

ASTM A216 WCA 铸钢凝固及冷却过程 相变的 CA 模拟 *

苏 斌¹⁾ 韩志强¹⁾ 赵永让²⁾ 沈丙振²⁾ 张连振²⁾ 柳百成¹⁾

1) 清华大学机械工程系先进成形制造教育部重点实验室, 北京 100084

2) 中信重工机械股份有限公司, 洛阳 471039

摘 要 结合 Thermo-Calc 和 Dictra 软件考虑了多组元条件下的凝固和溶质扩散过程, 建立了元胞自动机 (CA) 模型, 对 ASTM A216 WCA 铸钢凝固及后续冷却过程相变进行了模拟. 设计了阶梯形试件进行浇注与测温实验, 并用 OM 和 SEM 观察了铸态试件不同部位的微观组织, 测定了先共析 α 铁素体的含量及其晶粒尺寸、珠光体的层片间距, 并将数值模拟结果和实验结果进行了对比, 分析了冷却条件对铸态微观组织的影响. 结果表明, 模拟结果与实验结果符合良好, 随冷却速率的增大, 先共析 α 铁素体的含量增加, 同时, 先共析 α 铁素体的平均晶粒尺寸和珠光体的平均层片间距减小.

关键词 元胞自动机, 凝固组织, 数值模拟, ASTM A216 WCA 铸钢

中图分类号 TG111.5, 142.31 **文献标识码** A **文章编号** 0412-1961(2011)11-1388-08

CA MODELING OF PHASE TRANSFORMATION IN ASTM A216 WCA CAST STEEL DURING SOLIDIFICATION AND COOLING PROCESS

SU Bin¹⁾, HAN Zhiqiang¹⁾, ZHAO Yongrang²⁾, SHEN Bingzhen²⁾, ZHANG Lianzhen²⁾, LIU Baicheng¹⁾

1) Key Laboratory for Advanced Materials Processing Technology, Ministry of Education, Department of Mechanical Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084

2) CITIC Heavy Industries Co., Ltd., Luoyang 471039

Correspondent: HAN Zhiqiang, associate professor, Tel: (010)62794616,

E-mail: zqhan@mail.tsinghua.edu.cn

Supported by National Science and Technology Major Project (No.2011ZX04014-052)

Manuscript received 2011-05-24, in revised form 2011-08-06

ABSTRACT A cellular automaton (CA) model has been developed to simulate the microstructure evolution of ASTM A216 WCA cast steel during solidification and consequent cooling process. In the model, the thermodynamics and solute diffusion of the multicomponent system were taken into account by using Thermo-Calc and Dictra software. The peritectic solidification, α -ferrite/austenite transition and eutectoid transformation as well as the final microstructure can be predicted. To validate the model, a sand mold step-shaped casting was produced and metallographic examination was carried out, in which the content and the grain size of proeutectoid ferrite were measured by using OM, and the mean interlamellar spacing of pearlite was measured by using SEM. It was shown that the simulated results are in good agreement with the experimental results. As the cooling rate increases, proeutectoid α -ferrite content increased, while the mean grain size of proeutectoid α -ferrite and the average lamellar spacing of pearlite decreased.

KEY WORDS cellular automaton, solidification microstructure, numerical simulation, ASTM A216 WCA cast steel

* 国家科技重大专项资助项目 2011ZX04014-052

收到初稿日期: 2011-05-24, 收到修改稿日期: 2011-08-06

作者简介: 苏 斌, 男, 1985 年生, 博士生

DOI: 10.3724/SP.J.1037.2011.00299

大型铸钢件广泛用于电站、冶金、矿山、船舶等装备以及装备制造业, 如核电设备中的主泵泵体、汽轮机缸体, 大型冶金设备中的轧机机架、轧辊, 大型矿山设备中的中空轴、端盖、轮带、托轮等. 这些大型铸钢件的制造水平直

接关系到国家重点工程项目的质量、安全及进度, 具有重要意义^[1]。

在对大型铸钢件性能的控制过程中, 实际生产时通常非常重视热处理, 而对铸态微观组织重视不够, 但是对于结构复杂、壁厚较大的大型铸钢件, 铸态组织的晶粒尺寸、各相分数、珠光体层片间距和成分分布很不均匀, 这对于热处理奥氏体化过程, 包括奥氏体晶粒形核、长大和成分均匀化的影响非常大^[2-5]。因此, 建立铸钢凝固及后续冷却过程的相转变模型来预测铸态微观组织, 对于优化铸造工艺和控制铸件质量十分关键。对于铸钢凝固过程组织模拟, 国内外已有一些相关研究, 康秀红等^[6]用元胞自动机(CA)方法模拟了钢锭凝固过程中晶粒的形核与生长及柱状晶-等轴晶转变(columnar to equiaxed transition, CET)过程, 所模拟钢种不涉及 δ 铁素体/奥氏体(δ/γ)相变, 而对于C的质量分数小于0.5%的大型铸钢件都会发生 δ/γ 相变, 其对于铸态成分分布有重要的影响。Shibata等^[7]和Mcdonald等^[8]通过激光共聚焦显微镜观察了包晶反应, 将奥氏体的生长机制处理为一维简单模型并模拟了包晶转变的生长动力学, 但一维模型不能体现空间的面貌变化。此外, Zhang等^[9-11]、Tong等^[12,13]和Militzer等^[14-17]分别采用CA法、Monte Carlo法和相场法模拟了低碳钢热处理冷却过程中先共析铁素体晶粒形核与生长过程, 模型假定了奥氏体晶粒尺寸并对溶质分布进行了均一化假设, 与大型铸钢件中奥氏体晶粒大小及成分不均匀的实际不符。孙立斌等^[18]建立了ZG0Cr13Ni4Mo不锈钢凝固相变过程的物理和数学模型, 但模型仅考虑了C的扩散, 没有考虑其它合金元素对相变的影响。到目前为止, 尚未见考虑大铸钢件凝固及后续冷却涉及相变全过程且考虑多组元的扩散以及合金元素对相变影响的数学模型报道。

