DOI: 10.3901/JME.2018.02.062

焊接熔池凝固过程联生结晶晶体学取向 对线性不稳定动力学的影响*

郑文健¹ 贺艳明¹ 杨建国^{1,2} 董志波²

(1. 浙江工业大学化工机械设计研究所 杭州 310014;

2. 哈尔滨工业大学先进焊接与连接国家重点实验室 哈尔滨 150001)

摘要: 为了研究焊接熔池凝固过程中联生结晶的晶体学取向对线性不稳定动力学的影响规律,采用定量相场模型,耦合熔合线附近枝晶生长的瞬态条件,对不同晶体学取向的联生结晶生长过程进行数值模拟,同时采用考虑界面能各向异性的线性不稳定动力学解析模型对该系列联生结晶过程的界面演化进行预测。线性生长失稳波长的相场模拟结果和解析计算结果与试验结果吻合良好。不同晶体学取向的联生结晶的生长结果表明,晶体学取向偏角越大,界面越稳定,界面失稳临界时间越长。由于焊接熔池瞬态凝固条件的瞬变性,以及线性生长阶段界面波长选择放大机制的随机性,使晶体学取向偏角越大界面失稳波长越大的规律无法显现。因此焊接熔池中熔合线附近联生结晶的界面失稳胞晶间距与初始晶体学取向相关性不明显。

关键词: 焊接熔池凝固; 联生结晶; 晶体学取向; 线性不稳定; 相场

中图分类号: TG156

Influence of the Crystal Orientation of Epitaxial Solidification on the Linear Instability Dynamic during the Solidification of Welding Pool

ZHENG Wenjian¹ HE Yanming¹ YANG Jianguo^{1,2} DONG Zhibo²

(1. Institute of Process Equipment and Control Engineering,

Zhejiang University of Technology, Hangzhou 310014;

2. State Key Laboratory of Advanced Welding and Joining, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001)

Abstract: To study the influence of the crystal orientation of epitaxial solidification on the linear instability dynamic, coupled equations are conducted to present the transient conditions of crystal growth near the fusion line of the welding pool. A quantitative phase field model is used to simulate the epitaxial solidification with different crystal orientations. Moreover, a linear instability dynamic analytical model is presented to describe the variation of the onset of the initial planar instability with surface tension anisotropy. The initial average wavelengths obtained by the phase field model and the analytical model are in good agreement with that in experiment result. The epitaxial solidification results show that the greater the angle between the crystal orientation and the temperature gradient, the better the stability of the interface, and the larger the critical time of onset of initial planar instability. Due to the transient of the growth conditions in welding pool and the randomness of the amplification mechanism, it could not show up the law that the greater the crystal orientation angle, the larger the initial average wavelength. Thus, the initial average wavelength of planar instability is seemingly independent of the crystal orientation of epitaxial solidification.

Key words: solidification of welding pool; epitaxial solidification; crystal orientation; linear instability; phase field

0 前言

焊接熔池凝固行为及其形成的微观组织直接决定焊接接头的力学性能,因而预测或者再现熔池内组织演变过程具有重要意义。然而焊接熔池具有高

温、瞬时及高度非线性等特征,导致传统试验方法无法实现实时观测熔池凝固组织演变过程,所以只能通过数值模拟的手段再现熔池内的枝晶生长。组织模拟常用的计算方法有蒙特卡洛法、元胞自动机法和相场法等,目前为止已成功运用到熔池凝固过程的不同尺度的组织模拟中^[1-8]。近几年来,已经实现了全尺寸焊接熔池的组织模拟。WEI等^[6-7]采用蒙特卡洛方法对全尺寸铝合金焊接熔池以及热影响区

* 国家重点研发计划(2016YFC0801905)和国家自然科学基金(51475426, 51705461)资助项目。20170825 收到初稿, 20171204 收到修改稿

的枝晶生长进行了 2D 以及 3D 的研究, 获得了焊接速度对枝晶间距以及等轴晶的影响规律。HAN 等^[8]采用元胞自动机方法研究了全尺寸熔池凝固过程中的枝晶演变与焊接工艺参数的关系。相场法针对相变界面具有基于物理意义的科学定义, 能够实现微观尺度组织的精细化演变, 使其成为微观组织演变理论研究领域最具潜力的数值模拟方法, 相场法在焊接熔池凝固组织模拟方面取得了丰富的研究成果^[4, 9-11]。最早一篇关于相场法模拟焊接熔池枝晶生长的文献由 FARZADI 等^[9]发表, 其研究中将焊接熔池不同位置的枝晶生长简化成定向凝固。FALLAH 等^[10]建立了相场/热场耦合模型, 模拟了 Ti-Nb 合金激光粉末融敷过程熔池中微区的定向凝固过程。ZHENG 等^[4]采用定量相场模型研究了铝合金焊接熔池中瞬态条件下一次枝晶生长过程中的动力学问题。WANG 等^[11]采用多重相场模型研究了奥氏体不锈钢激光焊接过程中枝晶见残余液相分布现象。

