



# 硕士学位论文

MASTER'S DISSERTATION

论文题目 基于 Matlab 的 Q345 钢连铸坯凝固  
微观组织数值模拟

作者姓名 韩泽峰

学科专业 热能工程

指导教师 张静 副教授

2016 年 5 月

中图分类号: TG777.2

学校代码: 10216

UDC: 621

密级: 公开

## 工学硕士学位论文

# 基于 Matlab 的 Q345 钢连铸坯凝固 微观组织数值模拟

硕 士 研 究 生: 韩泽峰

导 师: 张静 副教授

申 请 学 位: 工学硕士

学 科 专 业: 热能工程

所 在 单 位: 车辆与能源学院

答 辩 日 期: 2016 年 5 月

授 予 学 位 单 位: 燕山大学

Thermal Engineering

**NUMERICAL SIMULATION OF Q345 STEEL  
SOLIDIFICATION MICROSTRUCTURE IN  
CONTINUOUS CASTING WITH MATLAB**

by Han Zefeng

Supervisor: Associate Professor Zhang Jing

**Yanshan University**

May, 2016



## 燕山大学硕士学位论文原创性声明

本人郑重声明：此处所提交的硕士学位论文《Q345 钢连铸凝固过程微观组织转变过程数值模拟》，是本人在导师指导下，在燕山大学攻读硕士学位期间独立进行研究工作所取得的成果。论文中除已注明部分外不包含他人已发表或撰写过的研究成果。对本文的研究工作做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式注明。本声明的法律结果将完全由本人承担。

作者签字：

日期： 年 月 日

## 燕山大学硕士学位论文使用授权书

《Q345 钢连铸凝固过程微观组织转变过程数值模拟》系本人在燕山大学攻读硕士学位期间在导师指导下完成的硕士学位论文。本论文的研究成果归燕山大学所有，本论文的研究内容不得以其它单位的名义发表。本人完全了解燕山大学关于保存、使用学位论文的规定，同意学校保留并向有关部门送交论文的复印件和电子版本，允许论文被查阅和借阅。本人授权燕山大学，可以采用影印、缩印或其它复制手段保存论文，可以公布论文的全部或部分内容。

保密☐，在 年解密后适用本授权书。

本学位论文属于

不保密☐。

(请在以上相应方框内打“√”)

作者签名：

日期： 年 月 日

导师签名：

日期： 年 月 日



## 摘 要

随着连铸技术的发展，如何有效地提高连铸坯的质量已成为连铸生产研究的主要方向。连铸坯微观凝固组织对钢的机械性能和加工性能影响很大，因此对连铸坯微观凝固组织进行数值模拟是非常有意义的。

本文以某钢厂断面直径为 250mm 的连铸圆坯为研究对象，采用有限差分法建立宏观温度场模型，运用元胞自动机法建立微观凝固组织模型。采用 Matlab 软件对上述模型进行 Q345 钢连铸坯微观组织的仿真模拟。

本文根据相关的文献资料对物性参数以及形核参数进行修正。将相关的参数带入程序进行计算，得到了清晰的凝固组织结构。取得某钢厂的 Q345 钢连铸坯样品，对试样进行腐蚀，在光学显微镜下进行金相分析，与相应的模拟结果进行对比，模拟结果的图像形貌与金相实验结果较为接近。因此，该模型能够较好的反映出晶粒的形态与大小。

模拟结果非常清楚的显示了等轴晶、柱状晶的分布位置，以及在不同平均形核过冷度下的等轴晶率变化的规律，并分析了浇注温度、冷却强度和拉速对等轴晶率的影响。

研究表明，随着平均形核过冷度的下降，等轴晶的占有率变大。晶粒尺寸随着平均形核过冷度的下降而减小。晶粒尺寸随浇注温度的降低而减小，随着冷却强度的降低而减小。冷却强度增强会使等轴晶率减小，晶粒尺寸变大。在实际生产中，加大拉速必须加大冷却强度，这将使等轴晶率减小，晶粒尺寸变大。通过分析可知，等轴晶率增大的有效途径是：低温浇注，较弱的冷却强度和较低的拉坯速度。因此，要提高拉速，必须采用其他相应措施，如电磁搅拌。

**关键词：**连铸坯；凝固组织；元胞自动机法；数值模拟

## Abstract

With the development of the continuous casting technology, how to improve the billet quality is the main direction that are studied on continuous casting technology. The formation of solidification microstructure has an important influence on the processing performance and mechanical properties of steel. Therefore, it is very meaningful to have a simulation of solidification structure of continuous casting billet.

Based on the 250mm section diameter of continuous casting round billet in a steelworks, this paper established the macro-temperature field model by using the finite difference method and the solidification microstructure formation model by using cellular automaton method. The Q345 steel microstructure of the continuous casting billet was simulated by Matlab software.

This paper modified the physical parameters and nucleation parameters according to some literature. Solidification structure was obtained clearly by calculating relevant parameters. The sample of continuous casting round billet of Q345 steel was get from the steelworks. The samples were corroded after polishing, and then were observed and taken photos using optical microscope. Comparing the samples and the numerical simulation results, we find that they were similar mostly. So the model can represent the grain morphology and the grain size preferably.

The simulation results show the distribution of the equiaxed grains and columnar grains clearly. It also shows the change rules of the equiaxed grains ratio in the different average nucleation undercooling. We also analyze the effect of the pouring temperature, the cooling intensity and the casting speed on the equiaxed grains ratio.

The research results shows that the occupancy of the equal axial grain becomes larger with the decrease of the average nucleation undercooling. The grain size decreases with the decrease of the average nucleation undercooling. The grain size decreases with the decrease of the pouring temperature, and decreases with the decrease of the cooling intensity. When the cooling intensity get stronger, the equiaxed grains ratio will decrease, the grain size will get larger. In actual production, when the continuous casting speed get



faster, the cooling intensity will increase correspondingly. That will decrease the equiaxed grains ratio, and increase the grain size. To sum up, the effective way to increase the equiaxed grains ratio is lower temperature pouring, the weaker cooling intensity and the lower continuous casting speed. Therefore, to improve the speed of casting, it must take other appropriate measures, such as electromagnetic stirring.

**Keywords:** continuous casting billet; solidification structure; cellular automaton method; numerical simulation



## 目 录

摘 要 .....	I
Abstract .....	II
第 1 章 绪 论 .....	1
1.1 研究背景 .....	1
1.2 研究意义 .....	2
1.3 主要研究内容 .....	3
第 2 章 数学模型及模拟方法 .....	5
2.1 形核模型 .....	5
2.1.1 瞬时形核模型 .....	6
2.1.2 连续形核模型 .....	6
2.2 晶粒长大模型 .....	7
2.2.1 LGK 模型 .....	8
2.2.2 KGT 模型 .....	10
2.3 微观组织模拟方法的发展 .....	12
2.3.1 确定性方法 .....	12
2.3.2 相场法 .....	13
2.3.3 随机性方法 .....	14
2.4 本章小结 .....	19
第 3 章 连铸坯凝固组织形成的数学模型 .....	21
3.1 圆坯宏观温度场模型 .....	21
3.1.1 建立圆坯传热模型的假设条件 .....	21
3.1.2 圆坯传热方程的建立 .....	21
3.1.3 初始条件与边界条件 .....	22
3.1.4 传热偏微分方程离散 .....	24
3.2 微观组织形成的相关模型 .....	28
3.2.1 微观元胞的温度计算 .....	28
3.2.2 形核模型 .....	29
3.2.3 生长模型 .....	31
3.2.4 元胞固相率的计算 .....	32
3.2.5 转变规则 .....	33
3.3 模型参数选取 .....	33
3.3.1 工艺参数 .....	33
3.3.2 物性参数 .....	34

3.3.3 形核参数 .....	36
3.3.4 动力学参数 .....	37
3.4 本章小结 .....	38
第 4 章 程序的实现与可视化 .....	39
4.1 程序的实现 .....	39
4.2 计算结果的可视化 .....	42
4.3 晶粒尺寸的计算 .....	43
4.4 本章小结 .....	43
第 5 章 模型验证与模拟结果分析 .....	45
5.1 模型验证 .....	45
5.1.1 温度场的验证 .....	45
5.1.2 枝晶组织显示方法 .....	46
5.1.3 枝晶显示实验与验证 .....	46
5.2 平均形核过冷度的作用 .....	47
5.3 连铸工艺参数影响 .....	49
5.3.1 浇注温度对凝固组织的影响 .....	49
5.3.2 冷却强度对凝固组织的影响 .....	50
5.3.3 拉速对凝固组织的影响 .....	52
5.4 本章小结 .....	52
结 论 .....	53
参考文献 .....	54
攻读硕士学位期间承担的科研任务与主要成果 .....	59
致 谢 .....	60

## 第1章 绪论

### 1.1 研究背景

自工业革命以来，钢铁工业发展成为一个国家的经济能否可持续发展的重要基石，它为国民经济的各个行业提供原材料。因此，钢铁也被称为“工业粮食”。经济学家一般将一个国家的钢铁总产量或者人均钢产量作为衡量一个国家经济实力的一项重要指标，由此可见钢铁工业的重要性。

我国是发展中大国，正处在经济结构调整期。虽然国家基础设施建设需要大量的低端钢材，但是随着大飞机工程，高铁工程，深海探索工程，航天探索工程等等一系列高端产业走向世界舞台，高端钢材的需求量将会不断增加，对钢材品质的要求也不断提高。我国钢产量在1996年的时候首次超过1亿吨，达到1.01亿吨，已占到世界钢产量的13.5%<sup>[1]</sup>。到2013年，我国的钢产量已经达到7.79亿吨，占到世界钢产量的48.5%。

连续铸钢在一个国家生产钢材中所占的比率体现着一个国家的钢铁生产水平，这是由连续铸钢的生产特点所决定的。连铸技术对钢铁制造业的影响是革命性的，它显著地提高了生产效率，成材率，产品质量，并降低了生产费用。连铸技术的发展大致可以分为四个阶段<sup>[2]</sup>，早期的思想启蒙阶段，在这一阶段美国人塞勒斯、英国人贝塞麦以及德国人容汉斯作出了重要贡献。连铸技术的开发阶段，在这一阶段德国人容汉斯起到了重要作用。传统的技术成熟阶段，以及最后到新技术的出现，完成朝着紧凑化、连续化和自动化的转变。我国的连铸技术起步较早，从1957年开始试验研究，1958年12月在重庆钢铁公司第三钢铁厂建成我国第一台立式双流连铸机，用于浇筑175mm×200mm的铸坯。1964年6月，世界第一台弧型板坯连铸机在重庆钢铁公司第三钢铁厂问世<sup>[3,4]</sup>。到1999年，我国钢铁的生产总量达到1.35亿吨，其中连铸坯生产量达到9367万吨，占据世界第一位<sup>[5,6]</sup>。2000年连铸生产量突破1亿吨，达到1.096亿吨，占总的钢产量的85.3%<sup>[7]</sup>。2001年连铸比首次超过90%<sup>[8]</sup>。2003年，连铸比达到96%<sup>[9]</sup>。2007年连铸坯的总产量为4.74亿吨，连铸比达到了96.95%<sup>[7]</sup>。

近几十年来随着新技术，新工艺不断在连续铸造生产中使用，人们对连铸坯质量要求也越来越高。这不仅仅是因为新技术应用必然的要求，更主要是因为连铸坯的质量关系到企业能否在钢铁行业继续生存下去。

连铸坯组织分为：表面的细小等轴晶部分，中部柱状晶和中心等轴晶。铸坯凝固组织质量的好坏，对于钢材在后续加工方面以及钢材的机械性能，使用寿命等方面都有着重要影响。由于柱状晶的结构特点使得其在受力时某一方向能够承受较大的外力，而某一方向受力能力不强，而等轴晶结构不存在这样的问题。因此，得到较多的等轴晶是大多数钢材所需要的。但是一些特种钢材(如定向凝固硅钢)则希望获得较多的柱状晶。对于连铸坯宏观方面的研究已经很完善了，但是对于铸坯微观凝固组织还不是很完善，同时新的连铸工艺应用对微观组织的影响也需要进一步研究。

连铸坯的凝固过程是一个包含物理化学变化的复杂相变过程，在实际生产过程中，很难对凝固过程进行直接的观察，这是因为凝固过程处在高温的环境中。凝固过程的一些现象发生在结晶器这样的密闭环节中的，例如钢液的对流现象，溶质的扩散等。在计算机技术尚不发达的时候，主要通过金相实验的方法来研究凝固组织形成的规律性，它的优点是可以直接观测到组织结构，它的缺点是费时、费工、费力。随着计算机小型化，计算机的性能显著提升，以及计算机的普及，使得用计算机来解决程序复杂、需要多次迭代计算的大型数学模型所需的计算时间大幅下降，这使得计算机模拟凝固过程变得可行。1964年，Chalmers在他的著作《凝固原理》中提出了描述合金凝固过程中溶质分配的一些基本数学模型，并解释了凭借面和球形生长中组织形态(如枝晶)的演化机制<sup>[10]</sup>。1974年，Fleming的《凝固技术》扩展了上述建模方法，并提出了新的模型来描述微观组织结构的演化特征，如枝晶臂间距、偏析形态<sup>[11]</sup>。接下来的十年里以Kurz和Fisher合著的《凝固基础》最为出名，该书对合金组织演化过程进行了较为详尽的描述<sup>[12]</sup>。1966年，Oldfield开始尝试进行凝固微观组织模拟。1980年后，计算机技术突飞猛进，计算机实现小型化，科研人员能够更好的利用计算机进行微观组织模拟工作，并取得了较为丰硕的成果。

## 1.2 研究意义

连铸坯的质量和性能与其凝固组织密切相关。连铸坯质量可分为表面质量和内部质量。连铸坯表面质量与弯月面的形成好坏紧密相关，钢液与结晶器铜壁存在润湿作用，在钢液与器壁接触处形成了很小的弯月面，弯月面可以确保初生坯壳的表面质量和坯壳的均匀性，弯月面半径越大铸坯表面质量越好。例如钢液与结晶器接触不均匀导致初生坯壳薄厚不均，弯月面半径过小，坯壳薄的地方应力集中，当应力超过其抗拉强度时，就会产生表面纵裂纹，影响表面质量。而连铸坯内部质量与

钢种、拉坯速度、钢水过热度以及微观组织结构有关，例如降低拉速以及二冷区的冷却强度，这样就减少了柱状晶的生长，更加有利于等轴晶形成，减少了中心偏析和疏松程度。铸坯的组织形貌对铸坯的质量有着重要影响，通过调节冷却水的用量，调整浇注温度以及使用电磁搅拌技术等方法可以获得等轴晶与柱状晶比例不同的铸坯。

自 2008 年金融危机以来，世界经济陷入波谷，几乎处于停滞状态。钢铁行业受到的影响尤为重要，危机面前，是挑战，同时也是机遇。这就要求钢铁企业努力提升自身产品的质量，从而占有更多的市场份额，确保企业能够在残酷的市场经济下存活。Q345 钢大量用于建筑行业 and 造船业。而这两个行业目前同样受到经济危机的影响。我国的十三五规划明确的划定了耕地红线，这使得建筑行业面临着诸如拆迁之类的额外成本支出，同样，伴随着我国人均居民收入的增加，造船业的人力成本也在增加。在经济危机的背景下，上述两个行业运营成本显著增加，使得企业的生存环境更为恶劣，面临的挑战更为突出。那么这两个行业的企业在采购 Q345 钢材时就希望购买到质量好且价格低的产品。因此生产 Q345 钢材的企业如果想要生存，必然要降低产品的价格，但同时也要保证产品质量，因为产品的质量同样关系到企业能否继续经营下去。由此可见，钢铁企业在生产产品的时候就要通过各种方法来降低成本，同时提升产品的质量。通过对 Q345 钢凝固过程进行数值模拟，找出其凝固过程中存在的规律，预测其等轴晶与柱状晶的所占比率，以及其机械性能。模拟结果可以作为改进生产工艺的参考，有助于钢厂提高其产品质量。

### 1.3 主要研究内容

本课题是以直径 250mm 的圆坯为研究对象，假设圆坯周围的冷却作用是均匀的，及圆周上各个点的换热系数是相等的。那么就可以建立一个只沿着半径方向进行传导热量的一维传热模型。根据以上假设本文在 Matlab 软件的基础上，应用有限差分法建立宏观温度场模型。建立微观模型时，采用的是能够很好的描述形核的随机性元胞自动机法。将宏观温度场模型与微观晶粒形核、枝晶生长模型相耦合进行仿真计算。在其它条件不变的情况下，通过改变平均形核过冷度，晶粒尺寸大小发生了改变，对比模拟结果解释其对凝固组织的影响。通过改变外部温度场参数调整冷却强度，对比在不同情况下数值模拟所得的晶粒尺寸，解释其对连铸坯凝固组织的影响。以相同的方法对比连铸坯的拉坯速度、浇注温度等参数改变后对凝固组织的影响。

响，以上模拟结果可以作为工艺优化的一个参考条件。



## 第2章 数学模型及模拟方法

国内外学者对于连铸坯的宏观方面的研究已经非常成熟了，而在微观方面还有很大的进步空间。利用数值模拟技术可以很好的对微观领域进行研究，国内外学者在此方面取得了一些成就。

早在1966年，Oldfield进行铸件凝固组织微观模拟<sup>[13]</sup>。在1970年至1980年间是微观组织模拟的探索阶段。1980年后，温度场数学模型逐步完善，人们将微观组织模拟与宏观的热流计算相联系起来，并提出了很多用于预测凝固过程中晶粒微观结构的模型。

根据液态金属凝固及组织形成过程的原理，金属凝固微观组织数值模拟的数学模型主要包括形核模型、枝晶生长模型和溶质扩散模型。从模拟方式方法上可分为确定性方法、概率方法和相场法。当然，这种划分也不是绝对的，如概率方法中有确定性方法的思想。

### 2.1 形核模型

形核在整个凝固过程中可以说是一个非常重要的阶段，金属形核根据形核机理可以划分为均质形核和异质形核。经典的均质形核理论是假设团簇在无杂质的熔体内自发形成，此理论虽然简单易懂，但是它预测的形核率同实际实验结果有很大的不同。异质形核理论认为团簇优先形成于熔体中外来颗粒或界面处(如熔体与容器之间的界面)。这些颗粒或是源于不可避免的杂质，或是为促进形核人工添加的。在实际生产中，总会有杂质进入到钢液中，这样均质形核的条件就被破坏了，只能进行非均质形核。

根据热力学第二定律，过程自发进行的方向是体系 Gibbs 自由能下降的方向，为了确保晶粒形核，这就要求固相的 Gibbs 自由能小于液相 Gibbs 自由能。在一定的过冷度下，金属液中形成许多微小的结晶中心，但其并不能稳定的存在，只有当其略大于临界晶核半径时才能进一步生长。

目前，依据形核密度与过冷度之间的关系将异质形核分成两类：瞬时形核，连续形核。根据 Turnbull 的经典形核理论：过冷度达到 $(0.18\sim 0.2)T_m$ 时，结晶核心可以在母相中自发形成，即发生均质形核；过冷度小于 $(0.18\sim 0.2)T_m$ 时，结晶核心要依附于液体中的外来固体表面上进行非均质形核。通常情况下，金属凝固时的过冷度不

超过 20℃，金属凝固时采用非均质形核方式，即金属液中存在着高熔点的固体夹杂物以及结晶器壁等现成的界面，依附于这些已存在的界面形核可形核界面能降低，因而形核可以发生在较小的过冷度下。

### 2.1.1 瞬时形核模型

瞬时形核模型在编写数值模拟的程序时要比连续形核模型简单，这是因为瞬时形核模型无需考虑形核过程的随机性。

亨特提出一种瞬时形核模型<sup>[14]</sup>：

$$N = K_1(n_0 - n_t) \exp \left[ \frac{-K_2}{(\Delta T)^2} \right] \quad (2-1)$$

式中  $n_0$ ——为最初形核的质点密度( $\text{m}^{-3}$ )；

$\Delta T$ ——为过冷度( $^{\circ}\text{C}$ )；

$N$ ——为形核密度(每立方米熔体中晶核个数( $\text{m}^{-3}$ )；

$K_1$ ——为原子与形核位碰撞频率常数；

$K_2$ ——为原子与形核位碰撞频率常数；

$n_t$ ——为时刻晶粒的形核质点密度( $\text{m}^{-3}$ )。

该瞬时形核模型认为在达到形核过冷度后，区域内的所有结晶中心同时形核，并且形核后将不再发生变化。在实际形核过程中结晶中心形核是具有随机性的，有的会在形核后重新融化，有的会进一步长大，晶粒的大小形态是随时变化的，而瞬时形核模型无法对此进行描述，因此具有一定的局限性。

