

文章编号: 1004-0609(2004)S1-0138-09

材料制备的计算机模拟^①

李依依, 李殿中, 黄成江, 张玉妥, 兰勇军

(中国科学院 金属研究所, 沈阳 110016)

摘 要: 以中英合作研制大型铸钢支承辊为例, 首先阐述了铸造工艺过程的计算机模拟过程, 包括充型过程的速度场、凝固过程的温度场以及微观组织等轴晶与柱状晶的转变和它们之间的竞相生长。其次, 对带钢热轧过程中的组织演化和性能进行了模拟和预报; 同时采用具有自主知识产权的深过冷热机械处理获得梯度细晶显微组织, 认为通过轧制形变前的深过冷进一步降低形变温度是获得超细晶粒的关键。最后, 提出多尺度模拟与集成是今后材料制备计算机模拟的发展方向。

关键词: 材料制备; 计算机模拟; 超细晶粒钢; 深过冷

Computer simulation on materials processing

LI Yiyi, LI Dianzhong, HUANG Chengjiang, ZHANG Yutuo, LAN Yongjun

(Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, China)

Abstract: The casting process of a large-size back-up steel roll was simulated by computer, including the filling velocity field, solidification temperature field, the transformation and the competition growth of equiaxed crystals and column crystals. Then the microstructural evolution and the properties of a strip steel were simulated and predicted. It is found that by a thermomechanical treatment under severe undercooling, an ultrafine and gradient grain structure can be obtained. Finally, it is pointed out that multiscale and integration simulation will be the developing trend for simulation on materials processing.

Key words: materials processing; computer simulation; ultrafine steel; severe undercooling

随着材料和计算机技术的高速发展, 可以通过事先的工艺设计和过程控制取代单凭经验积累和试差法方式制备材料。在材料科学与工程中, 经常要处理“正”“反”相左的、复杂的问题, 因而可引入理论与实践相互补充的第 3 种有效手段和方法——计算机模拟。计算机模拟是在计算机上通过系统模型模拟一个实际存在或正在设计中的真实系统, 以再现(实现可视化)或分析(数值计算)真实系统的本质特征。计算机模拟已经成为解决材料科学和工程中实际问题的重要手段, 它可以替代许多难以或无法实施的实验, 解决一般方法难以求解的大型系统问题; 它具有降低成本、缩短实验周期、稳定生产工艺和提高产品质量等优点, 此外, 还可以避免有害

实验对人身、财产的危害以及具有不受时空限制的优势, 特别是在对微观状态与过程的了解方面, 计算机模拟更有其独特、甚至有不可替代的作用。

材料制备过程是一个极其复杂的高温、动态和瞬时过程, 难以直接观察。在这个过程中, 材料经过液态充型、凝固结晶、固态相变、再结晶等多种复杂的物理、化学和冶金变化。为了获得优质产品, 就必须控制成形过程以获得性能最佳的材料, 同时必须使缺陷减小到最低限度或将它转移到危害最小的地方去。但这些过程都不能实时观察到, 间接测试也十分困难。通过计算机模拟, 可以观察材料的制备过程, 深入研究材料的成分、工艺、组织结构与性能的最佳组合, 从而进行材料选择、工件

① 基金项目: 国家重点基础研究发展规划资助项目(G1998061512)

作者简介: 李依依(1933-), 女, 教授, 中国科学院院士。

通讯作者: 李依依, 院士; 电话: 024-23881881; E-mail: yyli@imr.ac.cn

工艺设计和制造。本文作者针对计算机模拟技术在材料制备中的作用,总结了计算机模拟在铸造工艺、带钢热轧及深过冷形变超细晶粒钢的应用实例,展示了计算机模拟在材料制备中的应用前景。

1 铸造工艺过程的计算机模拟

铸造过程计算机模拟是改造传统铸造产业的必由之路,是当今世界各国专家学者关注的热点^[1]。铸造工艺过程的计算机模拟开展较早,在技术上也比较成熟,已由形状尺寸的宏观模拟进入微观模拟阶段,其发展过程大体上可分为 3 个阶段^[2]:第 1 阶段从 1962 年开始,主要开展了基本计算方法的研究,如有限差分法、有限元法等,并模拟了砂型铸钢件的温度场,预报了凝固过程中铸件易出现的缩孔和疏松缺陷;第 2 阶段从 1983 年开始,开展了铸件充型过程速度场的数值模拟,可以预报充型中可能出现的气孔和夹杂缺陷;第 3 阶段从 1992 年至今,开展了微观组织形态的计算机模拟,可以模拟形核、生长过程,预报铸件凝固过程中的晶粒形貌。

铸造工艺过程的计算机模拟可以优化现有的生产工艺;获得可重复的产品质量,即使在原材料、工艺设备和操作者变化时也同样稳定;可以缩短设计、生产产品的周期,降低成本;实现工艺的可视化,使企业操作者和模拟工作者之间能够共同分析达到最佳工艺模拟的判据标准。为此,采用 View-Cast 软件对铸钢支承辊凝固过程进行模拟,铸钢支承辊是由中国科学院金属研究所、英国伯明翰大学 IRC 中心和中国一重联合开发的项目,支承辊高度为 9 000 mm,净质量 30 t。图 1(a)为铸钢支承辊浇注过程温度场的数值模拟图,图 1(b)为缺陷预报。通过计算机模拟可以在实际铸造前对铸件可能出现

