



CA/MC 法模拟焊缝凝固微观组织形成

邓小虎, 张立文*

(大连理工大学 材料科学与工程学院, 辽宁 大连 116024)

摘要: 基于焊接冶金学原理, 将元胞自动机 (cellular automaton, 简称 CA) 法和蒙特卡罗 (Monte Carlo, 简称 MC) 法相结合, 建立了一类焊缝凝固微观组织演变模型. 模型采用 CA 法和 MC 法构建凝固形核和长大演变规则, 并且通过耦合有限差分法来计算温度场和溶质场. 模型被用来模拟低碳铁素体不锈钢焊缝凝固组织的形成, 再现焊缝凝固微观组织演变过程. 模拟结果表明, 增加形核孕育剂或减小焊接热输入均可以加强柱状晶向等轴晶转变. 模拟结果和实验结果以及理论模型吻合较好.

关键词: 元胞自动机 (CA); 蒙特卡罗; 焊缝凝固; 计算机模拟; 微观组织
中图分类号: TG14 **文献标志码:** A

0 引言

焊缝的性能对焊接件整体性能有很大的影响, 而焊缝组织晶粒的大小和形态决定了焊缝的力学性能. 细小的等轴晶粒可以提高焊缝性能, 但在通常的焊接条件下却不容易获得, 大部分焊缝凝固组织均为粗大的柱状晶^[1]. 因此, 对焊缝凝固组织形成过程进行研究有很重要的实际意义.

由于实验方法的局限性, 近年来学者们开始致力于采用数值模拟的方法来研究如何提高焊缝组织性能, 元胞自动机 (CA) 法和蒙特卡罗 (MC) 法等介观模拟方法开始应用到焊缝组织模拟中.

Rappaz 等^[2]采用 CAFE 模型模拟了移动激光下的钢板再熔过程的微观组织变化. Nestler 等^[3]运用 CA 法模拟了电子束表面再熔微结构形成过程. 在此基础上, Pavlyk 等^[4]还建立了耦合宏观热源和流体流变的焊接凝固微结构模型. Koseki 等^[5]采用 MC 法建立了 MCFD 微观组织模型, 模拟了焊接凝固中等轴晶的形成. 最近, 黄安国等^[6]采用 CA 法模拟了焊缝凝固组织晶粒长大的优先取向及竞争长大机制. Wei 等^[7,8]基于 CA-FD 模型模拟了焊接熔池枝晶晶粒长大过程. 但他们的模型都没有和实际焊接条件建立联系.

CA 法^[9]和 MC 法各有优缺点, CA 法的随机

性不是很好, 而 MC 法缺少物理机制的支持. 因此本文将两种方法结合起来模拟焊缝凝固组织的形核和长大过程, 并将模拟结果与焊接冶金理论和实验结果进行比较.

1 数学物理模型

1.1 温度场及溶质场计算

热传导计算采用二维有限差分法, 每一时间步 Δt 内差分单元温度变化可用下式表示:

$$T_{i,j}^{t+\Delta t} = (\lambda_{i+1,j} T_{i+1,j}^t + \lambda_{i-1,j} T_{i-1,j}^t + \lambda_{i,j+1} T_{i,j+1}^t + \lambda_{i,j-1} T_{i,j-1}^t - (\lambda_{i+1,j} + \lambda_{i-1,j} + \lambda_{i,j+1} + \lambda_{i,j-1} - A) \cdot T_{i,j}^t) / A \quad (1)$$

式中: $A = a^2 c_p \rho / \Delta t$, a 为元胞边长, c_p 和 ρ 分别为比热容和密度; $\lambda_{i,j}$ 为热传导系数, 可由下式

$$\lambda_{i,j} = f_{i,j}^s \lambda_s + f_{i,j}^l \lambda_l \quad (2)$$

求得^[10]. 其中 $f_{i,j}^s$ 、 $f_{i,j}^l$ 分别为 (i,j) 处的固相分数和液相分数; λ_s 和 λ_l 分别为固相和液相热传导系数.

