

不同取向双晶粒结构材料的蠕变行为分析

刘怡慧¹, 王延荣^{1,2}, 魏大盛^{1,2}

(1. 北京航空航天大学 能源与动力工程学院, 北京 100191;

2. 北京航空航天大学 江西研究院, 南昌 330096)

摘 要: 基于一种宏观唯象模型编写有限元子程序, 模拟了双晶粒结构材料的蠕变变形行为。所选取的蠕变模型具有明确的物理意义, 模型中的 3 项分别描述了蠕变演化过程的 3 个阶段。通过模拟双晶粒结构蠕变变形行为, 分析了铸造结构中的偏离角、二次取向及晶界对定向结晶材料蠕变变形行为的影响; 同时, 利用坐标系的两次旋转, 模拟材料的铸造偏离角和二次取向; 通过改变晶界的倾斜角度, 模拟材料的小角度倾斜晶界。结果表明: 铸造偏离角会明显降低材料的蠕变性能, 但二次取向对材料蠕变行为影响较小, 晶界的倾斜角度使晶界附近材料的蠕变行为产生明显变化。

关 键 词: 双晶粒结构; 蠕变行为; 铸造偏离角; 二次取向; 倾斜晶界

中图分类号: V232.4

文献标志码: A

Analysis on creep behavior of bi-crystal structural material with different orientations

LIU Yihui¹, WANG Yanrong^{1,2}, WEI Dasheng^{1,2}

(1. School of Energy and Power Engineering, Beihang University, Beijing 100191, China;

2. Jiangxi Research Institute, Beihang University, Nanchang 330096, China)

Abstract: A macroscopic phenomenological model and a finite element subroutine were used to simulate the creep behavior of bi-crystal structural material with different orientations. The selected creep model had a clear physical significance, and three terms of the creep model can be used to describe the three stages of creep deformation process respectively. The effects of casting deviation angle, secondary orientation and grain boundary of bi-crystal structural material on the creep deformation characteristics were also analyzed. These results indicated that the casting deviation angle can significantly reduce the creep properties of the material based on two rotations of the material coordinate system. The secondary orientation had insignificant effect on the creep behavior of the material, and the inclined grain boundary can change the creep behavior of the material near the grain boundary. The change of the incline angle of grain boundary of the material caused the change of creep deformation behavior near the grain boundaries.

Keywords: bi-crystal structure; creep behavior; casting deviation angle; secondary orientation; inclined grain boundary

多晶体材料往往由多个晶粒组合而成, 每个晶粒可视为单晶, 当晶粒数量足够多时表现为各

向同性。当晶粒数量降低至仅数个(几个乃至几十个)时, 材料的性能与普通多晶材料表现出明

收稿日期: 2022-04-29

基金项目: 国家科技重大专项 (J2019-IV-0006-0074, J2019-IV-0012-0080)

作者简介: 刘怡慧(1996—), 女, 博士生, 主要研究方向为定向凝固材料蠕变分析、燃气轮机结构强度评估。

引用格式: 刘怡慧, 王延荣, 魏大盛. 不同取向双晶粒结构材料的蠕变行为分析[J]. 航空动力学报, 2022, 37(10): 2201-2212. LIU Yihui, WANG Yanrong, WEI Dasheng. Analysis on creep behavior of bi-crystal structural material with different orientations[J]. Journal of Aerospace Power, 2022, 37(10): 2201-2212.

显差异,如定向结晶材料涡轮叶片结构。每个晶粒的铸造偏离角^[1-2]、二次取向^[3]及倾斜晶界^[4-5]等均对材料性能产生显著影响。因此,多晶体的应力应变本构及蠕变变形行为并不是各个单晶体的简单平均或叠加,它们表现出各向异性^[6],其中,双晶粒模型是用来描述数个晶粒组合的多晶体材料的简单模型。

一些涡轮叶片是仅沿叶高存在晶界的数个晶粒组合体,材料的凝固方向即为承受惯性(离心)载荷方向。考虑晶粒的各向异性和晶界方向对应力分布的影响,单方向的外加载荷在不同晶粒取向及晶界角度下转变为复杂的力平衡系统^[7],进而影响材料蠕变性能。由于叶片凝固过程的复杂性,以及合金中存在难熔元素等因素,目前的定向凝固合金制备技术还无法获得无缺陷的高温合金组织。为了分析这些由于制备引起的合金组织的缺陷,国内外研究人员研究并发展了多种方法,主要可以分为试验研究和数值模拟两类。

试验研究通过双晶粒试样来研究晶界及晶粒取向等因素产生的影响。SU 等^[8]对具有不同取向差的 Ni3Al 合金双晶粒微型试样进行了拉伸试验,研究了晶界对试样宏观力学特性的影响,发现晶界对滑移变形具有阻碍作用,但当两个晶粒具有共同的主滑移系时,晶界对滑移变形的阻碍作用减弱。曹亮等^[9]通过对不同角度晶界的镍基双晶试样进行持久试验,发现随着晶界角度的增加,试样的持久性能降低,断裂方式逐步由穿晶断裂向沿晶断裂过渡。秦健朝等^[10]采用 DD5 合金双晶试样研究了小角度晶界对 DD5 合金在 760、870 ℃ 和 980 ℃ 下拉伸、持久性能的影响,当晶界角度分别大于 14.8°、7.8°和 19.4°时,随着晶界角度的增加,试样持久寿命、伸长率以及断面收缩率下降。

数值模拟主要通过建立各类本构模型及有限元仿真来研究晶界等因素引起的影响。FENG 等^[11]建立了垂直物理晶界双晶粒模型,利用率相关晶体塑性理论研究了双晶粒的非弹性变形,分别分析了垂直/倾斜的几何和物理晶界对双晶粒结构单轴加载的力学响应。Reddy 等^[12]通过分子动力学方法模拟弯曲蠕变试验,研究了镍基双晶试样的蠕变变形行为与晶界状态的关系,应变和位错分析表明,双晶试样中晶界迁移的难易程度会影响应变突发的时间。分子动力学^[13]模拟的优点是可以直接观察原子的运动并在原子尺度上研究

晶界特征。

定向凝固合金的晶界性能是实际工程应用中所提出的需要满足的要求。由于叶片结构和工艺过程的复杂性,使得定向凝固合金存在包括铸造偏离角、二次取向及倾斜晶界等各类影响材料性能的缺陷。分析这些缺陷对材料蠕变性能的影响,以指导实际铸造工艺过程,并人为地定义缺陷容限,确定允许在实际工程中使用的合金。

本文讨论在外加载荷下,不同晶粒取向和晶界角度对材料蠕变性能的影响。选取双晶粒模型作为研究对象,采用一种能描述蠕变 3 个阶段的宏观唯象模型^[14],分析双晶粒结构材料晶界附近的蠕变变形行为。

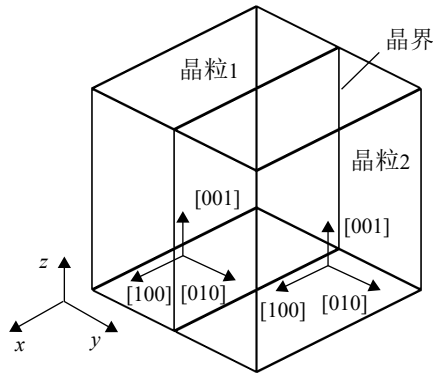
1 模型与材料

1.1 结构模型及参数

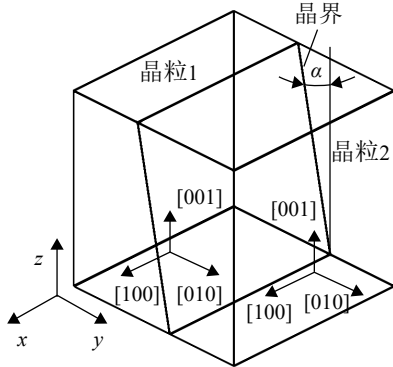
实际结构材料中,晶界是晶粒与晶粒之间的过渡区域,具有一定的厚度,但目前对于晶界的描述还缺乏足够的信息。本文采用几何晶界来模拟双晶粒模型中晶界处的力学行为。几何晶界即为不具有厚度的几何面^[11,15],仅起到分开不同晶粒的作用。

