

El、Scopus 收录 中文核心期刊

面向增材制造的熔池凝固组织演变的相场研究

肖文甲, 许宇翔, 宋立军

PHASE-FIELD STUDY ON THE EVOLUTION OF MICROSTRUCTURE OF THE MOLTEN POOL FOR ADDITIVE MANUFACTURING

Xiao Wenjia, Xu Yuxiang, and Song Lijun

在线阅读 View online: https://doi.org/10.6052/0459-1879-21-364

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于微结构动态演化机制的单晶镍基高温合金晶体塑性本构及其有限元模拟

MICROSTRUCTURE EVOLUTION MECHANISM BASED CRYSTAL-PLASTICITY CONSTITUTIVE MODEL FOR NICKEL-BASED SUPERALLOY AND ITS FINITE ELEMENT SIMULATION 力学学报. 2017, 49(4): 763-781

面向增材制造的应力最小化连通性拓扑优化

ADDITIVE MANUFACTURING-ORIENTED STRESS MINIMIZATION TOPOLOGY OPTIMIZATION WITH CONNECTIVITY 力学学报. 2021, 53(4): 1070-1080

增材制造中滚筒铺粉工艺参数对尼龙粉体铺展性的影响研究

RESEARCH ON THE EFFECTS OF ROLLER–SPREADING PARAMETERS FOR NYLON POWDER SPREADABILITY IN ADDITIVE MANUFACTURING

力学学报. 2021, 53(9): 2416-2426

基于统一相场理论的早龄期混凝土化-热-力多场耦合裂缝模拟与抗裂性能预测

COMPUTATIONAL MODELING OF SHRINKAGE INDUCED CRACKING IN EARLY-AGE CONCRETE BASED ON THE UNIFIED PHASE-FIELD THEORY

力学学报. 2021, 53(5): 1367-1382

飞机尾涡演变及快速预测的大涡模拟研究

LARGE EDDY SIMULATION ON THE EVOLUTION AND THE FAST-TIME PREDICTION OF AIRCRAFT WAKE VORTICES 力学学报. 2017, 49(6): 1185-1200

梯度纳米晶NiTi形状记忆合金的超弹性和形状记忆效应相场模拟

PHASE FIELD SIMULATION ON THE SUPER-ELASTICITY AND SHAPE MEMORY EFFECT OF GRADIENT NANOCRYSTALLINE NiTi SHAPE MEMORY ALLOY 力学学报. 2021, 53(3): 802-812



2021 年 12 月

金属增材制造中的关键力学问题与前沿计算技术专题

面向增材制造的熔池凝固组织演变的相场研究

肖文甲*,† 许宇翔* 宋立军*,2)

*(湖南大学机械与运载工程学院智能激光制造湖南省重点实验室,长沙 410082) †(佛山科学技术学院机电工程与自动化学院,广东佛山 528225)

摘要激光增材制造 (laser additive manufacturing, LAM) 技术极适合复杂整体构件的近净成形和高附值损伤件的快速修复.然而,激光增材制造熔池内部复杂的动态凝固过程显著影响成形件的终态组织,进而制约其服役性能.本文针对激光直接能量沉积 (direct energy deposition by laser, DED-L) Inconel 718 过程,构建宏观传热传质与多相场耦合的多尺度数学模型,解决了熔池宏-微观温度场的直接耦合,并基于 MPI 并行程序设计实现了熔池二维的全域定量模拟,研究了凝固过程中的晶粒演变过程.结果表明,模拟的熔池尺寸、凝固界面与实验结果吻合较好.熔池凝固界面形态和晶体择优取向是影响晶粒演变的重要因素.在熔池横截面上,凝固过程主要受温度梯度方向的驱使,取向与温度梯度方向夹角越小的晶粒占优生长.在纵截面上,晶粒的生长表现出弯曲生长以及"上三角"的晶粒特征,温度梯度方向的渐变导致了晶粒弯曲,相邻晶粒的竞争行为决定了晶粒形貌.本文阐明了金属激光增材制造晶粒演变的机理,有助于厘清增材制造热物理、化学、冶金过程,为凝固组织的预测和调控提供理论指导.此外,该多尺度数学模型也适用于其他金属材料的激光增材制造过程.

关键词 激光增材制造,镍基高温合金,晶粒演变,熔池凝固,多尺度模拟

中图分类号: TG665 文献标识码: A doi: 10.6052/0459-1879-21-364

PHASE-FIELD STUDY ON THE EVOLUTION OF MICROSTRUCTURE OF THE MOLTEN POOL FOR ADDITIVE MANUFACTURING¹⁾

Xiao Wenjia^{*,†} Xu Yuxiang^{*} Song Lijun^{*,2)}

 * (Hunan Provincial Key Laboratory of Intelligent Laser Manufacturing, School of Mechanical and Vehicle Engineering, Hunan University, Changsha 410082, China)
 [†] (School of Mechatronic Engineering and Automation, Foshan University, Foshan 528225, Guangdong, China)

Abstract Laser Additive Manufacturing (LAM) technology is very suitable for the near net forming of complex integral components and the rapid repair of high value-added damaged parts. However, the complex dynamic solidification process in the molten pool of LAM significantly affects the final microstructure of the formed parts, thereby restricting its service performance. A multi-scale mathematical model that integrates a macro heat and mass transfer and a multi-phase fields was established for the direct energy deposition by laser (DED-L) process of Inconel 718. The direct coupling of the macro-micro temperature field of the molten pool is solved. The two-dimensional global quantitative microstructure simulation of the molten pool is realized based on MPI parallel program design. The grain evolution

²⁰²¹⁻⁰⁷⁻²⁹ 收稿, 2021-08-30 录用, 2021-08-31 网络版发表.

