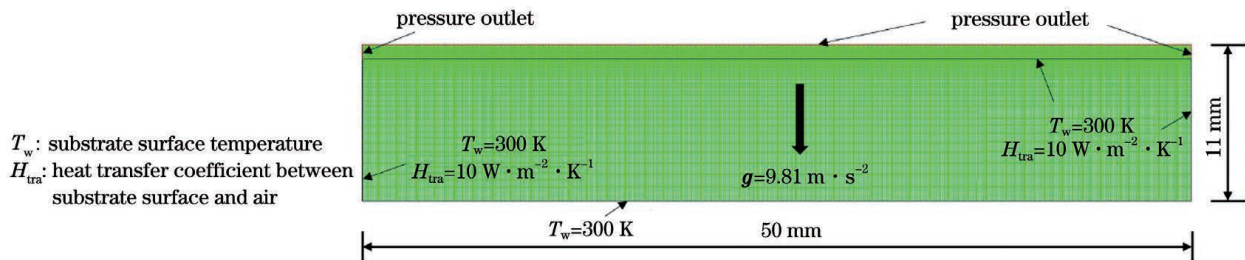


图 3 计算域的网格分布及边界条件示意图

Fig. 3 Grid distribution and boundary conditions of computational domain

表 2 模型计算时使用的热物性参数<sup>[22-24]</sup>

Table 2 Thermophysical parameters used in numerical simulation<sup>[22-24]</sup>

Parameter	Value
Reference density $\rho_{ref}/(\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$	8000
Specific heat $c_p/(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$	500
Melting point $T_f/\text{K}$	1805.15
Thermal conductivity of solid $k_s/(\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$	19.2
Effective thermal conductivity of liquid $k_l/(\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$	209.2
Latent heat $\Delta h_f/(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1})$	250000
Viscosity $\mu_l/(\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	0.0042
Primary dendrite arm spacing $\lambda_1/\text{m}$	$8.0 \times 10^{-6}$
Volume heat-transfer coefficient $H^*/(\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1})$	$1.0 \times 10^9$
Temperature coefficient of surface tension $\partial \gamma / \partial T /(\text{N} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$	$-4.3 \times 10^{-4}$
Equilibrium partition coefficient $k_e/$	0.86
Interfacial diffusion coefficient $D_i/(\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1})$	$3.0 \times 10^{-9}$
Solid-liquid interface width $\delta_i/\text{nm}$	50

在激光熔覆过程中,计算域被拆分成 5 个区域:空气域、基体域、激光束域、能量吸收域、粉末沉积域,如图 4 所示。从图 4 中可以看出:能量吸收域在基体域的最上层,即激光能量添加处;粉末沉积域在

能量吸收域的上一层,在空气域中将粉末以液态形式添加到沉积层中。因此,沉积层将随粉末的加入而逐层增加,能量吸收域和粉末沉积域的位置也将随之变化。

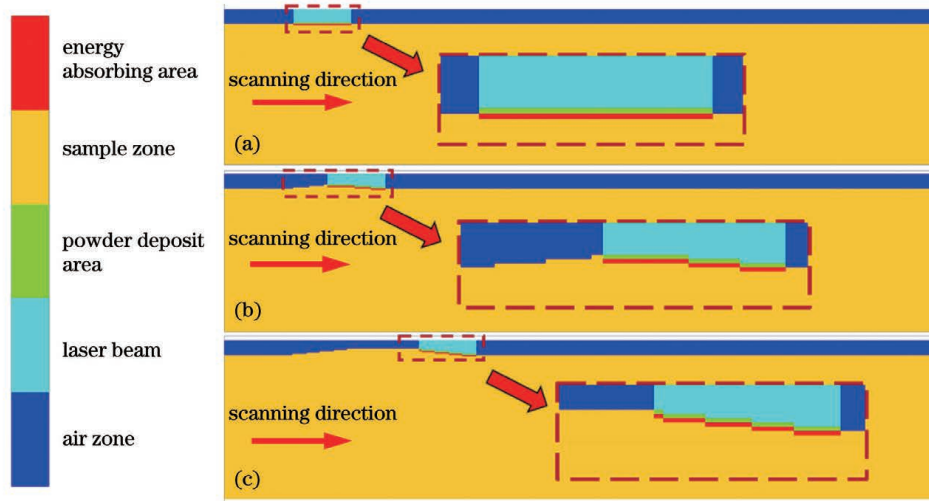


图 4 激光熔覆过程中计算域的演变示意图

Fig. 4 Schematic of computation domain evolution in laser cladding process

## 4 结果分析与讨论

在激光功率为 1500 W、扫描速度为 8 mm/s、送粉量为 10 g/min 的工艺参数下建立两种仿真模型:动态溶质再分配系数的凝固模型以及溶质再分配系数恒等于 0.86 的凝固模型。

### 4.1 温度场及熔池形貌的对比分析

为了研究溶质再分配系数对温度场分布的影响,选取多个模拟时间节点进行对比观察,如图 5 所示,其中图 5(a)~(c)为动态溶质再分配系数凝固模型的温度场云图,图 5(d)~(f)为恒定溶质再分配系数凝固模型的温度场云图。两种模型采用的是