的缩孔缺陷的大小、部位和发生的时间进行有效预报,以不断改进工艺;根据温度场的分布,有效控制凝固过程,确保铸件质量。

除了对凝固过程进行宏观模拟外,还采用元胞自动机方法(Cellular Automaton)模拟了凝固过程铸件横截面上的晶粒形核和长大以及柱状晶与等轴晶的转变。图 2 所示为柱状晶与等轴晶的转变。图 2(a)表示晶粒在型壁上形核并长大;图 2(b)为晶体生长过程;图 2(c)是晶体的择优长大;图 2(d)是中心区域等轴晶的形核;图 2(e)为等轴晶生长;图 2(f)为等轴晶与柱状晶的转变。可以看出,当器壁上形核率较小而生长速度大时,随机的晶粒在型壁表面形成后,很快沿着择优的结晶方向生长形成柱状晶。当与中心区域形核、生长的等轴晶相遇后,会出现等轴晶与柱状晶相互并吞竞相生长的情况。

柱状晶与等轴晶的形核与长大主要是由形核率和生长速度控制,同时也受一些外场的影响,为此,用元胞自动机方法与宏观三场(温度场、溶质场和速度场)耦合对凝固过程柱状晶与等轴晶竞相生长的情况进行微观模拟。图 3 为柱状晶与等轴晶的竞相生长图,图 3(a), (b), (c)和(d)分别为不同时刻晶粒的形貌,其中图 3(a)表示表面瞬时形核所需要的过冷度小,形核快,属于形核率大、晶粒生长速度小的情况,形成等轴晶;而内部形核所需要的过冷度大,形核慢,晶粒生长速度大,形成柱状晶。图 3(b)与图 3(a)具有相同的冷却速度和形核率,但是晶粒生长速度比图 3(a)的大 3 倍,则等轴晶向柱状晶转变,柱状晶择优生长。图 3(c)形核率是图 3(b)的一半,可以看到等轴晶提前生长成柱状晶。图 3(d)与图 3(b)具有同样的参数,但是未考虑流动对温度场的影响,可以看到,自然对流对凝固组织形态的影响非常大,特别是柱状晶与等轴晶之间的转变,这是由于液相流动改变了枝晶尖端的