熔池凝固初期, 熔合线位置的枝晶生长分为三个阶段, 即线性生长阶段、竞争生长阶段和胞晶/树枝晶生长阶段。线性生长阶段是整个熔池凝固的初始阶段, 对于整个熔池的组织演变具有非常重要的地位。线性生长阶段形成的组织形貌是非线性生长过程的基础, 线性生长结果直接影响到熔池凝固组织形态。此外, 熔池凝固过程的线性生长阶段占据了整个凝固过程相当长的一段时间^[12], 所以, 线性生长阶段对于整个熔池的组织演变来讲, 在时间和空间上都不可忽略, 线性生长阶段的研究具有非常重要的意义。线性生长阶段的理论基础为线性不稳定动力学理论, MULLINS 等^[13]最早系统描述平面晶生长形态变化的是界面稳定性理论(M-S 理论), 该理论的分析是建立在固液界面前沿稳态溶质分布及扩散的基础上。黄卫东等^[14]对类金属合金的凝固过程进行细致研究, 结果表明判断界面失稳条件需考虑界面形态演变的历史相关性。在 M-S 理论的基础上, WARREN 等^[15]引入瞬态参量建立瞬态条件下界面稳定性动力学解析模型(W-L 模型)。LOSERT 等^[16]研究了类金属合金的定向凝固过程, 采用荧光处理的方法测量了界面前沿溶质分布、界面层厚度以及界面推进速等参量, 试验测量结果与 W-L 理论高度吻合。林鑫等^[17]进行了纯扩散和对流两种情况下界面稳定性的理论分析和试验研究, 获得了对流对界面稳定性的影响规律。WANG 等^[18]将傅里叶级数合成方法引入到 W-L 模型, 建立了一个便捷模型, 可用于预测非线性生长阶段的界面形态。CHEN 等^[19]对铝合金的定向凝固过程进行了数值模拟和试验研究, 并通过 X 射线摄影技术实时检

测了凝固界面的瞬态参量, 试验结果证实了 W-L 模型的准确性。ZHENG 等^[12, 20]改进了 W-L 和 WANG 的解析模型, 改进模型能够预测非稳态条件下界面稳定性, 同时采用相场法模拟了非稳态条件下的线性生长过程, 模拟结果验证了改进模型的准确性。此外, 还对铝合金焊接熔池凝固过程中联生结晶的线性不稳定动力学进行研究, 界面失稳波长的解析结果、数值模拟结果以及试验结果吻合良好。WANG 等^[21]对流场参与条件下的联生结晶过程进行模拟, 发现流场对平面晶生长作用明显。

需要强调的是虽然凝固条件, 无论是稳态凝固还是非稳态凝固, 对界面的稳定性具有重要的影响, 但是其他因素如界面能及其各向异性、晶体学取向等也会影响线性生长结果。关于定向凝固中界面稳定性动力学研究已经取得了重要成果, 然而这些研究几乎都是基于界面推进方向沿着温度梯度方向的理想条件下, 即晶体学取向垂直于界面, 没有考虑不同晶体学取向的界面线性生长过程。WANG 等^[22]研究了界面能各向异性对定向凝固过程界面稳定性动力学的影响, 结果表明, 界面能各向异性对界面失稳时间和失稳波长具有显著影响。FORNARO 等^[23]对 Zn-Cd 合金凝固的界面生长过程研究证实了晶体学取向会影响到界面生长的稳定性。王理林等^[24]通过试验研究了不同晶体学取向的晶粒在定向凝固条件下的线性生长过程, 也证实界面失稳的非稳态演变与晶体学取向有关。焊接熔池凝固过程中一个重要特征就是联生结晶, 联生结晶的生长方向取决于焊缝基体晶粒的晶体学取向, 因而联生结晶的生长方向随机性很强, 目前未发现关于该方面的报道。到目前为止, 关于晶体学取向对定向凝固条件下的线性不稳定动力学研究较少, 缺乏系统研究, 而且尚未有非稳态条件下, 尤其是高度非线性瞬态条件下的研究成果。

基于此, 本文采用线性不稳定动力学模型、相场法展开焊接熔池凝固过程中联生结晶晶体学取向对界面稳定性的影响研究, 辅助试验研究予以验证。预测不同晶体学取向的联生结晶生长过程, 探究线性生长阶段界面失稳时间以及失稳波长的变化规律。

