270 月日 FOUNDRY 轻合金凝固技术专题

铝合金低压铸造过程数值模拟

谭云骧,马聚怀,许庆彦

(清华大学材料学院,先进成形制造教育部重点实验室,北京 100084)

摘要: 铝合金密度小、比强度高,常作为汽车轻量化材料。低压铸造充型平稳,能成形复杂 薄壁铸件,广泛应用于汽车典型零部件的制造。为优化低压铸造工艺、减少铸件缺陷、获得 优良组织性能的铸件,运用集成计算材料工程与多尺度数值模拟方法对铝合金低压铸造过程 开展研究,具有重要的科学意义与工程价值。本文全面综述了低压铸造铝合金凝固过程数值 模拟技术的发展,分析了充型过程和凝固过程的宏观数值模拟及其常用算法,归纳总结了元 胞自动机模拟铝合金初生相和共晶相的微观组织演变的研究现状,展望了铝合金低压铸造过 程数值模拟的未来发展方向。

关键词: 铝合金; 低压铸造; 集成计算材料工程; 数值模拟; 多尺度模拟

根据汽车工程学会2020年发布的节能与新能源汽车技术路线图^[1],对于车用材料,短期以完善高强度钢应用体系为重点,中期以形成轻质合金应用体系为方向, 远期以形成多材料混合应用体系为目标。铝合金作为应用最广泛的轻量化结构材料,因其具有较高的比强度、热导性,是汽车和航空等领域的关键材料^[2]。铝的轻量 化优势令其在汽车材料领域需求空间广阔,单车用铝量具有巨大的增长潜力。

低压铸造作为铝合金部件的重要成形方法,其铸造压力介于重力铸造和高压铸造之间。由于具有生产率高、压力下充型平稳、充型速度可控、尺寸精度较高、能成形结构复杂的铸件、不易产生氧化夹杂、组织致密等优点^[3],在汽车行业中,大多选用低压铸造方法生产轮毂和发动机缸盖^[4]。复杂薄壁铸件具有薄壁,结构复杂,轮廓尺寸大,尺寸精度高,内部质量要求高等特点,特别是对于形状复杂、壁厚差异大的薄壁铸件,其不同部位的微观组织和力学性能差别较大,关键部位的力学性能 难以满足服役要求^[3],因此复杂薄壁铝合金铸件的精确成形与组织控制、力学性能预测等问题仍需进一步深入研究。

美国于2011年提出"集成计算材料工程(ICME)"的概念,通过实验-计算-理论的集成创新,实现材料设计、开发、生产、应用等阶段的全过程加速,最终达到研发时间和研发成本双减半^[5]。经过数十年发展,针对铸造过程温度场、流场以及缩松缩孔等铸造缺陷宏观模拟的商业软件已陆续在铸造企业实际生产中得到应用,对降低低压铸造成本、减少研发周期起到了较大的帮助^[6]。在宏观层面,模拟预测温度场、流场以及缩松、缩孔、卷气等缺陷,能够更好地理解和优化铸造充型和凝固过程,从而提高铸件的整体质量。在微观层面,对微观组织进行多尺度模拟,这包括枝晶大小、晶粒结构、二次枝晶臂间距(SDAS)、析出相以及组织结构的形貌,从而得到工艺条件对微观组织的影响规律,并为力学性能预测奠定基础。基于微观组织的模拟,挖掘工艺-组织-性能之间的关系,开展预测铸态和热处理条件下铸件的力学性能,为优化铸造工艺和提高最终产品的性能提供了强有力的理论支持。

工艺条件决定了不同尺度组织的演变,而这些不同尺度的微观组织决定了铸件的最终力学性能,如抗拉强度、屈服强度、伸长率以及疲劳强度等。这就需要研究 者们对低压铸造过程中的微观组织演变过程进行多尺度模拟¹⁷¹,开展如图1所示的低 压铸造凝固条件-组织-性能的耦合计算研究,加快铝合金低压铸造工艺研发。

作者简介:

谭云骧(2000-),男, 博士生,主要从事数值模 拟的研究工作。E-mail: tyx22@mails.tsinghua.edu. cn 通讯作者: 许庆彦,男,教授。电话: 010-62795482,E-mail: scjxqy@tsinghua.edu.cn

中图分类号:TG249 文献标识码:A 文章编号:1001-4977(2024) 03-0270-12

基金项目:

北京市自然科学基金 - 小米 创新联合基金 L223001 资助。 收稿日期: 2023-11-22 收到初稿, 2024-01-10 收到修订稿。





Fig. 1 Schematic of multi-scale simulation coupling solidification conditions, microstructure, and mechanical properties in low pressure die casting process of aluminum alloys

1 低压铸造过程多尺度建模与仿真

低压铸造是一种反重力铸造方法,通过在保温炉 或保温坩埚中的液态合金液面上施加一定的压力,使 液态金属沿升液管从下向上充满铸型型腔,并在一定 压力下凝固成形。但在实际生产过程中,铸造过程中 填充型腔的压力水平、液相流速以及冷却速度等因素 仍会影响铸件中气孔和氧化膜等缺陷的形成与分布。 此外,铸件的力学性能还受到微观结构如晶粒尺寸、 二次枝晶臂间距以及析出相的形态与分布等的影响。 因此,要明确铝合金低压铸造过程中造成各种缺陷的 影响因素及形成机理,优化工艺以减少铸造缺陷进而 改善低压铸造铸件的力学性能。由于低压铸造充型凝 固过程复杂,通过试验及事后解剖方法无法了解实际 物理变化过程。虽然研究人员对低压铸造充型凝固过 程开展了一些试验研究,但对造成各种缺陷的影响因 素及其形成、发展机理的理解仍然不够深入,不能精 确有效地预测并消除其影响。因此,建立低压铸造过 程中相关的物理数学模型,并利用计算机数值模拟仿 真技术对宏观充型流场、凝固过程温度场,以及微观 组织演变过程进行仿真计算以预测低压铸造缺陷的形 成,对优化铸造工艺,获得高质量铸件具有重要工程 价值。