溶质场的求解采用与温度场类似的方程, 但对于液相扩散和固相扩散分别进行计算, 在固/液界面处通过平衡溶质再分配系数进行联系. 在一个时间步 Δt 内溶质浓度变化表示如下:

$$C_{i,j}^{t+\Delta t} = (D_{i+1,j} C_{i+1,j}^t + D_{i-1,j} C_{i-1,j}^t + D_{i,j+1} C_{i,j+1}^t + D_{i,j-1} C_{i,j-1}^t - (D_{i+1,j} + D_{i-1,j} +$$

$$(D_{i,j+1} + D_{i,j-1} - B) \cdot D_{i,j}^i) / B \quad (3)$$

式中: $B = a^2 / \Delta t$; $D_{i,j}$ 为溶质扩散系数, 可由

$$D_{i,j} = f_{i,j}^s D_s + f_{i,j}^l D_l \quad (4)$$

求得. 其中 D_s 与 D_l 分别为固相与液相溶质扩散系数.

凝固热采用温度回升法进行处理. 对于发生凝固转变的元胞, 考虑凝固热后的温度为

$$T^* = T + \Delta H / c_p \quad (5)$$

式中: ‘*’ 代表界面; ΔH 为凝固热, 其值见表 1. 对于溶质再分配也采用类似于凝固热的方法进行计算, 发生凝固转变前后由于溶质再分配产生的浓度变化为

$$C^* = C + \Delta C \quad (6)$$

其中 ΔC 为元胞状态发生转变时固液界面前沿析出的溶质浓度.

表 1 模拟中用到的材料物性参数^[5]

Tab. 1 Physical properties used in simulation^[5]

| 参数 | 数值 |
|--|---------------------|
| $c_p / (\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$ | 821.6 |
| $\lambda_l / (\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$ | 35 |
| $\lambda_s / (\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$ | 30 |
| $\rho / (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$ | 7.25×10^3 |
| $D_l / (\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1})$ | 5×10^{-9} |
| $D_s / (\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1})$ | 2×10^{-9} |
| $\sigma_{sl} / (\text{J} \cdot \text{m}^{-2})$ | 0.212 |
| $\sigma_{ss} / (\text{J} \cdot \text{m}^{-2})$ | 0.468 |
| $\Delta T_n / \text{K}$ | 1.8 |
| $\Delta H / (\text{J} \cdot \text{kg}^{-1})$ | 1.854×10^5 |

1.2 形核及晶粒长大

对于焊接熔池结晶来说, 非自发形核起了主要作用. 当液相中有现成表面存在时, 可以在较小的过冷度下进行结晶. 熔池中存在两类现成表面: 一是熔合区呈熔融状态的基体金属晶粒表面; 另外就是合金元素或杂质的悬浮质点^[1].

形核模型主要有两种, 瞬时形核模型和连续形核模型. 模型中都有一些参数需要由实验来确定. 本文采用瞬时形核模型来模拟焊接凝固形核, 并且加入概率条件(具体见 2.2)来控制形核.

长大规则采用结晶速率来计算界面单元的固相分数 f^s , 其计算式如下:

$$f_{i,j}^s = L_{i,j} / L_{CA} \quad (7)$$

其中 $L_{i,j}$ 为晶粒长大距离, L_{CA} 为元胞边长. $L_{i,j}$ 由晶粒长大速率 $v_{i,j}^g$ 求得:

$$L_{i,j} = \int_{t_2}^{t_1} v_{i,j}^g dt \quad (8)$$

晶粒长大速率由其和焊接速率之间的本构方程求得, 其方程如下:

$$v^g = v^w \cdot \cos \theta \quad (9)$$

其中 θ 为晶粒生长方向(最大温度梯度方向)和焊接方向的夹角.