1 焊接熔池瞬态凝固线性生长模型

1.1 熔池凝固瞬态条件

选定 Al-Cu 合金为焊接母材, 焊接方法为钨极氩弧焊, 工艺参数为: $I=230\text{ A}$, $U=15\text{ V}$, 焊接速度 2.5 mm/s , 其宏微观材料参数详见文献[12]。焊接熔池凝固过程中枝晶生长的两个关键控制参量^[25]为

推进速度 V_p 和温度梯度 G 。将熔池的熔合线边界近似成一条曲线,如图1所示,为了量化控制参量,将推进速度 V_p 分解为两个速度分量,枝晶各沿着 x 轴负方向即焊接速度方向和 z 轴正方向生长。 x 轴速度分量的逐渐变大, z 轴速度分量与之相反。时间 t 时刻,枝晶尖端位置为 $[x(t), z(t)]$,枝晶生长速度沿着焊接速度方向的速度分量为 V_{px} ,在距初始生长时刻的时间为 t 时

$$V_{px} = V_p \cos[a(t)] = V \cos^2[a(t)] \quad (1)$$

V_{px} 产生的累积生长距离即 Δx 可通过积分获得

$$\Delta x = \int_0^t V \cos^2[\theta(t')] dt' \quad (2)$$

熔池移动的距离为焊接速度与时间的乘积,所以枝晶生长尖端的坐标值可计算得

$$x(t) = Vt - \int_0^t V \cos^2[\theta(t')] dt' \quad (3)$$

$$y(t) = -\sqrt{a_t^2 \left[1 - \frac{x^2(t)}{b_t^2} \right]} \quad (4)$$

熔合线边界上位于 $[x(t), z(t)]$ 点的切线斜率和法线斜率均可通过联立曲线方程求得,得到

$$\cos[\theta(t)] = \frac{a_t^2 x(t)}{\sqrt{a_t^4 x^2(t) + b_t^4 y^2(t)}} \quad (5)$$

通过求解上述耦合方程,考虑了枝晶生长过程的偏转,从而得到焊接熔池中枝晶生长的瞬态条件为

$$V_p(t) = V \cos[\theta(t')] \quad (6)$$

$$G(t) = \frac{T_p - T_l}{\sqrt{x^2(t) + y^2(t)}} \quad (7)$$

通过求解耦合方程式(1)~(7),便可得出熔池凝固在任意位置、任意时间的枝晶生长瞬态条件。该耦合方程组需要通过计算机离散化的方法求得每一时刻的瞬态条件。

图1 熔池枝晶尖端生长速度

1.2 定量相场模型

定量 PF 模型是由 KARMA^[26]和 ECHEBARRIA 等^[27]提出的,相场模型引入一个标量,即相场参量 ϕ ,在凝固过程中, $\phi=1$ 和 $\phi=-1$ 分别代表着固相或者液相,在固液界面上,相场参量形成一个连续的函数。模型将扩散界面厚度定义为几个数量级倍的

实际界面厚度,并引入反溶质截留项以平衡由于界面厚度放大而产生的溶质截留效应,从而大大提高了相场计算尺度。对于二元稀溶液近似合金,液相线斜率为 m ,溶质分配系数为 k 。铝合金的热扩散系数远远大于其溶质扩散系数,因而凝固过程的相变潜热对溶质场和相场的影响可以忽略,因此焊接熔池温度场可以采用冻结温度近似^[28],表达式如式(25)所示,模拟过程中忽略流场的影响。

$$T(z, t) = T_0 + G(t) \left[z - z_0 - \int_0^t V_p(t') dt' \right] \quad (8)$$

溶质场的溶质浓度通过一个过饱和场 U 来表达

$$U = (1-k)c_0^l \exp(u) = \frac{1}{1-k} \left[\frac{2kc/c_\infty}{1-\phi+k(1+\phi)} - 1 \right] \quad (9)$$

$$\exp(u) = \ln \left\{ 2c/c_0^l [1+k-(1-k)\phi] \right\} \quad (10)$$

液相中平均溶质浓度为 c_∞ ,以界面液相一侧的溶质浓度 $c_l^0 = c_\infty/k$ 。相场和溶质场表达式分别定义为

$$\tau_0 a(\hat{n})^2 \left[1 - (1-k) \frac{z - \int_0^t V_p(t') dt'}{l_T} \right] \frac{\partial \phi}{\partial t} = W^2 \nabla^2 [a(\hat{n})^2 \nabla \phi] + \phi - \phi^3 - \lambda g'(\phi) \left[U + \frac{z - \int_0^t V_p(t') dt'}{l_T} \right] \quad (11)$$

$$\left(\frac{1+k}{2} - \frac{1-k}{2} \phi \right) \frac{\partial U}{\partial t} =$$

$$\nabla \left\{ Dq(\phi) \nabla U + a(\phi) W [1 + (1-k)U] \frac{\partial \phi}{\partial t} \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right\} + \frac{1}{2} [1 + (1-k)U] \frac{\partial \phi}{\partial t} - \nabla J_U \quad (12)$$

