



装备科技译著出版基金

集成计算材料工程

——模块化仿真平台的概念和应用

INTEGRATIVE COMPUTATIONAL
MATERIALS ENGINEERING
CONCEPTS AND APPLICATIONS OF
A MODULAR SIMULATION PLATFORM

[德] 乔治·施密茨 (G. J. Schmitz) 等著
乌尔里希·普拉尔 (U. Prahl)
黄新跃 等译

WILEY



国防工业出版社
National Defense Industry Press



装备科技译著出版基金

集成计算材料工程

——模块化仿真平台的概念和应用

Integrative Computational Materials Engineering

—Concepts and Applications of a Modular Simulation Platform

[德] 乔治·施密茨 (G. J. Schmitz) 等著
乌尔里希·普拉尔 (U. Prahl)
黄新跃 等译

国防工业出版社

· 北京 ·

著作权合同登记 图字:军-2015-048 号

图书在版编目 (CIP) 数据

集成计算材料工程:模块化仿真平台的概念和应用 / (德)
乔治·施密茨 (G. J. Schmitz), (德) 乌尔里希·普拉尔 (U. Prah) 等著; 黄新跃等译. — 北京: 国防工业出版社, 2016. 10

书名原文: Integrative Computational Materials Engineering
— Concepts and Applications of a Modular Simulation Platform
ISBN 978-7-118-10841-5

I. ①集… II. ①乔… ②乌… ③黄… III. ①工程材料—计算机辅助计算 IV. ①TB305-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2016) 第 194312 号

Integrative Computational Materials Engineering—Concepts and Applications of a Modular Simulation Platform by
G. J. Schmitz, U. Prah.

ISBN978-3-527-33081-2

Copyright © 2012 Wiley-VCH Verlag & Co. KGaA,
Boschstr. 12, 69469 Weinheim, Germany

All Rights Reserved. Authorised translation from the English language edition published by John Wiley & Sons Limited. Responsibility for the accuracy of the translation rests solely with National Defense Industry Press and is not the responsibility of John Wiley & Sons Limited. No part of this book may be reproduced in any form without the written permission of the original copyright holder, John Wiley & Sons Limited.

本书简体中文版由 John Wiley & Sons, Inc.

授权国防工业出版社独家出版。

版权所有, 侵权必究。

※

国防工业出版社出版发行

(北京市海淀区紫竹院南路 23 号 邮政编码 100048)

腾飞印务有限公司印刷

新华书店经售

*

开本 710 × 1000 1/16 插页 4 印张 17 字数 325 千字
2016 年 10 月第 1 版第 1 次印刷 印数 1—2000 册 定价 86.00 元

(本书如有印装错误, 我社负责调换)

国防书店: (010) 88540777

发行邮购: (010) 88540776

发行传真: (010) 88540755

发行业务: (010) 88540717

序

新世纪什么是高科技?也许可以有許多不同的定义,但是计算机模拟技术及其与传统工业的结合,无疑是未来高科技发展的一个重要方向。

在国际上,目前大量采用计算机应用技术的一个领域就是材料科学与工程。现代工业的发展中新材料往往起着基础和引领的作用,新材料不仅能够解决工业发展的物质基础瓶颈,而且能够为未来发展提供了种种新的可能。但是,在传统的试错法的研究开发模式下,一个成功的新材料的研究开发周期往往很长,开销很大,而且除了对材料性能和功能的要求外,还要其满足资源、环境等其他非功能性的要求。在这种情况下,传统的试错法已不再满足工业发展的急需,新兴的材料计算工程因此应运而生。每个从事材料研究开发,或者打算今后从事材料研究的人,都应该了解这一点。

集成计算材料工程是个新的术语,强调了材料模拟科学、或者说计算材料科学的集成特征。这里,需要对材料物理学、化学、力学、工程学等传统学科有个基本了解,更加重要的是,还需要具有计算方法学和计算机软件的基础。这样的跨学科和多学科背景,大大增加了工作的复杂程度,可能令人望而却步。但是,通过这本书,你会发现,其实你已经掌握了模拟工作的部分钥匙,只需要在另外一个或几个知识点上学习提高一下,就可能会有所收获,有所突破。

