

金属材料学

应用与研究

崔兰芳 ◎ 著

高翔 李晓龙 ◎ 参编



电子科技大学出版社

金属材料学应用与研究

崔兰芳 著



电子科技大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

金属材料学应用与研究 / 崔兰芳著. —成都: 电子科技大学出版社, 2016.4

ISBN 978-7-5647-3550-0

I. ①金… II. ①崔… III. ①金属材料—研究 IV. ①TG14

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2016) 第 075759 号

金属材料学应用与研究

崔兰芳 著

出版: 电子科技大学出版社(成都市一环路东一段 159 号电子信息产业大厦 邮编: 610051)

策划编辑: 谭炜麟

责任编辑: 谭炜麟

主 页: www.uestcp.com.cn

电子邮箱: uestcp@uestcp.com.cn

发 行: 新华书店经销

印 刷: 四川经纬印务有限公司

成品尺寸: 185mm×260mm 印张 9.75 字数 240 千字

版 次: 2016 年 4 月第一版

印 次: 2016 年 4 月第一次印刷

书 号: ISBN 978-7-5647-3550-0

定 价: 58.00 元

■ 版权所有 侵权必究 ■

- ◆ 本社发行部电话: 028-83202463; 本社邮购电话: 028-83201495。
- ◆ 本书如有缺页、破损、装订错误, 请寄回印刷厂调换。

目 录

第 1 章 金属环件与金属热加工引论	1
1.1 金属环件短流程铸辗复合精确成形工艺的研究现状	2
1.2 金属热加工过程微观组织演变的研究进展	7
1.3 元胞自动机法	21
1.4 晶粒长大 CA 模型	28
1.5 动态再结晶 CA 模型	38
第 2 章 强化机制的表象学分析	60
2.1 陶瓷增强体与金属基体的协同效应	60
2.2 DRMMCs 强化机制分类	63
2.3 基体强化的表象学研究——物理强化效应	64
2.4 复合材料强化的表象学方法——力学强化效应及表征	67
2.5 增强粒子断裂的临界条件	70
2.6 DRMMCs 物理强化机制	77
第 3 章 显微结构的表象学研究	80
3.1 颗粒和短纤维增强金属基复合材料组织的表象分析	80
3.2 等强度分析方法和增强体的特征参量	82
3.3 增强体分布的数学特征	85
3.4 增强体的力学强化因子	90
3.5 残余应力效应及初始流变应力分析	92
3.6 物理强化和力学强化机制的关系	95
第 4 章 力学性能预测与评估	97
4.1 同分布比拟与弹性模量预报	97
4.2 断裂应变	103
4.3 比例极限	107
4.4 屈服极限	109
4.5 极限强度	112



第 5 章 钢铁中的合金元素研究	116
5.1 概述	116
5.2 铁基固溶体	117
5.3 合金元素在晶体缺陷处的偏聚	120
5.4 合金元素对层错能的影响	122
5.5 钢铁中的化合物	123
5.6 合金元素对 Fe-Fe ₃ C 相图的影响	129
5.7 合金元素对钢在加热时转变的影响	132
5.8 合金元素对过冷奥氏体转变的影响	136
5.9 合金元素对淬火钢回火时转变的影响	145
参考文献	152



第 1 章 金属环件与金属热加工引论

装备制造业是为国民经济发展和国防建设提供技术装备的基础性、战略性产业，其发展水平体现了一个国家的工业化水平和国际竞争力。面向我国产业转型升级和战略性新兴产业发展的迫切需求，统筹经济建设和国防建设需要，大力振兴装备制造业并培育高端装备制造业，使其向智能化、绿色化、服务化进一步发展，是提升我国产业核心竞争力和实现我国由制造业大国向强国转变的必然要求。因此，我们应立足于装备制造业现有技术积累和制造能力，着力提升自主创新能力，逐步实现装备制造关键技术的突破。

环形零件作为各种重大装备中应用非常广泛的关键基础零件，在装备制造业和工业领域中具有非常重要的地位。根据国务院 2012 年发布的《“十二五”国家战略性新兴产业发展规划》，针对我国高端装备制造业，将大力发展现代航空装备、卫星及应用产业，提升先进轨道交通装备发展水平，加快发展海洋工程装备，做大做强智能制造装备。然而，国家工业和信息化部于 2012 年发布的《高端装备制造业“十二五”发展规划》中指出，我国轨道交通装备产业关键核心零部件研发基础薄弱，产业研发能力不强，缺乏深入系统的理论研究，难以满足主机发展的需要，还未完全摆脱对国外核心技术和关键零部件的依赖。将重点开展与高速铁路客车、重载铁路货车、新型城市轨道交通装备等配套的轮轴轴承等核心零部件的研发和制造，提高质量水平，满足整机配套需求。这充分说明随着轨道交通装备、航空装备及国防军事装备等高科技领域近年来的迅猛发展，重大装备对环形零件特别是大型环件如轴承套圈和风电法兰等（图 1-1）的需求和要求显著提高。