式中, $a(\hat{n}) = 1 - 3\varepsilon + 4\varepsilon [(\partial_x \phi)^4 + (\partial_z \phi)^4]$ 为各向异性, $q(\phi) = (1-\phi)/2$ 代表着溶质扩散在界面的渐变情况,其中 $a(\phi) = 1/(2\sqrt{2})$ 。为使相场模型能够真实反映出凝固过程的物理现象,需要通过渐进分析方法建立相场模型与传统尖锐界面模型的联系^[27],渐近分析推导的最终结果如式(13)、(14)所示

$$d_0 = a_1 W / \lambda \quad (13)$$

$$\tau_0 = a_2 \lambda W / D \quad (14)$$

式中, W 和 τ_0 分别为相场参量界面厚度和时间步长; d_0 和 D 为合金的毛细长度和液相中溶质扩散系数; a_1 和 a_2 是为了使相场模型和传统模型一致而产生的常数,其值分别是 $a_1=0.8839$, $a_2=0.6267$ 。通过式(13)、(14)即可建立材料的物理参量与相场参量的定量关系。耦合系数 λ 作为相场模型的数值收敛参数,代表相场界面的放大程度。研究表明 λ 在一定的取

值范围(1~120)内均可保证相场模型计算结果的精确性^[27], 为了提高计算效率, 耦合系数定义为一个较大值, 即 $\lambda=63.648$ 。从式(13)和(14)可知, 耦合系数一旦确定, 相场参量 W 和 τ_0 的值便确定, 界面宽度计算可得 $W=0.27 \mu\text{m}$ 。熔融金属中存在系列非线性扰动, 例如成分起伏、结构起伏以及热噪声等, 会对固液界面引起持续性的随机波动。为了体现该物理现象, 在溶质场控制方程中加入一个波动变量 J_U , 如式(15)所示。波动变量引起溶质浓度变化与控制方程求解结果相差几个数量级, 因而在整个数值计算过程中波动变量的影响可以忽略。该波动变量服从高斯分布, 方差为

$$\langle J_U^m(\mathbf{r}, t) J_U^n(\mathbf{r}', t') \rangle = 2Dq(\phi) F_U \delta_{mn} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \quad (15)$$

溶质扩散控制参量 $Dq(\phi)$, 产生了扩散系数在固相中为零而在液相中扩散系数为 D 的效果。通过该项将波动变量与 PF 参量紧密相关, 此外扰动的强度 $F_U = F_U^0 [1 + (1-k)U]$ 通过式(16)进行定义

$$\langle (\delta U)^2 \rangle = \frac{\langle (\delta c)^2 \rangle}{(\Delta c_0)^2} \equiv \frac{F_U}{\Delta V} \quad (16)$$

噪声振幅为

$$F_U^0 = \frac{kv_0}{(1-k)^2 N_A c_0} \quad (17)$$

在平面晶界面上, 界面温度为 $T_0(U=0)$ 时, 其值为 F_U 。其中 $\Delta c_0 = c_\infty(1/k-1)$ 是界面两侧溶质浓度跃变, N_A 是阿伏伽德罗常数, v_0 是液相摩尔体积。相场计算过程中, 波动变量直接造成到固液界面出现各种频率的微小起伏, 为噪声放大机制提供选择放大对象。随着凝固时间的增加, 特定频率的波长被选择放大, 其振幅迅速生长, 固液界面出现失稳现象, 即产生胞晶。最优选择放大频率的波长是胞晶的平均间距, 而其振幅是胞晶尖端距平衡位置的距离。

相场模拟计算区域大小为 $260 \mu\text{m} \times 260 \mu\text{m}$, 凝固初始时刻固液界面近似成平面晶, 温度梯度方向和推进速度方向设定为垂直于固液界面, 联生结晶最优取向与温度梯度方向设置成不同的夹角。

