

铸造过程的多尺度模拟研究进展*

柳百成 许庆彦 熊守美 康进武

(清华大学机械工程系 北京 100084)

摘要: 铸造行业对国民经济的发展具有重要作用, 但我国与国外有很大差距, 严重制约着经济的发展。铸造成形加工技术的发展趋势之一是用计算机模拟仿真技术来逐步代替传统的经验性研究方法。计算机模拟技术已成为改造传统铸造产业的必由之路, 在生产中得到了越来越广泛的应用。随着铸造过程宏观模拟技术的成熟, 研究者们把目光转向了微观过程模拟与多尺度模拟。主要针对目前的研究热点和发展趋势作了阐述, 特别是对新一代精确铸造充型凝固过程模拟、铸造过程的应力应变分析、微观组织的形成与演变及并行工程环境下的多尺度模拟仿真等方面的国内外最新进展进行了分析, 同时重点介绍了我国在这方面的研究成果。

关键词: 精确铸造 模拟仿真 应力模拟 微观组织模拟 多尺度模拟

中图分类号: TG24

0 前言

铸造行业是制造业的重要组成部分, 是汽车、电力、石化、造船、机械等支柱产业的基础制造技术。以液态铸造成形、固态塑性成形及连接成形等为代表的成形制造技术, 不仅赋予零件以形状, 而且决定了零件的最终组织、结构与性能。

我国有着悠久而灿烂的铸造历史。三千多年前我们祖先铸造的青铜器至今仍然令全世界惊叹不已。2001 年我国铸件年产量已超过美国(1 187 万 t), 达到 1 488 万 t, 是世界铸件生产第一大国。2002 年中国第二重型机械集团公司成功地浇注了世界最大的轧钢机机架铸件, 总共冶炼、浇注钢液 730 t。但是, 我国的铸造行业与国外工业发达国家相比, 仍有很大差距。例如, 重大工程的关键铸件如长江三峡水轮机的第一个铸造拼焊结构的叶轮仍从加拿大进口, 质量 430 t、价值为 960 万美元; 航空工业发动机及其他重要的动力机械的关键铸件如燃气轮机叶片的核心铸造技术尚有待突破。因此, 在振兴我国制造业的同时, 要加强和重视铸造技术的发展。轻量化、精确化、高效化、数字化及绿色化将是未来铸造技术的重要发展方向。

随着计算机技术的发展, 计算材料科学已成为一门新兴的交叉学科, 是除试验和理论外解决材料科学中实际问题的第三个重要研究方法。它可以比理论和试验做得更深刻、更全面、更细致, 可以进

行一些理论和试验暂时还做不到的研究。因此, 基于知识的以铸造为代表的材料成形工艺模拟仿真已成为材料科学与制造科学的前沿领域及研究热点。根据美国科学研究院工程技术委员会的测算, 模拟仿真可提高产品质量 5~15 倍、增加材料出品率 25%、降低工程技术成本 13%~30%、降低人工成本 5%~20%、增加投入设备利用率 30%~60%、缩短产品设计和试制周期 30%~60% 等。

经过 30 多年的不断发展, 铸造过程的宏观模拟在工程中应用已是一项十分成熟的技术, 已有很多商业软件如 MAGMA、PROCAST 及中国的铸造之星(FT-STAR)等, 并在生产中取得显著的经济及社会效益^[1, 2]。例如, 在我国重型制造企业的共同努力下, 长江三峡水轮机叶轮的不锈钢叶片(质量 62 t)已由德阳中国二重集团铸造厂于 2001 年首先试制成功, 其铸造工艺方案采用了先进的计算机模拟仿真技术, 经反复模拟得到了最优化的铸造工艺方案。由国务院三峡工程建设委员会办公室、中国机械工业联合会共同主持召开的鉴定委员会专家组认为: 该叶片技术资料齐全, 采用了计算机优化等先进技术, 符合有关标准要求, 达到国际同行业先进水平。

多学科、多尺度、多性能、高保真及高效率是模拟仿真技术的努力目标, 而微观组织模拟(从毫米、微米到纳米尺度)则是近年来研究的新热点课题。通过计算机模拟, 可深入研究材料的结构、组成及其在物理化学过程中宏观、微观变化机制, 并由材料成分、结构及制备参数的最佳组合进行材料设计就将铸造过程建模与仿真的最新进展, 主要是新一代精确铸造充型凝固过程, 铸造过程的应力分析, 微观组织演变及并行工程环境下的多尺度模拟仿真等方面的国内外最新进展进行讨论。

* 纪念《机械工程学报》创刊 50 周年——“机械工程技术的历史、进展与展望”主题征文。国家自然科学基金(59990470-3)和国家科技部重大基础研究(G2000067208-3)资助项目。20030902 收到初稿, 20030910 收到修改稿

1 精确铸造成形过程的建模与仿真

砂型铸造充型及凝固过程的模拟已得到广泛的应用, 研究重点已转向精确铸造成形工艺的建模与仿真。精确铸造成形方法主要有压力铸造、低压铸造、熔模铸造、消失模铸造和半固态铸造等。

1.1 压力铸造过程模拟仿真

压力铸造是目前广泛采用的精确铸造成形工艺, 特别是铝及镁合金的压力铸造。在压铸成形条件下, 型腔的填充模式是影响铸件质量的关键因素之一。因而, 充型过程的流场控制是精确成形过程铸件质量控制的核心环节。同时, 压铸过程是一个周期性循环生产的过程, 在平衡状态下模具及铸件的温度场分布对铸件质量、模具使用寿命及生产效率有重要影响。因此, 铸件充型及凝固过程数值模拟技术为压铸工艺设计、模具制造以及铸造工艺参数优化提供了快捷和有效的手段, 可以缩短产品开发周期。

图 1 和图 2 是汽车镁合金压铸件的充型及凝固过程的模拟结果, 其中充型模拟采用 ANYCAST-ING 软件, 而凝固模拟则采用 FT-STAR 软件。

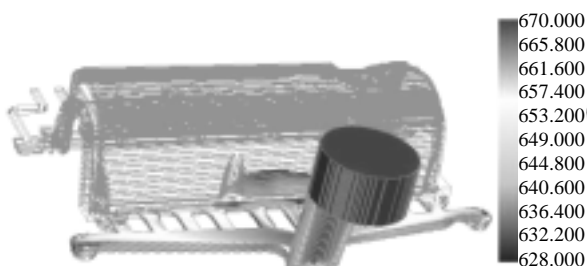


图 1 汽车汽缸盖罩盖镁合金压铸件的充型过程

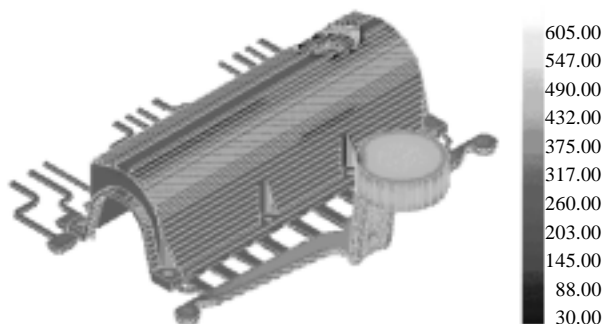


图 2 汽车汽缸盖罩盖镁合金压铸件的凝固过程

1.1.1 并行计算技术

因为对离散的流动控制方程的求解是一迭代过程, 需要很长时间, 因而提高计算效率仍是压铸模拟的研究重点。采用并行计算技术来加速流场的计算过程是重要的途径, 作者利用基于机群的网络化并行计算环境, 在对压铸充型过程的数学模型和计