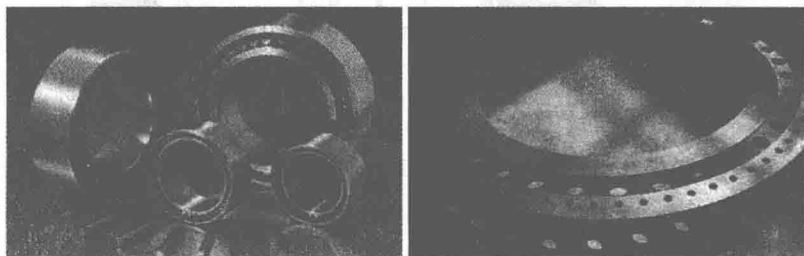


图 1-1 环形零件

目前我国大型环件的研发和制造还处在起步阶段。大型环件的工艺设计仍然主要

依赖于工程师经验,不能充分发挥现代科学技术在其中的作用,产品的安全性、可靠性和使用寿命等与发达国家相比仍存在一定差距。而且,传统环件加工工艺流程相对冗长,镦粗、冲孔等工序中材料浪费比较严重,其中热加工工艺需要多次加热,能源消耗比较大。与此同时,随着信息科学发展的不断推进,数值模拟技术已开始应用在大型环件成形工艺的研究中,通过仿真、分析、计算等手段,工艺设计速度显著提高,生产成本和能耗也明显降低。但是现阶段的数值模拟手段侧重于宏观场量的计算,对成形过程中微观组织演变的精确模拟相对薄弱。而在大型环件制造过程中,微观状态下存在的不合理因素恰恰是导致宏观性能不合格的主要原因。因此,制定合理的环形零件加工工艺,建立环形零件成形过程的微观组织预报方法,并在此基础上实现节约能源、降低成本、加快生产和提高经济效益的目的,已成为环形零件成形工艺和成形质量控制亟待解决的问题。

1.1 金属环件短流程铸辗复合精确成形工艺的研究现状

1.1.1 金属环件短流程铸辗复合精确成形工艺

环件的辗扩工艺作为借助辗环机生产环形零件的先进制造技术,是其他生产工艺无法替代的,其通过使环形坯料在成形辊的压力作用下产生连续局部塑性变形,实现壁厚减小、直径扩大、截面轮廓成形。该工艺适用于生产各种形状和尺寸的无缝环形零件,具有加工设备吨位小、加工产品范围广、产品生产质量好等特点,已成为现在环形零件加工中普遍采用的工艺方法。

传统环形零件生产流程如图 1-2 所示,具体包括冶炼、浇注钢锭、钢锭开坯与初锻、锯床下料、镦粗、冲孔、热辗扩,以及热处理和机加工。

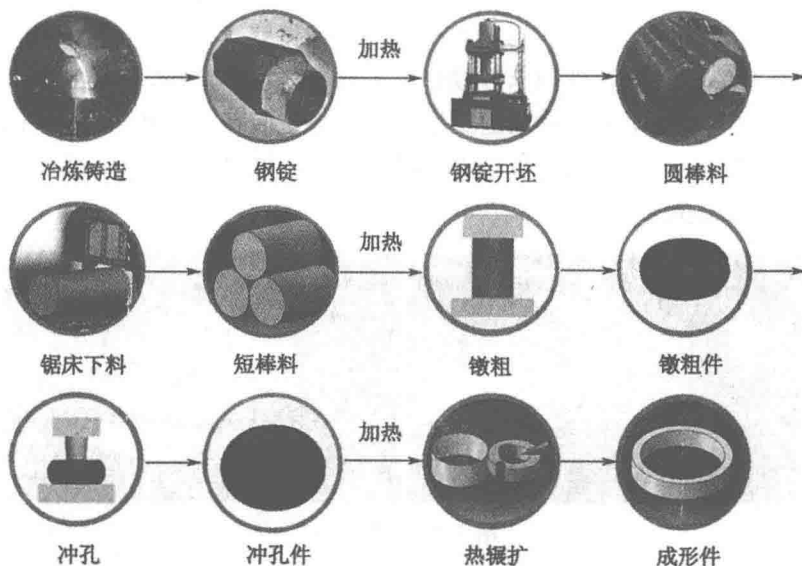


图 1-2 传统环形零件生产流程

这种工艺的加工步骤相对烦琐, 镟粗和冲孔工序中耗费材料较多, 整个工艺流程中工件需要多次加热, 能源消耗大, 多次加热产生的氧化皮会造成材料的浪费并影响成形质量, 这将严重阻碍我国发展绿色装备制造产业、智能装备制造产业, 且不利于国家工业节能减排和低碳制造目标的实现。由此可见, 开发环形零件特别是大型环件的成形新工艺并研究其基础理论, 降低生产成本, 提高生产率, 降低材料和能源消耗, 减少排放量, 是提升产品性能和质量的必然趋势, 具有重要的理论意义及实用价值。

针对传统工艺中加热次数多、能源消耗大和排放量高等缺点, 在国家自然科学基金重点项目和国家自然科学基金项目的资助和支持下, 国内学者提出了一种金属环件短流程铸辗复合精确成形新工艺 (metal ring short flow process blank-casting and rolling compound precision forming new process), 如图 1-3 所示。

