

制 · 造 · 业 · 高 · 端 · 技 · 术 · 系 · 列

铝及铝合金铸轧 成形与裂纹扩展



南昌航空大学学术文库

刘晓波 著

 机械工业出版社
CHINA MACHINE PRESS

制造业高端技术系列
南昌航空大学学术文库

铝及铝合金铸轧成形与 裂纹扩展

刘晓波 著



机械工业出版社

本书系统地研究分析了铝及铝合金铸轧成形与裂纹扩展规律及其影响因素。本书主要内容包括绪论、基于元胞自动机的铝铸轧微观数值模拟、基于有限元的铝铸轧成形过程数值模拟、基于损伤力学的铸轧辊辊套疲劳寿命研究、基于有限差分的铸轧过程铸嘴型腔流动数值模拟、铝铸轧试验研究、基于分子动力学的铝及铝合金裂纹扩展数值模拟、基于有限元的铝合金细观结构响应及裂纹扩展数值模拟、铝合金高温塑性变形条件下的变形机制。本书内容对研究铝及铝合金的铸轧成形与裂纹扩展,从而获得高质量的铝及铝合金产品具有较强的指导作用。

本书可供冶金、材料等领域从事铝及铝合金加工的工程技术人员使用,也可供相关专业的在校师生参考。

图书在版编目(CIP)数据

铝及铝合金铸轧成形与裂纹扩展/刘晓波著. —北京:机械工业出版社, 2018. 10

(制造业高端技术系列)

ISBN 978-7-111-61111-0

I. ①铝… II. ①刘… III. ①铝-铸造-研究②铝合金-铸造-研究
IV. ①TG292

中国版本图书馆CIP数据核字(2018)第233386号

机械工业出版社(北京市百万庄大街22号 邮政编码100037)

策划编辑:陈保华 责任编辑:陈保华 杨璇

责任校对:王明欣 封面设计:马精明

责任印制:常天培

北京圣夫亚美印刷有限公司印刷

2019年1月第1版第1次印刷

169mm×239mm·14印张·265千字

标准书号:ISBN 978-7-111-61111-0

定价:89.00元



凡购本书,如有缺页、倒页、脱页,由本社发行部调换

电话服务

服务咨询热线:010-88361066

读者购书热线:010-68326294

010-88379203

策划编辑:010-88379734

封面无防伪标均为盗版

网络服务

机工官网:www.cmpbook.com

机工官博:weibo.com/cmp1952

金书网:www.golden-book.com

教育服务网:www.cmpedu.com

前言

随着世界经济和科学技术的发展,铝已成为仅次于钢铁的第二大金属。双辊铸轧技术具有生产工艺简单、生产周期短、生产成本低等优势而成为国内外铝工业中的一种主要生产方法。铝双辊超薄快速铸轧技术以其铸坯组织晶粒细化、较少的偏析、优良的力学性能以及高的生产率等特点而成为当今冶金科技的前沿技术之一。由于铸轧过程熔体流动和凝固传热更加复杂,铸坯质量的控制难度增加,铸轧工艺参数的可调范围减小,铸轧工艺参数的合理匹配已成为制约实现快速超薄铸轧,获得高质量铸坯的一个关键问题。高性能铝合金具有高的室温强度和良好的综合力学性能,已广泛应用于航空、国防、高铁等领域。由于高强铝合金在锻造变形过程中温度不均匀产生裂纹等缺陷,严重影响了铝合金的质量,因此,研究高强铝合金裂纹等缺陷的产生机理,确立抑制成形过程组织缺陷的调控方法,对于获得高质量铝合金具有重要的意义。

本书系统地研究分析了铝及铝合金铸轧成形与裂纹扩展规律及其影响因素。基于元胞自动机法(CA),采用LGK模型模拟了晶粒生长的动态演变,用基于正态分布的形核模型和KGT生长模型,对铝铸轧凝固过程中晶粒的生长及微观组织的形成进行了模拟,模拟结果有助于从理论角度解释微观组织中出现枝晶间偏析、点偏析及微观缩松等缺陷的形成原因。基于有限元法(FEM),建立了铝铸轧过程整体模型,分析了铸轧参数对铸轧过程的影响。基于损伤理论,研究了辊套疲劳寿命预估。基于有限差分法(FDM),建立了铸嘴的流动模型,分析了铸轧参数对铸嘴型腔熔体流动、出口速度及出口温度的影响。通过水模试验及铸轧过程试验验证了模拟的有效性。基于分子动力学法(MD),采用嵌入原子势法(EAM),模拟了铝裂纹扩展行为,从裂纹扩展图观察到裂纹扩展的变化情况:裂纹尖端钝化、子裂纹的产生、孔洞的生成及长大过程以及裂纹和孔洞的汇集;探讨加载速度和初始裂纹长度对体系裂纹扩展行为的影响;分析了孔洞大小、数量及分布对铝裂纹扩展行为的影响;模拟铝合金粗大第二相 Al_2Cu 拉伸变形行为,发现 Al_2Cu 非常脆,应变 $\varepsilon=0.086$ 时应力达到峰值6.4GPa,在拉伸初期不易产生位错,从而弹性变形阶段较长;探讨温度和应变率对体系拉伸变形行

