

基于 CA 法的高温合金 IN690 管材挤压变形动态再结晶组织演变规律研究

王忠堂¹, 户金科¹, 王羚伊²

(1. 沈阳理工大学, 辽宁 沈阳 110159)

(2. 沈阳工学院, 辽宁 抚顺 113122)

摘要: 采用元胞自动机(CA)方法对高温合金 IN690 管材挤压变形过程中动态再结晶组织演变规律进行了数值模拟研究。确定了位错密度模型、回复模型、形核模型、晶粒长大模型等。分析了挤压变形过程中动态再结晶的过程, 得到了变形过程中的晶粒形态、分布、取向和尺寸。结果表明, 在相同挤压比条件下, 管壁外部的平均晶粒尺寸小于管壁中部; 在管材的相同部位, 随着挤压比的增大, 平均晶粒尺寸减小。平均晶粒尺寸的数值模拟结果与实验结果的相对误差小于 16.6%。

关键词: 高温合金; IN690; 元胞自动机; 动态再结晶; 晶粒尺寸

中图分类号: TG376.9

文献标志码: A

文章编号: 1002-185X(2017)09-2512-05

动态再结晶晶粒的大小和分布的均匀程度显著的影响金属材料的力学性能。因此, 控制和预测热变形过程中动态再结晶微观组织的演变具有重要意义。而元胞自动机 (cellular automata, CA) 法可以很好地用于模拟动态再结晶过程。元胞自动机 (CA) 方法在非线性和复杂动态系统的模拟上日趋成熟, 已经成功应用于很多科学领域中。国外 Rappaz^[1]和 Gandin^[2]等人很早就利用 CA 法模拟了凝固组织。Goetz^[3]首次采用 CA 法模拟了动态再结晶过程。周盛^[4]等将成形过程与 CA 法联系起来模拟了叶片成形中的动态再结晶过程。邓小虎等^[5,6]利用 CA 法将热变形参数与位错密度变化耦合起来, 模拟了动态再结晶晶粒的形核与长大。并且元胞自动机法目前已经应用在凝固结晶的形核生长、再结晶和相变等过程的模拟^[7-9]。Li 等^[10]研究了 TA15 钛合金 β 相转化 α 相时动态再结晶规律。吾志岗等^[11]研究了 GH625 高温合金发生动态再结晶所需的临界变形量与变形温度和应变速率的函数关系, 建立了动态再结晶的运动学方程, 其动态再结晶的形核方式主要为晶界弓出形核和亚晶合并长大形核。彭海健等^[12]研究发现, GH690 高温合金热变形时动态再结晶过程受变形温度及应变速率影响, 动态再结晶晶粒尺寸随变形温度增加而增大, 确定了动态再结晶发生的临界变形条件。王彬等^[13]研究了 Inconel

690 高温合金在高速热变形过程中的动态再结晶机制主要为亚晶直接转变为晶粒不连续动态再结晶 (DDRX), 应变诱导大角晶界弓出形核的不连续动态再结晶在变形初期比较明显, 而在整个变形过程中, 亚晶直接转变为晶粒的不连续动态再结晶起主要作用。

国内外学者对 IN690 高温合金热变形时的动态再结晶规律进行了研究, 并且取得了一些成果。但采用元胞自动机(CA)方法对 IN690 高温合金管材挤压变形过程中的动态再结晶规律的研究工作还很少。本文采用元胞自动机(CA)方法和数值模拟软件相结合对 IN690 高温合金管材挤压成形过程中的动态再结晶规律进行研究, 为制定合理的挤压成形工艺参数提供理论依据。

1 理论模型

1.1 位错密度模型

IN690 高温合金管材挤压成形属于热加工, 挤压的过程中产生变形积累位错。在 DEFORM-3D 中, 位错密度模型见式(1)~(4)。

$$\frac{d\rho_i}{d\varepsilon} = (h - r\rho_i) \quad (1)$$

$$h = h_0 \left(\frac{\dot{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}_0} \right)^m \cdot \exp \frac{mQ}{RT} \quad (2)$$

收稿日期: 2016-09-03

基金项目: 国家自然科学基金 (51575366)