1.3 时间步的处理

元胞自动机程序和差分程序采用相同的时间步. 时间步大小应该满足两个条件: 一是保证温度场和溶质场显式计算结果稳定, 再就是确保在一个时间步内晶粒长大距离不大于一个元胞边长. 综合考虑以上条件, 时间步 Δt 可以用下式计算:

$$\Delta t = 0.25 \min \left(\frac{a}{v_{\max}}, \frac{a^2}{D_l}, \frac{a^2}{D_s}, \frac{c_p \rho a^2}{\lambda} \right) \quad (10)$$

式中 v_{\max} 为晶粒最大长大速率.

2 CA/MC 模型的建立

焊接凝固过程主要由焊接过程参数和材料的成分来决定. 为了简化模型, 采用了以下假设:

(1) 对于焊接热源模型进行简化, 假设焊缝中心 $1 \text{ mm} \times 1 \text{ mm}$ 的区域迅速被加热到熔点以上温度 T_0 而被熔化^[5]:

$$T(x, y, 0) = \begin{cases} T_0; & 0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1 \\ 298 \text{ K}; & 1 \leq x \leq 4, 0 \leq y \leq 1 \end{cases} \quad (11)$$

T_0 的值通过模拟和实际焊接过程相同面积的熔化区来确定, 随着热扩散的进行, 熔化区越来越大直到整个焊缝区形成.

(2) 采用随机设定一定数量元胞为形核孕育剂位置, 这些位置相当于熔池内的悬浮质点, 其形核和晶粒长大按固液界面位置处理.

2.1 元胞自动机方法

元胞自动机是一种时间、空间、状态都离散, 空间上相互作用及时间上的因果关系皆局部的网格动力学模型. 关于元胞自动机方法的详细介绍见文献[9].

对于当前模型, 模拟区域被划分为 400×100 的四边形元胞空间, 代表了 $4 \text{ mm} \times 1 \text{ mm}$ 的实际大小. 模型采用二维 von Neumann 邻居规则, 即只考虑 4 个距离最近的邻居. 根据实际情况, 各个边界采用不同的边界条件, 焊缝中心采用对称边界条件, 为了使截面的位置带来的影响最小, 上下边界采用周期边界条件(如图 1 所示).

模型赋予每个元胞如下信息: 温度、溶质浓度、晶粒颜色变量、晶粒长大取向和晶粒状态变

量. 晶粒颜色变量用来表示不同的固相晶粒, 每个形核的固相晶粒具有随机的长大取向. 元胞状态变化采用连续变量表示. ‘1’代表固相, ‘0’代表液相, ‘0’和‘1’之间代表固/液界面, 处于界面态的元胞可以发生形核和长大. 整个程序的执行过程参见图2.

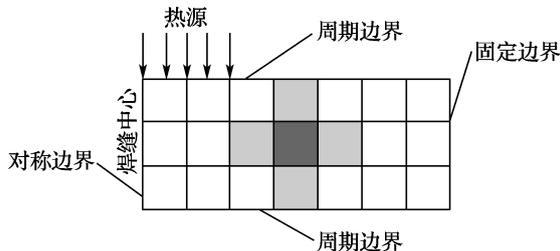


图1 CA网格示意图

Fig. 1 Schematics of the CA grid

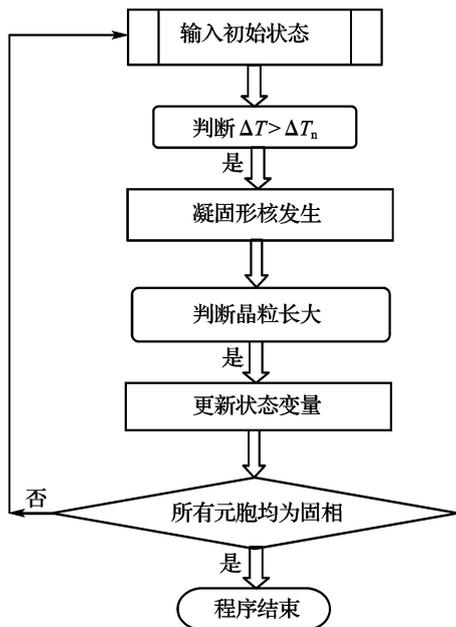


图2 二维元胞自动机程序流程图

Fig. 2 Flowchart of 2-D CA program

2.2 MC法修正形核和长大

为了更好地反映晶粒长大的随机过程及分枝机制, MC方法被引入来进行长大规则的修正. MC法也称为随机模拟法, 它以概率统计理论为其理论基础, 以随机抽样为其主要手段. 晶粒生长过程中的MC法基于能量最小原理, 不仅考虑了体积自由能变化, 而且加入了界面能的影响.

