

基于 3D-CAFE 法的连铸 Ag-28Cu 合金凝固组织的数值模拟

杨云峰, 谢 明*, 李 艳, 陈 松, 杨唯一, 任县利
(昆明贵金属研究所 稀贵金属综合利用新技术国家重点实验室, 昆明 650106)

摘 要: 基于 3D-CAFE 法对连铸法制备的 Ag-28Cu 合金的凝固组织进行了模拟, 研究了表面换热系数、浇注温度和拉速对凝固组织的影响。结果表明, 增大表面换热系数、降低浇注温度、提高拉速, 可起到细化晶粒的效果。在最佳工艺条件为表面换热系数 $1800 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$ 、浇注温度 830°C 、拉速 1.5 m/min 时, Ag-28Cu 合金的凝固组织等轴晶比例最大, 且晶粒较细。

关键词: 金属材料; CAFE; Ag-28Cu; 凝固组织; 浇注温度; 表面换热系数

中图分类号: TG244, TF832 **文献标识码:** A **文章编号:** 1004-0676(2016)01-0021-06

Numerical Simulation of Solidification Structures of Ag-28Cu Alloy Continuous Casting Based on 3D-CAFE Method

YANG Yunfeng, XIE Ming*, LI Yan, CHEN Song, YANG Weiyi, REN Xianli
(State Key Laboratory of Advanced Technologies for Comprehensive Utilization of Platinum Metals,
Kunming Institute of Precious Metals, Kunming 650106, China)

Abstract: Based on 3D-CAFE method, the solidification structures of the Ag-28Cu alloy continuous casting is simulated, and the effects of surface heat transfer coefficient, pouring temperature and casting speed on solidification structure were studied. The results show that by increasing the surface heat transfer coefficient, reducing the pouring temperature and improving the drawing speed, which can have the beneficial effect to grain refinement. Under the best process conditions, that is: the surface heat transfer coefficient is $1800 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$, the pouring temperature is 830°C , the casting speed is 1.5 m/min , Ag-28Cu alloy solidification structure have the largest proportion of equiaxed grains and the finer grain size.

Key words: metal materials; CAFE; Ag-28Cu; micro structures; pouring temperature; surface coefficient of heat transfer

CAFE 法(Cellular Automaton-Finite Element model)是首个结合了宏观热流计算和微观晶粒生长的凝固组织计算模型。庞瑞朋等^[1]采用 CAFE 法对 430 铁素体不锈钢铸件在缓冷、空冷和水冷条件下凝固过程进行了模拟, 发现冷却速率越大, 柱状晶比例越高。Zaeem 等人^[2-3]使用 CAFE 模型分别对 AZ91 合金和 Al-3.0Cu 合金的凝固过程中的等轴枝晶生长进行了模拟, 其二次枝晶间距 (SDAS)和冷却速率的模拟结果与实验数据相符。Wang 等^[4]使用 CAFE 模型对

9SMn28 易切削钢的凝固过程进行了模拟, 结果表明: 平均形核过冷度越大, 柱状晶区范围越大; 最大形核密度越大, 晶粒尺寸越小。但是, 在现有对凝固微观组织模拟的相关报道中, 贵金属合金仍然是一个空白。

Ag-28Cu 合金是典型的共晶合金, 凝固过程中溶质分凝显著。连铸技术作为近终形铸造技术的一种, 具有增加金属实用率、节约能源、提高铸坯质量、改善劳动条件等优点^[5]。但在连铸过程中, 其工

收稿日期: 2015-03-12

基金项目: 国家自然科学基金(项目号 51164015)、云南省重点基金项目(2011FA026)、云南省院所技术开发专项(2011CF012)。

第一作者: 杨云峰, 男, 硕士研究生, 研究方向: 凝固模拟研究。E-mail: yang_yunfeng@yeah.net

*通讯作者: 谢 明, 男, 研究员, 研究方向: 合金凝固成型控制和性能研究。E-mail: powder@ipm.com.cn

艺参数（如换热条件、浇注温度和拉速等）对铸坯质量影响较大，且通过实验寻找最佳的工艺参数对贵金属来说成本巨大，而计算机模拟则为工艺的改进和研究提供了一种低成本、高效率的途径^[6-7]。本文采用 3D-CAFE 法对连铸法制备 Ag-28Cu 合金的凝固组织进行模拟，分析不同换热系数、浇注温度和拉速对凝固组织的影响，得到更好的工艺参数。

