文章编号:1000-582X(2011)09-061-06

连铸坯凝固晶粒生长的元胞自动机模型

陈登福a,b,宋立伟a,王启明b,陈缦丽b

(重庆大学 a. 材料科学与工程学院;b. 重庆市冶金工程重点实验室,重庆 400044)

摘 要:首次将元胞自动机(Cellular Automata, CA)方法和有限差分法结合起来,建立了连铸 坯凝固时内部等轴晶和柱状晶的随机形核和晶粒生长模型。结合某钢厂实际生产情况,对实际工 况下连铸坯凝固组织进行模拟,再现了连铸坯内部组织的演变规律,发现晶粒呈现等轴晶-柱状晶-等轴晶的转变,以及不同工艺制度下3个晶层的厚度情况,表面激冷层和中心等轴晶层厚度随拉速 增加而减小,随下钢水过热度降低而增大,但柱状晶层厚度却随拉速和钢水过热度的增加而增加。 仿真结果对晶粒的随机形核、晶粒的择优生长、竞争生长以及晶粒的随机取向都有比较好的体现。

关键词:连铸坯;组织模拟;元胞自动机;柱状晶;等轴晶中图分类号:TF777.1文献标志码:A

Grain growth of continuous casting slab solidification based on cellular automata model

CHEN Deng-fu^{a,b}, SONG Li-wei^a, WANG Qi-ming^b, CHEN Man-li^b

(a. College of Materials Science and Engineering; b. Chongqing Provincial Key Laboratory of Metallurgical Engineering, Chongqing University, Chongqing 400044, P. R. China)

Abstract: The cellular automaton (CA) method is coupled with finite difference method to establish a stochastic nucleation and growth model. According to the actual production conditions, the solidification structure of continuous casting slab is simulated and the evolution law of the inner structure is reconstructed. It is showed that grain transformation is from equiaxed crystal to columnar crystal and then to equiaxed crystal. Thickness of three crystal layers are different in various production technological systems, thickness of surface equiaxed crystal and inner equiaxed crystal are reduced, and the results of the columnar crystal thickness are contrary, while casting speed and superheat are increasing. The results show well agreement with the stochastic nucleation, preferred growth, competitive growth and random orientation of grain.

Key words: continuous casting slab; microstructure simulation; cellular automation; exquiaxed cystal; columnar crystal

收稿日期:2011-04-21

基金项目:国家自然科学基金资助项目(50774105);高等学校博士点科研基金资助项目(20090191110012)

作者简介:陈登福(1963-),男,重庆大学教授,博士生导师,主要从事钢冶金、连铸与精炼、过程系统仿真与优化、资源综合利用与环保等的研究,(Tel)023-65102467;(E-mail)chendfu@cqu.edu.cn。

62

金属结晶后形成的组织,包括各种相的晶粒形 状、大小和分布等,将极大地影响到金属的加工性能 和使用性能,对于连铸坯,其凝固微观组织对其力学 性能有重要影响,并且直接关系到它的轧制和锻压 工艺等^[1-3]。凝固过程的计算机数值模拟研究发展 迅速,主要针对宏观温度场、流场、热应力场的计算 及优化生产工艺,并预测和防止宏观缺陷等^[4-6]。依 据液态金属的凝固及组织形成机理,金属凝固微观 组织数值模拟的数学物理模型主要包括形核模型、 生长模型和溶质扩散模型。目前国内外常用的数值 模拟方法有3种:确定性模型、概率模型和相场模 型。笔者则是应用基于元胞自动机的随机性模型对 连铸坯的凝固过程进行数值模拟^[2,7]。

最初的形核和生长模型一般采用确定性模型。 20世纪60年代以后开始^[8-10],冶金学家随着组织模 拟的深入研究相继提出了连续形核模型、瞬时形核 模型和晶粒生长概率模型。Srolovitz等人发展了 Monte Carlo技术后用其模拟了晶粒尺寸分布函数。 90年代 Gandin 和 Rappaz提出综合确定性模型和 概率模型后提出 CA 模型^[10]。我国对于凝固过程的 数值模拟起步较晚但发展迅速。清华大学柳百成和 许庆彦等人采用 CA 模型与宏观传热相耦合,对铸 造 Al-7%Si 合金的微观组织进行了模拟计算^[12]。 中国科学院金属研究所的李强等人用 CA 方法模拟 凝固组织,采用有限差分方法模拟凝固过程中的热 传导、溶质扩散及动量传输过程等^[13-14]。