¹⁾ 国家重点研发计划 (2020YFB2007600), 国家自然科学基金 (51875190) 和广东省基础研究与应用基础研究 (2020A1515110635) 资助项目. 2) 宋立军, 教授, 主要研究方向: 激光智能制造、激光制造材料科学相关研究. E-mail: ljsong@hnu.edu.cn

引用格式: 肖文甲, 许宇翔, 宋立军. 面向增材制造的熔池凝固组织演变的相场研究. 力学学报, 2021, 53(12): 3252-3262 Xiao Wenjia, Xu Yuxiang, Song Lijun. Phase-field study on the evolution of microstructure of the molten pool for additive manufacturing. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2021, 53(12): 3252-3262

process in the solidification of the molten pool is studied. The results show that the simulated molten pool size and solidification interface morphology are in good agreement with the experimental results. The morphology of solidification interface and the preferred orientation of crystal are important factors affecting the grain evolution. On the cross-section of the molten pool, the smaller the angle between the preferred orientation and the direction of temperature gradient, the more dominant the grain growth, because the solidification process is mainly driven by the direction of temperature gradient. On the longitudinal-section of the molten pool, the grain growth shows the characteristics of bending growth and "upper triangle". The gradual change of temperature gradient leads to the grain bending, and the competition behavior of adjacent grains determines the grain morphology. In this work, the mechanism of grain evolution in metal LAM is elucidated, which helps to clarify the thermophysical, chemical and metallurgical processes of additive manufacturing, and provides theoretical guidance for the prediction and control of microstructure. In addition, the multi-scale mathematical model can also be applied to the LAM process of other metal materials.

Key words laser additive manufacturing, nickel base superalloys, molten pool solidification, grain evolution, multi-scale simulation

引 言

激光增材制造技术因制造柔性高、周期短、材料局限小等优点,极适合复杂整体构件的制造与高附值零件的快速修复,在航空航天、能源动力等领域具有广阔的应用前景^[1-3].然而,金属粉末在高能激光束的辐照下快速熔化与冷却.熔池内部涉及许多瞬态及冶金过程,特别是糊状区的非平衡快速凝固过程对枝晶组织生长和晶粒演变起着关键作用,最终影响材料的显微组织和服役性能^[4].因此,为了实现激光增材制造构件显微组织和力学性能的调控,必须深入认知熔池的凝固行为和凝固组织演变规律.

目前,学者们开展了许多实验,一方面研究工艺参数(激光功率、扫描速率、扫描策略、光束模式等)对熔池形貌的影响^[5-7],如熔池深宽比、稀释率、熔池模式等;另一方面研究工艺参数对显微组织及力学性能的影响^[8-10],如晶粒尺寸、凝固模式、抗腐蚀等.然而,上述研究重点关注激光增材制造工艺与熔池形貌及力学性能映射关系,极少重视凝固过程.

近年来,随着监测技术的发展,报道了许多研究 熔池凝固过程的方法.如利用红外测温^[11]、高速摄 像^[12]和同步辐射 X-射线成像技术^[13-15] 监测熔池表 面的温度^[11] 及冷却速率、熔体流体流速^[13]、固-液 界面推进速度^[15]等.尽管实验监测手段越来越先进, 但目前仅能阐明宏观熔池的热-动力学机理,微观尺 度上仍难以追踪凝固组织的形成过程和揭示晶粒演 变规律^[16].因此,单一的实验法还难以实现激光增材 制造过程显微组织形成过程的完整描述.与此同时, 实验的经济和时间成本也极高.随着计算机技术的 日益进步,数值模拟技术逐步成为帮助人们理解材 料的凝固行为,有效率地进行工艺参数选取的有利 工具^[17].

目前,针对增材制造过程的数值模拟,国内外学 者开展了大量研究. Zhang 等^[16] 通过多尺度模拟,研 究了凝固速率与枝晶臂间距的关系,发现随着凝固 速率的上升,枝晶臂间距呈现下降趋势. Ghost 等^[18] 通过模拟提取了凝固界面前沿的溶质分布变化情 况,发现随着凝固速率的上升,枝晶尖端的溶质偏 析显著下降. 上述研究主要建立了熔池凝固行为(温 度梯度、凝固速率、冷却速度)与组织特征(枝晶臂 间距、溶质分布、尖端过冷)的关系,从而对成形件 的性能指标进行简单判定. 但大都局限于单一取向 晶粒的模拟^[19-22],而在增材制造过程中,熔池的凝固 受到多晶基板的作用,往往是多晶粒间相互竞争的 结果.

针对上述问题,研究人员对晶粒间的竞争过程 开展了深入的研究^[23-24]. Wang 等^[25]利用温度场得 到的温度梯度G以及凝固速率V_s构建温度随时间、 空间变化的函数,从而研究了熔池局部的两晶粒竞 争,揭示了晶粒竞争过程中的枝晶生长和淘汰现象. Yu和Wei^[26]构建了椭圆温度方程,研究了熔池局部 凝固始末的整个过程,发现与温度梯度方向夹角较 小的晶粒会在竞争中占据优势,并逐步挤压其他晶 粒的生长,形成"择优生长"现象. 然而,无论是利用 凝固参数构建温度演化方程,还是建立椭圆温度方 程,都仅能实现熔池局部特定位置的模拟,而缺乏对熔池全域凝固行为的认识.

目前针对熔池全域模拟的研究鲜有报道. Acharya 等^[27]将计算流体动力学与相场法结合,定性研究了 熔覆过程中横、纵截面的枝晶生长过程. 但在该学 者的研究中仅考虑了枝晶生长方向并预设了熔覆层 尺寸,忽略了工艺参数对熔池形貌以及凝固组织演 化的影响.

