

# 金属成形过程组织演变的 Cellular Automaton 模拟技术\*

李殿中 杜强 胡志勇 李依依

(中国科学院金属研究所, 沈阳 110015)

**摘要** 结合金属凝固过程和热成形过程的温度场、浓度场、应力应变场等的数值模拟和金属结晶、再结晶过程中的热力学、动力学条件, 建立了金属成形过程组织演变的宏-微观耦合模型. 利用 Cellular Automaton 方法, 依据建立的模型对 K417 Ni 基合金叶片的凝固组织形成过程和热加工过程的再结晶组织进行了模拟.

**关键词** Cellular Automaton 法, 宏-微观耦合模型, 组织模拟

**中图分类号** TB115

**文献标识码** A

**文章编号** 0412-1961(1999)11-1201-05

## SIMULATION OF THE MICROSTRUCTURE EVOLUTION IN METAL FORMING BY USING CELLULAR AUTOMATON METHOD

LI Dianzhong, DU Qiang, HU Zhiyong, LI Yiyi

Institute of Metal Research, The Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110015

Correspondent: LI Dianzhong, Tel: (024)23843531-55472, E-mail: dzli@imr.ac.cn

Manuscript received 1999-06-24, in revised form 1999-08-06

**ABSTRACT** A model coupling macro-thermosolutal transfer, strain/stress and micro-kinetics is established to simulate structure formation of solidification and deformation process. Based on the model, the Cellular Automaton method is adopted to describe dynamically the microstructure evolution. The results are applied in predicting the microstructure evolution of K417 superalloy investment turbine blade, and the recrystallization process of the hot plate rolling.

**KEY WORDS** Cellular Automaton method, coupling of macro/micro-modeling, simulation of microstructure evolution

金属成形过程组织的控制, 是人们长期致力研究的课题. 以往的研究主要是采用实验的方法, 自 80 年代末人们探索采用计算机仿真方法研究凝固组织和变形态组织的形成过程. 在凝固领域, Zhu 和 Smith, Brown 和 Spittle 等人首先提出 Monte Carlo 随机统计方法, 以自由能最小原理为基础模拟晶粒形核生长过程, 定量地考察了界面能和体积自由能的影响, 模拟结果虽然在晶粒的形貌和尺寸上与金相结果相近. 但该方法未充分考虑非均质形核和生长过程的物理机制, 也不能解决晶体生长过程中的择优取向问题, 模拟结果与实际情况差距很大<sup>[1-3]</sup>.

50 年代初, 计算机创始人、著名数学家 Neumann<sup>[8]</sup> 希望通过特定的程序在计算机上实现类似于生物体发育中细胞

的自我复制, 为了避免当时电子管计算机的限制, 他提出了一个简单的模式, 把一个长方形平面划分成若干个网格, 每一个格点表示一个细胞或系统的基元, 它们的状态赋值为 0 或 1, 在网格中用空格或实格来表示. 在事先设定的规则下, 细胞或基元的演化就用网格中的空格或实格的变动描述. 该方法称为元胞自动机 (Cellular Automaton) 法. 90 年代 Rappaz 等人采用 Cellular Automaton 方法模拟了凝固组织<sup>[4,5]</sup>, Marx 等人采用该方法模拟了再结晶过程的组织演变<sup>[6,7]</sup>.

Cellular Automaton 法具有 5 个特征: (1) 网格和基元均匀排列, 并且处于离散的格点上; (2) 网格和基元的状态随时间演变; (3) 网格和基元的状态和数值是有限的; (4) 网格和基元的演变规则是确定的或随机的; (5) 相互作用的局部性, 即每个基元的演化规则是局部的, 仅同周围的元胞有关系. 该方法抓住了简单性与复杂性这一对主要矛盾, 从而触及并体现了其它有关矛盾, 如局部与整体、宏观与微观、线性与非线性、决定性与随机性、数学模型与物

