

用元胞自动机方法模拟镁合金薄带 双辊铸轧过程凝固组织^{*}

黄 锋[†] 邱洪双 王广山

(东北大学轧制技术及连轧自动化国家重点实验室, 沈阳 110004)

(2009 年 1 月 16 日收到, 2009 年 3 月 12 日收到修改稿)

用元胞自动机方法模拟铸轧凝固组织, 采用有限元方法模拟铸轧过程中熔池内部的宏观传输现象, 将二者耦合模拟了镁合金铸轧薄带凝固过程中晶粒的形核与长大过程, 阐明了薄带铸轧工艺过程中的主要工艺参数(浇注温度、铸轧速度等)对镁合金薄带凝固组织中晶粒大小、取向等的影响规律, 这为通过工艺优化来控制铸轧薄带的凝固组织提供了理论依据.

关键词: 双辊铸轧, 镁合金, 凝固组织, 元胞自动机

PACC: 8130F

1. 引 言

镁合金由于具有较高的比强度、比刚度、减震性、导热性、电磁屏蔽性和易回收性等良好的综合性能, 成为现代汽车、航天航空及电子通信等行业的重要新型原材料, 被认为是 21 世纪最具开发和应用潜力的“绿色材料”^[1, 2]. 双辊薄带铸轧工艺是一种低能耗、近终形的成型工艺, 不仅能够降低成本、提高产品质量, 并且能生产常规工艺条件下难以生产的金属制品. 因此, 镁合金薄带铸轧工艺在近年来受到了广泛的关注, 并得到了快速的发展.

双辊铸轧过程的控制很复杂, 因此深入研究铸轧过程中金属熔液的晶体凝固规律、晶体生长与控制规律, 对提高金属带坯的组织与性能非常重要. 通过计算机数值模拟技术能够对合金在铸轧过程中的组织演变进行定量描述, 预测出材料中的凝固微观组织, 既有助于深入研究铸轧凝固组织形成机理, 更可以据此调整和优化生产工艺, 从而生产出具有理想凝固组织的薄带.

在凝固组织的数值模拟方法中, 元胞自动机 (cellular automaton, 简记为 CA) 方法因其具有一定物理背景, 能够定量反映基于凝固时间步长的过冷度

和溶质分布的影响等优点而得到广泛应用. CA 方法计算速度较高, 计算的区域也可以比较大, 可达到铸件一级. 这些优点使得它很适于描述自由枝晶、柱状枝晶的形成以及柱状晶与等轴晶之间的转化^[3-11]. 本文通过适用于宏观传输的有限元法与微观的 CA 方法相结合, 研究镁合金铸轧过程中凝固组织的变化规律.

2. 宏观传输模型

在连续铸轧过程中, 液体金属被注入两个反向旋转的轧辊及侧封板所形成的熔池内, 在金属由液态到完全凝固过程中, 同时伴有流动、传热和凝固过程, 为此需要进行速度场和温度场的耦合分析. 本文采用广义流体的概念, 基于湍流模型, 熔池内的宏观传输控制方程可以用通式表示, 其中方程变量用 ϕ 统一表示为^[12, 13]

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\rho C_{\phi} \phi) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_k C_{\phi} \phi) \\ & = \frac{\partial}{\partial x_k}(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x_k}) + S_{\phi}, \end{aligned} \quad (1)$$

式中, C_{ϕ} 为瞬时和对流项系数, Γ_{ϕ} 为扩散项系数,

^{*} 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2006CB605208) 和教育博士学科点专项科研基金 (批准号: 20050415021) 资助的课题.

[†] E-mail: hfork_2000@yahoo.com.cn

S_ϕ 为源项.(1)式在直角坐标系下可以表示为

$$\frac{\alpha(\rho u_x \phi)}{\partial x} + \frac{\alpha(\rho u_y \phi)}{\partial y} + \frac{\alpha(\rho u_z \phi)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) + S_\phi. \quad (2)$$

统一方程中的各项如表 1 所列.