这本书的作者乔治·施密茨和乌尔里奇·普拉尔是德国亚琛工业大学的教授。本书主要介绍了在集成计算材料工程方面的工作。虽然作者在概念部分强调了不同尺度模拟的重要性,但书中的方法更多的却是介观模型的模拟和分析方法。除了介绍集成材料计算的主要方法外,本书也给出一些不同材料工程结构计算机模拟的实例,对从事计算材料研发的人员有一定的借鉴意义。如果你想在计算材料研究开发方面有所作为,那么这本书可以帮助你了解到基本的方法和相关的知识,也许更重要的是,通过学习这本书,你会发现这些知识与工业应用的联系,会让你以后可以更加有目的、有针对性的积累知识,投入应用。

这本书出版于2013年,书中的研究工作是作者近几年刚刚完成的。本书的译者黄新跃女士长期从事材料的测试、评价和材料数据库的研发,后来又去德国深造并获得德国工学博士学位。她和同事倾注了大量的心血,力图让译本如实反映原书作者的意图。

我相信,读者在阅读后一定会有所收获。

益小苏

2016年5月

译者序

产品寿命周期是目前工业界的热门话题之一,它关系到产品的可靠性、可维护性和经济性,而且涉及资源与环境的保护。随着当代计算机技术的飞速发展,实现产品寿命周期的精确设计与控制已经指日可待。而实现这一目标的一个重要方面就是迫切需要服务于产品设计、制造过程的计算机仿真技术的发展。

21 世纪初,德国政府启动了一个名为“高工资国家的集成制造技术”项目,在 2006—2011 年间,德国亚琛工业大学(德语全称为 Rheisch-westfaelische Technische Hoch shule Aachen,英文简称为 RWTH Aachen university,所以也简称为 RWTH)的二十几个材料加工与制造相关的研究所参与了该项目。该项目起初名为“材料虚拟加工链”,但是专家们很快发现,项目的关键是建立一个标准化、网络化、模块化、开放性和可扩展的仿真平台,后来称为集成计算材料工程(ICME)平台,目的是实现多种尺度相关的材料信息交换。现在,集成计算材料工程正在成为一个新的计算材料学的前沿研究领域,其成果为计算材料学从原子尺度到微细观结构再到宏观结构的材料跨尺度研究,以及材料计算设计从理论到工程实现提供了手段。

为了节省能源、降低成本和加快研究进程,国内目前正在开展材料的计算设计研究。材料的组成、结构、性能及其服役特性是材料设计所关注的四个重要方面,这四个方而互为因果又互相牵制,造成了材料设计的复杂性。传统的材料设计研究以实验室研究为主,是一门实验科学。但是,传统的实验方法比较复杂,研究周期长,资源消耗大,因此成本很高,且对环境的负面影响也日益受到关注。随着对材料研究的深入,特别是计算机技术的发展,材料的计算机模拟与设计已不仅仅是材料物理以及材料计算理论学家的热门研究课题,更将成为一般材料研究人员的重要研究工具。由于模型与算法的成熟,通用软件的出现,使得材料计算设计的广泛应用成为现实。对大学以及研究机构来说,材料计算设计已经开展了多年,已经在一些专业上取得了一定的进展,但是尚未形成链条和规模。主要的一个问题是如何使用材料信息,以及如何在各个不同加工和制造环节进行信息交换,即所谓集成计算问题。材料基因组

计划的基本理念在于采用集成的计算平台、实验平台及数据平台,使得不同专业的科研人员可以协同合作。本书的主要内容就是关于这个 ICME,平台的主要概念和组成部分,比如其标准化、模块化的实现方法,模型的精度与选择,材料性能的预测方法和验证等。原书作者的意图不仅是力求让读者能够从书中获得 ICME 的整体概念,而且能够得到具体的实际应用的指导。本书给出了多个不同材料如钢、塑料和织物增强复合材料的比较完整的设计示例,占用了全书多半篇幅,其中甚至给出了如何确定微观模型尺寸这样非常具体的计算方法,对工程应用具有很大参考价值。