作者简介: 王忠堂, 男, 1962 年生, 博士, 教授, 沈阳理工大学材料科学与工程学院, 辽宁 沈阳 110159, 电话: 024-24680841, E-mail: ztwang@imr.ac.cn

$$r = r_0 \left(\frac{\dot{\epsilon}}{\dot{\epsilon}_0} \right)^{-m} \cdot \exp \frac{-mQ}{RT} \quad (3)$$

$$\rho_{i,j}^t = \rho_{i,j}^{t-1} / 2 \quad (4)$$

式中, ρ_i 表示位错密度($1/m^2$); h 表示位错应力场作用范围高度(m); r 表示位错应力场作用范围半径(m); ϵ 表示应变; m 表示速率敏感度, 一般 m 取 0.2; h_0 表示硬化常数; r_0 表示回复常数; $\dot{\epsilon}$ 表示应变速率(s^{-1}); $\dot{\epsilon}_0$ 表示应变速率校准常数; Q 表示激活能(J/mol); R 为气体常数, 8.314 J/(mol K); T 为管材温度(K)。

1.2 回复模型

在热加工过程中, 在金属内部同时进行着加工硬化与回复再结晶软化两个相反的过程。在 DEFORM-3D 中采用的回复模型为 Goetz^[3]提出的, 即每一时间步随机选取一定数量的元胞 N , 使其位错密度降低一半。使得各个元胞的位错密度分布不均匀。元胞数量 N 由式(5)确定。

$$N = \left(\frac{\sqrt{2M}}{K} \right)^2 \dot{\rho}^2 \quad (5)$$

式中, M 表示 CA 模型中总元胞数; K 表示常数, 取 6030; $\dot{\rho}$ 表示位错密度增长速率。

1.3 形核模型

动态再结晶的形核与位错密度有关。随着应变速率的增大, 位错密度 ρ 以一定速率增大, 达到临界值 ρ_c 时, 新晶粒开始在晶界处以一定形核速率 \dot{n} 开始形核。一般认为形核速率 \dot{n} 与应变速率 $\dot{\epsilon}$ 呈线性关系^[4], 见式(6)。

$$\dot{n} = C\dot{\epsilon}^\alpha \quad (6)$$

式中, \dot{n} 为形核速率, C 与 α 表示常数, $\alpha=0.9$, $C=200$ 。

1.4 晶粒长大模型

动态再结晶晶粒的生长速度与单位面积的驱动力成正比^[10], 见式(7)。

$$v_i = \frac{b}{kT} D \exp \left(\frac{-Q_b}{RT} \right) F_i / (4\pi r_i^2) \quad (7)$$

$$F_i = 4\pi r_i^2 \tau (\rho_m - \rho_i) - 8\pi r_i \gamma_i \quad (8)$$

式中, v_i 表示再结晶晶粒的生长速度, k 表示玻尔兹曼常数。 r_i 表示第 i 个动态再结晶晶粒的半径。 b 表示伯格矢量。 D 表示扩散系数。 Q_b 表示边界激活能。 ρ_i 表示位错密度。 ρ_m 表示与之相邻晶粒的位错密度。 τ 表示线位错能, 见式(9)。 γ_i 表示界面能, 见式(10)。

$$\tau = 0.5Gb^2 \quad (9)$$

$$\gamma_i = \gamma_m \frac{\theta_i}{\theta_m} \left(1 - \ln \frac{\theta_i}{\theta_m} \right) \quad (10)$$

式中, τ 表示线位错能, G 表示剪切模量, θ_i 表示再结晶晶粒的取向, θ_m 表示相邻晶粒的取向, γ_m 为晶界成为大角度晶界时的界面能, 见式(11)。

$$\gamma_m = \frac{Gb\theta_m}{4\pi(1-\mu)} \quad (11)$$

式中, μ 表示泊松比。

2 数值模拟方案

采用 DEFORM-3D 计算软件对高温合金 IN690 管材挤压进行数值分析。挤压过程的工艺参数为挤压坯料外径 120 mm、内径 43 mm、长度 200 mm。挤压管材外径/内径(mm)分别为 $\Phi 74/\Phi 43$, $\Phi 70/\Phi 43$, $\Phi 66/\Phi 43$ 。坯料温度为 1200 °C。挤压速度为 40 mm/s。挤压比分别为 3.46, 4.11, 5.00。挤压模具预热温度: 挤压筒温度 350 °C, 凹模温度 350 °C, 挤压针温度 150 °C, 挤压垫温度 700 °C。将获得的管材挤压过程中的应力、应变、应变速率、温度分布等信息与 CA 模块相连接, 从而可以得到高温合金 IN690 管材挤压变形过程中的微观组织演变规律。数值模拟中的初始晶粒尺寸与挤压实验的初始晶粒尺寸相同, 即平均晶粒尺寸为 50 μm 。