为的影响；分析了孔洞数量及分布对 Al_2Cu 拉伸变形行为的影响。基于均匀化方法，建立了铝合金细观结构的数学模型，对铝合金细观结构响应进行了分析；并分析了温度、孔洞数量对裂纹扩展的影响。对 7050 铝合金进行均匀化热处理，分析热变形参数对 7050 铝合金流变应力的影响；通过热变形参数对微观组织演化规律的影响，对高温塑性变形条件下的变形机制进行研究。

本书的内容为作者十余年来的研究成果，在研究过程中先后得到了国家自然科学基金项目（No: 50564004）、教育部科学技术研究重点项目（No: 02081）、江西省自然科学基金项目（No: 0250020, 2010GQC0803）及江西省教育厅科技落地计划科学前沿项目（No: KJLD12073）的资助。本书内容对研究铝及铝合金铸轧成形与裂纹扩展，从而获得高质量的铝及铝合金产品具有较强的指导作用。

感谢清华大学许庆彦教授、中南大学易幼平教授对本书内容的修改意见！感谢南昌航空大学学术文库专项基金资助！

由于时间仓促，且作者水平有限，书中错误和不当之处在所难免，在此诚恳地欢迎广大读者批评和指正。

刘晓波

目 录

前 言

第 1 章 绪论	1
1.1 铝及铝合金铸轧成形与裂纹扩展研究意义	1
1.2 铝及铝合金铸轧成形与裂纹扩展研究发展状况	1
1.2.1 铝及铝合金铸轧成形研究发展状况	1
1.2.2 铝合金裂纹扩展研究发展状况	4
1.3 铝及铝合金铸轧成形与裂纹扩展数值方法及其研究发展状况	5
1.3.1 元胞自动机法	5
1.3.2 有限元法	7
1.3.3 有限差分法	8
1.3.4 分子动力学法	9
1.4 本章小结	12
第 2 章 基于元胞自动机的铝铸轧微观数值模拟	13
2.1 概述	13
2.2 微观组织数值模拟的元胞自动机模型	14
2.2.1 形核模型	14
2.2.2 生长模型	15
2.2.3 溶质扩散模型	18
2.2.4 元胞自动机法的捕获法则	22
2.3 基于元胞自动机的微观组织数值计算方法	23
2.3.1 晶粒生长的数值计算方法	23
2.3.2 微观组织形成的数值计算方法	25
2.3.3 边界条件的确定及相对运动的处理	26
2.4 程序方案设计	27
2.4.1 晶粒生长的程序方案设计	27
2.4.2 微观组织形成的程序方案设计	28
2.5 基于元胞自动机的微观组织数值模拟	30
2.5.1 基于元胞自动机的晶粒生长数值模拟	31
2.5.2 基于元胞自动机的微观组织形成数值模拟	33

2.6 本章小结	36
第3章 基于有限元的铝铸轧成形过程数值模拟	38
3.1 概述	38
3.2 铝铸轧成形过程数学模型及其求解	38
3.2.1 铸轧成形过程数学模型的建立	38
3.2.2 一些重要工艺参数的处理	43
3.2.3 边界条件的确定	47
3.2.4 数值计算	47
3.3 铝铸轧成形过程数值模拟分析	48
3.3.1 铸轧区流场、温度场、热应力场及热应变场	48
3.3.2 铸轧辊辊套温度场与热应力场	49
3.4 铝铸轧参数对铸轧过程的影响	51
3.4.1 铸轧参数对铸轧区流场的影响	51
3.4.2 铸轧参数对铸轧区温度场的影响	53
3.4.3 铸轧参数对铸轧区热应力场的影响	56
3.4.4 铸轧参数对铸轧区热应变场的影响	58
3.4.5 铸轧参数对铸轧辊温度场的影响	60
3.4.6 铸轧参数对铸轧辊热应力场的影响	62
3.5 本章小结	65
第4章 基于损伤力学的铸轧辊辊套疲劳寿命研究	66
4.1 概述	66
4.2 损伤力学理论	67
4.2.1 含损伤材料本构关系	67
4.2.2 损伤演化方程	68
4.2.3 理论理想疲劳曲线	69
4.2.4 损伤参数确定	70
4.3 裂纹形成与扩展的损伤力学方法	71
4.3.1 疲劳损伤耦合理论	71
4.3.2 损伤力学——有限元法	72
4.4 辊套疲劳寿命预估	74
4.4.1 辊套的应力场分析	74
4.4.2 辊套疲劳寿命预测	77
4.5 本章小结	79
第5章 基于有限差分的铸轧过程铸嘴型腔流动数值模拟	80
5.1 概述	80
5.2 铸轧过程铸嘴型腔熔体数学模型及其求解	80
5.2.1 铸轧过程铸嘴型腔熔体数学模型	80
5.2.2 铸轧过程铸嘴型腔熔体求解	89

