

DOI: 10.3901/JME.2009.02.301

连续冷却过程中的相变本构方程

阳代军¹ 宁林新¹ 林建国² DEAN T A²

(1. 首钢技术研究院薄板研究所 北京 100041;

2. 伯明翰大学机械工程系 伯明翰 B15 2TT 英国)

摘要: 如何有效地预测在不同工艺条件下材料的微观结构和力学性能, 是许多钢铁公司非常关注的重要课题之一。以连续冷却过程中的自由能理论为基础, 成功地开发出一套在连续冷却过程中统一的相变本构方程。该本构方程可用来预测钢材在不同的冷却速度下从奥氏体到铁素体、珠光体或贝氏体的开始转变点和结束转变点, 同时还可用来预测各相转变的体积分数。利用优化算法通过缩小试验数据和预测数据之间的误差来确定本构方程中的材料常数, 得出 DIN SAE 5140 钢种相变本构方程的模型参数, 并且利用该相变本构方程对 DIN SAE 5140 钢种的相变过程进行详细地研究。研究结果表明, 利用所开发的模型参数得出的预测连续冷却转变(Continuous cooling transformation, CCT)曲线和相变过程中各相的转变体积分数与试验数据非常一致, 该统一的本构方程的建立为预测相变过程提供了一种有效的方法。

关键词: 连续冷却 相变 统一本构方程 材料模型

中图分类号: TG151.2

Phase Transformation Constitutive Equations during Continuous Cooling

YANG Daijun¹ NING Linxin¹ LIN Jianguo² DEAN T A²

(1. Department of Strip Technology, Shougang Research Institute of Technology, Beijing 100041;

2. Department of Mechanical Engineering, University of Birmingham, Birmingham B15 2TT, UK)

Abstract: How to effectively predict the effect of different process conditions on microstructure and mechanical properties is one of important tasks that many iron and steel companies are rather concerned about. On the basis of the theory of free energy during the continuous cooling process, a set of unified phase transformation constitutive equations are firstly developed to predict the start and the finish of phase transformation from austenite to ferrite, pearlite or bainite and volume fraction of each phase for different cooling processes. Optimization techniques are used for the determination of material constants within constitutive equations by minimizing the errors between experimental and predicted data. The material constants of the phase transformation constitutive equations are determined for DIN SAE 5140 steel. The phase transformation of DIN SAE 5140 steel is researched in detail. Good agreement is obtained between the predicted and experimental continuous cooling transformation (CCT) diagram and volume fraction of DIN SAE 5140 steel. This unified constitutive equation is an effective tool to predict the phase transformation process.

Key words: Continuous cooling Phase transformation Unified constitutive equations Material model

0 前言

近年来, 为满足越来越高的环保、节能要求, 材料制造商不断地开发各种新型材料适应社会的要求, 这给钢铁材料生产带来极大的挑战。因此钢材制造商不断采取措施来提高产品质量, 减少产品成本和缩短开发新产品的周期, 以满足日益增长的市

场需求。采用传统的试验方法来开发产品不仅增加了制造成本而且延长开发周期和交货时间, 极大地降低了企业的市场竞争力。然而通过对相变机理的深入研究, 可以建立数学模型预测在不同工艺条件下材料的微观结构和力学性能, 因此各钢铁公司投入了大量的人力和物力来开发计算机预测和控制系统^[1-2]。

为了精确预测热轧钢材的微观结构和机械性能, 基于本构方程模型的开发就显得至关重要。近十年, 在相变模型理论和数值模拟技术方面得到了

快速发展^[3-5]。20 世纪 30~50 年代, JOHNSON 等^[6-8]在相变动力学方面取得了重要的成就,建立了经典动力学方程来描述相变过程。他们的相变动力学方程已经成为相变研究的基础,世界上许多研究者都使用他们的方程来模拟相变过程。

20 世纪 50 年代, IRVINE 和 PICKERING^[9]首先提出了使用数学模型来预测材料微观结构,并通过控制冷却来得到材料的力学性能。研究表明材料的抗拉强度与材料中相的状态有着密切关系。如果能预测出钢中每一相的体积分数,便可以计算出该材料的抗拉强度。科学家不断地探索金属合金中微观结构和力学性能之间的定量关系,使材料的力学性能可通过数学模型计算出来而不是通过破坏性的测试方法。