工程中实际使用的定向凝固合金材料仅有数个晶粒,在横向的不同方向上材料性能不完全一致。对于研究模拟实际涡轮叶片材料的数个晶粒的多晶组合体的力学行为来说,双晶粒结构是较好的切入点。相对于单晶,双晶粒结构影响蠕变行为的因素更加丰富;相对于几个乃至几十个晶粒的多晶体,双晶粒结构中这些影响因素的组合既能模拟影响多晶体蠕变行为的典型特征,又能简化整体模型并保留关键特征,便于进行定量分析。双晶粒结构的力学行为是理解多晶粒材料晶界特性的基础。

计算中双晶粒模型如图 1 所示,图中定义了坐标方向。双晶粒中间平面为晶界,立方单元体模型边长分别为 2 mm。考虑到实际使用中的定向凝固合金仅存在沿叶高的晶界,本文只分析存在纵向晶界和具有较小偏离角 α 的情况。图 1(a)中晶界不存在偏角,图 1(b)中晶界存在与材料凝固方向(叶高方向)的偏角。采用文献^[14]描述的有限元子程序进行仿真计算,仿真计算以镍基材料为主,其相关参数^[16]分别为:弹性模量 $E = 105.5$ GPa,泊松比 $\nu = 0.377$,切变模量 $G = 105.01$ GPa,材料 [001] 方向的屈服强度 $\sigma_{[001]} = 935$ MPa。



(a) 纵向晶界



(b) 倾斜晶界

图 1 双晶粒模型

Fig. 1 Bi-crystal model

1.2 蠕变模型

利用蠕变模型^[14]

$$\varepsilon_c = \eta_1 (1 - e^{-\eta_4 \zeta}) + \eta_2 \zeta + \eta_3 \zeta^{\eta_5} \quad (1)$$

对不同取向、温度及应力水平下的蠕变应变-时间曲线进行拟合。该模型具有较明确的物理意义^[16-17]如图 2 所示。式中 ε_c 为蠕变应变, $\zeta = t/t_c$ 为无量纲时间, t_c 为给定温度和应力下的持久寿命, 则 $\zeta \in [0, 1]$; $\eta_i (i=1, 2, 3, 4, 5)$ 为与材料相关的参数, 是无量纲应力 $\sigma/\sigma_{0.2}$ 与无量纲温度 T/T_m 的函数 ($\sigma_{0.2}$ 和 T_m 分别为屈服应力和熔点温度), 可表示为

$$\ln \eta_i = a_i + b_i \frac{T}{T_m} + c_i \frac{\sigma}{\sigma_{0.2}} + d_i \frac{T}{T_m} \cdot \frac{\sigma}{\sigma_{0.2}} \quad (2)$$

式中 $\eta_i (i=1, 2, 3, 4, 5)$ 代表 5 个参数; a_i 、 b_i 、 c_i 和 d_i 为对应于各参数的待定系数, 可通过拟合试验数据得到。

图 2 所示模型中的 3 项可分别描述蠕变的 3 个阶段, 参数 η_1 、 η_4 分别描述了蠕变第 1 阶段的大小与形状, 分别由如图 2 所示的蓝色和红色蠕变曲线拟合得到; 而参数 η_2 对应图 2 中蓝色直线的斜率, 拟合公式^[18]为

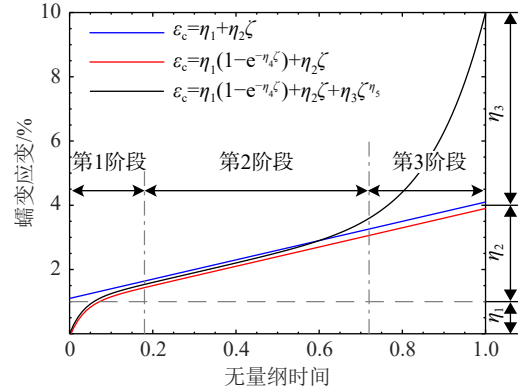
图 2 蠕变模型示意图^[16]

Fig. 2 Schematic diagram of creep model

$$\eta_2 = \dot{\varepsilon}_c \times t_c \quad (3)$$

式中 $\dot{\varepsilon}_c$ 为蠕变第 2 阶段蠕变应变率, t_c 为相应取向、温度与应力水平下的蠕变断裂时间, 其中 $\dot{\varepsilon}_c$ 可以表达为

$$\dot{\varepsilon}_c = C \sigma^n e^{\left(-\frac{Q_{ijk}}{RT}\right)} \quad (4)$$

式中 C 为材料常数, n 为应力指数, Q_{ijk} 为不同取向对应的蠕变激活能, R 为玻尔兹曼常数, $R = 0.0083145 \text{ kJ}/(\text{mol} \cdot \text{K})$ 。镍基材料 [001] 取向参数拟合结果见表 1, 通过式 (4) 求得 [001] 晶向不同温度和应力对应的蠕变第 2 阶段蠕变应变率, 并与试验结果进行比较, 定义百分比误差 $\frac{\dot{\varepsilon}_c - \dot{\varepsilon}_{c, \text{fitting}}}{\dot{\varepsilon}_c + \dot{\varepsilon}_{c, \text{fitting}}} \times 100\%$, 见表 2。式中 $\dot{\varepsilon}_{c, \text{fitting}}$ 为拟合蠕变应变率。

参数 η_3 、 η_5 分别描述了蠕变第 3 阶段的大小与形状。 δ_c 为蠕变断裂延伸率, 写作

表 1 蠕变应变率的参数拟合结果

Table 1 Fitting parameters of creep strain rate equation

取向	温度/℃	C	n	$Q_{ijk}/(\text{kJ/mol})$
[001]	760	6.64×10^{-3}	1.768 92	148.04

表 2 蠕变应变率拟合结果

Table 2 Fitting results of creep strain rate

温度/℃	应力/MPa	蠕变应变率/ 10^{-5} h^{-1}	拟合蠕变应变率/ 10^{-5} h^{-1}	误差/%
760	600	2.27	1.79	11.9
850	500	3.25	5.15	-22.5
850	570	8.57	6.49	13.8
980	200	3.15	5.27	-25.2
980	240	6.93	7.28	-2.4
1 070	50	0.882	1.18	-14.3
1 070	80	3.87	2.70	17.8
1 070	120	6.68	5.53	9.4

$$\delta_c = \eta_1 + \eta_2 + \eta_3 \quad (5)$$

从而有

$$\eta_3 = \delta_c - \eta_1 (1 - e^{-\eta_4}) - \eta_2 \quad (6)$$

由于试验数据手册仅提供了材料蠕变第 1 阶段和部分第 2 阶段蠕变应变-时间曲线, 缺乏蠕变第 3 阶段信息, 参考 GH4169 材料^[17]与 GH4169G 材料^[19]的模型参数 η_5 拟合数据, 可见参数 η_5 与温度和应力并无明显的相关性。考虑到程序的稳定性与第 3 阶段描述对实际分析的影响, 实际工程应用中也不允许材料进入蠕变第 3 阶段, η_5 的取值仅需要保证蠕变曲线存在第 3 阶段中蠕变应变随时间快速增加直至断裂的趋势。因此, 在本文中 η_5 取为 8.0。本文所采用镍基材料蠕变模型中的 5 个参数, 不同温度与应力水平下蠕变曲线参数拟合结果见表 3, 蠕变模型参数拟合结果见表 4。

1.3 蠕变模型算法

本文编写的 usermat 子程序采用常刚度矩阵的方法。首先, 由材料的常刚度矩阵式

$${}^{t+\Delta t}\boldsymbol{\sigma}_{(k+1)} - \boldsymbol{\sigma}_0 = \mathbf{D}_e (\Delta \boldsymbol{\varepsilon} - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_t - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{c(k+1)}) \quad (7)$$

求得

$$(\mathbf{I} + \theta \Delta t {}^{t+\theta \Delta t} \boldsymbol{\beta}_{(k)} \mathbf{D}_e \mathbf{C}) {}^{t+\Delta t} \boldsymbol{\sigma}_{(k+1)} = \mathbf{D}_e (\Delta \boldsymbol{\varepsilon} - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_t) + [\mathbf{I} - (1 - \theta) \Delta t {}^{t+\theta \Delta t} \boldsymbol{\beta}_{(k)} \mathbf{D}_e \mathbf{C}] {}^t \boldsymbol{\sigma} + ({}^{t+\Delta t} \mathbf{D}_e - {}^t \mathbf{D}_e) {}^t \boldsymbol{\varepsilon}_e \quad (8)$$