5.3 铸轧过程铸嘴型腔熔体流动与传热数值模拟	90
5.3.1 铸嘴型腔熔体流动与传热分析	90
5.3.2 铸轧参数对型腔流场出口速度、出口温度的影响	94
5.4 铸嘴布流调节过程型腔熔体流动与传热数值模拟	102
5.4.1 超薄供料型腔非定常流特点及其处理方法	102
5.4.2 超薄供料型腔非定常流数学模型	103
5.4.3 超薄供料型腔非定常流数值仿真分析	104
5.5 本章小结	111
第6章 铝铸轧试验研究	112
6.1 布流系统水模试验	112
6.1.1 试验的基本准则	112
6.1.2 试验方案及实施	114
6.1.3 试验结果与分析	116
6.2 铸轧过程试验及组织分析	119
6.2.1 试验方法	119
6.2.2 试验结果与分析	120
6.3 本章小结	125
第7章 基于分子动力学的铝及铝合金裂纹扩展数值模拟	127
7.1 概述	127
7.2 分子动力学的基本原理和模拟方法	127
7.2.1 分子动力学的基本原理	127
7.2.2 LAMMPS 简介	135
7.3 铝裂纹扩展行为的分子动力学模拟	136
7.3.1 不含孔洞的铝裂纹扩展行为的分子动力学模拟	136
7.3.2 含孔洞的铝裂纹扩展行为的分子动力学模拟	140
7.4 铝合金拉伸变形的分子动力学模拟	146
7.4.1 Al_2Cu 拉伸的分子动力学模拟	146
7.4.2 含孔洞的 Al_2Cu 拉伸的分子动力学模拟	153
7.5 本章小结	159
第8章 基于有限元的铝合金细观结构响应及裂纹扩展数值模拟	161
8.1 概述	161
8.2 基于均匀化方法的铝合金细观结构响应分析	161
8.2.1 铝合金细观结构的数学模型	161
8.2.2 铝合金缺陷细观结构有限元建模	165
8.2.3 结果与讨论	166
8.3 铝合金裂纹扩展数值模拟	173
8.3.1 模型的建立	173
8.3.2 铝合金裂纹扩展过程中裂纹前缘应力场的数值模拟	174

8.3.3 复杂载荷作用下裂纹扩展与分析	177
8.4 本章小结	181
第9章 铝合金高温塑性变形条件下的变形机制	183
9.1 概述	183
9.2 7050 铝合金热处理	183
9.2.1 试验材料与试验方案	183
9.2.2 试验结果与分析	184
9.3 7050 铝合金的热压缩试验	188
9.3.1 试验材料与方法	188
9.3.2 不同变形条件下 7050 铝合金真应力-真应变曲线	189
9.3.3 热变形参数对 7050 铝合金流变应力的影响及流变应力本构方程	192
9.4 高温塑性变形条件下 7050 铝合金微观组织的演化	196
9.4.1 7050 铝合金微观组织特征	196
9.4.2 7050 铝合金在不同变形程度下微观组织的演化规律	197
9.4.3 7050 铝合金在不同变形温度下微观组织的演化规律	199
9.4.4 7050 铝合金在不同应变速率下微观组织的演化规律	200
9.5 本章小结	202
参考文献	203

第1章

绪 论

1.1 铝及铝合金铸轧成形与裂纹扩展研究意义

随着世界经济和科学技术的发展,人们对铝的需要不断增加,铝已成为仅次于钢铁的第二大金属。采用双辊铸轧技术直接生产带坯,由于能够以简单的铸轧形式代替通常生产铝板带所需的铸造、锯削、加热、热轧等多道工序,因此,双辊铸轧以其生产工艺简单、能耗少、投资少、生产周期短、生产成本低的突出优势而成为国内外铝工业中的一种主要生产方法。铝双辊超薄快速铸轧技术以其铸坯组织晶粒细化、较少的偏析、优良的力学性能以及高的生产率等特点而成为当今冶金科技的前沿技术之一。超薄快速铸轧技术实现产业化很困难,其原因是随着铸轧速度的进一步提高,铸坯减薄,铸轧过程中熔体流动和凝固传热更加复杂,铸坯质量的控制难度增加,铸轧工艺参数的可调范围减小。铸轧工艺参数的合理匹配成为制约实现快速超薄铸轧,获得高质量铸坯的一个关键问题。

