

不同铸造工艺下 K4169 高温合金涡轮机匣凝固组织模拟

郭 钊¹ 秦 蓉¹ 马 鑫¹ 李 文² 徐 倩³

(1.中国航发南方工业有限公司; 2.华中科技大学材料成形与模具技术国家重点实验室;
3.武汉轻工大学机械工程学院)

摘 要 采用凝固组织模拟与试验分析方法,对不同铸造工艺下的 K4169 合金凝固枝晶溶质扩散、晶粒耦合共晶生长过程进行数值模拟分析,模拟结果与试验结果相符。结果表明,当冷却速率增大时,枝晶生长速率将大于溶质扩散速率,导致枝晶生长末期其周围的剩余液相溶质浓度仍将保持在较低水平。在细化剂作用下,铸件凝固过程大量形核,排到液相中的溶质较少,导致在晶粒生长后期剩余的液相溶质浓度仍较低,凝固后的固相溶质浓度也较低,且发生共晶反应的区域较少,抑制了凝固后期析出相数量。

关键词 高温合金;铸造工艺;凝固模拟;元胞自动机

中图分类号 TG244.3;TP311 **文献标志码** A

DOI:10.15980/j.tzzz.2023.011.004

开放科学(资源服务)标识码(OSID):



Numerical Simulation on Solidification Microstructure of K4169 Superalloy Turbine Casing under Different Casting Processes

Guo Zhao¹, Qin Rong¹, Ma Xin¹, Li Wen², Xu Qian³

(1.AECC South Industry Co., Ltd.; 2.State Key Laboratory of Material Processing and Die & Mould Technology, Huazhong University of Science and Technology;
3.School of Mechanical Engineering, Wuhan Polytechnic University)

Abstract: Numerical simulation analysis was conducted on solute diffusion and grain coupling eutectic growth processes of solidification dendrites of K4169 superalloy casting under different casting processes, and simulation results are consistent with the experimental results. The results indicate that as the cooling rate increases, the growth rate of dendrites is greater than solute diffusion rate, leading to the remaining liquid solute concentration around the dendrites remaining at a relatively low level in the later stage of growth. Under the action of refining agents, large amounts of nucleation are generated during the solidification process, resulting in less solute discharged into the liquid phase, and a lower concentration of residual liquid phase solute in the later stage of grain growth. The concentration of solid phase solute after solidification is also lower with fewer areas where eutectic reactions occur, inhibiting the quantities of precipitated phases in the later stage of solidification.

Key Words: Superalloy, Casting Process, Solidification Simulation, Cellular Automata

高温合金涡轮机匣是航空发动机的关键零部件之一,采用精密铸造工艺成形,但其铸造工艺窗口窄,易导致成形的零件存在铸造缺陷。通常采用多种铸造凝固工艺组合方法,如控温法、快速凝固法等,以消除疏松缺陷,但由于改变了铸件的凝固组织结构,从而影响铸件的力学性能,导致铸件在发动机长期服役过程中缓慢萌生出裂纹甚至断裂,最终使得发动机失效。

针对高温合金铸件凝固组织演变规律,国内外开展了大量研究。孙长波等^[1]、王春钢等^[2]采用电子探针、高温拉伸等试验分析技术,研究了铸件不同壁厚对 Ni₃

Al 基高温合金铸件组织和性能的影响,获得了壁厚对该铸件合金元素及力学性能的影响;赵运兴等^[3]采用试验方法研究了 CMSX-4 和 DD419 两种单晶高温合金铸件凝固组织共晶含量及分布情况。结果表明,前者共晶含量明显高于后者,并广泛分布于叶片厚大缘板处;高志坤等^[4]基于显微组织演变试验方法,分析了不同服役状态的涡轮叶片相组织分布及损伤形式,为后续涡轮叶片工程化应用及服役状态评估提供指导;PICHON L 等^[5]对比分析了 4 种高温合金中奥氏体 γ 相在基体中分布情况,并在不同的合金凝固组织中观察到 γ 沉淀