本文以大型铸钢件为背景, 研究开发预测铸钢件铸态微观组织的模型和仿真技术, 结合国内工厂生产的大型球磨机端盖, 建立了ASTM A216 WCA铸钢凝固及后续冷却过程相转变的CA模型, 模型中考虑了凝固和溶质扩散过程, 模拟了 δ 相晶粒形核生长、包晶反应、 γ 相晶粒形核生长、先共析 α 铁素体析出和珠光体转变过程, 预测了先共析铁素体的含量及其平均晶粒尺寸、珠光体的平均层片间距。为验证数值计算结果, 设计了阶梯形试件, 进行了浇注和测温实验, 观测了各阶梯测温点处的微观组织并与模拟结果进行了对比。

1 模型描述

1.1 相变过程分析

ASTM A216 WCA铸钢属于中碳微合金钢, 名义成分(质量分数, %)为: C 0.24—0.28, Si 0.3—0.45, Mn 0.75—0.90, S \leq 0.045, P \leq 0.04, Ni \leq 0.5, Cr \leq 0.5, Cu \leq 0.3, Mo \leq 0.2, V \leq 0.3, Fe余量, 结合Fe-C二元相图和Thermo-Calc计算^[19]可得出其从液态到室温

的相转变过程如下: 在温度 T 逐渐下降至液相线温度 T_L 时, 发生液相向 δ 铁素体转变 $L \rightarrow \delta$; T 进一步降低至包晶反应温度 T_P , 发生包晶反应 $L+\delta \rightarrow \gamma$ 和液相直接转变生成奥氏体 $L \rightarrow \gamma$; T 降低至奥氏体相变结束温度 A_3 , 发生奥氏体向先共析 α 铁素体转变 $\gamma \rightarrow \alpha$; T 降低至奥氏体相变开始温度 A_1 , 残余奥氏体向珠光体转变 $\gamma \rightarrow P(\alpha+Fe_3C)$ 。

1.2 相变模型的建立

1.2.1 $L \rightarrow \delta$ 形核模型. 形核阶段是从具有一定结晶区间的液相中生成 δ 相晶核, 采用Thévoz等^[20]提出的基于Gaussian分布的连续形核模型, 在给定过冷度下的新生晶核的密度由下式计算:

$$\frac{dn_\delta}{d(\Delta T')} = \frac{n_s}{\sqrt{2\pi}\Delta T_\sigma} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta T' - \Delta T_N}{\Delta T_\sigma}\right)^2\right) \quad (1)$$

式中, n_δ 为新生 δ 铁素体的晶核密度; $\Delta T'$ 为过冷度; ΔT_N 为最大形核过冷度; ΔT_σ 为标准方差过冷度; n_s 为异质形核基底的晶核密度。假定在一个时间步长内, 温度下降 ΔT , 相应的过冷度增加 $\delta(\Delta T)$, 此时熔体内新生晶核的密度 Δn_δ 可以表示为

$$\Delta n_\delta = \int_{\Delta T}^{\Delta T+\delta(\Delta T)} \frac{dn_\delta}{d(\Delta T')} d(\Delta T') \quad (2)$$

生长模型. 采用Braly和Flemings^[21]提出的考虑溶质在固相中反扩散、液相完全混合的溶质再分配模型, 通过Thermo-Calc进行多元合金的非平衡凝固路径计算获得的凝固过程中固相分数与温度的关系曲线如图1所示。可以通过固相分数的变化确定 L/δ 相界面的移动速率。

1.2.2 $L+\delta \rightarrow \gamma$ 和 $L \rightarrow \gamma$ (1) $L+\delta \rightarrow \gamma$ 形核模型. 当温度降到 T_P 时, 在 L 与 δ 的界面上会发生包晶反应($L+\delta \rightarrow \gamma$)生成一层 γ 相, 新生 γ 相沿着 L 和 δ 两相界面迅速生长, 将初生 δ 包裹起来, 因此, 假定初生 γ 相是一个晶粒且瞬间覆盖初生 δ 表面^[7,8]。

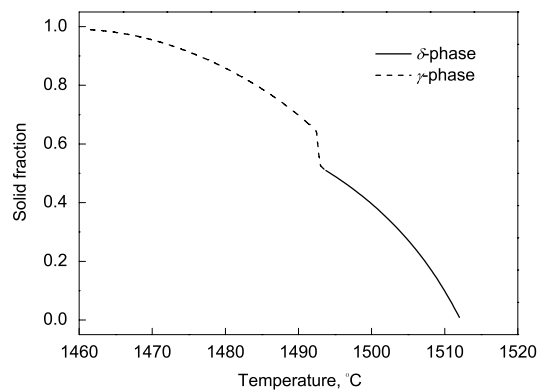


图 1 ASTM A216 WCA 钢凝固过程固相分数和温度之间的关系

Fig.1 Relationship between solid fraction and temperature during ASTM A216 WCA steel solidification

生长模型. 此过程包括 γ 相向 L 的生长及 γ 相向 δ 相的生长, 与 L/ δ 相界面的移动速率相似, L/ γ 相界面的移动速率可由 1.2.1 中凝固过程中固相分数与温度之间的相互关系求得. γ 相向 δ 相的生长采用多组元下的混合控制模型^[10,11], 即受界面反应和多组元原子扩散共同控制, δ/γ 相界面的移动速率 $v^{\delta/\gamma}$ 为

$$v^{\delta/\gamma} = M^{\delta/\gamma} \Delta G_{\delta \rightarrow \gamma} \quad (3)$$

式中, $M^{\delta/\gamma}$ 是 δ/γ 相界面的界面迁移率, 是溶质拖曳、尖端效应等多种作用的综合体现; $\Delta G_{\delta \rightarrow \gamma}$ 为 δ/γ 相界面的迁移驱动力, 由温度和界面成分确定. $M^{\delta/\gamma}$ 的计算式为

$$M^{\delta/\gamma} = M_0^{\delta/\gamma} \exp\left(-\frac{E^{\delta/\gamma}}{RT}\right) \quad (4)$$

式中, $M_0^{\delta/\gamma}$ 为常数, 因界面情况的不同而取值不同; R 是摩尔气体常数; $E^{\delta/\gamma}$ 为 δ/γ 相变激活能. $\Delta G_{\delta \rightarrow \gamma}$ 的计算式为

$$\Delta G_{\delta \rightarrow \gamma} = \sum_{i=1}^N c_i^\gamma |_{\delta/\gamma} (\mu_i^\delta - \mu_i^\gamma) \quad (5)$$

式中, N 为组元数; $c_i^\gamma |_{\delta/\gamma}$ 为组元 i 在 δ/γ 相界面处 γ 相中的摩尔分数; μ_i^δ 和 μ_i^γ 分别为组元 i 在 δ/γ 相界面处 δ 相和 γ 相中的化学势.