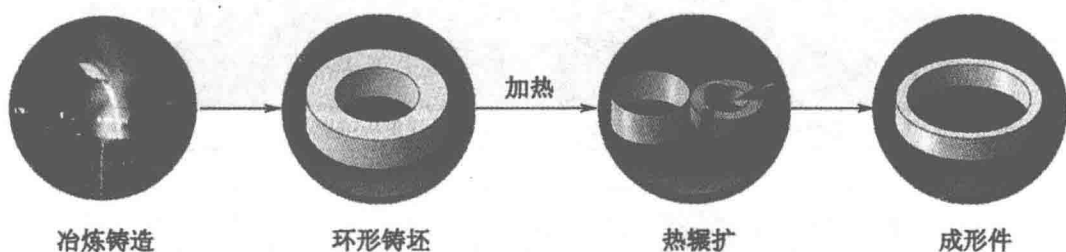


图 1-3 金属环件短流程铸辗复合精确成形新工艺流程

该工艺生产流程短, 制造工序少, 将环形铸坯直接辗扩成环形零件, 基本流程为铸造环坯、加热、热辗扩成形、热处理和机加工。新工艺与传统工艺相比具有以下主要优势。

1. 工艺流程短

新工艺将环形铸坯直接辗扩成环形零件, 将传统工艺中的镟粗工序和冲孔工序移除, 并将两次加热工序缩减, 从而缩短了工艺流程, 节省了人力和物力的投入。

2. 材料消耗少

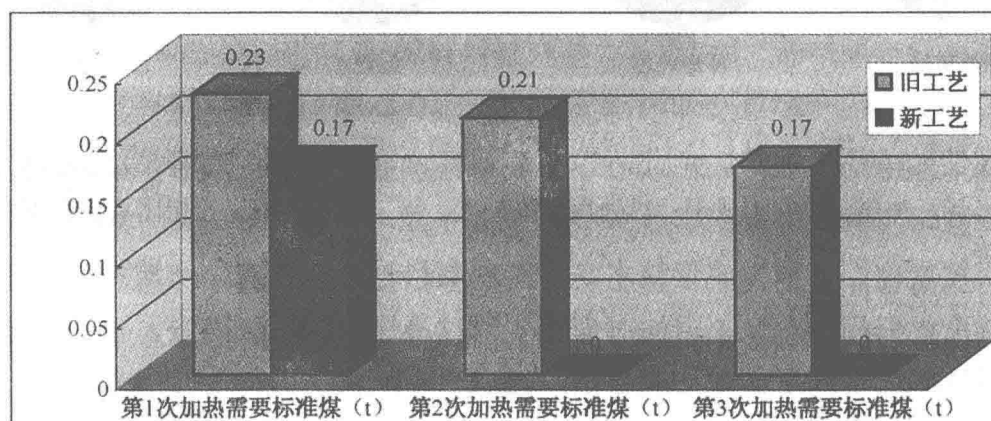
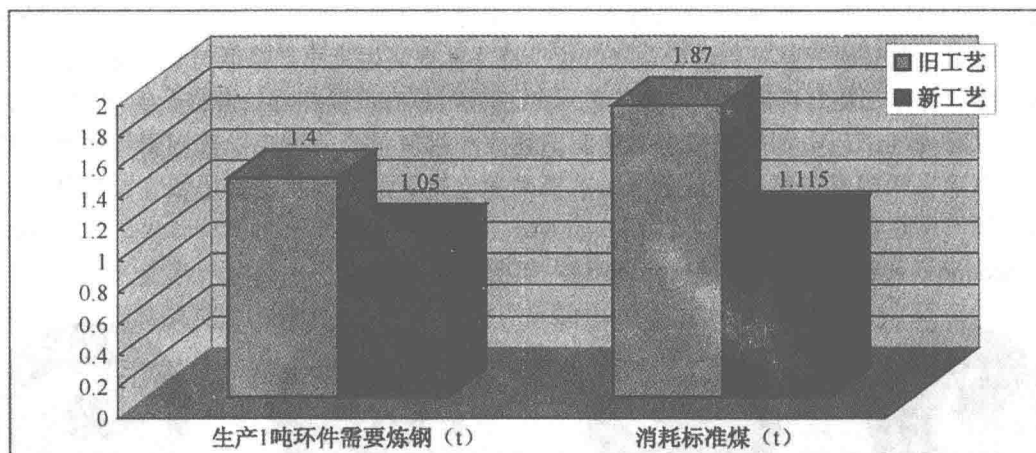
新工艺移除了传统工艺中的冲孔工序, 对环形铸坯直接进行加工。因此, 相比于传统工艺必然造成的冲孔废料, 新工艺只存在氧化皮损失。以直径为 1.5m 的环件为例, 根据该工艺锻坯冲孔孔芯直径的不同, 可节约材料 30% ~ 40%。而且, 新工艺在铸造环坯时可将机加工的废料重熔后循环使用, 进一步减少材料消耗。

除此以外, 加热对材料也造成一定的消耗。通常第一次加热将消耗材料的 2% ~ 3%, 第二次加热将消耗材料的 1.5% ~ 2%, 以此类推, 意味着加热次数越多, 材料消耗越大。通过缩减材料的两次加热和镟粗工序, 可以节约材料 3% ~ 4%。

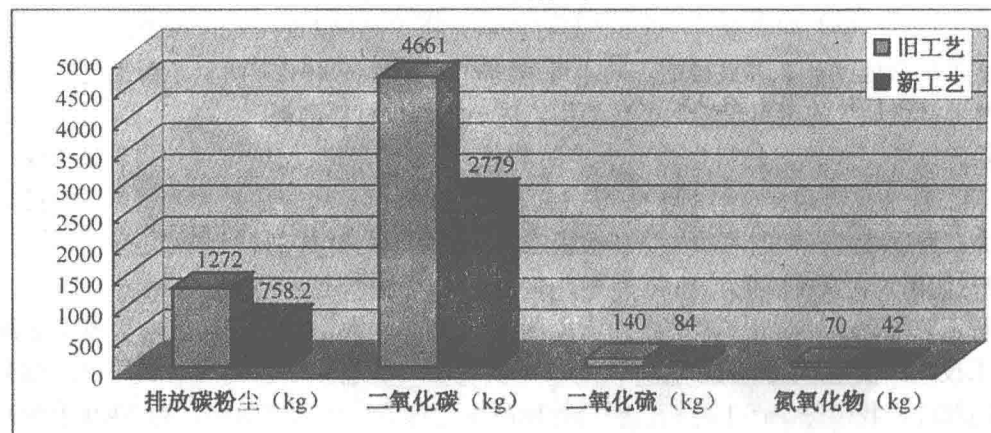
3. 能源消耗及排放低

新工艺缩减了环形坯料的两次加热, 降低了加热损耗, 减少了排放, 节省了能源和人工投入, 使生产效率得以提升, 有助于实现装备制造业绿色化的发展需求。据有关部门统计, 我国每生产 1 吨钢, 折合为标准煤 (每千克标准煤的热值为 7000 千卡) 需要 0.6 ~ 1.0 吨。另据专家统计, 钢锭从室温 25℃ 加热到 1250℃, 每吨约需 450 度电, 折合标准煤 0.18 吨。因此, 每节约 1 度电, 就节约 0.4 千克标准煤。相应地, 每节约