通过上述文献的分析,目前对于激光增材制造 过程的数值模拟,主要受限于狭小的模拟区域,局限 于熔池局部区域和单一取向晶粒开展模拟,缺乏对 熔池全域凝固组织演化的深入认识.因此,本文以激 光直接能量沉积 inconel 718 合金为研究对象,采用 实验和多尺度模拟相结合的方法,建立熔池全域的 凝固组织演化模型.为了解决模拟区域的问题,采用 信号传递接口编程 (message passing interface, MPI) 并行方法提高计算速率,最终实现对熔池横、纵截 面多晶粒竞争生长过程的模拟,揭示凝固组织的生 长行为.本文的模拟结果有助于厘清激光增材制造 热物理、化学、冶金过程,为熔池内凝固组织的预 测和调控提供理论指导.

1 多尺度模型及实验

1.1 宏观传热传质模型

本文主要基于能量守恒、质量守恒、动量守恒 定律开发激光增材制造宏观瞬态传热传质模 型^[21,28],为凝固组织的预测提供必要的热力学信息. 构建过程如下所示.

质量守恒方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}) = 0 \tag{1}$$

基于牛顿定律, 在x, y, z 3 个方向上分别建立动量 方程, 对流体运动过程进行求解, 所建立的动量方程 如下.

x轴方向动量方程

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u u) = \nabla \cdot (\mu \nabla u) - e_x \cdot F_{\mathrm{G/L}} \partial \phi - \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{\mu}{K} u \quad (2)$$

y轴方向动量方程

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u} v) = \nabla \cdot (\mu \nabla v) - \boldsymbol{e}_{y} \cdot \boldsymbol{F}_{\mathrm{G/L}} \partial \phi - \frac{\partial p}{\partial y} - \frac{\mu}{K} v \quad (3)$$

z轴方向动量方程

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u} w) = \nabla \cdot (\mu \nabla w) - e_{z} \cdot F_{G/L} \partial \phi - \frac{\partial p}{\partial z} - \frac{\mu}{K} w + \rho g \bar{\alpha} (T - T_{r})$$
(4)

能量守恒方程

报

$$\frac{\partial(\rho C_P T)}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla(\rho C_P T) = \nabla \cdot (k \nabla T) - \frac{\partial(\rho f_s \mathcal{L})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho f_s \Delta \bar{C}_P T)}{\partial t}$$
(5)

式 (1) ~ 式 (5) 中, ρ 为材料密度, ρ_l 为液相密度, μ 为流体黏度, \bar{a} 为热膨胀系数, g 为重力加速度, t 为 时间. u, v, w 分别为x轴、y 轴及z 轴方向的流体流 速. 式 (2) ~ 式 (4) 左侧的第一项为动量变化项, 第二 项则为对流项, 右侧第一项为黏性力扩散项.

水平集方法被用来追踪熔池的气-液界面^[28].激 光束与金属粉末都假定为高斯分布.熔池上表面主 要有因吸收激光束及粉末加热带来的能量输入和熔 体蒸发、热辐射导致的能量耗散^[21].具体可表示为

$$q' = q_{G/L}(r, l) A_a |\cos\theta_l|^{0.2} + q_p - \sigma \epsilon \left(T^4 - T_r^4\right) - \rho_l L_v J_e \quad (6)$$

其中θ₁为激光束与熔池弧面法向的夹角,σ为玻尔 兹曼常数, ϵ为辐射率, T_r为环境温度, L_v为蒸发潜 热, J_e为蒸发通量.模型中主要考虑了激光-粉末-基 材的相互作用和对流、辐射、潜热、蒸发等作用及 粉末输送、熔池内熔体流动等物理过程.

1.2 多相场模型

通过传热传质模型的构建,可以获取无量纲过 冷作为枝晶生长的驱动力,进而实现枝晶生长及溶 质分布的计算.本文的多相场模型是基于 Karma^[29] 和 Echebarria 等^[30] 的连续相场法建立起来的.由金 兹堡-朗道理论可知,二元合金的总自由能可表示为

$$F(\varphi, c, T) = \int_{V} \left[\frac{\sigma}{2} \sum_{i} |\nabla \varphi_{i}|^{2} + f_{sl}(\varphi, c, T) \right] dV \quad (7)$$

式中, *σ*为与能量相关的系数, *f_{sl}(φ,c,T*)为固相与液相的混合自由能密度函数. 通过对上述自由能函数 变分, 可以得到相场模拟的序参量控制方程与溶质 场控制方程如下所示.

$$\begin{bmatrix} 1 - (1 - k)U \end{bmatrix} a_{s}^{2}(\widehat{n}) \frac{\partial \varphi_{i}}{\partial t} = \nabla \cdot \left[a_{s}^{2}(\widehat{n}) \nabla \varphi_{i} \right] - \lambda \left(1 - \varphi_{i}^{2} \right)^{2} (U + \theta) + \varphi_{i} - \varphi_{i}^{3} + \partial_{x} \left[|\nabla \varphi_{i}|^{2} a_{s}(\widehat{n}) \frac{\partial a_{s}(\widehat{n})}{\partial (\partial_{x} \varphi_{i})} \right] + \partial_{y} \left[|\nabla \varphi_{i}|^{2} a_{s}(\widehat{n}) \frac{\partial a_{s}(\widehat{n})}{\partial (\partial_{y} \varphi_{i})} \right]$$
(8)

$$\left(\frac{1+k}{2} - \frac{1-k}{2}\sum_{i=1}^{n}\varphi_{i}\right)\frac{\partial U}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\tilde{D}\left(\frac{1-\sum_{i=1}^{n}\varphi_{i}}{2}\right)\nabla U + J_{at}\right] + \frac{1}{2}\frac{\partial \sum_{i=1}^{n}\varphi_{i}}{\partial t}\left[1 + (1-k)U\right]$$
(9)

式中, k 为溶质配分系数, 序参量 φ_i 为i 晶粒在该位置的体积分数, \tilde{D} 代表无量纲扩散系数, λ 为耦合参数^[21], U为过饱和度, 可表示为

$$U = \left[\frac{2ck/c_{\infty}}{(1+k) - (1-k)\sum_{i=1}^{n}\varphi_{i}} - 1\right] / (1-k)$$
(10)