表 1 统一方程中各项的表示

符 号	ϕ	C_ϕ	Γ_ϕ	S_ϕ
连续方程	1	1	0	0
x 方向动量方程	u_x	1	μ_{eff}	$\rho g_x - \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial u_x}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial u_x}{\partial z} \right)$
y 方向动量方程	u_y	1	μ_{eff}	$\rho g_y - \frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial u_y}{\partial z} \right)$
z 方向动量方程	u_z	1	μ_{eff}	$\rho g_z - \frac{\partial P}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial u_z}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial u_z}{\partial z} \right)$
能量方程	T	C_p	K_{eff}	Q_v
湍流动能方程	k		$\frac{\mu_t}{\sigma_k}$	$\mu_t \varphi - \rho \epsilon$
湍流动能耗散方程	ϵ		$\frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon}$	$c_1 \frac{\epsilon}{k} \mu_t \varphi - c_2 \frac{\rho \epsilon^2}{k}$

3. 微观模型

3.1. 形核模型

采用异质形核模型,假定形核发生在一系列不同的位置上,而这些形核位置可由连续而非离散的概率分布函数 $dn_v/d(\Delta T)$ 来描述^[14,15]. 在某一过冷度 ΔT 时所形成的晶粒密度 $n(\Delta T)$ 可由对该分布函数的积分求得,即

$$n(\Delta T) = \int_0^{\Delta T} \frac{dn}{d\Delta T'} \alpha(\Delta T') d\Delta T'. \quad (3)$$

假定晶粒密度的分布满足 Guass 分布,则 $dn_v/d(\Delta T)$ 可表示为

$$\frac{dn}{d(\Delta T)} = \frac{n_{\text{max}}}{\sqrt{2\pi\Delta T_\sigma}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta T - \bar{\Delta T}}{\Delta T_\sigma}\right)^2\right]. \quad (4)$$

式中 $\bar{\Delta T}$ 为平均形核过冷度, ΔT_σ 为标准偏差过冷度, n_{max} 为最大形核密度.

假设在铸辊表面及熔池内部形成的晶核具有随机取向,并用一个整数来表示晶粒取向的索引值.当元胞温度低于液相线温度时,在一个时间步长 δt 内温度降低了 δT ,而过冷度增加了 $\alpha(\Delta T)$ ($\alpha(\Delta T) >$

0),则新形核的晶粒密度为

$$\begin{aligned} \delta n &= n[\Delta T + \delta(\Delta T)] - n(\Delta T) \\ &= \int_{\Delta T}^{\Delta T + \delta(\Delta T)} \frac{dn}{d(\Delta T')} \alpha(\Delta T') d\Delta T'. \end{aligned} \quad (5)$$

新形成的晶核在整个 CA 单元内随机分布,其概率为

$$\begin{aligned} p &= \frac{\delta N}{N} \\ &= \delta n V, \end{aligned} \quad (6)$$

式中, N 为整个计算区域内 CA 单元数, V 为单个 CA 单元的体积,在每一个时间步长 δt 内,每一个 CA 单元均被赋予一个随机数 r ($0 \leq r \leq 1$).如果一个单元仍为液态,当 $r < p$ 时,该单元形核,并被赋予一个正整数 i 用来表示不同的晶向.

3.2. 生长模型

由于晶体的各向异性,CA 单元一旦形核将会沿着一定的择优方向生长,其生长速率可由枝晶尖端的局部过冷度确定.本文中采用 KGT 模型,固/液界面处的过冷度 ΔT 可以表示为

$$\Delta T = \Delta T_c + \Delta T_l + \Delta T_r + \Delta T_k, \quad (7)$$

式中 ΔT_c 为成分过冷, ΔT_r 为曲率过冷, ΔT_l 为热过冷, ΔT_k 为动力学过冷.由于双辊铸轧过程为一亚快速凝固过程,相对于快速凝固而言枝晶尖端