\* 国家 973 计划重大基础研究项目 G1998061512 及中国科学院“百人计划”特别资助项目

收到初稿日期: 1999-06-24, 收到修改稿日期: 1999-08-06

作者简介: 李殿中, 男, 1966 年生, 满族, 高级工程师, 博士

理本质之间的矛盾。因此它具有利用简单的、局部规则的和离散的方法描述复杂的、全局的、连续系统的能力。

该方法用于凝固模拟时,以凝固热力学和形核生长动力学为依据,考虑了形核位置与取向的随机性。Rappaz 等人针对 Al-7Si(质量分数,%,下同)合金和高温合金叶片,把孕育参数、冷却速率、合金浓度对 CET 的影响包括在内,半定量地模拟高温试样的形核、枝晶生长过程。

Marx 等人采用该方法用于再结晶模拟时,以变形时位错密度增加引起体积自由能改变,从而导致再结晶核心的形核和生长为基础,模拟了再结晶分数、尺寸和织构的演变过程<sup>[6]</sup>。

上述方法都是针对凝固过程和加工过程分别进行模拟,还没有将两者结合起来。本文以枝晶形核生长动力学为基础,综合考虑凝固过程和变形过程中诸如温度场的分布、凝固前沿溶质再分配、应力应变场及非均质形核等因素,采用同一种 Cellular Automaton 方法实现了对凝固组织形成过程和再结晶过程的计算机仿真。

## 1 数学模型的建立

本文把金属凝固和加工过程的宏观有限元、有限差分 and 微观形核生长模型相结合,在宏观范围内,计算了凝固过程中的温度场、浓度场的变化和变形过程中的应力应变场的变化;在微观范围内,计算了微观组织的形核和生长过程。

### 1.1 宏观模型

在凝固过程中,采用传热方程计算各个单元不同时刻的温度场变化、固相份数的变化,通过固相份数( $F_s$ )这一媒介,将宏观与微观形核数量  $n$  和晶粒尺寸  $R$  结合起来,即  $F_s = f(n, R)$ 。

在热加工过程中,通过有限元模拟计算各个单元的温度、应力应变、应变率的变化,然后与微观再结晶过程结合起来。

### 1.2 微观动力学模型

1.2.1 形核模型 根据 Rappaz 提出的连续形核模型<sup>[4]</sup>,凝固过程中晶核数量随过冷度的增大而增多,晶核密度与过冷度的关系符合 Gauss 正态分布规律

$$n(\Delta T) = \int_0^{\Delta T} \frac{dn}{d(\Delta T')} \cdot d(\Delta T') \quad (1)$$

其中

$$\frac{dn}{d(\Delta T')} = \frac{N_s}{\sqrt{2\pi} \cdot \Delta T_\sigma} \cdot \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\Delta T' - \Delta T_N}{\Delta T_\sigma}\right)^2\right] \quad (2)$$

式中,  $\Delta T = T_L - T$ ,  $T_L$  为合金液相线温度,  $n(\Delta T)$  为形核数,  $\Delta T_\sigma$  为过冷度方差值,  $\Delta T_N$  为正态分布曲线中心的过冷度,  $N_s$  为有效形核基底数,  $\Delta T'$  为过冷度。

处理再结晶过程时,采用位置过饱和和形核模型,形核数量根据实验结果确定。

1.2.2 枝晶尖端生长动力学模型 在枝晶生长过程

中,由于枝晶尖端液相溶质的富集,使成分过冷度发生变化,导致枝晶尖端生长速度也随之改变。过冷度主要取决于枝晶尖端的溶质过冷程度,在形核和生长初期还受曲率过冷度的影响。枝晶尖端过冷度与尖端生长速度的关系可采用 KGT 模型计算<sup>[9]</sup>

$$\Delta T = \Delta T_T + \Delta T_C + \Delta T_R \quad (3)$$

$$\Omega = Iv(P_c) \quad (4)$$

$$\Delta T_C = m \cdot C_0 \left[1 - \frac{1}{1 - \Omega(1 - K_0)}\right] \quad (5)$$