式(9)用于计算正应力分量, 式(10)用于计算切应力分量, 式中 ${}^{t+\theta \Delta t} \bar{\sigma}_{(k)}$ 采用等效应力形式。

${}^{t+\theta \Delta t} \beta_{1(k)}$ 、 ${}^{t+\theta \Delta t} \beta_{2(k)}$ 可通过下式得到:

$${}^{t+\theta \Delta t} \beta_{1(k)} = \frac{3}{4} \cdot \frac{{}^{t+\theta \Delta t} \dot{\varepsilon}_c(k)}{{}^{t+\theta \Delta t} \bar{\sigma}_{(k)} {}^{t+\theta \Delta t} g_{(k)}} \quad (11)$$

变量 $h_{1(k)}$ 、 $h_{2(k)}$ 分别由下式求得

$$h_{1(k)} = \frac{2}{3} [(s_{xx(k)} - s_{yy(k)})^2 + (s_{yy(k)} - s_{zz(k)})^2 + (s_{xx(k)} - s_{zz(k)})^2] + J (s_{xy(k)}^2 + s_{yz(k)}^2 + s_{xz(k)}^2) \quad (14)$$

$$h_{2(k)} = \frac{J}{3} [(s_{xx(k)} - s_{yy(k)})^2 + (s_{yy(k)} - s_{zz(k)})^2 + (s_{xx(k)} - s_{zz(k)})^2] + 2I (s_{xy(k)}^2 + s_{yz(k)}^2 + s_{xz(k)}^2) \quad (15)$$

式中 I 和 J 分别为本文所采用屈服函数的参数,

$$I = 4 \frac{\sigma_{y[001]}^4}{\sigma_{y[111]}^4}, J = \frac{32}{3} \cdot \frac{\sigma_{y[001]}^4}{\sigma_{y[011]}^4} - \frac{2}{3} - 6 \frac{\sigma_{y[001]}^4}{\sigma_{y[111]}^4}, \text{其他参}$$

表 3 蠕变曲线参数 η 拟合结果

Table 3 Fitting parameters η of creep curve

温度/℃	应力/MPa	$\eta_1/\%$	$\eta_2/\%$	$\eta_3/\%$	η_4	η_5
760	600	0.01	1.957 2	25.042 7	0.01	8.0
850	500	0.10	1.555 6	25.443 3	0.01	8.0
850	570	1.00	0.756 0	25.792 8	0.60	8.0
980	200	0.01	4.464 3	22.535 6	0.01	8.0
980	240	0.01	2.769 8	24.230 1	0.01	8.0
1 070	80	1.50	11.438 1	14.136 6	3.00	8.0
1 070	120	0.60	3.049 7	23.513 8	1.30	8.0

表 4 蠕变模型参数 η 拟合结果

Table 4 Fitting parameters η of creep model

拟合参数	a_i	b_i	c_i	d_i
η_1	-121.039 9	137.196 3	122.156 1	-124.793 5
η_4	-141.160 0	170.337 0	170.371 8	-192.401 8

式中 $\boldsymbol{\sigma}_0$ 为初始应力向量, $\mathbf{D}_e$ 为弹性应力-应变矩阵, $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}$ 为应变增量, $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}_t$ 为切线应变增量, θ 为 Newton-Raphson 迭代法的实常数, 左上角标和右上角标都表示相对于时间 t 的增量。需迭代求解线性方程组, 其中, $k = 0, 1, 2, \dots$, $\mathbf{C} = \left[\mathbf{I} - \frac{1}{3} \mathbf{m} \mathbf{m}^T \right]$, $\mathbf{m}^T = [1, 1, 1, 0, 0, 0]$, θ 取值在 $1/2 \leq \theta \leq 1$ 时算法是稳定的。

针对本文蠕变模型, 将原迭代式修改为^[20]

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{c(k+1)} = \frac{3}{4} \cdot \frac{{}^{t+\theta \Delta t} \dot{\varepsilon}_c(k) \Delta t}{{}^{t+\theta \Delta t} \bar{\sigma}_{(k)} {}^{t+\theta \Delta t} g_{(k)}} {}^{t+\theta \Delta t} \mathbf{S}_{(k+1)} h_{1(k)} = {}^{t+\theta \Delta t} \beta_{1(k)} \Delta t {}^{t+\theta \Delta t} \mathbf{S}_{(k+1)} h_{1(k)} \quad (9)$$

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{c(k+1)} = \frac{3}{8} \cdot \frac{{}^{t+\theta \Delta t} \dot{\varepsilon}_c(k) \Delta t}{{}^{t+\theta \Delta t} \bar{\sigma}_{(k)} {}^{t+\theta \Delta t} g_{(k)}} {}^{t+\theta \Delta t} \mathbf{S}_{(k+1)} h_{2(k)} = {}^{t+\theta \Delta t} \beta_{2(k)} \Delta t {}^{t+\theta \Delta t} \mathbf{S}_{(k+1)} h_{2(k)} \quad (10)$$

$${}^{t+\theta \Delta t} \beta_{2(k)} = \frac{3}{8} \cdot \frac{{}^{t+\theta \Delta t} \dot{\varepsilon}_c(k)}{{}^{t+\theta \Delta t} \bar{\sigma}_{(k)} {}^{t+\theta \Delta t} g_{(k)}} \quad (12)$$

其中 ${}^{t+\theta \Delta t} g_{(k)}$ 可通过下式得到:

$${}^{t+\theta \Delta t} g_{(k)} = (1 - \theta) {}^t g + \theta {}^{t+\Delta t} g_{(k)} = \frac{2}{3} (1 - \theta) {}^t \bar{\sigma}^2 + \frac{2}{3} \theta {}^{t+\Delta t} \bar{\sigma}_{(k)}^2 \quad (13)$$

数见下式:

$${}^{t+\theta \Delta t} \dot{\varepsilon}_c(k) = (1 - \theta) {}^t \dot{\varepsilon}_c + \theta {}^{t+\Delta t} \dot{\varepsilon}_c(k) \quad (16)$$

$${}^{t+\theta\Delta t}\bar{\sigma}_{(k)} = (1-\theta) {}^t\bar{\sigma} + \theta {}^{t+\Delta t}\bar{\sigma}_{(k)} \quad (17)$$

$${}^{t+\theta\Delta t}\sigma_{(k+1)} = (1-\theta) {}^t\sigma + \theta {}^{t+\Delta t}\sigma_{(k+1)} \quad (18)$$

$${}^{t+\theta\Delta t}S_{(k+1)} = C {}^{t+\theta\Delta t}\sigma_{(k+1)} \quad (19)$$

式中 $\sigma_{(k+1)}$ 是应力张量, $S_{(k+1)}$ 是偏应力张量。子程序的收敛准则为 $\frac{\|\Delta\epsilon_c(k+1) - \Delta\epsilon_c(k)\|}{\|\Delta\epsilon_c(k+1)\|} \leq E_{\text{error}}$, E_{error} 为给定误差。利用以上迭代方法更新应力,主程序调用子程序以及子程序迭代流程如图 3 所示。迭代过程中与镍基单晶蠕变模型直接相关变量为等效蠕变应变率 $\dot{\epsilon}_c$;子程序时间单位统一为 h。

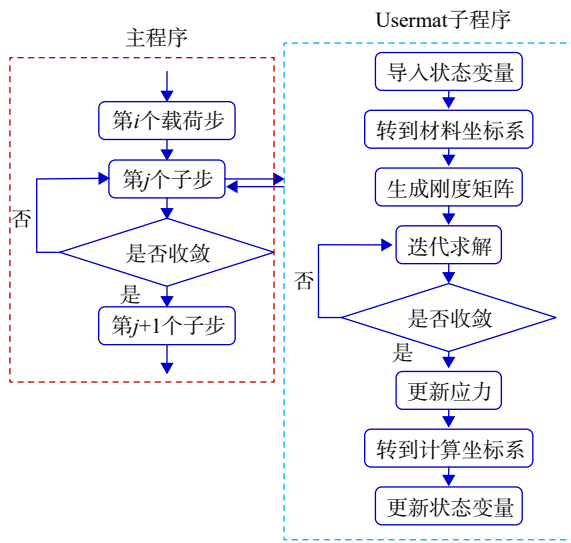


图 3 蠕变子程序调用计算流程

Fig. 3 Calculation flow of creep subroutine

1.4 蠕变模型合理性验证

利用表 1、表 3 和表 4 的拟合参数对 [001] 取向不同温度和应力的蠕变曲线进行拟合,以验证所采用蠕变模型的合理性,镍基材料 [001] 取向加载蠕变计算结果如图 4 所示。由于试验曲线蠕变第 1 阶段不明显,拟合曲线第 1 阶段也不明显,