1 3D-CAFE 计算模型

1.1 连续形核模型

凝固形核阶段采用 Rappaz 等^[8]提出的基于高斯分布的确定性形核模型，该模型认为形核的特征应该是连续的曲线而不是离散分布，形核位置由连续分布函数 $n(\Delta T)$ 来描述：

$$n(\Delta T) = \frac{n_{\max}}{\Delta T_{\sigma} \sqrt{2\pi}} \int_0^{\Delta T} \exp\left[-\frac{(\Delta T - \Delta T_{\max})^2}{2\Delta T_{\sigma}^2}\right] d(\Delta T) \quad (1)$$

式中， $n(\Delta T)$ 为过冷度 ΔT 时的晶粒密度， $n_{\max}$ 为正态分布从 0 到 ∞ 积分得到的最大形核质密度； $\Delta T_{\max}$ 为最大形核过冷度， ΔT_{σ} 为形核过冷度标准方差。

1.2 生长动力学模型

在凝固过程中，形核过冷度 ΔT 一般被看做下列 4 个过冷度的总和，其表达式为：

$$\Delta T = \Delta T_c + \Delta T_l + \Delta T_k + \Delta T_r \quad (2)$$

式中， ΔT 为枝晶尖端的过冷度， ΔT_c 为成份过冷度， ΔT_l 为热过冷度， ΔT_k 为动力学过冷度， ΔT_r 为曲率过冷度。对于大多数合金来说，后 3 项过冷度相对于成份过冷度 ΔT_c 来说很小，所以在计算中可以忽略它们的影响。

Kurz 等^[8-9]在研究快速定向枝晶凝固时，考虑了枝晶生长速率 v 对溶质分配系数、扩散系数及相图的影响，建立了描述枝晶尖端生长的动力学模型 (KGT 模型)。为加快计算的进程，对 KGT 模型进行拟合，得到枝晶生长速度 $v(\Delta T)$ 和形核过冷度 ΔT 之间的关系，其表达式为：

$$v(\Delta T) = a_2 \Delta T^2 + a_3 \Delta T^3 \quad (3)$$

式中， a_2 、 a_3 为生长动力学参数， $\text{m}/(\text{s} \cdot \text{K}^3)$ 。

1.3 CA 与 FE 模型耦合

为了将 FE 和 CA 耦合在一个模型中，同时考虑结晶潜热的影响，在 FE 节点和 CA 元胞中引入一个插值因子，如图 1 所示。

图 1 中，位于有限元 I 中心的 CA 元胞 ω 拥有来自 3 个 FE 节点 (i, j, k) 的非零插值系数 $P_{\omega i}$ 、 $P_{\omega j}$ 、 $P_{\omega k}$ 。结合已知的 FE 节点和插值因子，就可以确定

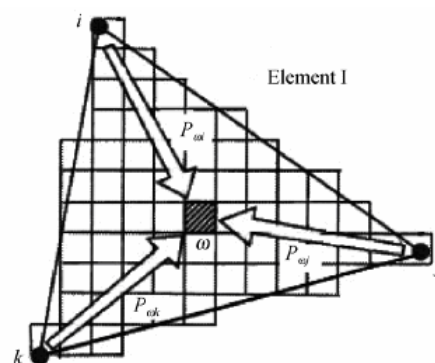


图 1 FE 网格和 CA 元胞的关系^[10]

Fig.1 Relation between FE mesh and CA cells^[10]