### 2.1.2 连续形核模型

Oldfield<sup>[13]</sup>最早提出一种将过冷度同形核率联系在一起的形核模型：

$$N = A(\Delta T)^m \quad (2-2)$$

式中  $A$ ——为与凝固合金及冷却条件有关的常数；

$m$ ——为指数；

$\Delta T$ ——为过冷度( $^{\circ}\text{C}$ )。

Oldfield 提出的模型阐述了过冷度对形核的影响，但该模型无法满足较大的过冷度条件下的形核过程，而 Rappaz 等学者提一种准瞬时形核模型<sup>[15]</sup>：

$$n(\Delta T) = \int_0^{\Delta T} \frac{dn}{d(\Delta T')} d(\Delta T') \quad (2-3)$$

式中  $n(\Delta T)$ ——为形核密度( $\text{m}^{-3}$ );

$dn/d(\Delta T)$ ——为连续分布的基底位置;

在某一过冷度下, 当形核率与过冷度之间满足 Gauss 正态分布分布时, 该模型可改为如下形式:

$$n(\Delta T) = \frac{n_{\max}}{\sqrt{2\pi}\Delta T_{\sigma}} \int_0^{\Delta T} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta T - \Delta T_N}{\Delta T_{\sigma}}\right)^2\right] d(\Delta T) \quad (2-4)$$

式中  $\Delta T_{\sigma}$ ——为标准方差过冷度( $^{\circ}\text{C}$ );

$n_{\max}$ ——为初始形核基底数( $\text{m}^{-3}$ );

$\Delta T_N$ ——为高斯正态分布曲线的中心值( $^{\circ}\text{C}$ )。

Rappaz 的模型将形核描述成一个连续过程, 而不是在某一时间内, 某一点突然出现的, 该模型在枝晶和共晶合金的模拟中广泛应用。

陈奎英等研究超重力下形核模型<sup>[16]</sup>:

$$U = \exp\left(\frac{\Delta G_{\delta_g}}{KT}\right)(1 + Y_G)u_0 \quad (2-5)$$

式中  $u_0$ ——为微重力作用下熔体的形核率;

$\Delta G_{\delta_g}$ ——为超重力引起的附加自由能(J);

$Y_G$ ——为超重力作用下扩散系数与微重力作用下扩散系数之比。

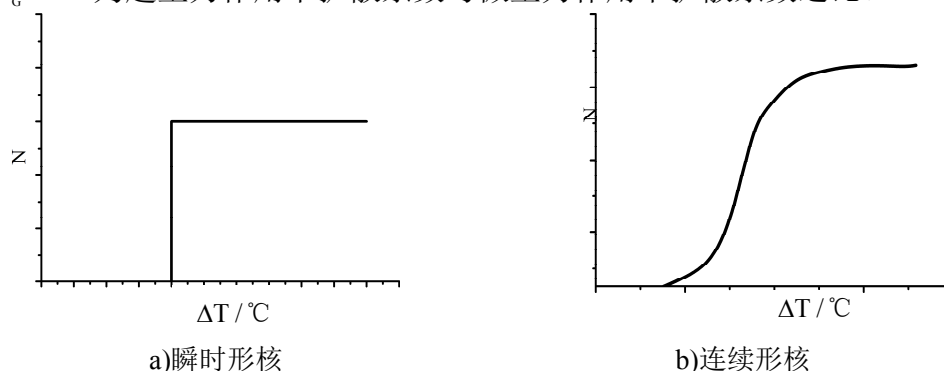


图 2-1 两种形核模型的对比

图 2-1 的横坐标为过冷度, 纵坐标为形核密度, 通过对比连续形核模型与瞬时形核模型, 可以看出二者之间的区别, 并且连续形核模型更为贴近实际情况<sup>[17]</sup>。

## 2.2 晶粒长大模型

晶粒形核后, 在一定过冷下, 继续进行晶核长大。枝晶长大方式决定于固液界

面结构。而界面存在方式分为两类：一是粗糙界面；二是光滑界面。晶粒长大是有连续长大和侧面长大两种。连续长大，也称为正常长大，其界面结构为粗糙界面，这种界面用原子尺度衡量是粗糙不平的，许多位置均可为原子着落，液相扩散的原子很容易被接纳并且与晶体连接起来，液相原子可以连续、无序地向界面添加，使液固界面沿法线方向迅速向液相推移，这种方式长大速度很快。侧面长大也为台阶方式长大，其界面结构是光滑界面，对于这种界面结构，先长出一个平台，然后吸收液体里的原子，原子逐步堆积并向四周蔓延生长，然后已有的平台上继续生长出新的平台，如此反复，如同登阶梯一样，利用这种方式进行生长，完成液相向固相的转变<sup>[18]</sup>。

对晶粒生长模型的发展，最早是研究共晶合金，然后才渐渐向枝晶方向上深入研究。大部分金属凝固都是以枝晶方式生长，枝晶生长一般分为定向生长和自由生长，定向生长的晶粒长成柱状枝晶，自由生长的晶粒形成等轴晶。研究枝晶生长，必须要建立枝晶尖端生长动力学计算模型<sup>[19]</sup>。

一般用于枝晶数值模拟的模型有两种：一种是用于模拟柱状晶生长的 KGT 模型；另一种是用于模拟等轴晶生长的 LGK 模型。

### 2.2.1 LGK 模型

熔体总过冷度可分为：曲率过冷、热过冷、成分过冷和动力学过冷。其中成分过冷和曲率过冷对熔体的总过冷度影响较大。

利普顿等学者重复考虑了上述的前三种过冷，忽略动力学过冷，提出了经典的 LGK 模型<sup>[20]</sup>。

由于枝晶向液相生长，在其界面处的曲率会发生变化，因而引起平衡液相线温度的改变，曲率过冷就可根据吉布斯-托马森关系得到：

$$\Delta T = K \frac{\sigma}{\Delta s_f} = \frac{2\Gamma}{R} \quad (2-6)$$

式中  $K$ ——为界面曲率( $\text{m}^{-1}$ )；

$R$ ——为枝晶尖端半径( $\text{m}$ )；

$\sigma$ ——为表面能( $\text{J} \cdot \text{m}^{-2}$ )；

$\Delta s_f$ ——为体积熔化熵( $\text{J} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{K}^{-1}$ )；

$\Gamma$ ——为 Gibbs-Thompson 系数。

溶质过饱和度 $\Omega$ 可表示为:

$$\Omega = \frac{c_1^* - c_0}{c_1^*(1-k)} = \text{Iv}(P_c) \quad (2-7)$$

式中  $\text{Iv}(P_c)$ ——为皮雷数的 Iv 函数;

$k$ ——为溶质分配系数。

将式(2-7)带入到式(2-4)中得到下式:

$$\Delta T_c = mc_0 \left[ 1 - \frac{1}{1 - (1-k)\text{Iv}(P_c)} \right] \quad (2-8)$$

枝晶在过冷熔体中长大, 由于凝固潜热只能通过周围的熔体带走, 熔体温度升高, 导致其温度梯度为负。

$$\Delta T_t = \frac{L}{c_p} \text{Iv}(P_t) \quad (2-9)$$

式中  $L$ ——为凝固潜热( $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$ );

$c_p$ ——为比热( $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}$ )。

对于一般平衡分配系数  $k$  小于 1 的合金来讲, 由于固液界面前沿溶质富集, 使得界面前沿的液相线温度与前方熔体的液相线之间形成差距。由浓度差引起的成分过冷可用下式表示:

$$\Delta T = m(c_0 - c_1^*) \quad (2-10)$$

式中  $c_0$ ——为熔体初始浓度(wt%);

$c_1^*$ ——为固液界面溶液浓度(wt%);

$m$ ——为液相线斜率( $^\circ\text{C} \cdot \text{wt}\%^{-1}$ )。

当忽略动力学过冷时, 枝晶尖端的总过冷度可以表示为:

$$\Delta T = mc_0 \left[ 1 - \frac{1}{1 - (1-k)\text{Iv}(P_c)} \right] + \frac{2\Gamma}{R} + \frac{L}{c_p} \text{Iv}(P_t) \quad (2-11)$$

枝晶尖端半径可表示为:

$$R = 2\pi \sqrt{\frac{\Gamma}{\sigma^* (mG_c \xi_c - G)}} \quad (2-12)$$

式中  $\xi_c$ ——为 Peclet 数;

$G$ ——为枝晶尖端平均温度梯度( $^\circ\text{C} \cdot \text{m}^{-1}$ );

$\sigma^*$ ——为稳定性常数, 理论值为  $1/4\pi^2$ ;

$G_c$ ——为枝晶前沿液相中的溶质浓度梯度( $\text{wt}\% \cdot \text{m}^{-1}$ )。

溶质浓度梯度  $G_c$  可用下式计算：

$$G_c = \frac{-2P}{R} \left[ \frac{c_0(1-k)}{1-(1-k)\text{Iv}(P_c)} \right] \quad (2-13)$$

对于枝晶尖端平均温度梯度  $G$ ，可由式(2-14)计算：

$$G = \frac{-PL}{Rc_p} \quad (2-14)$$

将式(2-13)以及(2-14)带入表达式(2-12)可以计算出枝晶尖端生长半径：

$$R = \frac{\Gamma / \sigma^*}{\frac{PL}{c_p} - \frac{2P_c m c_0 (1-k)}{1-(1-k)\text{Iv}(P_c)}} \quad (2-15)$$

溶质的 Peclet 数可用下式表示：

$$P_c = Rv / 2D \quad (2-16)$$

式中  $v$ ——为枝晶尖端生长速度( $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ )；

$D$ ——为液相内的溶质扩散系数( $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ )。

对式(2-11)、(2-15)和(2-16)进行联立，可以计算出枝晶尖端的生长速度  $v$ ，以及生长半径  $R$ 。

## 2.2.2 KGT 模型

定向凝固是建立方向一致的一个温度梯度，让枝晶生长成柱状晶。Kurz 等人提出的 KGT(Kurz, Giovanola, Trivedi)模型能够很好的模拟这一过程<sup>[21]</sup>。

在定向凝固条件下，枝晶生长前沿温度梯度为正，不存在热过冷，总的过冷度如式(2-17)所示：

$$\Delta T = mc_0 \left[ 1 - \frac{1}{1-(1-k)\text{Iv}(P_c)} \right] + \frac{2\Gamma}{R} \quad (2-17)$$

在枝晶区域内温度梯度  $G$  是可以忽略不计的，那么式(2.12)就可以简化为：

$$R = 2\pi \sqrt{\frac{\Gamma}{\sigma^* m G_c \xi_c}} \quad (2-18)$$

联立(2-16)、(2-17)和(2-18)计算出枝晶尖端的生长速度  $v$ ，以及枝晶生长半径  $R$ 。

依照实验数据，经过数学计算可得枝晶的长大速率与过冷度之间的关系：

$$v = \alpha (\Delta T)^2 + \beta (\Delta T)^3 \quad (2-19)$$

式中  $\alpha$ ——为数学回归系数, 受到合金的成分影响( $\text{m} \cdot \text{s}^{-1} \cdot ^\circ\text{C}^{-2}$ );

$\beta$ ——为数学回归系数, 受到合金的成分影响( $\text{m} \cdot \text{s}^{-1} \cdot ^\circ\text{C}^{-3}$ ).

一些学者经过实验研究, 并通过合理地调整得到了生长系数  $\alpha$  与  $\beta$  的具体表达式<sup>[22,23]</sup>。将生长系数  $\alpha$  与  $\beta$  同合金自身的各个物理参数联系在一起, 直观地反映出各个物理参数对直径生长的影响, 具有相当重要参考价值。

$$\begin{cases} \alpha = \left[ \frac{-\rho}{2(mc_0)(1-k)^2 \Gamma k} + \frac{mc_0}{(mc_0)^2 (1-k) D} \right] \frac{D^2}{\pi^2 \Gamma} \\ \beta = \frac{D^2}{\pi \Gamma} \cdot \frac{1}{(mc_0)^2 (1-k) D} \end{cases} \quad (2-20)$$

$$\begin{cases} \alpha = 10^{-6} \left[ \frac{L\rho}{(mc_0)^2 (1-k)^2 2k} - \frac{mc_0}{(mc_0)^2 (1-k) D} \right] \frac{D^2}{\pi^2 \Gamma} \\ \beta = \frac{D^2}{\pi^2 \Gamma} \cdot \frac{10^{-5}}{(mc_0)^2 (1-k) D} \end{cases} \quad (2-21)$$

可以用 KGT 模型来描述柱状晶生长, 用 LGK 模型来描述等轴晶生长。图 2-2 为 KGT 模型同 LGK 模型的比较。由图 2-2 可以发现, 过冷度越低, KGT 模型与 LGK 模型的枝晶尖端的长大速越低, 而且它们之间的差值也越小<sup>[24]</sup>。可见在模拟较大的连铸坯平面时, 由于铸坯平面的尺度是非常大的, 对于选取 KGT 模型或是 LGT 模型进行模拟计算, 其对最终形态的影响不是主要的因素。

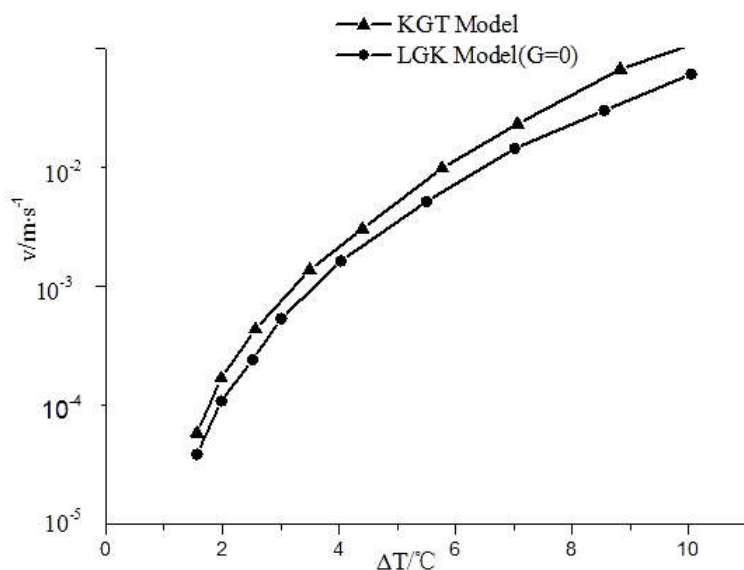


图 2-2 KGT 模型与 LGK 模型的比较

## 2.3 微观组织模拟方法的发展

定性模拟比较注重理论模型的到半定量、定量模拟，由定点形核到随机位置形核，由确定性模型发展到概率模型和相场模型<sup>[25]</sup>。对微观组织的生长模拟要考虑到热力学能障，原子扩散，原子之间的黏附，结晶潜热的导出等问题，需要建立宏观温度场与微观模型。因此需要考虑到质量守恒方程，热能守恒方程，动能守恒方程，将这些方程联合计算。

通常将微观组织模拟方法可分为：(1)随机性方法；(2)相场法；(3)确定性方法。这三种方法都有各自的优缺点，在某些条件下模拟的金属凝固组织较为准确。但是由于凝固过程中存在着各种不确定因素，例如金属形核的随机性，枝晶生长方向等等。所以在建立模型时要有着重点，忽略对本次模拟结果影响不大的因素。由此可见同实际情况相比，计算机对连铸坯的凝固组织模拟还不能将所有方面都考虑进去。

### 2.3.1 确定性方法

确定性方法是指在某一确定时刻，某一定量熔体体积内的晶粒晶核密度和生长速率都是确定的函数。晶粒形核后，由于其参数都是固定，所以其以界面的前进速率生长。该方法是以凝固动力学为基础，符合晶粒生长的物理背景，具有一定的实际意义。

确定性方法的代表性模型是由 Hunt 提出的用于预测柱状晶转变的模型<sup>[14]</sup>，该模型假设熔体中其液相成分是固定的，温度梯度在柱状晶前沿是线性变化的，等轴晶在柱状晶前沿的过冷区内形核以及生长，当柱状晶前端的等轴晶所占的体积分数足够大时，等轴晶就会阻断柱状晶前沿生长。采用简单的形核模型，及所有的晶粒是在一个固定的过冷度  $\Delta T_n$  下形核且晶粒的形核密度为  $n_g$ ，则可以量化的描述次物理过程。令柱状晶前沿晶粒的扩展体积分数为  $g_g$ ，则：

$$g_g = n_g \frac{4\pi}{3} R_g^3(t_n, t_{col}) \quad (2-22)$$

式中  $R_g(t_n, t_{col})$ ——为柱状晶前沿半径(m)；

$t_{col}$ ——为柱状晶前沿抵达时刻；

$t_n$ ——为晶粒形核时刻。

为了使模型简化，假设这里的晶粒是静止的，其生长动力学为  $v_g(\Delta T) = A\Delta T^2$ ，则冷却速率为常数。等轴晶半径  $R_g$  为



$$R_g(t_n, t_{col}) = \int_{t_n}^{t_{col}} v_g(t) dt = \frac{A}{\Delta T} \int_{\Delta T_n}^{\Delta T_{col}} \Delta T^2 d(\Delta T) = \frac{A}{3|T_v|} (\Delta T_{col}^3 - \Delta T_n^3) \quad (2-23)$$

式中  $v_g$  ——为晶粒的表面法相速率(m/s);

$T_v$  ——为冷却速率( $^{\circ}\text{C/s}$ );

$A$  ——为表面积( $\text{m}^2$ );

$\Delta T_{col}$  ——为在等温速率  $v_T$  下稳定柱状前沿的过冷度( $^{\circ}\text{C}$ )。

将式(2-23)带入式(2-22)中, 得到柱状晶前沿等轴晶体积分数  $g_g$  为

$$g_g = n_g \frac{4\pi}{81} \cdot \frac{A^3}{|T_v|^3} (\Delta T_{col}^3 - \Delta T_n^3) = n_g \frac{4\pi}{81} \cdot \frac{A^3}{(Gv_T)^3} \left[ \left( \frac{v_T}{A} \right)^{\frac{3}{2}} - \Delta T_n^3 \right]^3 \quad (2-24)$$

对于 CET 过程, Hunt 定义以下判断: 当超过  $g_g$  值时, 柱状晶停止生长, 等轴晶开始形成。

对于微观组织模拟, 在最初的阶段通常使用这种方法。但是, 由于该方法形核密度与生长速度是不发生变化的, 因此无法解释金属微观组织凝固过程中的的一些随机性现象, 例如晶粒形核后在一定情况下重新融化, 晶体生长方向等。

### 2.3.2 相场法

相场理论是建立在金兹堡-郎道提出的理论之上的, 反映有原子由无序向有序转变的趋势、溶质的扩散过程和热力学驱动力的共同作用。通过引入相场变量  $\Phi$  (当  $\Phi=1$  时表示固相;  $\Phi=0$  时, 表示液相; 在固、液两相区域时,  $\Phi$  的值在 0 和 1 之间变化), 表示系统在空间和时间上每个位置的物性。相场法建立统一的能量控制方程, 它的解能够很好的描述所研究的金属系统中固液两相区域内的物质状态和界面的前进方向, 不需要跟踪界面, 而是将液、固两相分开处理, 因此可以避免跟踪极为复杂固液界面时所遇到的困难, 避免了跟踪界面模拟方法常有的形状误差, 并极大地增强所得模拟结果的准确度。

20 世纪 80 年代, 首先由 Collins 和 Caginalp 等学者对微观凝固组织进行数值模拟<sup>[26,27]</sup>。在此后不久, Caginalp、Fife 等人首次把各向异性问题引进到模型里, 使相场法在金属微观凝固领域的应用得到发展<sup>[28-31]</sup>。Kobayashi 首次应用相场法对纯金属过冷熔体内较为混杂的枝晶进行了二维模拟<sup>[32]</sup>。Ramirez 等采用相场法模拟了等轴晶生长, 以及合金凝固时的柱状晶受到前方的等轴晶阻碍并向其转变的过程<sup>[33]</sup>。

Wheeler 等提出了 WBM 的合金相场模型, 可模拟理想二元合金<sup>[34-36]</sup>。Kim 等人

又提出了另外一个二元合金相场模型,被称为 KKS 模型<sup>[37]</sup>。该模型被广泛用于稀溶液合金枝晶生长模拟<sup>[38,39]</sup>。韩国民等基于 KKS 模型模拟了 Mg-Al 合金中  $Mg_{17}Al_{12}$  单个连续析出相的形貌演化过程。该模型考虑了界面能各向异性和微观弹性应变能,模拟出的析出相呈板条状形貌,端部平行四边形,与试验结果吻合<sup>[40]</sup>。