高性能铝合金具有高的室温强度和良好的综合力学性能,已广泛应用于航空、国防、高铁等领域,如飞机重要部件(包括飞机起落架的隔框、翼梁、托架等承载构件)、导弹壳体、高速列车车厢等。由于高强铝合金在常温条件下的塑性较低,一般需经高温塑性加工成形,但高强铝合金由于在锻造变形过程中温度不均匀产生裂纹等缺陷,严重影响了高强铝合金的质量,因此,研究高强铝合金高温塑形的变形机制及裂纹等缺陷产生机理,确立抑制成形过程组织缺陷的调控方法,改进高温变形特性,对制订该类合金的成形工艺,获得高质量铝合金具有重要的意义。

1.2 铝及铝合金铸轧成形与裂纹扩展研究发展状况

1.2.1 铝及铝合金铸轧成形研究发展状况

双辊铸轧方法是1846年由英国人Henry Bessmer首先设想出来的,他提出

了从两旋转辊上方倾倒金属液，从两旋转辊下方得到金属铸坯的方法，由于当时缺乏相应的技术（如结构材料和过程控制仪表等）支持，这种设想未能获得成功。

20 世纪 50 年代美国 Hunter-Douglas 公司首先研制出倾斜式双辊铝带材铸轧机并投入生产运行，随后，法国 Pechiney 公司研制的 3C 水平式双辊铸轧机也获得成功，从此以后，铝带坯双辊连续铸轧技术和设备得到了迅速的发展。20 世纪 70 年代以前，铸轧机多为标准型，铸轧辊直径为 $\phi 600 \sim \phi 700\text{mm}$ ，铸轧带坯厚度为 7mm 左右，铸轧速度小于 1.5m/min。20 世纪 80 年代以后出现了超型铸轧机，铸轧辊直径可达 $\phi 1000\text{mm}$ ，铸轧带坯厚度为 5~12mm，铸轧速度为 3m/min 左右，铸轧金属已由纯铝扩大到 3000 系列、5000 系列软铝合金。20 世纪 90 年代初出现了改进型超型铸轧机，铸轧带坯厚度为 3mm，铸轧速度为 5m/min。由于铸轧带坯尺寸薄和铸轧速度快能进一步发挥快速凝固的特点，使铸轧带坯的晶粒细化，从而获得更好的冶金质量，也可使这一生产方式对人类带来更大的效益。从 20 世纪 90 年代以来，国际上一些公司开展了快速超薄铸轧技术的研究，主要有意大利 Fata-Hunter 公司、法国 Pechiney 公司、英国 Davy 公司以及挪威 Hydro 公司。它们共同的做法是先研究开发与大学合作进行小型试验，在取得一定成果和经验后，进行中试和大型工业试验。英国 Davy 公司和牛津大学合作，于 1991 年推出了第一台快速超薄铝带坯铸轧试验机。1996 年以来，意大利 Fata-Hunter 公司、英国 Davy 公司以及法国 Pechiney 公司都相继研制出快速超薄铸轧工业样机，能铸轧出 1mm 厚的铸坯，铸轧速度达 15m/min，应该说，这是铸轧技术发展中的又一次飞跃。但是由于各国（美国、英国、法国、意大利、挪威）对快速超薄铸轧技术的研究均处于工业试验阶段，试验条件（如设备参数和功能、工艺环境条件等）各不相同，所得结果也有差别，甚至相反。例如：Fata-Hunter 公司的试验与 Hydro 公司的试验，对快速超薄铸轧的组织与性能的认识与结果几乎完全相反；在快速超薄铸轧的铸轧机型选择上也存在不同的主张，如 Fata-Hunter 公司采用二辊铸轧机型，Davy 公司则采用四辊铸轧机型，同时各试验铸轧机的工艺环境条件、设备参数和工艺参数及其范围的确定也不一致（力能参数，辊径，有、无外部冷却，铸轧区长度、大小，铸嘴开口度大小等）。在主要技术规律上尚未达成共识。

我国铝带坯连续铸轧技术研究开发工作始于 20 世纪 60 年代。1964 年初进行了双辊下注式铝带坯连续铸轧模拟试验，并于同年铸轧出厚 8mm，宽 250mm 和 400mm 的铝带坯，1965 年铸轧出宽 700mm 的铝带坯。1971 年由东北轻合金加工厂研制成我国第一台 800mm 水平下注式双辊铸轧机。1975 年，用铝带坯生产的冷轧板基本上满足了一般深冲制品和箔材毛料的性能要求。1979 年由华北铝加工厂研制成 $\phi 650\text{mm} \times 1300\text{mm}$ 我国第一台亨特式倾斜铸轧机，并于 1981 年

