

铁素体不锈钢焊接热影响区晶粒长大过程模拟*

莫春立 李殿中 钱百年 国旭明

(中国科学院金属研究所, 沈阳 110016)

摘要 提出一种用 Monte Carlo 模拟单相合金的热影响区 (HAZ) 晶粒长大方法, 可以将焊接实际时间与模拟过程对应起来. 应用有限元方法计算出焊接热循环, 并结合晶粒长大的 Arrhenius 公式, 模拟了铁素体不锈钢 EB26-1 在一定规范下 HAZ 晶粒的演变情况. 模拟结果表明, 此方法可以预测 HAZ 中晶粒的分布以及存在于 HAZ 中很陡的温度梯度对晶粒长大的阻碍作用.

关键词 Monte Carlo(MC) 模拟, 晶粒长大, 焊接热影响区, 铁素体不锈钢

中图分类号 O242.2

文献标识码 A

文章编号 0412-1961(2001)03-0307-04

SIMULATION OF GRAIN GROWTH IN WELDING HAZ OF FERRITE STAINLESS STEEL

MO Chunli, LI Dianzhong, QIAN Bainian, GUO Xuming

Institute of Metal Research, The Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016

Correspondent: MO Chunli, Tel: (024)23843531-55472, Fax: (024)2381320, E-mail: clmo@imr.ac.cn

Manuscript received 2000-06-26, in revised form 2000-09-04

ABSTRACT A method of Monte Carlo about grain growth in welding heat affected zone of single phase alloy was developed. This model can obtain an one-to-one correlation between Monte Carlo steps and real time of welding. Using FEM the thermal cycles in the HAZ were calculated and according to Arrhenius equation of grain growth, the grain structure evolution in HAZ of ferrite stainless steel EB-26-1 under certain process parameters was simulated. The results show that the grain size distribution in the welding HAZ could be obtained from Monte Carlo simulation, and the grain growth is restricted by the steep temperature gradients in the welding HAZ.

KEY WORDS Monte Carlo simulation, grain growth, heat affected zone (HAZ), ferrite stainless steel

晶粒度是金属材料特别是钢铁材料重要的性能指标, 晶粒长大是焊接冶金过程中不可忽视的因素, 它常导致焊接热影响区成为性能薄弱的环节, 故热影响区 (HAZ) 的晶粒长大, 直接影响着焊接接头的性能. 近十几年来 Monte Carlo(MC) 方法已广泛应用于多晶材料微观组织的模拟^[1,2]. 该方法可以体现材料微观组织转变过程的动力学和拓扑学过程. 为定量研究材料的组织演变提供了有效手段. 国内在用 MC 法模拟微观组织方面也进行了研究^[3], 主要集中在对 MC 法本身的探讨, 以及模拟的晶粒尺寸分布函数的特点等方面, 而将 MC 法与实际工艺过程联系起来的文章较少. 国外有关 MC 模拟的文章中, 将 MC 模拟的晶粒长大动力学当作实际的晶粒长大动力

学, 但实际上二者是不同的. 研究者发现模拟时间与实际时间、温度直接对应非常重要. Ling 和 Anderson^[4] 指出, MC 时间步与实际时间步之间隐含激活能因素. 这个因素与原子跳动频率相关. 通过比较肥皂泡实验结果与 MC 方法模拟结果, Grest 等人^[5] 将 MC 时间与实际时间的关系写成

$$t_r = 0.32t_{MC} + 2044 \quad (1)$$

式中, t_r 和 t_{MC} 分别为实际时间与 MC 时间步, min. Radhakrishnan 和 Zacharia^[6] 将其写为

$$t_{MCS} = k_1 k_2 [\exp(-Q/RT)]t \quad (2)$$

式中 t_{MCS} 为 MC 模拟时间步, 即模拟的次数, k_1 和 k_2 是常数, Q 为激活能, R 为气体常数, T 为热力学温度, t 为时间. Shen 等人^[7] 将其写为

$$t_{MCS} = \nu [\exp(-Q/RT)]t \quad (3)$$

* 国家 973 超级钢资助项目 G1998061512

收到初稿日期: 2000-06-26, 收到修改稿日期: 2000-09-04

作者简介: 莫春立, 男, 1971 年生, 博士生

式中 ν 为原子振动频率. 在以上公式中, MC 时间与实际时间是线性相关的. 然而模拟结果表明, MC 时间步与时间只在有限的范围内线性相关.