对于Al-Si-Mg三元合金,其冷却曲线与微观组织的形成示意图如图2所示。在低压铸造过程中,当熔体 温度低于液相线温度时,熔体中会生成 α (Al)相,并 随温度的降低而生长。同时,凝固前沿排出的Si和Mg 溶质元素富集在剩余液相中。当液相温度达到二元共 晶温度时,初生相之间的剩余液相区域开始析出 α (Al)+ β (Si)二元共晶结构。共晶 α (Al)的生长 会排出Si和Mg溶质,而共晶 β (Si)的生长则会消耗 液相中的Si溶质。因此,在二元共晶阶段,液相中的Si



图2 低压铸造铝合金冷却曲线与微观组织形成示意图 Fig. 2 Cooling curve and microstructural evolution of aluminum alloys in low pressure die casting process

溶质浓度变化较小,而Mg溶质浓度则急剧增加。当达 到三相共晶点时,剩余液相会转变为 α (Al)+ β (Si)+(Mg_2 Si)三相共晶结构。

1.1 充型过程模拟

充型过程是低压铸造的重要阶段。由于低压铸 造过程中充型较为平稳,金属液在铸型中上升速度较 慢,对低压充型过程的模拟主要是求解铝合金液体流 动的连续性方程、动量守恒方程和能量守恒方程,对 液态铝合金流体的自由表面进行追踪。其中质量守恒 和动量守恒一般利用连续性方程和Navier-Stokes方程进 行求解,如式(1)和式(2)所示,利用导热微分方 程求解能量守恒,如式(3)所示。

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \left(pv \right) = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(p\vec{v}) + \nabla (p\vec{v}\vec{v}) = \rho g + F_{\rm s} - \nabla p \qquad (2)$$

$$\rho c_{\mathbf{p}} \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_{\mathbf{p}} v \nabla T = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \dot{Q} \qquad (3)$$

式中: ρ 为密度, kg/m³, t为时间, s, v为速度, m/s, g 为重力加速度, m/s², F_s 为表面张力, N/m, p为压力, Pa, ∇ 为拉普拉斯算子, λ 为导热系数, W/(m・K), \dot{O} 为单位内热源发热率, J/(kg・s)。

低压铸造充型过程的数值模拟研究始于20世纪80 年代。计算流场的方法有很多,早期由Harlow等人^[8]提 出MAC算法及SMAC算法,Finite Volume方法等。现 在常用的主要是SuhasV. Patankar等人^[9]提出的SIMPLE 算法和美国LOS Alamos实验室^[10]提出的SOLA-VOF算 法。一系列铸造数值模拟的商用软件被开发出来,如 MAGMASOFT、ProCAST、Flow 3D、AnyCasting等, 可以进行铸造的充型、热传导、凝固过程以及应力场 的模拟。国内的铸造数值模拟软件近年来也有快速的 发展。清华大学是国内最早开始研发铸造数值模拟软 件的单位之一,其开发的具有自主知识产权的FT-Star 软件采用了有限差分的技术,且包含低压铸造的功能 模块。华中科技大学开发的华铸CAE软件可对铸件充 型、凝固过程进行计算机模拟,其中也含有低压铸造 的功能模块。华北工学院开发了CASTsoft铸造工艺模 拟仿真软件,能模拟包括低压铸造在内的多种铸造方 式。

沈阳铸造研究所的王君卿^[11]等人使用SOLA-VOF 算法对铸型充型过程进行二维充型模拟。清华大学闻 星火等人[12]通过开展低压铸造铝合金轮毂试验,开发 了基于SOLA-VOF算法的充型与凝固模拟软件。清华 大学程万里等人[13]根据低压铸造充型过程的特点,提 出内外区域分离简化算法,并对低压铸造生产的铝合 金轮毂的充型过程进行模拟,且模拟与试验结果吻合 良好。东北大学的孙晶莹^[14]等人基于Flow-3D商品化软 件,对不同结构的低压铸造平板型铸件充型过程进行 模拟,分析了增压速度和结构对卷气的影响。华北丁 学院的白月龙^[15]通过采用SOLA-VOF算法模拟充型过 程,解决了低压铸造浇不足的问题。华南理工大学的 梁秋华¹⁶等人基于AnyCasting软件,对水冷机壳低压铸 造充型过程进行数值模拟,研究了各工艺参数对充型 凝固过程的影响,并准确预测铸造缺陷。Dong等^[16]采 用ProCast软件,对不同冷却工艺的铝合金轮毂低压铸 造过程进行模拟与工艺优化,模拟结果如图3所示。



Fig. 3 Mold filling simulation of the LPDC fabricated A356 aluminum alloy wheel hub at different times

Liu等^[17]运用VOF方法通过两相流模型对低压铸造 模具充型过程进行了模拟,得到了3种压力加载速率 对应的充型速度场如图4所示^[17],并分析得出产生的涡 流以及充型速度的下降是产生氧化夹杂缺陷的主要原 因,模拟结果与利用X射线观察到的真实模具填充过程 吻合良好。Liu^[18]还运用VOF法,通过两相流模型研究 了低压铸造中扩大结构的充型行为,并通过有机玻璃 模具内的水模拟试验进行了验证。

