

金属增材制造条件下二元合金三维微观组织的相场法-有限元法预测

曹流¹, 孟瑞繁¹, 张沁丹¹, 张珞²

(1. 广州大学机械与电气工程学院系统流变学研究所, 广东广州 510006;

2. 北京科技大学机械工程学院, 北京 100089)

摘要: 基于开源相场法代码PRISMS-PF所提供的相场法-有限元法计算架构, 开展了A356铝合金MAM过程的模拟仿真研究。计算分析了工艺参数(温度梯度与扫描速率)以及初始固相形貌对溶质浓度、一次枝晶臂间距和晶粒形貌的影响, 再现了微观偏析、晶粒竞争生长以及二次枝晶臂等现象, 并与实验结果进行了对比验证。对比不同工艺参数(温度梯度与扫描速率)情形下的预测结果, 发现一次枝晶臂间距随温度梯度与扫描速率乘积的减小而增大, 而随着温度梯度与扫描速率的比值逐渐减小, 晶粒形貌由平面晶逐渐向胞状晶、柱状晶以及树枝晶转变。对比不同初始固相形貌情形下的预测结果, 发现当温度梯度与扫描速率的比值较小时, 即液-固界面前沿的成分过冷区越大时, 非平整的初始固相形貌对晶粒生长过程造成的影响越明显。

关键词: 金属增材制造; 相场法-有限元法; 温度梯度; 扫描速率; 一次枝晶臂间距

作者简介:

曹流(1991-), 男, 讲师, 博士, 研究方向为金属增材制造过程数值模拟。
E-mail: caoliu@gzhu.edu.cn

中图分类号: TG111.4
文献标识码: A
文章编号: 1001-4977(2023)04-0365-10

基金项目:

科技部科技创新2030-“新一代人工智能”重大专项“人机协同智能操作系统”子课题“作业环境仿真器与数字孪生平台”(2020AAA0104804); 广州市基础与应用基础研究项目(202102020724)。
收稿日期:
2022-05-20 收到初稿,
2022-07-15 收到修订稿。

与传统的减材制造、等材制造技术相比, 金属增材制造技术(metal additive manufacturing, MAM)可实现轻量化减重, 无需大型加热设备与多余的模具, 已被广泛应用于航空航天、汽车等领域^[1-2]。本质上, MAM的成形过程可视为大量微型铸造或焊接过程的集合, 故摸清MAM过程中局部区域的微观组织演变行为即可直接推广至整个MAM零件^[3-4]。当前, 三维微观组织模拟已成为研究金属凝固组织动力学行为的基本手段^[5-7], 其有助于分析溶质再分配^[8]、热扩散^[9]以及液相流动^[10]等因素对液-固相转变的影响。

目前, MAM微观组织模拟方法主要包括元胞自动机法^[11-12](cellular automaton method, CAM)、蒙特卡洛法^[13-14](Monte Carlo method, MCM)和相场法^[15-16](phase field method, PFM)。其中, CAM在宏观凝固热力学和晶粒形核与长大动力学的基础上, 通过更新各离散单元格的状态变化来描述液-固转变过程。CAM的优势在于耦合宏观热场数据可获得大尺寸范围内的晶粒信息(如CET转变、晶粒度等), 但其在表达晶粒形貌、共晶与包晶相变、溶质偏析等方面的能力较弱^[17-18]。MCM在最小界面能原理的基础上, 以概率统计为主要理论依据, 以随机抽样为主要手段, 其优势在于只需构建简单的概率统计模型即可描述晶粒的生长过程。但由于缺乏可靠的凝固动力学基础, 导致MCM难以获得凝固组织演变的微观尺度信息^[19-20]。PFM在扩散界面模型的基础上, 通过构建微分方程来体现具有特定物理机制的扩散、有序化势和热力学驱动力对相场变量的综合作用, 以达到重现凝固微观组织演变过程的目的。PFM的优势在于可获得足够精细的晶粒形貌^[21-22], 且近年来并行计算^[23]与自适应网格^[24]技术已广泛用于提高PFM的计算效率。可见, PFM最适合于再现MAM过程中微观组织的三维形貌演变。

当前, PFM模拟并无成熟的商业化软件, 而完全自主开发PFM代码要求研究

人员具备一定的材料学、数学以及计算机编程基础，且会遇到大量数值模拟底层开发障碍，如矩阵组装与求解、并行计算和自适应网格等。因此，基于开源PFM框架开展MAM微观组织模拟研究是可行性较高的选择。目前可查询到的开源PFM框架有MOOSE^[25]、OpenPhase^[26]、FiPy^[27]、MMSP^[28]和PRISMS-PF^[29]。其中，PRISMS-PF提供了可定制的用于求解相场模型的偏微分方程系统，可预测晶粒形核、生长以及粗化等各类微观结构演化过程^[30]。PRISMS-PF不仅提供了简便的自适应网格控制模块，还利用Deal.II有限元库的无矩阵功能，消除了存储和访问全局稀疏矩阵矢量的必要，可有效地求解具有十亿量级自由度的方程组^[31]。相比于其他的开源PFM框架，PRISMS-PF在自主开发的支持度、并行计算以及自适应网格等方面具有一定的优势，这也是本文选择PRISMS-PF开展MAM微观组织模拟研究的原因。

基于开源PFM框架PRISMS-PF开展了MAM条件下二元合金三维微观组织的数值模拟研究，以A356铝合金的MAM过程为研究对象，计算分析了工艺参数（温度梯度与扫描速率）以及初始固相形貌对溶质浓度、一次枝晶臂间距和晶粒形貌的影响，并与试验结果进行对比验证。本研究有望为深入理解MAM过程中的“微观组织-工艺-性能”间相互关系提供参考。

1 二元合金增材制造过程的三维PFM-FEM模型

考虑到MAM凝固过程具有高温梯度及外延结晶特点，目前普遍的做法是将MAM凝固过程等效为定向凝固过程，进而通过调整温度梯度和扫描速率（抽拉速率）来等效MAM凝固条件。本文所针对的问题场景为三维情形下一初始固相区域在定向凝固条件下逐渐生长。因此，所需的相场变量有三个：一是液-固相变量 φ （ $\varphi=1$ 表示固相， $\varphi=-1$ 表示液相， $-1 < \varphi < 1$ 表示液-固界面）；二是无量纲的过饱和浓度 U ；三是中间变量 ζ 。需要说明的是，中间变量 ζ 的提出是为了使相场模型的推导和计算过程更为清晰明了。