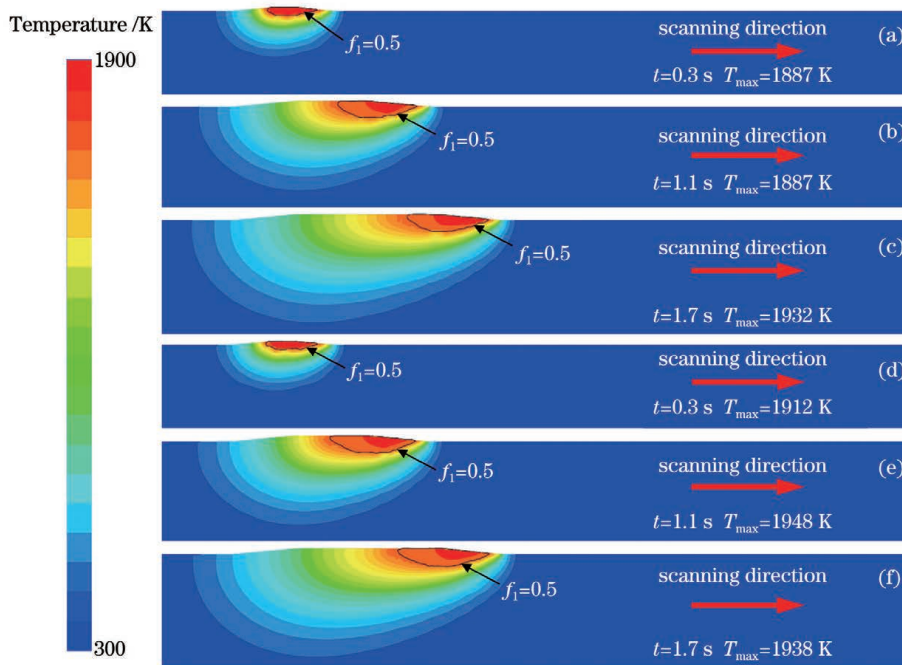


图 5 激光熔覆过程中的温度场演变。(a)~(c)动态溶质再分配系数凝固模型;(d)~(f)恒定溶质再分配系数凝固模型

Fig. 5 Evolution of temperature field during laser cladding. (a)~(c) Dynamic solute redistribution coefficient solidification model; (d)~(f) constant solute redistribution coefficient solidification model

相同的激光熔覆参数,比较后可以发现,两个模型仿真得到的温度场分布差异并不明显,都在  $t=0.3\text{ s}$  时出现了小区域熔池,且熔池都在  $t=1.1\text{ s}$  时达到稳定状态。另外,由图 5 还可以看出,两种模型都经历了急剧升温→缓慢升温→动态平衡的过程,这个过程主要由热输入量与因传热而散失的热量共同决定。在  $t=0.3\text{ s}$  之前,激光的热输入量远大于传热散失的热量,因此模型急剧升温;在  $t=0.3\sim 1.1\text{ s}$  时间段,随着激光热输入量的增加,基体表面形成熔池,但熔池尺寸较小,需要吸收热量变大,消耗了部

分激光热输入量,所以模型缓慢升温;在  $t=1.1\text{ s}$  之后,激光热输入量与因传热而散失的热量趋于平衡,熔池最高温度呈现出动态平衡状态。另外,两种模型都因为热量无法及时传导以及激光定向移动而在激光扫描路径上出现热累积,因此两种模型的温度场都呈勺状分布。

在动态平衡过程中,两种模型在不同时间点下预测的熔覆层高度与熔池深度如表 3 所示。由表 3 可知,两种模型的温度场相似,因此熔池几何尺寸的差异并不明显。

表 3 不同时间点下两种模型预测的熔覆层高度与熔池深度

Table 3 Predicted cladding layer height and molten pool depth by the two model at different time points

Time / s	Cladding height / mm		Molten pool depth/mm	
	Dynamic solute redistribution coefficient solidification model	Constant solute redistribution coefficient solidification model	Dynamic solute redistribution coefficient solidification model	Constant solute redistribution coefficient solidification model
	1.7	0.378	0.375	0.736
2.1	0.380	0.386	0.724	0.737
2.5	0.382	0.378	0.728	0.743

图 6 所示为激光熔覆过程中的熔池形貌模拟图。从图 6 和表 3 可以计算得出,动态溶质再分配系数凝固模型的熔池模拟结果与实验数据的误差为 2.39%,恒定溶质再分配系数凝固模型的熔池模拟结果与实验数据的误差为 3.25%。在熔池形貌尺

寸方面,两种模型的模拟结果与实验数据基本一致,但是由于受到当前二维模型的限制,只能得到以上两者的验证结果,无法获取模拟的熔池宽度,后期将完善构建三维仿真模型,以验证模拟的熔池宽度。