目前国内外针对连铸坯的凝固过程数值模拟的 研究较少,笔者应用元胞自动机模拟对连铸坯的凝 固过程进行数值模拟,研究连铸坯内部组织的演变 规律,晶粒的转变情况,以及不同工艺状况下各晶层 所占的比例,为优化连铸生产工艺提供有力依据。

1 凝固组织数学模型

1.1 晶粒形核模型

采用 Rappaz 等人^[9,15]提出的连续形核模型,假 设形核现象发生于一系列不同的形核位置上,形核 密度的变化 $\frac{dn}{d(\Delta T')}$ 满足某一概率分布。若这种分 布符合高斯分布,则有下式:

$$n(\Delta T) = \frac{n_{\max}}{\sqrt{2\pi}\Delta T_{\sigma}} \int_{0}^{\Delta T} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\Delta T' - \Delta T_{\max}}{\Delta T_{\sigma}}\right)^{2}\right] d(\Delta T'),$$
⁽¹⁾

式中: ΔT_{max} 为最大形核过冷度; ΔT_{σ} 为标准方差过 冷度; n_{max} 为最大形核密度。

在计算中,采用两套 ΔT_{max} 、 ΔT_{σ} 、 n_{max} 参数值分

别计算铸坯表面和内部液相中的形核,以区别表面和内部液面所具有的不同形核能力。另外,考虑到 长大的晶粒占据形核位置使得可以形核的位置逐渐 减少,可对形核基底分布函数乘上一个因子 1-f_s, f_s为固相率,如下所示:

$$n(\Delta T) = \frac{n_{\max}}{\sqrt{2\pi}\Delta T_{\sigma}} \int_{0}^{\Delta T} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\Delta T' - \Delta T_{\max}}{\Delta T_{\sigma}}\right)^{2}\right] \cdot \left[1 - f_{s}(\Delta T')\right] d(\Delta T'), \quad (2)$$

在一个时间步长 δt 中,试样温度减少 δT ,过冷度增加了 $\delta(\Delta T)$,因此新晶核密度为:

$$\delta_n = \int_{\Delta T}^{\Delta T + \delta(\Delta T)} \frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}(\Delta T')} \mathrm{d}(\Delta T'), \qquad (3)$$

晶核密度的增加量与试样体积相乘,得到在 δt 时间 内生成的晶核数 δN_v ,试样的整个单元数为 N_{CA} ,确 定随机数 $P_{v:}$

$$P_{\rm v} = \frac{\delta N_{\rm v}}{N_{\rm CA}} = \delta n_{\rm v} V_{\rm CA} \tag{4}$$

式中 V_{CA}为每个晶胞单元的体积。在一个时间步长 内,试样中每个单元中产生一随机数 r(0 < r < 1),当 r < P_{*}时,该单元开始形核。

1.2 晶粒生长模型

建立枝晶生长动力学模型是进行晶粒生长模拟的关键,通常认为,凝固过程中枝晶尖端过冷度 ΔT 由 4 部分组成:

 $\Delta T = \Delta T_{e} + \Delta T_{t} + \Delta T_{k} + \Delta T_{r}, \quad (5)$ 式中: ΔT_{e} 为成分过冷度; ΔT_{t} 为热过冷度; ΔT_{k} 为 动力学过冷度; ΔT_{r} 为曲率过冷度, $\Delta T_{r} = \frac{2\Gamma}{R}, R$ 为 枝晶尖端半径, Γ 为 Gibbs-Thomson 系数。