基于二维情形下定向凝固过程的相场模型^[32]，以及三维情形下界面能各向异性函数^[33]，得到了三维情形下MAM过程的相场模型。相场变量 φ 、 U 和 ζ 的控制方程为：

$$\tau_{\varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \zeta(\varphi, U) \quad (1)$$

$$\tau_U \frac{\partial U}{\partial t} = \nabla \cdot [\tilde{D} (1-\varphi) \nabla U + \vec{j}_{at}^U] + [1 + (1-k) U] \frac{\partial \varphi}{\partial t} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \zeta(\varphi, U) = & \nabla \cdot [a^2(\vec{n}) \nabla \varphi] + \frac{\partial}{\partial x} \left[|\nabla \varphi|^2 a(\vec{n}) \frac{\partial a(\vec{n})}{\partial(\partial \varphi / \partial x)} \right] + \\ & \frac{\partial}{\partial y} \left[|\nabla \varphi|^2 a(\vec{n}) \frac{\partial a(\vec{n})}{\partial(\partial \varphi / \partial y)} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[|\nabla \varphi|^2 a(\vec{n}) \frac{\partial a(\vec{n})}{\partial(\partial \varphi / \partial z)} \right] \\ & + \varphi - \varphi^3 - \lambda (1-\varphi)^2 \left[U + U_{off} + \frac{z-z_0 - \tilde{V}_p t}{\tilde{l}_T} \right] \quad (3) \end{aligned}$$

其中：

$$\tau_{\varphi} = [1 + (1-k) U] a^2(\vec{n}) \quad (4)$$

$$\tau_U = 1 + k(1-k)\varphi \quad (5)$$

$$\vec{j}_{at}^U = -\frac{1}{\sqrt{2}} [1 + (1-k) U] \frac{\partial \varphi}{\partial t} \vec{n} \quad (6)$$

$$\vec{n} = -\frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|} \quad (7)$$

$$a(\vec{n}) = (1-3\varepsilon_4) \left[1 + \frac{4\varepsilon_4}{1-3\varepsilon_4} (n_x^4 + n_y^4 + n_z^4) \right] \quad (8)$$

$$n_x = -\frac{\partial \varphi / \partial x}{|\nabla \varphi|} \quad (9)$$

$$n_y = -\frac{\partial \varphi / \partial y}{|\nabla \varphi|} \quad (10)$$

$$n_z = -\frac{\partial \varphi / \partial z}{|\nabla \varphi|} \quad (11)$$

式中： τ_{φ} 为式（1）的左端项系数； t 为无量纲时间； τ_U 为式（2）的左端项系数； \tilde{D} 为无量纲的溶质扩散系数； \vec{j}_{at}^U 用于表征相变对溶质分布的影响； k 为溶质再分配系数； $a(\vec{n})$ 为立方晶系的界面能各向异性函数^[33]； x, y, z 为无量纲的三维空间坐标； λ 为无量纲的耦合参数； U_{off} 决定了液-固界面的初始过冷度， $U_{off}=0$ 表示液-固界面的初始温度为固相线温度， $U_{off}=1$ 表示液-固界面的初始温度为液相线温度； z_0 为初始液-固界面的无量纲 Z 向高度； \tilde{V}_p 为无量纲的扫描速率； \tilde{l}_T 为无量纲的热作用长度； \vec{n} 为液-固界面的单位法向向量（由固相指向液相）； ε_4 为各向异性强度； n_x, n_y, n_z 分别为 \vec{n} 在三个坐标轴方向上的分量。

根据式（8）~（11）可得：

$$\frac{\partial a(\vec{n})}{\partial(\partial \varphi / \partial x)} = \frac{16\varepsilon_4 n_x}{|\nabla \varphi|} [n_y^2 (n_y^2 - n_x^2) + n_z^2 (n_z^2 - n_x^2)] \quad (12)$$

$$\frac{\partial a(\vec{n})}{\partial(\partial \varphi / \partial y)} = \frac{16\varepsilon_4 n_y}{|\nabla \varphi|} [n_x^2 (n_x^2 - n_y^2) + n_z^2 (n_z^2 - n_y^2)] \quad (13)$$

$$\frac{\partial a(\vec{n})}{\partial(\partial \varphi / \partial z)} = \frac{16\varepsilon_4 n_z}{|\nabla \varphi|} [n_x^2 (n_x^2 - n_z^2) + n_y^2 (n_y^2 - n_z^2)] \quad (14)$$

将式（12）~（14）代入式（3）可得：

$$\begin{aligned} & \xi(\varphi, U) \\ = & \nabla \cdot \left[\left\{ a^2(\vec{n}) \frac{\partial \varphi}{\partial x} + 16 |\nabla \varphi| a(\vec{n}) \varepsilon_4 n_x [n_y^2 (n_y^2 - n_x^2) + n_z^2 (n_z^2 - n_x^2)] \right\} \vec{x} + \left\{ a^2(\vec{n}) \frac{\partial \varphi}{\partial y} + 16 |\nabla \varphi| a(\vec{n}) \varepsilon_4 n_y [n_x^2 (n_x^2 - n_y^2) + n_z^2 (n_z^2 - n_y^2)] \right\} \vec{y} \right. \\ & \left. + \left\{ a^2(\vec{n}) \frac{\partial \varphi}{\partial z} + 16 |\nabla \varphi| a(\vec{n}) \varepsilon_4 n_z [n_x^2 (n_x^2 - n_z^2) + n_y^2 (n_y^2 - n_z^2)] \right\} \vec{z} \right] + \varphi - \varphi^3 - \lambda (1 - \varphi^2)^2 \left[U + U_{off} + \frac{z - z_0 - \tilde{V}_p t}{\tilde{l}_T} \right] \end{aligned} \quad (15)$$

式中： \vec{x} 、 \vec{y} 、 \vec{z} 分别为三个坐标轴方向上的单位向量。

将式(1)代入式(2)可得：

$$\tau_U \frac{\partial U}{\partial t} = \nabla \cdot [\tilde{D} (1 - \varphi) \nabla U + \vec{j}_{at}^U] + [1 + (1 - k)U] \frac{\xi(\varphi, U)}{\tau_\varphi} \quad (16)$$

依据PRISMS-PF提供的所谓的相场法-有限元法(phase field method-finite element method, PFM-FEM)计算架构^[29]，先对式(1)、(15)和(16)进行正向欧拉显式时间步进处理，进而可得相场变量 φ 、 U 和 ξ 的有限元弱形式为：

$$\int_{\Omega} w \varphi^{n+1} dV = \int_{\Omega} w r_\varphi dV \quad (17)$$

$$\int_{\Omega} w U^{n+1} dV = \int_{\Omega} (w r_U + \nabla w \cdot \vec{r}_{Ux}) dV \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \vec{r}_{\xi x} = & - \left\{ a^2(\vec{n}) \frac{\partial \varphi}{\partial x} + 16 |\nabla \varphi| a(\vec{n}) \varepsilon_4 n_x [n_y^2 (n_y^2 - n_x^2) + n_z^2 (n_z^2 - n_x^2)] \right\} \vec{x} - \left\{ a^2(\vec{n}) \frac{\partial \varphi}{\partial y} + 16 |\nabla \varphi| a(\vec{n}) \varepsilon_4 n_y [n_x^2 (n_x^2 - n_y^2) + n_z^2 (n_z^2 - n_y^2)] \right\} \vec{y} \\ & - \left\{ a^2(\vec{n}) \frac{\partial \varphi}{\partial z} + 16 |\nabla \varphi| a(\vec{n}) \varepsilon_4 n_z [n_x^2 (n_x^2 - n_z^2) + n_y^2 (n_y^2 - n_z^2)] \right\} \vec{z} \end{aligned} \quad (24)$$