网格中 CA 元胞的温度。在节点处，采用同样的插值因子对晶粒形核和生长过程释放的潜热进行求和，就可以知道温度的变化情况。

1.4 模拟参数的确定

溶质在液相中的扩散系数 D_L 按式(4)计算

$$D_L = D_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad (4)$$

式中，气体常数 $R=8.3145 \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$ 。由液相线斜率、平衡分配系数、液态扩散系数和 Gibbs-Thomson 系数计算得到枝晶尖端生长动力参数 $a_2=2.27202 \times 10^{-8} \text{ m}/(\text{s} \cdot \text{K}^3)$ ， $a_3=1.09001 \times 10^{-7} \text{ m}/(\text{s} \cdot \text{K}^3)$ 。模拟计算的铸件尺寸为 $\Phi 8 \times 37 \text{ mm}$ ；节点数为 19766，六面体单元总数为 96544；CAFE 计算域为 $\Phi 8 \times 4 \text{ mm}$ 。计算所用物性参数如表 1 所示。

表 1 计算所用 Ag-28Cu 合金的物性参数^[11]

Tab.1 Physical parameters of Ag-28Cu alloy for calculation^[11]

参数	数值
密度 (ρ)/(kg/m^3)	10^4
共晶温度 (T_m)/ $^{\circ}\text{C}$	779
导热系数 (k_T)/($\text{W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$)	352
潜热 (L)/ kJ/kg	-166.4
比热 ($C_{p,l}$)/($\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$)	32
热扩散系数 (α)/(m^2/s)	5.4346×10^{-5}
扩散常数 (D_0)/(m^2/s)	2.42×10^{-7}
活化能 (Q)/(J/mol)	48886
Ag 相液相线斜率 (m_a)/($\text{K}/\text{at}\%$)	-4.560
Cu 相液相线斜率 (m_p)/($\text{K}/\text{at}\%$)	5.067
平衡分配系数 (k)	0.313
Gibbs-Thomson 系数 (Γ)/($\text{m} \cdot \text{K}$)	1.4486×10^{-7}

此外，计算采用的体形核密度 $n_{v, \max}=8\times10^6\text{ m}^{-3}$ ，面形核密度 $n_{s, \max}=1\times10^6\text{ m}^{-2}$ ；体形核过冷度、面形核过冷度、体过冷度标准方差和面过冷度标准方差分别为： $\Delta T_{v, \max}=0.25\text{ K}$ ， $\Delta T_{s, \max}=0.2\text{ K}$ ， $\Delta T_{v, \sigma}=0.1\text{ K}$ ， $\Delta T_{s, \sigma}=0.1\text{ K}$ 。

2 模拟结果和讨论

2.1 结晶过程和实验结果

为研究不同工艺参数对连铸 Ag-28Cu 合金凝固组织的影响，选择不同的铸造速度、浇注温度和表面换热系数进行模拟，工艺条件如表 2 所列。M1 工艺参数的凝固模拟结果和实验结果对比如图 2、3

所示，图 4 为连铸 Ag-28Cu 合金的宏观组织。

表 2 连铸工艺参数

Tab.2 Process parameters of continuous casting			
No.	铸造速度/ min	浇注 温度/℃	表面换热系数/ (W/m ² ·K)
M1	1.1	830	1800
M2	1.1	830	3000
M3	1.1	830	5000
M4	1.1	930	5000
M5	1.1	1030	5000
M6	1.3	830	1800
M7	1.5	830	1800

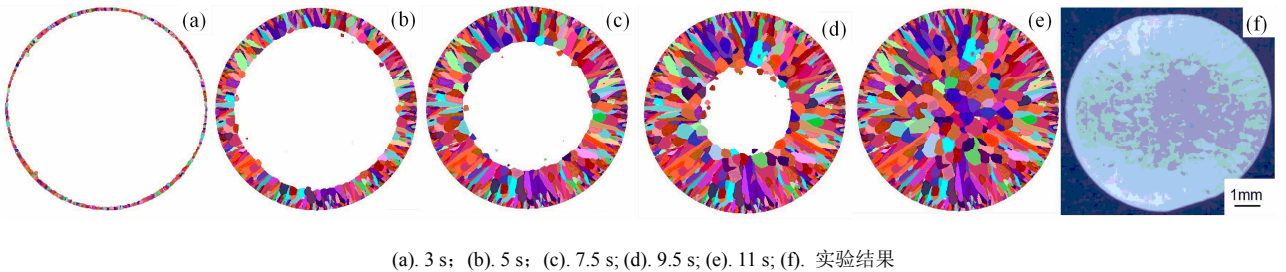


图 2 模拟铸件横截面的结晶过程和实验结果

Fig.2 Simulate crystallization process of M1 [(a~e): 3~11 s] and the experimental results of cross section of castings (f)