在枝晶生长过程中,枝晶尖端液相中溶质富集, 有较大的浓度梯度,从而产生较大的成分过冷 ΔT_{e} , 热过冷度 ΔT_{t} 和动力学过冷度 ΔT_{k} 一般较小,忽略 不计。因此,枝晶尖端过冷度主要取决于成分过冷 度,另外,在形核和生长初期还受曲率过冷度的影 响。枝晶尖端过冷度、枝晶尖端半径和尖端生长速 度采用 KGT 模型^[16]计算。

$$\Omega = \frac{C' - C_0}{C'(1 - K)} = I_v(P_c), \qquad (6)$$

$$R = 2\pi \sqrt{\left[\frac{\Gamma}{mG_{c}\xi_{c} - G}\right]},\tag{7}$$

$$P_{\rm c} = \frac{R_{\rm v}}{2DL},\tag{8}$$

$$\Delta T_{\rm c} = mC_0 \left[1 - \frac{1}{1 - \Omega(1 - K)} \right], \qquad (9)$$

式中:Ω为枝晶尖端溶质饱和度;C′为枝晶尖端液相 溶质浓度,可通过具体的溶质计算得到;k 为溶质分 第9期

配系数; P_c 为溶质 Peclet 数; I_v 为 Ivantsov 函数; $I_v(x) = x \cdot e^x E_i(x)$,其中 $E_i(x)$ 为指数积分符号, $E_i(x) = \int_{-\infty}^x \frac{e^y}{y} dy$; G_c 为浓度梯度; G 为温度梯度; m 为液相线斜率; v 为直径生长速度; ξ_c 是 P_c 的函数,在缓慢生长条件下, $\xi_c \approx 1$,当 P_c 较大时 $\left(P_c > \frac{\pi^2}{\sqrt{K}}\right)$, $\xi_c \approx \frac{\pi^2}{kP^2}$ 。

2 连铸坯组织模拟

首先,将模拟对象划分成大小两套网格,模拟过 程中整个计算区域划分为*M×N*个单元,每个单元 则由*m×n*个元胞组成。大网格称为单元,用于宏 观范畴温度场计算;小网格成为元胞,用于微观范畴 组织模拟。元胞只有两种存在状态:液态和固态,将 元胞依次进行编号,每一编号对应具体元胞信息。 网格划分完后,进行单元和元胞初始化,单元固相率 为0,元胞形核质点标记为0,晶向赋值为-1,代表 液相状态。

在实际模拟过程中为满足计算精度要求,微观 网格需划分到 μm 级。考虑到铸坯的对称性和组织 生长的一般规律,在计算过程中只对铸坯中心部位 纵向 1/2 长度的温度场进行计算,微观组织模拟的 计算区域在宏观计算区域的基础上缩小为铸坯中心 横向 20 mm、纵向 80 mm,如图 1 所示。



图 1 模拟计算区域示意图

在一个时间步长内,设置一个元胞选择器,随机 不重复地选取元胞编号,根据元胞编号可提取当前 元胞及其4个相邻元胞信息,继而判断:

1)如果当前元胞过冷度 $\Delta T < 0$,则不进行形核 和生长计算,继续随机选取下一元胞。

2)如果当前元胞为液态,则对当前元胞进行形 核计算。

按照晶粒形核模型,当前元胞过冷度增加δ

 (ΔT) (前一时刻过冷度为 ΔT),晶粒密度增加量 δn 为:

$$\delta n = n [\Delta T + \delta(\Delta T)] - n [\Delta T]$$
$$= \int_{\Delta T}^{\Delta T + \delta(\Delta T)} \frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}(\Delta T')} \mathrm{d}(\Delta T') \,. \tag{10}$$

当前元胞是否形核要看其形核概率[17] P":

$$P_n = \delta n V_{\circ} \tag{11}$$

若 P_n>r,r 为一随机数(0≪r≪1),则当前元胞 形核,由液态转为固态,形成形核质点,此时需要更 新当前元胞信息:形核质点标记为 TRUE,晶向值赋 予一个随机的正整数值(0~64),枝晶臂长、枝晶尖 端半径的初始化为 0。

3)如果当前元胞为形核质点,则对该形核质点 所代表的晶粒进行生长计算。



图 2 晶粒生长原理图

如图 2 所示,先捕捉到 4 个枝晶尖端所在的元 胞,利用 KGT 模型,可得到当前时刻 4 个枝晶尖端 半径 R_1 , R_2 , R_3 , R_4 和生长速度 v_1 , v_2 , v_3 , v_4 ,然后 可以求出在一个时间步长 δt 内枝晶臂长增长量及 伸长度。