本文作者根据 Gao 等人^[6]的方案提出一种 MC 时间与实际时间相关的动力学模式, 即以实验数据为基础的模式, 并以此模式研究了焊接热影响区 (HAZ) 晶粒的长大过程. 焊接 HAZ 晶粒的长大过程受温度梯度、固态相变以及材料中第二相质点的影响. 通常的钢铁材料在加热过程中要经历固态相变、碳化物或氮化物的溶解与析出及晶粒长大等几个过程. 为更好地揭示晶粒长大过程, 本工作选择固态无相变无析出相材料超纯铁素体不锈钢 EB26-1 进行分析.

1 实验方法

本实验所用材料为铁素体不锈钢 EB26-1, 其成分(质量分数, %)为: C 0.0053, S 0.003, P 0.017, Si 0.23, Mn 0.03, Cr 26.8, Ni 0.15, Mo 1.29, Cu 0.02, Nb 0.14, N 0.007, O 0.006. 部分试件在 Gleeble1500 热模拟试验机上进行热模拟试验. 另一试件采用钨极氩弧焊接, 电流为 150 A, 电压为 15 V, 焊接速度为 15 mm/s, 实验后对试样进行研磨、抛光, 再用 10% 草酸腐蚀, 统计晶粒大小. 晶粒尺寸的精确度取决于视场中所选的晶粒的个数. 每一视场都尽量多选以便提高其精度. 根据不同规范下热模拟实验数据并结合焊接实验数据, 确定晶粒长大与焊接参数的关系.

2 MC 模拟方法

采用二维矩阵, 应用六角形网格点阵. 将随机分布的晶向数目 $S_r(0 < S_r < 64)$, 分配给每一模拟的格点. 晶界是由两个不同位向的网格点决定的. 而一格点上晶向转变为另一晶向的几率 P 由转变前后的能量差 ΔE 决定^[6], 即

$$P = \begin{cases} 0 & \Delta E > 0 \\ 1 & \Delta E \leq 0 \end{cases} \quad (4)$$

式中, ΔE 为每一晶格点与最近邻 6 个格点的相互作用能在变化前后的差值

$$\Delta E = J \sum_{i=1}^6 (\delta_{s_i, s_0} - \delta_{s_i, s_n}) \quad (5)$$

式中, 角标 s_0 为所选晶格点处原始晶向数目; s_i 为晶格点最近邻六个格点的晶向数目; s_n 为原始格点随机转变后的新晶向数目; J 为相邻格点相互作用能; δ 为 Kronecker 函数.

对每个晶格点, 通过计算 ΔE 判断它的转变几率. 晶界处格点晶向改变的统计结果最终表现为晶粒的长大.

3 以实验数据为基础的 MC 模拟过程与结果

通过实验建立起的晶粒尺寸、高温停留时间及加热温

度之间的关系如下^[8]

$$D^{1.7} - D_0^{1.7} = \sum_{t_{900}}^{t'_{900}} 1.9 \times 10^4 \left[\exp\left(\frac{-2 \times 10^5}{RT(t)}\right) \right] \Delta t \quad (6)$$

式中 D 为经过加热后晶粒尺寸, D_0 为原始的晶粒尺寸. 取 $D_0 = 20 \mu\text{m}$, 高温停留时间从温度上升到 900 °C 的时间 t_{900} 开始计算, 到从峰值温度降到 900 °C 的时间 t'_{900} 为止. 在这段时间内以 Δt 为时间步长, 而加热过程的温度 T 是时间 t 的函数. 通过计算机模拟, 得出晶粒尺寸 D 与模拟时间步 t_{MCS} 的关系

$$D = K_1 \lambda (t_{\text{MCS}})^{n_1} \quad (7)$$

式中 K_1 和 n_1 为常数; λ 为模拟过程的格点常数. 可根据实际情况设定. 将式 (7) 代入式 (6), 即得出 MC 模拟时间步 t_{MCS} 与时间、温度之间在等温状态下的对应关系为

$$(t_{\text{MCS}})^{n_1} = \left(\frac{D_0}{K_1 \lambda}\right)^n + \frac{1.9 \times 10^4}{(K_1 \lambda)^n} \exp\left(\frac{-2 \times 10^5}{RT}\right) (t_1 - t_0) \quad (8)$$

式中晶粒长大的指数 $n=1.7$, t_0 和 t_1 分别为等温加热开始和结束时间. 式 (8) 可直接应用于等温状态. 但在焊接时的不平衡加热、冷却的情况下, 必须对整个方程进行求和. 相应情况下公式为

$$(t_{\text{MCS}})^{n_1} = \left(\frac{D_0}{K_1 \lambda}\right)^n + \frac{1.9 \times 10^4}{(K_1 \lambda)^n} \sum_i \left[\exp\left(\frac{-2 \times 10^5}{RT_i}\right) t_i \right] \quad (9)$$

由式 (8)、(9) 建立起计算机模拟时间步 t_{MCS} 与实际时间的对应关系.