$$R = 2\pi \sqrt{\frac{\Gamma}{mG_c \xi_c - G}} \quad (6)$$

$$v = 2DP_c/R \quad (7)$$

式中,  $\Delta T$  为枝晶尖端过冷度,  $\Delta T_T$  为热过冷度,一般地,  $\Delta T_T=0$ ,  $\Delta T_C$  为成分过冷度,  $\Delta T_R$  为曲率过冷度,  $\Delta T_R = 2\Gamma/R$ ,  $R$  为枝晶尖端半径,  $\Gamma$  为 Gibbs-Thompson 系数,  $\Omega$  为枝晶尖端溶质过饱和度,  $\Omega = (C^* - C_0)/[(C^*(1 - K_0)]$ , 其中  $C^*$  为枝晶尖端液相溶质浓度,其值与单元内液相平均溶质浓度  $C_L$  有关,  $G_c$  为浓度梯度,  $G$  为温度梯度,  $v$  为枝晶尖端生长速度,  $P_c$  为溶质的 Peclet 数,  $\xi_c$  与  $P_c$  相关,在缓慢生长条件下,  $\xi_c \approx 1$ ,  $Iv$  为 Ivantsov 函数。

本文以 Hunt 的 CET 模型为主处理微观组织形态转变过程<sup>[10]</sup>,即当柱状晶前沿等轴晶体积分数达到 49% 时,柱状晶的生长将被阻碍,等轴晶生长为主。

1.2.3 再结晶核心生长速度模型 再结晶生长速度  $v$  理论模型基于文献 [7]

$$v = \frac{b^2}{kT} D_0 \exp\left(\frac{-Q}{R_1 T}\right) \cdot p \quad (8)$$

其中,  $b$  是 Burgers 矢量模,  $k$  是 Boltzmann 常数,  $D_0$  是扩散系数,  $Q$  是晶粒边界移动激活能,  $R_1$  是气体常数,  $p$  是再结晶驱动力,可以表示为

$$p = 0.5\rho\mu b^2$$

式中,  $\mu$  是剪切模量,  $\rho$  是位错密度。

### 1.3 Cellular Automaton 算法

为了清晰地描述形核和生长过程,该模型采用 Cellular Automaton 法将铸件和热铸件剖分为许多宏观正六面体单元,每个正六面体单元又分成等距离的基元,宏观凝固单元用于求出每个时间步长内单元溶质和温度变化,宏观变形单元用于求温度、应力应变、应变率的变化。基元用于描述单

元内微观组织的形成过程,铸件表面层单元用于描述柱状晶的形核生长过程。

在凝固开始时,如单元温度高于液相线,形核概率为 0,即  $P_i=0$ 。一旦单元温度低于液相线温度,在一定过冷条件下,单元内将产生  $n$  个晶核,一个基元形核与否主要取决于概率  $P_i = n \cdot V_{CA}$ ,式中  $V_{CA}$  代表每个基元的体积。按计算要求产生随机数  $r(0 < r < 1)$ ,只有形核概率  $P_i \geq r$  的基元才能形核,基元的状态由液态转变为固态,并以不同的正整数标记,该正整数代表核心的随机取向。

在枝晶生长过程中母基元(初始形核基元)不断吞并相邻基元,但生长方向不变。首先为晶核定位,由于形核有先有后,所以当为一个晶粒选定了定位点后,可能该定位点已被其它晶粒所占据,这时重新为该晶粒定位。每当为一个晶粒定位后,都要为这个晶粒在模拟其生长过程中确定一个显示颜色值,同时为其选定生长方向。

在处理晶体的生长过程时,将晶粒的生长区域映射到屏幕上,形成生长区域的屏幕坐标,对这一区域的每一个像素点进行判别,若像素点的颜色值为屏幕底色,则说明这一点是空白点,当前晶粒将占领这一点,将这一像素点用当前晶粒的颜色值着色,生长方向与当前晶粒保持一致。若像素点的颜色值不为屏幕底色,说明当前像素点已被占领,发生了晶粒间的接触现象。检查占领者的显示颜色,若占领者晶粒显示颜色与当前晶粒的显示颜色相同,则要为当前处理的晶粒进行改变显示颜色的处理。