收稿日期:2023-05-10;修改稿收到日期:2023-06-20
基金项目:湖南省十大技术攻关项目(2022GK1050)
第一作者简介:郭钊,男,1988 年出生,工程师,湖南株洲(412000),E-mail:zzgz181@163.com
引用格式:郭钊,秦蓉,马鑫,等. 不同铸造工艺下 K4169 高温合金涡轮机匣凝固组织模拟[J]. 特种铸造及有色合金,2023,43(11):1 459-1 462.
GUO Z, QIN R, MA X, et al. Numerical simulation on solidification microstructure of K4169 superalloy turbine casing under different casting processes[J]. Special Casting & Nonferrous Alloys, 2023, 43(11):1 459-1 462.

物的各种行为。上述试验研究都在一定程度上阐明了高温合金凝固组织相含量及分布情况,但缺少高温合金凝固组织直观演变规律分析,而数值模拟研究能弥补在凝固组织演变行为上的不足。冯秋水等^[6]、COT-TURA M 等^[7]通过构建三维弹塑性多元多相场模型,模拟研究了高温合金 γ 相筏化演变规律,阐明了筏化演变的影响因素;马祎炜等^[8]基于 ProCAST 软件,模拟研究了高温合金叶盘铸造凝固行为和晶粒组织演变,指导了整体叶盘铸造工艺优化;张军等^[9]综合阐述了数值模拟技术在预测控制高温合金微观组织及其力学性能的作用,如相场法有效模拟高温合金凝固组织演变行为。然而,上述研究中晶粒组织模拟虽然能与宏观温度场耦合关联,但无法表征更加细微的 γ 相组织演变,而相场法虽然能模拟细微组织演变,但与宏观工艺关联甚远,且计算量大,指导实际工艺优化效果不理想。

针对上述问题,本研究采用改进元胞自动机方法,对不同铸造工艺下的高温合金机匣铸件凝固组织进行数值模拟分析,并辅以试验结果进行对比分析,以期为后续同类型铸件凝固组织性能评估提供参考。

1 数理模型与数值计算方法

1.1 枝晶生长模型

根据二元合金平衡凝固理论及 Gibson-Thomson 热动力学规律可知,枝晶生长过程中固液界面物理场变化遵循:

$$T^* = T_L^0 + m(C_L^* - C_0) - \Gamma w \quad (1)$$

$$C_S^* = kC_L^* \quad (2)$$

$$\frac{\partial C_{SL}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{SLi} \frac{\partial C_{SL}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{SLi} \frac{\partial C_{SL}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{SLi} \frac{\partial C_{SL}}{\partial z} \right) \quad (3)$$

$$\frac{\partial C_L}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{Li} \frac{\partial C_L}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{Li} \frac{\partial C_L}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{Li} \frac{\partial C_L}{\partial z} \right) + C_L(1-k) \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (4)$$

式中, T^* 为固液界面处的平衡温度; T_L^0 为合金液相初始溶质成分点平衡液相线温度; m 为平衡相图液相线斜率; C_L^* 为固液界面处液相侧平衡溶质浓度; C_0 为初始合金溶质浓度; Γ 为 Gibson-Thomson 系数; w 为固液界面曲率与界面能的函数; C_S^* 为固液界面处固相侧平衡溶质浓度; k 为溶质再分配系数; C_{SL} 为固相或液相中溶质浓度; D_{SLi} 为固相或液相中溶质扩散系数; C_L 为液相中溶质浓度; D_{Li} 为液相中溶质扩散系数; f_s 为凝固固相分数。