4)如果当前元胞为固态并且4个相邻元胞为液态,则判断这些相邻液相元胞能否被当前元胞所在的晶粒捕捉。

设当前元胞所在的晶粒为 A,可提取 A 晶粒相 关信息:4 个枝晶臂长,4 个枝晶尖端半径,形核质点 坐标。另外,对晶粒 A,晶向角度 θ:

$$\theta = \frac{1}{2} \cdot q \cdot \frac{\pi}{Q} - \frac{\pi}{4}, q \in [0, Q], \quad (12)$$

式中:Q为可取的晶向总数;q为代表晶粒晶向的 整数。

3 模拟结果及讨论

笔者针对国内某钢厂实际连铸坯生产工艺情况 进行仿真计算,铸坯尺寸为160 mm×1 250 mm。 模拟区域温度场宏观计算单元尺寸为 5 mm× 5 mm,CA 微观计算单元尺寸为 50 μm×50 μm,CA 算法网格划分比较细小,内嵌循环较多,一般计算机 完成一次成功的运算过程需要近 65 h。由于连铸工 艺的变化会对连铸坯组织的最终形成产生不同影 响,为了了解不同工艺条件下的铸坯组织生长情况, 结合实际连铸生产过程中 3 个比较有代表性的工况 进行了计算,如表 1。

算例	拉速 /(m・min ⁻¹)	过热度 /℃		
算例1	1.0	25		
算例 2	1.0	30		
算例3	1.2	25		

表1 3个算例的实验数据

图 3 为铸坯在算例 1 对应连铸工艺状况下模拟 得到的组织演变示意图。



图 3 算例 1 计算区域的组织演变图

从图 3(a)中可以看出,连铸坯表面由于靠近结 晶器,其表层区域在结晶器激冷作用下,温度迅速下 降瞬间产生了大量晶核,这些晶核由于生长空间比 较少,很快便相互接触无法生长,形成了表层等轴晶 区。如图 3(b)所示,在细小等轴晶前沿出现了等轴 晶向柱状晶的转变,柱状晶以一定速度向铸坯中心 生长,优先生长方向<10>,与热流方向相反的晶粒 生长很快,体现了晶粒的择优生长。这些柱状晶在 继续长大的过程中基本保持了其尖端的抛物线形 状,但是由于晶粒的竞争生长在有限的横向空间里, 很快这些柱状晶就碰撞到一起填满了横向生长 空间。

从图 3(c)可以看出,伴随柱状晶的逐渐生长,其

形貌也发生变化,由最初的枝晶抛物线形貌逐步演 变成了柱状,但其前沿依然保持着抛物线形貌稳定 向前推进。同时,在柱状晶生长过程中可以找到由 于晶粒竞争生长所留下的痕迹,如图中用椭圆圈出 来的区域所示,其中有一细小柱状晶生长过程中由 于周围柱状晶生长能力更强,被其周围柱状晶占据 生长空间,导致生长提前终止。随着柱状晶的发展, 经过结晶器、二冷区散热,铸坯中心部分液态金属的 温度全部降至熔点以下,再加上形核率的增加,满足 了形核时所需的过冷度的要求,于是在整个剩余液 相中同时形核。由于此时的散热已经失去了方向 性,晶核可以在剩余液体中自由生长,在各个方向上 的长大速度差别不大,因此即长成了中心等轴晶,如 图 3(e)、(f)体现了中心等轴晶的形核、长大过程。 对于柱状晶向中心等轴晶的转化,按照 Hunt 瞬时 形核模型[7]的解析解来进行计算,当中心等轴晶占 剩余液体的体积分数达到 0.49 时,柱状晶的生长停 止,等轴晶开始的长大过程,即发生了柱状晶向等轴 晶转变,最终的组织生长形貌如图 3(f)所示。

算例1的模拟结果很好地体现了连铸坯中间局 部区域凝固组织的演变过程。在算例2、算例3中 也得到了类似的组织演变模拟结果,其中各自对应 的组织转变图如图4和图5所示。图中(a)、(b)、 (c)3组瞬时模拟结果分别对应的是激冷层向柱状 晶生长的转变、铸坯中心出现等轴晶形核以及铸坯 凝固的最终结果。另外,由于目前研究工作最关心 的是工艺情况的变化对凝固组织各晶区所占比例的 影响。因此,对3组算例模拟得到的激冷层、柱状晶 区和等轴晶区3个晶区在纵向所对应的长度总结到 表2中,具体各区的长度值均近似取为整数值。