1 度电, 就减少污染排放 0.272 千克碳粉尘、0.997 千克二氧化碳、0.03 千克二氧化硫和 0.015 千克氮氧化物。生产 1 吨坯件, 传统工艺与新工艺的能源消耗和排放对比如图 1-4 所示。



(a) 能源消耗对比



(b) 排放对比

图 1-4 坯件热扩生产传统工艺与新工艺能源消耗和排放对比

如图 1-4 所示,新工艺无论能源消耗还是排放都远低于传统工艺。在冶炼和加热工序中,传统工艺能源消耗总量为 1.87 吨,排放总量为 6143 千克;新工艺能源消耗总量为 1.115 吨,排放总量为 3633.2 千克。新工艺比传统工艺节约能耗和减少排放约 41%。

4. 设备投资少

新工艺加工工序为铸造坯、加热、热辗扩成形、热处理和机加工,相比于传统工艺,锻坯工序和冲孔工序被移除,相应的液压机、锻锤等设备就省掉了。由此,节省了投资并降低了动力消耗。

综上所述,金属环件短流程铸辗复合精确成形工艺作为一种全新的工艺技术,具有高效、节材、节能减排、经济等特点,尤其适用于大型环件的生产,发展潜力巨大,应用前景广阔。同时,该工艺是集三维连续渐变、非对称、非稳态、宏微观耦合与热力耦合等特点于一体的高度非线性问题,材料在该过程中控形和控性并重,经历多场、多因素耦合作用下复杂、多道次局部加载与卸载、不均匀塑性变形和微观组织演化历程,这使得传统的经验模型或唯象数学模型不足以描述该过程的微观组织演变。

在铸辗复合成形过程中,环件的宏观力学性能主要由微观组织决定。在奥氏体再结晶温度以上的热变形过程中和变形之后,微观组织将发生动态回复、动态再结晶、静态回复、静态再结晶、亚动态再结晶和晶粒长大。晶粒尺寸主要由变形及冷却过程的温度、应变和应变速率决定,这使得金属的成性比成形更关键。由此,控制铸辗复合成形过程中的变形温度、应变和应变速率就成为调控成形/成性的重要手段。同时,铸辗复合成形作为一种连续局部回转塑性成形技术,其宏观变形过程和微观组织演变同时进行。然而仅采用微观模拟方法对宏观变形过程进行描述不充分,仅采用有限元方法则不能揭示出环件辗扩微观组织演变的机理。因此,从宏观和微观角度同时描述铸辗复合成形过程对预报和成形/成性一体化调控环件铸辗复合成形全过程具有重要的科学意义和推广应用价值。

1.1.2 国内外研究现状

应装备制造业向智能化、绿色化、服务化发展的需求,金属材料的微合金化方法、特殊钢在线软化处理、特殊钢析出物和夹杂物控制等新技术的不断涌现,以及计算机和信息等相关科学领域的快速发展,不仅为钢铁材料的加工与成形提供了科学理论和技术支持,而且为其提供了先进的控制手段和研究方法,从而为钢铁材料的改进和创新提供了有效保障。

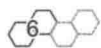
近年来,国内外学者针对不断涌现的材料加工成形新工艺进行了大量的探索,并已将相关成果初步应用于一些小型零件的生产中。铸锻复合成形工艺具有与连铸连轧工艺相似的特点,巧妙地把铸造和锻压两种工艺结合起来,可大大缩短工艺流程,降低生产成本,提高生产效率,改善劳动条件。

高质量的铸坯是实现环件短流程铸辗复合成形新工艺的先决条件。近年来,铸造工艺的高速发展为新工艺提供了研究基础。在环形铸坯离心铸造理论与工艺方面,国内外学者进行了许多卓有成效的工作。早在 1809 年英国人 Erchart 首先获得了离心铸

造工艺专利。2005-2008年,俄罗斯的 Zherebtsov 等提出了电磁离心铸造制造法兰的方法,实验表明环形坯件利用离心铸造生产,通过恰当的塑性加工和热处理可以获得更好的机械性能。2004年清华大学符寒光、西安交大邢建东等结合铸型的变速冷却技术,利用变速离心铸造、变流量浇注,改善了轧辊温度场与应力场的分布,消除了离心铸造高速钢乳辊出现的裂纹。在环形铸坯砂型铸造理论与工艺方面,1994年英国的 Clyne 等认为液态金属在凝固时的固液两相区可分为准固相区和准液相区,由此为铸件裂纹的研究提供了一定的理论依据。2009年南京航空航天大学刘小刚等提出了落砂温度的降低能有效地改善铸件的不均匀变形,下端温度梯度的增加能有效地缓解热裂倾向。在传统铸造工艺理论分析和数值模拟的基础上,2014年太原科技大学李永堂等研究了高质量环坯冶炼与铸造工艺,确定了型砂配方与冶炼铸造的一系列工艺参数,指明提升冶炼温度、降低浇注温度、限定浇注速度、混入冷铁等手段可有效控制铸件凝固过程、消除铸造缺陷,最终保障铸件质量。

在凝固过程晶粒细化方面,2005年法国的 Gavard 等研究了高洁净钢的再结晶和晶粒生长理论。2006年日本京都大学牧正志教授对细化钢铁材料晶粒的原理和方法进行了深入研究,并指出利用钢液超速冷却技术可以明显细化晶粒。2005年大连理工大学冯伟骏等研究了功率超声对铅锡合金凝固过程的影响,指出声空化效应和声流效应可使含铅 5% 的铅锡合金的凝固组织明显细化,在一定的超声功率范围内,随着功率的增加,合金组织的细化程度逐步提高。2008年清华大学黄天佑等提出模拟铸件铸造过程的 FDM/FEM 集成系统,使用接触单元处理铸件/铸型间的相互影响,并实现了温度场/应力场的相互作用。2010年清华大学李文胜等确定了大型铸钢件砂型热物性参数,并得出结论,优化设计铸件冷铁有利于补缩,可防止缩孔缩松。2009年沈阳理工大学张玉妥等采用相场方法获得了具有二次分枝的枝晶形貌,再现了枝晶的生长过程以及枝晶臂之间的竞争,预测了 Fe-0.5md%C 合金等温凝固枝晶生长过程中的溶质分布和微观偏析。众多学者对晶粒细化的原理、方法进行的深入研究,为环形铸坯铸造工艺的研究提供了思路。