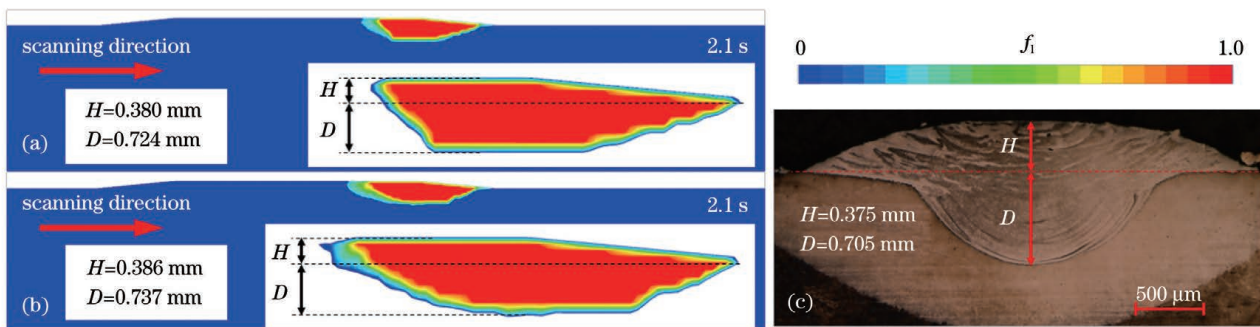


图 6 激光熔覆过程中的熔池形貌图( $t=2.1\text{ s}$ )。(a)动态溶质再分配系数凝固模型;(b)恒定溶质再分配系数凝固模型;(c)实验中的熔池形貌

Fig. 6 Molten pool morphologies during laser cladding ( $t=2.1\text{ s}$ ). (a) Dynamic solute redistribution coefficient solidification model; (b) constant solute redistribution coefficient solidification model; (c) experimental molten pool morphology

由图 6 可知,在  $t=2.1\text{ s}$  时,动态溶质再分配系数凝固模型的熔池尾部区域较恒定溶质再分配系数凝固模型略小。这是由于非平衡凝固下的溶质再分配系数较平衡凝固下的 0.86 有所增大,且糊状区的最高溶质再分配系数可达到 0.955,如图 7 所示。溶质再分配系数的增大导致熔点温度升高、界面浓

度差减小,进而使得动态溶质再分配系数凝固模型的凝固速率变快,所以其熔池尾部区域变小。

#### 4.2 流场分布对比分析

图 8 所示为两种模型在  $t=2.1\text{ s}$  时的固相体积分数以及速度矢量叠加云图,其中图 8(a)为动态溶质再分配系数凝固模型的流场云图,图 8(b)为恒

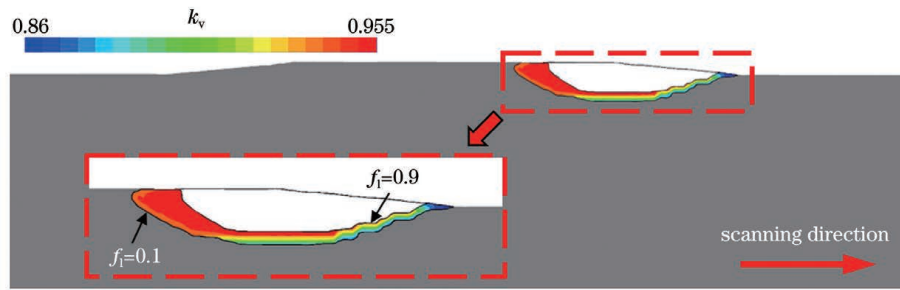
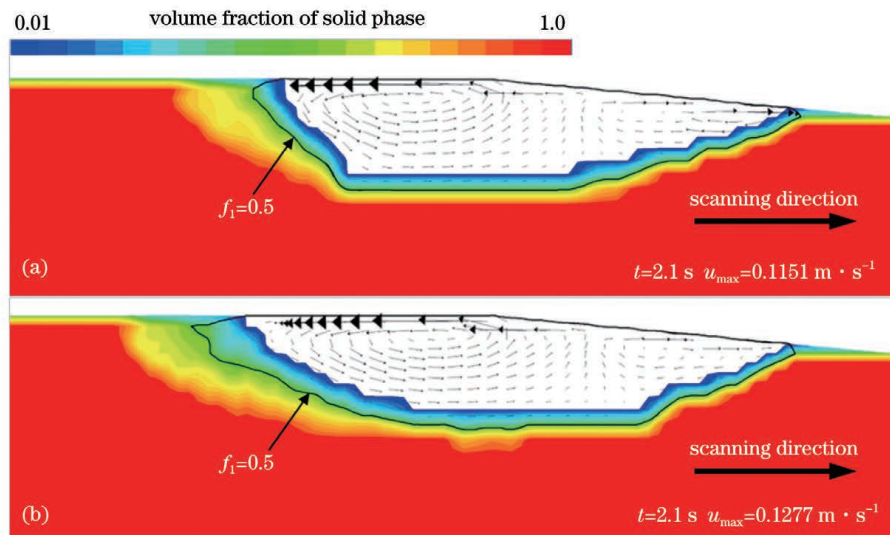