和 1983 年相继研制成 $\phi 650\text{mm} \times 1600\text{mm}$ 和 $\phi 980\text{mm} \times 1600\text{mm}$ 铸轧机, 并通过部级鉴定, 标志着我国铸轧技术进入成熟阶段。1984 年中日涿神有色金属加工专用设备有限公司成立, 并于 1993 年该公司为其母公司华北铝业有限公司试制成功我国第一台仿 3C $\phi 960\text{mm} \times 1550\text{mm}$ 超型铸轧机。至此国产铸轧机已具有标准型和超型这两种机型, 而且铸轧机逐步实现标准化、系列化。

随着我国微电子、信息、机械、食品、包装、建筑产业的迅猛发展, 我国已成为铝材生产及消费大国, 如何提高铝材生产率、降低生产成本、提高铝材质量、扩大铝材使用范围已成为迫在眉睫的问题。而快速超薄铸轧的冷却速度远高于现有常规铸轧, 铸坯结晶组织的晶粒度和枝晶间距明显减小, 溶质元素在固溶体中的过饱和度增大, 因此板带的深冲性能和力学性能得到了改善, 可生产出具有优良冶金组织和表面质量的优质板带; 同时, 可铸轧合金范围也可拓展 (如 3000 系列等铝合金), 可使铸轧产品的应用市场范围扩大。例如: 高精度 PS 版基、计算机硬盘的铝质基板、高层建筑幕墙板以及空调箔等。另外, 铸轧板厚度减薄后, 不仅大大减轻了对后面工序——冷轧的压力, 解放了冷轧机的生产力, 大大节省了铝箔生产的投资和能源, 而且提高了生产率, 增加了产品的市场竞争力。中南大学于 2000 年 7 月在试验铸轧机上成功地铸轧出铸轧速度为 $13.2\text{m}/\text{min}$ 、厚度为 2mm 的铸坯, 华北铝业有限公司也在工业铸轧机上成功铸轧出铸轧速度为 $5.8\text{m}/\text{min}$ 、厚度为 3.2mm 的铸坯, 这标志着我国在快速超薄铸轧技术领域已经达到世界先进水平。

为了进一步探明铸轧过程熔体流动和凝固传热规律, 掌握铸轧工艺参数的合理匹配, 实现稳定的工业生产, 除了继续进行试验研究以外, 结合数值模拟是一种有效的方法。由于铸轧过程熔体不容易检测, 发展数值模拟方法是研究铸轧成形的有效途径, 国内外学者做了一些研究。Ozawa 等研究建立了铝双辊铸轧过程的一维瞬态模型, 用有限差分方法求解轧辊及带坯的温度分布, 计算了不同铸轧工艺参数条件下液相区、两相区和变形区的大小。Miyasawa 等第一个建立了铝垂直双辊铸轧在固相和液相区的传热和流体流动计算数学模型, 他们运用流体动力学润滑理论来预测在轧辊间隙 (辊缝) 内的速度场, 同时他们也预测了其温度场, 通过差分方案来求解热平衡方程。M Yun 等开发了铸轧过程流场和温度场的二维仿真系统, 并用该系统分析了铝合金快速铸轧过程中弥散偏析产生的工艺条件。史荣等对铝带坯连续铸轧凝固过程进行了数值模拟研究。李晓谦等进行了快速铸轧中的接触热导及带坯在铸轧区的温度分布的仿真分析, 研究了快速铸轧辊套与铸坯之间具有强温变特性耦合关系的接触热阻的计算方法, 分析了各工艺参数对液穴区长度及出口温度的影响。湛利华等应用刚黏塑性有限元法建立铝合金连续铸轧过程的变形模型, 进行了双辊连续铸轧工艺中温度场和热应力场的数值计算。

1.2.2 铝合金裂纹扩展研究发展状况

在高强铝合金 7×××系合金中, 当在 Al 中加入 Zn、Mg、Cu 等元素时, 可生成一系列新的化合物, 如 β 相为 Mg_5Al_8 , T 相为 $Al_2Zn_3Mg_3$, S 相为 $CuMgAl_2$, η 相为 $MgZn_2$, θ 相为 $MgZn_5$, γ 相为以 Zn 为基体的固溶体。它们都易固溶于 Al 中, 且在 Al 中的固溶度都很高。虽然加入 Zn 和 Mg 元素之后, 铝合金的强度得到了极大的提高, 但是铝合金的伸长率和耐蚀性却随着 Zn 和 Mg 含量增加而降低。为了改善铝合金的综合性能及耐蚀性, 可以在合金中添加 Cu 元素, 合金的伸长率和耐蚀性得到了提高, 同时也使合金的疲劳强度得到了很好的改善。另外, 微量元素通过对合金在热加工变形过程中微观组织的影响, 可较明显地影响到合金的综合性能。例如: 微量的 Cr、Mn、Zr 等元素不仅可以大大提高合金的再结晶温度, 而且这些微量元素的金属间化合物能有效地阻止晶粒长大。此外, 铝合金在制备过程中不可避免会掺杂进一些有害的杂质, 如 Fe、Si 等元素, 这些杂质往往对铝合金成形件的综合性能有极大的损害。高强铝合金因其在拥有超高强度的同时, 断裂韧性和抗应力腐蚀性能等综合性能优异, 故它的出现给航天航空事业带来了飞速的发展。目前, 7050 铝合金厚板已大量应用于波音 777 客机以及 F/A-18Hornet 和 F-22RaPtor 军用飞机, 成为飞机制造业通用的结构材料。