相场法模拟晶体形核、生长过程有着物理意义明确的优点,应用范围广阔,国内外学者取得了许多成绩。但是,相场法要模拟微观组织必须在划分网格上做到比界面层小,这就加大了计算量,使得相场法在模拟微观组织尺寸上受到了极大的限制。由于本文模拟的是整个连铸过程,如果使用相场法,计算量会非常巨大,同时由于本文选取的网格尺度对相场法来说也是过大的,应用相场法模拟,所得到的结果很有可能会失真。

### 2.3.3 随机性方法

随机性方法也被称作概率方法,对金属相变时的随机性因素(如形核位置,晶粒形核后重新溶解等)给与了足够的重视。随机性方法同确定性方法相比较而言,随机性方法更能真实准确地反映金属凝固过程的实际情况。

随机性方法在 20 世纪 80 年代末期得到长足的发展,具有代表性是元胞自动机法和蒙特卡罗法。

#### 2.3.3.1 蒙特卡罗法

蒙特卡罗法是一种统计模拟方法,通过随机抽样,建立在最小界面能基础上,并且考虑到不同属性的质点之间存在界面能的方法。条件发生变化,质点的状态是也会跟着改变,例如熔融状态转变为液态等。在解决晶粒形核和枝晶生长描述上,蒙特卡罗法能够非常明确的显示微观组织形成过程,以及解释溶质偏析、成分过冷在形核起到的作用。

Spittle 首次应用蒙特卡罗法模拟凝固的形成过程<sup>[41]</sup>。Zhu 和 Smith 等人在 Spittle 研究的基础上进一步改进,以 Al-4.5wt%Cu 合金为研究目标进行数值模拟,得到了如图 2-3 所示的晶区图<sup>[42,43]</sup>。我国学者胡坤太,仇圣桃等对连铸坯进行蒙特卡罗法数值模拟,获得了和实际情况大体符合的连铸坯组织形貌,如图 2-4 所示<sup>[44]</sup>。

蒙特卡罗法在对晶粒生长方面的模拟取得了一些成就,但是还存在一些问题:(1)模拟时间同实际物理时间不能一一对应;(2)蒙特卡罗法在模拟过程中未考虑到枝晶生长动力学和择优取向。虽然蒙特卡罗法能够较为准确的预测晶粒大小,但其在使

用过程中还有一定的局限性，需要在晶粒形核描述中做进一步的改善。

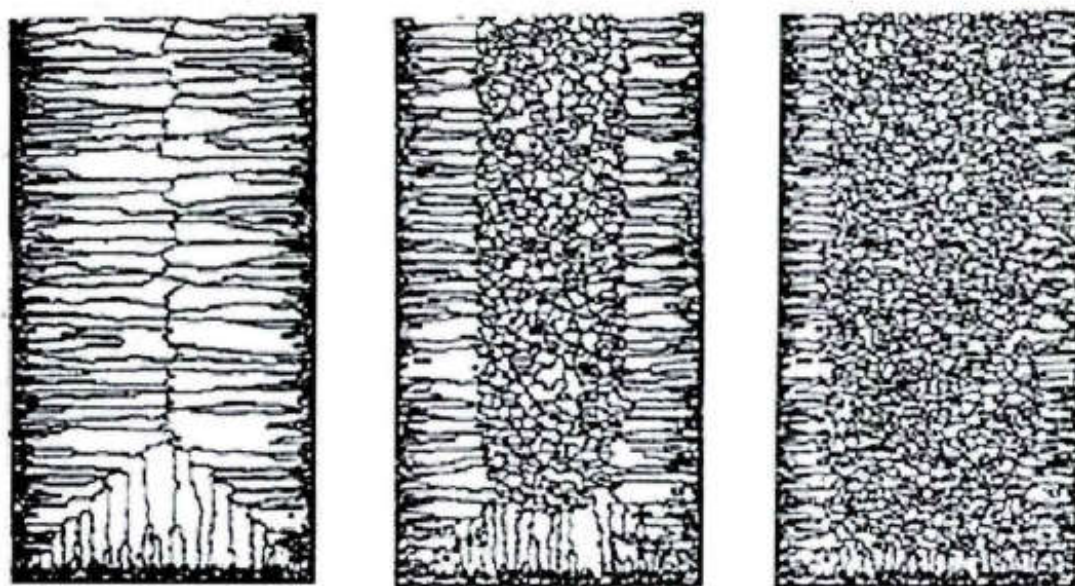


图 2-3 蒙特卡罗法得到典型晶区组织

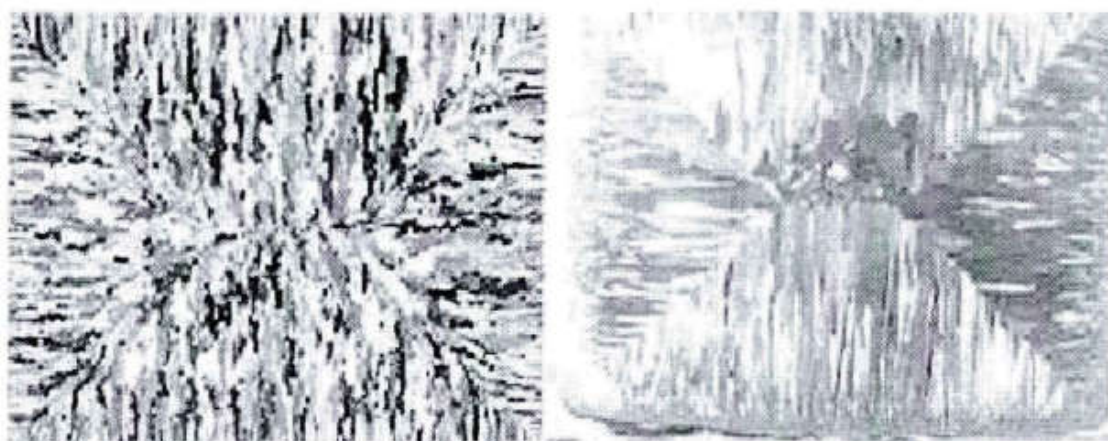


图 2-4 连铸坯凝固组织

### 2.3.3.2 元胞自动机法

元胞自动机概念最开始是 Jhon von Neumann(约翰·冯·诺依曼)在 1940 年左右提出<sup>[45]</sup>。20 实际 70 年代，对元胞自动机的研究再次活跃起来，数学家康威基于这一理论，提出了非常有名的“生命游戏”，Martin Gardner(马丁·加德纳)将 Conway 的理论通过可视化程序发表在《科学美国人》上<sup>[46]</sup>。1990 年代初期，Rappaz 和 Gandin 利用宏观有限元(FE)热流计算的结果耦合微观 CA 晶粒生长模型，提出了 FE-CA 偶和算法模型，建立二维元胞自动机(CA)模型<sup>[47-49]</sup>。并利用此模型对在不同热流密度

条件下的微观组织生长形态进行模拟，并显示其生长过程，首创宏微观耦合计算金属凝固组织的方法。

此后，Gandin 等又将二维的元胞自动机模型扩展到三维，模拟出柱状晶竞争生长以及柱状晶向等轴晶转变的过程，同实验结果相比较，模拟所得结果与实际情况具有很好的吻合度<sup>[50,51]</sup>。Beckermann 在已有宏观上热传递、溶质传递和微观形核生长动力学的基础上，进一步考虑了熔体对流运动对凝固组织形成的影响<sup>[52]</sup>。Lazaro 等人考虑了溶质扩散和溶质再分配的影响因素，利用元胞自动机模型模拟了枝晶的生长，定量解释了柱状晶向等轴晶转变过程中枝晶生长特征<sup>[53]</sup>。

2001 年，Zhu 和 Hong 提出了一种改进的元胞自动机模型(Modified Cellular Automaton model, MCA)，同已有的模型相比，MCA 考虑了在凝固过程中不论是液相还是固相的溶质再分配问题，用来模拟过冷熔体的自由枝晶演化，铸造凝固过程中的竞争枝晶生长以及 Al-7mass%Si 合金的枝晶结构，模拟所得与实验所得较为符合<sup>[54,55]</sup>。

陈守东等采用宏观温度计算与微观晶粒生长相结合的元胞自动机模型，对纯铝的连铸过程进行了微观组织模拟，探讨了冷却强度和浇注温度对连铸纯铝的组织影响<sup>[56]</sup>。庞瑞朋等以 430 铁素体不锈钢材料为研究对象，建立 3 维的元胞自动机模型，通过比较缓冷、空冷以及水冷条件下，冷却强度不同时，分析温度场，流场对凝固过程的影响，发现在缓冷条件下，铸件凝固过程中的温度场最宽且两相区最宽；比较 3 种条件，冷却速率越缓慢，等轴晶比率越高<sup>[57,58]</sup>。Zacem 等使用 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，其二次枝晶间距和冷却速率的模拟结果与试验数据相符<sup>[59,60]</sup>。

付振南，许庆彦等人利用元胞自动机法模拟镁合金枝晶生长过程，所建立的数学模型耦合了宏观温度场和微观组织模拟计算，其中考虑溶质扩散，曲率过冷和各向异性等影响因素，将所得到的模拟结果同实验结果相对比，二者吻合较好，如图 2-5 所示<sup>[61]</sup>。

元胞自动机是由一个一个的简单元胞组成，各个元胞之间通过相互作用，相互联系完成复杂的行为。它的 4 要素分别是：(1)元胞邻居；(2)元胞；(3)转变规则；(4)邻居类型。它们之间的关系如图 2-6 所示。

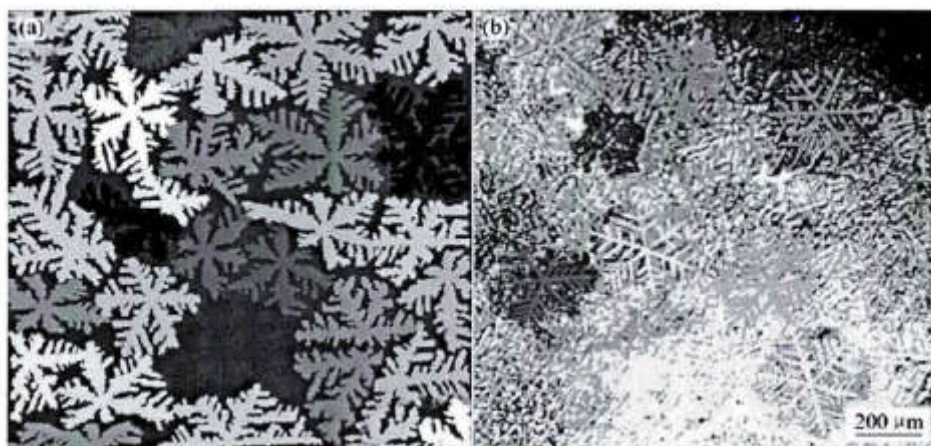


图 2-5 等轴晶多晶粒枝晶组织模型与实验对比

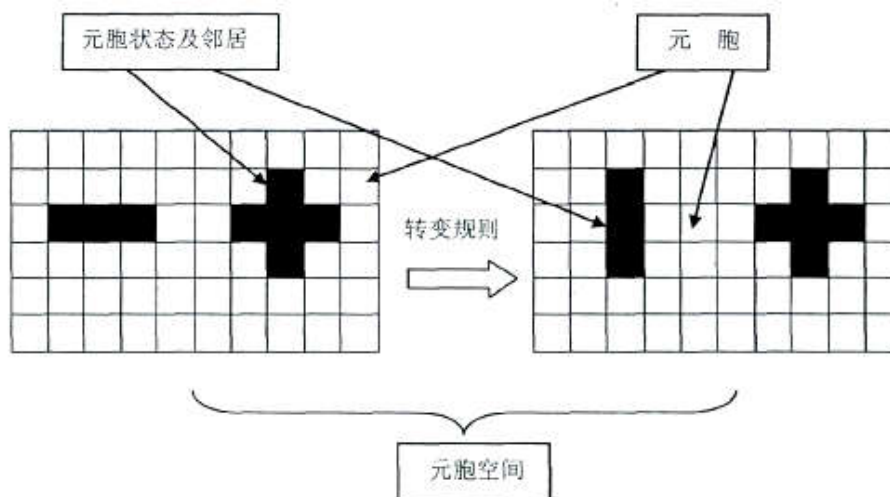


图 2-6 元胞自动机的组成

元胞自动机算法的四要素：

### (1)元胞

元胞状态是元胞最基本的属性，不同的元胞状态代表不同元胞属性；元胞按网格几何形状划分，通常可分为三角形，四边形以及六边形网格。

### (2)元胞空间

元胞空间可以使一维、二维、三维，也可以是笛卡尔网格中任意位数的构造。

### (3)邻居类型

在一维空间里，是以半径为度量定义邻居的，通常为左右相邻的两个元胞。

在二维空间内，六边形网格多以 6 邻居为主；三边型网格多以 3 个邻居和 12 个邻居为主，如图 2-7 所示。四边形网格常见的有两种：(a)V.Neumann 型和(b)Moore



型，如图 2-8 所示。

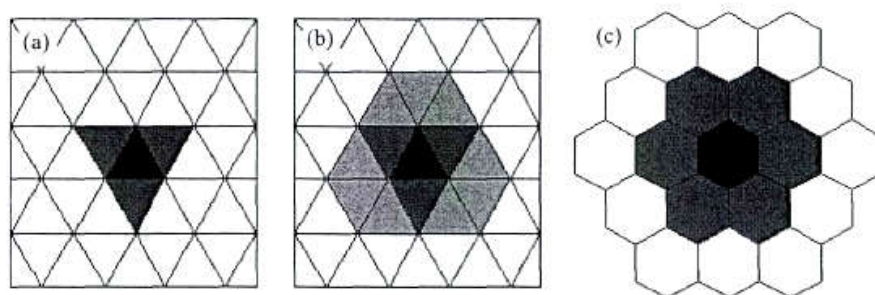


图 2-7 三边形网格与六边形网格

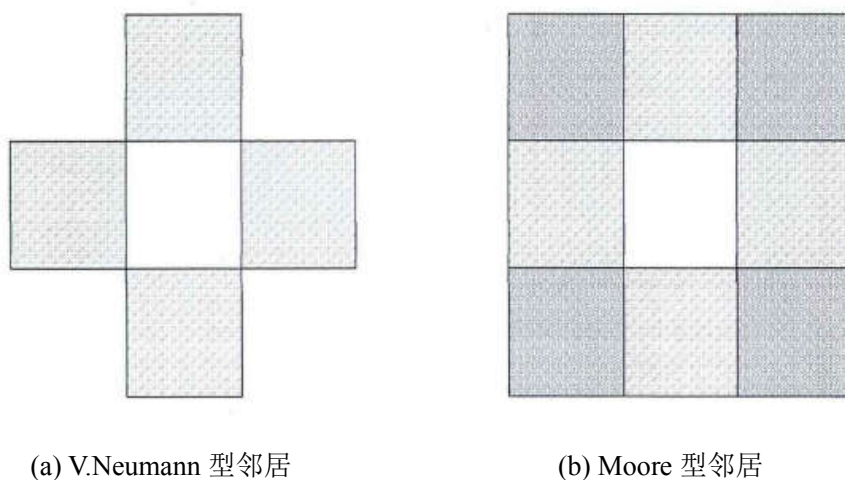


图 2-8 四边形邻居类型

#### (4) 转变规则

转变规则决定着元胞自动机法如何动态运行，每一个元胞的当前状态可以看作是“自变量”，下一时刻的元胞状态可以看作是“因变量”，转变法则可以看作是“对应法则”。以 V. Neumann 模型为例，其数学表达式可表示为：

$$\varphi_{i,j}^{t+\Delta t} = f(\varphi_{i,j}^t, \varphi_{i-1,j}^t, \varphi_{i+1,j}^t, \varphi_{i,j-1}^t, \varphi_{i,j+1}^t) \quad (2-25)$$

式中  $f$  ——为转变规则方程；

$\varphi_{i,j}^t$  ——为变量  $\varphi$  在  $t$  时刻位置  $(i, j)$  的元胞状态变量的值， $\varphi$  的下标代表位置，上标代表时间；

$\varphi$  ——为元胞状态变量的值。

运用元胞自动机方法计算模拟凝固过程中的微观组织，首先要更具所模拟的区域划分网格，通常而为模拟选用四边形网格；其次，设定元胞的状态值；再次，设定邻居元胞之间的关系。计算模拟时，依据选取的形核、生长模型制定相对应的捕

捉算法，并以此来建立相应的局部转变规则。

Rappaz 等人首先提出的一种元胞自动机的局部转变规则，其假设晶粒的生长外形是以正四边形，正四边形的对角线与坐标轴正向成 $\theta$ 角，为晶粒的择优生长方向，如图 2-9 所示<sup>[47]</sup>。假设核心元胞 A 在 $t_0$ 时刻形成，则在 $t$ 时刻代表经历外形的正四边的半对角线长可表示为：

$$L(t) = \int_0^t v[\Delta T(t)] dt \quad (2-26)$$

应用 KGT 生长模型计算出 $v(\Delta T)$ ， $v(\Delta T)$ 为枝晶尖端生长速度。该正四边形经过一段生长时间，当长到元胞 A 对应的正上、正下、正左、正右方向元胞的中心时，假设它们的状态为液态，元胞 A 将捕获这几个邻居元胞，并将自身的状态数赋予这几个邻居元胞。否则，元胞 A 不再生长，而邻居元胞开始生长。该方法具有一定缺陷，在经过多次计算后，择优方向发生偏移，因此需要在每一次计算后进行调整。

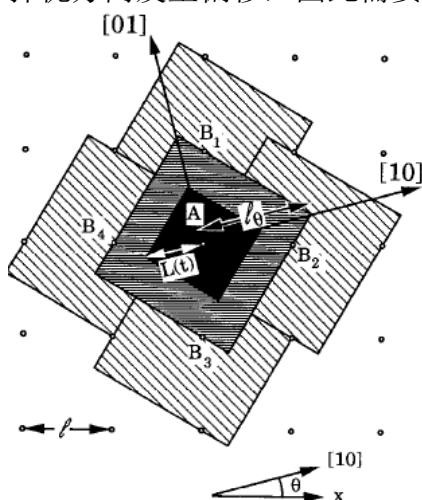


图 2-9 传统的捕获算法

朱明芳提出改进算法。固液混合区的元胞周围满足存在液相元胞条件时，生长距离 $L_i$ 可以进行转化，可得：

$$L_i = \frac{\int v_i[\Delta T(t)] dt}{\cos \theta + |\sin \theta|} \quad (2-27)$$

假如 $i$ 最近相邻的元胞为液相，当 $L_i$ 大于元胞尺寸 $\Delta x$ 时，邻居元胞被捕获；而当 $i$ 为次邻近位置上的液相元胞时，则 $L_i$ 大于 $\sqrt{2}\Delta x$ 时被捕获。

## 2.4 本章小结

对于金属微观凝固方面的研究，许多学者做了各个方面的努力，提出了一些经

典理论。目前，微观模拟所建立的模型是都是进行过简化的，对想要获得结果有直接影响的项目，有侧重点的保留一些项。这是因为凝固过程过于复杂，受到许多因素的影响(如溶质的再分配，结晶潜热的处理等)，所以想要建立一个能够考虑到各种因素的模型是不现实的。目前理论研究还有很大空间，模拟尺度还可以继续缩小，相应的数值模拟模型还可更为完善。

微观模拟对于异形件以及连铸坯的研究还有待进一步研究。异形件的结构复杂，容易发生夹杂物聚集，充型不完整的问题，这些都给异形件模拟工作带来了困难。而对于连铸坯，钢液浇注时，在结晶器内有着强烈的对流运动，会对凝固组织产生影响，而现有阶段的模拟基本上忽略了钢液的对流运动的影响。这就需要更多的研究以建立更为完善的数学模型。



## 第3章 连铸坯凝固组织形成的数学模型

### 3.1 圆坯宏观温度场模型

#### 3.1.1 建立圆坯传热模型的假设条件

根据生产的实际情况，做一些假设：

- (1)液相线温度和固相线温度为恒定值；
- (2)只考虑沿铸坯直径方向上的传热，所以模拟的那一层与前后两层不存在传热；
- (3)拉坯速度均匀恒定；
- (4)凝固潜热采用等效比热法，而铸坯表面则采用特殊处理。在 3.1.4 节将进行详细的描述；
- (5)对于圆坯，假设圆坯在结晶器及二冷区向四周传热是均匀的，即温度梯度只沿半径方向发生；
- (6)假设圆坯在凝固过程中钢液不发生收缩。