1.3 瞬态条件下线性不稳定动力学模型

定向凝固的线性不稳定动力学模型可精确预测线性生长阶段固液界面的非稳态演化过程, 将焊接熔池瞬态凝固条件代入模型后可实现联生结晶的界面稳定性动力学特征。解析模型中界面前沿溶质层厚度 l 、界面推进速度 V_{ip} 、界面液相一侧溶质浓度 c_0 以及截面位置 z_0 的耦合方程组为

$$\frac{\partial l}{\partial t} = \frac{4D[mc_\infty / G(t) + kz_0]}{l(1-k)z_0} + \frac{lG(t)}{G(t)z_0 + mc_\infty} \frac{\partial z_0}{\partial t} \quad (18)$$

$$v_{ip}(t) = V_p(t) + \frac{\partial z_0}{\partial t} = \frac{2D[z_0 + mc_\infty / G(t)]}{l(1-k)z_0} \quad (19)$$

$$c_0(z_0, t) = \frac{-2Dc_\infty}{2D + v_{ip}(t)(1-k)l} \quad (20)$$

体心立方晶体结构的各向异性为 $a(\hat{n}) = 1 + \varepsilon \cos 4(\theta + \theta_0)$, 其中 θ 为界面法向与温度梯度方向的夹角, θ_0 为理想晶体学取向的偏角。将各向异性引入线性不稳定分析, 并考虑时间相关性, 获得了界面不稳定的扰动频率 ω 与其增长率 $\sigma_\omega(t)$ 的关系^[17]

$$q_\omega \left\{ 1 + \frac{2}{l} \left[z_0 + \frac{mc_\infty}{G(t)} \right] + \frac{\gamma T_0 [1 - 15\varepsilon \cos(4\theta_0)] \omega^2}{G(t)} \right\} = \frac{1}{D} \frac{\partial z_0}{\partial t} + \frac{2}{l} \left[z_0 + \frac{mc_\infty}{G(t)} \right] \times \left[\frac{v_{ip}(t)}{D} + \frac{\sigma_\omega(t)}{v_{ip}(t)} + \frac{1}{z_0} + \frac{\gamma T_0 [1 - 15\varepsilon \cos(4\theta_0)] \omega^2}{G(t)} \right] \quad (21)$$

$$q_\omega = v_{ip}(t) / (2D) + \left\{ \omega^2 + [v_{ip}(t) / (2D)]^2 \right\}^{1/2} \quad (22)$$

对于某一频率的扰动, 在界面推进过程中其振幅为

$$A_\omega(t) = A_0(t) \exp \left[\int_{t_i}^t \sigma_\omega(t) dt \right] \quad (23)$$

式中, t_i 是线性增长系数从负值转变为正值的临界时刻。 $A_\omega(0)$ 代表扰动初始时刻的振幅, 其与频率的关系如式(24)所示

$$\langle |A_\omega(0)|^2 \rangle = \frac{k_B T_m}{\gamma [1 - 15\varepsilon \cos(4\theta_0)] \omega^2} \quad (24)$$

利用傅里叶级数合成, 界面形态随时间的变化关系可以表示为^[18]

$$z_i(x, t) - z_0(t) = \sum A_\omega(t) \cos[\omega t + \phi_\omega(t)] \quad (25)$$

式中, $z_i(t)$ 表示界面维持平面状态推进的平衡位置, 当 $t < t_i$ 时, $\phi_\omega(t)$ 是一个随机变量, 其分布区间为 $[0, 2\pi]$, 当 $t > t_i$ 时, $\phi_\omega(t) = \phi_\omega(t_i^-)$ 。

2 计算结果及分析

为验证相场模型与解析模型的准确性, 对同一焊接过程熔池熔合线附近枝晶生长, 分别进行相场模拟和解析计算, 两者输入的凝固条件完全一致, 具体瞬态凝固条件如图 2 所示。

图2 焊接熔池凝固瞬态条件

晶体学取向 $\theta_0=0^\circ$, 即最优生长方向平行于温度梯度方向。提取线性生长结束时的界面形态进行对比, 并辅助试验结果予以验证, 如图3所示。相场模型在给定焊接条件下, 凝固时间 $t=0.78$ s 时, 界面平均失稳波长即平均胞晶间距为 $8.13 \mu\text{m}$; 解析计算模型在 $t=0.67$ s 时, 界面平均失稳波长为 $9.81 \mu\text{m}$; 试验结果获得的平均失稳波长为 $10.9 \mu\text{m} \pm 0.5 \mu\text{m}$ 。由于计算模型忽略了试验中的一些影响因素, 所以计算模型和试验结果可以存在一定的误差, 但是整体上讲三者结果数值相近, 表明相场模型和解析模型具有一定的准确度。