晶粒形核过程的MC概率修正由下式决定:

$$P_n = \begin{cases} 1; \Delta T \geq \Delta T_n, \frac{i}{N_1} < r_1, \frac{j}{N_2} < r_2 \\ 0; \Delta T < \Delta T_n \end{cases} \quad (12)$$

其中 ΔT 为过冷度; ΔT_n 为临界形核过冷度, 其值见表1. i, j 为元胞位置, r_1, r_2 为随机数 ($0 < r_1, r_2 \leq 1$).

对于正方形单元, 晶粒长大时元胞由液相转变为固相所需的最小能量为^[11]

$$\Delta F_g^*(x, y, t) = \frac{(n_{sl}\sigma_{sl} + n_{ss}\sigma_{ss})^2 \delta}{4\Delta S(x, y, t)\Delta T(x, y, t)} \quad (13)$$

其中 σ_{sl} 和 σ_{ss} 分别为固/液界面和固/固界面的界面能, n_{sl} 和 n_{ss} 分别为固/液界面和固/固界面的个数, δ 为单元厚度, ΔS 为熔化熵. 元胞生长概率 P_g 可用下式计算^[11]:

$$P_g(x, y, t) = \begin{cases} 0; & \Delta T \leq 0 \\ \exp(-\Delta F_g^*(x, y, t)/kT); & \Delta T > 0 \end{cases} \quad (14)$$

式中 k 为 Boltzmann 常数.

3 模拟结果及讨论

CA/MC模型被应用到低碳铁素体不锈钢中以验证模型的正确性. 计算中用到的物性参数见表1. 图3是模拟不添加形核孕育剂时得到的最终组织和实际焊缝组织^[5]的对比. 简化热源模型取 $T_0 = 5000$ K 和实际中得到的熔化区面积基本一致. 图3(a)是采用MC修正长大前的结果, 图3(b)为考虑MC修正长大后得到的模拟组织. 与实验结果图3(c)相比, 经过MC修正后的最终组织在形状上更为接近.

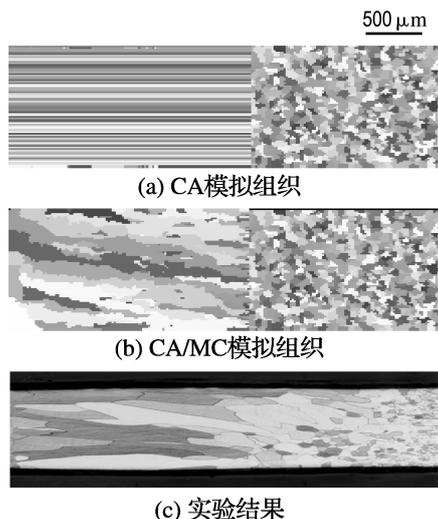


图3 无形核孕育剂得到的模拟组织和实际焊缝晶粒组织对比

Fig. 3 Comparison between calculated and actual weld grain structure without nucleate agent

图4是 CA/MC 模型在形核孕育剂密度为 $100/\text{mm}^2$ 时得到的熔池凝固过程中不同时刻的晶粒组织. 图4(a)为熔化刚结束, 焊缝即将凝固时, 图中白色区域代表焊接熔化区. 图4(b)为柱状晶形核并且开始长大. 通过图4(c)可以看到柱状晶向等轴晶转变(CET)发生, 等轴晶的产生是随着凝固过程进行, 温度梯度发生变化和凝固前沿有高密度形核孕育剂共同作用的结果. 最终焊缝组织图4(d)为初始得到柱状晶粒, 凝固后期焊缝中心为等轴状晶粒的混合组织. 与实际焊缝组织图4(e)相比, 不论是在晶粒大小, 还是在 CET 发生时间上, 都吻合较好.