式中：上标 n 和 $n+1$ 分别表示当前时刻的物理量值和经过一定时间步长后的物理量值； r_φ 为 φ 有限元弱形式的右端项系数； r_U 、 \vec{r}_{Ux} 为 U 有限元弱形式的右端项系数； r_ξ 、 $\vec{r}_{\xi x}$ 为 ξ 有限元弱形式的右端项系数； Δt 为无量纲的时间步长。

由式(5)可得：

$$\nabla \frac{1}{\tau_U} = \frac{1 - k}{(\tau_U)^2} \nabla \varphi \quad (25)$$

将式(25)代入式(21)可得：

$$r_U = U^n - \Delta t \nabla \frac{1 - k}{(\tau_U)^2} \cdot \nabla \varphi [\tilde{D} (1 - \varphi^n) \nabla U^n + \vec{j}_{at}^U] + \Delta t \frac{[1 + (1 - k)U^n] \xi^n}{\tau_U} \quad (26)$$

上面的公式对溶质浓度、时间与长度均做了无量纲处理，无量纲物理量与实际物理量的对应关系为：

$$\lambda = a_1 \frac{W}{d_0} \quad (27)$$

$$\tilde{D} = a_1 a_2 \frac{W}{d_0} \quad (28)$$

$$\tilde{V}_p = a_1 a_2 \frac{V_p W^2}{D d_0} \quad (29)$$

$$\tilde{l}_T = \frac{|m_l| c_0 (1 - k)}{k G W} \quad (30)$$

$$\int_{\Omega} w \xi^{n+1} dV = \int_{\Omega} (w r_\xi + \nabla w \cdot \vec{r}_{\xi x}) dV \quad (19)$$

其中：

$$r_\varphi = \varphi^n + \frac{\xi^n}{\tau_\varphi} \Delta t \quad (20)$$

$$r_U = U^n - \Delta t \nabla \frac{1}{\tau_U} \cdot [\tilde{D} (1 - \varphi^n) \nabla U^n + \vec{j}_{at}^U] + \Delta t \frac{[1 + (1 - k)U^n] \xi^n}{\tau_U} \quad (21)$$

$$\vec{r}_{Ux} = \frac{\Delta t}{\tau_U} [\tilde{D} (1 - \varphi^n) \nabla U^n + \vec{j}_{at}^U] \quad (22)$$

$$r_\xi = \varphi^n - (\varphi^n)^3 - \lambda (1 - (\varphi^n)^2)^2 \left[U + U_{off} + \frac{z - z_0 - \tilde{V}_p t}{\tilde{l}_T} \right] \quad (23)$$

$$c = \frac{c_0 [1 + k - (1 - k) \varphi] [1 - (1 - k) U]}{2 (1 + U_0 - U_0 k)} \quad (31)$$

$$\tau_0 = a_1 a_2 \frac{W^3}{D d_0} \quad (32)$$

$$d_0 = \frac{\gamma_0 T_m c_p}{\rho L^2} \quad (33)$$

式中： a_1 、 a_2 均为常量，其值分别为0.883 9和0.626 7； d_0 为毛细作用长度，m； W 为人为指定的液-固界面厚度，其值通常处于 $10d_0 \sim 100d_0$ 范围内，m； V_p 为扫描速率（抽拉速率），m/s； D 为液相中溶质扩散系数， m^2/s ； m_l 为液相线温度随溶质浓度的变化率，K/%； c_0 为初始的液相溶质浓度，%； G 为温度梯度，K/m； c 为溶质浓度，%； U_0 为初始的无量纲过饱和浓度， $U_0 = -1$ 表示初始的液相溶质浓度为 c_0 ，初始的固相溶质浓度为 kc_0 ； τ_0 为特征时间，s； γ_0 为表面张力系数，N/m； T_m 为熔点，K； c_p 为比热容，J/(kg·K)； ρ 为密度， kg/m^3 ； L 为凝固潜热，J/kg。需要说明的是，将计算结果中的无量纲时间和无量纲长度分别乘以特征时间 τ_0 和特征长度 W ，即可得到真实时间和真实长度。

基于PRISMS-PF的PFM-FEM计算架构求解MAM相场模型(式1、式15和式16)时，只需关注各相场变量有限元弱形式的右端项系数(式20~式26)，而

无需过多在意并行计算和自适应网络的底层逻辑,进而可以更为有效地针对所关心的问题相场法模拟研究。图1为MAM微观组织演化行为的仿真流程,其中,并行计算技术采用消息传递接口(message passing interface, MPI),控制自适应网格的依据是 ϕ 的变化是否剧烈。

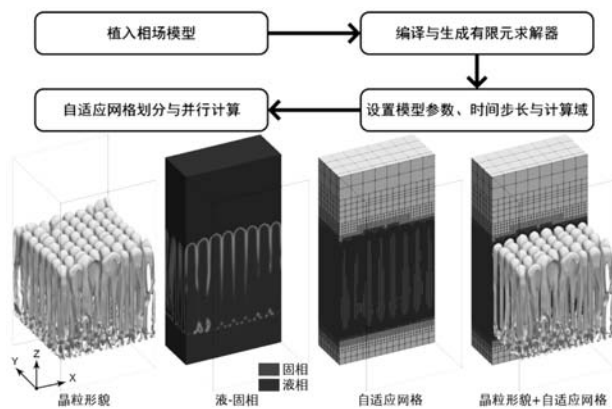


图1 MAM微观组织演化行为的仿真流程

Fig. 1 Simulation process of the evolutionary behavior of the MAM microstructure

2 结果与讨论

2.1 计算参数

本文所选取的合金为A356铝合金,其成分(质量分数)为:Al 92.7%-Si 7%-Mg 0.3%。表1为采用

JMatPro软件计算得到的A356铝合金物性参数。考虑到本研究对象为二元合金,故将A356铝合金等效为伪二元合金Al 93%-Si 7%。本文主要研究温度梯度和扫描速率(抽拉速率)等工艺参数对MAM微观组织演化行为的影响,表2为除温度梯度和扫描速率之外的计算参数。表3为不同温度梯度与扫描速率下的计算方案。另外,无量纲的计算域尺寸均为 $150 \times 150 \times 300$,自适应网格的最大细化等级均为6,初始固相所在的长方体区域均位于底端且高度为5。需要说明的是,表3中计算方案所得到的溶质溶度、时间和长度结果均为无量纲,式(31)和式(32)可用于将无量纲数据转换为真实的数据。所采用的计算资源配置为Intel Xeon Gold 6240 CPU(双CPU,72线程,128 GB内存)。