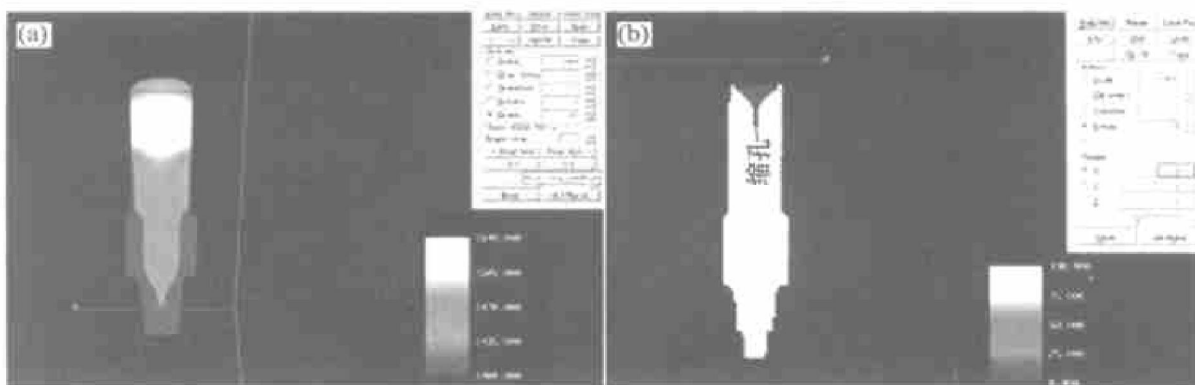


图 1 铸钢支承辊凝固过程的宏观模拟
(a) —温度场; (b) —缺陷预报

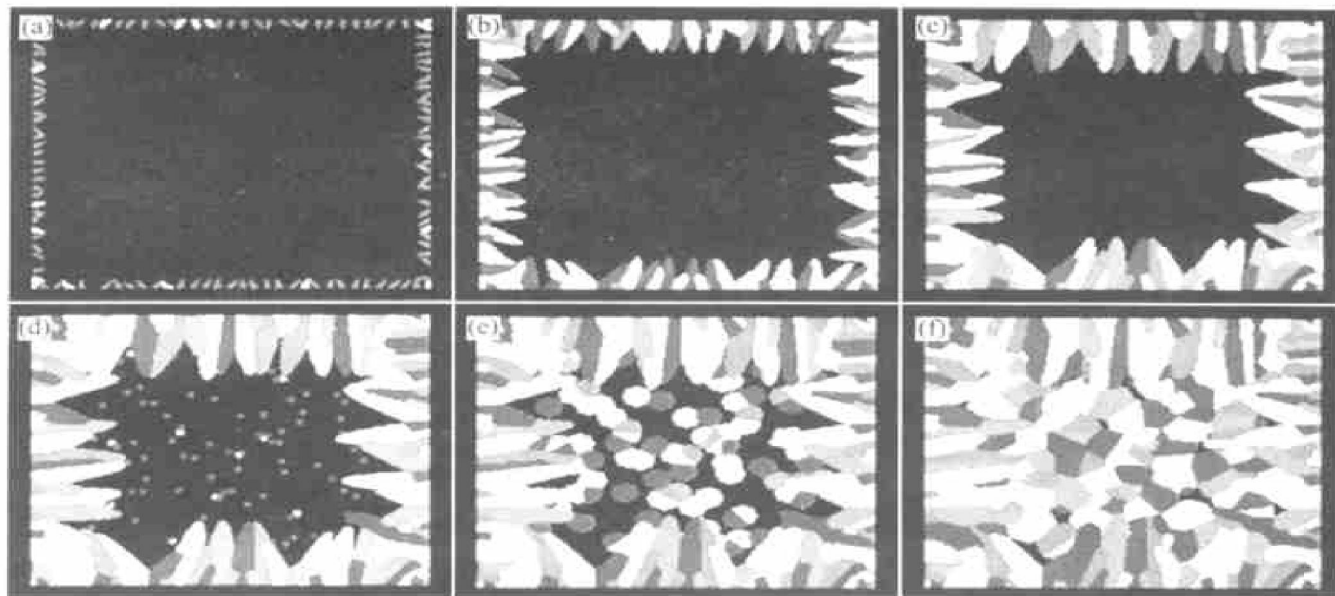


图2 凝固过程中铸件横截面上晶粒形核长大过程以及柱状晶与等轴晶的转变

(a) 一柱状晶形核; (b) 一柱状晶长大; (c) 一晶体的择优生长;
(d) 一等轴晶形核; (e) 一等轴晶长大; (f) 一等轴晶与柱状晶的转变

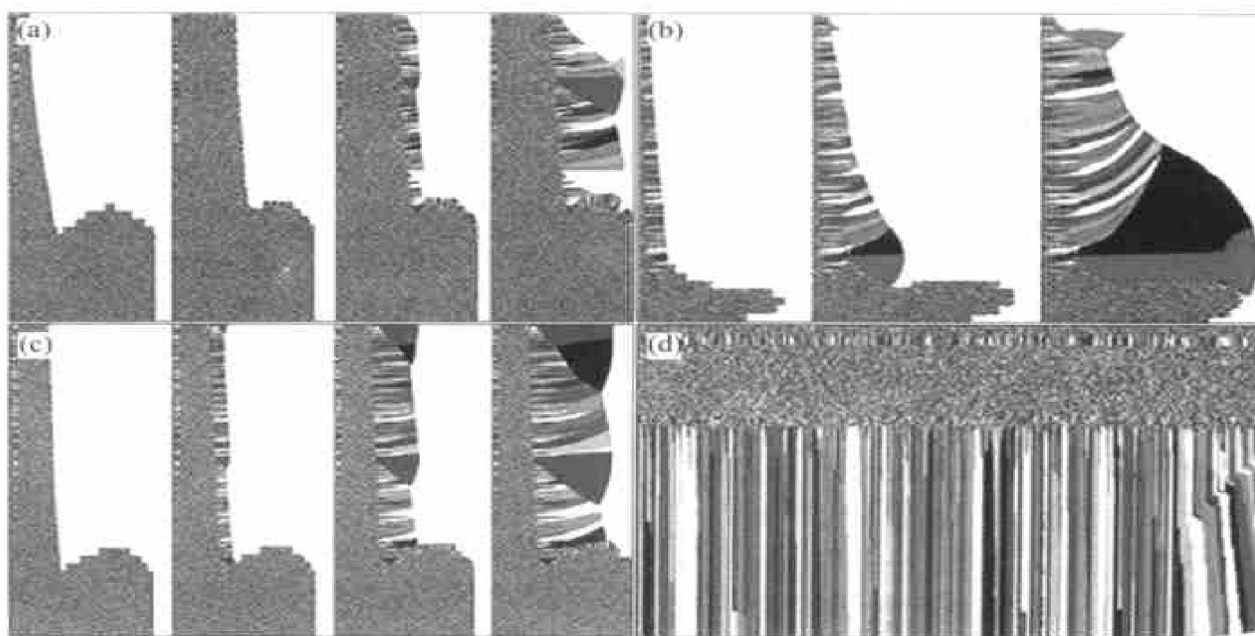


图3 柱状晶与等轴晶的竞相生长

(a) 一表面形成等轴晶, 内部形成柱状晶; (b) 一柱状晶择优生长;
(c) 一等轴晶提前生长成柱状晶; (d) 一不考虑自然对流情况下的晶粒形貌

传热和传质条件, 从而对凝固形态产生影响。从上述的一系列图中还可以看出, 等轴晶与柱状晶之间的转变主要是由形核率和生长速度控制, 而不是仅由形核率控制。形核率和生长速度的比值越小, 越易发生等轴晶向柱状晶的转变; 而形核率越大, 生长速度越小, 则越易发生柱状晶向等轴晶的转变。

双金属轧辊要求表层强度高、心部强度低, 因此, 可以采用溢流法生产工艺制造双金属轧辊。溢流法浇注工艺是指首先用一种液态金属充满铸型,

当与铸型接触的液态金属凝固到一定厚度时, 再注入另一种液态金属, 将第一种还未凝固的液态金属从铸型腔中冲洗出去, 这样, 在铸件表层凝固的是第一种液态金属; 在心部凝固的是第二种液态金属。模拟溢流法生产工艺制造双金属轧辊的浇注过程关键在于对两种流体界面的跟踪。水平集方法是一种有效的模拟两种流体分界面拓扑关系改变的数值方法。图4所示为溢流法浇注充型过程界面的演化。采用水平集方法(Level Set Method)对溢流法