由于 γ 相 (fcc) 与 δ 相 (bcc) 的晶格结构不同, 在发生 $\delta \rightarrow \gamma$ 转变时, 在 δ/γ 相界面处的各组元原子将从 δ 相往 γ 相迁移, 相应的原子流量 $J_{\delta \rightarrow \gamma}$ 为

$$J_{\delta \rightarrow \gamma} = (c_i^\gamma |_{\delta/\gamma} - c_i^\delta |_{\delta/\gamma}) v^{\delta/\gamma} \quad (6)$$

式中, $c_i^\delta |_{\delta/\gamma}$ 为组元 i 在 δ/γ 相界面处 δ 相中的摩尔分数.

δ/γ 相界面处的 δ 相将与周围的 δ 相发生溶质扩散, δ/γ 相界面处的 γ 相将与周围的 γ 相发生溶质扩散, 满足以下溶质扩散方程:

$$\frac{\partial c_i^u}{\partial t} = D_i^u \nabla^2 c_i^u \quad (7)$$

式中, c_i^u 为组元 i 在相 u (δ 相或 γ 相) 中的摩尔分数; D_i^u 为组元 i 在相 u (δ 相或 γ 相) 中的扩散系数.

假定 $\delta \rightarrow \gamma$ 转变时新生成 γ 相的成分为平衡相图对应温度的平衡成分, 则 δ/γ 相界面处的 γ 相和 δ 相中的各组元的摩尔分数可通过式 (6) 和 (7) 计算获得.

(2) L \rightarrow γ

当温度和液相成分达到一定条件时, 残余液相会直接析出 γ 相, 此过程与从液相中直接析出 δ 相相似, 所以该过程采用的模型和从 L 中直接析出 δ 相相同.

1.2.3 $\gamma \rightarrow \alpha$ 形核模型. 当温度低于 A_3 时, α 相开始在 γ 晶粒晶界处形核^[22,23]. 经典形核速率 I 可以表示为^[24]

$$I = \eta \frac{2D_C^\gamma V x}{a^4 (3kT)^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{\xi}{\Delta G_a^2 kT}\right) \quad (8)$$

式中, D_C^γ 为 C 在 γ 中的扩散系数; V 为铁素体的原子体积; x 为 C 的摩尔分数; a 为 α 和 γ 的平均晶格常数; k 为 Boltzmann 常数; ΔG_a 为 α 相形核驱动力, 当温度下降到 $T (T < A_3)$ 时, 有

$$\Delta G_a(T) = \sum_{i=1}^N c_i^\gamma (\mu_i^\gamma(A_3) - \mu_i^\gamma(T)) \quad (9)$$

式中, c_i^γ 为组元 i 在 γ 相中的摩尔分数.

形核位置密度 η 和界面能量 ξ 分别为

$$\eta = N_a (\gamma_c + \gamma_0 - \gamma_{gb})^{\frac{1}{2}} \quad (10)$$

$$\xi = 4\pi\gamma_e^2 (\gamma_c + \gamma_0 - \gamma_{gb}) \quad (11)$$

式中, N_a 为 γ 相晶粒边界有效形核晶核的面积密度; γ_e , γ_c , γ_0 和 γ_{gb} 为 Pillbox 模型^[24-26] 中不同晶粒界面处的界面能, 其中 γ_e 是不可避免地形成错配面的界面能, γ_c 是 α 铁素体长大过程中移动界面的界面能, γ_0 是 α 铁素体核心和原奥氏体基体接触面 (不移动) 的界面能, γ_{gb} 是原奥氏体界面能. $\gamma_c + \gamma_0 - \gamma_{gb}$ 表示奥氏体晶界转变为奥氏体- α 铁素体晶界时界面能的变化值.

α 相的形核密度 n_α 为

$$n_\alpha = \int_T^{A_3} \frac{I(T')}{\varphi(T')} dT' \quad (12)$$

式中, $\varphi(T')$ 为冷却速率.

生长模型: α 铁素体的生长采用多组元下的混合控制模型^[10,11], 即 α 铁素体生长的速率 $v^{\gamma/\alpha}$ 由下式决定:

$$v^{\gamma/\alpha} = M^{\gamma/\alpha} \Delta G_{\gamma \rightarrow \alpha} \quad (13)$$

其中, $M^{\gamma/\alpha}$ 为广义的 γ/α 相界面迁移率, 其计算式为

$$M^{\gamma/\alpha} = M_0^{\gamma/\alpha} \exp\left(-\frac{E^{\gamma/\alpha}}{RT}\right) \quad (14)$$

式中, $M_0^{\gamma/\alpha}$ 为常数, 因界面情况的不同而取值不同; $E^{\gamma/\alpha}$ 为 γ/α 相变激活能. $\Delta G_{\gamma \rightarrow \alpha}$ 为 γ/α 相界面的迁移驱动力, 可由下式求得:

$$\Delta G_{\gamma \rightarrow \alpha} = \sum_{i=1}^N c_i^\alpha |_{\gamma/\alpha} (\mu_i^\gamma - \mu_i^\alpha) \quad (15)$$

式中, $c_i^\alpha |_{\gamma/\alpha}$ 为组元 i 在 γ/α 相界面处 α 相中的摩尔分数; μ_i^α 为组元 i 在 α 相中的化学势.