算模型进行分析的基础上, 提出并建立了并行搜索计算模型。该模型以原有的 SOLA-VOF 串行算法为基础, 通过效率参数的适当选择和调整, 充分利用多节点的优势, 最终实现并行计算优化串行过程的目的^[3]。

采用微机并行计算系统 TH-NPSC2, 对倒档伺服器活塞零件的充型流动过程进行模拟。图 3 为充型流动过程的模拟结果。从充型过程可以看出, 零件的圆筒形薄壁处是最后充填部位。由于气体集中于此, 所以容易产生卷气、气孔等缺陷, 影响零件质量。模拟结果为模具的设计、溢流槽的位置确定提供了有益的指导。

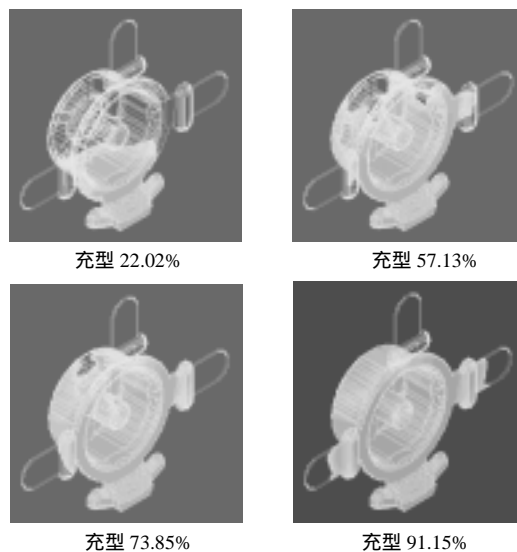


图 3 倒档伺服器活塞充型模拟结果

1.1.2 分数步长法

采用分数步长法原理, 对凝固过程中的热传导问题构造了相应的具有二阶精度的有限差分格式如式(1)所示

$$\begin{cases} \frac{T^{n+1/3} - T^n}{\tau} + \frac{1}{2} A_x^n (T^n + T^{n+1/3}) = 0 \\ \frac{T^{n+2/3} - T^{n+1/3}}{\tau} + \frac{1}{2} A_y^n (T^{n+1/3} + T^{n+2/3}) = 0 \\ \frac{T^{n+1} - T^{n+2/3}}{\tau} + \frac{1}{2} A_z^n (T^{n+2/3} + T^{n+1}) = 0 \end{cases} \quad (1)$$

式中 τ ——分数步时间步长

n ——计算时间步, $n = 0, 1, 2, \dots$

A_x^n, A_y^n, A_z^n 分别为 $t_n \leq t \leq t_{n+1}$ 时对算子

$$A_x = -\alpha \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad A_y = -\alpha \frac{\partial^2}{\partial y^2}, \quad A_z = -\alpha \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

的近似。

由于该算法的无条件稳定性, 所以时间步长可以在一定的范围内任意选择, 因此可以极大地加快计算速度, 提高计算效率^[4]。

1.1.3 计算区域优化

根据 Barone 和 Caulk^[5]提出的“瞬态层”概念, 及压铸过程的温度场变化特点和模具内温度分布特点, 提出了对压铸件凝固模拟分析的分区计算方案。将整个模拟计算区域分为铸件区、瞬态区和稳态区。当采用分数步长法进行数值求解时, 由于没有时间步长限制, 可在模具“瞬态层”区域及铸件区域采用较小的空间步长和时间步长, 而在模具“稳态区”则可采用较大的空间步长和时间步长。这样可大大提高整个系统的模拟计算效率。

对气缸盖罩盖镁合金压铸件及模具在压铸过程

的温度场进行了模拟计算。在保证模拟计算精度的前提下, 分别采用不同的方法进行了模拟计算效率的对比研究。下表给出了采用不同模拟方法进行实际压铸件凝固模拟计算效率比较结果。

从下表可以看出, 采用分数步长法、分区域空间步长和分区域时间步长法等进行凝固模拟分析, 可大大提高模拟计算效率, 为快速有效地得到压铸工艺参数如浇注温度、模具预热温度等对铸件和模具温度场的影响的模拟结果, 及选取较优工艺参数提供科学的基础。

表 采用不同模拟计算方法进行实际压铸件凝固模拟计算效率比较

模拟方法	空间 mm	时间步长 t/s		网格划分数量		压铸每周期计算时间 T/min
		凝固阶段	其他阶段	网格总数	瞬态区网格数	
分数步长法	2	0.1	0.1	33 019 613		500
分阶段时间步长法	2	0.1	1	33 019 613		208
分区域空间步长法	不同空间步长	0.1	1	17 119 258		107
分区域时间步长法	不同空间步长	瞬态区 0.1 稳态区 0.2	瞬态区 1 稳态区 2	17 119 258	687 661	51

图 4 显示了模具的温度场, 图 5 是模拟计算中定镶块离铸件不同距离部位随时间变化的温度曲线。可以看出, 模具内温度随着压铸周期的进行有周期性的上升和下降。在压铸第一阶段, 压入金属液后, 模具表面温度在极短的时间内上升至最高值, 然后迅速下降, 变化速度和幅度较大。而在第二、三、四段, 模具温度的变化较平缓。随着到铸件距离的增大, 温度上升的速度越慢, 且变化幅度渐小, 表明离铸件较远的模具温度受铸件温度的影响逐渐减小。

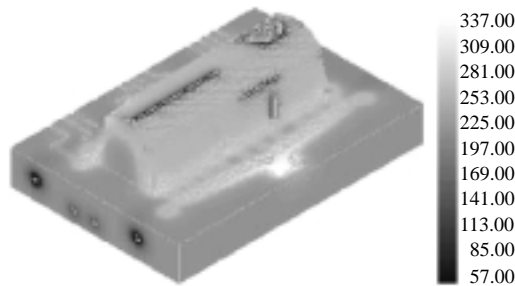


图 4 气缸盖罩盖镁合金压铸模具温度场

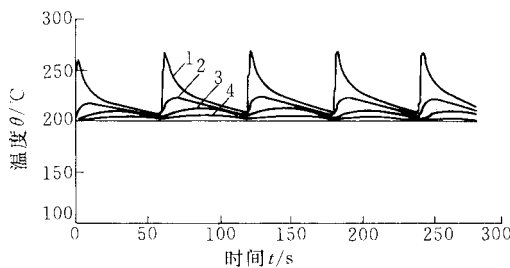


图 5 定镶块离铸件不同距离的温度变化曲线

- 1. 距铸件 1 mm 处
- 2. 距铸件 5 mm 处
- 3. 距铸件 9 mm 处
- 4. 距铸件 13 mm 处

1.2 熔模铸造过程数值模拟

近年来, 国内外熔模铸造技术发展迅速, 熔模精铸件尤其是高温合金铸件在航空航天、国防军工等领域中的应用越来越广泛, 如航空发动机压气机和燃气轮机的涡轮叶片等关键部件。由于熔模精铸件一般形状复杂、合金熔炼温度高和生产工序繁多等原因, 导致废品率和成本居高不下。利用计算机技术对熔模铸造过程进行数值模拟, 有助于了解铸件凝固过程和预测铸造缺陷, 从而改善铸造工艺, 提高铸件质量。