的生长速率并不是太高,故枝晶尖端的动力学过冷度可以忽略.因此,枝晶尖端总的过冷度 ΔT 可表示为

$$\Delta T = T_1 - T(t_n) + (C_1 - C_0)m - \Gamma \bar{K}, \quad (8)$$

式中, C_0 为合金的初始浓度, C_1 为固液界面处的溶质浓度, m 为液相线斜率, Γ 为 Gibbs-Thomson 系数, \bar{K} 为枝晶尖端曲率. \bar{K} 可表示为

$$\bar{K} = \frac{1}{dx} \left[1 - 2 \frac{f_s(i) + \sum_{j=1}^n f_s(j)}{n+1} \right]. \quad (9)$$

枝晶尖端的生长速率与过冷度之间的关系可由下列枝晶尖端动力学模型得到^[16]:

$$v[\Delta T] = k_1 \Delta T^2 + k_2 \Delta T^3. \quad (10)$$

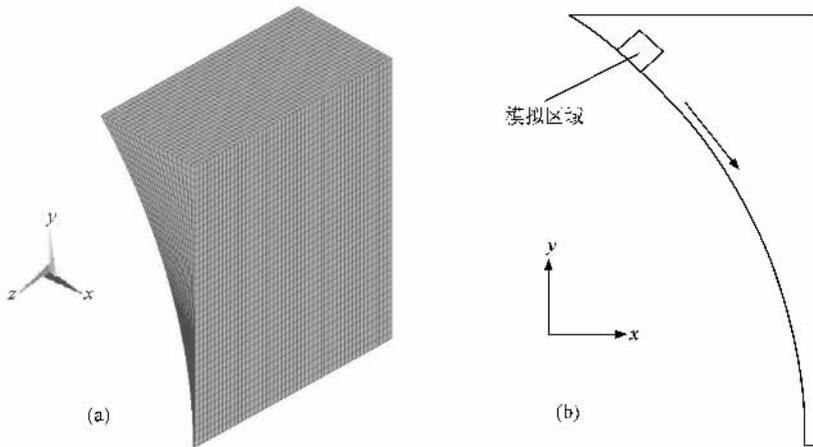


图1 模拟区域示意图 (a)宏观模拟区域,(b)微观模拟区域

表2 模拟中用到的物性参数

密度/ $10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$	液相线温度/ $^{\circ}\text{C}$	固相线温度/ $^{\circ}\text{C}$	比热容/ $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$	潜热/ $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$	热导率/ $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
1.78	636	575	1040	339	96

5. 模拟结果及讨论

运用本文提出的模型,模拟了不同工艺下铸轧镁合金薄带的凝固组织.铸辊直径为 500 mm,辊身长度为 250 mm,熔池高度为 160 mm,浇铸温度分别为 660、640 $^{\circ}\text{C}$,铸轧速度分别为 15、20 和 30 m/min.不同工艺条件下的宏观温度场如图 2 所示.对应的各工艺条件下镁合金薄带最终的凝固组织如图 3 所示.

从图 3 的模拟结果可以看出,在不同工艺条件下薄带最终的凝固组织均为等轴晶.造成这种现象

4. 数值方法

本文采用弱耦合方法^[17],首先采用有限元法,运用专业有限元软件 ANSYS 求解熔池内部的宏观传输现象,得到熔池内部的流场及温度场.模拟区域如图 1(a)所示,由于熔池的对称性,故采用熔池的 1/4 作为模拟区域.在 z 方向选取不同的截面,在此截面上选取如图 1(b)所示的紧贴辊面的一部分作为微观组织模拟的区域,通过插值计算微观模拟区域内的温度分布,在此基础上运用 CA 方法分析熔池内合金的形核与生长过程.模拟区域随着铸辊的转动,可实现对熔池不同位置的凝固组织的模拟.

模拟中用到的参数如表 2 所列.

的主要原因如下:因为铸辊的强制冷却,熔池内产生了较大的温度梯度,在大的过冷度下熔池内部晶粒大量形核生长,抑制了铸辊表面柱状晶的形成.同时,由于水口的注流冲击以及铸辊转动造成的强制对流,造成了固/液界面前沿温度及溶质分布的波动,引起了固/液界面的失稳,更有利于晶核的形成.而且强的对流冲击冲刷熔池表面的枝晶,造成枝晶的碎裂并被带入熔池内部,可以作为新的晶核.因此就造成了熔池内部晶粒的增殖,大量晶核的形成导致了最终得到完全的等轴晶组织.从图 4 所示的实际铸轧薄带的组织照片证实了这一点.

