

钛合金成形过程数值模拟

王狂飞 历长云 崔红保 等著



冶金工业出版社
Metallurgical Industry Press

钛合金成形过程数值模拟

王狂飞 历长云 崔红保 等著

北 京
冶金工业出版社
2009

内 容 简 介

全书共分7章。第1章介绍钛合金研究意义以及凝固过程数值模拟国内外研究最新进展。第2章以立式离心铸造为例,详细介绍了钛合金熔体充型过程数值模拟以及工艺参数对充填过程的影响。第3章详细介绍了凝固过程传热计算数学模型,缩孔、缩松预测数学模型等。第4章介绍了采用宏微观相结合的元胞自动机方法模拟组织形成的过程。第5章重点介绍了单相定向凝固理论基础、微观组织的计算模型、TiAl合金单相凝固过程特点、TiAl合金枝晶凝固特点等内容。第6章详细介绍了两相形核条件下的组织选择图、钛合金包晶相变相场模型构造等。第7章详细介绍了锻造过程组织模拟研究现状、微观组织预测模型等。

本书可供从事金属材料研究的科技人员和大专院校相关专业师生阅读。

图书在版编目(CIP)数据

钛合金成形过程数值模拟 / 王狂飞等著. —北京:冶金工业出版社, 2009. 8

ISBN 978-7-5024-4970-4

I. 钛… II. 王… III. 钛合金—成型—研究 IV. TG146. 2

中国版本图书馆CIP数据核字(2009)第119080号

出 版 人 曹胜利

地 址 北京北河沿大街嵩祝院北巷39号, 邮编100009

电 话 (010)64027926 电子信箱 postmaster@cnmip.com.cn

责任编辑 李培禄 美术编辑 张媛媛 版式设计 张 青 孙跃红

责任校对 卿文春 责任印制 牛晓波

ISBN 978-7-5024-4970-4

北京百善印刷厂印刷;冶金工业出版社发行;各地新华书店经销

2009年8月第1版, 2009年8月第1次印刷

148mm×210mm; 8.125印张; 237千字; 244页; 1-2000册

29.00元

冶金工业出版社发行部 电话:(010)64044283 传真:(010)64027893

冶金书店 地址:北京东四西大街46号(100711) 电话:(010)65289081

(本书如有印装质量问题,本社发行部负责退换)

序

钛合金具有低的密度、高的比强度和比模量,在高温时,这种合金依然可以维持较高的强度和刚度,并且具有良好的抗蠕变性和抗氧化的能力。因此钛合金被认为是最具潜力的新一代高温结构材料。基于钛合金的优良性能,该合金已广泛应用于航空、航天、舰船等各个领域且其应用量急剧上升,随着航空、航天以及相关领域高技术的快速发展,要求钛合金实现精确成形和高性能控制。为此,国内外在材料加工及制备领域正大力发展钛合金成形技术。其中钛合金定向凝固技术、离心铸造或熔模铸造技术、锻造成形技术等能够使钛合金实现成形和改性。钛合金成形过程是极其复杂的高温、动态和瞬时过程,难以直接观察,在这个过程中,材料经熔化、成形、相变、结晶与再结晶等一系列复杂的物理、化学、冶金变化而成形为毛坯或构件。为了获得优质构件,就必须控制制备过程,使材料的成分、工艺、组织与性能处于最佳状态,同时使缺陷减少到最低限度或将它转移到危害最小的区域。但这些难以实时观察,间接测试也十分困难。

随着计算机软硬件和数值模拟技术的快速发展,将仿真模拟应用于钛合金成形过程成为可能,过程模拟、缺陷预测、微观组织模拟和预测已成为国内外学者的研究热点。通过计算机模拟钛合金成形过程,一可以预测钛合金件的缺陷和性能,优化工艺参数;二可以揭示其微观组织的分布规律;三可为钛合金加工工艺的制订提供工程实用的科学依据和预见性设计方法,对发展钛合金加工技术具有重要理论意义和应用