MC 模拟采用的矩阵尺寸为 500×500 . 半周期性边界条件, 即平行于热循环梯度方向的边界设定为周期性的. 矩阵最上一排与最下一排相邻. 经多次模拟并应用对数线性规划得式 (7) 中 K_1, n_1 分别为 1.64 和 0.35, 代入式 (7), 得晶粒长大动力学公式为

$$D = 1.64 \lambda (t_{\text{MCS}})^{0.35} \quad (10)$$

取 $\lambda = 5 \mu\text{m}$, 晶粒尺寸与模拟时间步 t_{MCS} 的关系见图 1.

将式 (10) 及相关数据代入式 (9), 得

$$(t_{\text{MCS}})^{0.6} = 4.5 + \frac{1.9 \times 10^4}{(1.64 \times 0.005)^{1.7}}$$

$$\sum_{t_{900}}^{t'_{900}} \left[\exp\left(\frac{-2 \times 10^5}{8.31T(t)}\right) \right] \Delta t \quad (11)$$

再代入图 2 的温度场的计算数据, 可得对应熔合线部位与计算机模拟时间步 t_{MCS} 的关系 (图 3). 为研究 HAZ

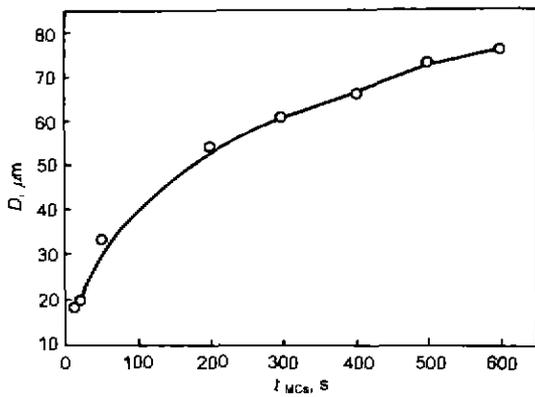


图 1 计算机时间步 t_{MCS} 与模拟的晶粒尺寸 D 的关系

Fig.1 Relationship between the MC step (t_{MCS}) and grain size (D)

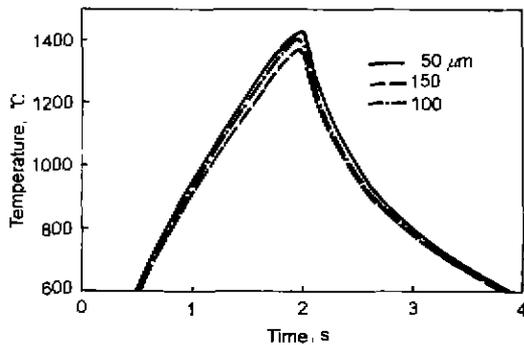


图 2 熔合线附近 HAZ 的热循环曲线

Fig.2 Thermal cycle curves at different positions in HAZ (50, 100 and 150 μm representing the distances from fusion line)