目前国内外在高强铝合金高温变形行为、显微组织和性能方面进行了较深入的研究, 在高强铝合金裂纹缺陷的研究中疲劳裂纹研究多, 变形裂纹研究少。在铝合金塑性变形裂纹的研究方面, 高维林等建立了金属塑性变形中位错组态演化模型; Masumura 等建立了裂纹位错排列干涉模型; 刘世兴等的研究表明 7055 铝合金在垂直于纵向面上的断裂是延性穿晶断裂, 平行于纵向面上的断裂主要是沿晶断裂; Fourmeau 等通过试验和数值模拟研究了高强铝合金在不同应力状态下的各向异性失效模式; Liu 等采用扩展有限元法模拟了高强铝合金在单方向拉伸载荷条件下晶界裂纹的扩展; 李江等研究了 7050 高强铝合金断裂韧性及其影响因素, 降低各向异性和适度提高预制裂纹长度, 可有效降低试样宏观开裂角。

在数值模拟研究方面, 国内外有学者通过建立多尺度模型来进行仿真研究, Wei 等建立了描述晶体材料的韧性断裂过程多尺度模型; Potirniche 等利用修正嵌入原子法的分子动力学模拟, 进行了材料长度尺度对单晶镍的破坏进程影响的分析, 该研究提供了针对桥接材料从纳米尺寸到更大尺寸的长度尺度方面的研究手段; 陈康华等建立了高强铝合金断裂韧性与双级微裂纹的非线性关系模型, 通过模型解析, 分析两种尺度微裂纹体积分数对高强铝合金断裂韧性的影响规律; Groh 等建立了一个数值的、分层的多尺度模型的方法论, 通过使用晶体塑性模型验证的多尺度桥梁方法论来预测在 $[421]$ 晶向的单轴压缩载荷下的单晶铝

变形的机械响应; Jordon 等表征和模拟了锻造铝合金在两种不同的长尺度下, 由材料的微观组织均质化引起的损伤诱发各向异性; 陆怀宝等采用多尺度准连续介质法 (QCM) 模拟体心立方 (bcc) 金属钽 II 型裂纹尖端位错的形核与发射过程, 获得位错发射位置与应力强度因子关系曲线, 研究全位错分解以及扩展位错形成机理; 王绍青等在金属材料力学性质多尺度计算模拟方面取得了有意义的成果。这些研究证明, 通过多尺度模型来进行仿真研究, 对于认识裂纹产生条件、裂纹演化和影响因素是一种有效的研究方法。

1.3 铝及铝合金铸轧成形与裂纹扩展数值方法及其研究发展状况

1.3.1 元胞自动机法

1. 常见的组织模拟方法简介

要逼真地再现微观组织的形貌, 就要找到一种可靠的模拟方法来准确预测晶粒的形核、生长、吞并、阻碍等过程。在宏观传热、传质、动量传输和结晶理论基础上, 通过固相率这一桥梁将微观组织变化通过传热方程的源值项联系起来, 形成宏观、微观模拟相统一的模拟方法。近年来各种微观组织的模拟方法纷纷出现, 如传统的热焓法、元胞自动机法 (CA)、蒙特卡罗法 (MC) 和相场方法等。这些方法各有其优缺点, 都能在一定程度上较准确地模拟合金的凝固组织。凝固微观组织数值模拟的方法主要有确定性方法、相场方法及随机性方法。

确定性方法以凝固动力学为基础, 虽然符合晶粒生长物理背景, 但是它不能处理晶体生长过程中的一些随机过程, 难以考虑晶体学的影响, 所以无法模拟凝固时枝晶的生长过程及形貌。

相场方法是一个描述枝晶生长的新方法, 它可以避免跟踪固液界面的位置和形状, 而模拟一个枝晶内的亚结构, 如二次臂和高次臂的生长过程。但它的计算域较小, 难以用于实际铸轧过程模拟。

随机性方法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, 动态跟踪显示每个晶粒的形核生长过程和柱状晶向等轴晶转变过程, 适用于柱状晶组织的形成及柱状晶与等轴晶相互转变的模拟, 主要有 MC 法和 CA 法。尽管 MC 法被证明能产生同实际铸件组织相似的晶粒结构, 但它缺乏物理基础。由于 CA 法在基本单元定义和变化规则应用方面的灵活性, 其发展应用不局限于特定物理体系, 而且为微观结构模拟中实现不同空间及时间尺度之间的跨越性模拟计算提供了方便简洁的数值工具。