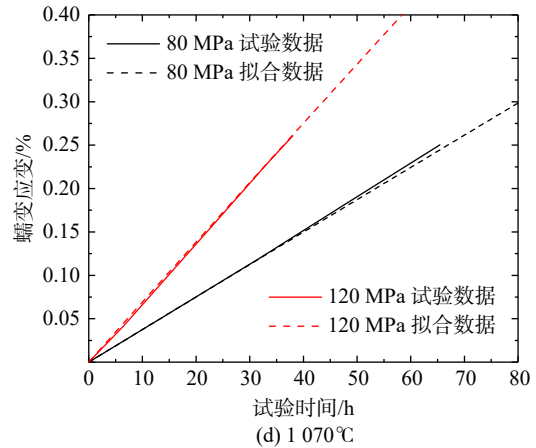
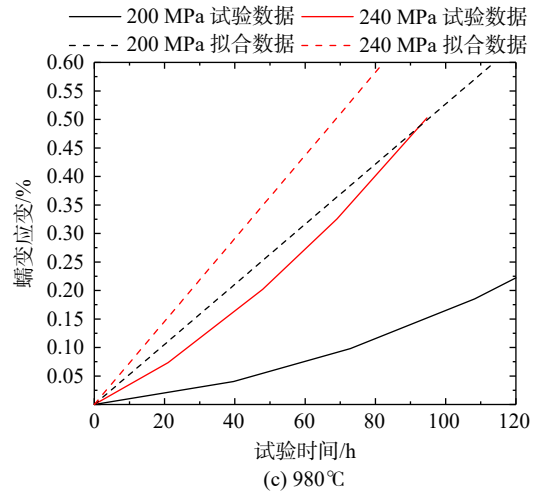
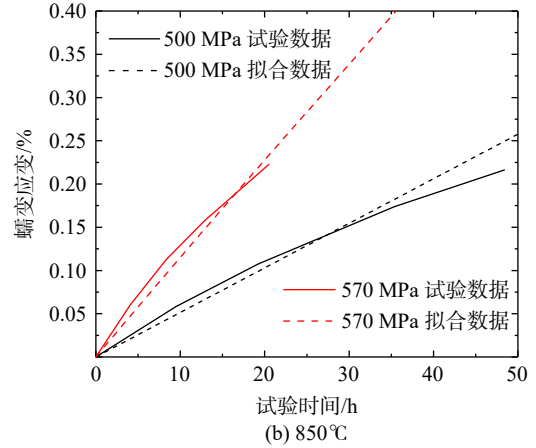
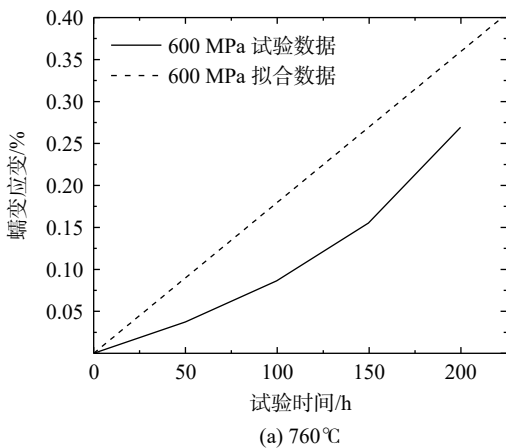


图 4 蠕变曲线拟合结果

Fig. 4 Fitting results of creep curve

在一定时间内,主要表现为恒速蠕变的第 2 阶段,拟合结果呈线性。实际蠕变模型为非线性模型,包含减速、恒速和加速 3 个阶段。

由图 4 可以看出 760 °C 与 980 °C 下蠕变计算结果偏保守,850 °C 与 1070 °C 下蠕变计算结果与试验结果符合较好。考虑到蠕变数据的分散性,模型精度总体上在工程可接受范围内。

2 计算分析与讨论

所有算例均设定温度为 760 ℃, 在结构模型上表面施加 580 MPa 拉应力, 并约束结构模型下表面。在双晶粒模型中, 需要考虑晶粒的铸造偏离角和二次取向对蠕变行为的影响, 同时晶界可能存在偏角, 也会对蠕变性能产生影响。

2.1 晶粒取向的描述

实际制造中, 晶粒取向无法保证与设计取向完全一致, 晶粒的 [001] 方向通常与叶高方向(本文中为 z 轴)存在一定的偏角^[21], 文献^[22]认为铸造偏离角小于 15°工程上可以接受。现有的定向凝固技术能控制绝大多数晶粒的铸造偏离角在 10°以内^[23-24], 其分布可认为满足高斯分布, 以 5°偏离角为最多。在实际生产中, 一般只对 [001] 方向进行控制, 而不对二次取向进行控制^[3], 因而二次取向对材料蠕变性能影响需要进行进一步地讨论。

现对晶粒进行两次旋转, 第 1 次旋转为通过整体坐标系绕 xy 平面任一给定轴进行旋转得到坐标系 1, 第 2 次旋转为通过坐标系 1 绕 z_1 轴进行旋转得到坐标系 2, 具体旋转过程见图 5。通过第 1 次旋转, 晶粒产生给定方向和角度的铸造偏离角; 通过第 2 次旋转, 晶粒产生给定角度的二次取向角。

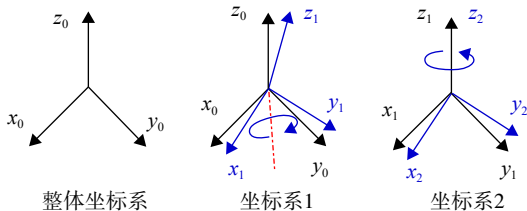


图 5 两次旋转示意图

Fig. 5 Schematic diagram of rotation of two times

2.2 网格无关性验证

有限元计算所用网格如图 6 中的网格所示, 需要对网格进行无关性验证, 分别选取图 6 所示的 3 种网格进行计算, 网格数量分别为 512、4 096、32 768。所有计算条件设置均为 760 ℃ 和 580 MPa 拉应力, 计算 300 h 蠕变应变。

3 种不同密度网格同一位置计算结果对比见图 7, 选取数据点位置见图 8, 具体数值见表 5。从图表中可以看出, 网格密度对结果的影响很小, 结果满足网格无关性。进行蠕变变形模拟时, 网格密度增加, 计算时长将大幅度增加, 后文选取

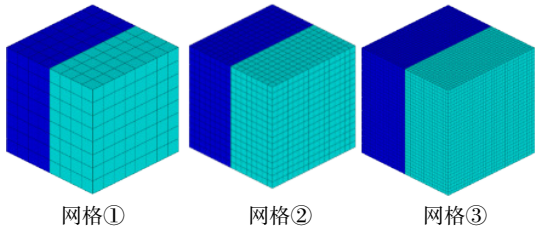


图 6 不同密度的有限元网格

Fig. 6 Finite element meshes with different densities

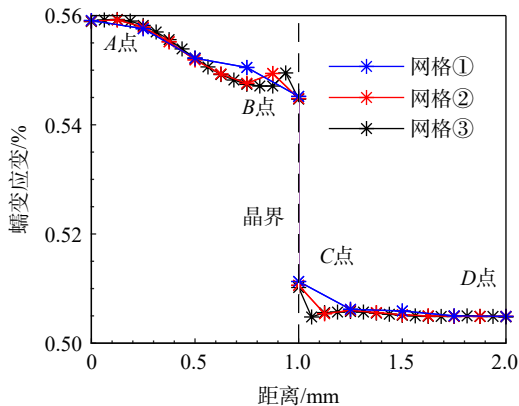


图 7 蠕变应变计算结果对比

Fig. 7 Comparison of creep strain calculation results

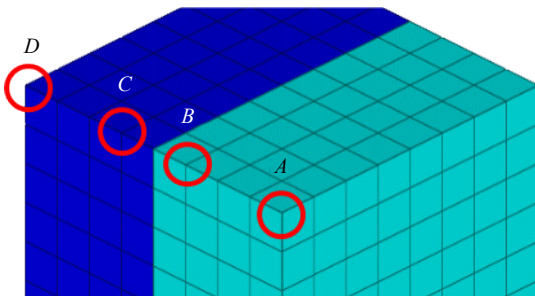


图 8 蠕变应变的提取位置

Fig. 8 Extraction locations of creep strain

表 5 不同密度网格计算结果对比

Table 5 Comparison of calculation results among grids with different densities

网格名称	网格数量	300 h 蠕变应变/%			
		A 点	B 点	C 点	D 点
①	512	0.559 1	0.550 5	0.506 2	0.504 9
②	4 096	0.559 0	0.549 4	0.505 4	0.504 9
③	32 768	0.558 9	0.549 5	0.504 8	0.504 8