#### 3.1.2 圆坯传热方程的建立

从理论上来讲，连铸生产过程中铸坯凝固伴有传导、对流、辐射三种传热方式，而且是并伴有形变的非稳态传热过程。假设在钢液结晶器内最上面一层，沿铸坯中心取一个高度为  $dz$ ，厚度为  $dx$ ，宽度为  $dy$  的微元体，与铸坯同时向下运动，微元体的热量平衡为：

- (1)微元体热量=接受热量-支出热量
- (2)钢液从上端带入微元体热量( $dx dy$  面):  $\rho v c T dx dy$  (令  $dy=1$ )
- (3)铸坯中心传给微元体热量( $dy dz$  面):  $\lambda \frac{\partial T}{\partial x} dy dz$
- (4)微元体内存储热量:  $\rho c \frac{\partial T}{\partial t} dx dy dz$
- (5)微元体向下运动带走热量( $dx dy$  面):  $\rho v c \left( T + \frac{\partial T}{\partial z} dz \right) dx dy$
- (6)微元体侧面传走热量( $dy dz$  面):  $-\lambda \left[ \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) dx \right] dy dz$

将每一项热量带入热量平衡方程，进行简化，令微元体和铸坯同处在同一坐标系下，可得：

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial T}{\partial x} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (3-1)$$

对于圆坯可以用极坐标表示，其数理方程为：

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{\lambda}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \rho H \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (3-2)$$

式中  $r$ ——为半径(m)；

$\lambda$ ——为钢的导热系数(kJ/m·s·℃)；

$T$ ——为铸坯温度(℃)；

$H$ ——为凝固潜热(kJ/kg)；

$\phi$ ——为固相相对量；

$\rho$ ——为钢的密度(kg/m<sup>3</sup>)。

### 3.1.3 初始条件与边界条件

#### 3.1.3.1 初始条件

在模拟初始阶段，假设在结晶器内最上面一层钢液温度处处相等，并以此为初始条件：

$$T_0 = T_c \quad (3-3)$$

式中  $T_c$ ——为浇注温度(℃)。

#### 3.1.3.2 边界条件

铸坯中心两侧对称传热

(1)结晶器表面热流计算：

结晶器机构较为复杂，导致其传热机制也较为复杂，其中包括传导、对流以及相变放热，再加上液体凝固收缩，钢液填充不及时，容易生成气缝，从而加大热阻，以及一系列不稳定因素的影响，这使得选取第二类边界条件  $q$  难以精确计算。因此，常用经验数据和统计的方法来表示结晶器的传热能力。

Savage 通过实验测量，获得经验系数  $B=0.335$ ，其表达式如下<sup>[62]</sup>：

$$q = 2.688 - 0.335\sqrt{\tau} = 2.688 - 0.335\sqrt{z/v} \text{ (MW/m}^2\text{)} \quad (3-4)$$

式中  $z$ ——为结晶器内钢水的高度(m)；

$v$ ——为拉坯速度(m/s)；

$\tau$ ——为钢水通过结晶器的时间(s)。

Huespe 等提出的圆坯公式添加了一个修正项，如式(3-5)所示<sup>[63]</sup>：

$$q = 2.19 \times 10^6 - 5.64 \times 10^5 \sqrt{z/v} + 1.60 \times 10^5 (\text{W/m}^2) \quad (3-5)$$

Davies 提出了局部热流密度公式, 如下式所示:

$$q = 2.64 \times \exp[-(z/v)] + 0.91 \times \exp[-(z/11.3v)] + 0.93 (\text{MW/m}^2) \quad (3-6)$$

姚曼通过设置热电偶传感器实时测量结晶壁温度, 逆向计算传热方程求解结晶器热流密度<sup>[64]</sup>。

结晶器所带走的热量同冷却水的流量, 进出水温度以及圆坯的拉速有关, 本文计算结晶器热流密度  $q$ , 采用了目前数值模拟计算最为广泛的一种方法, 将热流密度与时间结合起来, 利用经验参数完成简化, 这为后面的讨论冷却强度对连铸坯形貌, 等轴晶率的影响提供了方便。只需要改变经验参数  $B, k$  就可以获得不同的冷却强度。

$$q = k(A + B\sqrt{t}) \quad (3-7)$$

式中  $B$  ——为经验常数( $\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-0.5}$ );

$A$  ——为结晶器入口截面上的热流密度( $\text{W} \cdot \text{m}^{-2}$ );

$t$  ——为钢液从  $t_0$  时刻进入结晶器起在结晶器内所停留的时间(s);

$k$  ——为热流修正系数。

## (2) 二冷区热流计算

目前对连铸坯在二次冷区进行冷却的方式主要分为两种, 一种是气—水混合喷雾冷却, 另一种是水喷雾冷却。

二冷区的传热方式为以下几种<sup>[65]</sup>:

- ①连铸坯与夹棍接触处通过传热方式换热;
- ②连铸坯与周围空气通过对流换热方式传热;
- ③连铸坯表面通过热辐射方式向周围空气散热;
- ④连铸坯将热量以传热方式, 对流换热方式将热量传递给冷却水。

由上述各种传热路径可见影响二冷区换热因素较多, 且学者对二冷区传热做了很多的研究, 并总结了许多的二冷区第二类边界条件导热系数。

对于二冷区第  $i$  段, 其表面热流密度  $q_i$  可表示为:

$$q_i = h_i (T_s - T_w) + \varepsilon \delta \left[ (T_s + 273)^4 - (T_0 + 273)^4 \right] \quad (3-8)$$

式中  $k$  ——为比例系数;

$q_i$  ——为第  $i$  段的热流密度( $\text{kJ/m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ );

$\varepsilon$  ——为辐射系数, 本文取 0.8;

$\delta$ ——为玻尔兹曼常数;

$h_i$ ——为二冷区第*i*段换热系数( $\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}$ );

$T_s$ ——为铸坯表面温度( $^\circ\text{C}$ );

$T_0$ ——为周围环境温度( $^\circ\text{C}$ );

$T_w$ ——为冷却水温度( $^\circ\text{C}$ )。

换热系数 $h_i$ 越大,那么连铸坯表面同二冷区冷却水之间的换热效率就越高。每秒钟传走的热量就越多,冷却强度就越大。换热系数 $h_i$ 与连铸坯周围布置的喷嘴数量、喷嘴结构、喷水量、喷水高度、角度、距离以及铸坯表面温度等因素有关。本文采用式(3-9)计算换热系数<sup>[66]</sup>。

$$h_i = 1.57 w_i^{0.55} (1 - 0.0075 T_w) / \alpha_i \quad (3-9)$$

式中  $w_i$ ——为各段的水流密度( $\text{L} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ );

$\alpha_i$ ——为各段的调节系数。

### (3)空冷区热流计算

连铸坯在空冷区表面热流密度可表示为:

$$q = \varepsilon \delta \left[ (T_s + 273)^4 - (T_0 + 273)^4 \right] + \gamma h (T_s - T_0) \quad (3-10)$$

$$h = 5.6784 \times 0.29 \left[ \frac{1.8(T_s - T_0)}{3.28L} \right]^{1/4} \quad (3-11)$$

式中  $L$ ——为特征尺寸(m);

$\gamma$ ——为对流作用所占比例;

$h$ ——为自然对流换热系数( $\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}$ )。

### 3.1.4 传热偏微分方程离散

实际生产中铸坯的物性参数是随温度发生变化的,且与温度之间的关系是非线性的。因此可知使用解析法求解微分方程的计算量过于庞大,很难实现。采用数值法则可以解决计算量庞大的问题。

本文采用有限差分法求解温度场,差分法的原理是将微分方程中的时间变量,空间变量离散化。将连铸坯的截面划分为一个个节点,将时间划分为一个个时间段。差分方程的建立采用微元体平衡法,直接根据物理过程推导出差分方程。

假设圆坯最外围的每一点上的换热系数是相同的,所以温度差只存在在于半径方向上,温度节点为环形。假设一共有 $n+1$ 环,环间距为 $\Delta r$ ,每一个节点为每一环

的中心点，如图 3-1 所示。

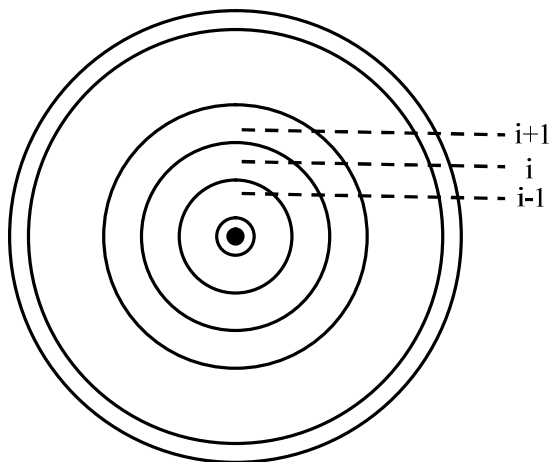


图 3-1 圆环差分格式

为了简化计算，最里面一环的节点为圆心，将其半径设为  $\frac{1}{2}\Delta r$ ，同理将最外面一环宽度设为  $\frac{1}{2}\Delta r$ ， $\Delta r = \frac{1}{n} \cdot r$ ， $r$  为圆坯的半径。

对于连铸坯内部节点：

$$s_i = \pi \left( r_i + \frac{1}{2} \Delta r \right)^2 - \pi \left( r_i - \frac{1}{2} \Delta r \right)^2 = 2\pi r_i \Delta r$$

$$V_i = s_i \cdot \Delta z$$

$$\Delta z = v \cdot \Delta t$$

$$\begin{aligned} \rho \cdot V_i \cdot c \frac{T_{i-1}^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} &= \lambda_{i-1} \frac{(T_{i-1}^{n+1} - T_i^{n+1})}{\Delta r} \left( r_i - \frac{1}{2} \Delta r \right) \cdot 2\pi \cdot \Delta z \\ &+ \lambda_{i+1} \frac{(T_{i+1}^{n+1} - T_i^{n+1})}{\Delta r} \left( r_i + \frac{1}{2} \Delta r \right) \cdot 2\pi \cdot \Delta z \end{aligned}$$

经整理可得：

$$\begin{aligned} -\lambda \left( \frac{1}{\Delta r^2} - \frac{1}{2r_i \Delta r} \right) T_{i-1}^{n+1} + \left( \frac{\rho c}{\Delta t} + \frac{2\lambda}{\Delta r^2} \right) T_i^{n+1} - \lambda \left( \frac{1}{\Delta r^2} + \frac{1}{2r_i \Delta r} \right) T_{i+1}^{n+1} &= \frac{\rho c}{\Delta t} T_i^n \\ a_{i-1} T_{i-1}^{n+1} + b_i T_i^{n+1} + c_{i+1} T_{i+1}^{n+1} &= \frac{\rho c}{\Delta t} T_i^n \end{aligned} \quad (3-12)$$

其中：

$$\begin{aligned} a_i &= -\lambda \left( \frac{1}{\Delta r^2} - \frac{1}{2r_i \Delta r} \right) \\ b_i &= \frac{\rho c}{\Delta t} + \frac{2\lambda}{\Delta r^2} \end{aligned}$$

$$c_i = -\lambda \left( \frac{1}{\Delta r^2} + \frac{1}{2r_i \Delta r} \right)$$

对于连铸坯内部中心节点：

$$s_1 = \pi \cdot \frac{\Delta r^2}{4}$$

$$V_1 = \pi \cdot \frac{\Delta r^2}{4} \Delta z$$

$$\rho V_1 c \frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} = \lambda_{i-1} \frac{(T_{i-1}^{n+1} - T_i^{n+1})}{\Delta r} \left( r_i - \frac{1}{2} \Delta r \right) 2\pi \Delta z + \lambda_{i+1} \frac{(T_{i+1}^{n+1} - T_i^{n+1})}{\Delta r} \left( r_i + \frac{1}{2} \Delta r \right) 2\pi \Delta z$$

经整理可得：

$$\left( \frac{\rho c}{\Delta t} + \frac{4\lambda}{\Delta r^2} \right) T_1^{n+1} - \frac{4\lambda}{\Delta r^2} T_2^{n+1} = \frac{\rho c}{\Delta t} T_1^n \quad (3-13)$$

$$V_{n+1} \approx \pi \cdot D \cdot \frac{\Delta r}{2} \Delta z$$

$$S_{n+1} = \pi \cdot D^2 - \pi \left( \frac{d - \Delta r}{2} \right)^2 \approx \pi \cdot D \cdot \frac{\Delta r}{2}$$

$$\rho V_{N+1} c \frac{T_{N+1}^{n+1} - T_{N+1}^n}{\Delta t} = \lambda_N \frac{(T_N^{n+1} - T_{N+1}^{n+1})}{\Delta r} \cdot 2\pi \left( \frac{D}{2} - \frac{\Delta r}{2} \right) - q\pi D + \frac{V_{N+1} \rho H \Delta q}{\Delta t}$$

经整理可得：

$$\frac{-2\lambda}{\Delta r^2} + \left( \frac{\rho c}{\Delta t} + \frac{2\lambda}{\Delta r^2} \right) T_{N+1}^{n+1} = \frac{\rho c}{\Delta t} T_{N+1}^n - \frac{2q}{\Delta r} + \frac{\rho H \Delta q}{\Delta t} \quad (3-14)$$

考虑到金属凝固时有潜热放出，需要对表面节点的温度进行讨论。

假设当表面节点旧值  $T_{N+1}^n$  满足表达式  $T_{N+1}^n > T_1$ ，新值  $T_{N+1}^{n+1}$  满足表达式  $T_{N+1}^{n+1} > T_1$ ，看作是情况 1，而  $T_{N+1}^{n+1}$  满足表达式  $T_1 > T_{N+1}^{n+1} > T_s$  时，看作是情况 2，而  $T_{N+1}^{n+1}$  满足表达式  $T_{N+1}^{n+1} < T_s$  时，看作是情况 3；假设当  $T_{N+1}^n$  在固液相混合区域时， $T_{N+1}^{n+1}$  也在固液相混合区域时，看作是情况 4，而  $T_{N+1}^{n+1}$  在固相时，看作是情况 5；假设当表面节点  $T_{N+1}^n$  在固相时，而  $T_{N+1}^{n+1}$  也在固相时，看作是情况 6。

情况 1 与 6 无潜热释放，所以：

$$\Delta q = 0$$

对于情况 2、3、4、5，有潜热放出。钢的凝固过程存在于固液混合区、液相区和固相区，随着温度的降低会有越来越多的固相成分。可将凝固潜热简化到固液两相区域中，做线性化处理。

由情况 2 可得：

$$\Delta q = \frac{T_l - T_{N+1}^{n+1}}{T_l - T_s}$$

由情况 3 可得：

$$\Delta q = 1$$

由情况 4 可得：

$$\Delta q = \frac{T_{N+1}^n - T_{N+1}^{n+1}}{T_l - T_s}$$

由情况 5 可得：

$$\Delta q = \frac{T_{N+1}^n - T_s}{T_l - T_s}$$

以上各式中的  $T_l$  与  $T_s$  分别为液、固相线温度，内部节点  $T_i^{n+1}$  与  $T_i^n$  相差很小，潜热用等效比热法解释：

$$c_p = c + \frac{H}{T_l - T_s}$$

根据上述判断的条件，情况 1 可改写为：

$$\frac{-2\lambda}{\Delta r^2} T_N^{n+1} + \left( \frac{\rho c}{\Delta t} + \frac{2\lambda}{\Delta r^2} \right) T_{N+1}^{n+1} = \frac{\rho c}{\Delta t} T_{N+1}^n - \frac{2q}{\Delta r} \quad (3-15)$$

情况 2 可改写为：

$$\frac{-2\lambda}{\Delta r^2} T_N^{n+1} + \left( \frac{\rho c}{\Delta t} + \frac{2\lambda}{\Delta r^2} + \frac{\rho H}{\Delta t (T_l - T_s)} \right) T_{N+1}^{n+1} = \frac{\rho c}{\Delta t} T_{N+1}^n - \frac{2q}{\Delta r} + \frac{\rho H T_l}{T_l - T_s} \quad (3-16)$$

情况 3 可改写为：

$$\frac{-2\lambda}{\Delta r^2} T_N^{n+1} + \left( \frac{\rho c}{\Delta t} + \frac{2\lambda}{\Delta r^2} \right) T_{N+1}^{n+1} = \frac{\rho c}{\Delta t} T_{N+1}^n - \frac{2q}{\Delta r} + \frac{\rho H}{\Delta t} \quad (3-17)$$

情况 4 可改写为：

$$\frac{-2\lambda}{\Delta r^2} T_N^{n+1} + \left( \frac{\rho c_p}{\Delta t} + \frac{2\lambda}{\Delta r^2} \right) T_{N+1}^{n+1} = \frac{\rho c}{\Delta t} T_{N+1}^n - \frac{2q}{\Delta r} \quad (3-18)$$

情况 5 可改写为：

$$\frac{-2\lambda}{\Delta r^2} T_N^{n+1} + \left( \frac{\rho c}{\Delta t} + \frac{2\lambda}{\Delta r^2} \right) T_{N+1}^{n+1} = \frac{\rho c}{\Delta t} T_{N+1}^n - \frac{2q}{\Delta r} + \frac{\rho H}{\Delta t} \left( \frac{T_{N+1}^n - T_s}{T_l - T_s} \right) \quad (3-19)$$

将公式(3-12)到(3-14)联立，得到一个三对角矩阵。温度场采用隐式表达式，对其求解可用 TDMA，即追赶法<sup>[67]</sup>。本文使用 Matlab 软件对其进行求解，

计算过程中，对表面温度采用试错法来处理。根据旧值  $T_{N+1}^n$  大小可分为三个区域：

1)如果圆坯表面温度旧值满足表达式  $T_{N+1}^n \geq T_l$ ，则旧值在液相区。2)如果表面温度旧值满足表达式  $T_l > T_{N+1}^n > T_s$ ，则表面温度旧值在固液混合区。3)若表面温度旧值满足表达式  $T_{N+1}^n \leq T_s$ ，则表面温度旧值在固相区。

由于连铸坯表面热量被冷却水带走，因此，在通常情况下表面节点的新值应低于旧值。当表面节点满足表达式  $T_{N+1}^n < T_s$  时，即使冷却强度下降导致回温，新值也不可能回到两相区以及液相区。

连铸坯表面温度按上述假设的第一种情况进行讨论，此时，旧值满足表达式  $T_{N+1}^n > T_l$ 。先假设新值满足表达式  $T_{N+1}^{n+1} > T_l$ ，那么应按照无潜热释放计算。如果本次的计算结果是正确的，可以进入下一步计算。但如果新值满足表达式  $T_{N+1}^{n+1} < T_l$ ，那么说明计算结果有误，应该用式(3-16)再次进行计算，如果新值满足表达式  $T_s < T_{N+1}^{n+1} < T_l$ ，那么结果是正确的。但是如果新值满足表达式  $T_{N+1}^{n+1} < T_s$ ，则结果有误，应采用式(3-17)进行计算。

上述讨论的情况(1)的计算方法和情况 2 的是一样的。先按照式(3-18)进行计算，如果新值满足表达式  $T_s < T_{N+1}^{n+1} < T_l$ ，计算结果是对的；若新值满足表达式  $T_{N+1}^{n+1} < T_s$ ，则计算结果是错的，需要用式(3-17)重新计算。

上述讨论的情况 3，没有凝固潜热的释放，所以无需采用试错法来迭代处理，可采用式(3-15)直接进行计算。

## 3.2 微观组织形成的相关模型

### 3.2.1 微观元胞的温度计算

由于本文采用的是宏观与微观相耦合的方法进行模拟计算，所以采用两套网格计算，大网格用于计算温度场，小网格用于模拟凝固组织，这有利于减少计算量，提高计算效率。先计算完每一个单元的温度，接着采用双线性插值法计算元胞温度，如图 3-2 所示。

任意一元胞  $P$  的温度与该元胞到它相邻的宏观单元点的距离  $l_i$  成反比，计算公式如下：

$$T_p = \sum_{i=1}^n l_i^{-1} T_i / \sum_{i=1}^n l_i^{-1} \quad (3-20)$$

式中  $T_i$ ——为  $P$  周围的单元节点的温度( $^{\circ}\text{C}$ )；

$l_i$ ——为  $P$  到单元节点的距离(m)；



$T_p$ ——为元胞单元的温度( $^{\circ}\text{C}$ );