长期以来,预测微观组织进而控制性能一向是铸轧加工的追求目标。随着对凝固机理的进一步了解和计算能力的提高,这一目标的最后实现将成为可能。

2. 元胞自动机法国内外研究现状

Von Neumann 最早把 CA 法作为一种物理现象的模拟技术引入的,这种方法将物理系统分成许多小单元,通过成套的规则,每个单元同其相邻的单元迭代地作用,这些单元通常映象到计算机的屏幕上。于是,模型系统随时间的发展变化就能观察到。Rappaz 和 Gandin 发展了 CA 法。该方法具有一定的物理基础,能够定量地反映过冷度和溶质浓度的影响。

Rappaz 和 Gandin 等用基于高斯分布的连续形核模型来计算晶粒密度,考虑了铸件表面与中心形核位置及晶粒取向随机性。他们把晶粒的形核与长大的物理机制引入到模型中,考察了晶粒在模具壁处的不均匀连续形核、晶核的晶体学位向关系以及枝晶尖端生长的动力学,建立了随机 CA 模型来模拟凝固结晶中晶粒结构的形成。他们成功地预测从柱状晶到等轴晶的转变,并得到了试验验证;并将二维模型发展到三维模型,并将得到的等轴涡轮叶片翼面晶粒结构同试验所得铸件横截面组织图进行了比较。Brown 把 CA 法与有限差分法结合起来,建立了三维的 CA 有限差分 (CAFD) 模型来模拟两相的耦合生长,把此模型应用到真实的共晶系 Pb-Sn 的凝固中,得到了固液界面移动的距离随时间的变化及相的片间距等定量的结果。Geiger 等人则利用 CA 方法研究了温度、各向异性、活化能和界面能对晶粒长大动力学的影响。Marx 和 Kumar 建立了奥氏体中析出铁素体的 CA 模型。模拟结果能够再现 Militzer 等人做的作为冷却速率函数的初始温度的变化、每个奥氏体晶粒内铁素体晶粒数和铁素体晶粒大小等实验结果。模型描述了铁素体在奥氏体晶界的形核及铁素体沿奥氏体晶界和在晶内的长大。

在国内,这方面也做了一些研究,朱鸣芳等改进了三维 CA 模型,CA 模型也运用到凝固的共晶生长现象中。康秀红等用枝晶尖端生长动力学模型研究了晶粒的生长及 $[100]$ 择优晶向对生长的影响,确立了由柱状晶向等轴晶转变的判断。李殿中等用 CA 法模拟了镍基合金叶片凝固过程微观组织,又用 CA 法模拟了金属成形过程中的组织演变,建立了金属成形过程组织演变的宏观-微观耦合模型。张林等建立了镍基耐热合金凝固过程的 CA 模型,该模型以温度扩散方程、多组元的溶质扩散方程以及枝晶尖端生长的 LGK 模型为基础。利用这个模型模拟了凝固过程中不同冷却速度下晶粒微观结构的演化。许庆彦等采用 CA 微观模型,并与宏观的传热计算相结合,在模拟过程中,采用连续形核的方法处理液态金属的异质形核现象,通过高斯分布函数描述形核质点密度随温度的分布关系,晶粒生长模型则考虑枝晶尖端生长动力学和择优生长方向 $[100]$ 晶向,对砂型铸造铝合金铸件的凝固组织形成进行了模拟。张涛等建立了基于 CA 法的

7055 铝合金动态再结晶 (DRX) 模型, 研究了 7055 铝合金在热压缩过程中的组织演变规律。

1.3.2 有限元法

1. 有限元法简介

有限元法 (FEM) 的基础是变分原理和加权余量法。其基本求解思想是把计算域划分为有限个互不重叠的单元, 在每个单元内, 选择一些合适的节点作为求解函数的插值点, 将微分方程中的变量改写成由各变量或其导数的节点值与所选用的插值函数组成的线性表达式, 借助于变分原理或加权余量法, 将微分方程离散求解。随着高速运算计算机的发明, 有限元法这种有效的数值计算方法才得以发展, 如热传导、流体、失效与破坏等领域都已经普遍应用有限元法来分析计算。