KIRKALDY 等^[10-11]首先建立了钢在连续冷却过程中相变的数学模型以及计算合金钢平衡温度的方法。基于热力学理论, KIRKALDY 等计算出了相变动力学方程,并根据经典形核理论得到了孕育期的表达式,同时他们还考虑了过冷度和材料成分对相变的影响。HAWBOLT 等^[12]也提出一种叠加法则从等温转变(Time temperature transformation, TTT)曲线预测连续冷却转变(Continuous cooling transformation, CCT)曲线。

最近, SUEHIRO 等^[13-14]基于经典相变动力学提出了一个增量方程来预测冷却过程中材料的微观结构,该模型仅利用少量通过试验获得的经验参数,便能对钢材的微观结构进行相对准确的预测。

还有其他许多用于模拟控冷过程中相变规律方程也已经开发出来^[15-19]。为了较方便地预测钢材产品相变过程中的微观结构和力学性能,必须建立一套统一的相变方程。2004 年,根据等温转变过程相变动力学原理, GARRETT 等^[20]提出了一套统一的相变本构方程来模拟等温转变过程中贝氏体长大的体积分数和孕育期。本文将相变模型扩展到预测连续冷却过程中从奥氏体到铁素体、珠光体和/或贝氏体的相变过程,并且针对 DIN SAE 514 钢得出了一套统一的相变本构方程。

1 统一的相变本构方程的开发

1.1 相变的形核和长大

为了实现过冷奥氏体向铁素体、珠光体或贝氏体的转变,必须存在一定的过冷度。如果奥氏体过冷度为 ΔT ($\Delta T = T_m - T$), 即在其转变之前低于平衡温度 T_m 。随着相变的进行,自由能(ΔG_V)将随之减小,如图 1 所示。自由能的下降为相变过程提供了驱动力^[21],自由能的下降可以表示为

$$\Delta G_V = G_V^B - G_V^A < 0 \quad (1)$$

式中 G_V^A , G_V^B ——自由能初始和终止状态

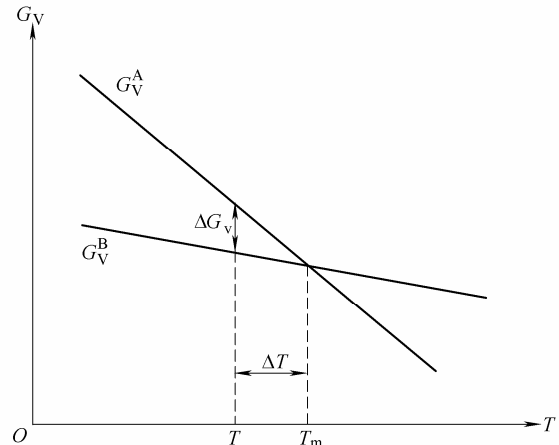


图 1 相 A、B 体积自由能随温度的变化曲线

对于小的过冷度 ΔT ^[21], 有

$$\Delta G_V = \frac{\Delta T}{T_m} Q \quad (2)$$

式中 Q ——单位体积的溶解潜热

在这里假设相变过程为简单的均匀过程,新相粒子形成时自由能的变化可以归结为两个方面的贡献:一方面是伴随着新相的形成,单位体积自由能减少(ΔG_V);另一方面是小粒子的界面能(S_{AB})。假设新相粒子是一个半径为 r 的球体,因此当新相粒子形成时自由能的改变为^[21]

$$\Delta G = -\frac{4}{3}\pi r^3 \Delta G_V + 4\pi r^2 S_{AB} \quad (3)$$

由于很难正确选择界面能(S_{AB})的值,而且直接用试验方法来验证也非常复杂,因此可以认为^[20]

$$S_{AB} \propto \frac{\sqrt{\Delta T}}{T} \quad (4)$$

如图 2 所示,因为界面能随着 r^2 的增加而增加,而体积自由能随着 r^3 的增加而增加,同时固体小粒子的生成总能导致自由能的增加。正是由于自由能的增加能够保证奥氏体在 T_m 温度以下处于亚稳定状态。从图 2 可以看出对于给定的过冷度则有一个特定的临界半径 r^* 和与之相对应的最大附加自由能。在新粒子的临界半径为 r^* 时,自由能的变化量最大,即有