$n$ ——为周围宏观节点的数目。

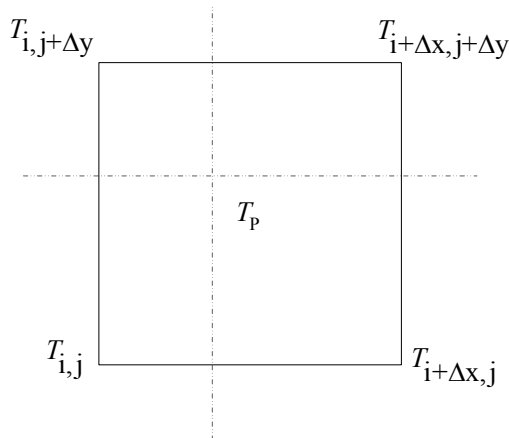


图 3-2 双线性插值法示意图

### 3.2.2 形核模型

晶粒形核是一个随机过程，所以在模拟晶粒形核时有体现其随机型，而 Rappaz 连续形核模型正好满足上述要求。形核位置的随机性用  $dn/d(\Delta T)$  来描述：

$$\frac{dn}{d(\Delta T)} = \frac{n_{\max}}{\sqrt{2\pi}\Delta T_{\sigma}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta T - \Delta T_{\max}}{\Delta T_{\sigma}}\right)^2\right] \quad (3-21)$$

式中  $n_{\max}$ ——为最大形核密度( $\text{m}^{-3}$ );

$n$ ——为形核密度( $\text{m}^{-3}$ );

$\Delta T_{\max}$ ——为合金的平均形核过冷度( $^{\circ}\text{C}$ );

$\Delta T_{\sigma}$ ——为标准方差过冷度( $^{\circ}\text{C}$ )。

经查阅相关文献，给  $n_{\max}$ ， $\Delta T_{\max}$ ， $\Delta T_{\sigma}$  选取了一些较为合理的数值。

(1)形核率计算

令  $u = \frac{\Delta T - \Delta T_{\max}}{\Delta T_{\sigma}}$ ，变量  $u$  的正太分布函数的积分可以近似的按照公式(3-22)来计算。

$$\phi(u) \approx \begin{cases} 1 - \frac{1}{2} \left( 1 + \sum_{i=1}^4 a_i u \right)^{-4}, & (u \geq 0) \\ \frac{1}{2} \left( 1 + \sum_{i=1}^4 a_i |u| \right)^{-4}, & (u < 0) \end{cases} \quad (3-22)$$

$a_i$  是高斯公式的求积系数，可由式(3-23)计算：

$$a_i = \int_0^{\Delta T} l_i(x) dx \quad (3-23)$$

$x$  是高斯点，可以由式(3-24)计算：

$$l_i(x) = \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^n \frac{(x - x_k)}{(x_i - x_k)} \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n) \quad (3-24)$$

$l_i(x)$  为插值基函数，仅与节点有关。可以求的球机系数：

$$\begin{aligned} a_1 &= 0.196854 & a_2 &= 0.115194 \\ a_3 &= 0.000344 & a_4 &= 0.019527 \end{aligned}$$

可得到过冷度为  $\Delta T$  时的形核密度：

$$n(\Delta T) = n_{\max} \phi(u) \quad (3-25)$$

对应于每一个宏观温度，随着温度变化，对应过冷度变化量  $\delta(\Delta T)$ ，那么熔体内形核密度的增量为：

$$\delta n = \int_{\Delta T}^{\Delta T + \delta(\Delta T)} \frac{dn}{d(\Delta T)} d(\Delta T) = n(\Delta T + \delta(\Delta T)) - n(\Delta T) \quad (3-26)$$

因此在  $\delta t$  时间内，元胞  $i$  的形核率  $Pn_i$  可由下式计算。

$$Pn_i = \delta n_i S_i \quad (3-27)$$

式中  $S_i$ ——为元胞  $i$  的面积( $m^2$ )。

对于表面激冷层、靠近结晶器表层和中间元胞计算时采用相同的公式，由于冷却条件不同，所以采用不同的形核参数。

## (2) 形核位置

金属凝固时，不是在一瞬间全部形核，而是随机的位置上小晶粒进行聚合形成结晶中心，这些短程有序的原子团并不稳定，只有那些略大与临界形核半径的原子团才能进一步形核。

本模型模拟开始于结晶器内钢液最上一层，一直持续到空冷结束。在整个过程中，模型划分的所有元胞都经历了从液相到固相的转变。本文使用 Matlab 软件进行编程，实现二维元胞模拟，整个元胞区域相当于是一个大的矩阵，而每一个元胞就相当于就相当于是矩阵中的一个元素。首先，所有元胞设为液相状态属性  $<-1>$ ，同时可以使用 randn 语句给每一个元胞赋予一个随机数  $Rn(i) (0 \leq Rn \leq 1)$ 。在凝固计算时，要用元胞的随机数同形核率  $Pn_i$  进行比较，这里的形核率  $Pn_i$  可以由式(3-27)计算得到，当形  $Pn_i > Rn(i)$  时，该元胞形核，当形  $Pn_i < Rn(i)$  时，不能形核。

### 3.2.3 生长模型

本文在数值模拟组织生长时,选用的是 KGT 模型,本文在 2.2 章已经对 LGK 模型同 KGT 模型在枝晶生长方面进行了比较,从图 2-2 可知: KGT 模型同样可以计算等轴晶生长过程。

枝晶生长前沿的过冷度  $\Delta T$  由 4 部分组成:

$$\Delta T = \Delta T_c + \Delta T_l + \Delta T_k + \Delta T_r \quad (3-28)$$

在连续铸造情况下,式(3.28)中的  $\Delta T_l$ 、 $\Delta T_k$  和  $\Delta T_r$  对大多数钢影响较小,而成分过冷  $\Delta T_c$  起着主导作用,因此总过冷度可以看作是成分过冷。

$$\Delta T = \Delta T_c \quad (3-29)$$

枝晶尖端生长半径  $R$  可由式(3-30)计算:

$$R = 2\pi\sqrt{\Gamma T_m / (\sigma^* m G_c \xi_c)} \quad (3-30)$$

溶质过饱和度  $\Omega$  可由式(3-31)计算:

$$\Omega = \frac{c_1^* - c_0}{c_1^* (1-k)} = \text{Iv}(P_c) \quad (3-31)$$

过冷度  $\Delta T$  可由式(3-32)计算:

$$\Delta T = mc_0 \left[ 1 - \frac{1}{1 - \Omega(1-k)} \right] \quad (3-32)$$

其中:

$$\xi_c = 1 - \frac{2k}{\left[ 1 + (2\pi / P_c)^2 \right]^{1/2} - 1 + 2k} \quad (3-33)$$

在生长缓慢的条件下,  $\xi_c = 1$ 。

$\text{Iv}(P)$  的 Ivantsov 函数,可表示为:

$$\text{Iv}(P) = P \exp[P] E_1(P) \quad (3-34)$$

$E_1$  为指数积分函数,可由式(3-35)计算:

$$E_1(P) = \int_P^\infty \frac{\exp(-z)}{z} dz \quad (3-35)$$

Ivantsov 函数  $\text{Iv}(P)$  也可以些微连续分数<sup>[68]</sup>, 即

$$\text{Iv}(P) = P / P + 1 / 1 + 1 / P + 2 / 1 + 2 / P + \dots + n / 1 + n / P + \dots \quad (3-36)$$

$$P_c = \frac{Rv}{2D} \quad (3-37)$$

$$\Omega = \text{Iv}(P_c) \approx \frac{2P_c}{2P_c + 1} = \frac{Rv}{Rv + D} \quad (3-38)$$

$$G_c = -\frac{vc_0(1-k)}{D[1-(1-k)-k\Delta T]} \quad (3-39)$$

$$Rv = -\frac{\Delta TD}{mc_0(1-k)-k\Delta T} \quad (3-40)$$

$$v = \frac{\frac{mc_0(1-k)}{D[1-(1-k)\text{Iv}(P_c)]}}{\frac{\pi^2\Gamma}{P_c^2 D^2}} \quad (3-41)$$

晶粒形核、枝晶生长一系列的模拟计算，需要准确的空间步长  $\delta x$  与时间步长  $\delta t$ ，如果空间步长  $\delta x$  与时间步长  $\delta t$  设置的过大，会使等轴晶与柱状晶的形貌发生偏差，但是如果空间步长  $\delta x$  与时间步长  $\delta t$  设置的过小，计算量就会过大，模拟时间过长。文献中指出，在相同的演化规则下，空间步长相同，只是时间步长不同时，所得出的凝固组织形貌相差很大，同时指出在时间步长满足下式时才较为合理<sup>[69]</sup>。

$$\delta t \leq \frac{1}{4} \min\left(\frac{\delta x}{v_{\max}}, \frac{\delta x^2}{D}\right) \quad (3-42)$$

文献对时间步长的选择是：每进行一次计算时，固液界面的移动的空间不能超出元胞尺寸的五分之一<sup>[70,71]</sup>。

通过计算，本文的时间步取为 0.0001 秒，这既满足了上述式(3-42)的要求，同时也满足宏观温度场计算的要求，这是因为本文的宏观温度场计算采用的是隐式计算，而隐式计算对时间步的要比显式计算时间步要求小得多。因此，时间步的选择上只要满足了微观组织的计算，就能满足宏观温度场的计算。

### 3.2.4 元胞固相率的计算

微观组织模拟时，每一个时间步  $\delta t$  都会对界面处的元胞进行一次状态判别，判别元胞个体是否转变为固相。这需要进行固相率计算。

Sasikumar 通过式(3-43)计算每一个时间步内界面沿  $x$ 、 $y$  方向的速度  $v_x$ 、 $v_y$ ，得出固相率增量<sup>[72]</sup>：

$$\Delta f_s = \frac{\delta t}{\delta x} \left( v_x + v_y - v_x v_y \frac{\delta t}{\delta x} \right) \quad (3-43)$$

### 3.2.5 转变规则

本文是宏观温度与微观耦合计算，在每一个时间步内，都会计算一次温度，并以此为依据来判读各个元胞的状态。在模拟计算时，先将所元胞的状态属性定义为液相<-1>。随着计算的进行，有一部分元胞有液相变为两相区的元胞<0>。在经过一段时间的计算，有一部分元胞开始转变为固相元胞<1>。

转变规则定义如下：

(1)温度的下降过程中，固液界面元胞<0>在过冷的作用下，开始凝固，固相率增量 $\Delta f_s$ 的计算方法见式(3-43)；

(2)当固相分数等于1时，固液界面元胞<0>变为固相元胞<1>，此时，该元胞获得了捕捉周围邻居元胞的能力。

(3)液相元胞<-1>形核或是被捕捉时，变为界面元胞<0>；

(4)固相元胞进<1>依照冯·诺伊曼的法则，对周围正上、正下、正左和正右的四个邻居进行判断，如果邻居为液相元胞，则捕获成功，并将自身的随机取向赋值给它；如果邻居状态是固相和两相元胞，那么捕获失败。

## 3.3 模型参数选取

### 3.3.1 工艺参数

本文所模拟的钢的型号是 Q345，表 3-1 为 Q345 钢的主要成分。

表 3-1 Q345 钢的主要成分/wt%

元素	C	Mn	Si	S	P
含量	0.2	0.75	0.14	0.01	0.016

模型中所用某钢厂连铸机参数、生产工艺参数和一些计算中使用到的参数见表 3-2。

表 3-2 模型中的所使用到的连铸工艺参数

项目	参数
圆坯的断面半径/mm	250
拉坯速度/ $\text{m} \cdot \text{min}^{-1}$	1.1
浇注温度/ $^{\circ}\text{C}$	1496
连铸机半径/m	12
结晶器长度/m	1

表 3-2(续表)

项目	参数
二冷区 0 段长度/m	0.422
二冷区 1 段长度/m	3.52
二冷区 2 段长度/m	4.986
二冷区 0 段用水量/ $\text{m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$	20
二冷区 1 段用水量/ $\text{m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$	23
二冷区 2 段用水量/ $\text{m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$	2.5
空冷段长度/m	5.94
环境温度/ $^{\circ}\text{C}$	35
二冷段冷却水温度/ $^{\circ}\text{C}$	25
辐射系数	0.8

### 3.3.2 物性参数

数值模拟时, 选取较良好的物性参数有利于提高模拟的精准度, 因此在选取物性参数时应该谨慎对待。

#### (1) 密度

在数学模型中, 通常对于密度的设定方法有两种: 1) 常数法, 2) 公式法。由于密度是随温度非线性变化的, 难以采用公式法进行设定, 本文采用常数法来处理。

对于低碳钢来说, 液相区  $\rho_l = 7.0 \text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ , 高温固相密度  $\rho_s = 7.4 \text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ , 而固液混合区密度可以按照固相率来进行计算, 具体的赋值方法可由式(3-44)来确定。

$$\rho = \begin{cases} 7000; T \geq T_l \\ f_s \rho_s + (1 - f_s) \rho_l; T_s < T < T_l \\ 7400; T \leq T_s \end{cases} \quad (3-44)$$

#### (2) 比热容

比热容是钢的重要参数之一。通常情况下, 温度越高钢的比热容越大, 但是在高温时, 钢的比热容变化不大。在数值模拟时, 一般使用常数法, 或是简化为温度的线性函数。

常数法的优点是参数设置简单, 计算量小, 模拟时间减少, 因此在数值计算中广泛应用<sup>[73]</sup>。大多数的钢在液相时的比热容为  $0.84 \text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot ^{\circ}\text{C}^{-1}$ , 在固相的比热容为  $0.67 \text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot ^{\circ}\text{C}^{-1}$ , 在两相区时取固相与液相两者的平均值<sup>[74]</sup>。

而线性函数法则将钢的比热容表示成温度的函数，能够反映温度对比热的影响，表达式如式(3-45)所示：

$$c_p = 470 + 0.204T \quad \text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot ^\circ\text{C}^{-1} \quad (3-45)$$

### (3)凝固潜热

高温的连铸坯在外部冷却作用下，随着热量的逐步散失，发生了凝固现象，在这一过程中钢液由液相转变为固相，发生了物相转变，钢液放出凝固潜热。

钢的凝固潜热与钢内所含有的其它元素有关，纯铁的凝固潜热是  $2.73 \times 10^5 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1}$ ，而对常见碳钢来说，凝固潜热通常是  $2.86 \times 10^5 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。

数值模拟计算时，虽然凝固潜热释放量不大，且只在两相区发生凝固的区域释放，但是其对温度场计算产生很大影响，进而影响到微观凝固组织形貌的生成。因此，在编写程序时需要对凝固潜热进行处理。本文采用常用的等价比热法处理凝固潜热。等价比热法是将凝固潜热看成是比热容的一部分，可以用式(3-46)解释：

$$c'_p = c_p + c_0 \quad (3-46)$$

式中  $c_0$ ——为潜热引起的比热容增量

$c_p$ ——为金属本身的比热容

$c'_p$ ——为等效比热容

钢处在固液混合区时，等效比热法的表达方式如(3-47)所示：

$$c'_p = c_p + \frac{\Delta H_m}{T_l - T_s} \quad (3-47)$$

本文在计算铸坯表层的温度时(即当表层温度处在固液混合区时)，采用等价比热法，按式(3-47)处理。

### (4)导热系数

在数值模拟过程中，导热系数是非常重要的一项，查阅《现代连续铸钢使用手册》得到常温下的导热系数  $\lambda = 0.294 \text{ W}/(\text{cm}^2 \cdot ^\circ\text{C})$ 。普通的碳钢的导热系数会随着温度的变化而变化。以普通碳钢从  $0^\circ\text{C}$  开始升温为例，在  $800^\circ\text{C}$  以下，导热系数变化明显，超过  $800^\circ\text{C}$  后，变化缓慢<sup>[75]</sup>。导热系数随普通的碳钢变化高温变化缓慢，低温显著<sup>[76]</sup>。

钢液从中间包倒入到结晶器时，会发生剧烈的对流现象，加速钢液热量的传导，因此在结晶器内，钢液导热系数是静止的 4-7 倍；在固液混合相区内，枝晶的生长阻碍了钢液的流动性，降低了传热效率，两相区导热系数用式(3-24)计算。由于钢液在

结晶器内的流动性要比二冷区强，所以液相的导热系数应该要大。所以根据连铸坯经过不同的区域，设置相应的、接近实际情况的经验常数  $n$ ，结晶器内的  $n$  设定为 5，二冷区设定为 3。

对本模型来说采用等效导热系数，如下式：

$$\lambda^* = \begin{cases} \lambda = A + BT; & T \leq T_s \\ (\lambda + n\lambda) / 2; & T_s < T < T_l \\ n\lambda & T \geq T_l \end{cases} \quad (3-48)$$

式中  $\lambda^*$ ——为等效导热系数( $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}$ );

$\lambda$ ——为固相导热系数( $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}$ );

$n$ ——为经验常数。

### (5)液相线和固相线温度

钢的液、固相线温度的计算方法在元素前面设定的系数各不相同，但结果差异不大。

本文中的液相线温度选取下式来计算，结果为  $1466^\circ\text{C}$ 。

$$T_l = 1496 - 100[88w(\text{C}) + 8w(\text{Si}) + 5w(\text{Mn}) + 30w(\text{P}) + 25w(\text{S}) + 5w(\text{Cu}) + 4w(\text{Ni}) + 2w(\text{Mo}) + 2w(\text{V}) + 1.5(\text{Cr})] \quad (3-49)$$

固相线温度选取下式计算，结果为  $1363^\circ\text{C}$ 。

$$T_s = 1496 - 100[175w(\text{C}) + 20w(\text{Si}) + 30w(\text{Mn}) + 280w(\text{P}) + 575w(\text{S}) + 4.75w(\text{Ni}) + 6.5w(\text{Cr}) + 7.8w(\text{Cu}) + 7.5w(\text{Al}) + 4w(\text{V}) + 5w(\text{Mo}) + 2.5w(\text{W}) + 60w(\text{Nb}) + 160w(\text{O})] \quad (3-50)$$

### 3.3.3 形核参数

对于连续铸造来说，形核过程均为非均质形核，结晶器内壁相当于已存在的可性和界面，降低了形核能耗。钢液中的高熔点固体夹杂物也起到了同样的作用。形核参数同冷却条件不同而不同。结晶器和二冷区的冷却条件不同，因此连铸坯的凝固速率也不同，而其变化趋势是凝固速率越来越小。这也影响了平均形核过冷度的变化趋势，同样形核平均过冷度也是越来越小。目前关于连续铸造形核参数资料较少，本文参照了铸造工艺的 Fe-C 合金的形核参数<sup>[78,79]</sup>。

由于本文使用的是二维元胞自动机模型，需要对文献中的三维形核数据进行而



为转变，转变公式如下：

$$n_{\max,s} = \left( \frac{4}{\pi} n_{\max,s}^* \right)^{1/2} \quad (3-51)$$

$$n_{\max,v} = \left( \frac{6}{\pi} \right)^{1/3} \left( n_{\max,v}^* \right)^{2/3} \quad (3-52)$$

式中  $n_{\max,v}^*$  ——为三维内部最大形核密度( $\text{m}^{-3}$ );

$n_{\max,v}$  ——为三维的表面最大形核密度( $\text{m}^{-2}$ );

$n_{\max,s}$  ——为二维内部最大形核密度( $\text{m}^{-2}$ );

$n_{\max,s}^*$  ——为二维的表面最大形核密度( $\text{m}^{-1}$ )。

形核参数的设定好坏，决定着连铸坯微观组织形貌模拟的好坏，根据相关理论以及参考铸造工艺，限定了形核参数范围<sup>[79]</sup>。

表 3-3 形核参数

名称	参数
$n_{\max} / \text{m}^{-1}$	$(1.0 \sim 2.0) \times 10^7$
$\Delta T_{\max,s} / ^\circ\text{C}$	0.5
$\Delta T_{\sigma,s} / ^\circ\text{C}$	0.12
$n_{\max,v} / \text{m}^{-2}$	$(1.0 \sim 1.8) \times 10^5$
$\Delta T_{\max,v} / ^\circ\text{C}$	7-14
$\Delta T_{\sigma,v} / ^\circ\text{C}$	1.5