1.2 凝固过程模拟

低压铸造凝固过程是一个较复杂的物理化学过

程,同时伴随着热量传输、溶质传输、动量传输和相 变等过程。低压铸造铸件的整个模拟过程中,包括充 型、凝固以及应力模拟等,都存在着温度场的模拟。 因其凝固过程包括热传导、热对流和热辐射三种基本 传热方式,故计算低压铸造凝固过程热量交换时用传 热方程进行模拟计算,如式(4)所示。

$$\rho c_{\mathbf{p}} \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \left(\lambda \nabla T\right) + \dot{Q} \tag{4}$$

式中: c_p 为比热容,J/(kg·s);t为时间,s;T为温度,K; λ 为导热系数,W/(m·K); \dot{Q} 为低压铸造过程单位体积内热源发热率,J/(m³·s)。





同其他铸造凝固过程一样,低压铸造过程中发生 凝固相变,释放出凝固潜热。常见的潜热处理方法有 等价比热法、温度回升法和热焓法。谢敏等人^[19]采用 PAM-CAST软件,对低压铸造轮毂模具的冷却过程进 行了研究。王柯等人^[20]对低压铸造的多类型界面换热 特点进行分类并对实际铝合金轮毂铸件进行了计算。 黄志豪^[21]采用ProCast软件对ZL114A的机匣铸件的温 度场与应力场进行模拟分析并优化了工艺。河南理工 大学的米国发等人^[22]运用View-Cast软件,针对低压铸 造的铝合金车轮进行温度场模拟,分析了缺陷形成机 理。王志坚等人^[23]运用ProCast软件,耦合充型和凝固 温度场分析了低压铸造铝合金轮毂,根据模拟结果优 化了模具结构和工艺参数。Merlin等^[24]对低压铸造A356 铝合金的轮毂填充和凝固行为进行了数值模拟,将 SDAS估算的凝固时间与计算凝固时间对比。黄玉祥^[25]应 用Procast对制动器分隔盘的多种铸造工艺参数进行模拟计 算,获得了最佳工艺参数,凝固模拟结果如图5所示。

1.3 初生相枝晶生长模拟

在合金微观组织模拟方面,目前应用最广泛的方





法主要是Cellular Automaton (CA)方法和Phase Field (PF)方法。CA方法基于物理基础和生长动力学理 论,通过设定体系演化规则和处理随机过程来模拟凝 固过程的微观组织^[7]。PF方法以金兹堡-朗道理论为基 础,综合考虑了热力学的有序化势和热力学驱动力, 引入了连续变化的序参量来求解能量和溶质守恒方程 以及相场变量方程,模拟凝固过程中复杂微观组织的 演化^[26]。

形核是凝固组织形成的关键步骤,它决定了不同 相的析出次序和具体分布。在铝合金凝固过程中,随 着温度的降低,初生相枝晶的自由能首先低于液相自 由能,因此开始形核并逐渐生长。铝合金低压铸造过 程中枝晶的形核模式通常是非均质形核,计算域中晶 粒形核模型有瞬时形核模型和连续形核模型。瞬时形 核模型假设所有形核在形核温度下瞬间发生^[27],适用 于尺寸相同的单一异质形核,即在某一过冷度下所有 晶粒瞬间形核,并不适用于铝合金低压铸造凝固过程 中的晶粒形核模式。连续形核模型则假设形核数与过 冷度之间有依赖关系,其中基于高斯分布的连续形核 模型^[28]常用于铝合金低压铸造过程形核过程,该模型 的表达式是:

$$\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}(\Delta T)} = \frac{n_{\mathrm{max}}^*}{\sqrt{2\pi}\Delta T_{\mathrm{s}}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta T - \Delta T_{\mathrm{mn}}}{\Delta T_{\mathrm{s}}}\right)^2\right] \quad (4)$$

式中: n是枝晶形核数目, n^{*}_{max}为形核质点最大密度, ΔT 为实际过冷度, ΔT_{m} 为平均形核过冷度, ΔT_{s} 为标 准曲率过冷度。

CA方法采用一层界面状态的网格将固液相分隔 开,其网格尺寸较大,计算域范围更广,同时可以考 虑温度场、流场对凝固组织的影响,实现了宏微观耦 合,且计算效率高,具有更大的工程应用价值^[29-30]。近 年来,CA方法在模拟实际铸造过程的凝固组织演化方 面得到了广泛应用,并取得了快速发展^[31]。PF方法由 于计算量非常巨大,虽然近年来研究者提出了自适应 网格技术和并行计算方法来提高PF方法计算速度, 但其模拟区域和计算效率仍与CA方法存在不小的差 距[32]。

形核后,使用CA方法对初生相枝晶生长进行模 拟的基本思想是将凝固过程在时间和空间上离散化。 首先将计算域划分为小尺寸的CA单元,每个单元包含 相应的状态值(液相、固相、界面)以及相关的变量 (温度、浓度、固相分数、生长取向等)。然后,根 据凝固过程的宏观传输方程和元胞状态的捕获规则, 描述CA单元的状态随着凝固时间的演变过程,从而 可以获得枝晶形态随时间和温度的演变过程。铝合金 凝固组织的细化主要体现在晶粒的细化和二次枝晶臂 间距的细化。晶粒的细化主要受形核条件的影响,而

二次枝晶臂间距的细化则取决于凝固过程。铝合金凝 固过程中,溶质扩散和再分配会受到成分过冷和动力 学过冷的影响,固液界面处的Si和Mg溶质会向液相中 排出,在固液界面前沿形成溶质梯度,有利于溶质扩 散。