图 7 非平衡凝固下的溶质再分配系数示意图

Fig. 7 Schematic of solute redistribution coefficient during non-equilibrium solidification

图 8 流场分布模拟结果( $t=2.1$  s)。(a)动态溶质再分配系数凝固模型;(b)恒定溶质再分配系数凝固模型Fig. 8 Simulated flow field distribution ( $t=2.1$  s). (a) Dynamic solute redistribution coefficient solidification model; (b) constant solute redistribution coefficient solidification model

定溶质再分配系数凝固模型的流场云图。从图 8 中可以看出,两种模型的熔池内部都存在一顺一逆两个涡流。这是因为熔池边缘区域温度较低,而中心区域温度较高,两区域存在较大的温度梯度,在表面张力梯度的作用下,形成了从最高温度处向两侧流动的 Marangoni 流,而这两个涡流最终在熔池底部汇合,并在热溶质浮力的作用下向上流向熔池顶部。

由图 8 可知,恒定溶质再分配系数凝固模型模拟的最大流速为  $0.1277$  m/s,相较于动态溶质再分配系数凝固模型模拟的最大流速( $0.1151$  m/s)大  $10.95\%$ 。这是因为,两种模型的温度场类似,使得两个熔池的表面张力梯度相似,因此熔池内流场的驱动力基本一致,而动态溶质再分配系数凝固模型的熔池(熔体流动范围)较小,最终导致熔池流速变慢。另外,由于非平衡凝固下的溶质再分配系数增大,熔池的凝固速率变快,因此动态溶质再分配系数

凝固模型的糊状区比恒定溶质再分配系数凝固模型的小。

#### 4.3 溶质分布对比分析

由于 316 L 粉末富含 Cr 元素,而 45 钢基体几乎不含 Cr 元素,所以可以通过观察 Cr 元素来探究溶质再分配系数对沉积层溶质分布的影响。图 9(a)为动态溶质再分配系数凝固模型的 Cr 元素分布云图,图 9(b)为恒定溶质再分配系数凝固模型的 Cr 元素分布云图,图 9(c)为沿激光扫描方向切开的试样的金相图,图 9(d)为垂直于激光扫描方向( $y$ )的 EDS 取点位置,图 9(e)为沿激光扫描方向( $x$ )的 EDS 取点位置。从仿真模拟得出的 Cr 元素分布云图可以看出,两种模型的沉积层均可以分为三个区域:初始区域、稳定区域和结束区域。在沉积层的初始及结束区域,Cr 元素分布杂乱,不具备良好的分析意义,因此着重研究沉积层稳定区域。在沉积层的稳定区域,随着热输入量与因传热而散失

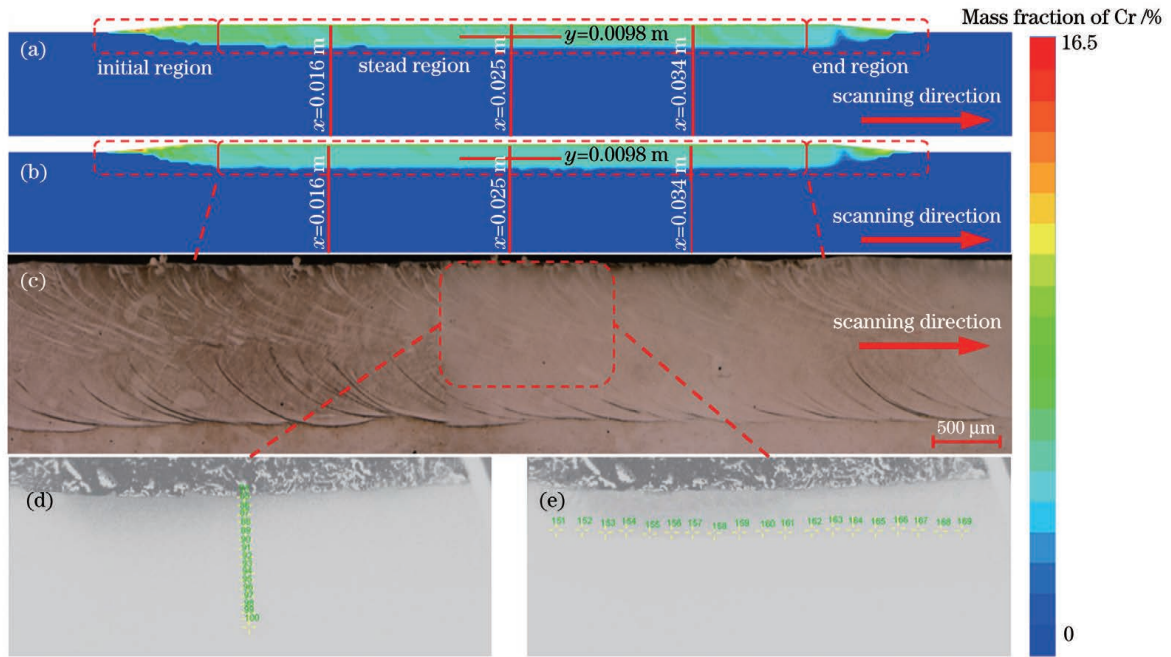


图 9 Cr 元素分布模拟结果。(a) 动态溶质再分配系数凝固模型; (b) 恒定溶质再分配系数凝固模型; (c) 试样的金相图; (d)  $y$  方向 EDS 取点位置; (e)  $x$  方向 EDS 取点位置