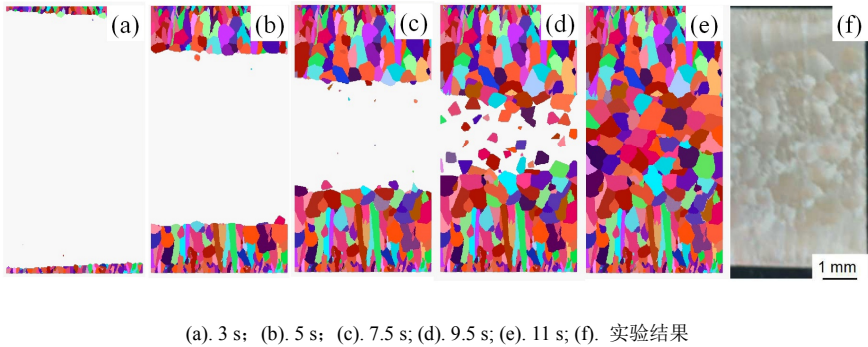


图 3 模拟铸件纵截面的结晶过程和实验结果

Fig.3 Simulate crystallization process of M1 [(a~e): 3~11 s] and the experimental results of lengthwise section of castings (f)

图 2、3 中不同的颜色区域代表不同的晶粒取向。由图 2、3 可看出，表面细晶区最先在模具表面形成，接着柱状晶垂直于铸件表面逆热流方向生长；

当柱状晶生长停止，等轴晶开始在铸件中心形核，并不断长大，直到晶粒相互接触，凝固过程结束。

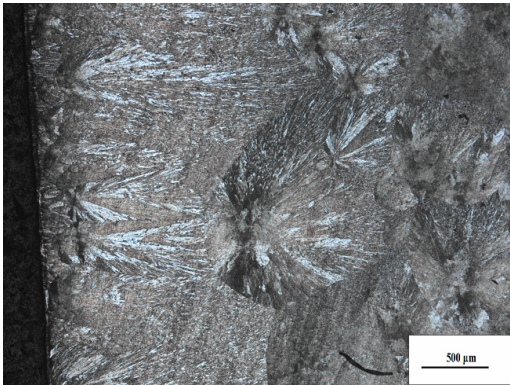


图 4 连铸 Ag-28Cu 合金宏观组织

Fig.4 Macrostructure of Ag-28 Cu alloy by continuous casting

图 4 中，连铸 Ag-28Cu 合金柱状晶长度平均为 1.40 mm，等轴晶直径大部分介于 0.80~1.34 mm 之间，而利用 3D-CAFE 模块计算的 M1 条件下的晶

粒平均直径为 1.40 mm，说明 3D-CAFE 模块可以运用于连铸 Ag-28Cu 合金的凝固组织模拟，其结果和实验结果吻合较好。

2.2 模拟结果讨论

在连铸生产过程中，在提高提速、减低过热度的条件下，提高铸件的性能，一直是众多研究者的目标。为研究不同换热系数、浇注温度和拉速对凝固组织的影响，分别对模型 M1、M2、M3 设置不同的换热系数，分别为 1800、3000、5000 W/(m²·K)；对模型 M3、M4、M5 设置不同的浇注温度，分别为 830、930、1030℃；对模型 M1、M6、M7 设置了不同的铸造速度，分别为 1.1、1.3、1.5 m/min，具体工艺参数见表 2 所列。图 5 为 7 种工艺条件下的 Ag-28Cu 合金凝固组织模拟结果，表 3 列出了不同模型对应的模拟统计结果，图 6 为不同表面换热系数、浇注温度和拉速对应的晶粒尺寸分布结果。