环件辗扩是一种连续的体积成形技术,是环形零件生产不可替代的先进成形制造技术。国内外学者在环件辗扩成形工艺的基础理论、数值模拟和实验研究方面做了大量的工作。1991年韩国的 Yang 等研究了环件乳制的平面变形,得出了变形金属的速度场、沿接触表面方向的外力,分析出应变速率分布、驱动转矩和垂直压力分布。2003年 Forouzana 等将热力耦合方法引入了对辗扩过程的数值模拟。1994-2009年,武汉理工大学华林等对环件冷辗扩时的力学原理、辗扩条件、变形和成形规律及过程控制做了系统的研究,揭示了环件轧制成形原理和普遍规律,并运用连续速度场上限法获得了环件辗扩时的力和力矩的计算公式。2005-2010年,西北工业大学杨合等对环件热辗扩进行了研究,模拟分析了热辗扩过程中温度场和应变场的分布特征,研究了辗扩参数对成形的影响规律及热辗扩过程传热、变形和微观组织演变机理。近年来,铸造工艺快速发展使得制造出符合环件铸辗复合成形要求的高质量铸坯成为可能。然而目前环件辗扩成形主要考虑锻坯辗扩工艺参数对环件尺寸精度的影响,对铸坯的环件辗扩成形工艺及理论的研究还比较少,对辗扩过程中环件微观组织演变机理和规



律的研究基本空白。

铸坯环件辗扩成形过程中环件组织细化、成分均匀化是环件短流程铸辗复合成形新工艺要解决的关键问题之一。一直以来,国内外学者对锻态组织热变形过程中组织演变机理进行了大量的研究,得到了变形参数对金属组织演变的影响规律,实现了锻态组织热加工过程晶粒细化及生长的预测和控制方法。2009年蔺永诚等对锻态 42CrMo 合金的热变形行为进行了系统的研究,得出了该材料的应力应变曲线、变形温度、变形的速度、变形的程度等对动态再结晶、亚动态再结晶以及静态再结晶的影响规律及数学模型,但未对铸态组织在热加工过程中的变化及其再结晶机理和规律进行研究。2013年 Ibrahim 等采用压缩实验研究了铸态和热处理态 Ti-6.55Al-3.41Mo-1.77Zr 合金微观组织和力学性能。卜乐平等为提高铸态 Mg-Al-Ti-B 合金显微结构的均匀性和密实度,采用光学显微镜、扫描电子显微镜、X 射线衍射和力学性能测试研究了 B_2O_3 对铸态 Mg-Al-Ti-B 合金显微组织与力学性能的影响。上述研究为轴承钢铸态组织热变形行为及组织演变规律的研究提供了可借鉴的方法。然而环件短流程铸辗复合成形新工艺需要其铸态组织通过一次加热的多次辗压达到“控形”和“控性”的双重目的,因此研究铸态组织在一次加热多次小量变形时的热力学行为和组织演变机理就非常必要。

1.2 金属热加工过程微观组织演变的研究进展

1.2.1 热加工过程微观组织演变研究与发展

对于环形零件来说,热辗扩作为一种先进的连续局部回转塑性成形技术,是目前生产大型环件的首选加工工艺。热辗扩过程在奥氏体再结晶温度以上的热变形过程中和变形之后,金属材料的微观组织将出现动态回复、动态再结晶、亚动态再结晶、静态回复、静态再结晶、晶粒长大。当确定了材料成分时,晶粒的尺寸主要通过变形、温度、应变、应变速率确定。而通过对热辗扩过程中晶粒的大小进行控制,可以使晶粒细化均匀,从而有效地提升产品的性能。因此,定量研究金属微观组织的演变过程对提高产品性能和质量就至关重要。

迄今为止,金属热成形领域的微观组织演变数值模拟研究主要针对碳钢和低合金钢的轧制和锻造过程,针对环件热辗扩成形过程的研究相对不足。

自 1966 年在英国 Sheffield 召开第一届国际热加工会议以来,国内外许多学者从软化机理、热加工中微观组织性能的预报和控制以及组织模拟等方面进行了大量研究。

1979 年,英国 Sheffield 大学的 Sellars 等提出在乳制过程中金属和合金的组织变化特征可用组织模拟模型描述。在 1939 年 Avrami 等提出的 Avrami 方程基础上,首次对微观组织演变进行了定量描述。用有限差分法对 C-Mn 钢板材的微观组织演化进行了数值模拟,建立了比较全面的动态再结晶预测模型。基于 Avrami 方程提出的动态再结晶动力学模型如下所示:



$$X_{\text{drx}} = 1 - \exp\left(-0.693\left(\frac{t}{t_{0.5}}\right)\right) \quad (1.1)$$

式中, X_{drx} 为动态再结晶百分数, t 是时间, $t_{0.5}$ 表示动态再结晶为 50% 时的时间, 常数 0.693 的确定使模型中的变量具有了明确的物理意义。