清华大学李斌^[33]在阶梯铸件的低压铸造试验基 础上,考虑形核、溶质再分布、固相分数曲率以及各 向异性等因素,对铝合金微观组织演化进行了数值模 拟,模拟与试验结果如图6所示。2007年,李斌等^[34] 考虑了外加SiC颗粒与铝合金枝晶生长的相互作用, 模拟了颗粒在铝合金枝晶间偏聚过程的溶质场、速 度场,并进一步将CA模型与颗粒均匀性分析技术结 合、模拟得到SiC增强的铝合金复合材料的颗粒分布 及微观组织^[35]。石玉峰等^[36-41]在铝合金微观组织数值 模拟方面做了一系列工作。2011年,石玉峰等^[42]利用 NH₄Cl-74%H₂O透明合金进行了定向凝固试验,并建立 CA模型模拟了多温度梯度、多择优取向和多抽拉速度 对柱状晶的影响。并进一步耦合液体流动方程、溶质 对流扩散方程,研究了强制对流和自然对流对NH₄Cl-74%H₂O透明合金枝晶生长的影响^[38]。

Zhu等^[43]在传统的CA模型基础上,考虑了凝固过 程中溶质在固相和液相中的再分配、成分过冷和曲率 过冷对平衡界面温度的影响。2006年,Zhu等^[44]针对 低Peclet数区的枝晶生长开发了定量虚拟前沿的跟踪模 型,准确描述了铝合金从初始不稳定状态到稳定状态 的枝晶生长动力学,并对Al-10wt.%Cu合金等轴晶生长

(b1)阶梯1模拟结果 (b2)阶梯2模拟结果 (b3)阶梯3模拟结果 图6 低压铸造铝合金阶梯铸件不同位置微观组织模拟和试验结果

Fig. 6 Microstructure simulation and experimental results at different positions of LPDC aluminum alloy step-shaped castings.



进行了模拟,结果如图7所示。

Zhang等^[45]于2012年建立了二元合金树枝晶生长的CA模型,模拟了丁二腈-2.5(wt.%)乙醇的定向凝固枝晶生长,得到了一次枝晶臂间距。同时也建立了Al-Cu二元合金的CA模型,研究了迎流对树枝晶生长的影响^[46]。2014年,Chen等^[47]建立了二维CA模型,对铝合金凝固过程中枝晶生长进行了定量预测,该CA模型适用于多等轴晶生长和柱状晶生长的二维模拟。2015年,Chen等^[48]开展了铝合金的定向凝固试验并建立CA

模型,对定向凝固过程中铝合金枝晶形貌的演变与一次枝晶臂间距进行了较为深入的研究。同年,Chen等^[49] 提出一种改进的二维CA模型,采用一种新的基于杠杆 规则的有效方法来计算界面单元固相分数增量,对Al-Cu-Mg三元合金进行模拟。Chen等^[50]引入了一种偏心 八面体领域跟踪算法,消除了网格依赖性对三元铝合 金枝晶生长的的影响,并耦合热力学计算数据库,将 三元铝合金CA模型推广至三维,模拟结果如图8所示。 Chen等^[51]也改进了CA模型的形核模型,通过与热力



(b1-b4)1.4 s, 2.2 s, 4.6 s, 17 s的成分场模拟结果 图7 冷却速度5 K/s的Al-10wt.%Cu合金的等轴晶模拟结果

Fig. 7 Simulated equiaxed dendrite evolution of Al-10wt.%Cu alloy with cooling rate of 5 K/s



Fig. 8 Simulated multigrain solidification of an Al-7Si-0.36Mg alloy at a constant cooling rate of 2 K/s (al-a3) and 5 K/s (bl-b3)

学、动力学和平衡相图数据库耦合,对空间坐标进行 变换,建立三元铝合金的形核函数,建立了Al-Si-Mg合 金的三维枝晶生长CA模型,定量地预测了二次枝晶臂 间距的变化。Gu等^[52]对Al-Si-Mg三元合金建立了三维 定量CA模型,模拟了凝固过程中枝晶的生长,研究了 第三组分的浓度对枝晶形态和溶质分布的影响规律, 且模拟结果与LGK模型良好吻合。Hao等^[53]针对Al-Si-Mg的高真空压铸,建立了三元定量CA模型,模拟了不 同Si含量和冷却速度条件下的Al-Si-Mg合金凝固过程的 微观组织演变和微观偏析,模拟结果与EBSD结果吻合 良好。

1.4 共晶相生长模拟

共晶凝固是共晶两相在液相中竞争与协作的生长 过程。共晶组织分为规则共晶、非规则共晶和离异共 晶,其中Al-Si系合金的 α (Al)+ β (Si)共晶是一种典 型的非规则共晶组织^[54]。铝硅合金共晶凝固过程中, 存在液相、初生 α 相、共晶 α 相和共晶 β 相。当液相 温度降低到共晶温度以下一定温度时,液相中开始形 核,生长为共晶 α 相或共晶 β 相,并随着温度的不断 降低,晶核开始长大。共晶硅层片间距 λ 的尺寸一般 在几十微米内,热扩散效率远小于溶质扩散,并且在 α (Al)+ β (Si)共晶转变时,熔体的温度变化较小, 所以 α (Al)+ β (Si)共晶生长形态及组织特征主要受 溶质扩散和界面张力的作用。在平衡凝固条件下,达 到共晶温度时剩余液相中Si溶质溶度约为12.6%,共晶 α (Al)相中Si的固溶度约为1.6%,共晶硅中Si的固溶 度接近于100%。所以凝固过程中随着共晶 α (Al)相 的生长,界面前沿由于Si溶质的排出会出现溶质富集, 而随着共晶β(Si)相的生长,界面前沿由于Si溶质被 吸收导致出现溶质匮乏。