清华大学与钢铁研究总院合作对钛铝增压涡轮进行了数学建模和模拟计算^[6, 7]。为考察铸件凝固规律和收缩缺陷, 针对倒锥形浇注系统(方案 A)和半球形浇注系统(方案 B)两种工艺分别进行了模拟, 如图 6 所示。图 7a 和 b 所示分别为方案 A 和 B 的铸件凝固末期温度场。方案 B 的热节部位显著上移, 有利于使收缩缺陷集中在浇注系统内部, 减少铸件内部尤其是涡轮轴部位的缺陷。

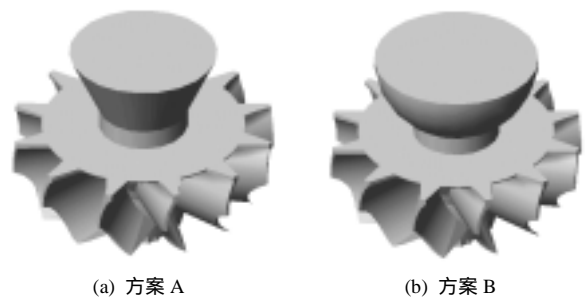


图 6 涡轮铸件三维实体形状

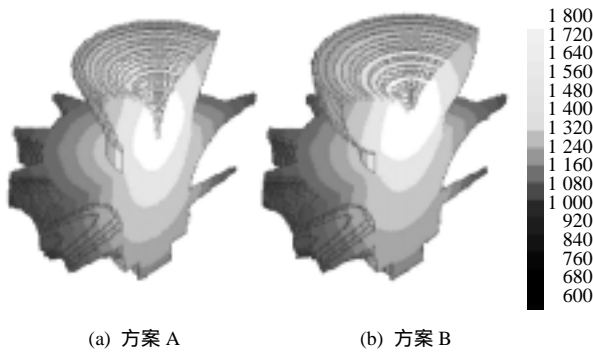


图7 涡轮铸件凝固末期的温度场

2 铸造过程热应力建模与仿真

铸造过程热应力分析就是采用数值模拟的方法计算铸件/型芯在铸造过程中的热应力(将型芯的阻碍作用通过边界条件也纳入到热应力分析中)产生的变化,预测铸件热裂的产生、铸件的残余应力和残余变形,甚至型芯的变形和应力分布。通过对计算结果的分析进一步优化铸件结构或铸造工艺,从而消除热裂,最大限度地减小残余变形和残余应力。热应力分析的对象已从单一研究铸件的应力和变形,逐渐发展到研究铸件和型芯整个系统的热应力和变形分析^[8],因为不考虑型芯很难全面考虑铸件/型芯边界条件,并且在压铸生产中铸型的热应力模拟对预测压铸模具的使用寿命具有重要意义。另外,铸造过程热应力数值模拟研究逐渐从热力单向耦合向双向耦合发展。单向耦合即只考虑铸件传热对热应力的影响,而不考虑热应力对传热的影响。双向耦合为传热和应力发展相互影响。

2.1 力学模型

在铸件形成过程中,液态金属经过液态、固液两相共存区和固态三个阶段,而且同一时刻可能三个区域共存,因此凝固模拟涉及的应力应变本构关系非常复杂。铸件凝固过程热应力数值模拟也大致分为固液两相区的模拟和凝固以后阶段的模拟两部分。哈尔滨工业大学、清华大学和华北工学院等对一些铸造铝合金和铸钢进行了固液两相区的流变学性能的研究,得到了比较一致的流变学模型[H]-[H][N]-[N][S]^[9]。同时,在半固态铸造方面对铝合金在半固态下的流变学性能进行了大量研究和测试,这也为固液两相区的应力分析奠定了基础。铸件凝固以后一般采用热弹塑性模型或热弹粘塑性模型^[8,10]。目前凝固过程应力数值模拟的研究主要集中在凝固以后阶段,而在固液两相区的应力数值模拟方面的研究工作较少。另一方面砂型的力学模型也比较复杂,Bellet^[8]和 Samonds^[10]在铸件应力分析中将

其处理为热弹塑性模型。

作者^[11]开发了基于流变学模型 H-[H][N]-[N][S]的铸件准固相区应力分析程序,对带热节的工字型铸件在中间有无刚性约束条件进行了模拟,如图8所示。在流变学模型的基础上提出了热裂判据:当等效粘塑性应变大于临界粘塑性应变时产生热裂。

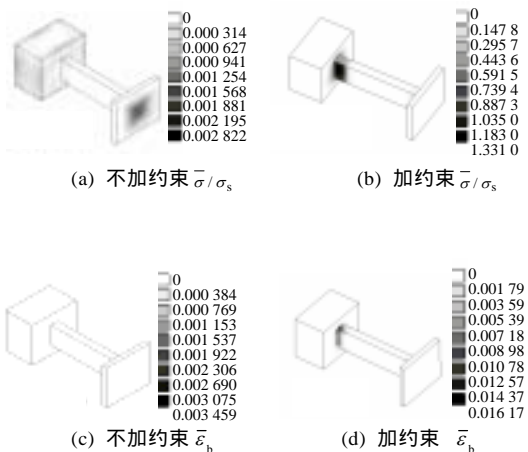


图8 工字型试件在不同约束工艺下的结果比较

2.2 应用软件

铸造过程热应力模拟的分析手段经历了由简易专用程序、通用有限元应力分析软件到铸件凝固模拟专业软件三个阶段。早期的研究采用自行开发有限元应力分析程序,主要处理二维问题,如郑贤淑等^[12]、邓康等^[13]、金俊泽等^[14]及张风禄等^[15]分别对应力框、大型汽轮机缸体、大型铸钢轧辊及水平连铸坯进行了热应力分析。近年来出现了一些大型的通用有限元分析软件如 ANSYS、ABAQUS、ADINA 及 I-DEAS 等,这些软件已经广泛应用,一般都提供热弹塑性模型等多种常用材料力学模型,并且具有强大的有限元前后处理功能。应用这些软件可以对铸件进行三维热应力分析。例如,林家骥等^[16]和陈国权^[17]分别采用 ABAQUS 和 ADINA & ADINAT 软件对带凹槽圆筒件和中空轴铸钢件进行了应力分析及热裂预测。但是,要完全适合铸造过程应力数值模拟,这些商业软件还需要进行二次开发。近几年来国外开发了一些专业铸件凝固过程数值模拟软件,其中部分软件具有应力分析功能,如 MAGMA、PROCAST、CASTS、PHYSICA、THERCAST 及铸造之星等。

由于铸造过程应力分析实际上包括两部分,传热计算和应力计算。多数铸件凝固模拟软件采用有限差分法,而应力分析普遍采用有限元法。因此在该领域主要有两种方法:一种是温度场和应力场都采用相同的方法,主要是有限元法;另一种是采用

不同的方法计算温度场和应力场，如用有限差分或有限体积法计算温度场，然后用有限元法计算应力。热分析和应力分析采用不同的方法是为了充分发挥各数值算法的优点，但是存在不同算法模型间的匹配问题以及由此带来的误差，如有限差分模型或有限元模型和有限元模型的匹配。热分析和应力分析都采用相同的方法，温度场和应力场不需要进行匹配，并且能够实现应力场和温度场计算耦合，但计算复杂而且计算量大。