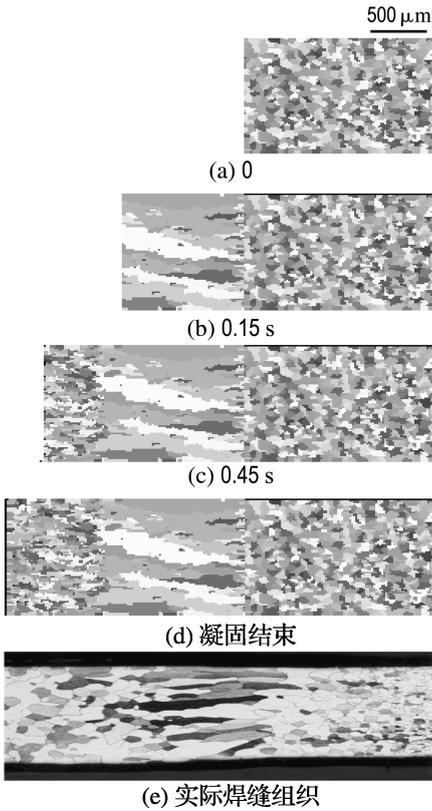


图4 凝固过程中不同时刻焊缝组织比较(形核孕育剂密度为 $100/\text{mm}^2$)

Fig. 4 Calculated results showing different time of grain structure and comparing with the actual results with the number of nucleate agents of $100/\text{mm}^2$

图5为添加不同体积密度的形核孕育剂得到的最终焊缝晶粒组织. 由图5(a)可以看出, 无形核孕育剂时没有等轴晶粒出现, 焊缝最终组织为完全的柱状晶组织. 比较图5(b)、(c)发现, 随着形核孕育剂密度的增加, 等轴晶粒数量也随之增加, 并且形核孕育剂密度越大, 等轴晶粒越细小.

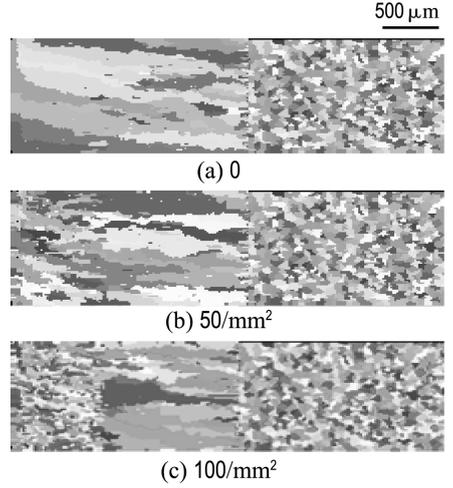


图5 不同体积密度下形核孕育剂得到的模拟焊缝组织 ($T_0=5\ 000\ \text{K}$)

Fig. 5 Comparison between calculated and actual weld grain structure with different volume density nucleate agent ($T_0=5\ 000\ \text{K}$)

焊缝凝固的 CET 除了可以通过增加形核孕育剂含量进行加强以外, 还可以通过改变焊接能量输入的手段实现. 图5为通过改变第二相粒子密度来得到更为细小的等轴晶粒组织. 图6为采用不同焊缝中心温度时得到的焊缝最终组织. 不同焊缝中心温度对应了不同的焊接热输入. 由图6可以看出, 随着焊接能量密度的增加, 焊缝更容易以柱状晶组织凝固, 而采用低能量密度更容易在焊缝中心处出现等轴晶粒组织.