1.2 晶粒组织耦合共晶生长模型

液态高温合金凝固过程不仅存在着初生 γ 相枝晶生长,当在凝固末期,液态合金溶质成分达到共晶成分时,会伴随着共晶生长。此时,上述模型不适用于描述共晶生长规律。为此,通过采用晶粒生长的 KGT 模型来表征晶粒组织耦合共晶生长速率:

$$v(\Delta T) = a_1 \cdot (\Delta T)^2 + a_2 \cdot (\Delta T)^3 \quad (5)$$

式中, v 为晶粒任意生长方向的生长速率; a_1 、 a_2 分别为基于枝晶尖端生长规律拟合的晶粒生长系数; ΔT 为过冷度。式(1)忽略了晶粒生长过程中非枝晶尖端部分形貌,并用于计算整个晶粒生长过程中边界演化轨迹。其中,假设当前界面为初生枝晶晶粒生长时,如果此时该界面的溶质成分浓度大于或等于共晶成分点浓度时,则此界面初生枝晶生长停止;当前界面为共晶生长,根据共晶生长速率与过冷度的关系式生长,如果此时该界面的温度大于共晶点温度,则此界面的共晶生长停止;同时考虑初生枝晶-二次共晶生长过程中溶质扩散影响;由于不考虑枝晶/共晶形貌,但考虑了枝晶/共晶生长过程中溶质场传递扩散,其中溶质场通过 KGT 模型拟合系数影响晶粒生长速率,而晶粒生长速率又由拟合系数与过冷度决定,从而将枝晶生长速率、溶质场与过冷度三者关联到了晶粒生长速率:

$$\frac{\partial C_L}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{Li} \frac{\partial C_L}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{Li} \frac{\partial C_L}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{Li} \frac{\partial C_L}{\partial z} \right) + C_L(1-k) \frac{\partial F_s}{\partial t} \quad (6)$$

式中, F_s 为宏观网格凝固固相分数。

1.3 元胞自动机数值计算方法

元胞状态分别定义为液相元胞($f_s = 0$),固相元胞($f_s = 1$)和界面元胞($0 < f_s < 1$);元胞邻居分为一阶最近邻居(包含有 6 个元胞)、二阶近邻居(12 个元胞)和三阶次近邻居(18 个元胞),采用三维元胞自动机偏心立方算法^[10]对枝晶及共晶生长数值计算中元胞状态转变进行处理。

2 模拟结果与试验分析

涡轮机匣铸件材质为 K4169 高温合金,其成分见表 1。

表 1 K4169 合金的化学成分

Tab.1 Chemical composition of K4169 alloy							%
w_B							
Al	C	Cr	Mo	Nb	Ni	Ti	Fe
0.5	0.05	19	3.05	4.9	52.5	0.9	余量

K4169 高温合金为多元合金,涉及复杂的多元耦合凝固过程,采用加权平均等当量法,对其进行伪二元化

处理,获得合金的等效热物性参数和凝固生长参数,其中,合金固液相温度通过 DSC 试验测定,其他参数通过参考文献^[10] 伪二元化处理方法计算获得,见表 2。

表 2 K4169 合金等效热物性参数和凝固生长参数

Tab.2 Equivalent thermophysical parameters and solidification growth parameters of K4169 alloy								
液相 线温 度/℃	固相 线温 度/℃	溶质 初始 浓度/ %	溶质 分配 系数	液相线 等效 斜率	共晶点 等效浓 度/%	液相扩 散系数/ (m ² · s ⁻¹)	固相扩 散系数/ (m ² · s ⁻¹)	吉布斯 汤姆逊 系数/ (K·m)
1 339	1 269	47.5	0.762	-3.374	0.545	2.0× 10 ⁻⁹	5.0× 10 ⁻¹⁰	1.9× 10 ⁻⁷