2. 有限元法在铸轧成形中的应用

M. Gupta 等利用有限元法模拟了水平式双辊铸轧薄带过程中熔池内的热传导、液体流动和熔液的凝固, 但是未考虑材料的物性参数随温度的变化情况, 即材料为常物性; 也没有考虑气隙对传热的影响。李晓谦等进行了铝带坯连续铸轧变形的有限元分析。他们以 Levy-Mises 塑性流动理论为基础, 并同时考虑温度变化因素, 对铸轧过程的塑性变形进行了分析计算。A. Saxena 和 Y. Sahai 通过 FIDAP 软件分析得到了铸轧过程流体流动、凝固传热模型、有限元网格及节点温度值, 并将其转化到 ANSYS 中作为变形分析时的温度载荷边界条件; 然后运用有限元分析软件 ANSYS 建立了铝合金双辊铸轧过程二维稳态热-力耦合模型, 计算了水平双辊薄带坯连续铸轧工艺中由于温度梯度以及轧辊对铸坯施加的机械载荷的作用引起的应力。逯洲威等用 MARC 大型有限元分析软件, 采用弹塑性大变形热-力耦合有限元法, 对薄板坯连铸液芯铸轧过程铸壳变形特点进行了仿真研究。C. G. Kang 和 Y. D. kim 等利用 ANSYS 有限元分析软件对不锈钢材料半固态连续铸轧成形过程的流动行为、轧制力和轧制变形进行了仿真研究。金珠梅等在进行旋转状态铸辊内部传热过程特点的基础上, 应用广义流体概念, 建立了熔池和铸辊混合区域的整体数学分析模型, 实现了整体模型的耦合计算, 计算结果揭示了双辊法连续铸轧过程熔池内流场、凝固温度场及铸辊内温度场、热应力场的特点。

3. 有限元法在裂纹扩展中的应用

在国外, Shephard 等研究了裂纹扩展后便重新划分网格且其边界条件随即也发生变化的改进有限元法。Bittencourt 等提出一种为了得到光滑的裂纹边界通过改变裂纹扩展后的局部网格形状的方法。为了解决裂纹扩展问题, Klein 等引进了一种虚拟联结单元。Siegmund 等研究了铝合金薄板中的裂纹扩展。Scheider 等

对光棒试样的缩颈断裂过程进行了数值模拟。Chowdhury 等采用大变形有限元程序和内聚区模型相结合的方法对准静态裂纹扩展进行了模拟,得到的裂纹扩展曲线相比于试验得到曲线差别不是很大。

在国内也有很多学者对裂纹扩展进行了大量的模拟研究。杨庆生、杨卫在用有限元法模拟裂纹扩展中,应用的是自适应的网格划分方法来实现网格动态划分。孙穆、余寿文通过研究证明,材料在裂纹扩展中裂纹扩展阻力与定常扩展裂纹的弹塑性场受到材料各向异性硬化性质的影响是非常大的。王德民、徐纪林对在一对均匀拉应力作用下的铝合金薄板(含中心裂纹)运用有限元方法与塑性大变形的基本方程进行模拟计算,所获得的结果与试验结果吻合得较好。崔玉红等研究了 Hybrid、Trefftz 有限元应用于 I、II 和 III 型复合裂纹的弹性断裂问题。黄向平等研究了自适应网格生成技术,这种技术能够对裂纹扩展进行跟踪、仿真。王承强等提出了求解基于线性内聚力模型的平面裂纹扩展问题的半解析的有限元法。郁大照等采用有限元软件 MSC. Marc 构建含裂纹螺栓件的三维有限元分析模型,通过分析得到了不同损伤模式下的 SIF 与裂纹长度沿板厚度方向的变化曲线。

1.3.3 有限差分法

1. 有限差分法简介

有限差分法(FDM)的基本思想是先把问题的定义域进行网格剖分,然后在网格点上按适当的数值微分公式把定解问题中的微商换成差商,从而把原问题离散化为差分格式,进而求出数值解。有限差分法原理简单,便于实施,发展相对比较成熟,但对几何形状的适应性较差,在应用网格生成技术后,这一缺点得以克服。有限差分法广泛用于热传导、气体扩散、流体传热问题。

2. 有限差分法在铸轧成形中的应用

在铸轧过程方面,M. J. Bagshaw 等对铸轧过程中热线形成问题进行了较为深入的研究,建立了二维稳态热流模型来描述铸轧过程,将轧辊与铸坯之间的传热系数在整个铸轧区内划分为三部分,通过对仿真结果的分析解释了在不同界面传热系数的条件下热线形成的原因。牛津大学的 Bradbury 等对连续铸轧过程中固态和半固态区的凝固、传热和流体流动进行了数值模拟,将固态和半固态区的黏度考虑为温度函数的修正黏度,即认为材料为无加工硬化的各向同性材料。带坯/轧辊界面假定为黏着摩擦,金属与轧辊间的传热系数由施加在轧辊上的局部压力来决定。固相百分数由 Scheil 方程得到。

在铸嘴型腔方面,H. Yu 建立了二维铸嘴型腔层流流体力学模型,M. V. Akdeniz 和 K. Sarioglu 等对二维流场、温度场铸嘴系统进行了计算机仿真,乐起胜建立了二维电磁铸轧铸嘴型腔温度场模型,李宏建立了二维快速超薄铸轧