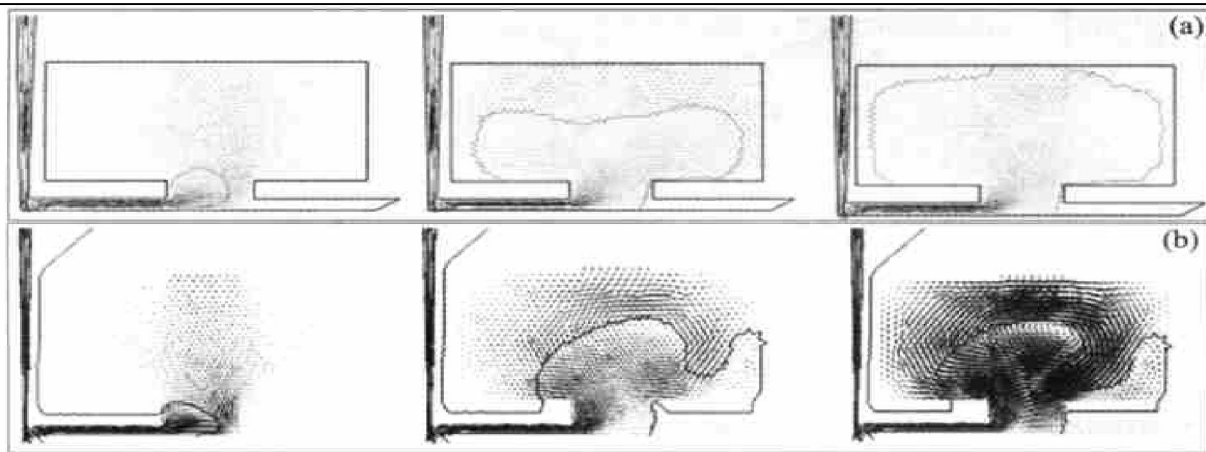


图 4 溢流法浇注充型过程界面的演化

(a) $\rho_1: \rho_2 = 1: 1.025$, $v = 5 \text{ m/s}$; (b) $\rho_1: \rho_2 = 1: 1.05$, $v = 5 \text{ m/s}$

生产工艺制造双金属轧辊进行模拟, 再现了浇注过程界面的演变情况, 其中图 4(a) 为两种液态金属的密度比为 1: 1.025, 入流速度为 5 m/s 时的模拟结果; 图 4(b) 为两种液态金属的密度比为 1: 1.05, 入流速度为 5 m/s 时的模拟结果。从图中可以看出, 图 4(a) 中所示的界面是稳定的, 几乎所有的先浇注进去的未凝固的液态金属都被冲刷掉, 这是工艺设计者期望的理想情况; 图 4(b) 的界面是不稳定的, 当入流速度保持不变, 两种金属液密度比增大到 1: 1.05 时, 两种液态金属混合在一起, 并伴随着复杂的界面形态, 先浇注进去的液态金属会污染后浇注进去的液态金属, 且冲刷已凝固的表层, 使表层变薄, 且不均匀, 影响轧辊的质量。

2 热轧带钢组织性能预报与实践

热轧带钢组织和性能预报是基于成分、工艺、组织结构和性能的四面体模型, 将物理冶金模型与工艺模型集成, 开发离线与在线的模拟软件, 对工艺过程实现控制。对普碳钢和微合金钢而言, 通常考核的力学性能指标是抗拉强度、屈服强度和伸长率。带钢的性能主要取决于化学成分、晶粒尺寸、组成相的分数以及轧制与冷却过程的工艺参数等。温度场的计算是带钢热轧组织性能预报的基础, 它贯穿在全过程的模拟中。

带钢热轧的工艺流程主要包括加热、轧制、冷却、相变和卷取。组织和性能预报模型主要由 5 部分组成: 1) 板坯加热的奥氏体化过程及晶粒长大模型; 2) 轧制过程中的组织变化模型; 3) 轧后冷却过程中的相变模型; 4) 卷取过程中铁素体晶粒长大模型; 5) 组织和力学性能模型。图 5 所示为热轧带钢物理冶金模型流程图, 基于上述模型开发了

热轧带钢组织与性能预报的 Rollan (Rolling analysis)^[3] 软件, 界面部分用 Visual Basic 编写, 核心计算部分采用 Visual C++ 编写, 实现了计算和结果输出的分离, 便于程序的调试、升级、维护和移植。Rollan 软件包括计算、专家系统、数据库和帮助 4 部分模块。计算模块是在物理冶金模型的基础上完成热轧带钢的组织与性能预报, 是软件的核心部分, 它包括 5 个模块: 加热模块、轧制模块、相变模块、卷取模块和力学性能模块。专家系统模块是根据用户所要求的力学性能指标反推出热轧工艺参数。数据库模块中输入了大量的生产工艺参数, 计算时可直接从数据库中读取数据。帮助模块是软件的使用说明和用户手册。

图 6 所示为 Rollan 软件界面, 其中图 6(a) 为 Rollan 软件的主界面; 图 6(b) 为参数输入界面, 包括钢种与化学成分、板坯规格和轧制工艺制度 3 部分; 图 6(c) 为加热模块, 包括板坯在均热炉中的温度—时间曲线以及奥氏体晶粒的长大过程; 图 6(d) 为轧制模块, 包括初轧和精轧两部分, 可以预报轧制力和一些重要数据, 如轧制过程中各道次的温度、奥氏体再结晶和奥氏体晶粒尺寸; 图 6(e) 为冷却相变模块, 包括输出辊道上带钢的冷却曲线、组成、相变分数和铁素体晶粒尺寸等; 图 6(f) 为性能模块, 预报带钢的抗拉强度、屈服强度、伸长率及其沿带钢长度方向的分布, 同时采用打靶的形式直观地反映所预报的性能在要求的强度和伸长率条件下的误差范围。

图 7 所示为热轧带钢力学性能预报值与实测值的比较, 其中图 7(a) 为抗拉强度, 预报值与实测值误差为 9.9 MPa; 图 7(b) 为屈服强度, 误差为 13.1 MPa; 图 7(c) 为伸长率, 误差为 2%; 图 7(d) 和图 7(e) 所示为 9.35 mm 厚的带钢在长度方向上预报