$$\frac{d\Delta G}{dr} = 0 = -4\pi r^2 \Delta G_V + 8\pi r S_{AB} \quad (5)$$

则临界半径 r^* 为

$$r^* = \frac{2S_{AB}}{\Delta G_V} \quad (6)$$

将式(2)和式(4)代入式(6),则有在 G 的峰值上新相的成核半径为

$$r^* = \frac{A_1 T_m}{T \sqrt{\Delta T Q}} \quad (7)$$

式中 A_1 ——材料常数

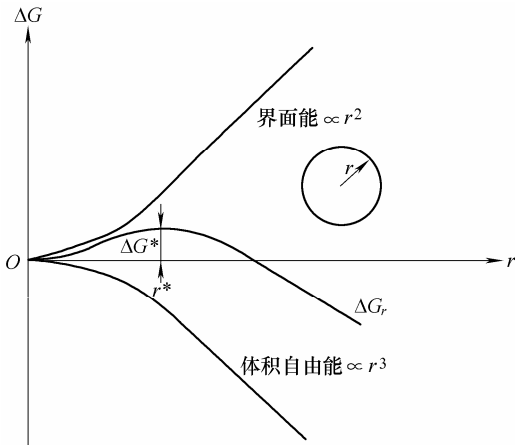


图2 形核过程中自由能 ΔG_V 和新相粒子半径 r 的关系

在相变过程中，新相粒子的长大速率与转变温度之间的关系在图3所示。随着过冷度(ΔT)的增加，自由能变化量(ΔG_V)也随之增加。这是由于转变温度 T 降低，奥氏体的碳浓度增加，扩散距离减小，导致生长速率增加；但随着过冷度的连续增加，转变温度和原子的活动能力越来越低，转变速度逐渐变小，又导致了生长速率的降低。从图3中可以看出，长大速率曲线与高斯曲线关系很相似，因此将高斯方程加以修正后即可用来描述新相粒子的长大速率

$$\dot{r} = A_2 \exp\left(-\frac{|T - T_1|^{n_1}}{B_1}\right) \quad (8)$$

式中 A_2, B_1, n_1, T_1 ——材料常数

式(8)描述了相变过程中新球相的长大速率，当新相粒子半径 r 达到了临界半径值 r^* ，新相就形成了。从新相粒子开始长大到新相的形成，这一段时间就是孕育期。

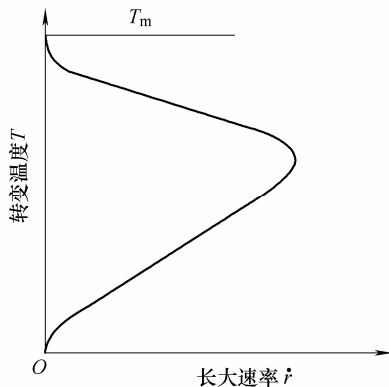


图3 长大速率与转变温度之间的关系曲线

1.2 转变体积分数

当新相粒子半径 r 大于临界半径 r^* 时，相变过

程就开始，考虑到新相粒子半径对体积分数的影响，引入 $(r-r^*)/r$ 。最初在孕育期到达之前， $r-r^* < 0$ ，因此体积分数的增长率 $\dot{\phi} = 0$ 。如图4所示，形核率也与温度 T 有关。值得注意的是，在过冷度小于 ΔT_C 时，由于驱动力太小，可以忽略新相粒子的形核；同时在过冷度很高时，由于扩散太慢，新相粒子的形核也可以忽略；在中等过冷度时，形核速率可以达到最大^[21]。所以温度对相变体积分数的影响也可以认为用一个修正的高斯分布来描述。因此从奥氏体转变为铁素体、珠光体或贝氏体的相变体积分数增长率 $\dot{\phi}$ 可以表示为

$$\dot{\phi} = A_3 \left(\frac{r-r^*}{r}\right)^{n_2} \exp\left(-\left(\frac{|T-T_2|}{B_2}\right)^{n_3}\right) \left(1 - \sum_{i=1}^3 \phi_i\right)^{n_4} \quad (9)$$

式中 $A_3, B_2, n_2, n_3, n_4, T_2$ 是材料常数； $i=1, 2, 3$ 分别代表铁素体、珠光体和贝氏体。方程式中引入 $(1-\phi_1-\phi_2-\phi_3)$ 来确保相变体积分数 $\phi=0\sim 1.0$ ，同时用来控制已转变相对正在转变相的影响。