2.2 工艺参数对微观组织演化行为的影响

图2为方案B2情形下不同时刻的三维晶粒形貌、截面液-固相、自适应网格及溶质浓度分布。由计算结果可知,初始的固相区域为一位于底端的长方体,故液-固界面为一平整平面。在一定的温度梯度与扫描速率的共同作用下,液-固界面逐渐向液相区推进,即发生了凝固行为。由于凝固过程中发生了溶质再分配,使得液-固界面前方的溶质浓度逐渐增加,进而在液-固界面前方一定距离内出现成分过冷区,从而导致平整液-固界面逐渐失稳,形成柱状晶。当柱状晶出现后,柱状晶粒间的液相区域会受溶质再分配的影响而出现溶质聚集,即表现为微观偏析。图2所表现出的典型

表1 A356铝合金的物性参数

Table 1 Physical parameters of the A356 aluminum alloy

溶质扩散系数(液相)/($\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$)	熔点/K	比热容/($\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$)	凝固潜热/($\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$)	表面张力系数/($\text{N} \cdot \text{m}^{-1}$)	密度/($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$)
2.91×10^{-9}	888.83	4 900	4.3139×10^5	0.922 55	2 430

表2 计算参数
Table 2 Calculation parameters

符号	物理含义	数值	单位
ε_4	各向异性强度	0.05	
k	溶质再分配系数	0.3	
c_0	初始的液相溶质浓度	7	%
U_0	初始的无量纲过饱和浓度	-1	
U_{off}	液-固界面的初始过冷度	0.9	
z_0	初始液-固界面的无量纲Z向高度	5	
a_1	常量	0.883 9	
a_2	常量	0.626 7	
d_0	毛细作用长度	8.88×10^{-9}	m
W	人为指定的液-固界面厚度	1.77×10^{-7}	m
D	液相中溶质扩散系数	2.91×10^{-9}	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
$ m_l c_0$	液相线温度随溶质浓度的变化	2	K

表3 不同温度梯度与扫描速率下的计算方案
Table 3 Calculation schemes for different temperature gradients and scan rates

扫描速度 /($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)	温度梯度/($\text{K} \cdot \text{m}^{-1}$)				
	1×10^6	1×10^5	1×10^4	1×10^3	1×10^2
1×10^{-2}	方案 A1	方案 B1	方案 C1	方案 D1	方案 E1
5×10^{-3}	方案 A2	方案 B2	方案 C2	方案 D2	方案 E2
1×10^{-3}	方案 A3	方案 B3	方案 C3	方案 D3	方案 E3
1×10^{-4}	方案 A4	方案 B4	方案 C4	方案 D4	方案 E4

MAM凝固微观组织特征与A356合金的MAM实验结果^[34]相一致,可见,本文所采用的PFM-FEM计算架构可用于研究A356合金MAM凝固过程微观组织的演化行为。

为分析工艺参数(温度梯度和扫描速率)对一次枝晶臂间距的影响,图3和图4分别给出了不同温度梯

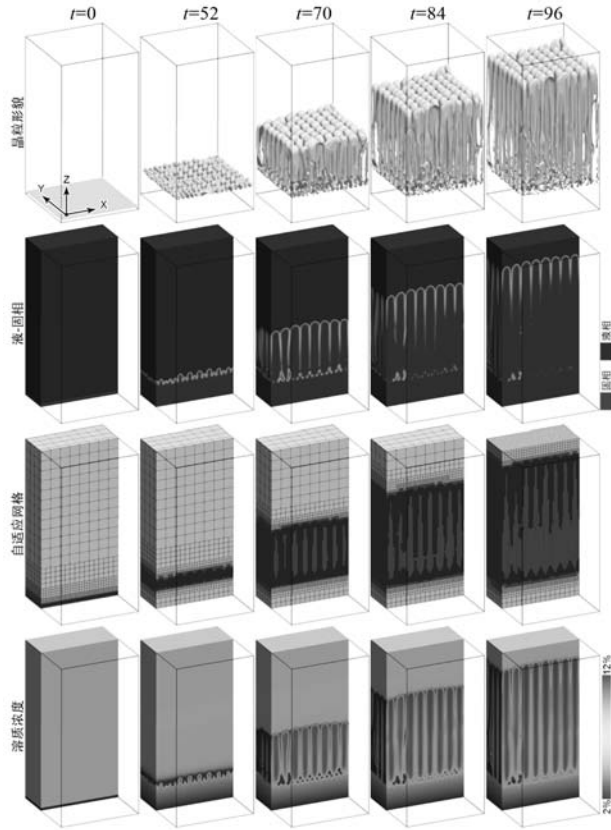


图2 方案B2情形下不同时刻的三维晶粒形貌、截面液-固相、自适应网格及溶质浓度分布

Fig. 2 Three-dimensional grain morphology, cross-sectional liquid-solid phase, adaptive mesh and solute concentration distributions at different moments in the case of scheme B2

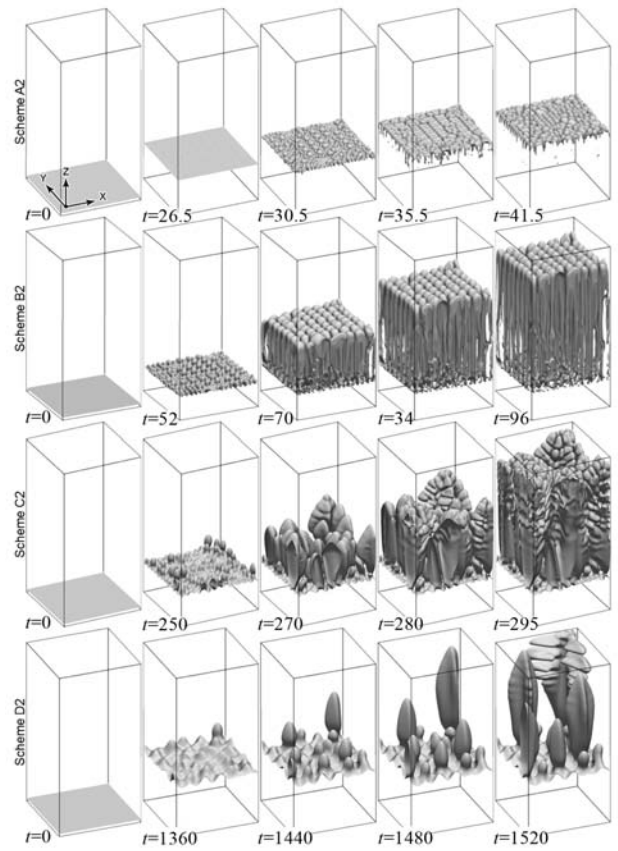


图3 扫描速率一定时不同温度梯度下的晶粒形貌演化结果

Fig. 3 Grain morphology evolutions at different temperature gradients for a certain scan rate