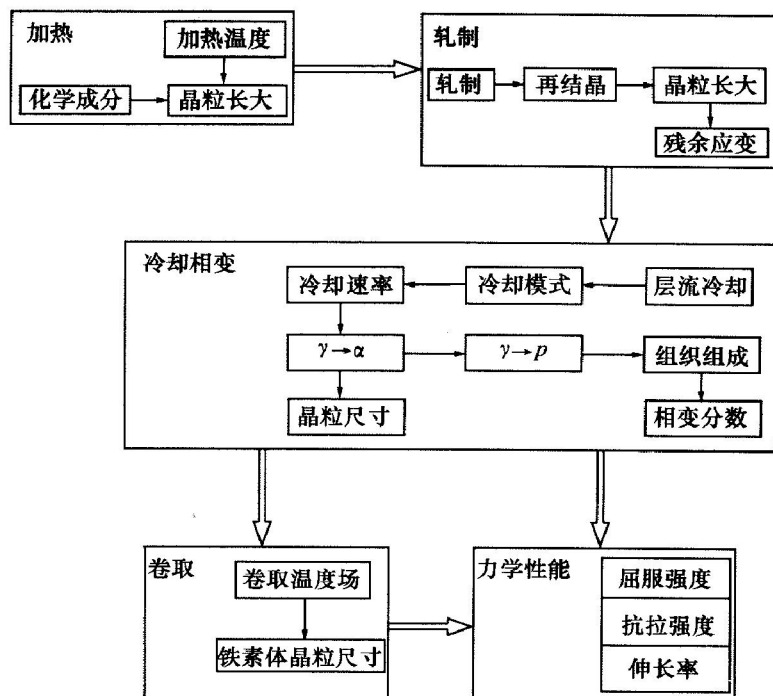


图 5 热轧带钢物理冶金模型流程图

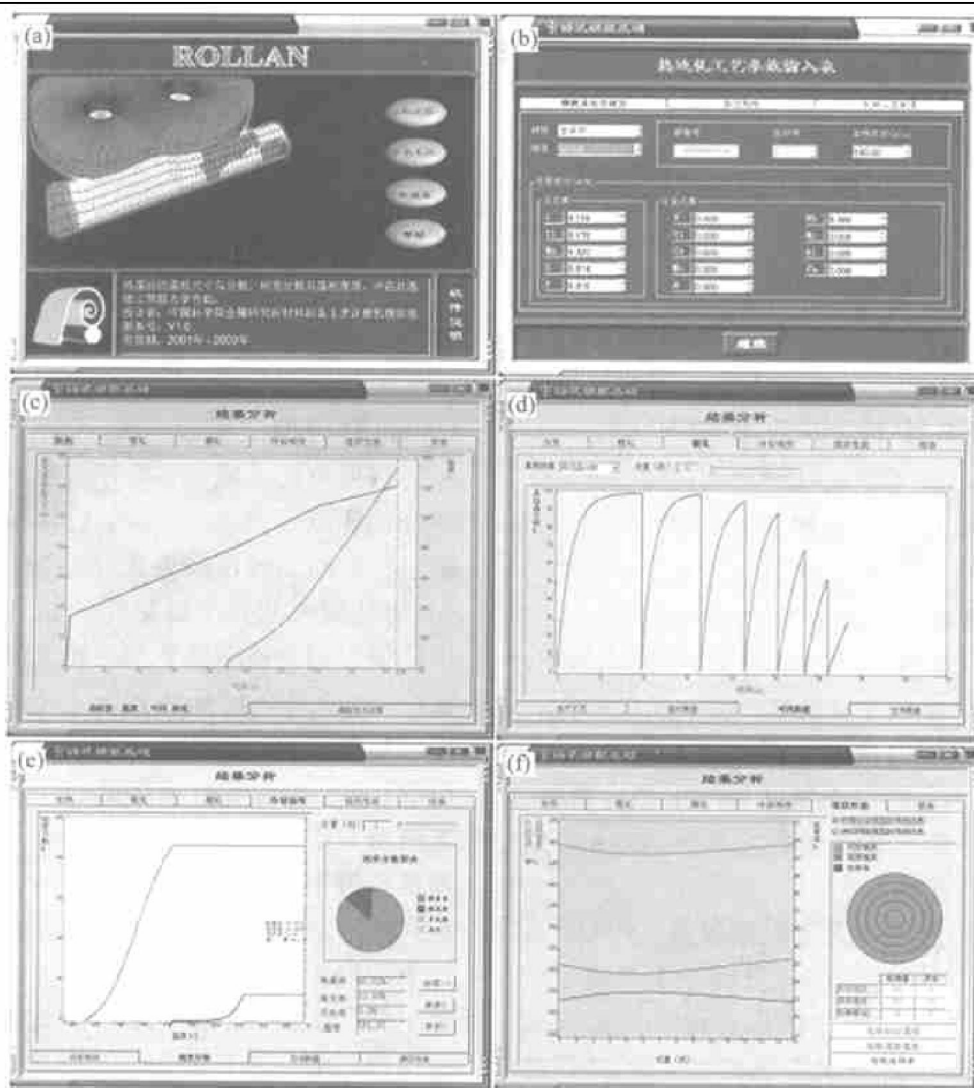


图 6 热轧带钢组织与性能预报—Rollan 软件

(a) 一主界面; (b) 一参数输入界面; (c) 一加热模块; (d) 一轧制模块; (e) 一冷却相变模块; (f) 一性能模块

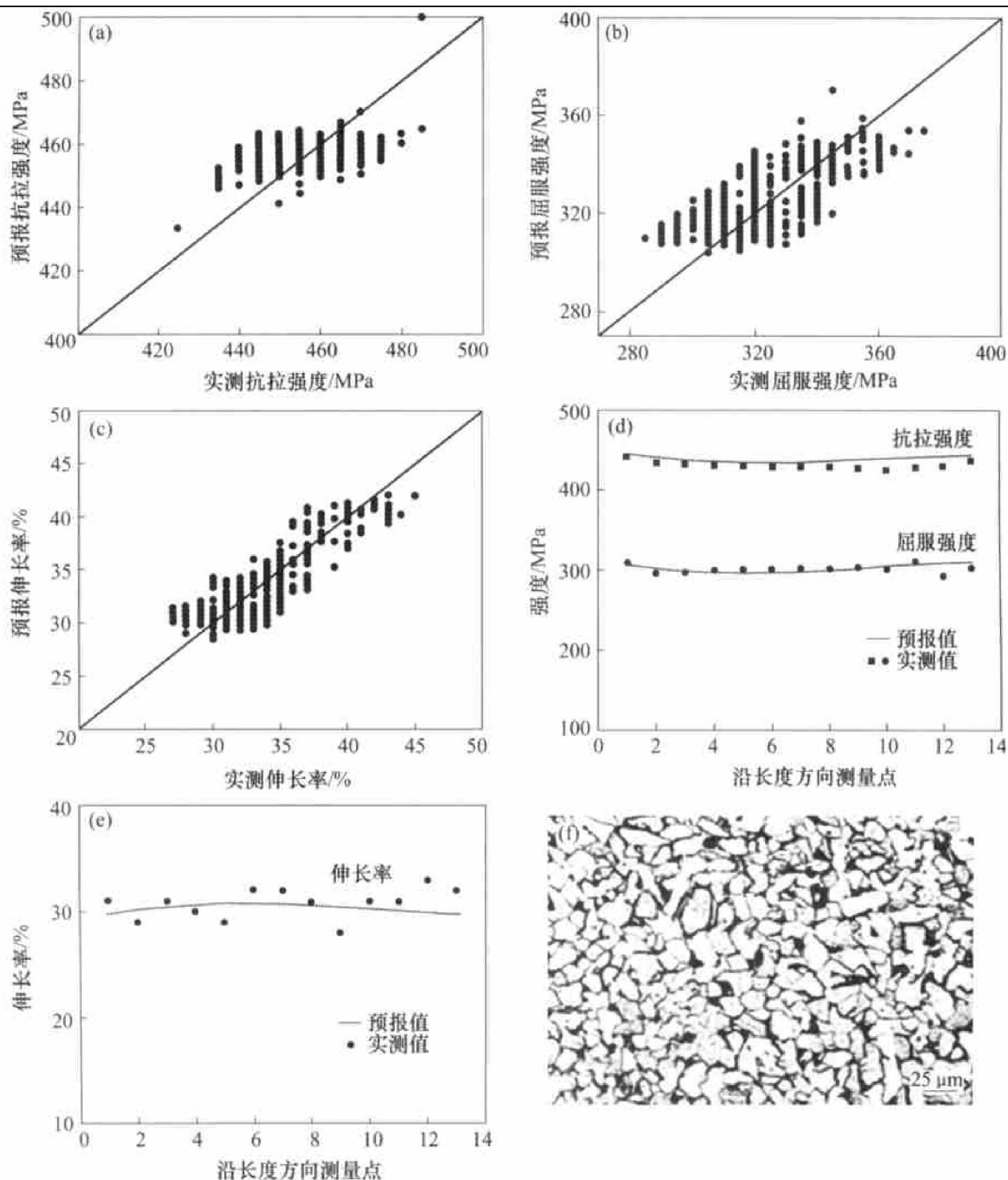


图 7 热轧带钢力学性能和组织预报值与实测值的比较

(a) —抗拉强度; (b) —屈服强度; (c) —伸长率; (d), (e) —带钢长度方向的性能分布; (f) —热轧 Q235B 的金相组织

值与实测值的比较, 可以看出预报值与实测值吻合较好; 图 7(f) 为热轧普碳钢典型的金相组织, 由铁素体和珠光体组成。

3 深过冷形变获得超细晶粒钢的模拟与探索

超细晶粒钢一般是指平均晶粒尺寸 $< 5 \mu\text{m}$ 的钢种, 被认为是最有应用前景的钢铁材料。1998 年