由于 γ 相 (fcc) 与 α 相 (bcc) 的晶格结构不同, 在发生 $\gamma \rightarrow \alpha$ 转变时, 在 γ/α 相界面处的各组元原子将从 α 相往 γ 相迁移, 相应的原子流量 $J_{\alpha \rightarrow \gamma}$ 为

$$J_{\alpha \rightarrow \gamma} = (c_i^\gamma |_{\gamma/\alpha} - c_i^\alpha |_{\gamma/\alpha}) v^{\gamma/\alpha} \quad (16)$$

式中, $c_i^\gamma|_{\gamma/\alpha}$ 为组元 i 在 γ/α 相界面处 γ 相中的摩尔分数. 同时 γ/α 相界面处的 γ 相将与周围的 γ 相发生溶质扩散过程, γ/α 相界面处的 α 相将与周围的 α 相发生溶质扩散过程, 满足式 (7).

假定 $\gamma \rightarrow \alpha$ 转变时新生成 α 相的成分为平衡相图对应温度的平衡成分, 则 γ/α 相界面处的 γ 相和 α 相中各组元的摩尔分数可通过式 (7) 和 (16) 计算获得.

1.2.4 $\gamma \rightarrow P(\alpha+Fe_3C)$ 随着温度的降低, 越来越多的 α 相形成, 这时溶质聚集在正在生长的 α 相前端的 γ 相中, 当温度降低且达到珠光体转变的开始温度时, 残余 γ 相将转变为铁素体与渗碳体片层相间的珠光体组织 [6,27,28], 本文假定该转变过程瞬间完成. 等温转变过程中珠光体转变的孕育期 t_{inc} 可由下式求得:

$$t_{inc} = b(T)^c \quad (17)$$

式中, b 和 c 为相关参数. 将试样在某温度下滞留时间除以该温度的孕育期所得值作为孕育率, 不同温度下的孕育率相加得出值达到 1 时代表孕育期结束, 珠光体转变开始. 根据等温转变过程的孕育期推算连续冷却时的珠光体转变开始温度, 在转变温度 T 下, 珠光体层片间距 λ 可由下式求出:

$$\lambda = 4d\sigma V_m / \Delta G_{\gamma \rightarrow P} \quad (18)$$

式中, d 为相关参数; σ 为表面能; V_m 为珠光体的摩尔体积; $\Delta G_{\gamma \rightarrow P}$ 为珠光体转变驱动力, 由转变温度和奥氏体成分确定. 温度下降到 T 时 ($T < A_1$), $\Delta G_{\gamma \rightarrow P}$ 为

$$\Delta G_{\gamma \rightarrow P}(T) = \sum_{i=1}^N c_i^\gamma (\mu_i^\gamma(A_1) - \mu_i^\gamma(T)) \quad (19)$$

1.3 数值方法

1.3.1 CA 模型 本文 CA 模型将模拟区域划分为如图 2 所示的正方形元胞空间, 每个元胞的边长为 Δh ,

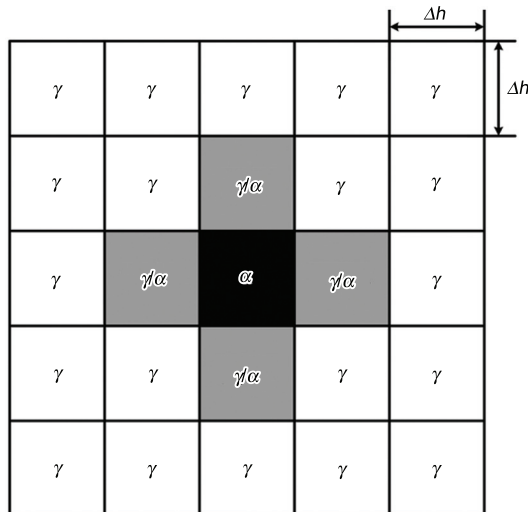


图 2 CA 模型及元胞

Fig.2 Illustration of the CA cells

黑色区域代表中心元胞, 灰色区域代表其邻居元胞. 模型赋予每个元胞单元 7 个控制变量: (1) 1 个取向变量, 以 1—100 间的一个正整数代表晶粒的取向; (2) 1 个状态变量, 用 1, 2, 3, 4, 5, 6 和 7 分别表示元胞为液相、 δ 相、 δ/γ 相界面、 γ 相、 γ/α 相界面、先共析 α 相和珠光体组织; (3) 4 个成分变量, 即元胞中 C 和 Mn 的摩尔分数 (模型中考虑 C 和 Mn 组元, 对于状态为相界面的元胞, 考虑新相和母相成分); (4) 1 个相界面的迁移距离变量 l , 对于相界面元胞, $0 < l < \Delta h$, 其余位置 $l=0$ 或 $l=\Delta h$.

1.3.2 模拟过程 (1) 初始条件: 在模拟的初始时刻, 赋予每个元胞相同的起始温度 (浇注温度) 与初始溶质浓度 (由实际合金成分确定), 初始状态均为液态.

(2) 温度变化: 通过宏观温度场模拟得到的冷却曲线获得冷却速率 φ , 在时间步长 Δt 内, 温度由 T 下降为 $T - \Delta t \cdot \varphi$.

(3) 形核: 以先共析 α 铁素体从奥氏体晶界析出为例, 对于奥氏体元胞 (i, j), 当在过冷状态下时, 由式 (12) 可求得该元胞在过冷温度下的形核密度 $n_\alpha(i, j)$, 计算域中总的先共析 α 铁素体晶核数目 N_α 为

$$N_\alpha = \sum_{(i,j) \in \gamma} n_\alpha(i, j) \cdot S_{cell} \quad (20)$$

式中, S_{cell} 为一个元胞的面积, 对于每个处于奥氏体晶界位置的奥氏体元胞, 其形核概率由该元胞的形核密度决定, 形核密度越大则形核概率越大.

(4) 生长: 在 1 个时间步长 Δt 内, 温度由 T 下降为 $T - \Delta t \cdot \varphi$, 计算域中总固相率增量 Δf_s 可由图 1 获得, 假定晶粒按照等轴球状长大, 每个晶粒在 Δt 内的半径增量 Δr 相等并可由下式求出:

$$\Delta f_s \cdot S_{total} = \pi \sum_{m=1}^{N_s} [(r_m + \Delta r)^2 - r_m^2] \quad (21)$$

式中, S_{total} 为计算域的总面积; N_s 为总的晶粒数目; r_m 为第 m 个晶粒的半径.