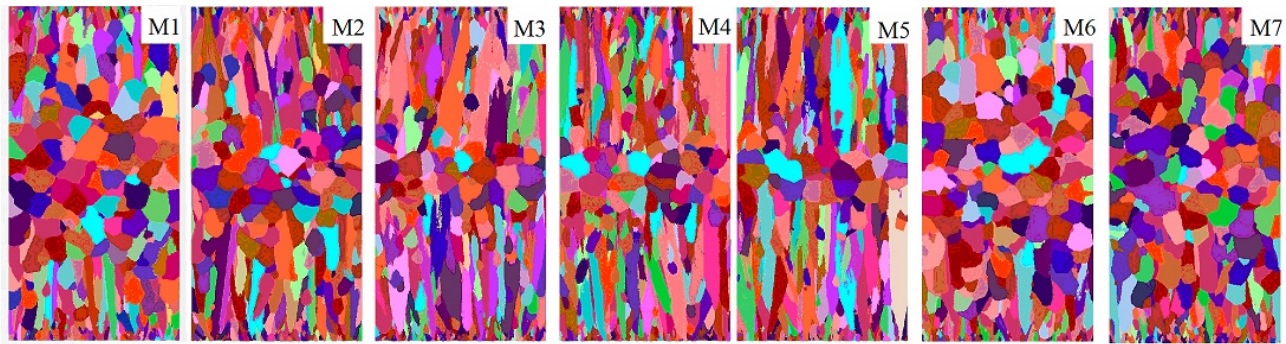


图 5 7 种工艺条件下的 Ag-28Cu 合金凝固组织模拟结果

Fig.5 Results of solidifying structure of Ag-28Cu alloys simulated by seven process conditions

从图 5 可看出，随表面换热系数的增大，柱状晶区比例增大，等轴晶区比例减小；增加拉速使柱状晶区比例减小，等轴晶区比例增大；而浇注温度对柱状晶和等轴晶比例影响较小。

表 3 7 种工艺条件下的 Ag-28Cu 合金凝固组织模拟模拟结果统计

Tab.3 Statistical results of solidifying structure of Ag-28Cu alloys simulated by seven process conditions

统计项	M1	M2	M3	M4	M5	M6	M7
晶粒数	435	475	489	480	439	452	474
平均晶粒面积 /(10 ⁻⁶ m ²)	7.54	6.90	6.71	6.83	7.47	7.26	6.92
最小晶粒面积 /m ²	10 ⁻⁸	10 ⁻⁸	10 ⁻⁸	10 ⁻⁸	10 ⁻⁸	10 ⁻⁸	10 ⁻⁸
最小晶粒面积所占百分比 /%	57.471	72.421	86.912	77.083	84.282	64.602	63.924
最大晶粒面积 /(10 ⁻⁵ m ²)	4.08	6.98	11.8	8.81	12.9	5.86	5.21
平均晶粒直径 /(10 ⁻³ m)	1.40	1.34	1.32	1.44	1.43	1.37	1.35
平均晶粒取向差 /(°)	30.275	29.966	30.230	30.219	29.422	29.748	30.889

由表 3 可以发现，随表面换热系数的增大，晶粒数增多，平均晶粒面积、平均晶粒直径减小，最

小晶粒面积所占比例增大。随浇注温度的增高，晶粒数减少，平均晶粒面积增大；而平均晶粒直径呈先增大后减小的趋势，最小晶粒面积所占比例则呈先减小后增大的趋势。随牵引杆拉速的增大，晶粒