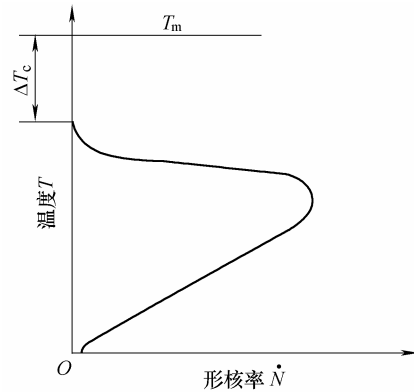


图4 形核率和温度的关系曲线

1.3 统一的相变本构方程

在热轧之后的热处理和控冷过程中，通过相变过程，可以获得需要的材料性能。根据相变过程中自由能的变化，本文成功地开发出了一套统一的相变本构方程，用来模拟从奥氏体到铁素体、珠光体或贝氏体的相变过程和转变后每一相的体积分数。统一的相变本构方程为

$$\begin{cases} \dot{r}_i = A_{2i} \exp\left(-\frac{|T - T_{1i}|^{n_{1i}}}{B_{1i}}\right) \\ \dot{\phi}_i = A_{3i} \left(\frac{r_i - r_i^*}{r_i}\right)^{n_{2i}} \exp\left(-\left(\frac{|T - T_{2i}|}{B_{2i}}\right)^{n_{3i}}\right) \left(1 - \sum_{i=1}^3 \phi_i\right)^{n_{4i}} \\ r_i^* = \frac{A_{1i} T_{mi}}{T \sqrt{T_{mi} - T Q_i}} \end{cases} \quad (10)$$

方程式(10)是一套总方程式, 可用来模拟在连续冷却过程中从奥氏体到铁素体($i=1$)、珠光体($i=2$)或贝氏体($i=3$)的相变, 而没有转变的残余量就是马氏体体积分数。 A_{1i} 、 A_{2i} 、 A_{3i} 、 B_{1i} 、 B_{2i} 、 n_{1i} 、 n_{2i} 、 n_{3i} 、 n_{4i} 和 Q_i 是材料常数, 这些常数须要利用实际的相变数据来进行标定。 T_{mi} 是平衡温度, 可从 CCT 曲线中获得。 \dot{r}_i 是相变过程中新相粒子的长大速率, 当新相粒子半径 r_i ($r_i = r_{i-1} + \dot{r}_i \Delta t$) 达到了临界半径值 r_i^* 时, 新相就形成, 也即从此时开始发生相变。 $\dot{\phi}_i$ 是新相体积分数的增长率, 新相的体积分数 $\phi_i = \phi_{i-1} + \dot{\phi}_i \Delta t$ 。

求解方程式(10)的过程详见图 5, 计算的主要任务是分别计算从奥氏体到铁素体、珠光体或贝氏体相变的孕育期和各相的转变体积分数。由于马氏体相变不是在本研究的主要任务, 而且假定转变为铁素体、珠光体或贝氏体后剩余奥氏体全部转变为马氏体, 因此当温度 T 小于马氏体相变温度 T_{MS} 时, 已经被转变成马氏体的体积分数 ϕ_M 为