作者^[18, 19]采用有限差分法进行传热模拟，采用有限元法进行应力分析，建立了有限差分(FDM)/有限元(FEM)集成铸件热应力分析系统，如图 9 所示。系统实现了有限差分/有限元模型温度载荷的自动转换，采用流变学模型进行铸件准固相区热应力分析及热裂预测，在铸件凝固以后的应力分析可采用 ANSYS 或 I-DEAS 等商业软件中的热弹塑性模型。该系统已在铸造生产中得到应用，对多个实际铸件进行了热应力分析，并取得很好的结果，例如，不同落砂温度对于六缸发动机缸体残余应力的影响，压铸模具的应力及变形分布(图 10)及加强筋对大型鼓风机铸件局部残余应力的影响(图 11)。

场/应力场以及微观组织模拟耦合起来，对铸件凝固过程中多物理现象进行了模拟，这也是将来铸件凝固模拟的一个发展方向。

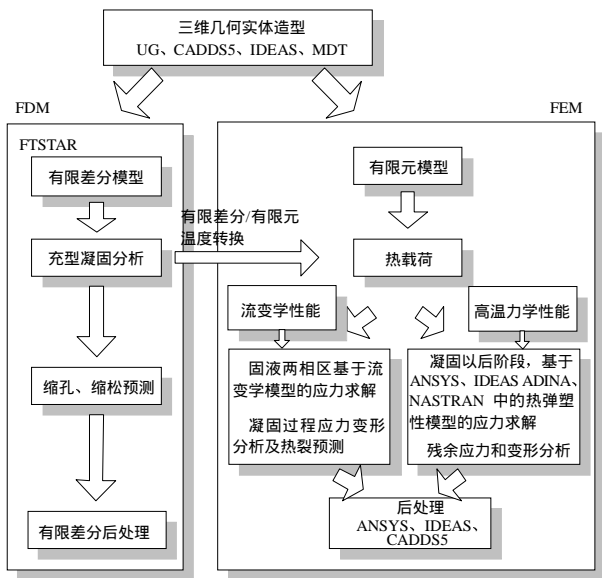
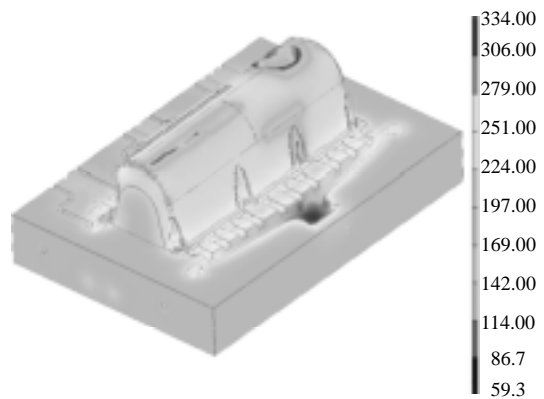


图 9 铸件凝固过程 FDM/FEM 集成热应力分析系统框图

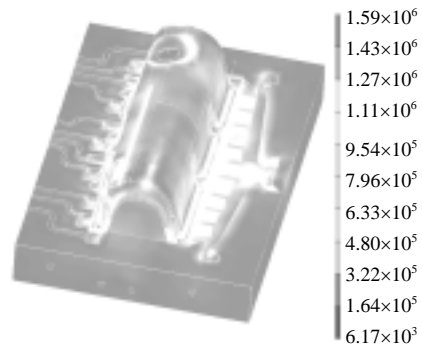
Si Ho-Mun 等^[20]也采用有限差分和有限元集成的方法进行铸件的热应力分析。Jinho Lee 等^[21]则采用有限体积法和有限元法的集成对凝固金属进行热应力分析。J. H. Hattel 等^[22]实现了基于控制体积有限差分法的热弹性应力分析，在采用有限差分法进行应力分析方面进行了探索。Frakeldey 等^[20]将温度



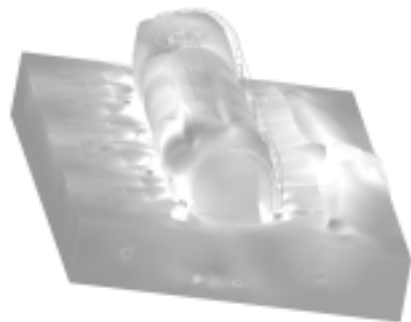
(a) 有限差分模型下的温度分布



(b) 转换到有限元模型下的温度载荷



(c) 开模前模具中的等效应力分布



(d) 开模后模具的变形情况

图 10 压铸模具中的等效应力分布及变形情况

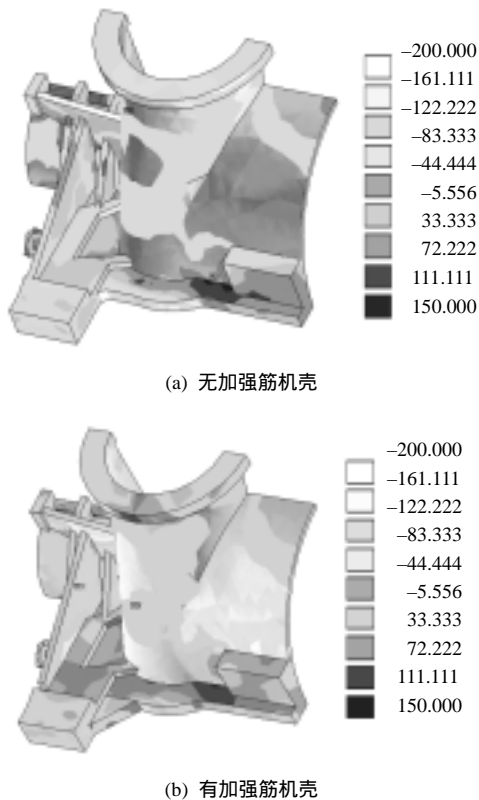


图 11 大型鼓风机机壳铸铁件 x 方向残余应力(MPa)

3 凝固过程微观组织模拟仿真

凝固过程微观组织模拟已成为材料科学的研究热点之一,模拟方法一般可分为两大类:确定性模拟与随机性模拟。确定性模拟^[23]以凝固动力学为基础,符合晶体生长的物理背景,但未考虑晶体生长过程中的一些随机现象。随机性方法中有代表性的是 Monte Carlo (MC)法^[24]与 Cellular automaton (CA)法^[25, 26]。在 MC 法中引入了概率论,对形核位置的分布与晶粒生长取向进行随机的处理,可得到与实际金相图片类似的图像,并体现出不同工艺参数的影响。CA 法以形核过程的物理机理和晶体生长动力学理论为基础,可得到晶粒的尺寸及分布,也可描述柱状晶的形成以及柱状晶向等轴晶的转变。最近相场方法^[27]备受关注,在模拟晶粒三维生长方面有独特的优势。相场理论通过微分方程反映了扩散、有序化势及热力学驱动的综合作用,可以描述金属系统中固液界面的形态、曲率以及界面的移动。若与温度场、溶质场、速度场等外部场耦合,则可对金属液的凝固过程进行真实的模拟。但计算域较小,只能针对较大的过冷度,难以应用于实际的铸造过程。Steinbach 等提出了一种介观尺度的模拟方法^[28],采用整体数值模拟与局部解析解相结合的方法来描述多个等轴枝晶在过熔熔体中的非稳定长大,但能模拟的晶粒数目仍非常有限。