在元胞自动机 (CA) 模块中, 采用 330×440 的四边形空间, 每个元胞尺寸为 1 μm , 所模拟的区域代表 0.33 mm×0.44 mm 的实际样品。邻居类型采用 Moore 邻居。图 1 为采用元胞自动机方法得到的初始晶粒, 图中不同的颜色代表不同的晶粒取向, 从而可以区分不同的晶粒。

3 数值模拟结果及分析

3.1 动态再结晶过程中晶粒组织的变化

图 2 所示为 IN690 高温合金挤压过程中管壁外部发生动态再结晶时晶粒的变化过程。因为管壁外部的变形量较大, 为完全动态再结晶状态。

图 3 为挤压过程中晶粒发生动态再结晶的过程。图 3a 表示挤压开始阶段, 此时挤压坯料产生变形, 但变形量较小并且开始积累位错, 当位错密度达到临界动态再结晶密度时, 出现动态再结晶晶核并随机的分

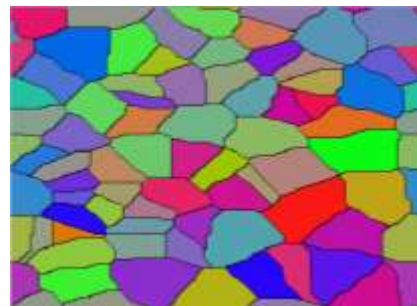


图 1 坯料初始晶粒

Fig.1 Initial grains (50 μm)

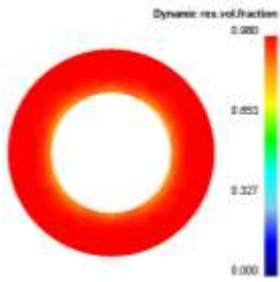


图 2 管材横截面动态再结晶分布云图

Fig.2 Dynamic recrystallization in cross section of extruded tube

布在大角晶界上，在晶界处优先形核，此时可以观察到明显的链状组织。图 3b 表示坯料进入变形区，在晶界处出现动态再结晶组织，随着变形量逐渐增大，再结晶晶核不断在晶界处与位错密度高的地方出现，初始晶粒逐渐被动态再结晶晶粒所取代。图 3c 表示管材挤出凹模口阶段，由于管材挤出模具口之后不产生变形，没有位错的积累因此不再发生动态再结晶。图 3d 表示挤压管材晶粒长大阶段，由于挤压完成后管材的温度比较高，因此会发生晶粒长大现象，此时晶粒不断长大，尺寸大的晶粒逐渐吞噬尺寸小的晶粒。

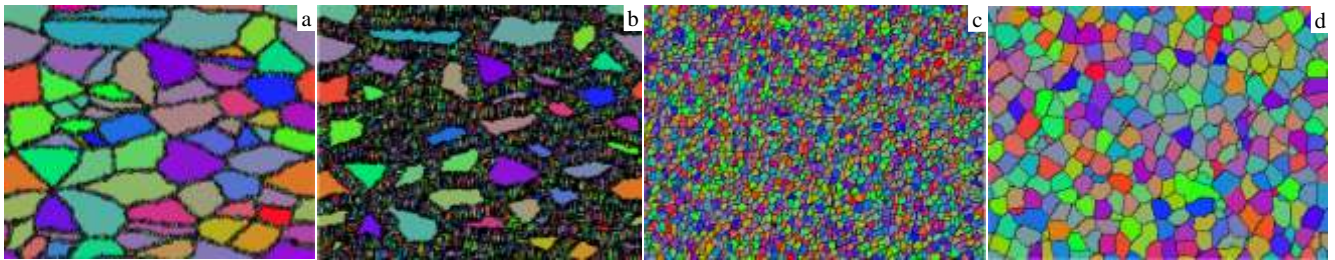


图 3 管材挤压变形过程中的动态再结晶

Fig.3 Dynamic recrystallization during tube extrusion: (a) initial stages, (b) deformation field, (c) tube extruded out of die, and (d) extruded tube