我国启动了由翁宇庆教授担任首席科学家的“新一代钢铁材料重大基础研究”项目^[4]。经过几年的工作, 新一代超细晶粒钢的基本特征已显现出来, 它是将现代冶金理论和新技术相结合, 以纯净化、均质化、形变诱导相变为基础, 又与生产实践紧密结合获得的钢种, 是使传统材料升级的多快好省的途径。特别是形变诱导相变获得细晶粒钢的理论在国内外都作了大量的工作, 取得了一些成绩。

形变诱导相变强调轧制温度控制在 Ar_3 附近,

在热形变时产生 $\gamma \rightarrow \alpha$ 相变, 认为是动态形变诱导铁素体相变获得细晶粒。黄成江和李殿中等^[5,6]的研究发现, 某种情况下应用形变诱导相变理论进行轧制时并没有获得完全的细晶粒, 甚至表面出现变形的铁素体。那么, 形变诱导相变必须在适当形变条件下才能发生, 热轧过程中如何满足这种形变条件? 为什么超细晶粒只出现在热轧板的表层?

要回答上述问题, 必须了解热轧形变时钢板上每个点真实的形变历史和温度历程以及应变变量。而这些数据很难由实验测量得到, 需要借助于计算机数值模拟。

黄成江、李殿中等用有限元法研究了板厚为 2 mm 的普碳钢。图 8 所示为钢板有限元网格, 轧制前板厚为 2 mm, 由于所研究的对象具有对称性, 文中取其一半进行研究, 图中所示为上半部分。