价值。

本书的特点是针对钛合金成形的数值模拟,主要包括离心铸造过程模拟、缺陷预测、定向凝固过程单相及多相组织模拟、锻造过程组织模拟。该书介绍了国内外钛合金成形最新技术,并且把系统的理论分析和最新的研究成果结合起来,是材料工作者的一本良好参考书,也可以作为数值模拟方向的专业教材。

中国工程院院士



2009 年 4 月

前 言

随着航空、航天技术的进步,对高温结构材料的性能提出了越来越高的要求,钛合金以其优良的性能受到该领域的广泛关注。由于钛合金成形过程比较复杂,例如其熔炼温度较高,熔炼过程中易与其他合金元素发生剧烈反应,必须真空浇铸,且其充填过程及凝固过程中缺陷形成难以控制,通过数值模拟方法可以动态地观察钛合金的成形过程,有利于优化工艺,节约成本。

在钛合金成形过程模拟方面,尽管相关的会议论文集、学术期刊很多,但是还没有关于钛合金加工过程模拟的著作出版,本书弥补了这一不足。本书共分7章。第1章绪论,主要介绍了钛合金研究意义、钛合金定向凝固技术以及钛合金凝固过程数值模拟研究进展;第2章钛合金熔体充型过程计算机模拟,介绍了钛合金熔体充型过程数值模拟概况,并以立式离心铸造为例,详细介绍了充型过程数学模型、充型过程数学模型离散化处理、初始条件和边界条件的确定、立式离心力场下熔体质点的受力分析等;第3章钛合金凝固过程缩孔缩松预测,详细介绍了凝固过程传热计算数学模型、凝固过程潜热处理、初始条件和边界条件的确定,以及缩孔、缩松预测的数学模型等;第4章钛合金宏观凝固组织计算机模拟,详细介绍采用宏微观相结合的元胞自动机方法模拟铸件凝固过程中的组织形成,其中包括宏观计算模型、微观动力学模型、凝固过程中缩孔的形成模型等内容;第5章钛合金凝固过程单相微观组织模拟,详细介绍了单相定向凝固理论基础、微观组织的

计算模型、TiAl 合金单相凝固过程特点、TiAl 合金枝晶凝固特点等内容;第6章钛合金凝固过程多相微观组织模拟,详细介绍了两相形核条件下的组织选择图、钛合金包晶相变相场模型构造等;第7章钛合金锻造过程微观组织模拟,详细介绍了锻造过程微观组织模拟研究现状、微观组织预测模型等。

本书由河南理工大学、哈尔滨工业大学、哈尔滨理工大学、电子科技大学等相关教师合著。各章作者(按章节顺序)分别为:第1章由崔红保撰写,第2章由历长云撰写,第3章由历长云和王狂飞撰写,第4章由刘东戎撰写,第5章由王狂飞撰写,第6章由崔红保和李新中撰写,第7章由高涛撰写。本书由哈尔滨工业大学郭景杰教授主审。

鉴于作者水平所限,书中不当之处,敬请读者批评指正。

著 者
2009 年 4 月

目 录

1 绪论	1
1.1 钛合金研究意义	1
1.2 钛合金定向凝固技术概述	2
1.2.1 定向凝固方法及特点	2
1.2.2 钛铝基合金定向凝固技术	5
1.3 钛合金凝固过程数值模拟	17
1.3.1 钛合金充型凝固研究现状	17
1.3.2 钛合金充型凝固缺陷研究现状	24
1.3.3 钛合金微观组织模拟	26
1.4 本章小结	45
参考文献	45
2 钛合金熔体充型过程计算机模拟	50
2.1 概论	50
2.2 钛合金熔体充型过程数值模拟概况	51
2.2.1 实验研究现状	51
2.2.2 数值模拟研究现状	53
2.3 充型过程数值模拟计算方法	54
2.4 充型过程数学模型	58
2.4.1 流动数学模型	58
2.4.2 紊流流动数学模型	59
2.5 充型过程数学模型离散化处理	60
2.5.1 动量方程(Navier - Stokes)的离散	62
2.5.2 SOLA - VOF 计算方法	64