### 3.3.4 动力学参数

KGT 模型刚开始只适合二元合金，经过许多学者的努力，KGT 模型通过转变，已经适合了多元合金，经查阅《常用金属材料手册》以及翻阅相关文献，可以得到相应的动力学参数<sup>[80]</sup>。并运用式(2-28)、(3-29)和(3-30)分别计算相应的当量值，将计算值列于表 3-4 中。

$$c_0 = \sum c_i \quad (3-53)$$

$$m = \sum (m_i c_i) / c_0 \quad (3-54)$$

$$k = \sum (m_i c_i k_i) / m c_0 \quad (3-55)$$

式中  $c_i$  ——为元素  $i$  在合金中的质量分数( $\text{wt}\%$ );

$m_i$  ——为元素  $i$  的液相线斜率( $^\circ\text{C} \cdot \text{wt}\%^{-1}$ )。;

$k_i$ ——为元素*i*的溶质平衡分配系数。

表 3-4 动力学参数

元素	含量 $c_i / \text{wt}\%$	溶质分配系数 $k_i$	液相线斜率 $m_i / ^\circ\text{C} \cdot \text{wt}\%^{-1}$	扩散系数 $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	吉布斯系数 $\text{K} \cdot \text{m}$
C	0.2	0.25	-68	$3.0 \times 10^{-9}$	$1.9 \times 10^{-7}$
Si	0.14	0.60	-15	$3.0 \times 10^{-9}$	$1.9 \times 10^{-7}$
Mn	0.75	0.73	-6.5	$3.0 \times 10^{-9}$	$1.9 \times 10^{-7}$
P	0.016	0.16	-28	$3.0 \times 10^{-9}$	$1.9 \times 10^{-7}$
S	0.01	0.04	-100	$3.0 \times 10^{-9}$	$1.9 \times 10^{-7}$

### 3.4 本章小结

在温度场模型的建立阶段。首先，讨论了圆坯的温度场模型能够建立的假设条件，对比实际传热情况，进行了一些条件上的简化；其次，建立了数学模型，分析了初始条件和第二类边界条件的设置，对结晶器、二冷区各段、空冷区等不同冷却方式所选用的模型进行分析，并选取了较为合理的模型。建立微观模型时，着重分析在元胞自动机法下，晶粒形核与枝晶生长的规则，以及时间步长的选取。最后对模型中所需参数选取进行了分析，并确定了选取参数的方法，一部分参数需要查阅手册或文献获得，将查阅所得到的参数列于表中；另外一些参数需要计算，讨论了其所需要使用的公式，并选定了较为合理的计算公式。

## 第 4 章 程序的实现与可视化

### 4.1 程序的实现

本文所用的编程软件为 Matlab 软件，它是有美国 MathWorks 公司出品用于数学计算的软件。它具有编程语言简单易学，用户界面友好，并且有着图形处理的功能，这为本文在模拟凝固组织形貌实现可视化方面带来方便。

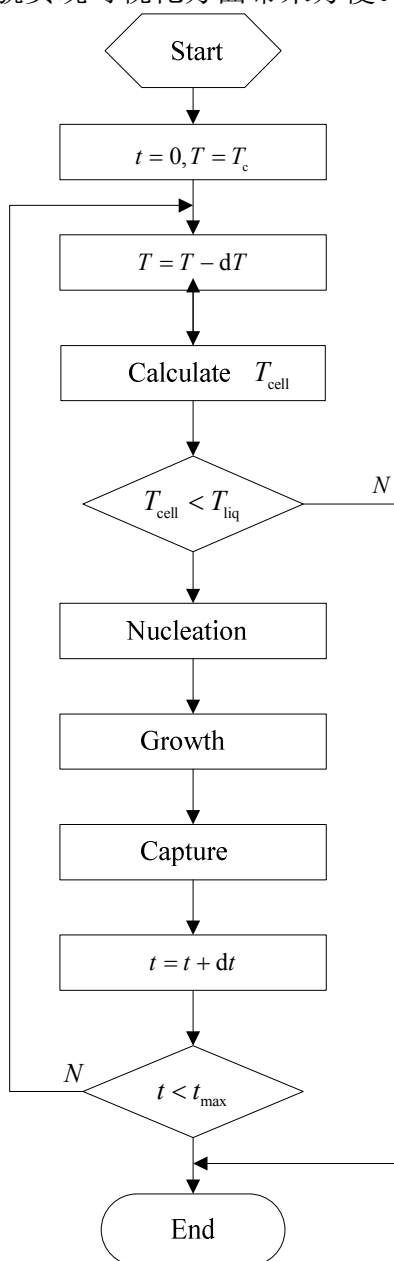


图 4-1 主流程图

整个主程序包括三个部分：(1)前处理部分，主要是对宏观计算需要使用的参数(如钢液密度、比热容、导热系数、冷却水温度、计算的时间步大小等)以及微观计算需要使用的参数(如平均形核过冷度、最大形核过冷度、最大形核密度等)进行设置；(2)数值模拟计算部分，采用 TDMA 法计算圆坯的温度分布，采用元胞自动机法模拟凝固过程；(3)后处理部分，对圆坯的温度分布进行处理，绘制凝固组织形貌图以及对模拟结果的简要分析。

在主程序(如图 4-1 所示)内先是计算宏观的温度分布，用一个时间步内的大网格单元的温度值，以此为基础，在计算小的元胞温度，具体的插值方法可查看 3.3.1 节。钢液在冷却液的作用下，温度不断下降，低于液相线后，对元胞 $(i, j)$ 按照图 4-2 所示的流程进行形核计算，得到形核概率 $Pn(i, j)$ ，由于元胞在处于液相时，都赋予了一个随机数 $Rn(i, j)$ ，此时用 $Pn(i, j)$ 与 $Rn(i, j)$ 相比较，如果 $Pn(i, j) < Rn(i, j)$ ，则不能形核；如果 $Pn(i, j) > Rn(i, j)$ ，那么元胞 $(i, j)$ 可以形核，同时它的状态属性就由液相 $<-1>$ 变为固液混合相 $<0>$ ，然后进行枝晶生长计算。

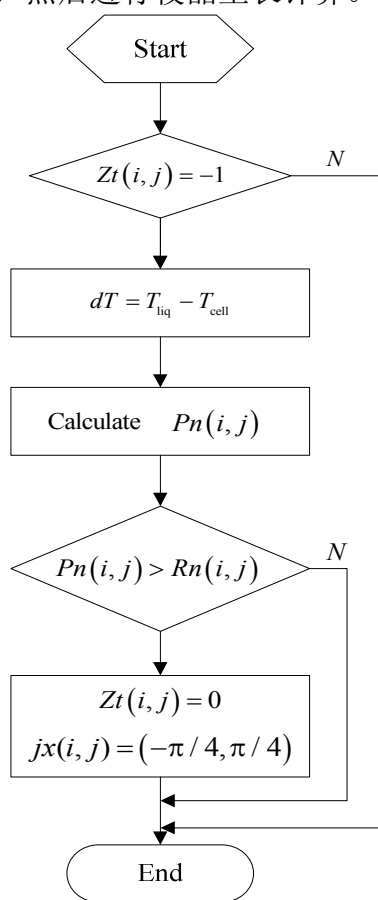


图 4-2 形核示意图

计算枝晶生长时(如图 4-3 所示),要判定元胞是否是固相,因为只有固相元胞才能进行捕获。在判定如果元胞 $(i, j)$ 是否是固相时,需要计算它的固相率,当其固相率变为 1 时,元胞 $(i, j)$ 就可以可按图 4-4 进行捕捉计算。捕获计算开始时,先对邻居进行扫描,本文采用的是 Moore 型元胞邻居,所以扫描周围正上、正下、正左、正右 4 个方向的邻居,对邻居的状态属性进行判断。假如某一个邻居是液相的,那么就捕获这个元胞,这个元胞将转变为固液两相状态的元胞,并将主元胞的取向数赋予这个被捕获的元胞;假如邻居元胞固相 $<1>$ 或是液固两相 $<0>$ ,那么不进行捕获计算。

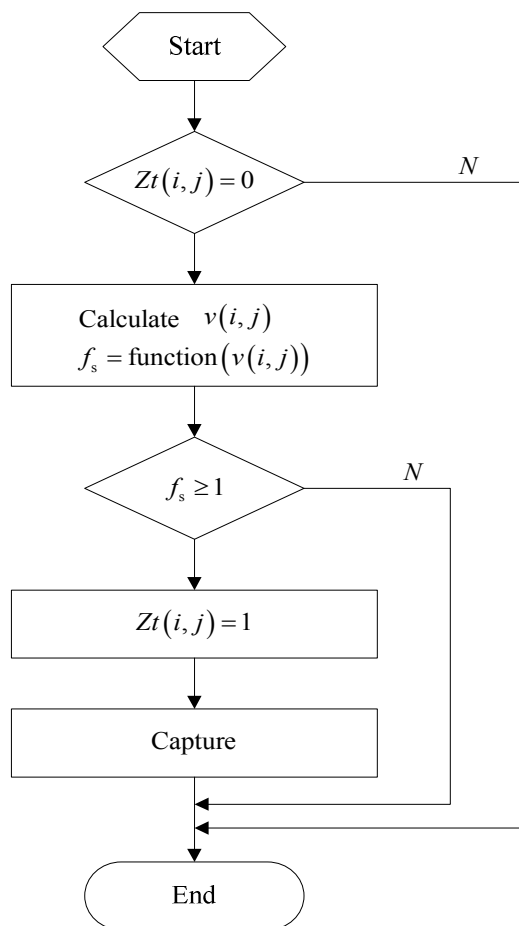


图 4-3 枝晶长大示意图

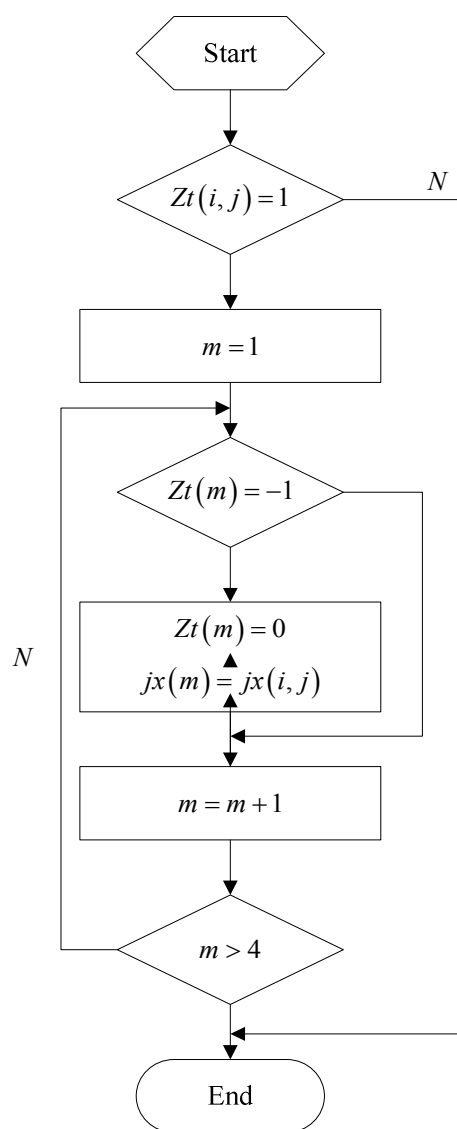


图 4-4 捕获模块示意图

## 4.2 计算结果的可视化

将偏微分方程进行离散后，使用 Matlab 软件编写差分方程的，期间使用的方法是 TDMA 法，也成追赶法，是专门用来计算三对角矩阵的数学计算方法。用 Matlab 语言计算后可以生成一系列数据文件，所有计算数据名称可在 Workspace 栏里查看，如图 4-5 所示。在 Workspace 中的计算数据可以在 Variable Editor 栏里查看计算结果，如图 4-6 所示。

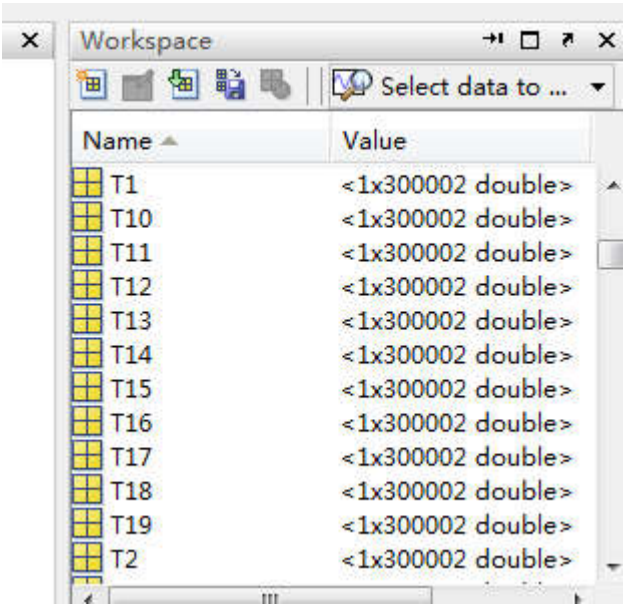


图 4-5 Workspace 栏

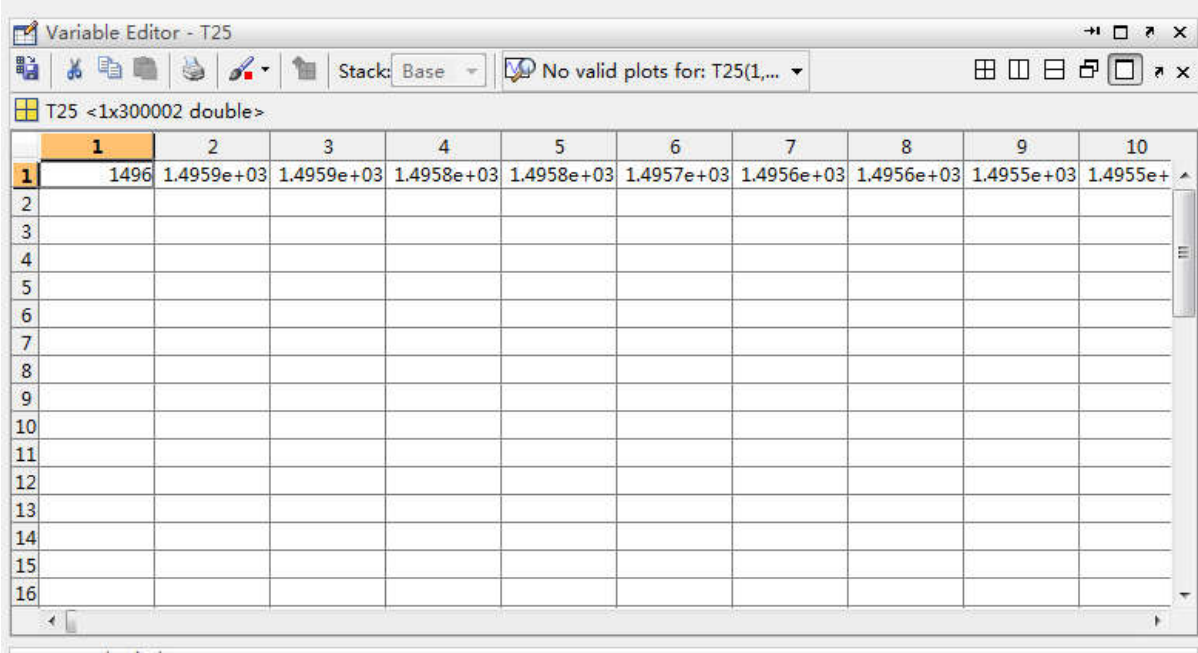


图 4-6 Variable Editor 栏

微观模拟部分的计算结果可由 Matlab 软件自身生产图片，无需借助其他软件，这也是使用 Matlab 软件的优点。对于晶粒大小的统计，可以在程序中设定每隔一段时间就进行一次统计，计算晶粒的平均直径尺寸，平均面积，同时使用 'xlswrite' 语句专门生成一个 Excel 表格对晶粒的统计数据进行了存储。

### 4.3 晶粒尺寸的计算

晶粒尺寸的计算有两种：一种是以长度计算；另外一种是以面积表示。

本文对晶粒的尺寸计算采用的是上述的第二种方法。在模拟的初始化阶段，给每一个元胞赋予一个唯一的随机数。当元胞被邻居捕获时，其晶粒的随机数被赋予与捕获它的邻居元胞的随机数。最终所得结果，每一个晶粒有唯一的随机数，以区别周围的晶粒。通过一次扫描，就可以将给定面积上的晶粒数计算出来。

对于晶粒尺寸的计算，文献<sup>[77]</sup>中提供一种方法，假设某一晶粒中所包含的元胞数量为  $N_i$ ，且定义初始元胞面积为  $S_0$ ，那么该晶粒的面积则为：

$$S_i = N_i \cdot S_0 \quad (4-1)$$

式中  $N_i$ ——为晶粒所包含的元胞数量；

$S_0$ ——为标定的初始元胞面积( $\text{m}^2$ )；

$S_i$ ——为当前晶粒的面积( $\text{m}^2$ )。

对于晶粒的直径的计算，可以近似按照圆的直径来计算，具体公式如下：

$$D_i = 2\sqrt{S_i / \pi} \quad (4-2)$$

对于本模型的晶粒尺寸的计算，由于模拟对象的面积一定，因此较为简单的方法是利用选取的面积同晶粒数的比值：

$$\bar{D} = 2\sqrt{S / (N \cdot \pi)} \quad (4-3)$$

式中  $\bar{D}$ ——为平均晶粒直径(m)；

$S$ ——为总面积(m)；

$N$ ——为晶粒总数。

### 4.4 本章小结

(1)介绍了模型的总体设计，利用 Matlab 软件平台，实现温度场离散方程的程序编制，利用元胞自动机法对晶粒形核、生长的这一过程进行计算以及对晶粒尺寸的计算。

(2)利用 Matlab 软件的自带绘图功能对模拟结果进行图形绘制。



## 第 5 章 模型验证与模拟结果分析

### 5.1 模型验证

#### 5.1.1 温度场的验证

本文取现场的实际生产工艺数据带入编写的程序中计算，使用 Matlab 自身的画图功能，画出连铸坯从结晶器开始一直到空冷结束时的表面节点以及中心节点的温度随着时间变化的曲线，如图 5-1 所示。用数值模拟所得的表面温度同实际生产现场的测量值进行对比，在空冷结束时模拟所得温度为 1086.9℃，实际现场测量值为 1095℃，模拟计算的温度值同实际测量值差距不大，具有一定的可信度。可以作为后续的凝固组织模拟的基础。

本文计算温度场采用的是第二类边界条件，因此只需要调节相应的系数，使得热流量  $q$  发生改变即可，本文的初始设计参数以及调整后的参数如表 5-1 所示。

表 5-1 温度场模型参数

项目	$A / W \cdot m^{-2}$	$B / W \cdot m^{-2} \cdot s^{-0.5}$	$\alpha_0$	$\alpha_1$	$\alpha_2$
初设值	268	27.6	4.0	4.0	4.0
调节后值	268	25	4.2	3.9	3.6

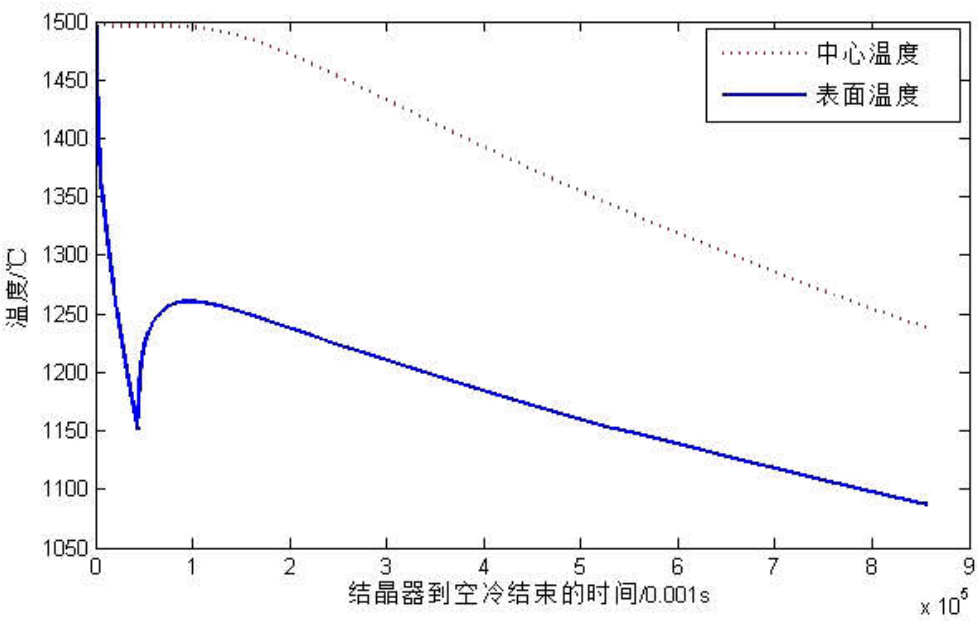


图 5-1 圆坯表面温度和中心温度

### 5.1.2 枝晶组织显示方法

枝晶检验是一种弱酸蚀检验，可用于研究连铸坯凝固过程枝晶的形成和形态。本文中金相实验用钢的型号是 Q345，由于实验对象是连铸坯，所以本文选用专利号为 CN1308226 的腐蚀剂作为实验腐蚀剂。