对于先共析 α 铁素体向奥氏体生长, 在 t_0 时刻, γ/α 相界面元胞中组元 i 在 γ 相和 α 相中的摩尔分数分别为 $c_i^\gamma|_{\gamma/\alpha}^{t_0}$ 和 $c_i^\alpha|_{\gamma/\alpha}^{t_0}$, 该元胞中相界面的迁移距离为 $l_{t_0}^{\gamma/\alpha}$, 此时相界面迁移速率 $v_{t_0}^{\gamma/\alpha}$ 可由式 (13) 求出, Δt 时间内相界面的迁移距离 $\Delta l^{\gamma/\alpha}$ 为

$$\Delta l^{\gamma/\alpha} = \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} v_{t_0}^{\gamma/\alpha} dt \quad (22)$$

则 $t_0 + \Delta t$ 时刻元胞中 γ/α 相界面的迁移距离 $l_{t_0 + \Delta t}^{\gamma/\alpha}$ 为

$$l_{t_0 + \Delta t}^{\gamma/\alpha} = l_{t_0}^{\gamma/\alpha} + \Delta l^{\gamma/\alpha} \quad (23)$$

当 $l_{t_0 + \Delta t}^{\gamma/\alpha} \geq \Delta h$ 时, γ/α 相界面元胞将转变为 α 铁

素体元胞, 否则保持原态.

假定 Δt 时间内新生成 α 相的成分为平衡相图对应温度的平衡成分 $c_i^{\alpha, \text{equi}}$, 则 $t_0 + \Delta t$ 时刻, 在 γ/α 相界面元胞中组元 i 在 γ 相和 α 相中的摩尔分数 $c_i^{\gamma|_{\gamma/\alpha}^{t_0+\Delta t}}$ 和 $c_i^{\alpha|_{\gamma/\alpha}^{t_0+\Delta t}}$ 分别为

$$c_i^{\gamma|_{\gamma/\alpha}^{t_0+\Delta t}} = [(c_i^{\gamma|_{\gamma/\alpha}^{t_0}} - c_i^{\alpha, \text{equi}}) \Delta l^{\gamma/\alpha} + c_i^{\gamma|_{\gamma/\alpha}^{t_0}} (\Delta h - l_{t_0+\Delta t}^{\gamma/\alpha})] / (\Delta h - l_{t_0+\Delta t}^{\gamma/\alpha}) \quad (24)$$

$$c_i^{\alpha|_{\gamma/\alpha}^{t_0+\Delta t}} = (c_i^{\alpha, \text{equi}} \cdot \Delta l^{\gamma/\alpha} + c_i^{\gamma|_{\gamma/\alpha}^{t_0}} \cdot l_{t_0+\Delta t}^{\gamma/\alpha}) / l_{t_0+\Delta t}^{\gamma/\alpha} \quad (25)$$

在采用式 (22)–(25) 进行计算后, 再通过式 (7) 分别求解计算域中 γ 相和 α 相中的溶质场变化, 包括计算 γ/α 相界面元胞中的 γ 相与周围 γ 相元胞的溶质扩散过程, γ/α 相界面元胞中的 α 相与周围 α 相元胞的溶质扩散过程, 以获得 $t_0 + \Delta t$ 时刻 γ/α 相界面元胞中组元 i 在 γ 相和 α 相中的最终摩尔分数. 对于奥氏体向 δ 铁素体的生长, 计算过程与先共析 α 铁素体向奥氏体生长相似.

1.3.3 考虑多组元扩散的热力学及动力学参数计算
本文计算过程中的相转变温度、多元合金的非平衡凝固路径、相界面处各组元在各相中的化学势、 α 相形核驱动力 ΔG_α 和珠光体转变驱动力 $\Delta G_{\gamma \rightarrow P}$ 均由 Thermo-Calc 计算获得. 计算得到的不同 C 和 Mn 含量 (质量分数) 钢的 α 相形核驱动力 ΔG_α 与温度的关系如图 3 所示.

Dictra 软件 [29] 中的模拟过程基于多组元扩散方程的数值计算, 其热力学参数来自于 Thermo-Calc, 而迁移率作为扩散参数储存于自身的 MOB 数据库中, 结合迁移率和有关的热力学参数便可计算与温度和浓度有关的扩散系数. 本文考虑 C 和 Mn 的扩散, 各组元的扩散系数 D 为

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{Q_D}{RT}\right) \quad (26)$$

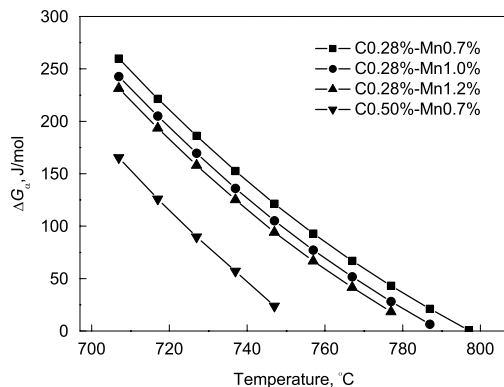


图 3 先共析 α 铁素体形核驱动力与温度的关系

Fig.3 Relationship between driving force for α -ferrite nucleation and temperature of ASTM A216 WCA steels with different C and Mn contents

式中, D_0 为扩散常数, Q_D 为扩散激活能. 各组元在各相中的扩散系数均由 Dictra 计算获得. 不同温度下, C 和 Mn 的扩散系数与它们浓度的关系计算结果如图 4 所示.

2 模拟结果与实验验证

2.1 浇注实验

为了使实验数据有针对性和对比性, 浇注实验和实际球磨机端盖生产同时进行, 金属液取自同一炉钢水, 实际化学成分 (质量分数, %) 为: C 0.28, Si 0.36, Mn 0.90, S 0.025, P 0.025, Ni 0.2, Cr 0.25, Cu 0.25, Mo 0.15, Fe 余量.

为反映实际铸件不同厚度处的凝固特点, 设计了阶梯形试件, 阶梯从厚到薄标记为从 1 到 5, 在各阶梯中部放置 B 型热电偶进行测温, 浇注时采用 IMC 数据采集仪记录测温点的冷却曲线, 试样尺寸及测温位置如图 5 所示. 浇注温度约 1540 °C, 浇注后约冷却 48 h 后开箱落砂, 然后空冷至室温.