网格①进行有限元计算。

2.3 铸造偏离角对蠕变行为的影响

晶界纵向(无偏角)为图 1(a)所示。晶粒 1 不进行旋转, 晶粒 2 只进行第 1 次旋转, 产生铸造偏离角, 并得到坐标系 3。坐标系 3 的 z_1 轴与整体

坐标系 z_0 轴存在铸造偏离角 β , 选取 $\beta = 5^\circ$ 。坐标系 3 的 z_1 轴在整体坐标系中位置如图 9 所示, z_1 轴在整体坐标系中的投影与旋转轴存在 90° 夹角。

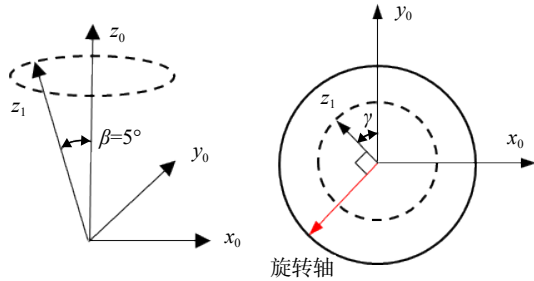
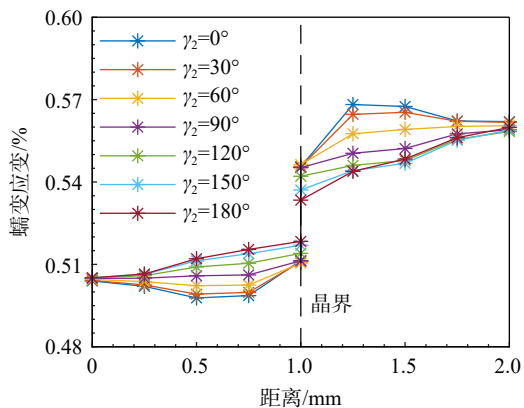


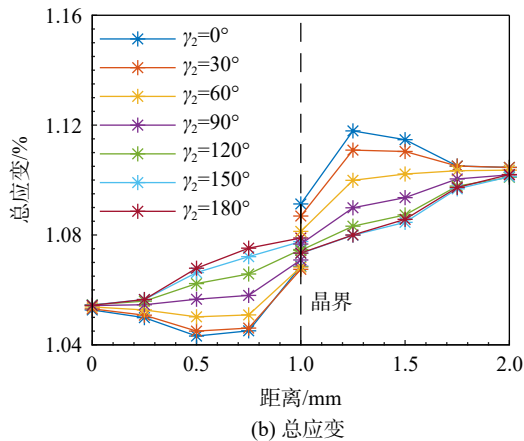
图 9 铸造偏离角示意图

Fig. 9 Schematic diagram of casting deviation angle

考虑到材料的对称性, 旋转轴仅需选取 180° 范围即可模拟所有可能的情况。定义 z_1 轴在整体坐标系中的投影与整体坐标系 x_0 轴角度为 γ , 晶粒 1 的 γ 记作 γ_1 , 晶粒 2 的 γ 记作 γ_2 。 z 向作用 580 MPa 应力, 对 γ 在 $0 \sim 180^\circ$ 内的材料进行 300 h 蠕变分析, 提取材料蠕变应变及总应变结果如图 10 所示。提取的路径见图 11 红色箭头。随着 γ_2 由



(a) 蠕变应变



(b) 总应变

图 10 晶粒 2 不同 γ_2 蠕变应变与总应变对比

Fig. 10 Comparison of creep strain and total strain of grain 2 with different γ_2

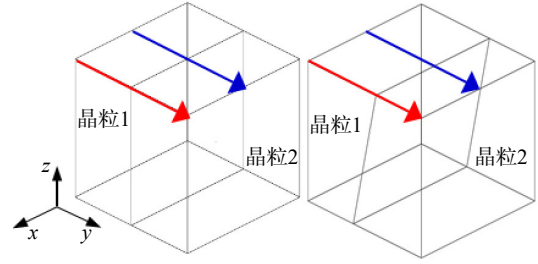


图 11 应变提取路径

Fig. 11 Extraction path of strain

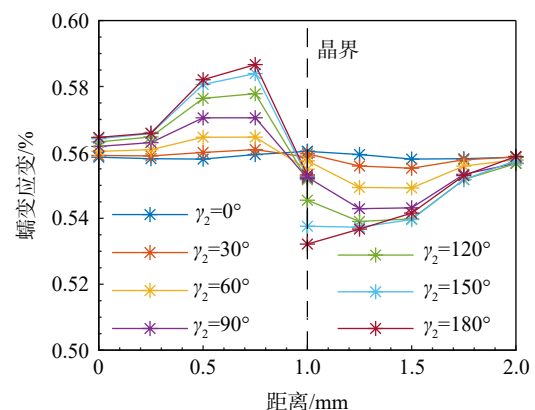
0° 增大到为 180° , 坐标系 3 的 z_1 轴在整体坐标系中的投影由 y_0 轴顺时针转向负 y_0 轴。

对比晶界两侧晶粒的应变, 可以发现晶粒 2 的蠕变应变和总应变均大于晶粒 1, 表明材料存在铸造偏离角时, 蠕变性能降低, 即蠕变应变和总应变增加。分析不同 γ 角的蠕变应变, 当晶粒结晶方向(坐标系 3 的 z_1 轴)向晶界倾斜时, 晶界两侧蠕变应变更接近, 而当晶粒结晶方向(坐标系 3 的 z_1 轴)向模型边缘倾斜时, 晶界两侧蠕变应变差异增大。

晶粒 1 和晶粒 2 同时存在铸造偏离角, 即两个晶粒均进行第 1 次旋转。晶粒 1 和晶粒 2 各自通过旋转产生坐标系 4 和坐标系 5。选取晶粒 1 和晶粒 2 铸造偏离角 β 均为 5° , 固定晶粒 1 的取向角 γ_1 为 0° 、 90° 和 180° , 旋转晶粒 2 的取向角 γ_2 。通过有限元计算分析 300 h 时的蠕变应变, 分析结果见图 12。

当晶粒 1 取向角 $\gamma_1 = 0^\circ$ 时, 其结晶方向(坐标系 4 的 z_1 轴)向晶界倾斜。考虑材料对称性, 晶粒 2 取向角 γ_2 从 0° 旋转到 180° , 蠕变应变对比如图 12(a)。