从图 3(a)与图 3(b)以及图 3(c)与图 3(d)的对比可以看到,随着铸轧速度的增大,得到了更加细小的晶粒.这是因为随着铸轧速度的增大,对流的强度增大,晶粒增殖的效果增强,晶粒细化的作用也就更加明显.从图 4 所示的实际铸轧金相照片也证实了

这一点.对比图 3(a)与图 3(d)可以看到,随着浇铸温度的降低,晶粒尺寸有一定的细化.这是因为过热度的降低,使得熔池内的温度梯度降低,有利于晶核的形成.这一点在图 4 所示的铸轧金相照片中也得到了证实.

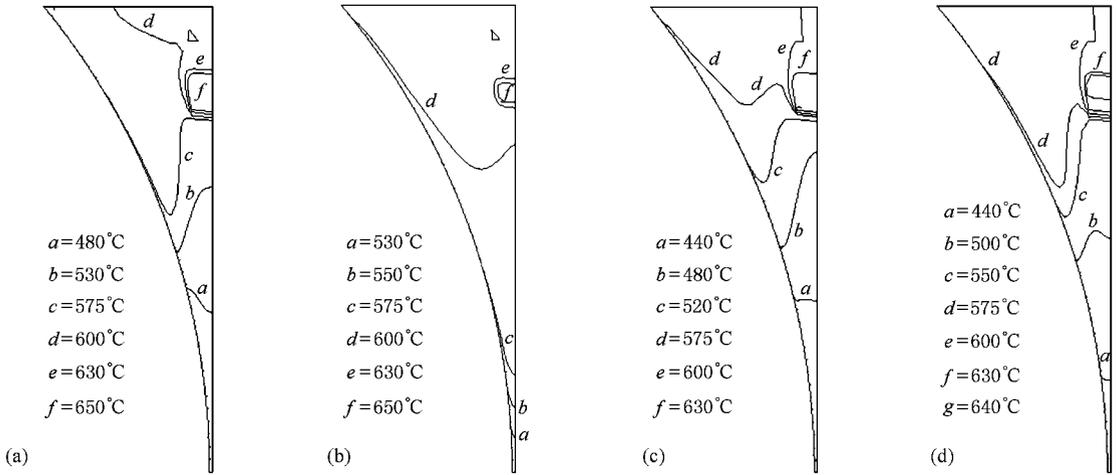


图 2 不同工艺条件下熔池内的温度分布 (a) 660°C , 20 m/min ; (b) 660°C , 30 m/min ; (c) 640°C , 15 m/min ; (d) 640°C , 20 m/min