2.2 温度场

测温过程中 No.1 阶梯中的热电偶在实验过程中被损坏而没有得到数据, 因此只获得了 No.2—5 号阶梯的冷却曲线, 测温点上获得的冷却曲线是有限位置的数据, 为了对整个阶梯件的冷却情况有全面的认识, 从而模拟和分析不同位置的组织转变, 用 ProCAST 模拟计算了阶梯试件凝固冷却过程宏观温度场, 测温点的冷却曲线的模拟结果与实际测温曲线如图 6 所示. 可见, 从 No.1—5 阶梯, 冷却速率逐渐增加, 模拟获得的冷却曲线与实际测温曲线基

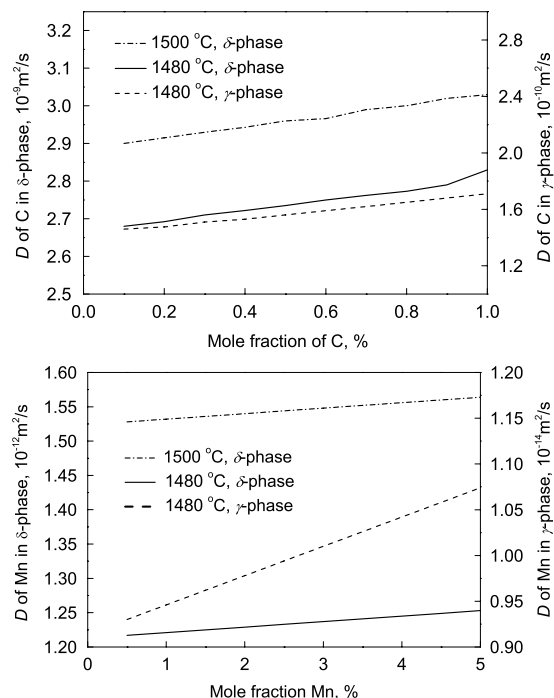


图 4 C 和 Mn 的扩散系数

Fig.4 Diffusion coefficients (D) of C and Mn

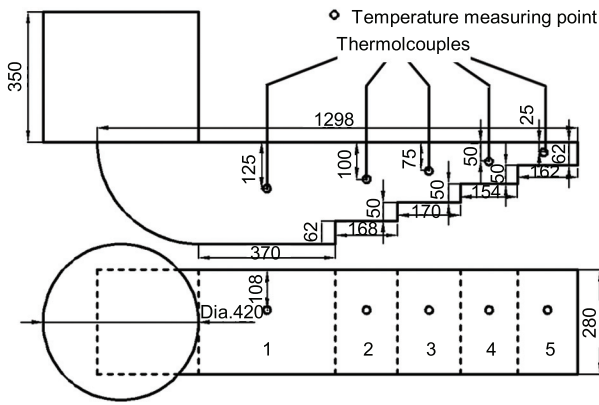


图 5 阶梯件尺寸及测温点的位置

Fig.5 Geometry of step-shaped casting and the positions of thermocouples (unit: mm)

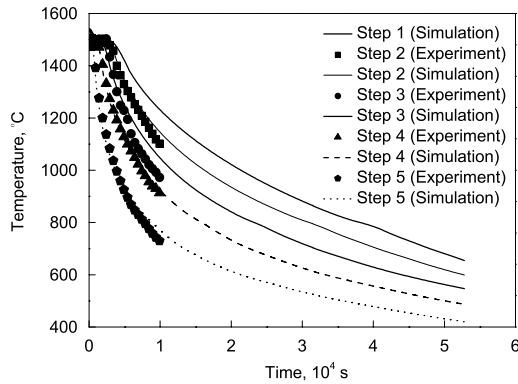


图 6 不同阶梯位置实际冷却曲线和模拟曲线

Fig.6 Simulated and measured cooling curves of different steps

本吻合, 因此可以用数值模拟的结果来分析研究对象.

2.3 模拟参数

模拟在 150×100 的正方形元胞网格中进行 (对应一个 $1.5 \text{ mm} \times 1 \text{ mm}$ 的实际区域). 模拟中所使用的物理参数 [6,24,27,28] 如表 1 所示.

2.4 微观组织

将阶梯试件切割和取样, 采用 4% 硝酸酒精作为侵蚀剂, 分别用光学显微镜 (OM) 和扫描电镜 (SEM) 观察试样的微观组织, 结果如图 7 所示, 其中, 图 7a—e 为 1—5 号阶梯的 OM 照片, 明亮部分为先共析 α 铁素体, 黑色部分为珠光体; 图 7f—j 为对应的模拟结果, 图中不同灰度区域表示不同取向的奥氏体晶粒, 不同颜色彩色区域表示不同取向的先共析 α 铁素体晶粒. 对图 7 所示各阶梯中先共析 α 铁素体面积分数和晶粒尺寸进行统计, 结果如图 8a 和 b 所示. 结合图 7, 图 8a 和 b 可知随着冷却速率的增大, 先共析 α 铁素体的含量 (面积分数) 增加, 其平均晶粒尺寸减小.

表 1 模拟中所使用的参量取值

Table 1 Parameters used in the simulation [6,24,27,28]