2.6	初始条件和边界条件的确定	67
2.6.1	初始条件	67
2.6.2	边界条件	68
2.7	立式离心力场下熔体质点的受力分析	69
2.7.1	基本假设	69
2.7.2	立式离心力场下熔体质点运动加速度模型	70
2.7.3	钛合金立式离心铸造充填过程数值模拟	72
2.7.4	钛合金薄壁件充填过程的数值模拟	80
2.8	实验验证	86
2.8.1	实验材料及方案	87
2.8.2	钛合金立式离心铸造实验结果及理论分析	88
2.9	本章小结	88
	参考文献	89
3	钛合金凝固过程缩孔缩松预测	92
3.1	概论	92
3.2	凝固过程传热计算数学模型	94
3.2.1	传统直接差分法的传热计算原理	94
3.2.2	改进的直接差分法传热计算原理	95
3.2.3	改值直接差分三维传热计算公式	96
3.3	凝固过程潜热处理	97
3.3.1	温度回升法	97
3.3.2	等价比热容法	97
3.3.3	热焓法	98
3.4	初始条件和边界条件的确定	98
3.5	缩孔、缩松预测的数学模型	100
3.5.1	凝固过程缩孔预测模型	101
3.5.2	凝固过程缩松预测模型	104
3.5.3	孤立区搜索模型	107
3.6	钛合金凝固过程缩孔缩松的计算机模拟	109
3.7	本章小结	117

参考文献	117
4 钛合金宏观凝固组织计算机模拟	119
4.1 概论	119
4.2 钛合金凝固过程组织模拟	120
4.2.1 宏观计算与微观计算相耦合	120
4.2.2 宏观计算模型	121
4.2.3 初始条件和边界条件的确定	124
4.2.4 微观动力学模型	124
4.2.5 凝固过程中缩孔的形成	126
4.3 钛合金凝固过程中晶粒组织形成的 CA 模拟方法	126
4.3.1 程序流程图	128
4.3.2 组织模拟举例	130
4.4 本章小结	136
参考文献	136
5 钛合金凝固过程单相微观组织模拟	138
5.1 概论	138
5.2 定向凝固理论基础	139
5.3 微观组织的计算模型	142
5.3.1 热和溶质扩散模型	142
5.3.2 液态金属形核与长大模型	147
5.4 TiAl 合金单相凝固过程特点	149
5.4.1 TiAl 合金平界面凝固特点	150
5.4.2 TiAl 合金枝晶凝固特点	151
5.5 TiAl 合金单相定向凝固组织演化过程模拟	160
5.5.1 模拟初始条件	161
5.5.2 晶核数量对凝固过程组织演化的影响	162
5.5.3 温度梯度对定向凝固过程组织演化的影响	165
5.5.4 抽拉速度对凝固过程组织演化的影响	174
5.5.5 铝含量对凝固过程组织演化的影响	181

5.6 TiAl 合金常规条件下凝固组织模拟	187
5.6.1 边界条件与初始条件	187
5.6.2 结果与讨论	187
5.7 本章小结	193
参考文献	194
6 钛合金凝固过程多相微观组织模拟	197
6.1 概论	197
6.2 两相形核条件下的组织选择图	198
6.2.1 平面生长	199
6.2.2 胞晶/枝晶生长	201
6.2.3 两相形核分析及其组织选择图	202
6.3 钛合金包晶相变相场模型的构造	206
6.3.1 Nestler 模型	207
6.3.2 Lo 模型	210
6.3.3 具体合金包晶相变相场模型构造	212
6.4 定向凝固 TiAl 合金包晶相变微观组织模拟	215
6.4.1 计算参数的选取及数值求解问题	215
6.4.2 小直径试样连续形核控制的微观组织	216
6.5 本章小结	218
参考文献	219
7 钛合金锻造过程微观组织模拟	221
7.1 概论	221
7.2 研究现状	221
7.2.1 钛合金的微观组织和性能	221
7.2.2 钛合金锻造技术	223
7.2.3 微观组织预测模型概述	225
7.2.4 锻造过程微观组织模拟研究现状	229
7.3 钛合金锻造微观组织模拟预测实例	231
7.3.1 有限元模型	231