德国亚琛工业大学是一所国际上著名的综合性工业大学,其理工科实力强劲,不仅像机械制造、建筑、物理等传统学科在德国大学中名列前茅,电子、计算机等新兴学科也排行在三甲之列。在最近几十年中,德国亚琛工业大学所在的亚琛市及周围地区渐渐形成一个大的技术研发中心,许多国际著名公司如爱立信、福特、飞利浦、联合科技等都在亚琛建立了分部,三菱也在亚琛附近建立了欧洲半导体中心,微软的德国研究院也设在亚琛。德国亚琛工业大学具备了传统工业与现代计算机信息技术结合的研发优势。本书是由德国亚琛工业大学的专家撰写,他们的专业领域包括不同类别的材料制造,覆盖了从铸造、冷/热成形工艺、热处理、连接工艺、涂层直到机加工的全部制造链,而且还有信息专业的研究人员参与,因此成功地也是开创性地建立并发展了一个 ICME 概念的平台 AixViPMaP[®]。该书于 2012 年出版,主要介绍了德国亚琛工业大学在 ICME 方面的工作,除了介绍平台 AixViPMaP[®] 的构建和应用,更侧重介绍了材料设计与加工过程,及其与性能的关系,特别是与材料服役寿命的关系。这是一本材料设计工程化的技术参考书,适合材料科学、力学、应用数学和计算数学等相关领域的研究人员、工程技术人员、教师和研究生参考和阅读。

全书共分为 13 章,根据内容分为两大部分。第 I 部分从第 1 章~第 7 章,是 ICME 的理论部分,介绍了 ICME 平台的主要概念,其中第 1 章~第 3 章是关于平台总体概念的各个方面,第 4 章~第 7 章可能是读者最关注的,因为这里介绍了 ICME 的四个技术关键:数据格式标准化、等效性能的预测方法、分布式仿真和仿真结果的可视化。第 II 部分包括第 8 章~第 13 章,其中第 8 章~第 12 章是根据 ICME 在德国亚琛工业大学的实践,给出了 5 个测试算例,每章 1 个算例。这 5 个算例来自 5 种不同材料的工业结构:管线钢、齿轮零件、工程塑料零件、织物增强铝合金活塞杆和不锈钢轴承座。通过这些算例,给出了 IC-

ME 工程的主要实践过程,包括实际材料或结构的数字化离散过程、宏观和微观模型建模、模型的评价方法和模拟结果的评价。此外还重点呈现了跨尺度仿真的过程,并且也强调了跨尺度仿真的重要意义。第 13 章是对 ICME 未来的展望。

本书的翻译人员来自北京航空材料研究院,主要有黄新跃、许巍和王亮,陶旋姿也参与了翻译工作。由于本书内容涉及多个学科,需要的知识面非常广博,翻译过程中遇到了很大挑战,如果译文有不准确之处,希望读者批评指正。

译 者
2016 年 3 月

前言

撰写这本关于“集成计算材料工程”(ICME)平台的专著的想法来自卓越计划项目群之中的课题“高工资国家的集成制造技术”的工作,该项目是由德国联邦政府卓越计划资助的。

课题最初称为“材料虚拟加工链”,其目的是为不同类型的材料和加工过程建立模拟仿真系统。但是在项目开始不久的2006年,人们很快发现,要想在加工的各个环节之间以及材料工程的不同尺度之间进行有效的信息交换,标准化、模块化、开放性和可扩展的仿真平台是最起码的要求。

课题的仿真平台的核心基于德国亚琛工业大学(RWTH)十几个研究所的专家和他们使用的仿真工具。专家们的专业覆盖了整个制造生产链,从铸造到冷/热成形工艺、热处理、连接工艺,以及涂层和机加过程,包括了不同的材料类型,比如金属合金(特别是钢)、复合材料和高聚物。该平台建立在RWTH的计算机硬件和软件系统上,由科学计算和信息管理的专家们最终完成。

具体来说,参加项目的有以下这些研究所:铸造研究所(GI),黑色冶金研究所(IEHK),焊接和连接件研究所(ISF),表面工程研究所(IOT),金属成形研究所(IBF),塑料加工研究所(IKV),科学计算研究所(SC),机械工程信息管理系统(ZLW/IMA),纺织技术研究所(ITA),FRAUNHOFER 激光技术研究所(ILT/NLD)和 ACCESS。

在项目进行过程中,ICME 已经显露出是计算材料研究的一个新方向,集中了计算材料研究的各个方面,研究从原子尺度到细微观连续尺度的微观结构,再到工程应用的部件或加工尺度的多尺度问题。在我们看来,这一正在发展的平台概念将对新出现的 ICME 方向非常有价值,由于很难在某个期刊的文章中发表标准化构架及其应用实例,我们决定在这本书中介绍“集成计算材料工程平台”的概念。我们希望读者一旦看到这部书就感觉有用和深受启发,并在其后研究平台标准细节时有所帮助。