(a) 相场

(b) 解析模型

(c) 试验

图3 焊接熔池线性生长结果

按照同样的熔池凝固条件, 联生结晶分别采用 $\theta_0=0^\circ$ 、 10° 、 20° 、 30° 和 40° 五种不同的初始晶体学

取向, 分别采用相场法和解析算法研究线性不稳定动力学规律。当界面起伏的振幅尺寸生长到与界面波长尺寸相当时, 界面发生失稳, 该时间点为临界失稳时刻, 此时的波长为临界波长, 也就是胞晶间距。定义临界失稳时刻为线性生长和非线性生长的转变点。图4为不同晶体学取向的联生结晶在凝固时间 $t=0.68$ s 时界面的振幅频谱图。从频域的选择放大效果可以看出: ① 同一凝固时刻, 界面一定范围频率波长的放大程度随着晶体学取向偏角的增大而减小; ② 选择放大频率的范围也随着晶体学取向偏角的增大而减小。以上两点说明联生结晶的晶体学取向偏角越大, 界面越稳定。另外, 从频谱图还能看出最优选择放大效果的频率随着晶体学取向偏角的增大而减小, 即联生结晶的晶体学取向偏角越大, 界面的失稳时间越长, 失稳波长呈现增大趋势, 但是该趋势受焊接熔池凝固的瞬态条件影响, 变化幅度不大。

图4 不同晶体学取向的振幅频谱图($t=0.68$ s)

图5为不同晶体学取向的联生结晶在凝固时间 $t=0.78$ s 时界面形态的相场计算结果。首先可以直观地看出, 随着晶体学取向偏角的增大, 界面越稳定, 枝晶生长越受限, 线性生长时间越长。其次, 枝晶的偏转生长只有在非线性生长明显时才能体现。如 $\theta_0=10^\circ$ 和 $\theta_0=20^\circ$ 的形貌, 由于失稳时间早, 已经经历了一段时间的非线性生长, 枝晶的偏转生长较明显。 $\theta_0=30^\circ$ 和 $\theta_0=40^\circ$ 时, 该时刻正处于失稳临界时间边缘, 枝晶形貌仍未出现明显的偏转现象。

严格来讲, 线性生长阶段只要界面发生起伏, 即界面不是严格意义上的平面, 非线性生长便出现, 只是非线性作用不明显。在界面持续推进过程中, 线性作用与非线性作用呈现此消彼长的状态, 有效选择波长逐渐放大, 非线性作用逐渐占据主导作用, 这也是相场计算结果的界面并不呈现正弦函数叠加的效果, 如图3a和图3b的对比。因此, 线性生长作用对枝晶的偏转生长并无贡献, 非线性作用才会

导致枝晶偏转生长^[17], 这也是图 5 中截面失稳临界时间之前, 非零晶体学取向偏角的胞晶没有倾斜生长现象的原因。

图 5 不同晶体学取向界面形态的相场计算结果($t=0.78$ s)

将线性生长阶段临界失稳时间和临界波长的相场模拟结果和解析计算结果汇总进行比较, 如图 6 所示。临界失稳时间随着晶体学取向角度的增大而增大, 相场模拟结果和解析计算结果获得的规律一致。现有理论表明, 临界波长随着晶体学取向角度的增大呈增大趋势^[22, 24], 解析模型最优放大波长的计算结果与此一致, 然而相场计算结果中, 胞晶平均间距与晶体学取向角度无明显关系。这是因为:

① 焊接熔池凝固过程中枝晶生长瞬态条件变化迅速, 线性生长阶段总体时间较短, 不同晶体学取向角度产生的影响无法体现, 解析计算结果证明不同晶体学取向角度界面的临界参量绝对差值很小; ② 线性生长阶段界面所受扰动具有随机性, 从振幅频谱图可知, 最优放大的扰动频率呈较宽范围分布, 并不是一个唯一值, 因而界面波长也分布在一定范围内, 如当前焊接条件下 $\theta_0=0^\circ$ 的界面选择放大程度能够达到最优值 95% 以上的波长范围为 $9.82 \sim 11.63 \mu\text{m}$ (解析解, 如图 4 所示), 该波动范围远大于晶体学取向角度对波长产生的波动范围 $10.45 \sim 10.52 \mu\text{m}$ (解析解, 如图 6 所示)。

观察焊缝微观组织形貌, 如图 7 所示, 在熔合线附近, 对较大尺度范围内(几毫米甚至是几厘米)的界面失稳平均胞晶间距进行测量统计发现, 任意位置的平均胞晶间距均分布在 $10.9 \mu\text{m} \pm 0.5 \mu\text{m}$ 的范围内, 任意数量级范围内(几十微米到几十毫米级别)