,但能模拟的晶粒数目仍非常有限。

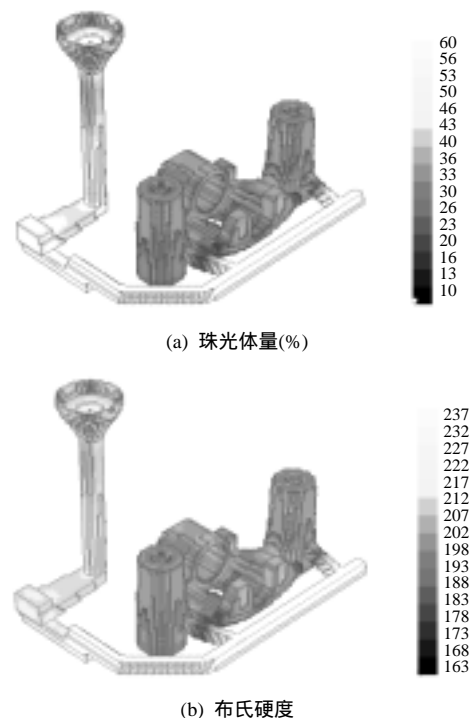
3.1 确定性方法(Deterministic model)

Thévoz 和 Rappaz 在等轴晶模拟中首先将溶质扩散模型和枝晶生长动力学模型结合起来。他们可以求得平均晶粒尺寸分布及铸件的冷却曲线。但是他们只考虑了等轴晶组织,没有考虑对流传输和晶粒沉积效应。

Wang 和 Beckermann^[29]将动量方程、能量方程和传质方程同时求解,考察了固相传输对等轴晶组织的影响,提出了多相溶质扩散模型。在枝晶组织中考虑了不同的长度尺度,认为控制体积中包含三种相:固相(等轴晶或柱状晶)、枝晶间液相及远端液相。枝晶的包络线被看作是固液界面,它的运动受枝晶尖端生长动力学所控制。该模型能体现枝晶的粗化过程,适用于柱状晶和等轴晶,但是忽略了热过冷熔体的对流的影响。

Brown 和 Hunt^[30]使用界面追踪技术,通过设置标志粒子来研究枝晶前沿及等轴晶晶界的移动,并研究了 CET 转变。Gandin^[31]采用二界面的前沿追踪技术,基于求解传热方程研究了定向凝固过程中共晶生长前沿和枝晶生长前沿的变化。Yang 和 Stefanescu^[32]通过晶粒追踪模型可以精确模拟铝合金等轴晶粒的移动,并分析了晶粒移动对组织转变及最终组织的影响。

赵海东等^[33,34]采用确定性模型对汽车球墨铸铁件进行了微观组织及性能预测模拟,铸件材质为 QT450-10。图 12 为实际球铁件的模拟预测结果,与生产实际结果吻合较好。



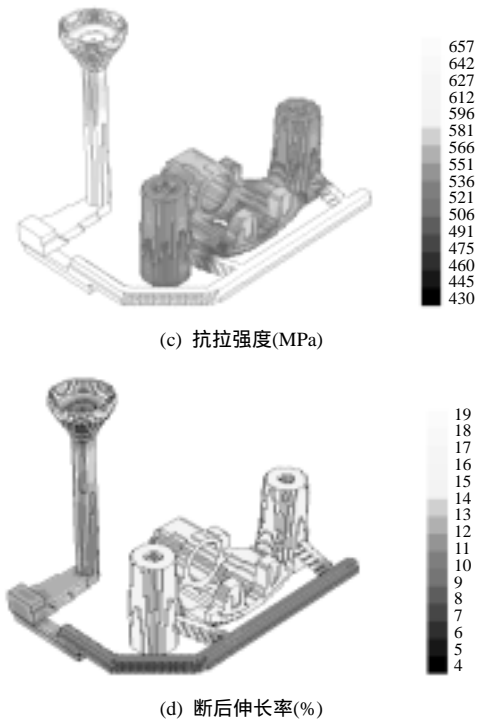


图 12 汽车球墨铸铁件微观组织及性能预测

3.2 随机性方法(Stochastic model)

随机模型是指主要采用概率方法来研究晶粒的形核和长大，包括形核位置的随机分布和晶粒晶向的随机取向。主要包括有 MC 法和 CA 方法。MC 法以概率统计理论为基础，以随机抽样为手段。它建立在界面能最小基础之上，不同属性的质点之间存在界面能(如固、液质点，或属于不同晶粒的质点)。Zhu 和 Smith^[24]对晶粒的形核与生长采用 MC 方法，基于固液相变时体自由能和界面自由能的变化计算了晶粒的生长，但没有考虑晶体生长过程中的择优取向。该方法忽略了宏观/微观传输过程的细节，缺乏物理背景。因此现在用这种方法模拟凝固组织已比较少见。

Rappaz 和 Gandin^[35]提出了 CA 模型，考虑了非自发形核方法和生长过程的物理机制。在 FE-CA 的基础上，他们又发展了 3D CAFE 模型，并成功地模拟了铝硅棒晶粒组织的形成。作者等对 CA 法作了修正，采用简化的枝晶形状模拟了金属型和砂型试样的晶粒结构，并与试验进行了比较，如图 13 所示。

枝晶往往具有复杂的几何形状，如初生主干上会出现二次枝晶臂或高次分枝。传统的 CA 方法没有考虑具体的枝晶形貌。Stefanescu 和 Pang 等^[36]首先对枝晶形状的模拟做了尝试：在 10^{-6} m 尺度采用随机模型，而在 10^{-4} m 尺度下采用确定性模型，并将二者进行了耦合。同时还计算了枝晶臂粗化，主要是综合考虑了尖端生长速度和确定性的枝晶粗化模型。

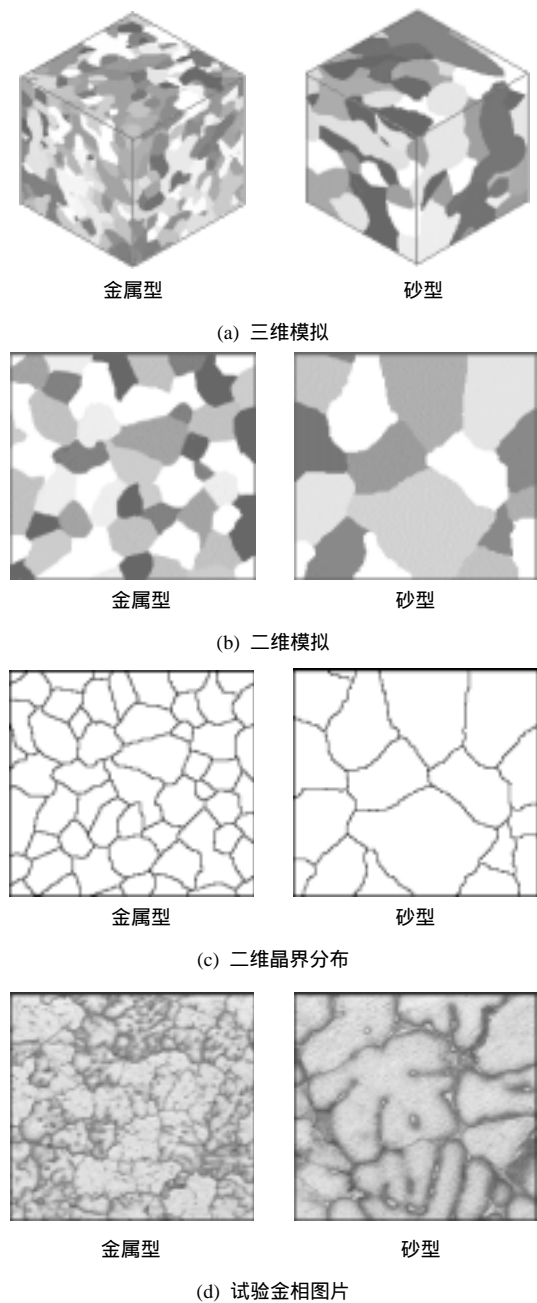
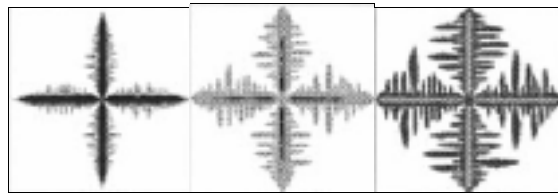