1986 年, Yada 等针对 Mn 含量少于 1% 的 C-Mn 低碳钢, 建立了环轧过程中微观组织演变的半经验数学模型 (包括动态再结晶、静态再结晶、晶粒尺寸模型和相应再结晶动力学模型), 并提出了一种分析微观组织演变的经验公式:

$$X_{\text{drx}} = 1 - \exp(-0.693(\frac{\varepsilon - \varepsilon_c}{\varepsilon_{0.5}})^2) \\ \varepsilon_{0.5} = 1.144 \times 10^{-3} d_0^{0.28} \dot{\varepsilon}^{0.05} \exp(\frac{6420}{T}) \quad (1.2)$$

式中, ε_c 为发生动态再结晶的临界应变, $\varepsilon_{0.5}$ 表示动态再结晶为 50% 时的应变, d_0 为初始晶粒尺寸, $\dot{\varepsilon}$ 是应变速率, T 为变形温度。Yada 模型创造性地以应变作为变量, 因此特别适用于模拟非线性稳态的热变形过程, MARC、DEFORM、SUPERFORM 等有限元软件平台提供了与该模型的交互接口。

1987 年, 德国 Aachen 大学的 Kopp 等首次将微观组织演变模型引入非稳态锻造过程, 并通过有限元软件的二次开发, 对二维热锻粗这样的非稳态锻造的动态再结晶过程进行了数值模拟。其动态再结晶动力学模型如下:

$$X_{\text{drx}} = 1 - \exp(-k_d(\frac{\varepsilon - \varepsilon_c}{\varepsilon_{0.5}})) \\ \varepsilon_{0.5} = k_1 Z^{n_1} \quad (1.3)$$

式中, k_d 、 k_1 和 n_1 是待定参数, Z 表示应变速率和温度之间的关系。

1991 年, 加拿大 McGill 大学 Jonas 等通过热力模拟曲线确定的内变量进化方程来调整 Avrami 方程中的参数, 用来预测低碳钢在高温不同应变率下的流变应力行为。1995 年, 美国 Shivpuri 等针对高温 Waspaloy 合金二维锻粗过程, 通过参数优化的 Kopp 再结晶动力学方程对其建模, 并预测了其再结晶以及晶粒长大过程。1997 年, 英国剑桥大学 Saito 等利用 Kohnogorov-Johnson-Mehl-Avrami (KJMA) 方程对热加工过程的微观组织进行了描述和预测。KJMA 方程如下:

$$X_{\text{drx}} = 1 - \exp[-\int_0^t J(t') V(t, t') dt'] \quad (1.4)$$

式中, $J(t')$ 是时间 t' 是时的形核率, $V(t, t')$ 表示时间 t 和稳定核形成时间 t' 时的体积, $\int_0^t J(t') V(t, t') dt$ 为扩展体积。

2002 年, 加拿大 Concordia 大学 Mcqueen 等采用 Avrami 方程对比不同奥氏体不锈钢 (包括铸钢、锻钢等) 的微观组织结构, 发展了动态再结晶理论。2005 年, 东北大

学金文忠和王磊等建立了模拟再结晶过程的二维元胞自动机模型,发现网格规模与邻居关系对再结晶动力学的 Avrami 指数 n 几乎没有影响,采用交替 Moore 型邻居关系得到的最终组织与真实组织更加接近,位置过饱和形核得到的再结晶晶粒尺寸比恒定速率形核的晶粒尺寸更均匀。2012 年,上海交通大学陈睿恺和顾剑锋等通过定量金相法研究了 $30\text{Cr}_2\text{Ni}_4\text{MoV}$ 低压转子钢,实验拟合得到表征珠光体转变动力学 Avrami 方程,在此基础上绘制了低压转子锻后热处理以及性能热处理的珠光体等温转变的 TTT 曲线。2005 年,山东大学王广春等基于 Yada 模型,构建了锻造过程的微观组织演变优化模型,并基于遗传算法开发出优化软件,发现摩擦因素显著影响成形后微观组织晶粒度分布的均匀性与细小化,优化工艺因素在一定程度上可以控制最终锻件的微观组织晶粒度分布。2006 年,韩国的 Yeom 等在 Yada 模型的基础上,采用 DEFORM 进行了 718 钢锭开坯过程的微观组织演变模拟,发现 $\delta 444\text{S-phase}$ (Ni_3Nb) 的溶解温度对 718 钢锭起到重要作用。

以上研究主要是通过提出的经验或半经验公式对金属热加工领域的微观组织演变进行分析和数值模拟,对研究热成形工艺和工件内部质量间的关系具有重要意义。除此以外,内变量法 (Internal State Variable Method) 因其能反映变形过程中微观组织演变机理的独特优势,已逐渐受到国内外学者的重视。

2000 年, Sellars 等提出了能预测位错密度、亚晶尺寸、亚晶位相差等内变量的模型,并研究了不同热变形条件下的再结晶行为。2008 年,韩国 Pohang 科技大学 Lee 等以 Orowan 增强方程为基础,提出了基于位错密度的单晶体内变量本构模型 (SCCE-D)。2011 年,西北工业大学杨合等首次提出了基于内变量理论和自洽法的本构方程,并用此方程描述了两相钛合金微观组织演变。2013 年,王哲君等在位错增殖动态理论、统一粘塑性理论的基础上,提出了描述不连续屈服、下屈服点后存在轻微应变硬化、动态再结晶等变形特性的内变量本构模型。

1.2.2 介观尺度微观组织模拟方法的研究进展

计算材料科学 (Computational Materials Science, CMS) 是 20 世纪 80 年代发展起来的一门跨材料科学、物理学、计算机科学、数学、化学以及机械工程等学科的新兴学科分支。该学科在世界范围内并没有统一的名称,在欧洲和中国被称为 “Computational Materials Science”, 在美国被称为 “Computer-based Analysis and Modeling”, 在日本则被称为 “Materials Design”。它运用固体物理理论、理论化学和计算机算法来研究现代材料科学中一些实验研究有困难的课题。