Fig. 9 Simulated Cr element distribution. (a) Dynamic solute redistribution coefficient solidification model; (b) constant solute redistribution coefficient solidification model; (c) metallographic microstructure of samples; (d) point locations in  $y$  direction for EDS analysis; (e) point locations in  $x$  direction for EDS analysis

的热量达到动态平衡, 熔池趋于稳定状态, 而且在 Marangoni 流作用下, 熔融金属粉末和基材在熔池内混合搅拌, 沉积层中的 Cr 元素分布得较为均匀。然而, 如图 9 所示, 动态溶质再分配系数凝固模型的沉积层中存在更多的 Cr 元素偏析现象, 而恒定溶质再分配系数凝固模型的沉积层中的 Cr 元素分布得更为均匀。

为了更加直观地分析溶质再分配系数对元素分布的影响, 分别在两种模型的 Cr 元素分布云图上选择  $x=0.016\text{ m}$ 、 $x=0.025\text{ m}$  和  $x=0.034\text{ m}$  直线上的 Cr 元素含量与实验测得的沉积层中的 Cr 元素含量进行对比, 对比结果如图 10 所示。从图 10 中可以看出, 两种模型的 Cr 元素变化趋势与实验数据基本一致, Cr 元素含量都是自上而下呈递减的趋势。

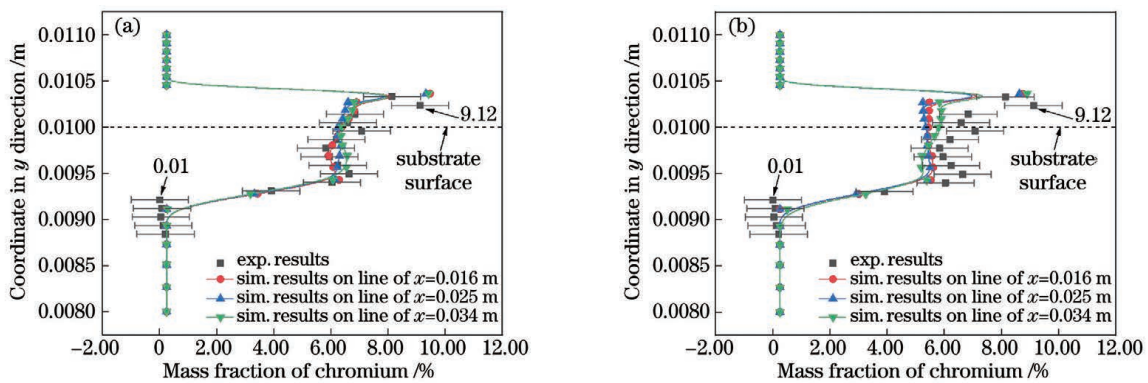


图 10  $y$  方向上 Cr 元素分布的模拟结果与实验结果对比。(a) 动态溶质再分配系数凝固模型; (b) 恒定溶质再分配系数凝固模型

Fig. 10 Comparison of simulated and experimental Cr element distributions in  $y$  direction. (a) Dynamic solute redistribution coefficient solidification model; (b) constant solute redistribution coefficient solidification model

由于两种模型的模拟结果都十分接近实验数据, 因此通过模拟结果与实验数据的绝对误差来判

断哪种模型预测的准确性更高。计算公式为

$$E_a = |\bar{x} - X|, \quad (19)$$



式中:  $E_a$  为绝对误差;  $\bar{x}$  为同种模型得出的三个模拟数据的平均值;  $X$  为实验数据。

两种模型的仿真结果与实验数据之间的误差如图 11 所示。可以发现, 动态溶质再分配系数凝固模型仿真得到的 Cr 元素质量分数的模拟结果与实验数据之间的误差更小, 大部分绝对误差在 0.5% 以内, 而恒定溶质再分配系数凝固模型仿真得到的 Cr 元素质量分数的模拟结果与实验数据的绝对误差大部分在 1% 以上。可见, 溶质再分配系数在沉积层溶质分布过程中起着主导控制作用, 在宏观传热传质模型中需要考虑溶质再分配系数的变化。

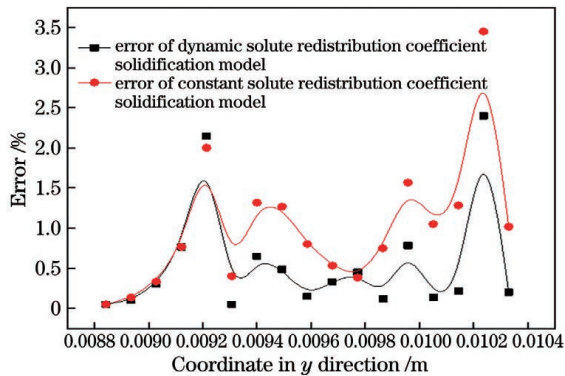


图 11 两种模型模拟的 Cr 元素质量分数与实验数据的误差  
Fig. 11 Error between Cr mass fractions simulated by two models and experimental data