$$\phi_M = 1 - \phi_F - \phi_P - \phi_B \quad (11)$$

式中 ϕ_M ——马氏体的转变体积分数
 ϕ_F ——铁素体的转变体积分数
 ϕ_P ——珠光体的转变体积分数
 ϕ_B ——贝氏体的转变体积分数

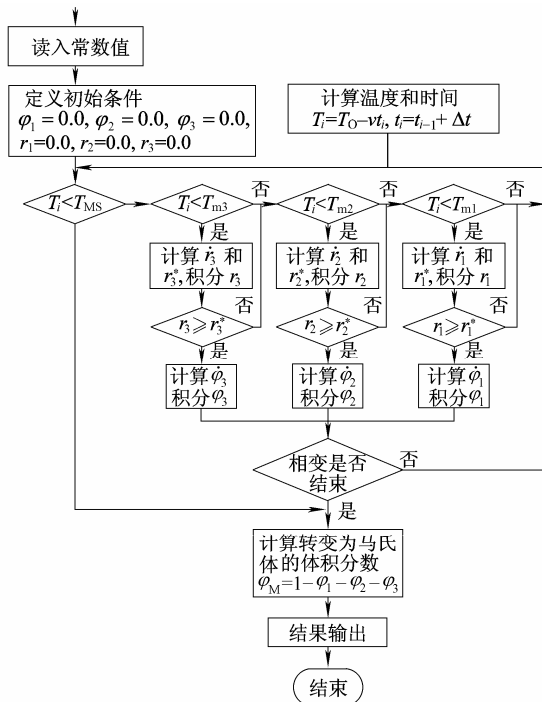


图 5 相变计算过程流程图

2 模型常数的优化

2.1 目标函数

本文利用优化技术通过缩小试验和预测数据

之间的误差来确定本构方程中的材料常数^[22], 其目标函数定义为

$$\begin{cases} f_i(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^n \left[\omega_{1ij} \left(\ln \frac{t_{ij}^c}{t_{ij}^e} \right)^2 + \omega_{2ij} \left(\ln \frac{T_{ij}^c}{T_{ij}^e} \right)^2 + \omega_{3ij} \left(\ln \frac{\phi_{ij}^c}{\phi_{ij}^e} \right)^2 \right] \\ \omega_{1ij} = \frac{nt_{ij}^e}{\sum_{i=1}^n t_{ij}^e} \quad \omega_{2ij} = \frac{nT_{ij}^e}{\sum_{i=1}^n T_{ij}^e} \quad \omega_{3ij} = \frac{n\phi_{ij}^e}{\sum_{i=1}^n \phi_{ij}^e} \end{cases} \quad (12)$$

式中 $f_i(\mathbf{x})$ ——误差值与转变时间、转变温度和转变体积分数的关系, $i=1, 2, 3$ 分别代表铁素体、珠光体和贝氏体, $\mathbf{x}(\mathbf{x}=(x_1, x_2, \dots, x_S))$ 为材料常数, 且 S 是常数的个数, n 是冷却速率曲线的数量

t_{ij}^c, t_{ij}^e ——相变开始点计算时间和试验时间
 T_{ij}^c, T_{ij}^e ——相变开始点计算温度和试验温度
 ϕ_{ij}^c, ϕ_{ij}^e ——相变结束点计算体积分数和试验体积分数

相变开始点的计算时间 t_{ij}^c 和计算温度 T_{ij}^c 与相变结束点的计算体积分数 ϕ_{ij}^e 不能直接得到, 必须通过数值积分方法根据本构方程来进行计算。

2.2 优化过程

对于每一种类型的相变, 分成两步来进行计算。首先计算相变的孕育时间, 根据式(10)中的第一方程, 通过时间的积累计算得到孕育时间, 当粒子半径 r 达到临界半径 r^* 时的时间即为孕育时间, 这时新相开始形成。当 $r < r^*$, 方程式(10)的第二方程 $\dot{\phi} = 0$, 对于一个给定的冷却速率, 可以计算出粒子半径 r 和奥氏体相变的体积分数, 可以使用方程式(12)获得计算值和试验数据之间的误差。图 6 给出了常数优化计算的详细过程。

3 计算结果

3.1 研究钢种和模型常数

本文利用统一的相变本构方程(式(10))和确定模型常数的方法, 研究了 DIN ASE 5140^[23]在连续冷却过程中的相变过程, 钢的化学成分(质量分数)是 0.44% C、0.80% Mn、0.22% Si、0.030% P、0.023% S、1.04% Cr、0.17% Cu、0.04% Mo、0.26% Ni 和小于 0.01% V。DIN SAE 5140 钢^[23]的 CCT 曲线如图 7 所示。根据 CCT 曲线, 该钢的典型转变温度为: $\theta_{C3}=790$ °C、 $\theta_{C1}=745$ °C, 而且马氏体开始转变温

却速率下可以获得铁素体和珠光体两种微观组织,且没有贝氏体形成。如图 10b, 在中等冷却速率下可以获得铁素体、珠光体和贝氏体三种微观组织。如图 10c, 在较高冷却速率下可以得到铁素体和贝氏体两种微观组织, 且没有珠光体形成。随着冷却速率的增加, 铁素体的体积分数减小, 这与试验 CCT 曲线一致。