枝晶显示可以显示出连铸坯的中心偏析、中心裂纹、中间裂纹、枝晶间距的测定。但是该方法费时费工，费效比低；而且需要评价的图像经过了软件处理后，存在失真的风险。特别是中心偏析和中心疏松不易区分。本文采用枝晶显示方法主要是同模拟结果进行对比，验证模拟方法能否真实的反映枝晶的形态。

### 5.1.3 枝晶显示实验与验证

将试样连铸坯经过线切割后，在沿着半径方向上连续取 3 个直径为 10mm 的圆形小试样，由内到外一次变为试样 1，试样 2，试样 3，如图 5-2 所示；对铸坯试样进行研磨以及抛光，在达到精度要求之后，用腐蚀剂进行擦拭，腐蚀后用无水乙醇对试样表面进行洗涤，并用吹风机进行吹干；对每个试样用光学显微镜在放大 200 倍的情况下进行观察，得到铸坯试样不同位置凝固组织。

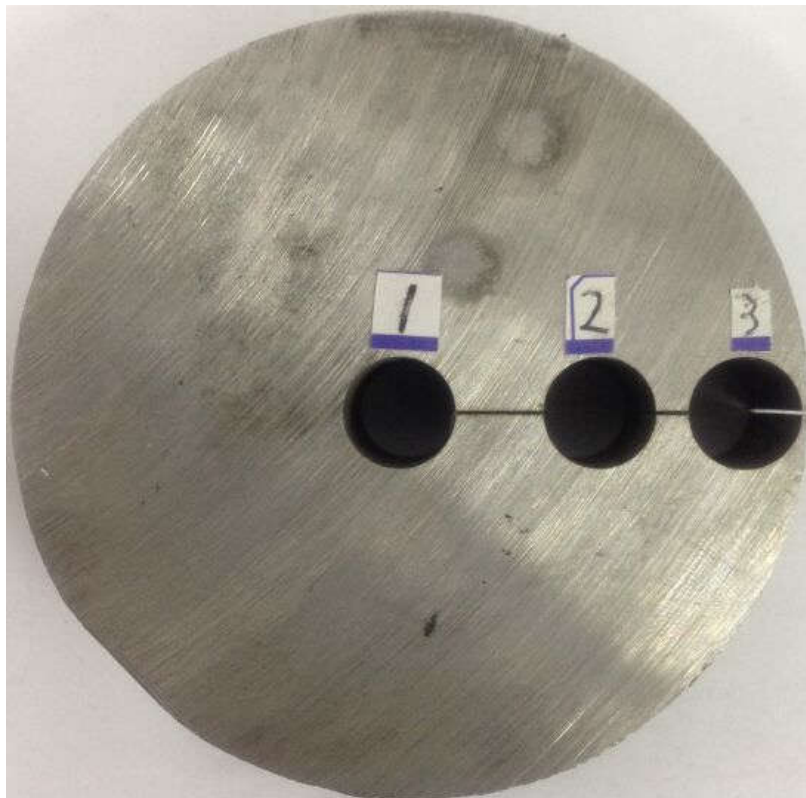


图 5-2 试样选取位置

在试样 1, 试样 2, 试样 3 相对应的位置取边长 5mm 的正方形区域, 以边长  $10\mu\text{m}$  为基准进行划分得到 250000 小的正方形。进行模拟得到相应的模拟结果。试验所得金相图与相应位置的模拟结果对比图如图 5-3, 图 5-4 以及 5-5 所示。

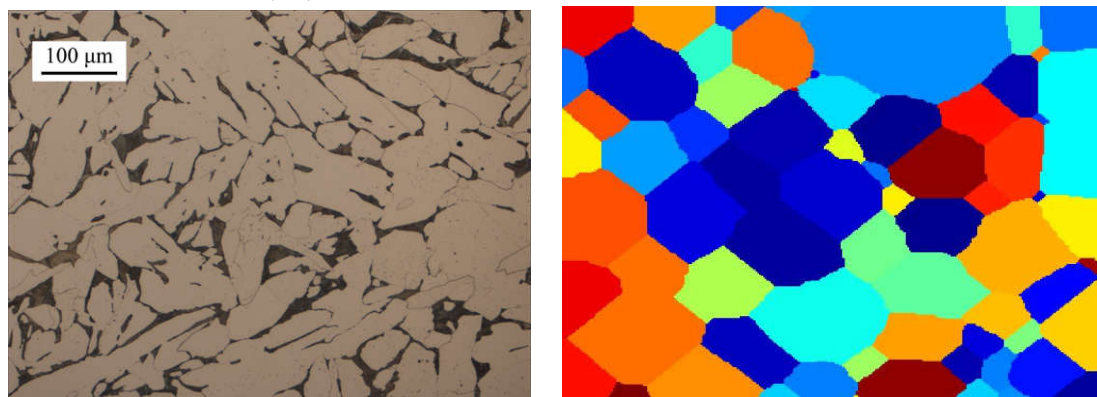


图 5-3 试样 1 显微结构与模拟结果对比

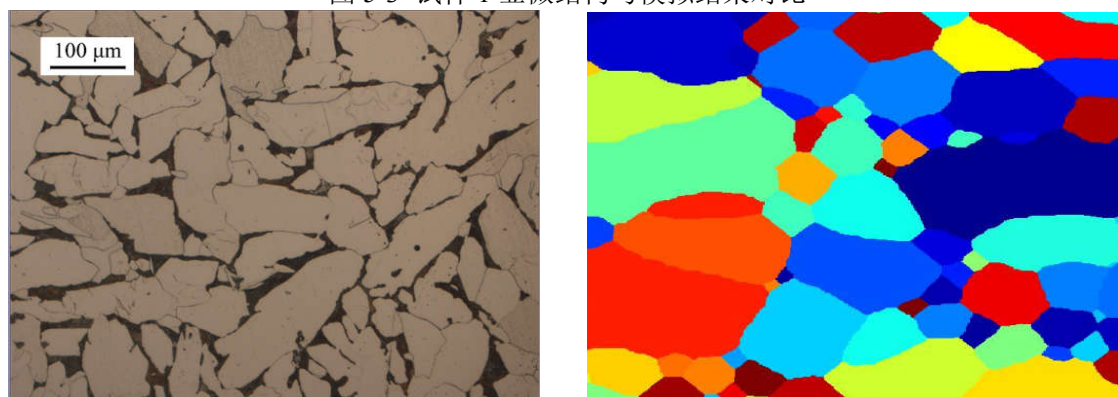


图 5-4 试样 2 显微结构与模拟结果对比

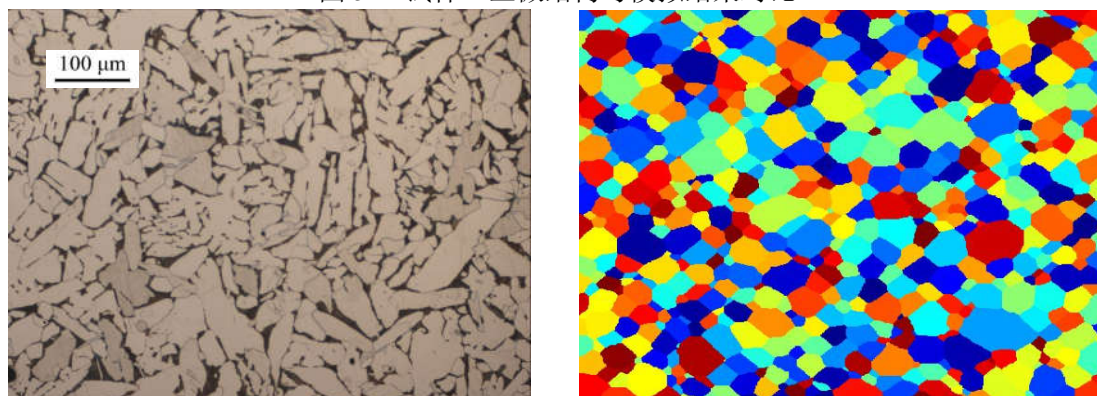


图 5-5 试样 3 显微结构与模拟结果对比

## 5.2 平均形核过冷度的作用

液态金属在过冷度的作用下, 出现一大批大于临界形核半径的晶核后, 结晶过

程就开始了。过冷度直接影响着金属凝固的整个过程，包括形核，枝晶生长，晶体学上的择优生长等。提高形核过冷度是可以通过熔体净化的方法(如熔体脱气和除渣精炼)来实现，如果想要降低形核过冷度，则可通过添加形核剂的方法。

表 5-2 四组不同的平均形核过冷度

组号	结晶器段 $\Delta T_{\max}/^{\circ}\text{C}$	二冷 0 段 $\Delta T_{\max}/^{\circ}\text{C}$	二冷 1 段 $\Delta T_{\max}/^{\circ}\text{C}$	二冷 2 段 $\Delta T_{\max}/^{\circ}\text{C}$	空冷段 $\Delta T_{\max}/^{\circ}\text{C}$
1	13.5	12	11	11.2	11
2	12.5	11.5	10.5	10.2	10
3	11.5	10	10	9.4	9.5
4	10.5	9.5	9	8.6	8.5

由图 5-6 可以看出等轴晶所占比例再增大。从图 5-7 中可以得出：当其它参数不变时，只改变平均形核过冷度，平均形核过冷度的变大，晶粒尺寸也在会变大。因此，想要提高等轴晶率可以通过降低平均形核过冷度来获得。

平均形核过冷度影响着钢液凝固的速度，平均形核过冷度下降，易于形核。因此，可以通过改变平均形核过冷度增加等轴晶率，从而缩小晶粒的平均尺寸。

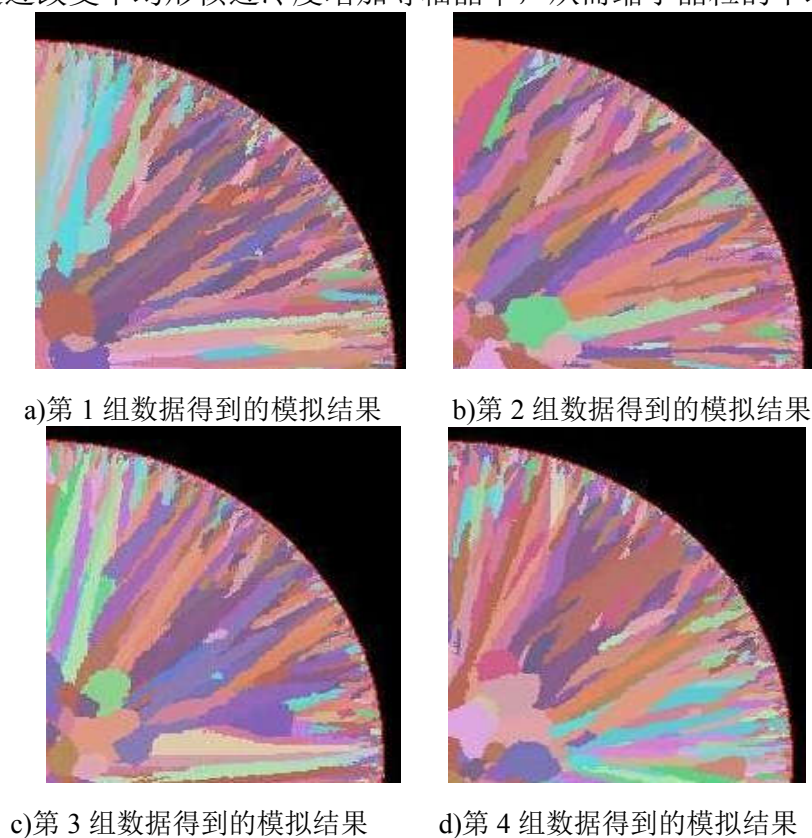


图 5-6 不同平均形核过冷度的凝固组织



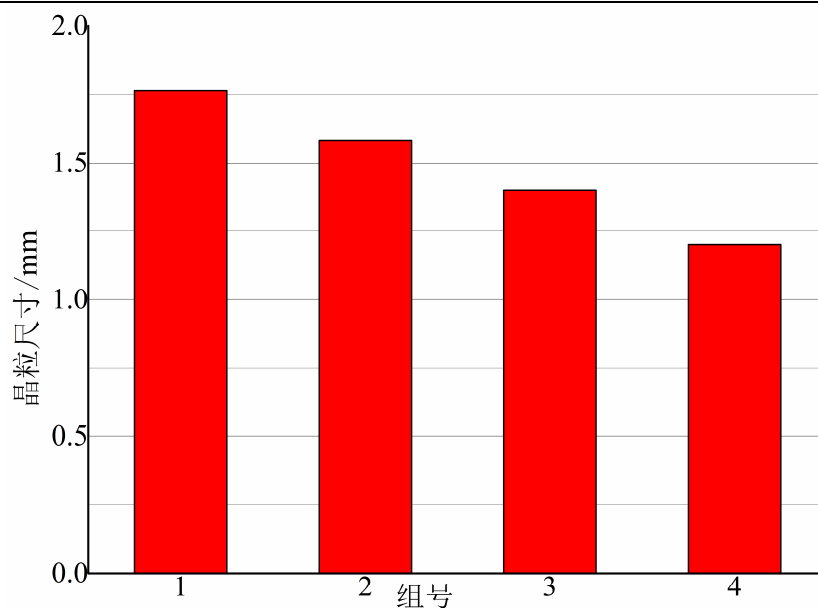


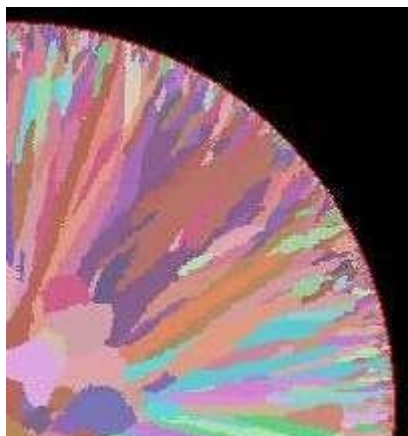
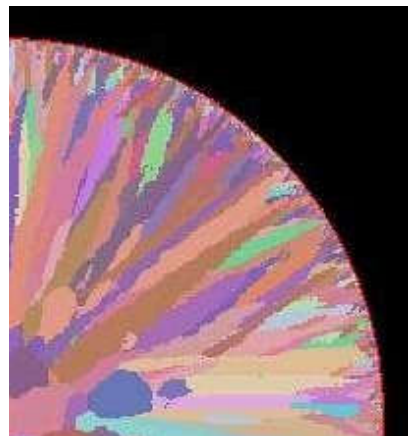
图 5-7 平均形核过冷度与晶粒尺寸的关系

### 5.3 连铸工艺参数影响

#### 5.3.1 浇注温度对凝固组织的影响

在铸坯拉速不变、冷却强度一定的情况下，只改变浇注温度。从图 5-8 中可以看出，等轴晶的分布逐步减少，而柱状晶的分布范围逐步加大。从图 5-9 中可以看出在较小的浇注温度下，晶粒尺寸比较小，说明等轴晶所占比例增加。

对钢液连铸，较高的浇注温度会使得过冷度变小，不利于形核，同时因为钢液的温度较高，使得已经形核的重新变回液相。浇注温度低，过冷度大，有利于形核，这些晶核长大后形成等轴晶。因此，在保证水口不被冻结的情况下，采用低温浇注有易于等轴晶生长。

a)  $T_c = 1496^\circ\text{C}$ b)  $T_c = 1506^\circ\text{C}$

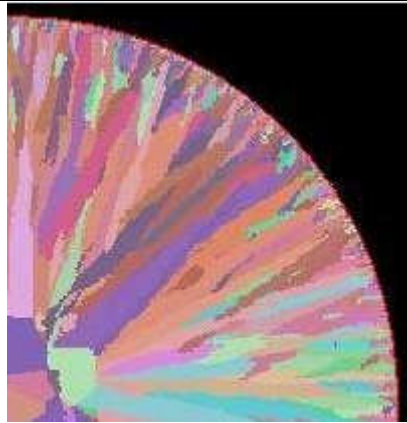
c)  $T_c = 1516^\circ\text{C}$ 

图 5-8 不同浇注温度下的凝固组织

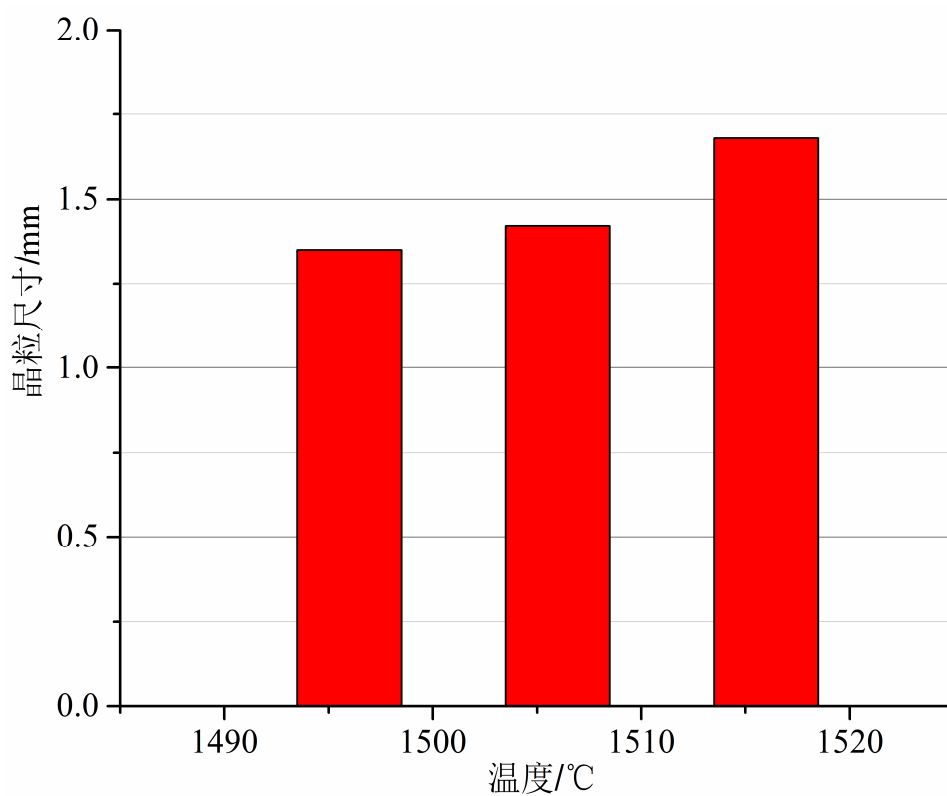


图 5-9 不同浇注温度下的晶粒尺寸

### 5.3.2 冷却强度对凝固组织的影响

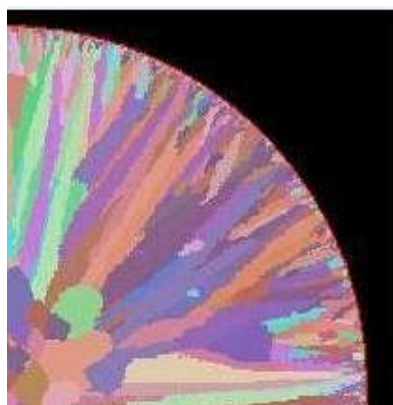
在连铸坯拉速和浇注温度不变的前提下，只改变冷却强度情况下，来模拟连铸坯凝固组织。三组不同的冷却强度如表 5-3 和 5-4 所示。由图 5-10 可见，等轴晶的分布范围在减小，柱状晶的分布范围在增大。由图 5-11 可见，较小的冷却强度下，晶粒尺寸比较小；较大的冷却强度下，晶粒比较大。

表 5-3 结晶器冷却参数

组号	$A/W / \text{m}^{-2}$	$B/W \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-0.5}$
1	268	27.6
2	268	25
3	268	22