为了研究溶质再分配系数对沉积层元素偏析的影响, 分别在两种模型仿真模拟得出的 Cr 元素分布云图上选取  $y=0.0098$  m 直线上的 Cr 元素含量与实验数据进行比较, 结果如图 12 所示。从图中可以看出, 动态溶质再分配系数凝固模型的元素偏析现象更为明显, 且与实验结果更为接近。这是因为非

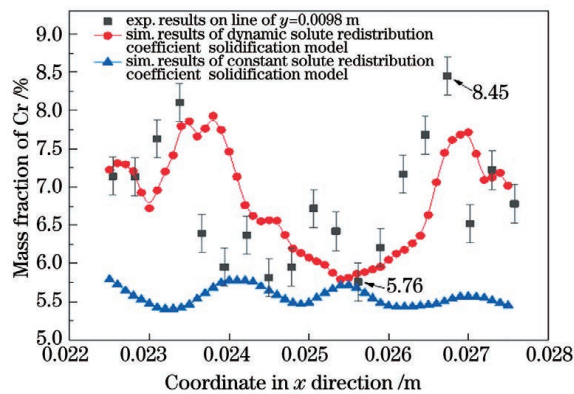


图 12 两种模型模拟的  $x$  方向上的 Cr 元素质量分数与实验数据的对比

Fig. 12 Comparison between Cr mass fractions in  $x$  direction simulated by two models and experimental data

平衡凝固下的溶质再分配系数变大, 导致熔点升高、界面浓度差减小、熔池凝固速率变快, 从而使得熔池区域变小, 最终导致熔池流速变慢。而熔池流速变慢以及熔池凝固速率变快会使熔池流动运输成分的能力下降, 基体材料和粉末材料不能充分混合, 因此更容易形成元素偏析现象。

## 5 结 论

为了提高沉积层溶质分布的预测精度, 将体积平均法和非平衡溶质再分配系数的计算方法相结合, 建立固-液-气三相宏观传热传质模型, 模拟 45 钢表面激光熔覆 316L 不锈钢粉末的过程。通过比较动态溶质再分配系数凝固模型和溶质再分配系数恒等于 0.86 的凝固模型, 探究宏观传热传质模型中引入动态溶质再分配系数对温度场、流场和溶质场的影响机制, 得到如下结论:

1) 对比同一时刻下两种模型仿真的温度场和流场发现, 动态溶质再分配系数凝固模型和恒定溶质再分配系数凝固模型的温度场分布、熔池流场的差异性并不明显。动态溶质再分配系数凝固模型的熔池和糊状区比恒定溶质再分配系数凝固模型的更小, 这是因为非平衡凝固下的溶质再分配系数增大, 使得熔点温度升高、界面浓度差减小, 熔池的凝固速率变快, 最终导致熔池和糊状区缩小。

2) 对比模拟得到的溶质场与实验数据可以发现, 两种模型仿真得到的 Cr 元素含量与实验数据基本一致, 都呈由上到下递减的趋势。相较实验数据中  $y$  方向上的 Cr 元素分布, 动态溶质再分配系数凝固模型的绝对误差大部分在 0.5% 以下, 而恒定溶质再分配系数凝固模型的绝对误差却普遍高于 1%。这是因为动态溶质再分配系数更符合实验中熔池的凝固过程。相较实验数据中  $x$  方向上的 Cr 元素分布, 动态溶质再分配系数凝固模型的元素偏析现象更为明显, 也更接近实验数据。这是因为熔池流速变慢以及熔池凝固速率变快, 都会导致熔池没有充分流动就已经凝固, 因此更容易形成元素偏析现象。