一些研究者利用易于观察的透明合金展开了对共 晶生长过程的试验与模拟研究。Shi等^[37]采用二维和三 维的CA模型,研究了CBr₄-C₂Cl₆透明合金的共晶凝固过 程,研究了抽拉速度对共晶间距的影响规律,并对透 明合金共晶间距演变规律和片状共晶到棒状共晶的转变 机制进行了模拟研究。Zhu等^[55]利用CA模型和CBr₄-C₂Cl₆ 透明共晶合金试验,研究了共晶相的合作和竞争生长 机制与扩散、生长速度对规则共晶演变的影响。Zhu等^[56] 考虑液相、初生相和两个共晶相的形核、取向和溶质 再分配等因素,考虑了竞争和耦合共晶生长机制建立 了MCA模型,模拟了共晶和亚共晶Al-Si合金的微观组 织演变。Chen等^[57]首先进行了冷却速度和Sr改性对共 晶Si生长的影响,后通过共晶生长算法和形核准则获得 了Al-Si共晶竞争和协同生长机制,并对Al-7Si合金在不 同凝固条件下的枝晶和共晶组织进行了模拟,结果如 图9所示。Hu等^[58]提出了一种结合有限差分方法的二维 CA模型,研究了Al-Si-Mg三元合金中气孔和枝晶的演 变,模拟结果如图10所示。Fang等^[59]根据Calphad方法 提出了一个考虑相平衡的二维CA模型,应用于三元铝 合金不规则共晶组织的演变,并研究了冷却速度对凝 固组织和微观偏析的影响,模拟结果如图11所示。

2 力学性能预测模拟

铝合金铸件的力学性能受到铸造工艺、热处理工



百多 0 K共同也很及下水以上AI-SI共同夺血族回归则实现纪末和小问六面也很不可下的关面形态和实现纪末 Fig. 9 Simulated results of unmodified Al-Si eutectic solidified isothermally with a eutectic undercooling of 6 K



Fig. 10 Simulated evolution of gas porosity, columnar dendrites, and eutectics during directional solidification of Al-7Si-0.4Mg alloy



(a-d)Si浓度场; (e-h)Mg浓度场(蓝色为液相,黄色为共晶α相,黑色为共晶β相,红色为γ相)
图11 Al-13Si-2.6Mg合金共晶显微组织演变模拟结果
Fig. 11 Simulated evolution of the eutectic microstructure for an Al-13Si-2.6Mg alloy

艺等因素的影响,这些因素会对低压铸造铸件的力学 性能产生重要影响,包括抗拉强度、屈服强度以及伸 长率等方面的性能。因此需要建立低压铸造和热处理 工艺参数与铝合金微观组织演变的定量化模型以及铸 件力学性能影响规律,以确保其在服役期间能够继续 满足设计要求。

278 转告 FOUNDRY 轻合金凝固技术专题

在铝合金的铸态力学性能预测中, 主要利用SDAS 建立了相关的计算模型。对于热处理后的性能预测, 许多研究者同样构建了针对热处理后力学性能强度的 预测模型。Esmaeili等^[60]将动力学模型和屈服强度模型 结合,研究了Al-Mg-Si-Cu合金的人工时效的沉淀硬化 行为。Maugis等^[61]建立了析出动力学的计算模型,推 导出析出物在形核过程中的成分、尺寸和生长速率, 将析出相形核、生长、粗化过程耦合。Liu等^[62]针对 Al-Cu二元合金、6061铝合金和Al-Zn-Mg合金,建立了 合金屈服强度与析出相尺寸、体积分数的定量关系, 预测了铝合金的板状和针状析出物的屈服强度。2012 年,Bahrami等^[63]假设时效析出相的分布由瞬时形核和 生长控制,在峰时效后该过程转变为粗化控制,建立 了Al-Mg-Si的时效硬化模型,预测了时效过程中的屈 服强度,预测结果如图12所示。Bardel等^[64]将析出尺寸 分布作为屈服强度微观力学模型的输入,考虑非球形 析出建立了描述6061铝合金非等温处理(T6热处理) 的析出与屈服应力的模型。Sjolander等人^[65]假设了由 α-Al基体扩散出的Mg,瞬时形核生长为球状析出相 Mg₅Si₆,建立了对人工时效的Al-Si-Mg合金的屈服强度 的模型。

2016年, Chen等^[66]开展了Al-7Si-0.4Mg的时效试验,获得了拉伸应力应变曲线和力学性能数据并得出



图12 时效温度190 ℃下AA6061合金的屈服强度预测 Fig. 12 Prediction of yield strength of AA6061 alloy with aging temperature of 190 ℃

屈服强度和拉伸强度之间的关系,建立了Al-Si-Mg三元 合金的时效析出动力学模型、强化模型与应变硬化模 型,最终成功预测了两种时效温度处理后的抗拉强度 以及伸长率,结果如图13所示。Chen等^[67]通过耦合计 算相图数据库,建立了Al-Mg-Si三元合金针状析出相的 析出、长大、粗化动力学模型和时效强化模型,从而 模拟得到析出相尺寸、形核密度、相分数等,进而实 现对屈服强度的预测。针对铝合金铸件拉伸过程中的 应力应变,模拟了180℃时效条件下屈服强度、抗拉强 度和伸长率随时效时间的变化规律^[68]。针对铝合金铸 件屈服强度,铝合金各个阶段的微观组织演变、二次



Fig. 13 Prediction of mechanical property of Al-7Si-0.4Mg alloy: aging 0-36 hours at 160 °C and 180 °C, and comparative assessment of UTS and EL (experimental vs. predicted)

枝晶臂间距、初生相和共晶相随凝固条件的影响规律也 开展了较深入地研究,分析了影响Al-7Si-Mg最终屈服 强度的因素。但该时效析出动力学模型仅考虑了针状的 β"相,且其长径比和界面能不随时效过程而变化^[69]。