Parameter	Value	Unit
Liquidus temperature (T_L)	1513	$^{\circ}\text{C}$
Peritectic temperature (T_P)	1493.5	$^{\circ}\text{C}$
Starting temperature of austenite to α -ferrite transformation (A_3)	807	$^{\circ}\text{C}$
Eutectoid temperature (A_1)	707	$^{\circ}\text{C}$
Even degree of undercooling (ΔT_N)	10	$^{\circ}\text{C}$
Normal curvature degree of undercooling (ΔT_{σ})	4	$^{\circ}\text{C}$
Maximum density of nuclei (n_s)	10^7	m^{-2}
Activation energy for atom motion at the δ/γ interface ($E^{\delta/\gamma}$)	140	kJ/mol
Pre-exponential factor ($M_0^{\delta/\gamma}$)	0.01	$\text{mol}\cdot\text{m}/(\text{J}\cdot\text{s})$
Atomic volume of α -ferrite (V)	0.00824	nm^3
Average lattice parameter of α -ferrite and γ (a)	0.329	nm
Area density of the atomic sites available for nucleation at γ boundaries (N_a)	10^3	m^{-2}
Edge energy (γ_e)	0.032	J/m^2
Difference of interfacial and grain boundary energies ($\gamma_c + \gamma_0 - \gamma_{gb}$)	0.0065	J/m^2
Activation energy for atom motion at the γ/α interface ($E^{\gamma/\alpha}$)	140	kJ/mol
Pre-exponential factor ($M_0^{\gamma/\alpha}$)	0.001	$\text{mol}\cdot\text{m}/(\text{J}\cdot\text{s})$
Adjustable parameter (b)	0.04	s
Adjustable parameter (c)	2	-
Adjustable parameter (d)	140	-
Molar volume of pearlite (V_m)	7.3×10^{-6}	m^3/mol
Surface energy (σ)	1	J/m^2

用 SEM 对金相试样进行观察, 测量了珠光体平均片层间距并与模拟结果进行了对比, 结果如图 8c 所示. 可见, 随着冷却速率的增大, 珠光体平均片层间距减小.

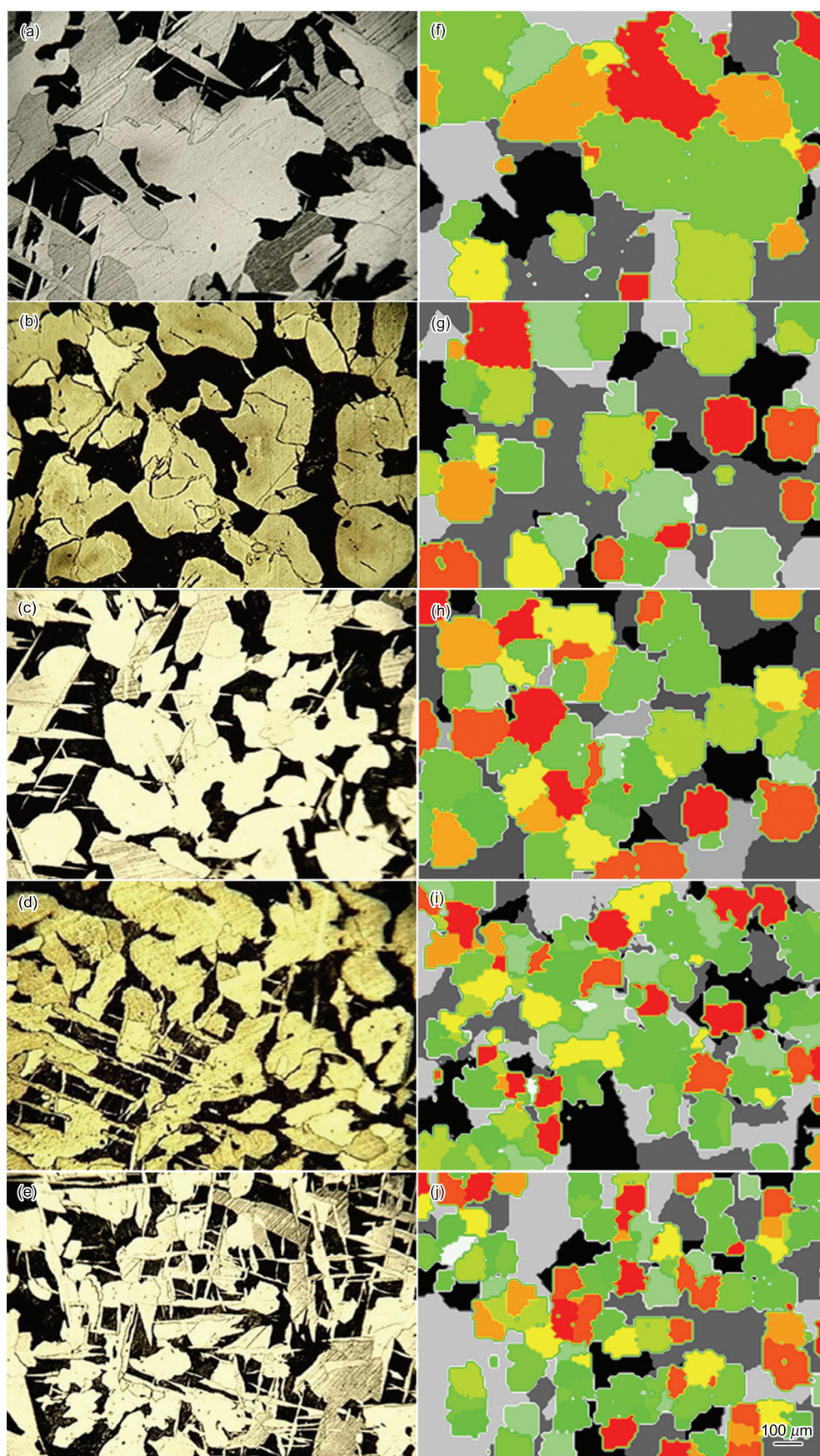


图 7 各阶梯测温点处微观组织的实验和模拟结果

Fig.7 Experimental (a—e) and simulated (f—j) microstructures of No.1 (a, f), No.2 (b, g), No.3 (c, h), No.4 (d, i) and No.5 (e, j) steps