式中, *c*_∞为无穷远处的 Nb 浓度,即平衡浓度.无量 纲的温度场*θ*可表示为

$$\theta = k(T - T_0) / [|m| c_{\infty} (1 - k)]$$
(11)

 T_0 为参考温度. $a_s(n)$ 为晶体表面能的各向异性,可表示为

$$a_s(\widehat{n}) = 1 + \varepsilon \cos[4(\alpha + \theta_i)] \tag{12}$$

式中, θ_i 是*i* 晶粒择优取向与温度梯度方向的夹角 (取向角)^[31]. *J*_{at} 代表反溶质截流,可表示为

$$\boldsymbol{J}_{at} = \frac{[1 + (1 - k)U]}{2\sqrt{2}} \frac{\partial \sum_{i=1}^{n} \varphi_i}{\partial t} \frac{\nabla \varphi_i}{|\nabla \varphi_i|}$$
(13)

在 Inconel 718 合金凝固中, 后期富含 Nb 元素 的区域会析出脆性 Laves 相, 而 Laves 相会显著降低 构件的综合力学性能. 基于这一事实, 本文把多元的 Inconel 718 合金简化为 Ni-Nb 二元合金处理^[21, 32-34], 关于模型更详尽的阐述请参考文献 [21, 32].

1.3 实验过程

在湖南大学 HCX60 激光复合制造系统上开展 直接能量沉积 Inconel 718 合金实验. 通过正交实验, 优化后的工艺参数如表 1 所示. 打印态的试样经过 线切割加工、镶嵌、磨抛、腐蚀等金相制样规范流 程后备金相显微镜观察. 腐蚀液成分为 1:1:1 的 蒸馏水、双氧水、盐酸的混合液.

Table 1 The processing parameters for DED-L of Inconel 718

Processing parameters	Value
laser power, P/W	600
laser scan speed, $V/(\text{mm}\cdot\text{s}^{-1})$	6
laser beam diameter, d_L /mm	1
powder feed rate, $F/(g \cdot min^{-1})$	9
shielding gas (Ar), $s_g/(L \cdot \min^{-1})$	6
delivering gas (Ar), $n_g/(L \cdot \min^{-1})$	15
defocus distance, n/mm	+19

1.4 数值求解过程

利用 Fortran 语言编写程序在戴尔服务器 (12核24线程, 主频2.1 HGz, 内存64GB, 存储18TB) 上实现多尺度模型的数值计算. 通过传热传质模型 求解熔池形貌、温度及流场分布, 对得到的横截面 (*y-z*平面)和纵截面(*x-z*平面)温度场进行无量纲处 理, 获得无量纲温度θ随时间的变化, 并输入相场模 型. 通过迭代求解序参量控制方程和溶质场控制方 程, 获取各晶粒体积分数*φ*_i和溶质浓度*c*随时间的变 化, 具体求解过程如图1所示.



就宏观传热传质模拟而言,采用有限体积法离 散,在保证精度的前提下,为了节省计算资源,采用 非均匀网格划分,对激光加载和熔覆层区域设置密 网格,其他区域设置疏网格(图1),密网格的空间步 长为 0.05 mm,疏网格的步长为 0.3 mm. 就多相场模 拟而言,采用均匀网格划分,空间步长约为 0.058 μm. Inconel 718 合金的物性参数如表 2 所示.

选取熔覆层的中部为主要研究截面以避免开光 和关光瞬间造成的熔池波动.此时熔池的横、纵截 面形貌均倾向于准稳态.通过将该平面从开始凝固 (*t* = 600 ms)到结束凝固 (*t* = 795 ms)的温度场信息 力

表 2 Inconel 718 合金物性参数^[21]

 Table 2
 Physical property parameters for Inconel 718 alloy^[21]

Variables	Value
liquidus temperature ^[21] , T_l/K	1609
solidus temperature ^[21] , T_m/K	1533
dendsity, $\rho / (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$	8190
partition coefficient ^[33] , k	0.48
alloy composition, c_{∞} /wt%	5.08
Gibbs–Thomson coefficient ^[33] , $\Gamma/(K \cdot m)$	3.65×10^{-7}
anisotropy ^[33] , ε	0.02
liquidus slope ^[33] , $m/(K \cdot wt\%)$	-10.5
thermal conductivity of solid, $k_s / (J \cdot m^{-1} \cdot s^{-1} \cdot K^{-1})$	11.4
thermal conductivity of liquid, $k_l / (J \cdot m^{-1} \cdot s^{-1} \cdot K^{-1})$	28.3
specific heat, $c_p/(J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1})$	435/720
latent heat ^[33] , $L / (J \cdot kg^{-1})$	2.95×10^5
chemical capillary length ^[33] , d_0/m	$6.4 imes 10^{-9}$
liquid diffusion coefficient ^[33] , $D_L / (m^2 \cdot s^{-1})$	$3 imes 10^{-9}$
laser absorption rate ^[21] , A_{α}	0.26

连续输入相场模型,以模拟其凝固组织演化过程.为 了解决宏观温度场与微观相场间由于跨尺度所带来 的空间、时间步长问题,在空间上,利用数据拟合, 将温度场模拟的毫米级空间步长转化为相场模拟所 需的微米级步长;在时间上,每次宏观循环时间内, 温度随时间近似呈线性下降关系.因此,通过线性插 值的外推法,获得相场模拟每次迭代所需的温度,该 过程如图 2 所示.

由于经数值处理后的宏观温度场实时输给多相 场模型, 微观上没有涉及传热的计算. 因此在多相场 模型中没有考虑潜热的释放对凝固影响. 忽略凝固



潜热,会降低尖端过冷,从而减小枝晶尖端生长速率. 然而,控制枝晶生长的溶质扩散长度比热扩散长度 要小约3个数量级,潜热对微观凝固过程影响较小.