第9期



图 5 算例 3 对应的组织演变

表 2 3 个算例下各晶区长度

长度/mm	算例1	算例 2	算例 3
激冷层	5	2	3
柱状晶区	60	65	68
中心等轴晶	15	13	9

3个算例由于工艺状况的差别,模拟结果的差 别相应有所不同,最直观地表现在各晶区所占比例 上有一定差别。结合表 2 中结果可以看出,算例 1 的表面激冷层长度要明显大于另外两个算例中的结 果。这是由于在算例1的工况条件下,对应的钢水 过热度较低,同时铸坯在结晶器停留的时间相对要 长些,为表面激冷层的形成提供了相对较好的冷却 效果,使铸坯表层温度很快下降提高了表层液相的 形核率。算例2和算例3由于拉速和过热度均为影 响铸坯表面温降速度的因素,虽然算例2的过热度 比算例3要大,但其对应的铸坯在结晶器停留时间 要长,因此两个算例的表层晶区长度差别不大。进 入柱状晶生长区域,柱状晶的生长主要受铸坯内部 过冷度的影响,过冷度越大越有利于柱状晶的生长。 由于算例3拉速最大对应的二冷强度最大,出结晶 器后铸坯内部温降最快晶粒生长速度快,因此算 例 3的柱状晶最发达对应的柱状晶/等轴晶的比值 也最大。算例2由于对应的浇注过热度比算例1要 高,而其他工艺参数无任何变化,因此算例2的温度 降低的速度要比算例1相对慢一些,导致其铸坯中 心区域温度下降到形核过冷度以下也相应延迟,铸 坯中心出现等轴晶的时间比较晚,柱状晶生长速度 虽然慢些,但是有足够的生长时间,因此算例2的柱 状晶虽然比算例1的过热度大,但是其柱状晶要发 达柱状晶/等轴晶的比值也相应比较大。

综合以上分析可得形核率与生长速度的比值是 决定组织形态(柱状晶/等轴晶转变)的重要因素,要 想获得优良的微观组织应当合理地控制两者的比 值。对于连铸生产工艺而言,合理选择拉坯速度、控 制钢水过热度对连铸坯产品性能的提高十分关键。

4 结 论

1)通过元胞自动机方法建立的连铸坯宏微观耦 合组织仿真模型,较好地再现了连铸坯内部组织的 演变规律,首先生成表层等轴晶,随后出现等轴晶向 柱状晶转变,然后柱状晶向等轴晶转变,最后生成中 心等轴晶。

2)研究认为形核率与生长速度的比值是决定组 织形态的重要因素,要想获得优良的微观组织应当 合理地控制两者的比值。对于连铸生产工艺而言, 合理选择拉坯速度、控制钢水过热度对连铸坯产品 性能的提高实践关键。

3)研究表明晶粒在生长过程中存在择优生长及 竞争生长,当其周围晶粒的生长能力超过自身生长 能力,则有可能被周围晶粒占据生长空间,使其生长 提前终止。

4)较低的拉速下,铸坯表层激冷层、柱状晶和等 轴晶的相互比例也较低,而钢水大的过热度能够增 大相互之间的这个比例,合理地控制连铸拉坯的速 度和钢水的过热度对获得优质连铸产品有重要 意义。

参考文献:

- [1] STEFANESCU D M. Solidification and modeling of cast iron-A short history of the defining moments [J]. Materials Science and Engineering A, 2005(413/414): 322-333.
- [2] GHOSH S, GABANE P, BOSE A, et al. Modeling of recrystallization in cold rolled copper using inverse cellular automata and genetic algorithms [J]. Computational Materials Science, 2009, 45(1):96-103.
- [3] 张健,陈登福,温良英,等.二次冷却和结晶器电磁搅拌 对高碳钢中心缩孔的影响[J].过程工程学报,2008, 8(s1):210-213.