3 总结与展望

数值模拟技术对铝合金低压铸造的工艺优化和质 量控制具有非常大的指导作用。近几十年来已发展出 不少算法与商业数值模拟软件,对充型、凝固等宏观 物理现象进行数值模拟,帮助优化低压铸造工艺,减 少铸造缺陷,降低生产成本,提高生产效率和产品质 量。此外,对铝合金低压铸造过程中枝晶和共晶微观 组织的演变开展了数值模拟,并建立了微观组织与力 学性能之间的关系。然而,铝合金低压铸造的数值模 拟仍面临一些挑战,如数值模拟计算的准确性、数值 计算效率的提高以及多尺度模拟的深度耦合。期望铝 合金低压铸造数值模拟在以下方面深化发展。

(1)现有的多尺度数值模拟中,宏观模拟与微 观模拟多是未耦合或者弱耦合,未来的研究应进一步 发展ICME在低压铸造中的应用,深度耦合宏观模拟 与微观模拟,实现宏观与微观之间的信息传递,构建 低压铸造工艺全流程模拟体系,从而提高模拟结果的 一致性和准确性。

(2)铝合金低压铸造数值模拟领域未来将在高性能计算和并行计算技术的支持下,加快数值模拟的计算速度,扩大低压铸造数值模拟计算域,实现对大型复杂薄壁低压铸件进行快速多尺度模拟。

(3)针对目标力学性能的低压铸造铸件快速设 计铸造新工艺,将大数据与机器学习的方法结合进数 值模拟技术中,从大规模的模拟数据中挖掘规律,建 立成分-工艺-组织-性能的对应关系,从而快速获得目 标性能铸件对应的工艺,加速低压铸造工艺开发。

参考文献:

- [1] 于永初.《节能与新能源汽车技术路线图2.0》引领中国汽车产业发展 [J]. 汽车工艺师, 2020(11): 8-10.
- [2] 罗爱华, ANIL K SACHDEV, BOB R POWELL. 汽车轻量化先进铸造技术 [J]. 铸造, 2011, 60(2): 113-119.
- [3] 杨瑶. 某型号铝合金轮毂低压铸造成型工艺研究 [D]. 太原:中北大学, 2020.
- [4] 张水勇, 江玉华. 低压铸造机在汽车铝合金缸盖生产中的应用 [J]. 铸造技术, 2008 (1): 128-130.
- [5] 宿彦京,付华栋.中国材料基因工程研究进展 [J]. 金属学报,56(10):1313-1323.
- [6] 梁秋华,韩伟,黄凌森,等.水冷机壳低压铸造凝固过程数值模拟及工艺优化 [J].铸造,2019,68(4):353-358.
- [7] MURAT Tiryakioğ lu, JOHN Campbell, NIKOLAOS D Alexopoulos. Quality indices for aluminum alloy castings: A critical review [J]. Metallurgical and Materials Transactions B, 2009, 40: 802–811.
- [8] HARLOW F H, WELCH J E. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free furface [J]. The Physics of Fluids, 1965, 8 (12) : 2182–2189.
- [9] PATANKAR, SUHAS V. A Calculation Procedure for Two-Dimensional Elliptic Situations [J]. Numerical Heat Transfer Fundamentals, 1981, 4 (4): 409–425.
- [10] NICHOLS B, HIRT C, HOTCHKISS R. SOLA-VOF: a solution algorithm for transient fluid flow with multiple free boundaries: LA-8355, 5122053 [R]. 1980: LA-8355, 5122053.
- [11] 王君卿, HANSEN S F, HANSEN P N. 铸型充填过程模型化及流动场数值模拟 [J]. 铸造, 1987(12): 20-22.
- [12] 闻星火, 康进武, 熊守美, 等. 低压铸造铝合金轮毂充型与凝固模拟 [J]. 中国有色金属学报, 1999 (1): 127-132.
- [13] 程万里, 熊守美, 柳百成. 低压铸造过程充型模拟简化模型的研究 [J]. 铸造, 2003 (8): 609-612.
- [14] 孙晶莹,乐启炽,赵旭,等.基于Flow-3D的铝合金铸件低压铸造卷气行为 [J].特种铸造及有色合金, 2019, 39 (7):739-741.
- [15] 白月龙. 低压铸造充型过程数值模拟研究 [D]. 太原:华北工学院,2002.
- [16] DONG Guojiang, LI Shide, MA Shaozhong, et, al. Process optimization of A356 aluminum alloy wheel hub fabricated by low-pressure die casting with simulation and experimental coupling methods [J]. Journal of Materials Research and Technology, 2023, (24): 3118– 3132.
- [17] LIU Shanguang, CAO Fuyang, ZHAO Xinyi, et al. Characteristics of mold filling and entrainment of oxide film in low pressure casting of A356 alloy [J]. Materials Science and Engineering: A, 2015, 626: 159–164.
- [18] LIU Shanguang, LUO Chuanbiao, LI Guoai, et al. Effect of pressurizing speed on filling behavior of gradual expansion structure in low pressure casting of ZL205A alloy [J]. China Foundry, 2018, 15 (4): 276–282.
- [19] 谢敏,王迎春,李大永,等. 镁合金轮毂低压铸造模具冷却与温度场的模拟 [J]. 铸造技术, 2005 (4): 296-299.
- [20] 王柯,闻星火,熊守美,等.低压铸造三维温度场的冷却边界条件处理 [J]. 特种铸造及有色合金, 2003 (1): 32-33+2.
- [21] 黄志豪. 铝合金机匣低压铸造过程数值模拟及工艺研究 [D]. 哈尔滨:哈尔滨工业大学, 2020.
- [22] 米国发,历长云,王狂飞,等. 铝合金车轮低压铸造工艺数值模拟及应用 [J]. 热加工工艺,2013, 42 (7): 60-62.
- [23] 王志坚,赵岩,宋鸿武,等.大型铝合金轮毂低压铸造过程数值模拟及工艺优化 [J]. 特种铸造及有色合金,2014,34(3):256-

259.