3.2 挤压比对晶粒尺寸的影响

图 4 为不同挤压比下管壁中部的晶粒组织。图 5 为不同挤压比下管壁外部的晶粒组织。由图 4a 与图 5a 可知，相同挤压比 $\lambda=3.46$ 下管壁中部的平均晶粒尺寸(26.82 μm)大于管壁外部的平均晶粒尺寸(14.08 μm)。因为管壁外部的变形量大于管壁中部的变形量，因此动态再结晶程度高，晶粒尺寸较小，并且管壁中部在变形过程中温度比较高，晶粒长大较管壁外部明显。由图 4b, 4c 与图 5b, 5c 可以看出在挤压比 $\lambda=4.10$ 与 $\lambda=5.00$ 条件下具有相同的结论。

由图 4a, 4b, 4c 与图 5a, 5b, 5c 可以得出，随

着挤压比的增大，管壁同一部位的晶粒尺寸不同。在挤压比为 $\lambda=3.46$ 的情况下管壁中部的平均晶粒尺寸为 26.82 μm ，挤压比 $\lambda=4.10$ 时管壁中部的平均晶粒尺寸为 21.87 μm ，挤压比 $\lambda=5.00$ 时管壁中部的平均晶粒尺寸为 20.99 μm ，随着挤压比的增大管壁中部的晶粒尺寸呈现减小的趋势，并且随着挤压比的增大这种减小的趋势减慢。这是因为挤压比越大变形量就越大，动态再结晶程度就越高，但随着挤压比的增大变形产生的热就越多，晶粒尺寸减小的趋势就会减慢。观察管壁外部的平均晶粒尺寸具有相同的结果。

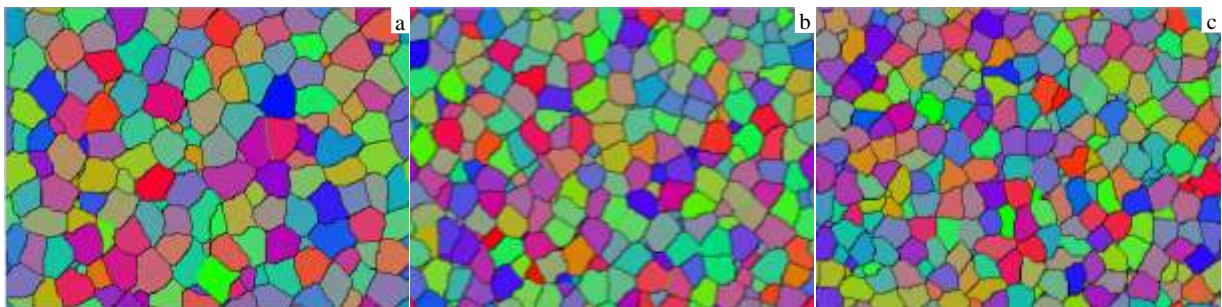


图 4 不同挤压比下管壁中部的晶粒组织

Fig.4 Microstructures of tube in middle wall at different ratios: (a) $\lambda=3.46$, grain size is 26.82 μm ; (b) $\lambda=4.10$, grain size is 21.87 μm ; (c) $\lambda=5.00$, grain size is 20.99 μm