数增多，平均晶粒面积、平均晶粒直径减小，最小晶粒面积所占比例呈先增大后减小的趋势。同时可以看出浇注温度、表面换热系数以及拉速对平均晶粒取向差影响较小。

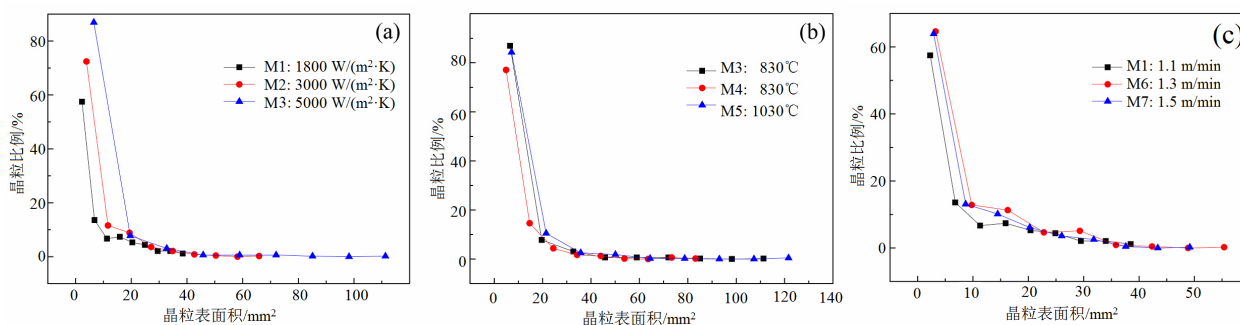


图 6 不同表面换热系数(a)、浇注温度(b)和拉速(c)对应的晶粒尺寸分布结果

Fig.6 Grain size distribution of different surface heat transfer coefficient (a), pouring temperature (b) and casting speed(c)

由图 6 可知，不同工艺参数对晶粒尺寸分布的影响有差异。表面换热系数对晶粒尺寸分布影响较大，随表面换热系数的增大，晶粒尺寸分布范围增大明显，且小尺寸晶粒增多。浇注温度的提高同样使晶粒尺寸分布范围增大，但变化程度较表面换热系数的影响程度小。随拉速的加快，晶粒尺寸分布范围呈先增大后减小的趋势，其波动范围较前 2 种情况要小。

综上所述：增大铸件表面换热系数使晶粒得到细化，但增大了柱状晶的比例和晶粒尺寸分布范围；降低浇注温度也可使晶粒得到细化；提高牵引杆拉速可使等轴晶比例增大，且晶粒也得到了细化。比较 7 种工艺条件下的组织形貌可知，M7(表面换热系数 1800 W/(m²·K)、浇注温度 830°C、拉速 1.5 m/min)在提高拉速的条件下，等轴晶比例最大，且晶粒较细，为最佳工艺条件。

3 结论

基于 3D-CAFE 模型对连铸法制备 Ag-28Cu 合金的凝固组织进行了模拟，结果表明：

1) 表面换热系数是细化晶粒的主要因素，浇注温度、表面换热系数和牵引杆拉速对平均晶粒取向差影响较小。

2) 增大表面换热系数、降低浇注温度、提高拉速，可起到细化晶粒的效果；增大表面换热系数，减慢拉拔速度，柱状晶区比例增大，等轴晶区比例减小；随表面换热系数的增大，晶粒细化的同时晶

粒尺寸分布范围增大；提高浇注温度，晶粒逐渐粗化；随拉速的增大，晶粒不断细化。

通过比较 7 种工艺条件下的凝固组织模拟结果，得到的最佳工艺条件为：表面换热系数 1800 W/(m²·K)、浇注温度 830°C、拉速 1.5 m/min。

参考文献：

- [1] 庞瑞朋, 王福明, 张国庆, 等. 基于 3D-CAFE 法对 430 铁素体不锈钢凝固热参数的研究[J]. 金属学报, 2013, 49(10): 1234-1242.
- PENG R P, WANG F M, ZHANG G Q, et al. Study of solidification thermal parameters of 430 ferrite stainless steel based on 3D-CAFE method[J]. Acta Metall Sin, 2013, 49(10): 1234-1242.
- [2] ZAEEM M A, YIN H, FELICELLI S D. Comparison of cellular automaton and phase field models to simulate dendrite growth in hexagonal crystals[J]. Journal of materials science & technology, 2012, 28(2): 137-146.
- [3] ZAEEM M A, YIN H, FELICELLI S D. Modeling dendritic solidification of Al-3%Cu using cellular automaton and phase-field methods[J]. Applied mathematical modelling, 2013, 37(5): 3495-3503.
- [4] WANG J, WANG F, ZHAO Y, et al. Numerical simulation of 3D-microstructures in solidification processes based on the CAFE method[J]. International journal of minerals, metallurgy and materials, 2009, 16(6): 640-645.
- [5] THEVOZ P, DESBIOLLES J L, RAPPAZ M. Modeling of equiaxed microstructure formation in casting[J]. Metallurgical transactions A, 1989, 20(2): 311-322.