乔治·施密茨
乌尔里希·普拉尔
德国亚琛
2011年7月

目 录

第 I 部分 概 念

第 1 章 引言	1
1.1 动机	1
1.2 什么是 ICME	2
1.2.1 “一元系统”:I,C,M,E	3
1.2.2 “二元系统”:ME,IM,IE,IC,CE 和 CM	4
1.2.3 “三元系统”:CME,ICM,IME,ICE	6
1.2.4 “四元系统”:ICME	7
1.3 ICME 的发展历程	8
1.4 当前实现 ICME 的努力	9
1.5 向模块标准化的 ICME 平台前进	11
1.6 本书内容	12
参考文献	13
第 2 章 平台的基本特征	16
2.1 概述	16
2.2 开放体系结构	21
2.3 模块化	22
2.3.1 单一模块	22
2.3.2 尺度的桥接	24
2.3.3 接口模块/服务	25
2.3.4 数据模块	26
2.4 标准化	27
2.5 基于网络的平台操作	28
2.6 平台概念的好处	29

2.6.1	对软件提供者的好处	29
2.6.2	对工业用户的好处	30
2.6.3	对科研、教育和知识管理的好处	30
2.7	使用测试算例验证	31
	参考文献	32
第3章	先进模型、软件以及未来的改进	33
3.1	引言	33
3.2	现有模型和软件的回顾	34
3.3	在 ICME 框架内对模型和软件的要求	38
3.3.1	模型质量	38
3.3.2	改进数值和模型精度	39
3.3.3	单个模型的加速与分布式仿真	40
3.3.4	信息集成	43
3.4	单一模型在平台上运行的好处	44
3.4.1	初始条件质量的改进	44
3.4.2	材料数据质量的改进	45
3.4.3	材料局部等效性能的讨论	45
3.5	平台模型的强耦合和弱耦合	45
3.6	小结	46
	参考文献	46
第4章	标准化	47
4.1	概述	47
4.2	几何形状和结果数据的标准化	48
4.2.1	扩展文件头	49
4.2.2	几何形状属性	50
4.2.3	场数据	50
4.3	材料数据	52
4.4	应用程序界面	55
4.4.1	USER_MATERIAL_TM 子程序	57
4.4.2	USER_MATERIAL_HT 子程序	59
4.4.3	USER_EXPANSION 子程序	60
4.4.4	USER_PHASE_CHANGE 子程序	60
4.5	标准化的未来方向	62

参考文献 62

第5章 等效性能的预测..... 63

5.1 引言 63

5.2 具有周期性微观结构材料的均质化 64

5.2.1 一种非均质材料的静平衡问题 64

5.2.2 周期性和两级尺度描述 65

5.2.3 渐近均质化方法 67

5.3 具有随机微观结构材料的均质化 69

5.3.1 RVE 的形貌分析和定义 69

5.3.2 RVE 位置对等效弹性性能的影响 73

5.3.3 随机均质化 74

5.4 宏观结果的后处理:局部化 76

5.5 均质化模型:专为半晶态热塑性塑料开发的两级辐射均质化 77

5.5.1 非晶和多晶相的力学性能 78

5.6 虚拟材料测试 80

5.7 确定等效性能的工具 81

5.7.1 均质化工具 HOMAT 和其前处理器 Mesh2Homat 81

5.7.2 虚拟测试的编程环境 82

5.8 例子 83

5.8.1 基于验证例子的方法比较 83

5.8.2 一种 Fe - C - Mn 钢的奥氏体—铁素体相变 84

5.8.3 随机均质化的应用:一个开孔金属泡沫材料的等效热导率 87

5.9 结论 89

参考文献 90

第6章 分布式仿真 93

6.1 动机 93

6.2 AixViPMaP® 仿真平台架构 94

6.3 数据集成 97

6.4 基于互联网的仿真平台用户界面 100

参考文献 103

第7章 可视化..... 104

7.1 动机 104

7.2	标准化的后处理	105
7.3	集成的可视化	107
7.4	数据历程追溯	110
	参考文献	112

第Ⅱ部分 应 用

第8章	管线钢测试算例	114
8.1	引言	114
8.2	材料	115
8.3	工艺	116
8.3.1	工艺链概述	116
8.3.2	再加热	116
8.3.3	热轧	117
8.3.4	冷却和相变	117
8.3.5	U形和O形成型	118
8.3.6	焊接	118
8.4	试验	118
8.4.1	膨胀计试验	118
8.4.2	确定屈服流动曲线和动态 DRX 动力学的压缩试验	120
8.4.3	拉伸试验	120
8.4.4	焊接试验	120
8.5	实验工艺链	121
8.6	仿真模型和结果	122
8.6.1	再加热	122
8.6.2	热轧	127
8.6.3	冷却和相变	130
8.6.4	U成型和O成型	133
8.6.5	焊接	139
8.7	结论和经验	146
	参考文献	146
第9章	齿轮零件测试算例	149
9.1	引言	149
9.2	材料	149