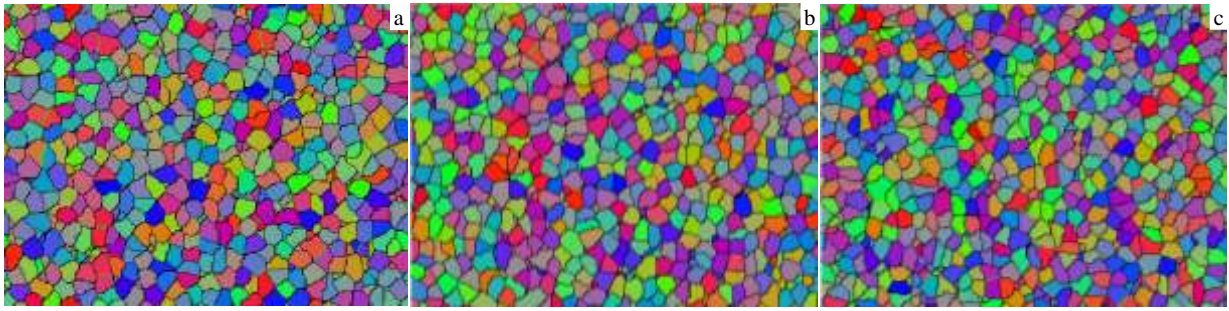


图 5 不同挤压比下管壁外部的晶粒组织

Fig.5 Microstructure of tube in external wall at different ratios: (a) $\lambda=3.46$, grain size is 14.08 μm ; (b) $\lambda=4.10$, grain size is 13.13 μm ; (c) $\lambda=5.00$, grain size is 13.03 μm

4 实验验证

高温合金 IN690 管材挤压实验工艺参数为挤压速度 40 mm/s、挤压比 3.46、挤压温度为 1200 °C。得到了的实验结果与数值模拟结果进行了对比分析，见图 6 和图 7。由图 6 结果发现，挤压比 $\lambda=3.46$ 时的管壁中部的平均晶粒尺寸的数值模拟结果为 $d=26.82 \mu\text{m}$ ，其实验结果为 $d=23.08 \mu\text{m}$ 。由图 7 结果发现，挤压比 $\lambda=3.46$ 时的管壁中部的平均晶粒尺寸的数值模拟结果为 $d=14.08 \mu\text{m}$ ，其实验结果为 $d=13.13 \mu\text{m}$ 。

图 8 表示不同挤压比下管壁中部的实验结果与模拟结果对比，实验结果与模拟结果的相对误差小于 16.6%。

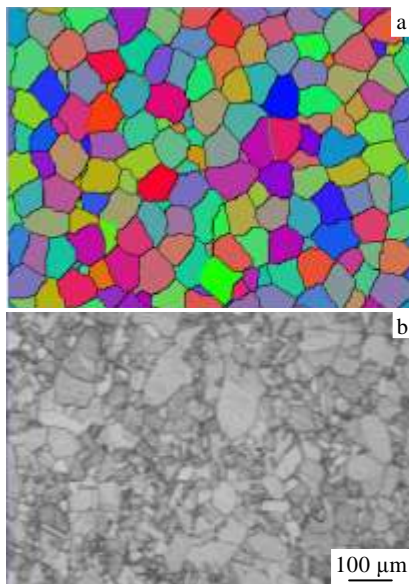


图 6 管壁中部的晶粒组织

Fig.6 Microstructures of tube in middle wall: (a) simulation $d=26.82 \mu\text{m}$ and (b) experiment $d=23.08 \mu\text{m}$

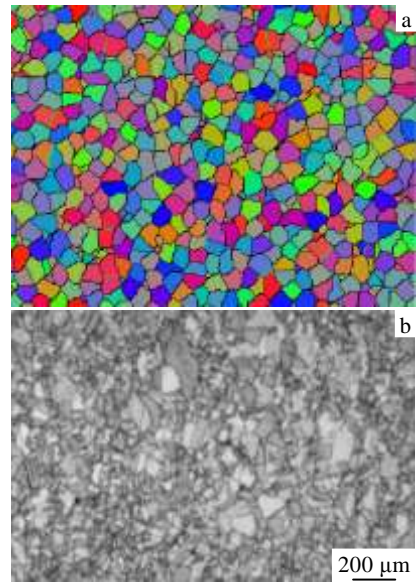


图 7 管壁外部的晶粒组织

Fig.7 Microstructures of tube in external wall: (a) simulation $d=14.08 \mu\text{m}$ and (b) experiment $d=13.13 \mu\text{m}$

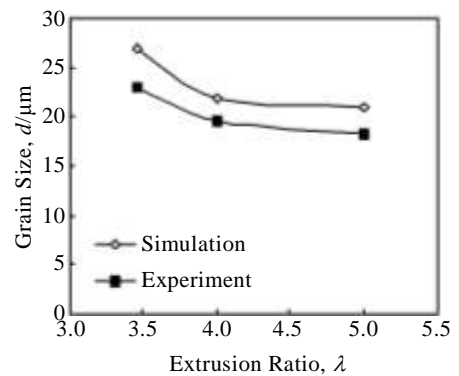


图 8 管壁中部晶粒尺寸实验结果与模拟结果对比

Fig.8 Comparison of simulation results and experimental results of grain size in middle wall

