

文章编号:1000-582x(2001)02-0024-04

双辊连铸薄带凝固组织仿真模拟的微观模型

侯仕东, 彭晓东, 杨明波, 潘复生

(重庆大学机械工程学院, 重庆 400044)

摘要: 在研究双辊薄带连铸工艺凝固过程的基础上, 运用金属凝固的基本原理, 并用现代计算机仿真技术建立了双辊连铸薄带凝固的形核、枝晶尖端的生长动力学、柱状晶向等轴晶生长的转变(CET)的解析模型及仿真模型, 为双辊连铸薄带凝固组织形成的仿真模拟奠定了基础。

关键词: 双辊薄带连铸; 仿真模拟; 微观模型

中图分类号: TG 249.7

文献标识码: A

双辊薄带连铸技术是冶金及材料领域内的一项前沿技术, 其特点为: 简化生产工序, 缩短生产周期, 减少设备投资, 降低生产成本, 具有巨大的技术和经济潜力。近十多年里该技术取得了许多重大进展, 但仍然未达到工业化生产的要求, 主要问题薄带质量不稳定, 而薄带的凝固组织是影响薄带质量的关键因素。目前国内外还不能定量地阐明双辊薄带连铸中各种工艺条件对薄带凝固组织的影响和等轴晶区的生成机制。以往对于双辊薄带凝固组织的研究主要采用实验方法得到特定条件下的凝固组织, 没有把传输过程的宏观模型与显微组织形成的微观模型结合起来进行组织的预测。针对这一情况, 笔者在宏观温度场模拟的基础上, 建立相应的形核模型、枝晶尖端的生长动力学模型、柱状晶向等轴晶的转变(CET)模型, 并借鉴单元自动机 CA(Cellular Automation)模型, 建立了薄带凝固组织形成的仿真模型, 为薄带凝固组织的计算机仿真及组织的定量预测奠定基础^[1,2]。

1 双辊薄带连铸的凝固过程

在双辊薄带连铸过程中, 当液态金属浇入一对反向旋转的水冷结晶辊之间时, 受水冷结晶辊的激冷作用, 在表面形核, 产生大量的结晶晶核, 这些结晶晶核的迅速繁衍和生长, 在双辊表面形成一薄层细等轴晶区。由于双辊表面具有一定的强制热流, 随着凝固的不断进行, 晶核在与热流相反的方向上发生择优生长,

柱状晶形成并开始生长。随着液相温度不断降低, 界面前沿的过冷区不断增大, 当柱状晶生长前沿的液相温度达到体积内部形核温度时, 中心等轴晶形核, 此时柱状晶和等轴晶共同生长。随着凝固过程的进一步进行, 当柱状晶生长前沿的中心等轴晶的固相体积率达到临界值, 或等轴晶的尺寸达到足以阻碍柱状晶生长时, 柱状晶停止生长, 并发生柱状晶向等轴晶的转变, 只有等轴晶生长, 直到凝固结束。这种情况下薄带的凝固组织除有表层细等轴晶以外, 还有柱状晶和中心等轴晶。如果在柱状晶的生长过程中, 其生长前沿根本就不具备体积内部形核条件或即使有体积内部形核发生, 但在凝固结束前, 中心等轴晶的固相体积率小于临界值或其尺寸非常小, 柱状晶就会将中心等轴晶吞并, 形成没有中心等轴晶区的薄带凝固组织。介于上述两种情况之间的是中心等轴晶的尺寸既不能大到阻碍柱状晶的生长, 而又不至于小到被柱状晶吞并, 在这种情况下, 就会形成具有混晶结构的薄带凝固组织。

由于表层细等轴晶区很薄, 在微观模拟中, 认为液态金属在双辊表面受到激冷而形核, 然后沿最大热流方向直接开始柱状晶的生长, 忽略了表层等轴晶的影响。

2 双辊连铸薄带凝固组织形成的解析模型

双辊连铸薄带凝固组织形成的解析模型包括形核模型、枝晶尖端的生长动力学模型、柱状晶向等轴晶的转

• 收稿日期: 2000-10-20

基金项目: 国家自然科学基金(59995440), 重庆市科委应用基础研究资助项目

作者简介: 侯仕东(1975-), 男, 四川阆中人, 重庆大学硕士生。主要从事材料加工工程的研究。

变(CET)模型。

2.1 形核模型

采用 Rappaz 提出的连续形核模型^[3~5],该模型考虑了形核过冷度的影响和形核的连续性,具有较强的实用性。该模型的基本假设为:1)忽略枝晶破碎和液相表面氧化等形成的核心对形核的影响;2)忽略液相流动对凝固形核的影响。根据 Rappaz 的连续形核模型,在给定过冷度下,形核总数是形核分布函数的积分,其数学表达式如下:

$$n(\Delta T) = \int_0^{\Delta T} \frac{dn}{d(\Delta T)} d(\Delta T) \quad (1)$$

$$\frac{dn}{d(\Delta T)} = \frac{N_s}{\sqrt{2\pi}\Delta T_0} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta T - \Delta T_N}{\Delta T_0}\right)^2\right] \quad (2)$$