现代材料科学有实际研究表明:材料性质并非一成不变地依赖于材料的化学组分,而在很大程度上还取决于材料的微结构。不仅对材料物性的分析,而且对其性能的特征,都需要深入到微观层次,如原子级水平 (Atomically Level)。由此,计算材料科学的研究按照对象的空间尺度不同划分为三个层次:宏观层次 (Macroscopic Level) 针对材料的宏观几何尺寸,主要研究其加工和力学性能;介观层次 (Mesoscale Level) 典型尺度约在 $1\mu\text{m}$ 量级,这时材料被看成连续介质,对应于晶粒尺寸大小的晶格缺陷系

统，不考虑其中单个原子、分子的行为；微观层次（Microscopic Level）的空间尺度约在 $1\mu\text{m}$ 量级，对应小于晶粒尺寸的晶格缺陷系统，是原子、电子层次。

针对不同的空间尺度，采用的模拟方法不尽相同。不同空间尺度和模拟方法见表 1-1。宏观尺度范围为毫米以上，其行为主要表现为材料在加工过程中的塑性变形行为、弹性变形行为、断裂行为、物理场及其变量的变化等。现阶段适合材料宏观行为模拟的商业软件主要有：美国 ANSYS 公司开发的 ANSYS 软件注重应用领域的拓展，覆盖流体、电磁场和多物理场耦合等十分广泛的研究领域；法国 Dassault 公司开发的 ABAQUS 软件集中于结构力学和相关领域研究，适用于解决非线性问题，致力于解决该领域的深层次实际问题；美国 SFTC 公司的 DEFORM-2D/3D 在分析金属成形及其相关工业的各种成形工艺和热处理工艺时操作简便等。介观尺度介于微观尺度和宏观尺度之间，又称细观尺度，范围从亚微米到丝米，其行为表现为材料显微组织的演变，包括金属凝固过程中的枝晶生长，这方面的模拟方法主要有相场法（Phase Field Model）、蒙特卡洛（Monte Carlo, MC）法、元胞自动机（Cellular Automata, CA）法。微观尺度范围从埃到几十纳米，可分为纳观（几分之一纳米到几十纳米的尺度）和物理微观（埃及小于埃的尺度）两个层次。其行为主要表现为材料在原子结构、电子结构、量子结构上的行为及变化，主要采用的方法是分子动力学（Molecular Dynamics, MD）、量子力学（Quantum Mechanics, QM）和蒙特卡洛（Monte Carlo, MC）法等。

下面主要介绍介观尺度微观组织模拟常见方法及其研究进展。

表 1-1 不同空间尺度和模拟方法

模拟尺度	尺寸范围	研究目标	模拟方法
宏观尺度	厘米 (10^{-2}m)	应力场、应变场、温度场、试件几何结构完整性评定等	边界元、有限元法、有限差分法
	毫米 (10^{-3}m)		
介观尺度	丝米 (10^{-4}m)	凝固、再结晶、相变、位错等	元胞自动机法、相场法、蒙特卡洛法等
	忽米 (10^{-5}m)		
	微米 (10^{-6}m)		
	亚微米 (10^{-7}m)		
微观尺度	10 纳米 (10^{-8}m)	原子聚集体断裂、纳米、晶体断裂扩散、位错分析、亚晶生长和简单晶格缺陷等	分子动力学、量子力学和位错动力学等
	纳米 (10^{-9}m)		
	埃 (10^{-10}m)		

1. 相场法

相场法是一种以 Ginzburg-Landau 唯象理论为基础的方法。该方法主要被应用在凝固过程、晶粒生长、固态相变、位错演化等方面的模拟研究中，扩散、有序化势和热力学驱动的综合作用经由微分方程来描述。相场法通常采用一组序参量对体系的瞬时状态进行描述。序参量包括保守场与非保守场。满足局域守恒条件的场变量组成的是保守场，不满足局域守恒条件的场变量组成非保守场。

相场法可以分成连续相场法与微观相场法。连续相场法突破了经典理论中相界必须为明锐界面的局限性，通过引入连续扩散界面层来描述相界，建立连续体相场动力学模型，可同时描述相场变化的全过程，但是不能处理原子层次上的结构问题。微观

相场法通过建立微观动力学模型来实现,用于描述相变过程中出现的各种现象。

国外早在1974年, Halperin 等提出的“ModelC”就包含了相场的思想。20世纪80年代初, Collins 等、Caginalp 等在“ModelC”的基础上将各向异性引入相场模型,提出了早期的相场模型,并发现当界面厚度接近零时,相场模型转变为尖锐界面模型。1983年, Fix 首次提出了相场模型的数值求解法,并对简单界面形状进行了一、二维计算。1993年, Kobayashi 在 Fix 数值求解相场法的基础上,采用各向异性相场模型最早为纯金属过冷熔体中出现的复杂形状枝晶生长进行了二维模拟,进而从二维模拟发展到三维模拟,获得了接近真实凝固组织的模拟结果,该结果引起了材料学界的兴趣。1996年, Karma 与 Rappel 提出相场模型在一定界面厚度下有效的 Gibbs-Thomson 关系,界面厚度可大于毛细长度的思想,从而建立了超过冷度范围模拟的新相场模型。1998年, Tonhardt 开始考虑相场模型中的流场,纯金属凝固时熔体的对流被简化为剪流,并基于此建立了相场模型来模拟剪流下枝晶的演化。2000年, Tong 和 Beckermann 在 Karma 模型基础上提出了考虑流场的相场模型,对强迫对流下流速、流向和各向异性强度对枝晶尖端推进速度和形态选择的影响进行了模拟。