表 5-4 二冷段各段的水流密度

组号	$w_0 / \text{L} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$	$w_1 / \text{L} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$	$w_2 / \text{L} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$
1	12	4	0.5
2	15.33	5.43	0.526
3	17.5	8.1	2.2



a)第1组数据得到的模拟结果



b)第2组数据得到的模拟结果



c)第3组数据得到的模拟结果

图 5-10 不同冷却强度下的凝固组织

从生长速率上考虑，冷却强度加大，沿半径方向的温度梯度加大，有利于柱状晶生长，柱状晶所占比例加大；而降低冷却强度，有利于抑制柱状晶生长。

从平均形核过冷度上考虑，随着冷却强度的加大，平均形核过冷度增大，这不

利于等轴晶的生长，因此，在一定的范围内降低冷却强度是有必要的。

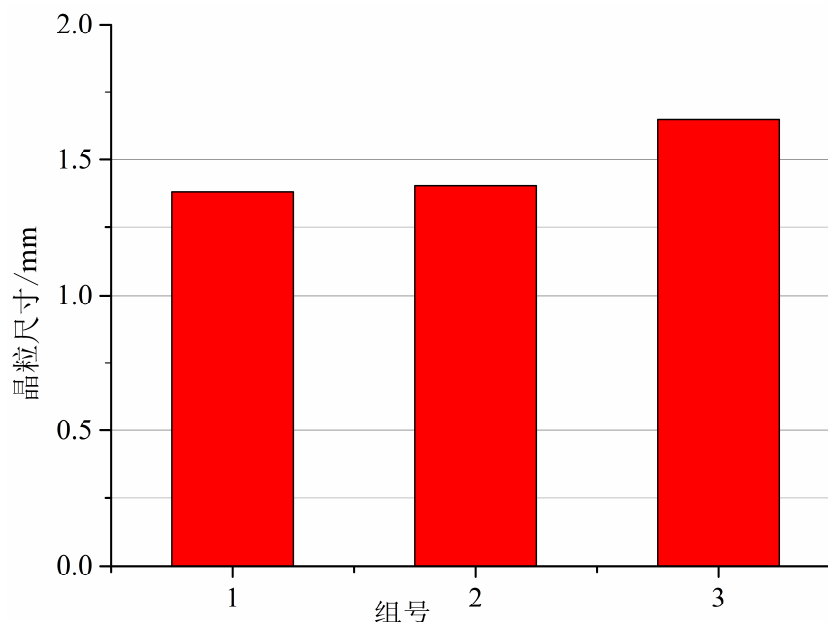


图 5-11 不同冷却条件的晶粒尺寸

### 5.3.3 拉速对凝固组织的影响

在实际生产过程中，拉速与冷却水的用量是有一定的配合关系的。通常较快的拉速配合以较多的冷却水用量，以保证冷却强度足够大；而较低的拉速，在保证足够的冷却强度的前提下，冷却水的用量则可适当的减少。从 5.3.2 节可知，加快铸坯拉速，冷却水用量加大，等轴晶率减小。减慢连铸坯的拉速，相应的冷却水用量减少，等轴晶率也随之增加。因此，配合以较少的冷却水用量下的较慢拉坯速度有利于等轴晶的形成。

## 5.4 本章小结

在本章中，首先对温度场模型进行了验证，表明温度场模型计算出的结果同生产现场差距不大，可作为下一步凝固组织计算的基础；取试样同模拟结果做对比，发现模拟的晶粒组织图形貌接近金相实验照片，可以认为本文所建立的模型能够较好的反映实际凝固情况。利用本模型对比在改变单一条件情况下，物性参数，和生产工艺对铸坯凝固组织的影响。结果表明：较小的平均形核过冷度有助于等轴晶的形成，有利于减小晶粒尺寸；低温浇注、较低的冷却强度和较慢的拉速有利于等轴晶的生成。



## 结 论

本文以连铸工艺为基础，以直径 250mm 的 Q345 钢为研究对象，依据金属凝固机理、形核模型和生长模型。先建立宏观温度场模型，再耦合微观组织形核、生长模型，采用宏观与微观相结合的方法，利用 Matlab 软件进行程序编写，对其凝固组织的形成进行了数值模拟，并对结果做出了分析，得出以下结论：

(1)通过所建立的模型能够得到典型的晶区分布，数值模拟结果与实验结果基本一致。对比试样金相实验，模拟结果在组织形态方面是相似的。所建立的模型的晶粒尺寸与实际的晶粒尺寸也基本相符。

(2)在其他参数不变时，改变平均形核过冷度，晶粒尺寸随着平均形核过冷度的减小而减小。

(3)在其他参数不变时，改变浇注温度和冷却强度，进行比较发现：较低的浇注温度，容易形成等轴晶，进而降低平均晶粒尺寸；较弱的冷却强度下更容易形成等轴晶，有利于抑制柱状晶生长，降低平均晶粒尺寸。随着拉速的减慢，相应的冷却水用量减少，冷却强度下降，晶粒尺寸减小。

(4)通过对连铸坯凝固组织的模拟可知，为了使凝固组织中等轴晶率加大，要适当的降低拉坯速度、降低浇注温度和降低冷却强度。

凝固组织质量的好坏决定着连铸坯的各项性能，新兴技术的应用使得，尤其是电磁搅拌技术的应用，对晶粒组织细化起到了重要作用。而本文只讨论了在改变温度场的某些参数情况下，热流密度改变对连铸坯的凝固组织所能产生的影响，并没有考虑到电磁搅拌作用。因此，可以对模型进一步完善模型，考虑加入电磁力的作用。

本文主要考虑的是晶粒尺寸大小，等轴晶率的问题，对连铸坯截面进行了模拟。为了计算方便，所选择的元胞尺度较大。连铸坯在结晶器内凝固过程的好坏，对接下来的整个过程都有着重要影响。因此，可以重点考虑结晶器内连铸坯的凝固组织形成规律。取连铸坯坯壳处的一些小部分进行研究，将网格进一步细化，采用元胞自动机法与蒙特卡罗法相结合的方式，对一次枝晶臂间距，二次枝晶臂间距，溶质偏析等问题进行模拟。

## 参考文献

- [1] 殷瑞钰. 中国连铸的快速发展[J]. 钢铁, 2004, 39(Z1): 1-7.
- [2] 干勇. 连续铸钢前沿技术的工程化[J]. 中国工程科学, 2002, 4(9): 12-18.
- [3] 郭戈, 乔俊飞. 连铸过程控制理论与技术[M]. 北京: 冶金工业出版社, 2003: 90-95.
- [4] 周金泉. 对加快发展我省电炉连铸的初步探讨[J]. 水钢科技, 1993(2): 14-21.
- [5] 蒲海清. 依靠科技进步促进结构调整[J]. 炼钢, 2000, 16(3): 1-4.
- [6] 单亦合. 以钢的质量成本为基础全面优化炼钢连铸生产结构提高经济效益[J]. 炼钢, 2000, 16(3): 5-10.
- [7] 殷瑞钰. 我国炼钢连铸技术发展和2010年展望[J]. 炼钢, 2008, 24(6): 1-12.
- [8] 张兴中, 倪满森. 连铸技术的发展状况和趋势[J]. 中国冶金, 2003(3): 17-20.
- [9] 张兴中. 我国连续铸钢技术的发展状况和趋势[J]. 钢铁研究学报, 2004, 16(6): 1-6.
- [10] Chalmers B. Principles of Solidification[M]. New York: Wiley, 1964: 344-352.
- [11] Flemings M C. Solidification Processing[M]. New York: McGraw-Hill, 1974: 165-174.
- [12] Kurz W, Fisher D J. Fundamentals of solidification. 4th edition[M]. Trans. Tech. Publ., Aedermansdorf, Switzerland, 1998: 77-80.
- [13] Oldfield W. A quantitative approach to casting solidification[J]. Freezing of cast Iron, ASM Transactions, 1966, 59(2): 945-960.
- [14] Hunt J D. Steady state columnar and equiaxed growth of dendrites and eutectic[J]. Material Science and Engineering, 1984, 65(1): 75-83.
- [15] Rappaz M. Gandin Ch A. Probabilistic Modeling of Microstructure Formation in Solidification Process[J]. Acta Metall, 1993, 41(2): 345-348.
- [16] Kuiying C, Zhuangqi H, Bingzhen J. Development on Numerical Simulation of Microstructure in Solidification[J]. Acta Metall, 1975(23): 229-235.
- [17] 郝志强. 镍基高温合金凝固过程组织模拟与仿真[D]. 北京: 北京交通大学学位论文, 2006: 55-56.
- [18] 荆涛. 凝固过程数值模拟[M]. 北京: 电子工业出版社, 2002: 104-115.
- [19] 王同敏. 金属凝固过程微观模拟研究[D]. 大连: 大连理工大学学位论文, 2000: 60-66.
- [20] Lipton J, Glicksman M E, Kurz W. Dendritic growth into undercooled alloy melts[J]. Material

- Science and Engineering, 1984, 65(1): 57-63.
- [21] Kurz W, Giovanola W, Trivedi R. Theory of microstructural development during rapid solidification[J]. Acta Metallurgica, 1986, 34(5): 823-830.
- [22] 陈光友. Al-Si合金凝固组织的数学模拟[D]. 武汉: 武汉科技大学学位论文, 2009: 67-70.
- [23] 刘东戎, 吴士平. 铝硅合金凝固组织的数值模拟[J]. 哈尔滨理工大学学报, 2002, 7(5): 97-99.
- [24] 陈晋. 基于元胞自动机方法的凝固过程微观组织数值模拟[D]. 南京: 东南大学学位论文, 2005: 60-63.
- [25] 李依依, 李殿中, 朱苗勇, 等. 金属材料制备的计算机模拟[M]. 北京: 科学出版社, 2006: 93-95.
- [26] Collins J B, Levin H. Diffuse interface model of diffusion-limited crystal growth[J]. Physical Review B, 1985, 31(9): 6119-6122.
- [27] Caginalp G, Fife P C. Dynamic of layered interfaces arising from phase boundaries[J]. SIAM Journal of Apply Mathematics, 1988, 48(3): 506-510.
- [28] Caginalp G, Fife P C. Phase field methods for interfacial boundaries[J]. Physical Review B, 1986, 33(11): 7792-7794.
- [29] Caginalp G, Fife P C. High-order phase field models and detailed anisotropy[J]. Physical Review B, 1986, 34(7): 4940-4943.
- [30] Fife P C, Gill G S. The phase-field description of mushy zones[J]. Physic D, 1989, 35(1): 267-275.
- [31] Fife P C, Gill G S. Phase-transition mechanisms for the phase-field model under internal heating[J]. Physical Review A, 1991, 43(2): 843-851.
- [32] Kobayashi R. Modeling and numerical simulation of dendritic crystal growth[J]. Physic D, 1993, 63(10): 410-423.
- [33] Ramirez J C, Beekermann C. Examination of binary alloy free dendritic growth theories with a phase-field model[J]. Acta Materialia, 2005, 53(6): 1721-1736.
- [34] Whwler A A, Boettinger W J, Mcfadden G B. Phasefield model for isothermal transition in binary alloys[J]. Physical Review E, 1992, 45(10): 7424-7439.
- [35] Warren J A, Boettinger W J. Prediction of dendritic growth and microsegregation patterns in a binary alloy using the phase-field method[J]. Acta. Metall. Mater., 1995, 43(2): 689-703.
- [36] Wheeler A A, Boettinger W J, Mcfadden G B. Phase-field model of solute trapping during

- solidification[J]. Physical Review E, 1993, 47(3): 1895-1909.
- [37] Kim S G, Kim W T, Suzuki T. Phase-field model for binary alloy[J]. Physical Review E, 1999, 60(6): 7186-7197.
- [38] Suzuki T, Ode M, Kim S G, et al. Phase-field model of dendritic growth[J]. Crystal Growth, 2002, 237: 125-131.
- [39] Ode M, Kim S G, Kim W T et al. Phase-field simulation of microstructure evolution during the initial stage of rapid solidification of alloys[J]. Int. J. Cast Metals Res., 2001, 15: 247-250.
- [40] 韩国民, 韩志强, 等. Mg-Al 合金  $Mg_{17}Al_{12}$  连续析出相形貌的相场模拟[J]. 金属学报, 2013, 49(3): 277.
- [41] Spittle J A, Brown S G R. Computer simulation of the effects of alloy variables on the grain structures of castings[J]. Acta Metallurgica, 1989, 37(7): 1803-1810.
- [42] Zhu P P, Smith R W. Dynamic simulation of crystal growth by monte carlo method-I. model description and kinetics[J]. Acta Metallurgica, 1992, 40(4): 683-692.
- [43] Zhu P P, Smith R W. Dynamic simulation of crystal growth by monte carlo method-II. ingot microstructures[J]. Acta Metallurgica, 1992, 40(12): 3369-3379.
- [44] 胡坤太, 仇圣桃, 张惠, 等. 用蒙特卡罗法模拟连铸坯凝固组织[J]. 钢铁研究学报, 2004, 16(2): 27-32.
- [45] Mark Andrew Smith. Cellular Automata Methods in Mathematical Physics[D]. Cambridge: MASSACHUSETTS INSTITUTE OF TECHNOLOGY, 1994: 56-66.
- [46] M. Gardner. MATHEMATICAL GAMES The fantastics combination of John Conway's new solitaire game "life"[J]. Scientific American, 1970, 233: 120-123.
- [47] Rappaz M, Gandin C A. Probabilistic modeling of microstructure formation in solidification processes[J]. Acta Metallurgica et Materialia, 1993, 41(2): 345-360.
- [48] Gandin C A, Rappaz M. A coupled finite element-cellular automaton model for the prediction of dendritic grain structures in solidification[J]. Acta Metallurgica, 1994, 42(7): 2233-2246.
- [49] Rappaz M, Charbon C, Sasikumar R. About the shape of eutectic grains solidifying in a thermal gradient[J]. Acta Metallurgica, 1994, 42(7): 2365-2374.
- [50] Gandin C A, Rappaz M, Tintillier R. Three-dimensional probabilistic simulation of solidification grain structures: Application to superalloy precision casting[J]. Metallurgical and Materials

- Transaction A, 1993, 24A(2): 467-479.
- [51] Gandin C A, Rappaz M, Tintillier R. 3-dimensional simulation of the grain formation in investment castings[J]. Metallurgical and Materials Transaction A, 1994, 25A(3): 629-635.
- [52] Beekermann C. Modeling segregation and grain structure development in equiaxed solidification[J]. Jom the Journal of the Minerals Metals & Materials Society, 1997, 49(3): 13-17.
- [53] Lazaro B S, Stefanescu D M. Growth of solutal dendrites: A cellular automaton model and its quantitative capabilities[J]. Metallurgical and Materials Transaction A, 2003, 34(2): 367-382.
- [54] Zhu M F, Hong C P. A modified cellular automaton model for the simulation of dendritic growth in solidification of alloy[J]. ISIJ international, 2001, 41(5): 436-445.
- [55] Zhu M F, Kim J M, Hong C P. Modeling of globular and dendritic structure evolution in solidification of an Al-7mass%Si alloy[J]. ISIJ international, 2001, 41(9): 992-998.
- [56] Chen S, Chen J, Yu J, et al. Simulation of microstructures in solidification of aluminum twin-roll continuous casting[J]. Procedia Eng, 2012, 31: 509.
- [57] 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.
- [58] Li Q, Li D Z, Qian B N. Modeling the dendritic evolution and micro-segregation of cast alloy with cellular automaton[J]. Journal of University of Science and Technology Beijing, 2004, 11(6): 511-516.
- [59] Zaeem M A, Yin H, Felincelli S D. Comparison of cellular automaton and phase field models to simulate dendrite growth in hexagonals[J]. J Mater Sci Technol, 2012, 28(2): 137-146.
- [60] Zaeem M A, Yin H, Felicelli S D. Modeling dendritic Solidification of Al-3%Cu using cellular automaton and phasefield methods[J]. Appl Mathemat Modelling, 2013, 37(5): 3495-3503.
- [61] 付振南, 许庆彦, 熊守美. 基于概率捕获模型的元胞自动机方法模拟镁合金枝晶生长过程[J]. 中国有色金属学报, 2007, 17(10): 1567-1573.
- [62] 蔡开科. 连续铸钢原理与工艺[M]. 北京: 冶金工业出版社, 1994: 145-147.
- [63] 盛义平, 孔祥东, 杨永利. 连铸结晶器传热便捷条件研究[J]. 中国机械工程, 2007, 18(13): 1615-1618.
- [64] Yao Man, Yin Hebi, Fang Dacheng. Real-time Analysis on Non-uniform Heat Transfer and Solidification in Mould of Continuous Casting Round Billets[J]. ISIJ International, 2004, 44(10): 1696-1704.

- [65] 刘明延, 李平, 栾兴家, 等. 板坯连铸机设计与计算(上册)[M]. 北京: 机械工业出版社, 1990: 88-96.
- [66] Nozaki T, Matsuno J, Murata K, Ooi H, et al. Secondary cooling pattern for preventing surface cracks of continuous casting slab[J]. Transaction ISIJ, 1978, 18(6): 330-338.
- [67] 丁丽媛, 程杞元. 数值计算方法[M]. 北京: 北京理工大学出版社, 2005: 50-60.
- [68] 胡汉起. 金属凝固原理[M]. 北京: 机械工业出版社, 1999: 134-138.
- [69] Krane M J M, Johnson D R., Raghavan S. The development of a cellular automaton-finite volume model for dendritic growth[J]. Applied Mathematical Modelling, 2009, 33(5): 2234-2247.
- [70] Wang W, Lee P D, Mclean M. A model of solidification microstructures in nickel-base superalloys: primary dendrite spacing selection[J]. Acta Materialia, 2003, 51(10): 2971-2987.
- [71] 郭勇冠, 李双明, 刘林, 等. DZ125高温合金定向凝固微观组织CA法模拟[J]. 金属学报, 2008, 44(3): 365-370.
- [72] Sasikumar R, Jacob E, George B. Simulation of dendrite growth in binary alloys[J]. Scripta Materialia, 1998, 38(4): 693-701.
- [73] Ferguson D, Chen W, Bonsteel T. A look at physical simulation of metallurgical process, past, present and future[J]. Materials Science and Engineering A, 2008, 208(4): 1-4.
- [74] 朱苗勇. 现代冶金学[M]. 北京: 冶金工业出版社, 2005: 159-160.
- [75] 陈雷. 连续铸钢[M]. 北京: 冶金工业出版社, 1994: 74-75.
- [76] 坚增运, 常芳娥, 马卫红, 等. 金属熔体的形核和过冷度[J]. 中国科学, 2000, 30(1): 9-14.
- [77] 康秀红, 杜强, 李殿中, 等. 用元胞自动机与宏观传输模型耦合方法模拟凝固组织[J]. 金属学报, 2004, 40(5): 452-456.
- [78] 齐伟华, 张捷宇, 王波, 等. Fe-C合金凝固组织元胞自动机—有限单元三维模型[J]. 过程工程学报, 2008, 8(1): 64-67.
- [79] 崔忠圻. 金属学与热处理[M]. 北京: 机械工业出版社, 2000: 42-46.
- [80] 何东. 晶粒组织演化的元胞自动机模拟[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学学位论文, 2007: 77-78.

## 攻读硕士学位期间承担的科研任务与主要成果

### (一)参与的科研项目

- [1] 张静. 基于微观模拟的电磁搅拌作用下高碳钢连铸坯质量预测理论与方法, 国家自然科学基金项目. 课题编号: 51304173.
- [2] 张静. 连铸电磁搅拌作用下高碳钢凝固组织演变机理研究, 河北省高层次人才资助项目. 课题编号: B2013003009.

### (二)发表的学术论文

- [1] 张静, 杨龙, 韩泽峰, 吴会平. 电磁搅拌作用下连铸结晶器内界面波动行为研究. 钢铁研究学报[J]. 已录用, 待发表.

## 致 谢

随着论文的完成，我的硕士生生涯也即将画上句号，回想这三年，自己收获了很多。

衷心感谢我的研究生导师张静副教授，本课题研究的内容是在张老师的悉心指导下完成的。张老师严谨的治学态度、渊博的学识以及诲人不倦的精神使我受益终生。此外，张老师更在做人做事等方面深深地影响了我，教会我很多课本上学不到的人生道理，在此谨向恩师致以我最衷心的感谢。

感谢吴亮亮同学在实验上的大力支持和帮助，谢谢同课题组的吴会平师妹的帮助，在此向你们表示衷心的感谢。谢谢在研究生期间帮助过我的各位老师和研究生班级的同学。