的平均胞晶间距也落在此范围内, 这说明整条焊缝上, 熔合线联生结晶的失稳胞晶间距十分稳定。实际上焊缝母材基体是由多晶组成, 各个晶粒的晶体学取向随机分布, 此外母材焊接前的最终状态为轧制态, 晶粒形状呈链状, 进一步增加了晶体学取向的复杂多变性。按照焊缝微观组织的以上两种特征可知, 焊缝母材基体的晶体学取向对联生结晶线性生长阶段形成的胞晶间距无明显影响。不同焊接方法^[29]对线性生长结果的影响以及外加复合场^[30]的调控机理有待于进一步研究。

图 6 不同晶体学取向界面形态的临界波长和临界失稳时间

图 7 焊接接头微观组织形貌

3 结论

(1) 推导了熔池凝固瞬态边界条件耦合方程组, 与定量相场方程耦合, 实现熔合线附近微观组织的精细化演变过程; 对非稳态条件下线性生长过程进行渐进分析, 考虑晶体界面能的各向异性, 建立线性不稳定动力学解析模型。

(2) 采用相场模型和解析模型对相同焊接工艺条件下焊接熔池凝固过程熔合线附近的枝晶生长过程进行模拟和计算, 两者获得的线性生长结果, 及界面失稳时的平均波长与试验中界面失稳平均胞晶间距吻合良好。

(3) 焊接熔池凝固过程中线性生长阶段, 联生结晶的晶体学最优取向与温度梯度方向偏角越大, 界面越稳定, 界面失稳时间越长。联生结晶的晶体学取向对界面失稳胞间距影响作用不明显。

参 考 文 献

- [1] CHEN S, GUILLEMOT G, GANDIN C-A. Three-dimensional cellular automaton-finite element modeling of solidification grain structures for arc-welding processes[J]. *Acta Materialia*, 2016, 115: 448-467.
- [2] 陈飞, 崔振山, 董定乾. 微观组织演变元胞自动机模拟研究进展[J]. *机械工程学报*, 2015, 51(4): 30-39.
CHEN Fei, CUI Zhenshan, DONG Dingqian. Research progress in cellular automaton simulation of microstructure evolution[J]. *Journal of Mechanical Engineering*, 2015, 51(4): 30-39.
- [3] WEI H L, ELMER J W, DEBROY T. Origin of grain orientation during solidification of an aluminum alloy[J]. *Acta Materialia*, 2016, 115: 123-131.
- [4] ZHENG W J, DONG Z B, WEI Y H, et al. Phase field investigation of dendrite growth in the welding pool of aluminum alloy 2A14 under transient conditions[J]. *Computational Materials Science*, 2014, 82: 525-530.
- [5] TAN W, BAILEY N S, SHIN Y C. Numerical modeling of transport phenomena and dendritic growth in laser spot conduction welding of 304 stainless steel[J]. *Journal of Manufacturing Science and Engineering*, 2012, 134(4): 041010.
- [6] WEI H L, ELMER J W, DEBROY T. Origin of grain orientation during solidification of an aluminum alloy[J]. *Acta Materialia*, 2016, 115: 123-31.
- [7] WEI H L, ELMER J W, DEBROY T. Three-dimensional modeling of grain structure evolution during welding of an aluminum alloy[J]. *Acta Materialia*, 2017, 126: 413-425.
- [8] HAN R, LI Y, LU S. Macro-micro modeling and simulation for the morphological evolution of the solidification structures in the entire weld[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2017, 106: 1345-1355.
- [9] FARZADI A, DO-QUANG M, SERAJZADEH S, et al. Phase-field simulation of weld solidification microstructure in an Al-Cu alloy[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2008, 16(6): 065005.
- [10] FALLAH V, AMOOREZAEI M, PROVATAS N, et al. Phase-field simulation of solidification morphology in laser powder deposition of Ti-Nb alloys[J]. *Acta Materialia*, 2012, 60(4): 1633-1646.
- [11] WANG D, KADOI K, SHINOZAKI K. Prediction of residual liquid distribution of austenitic stainless steel during laser beam welding using multi-phase field modeling[J]. *ISIJ International*, 2017, 57(1): 139-147.
- [12] ZHENG W, DONG Z, WEI Y, et al. Onset of the initial instability during the solidification of welding pool of aluminum alloy under transient conditions[J]. *Journal of Crystal Growth*, 2014, 402: 203-209.
- [13] MULLINS W W, SEKERKA R F. Stability of a planar interface during solidification of a dilute binary alloy[J]. *Journal of Applied Physics*, 1964, 35(2): 444-451.
- [14] 黄卫东, 周尧和. 定向凝固的界面形态转变[J]. *金属学报*, 1991, 27(2): 86-91.
HUANG Weidong, ZHOU Yaohe. Interface morphology transitions during directional solidification in a transparent model alloy[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 1991, 27(2): 86-91.
- [15] WARREN J, LANGER J. Prediction of dendritic spacings in a directional-solidification experiment[J]. *Physical Review E*, 1993, 47(4): 2702-2712.
- [16] LOSERT W, SHI B Q, CUMMINS H Z. Evolution of dendritic patterns during alloy solidification: Onset of the initial instability[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 1998, 95(2): 431-438.
- [17] 林鑫, 李涛, 王琳琳, 等. 单相合金凝固过程时间相关的界面稳定性(I)[J]. *物理学报*, 2004, 11(53): 3971-3977.
LIN Xin, LI Tao, WANG Linlin, et al. Time-dependent interface stability during directional solidification of a single phase alloy(I)[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2004, 11(53): 3971-3977.
- [18] WANG Z, WANG J, YANG G. Fourier synthesis predicting onset of the initial instability during directional solidification[J]. *Applied Physics Letters*, 2009, 94(6): 061920.
- [19] CHEN Y, BOGNO A A, XIAO N M, et al. Quantitatively comparing phase-field modeling with direct real time observation by synchrotron X-ray radiography of the initial transient during directional solidification of an Al-Cu alloy[J]. *Acta Materialia*, 2012, 60(1): 199-207.
- [20] DONG Z, ZHENG W, WEI Y, et al. Dynamic evolution of initial instability during non-steady-state growth[J]. *Physical Review E*, 2014, 89: 062403.
- [21] WANG L, WEI Y, ZHAN X, et al. Simulation of dendrite growth in the laser welding pool of aluminum alloy 2024 under transient conditions[J]. *Journal of Materials Processing Technology*, 2017, 246: 22-29.
- [22] WANG Z J, WANG J C, YANG G C. Onset of initial