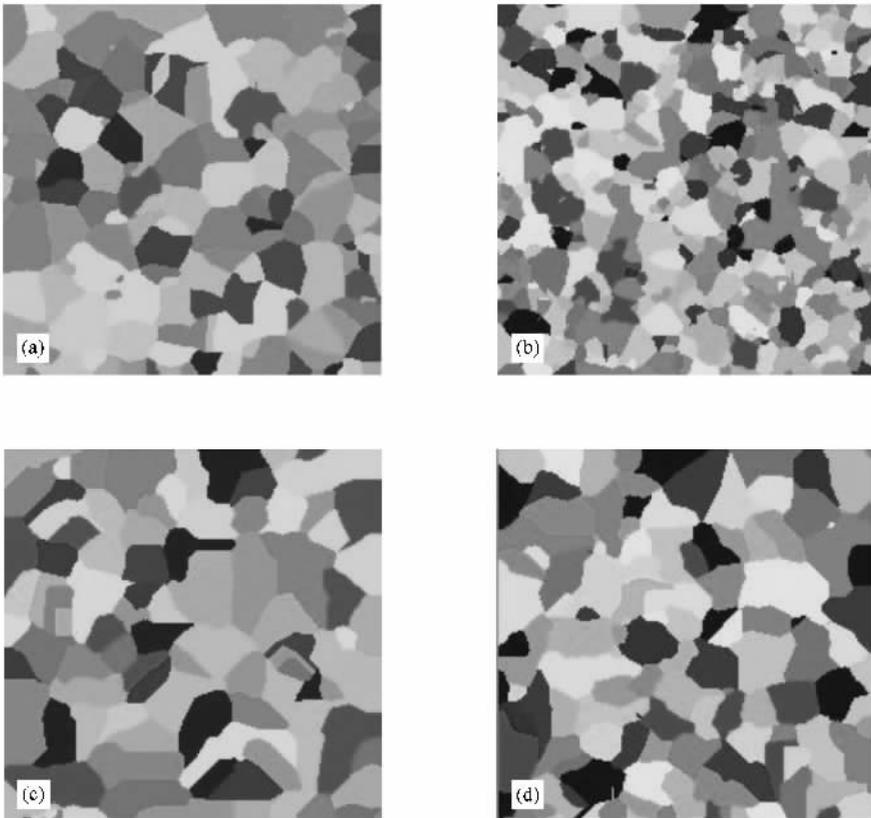


图 3 不同工艺条件下薄带最终凝固组织的模拟结果 (a) 660°C , 20 m/min ; (b) 660°C , 30 m/min ; (c) 640°C , 15 m/min ; (d) 640°C , 20 m/min

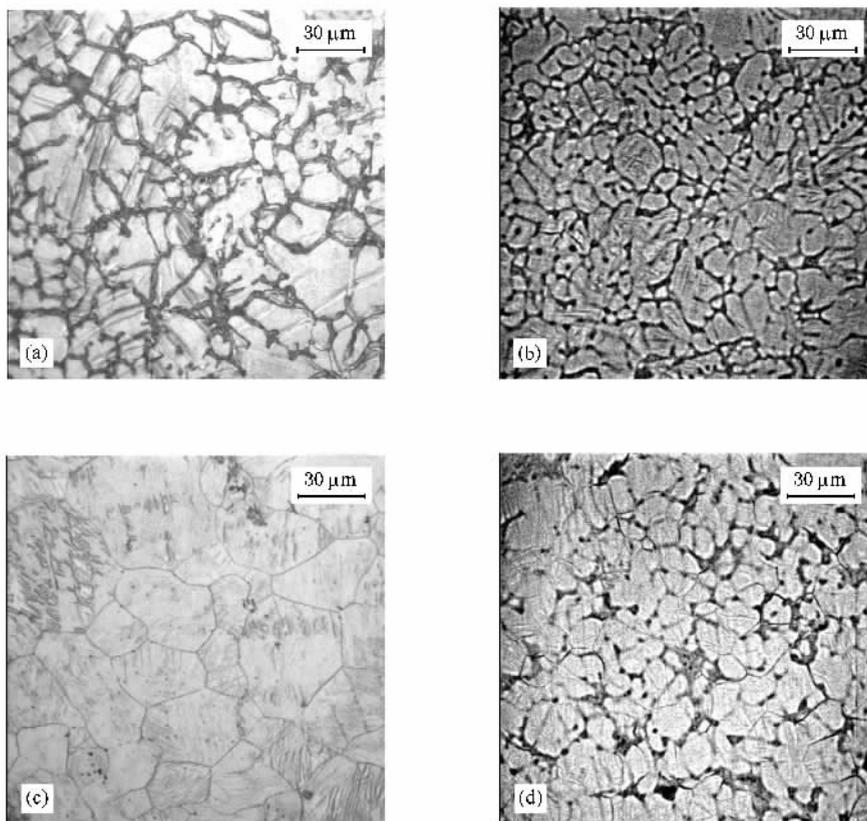


图4 铸轧实验得到的组织金相照片 (a)660 °C 20 m/min (b)660 °C 30 m/min ;(c)640 °C ,15 m/min ;(d)640 °C 20 m/min

6. 结 论

用 CA 方法与有限元法耦合 ,成功地实现了镁合金薄带双辊铸轧过程凝固组织演变的模拟 ,模拟结果与实验结果符合较好 . 这为薄带铸轧工艺的优化和薄带质量的控制提供了理论上的支持 . 模拟结

果表明 ,铸轧镁合金薄带的凝固组织均为完全的等轴晶组织 ,与实验结果相符 . 铸轧速度对铸轧镁合金薄带的最终组织具有重大的影响 ,在相同的浇铸温度下 ,随着铸轧速度的增大 ,能够明显地细化晶粒 . 在相同的铸轧速度下 ,随着浇铸温度的降低 ,镁合金薄带凝固组织有一定程度的细化 .

