

3 TiAl 基合金高温变形行为的物理和数值模拟

3.1 引言

金属与合金在热变形过程中，随着变形的进行，所表现出来的变形抗力变化可以反映出合金热加工性能的好坏，同时变形抗力的大小也是加工设备选择的重要依据。变形抗力的大小主要与变形温度，应变速率等变形参数紧密相关。变形参数又对合金最终的组织和性能有重要影响。金属热变形行为的物理模拟是利用材料在热变形过程中不同变形条件下的应力-应变关系曲线，通过一定的物理模型进行计算，得到材料的变形常数，以及适合热加工的加工参数范围，建立起加工-组织-性能的预测模型，从而为合金热加工的数值模拟以及工艺参数优化和性能的有效控制提供依据。

TiAl 基合金本身的组织结构特征，决定了其具有很差的塑性变形能力，热加工窗口范围很小，然而仅通过成份、热处理以及铸造方式等优化手段进行组织调整，仍然不能使其性能达到理想状态，因此需要通过塑性变形来对组织和性能进行优化。利用小试样的热压缩模拟，获得变形时的应力-应变关系，从而计算得到材料参数以及加工窗口，已成为众多材料热加工前重要的物理模拟手段。在 TiAl 基合金中，众多研究者利用该方法对不同成份的粉末冶金和铸造冶金的合金进行了研究^[85-89]。但是这些基于 Arrhenius 公式的本构方程却忽略了应变对合金高温变形行为的影响。事实上，流变应力随着应变的增加而发生变化，而变形时摩擦和温升对应力-应变曲线的影响也不可忽略。因此在研究 TiAl 基合金的热变形行为时，必须考虑应变的影响，建立本构方程时需要将应变这一参数在本构方程中加以体现。Slooff 等人^[90]提出了一种包含应变的双曲正弦函数本构方程已经在其它钢铁、纯钛、复合材料以及镍基超合金中用于评价材料的热变形行为^[91-95]，但在 TiAl 合金中的应用仍比较少。

基于动态材料模型(Dynamic Material Modeling, DMM)的加工图是材料在加工时进行参数设计和工艺优化的一种重要工具，通过加工图不仅可以获得特定变形条件下的微观组织变形机制，还可以显示出材料在加工过程中的不稳定变形条件区域。

有限元法模拟不仅可以获得材料成形过程中流动规律及组织和性能的变化过程，而且还可以获得变形过程中的瞬时位移场、速度场、应变场、温度场及应力场等热变形过程的热力学参量，对材料实际变形的参数选择和优化具有重要的指导作用。

本章利用粉末冶金 Ti-47Al-2Cr-2Nb-0.2W 合金热压缩实验得到的应力-应变

曲线进行物理模拟，得到合金的材料常数和包含应变的本构方程，利用本构方程推导出不同变形条件下合金的流变应力，从而绘制出 Ti-47Al-2Cr-2Nb-0.2W 合金的热加工图，得到变形条件-组织-变形能力之间的关系。利用物理模拟得到的材料参数对轧制过程进行数值模拟，得到轧制过程中的温度场、损伤情况等信息，从而为 TiAl 基合金的热轧制提供参数选择和优化的依据。

3.2 TiAl 基合金的高温变形行为

3.2.1 应力-应变曲线

图 3-1 为不同温度和应变速率下粉末冶金 Ti-47Al-2Cr-2Nb-0.2W 合金单向压缩时的真应力-真应变曲线。由图可以看出，所有条件下的曲线均显示出流变峰值的特征，变形初期，真应力随着变形的增加迅速增大，到达峰值后，真应力则随着变形的增加缓慢降低。不同的变形条件，到达峰值的时间不同，以及到达峰值后应力降低的速率也不同。在相同的应变速率条件下，峰值应力随着变形温度的升高而降低。

从图 3-1 还可以看出，真应力-真应变曲线主要有两种类型，第一类曲线表现为变形开始阶段，真应力随着真应变的增加迅速线性递增，这个阶段材料变形属于弹性变形，材料只发生了加工硬化；真应变继续增加，真应力出现非线性递增特征，直到达到应力峰值；其后随着真应变的增加，真应变线性或非线性递减，属于这一类的曲线如变形温度为 1323K，不同应变速率下的曲线。第二类曲线开始阶段与第一类一致，区别在于达到应力峰值后随着真应变的增加，真应力达到基本稳定值，即出现稳态流变的特征，如变形温度为 1473K，不同应变速率条件下的曲线。这两类特征的曲线均出现明显的应力峰值，说明合金在实验条件下的流变应力曲线为动态再结晶型^[91, 92]。变形的开始阶段由于大量位错的产生、增殖、运动、缠结最终导致位错滑移受阻，表现出加工硬化特征；当变形达到临界值时，合金由于动态再结晶作用发生软化，当加工硬化和动态再结晶达到平衡，即出现稳态流变的特征。

从应力-应变曲线还可以看出，材料在变形过程中的动态再结晶既表现出了连续动态再结晶(Continuous Dynamic Recrystallization, CDRX)特征，也表现出了不连续动态再结晶(Discontinuous Dynamic Recrystallization, DDRX)的特征。在应变速率较低时($\leq 0.1\text{s}^{-1}$)，应力-应变曲线仅有一个明显的应力峰，动态再结晶属于连续再结晶行为；当应变速率为 1s^{-1} 时，应力-应变曲线出现多峰波动现象，表现为不连续再结晶的特征。