同样,在处理再结晶过程时,假设达到临界温度和临界应变变量时,再结晶核心首先在晶界、边和角处形成,选择的单元区域为全部等轴晶区,利用建立的形核长大模型,则可以采用三维 Cellular Automaton 方法描述再结晶过程。

## 2 应用实例

### 2.1 高温合金精铸叶片的模拟结果

对 K417 Ni 基高温合金涡轮叶片进行了凝固组织形成过程的仿真和实验,并选择典型断面进行比较。首先计算宏观温度场和溶质浓度场,根据宏观信息,计算微观形核生长和组织演变过程。

图 1 模拟了凝固组织初始阶段的形核生长过程。当金属液浇入铸型后,表面温度降低很快,一层细密的等轴晶迅速形成,在叶片表层,尤其是壁厚较薄的进、排气边处,散热较快而首先形核和生长,这些半球状核心粘附在壳型内表面,并具有不同的取向。而中心厚大部位的金属液温度仍然很高,尚未达到形核所需的过冷度,未能形核。取向垂直于表面的那些晶粒,其生长方向  $\langle 100 \rangle$  平行于热流方向,是最佳取向。这些晶粒将很快在“杂乱无章”的晶粒中脱颖而出,逐渐长大,同时阻挡住那些不利取向的晶粒。沿非择优晶向生长或生长方向不平行于热流的晶粒,由于相互搭桥或被有限生长的柱状晶臂阻挡,很快停止生长。取向逐渐集中到与表面形成  $90^\circ$  左右的方向,图 1 中叶片择优取向是很明显

的。由于叶片横断面的温度不均匀,因而各部位过冷程度不一致,导致枝晶的生长速度与尖端半径均不同。

随着凝固的继续,液态金属的温度不断下降,柱状前沿溶质富集量大,过冷度逐渐加大,温度梯度不断减小,前沿液体中由于存在迁移和熔断来的核心,造成等轴晶形核条件,因此大量等轴晶几乎在瞬间便开始形核、生长,并不断阻挡柱状晶生长,形成了柱状晶向等轴晶转变区域,见图 2 的叶片中部。

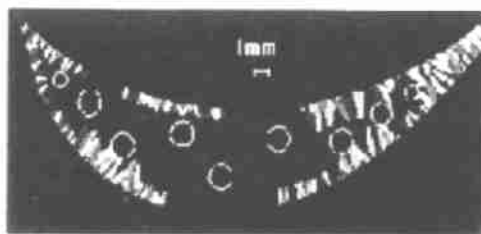


图 1 晶粒生长过程的竞争选择

Fig.1 Preferential growth of grains

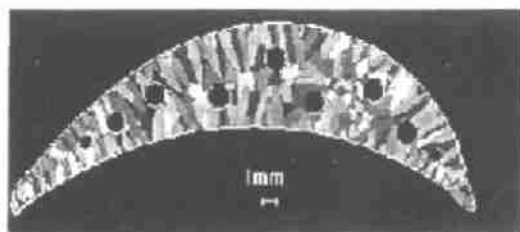


图 2 原始工艺叶片晶粒组织形貌

Fig.2 Morphology of microstructure of a blade produced by original technology

改变工艺条件,可以得到不同的模拟结果。图 2 的工艺方案由于浇注温度高,壳温低,孕育剂粒度粗,则单位体积形成的核心数少,生长占优。较高的温度梯度导致大柱状晶的产生。

### 2.2 再结晶过程的模拟结果

利用铸态凝固组织模拟结果,得到不同单元内晶界形核位置分布如图 3a 所示,晶粒分布如图 3b 所示。根据再结晶模型,假设在晶界处优先形核,根据确定的形核率,使用 Cellular Automaton 方法,随机确定形核位置,而后,考虑在时间步长为  $\Delta t$  间隔内,通过晶粒长大速率计算公式,得到每一晶粒长大速率,每一晶粒按此速率长大,所得结果如图 4a 所示。模拟过程中,晶粒按等轴晶长大方式长大,当各个晶粒接触后,再结晶结束,所得结果如图 4b 所示。