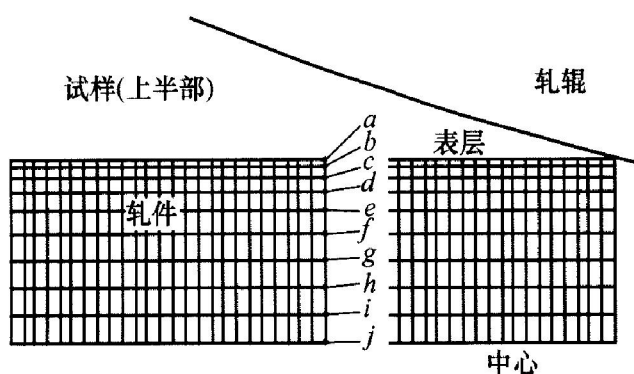


图 8 钢板有限元网格

通常普碳钢的各类应变只能反映物体的形变程度, 不能反映物体曾经经历过的形变历史, 换言之, 不能充分反映形变历史对组织演变的影响。为了克服这个困难, 研究带钢热轧过程中轧件形变历程对组织演变的影响, 定义了一个新变量, 称之为累积剪切应变, 借以反映热轧过程中剪切形变历史对显微组织的影响, 用以下公式表示:

$$E_{xy} = \int |\dot{\epsilon}_{xy}| dt \quad (1)$$

式中 t 是轧件上的某点从轧件被咬入至该点运动到当前位置所消耗的时间; $\dot{\epsilon}_{xy}$ 为剪切应变速率。

运用此公式描述带钢表层及心部的累积总剪切应变场, 如图 9 所示。

由图 9 可以看出, 热轧后, 带钢表层的累积剪切应变可达到接近 1.0, 超过压下量的 2 倍, 而心部的累积剪切应变很小。带钢表层的累计剪切应变很大, 为奥氏体向铁素体转变提供了额外的驱动力, 使表层晶粒变细, 心部则相反。表层存在的高应变部分揭示了超细晶粒的形成原因, 但仅仅是

1.0 左右的应变尚不足以解释超细晶的形成。大量的研究表明^[7], 要稳定地获得超细晶, 应变变量应在 2.0 左右。所以除应变以外, 还须从温度条件上考察超细晶的形成过程。图 10 所示为试样表层至心部温度的变化曲线, 在形成超细晶的表层, 由于轧辊的激冷以及轧后心部的温升, 试样经历了一种陡降→陡升型的温度—时间变化。



图 9 热轧带钢的累积总剪切应变场
(摩擦因数 0.3)

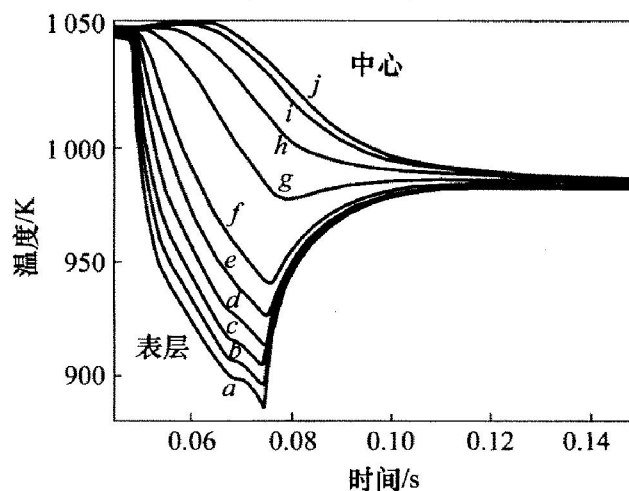


图 10 从试样表层至芯部温度的变化

综上所述, 形变前快速冷却, 大幅度降低相变开始温度, 造成奥氏体在相变前储存较多的应变能, 提高形核率, 使深过冷奥氏体在低温状态下形变, 是晶粒得以超细化的本质原因。因此, 热轧板表层超细晶形成的主要因素是: 1) 轧辊对轧板表面的激冷作用, 使得与冷轧辊接触的轧板表面温度迅速降低, 增大了过冷度, 从而细化了表层的铁素体晶粒; 2) 在轧板表层存在着由轧辊和轧板之间的摩擦导致的比轧板芯部大得多的剪切应变, 这个剪切应变使得在对轧板施加较小形变量时就可以在轧板表层得到很大的应变变量, 从而可以在表层得到很细的铁素体组织。

热模拟实验结果见图 11。图 11(a) 为形变前空冷, 724 °C 下压缩 60% 时的显微组织。可以看出, 晶粒变得不均匀, 多数铁素体晶粒较细, 但是一些铁素体晶粒被拉长, 表明大部分铁素体在形变前期析出, 在形变过程中被拉长。图 11(b) 为形变前喷

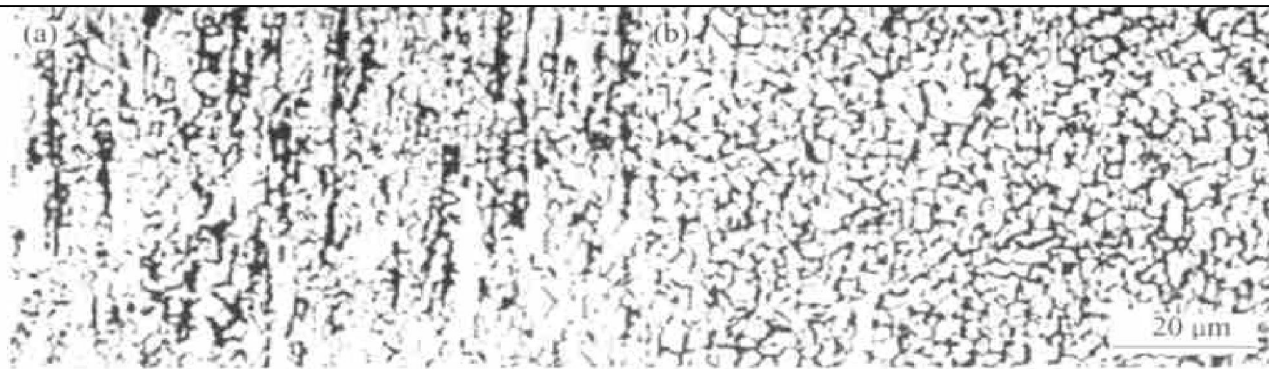


图 11 热模拟实验试样的显微组织
(a) 一形变前空冷, 724 °C 压缩 60%; (b) 一形变前喷氮气冷却, 713 °C 压缩 60%

氮气冷却, 在 713 °C 下压缩 60% 时的显微组织。可以看出, 铁素体晶粒较均匀, 大约为 2 μm 。通过形变前喷氮气强制冷却, 轧制温度可降低, 过冷奥氏体具有较高的应变能, 增加了形核率, 在一定的形变量下, 可获得细晶而不出现拉长铁素体晶粒。