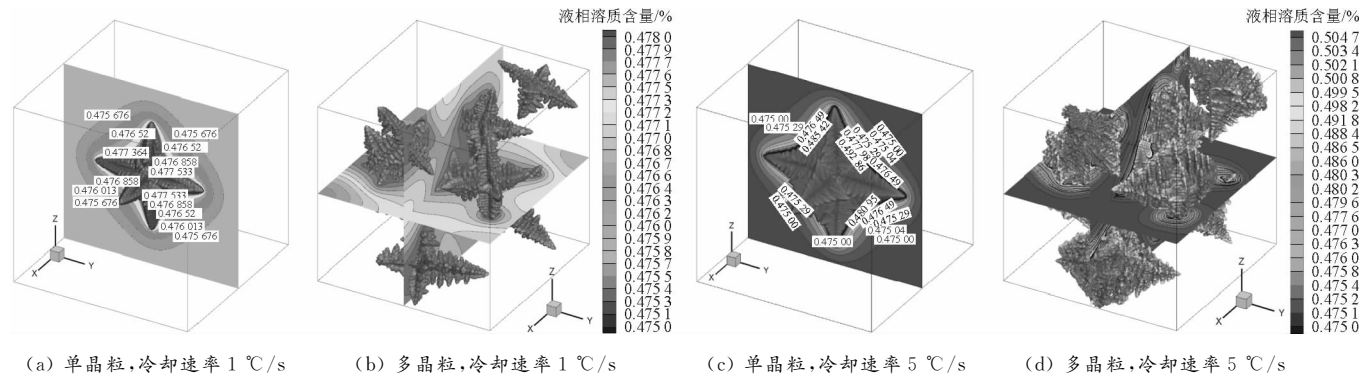


图 1 2 种冷却速率下单晶粒与多晶粒枝晶生长溶质场分布

Fig.1 Solute field distribution of single grain and multi grain dendritic growth under different cooling rates

度梯度较大,且远离枝晶的液相区域,溶质浓度仍接近于初始溶质浓度。可以推测当冷却速率增大时,枝晶生长速率将大于溶质扩散速率,使得枝晶生长末期其周围的剩余液相溶质浓度仍将保持在较低水平。

2.2 晶粒组织耦合共晶生长模拟

除了冷却速率是高温合金铸造工艺控制的常用方法,细化剂也是控制铸件晶粒组织的一种常用措施,其中铝酸盐细化剂作用于铸件表面,细化表面晶粒,提高晶粒组织的力学性能。设置两种形核最大基底数 5.0×10^6 、 5.0×10^7 以表征无、有细化剂对合金凝固晶粒组织的影响。对凝固组织生长过程的数值计算区域进行网格划分,采用宏-介观耦合两套网格,宏观网格数量为 $50 \times 50 \times 50$ 个,每个宏观网格尺寸为 1.2 mm,用于考虑宏观温度场;在每个宏观网格中元胞网格尺寸为 0.3 mm,用于考虑凝固组织场;设置液相合金初始温度为 1 400 °C,计算区域边界取相同传热边界条件,即给定计算区域边界每个面 5 °C/s 的冷却速率,此时,计算区域内晶粒组织生长由随机形核与细化剂作用控制。图 2~图 4 分别为 2 种形核最大基底数下固相溶质浓度分布、晶粒取向分布与共晶含量分布对比示意图,其中,每种形核最大基底数的固相溶质浓度分布、晶粒取向分布与共晶含量分布三者时空上一一对应。可以

2.1 枝晶生长过程溶质场模拟

在实际铸件生产过程中,铸件冷却速率存在缓冷与快冷差异。通过实际测温,冷却速率范围一般为 0.01~10 °C/s。在该冷却速率范围内,采用两种冷却速率,即 1 °C/s 和 5 °C/s 对单个晶粒及多个晶粒生长过程进行数值模拟。对枝晶生长过程的数值计算区域进行网格划分,元胞网格设置为 $200 \times 200 \times 200$ 个,研究分析高温合金凝固枝晶生长过程中溶质场扩散及分布规律。图 1 为 2 种冷却速率下单晶粒与多晶粒枝晶生长溶质场分布对比示意图。可以看出,无论是单晶粒或多晶粒,相对于 1 °C/s、5 °C/s 冷却速率下枝晶液相溶质浓