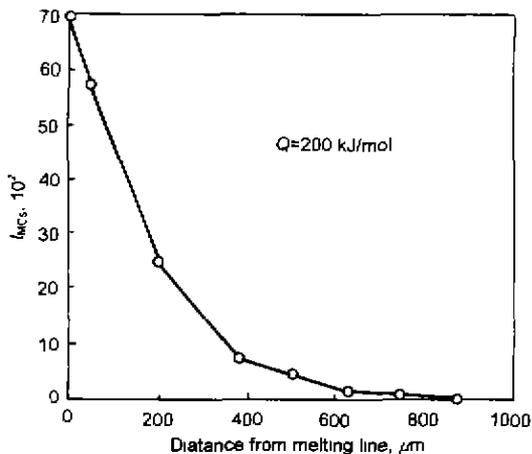


图 3 HAZ 不同部位对应的计算机模拟步 t_{MCS}

Fig.3 Simulated MC steps (t_{MCS}) at different locations in HAZ

中温度梯度对晶粒长大的影响, 将图 2 中距熔合线 100 μm 处的热循环记录下来, 模拟相同热循环情况下试

件总体受热时的晶粒长大, 并与 HAZ 中模拟结果相比较, 结果如图 4 所示. 可以看出, 晶粒长大在 HAZ 中距熔合线 100 μm 处的粗晶区由于温度梯度的存在而受到阻碍, 其长大结果仅为无温度梯度时的 75% 左右. 温度梯度的存在造成 HAZ 各部分晶粒长不致, 这种不一致性使晶粒长大相互影响和制约, 客观上造成对晶粒长大的阻碍作用. 在模拟过程中还发现温度梯度越大其阻碍作用越明显. 图 5a 为计算机模拟焊接热影响区的组织的结果, 图 5b, c 分别为实际焊接热影响区和母材的金相照片.

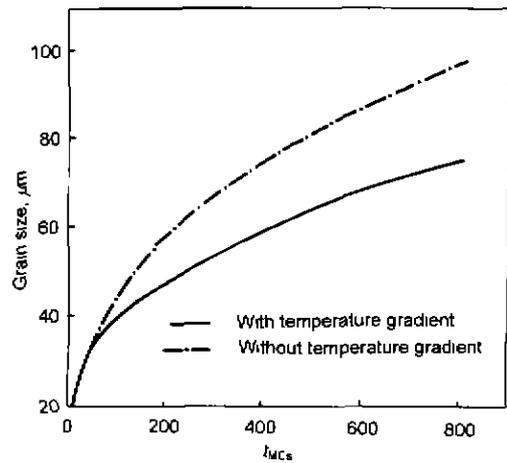


图 4 温度梯度对距熔合线 100 μm 处晶粒长大的影响

Fig.4 Effect of temperature gradient on the grain growth in HAZ from 100 μm to the fusion line

4 讨论

超纯铁素体不锈钢 EB26 — 1 在加热过程中不发生相变, 材料微观组织的变化以晶粒长大为主, 而且由于材料的杂质含量低, 在加热和高温区的温度下降过程中没有第二相质点产生, 亦无第二相质点阻碍晶粒长大, 故这个过程比较适合用 MC 方法进行模拟. 模拟过程中的每个格点对应实际物理材料的一小块区域, 它的选择可以根据模拟的实际情况而定. 这样无论晶粒有多大都可以用格点来表示. 为了提高模拟的精度, 要考虑两个因素: 一是对给定物理过程所需的迭代次数; 另一个是模拟精度. 选取晶格点的尺寸十分重要. 本工作所进行的步数为 $1 \times 10^3 - 5 \times 10^4$, 既可以较准确地建立起实际时间、加热温度与 t_{MCS} 之间的关系, 又不使计算量过大而无法实现. 因此晶格点尺寸要仔细选取以使运算步在此范围内. 若选取晶格点空间常数过大, 则 t_{MCS} 数目较小, 模拟结果精度差; 反之, 晶格常数小, t_{MCS} 太大, 有时超过 10^8 次, 计算机运行也较难. 根据调试结果, 选择 $\lambda=5 \mu\text{m}$, 即二维平面中每一格点代表 $5 \mu\text{m} \times 5 \mu\text{m}$ 的区域. 在 MC 模拟过程中引入各向异性参数, 即设定不同晶向对应不同的能量状态, 是