图 13 铝合金凝固组织模拟结果与金相组织的对比

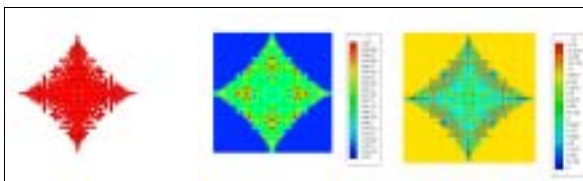
Dilthey 等^[37]利用改进的 CA 模型对枝晶形貌和晶粒长大进行了数值模拟，考虑了固液相中的溶质扩散和溶质再分配、溶质和曲面过冷度对平衡界面温度的影响，定性再现了枝晶尖端的抛物线形态、二次和三次枝晶臂的发展、平界面的不稳定性、由曲率减小引起的粗化及在限制条件下枝晶的选择等。Nastac^[38]提出了一种更复杂的随机模型来模拟枝晶的形貌演变。这个模型包括与时间有关的温度分布计算、液相及固相中的溶质再分布、曲率和生长的各向异性。Zhu 和 Hong^[39]也采用类似的方法模拟了枝晶形成。作者在这方面也做了一些工作，可模拟二维及三维枝晶的生长^[38, 39]，对等轴晶的模拟结果如图 14 所示。



Nastac 的模拟结果(Al-7%Si)



Zhu 和 Hong 的模拟结果(Al-2%Cu)



(a) 等轴枝晶生长形貌 (b) 温度分布 (c) 溶质分布

作者的模拟结果(Fe-0.6%C)

图 14 等轴枝晶生长的模拟

3.3 相场模型(Phase field model)

相场方法引入相场变量 ϕ , ϕ 是一个有序参量,表示系统在空间/时间上每个位置的物理状态(液态或固态)。最近相场方法的研究成为微观组织模拟的热点。

相场方法的应用范围较广,从共晶到包晶、界面变化、枝晶生长,从二元到三元,从两相到多相,及颗粒在界面上的迁移等问题。已有的工作包括:①多个晶粒生长时多元相场的耦合;②枝晶生长过程中相场与温度场或溶质场的耦合;③在包晶和共晶凝固中双相场与溶质场的耦合;④当存在强迫对流时相场与速度场的耦合。Nestler 等提出了一种新的多相场模型公式,考虑了表面能和界面动力学各向异性。Diepers 等^[40]使用相场理论模拟了二元合金中对流引起的晶粒粗化,考虑熔体对流的影响,模拟了二维粗化问题。在纯扩散条件下,模拟结果与经典 LSW 理论稍有偏差。在强迫对流存在时,组织迅速粗化,曲率半径分布加宽,与 Ratke-Thieringer 理论一致。Tong 等^[41]利用相场方法模拟了二维情况下的枝晶自由生长。当流体流动速度与尖端生长速度为同一个数量级时,流体的流动对枝晶的生长方向有重要影响。但是模拟中没有考虑干扰及高次枝晶的影响。

Grafe 等^[42]采用多相场模型模拟了三元单晶 Ni-Al-Cr 在定向凝固时的组织变化及微观偏析。Nestler 等^[43]提出了一个通用的二元多相合金系统的

等^[43]提出了一个通用的二元多相合金系统的多相场模型,通过恰当地改变系统参数,可用来模拟共晶、包晶中的凝固现象,建立了多相场模型中自由能与特定相图之间的联系。Ode 等^[44]利用相场方法研究了颗粒/界面问题,成功地再现了颗粒在界面前沿的推移和陷落现象。

张光跃等^[45]采用相场方法对铝合金的生长过程进行了模拟。把 Karma 和 Rappel 的纯物质三维相场模拟扩展到了二元合金的三维相场模型^[45]。图 15 对不同模型计算的三维枝晶形貌进行了对照。



(a) 纯物质尖锐界面相场模型 (b) 二元合金弥散界面相场模型

图 15 相场法模拟的三维枝晶形貌

4 快速产品/工艺开发系统与多尺度模拟仿真

我国制造业的主要问题之一是缺乏创新产品的开发能力,因而缺乏国际市场竞争能力。随着全球化市场的激烈竞争,加快产品开发速度已成为竞争的重要手段之一。美国汽车工业希望汽车的研发周期缩短为 15~25 个月,而 20 世纪 90 年代汽车的研发周期为 5 年。并行工程、快速产品/工艺开发系统及网络化虚拟制造等就是在这样的背景下产生。

应该指出,产品设计及制造开发系统是以设计与制造过程的建模与仿真为核心内容,模拟仿真或称计算机辅助工程分析(CAE)已成为并行工程及产品虚拟开发的主要内容,如图 16 所示^[46]。1992 年美国先进金属材料加工工程研究中心提出“合理的产品与工艺(成形加工)设计(Rational product and process design)”,即在设计阶段进行成形工艺与产品设计(CAD)、铸造成形过程与性能分析、及模具与产品的制造过程仿真(CAM)。它不仅提供产品零部件的可制造性评估,而且提供产品零部件的性能预测。最近,制造厂商又提出了“新产品一次研发成功”的理念,其核心仍然是从设计到制造全部过程的建模与仿真技术。快速产品/工艺开发系统与多尺度模拟仿真已在海外汽车及航空工业中得到应用,如图 17 所示。根据上述构思,针对铝合金铸件的性能和疲劳寿命预测,作者初步建立了铝合金铸件疲劳寿命模拟分析系统,如图 18 所示^[47]。