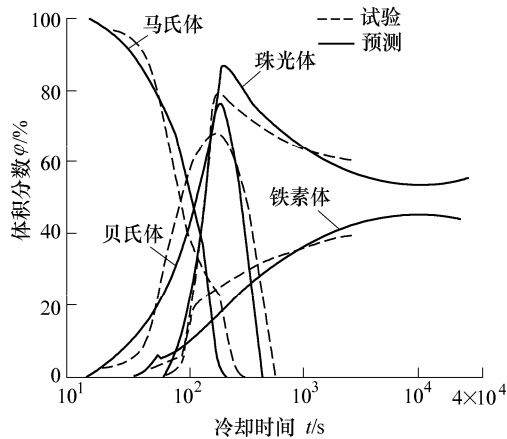
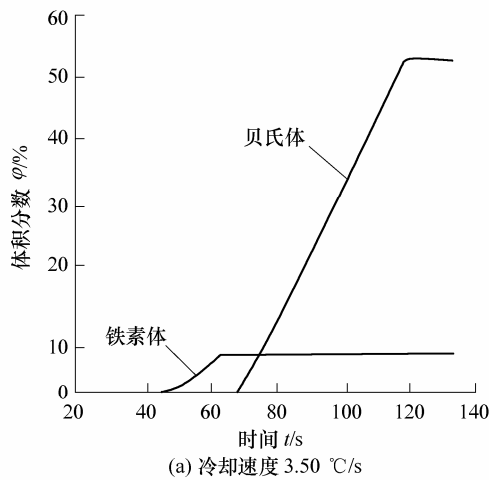
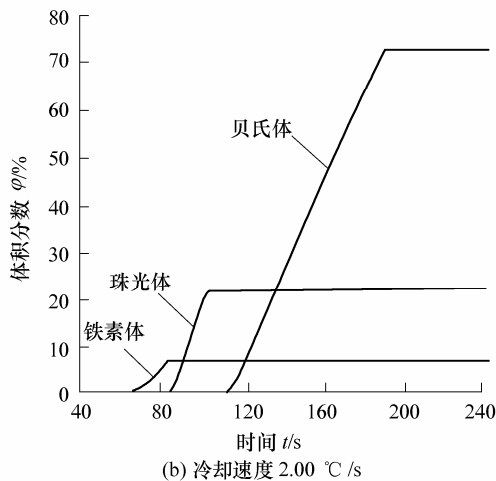


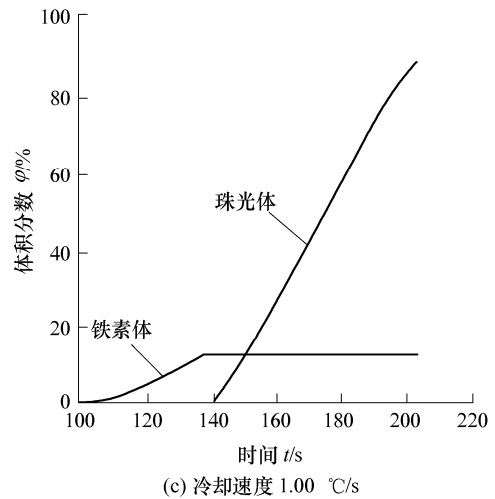
图9 SAE 5140 钢的预测转变体积分数曲线



(a) 冷却速度 3.50 °C/s



(b) 冷却速度 2.00 °C/s



(c) 冷却速度 1.00 °C/s

图10 不同冷却速率下的相变过程

4 结论

(1) 本文基于自由能理论, 首次开发出了一套统一的相变本构方程, 该模型具有通用性, 可以模拟钢从奥氏体向铁素体、珠光体或贝氏体转变的孕育期和各相的转变体积分数。

(2) 采用优化算法得出了 DIN SAE 5140 钢的相变本构方程的模型参数。利用该模型计算出 DIN SAE 5140 钢的 CCT 曲线和体积转变分数与试验结果非常一致。