式中: $n(\Delta T)$ —过冷度 ΔT 时的晶核密度, $\Delta T = T_L - T$ (T_L 为液相线温度); N_s —总的初始形核质点密度; $\Delta T_N, \Delta T_0$ —合金的最大形核过冷度和标准方差过冷度。

式中 $N_s, \Delta T_N, \Delta T_0$ 可由差热分析(DTA)实验确定。双辊表面形核和液相内部体积形核分别采用两种不同的形核分布函数(如图 1)来处理,形核模型的建立主要是为了计算形核密度 $n(t)$ 。

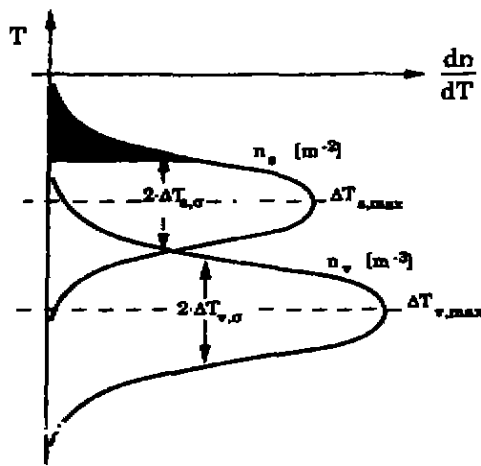


图 1 表面和液相体积内部不同的分布函数

2.2 枝晶尖端的生长动力学模型

枝晶的生长主要由枝晶尖端的生长速率决定,枝晶生长模型的关键是确立枝晶尖端的生长速率与枝晶尖端过冷度的关系,枝晶尖端的过冷度对柱状晶的生长速率以及柱状晶生长前沿等轴晶的形核、生长具有重要的影响。

枝晶的凝固形态主要由溶质扩散和界面张力控制,在低的凝固速率条件下,溶质扩散引起的成份过冷

在枝晶生长过程中起主要作用,凝固在平衡状态下进行;随着凝固速率的提高,进入中等生长速率范围,由于枝晶间距及枝晶尖端半径的减小,曲率效应变成了制约因素,但在这个速率范围内凝固界面的溶质原子迁移仍能达到平衡,但液相内部的扩散不能充分进行,处于近平衡凝固状态,当凝固速率进一步增大,进入快速凝固速率范围,枝晶间距及枝晶尖端的半径进一步减小,曲率效应的作用更加明显,液相中的溶质原子来不及充分扩散,凝固界面上的溶质原子迁移偏离平衡,凝固在非平衡状态下进行。

KGT 模型常用于描述合金快速凝固过程中强制性枝晶尖端的生长,该模型是在纯扩散条件下用 Ivanstov 方法求解枝晶尖端的浓度场并与稳定性判据相结合的基础上建立的,模型中枝晶尖端的过冷度由成份过冷度 ΔT_C , 曲率过冷度 ΔT_R 以及动力学过冷度 ΔT_K 组成,并且枝晶的快速生长使凝固在非平衡状态下进行,从而使平衡分配系数 K , 液相中溶质的扩散系数 D_L 等发生变化,这些在 KGT 模型中均能反映出来,而双辊薄带连铸过程是一个亚快速凝固过程(冷却速度大约为 $10^2 \text{ }^\circ\text{C/s}$),它既不同于凝固速率较慢的常规铸造过程(冷却速度约为 $10^{-2} \sim 10^0 \text{ }^\circ\text{C/s}$),也不同于急冷快速凝固过程(冷却速度大于 $10^4 \text{ }^\circ\text{C/s}$),并且它还具有定向凝固的一些特性,在考虑了这些因素并根据假设:1) 枝晶尖端的形状为旋转抛物状;2) 枝晶间液相完全混合,忽略固相中的溶质扩散;3) 忽略液相对流对稳定性常数 σ^* 的影响。对 KGT 模型进行修正,然后用其来描述双辊薄带凝固过程中枝晶的生长。在双辊薄带凝固过程中,枝晶的生长速率位于中等生长速率范围,相对于快速凝固其生长速率也不是很高,而合金的动力学系数很大,因此可以忽略枝晶尖端的动力学过冷度。此外,由于凝固在近平衡状态下进行,可以认为合金的平衡分配系数 K 、液相中溶质的扩散系数 D_L 等为不变的常数。修正之后的 KGT 模型如下:

$$\Delta T = T_L - T^* = \Delta T_C + \Delta T_R$$

$$\Omega = Iv(pc)$$

$$R = \sqrt{\frac{\Gamma}{(mG_C\xi_c - G)\sigma^*}} \quad (3)$$

$$V = 2D_L P_C / R$$

式中 ΔT —枝晶尖端的过冷度;