1.5 模拟的效率优化

为了解决计算量巨大带来的模拟区域狭小问题,本工作采用 MPI 并行工具对多相场模拟进行优化^[35].如图 3 所示,首先主线程初始化变量,等分割计算域,初始化φ,U,θ并广播给子线程;接着各区域按照序参量控制方程以及浓度场控制方程分别进行迭代计算;在涉及计算块边界时,为了确保边界能够正常进行中心差分,各线程间利用 MPI_SENDRECV()函数通信,更新边界信息及全局计算结果;所有线程完成循环计算一次后方可进入下一次循环,迭代直至收敛完成计算,再根据分割规则重构计算域全部数据并输出结果.图 3 虚线框内为 MPI 并行计算部分.

同时,为了深入分析 MPI 并行工具对于模拟带 来的影响,本文研究了计算效率与并行线程的关系, 并对结果可靠性进行了验证,结果可见图 4. 如图 4(a) 所示,展示了 MPI 并行计算时间与线程数的关系, 可以发现随着 MPI 投入计算线程数量的增加,耗时



Fig. 3 The MPI parallel computing principle



result reliability

耗费时间为 236 min, 相比于 4 线程的情况, 耗时略 微上升, 但仍然优先原串行计算. 这是因为随着线程 的增加, 各局部计算区域之间的通信时间增加造 成的.

另外,分别从串行计算和并行计算的结果中提 取了一次枝晶臂间距 (primary dendrite arm spacing, PDAS),研究了线程数量对 PDAS 结果的影响,结果 如图 4(b)所示.发现模拟得到的 PDAS 在 4.25 ~ 5.0 μm 范围内波动,且根据误差棒发现,波动的幅度 都十分近似.由于,在序参量初始化时设定了一个随 机扰动的固/液界面以模拟凝固前期的热涨落现象, 这种因随机扰动造成的波动影响较小.因此,选取效 率最优的 4 线程开展后续并行计算工作.

此外,对比了 MPI 并行和串行程序情况下的 PDAS 和尖端半径随冷却速度的变化规律,如图 4(c)~ 图 4(d) 所示.不管是并行程序还是串行程序,冷却速 度与 PDAS 以及尖端半径都呈幂指数关系,而且标 度律非常接近.由此论证了 MPI 并行计算的可靠性. 综上所述,以线程数为 4 的 MPI 并行程序开展后续 的熔池全域模拟工作,可以提升计算效率约 2.5 倍.

2 模拟结果与讨论

本节中首先对温度场模拟结果和实验结果进行 分析,验证了宏观模型的准确性.然后开展熔池横、 纵截面的多晶粒竞争生长模拟,研究熔池全域凝固 组织的动态演化过程.

2.1 熔池形貌模拟结果

基于前面激光直接能量沉积实验开展对应的宏 观模拟,发现随着开光时间的推移,熔池中心温度上 升,且热影响区逐渐变大,熔覆层的沉积高度也随之 增加,凝固界面后沿形貌逐渐由扁平的抛物线形向 着半圆形转变,当开光时间到达 600 ms 时,熔池凝 固界面趋于准稳态.因此,选取熔池中部 *x* = 3.6 mm (600 ms × 6 mm/s), *y* = 0 mm (中心面) 的平面在 600 ms 时刻下进行横、纵截面实验与模拟结果的对比.

如图 5(a) 所示, 给出了实验的熔池横截面轮廓 与模拟的对比. 在模拟中, 熔池的固/液界面由固相 等温线 (*T_s* = 1260 °C) 决定; 气液界面由水平集方法 追踪, 即图中黑线. 通过对比可以发现, 模拟的熔池 尺寸与实验测量的吻合较好, 高度约为 700 μm, 宽 度约为 680 μm. 此外,对比了熔池纵截面的凝固界面变化趋势, 如图 5(b) 所示.在激光增材制造实验中,通过开光 500 ms,关光 20 ms,使金相组织中的熔池凝固界面 清晰显示.从图中可以发现模拟中的固相线温度等 温线和实验凝固界面十分吻合.进一步在金相图中 随机提取了 6 组熔池凝固界面曲线,拟合为实验凝



(a) 实验的熔池橫截面形貌与模拟的对比
 (a) Comparison of the cross-section morphology of the molten pool between the experiment and the simulation



(b) 实验的熔池纵截面形貌与模拟的对比(b) Comparison of the longitudinal-section morphology of the molten pool between the experiment and the simulation





图 5 实验的熔池形貌与模拟的对比

Fig. 5 Comparison of the molten pool morphology between the experiment and the simulation

固界面,并与模拟的熔池固/液界面进行了对比,见 图 5(c),发现实验结果与模拟的熔池凝固界面十分 接近.综上所述,可以得出本文的传热传质模型是可 靠的.根据 1.3 节所述的方法将温度场演变输入给多 相场模型,深入地开展镍基高温合金凝固组织演化 研究.

2.2 熔池横截面凝固组织演化

为了减少计算资源,考虑到熔池的对称性,计算 区域限制为熔池横截面区域的一半,并采用零通量 的边界条件.此外,由文献 [36]的模拟结果阐明,在 激光增材制造过程中,高的温度梯度会形成相对狭 小的糊状区,从而阻止了糊状区内新核的形成.另外, 相比于铝合金等其他材料,镍基合金的溶质配分系 数高 (0.48),使得凝固前沿的偏析相对较小,从而减 轻了固/液界面处的成分过冷,促使凝固前沿形核的 概率进一步降低.所以,镍基合金的凝固过程主要由 基板晶粒的外延生长所主导.

图 6 展示了熔池内部横截面凝固组织的动态演 化过程. 在模拟的初始化过程中,以气液界面确定熔 池上表面,以固相线确定熔池下表面,在熔池的底部 凝固界面即 *T*=1260 °C 的等温线上,等间距随机布 置 0°, 20°, 40°, 60°的初始晶粒核点,研究底部晶粒 的外延生长过程.