5 结 论

1) 采用元胞自动机(CA)方法对高温合金 IN690 管材挤压变形过程中动态再结晶组织演变规律进行了数值模拟研究, 确定了位错密度模型、回复模型、形核模型、晶粒长大模型等。

2) 分析了挤压变形过程中动态再结晶的过程, 得到了变形过程中的晶粒形态、分布、取向和尺寸。高温合金 IN690 管材挤压变形过程中, 微观组织具有明显的链状组织, 不断产生新的晶粒取代原始晶粒并伴随新生晶粒的长大, 直至长大停止。

3) 在相同挤压比条件下, 管壁外部的平均晶粒尺寸小于管壁中部; 在管材的相同部位, 随着挤压比的增大, 平均晶粒尺寸减小。

4) 基于 CA 法的组织模拟结果与实验结果相吻合, 挤压管材的晶粒尺寸模拟结果与实验结果的相对误差小于 16.6%。

参考文献 References

- [1] Rappaz M, Gandin C H A. *Acta Metal*[J], 1993, 41(2): 345
- [2] Gandin C H A, Rappaz M, Tintillier R. *Metallurgical Transactions*[J], 1994, 25(3): 629
- [3] Goetz R L, Seetharaman V. *Scripta Mater*[J], 1998, 38: 405
- [4] Zhou Sheng(周 盛), Fu Jian(傅 建), Wang Tao(王 涛). *Hot Working Technology*(热加工工艺)[J], 2009, 38(5): 96
- [5] He Yan(何 燕), Zhang Liwen(张立文), Niu Jing(牛 静). *Journal of Material Heat Treatment*(材料热处理学报)[J], 2005, 26(4): 120
- [6] Deng Xiaohu(邓小虎), Zhang Liwen(张立文), He Yan(何 燕). *Journal of Plasticity Engineering*(塑性工程学报)[J], 2007, 14(2): 24
- [7] Zhang Lin(张 林), Wang Yuanming(王元明), Zhang Caibai(张彩磬). *Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2001, 37(8): 882
- [8] Zhang Lin(张 林), Zhang Caibei(张彩磬), Wang Yuanming(王元明). *Chinese Journal of Materials Research*(材料研究学报)[J], 2002, 16(2): 200
- [9] Guo Yongguan(郭勇冠), Li Shuangming(李双明), Liu Lin(刘 林). *Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2008, 44(3): 365
- [10] Li Ping(李 萍), Gan Guoqiang(甘国强), Xue Kemin(薛克敏). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2012, 41(S2): 343
- [11] Wu Zhigang(吾志岗), Li Defu(李德富), Guo Shengli(郭胜利) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2012, 41(2): 235
- [12] Peng Haijian(彭海健), Li Defu(李德富), Guo Qingmiao(郭青苗) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2012, 41(8): 1317
- [13] Wang Bin(王 彬), Yu Zhentao(于振涛). *Materials Protection*(材料保护)[J], 2013, S2: 103
- [14] Ding R, Guo Z X. *Acta Materialia*[J], 2001, 49(16): 3163

Micro-structure Evolution of Dynamic Recrystallization during Tube Extrusion of IN690 Superalloy Based on Cellular Automata

Wang Zhongtang¹, Hu Jinke¹, Wang Lingyi²

(1. Shenyang Ligong University, Shenyang 110159, China)

(2. Shenyang Institute of Technology, Fushun 113122, China)

Abstract: Dynamic recrystallization of IN690 superalloy during tube extrusion has been simulated based on Cellular Automata (CA). The model of dislocation density and model of reply and model of nucleation and model of grain growth were determined. Morphology, distribution, orientation and size of grains during the process of deformation were obtained through dynamic recrystallization analysis. The results show that the grain size of the external wall is smaller than that of the middle under the same extrusion ratio. With the increasing of extrusion ratio, the grain size at the same site of the tube decreases. The relative errors of the grain sizes of simulation and experiment are less than 16.6%.

Key words: superalloy; IN690; cellular automata; dynamic recrystallization; grain size

Corresponding author: Wang Zhongtang, Ph. D., Professor, School of Material Science and Engineering, Shenyang Ligong University, Shenyang 110159, P. R. China, Tel: 0086-24-24680841, E-mail: ztwang@imr.ac.cn