7.3.2 微观组织预测模型	233
7.3.3 塑性变形 - 传热 - 微观组织演变耦合方法	234
7.3.4 工艺方案	234
7.3.5 工艺参数对微观组织的影响	235
7.4 本章小结	241
参考文献	241

1 绪 论

1.1 钛合金研究意义

随着航空、航天技术的进步,航空、航天发动机的转速越来越高,同时涡轮温度和推重比都在逐年提高,为了提高发动机的热效率和减轻发动机的自重,对发动机的结构材料尤其是高温结构材料的性能提出了越来越高的要求^[1]。现今广泛使用的高温结构材料为镍基超合金,由于合金本身的限制,其使用温度的提高越来越困难。发展一种介于镍基超合金和高温陶瓷之间的高温结构材料是高温合金研究中的长远目标。TiAl 基合金具有低密度、高强度、良好的抗腐蚀性、高的高温强度等优良的性能,被作为能代替铁合金和镍基合金的材料大力发展。由于其具有优异的常温和高温比强度、比刚度、高温抗氧化性和极限使用温度,因而,在航空、航天发动机等方面具有极高的应用前景。TiAl 基合金在飞机、导弹、火箭上的用量已成为航空航天领域发展水平的重要标志之一。TiAl 基合金的微观组织状态对力学性能有重要影响,全片层微观组织是潜在的喷气发动机叶片、涡轮盘和汽车发动机进排气阀材料^[2]。如果能够保证材料的片层方向与主应力方向一致,将大大提高材料的高温使用性能。另外金属间化合物由于原子之间既有金属键成分,又有共价键成分,以及在室温和高温下保持结构上长程有序,因而不但具有一定的室温塑性、韧性和抗裂纹扩展性,还有很高的高温强度、抗蠕变性能、显微组织的高温稳定性和弹性模量等高温结构材料所应有的性能。 γ -TiAl 基合金具有低的密度、高的比强度和比模量,在高温时,这种合金依然可维持较高的强度和刚度,并且有良好的抗蠕变和抗氧化能力。特别是由 TiAl(γ)/Ti₃Al(α_2)形成的全片层结构显示了良好的室温与高温综合性能,其高温性能与镍基合金相当,但其密

度还不到镍基合金的一半。 γ -TiAl 基合金作为一种密度较低金属间化合物,被认为是最具潜力的新一代高温结构材料。

1.2 钛合金定向凝固技术概述

1.2.1 定向凝固方法及特点

TiAl 基合金具有低密度、高强度、良好的抗腐蚀性、高的高温强度等优良性能,被作为能代替铁合金和镍基合金的材料大力发展。TiAl 基合金的微观组织状态对力学性能有重要影响,全片层微观组织是潜在的喷气发动机叶片、涡轮盘和汽车发动机进排气阀材料。然而, Ti-Al 金属间化合物因其力学性能的不平衡性,例如,室温下层片状组织具有优良的抗蠕变性能和断裂韧性,但塑性和强度很低以及 TiAl 基合金件批量生产的不确定因素等,造成了其投入实际应用存在一定障碍。由于定向凝固技术(DS)在镍基高温合金叶片铸造方面所获得的巨大成功,因此定向凝固技术作为解决该方法已引起许多研究者的注意。

定向凝固又称单向凝固或者单向结晶,是使金属或者合金由熔体中定向生长晶体的一种工艺方法。材料的使用性能是由其组织形态来决定的。因此,包括成分调整在内,人们通过控制材料的制备过程以获得理想的组织从而使材料具有所希望的使用性能,控制凝固过程已成为提高传统材料的性能和开发新材料的重要途径。定向凝固技术由于能得到一些具有特殊取向的组织 and 优异性能的材料,因而自它诞生以来得到了迅速的发展,目前已广泛地应用于高温合金、半导体材料、磁性材料以及自生复合材料的生产。同时,定向凝固技术的出现,也为凝固理论的研究和发展提供了实验基础^[3],使凝固理论向更深层次发展。