9.3	工艺链	150
9.3.1	概述	150
9.3.2	热轧和锻造	151
9.3.3	FP 退火	152
9.3.4	机械加工	152
9.3.5	渗碳	152
9.3.6	激光焊接	152
9.4	试验步骤和结果	153
9.4.1	现象概述	153
9.4.2	动态再结晶和晶粒长大的特征	154
9.4.3	相变特征	154
9.4.4	在工艺链中粒子演化的研究	155
9.4.5	焊接深度的特征	156
9.5	仿真链和结果	157
9.5.1	仿真链概述	157
9.5.2	宏观工艺模拟	160
9.5.3	微观模拟	170
9.6	结论	174
	参考文献	174
第 10 章	工程塑料零件测试算例	176
10.1	引言	176
10.2	材料	177
10.2.1	聚丙烯	177
10.3	工艺链	178
10.4	工艺链各个过程的模拟	179
10.4.1	半晶态热塑料的结晶过程	179
10.4.2	分子取向的形成	182
10.4.3	半晶态热塑料的等效力学性能	184
10.4.4	材料宏观力学行为	185
10.5	实际工艺链的实现	189
10.5.1	SigmaSoft 软件	189
10.5.2	SphaeroSim 软件	189
10.5.3	HOMAT 软件	190
10.5.4	有限元 Abaqus 软件	190
10.5.5	仿真链	190

10.6	试验方法	192
10.7	结果	193
10.7.1	宏观过程模拟	194
10.7.2	微观结构模拟	194
10.7.3	等效力学性能	197
10.7.4	宏观零件的行为	203
10.8	结论	205
	参考文献	206
第 11 章	织物增强金属活塞杆测试算例	208
11.1	引言	208
11.2	试验流程	209
11.2.1	编织工艺	210
11.2.2	熔模铸造工艺	211
11.3	仿真链	211
11.3.1	概述	211
11.3.2	编织工艺的仿真	212
11.3.3	编织结构的仿真	215
11.3.4	渗透工艺的仿真	217
11.3.5	固化微观结构的仿真	217
11.3.6	等效各向异性材料性质	219
11.3.7	零件的等效性质	224
11.4	结论	224
	参考文献	225
第 12 章	不锈钢轴承套测试算例	227
12.1	引言	227
12.2	材料	228
12.2.1	概述	228
12.2.2	热物理性能	228
12.3	工艺过程	229
12.3.1	工艺链概述	229
12.3.2	铸造工艺	229
12.3.3	热处理工艺	230
12.3.4	机加工过程	230
12.3.5	应用过程	230

12.4	现象	231
12.4.1	对建模对象的概述	231
12.4.2	对各个现象的描述	231
12.5	仿真链	235
12.5.1	仿真工具	235
12.5.2	仿真流程	235
12.6	结果	236
12.6.1	宏观过程模拟	236
12.6.2	微观结构模拟	240
12.7	结论	243
	参考文献	244
第13章 未来的 ICME		245
13.1	必须面对的问题	245
13.2	经验和教训	248
13.3	未来方向	253
13.3.1	教育和培训	253
13.3.2	国际化、专业化和商业化	254
13.3.3	平台发展	255
13.4	结束语	257
	参考文献	257

DIYIBU 第 I 部分 概念

第 1 章 引 言

乔治·施密茨, 乌尔里奇·普拉尔

1.1 动 机

商品的复杂性和价值不断增加,因此其生产需要非常先进的、基于知识的定制材料和零件。一般来说,产品的形成伴随着计划和设计行为,以保证加工链的准确合适,从而得到具有所期待功能的零件,同时满足合理的成本目标。这是一个左右为难的问题,因为花费在计划和设计的成本必须与最终产品价值相应,并且同时,顾客还愿意以这个价格来买它。任何一位生产商感兴趣的是产品将要获得的利润。简单来说,利润可以定义为:

$$\text{利润} = \text{价值} - \text{成本}$$

这里价值可以理解为是第三方愿意为产品支付的价格,而成本是为了生产这一特定产品所有费用的总和。特别是,用于设计和计划该产品的工作,以及基于试验和仿真所确定的生产过程,都必须作为成本来考虑。所以,计划的优化过程(见图 1.1)将会降低花费在计划或者可靠性预测方面的功夫,包括时间和金钱,降低用于验证目的的试验测试的必要性,甚至可以使某个产品达到“一次完成”的程度。对于某些特别的情况,甚至产品的价值也会增加,例如,提供产品的生产过程的虚拟文件和其性能,顾客在使用这些产品时,可能会利用这些信息来更好地预计维护计划和寿命周期。而维护时间的缩短或者服役时间的延长,对顾客来说就是增加了产品的价值。可能还有另一个好处,产品刚开始服役时的性能是足够的——虽然还不是最优的,但可以在实际运行条件下进一步优化,也延长了产品的使用时间。

为了满足产品寿命周期模拟这样一个艰巨的目标,一个最基本的要求是对该

零件的生产历程能够进行完整的描述,以理想的初始条件开始,包括均匀的、各向同性的,以及无应力熔化等,随之以后续加工步骤,最终结束于对运行载荷下失效的描述。这样一个模拟类型的实现是“集成计算材料工程”(ICME)的重要目标之一。

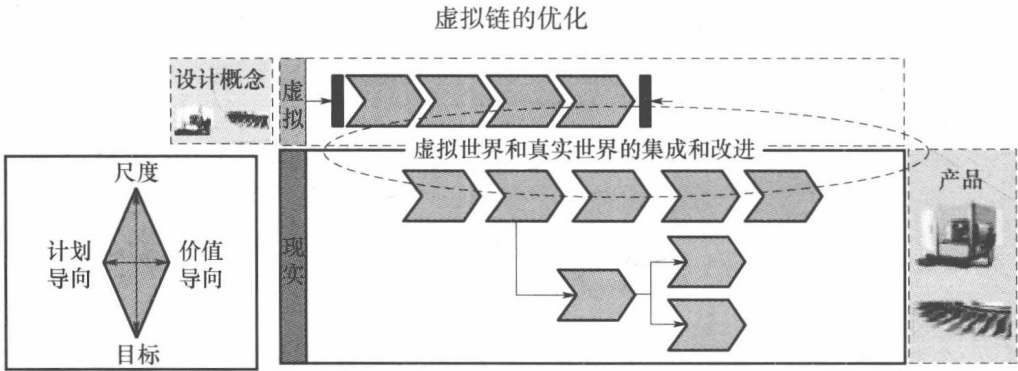


图 1.1 仿真可以实现产品加工计划过程花费的降低,通过(i)各个单一模块的优化, (ii)不同模块之间沟通的改善。举例来说,实际生产过程可以通过虚拟世界与在线加工控制的结合来优化

1.2 什么是 ICME

正如书名所指出,缩写 ICME 可以理解为“集成计算材料工程”,也可以像常用的那样,如维基字典,理解为“集成了的”计算材料工程——它们在术语方面的些微区别也说明,在进入到主题本身的细节之前,应该讨论一下用词的所有方面。

请看一下 ICME 这个词的四个组成字母“*I*”,“*C*”,“*M*”,“*E*”,材料学家可能会发现这和一个材料的四元相图相似,比如 $\text{Fe}-\text{C}-\text{Mn}-\text{Si}$ 合金系统(见图 1.2 (a)~(d))。为了构建一个四元合金系统的热力学描述,应该从每个纯元素开始,然后进入到二元系统,随后二元系统被用于构建三元系统,该三元系统进而被用于构建四元系统。值得注意的是一个三元系统可能包含一些信息,这些信息是不能通过对二元子系统的简单叠加获得的。

ICME 为本书用词提供了一种常用的理解,最好的开端是先探讨“一元系统”(即 *I*, *C*, *M* 和 *E* 这四个字母),然后再看“二元系统”(集成计算“*IC*”、集成材料“*IM*”、集成工程“*IE*”、计算材料“*CM*”、计算工程“*CE*”和材料工程“*ME*”),随之介绍的是“三元系统”(集成计算材料“*ICM*”、集成计算工程“*ICE*”、集成材料工程“*IME*”和计算材料工程“*CME*”),从而揭开这个四元系统的复杂性之谜。