通过研究应变、应变速率、温度和过冷度 4 个因素后, 发现“将形变温度控制在 A_{r3} 附近”并非获得超细晶的充分条件。形变前快速冷却, 大幅度降低相变开始温度, 使得深过冷奥氏体具有较高的应变能, 增加形核率, 在一定的形变量下, 获得细晶, 是超细晶形成的本质。根据这个新机制, 中国科学院金属研究所与珠钢和重庆汽车研究所在珠钢 CSP 生产线上采用深过冷轧制工艺, 共轧制了数百吨钢, 珠钢和重庆汽车研究所检验表明, 钢的强度、伸长率和冷弯性能均得到大幅度提高。应用于制造汽车发动机横梁, 一次冲压成功。图 12 所示为采用深过冷轧制工艺前、后冷弯实验比较, 图 12(a) 所示为在 CSP 生产线上未采用深过冷轧制工艺的钢板, 冷弯时出现了微裂纹; 图 12(b) 为深过冷轧制钢板冷弯性能好, 没有微裂纹发生。

4 材料制备计算机模拟发展趋势

当前, 材料正向高强度、高韧性、复合化、多功能化方向发展, 材料制备也向近无余量、近零缺陷的方向努力。面对越来越多的需求目标, 材料制备过程的计算机模拟必须提出新概念、发展新理论, 建立真实描述过程的数理模型, 认真而踏实的解决生产中的具体问题, 提升产品质量, 降低成本; 同时还要不断改进、创新与开发新工艺。

材料制备计算机模拟是计算材料学的一个重要方面, 应该将宏观、介观与微观等多层次、多尺度模拟与集成联系起来。将微观组织结构与材料或构

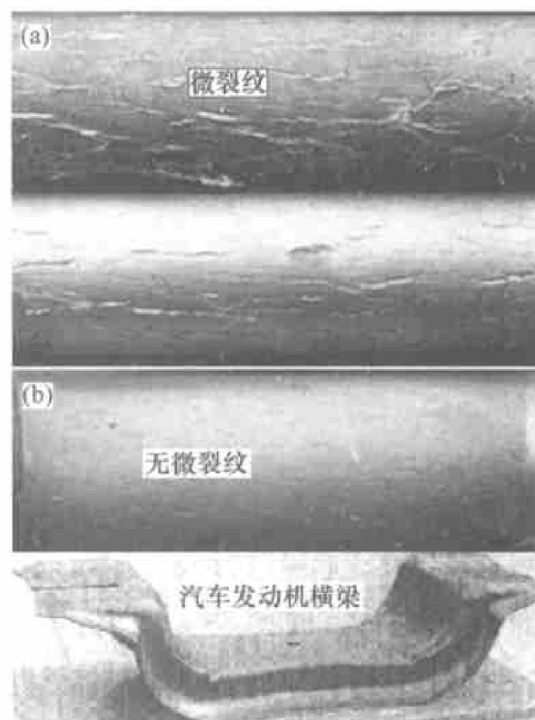


图 12 采用深过冷轧制工艺前(a)、后(b)冷弯实验比较

件的宏观性能结合起来, 通过理论分析, 揭示各层次的内在规律和相互联系, 并通过算法创新, 实现规律的定量化和可视化。因此, 多层次、多尺度模拟与集成以及向多维方向扩展是材料制备计算机模拟的发展方向。

5 结束语

1) 铸造工艺过程的计算机模拟可以直接模拟和观察铸造过程, 优化工艺参数, 指导新产品开发。

2) 通过热轧带钢组织性能预报, 可以合理选择热轧工艺参数, 保证带钢长度方向的组织和性能均匀性, 稳定质量, 减少测试的工作量。

3) 提高形变前的过冷度, 降低形变温度, 使奥

氏体在深过冷状态下形变, 利用有限应变可获得超细晶粒钢。

4) 计算机模拟技术已经成为解决材料科学和工程中实际问题的重要组成部分, 多尺度模拟与集成是材料制备计算机模拟的发展方向。

参考文献

- [1] 柳百成, 康进武. 铸件凝固过程的宏观及微观计算机研究[J]. 铸造工程·造型材料, 2000, 24(3): 1-6.
- [2] 顾秉林. 材料科学与工程国际前沿[M]. 济南: 山东科学技术出版社, 2003.
- [3] 中国科学院 金属研究所. 带钢热轧组织性能离线预报与在线监测系统软件开发和应用报告[R]. 2003. 3.
- [4] 翁宇庆等. 超细晶钢- 钢的组织细化理论与控制技术[M]. 北京: 冶金工业出版社, 2003.
- [5] Huang C J, Zhang H, Lan Y J, et al. A discussion of the formation of ultrafine grains in low carbon steels based on FE analysis [J]. Computational Materials Science A, 2003, 352(1-2): 136-143.
- [6] Huang C J, Li D Z, Li Y Y. A finite element analysis of strain induced transformation rolling and an experimental study on the grain refinement potential of severe undercooling thermomechanical treatment [J]. Mater Sci Eng A, 2003: 352(1-2): 136-143.
- [7] Inoue T, Torizuka S, Nagai K. Grain refinement by multipass hot compression [J]. Mater Sci Tech, 2001, 17: 1329-1338.

(编辑 杨 兵)