- [24] MERLIN M, TIMELLI G, BONOLLO F, et al. Impact behaviour of A356 alloy for low-pressure die casting automotive wheels [J]. Journal of Materials Processing Technology, 2009, 209 (2): 1060–1073.
- [25] 黄玉祥. 汽车铝合金零件的低压铸造数值模拟研究 [D]. 南昌: 南昌大学, 2015
- [26] ZHANG Ang, DU Jinglian, GUO Zhipeng, et al. A phase-field lattice-boltzmann study on dendritic growth of Al-Cu alloy under convection [J]. Metallurgical and Materials Transactions B, 2018, 49 (6): 3603–3615.
- [27] FLOOD S C, HUNT J D. Columnar and equiaxed growth [J]. Journal of Crystal Growth, 1987, 82 (3): 552–560.
- [28] TVEITO K O, PAKANATI A, M' HAMDI M, et al. A aimplified three-phase model of equiaxed solidification for the prediction of microstructure and macrosegregation in castings [J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 2018, 49 (7) : 2778–2794.
- [29] LI B, XU Q Y, LIU B C. Numerical modeling of microstructure evolution and dendrite growth for Al-Si alloy casting during low pressure die casting [J]. Materials Science Forum, 2007, 561-565: 1787–1792.
- [30] ZHANG Yongjia, ZHOU Jianxin, YIN Yajun, et al. Multi-GPU implementation of a cellular automaton model for dendritic growth of binary alloy [J]. Journal of Materials Research and Technology, 2021, 14: 1862–1872.
- [31] 赵九洲,李璐,张显飞.合金凝固过程元胞自动机模型及模拟方法的发展 [J]. 金属学报, 2014, 50(6): 641-651.
- [32] WANG W, MURRAY J L, HU S Y, et al. Modeling of plate-like precipitates in aluminum alloys—comparison between phase field and cellular automaton methods [J]. Journal of Phase Equilibria and Diffusion, 2007, 28 (3): 258–264.
- [33] 李斌, 许庆彦, 潘冬, 等. 低压铸造ZL114A铝合金微观组织模拟 [J]. 金属学报, 2007(2): 759-762, 734.
- [34] 李斌, 许庆彦, 柳百成, 等. 有外加相存在时Al-Si合金枝晶微观组织数值模拟 [J]. 金属学报, 2007, 43 (3): 240-248.
- [35] 李斌,许庆彦,李旭东,等. Al-Si/SiC_p复合材料微观组织模拟及颗粒分布均匀性定量预测 [J]. 机械工程学报,2007(1):202-207,213.
- [36] SHI Yufeng, XU Qingyan, LIU Baicheng. Simulation and experimental validation of three-dimensional dendrite growth [J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2012, 22 (11): 2756–2761.
- [37] 石玉峰, 许庆彦, 柳百成. 定向凝固共晶生长的元胞自动机数值模拟 [J]. 金属学报, 2012, 48(1): 41-48.
- [38] 石玉峰, 许庆彦, 柳百成. 对流作用下枝晶形貌演化的数值模拟和实验研究 [J]. 物理学报, 2011, 60(12): 381-391.
- [39] 石玉峰,许庆彦,柳百成. 基于改进元胞自动机方法的强制对流作用下三维枝晶生长的数值模拟 [J]. 稀有金属材料与工程,2013,42 (4):700–705.
- [40] 石玉峰, 许庆彦, 柳百成. 基于改进元胞自动机模型的三元合金枝晶生长的数值模拟 [J]. 物理学报, 2012, 61(10): 455-462.
- [41] 石玉峰,许庆彦,李忠林,等. 基于CA方法的铝合金铸件微观组织的数值模拟 [J]. 铸造,2011,60(12): 1209–1213.
- [42] 石玉峰,许庆彦,龚铭,等. 定向凝固过程中NH₄Cl-H₂O枝晶生长的数值模拟 [J]. 金属学报,2011,47(5):620-627.
- [43] ZHU M F, HONG C P. A modified cellular automaton model for the simulation of dendritic growth in solidification of alloys [J]. ISIJ International, 2001, 41 (5): 436–445.
- [44] ZHU M, STEFANESCU D. Virtual front tracking model for the quantitative modeling of dendritic growth in solidification of alloys [J]. Acta Materialia, 2007, 55 (5): 1741–1755.
- [45] 张显飞,赵九洲. 合金定向凝固一次枝晶间距模拟 [J]. 中国有色金属学报, 2012, 22 (10): 2868-2874.
- [46] 张显飞,赵九洲.来流对Al-Cu合金三维树枝晶生长的影响 [J].金属学报,2012,48(5):615-620.
- [47] CHEN Rui, XU Qingyan, LIU Baicheng. A modified cellular automaton model for the quantitative prediction of equiaxed and columnar dendritic growth [J]. Journal of Materials Science & Technology, 2014, 30 (12): 1311–1320.
- [48] 陈瑞,许庆彦,柳百成. Al-7Si-0.36Mg合金定向凝固一次枝晶臂间距实验和模拟 [J]. 中国有色金属学报,2015,25(10):2613-2622.
- [49] CHEN Rui, XU Qingyan, LIU Baicheng. Simulation of the dendrite morphology and microsegregation in solidification of Al-Cu-Mg aluminum alloys [J]. Acta Metallurgica Sinica (English Letters), 2015, 28 (2): 173–181.
- [50] CHEN Rui, XU Qingyan, LIU Baicheng. Cellular automaton simulation of three-dimensional dendrite growth in Al-7Si-Mg ternary aluminum alloys [J]. Computational Materials Science, 2015, 105: 90–100.
- [51] 陈瑞,许庆彦,吴勤芳,等. Al-7Si-Mg合金凝固过程形核模型建立及枝晶生长过程数值模拟 [J]. 金属学报, 2015, 51 (6): 12.
- [52] GU Cheng, COLIN D Ridgeway, LUO Alan A. Examination of dendritic growth during solidification of ternary alloys via a novel quantitative 3D cellular automaton model [J]. Metallurgical and Materials Transactions B, 2019, 50 (1): 123–135.
- [53] HAO Yongzhi, ZHAO Haidong, SHEN Xu, et al. Simulation of α -Al grain formation in high vacuum die-casting Al-Si-Mg alloys with multi-component quantitative cellular automaton method [J]. China Foundry, 2022, 19 (2): 99–108.
- [54] LI Qinglin, ZHU Yuqian, ZHAO Shang, et al. Influences of Fe, Mn and Y additions on microstructure and mechanical properties of hypoeutectic Al-7%Si alloy [J]. Intermetallics, 2020, 120: 106768.
- [55] ZHU M F, HONG C P. Modeling of microstructure evolution in regular eutectic growth [J]. Physical Review B, 2002, 66 (15) : 155428.
- [56] ZHU M F, HONG C P. Modeling of irregular eutectic microstructures in solidification of Al-Si alloys [J]. Metallurgical and Materials Transactions