度或扫描速率下的晶粒形貌演化结果。由对比结果可知，当扫描速率 V_p 一定时，随着温度梯度 G 的降低，晶粒数量逐渐减少，即一次枝晶臂间距逐渐增大；当 G 一定时，随着 V_p 的减小，也表现出一次枝晶臂间距逐渐增大。此结论与MAM一次枝晶臂间距的经验公式 $\lambda_1=AG^{-0.5}V_p^{-0.25}$ 相一致^[35]，即一次枝晶臂间距随 $G \times V_p$ 值的减小而增大。图5给出了不同温度梯度与扫描速率下的一次枝晶臂间距数据，其定量化地验证了上述结论。图6为不同线能量密度下晶粒形态与大小的金属增材制造实验结果^[36]。由实验对比结果可知，当线能量密度越大时，单位长度上熔池所获得的能量越多，熔池尺寸越大，所表现出的整体温度梯度越小，晶粒尺寸越大，即晶粒间距越大。图7为一定线能量密度下晶界附近的晶粒间距变化实验结果^[36]。由实验结果可知，沿着堆积方向来看，晶粒在穿过晶界的过程中，晶粒间距会先变小后变大。其原因在于，凝固过程中熔池边界处的温度梯度是变化的。一般而言，当熔池具备最大边界时，温度梯度最大；随着熔池边界缩小，温度梯度逐渐降低，故实验结果中表现出晶界上

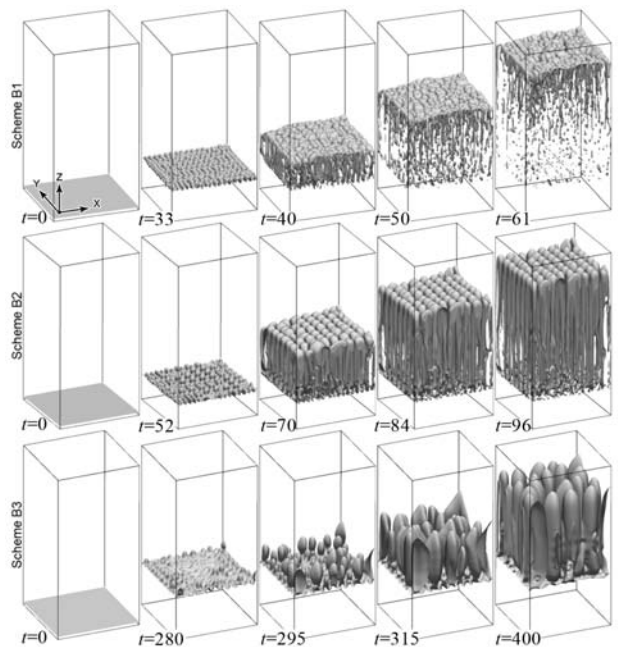


图4 温度梯度一定时不同扫描速率下的晶粒形貌演化结果

Fig. 4 Grain morphology evolutions at different scan rates for a certain temperature gradient

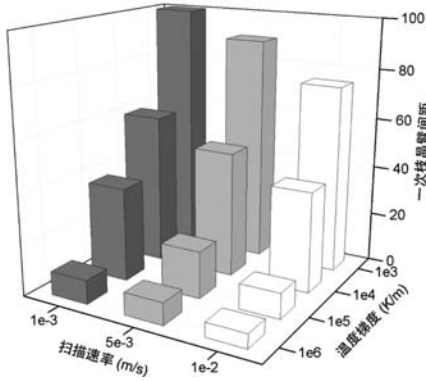


图5 不同温度梯度与扫描速率下的一次枝晶臂间距

Fig. 5 Primary dendrite arm spaces at different temperature gradients and scan rates

方的晶粒间距最小。上述实验结果验证了工艺参数对枝晶间距的影响。

为分析工艺参数（温度梯度和扫描速率）对晶粒形貌的影响，图8给出了不同温度梯度与扫描速率下的晶粒形貌预测结果。由对比结果可知，当扫描速率一定时，随着温度梯度的降低，晶粒形貌由胞状晶逐渐向柱状晶以及树枝晶转变，其中，树枝晶的出现涉及到明显的晶粒竞争生长以及二次枝晶臂等现象。当温度梯度一定时，随着扫描速率的增大，晶粒形貌由平面晶逐渐向胞状晶、柱状晶，甚至树枝晶转变。考虑到MAM过程中的熔池微观组织演化行为与激光焊接过程中的熔池有一定的相似之处，而激光焊接领域通常采用温度梯度与扫描速率的比值即 G/V_p 来研究成形工艺对晶粒形

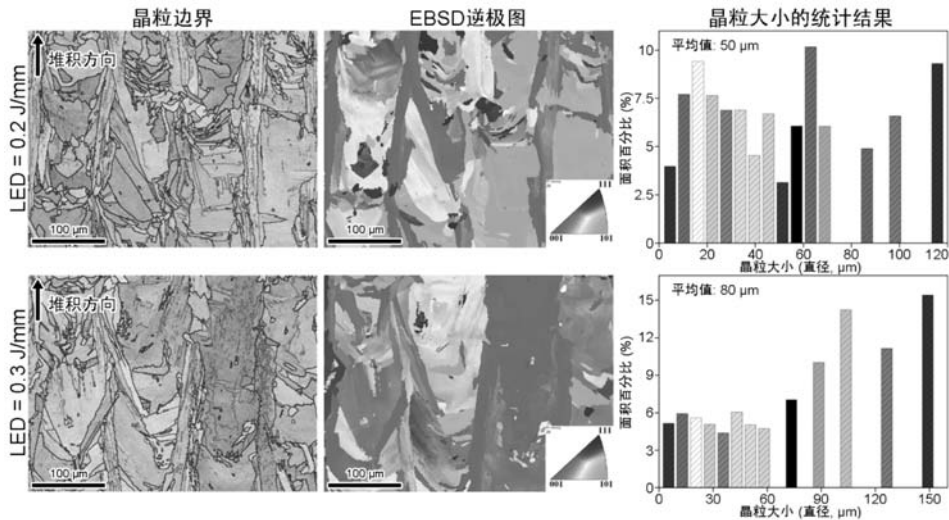


图6 不同线能量密度（LED）下晶粒形态与大小的实验结果

Fig. 6 Experimental results of grain morphology and size of selective laser melting IN738 alloy at different line energy densities

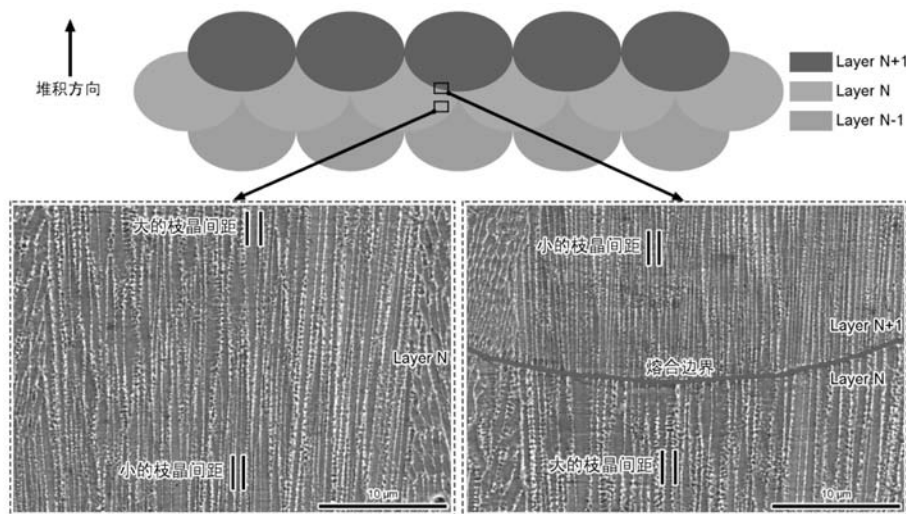


图7 一定线能量密度下晶界附近的晶粒间距变化实验结果

Fig. 7 Experimental results of the changes in grain spacing near grain boundaries of the selective laser melting IN738 alloy under a LED of 0.2 J/mm