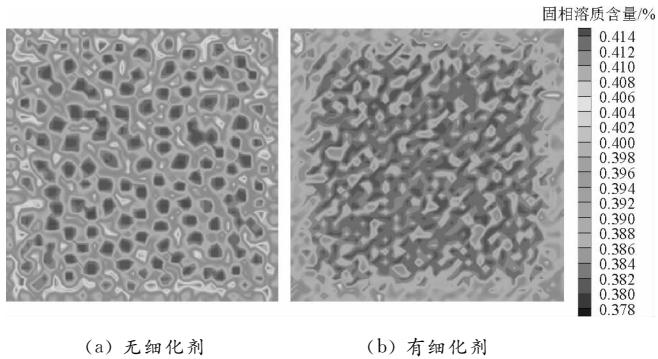


图 2 2 种不同的形核最大基底数下固相溶质浓度分布

Fig.2 Solid solute concentration distribution under different maximum bases for nucleation

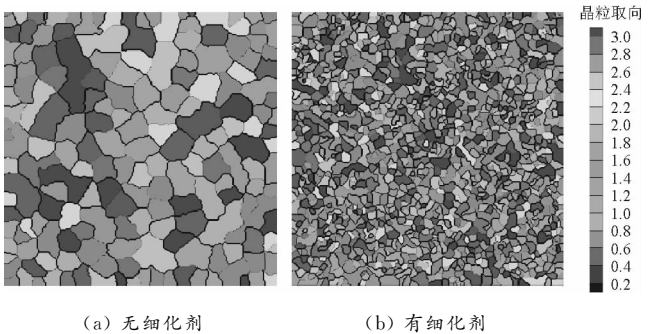


图 3 两种不同的形核最大基底数下晶粒取向分布

Fig.3 Grain orientation distribution under different maximum bases for nucleation

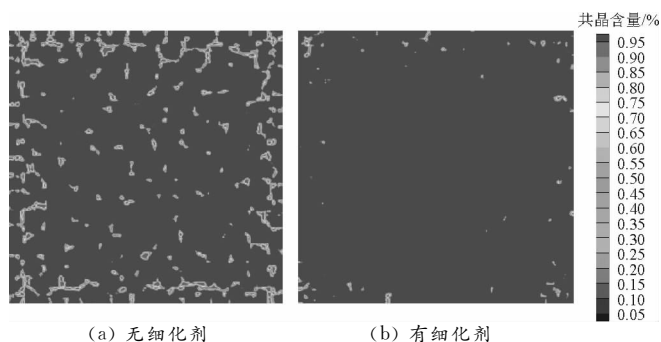


图 4 两种不同的形核最大基底数下共晶含量分布
Fig.4 Eutectic content distribution under different maximum bases for nucleation

看出,在相同过冷度条件下,相对于无细化剂,有细化剂促进晶粒形核数量明显较多。在细化剂作用下,合金固相溶质浓度、共晶含量较大的面积区域明显小于无细化剂作用下的,同时,每种形核最大基底数的合金固相溶质浓度分布、共晶含量分布二者在空间区域上一一对应,且较大值均在晶粒边界之间形成,说明了在细化剂作用下,模拟计算区域的晶粒形核数较多,形核后的枝晶生长过程中固液界面会发生溶质再分配。由于每个晶粒生长过程时间较短,使得排到液相中的溶质较少,导致在晶粒生长后期剩余的液相溶质浓度仍较低,凝固后的固相溶质浓度也较低。另外,晶粒生长后期较低的液相溶质浓度也很少满足共晶成分点,导致液相溶质发生共晶析出反应区域较少。

2.3 不同工艺下铸件凝固组织试验对比

图 5 和图 6 分别为有、无细化剂两种工艺下铸件试样的金相和 SEM 图。可以看出,细化剂作用下铸件试样晶粒数明显增加,晶粒尺寸远小于无细化剂的。通过 SEM 分析观察,在晶粒边界之间,试样均存在析出物,且无细化剂试样析出物明显多于有细化剂作用的,经 SEM 统计,无细化剂和有细化剂试样析出相面积分数分别约为 3.62% 和 1.25%,这与前文结果一致,即有细化剂能促进晶粒形核,并伴随着抑制凝固后期析出相数量作用。