T_L —合金的液相线温度;

T^* —枝晶尖端的温度;

ΔT_C —成份过冷度,

$$\Delta T = m(c^* - c_0) \quad (4)$$

ΔT_R — 曲率过冷度,

$$\Delta T_R = 2\Gamma/R \quad (5)$$

c^* — 枝晶尖端液相中的溶质浓度;

m — 液相线斜率;

c_0 — 合金的成份;

Ω — 枝晶尖端液相中溶质的过饱和度,

$$\Omega = (c^* - c_0)/[c^*(1 - k)] \quad (6)$$

k — 溶质平衡分配系数;

$Iv(p_c)$ — p_c 的伊万卓夫(Ivanstov) 函数,取一级近似

$$Iv(p_c) = \frac{p_c}{1 + p_c} \quad (7)$$

p_c — 溶质浓度的贝克列(Peclet) 数;

R — 枝晶尖端曲率半径;

Γ — Gibbs-Thompson 系数;

G_C — 枝晶尖端液相中溶质的浓度梯度,

$$G_C = - \frac{V_\infty(1 - k)}{D_L[1 - (1 - k)\Omega]} \quad (8)$$

ξ_c — P_c 的函数,

$$\xi_c = 1 - \frac{2k}{[1 + (2\pi/p_c)^2]^{1/2} - 1 + 2k} \quad (9)$$

G — 枝晶尖端的平均温度梯度,在定向凝固过程中 G 主要由外部热流决定;

D_L — 液相中溶质的扩散系数;

V — 枝晶尖端的生长速率。

在已知枝晶尖端的过冷度条件下,求解方程组(3)就可以得到在该过冷度下枝晶尖端的生长速率、尖端的曲率半径。修正后的 KGT 模型可同时用来描述双辊薄带连铸过程中柱状枝晶和等轴枝晶的尖端生长速率和形态变化,如果凝固组织为柱状晶,其一次轴长度为 L_{com} ;如果凝固组织为等轴晶,其生长半径为 R_c , L_{com} 和 R_c 可以分别表示如下:

$$L_{com} = \int_0^t V_{com} dt \quad (10)$$

$$R_c = \int_0^t V_c dt \quad (11)$$

式中 t 为凝固时间, V_{com} 为柱状枝晶尖端的生长速率, V_c 为等轴枝晶尖端的生长速率。

2.3 柱状晶向等轴晶的转变(CET) 模型

柱状晶生长前沿的液相温度达到体积内部形核温度 T_i 时,就会发生体积内部形核,由 Hunt 提出的判据知:在随后的凝固过程中,有可能发生 CET 转变,出现中心等轴晶,其数学表达式为:

$$f_i(t) \geq f_1 \quad (12)$$

出现混晶组织的数学表达式为:

$$f_2 < f_i(t) < f_1 \quad (13)$$

没有中心等轴晶,仅为柱状晶的数学表达式为:

$$f_i(t) \leq f_2 \quad (14)$$

式中 $f_1 = 0.49, f_2 = 0.0049, f_i(t)$ 为某一时刻柱状晶前沿等轴晶的固相分数,它的大小与形核密度 $n(t)$ 、晶粒尺寸 $R_c(t)$ 及等轴晶粒的内部固相体积率 $f_i(t)$ 有关,可表示为:

$$f_i(t) = n(t) \cdot \frac{4}{3} \pi R_c^3(t) \cdot f_i(t) \quad (15)$$

式中 $n(t)$ 和 $R_c(t)$ 由形核、生长模型计算,而 $f_i(t)$ 则可以表示为:

1) 液相中存在扩散边界层 $\delta = 2D_L/V_c$ 时

$$f_i(t) = \Omega f(p_c) \quad (16)$$

$$f(p_c) = 1 + \frac{3}{2p_c} + \frac{1}{p_c^2} + \frac{1}{4p_c^3} \quad (17)$$

2) 液相完全混合时:

$$f_i(t) = \Omega \quad (18)$$

上述(1) ~ (18) 方程式就构成了双辊薄带连铸过程中柱状晶和等轴晶竞争生长模型的全部控制方程,对这些方程按一定的算法求解,就能够实现对柱状晶长度的定量计算,以及工艺操作条件变化对柱状晶长度影响的定量计算。