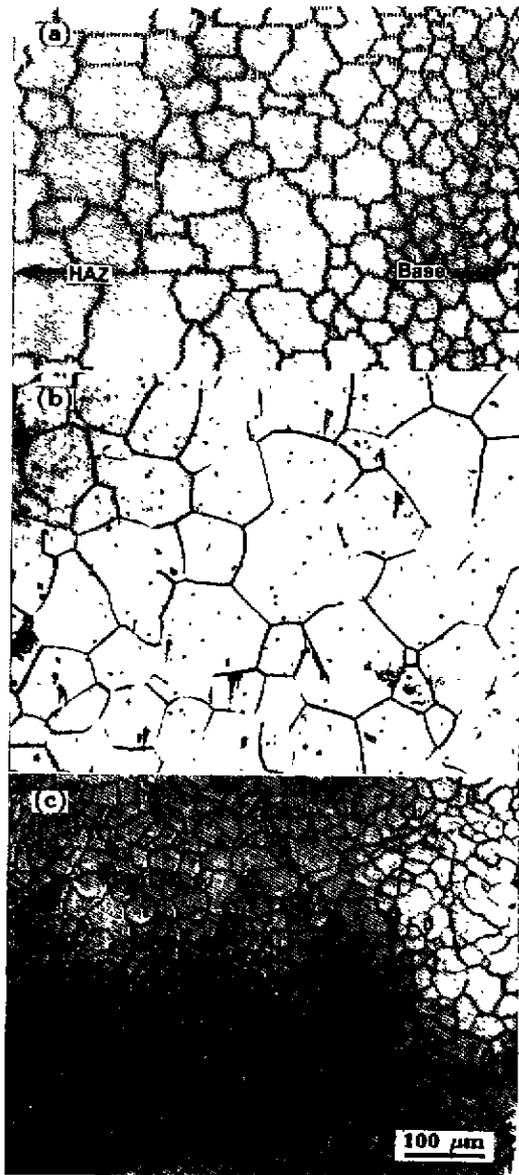


图5 模拟微观组织与实际微观组织的对比

Fig.5 Comparison of simulated and actual microstructures
(a) simulated microstructure (b) actual microstructures of HAZ (c) actual base structure

为了使模拟结果与实际更一致. 由以上分析可知, t_{MCS} 的计算是通过经验晶粒长大公式和有限元的热循环数据得到的, 因此经验公式与热循环的精度对模拟的精度有很大的影响. 图2的热循环曲线是根据文献[8]中的实验结果并应用有限元软件 ANSYS 进行计算的, 计算过程中还通过实验进行验证. 但由于有限元网格划分的限制(每个网格最小间距为 $100 \mu\text{m}$), 图中距离为 $100 \mu\text{m}$ 的曲线为

对周围节点经过线性处理的结果. 这样可以更好的保证计算的准确性. 由图5c可见母材中的平均晶粒尺寸为 $20-30 \mu\text{m}$ 、经焊接后熔合线附近不可避免地发生晶粒长大. 最大晶粒约为 $200 \mu\text{m}$ (图5b所示). 从图5a的模拟结果可以看出, 熔合线附近晶粒尺寸较大, 达到 $200 \mu\text{m}$ (图5a在左下部), 体现过热对晶粒长大的影响. 它不但使晶粒普遍长大, 同时也造成晶粒尺寸分布更加不均匀. 从图4可以看出由于 HAZ 不同位置存在温度梯度, 使晶粒长大受到阻碍, 用 MC 方法可以很好的体现这种阻碍作用. 在计算过程中发现, 当温度梯度变大时, 这种阻碍作用也增加, 最大时模拟的晶粒只能长大到无阻碍时的 60%. 从金相照片与模拟结果的比较看, 二者的晶粒尺寸分布一致, 表明实际参数与模拟结果具有很大的可比性. 应用 MC 方法可以计算出每个时间步晶粒长大的平均晶粒尺寸以及拓扑学上的变化. MC 方法不仅将晶粒长大的微观组织演变模拟出来, 还将其宏观晶粒尺寸分布予以揭示, 比较直观的揭示晶粒长大的动力学过程. 这一点是物理模拟方法以及解析方法难以比拟的.

5 结论

(1) 以 MC 方法为基础, 通过将 MC 模拟步 MCS 与实际时间相匹配的模式, 在应用一定实验数据和热循环数据的基础上, 将 MCS 与焊接工艺参数对应起来模拟 HAZ 晶粒长大, 得到与实测结果吻合较好的模拟结果.

(2) MC 模拟很好地反映了 HAZ 晶粒长大的动力学过程, 揭示了由于温度梯度的存在对晶粒长大的阻碍作用, 模拟了 HAZ 微观组织的演变过程以及 HAZ 晶粒尺寸分布情况, 具有解析法难以比拟的优越性.

参考文献

- [1] Anderson M P, Srolovitz D J, Grest G S, Sahni P S. *Acta Metall*, 1984; 32: 783
- [2] Anderson M P, Grest G S, Srolovitz D J. *Philos Mag*, 1989; 59B: 293
- [3] Song X Y, Liu G Q. *Chin J Mater Res*, 1998, 12: 245
(宋晓艳, 刘国权. 材料研究学报, 1998; 12: 245)
- [4] Ling S, Anderson M P. *J Met*, 1992; 44: 30
- [5] Grest G S, Glazier J A. *Mat Sci Forum*, 1992; 39: 94
- [6] Gao J H, Thompson R G. *Acta mater*, 1996; 44: 4565
- [7] Shen Y. *Master's Thesis University of Alabama*, Birmingham, 1993
- [8] Mo C L, Qian B N, Li D Z. *Chin J Mater Res*, to be published
(莫春立, 钱百年, 李殿中. 材料研究学报, 待发表)