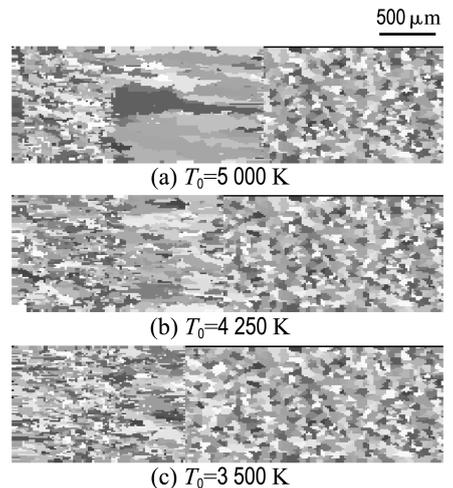


图6 焊缝中心温度对模拟得到晶粒组织的影响(形核孕育剂密度为 $100/\text{mm}^2$)

Fig. 6 Simulated results showing the effect of welding pool center temperature with the number of nucleate agents of $100/\text{mm}^2$

4 结 论

(1)建立了一类改进的 CA/MC 焊缝凝固微观组织演变模型,模型被应用到低碳铁素体不锈钢焊接中,很好地模拟了焊缝凝固微观组织的形成;

(2)在焊缝中添加形核孕育剂可以降低焊件温度梯度,增加形核过冷度,进而促进等轴晶形成,提高焊缝性能;

(3)通过减小焊接热输入,可以降低焊缝处能量密度,进而细化晶粒,改善焊缝性能.

参考文献:

- [1] 张文钺. 金属熔焊原理及工艺[M]. 北京:机械工业出版社, 1980
- [2] RAPPAZ M, GANDIN C A. Prediction of grain structures in various solidification processes [J]. **Metallurgical and Materials Transactions A**, 1996, **27A**:695-705
- [3] NESTLER B, PAVLYK V, LUDWIG A, *et al.* Numerical simulation of microstructure formation during electron-beam surface remelting of an Al-Si alloy [J]. **Mathematical Modeling of Weld Phenomena**, 1998, **4**:332-351
- [4] PAVLYK V, DILTHEY U. Simulation of weld solidification microstructure and its coupling to the

- macroscopic heat and fluid flow modeling [J]. **Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering**, 2004, **12**:S33-S45
- [5] 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
- [6] 黄安国,余圣甫,李志远. 焊缝金属凝固组织元胞自动机模拟[J]. 焊接学报, 2008(04):45-48
- [7] 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, **12**(2): 138-146
- [8] ZHAN X H, DONG Z B, WEI Y H, *et al.* Dendritic grain growth simulation in weld molten pool based on CA-FD model [J]. **Crystal Research and Technology**, 2008, **43**(3):253-259
- [9] RABBE D. 计算材料学[M]. 北京:化学工业出版社, 2002
- [10] 李 强, 李殿中, 钱百年. Al-7%Si 凝固过程组织演变的元胞自动机方法模拟[J]. 材料工程, 2004, **7**:35-39
- [11] ZHU Pan-ping, SMITH R W. Dynamic simulation of crystal growth by Monte Carlo method- II. Ingot microstructures [J]. **Acta Metallurgica et Materialia**, 1992, **40**(12):3369-3379

Simulation of formation of welding solidification microstructure by CA/MC scheme

DENG Xiao-hu, ZHANG Li-wen*

(School of Materials Science and Engineering, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

Abstract: Based on the metallurgical theories of welds, a modified cellular automaton (CA) and Monte Carlo (MC) model is constructed on microstructural evolution during welding solidification. The CA/MC scheme is used to the development of evolutionary rule of grains nucleation and growth combined with finite difference calculation of thermal and solute diffusion. The model is employed to simulate the formation of welding solidification microstructure in low-carbon ferritic stainless steel. It is found that the simulation can reproduce the welds solidification. The simulation results show that increasing the nucleating agent or decreasing the energy input can enhance the columnar-to-equiaxed transition (CET). The computed results are qualitatively consistent with the actual ones and theoretical conclusions.

Key words: cellular automaton (CA); Monte Carlo; welding solidification; computer simulation; microstructure