定向凝固技术的重要参数包括:凝固过程中固液界面前沿液相中的温度梯度 G_L 和固液界面向前推进的速度,即晶体生长速度 v 。 G_L/v 值是控制晶体长大形态的重要判据。在提高 G_L 的条件下,增加 v ,才能获得所要求的晶体形态,细化组织,改善质量,并提高定向凝固铸件的生产效率。

定向凝固技术的方法有很多种,可分为传统定向凝固技术和新兴定向凝固技术两种。具体方法主要有:

(1) 炉外结晶法(发热铸型法):炉外结晶法就是将金属液浇入一侧壁绝热、底部冷却、顶部覆盖发热剂的铸型中,在金属液和已凝固金属中建立起一个自上而下的温度梯度,自下而上进行凝固,实现单向凝固。这种方法温度梯度不大,很难控制,致使凝固组织粗大,铸件性能差,不适于大型、优质铸件的生产。但其工艺简单、成本低,可用于制造小批量零件^[4]。

(2) 功率降低法(PD法):将保温炉的加热器分成几组,分段加热。当金属液置于保温炉内,在从底部对铸件冷却的同时,自下而上顺序关闭加热器,金属则自下而上逐渐凝固,从而在铸件中实现定向凝固。在凝固过程中温度梯度是逐渐减小的,致使所能允许获得的柱状晶区较短,组织也不够理想,设备相对复杂,且能耗大,限制了该方法的应用^[5]。

(3) 快速冷却法(HRS):在 Bridgman 晶体生长技术的基础上发展的快速凝固法,是铸件以一定的速度从炉中移出或炉子移离铸件,采用空冷方式,而且炉子保持加热状态。这种方法有较高的温度梯度和冷却速度,所获得的柱状晶间距较长,组织细密挺直,且较均匀^[6]。

(4) 液态金属冷却法(LMC法):在 HRS 法的基础上,将抽拉出的铸件部分浸入具有高导热系数的高沸点、低熔点、热容量大的液态金属中,形成了一种新的定向凝固技术,即 LMC 法,能提高冷却速度和温度梯度,且在较大的生长速度范围内可使界面前沿的温度梯度保持稳定,结晶在相对稳态下进行,能得到较长的单向柱晶。常用液态金属有 Ga-In 和 Ga-In-Sn 合金^[7]。

(5) 区域熔化液态金属冷却法(ZMLMC法):将区域熔化与液态金属冷却相结合,利用感应加热集中对凝固界面前沿液相进行加热,有效地提高了固液界面前沿的温度梯度。这种方法最高温度梯度可达 1300K/cm ,最大冷却速度可达 50K/s ^[8]。

(6) 深过冷定向凝固(DUDS):1981 年 B. Lux 等首先提出过冷熔体中的定向凝固,基本原理是将盛有金属液的坩埚置于一激冷座上,在金属液被动力学过冷的同时,金属液内建立起一个自下而上的温度梯

度,冷却过程中温度最低的底部先形核,晶体自下而上生长,形成定向排列的树枝晶骨架,其间是残余的金属液。在随后的冷却过程中,这些金属液依靠向外界散热而向已有的枝晶骨架上凝固,最终获得了定向凝固组织^[9]。

(7)电磁约束成形定向凝固技术(DSEMS):电磁约束成形定向凝固技术是将电磁约束成形技术与定向凝固技术相结合而产生的一种新型定向凝固技术。该技术利用电磁感应加热熔化感应器内的金属材料,并利用电磁压力来约束已熔化的金属熔体成形。该技术可分为无接触和软接触两种,都能产生很高的温度梯度,使凝固组织超细化,显著提高铸件的表面质量和内在综合性能,而且可以应用于高熔点、活泼金属的定向凝固。但该技术涉及电磁流体力学、冶金、凝固以及自动控制等多学科领域,目前还处于研究开发阶段^[10]。