当两个晶粒取向角一致时, 晶界两侧的蠕变应变差最小, 几乎一致; 当两个晶粒取向角完全



(a) 晶粒 1 取向角 $\gamma_1 = 0^\circ$

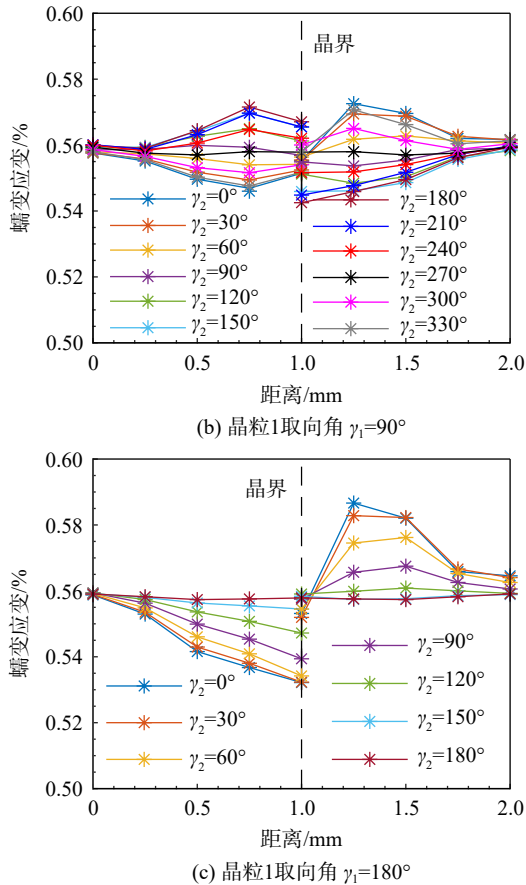


图12 不同铸造偏离角蠕变应变对比

Fig. 12 Comparison of creep strains at different casting deviation angles

相反时,晶界两侧的蠕变应变差最大,并且会影响靠近晶界的部分区域。当晶粒1取向角 $\gamma_1 = 90^\circ$ 时,其结晶方向(坐标系4的 z_1 轴)向模型边缘倾斜。单独提取晶界附近同一节点不同取向角蠕变应变如图13所示。当晶粒1和晶粒2取向角一致时,晶界对蠕变应变无影响;当晶粒1和晶

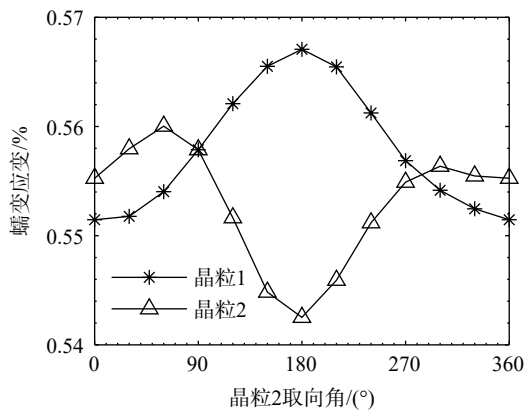


图13 晶界两侧蠕变应变对比

Fig. 13 Comparison of creep strain on both sides of grain boundary

粒2取向角反向时,蠕变应变差也不明显;当晶粒1和晶粒2存在 90° 取向角时,即晶粒1结晶方向(坐标系4的 z_1 轴)向模型边缘倾斜,晶粒2结晶方向(坐标系5的 z_2 轴)向晶界倾斜,此时晶界两侧蠕变应变差最大。

2.4 二次取向对蠕变行为的影响

当晶界为垂直边界时,晶粒1不进行旋转,晶粒2只进行第2次旋转,产生二次取向角,并得到坐标系6,旋转过程见图5。由于每一个晶粒都可以视作一个单晶,其[100]、[010]和[001]方向性能相同,二次取向旋转 90° 时其材料属性完全相同。考虑到材料的对称性,只需要分析旋转角度为 0° 到 45° 的影响。晶粒2旋转不同二次取向角 δ_2 时的蠕变应变与总应变见图14。

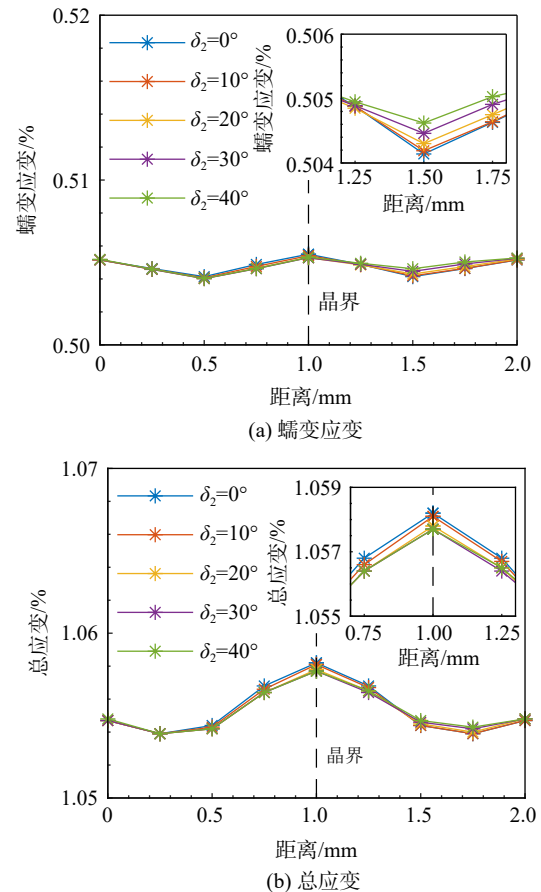


图14 不同二次取向角的蠕变应变与总应变对比

Fig. 14 Comparison of creep strain and total strain at different secondary orientation angles

从图14可以看出晶粒不存在铸造偏离角时二次取向角 δ_2 对蠕变应变和总应变影响都不明显。蠕变应变远离晶界处影响更大,总应变在晶界附近影响更大。

当晶粒2存在铸造偏离角 $\beta = 5^\circ$,取向角分别

为 0° 、 90° 和 180° 时, 二次取向角对蠕变应变的影响见图 15, 可以看出, 存在铸造偏离角时, 二次取向对材料的蠕变变形行为影响相对不明显。总应变对比结果与蠕变应变类似, 就不在此处列出。

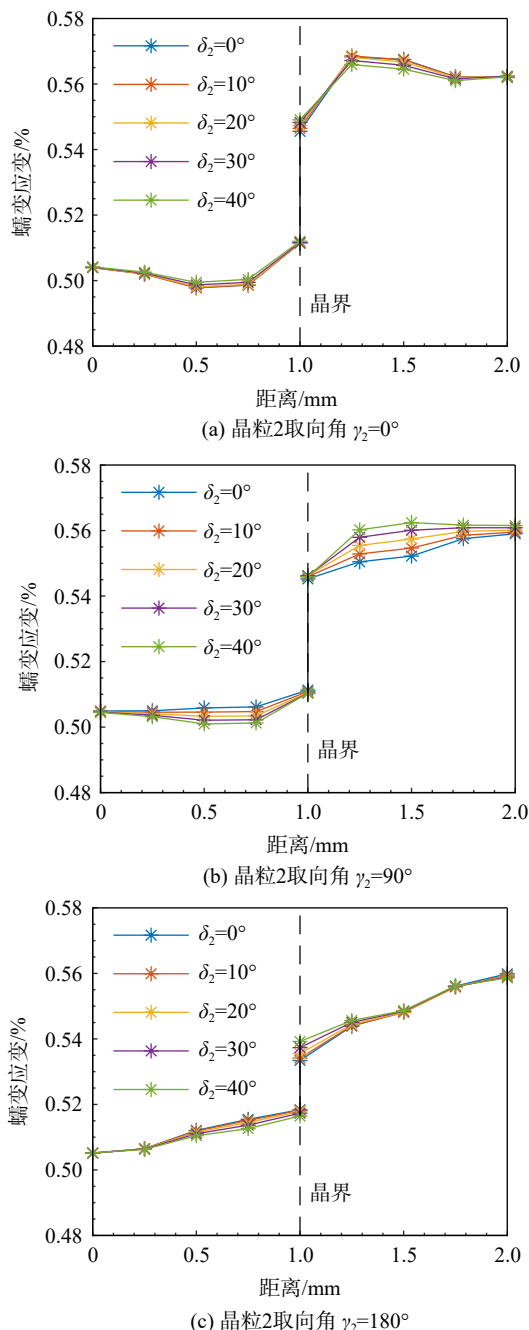


图 15 不同二次取向角的蠕变应变对比

Fig. 15 Comparison of creep strain at different secondary orientation angles

2.5 晶界倾斜角度对蠕变行为的影响

晶界是影响蠕变变形行为的重要因素之一^[25]。实际结构中, 晶界一般存在一定的倾斜偏角。当晶界倾斜偏角小于 10° 时认为是小角度倾斜晶界^[26], 工程中可以接受。

选取晶界角度 α 为 0° 、 5° 和 10° 进行蠕变分析, 所采用的模型见图 1(b)。进行 300 h 蠕变变形模拟并提取不同晶界角度蠕变应变结果进行对比, 应变提取路径如图 11 所示, 沿红色箭头提取模型边缘节点应变, 沿蓝色箭头提取模型中间节点应变, 不同路径的结果对比见图 16, 竖直虚线为不同角度晶界的位置。