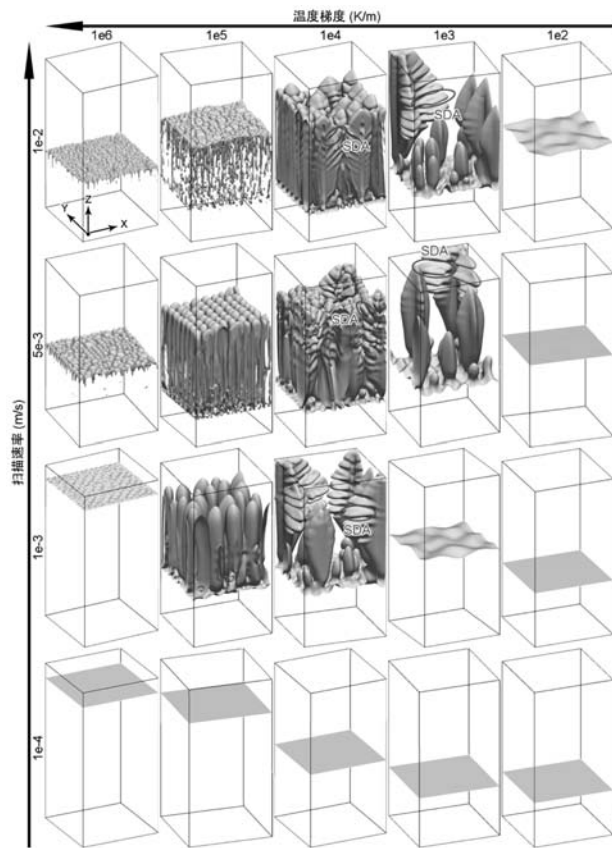


图8 不同温度梯度与扫描速率下的晶粒形貌

Fig. 8 Grain morphologies at different temperature gradients and scan rates

貌的影响^[37]。在激光焊接领域中，普遍认为随着比值 G/V_p 逐渐减小，晶粒形貌由平面晶逐渐向胞状晶、柱状晶、树枝晶，甚至等轴晶转变^[37]。图8所表现出的整体趋势为随着比值 G/V_p 逐渐减小，晶粒形貌由平面晶逐渐向胞状晶、柱状晶以及树枝晶转变。图9为不同线能量密度下晶粒形貌的实验结果^[36]。由实验结果可知，当线能量密度较大时，熔池的整体温度梯度较小，成分过冷区较大，故出现了二次枝晶臂；而当线能量密度较小时，未出现二次枝晶臂。上述实验结果验证了工艺参数对枝晶形貌的影响。

温度梯度与扫描速率之所以以比值 G/V_p 的方式影

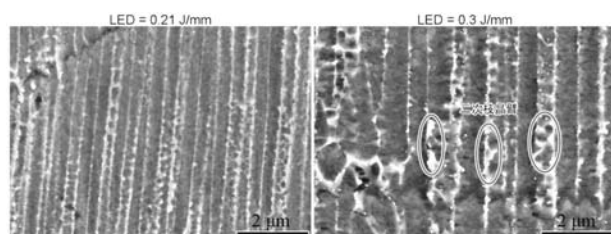


图9 不同线能量密度下晶粒形貌的实验结果

Fig. 9 Experimental results of the grain morphologies under different LEDs

响着晶粒形貌，其本质上是因为温度梯度与扫描速率共同决定了液-固界面前沿的成分过冷区大小。其中，温度梯度影响液-固界面前沿的温度分布，扫描速率影响液-固界面前沿的平衡液相线温度分布。当 G 大且 V_p 小，即比值 G/V_p 较大时，成分过冷区较小甚至不存在，此时向前生长的晶粒均被“过热”的液态金属重新熔化，晶粒前沿只能形成胞状晶，甚至平面晶；当 G 小且 V_p 大，即比值 G/V_p 较小时，成分过冷区较大，此时向前生长的晶粒能够得以保留，进而发展为柱状晶、树枝晶，甚至直接在液相内部形核形成等轴晶。需要指出的是，图8中当温度梯度最小时（ $G=1 \times 10^2$ K/m），晶粒形貌整体表现为平面晶，其原因是本文的相场模型未考虑形核，无法直接从液相中形核并发展为等轴晶。考虑到实际MAM凝固过程中的温度梯度大致处于 $10^4 \sim 10^6$ K/m量级，可见等轴晶占MAM微观组织的比例极少。

2.3 初始固相形貌对微观组织演化行为的影响

上述计算方案中的初始固相形貌均为平整的液-固界面，为分析非平整的初始液-固界面对晶粒生长过程的影响，表4给出了非平整初始固相形貌下的计算方案。其中，初始的液-固界面为平整的液-固界面加上规则排布的16个半球形凸起。图10为方案G1情形下不同时刻的晶粒形貌、液-固相以及溶质浓度分布结果。由计算结果可知，由于初始的液-固界面存在凸起，当液-固界面前沿存在一定宽度的成分过冷区时，凸前的晶粒得以保留，进而发展为柱状晶。可见，非平整的初始液-固界面能够对晶粒的生长过程产生一定影响。

为分析不同温度梯度与扫描速率情形下非平整初

表4 非平整初始固相形貌下的计算方案
Table 4 Calculation schemes under non-flat initial solid-phase morphology

扫描速度/($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)	温度梯度/($\text{K} \cdot \text{m}^{-1}$)	
	1×10^6	1×10^3
1×10^{-2}	方案 F1	方案 G1
1×10^{-3}	方案 F2	方案 G2

始固相形貌对晶粒生长过程的影响，图11给出了各计算方案下的晶粒形貌预测结果。将图8与图11进行对比可知，当 G 大且 V_p 小，即比值 G/V_p 较大时，不同初始固相形貌情形下最终的晶粒形貌是类似的，而当 G 小且 V_p 大，即比值 G/V_p 较小时，不同初始固相形貌情形下最终的晶粒形貌差异较大。造成上述现象的原因仍与成分过冷区相关，即液-固界面前沿的成分过冷区越大，非平整的初始固相形貌特征越容易在后续凝固过程中得以保留，即对晶粒生长过程造成越明显的影响。