(3) 该统一的本构方程的建立为预测相变过程提供了一种有效的方法。

参 考 文 献

- [1] LOFFLER H U, DOLL R, DUN W. Microstructure monitor controls product quality successful implementation at the hot strip mill at Wuhan Iron & Steel (Group) Co (WISCO) [C]// China International Steel Congress 2004, Shanghai, China, 2004: 1-5.
- [2] SHULKOSKY R A, ROSBURG D L, CHAPMAN J D, et al. A microstructure evolution used for hot strip rolling[C]//Materials Science & Technology Conference, Chicago, USA, Nov., 2003: 1-17.
- [3] BHADESHIA H K D H. Thermodynamic analysis of isothermal transformation diagrams[J]. Metal Science, 1982, 16: 159-165.
- [4] KHLESTOV V M, KONOPLEVA E V, MCQUEEN H J. Kinetics of austenite transformation during thermomechanical processes[J]. Canadian Metallurgical Quarterly, 1998, 37(2): 75-89.
- [5] JONES S J, BHADESHIA H K D H. Kinetics of the

- simultaneous decomposition of austenite into several transformation products[J]. *Acta Materialia*, 1997, 45(7): 2 911-2 920.
- [6] JOHNSON W A, MEHL R F. Reaction kinetics in processes of nucleation and growth[J]. *American Institute of Mining and Metallurgical Engineers-Transactions*, 1939, 135: 416-442.
- [7] AVRAMI M. Kinetics of phase change. III. Granulation. phase change and micro-structure[J]. *Journal of Chemical Physics*, 1941(9): 177-184.
- [8] CAHN J W. Kinetics of grain boundary nucleated reactions[J]. *Acta Metallurgica*, 1956, 3(5): 449-459.
- [9] IRVINE K J, PICKERING F B. Low-carbon bainitic steels[J]. *Iron and Steel Institute-Journal*, 1957, 187: 292-309.
- [10] KIRKALDY J S. Prediction of alloy hardenability from thermodynamic and kinetic data[J]. *Metallurgical Transactions*, 1973, 4(10): 2 327-2 333.
- [11] KIRKALDY J S, SHARMA R C. A new phenomenology for steel IT and CCT curves[J]. *Scripta Metallurgica*, 1982, 16(10): 1 193-1 198.
- [12] HAWBOLT E B, CHAU B, BRIMACOMBE J K. Kinetics of austenite-pearlite transformation in eutectoid carbon steel[J]. *Metallurgical Transactions A*, 1983, 14A(9): 1 803-1 815.
- [13] SENUMA T, SUEHIRO M, YADA H. Mathematical models for predicting microstructural evolution and mechanical properties of hot strips[J]. *ISIJ International*, 1992, 32(3): 423-432.
- [14] SUEHIRO M, SENUMA T, YADA H, et al. Application of mathematical model for predicting microstructural evolution to high carbon steels[J]. *ISIJ International*, 1992, 32(3): 433-439.
- [15] SERAJZADEH S, MIRBAGHERI S M H. A model for determination of austenite decomposition kinetics during continuous cooling on the run-out table[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2006, 14: 217-228.
- [16] SAITO Y, SHIGA C. Computer simulation of microstructural evolution in thermo-mechanical processing of steel plates[J]. *ISIJ International*, 1992, 32(3): 414-422.
- [17] GAMSJAGER E, ANTRETTETTER T, SCHMARANZER C, et al. Diffusional phase transformation and deformation in steels[J]. *Computational Materials Science*, 2002, 25: 92-99.
- [18] QUIDORT D, BRECHET Y J M. A model of isothermal and non isothermal transformation kinetics of bainite in 0.5% C steels[J]. *ISIJ International*, 2002, 42(9): 1 010-1 017.
- [19] LI J, YANG C, DONG H. Computer simulations of phase transformation in steels[J]. *Materials and Design*, 2001, 22: 39-43.
- [20] GARRETT R P, XU S, LIN J, et al. A model for predicting austenite to Bainite phase transformation in producing dual phase steels[J]. *International Journal of Machine Tools & Manufacture*, 2004, 44: 831-937.
- [21] PORTER D A, EASTERLING K E. *Phase transformations in metals and alloys*[M]. London: Chapman & Hall, 1992.
- [22] LI B, LIN J, YAO X. A novel evolutionary algorithm for determining unified creep damage constitutive equations[J]. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2002, 44(5): 987-1 002.
- [23] VOORT G F V. *Atlas of time-temperature diagrams for irons and steels* [M]. Metals Park, Ohio : ASM International, 1991.
-
- 作者简介: 阳代军, 男, 1968 年出生, 工学博士。主要研究方向为热轧带钢轧制技术。
E-mail: djyang@mail.shougang.com.cn