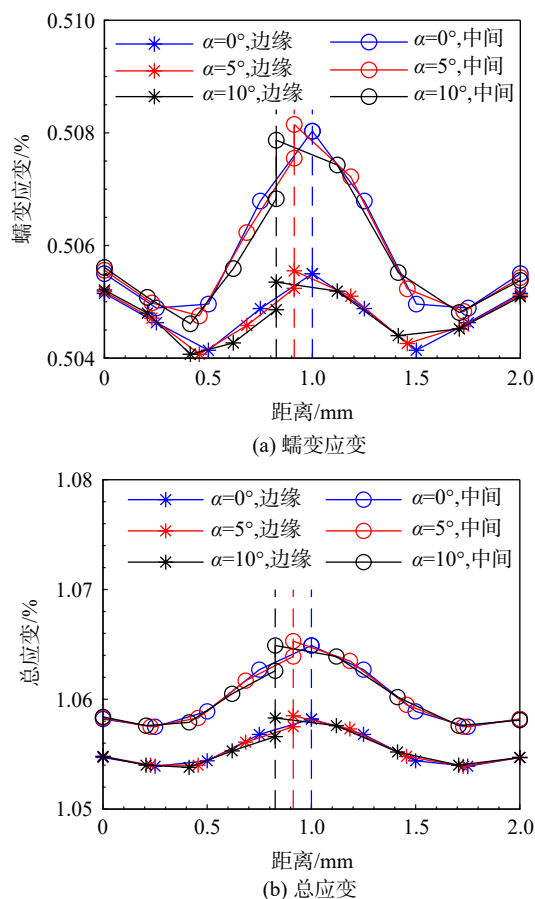


图 16 不同晶界角度蠕变应变与总应变对比

Fig. 16 Comparison of creep strain and total strain at different grain boundary angles

总体上, 中间节点的蠕变应变和总应变均大于边缘节点, 但表现出了同样的变化趋势。晶界角度越大, 晶界两侧蠕变应变差越明显。

存在倾斜晶界时, 铸造偏离角的影响需要进行考虑。选取晶界角度 $\alpha = 5^\circ$, 晶粒 1 和晶粒 2 均不存在二次取向角, 晶粒 2 只进行第 1 次旋转产生铸造偏离角, 铸造偏离角角度选取为 5° 。铸造偏离角的影响见图 17。

存在倾斜晶界时, 不同铸造偏离角的蠕变结果整体趋势与纵向晶界相同。晶界附近蠕变应变差有小幅降低, 远离晶界处晶界角度的影响减小直至消失。

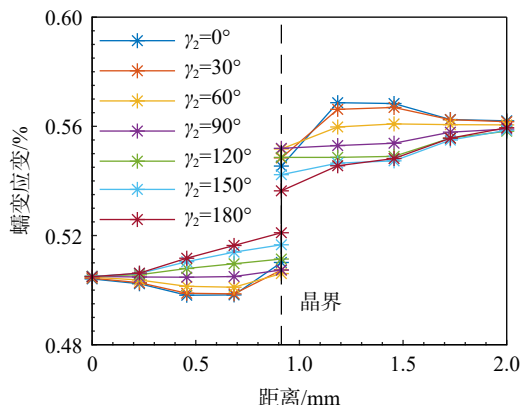


图 17 存在倾斜晶界时不同铸造偏离角蠕变应变对比
Fig. 17 Comparison of creep strains at different casting deflection angles in presence of inclined grain boundaries

进一步考虑存在倾斜晶界时,二次取向对蠕变变形行为的影响。选取晶界角度 $\alpha = 5^\circ$,晶粒 1 和晶粒 2 均不存在铸造偏离角,晶粒 1 不存在二次取向角,晶粒 2 只进行第 2 次旋转产生二次取向角。考虑材料的对称性,二次取向角旋转角度为 0° 到 45° ,蠕变应变结果对比见图 18。从图中可以看出,蠕变应变整体趋势与不存在二次取向角时一致。当存在倾斜晶界时,二次取向对蠕变应变影响很小,这与 2.3 节的结论相同。

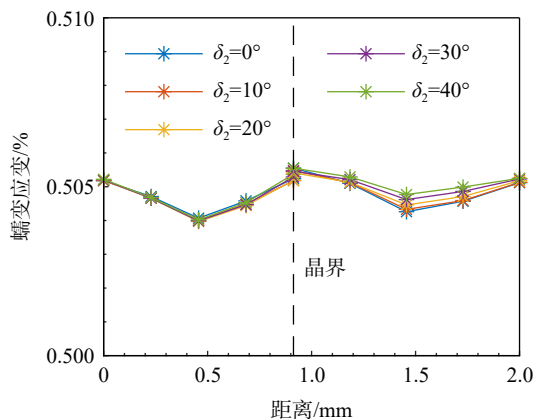


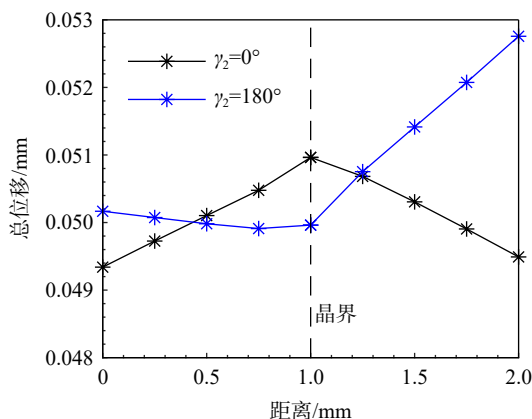
图 18 存在倾斜晶界时不同二次取向角蠕变应变对比
Fig. 18 Comparison of creep strains at different secondary orientation angles in presence of inclined grain boundaries

2.6 晶界两侧变形分析

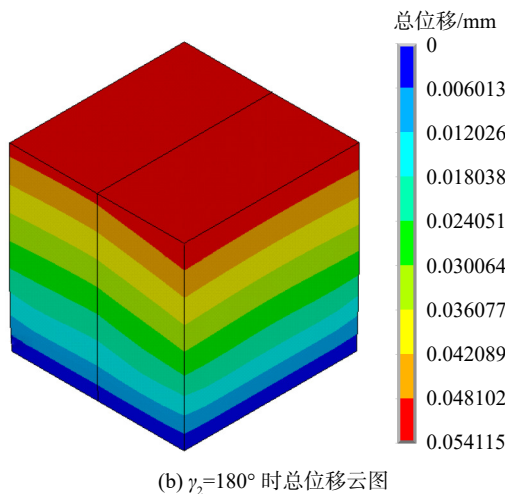
由前述 2.3~2.5 节各算例可知,双晶粒界面两侧蠕变应变和总应变并不一致。晶界两侧的应变不一致不等同于晶界两侧变形不一致,材料的铸造偏离角、二次取向及晶界倾斜角都会对材料承受载荷方向的物理性能产生影响,例如弹性模量、切变模量和泊松比等。在承受相同载荷的情

况下,不同的材料属性引起了晶界两侧应变的不一致,但晶界两侧的总变形保持一致。

提取图 10 中与 $\gamma_2 = 0^\circ$ 和 $\gamma_2 = 180^\circ$ 对应算例的总位移见图 19,从图中可以看出,在晶界两侧蠕变应变和总应变存在不一致的情况下,晶界两侧的总位移保持一致,因此晶界两侧并未出现界面开裂。实际结构中,晶界两侧虽然总变形保持一致,但蠕变应变和总应变不一致会引起晶界附近的引力集中现象,引起晶界附近裂纹萌生^[27]。



(a) $\gamma_2 = 0^\circ$ 和 $\gamma_2 = 180^\circ$ 的总位移对比



(b) $\gamma_2 = 180^\circ$ 时总位移云图

图 19 $\gamma_2 = 0^\circ$ 和 $\gamma_2 = 180^\circ$ 时总位移

Fig. 19 Total displacements of $\gamma_2 = 0^\circ$ and $\gamma_2 = 180^\circ$

3 结 论

本文分析采用的是双晶粒模型,与实际定向结晶叶片有所不同,但所得结果仍有一定的普适性。由前述的计算分析,可以得到如下结论:

1) 铸造偏离角对蠕变行为存在影响,铸造偏离角增大,材料的蠕变性能变差;铸造偏离角的取向角对蠕变性能存在一定影响,晶界两侧晶粒的取向角越接近,晶粒间蠕变行为越相近,取向

角偏差越大,晶界两侧蠕变行为差异越明显。

2) 本文中,二次取向角对蠕变行为影响不显著,不同的二次取向角引起的蠕变行为变化较小,晶界对二次取向的影响很不明显。

3) 晶界角度对晶界两侧的蠕变行为存在一定的影响,晶界倾斜角度增大,晶界两侧晶粒蠕变行为差异增大。

上述结果及结论虽由本文双晶粒结构模型得到,但其一般性结论有助于对实际叶片结构设计分析的认识。

参考文献:

- [1] 张雪薇,李超,罗胜年.晶粒取向和晶界对双晶铜变形的影响[J]. *实验力学*, 2019, 34(3): 406-412.
ZHANG Xuwei, LI Chao, LUO Shengnian. On the effect of grain orientation and grain boundary on the deformation of bicrystal copper[J]. *Journal of Experimental Mechanics*, 2019, 34(3): 406-412. (in Chinese)
- [2] SHI Yi, YANG Xiaoguang, YANG Didi, et al. The influence of temperature and orientation on fatigue crack growth behavior of a directional solidification nickel-based superalloy: experimental investigation and modelling[J]. *International Journal of Fatigue*, 2019, 125(8): 505-519.
- [3] WEI Wencong, ZHANG Jiawei, SONG Jinxia, et al. Effect of secondary orientation on micromechanical properties of nickel base single crystal superalloy[J]. *Journal of Physics: Conference Series*, 2021, 1907(1): 012011.1-012011.5.
- [4] NEWELL M, D'SOUZA N, GREEN N R, et al. Formation of low angle boundaries in Ni-based superalloys[J]. *International Journal of Cast Metals Research*, 2013, 22: 66-69.
- [5] BOGDANOWICZ W, ALBRECHT R, SIENIAWSKI J, et al. The subgrain structure in turbine blade roots of CMSX-4 superalloy[J]. *Journal of Crystal Growth*, 2014, 401: 418-422.
- [6] TENG Yao, SHI Tao, ZHU Yuping, et al. Experimental study on the anisotropic stress-strain behavior of polycrystalline Ni-Mn-Ga in directional solidification[J]. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 2016, 25(3): 1056-1061.
- [7] WANG Y N, HUANG J C. Comparison of grain boundary sliding in fine grained Mg and Al alloys during superplastic deformation[J]. *Scripta Materialia*, 2003, 48(8): 1117-1122.
- [8] SU J Q, DEMURA M, HIRANO T. Mechanical behaviour of $\Sigma 3$ boundaries in Ni_3Al [J]. *Acta Materialia*, 2003, 51(9): 2505-2515.
- [9] 曹亮,周亦曹,金涛,等.晶界角度对一种镍基双晶高温合金持久性能的影响[J]. *金属学报*, 2014, 50(1): 11-18.
CAO Liang, ZHOU Yizhou, JIN Tao, et al. Effect of grain boundary angle on stress rupture properties of a Ni-based bicrystal superalloy[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2014, 50(1): 11-18. (in Chinese)
- [10] 秦健朝,崔仁杰,黄朝晖.小角度晶界对DD5镍基单晶高温合金中、高温条件下力学性能的影响[J]. *材料工程*, 2020, 48(10): 114-122.
QIN Jiangchao, CUI Renjie, HUANG Chaohui. Effect of low angle grain boundaries on mechanical properties of DD5 single crystal Ni-base superalloy at medium temperature and high temperature[J]. *Journal of Materials Engineering*, 2020, 48(10): 114-122. (in Chinese)
- [11] FENG Lu, ZHANG Guang, ZHANG Keshi. Grain boundary effects on the inelastic deformation behavior of bicrystals[J]. *Materials Science and Engineering A*, 2003, 361(1/2): 83-92.
- [12] REDDY K V, PAL S. Influence of grain boundary complexion on deformation mechanism of high temperature bending creep process of Cu bicrystal[J]. *Transactions of the Indian Institute of Metals*, 2018, 71(7): 1721-1734.
- [13] SPEAROT D E, JACOB K I, MCDOWELL D L. Dislocation nucleation from bicrystal interfaces with dissociated structure[J]. *International Journal of Plasticity*, 2007, 23(1): 143-160.
- [14] 王佳良. 涡轮叶/盘结构材料疲劳与蠕变分析方法研究[D]. 北京:北京航空航天大学, 2019.
WANG Jialiang. Research on fatigue and creep analysis method of structural materials for turbine blade/disk[D]. Beijing: Beijing University of Aeronautics and Astronautics, 2019. (in Chinese)
- [15] 杜正兴,温志勋,侯乃先,等.考虑两种晶界的各向异性双晶和三晶体晶界附近弹塑性应力场分析[J]. *计算力学学报*, 2008, 25(5): 627-633.
DU Zhengxing, WEN Zhixun, HOU Naixian, et al. Elastic-plastic stress distribution near grain boundary in anisotropic bicrystals and tricrystals considering two kinds of grain boundaries[J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2008, 25(5): 627-633. (in Chinese)
- [16] 《航空发动机设计用材料数据手册》编委会. 航空发动机设计用材料数据手册:第四册[M]. 北京:航空工业出版社, 2010:250-322.
- [17] WEI Dasheng, WANG Jialiang, WANG Yanrong, et al. Experimental and numerical investigation of the creep behaviour of Ni-based superalloy GH4169 under varying loading[J]. *Fatigue and Fracture of Engineering Materials and Structures*, 2018, 41(5): 1146-1158.
- [18] DOBES F, MILICKA K. Internal stress and activation energy of creep[J]. *Materials Science and Engineering A*, 2007, 462(1/2): 380-383.
- [19] 程域钊. 蠕变建模及叶盘结构应力分析[D]. 北京:北京航空航天大学, 2015.
CHENG Yuzhao. Modelling of creep and stress analysis of turbine disk and blade[D]. Beijing: Beijing University of Aeronautics and Astronautics, 2015. (in Chinese)
- [20] WEI Dasheng, LIU Yihui, WANG Yanrong, et al. Normalized parameter creep model of DD6 nickel-based single crystal superalloy[J]. *Metals*, 2021, 11(2): 254.1-254.18.
- [21] WANG Binqiang, ZENG Long, REN Neng, et al. A comprehensive understanding of grain selection in spiral grain selector during directional solidification[J]. *Journal of Materials Science and Technology*, 2022, 102: 204-212.
- [22] SWANSON G A, LINASK I, NISSLEY D M, et al. Life prediction and constitutive models for engine hot section anisotropic materials program[R]. NASA-1986-15532, 1986.
- [23] 王柠,刘林,高斯峰,等.镍基单晶高温合金螺旋选晶过程的数值模拟[J]. *稀有金属材料与工程*, 2013, 42(12): 2558-2562.
WANG Ning, LIU Lin, GAO Sifeng, et al. Simulation of grain selection during solidification of Ni base single crystal superalloy in spiral grain selector[J]. *Rare Metal Materials and Engineering*, 2013, 42(12): 2558-2562. (in Chinese)
- [24] ZHU Xintao, YANG Qiang, WANG Fu, et al. Grain orientation optimization of two-dimensional grain selector during directional solidification of Ni-based superalloys[J]. *Materials*, 2020, 13(5): 1121.

- 1-1121.10.
- [25] 温志勋, 于庆民, 岳珠峰. 含与不含晶界空穴的双晶体蠕变行为研究[J]. 计算力学学报, 2008, 25(2): 194-200.
- WEN Zhixun, YU Qingmin, YUE Zhufeng. Study on creep behavior of the bi-crystal with or without void in the grain boundary[J]. Chinese Journal of Computational Mechanics, 2008, 25(2): 194-200. (in Chinese)
- [26] 邓安华. 金属材料简明辞典[M]. 北京:冶金工业出版社, 1992:345.
- [27] 刘颖超. 晶界对双晶 γ -TiAl力学性能影响的计算机模拟[D]. 南京:南京航空航天大学, 2018.
- LIU Yingchao. Computer simulation of mechanical tensile properties on grain boundry in bicrystal γ -TiAl[D]. Nanjing:Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 2018.(in Chinese)

(编辑:秦理曼)