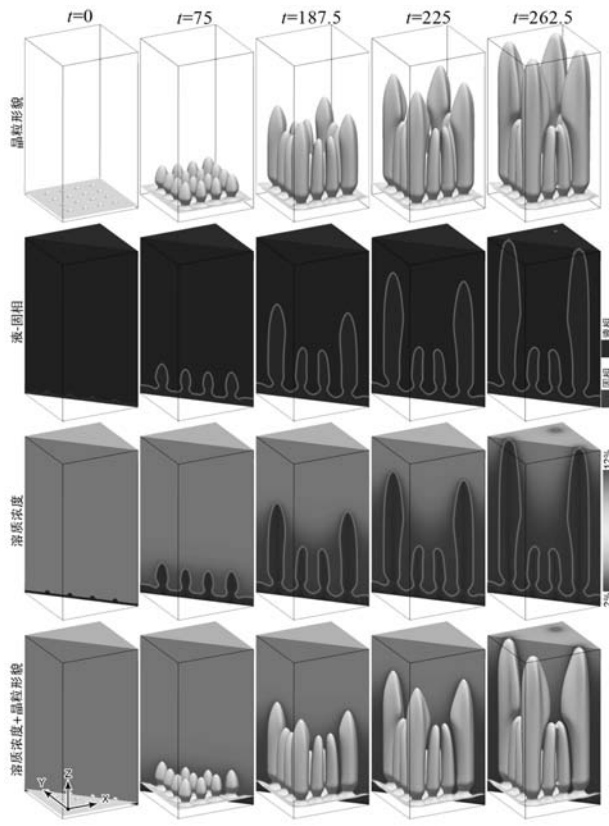


图10 方案G1情形下不同时刻的晶粒形貌、液-固相以及溶质浓度分布

Fig. 10 Grain morphology, liquid-solid phase and solute concentration distributions at different moments in the case of scheme G1

3 结论

(1) 对比不同工艺参数(温度梯度与扫描速率)情形下的预测结果,发现一次枝晶臂间距随温度梯度与扫描速率的乘积即 $G \times V_p$ 值的减小而增大,而随着比值 G/V_p 逐渐减小,晶粒形貌由平面晶逐渐向胞状晶、柱

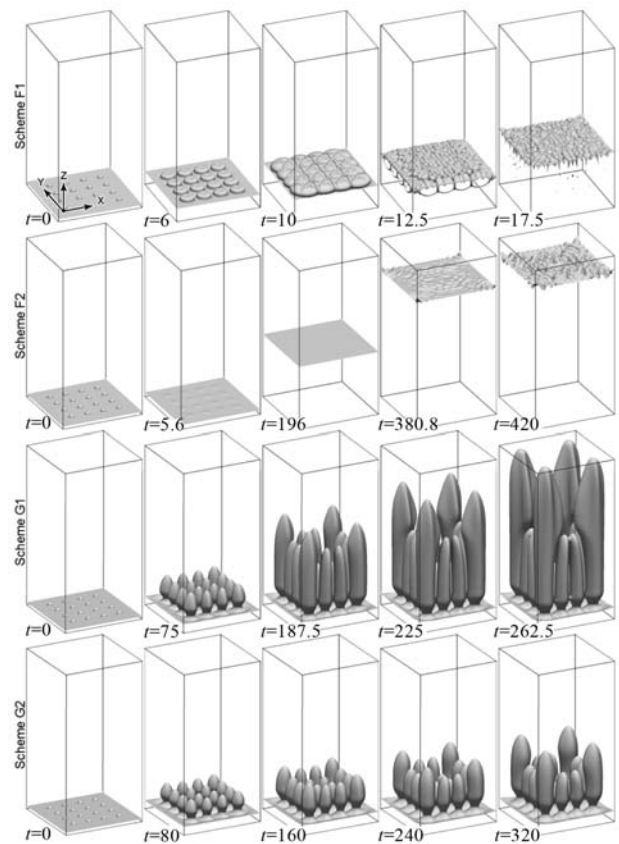


图11 不同温度梯度与扫描速率情形下非平整初始固相形貌对晶粒形貌演化的影响

Fig. 11 Influence of non-flat initial solid-phase morphology on grain morphology evolutions under different temperature gradients and scan rates

状晶以及树枝晶转变。

(2) 对比不同初始固相形貌情形下的预测结果,发现当比值 G/V_p 较小,即液-固界面前沿的成分过冷区越大时,非平整的初始固相形貌对晶粒生长过程造成的影响越明显。

参考文献:

- [1] GU D D, SHI X Y, POPRAW R, et al. Material-structure-performance integrated laser-metal additive manufacturing [J]. Science, 2021, 372: 932.
- [2] MAHALE R S, SHAMANTH V, HEMANTH K, et al. Processes and applications of metal additive manufacturing [J]. Materials Today: Proceedings, 2021, DOI: 10.1016/j.matpr.2021.08.298.
- [3] LIU Z Y, ZHAO D D, WANG P, et al. Additive manufacturing of metals: microstructure evolution and multistage control [J]. Journal of Materials Science & Technology, 2022, 100: 224-236.
- [4] SHAKIL S I, HADADZADEH A, AMIRKHZIZ B S, et al. Additive manufactured versus cast AlSi10Mg alloy: microstructure and micromechanics [J]. Results in Materials, 2021, 10: 100178.
- [5] LI J H, ZHOU X L, BROCHU M, et al. Solidification microstructure simulation of Ti-6Al-4V in metal additive manufacturing: a review [J]. Additive Manufacturing, 2020, 31: 100989.