3) 溶质再分配系数对熔池凝固过程有主导控制作用, 为了提高沉积层溶质分布的预测精度, 在仿真模拟激光熔覆过程时需要考虑溶质再分配系数的变化。

## 参 考 文 献

- [1] Lou F J. Analysis and numerical simulation of

- temperature and stress during laser cladding process [D]. Hangzhou: Zhejiang University of Technology, 2009.
- 楼凤娟. 激光熔覆的温度及应力分析和数值模拟 [D]. 杭州: 浙江工业大学, 2009.
- [2] Yao J H. Laser surface modification technology and application [M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2012.
- 姚建华. 激光表面改性技术及其应用 [M]. 北京: 国防工业出版社, 2012.
- [3] Yao Y S, Tang J P, Zhang Y C, et al. Development of laser fabrication technology for amorphous alloys [J]. Chinese Journal of Lasers, 2021, 48(2): 0202012.
- 姚燕生, 唐建平, 张亚超, 等. 非晶合金激光制造技术研究进展 [J]. 中国激光, 2021, 48(2): 0202012.
- [4] Hu D W, Liu Y, Chen H, et al. Microstructure and properties of laser cladding Ni-based WC coating on Q960E steel [J]. Chinese Journal of Lasers, 2021, 48(6): 0602120.
- 胡登文, 刘艳, 陈辉, 等. Q960E 钢激光熔覆 Ni 基 WC 涂层组织及性能 [J]. 中国激光, 2021, 48(6): 0602120.
- [5] Pang X T, Gong Q F, Wang Z J, et al. Microstructures and mechanical properties of 30CrMnSiA and 30CrMnSiNi2A high-strength steels after laser-cladding repair [J]. Chinese Journal of Lasers, 2020, 47(11): 1102002.
- 庞小通, 龚群甫, 王志杰, 等. 30CrMnSiA 和 30CrMnSiNi2A 高强钢激光熔覆修复后的组织特征与力学性能 [J]. 中国激光, 2020, 47(11): 1102002.
- [6] Ji X, Sun Z G, Chang L L, et al. Microstructure evolution behavior in laser melting deposition of Ti6Al4V/Inconel625 gradient high-temperature resistant coating [J]. Chinese Journal of Lasers, 2019, 46(11): 1102008.
- 季霄, 孙中刚, 唱丽丽, 等. 激光熔化沉积 Ti6Al4V/Inconel625 梯度耐高温涂层组织演变行为研究 [J]. 中国激光, 2019, 46(11): 1102008.
- [7] Ying L X, Wang L Q, Chen G C, et al. Simulation and calculation of 3D laser cladding temperature field of ceramic-metal composite coatings by finite element method [J]. Heat Treatment of Metals, 2004, 29(7): 24-28.
- 应丽霞, 王黎钦, 陈观慈, 等. 3D 激光熔覆陶瓷-金属复合涂层温度场的有限元仿真与计算 [J]. 金属热处理, 2004, 29(7): 24-28.
- [8] Dai D P, Jiang X H, Cai J P, et al. Numerical simulation of temperature field and stress distribution in Inconel 718 Ni base alloy induced by laser cladding [J]. Chinese Journal of Lasers, 2015, 42(9): 0903005.
- 戴德平, 蒋小华, 蔡建鹏, 等. 激光熔覆 Inconel 718 镍基合金温度场与应力场模拟 [J]. 中国激光, 2015, 42(9): 0903005.
- [9] Zhao J X, Wang G, Wang X Y, et al. Multicomponent multiphase modeling of dissimilar laser cladding process with high-speed steel on medium carbon steel [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2020, 148: 118990.
- [10] Mirzade F K, Niziev V G, Panchenko V Y, et al. Kinetic approach in numerical modeling of melting and crystallization at laser cladding with powder injection [J]. Physica B: Condensed Matter, 2013, 423: 69-76.
- [11] Zhan X H. Simulation of dendritic grain growth in weld pool of Ni-Cr binary alloy [D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2008.
- 占小红. Ni-Cr 二元合金焊接熔池枝晶生长模拟 [D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2008.
- [12] Aziz M J, Kaplan T. Continuous growth model for interface motion during alloy solidification [J]. Acta Metallurgica, 1988, 36(8): 2335-2347.
- [13] Pinomaa T, Provatas N. Quantitative phase field modeling of solute trapping and continuous growth kinetics in quasi-rapid solidification [J]. Acta Materialia, 2019, 168: 167-177.
- [14] Plapp M. Unified derivation of phase-field models for alloy solidification from a grand-potential functional [J]. Physical Review E, 2011, 84(3): 031601.
- [15] Eiken J, Böttger B, Steinbach I. Multiphase-field approach for multicomponent alloys with extrapolation scheme for numerical application [J]. Physical Review E, 2006, 73(6): 066122.
- [16] Yang Y, Humadi H, Buta D, et al. Atomistic simulations of nonequilibrium crystal-growth kinetics from alloy melts [J]. Physical Review Letters, 2011, 107(2): 025505.
- [17] Ge H H, Xu H Z, Wang J F, et al. Investigation on composition distribution of dissimilar laser cladding process using a three-phase model [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2021, 170: 120975.
- [18] He X L, Song L J, Yu G, et al. Solute transport and composition profile during direct metal deposition with coaxial powder injection [J]. Applied Surface Science, 2011, 258(2): 898-907.
- [19] Ge H H, Ren F L, Li J, et al. Four-phase dendritic model for the prediction of macrosegregation, shrinkage cavity, and porosity in a 55-ton ingot [J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 2017, 48(3): 1139-1150.