疲劳寿命模拟分析系统，如图 18 所示^[47]。

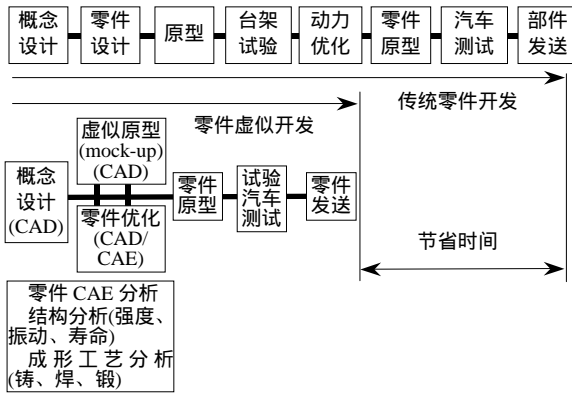


图 16 产品虚拟开发与传统方法比较

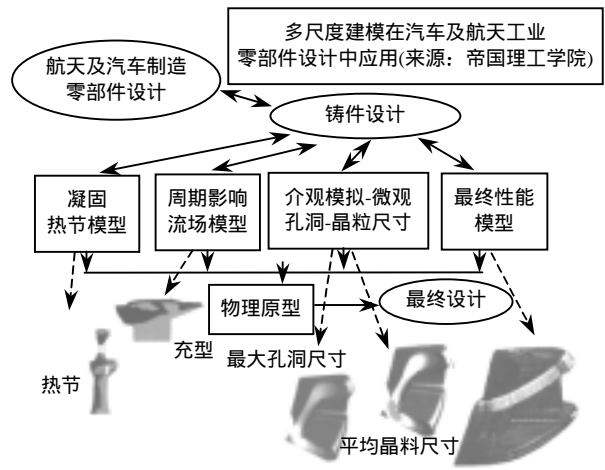


图 17 多尺度模拟仿真在国外汽车及航天工业中的应用

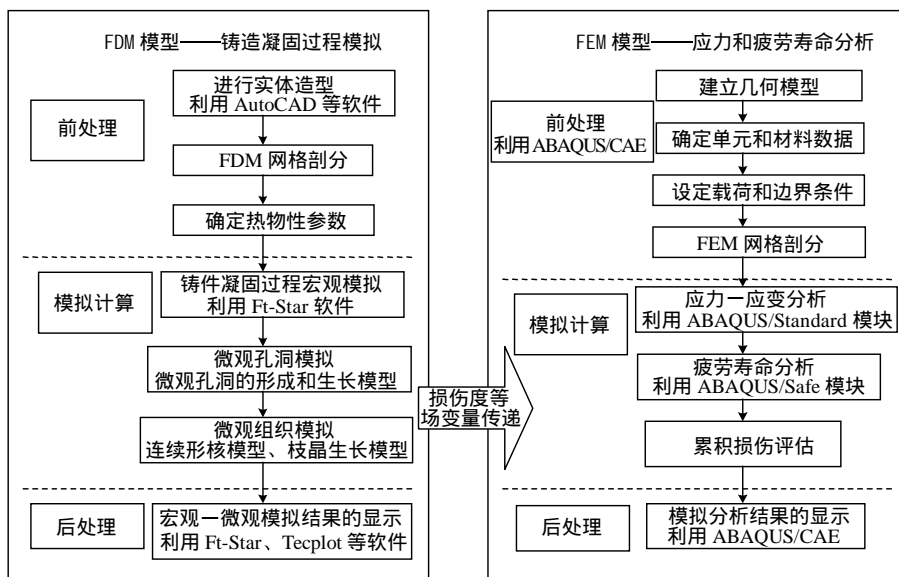


图 18 铝合金铸件疲劳寿命模拟分析系统

5 结论

铸造行业是制造业的重要组成部分，在振兴我国制造业的同时，要加强和重视先进铸造技术的发展。基于知识的铸造成形过程模拟仿真是材料科学与制造科学的前沿领域及研究热点，铸造成形过程的宏观模拟已在生产中广泛应用。采用并行计算技术、分数步长法及分区域空间步长和分区域时间步长法可大大提高压力铸造充型及凝固过程数值模拟的计算效率。采用有限差分法进行传热模拟、采用有限元法进行应力分析的 FDM/ FEM 集成铸件热应力分析系统已在生产中应用。系统实现了有限差分/有限元模型温度载荷的自动转换，采用流变学模型进行铸件准固相区热应力分析及热裂预测，采用热弹性模型进行铸件凝固后的应力。凝固过程微观组织模拟已成为计算材料科学的当前研究热点，在

确定性方法、元胞自动机方法及相场方法等方面均取得可喜的进展。在网络化环境下、在快速产品/工艺研究开发系统中进行铸件的多尺度模拟仿真将是今后的发展趋势。

参 考 文 献

- 1 柳百成, 荆涛. 铸造工程的模拟仿真与质量控制. 北京: 机械工业出版社, 2001
- 2 高志强, 王春乐, 邱伟, 等. 考虑充型过程的铸钢件缩孔缩松预测研究. 机械工程学报, 1997, 33(6): 46~52
- 3 Wang G, Xiong S M, Liu B C, et al. Parallel computation technique for mold filling simulation of die casting process by optimizing the computational parameters. Int. J. Cast. Metal. Res., 2002, 15 (3): 143~147
- 4 Xiong S M, Lau F, Lee W B, et al. Numerical methods to improve the computational efficiency of thermal analysis for the die casting process. J. Mater Process Tech.,