国内2001年,西北工业大学于艳梅等利用相场法模拟过冷纯金属熔体枝晶生长的过程,发现热噪声可能促发侧向分支形成,但对枝晶尖端的稳态行为影响不大;随着各向异性的增加,枝晶尖端生长速度增大,但半径减小;在界面动力学系数减小且小于1的情况下,热扩散系数减小时,枝晶尖端生长速度减小,但相应的半径增大;当界面能趋于增大的枝晶尺度且界面在扰动下保持稳定时,界面能越大,侧向分支的形成趋势越小。2005年,华中科技大学龙文元等在研究 Ginzberg-Landau 理论的基础上,以 Al-6.5%Cu 合金为例,采用近似于 WBM 模型和 KKS 模型的新相场模型模拟了不同过冷度条件下二元合金凝固过程的等轴枝晶生长过程。他们发现过冷度的增大伴随枝晶的二次枝晶更加发达,浓度 Peclet 数和枝晶尖端的生长速率增大。2010年,兰州理工大学袁训锋等在 Wheeler 等提出的纯扩散相场模型基础上构建温度场、流场和溶质场多场耦合的相场模型,研究 Ni-Cu 合金凝固过程单晶粒枝晶及多晶粒枝晶在强制对流下的生长行为,发现熔体的流动能够明显改变凝固前沿的传热和传质,进而改变枝晶的生长行为。2013年,西北工业大学郑雪红等利用耦合应力的晶体相场法研究纳米晶在单向拉伸过程中的大角度和小角度晶界运动,发现小角度晶界上位错的运动使晶界消失,最终发生晶体合并;大角度晶界上曲率诱发晶界运动,伴随高能晶界消失和低能晶界生长。

由此可知,利用相场法建立数学模型进行数值模拟,从对纯金属的模拟发展为对多元合金的模拟,从对单相场的模拟发展为对多相场的模拟,从对无流场和溶质场的模拟发展为对流场和溶质场的模拟,一般采用有限差分法或有限元法求解,存在计算量过大的缺陷,对三维组织模拟具有较大的限制。虽然得到了大量与试验定性相一致的结果,但是在定量研究上还比较欠缺,数值误差较大,因此在相场模型的优化上还存在较大的提升空间。

2. 蒙特卡洛法

蒙特卡洛(Monte Carlo, MC)法又称随机模拟(Stochastic simulation),通过抓住

事物运动的几何特征和数量, 以一个概率模型为基础, 将模拟模型所描绘过程的试验结果作为问题的近似解, 因为它的某些统计参量是待求问题的解, 所以该方法更易被计算机实现。

伴随电子计算机的问世, MC 法以一种独立方法的形式于 20 世纪 40 年代中期被提出来, 并首先被应用于核武器的研制中。然而, 直到 20 世纪 80 年代初期, 美国 EXXON 研究组提出二维算法后, 该方法才引发国内外学者的热切关注并逐步应用于材料的晶粒长大、有序一无序转变等金属学和物理学仿真过程。1984 年, 美国 EXXON 研究组 Anderson 等首次提出了一个模拟二维晶粒长大过程的新型 MC 程序, 但没有真实地反映晶界的变化机理, 获得的正常晶粒生长指数误差较大。1992 年, Rollett 等提出了基于晶粒间相互作用能的 MC 法, 对由缺陷浓度最小值和晶粒边界能驱动的微观结构进行了模拟并获取了与实际较一致的结果。1994 年, Paillard 等通过二维网格 MC 法对铁硅合金的正常和异常晶粒的生长进行了模拟及验证。1994 年, Halldorsson 等提出了新的 MC 算法, 考虑了 MC 模拟时间和真实时间的线性关系, 通过该方法模拟获取两个修正模型, 其中一个用来限制最近邻晶粒的再取向, 另外一个用来将初始晶粒的取向数目增加为晶粒总数, 完全消除晶粒生长中的晶粒结合。1995 年, Radhakrishnan 等在前期研究基础上, 思考了焊接热影响区晶粒边界上存在的钉扎作用, 并得出了晶粒尺寸、模拟时间增量步与参数间的关系表达式。2006 年, Ivasishin 等提出了三维 MC 模型, 对多晶体材料再结晶和晶粒长大过程进行模拟, 重点研究初始晶粒组织结构、变形储能的空间分布及不同的形核机制对再结晶的影响。

国内 1997 年, 北京科技大学窦晓峰等通过 MC 技术对钢的静态再结晶及晶粒长大过程进行了模拟, 并考虑了不同形核储能下的形核机制。1998 年, 北京科技大学宋晓艳和刘国权等提出了一种改进的 MC 算法, 限定 MC 中微单元再取向的可能性, 并通过微单元取向组态能量变化确定重取向概率, 能更准确地体现微单元取向更换过程和理想的稳态晶粒长大特征, 大幅度提高了模拟效率。2005 年, 东北大学何雪法等提出了考虑细观短裂纹阶段的生长随机性的新型 MC 模型, 可视化再现了短裂纹群体萌生、扩展、干涉等的物理过程, 并研究了裂纹数密度分布现象及短裂纹的不定性问题。2010 年, 山东大学的王丽君和关小军等对目前材料动态再结晶过程介观组织模拟的 CA 模型和 MC 模型这两种常见模型的研究进展进行了分析, 指出现有 MC 模型存在再结晶驱动力及形核模型的设定与实际情况有偏差, 以等轴晶取代变形晶不能反映再结晶过程晶粒形状连续变化等问题, 并提出了解决思路。

研究表明, 基于 MC 法的材料动态再结晶介观组织模拟主要针对二维晶粒、三维晶粒的生长过程, 并从中得到难以从解析方程中获取的晶粒生长拓扑学和动力学信息。然而, 近几年来 MC 模型研究相对 CA 模型研究发展滞后, 这主要是 MC 方法本身所存在的再结晶驱动力及形核模型的设定与实际情况有偏差, 以等轴晶取代变形晶不能反映再结晶过程晶粒形状连续变化等问题造成的, 因此, 研究其存在的问题并找准解决途径至关重要。

3. 元胞自动机法

元胞自动机 (Cellular Automata, CA) 法, 又称细胞自动机法, 最早由数学家