- [20] Wu M, Ludwig A, Kharicha A. A four phase model for the macrosegregation and shrinkage cavity during solidification of steel ingot[J]. *Applied Mathematical Modelling*, 2017, 41: 102-120.
- [21] Wang T, Wu M H, Ludwig A, et al. Modelling the thermosolutal convection, shrinkage flow and grain movement of globular equiaxed solidification using a three phase model[J]. *International Journal of Cast Metals Research*, 2005, 18(4): 221-228.
- [22] Li J, Wu M H, Ludwig A, et al. Simulation of macrosegregation in a 2.45-ton steel ingot using a three-phase mixed columnar-equiaxed model [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2014, 72: 668-679.
- [23] Schneider M C, Gu J P, Beckermann C, et al. Modeling of micro- and macrosegregation and freckle formation in single-crystalnickel-base superalloy directional solidification[J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 1997, 28(7): 1517-1531.
- [24] Pinomaa T, Lindroos M, Walbrühl M, et al. The significance of spatial length scales and solute segregation in strengthening rapid solidification microstructures of 316L stainless steel [J]. *Acta Materialia*, 2020, 184: 1-16.

## Effect of Solute Redistribution Coefficient on Solute Distribution in Laser Cladding

Zhang Caowei<sup>1,2,3</sup>, Ge Honghao<sup>1,2,3\*</sup>, Fang Hao<sup>1,2,3</sup>, Zhang Qunli<sup>1,2,3</sup>, Yao Jianhua<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup> College of Mechanical Engineering, Zhejiang University of Technology, Hangzhou, Zhejiang 310014, China;

<sup>2</sup> Institute of Laser Advanced Manufacturing, Zhejiang University of Technology, Hangzhou, Zhejiang 310014, China;

<sup>3</sup> Collaborative Innovation Center of High-End Laser Manufacturing Equipment, Hangzhou, Zhejiang 310014, China

### Abstract

**Objective** Laser cladding technology, which is the foundation of laser remanufacturing technology, can improve the wear resistance, corrosion resistance, high-temperature resistance, and other properties of the substrate surface. However, the experimental method requires a significant amount of time and energy to optimize the parameters of laser cladding, and numerical simulation provides an efficient way to study such a complex physical phenomena. Moreover, laser cladding is a non-equilibrium solidification process, but most of the numerical simulations have neglected it. This study demonstrates a three-phase solidification model based on the volume-averaged method and investigates the influence of the solute redistribution coefficient on the solute distribution in the deposition layer during non-equilibrium solidification. Additionally, accurate prediction of the solute distribution on the deposition layer has also been presented in this study during the laser cladding.

**Methods** A three-phase solidification model based on the volume-averaged method is established in this study, with considerations of non-equilibrium dynamic solute redistribution coefficient and constant solute redistribution coefficient. Both models investigate the laser cladding of 316L stainless steel powder on 45 steel substrates. The experimental results on the geometrical morphology and chromium concentration of the cladding layer validate the numerical results. By comparing the temperature field, flow field, and solute field of the two models, the influence of the solute redistribution coefficient on the cladding process during non-equilibrium solidification is explored; furthermore, whether the dynamic solute redistribution coefficient should be considered in the solidification model is determined by comparing the prediction accuracy of chromium concentration between the two solidification models.

**Results and Discussions** In this paper, the mass of element mesh diffusion is used to calculate the relatively accurate moving velocity of the solid-liquid interface, and the dynamic solute redistribution coefficient is calculated accordingly (Fig. 2). The solute redistribution coefficient in the laser cladding process is greater than the constant solute redistribution coefficient (Fig. 7). The geometrical morphologies of the cladding layer are obtained by using the two solidification models, which are in good agreement with the experimental data (Fig. 6). At the same time point, the temperature (Fig. 5) and flow fields (Fig. 8) of the two solidification models are identical. In the molten pools of the two solidification models, there are clockwise and counter-clockwise vortices and the chromium element in the powder diffuses to all parts of the cladding layer due to the vortices' action. Moreover, the solute distribution in the deposition layer obtained by the two solidification model's simulation is compared with the experimental data

which shows that the content of chromium element in both the models decreases from above to below (Fig. 9 and Fig. 10). The dynamic solute redistribution coefficient, on the other hand, is more consistent with the experimental solidification process, the most absolute errors between the simulation results of the solidification model with dynamic solute redistribution coefficient and the experimental data are within 0.5% (Fig. 11), and the element segregation phenomenon is more obvious and closer to the experimental data (Fig. 12).

**Conclusions** A three-phase solidification model based on the volume-averaged method with considerations of non-equilibrium dynamic solute redistribution coefficient and constant solute redistribution coefficient is established. The morphologies of the temperature field and flow field are the same when compared to the simulation results of the two solidification models, as is the variation trend of solute field concentration. However, the dynamic solute redistribution coefficient solidification model predicts the solute distribution in the deposition layer with less error and is closer to the experimental data. In the laser cladding process, the solidification rate of the molten pool varies with the change in the solute redistribution coefficient, which leads to the instability of the solute distribution process and obvious element segregation. Our findings indicate that the dynamic solute redistribution coefficient has a significant impact on solute distribution in the deposition layer. To more accurately predict the solute distribution in the deposition layer, the change in the solute redistribution coefficient should be considered in the laser cladding process simulation.

**Key words** laser technique; laser cladding; solute redistribution coefficient; solute distribution; numerical simulation