同样,使用 Cellular Automaton 方法,对三维再结晶进行了初步模拟,所得结果如图 5 所示。图 6 是二维断面的晶粒尺寸分布。

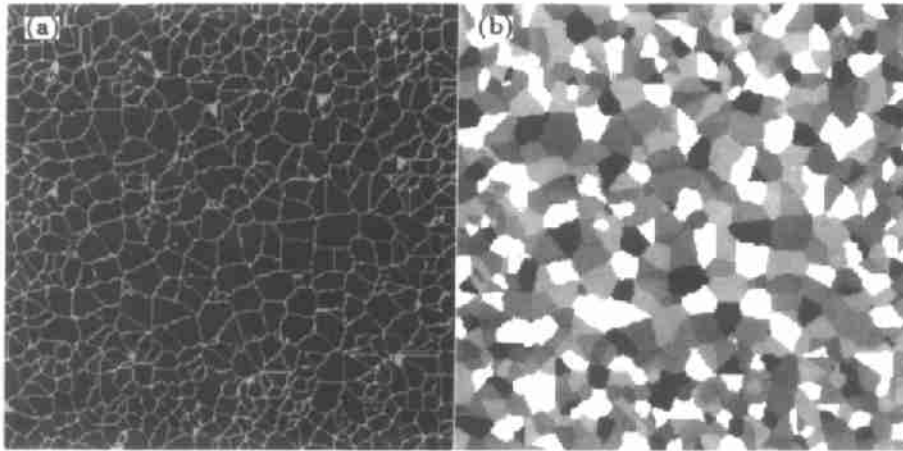


图 3 初始铸态组织模拟结果

Fig.3 The simulated results of initial cast microstructure  
(a) the grain boundary distribution (b) the initial grain size

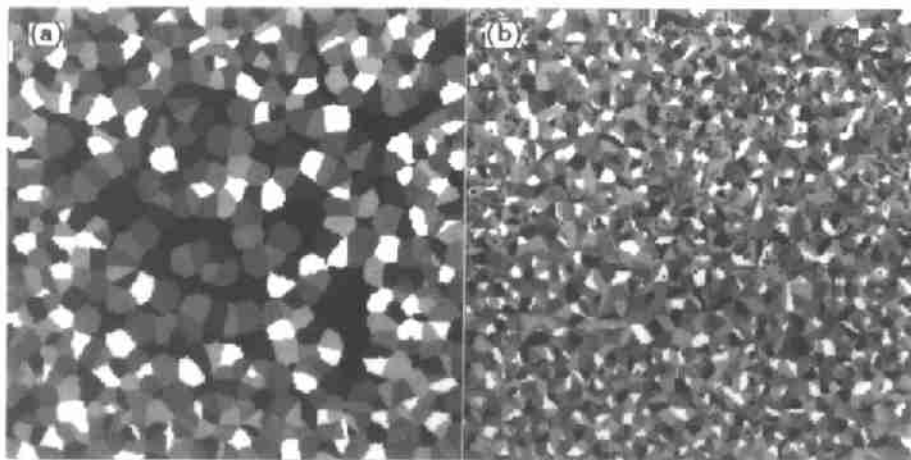


图 4 再结晶组织的模拟结果

Fig.4 The simulated results of recrystallization process  
(a) the nucleation and growth of recrystallized grains (b) the final recrystallized grain size