- [1] Suery M ,Zavaliangos A 2000 *The 6th International Conference on Semi-Solid Processing of Alloys and Composites* (Turin :Edimet) p129
- [2] Laukli H I 2004 *Ph. D. Dissertation* (Trondheim : Norwegian University of Science and Technology)
- [3] Rappaz M ,Gandin C A 1993 *Acta Metall. Mater.* **41** 346
- [4] Gandin C A ,Rappaz M 1994 *Acta Metall. Mater.* **42** 2233
- [5] Rappaz M ,Gandin C A 1996 *Metall. Mater. Trans. A* **27** 695
- [6] Stefanescu D M ,Pang H 1998 *Can. Metall. Quart.* **37** 229
- [7] Gandin C A ,Jalanti T ,Rappaz M 1998 *Modeling of Casting , Welding and Advanced Solidification Processes (VIII)* (Warrendale : TMS Publication) p363
- [8] Chen J ,Zhu M F ,Sun G X 2005 *Acta Metall. Sin.* **41** 799 (in Chinese) [陈 晋、朱鸣芳、孙国雄 2005 金属学报 **41** 799]
- [9] Nastac L 1999 *Acta Mater.* **47** 4253
- [10] Xu Q Y ,Liu B C 2001 *Mater. Trans. Jm.* **41** 2316
- [11] Guillemot G ,Gandin C A ,Bellet M 2007 *J. Cryst. Growth* **303** 58
- [12] Zhang X M ,Zhang J F 2006 *J. Northeast Univ. (Nat. Sci. Ed.)* **27** 759 (in Chinese) [张晓明、张军锋 2006 东北大学学报 (自然科学版) **27** 759]
- [13] Baea J W ,Kangb C G 2007 *JMPT* **191** 251
- [14] Kurz W ,Giovanola B ,Trivedi R 1986 *Acta Metall.* **34** 823
- [15] Sang S H 2001 *Sci. Tech. Adv. Mater.* **2** 241

[16] Zhu M F ,Hong C P 2001 *ISIJ. Int.* **41** 436

(in Chinese] 康秀红、杜 强、李殿中、李依依 2004 金属学报

[17] Kang X H ,Du Q ,Li D Z ,Li Y Y 2004 *Acta Metall. Sin.* **40** 452

40 452]

Modelling of solidification microstructure evolution of twin-roll casting magnesium strip using cellular automaton *

Huang Feng[†] Di Hong-Shuang Wang Guang-Shan

(*State Key Laboratory of Rolling and Automation ,Northeastern University ,Shenyang 110004 ,China*)

(Received 16 January 2009 ; revised manuscript received 12 March 2009)

Abstract

Cellular automaton (CA) is applied to simulating the microstructure evolution during the solidification , and finite element method (FEM) was used for solving the conservation equations which govern the macro-transport phenomena during the twin-roll casting process of the magnesium strip in the molten pool . Coupling CA with FEM can predict the microstructure evolution during solidification involving nucleation and growth of the grains . On the basis of this CA-FEM method ,the effects of the main parameters involving pouring temperature , casting speed and pool height on the characteristic of solidification microstructure such as grain size and orientation can be quantitatively clarified by numerical simulation , which can provide the theoretical basis for the optimization of the processing parameters and the control of the solidification structure .

Keywords : twin-roll casting , magnesium , solidification microstructure , cellular automaton

PACC : 8130F

* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 2006CB605208) and the Doctoral Program Foundation of Institution of Higher Education , China (Grant No. 20050415021).

[†] E-mail : hfork_2000@yahoo.com.cn