- planar instability with surface-tension anisotropy during directional solidification[J]. *Physical Review E*, 2009, 80: 052603
- [23] FORNARO O, PALACIO H A. Planar front instabilities during directional solidification of hcp: Zn-Cd dilute alloys[J]. *Scripta Materialia*, 2006, 54: 2149-2153.
- [24] 王理林, 王贤斌, 王红艳, 等. 晶体取向对定向凝固平界面失稳行为的影响[J]. *物理学报*, 2012, 61(14): 148104.
- WANG Lilin, WANG Xianbin, WANG Hongyan, et al. Effect of crystallographic orientation on instability behavior of planar interface in directional solidification[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2012, 61(14): 148104.
- [25] 刘会杰. 焊接冶金与焊接性[M]. 北京: 机械工业出版社, 2002.
- LIU Huijie. *Welding metallurgy and weldability*[M]. Beijing: China Machine Press, 2002.
- [26] KARMA A. Phase-field formulation for quantitative modeling of alloy solidification[J]. *Physical Review Letters*, 2001, 87(11): 115701.
- [27] ECHEBARRIA B, KARMA A, PLAPP M. Quantitative phase-field model of alloy solidification[J]. *Physical Review E*, 2004, 70(6): 061604.
- [28] WANG Z, LI J, WANG J, et al. Phase field modeling the selection mechanism of primary dendritic spacing in directional solidification[J]. *Acta Materialia*, 2012, 60(5): 1957-1964.
- [29] 陈轩, 卢庆华, 张静, 等. 高频微振条件下激光焊接组织研究[J]. *机械工程学报*, 2016, 52(20): 60-65.
- CHEN Xuan, LU Qinghua, ZHANG Jing, et al. Microstructure characteristic of laser welded joint under high frequency micro-vibration condition[J]. *Journal of Mechanical Engineering*, 2016, 52(20): 60-65.
- [30] 彭必荣, 卢庆华, 何晓峰, 等. 机械振动对激光焊接接头组织的影响[J]. *机械工程学报*, 2015, 51(20): 94-100.
- PENG Birong, LU Qinghua, HE Xiaofeng, et al. Effects of mechanical vibration on microstructure of laser welded joint[J]. *Journal of Mechanical Engineering*, 2015, 51(20): 94-100.
-
- 作者简介: 郑文健, 男, 1985 年出生, 博士。主要研究方向为焊接过程数值模拟。
E-mail: zwj0322@zjut.edu.cn
- 杨建国(通信作者), 男, 1975 年出生, 博士, 教授。主要研究方向为焊接力学与可靠性以及焊接计算学。
E-mail: yangjg@zjut.edu.cn