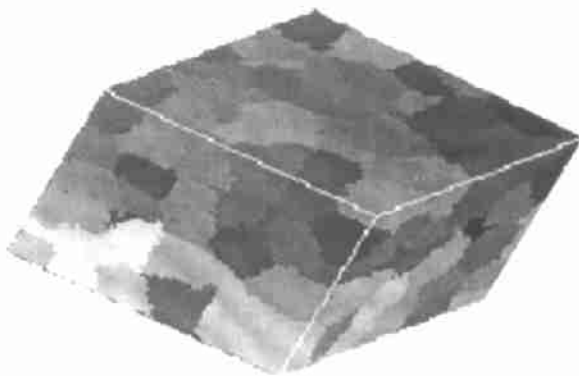


图 5 再结晶过程的三维模拟  
Fig.5 The 3D structure of recrystallized grains

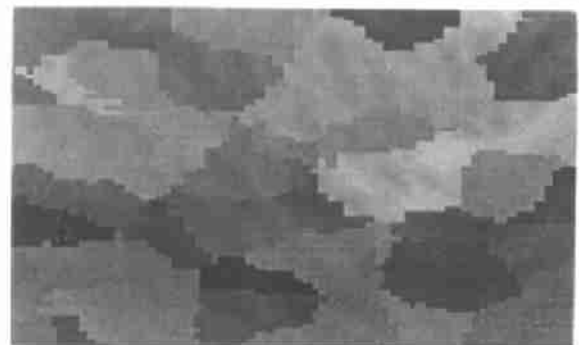


图 6 截面的再结晶组织的模拟结果  
Fig.6 The section of recrystallized grains

由以上分析可知, Cellular Automaton 法是处理微观组织演变过程的一种好的方法. 如将有限元、有限差分法与 Cellular Automaton 方法结合, 构造合理的物理模型, 则可以模拟实际件凝固过程、热处理过程、焊接过程及加工过程的组织演变, 预测晶粒度、相的分布等, 并通过宏观工艺参数控制来优化组织<sup>[11,12]</sup>. 以往对再结晶过程进行模拟时, 通常假设初始铸态组织是均匀的, 这与实际情况不符. 而本文尝试采用同一种 Cellular Automaton 方法, 可以模拟不同工艺条件下的铸态与变形态组织. 这样就可考虑初始晶粒度对加工过程的影响, 将两者紧密结合, 特别是三维组织模拟, 更有利于指导实际. 但是由于机器容量和速度的限制, 目前模拟的晶粒数是有限的.

由模拟结果可见, 原始铸态组织晶粒尺寸细小, 则再结晶后的晶粒尺寸也细小均匀.

### 3 结论

(1) 采用 Cellular Automaton 方法描述晶核的形成与生长过程, 该方法可计算任一时刻任一晶粒的生长尺寸及形态演变过程, 实现了组织形成过程的定量预测.

(2) 通过将传热、传质模型与微观形核、生长和组织形态转变模型相结合, 建立了宏-微观统一模型. 所开发的模拟系统可定量计算铸件温度场、浓度场、固相份数场、微观

组织演变和再结晶过程等, 使模拟研究由宏观深化到微观组织领域.

(3) 模拟了 K417 Ni 基合金涡轮叶片的组织演变过程, 模拟结果与实测结果吻合良好. 对热加工再结晶过程进行了初步模拟, 三维的模拟结果更有利于解决实际问题.

### 参考文献

- [1] Zhu P P, Smith R W. *Acta Metall Mater*, 1992; 40(12): 3369
- [2] Spittle J A, Brown S G R. *Acta Metall*, 1989; 37(3): 1803
- [3] Brown S G R, Spittle J A. In: Rappaz M, Ozgu M R, Mahin K W eds, *Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Process-V*, TMS, 1991: 395
- [4] Rappaz M, Gandin Ch-A. *Acta Metall Mater*, 1993; 41(2): 345
- [5] Rappaz M, Gandin Ch-A. *MRS Bull*, 1994: 20
- [6] Marx V, Reher F R, Gottstein G. *Acta Mater*, 1999; 47(4): 1219
- [7] Davies C H J. *Scr Mater*, 1997; 36(1): 35
- [8] Numann J V. *Theory of Self-Reproducing Automaton*. Champaign: Univ. of Illinois Press, 1966: 30
- [9] Kurz W, Giovanola B, Trivedi R. *Acta Metall*, 1986; 34(6): 823
- [10] Hunt J D. *Mater Sci Eng*, 1984; 65(2): 75
- [11] Jacot A, Rappaz M. *Acta Mater*, 1999; 47(5): 1645
- [12] Kumar M, Sasikumar R, Kesavan Nair P. *Acta Mater*, 1998; 46(17): 6291