由图 6(a) 可知, 在凝固初始阶段 (0~16 ms), 由 于凝固速率较低,凝固组织的生长也较缓慢,凝固组 织以顺着凝固界面生长为主,使得各个晶粒间相互 接触,共同以平面晶的稳态形式向着凝固界面的法 向进行生长.在16~32 ms 过程中,即如图 6(b)所 示,随着凝固的持续进行,各个晶粒内部通过凝固前 沿不断向液相排出 Nb 元素, 进而 Nb 元素会聚集在 固/液界面前沿形成富铌层,使得界面处的成分过冷 迅速增大,导致在晶界位置首先出现平面晶的失稳, 并逐步扩散至远离晶界位置,随着凝固的推移,会由 原先微小的凸起转变为明显的枝晶形貌,从而出现 平面晶到枝晶的转变.在 32~90 ms 过程中,如 图 6(c) 所示, 由于各晶粒的结晶学方向差异和表面 能的各向异性,各枝晶列表现为激烈的竞争生长.在 熔池底部,由于等温线较为平缓,温度梯度的方向接 近于竖直方向,因此,可以发现取向角为0°的红色晶 粒和 20°的黄色晶粒在该区域占优生长,并逐步淘汰 相邻的黄色晶粒以及绿色晶粒.而在熔池的顶部,由 于在该位置温度梯度的方向更接近于45°,同时,取

<u>200 μm</u> (a) 16 ms (b) 32 ms



200 µm





Fig. 6 Dynamic evolution process of solidification microstructure in cross-section of molten pool for laser additive manufacturing Inconel 718

向角为 40°的绿色晶粒和取向角为 60°的蓝色晶粒 也更接近于温度梯度的方向.因此,可以发现取向角 为 0°的红色晶粒在熔池顶部区域逐步淘汰.如 图 6(d)所示,在 128 ms 左右时刻,熔池即将完全凝 固,可以明显地发现,熔池底部主要以取向角较小的 红色晶粒和黄色晶粒为主,熔池顶部主要以取向角 度较大的绿色晶粒和蓝色晶粒为主.综上所述,可以 得出,在外延生长过程中,横截面的凝固组织演化主 要受温度梯度方向的影响.当晶粒的结晶学方向接 近于其凝固界面的温度梯度方向时,该晶粒将在竞 争过程中处于优势地位,并逐步淘汰远离温度梯度 方向生长的劣势晶粒.

如图7所示,展示了熔池横截面显微组织的金 相图,图中白色虚线描述了晶粒轮廓.从中可以发现, 在熔池底部晶粒主要呈竖直生长,在熔池顶部晶粒 主要呈现枝晶的倾斜生长. 此外还发现了熔池中心 区域呈现等轴生长,这可能是由于熔池内形核增加, 抑制了晶粒的外延生长,从而产生了柱状晶到等轴 晶的转变 (columnar to equiaxed, CET). 然而, 因难以 直接评估凝固过程的形核过冷和形核密度,在目前 的模拟工作中,开展形核对 CET 的定量研究十分困 难. 对于多层熔覆和块体增材制造而言, 层间存在重 熔现象,使得在后一层的打印过程中,前一层熔池顶 部的等轴晶粒会率先熔化消失.因此,仍能延续前一 层晶粒的外延生长.通过模拟和实验的对比,可以发 现,凝固组织演变受到温度梯度方向的影响,在熔池 底部呈现竖直生长,在顶部呈现倾斜生长.这与模拟 的熔池横截面晶粒演变趋势一致.

2.3 熔池纵截面凝固组织演化

本节讨论了激光增材制造 Inconel 718 熔池纵截 面的凝固组织动态演化过程, 如图 8 所示. 与横截面 的结果类似, 在纵截面的模拟过程中, 同样包括了平



图 7 横截面的金相组织图 Fig. 7 Metallographic diagram of cross-section

面晶的生长、失稳转变为枝晶以及竞争生长的过程.如图 8(a) 所示,在凝固初始阶段,熔池顶部的凝固组织生长明显快于底部,可以发现,熔池顶部已呈现明显的枝晶竞争生长状态,而熔池底部仍保持着平面晶的生长状态.该现象的产生是因熔池固/液界面各处的凝固条件不同造成的.由文献 [21] 可知,在固相线上,熔池顶部的凝固速率大于熔池底部,同理,熔池顶部的等温线推进也会相应地快于熔池底部.

在激光增材制造单道单层单向扫描的沉积过程中, 熔池中下部的凝固组织以 40°的绿色晶粒和 60°的蓝色晶粒为主, 如图 8(b) 所示. 这是因为在单向扫描过程中, 熔池的主要温度梯度方向与扫描方向有大约 60°的夹角^[37]. 此时, 取向角为 40°和 60°的晶粒为优势晶粒, 并随着凝固的进行, 不断地通过侧枝的生成挤压 0°和 20°晶粒的生长; 而在熔池的上部区域, 由于受到温度梯度方向和扫描方向的共同作用, 40°和 60°的晶粒不再在竞争中占有优势. 因此, 各个晶粒都沿着扫描方向推进, 本文的模拟结果很好地支持了 Wei 等^[38] 的观点.