2024年 第3期/第73卷

A, 2004, 35 (5) : 1555-1563.

- [57] CHEN Rui, XU Qingyan, LIU Baicheng. Modeling of aluminum-silicon irregular eutectic growth by cellular automaton model [J]. China Foundry, 2016, 13 (2): 114–122.
- [58] HU Mengdan, WANG Taotao, FANG Hui, et al. Modeling of gas porosity and microstructure formation during dendritic and eutectic solidification of ternary Al-Si-Mg alloys [J]. Journal of Materials Science & Technology, 2021, 76: 76–85.
- [59] FANG Hui, TANG Qianyu, ZHANG Qingyu, et al. Modeling of microstructure and microsegregation formation during solidification of Al-Si-Mg alloys [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2019, 133: 371–381.
- [60] ESMAEILI S, LLOYD D J, POOLE W J. Modeling of precipitation hardening for the naturally aged Al-Mg-Si-Cu alloy AA6111 [J]. Acta Materialia, 2003, 51 (12): 3467–3481.
- [61] MAUGIS P, GOUNÉ M. Kinetics of vanadium carbonitride precipitation in steel: A computer model [J]. Acta Materialia, 2005, 53 (12): 3359–3367.
- [62] LIU G, ZHANG G J, DING X D, et al. Modeling the strengthening response to aging process of heat-treatable aluminum alloys containing plate/disc-or rod/needle-shaped precipitates [J]. Materials Science and Engineering: A, 2003, 344 (1-2) : 113-124.
- [63] BAHRAMI A, MIROUX A, SIETSMA J. An age-hardening model for Al-Mg-Si alloys considering needle-shaped precipitates [J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 2012, 43 (11): 4445–4453.
- [64] BARDEL D, PEREZ M, NELIAS D, et al. Coupled precipitation and yield strength modelling for non-isothermal treatments of a 6061 aluminium alloy [J]. Acta Materialia, 2014, 62: 129–140.
- [65] SJÖLANDER E, SEIFEDDINE S, SVENSSON I L. Modelling yield strength of heat treated Al-Si-Mg casting alloys [J]. International Journal of Cast Metals Research, 2011, 24 (6): 338–346.
- [66] 陈瑞. Al-7Si-Mg铝合金拉伸过程应变硬化行为及力学性能模拟研究 [J]. 金属学报, 2017, 53 (9): 1110-1124.
- [67] 陈瑞,许庆彦,柳百成. Al-Mg-Si合金中针棒状析出相时效析出动力学及强化模拟研究 [J]. 金属学报,2016,52 (8):987–999.
- [68] 陈瑞,许庆彦,郭会廷,等. Al-7Si-Mg铸造铝合金拉伸过程应力-应变曲线和力学性能的模拟 [J]. 铸造, 2016, 65 (8): 737–743.
- [69] 陈瑞,许庆彦,郭会廷,等. Al-7Si-Mg铸造铝合金凝固和热处理过程微观组织模拟和屈服强度预测 [J]. 稀有金属,2017,41(8): 837-849

Numerical Simulation of Low Pressure Die Casting Process of Aluminum Alloy

TAN Yun-xiang, MA Ju-huai, XU Qing-yan

(Key Laboratory for Advanced Materials Processing Technology, Ministry of Education, School of Materials Science and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract:

Aluminum alloys, characterized by their low density and high specific strength, are commonly used as lightweight materials in automobiles. Low pressure die casting facilitates smooth filling and the formation of complex, thin-walled castings, making it widely applicable in the manufacturing of typical automotive components. To optimize the low-pressure casting process, reduce casting defects, and obtain castings with superior mechanical properties, Integrated computational materials engineering (ICME) and multi-scale numerical simulation methods have been utilized to study the low pressure die casting process of aluminum alloys, which bear significant scientific and engineering value. This article provides a comprehensive review of the development of numerical simulation techniques for solidification in low pressure die casting of aluminum alloys. It concludes macro numerical simulations and their common algorithms for the filling and solidification processes, summarizes the current state of research on the microstructural evolution of primary and eutectic phases in aluminum alloys using the cellular automaton simulation, and forecasts the future development directions of numerical simulations for the solidification process in low pressure die casting of aluminum alloys.

Key words:

aluminum alloy; low pressure die casting; ICME; numerical simulation; multi-scale simulation