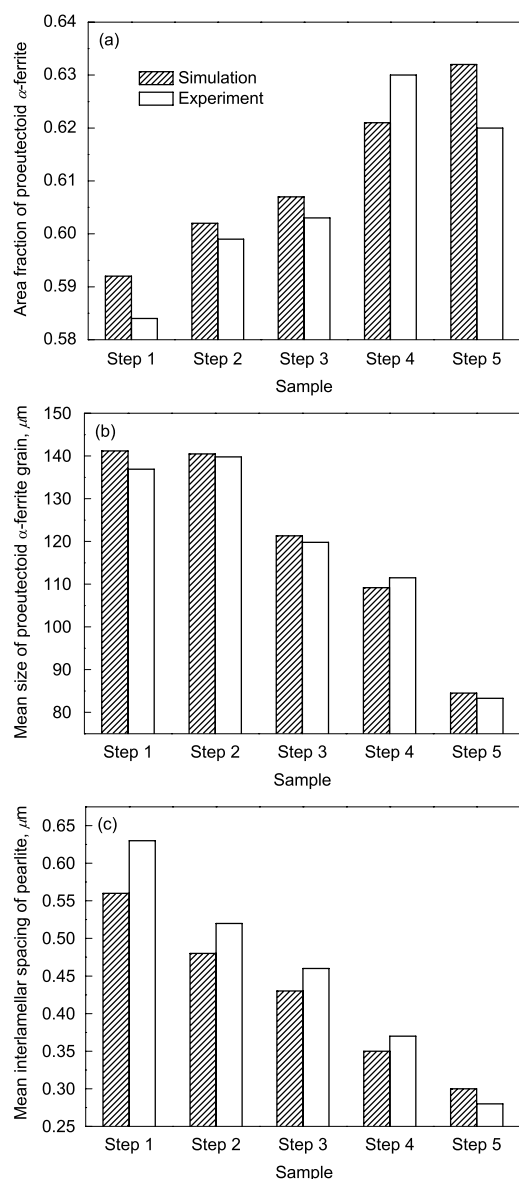


图 8 各阶梯中先共析 α 铁素体的面积分数和平均晶粒尺寸及珠光体平均片层间距

Fig.8 Area fraction (a) and mean size (b) of proeutectoid α ferrite and mean interlamellar spacing of pearlite (c) in different steps

3 结论

结合 Thermo-Calc 和 Dictra 软件考虑多组元扩散对相变动力学的影响, 建立了 ASTM A216 WCA 铸钢凝固及后续冷却过程相转变的 CA 模型, 设计阶梯形试件进行浇注实验, 结果表明, 模拟结果与实验结果符合良好, 随着冷却速率的增大, 先共析 α 铁素体的含量增加, 同时先共析 α 铁素体的平均晶粒尺寸和珠光体的平均层片间距减小。

参考文献

[1] Huang T Y, Liu X G, Kang J W, Liu B C. *Foundry*, 2007; 56: 899

- (黄天佑, 刘小刚, 康进武, 柳百成. 铸造, 2007; 56: 899)
- [2] Roosz A, Gacsi Z, Fuchs E G. *Acta Metall*, 1983; 21: 269
- [3] García de Andrés C, Caballero F G, Capdevila C, Bhadeshia H K D H. *Scr Mater*, 1998; 39: 791
- [4] Caballero F G, Capdevila C, García de Andrés C. *J Mater Sci*, 2002; 37: 3533
- [5] Oliveira F L G, Andrade M S, Cota A B. *Mater Charact*, 2007; 58: 256
- [6] Kang X H, Du Q, Li D Z, Li Y Y. *Acta Metall Sin*, 2004; 40: 152
(康秀红, 杜 强, 李殿中, 李依依. 金属学报, 2004; 40: 452)
- [7] Shibata H, Arai Y, Suzuki M, Emi T. *Metall Mater Trans*, 2000; 31B: 981
- [8] McDonald N J, Sridhar S. *J Mater Sci*, 2005; 40: 2411
- [9] Zhang L, Zhang C B, Wang Y M, Wang S Q. *Acta Metall Sin*, 2004; 40: 599
(张 林, 张彩磊, 王元明, 王绍青. 金属学报, 2004; 40: 599)
- [10] Zhang L, Zhang C B, Wang Y M, Wang S Q, Ye H Q. *Acta Mater*, 2003; 51: 5519
- [11] Lan Y J, Li D Z, Li Y Y. *Acta Mater*, 2003; 51: 5519
- [12] Tong M M, Li D Z, Li Y Y. *Acta Mater*, 2004; 52: 1155
- [13] Tong M M, Li D Z, Li Y Y, Ni J. *Metall Mater Trans*, 2002; 33A: 3111
- [14] Militzer M, Mecozzi M G, Sietsma J, Zwaag S V. *Acta Mater*, 2006; 54: 3961
- [15] Huang C J, Browne D J, McFadden S. *Acta Mater*, 2006; 54: 11
- [16] Huang C J, Browne D J. *Metall Mater Trans*, 2006; 37A: 589
- [17] Loginova I, Odqvist J, Amberg G, Ågren J. *Acta Mater*, 2003; 51: 1327
- [18] Sun L B, Xu Q Y, Liu B C. *Acta Metall Sin*, 2003; 39: 387
(孙立斌, 许庆彦, 柳百成. 金属学报, 2003; 39: 387)
- [19] Andersson J, Helander T, Höglund L, Shi P F, Sundman B. *Calphad*, 2002; 26: 273
- [20] Thévoz P, Desbiolles J L, Rappaz M. *Metall Mater Trans*, 1989; 20A: 311
- [21] Brody H D, Flemings M C. *Trans AIME*, 1966; 236: 615
- [22] Shang C J, Hu L J, Yang S W, Wang X M, Zhao Y T, He X L. *Acta Metall Sin*, 2005; 41: 471
(尚成嘉, 胡良均, 杨善武, 王学敏, 赵运堂, 贺信莱. 金属学报, 2005; 41: 471)
- [23] Fazeli F, Militzer M. *Metall Mater Trans*, 2005; 36A: 1395
- [24] Militzer M, Pandi R, Hawbolt E B. *Metall Mater Trans*, 1996; 27A: 1547
- [25] Wang Q C, Yang Z G, Li Z D. *Acta Metall Sin*, 2007; 43: 344
(王启超, 杨志刚, 李昭东. 金属学报, 2007; 43: 344)
- [26] Wang Q C, Yang Z G, Zhang C. *Acta Metall Sin*, 2008; 44: 708
(王启超, 杨志刚, 张 弛. 金属学报, 2008; 44: 708)
- [27] Varma M R, Sasikumar R, Pillai S G K, Nair P K. *Bull Mater Sci*, 1996; 27A: 1547
- [28] Nakajima K, Apel M, Steinbach I. *Acta Mater*, 2006; 54: 3665
- [29] Borgenstam A, Engstrom A, Höglund L, Ågren J. *J Phase Equilibria*, 2000; 21: 269