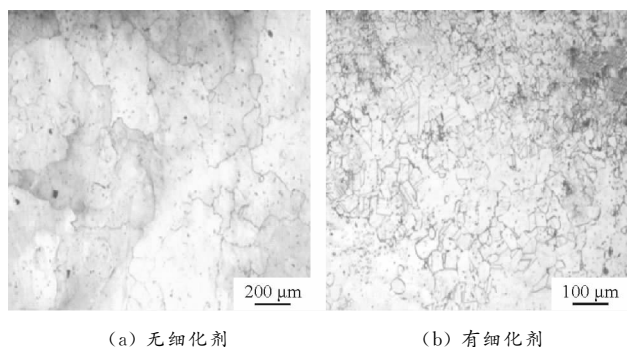


图 5 2 种工艺下铸件试样金相组织
Fig.5 Metallographic structure of casting specimens under different processes

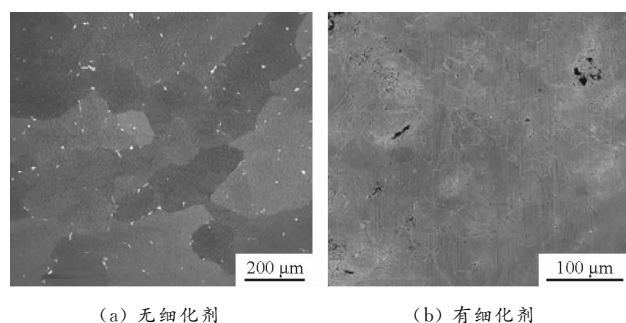


图 6 2 种工艺下铸件试样 SEM 图
Fig.6 SEM images of casting specimens under different processes

3 结 论

(1)采用了凝固组织模拟方法对不同铸造工艺下的铸件凝固组织进行分析,并辅以试验对比分析,模拟结果与试验结果一致。

(2)当冷却速率增大时,枝晶生长速率将大于溶质扩散速率,使得枝晶生长末期其周围的剩余液相溶质浓度仍将保持在较低水平。

(3)有细化剂能促进晶粒形核,并伴随着抑制凝固后期析出相数量作用,这将为后续同类型铸件凝固组织性能评估提供参考。

参 考 文 献

- [1] 孙长波,王健楠,王福德,等.壁厚对某 Ni_3Al 基高温合金铸件的微观组织及性能影响研究[J].铸造, 2023, 72(3): 310-314.
- [2] 王春钢,孙长波,夏鹤翔,等.浇注工艺对 Ni_3Al 基高温合金组织和性能的影响研究[J].铸造, 2022, 71(11): 1 353-1 357.
- [3] 赵运兴,员莹莹,马德新,等.高温合金 CMSX-4 和 DD419 单晶铸件中共晶含量的试验研究[J].航空制造技术, 2022, 65(17): 74-80.
- [4] 高志坤,王威,李艳明,等.基于显微组织演变的涡轮叶片损伤分析[J].航空发动机, 2022, 48(1): 121-126.
- [5] PICHON L, DUBOIS J B, CHOLLET S, et al. Low temperature nitriding behaviour of Ni_3Al -like γ' precipitates in nickel-based superalloys[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2019, 771: 176-186.
- [6] 冯秋水,夏鹤翔,许庆彦,等.镍基单晶高温合金 γ' 相筏化组织三维相场模拟研究[J].特种铸造及有色合金, 2023, 43(1): 92-98.
- [7] COTTURA M, APPOLAIRE B, FINEL A, et al. Coupling the phase field method for diffusive transformations with dislocation density-based crystal plasticity: Application Ni-based superalloys [J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2016, 94: 473-489.
- [8] 马祎炜,姚志浩,李大禹,等.高 γ' 含量高温合金整体细晶叶盘铸造凝固行为和组织特征模拟研究[J].稀有金属材料与工程, 2022, 51(12): 4 519-4 526.
- [9] 张军,介子奇,黄太文,等.镍基铸造高温合金等轴晶凝固成形技术的研究和进展[J].金属学报, 2019, 55(9): 1 145-1 159.
- [10] 郭钊.航空镍基高温合金叶片定向凝固过程多尺度耦合数值模拟研究[D].武汉:华中科技大学, 2019.

(编辑:彭瑾)