ZHANG JIAN, CHEN DENG -FU, WEN LIANG -YING, et al. Effect of secondary cooling and mould electromagnetic stirring on center pipes of high-carbon steel[J]. Chinese Journal of Process Engineering, 2008, 8(s1):210-213. [4]何燕,张立文,牛静.CA法及其在材料介观模拟中的应 用[J].金属热处理,2005,30(5):45-49. HE YAN, ZHANG LI-WEN, NIU JING. Cellular

automata and its application in macroscopic simulation of material [J]. Metal Heat Treatment,2005,30(5):45-49.

- [5] GUILLEMOT G, GANDIN C A, COMBEAU H. Modeling of macrosegregation and solidification grain structures with a coupled cellular automaton-Finite element model [J]. ISIJ International, 2006, 46 (6): 880-895.
- [6]陈登福,李宏亮,牛宏波,等.方坯连铸二次冷却配水新 模型[J].重庆大学学报,2007,30(6):61-64,68.
 CHEN DENG-FU,LI HONG-LIANG,NIU HONG-BO,et al. New model for spraying water of nozzles in secondary cooling of billet continuous casting [J].
 Journal of Chongqing University, 2007, 30(6): 61-64,68.
- [7] KUGLER G, TURK R. Study of the influence of initial microstructure topology on the kinetics of static recrystallization using a cellular automata model [J]. Computational Materials Science.2006,37(3):284-291.
- [8] 邓小虎. 金属热变形及焊缝凝固过程的元胞自动机模 拟[D]. 辽宁:大连理工大学,2009.
- [9] RAGHAVAN S, SAHAY S S. Modeling the grain growth kinetics by cellular automaton [J]. Materials Science and Engineering A,2007(445/446):203-209.
- [10] IVASISHIN O M, SHEVCHENKO S V, VASILIEV N L, et al. A 3-D Monte-Carlo (potts) model for recrystallization and grain growth in polycrystalline materials[J]. Materials Science and Engineering A, 2006, 433:216-232.
- [11] GANDIN CH A, DESBIOLIES J L, RAPPAZ M, et al. Grain texture evaluation during columnar growth of dendritic alloys [J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 1999, 30(12): 3153-3162.
- [12] XU Q Y,LIU B C. Modeling of As-cast microstructure

of A1 alloy with a modified cellular automaton method[J]. Materials Transactions, 2001, 42 (11): 2316-2321.

[13] 李强,马颖澈,刘奎,等. U-6% Nb 二元合金凝固过程中 显微组织与显微偏析的模拟[J]. 金属学报,2007,43 (2):217-224.

LI QIANG, MA YING-CHE, LIU KUI, et al. Modeling of microstructure and microsegregation of U-6% Nb binary alloy during solidification process[J]. Acta Metallurgica Sinica, 2007, 43(2):217-224.

- [14] 李强,李殿中,钱百年. 元胞自动机方法模拟枝晶生长[J]. 物理学报,2004,53(10):3477-3481.
 LI QIANG, LI DIAN-ZHONG, QIAN BAI-NIAN.
 Modeling of dendritic growth by means of cellular automaton method [J]. Acta Physica Sinica, 2004, 53(10): 3477-3481.
- [15] 麻晓飞,关小军,刘运腾,等.不同尺寸二相粒子材料晶 粒长大的元胞自动机仿真[J].中国有色金属学报, 2008,18(7):1305-13011.
 MA XIAO-FEI,GUAN XIAO-JUN,LIU YUN-TENG, et al. Simulation of second phase particles with different sizes on grain growth process[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals,2008,18(7):1305-1311.
- [16] YUE C X, ZHANG L W, LIAO S L, et al. Mathematical models for predicting the anstenite grain size in hot working of GCrl5 steel[J]. Computational Materials Science, 2009, 45:462-466.
- [17] 张林,张彩碚,王元明,等. 连续冷却过程中低碳钢奥氏 体→铁素体相变的元胞自动机模拟[J]. 金属学报, 2004,40(1):8-13.

ZHANG LIN, ZHANG CAI-PEI, WANG YUAN-MING, et al. Cellular automaton modeling of the transformation from austenite to ferrite in low carbon steel during continuous cooling[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals,2004,40(1):8-13.

(编辑 王维朗)