3 双辊连铸薄带凝固组织形成的仿真模型

在确定性的竞争生长模型的基础上,借鉴 Rappaz 的单元自动生成机制 CA(Cellular Automaton) 模型

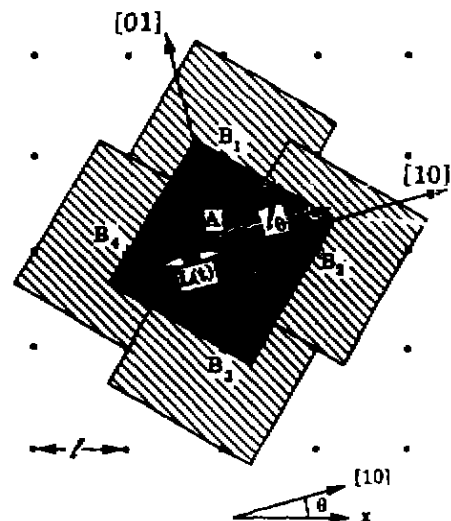


图 2 单元自动生成模型示意图

(其示意图如图2所示),就可以实现双辊薄带凝固组织形成的动态显示。仿真模型描述如下。

把双辊薄带凝固过程的横断面划分为许多规则(一般为四边形或六边形)的微观网格单元(Cells),假定每个微观网格单元在生长过程中有自己的属性(液态或固态),并标出每个微观网格单元的最相邻单元、次相邻单元,单元的形核采用蒙特卡罗过程,即:如假定宏观网格单元在单位时间内形核 Δn ,此时有 N 个微观网格单元是液态,则每个微观网格单元成为核心的概率是 $P = \Delta n/N$,对每个微观网格单元产生一个随机数 $r(0 < r < 1)$,当 $r < p$ 时,此微观网格单元就成为核心,并开始生长。在图2所示的单元自动生成模型中,设 A 点为 t_N 时刻结晶形核的一个微观网格单元,在其形核之后就生长,假设其生长方向与 x 轴成 θ 角(随机选取 $-45^\circ < \theta < 45^\circ$),当生长到 t 时刻,晶粒的半径如图2中阴影四边形的半对角线长 $L(t)$,

且 $L(t) = \int_{t_N}^t V(\Delta T) dt$, $V(\Delta T)$ 为枝晶尖端的生长速率,其计算由生长模型实现,到 t_B 时刻,如果 A 结点形核长大的四方形晶粒接触到四个相邻单元 B_1 、 B_2 、 B_3 、 B_4 ,此时晶粒半对角线长 $L(t_B) = l_s = l[\cos\theta + \sin\theta]$, (l 为微观网格单元间距),判定 B_1 、 B_2 、 B_3 、 B_4 四个微观网格单元凝固,并作出标记,其后 B_1 、 B_2 、 B_3 、 B_4 四个微观网格单元结点继续长大,捕获其周围

的微观网格单元,依次类推,直到全部微观网格单元全部成为固态,凝固结束。

4 结论

在宏观温度场模拟的基础上,结合形核模型、枝晶尖端的生长动力学模型、CET转变模型和单元自动生成机制CA(Cellular Automaton)模型,并运用一定的计算机处理技术,就能够实现双辊薄带凝固过程的动态显示,直观地显示出工艺因素的变化对薄带凝固组织区的影响,从而为双辊薄带凝固组织的预测及质量控制提供理论依据。

参考文献:

- [1] 潘复生,周守则.快速凝固钢带的研究现状和发展前景[J].材料导报,1993,(1):16-21.
- [2] 梁晓平.双辊薄带连铸过程的数学模型及工艺控制研究[D].重庆:重庆大学,1996.
- [3] RAPPAZ M. Probabolic Modelling of Microstructure Formation In Solidification Process[J]. Acta metall mater, 1993, (2):345-360.
- [4] 胡汉起.金属凝固原理[M].北京:机械工业出版社,1991.
- [5] KURZ W, GIOVANOLA B. Theory Of Microstructural Development During Rapid Solidification [J] Acta metall, 1986, (5):823-830

Micromodel of Computer Emulational Simulation on Twin-roll Casting Strip Solidification Structure

HOU Shi-dong, PENG Xiao-dong, YANG Ming-bo, Pan Fu-sheng

(College of Mechanical Engineering, Chongqing University, Chongqing 400044, China)

Abstract: Based on the research on the solidification of twin-roll casting strip, the analytical model and emulational model of nucleation, the growth of dendrity tip and colunar dendrity transformation to equiaxis dendrity (CET) of twin-roll casting strip solidification are established by means of the principle of metal solidification and modern computer emulational technology. The foundation for the emulational simulation of twin-roll casting strip solidification structure is laid.

Key words: twin-roll casting strip; emulational simulation; micromodel

(责任编辑 成孝义)