(8)激光超高温温度梯度快速定向凝固:利用大功率激光器在表面快速熔凝时,凝固界面的温度梯度可达到 $5 \times 10^4 \text{ K/cm}$,凝固速度高达数米每秒。Cline 等利用 90WcwNd: YAG 激光器作为热源来定向凝固制作 $\text{Al} - \text{Al}_2\text{Cu}$ 、 $\text{Pd} - \text{Cd}$ 共晶薄膜,得到了规则的层片状共晶组织。西北工业大学利用高能 CO_2 激光束作为热源,加热固定在陶瓷衬底上的厚度 0.5mm、宽度 5mm 的镍基高温合金薄片,初步实现了定向凝固组织^[11]。

表 1-1 给出了几种定向凝固方法的主要冶金参数。

表 1-1 不同定向凝固方法的主要冶金参数^[12]

项 目	功率降低法	快速冷却法	液态金属冷却法
温度梯度/ $\text{K} \cdot \text{cm}^{-1}$	7 ~ 11	26 ~ 30	73 ~ 103
生长速度/ $\text{cm} \cdot \text{h}^{-1}$	8 ~ 12	23 ~ 27	53 ~ 61
冷却速度/ $\text{K} \cdot \text{h}^{-1}$	90	700	4700
局域凝固时间/min	85 ~ 88	8 ~ 12	1.2 ~ 1.6

目前,定向凝固技术的最主要应用是生产具有均匀柱状晶组织的铸件,特别是在航空领域生产高温合金的发动机叶片。与普通铸造方法获得的铸件相比,它使叶片的高温强度、抗蠕变和持久性能、热疲劳性能得到大幅度提高。用定向凝固技术可以制备单晶,改善磁性材料

的磁性能,消除复合材料制备过程中增强相与基体间界面的影响。

定向凝固技术的发展推动了凝固理论的发展和深入。从 Chalmers 等^[13]的成分过冷理论到 Mullins 等^[14]的界面稳定动力学理论(MS 理论),人们对凝固过程有了更深刻的认识。近年来对 MS 理论界面稳定性条件所做的进一步分析表明,MS 理论还隐含着另一种绝对稳定性现象,即当温度梯度 G 超过一临界值 G_a 时,温度梯度的稳定化效应会完全克服溶质扩散的不稳定化效应,这时无无论凝固速度如何,界面总是稳定的,这种绝对稳定性称为高梯度绝对稳定性。寻求新方法实现高梯度绝对稳定性,揭示在这种极端条件下凝固过程的新现象和新规律,并在此基础上对该新现象予以更加准确的理论描述,成为当前急需进行的具有重大理论意义的研究工作。

随着工业技术对材料性能要求的提高,定向凝固技术必将为新材料制备和新加工技术的开发提供广阔的前景,也必将使凝固理论得到完善和发展。

1.2.2 钛铝基合金定向凝固技术

TiAl 基合金具有低密度、高强度、高温模量、良好的抗腐蚀性、高的高温强度等优良的性能,作为一种很有前途的材料在高温领域将代替钛合金和镍基超级合金。TiAl 基合金的力学性能取决于它们的微观组织,这种微观组织是由 $(\text{Ti}_3\text{Al}) \alpha_2$ 和 $(\text{TiAl}) \gamma$ 相层,或者双相片层 (α_2/γ) 和 γ 晶粒复式结构组成的。微观组织控制是提高合金力学性能的主要方法。许多研究表明,全片层微观组织比复式组织能产生良好的断裂强度和高温强度。但是全片层微观组织经常伴随着大尺寸晶粒,这样将导致差的塑性。而且以前的研究表明,由一个片层晶粒组成的 PST 单晶,片层微观组织的力学性能有很强的各向异性。全片层微观组织对于喷气发动机叶片、涡轮发动机轮和汽车发动机阀都是很有潜力的材料。为了获得良好的室温拉伸性能和高温延伸性,片层方向需要与生长方向一致。通常,两种不同的处理方法应用于处理片层微观组织。一种是用热机械处理(TMCP)减小晶粒的尺寸,另一种是用定向凝固使片层方向与载荷方向平行。对定向凝固,有两种方法控制片层方向,一种是籽晶法,另一种是不用种子的控制凝固过程方法。