- [6] TAKAHASHI K, YAMANAKA A. Quantitative three-dimensional phase-field modeling of dendritic solidification coupled with local ensemble transform Kalman filter [J]. *Computational Materials Science*, 2021, 190: 110296.
- [7] TEFERRA K, ROWENHORST D J. Optimizing the cellular automata finite element model for additive manufacturing to simulate large microstructures [J]. *Acta Materialia*, 2021, 213: 116930.
- [8] GU C, RIDGEWAY C D, CINKILIC E, et al. Predicting gas and shrinkage porosity in solidification microstructure: a coupled three-dimensional cellular automaton model [J]. *Journal of Materials Science & Technology*, 2020, 49: 91–105.
- [9] ZHANG A, DU J L, GUO Z P, et al. Evolution of specific interface area during solidification: A three-dimensional thermosolutal phase-field study [J]. *Computer Physics Communications*, 2021, 267: 108042.
- [10] BERGER R, APEL M, LASCHET G. An analysis of the melt flow permeability for evolving hypoeutectic Al-Si mushy zone microstructures by phase field simulations [J]. *Materialia*, 2021, 15: 100966.
- [11] YU Y F, LI Y, LIN F, et al. A multi-grid cellular automaton model for simulating dendrite growth and its application in additive manufacturing [J]. *Additive Manufacturing*, 2021, 47: 102284.
- [12] MOHEBBI M S, PLOSHIKHIN V. Implementation of nucleation in cellular automaton simulation of microstructural evolution during additive manufacturing of Al alloys [J]. *Additive Manufacturing*, 2020, 36: 101726.
- [13] RODGERS T M, MOSER D, ABDELJAWAD F, et al. Simulation of powder bed metal additive manufacturing microstructures with coupled finite difference-Monte Carlo method [J]. *Additive Manufacturing*, 2021, 41: 101953.
- [14] SUNNY S, YU H L, MATHEWS R, et al. Improved grain structure prediction in metal additive manufacturing using a dynamic kinetic monte carlo framework [J]. *Additive Manufacturing*, 2021, 37: 101649.
- [15] PARK J, KANG J H, OH C S. Phase-field simulations and microstructural analysis of epitaxial growth during rapid solidification of additively manufactured AlSi10Mg alloy [J]. *Materials and Design*, 2020, 195: 108985.
- [16] LIU S Y, SHIN Y C. Thermodynamically consistent phase-field modeling of competitive polycrystalline growth of beta grains during additive manufacturing of Ti6Al4V [J]. *Journal of Crystal Growth*, 2021, 564: 126112.
- [17] LIU S Y, SHIN Y C. Integrated 2D cellular automata-phase field modeling of solidification and microstructure evolution during additive manufacturing of Ti6Al4V [J]. *Computational Materials Science*, 2020, 183: 109889.
- [18] LIAN Y P, GAN Z T, YU C, et al. A cellular automaton finite volume method for microstructure evolution during additive manufacturing [J]. *Materials and Design*, 2019, 169: 107672.
- [19] ZHOU X W, KARNESKY R A, YANG N, et al. Kinetic monte carlo simulations of structural evolution during anneal of additively manufactured materials [J]. *Computational Materials Science*, 2020, 179: 109605.
- [20] RODGERS T M, MADISON J D, TIKARE V. Simulation of metal additive manufacturing microstructures using kinetic monte carlo [J]. *Computational Materials Science*, 2017, 135: 78–89.
- [21] LIU P W, WANG Z, XIAO Y H, et al. Integration of phase-field model and crystal plasticity for the prediction of process-structure-property relation of additively manufactured metallic materials [J]. *International Journal of Plasticity*, 2020, 128: 102670.
- [22] KARAYAGIZ K, JOHNSON L, SEEDE R, et al. Finite interface dissipation phase field modeling of Ni-Nb under additive manufacturing conditions [J]. *Acta Materialia*, 2020, 185: 320–339.
- [23] MU Z L, GUO Z P, LIN Y H. Simulation of 3-D lithium dendritic evolution under multiple electrochemical states: a parallel phase field approach [J]. *Energy Storage Materials*, 2020, 30: 52–58.
- [24] GREENWOOD M, SHAMPUR K N, OFORI-OPOKU N, et al. Quantitative 3D phase field modelling of solidification using next-generation adaptive mesh refinement [J]. *Computational Materials Science*, 2018, 142: 153–171.
- [25] TONKS M R, GASTON D, MILLETT P C, et al. An object-oriented finite element framework for multiphysics phase field simulations [J]. *Computational Materials Science*, 2012, 51: 20–29.
- [26] TEGELER M, SHCHYGLO O, KAMACHALI R D, et al. Parallel multiphase field simulations with open phase [J]. *Computer Physics Communications*, 2017, 215: 173–187.
- [27] GUYER J E, WHEELER D, WARREN J A. FiPy: partial differential equations with python [J]. *Computing in Science & Engineering*, 2009, 11 (3) : 6–15.
- [28] KLEIVEN D, AKOLA J. Precipitate formation in aluminium alloys: multi-scale modelling approach [J]. *Acta Materialia*, 2020, 195: 123–131.
- [29] DEWITT S, RUDRARAJU S, MONTIEL D, et al. PRISMS-PF: a general framework for phase-field modeling with a matrix-free finite element method [J]. *npj Computational Materials*, 2020, 6: 29.
- [30] AAGESEN L K, ADAMS J F, ALLISON J E, et al. PRISMS: an integrated, open-source framework for accelerating predictive structural materials science [J]. *JOM*, 2018, 70 (10) : 2298–2314.
- [31] DEWITT S, SOLOMON E L S, NATARAJAN A R, et al. Misfit-driven precipitate composition and morphology in Mg-Nd alloys [J]. *Acta Materialia*, 2017, 136: 378–389.

- [32] ECHEBARRIA B, FOLCH R, KARMA A, et al. Quantitative phase-field model of alloy solidification [J]. *Physical Review E*, 2004, 70: 061604.
- [33] SAKANE S, TAKAKI T, ROJAS R, et al. Multi-GPUs parallel computation of dendrite growth in forced convection using the phase-field-lattice Boltzmann model [J]. *Journal of Crystal Growth*, 2017, 474: 154–159.
- [34] KIMURA T, NAKAMOTO T. Microstructures and mechanical properties of A356 (AlSi7Mg0.3) aluminum alloy fabricated by selective laser melting [J]. *Materials and Design*, 2016, 89: 1294–1301.
- [35] ZHANG J, WU L M, ZHANG Y, et al. Phase field simulation of dendritic microstructure in additively manufactured titanium alloy [J]. *Metal Powder Report*, 2019, 74 (1) : 20–24.
- [36] CAO L, ZHANG L, MENG R F, , et al. Analyzing effects of temperature gradient and scan rate on metal additive manufacturing microstructure by using phase field-finite element method [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2022, 30: 034003.
- [37] 王磊. 2A14铝合金激光焊接熔池微观组织演变相场法研究 [D]. 南京: 南京航空航天大学, 2018.

Prediction of Three-Dimensional Microstructure of Binary Alloys Under Metal Additive Manufacturing Conditions by Phase Field Method-Finite Element Method

CAO Liu¹, MENG Rui-fan¹, ZHANG Qin-dan¹, ZHANG Luo²

(1. Institute for Systems Rheology, School of Mechanical and Electrical Engineering, Guangzhou University, Guangzhou 510006, Guangdong, China; 2. School of Mechanical Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100089, China)

Abstract:

In this paper, a simulation study of A356 aluminum alloy MAM process was carried out based on the phase field method-finite element method computational architecture provided by the open-source phase field method code PRISMS-PF. The effects of process parameters (temperature gradient and scan rate) and initial solid-phase morphology on solute concentration, primary dendrite arm space and grain morphology were calculated and analyzed, and the phenomena of microscopic segregation, grain competition growth and secondary dendrite arms were reproduced and compared with experimental results for verification. Comparing the predicted results for different process parameters, it was found that the primary dendrite arm space increased as the product of temperature gradient and scan rate decreased, while the grain morphology gradually changed from plane crystal to cellular crystal, columnar crystal and dendrite as the ratio of the temperature gradient to scan rate decreased. Comparing the predicted results for different initial solid-phase morphologies, it was found that when the ratio of the temperature gradient to scan rate was small, i.e., the larger the composition overcooling zone at the front of the liquid-solid interface, the more obvious the effect of the non-flat initial solid-phase morphology on the growth process of the grains.

Key words:

metal additive manufacturing; phase field method-finite element method; temperature gradient; scan rate; primary dendrite arm space