- 2003,139(1~3): 457~461
- 5 Barone M R, Caulk D A. New method for thermal analysis of die casting. *J. of Heat Transfer*, 1993, 115 (2): 284~293
- 6 梁作俭, 许庆彦, 李俊涛, 等. γ -TiAl 增压涡轮近净形铸造过程实验研究. *稀有金属材料与工程*, 2002(10): 353~357
- 7 梁作俭, 许庆彦, 李俊涛, 等. γ -TiAl 增压涡轮熔模铸造过程数值模拟研究. *稀有金属材料与工程*, 2003(3): 164~169
- 8 Bellet Michel, Aliaga Charles, Jaouen Olivier. Finite elements for a thermomechanical analysis of solidification processes. In: Sahn Peter R, Hansen Preben N, Coley James G, eds. *Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes IX*. New York: The Minerals, Metals & Materials Society, 2000: 11~17
- 9 Li Q, Chen K, Liu Ch, et al. Rheological behavior in solid-liquid coexistence zone and simulation of stress-strain and cracking of Al-Cu alloy during solidification. *AFS Trans.*, 1991, 99: 245~253
- 10 Samonds M, Zhu J Z. Coupled thermal-fluid-stress analysis of castings. In: Sahn Peter R, Hansen Preben N, Coley James G, eds. *Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes IX*. New York: The Minerals, Metals & Materials Society, 2000: 81~87
- 11 Kang J, Liu B C, Xiong S M. Numerical simulation of thermal stress of shaped casting based on rheological model. *J. Mater. Sci. Technol.*, 1999, 15(3): 267~270
- 12 郑贤淑, 金俊泽. 应力场动态应力的热弹塑性分析. *大连理工大学学报*, 1983, 22(3): 1~6
- 13 邓康, 毛生根, 孙焕纯, 等. 大型汽轮机缸体铸件应力计算与热裂分析. *铸造技术*, 1993(2): 3~6
- 14 金俊泽, 郑贤淑, 郭可仞. 大型铸钢轧辊铸造及热处理应力的数值模拟. *铸铁*, 1988, 23(10): 35~41
- 15 张风祿, 傅军隆. 水平连铸坯热应力的计算和分析. *北京科技大学学报*, 1990, 12(1): 25~31
- 16 林家骥, 朱世根, 于震宗. 铸钢件凝固过程三维温度场热应力场的数值模拟与缩孔(缩松)的热裂的判定. *铸造*, 1993, 42(10): 1~9
- 17 陈国权. 中空轴铸钢件凝固过程三维热应力场模拟及其热裂的研究: [博士学位论文]. 北京: 清华大学, 1994
- 18 Liu B C, Zhu R M. Residual stress computation and analysis of machine tool bed casting. In: *Proceedings of the Fifth International Symposium of the Physical Metallurgical of Cast Iron*, France, 1994
- 19 Liu B C, Kang J W, Xiong S M. A study on the numerical simulation of thermal stress during the solidification of shaped casting. *Science and Technology of Advanced Materials*, 2001(2): 157~164
- 20 Si Ho-Mun, Cho Chongdu, Kwahk Si-Young. A hybrid method for casting process simulation by combing FDM and FEM with an efficient data conversion algorithm. *Journal of Materials Processing Technology*, 2003, 133: 311~321
- 21 Lee Jinho, Hwang Ki-Young. A hybrid numerical analysis of heat transfer and thermal stress in a solidifying body using FVM and FEM. *Int. J. Engng Sci.*, 1996, 34(8): 901~922
- 22 Hattel J H, Hansen P N. A control volume based finite difference method for solving equilibrium equations in terms of displacement. *Appl. Math Modeling*, 1995(19): 210~243
- 23 Zhao H D, Liu B C. Modeling of stable and metastable eutectic transformation of spheroidal graphite iron casting. *ISIJ Inter.*, 2001, 41 (9): 986~991
- 24 Zhu P, Smith R W. Dynamic simulation of crystal growth by Monte Carlo method-I: model description and kinetics. *Acta Metall. Mater.*, 1992, 40: 683~692
- 25 Xu Q Y, Liu B C. Modeling of As-cast microstructure of Al alloy with a modified cellular automaton method. *Mater. Trans.*, 2001, 41(7): 2 316~2 321
- 26 Feng W M, Xu Q Y, Liu B C. Microstructure simulation of aluminum alloy using parallel computing technique. *ISIJ International*, 2002, 42(7): 702~707
- 27 Zhang G Y, Jing T, Liu B C. Microstructure simulation of aluminum alloy casting using phase field method. *Int. J. Cast. Metal. Res.*, 2002, 15(3): 237~240
- 28 Steinbach I, Beckermann C, Kauerauf B, et al. Three-dimensional modeling of equiaxed dendritic growth on a mesoscopic scale. *Acta Mater.*, 1999, 47(3): 971~982
- 29 Wang C Y, Beckermann C. Multi-scale/-phase modeling of dendritic alloy solidification. American Society of Mechanical Engineers, Heat Transfer Division, (Publication) HTD, *Transport Phenomena in Solidification*, 1994, 284: 75~95
- 30 Brown D J, Hunt J D. A model of columnar growth using a front-tracking technique. In: *Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes IX*, Aachen, Germany. 2000: 437~444
- 31 Gandin Ch-A. From constrained to unconstrained growth during directional solidification of dendritic alloy. *Acta Materialia*, 2000, 48(10): 2 483~2 501
- 32 Yang B J, Stefanscu D M. Solidification modeling with grain tracking, modeling of casting. In: *Welding and Advanced Solidification Processes IX*, Aachen, Germany. 2000 : 582~589
- 33 赵海东, 柳百成, 刘蔚羽, 等. 球墨铸铁件微观组织的数值模拟. *机械工程学报*, 2000, 36(2): 76~80

- 34 Zhao H D, Liu B C. Modeling of stable and metastable eutectic transformation of spheroidal graphite iron casting. *ISIJ International*, 2001, 41(9): 986~991
- 35 Gandin Ch-A, Rappaz M. Coupled finite element-cellular automation model for the prediction of dendritic grain structures in solidification processes. *Acta Metall.*, 1994, 42: 2 233~2 246
- 36 Stefanescu D M, Pang H. Modeling of casting solidification; stochastic or deterministic. *Canadian Metallurgical Quarterly*, 1998, 37(3, 4): 229~239
- 37 Dilthey U, Pavlik V. Numerical simulation of dendrite morphology and grain growth with modified cellular automata. In: *Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes VIII*. 1998: 589~596
- 38 Nastac L. Numerical modeling of solidification morphologies and segregation patterns in cast dendritic alloys. *Acta Mater.*, 1999, 47(17): 4253~4262
- 39 Zhu M F, Hong C P. A modified cellular automaton model for the simulation of dendritic growth in solidification of alloys. *ISIJ International*, 2001, 41(5): 436~445
- 40 Diepers H-J, Beckermann C, Steinbach I. Simulation of convection and ripening in a binary alloy mush using the phase-field method. *Acta Materialia*, 1999, 47(13): 3 663~ 3 678
- 41 Tong X, Beckermann C, Karma A, et al. Phase-field simulations of dendritic crystal growth in a forced flow. *Physical Review E*, 2001, 63(6): 1~16
- 42 Grafe U, Bottinger B, Tiaden J, et al. Coupling of multicomponent thermodynamic databases to a phase field model: application to solidification and solid state transformations of superalloys. *Scripta Materialia*, 2000, 42(12): 1 179~1 186
- 43 Nestler B, Wheeler A A. Multi-phase-field model of eutectic and peritectic alloys: numerical simulation of growth structures. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 2000, 138(1): 114~133
- 44 Ode M, Kim S G, Suzuki T. Recent advances in the phase-field model for solidification. *ISIJ International*, 2001, 41(10): 1 076~1 082
- 45 Zhang G Y, Jing T, Liu B C. Dendritic morphology simulation using the phase field method. *Tsinghua Science and Technology*, 2003, 8(1): 117~120
- 46 Haldenwanger H G, Stich A. Casting simulation as an innovation in the motor vehicle development process. *Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes – IX*. 2000: 44~51

- 47 Dong S Y, Zhuang Z, Xiong S M, et al. Modeling of micro-porosity evolution and fatigue life of aluminum alloy. In: *Proceedings of the 10th International Modeling Conference on Casting, Welding and Advanced Solidification Processes*, Florida, USA, 2003

PROGRESS ON MULTI-SCALE MODELING OF CASTING PROCESS

*Liu Baicheng Xu Qingyan Xiong Shoumei
Kang Jingwu
(Tsinghua University)*

Abstract: Casting industry is critical to the national economy. However there exists big gap between the casting technologies at home and abroad. One of the important future trends is the application of numerical simulation technique to substitute the traditional empirical research methods. Numerical simulation has become the necessary way to up-grade the traditional casting industries and been paid with much more attention. With the mature of macro-modeling of casting process, micro-modeling and multi-scale modeling become one of the hottest research frontiers attracting many researchers and engineers. The current research hotspots and the development trends of modeling of casting processes are mainly introduced, especially on the mold filling and solidification processes of net shape casting, the stress and strain analyses, the prediction of the formation and evolution of microstructure and the multi-scale modeling under concurrent engineering environment. At the same time, the related achievements in our country are given with special emphasis.

Key words: Net shape casting Modeling and simulation
Stress analysis Microstructure simulation
Multi-scale modeling

作者简介: 柳百成, 男, 1933 年出生, 中国工程院院士, 清华大学教授, 《机械工程学报》编委。长期从事铸铁结晶凝固过程和石墨形态控制的基础研究及提高铸铁性能和开发新型铸铁的应用研究, 在国内较早提出用电子计算机技术改造传统铸造行业, 在开拓多学科宏观及微观铸造过程模拟仿真研究新领域作出贡献。近年来, 积极组织倡导开展轻量化、精密化、清洁化材料成形理论与技术研究。获部委科技进步一等奖 2 项、二等奖 5 项及三等奖 4 项, 获国外奖励 2 项及国家发明专利 2 项。2002 年获光华工程科技奖。发表论文 300 余篇, 在国际学术会议宣读论文 20 余篇。