此外, 在图 8(b) 中可以发现取向角为 0°的红色 晶粒 1 出现了较为明显的晶粒弯曲生长现象. 这与 Tan 等^[39] 报道的实验结果类似. 该现象背后的实质 是结晶学的择优取向. Inconel 718 合金具有面心立



图 8 激光增材制造 Inconel 718 纵截面凝固组织动态演化过程 Fig. 8 Dynamic evolution process of solidification microstructure in longitudinal-section of molten pool for laser additive manufacturing Inconel 718

方的晶体结构,因此对于取向角为0°的晶粒而言,竖 直的 0°方向和水平的 90°方向都是其择优生长方向. 因为红色晶粒1的初始凝固位置位于熔池中下部, 此时 0°的结晶学方向与温度梯度方向夹角较小,因 此,红色晶粒倾向于竖直方向生长.随着凝固界面的 推移,红色晶粒1不断生长,晶粒前沿的温度梯度方 向发生改变,在凝固过程的某一时刻,其红色晶粒的 凝固界面位置处的温度梯度方向与 90°的结晶学方 向的夹角更小,导致红色晶粒倾向于水平生长.由于 凝固界面的推进,在温度梯度方向和择优取向的共 同作用下,晶粒生长方向从原先的竖直方向转变至 水平方向,最终导致了渐变弯曲晶粒的形成,而对于 同为0°取向的晶粒2而言,由于其初生位置在熔池 顶部、因此、从凝固开始到晶粒 2 淘汰的整个过程中、 始终为90°的结晶学方向与温度梯度方向夹角更小, 使得晶粒2保持着水平方向生长的状态,同时受到 相邻晶粒间的竞争,晶粒2呈现典型的"上三角"形 貌,综上所述,温度梯度方向的变化导致了渐变弯曲 晶粒的形成,相邻晶粒间的竞争行为决定了晶粒淘 汰的形貌特征.

图 9 给出了熔池纵截面显微组织的金相图,其中白色虚线为熔池的凝固界面.从图中可以发现,在 熔池顶部区域,出现晶粒 (白色实线)倾向于水平方向生长,晶粒形貌与模拟中的晶粒 2 非常相似,呈 "上三角"形态.即在热流方向与晶体择优取向共同 作用下,经长时间的竞争生长后,劣势晶粒被逐渐淘汰.



图 9 纵截面的金相组织图 Fig. 9 Metallographic diagram of longitudinal-section

3 结论

本文以激光增材制造 Inconel 718 为研究对象, 构建了宏观传热传质与多相场耦合的多尺度数学模 型.为了解决模拟区域受限的问题,通过 MPI 并行 计算工具优化模拟效率,使得计算速度提升 2.5 倍. 实验和模拟研究了熔池形貌、横截面凝固组织、纵 截面凝固组织等特征,主要的结论总结如下:

(1)通过对温度场在时间域和空间域的数值处理,解决了宏观热行为与微观温度场演变的时空耦合,构建了金属激光增材制造的多尺度数学模型;

(2) 熔池形貌在开关约 600 ms 后达到准稳态. 模拟的熔池尺寸、凝固界面与实验结果吻合较好. 模拟和实验研究表明, 熔池凝固界面形态是影响晶 粒演变的重要因素;

(3) 对于横截面的凝固组织, 熔池中心主要体现 为晶粒的外延生长, 凝固过程主要受温度梯度方向 的驱使. 当晶粒的结晶学方向接近于其凝固界面的 温度梯度方向时, 该晶粒将在竞争过程中处于优势 地位, 并逐步淘汰远离温度梯度反向生长的劣势晶粒;

(4) 对于纵截面的凝固组织, 晶粒的生长表现出 弯曲生长以及"上三角"的晶粒特征. 其可归因于温 度梯度方向和相邻晶粒间的竞争行为. 温度梯度方 向的变化导致了晶粒渐变弯曲, 相邻晶粒间的竞争 行为通过枝晶列的生成与淘汰决定了晶粒的形貌 特征.

参考文献

- Popovich VA, Borisov EV, Popovich AA, et al. Functionally graded Inconel 718 processed by additive manufacturing: Crystallographic texture, anisotropy of microstructure and mechanical properties. *Materials and Design*, 2017, 114: 441-449
- 2 乐方宾, 叶寒, 刘勇. 金属材料增材制造研究与应用. 江西科学, 2020, 38(2): 157-161 (Le Fangbin, Ye Han, Liu Yong. Research and application of metal additive manufacturing. *Jiangxi Science*, 2020, 38(2): 157-161 (in Chinese))
- 3 王超, 徐斌, 段尊义等. 面向增材制造的应力最小化连通性拓扑优化. 力学学报, 2021, 53(4): 1070-1080 (Wang Chao, Xu Bin, Duan Zunyi, et al. Additive manufacturing-oriented stress minimization topology optimization with connectivity. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2021, 53(4): 1070-1080 (in Chinese))
- 4 Liu F, Lin X, Huang C, et al. The effect of laser scanning path on microstructures and mechanical properties of laser solid formed nickel-base superalloy Inconel 718. *Journal of Alloys and Compounds*, 2011, 509(13): 4505-4509
- 5 Zheng M, Wei L, Chen J, et al. On the role of energy input in the surface morphology and microstructure during selective laser melting of Inconel 718 alloy. *Journal of Materials Research and Technology*, 2021, 11: 392-403
- 6 Liu X, Xiao H, Xiao W, et al. Microstructure and crystallographic texture of laser additive manufactured nickel-based superalloys with different scanning strategies. *Crystals*, 2021, 11(6): 591