- [6] 杨云峰, 谢明, 程勇, 等. 金属凝固微观组织数值模拟研究现状[J]. 材料导报, 2014, 28(21): 24-29.
YANG Y F, XIE M, CHENG Y, et al. Research status of numerical simulation of solidification microstructure[J]. Materials review, 2014, 28(21): 24-29.
- [7] 杨云峰, 谢明, 李艳, 等. 连铸 Ag-28Cu 温度场非稳态过程的数值模拟[J]. 贵金属, 2015, 36(4): 37-44.
YANG Y F, XIE M, LI Y, et al. Numerical simulation of unsteady temperature field for Ag-28Cu alloy in continuous casting[J]. Precious metals, 2015, 36(4): 37-44.
- [8] RAPPAZ M, GANDIN C A. Probabilistic modelling of microstructure formation in solidification processes[J]. Acta metallurgica et materialia, 1993, 41(2): 345-360.
- [9] KURZ W, GIOVANOLA B, TRIVEDI R. Theory of microstructural development during rapid solidification[J]. Acta metallurgica, 1986, 34(5): 823-830.
- [10] GANDIN C A, RAPPAZ M. A coupled finite element-cellular automaton model for the prediction of dendritic grain structures in solidification processes[J]. Acta metallurgica et materialia, 1994, 42(7): 2233-2246.
- [11] 赵素. Ag-28.1Cu-xSb 共晶合金的过冷凝固[D]. 上海: 上海交通大学, 2009.
ZHAO S. Solidification of undercooled Ag-28.1Cu-xSb eutectic alloys[D]. Shanghai: Shanghai Jiao Tong University, 2009.

【上接第 20 页】

- [4] 缙明亮, 武俊杰, 杨柳, 等. 云南某氧化银矿选矿试验研究[J]. 贵金属, 2014, 35(4): 54-59.
GOU M L, WU J J, YANG L, et al. Experimental study on mineral processing technology for silver ore in Yunnan [J]. Precious metals, 2014, 35(4): 54-59.
- [5] 黄万抚, 钟祥熙. 湿法炼锌酸浸出渣浮选回收银试验[J]. 贵金属, 2015, 36(3): 19-25.
HUANG W F, ZHONG X X. Recovering silver from acid-leaching residues of zinc ore by flotation[J]. Precious metals, 2015, 36(3): 19-25.
- [6] 邱廷省, 赵学付. 某含铜银矿石选别工艺优化研究[J]. 金属矿山, 2010 (12): 63-66.
QIU T S, ZHAO X F. Optimization research on beneficiation of a copper-bearing silver mine[J]. Metal mine, 2010 (12): 63-66.
- [7] 周怡玫, 官长平, 汤小军. 综合回收硫精矿中铅锌银选矿工艺研究[J]. 有色金属: 选矿部分, 2012 (4): 33-36.
ZHOU Y M, GUAN C P, TANG X J. Research on beneficiation technology of comprehensive recovery of lead, zinc and silver minerals from sulphur concentrate [J]. Nonferrous metals: mineral processing section, 2012(4): 33-36.
- [8] 唐平宇, 王素, 田江涛, 等. 山西某难选氧化铜矿选矿试验研究[J]. 有色金属: 选矿部分, 2013 (5): 10-13.
TANG P Y, WANG S, TIAN J T, et al. Experiment study on mineral processing of a refractory oxide copper ore of Shanxi[J]. Nonferrous metals: Mineral processing section, 2013(5): 10-13.
- [9] 李福兰, 胡保栓, 李国栋, 等. 西藏某复杂铜锌硫化矿选矿试验[J]. 金属矿山, 2012, 41(9): 61-64.
LI F L, HU B S, LI G D, et al. Experimental study on complex copper-zinc sulfide ore from Tibet[J]. Metal mine, 2012, 41(9): 61-64.