- 7 Xiao H, Cheng M, Song L. Direct fabrication of single-crystal-like structure using quasi-continuous-wave laser additive manufacturing. *Journal of Materials Science & Technology*, 2021, 60: 216-221
- 8 Ma M, Wang Z, Zeng X. Effect of energy input on microstructural evolution of direct laser fabricated IN718 alloy. *Materials Characterization*, 2015, 106: 420-427
- 9 Bermingham MJ, StJohn DH, Krynen J, et al. Promoting the columnar to equiaxed transition and grain refinement of titanium alloys during additive manufacturing. *Acta Materialia*, 2019, 168: 261-274
- 10 Luo G, Xiao H, Li S, et al. Quasi-continuous-wave laser surface melting of aluminium alloy: Precipitate morphology, solute segregation and corrosion resistance. *Corrosion Science*, 2019, 152: 109-119
- 11 Khanzadeh M, Chowdhury S, Marufuzzaman M, et al. Porosity prediction: Supervised-learning of thermal history for direct laser deposition. *Journal of Manufacturing Systems*, 2018, 47: 69-82
- 12 Hooper PA. Melt pool temperature and cooling rates in laser powder bed fusion. *Additive Manufacturing*, 2018, 22: 548-559
- 13 Guo Q, Zhao C, Qu M, et al. In-situ full-field mapping of melt flow dynamics in laser metal additive manufacturing. *Additive Manufacturing*, 2020, 31: 100939
- 14 Leung CLA, Marussi S, Atwood RC, et al. In situ X-ray imaging of defect and molten pool dynamics in laser additive manufacturing. *Nature Communications*, 2018, 9(1): 1355
- 15 Zhao C, Fezzaa K, Cunningham RW, et al. Real-time monitoring of laser powder bed fusion process using high-speed X-ray imaging and diffraction. *Scientific Reports*, 2017, 7(1): 3602
- 16 Zhang J, Wu L, Zhang Y, et al. Phase field simulation of dendritic microstructure in additively manufactured titanium alloy. *Metal Powder Report*, 2019, 74(1): 20-24
- 17 Liu D, Wang Y. Mesoscale multi-physics simulation of rapid solidification of Ti-6Al-4V alloy. *Additive Manufacturing*, 2019, 25: 551-562
- 18 Ghosh S, Ma L, Ofori-Opoku N, et al. On the primary spacing and microsegregation of cellular dendrites in laser deposited Ni–Nb alloys. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2017, 25(6): 065002
- 19 Sahoo S, Chou K. Phase-field simulation of microstructure evolution of Ti-6Al-4V in electron beam additive manufacturing process. *Additive Manufacturing*, 2016, 9: 14-24
- 20 Zhang Z, Tan ZJ, Yao XX, et al. Numerical methods for microstructural evolutions in laser additive manufacturing. *Computers & Mathematics with Applications*, 2019, 78(7): 2296-2307
- 21 Xiao W, Li S, Wang C, et al. Multi-scale simulation of dendrite growth for direct energy deposition of nickel-based superalloys. *Materials and Design*, 2019, 164: 107553
- 22 Karayagiz K, Johnson L, Seede R, et al. Finite interface dissipation phase field modeling of Ni–Nb under additive manufacturing conditions. *Acta Materialia*, 2020, 185: 320-339
- 23 Wang Y, Shi J. Influence of laser scan speed on micro-segregation in selective laser melting of an iron-carbon alloy: A multi-scale simulation study. *Procedia Manufacturing*, 2018, 26: 941-951
- 24 Wang Y, Shi J, Liu Y. Competitive grain growth and dendrite morphology evolution in selective laser melting of Inconel 718 superalloy. *Journal of Crystal Growth*, 2019, 521: 15-29
- 25 Wang L, Wang N, Provatas N. Liquid channel segregation and morphology and their relation with hot cracking susceptibility during

报

力

columnar growth in binary alloys. *Acta Materialia*, 2017, 126: 302-312

- 26 Yu F, Wei Y. Phase-field investigation of dendrite growth in the molten pool with the deflection of solid/liquid interface. *Computational Materials Science*, 2019, 169: 109128
- 27 Acharya R, Sharon JA, Staroselsky A. Prediction of microstructure in laser powder bed fusion process. *Acta Materialia*, 2017, 124: 360-371
- 28 Li S, Xiao H, Liu K, et al. Melt-pool motion, temperature variation and dendritic morphology of Inconel 718 during pulsed- and continuous-wave laser additive manufacturing: A comparative study. *Materials and Design*, 2017, 119: 351-360
- 29 Karma A. Phase-field formulation for quantitative modeling of alloy solidification. *Phys. Rev. Lett.*, 2001, 87(11): 115701
- 30 Echebarria B, Folch R, Karma A, et al. Quantitative phase-field model of alloy solidification. *Physical Review E*, 2004, 70: 061604
- 31 Xing H, Zhang LM, Song KK, et al. Effect of interface anisotropy on growth direction of tilted dendritic arrays in directional solidification of alloys: Insights from phase-field simulations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2017, 104: 607-614
- 32 Xiao W, Xu Y, Xiao H, et al. Investigation of the Nb element segregation for laser additive manufacturing of nickel-based superalloys. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2021, 180: 121800
- 33 Nie P, Ojo OA, Li ZG, et al. Numerical modeling of microstructure

evolution during laser additive manufacturing of a nickel-based superalloy. *Acta Materialia*, 2014, 77: 85-95

- 34 Keller T, Lindwall G, Ghosh S, et al. Application of finite element, phase-field, and CALPHAD-based methods to additive manufacturing of Ni-based superalloys. *Acta Materialia*, 2017, 139: 244-253
- 35 朱昶胜, 金显, 邓新等. 基于 MPI 并行的 PF-LBM 三维枝晶生长 模型模拟计算. 兰州理工大学学报, 2018, 44(2): 27-33 (Zhu Changsheng, Jin Xian, Deng Xin, et al. Simulation computation of MPI-based parallel PF-LBM 3-D dendritic growth model. *Journal of Lanzhaou University of Technology*, 2018, 44(2): 27-33 (in Chinese))
- 36 Zinovieva O, Zinoviev A, Ploshikhin V. Three-dimensional modeling of the microstructure evolution during metal additive manufacturing. *Computational Materials Science*, 2018, 141: 207-220
- 37 DebRoy T, Wei HL, Zuback JS, et al. Additive manufacturing of metallic components—Process, structure and properties. *Progress in Materials Science*, 2018, 92: 112-224
- 38 Wei HL, Elmer JW, DebRoy T. Origin of grain orientation during solidification of an aluminum alloy. *Acta Materialia*, 2016, 115: 123-131
- 39 Tan XP, Chandra S, Kok Y, et al. Revealing competitive columnar grain growth behavior and periodic microstructural banding in additively manufactured Ti-6Al-4 V parts by selective electron beam melting. *Materialia*, 2019, 7: 100365