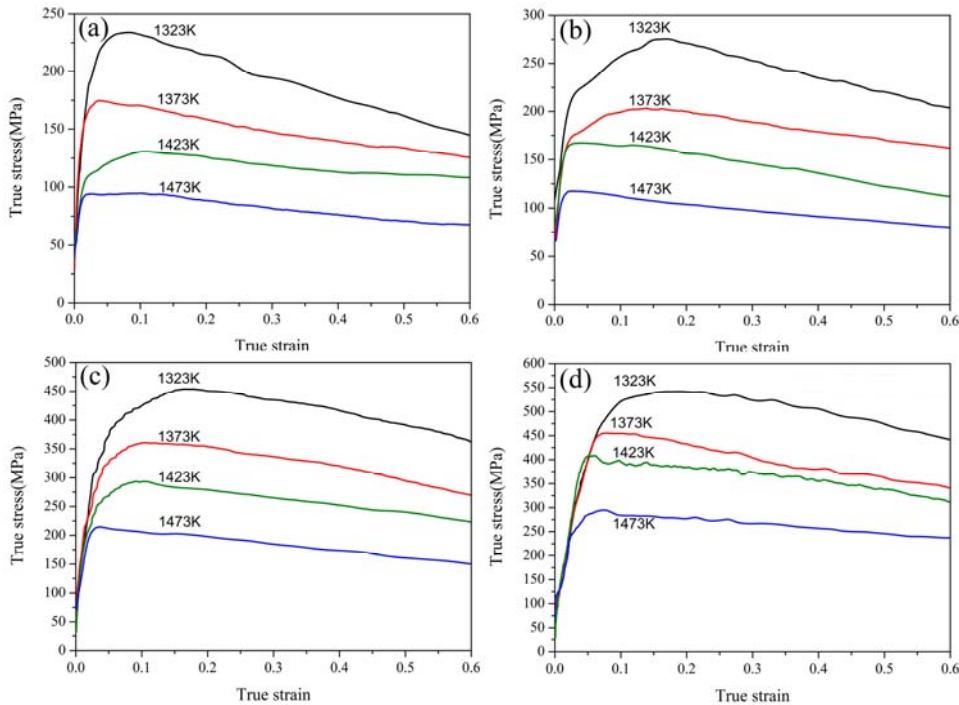


图 3-1 合金在不变形条件下的真应力-真应变曲线

Fig. 3-1 True stress-strain curves of alloy at different deformation conditions(a) 1 s^{-1} (b) $1 \times 10^{-1} \text{ s}^{-1}$ (c) $1 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$ (d) $1 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$

3.2.2 应力-应变曲线的摩擦修正

在热变形过程中试样和压头之间尽管采用了润滑措施来减小摩擦的影响，但是摩擦仍然无法避免^[96]。由于摩擦的作用，试样在变形过程中随着变形量的增加，不均匀变形程度越来越严重，导致变形后的试样出现如图 3-2 所示的鼓形，得到的流变应力与实际值发生偏差。因此，在进行材料常数求解以及本构方程建立前，必须考虑是否需要对实验测试得到的流变应力值进行摩擦修正。

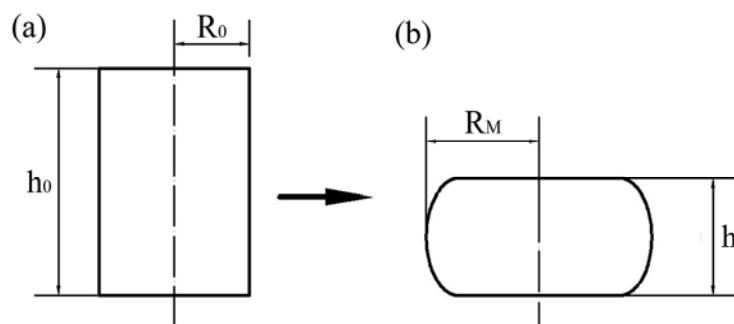


图 3-2 试样压缩前后的形状示意图

Fig. 3-2 Schematic plot of a sample before and after the compression

(a) 压缩前 (b) 压缩后

Roebuck 提出了一种利用滑动摩擦系数来评价摩擦影响的准则，利用该准则可以判断实验所得到的流变应力数据是否需要进行摩擦修正，该判断准则为^[97]：

$$B = \frac{hR_M^2}{h_0R_0^2} \quad (3-1)$$

式中 B 为滑动摩擦系数， h 为变形后试样的高度， R_M 为变形后试样的最大直径， h_0 和 R_0 分别为试样原始高度和直径(如图 3-2 中所示)。当 $1 < B \leq 1.1$ 时，测量的流变应力值和实际的值相差不大，流变应力曲线不需要进行修正；当 $B \geq 1.1$ 时，测量值和实际值的差别较大，则必须进行修正。

基于以上的判断准则，通过测量各种变形条件下试样变形后的尺寸，计算得到各条件下的 B 值，如表 3-1 所示。

表 3-1 不同变形条件下的 B 值

Table 3-1 The value of B under various deformation conditions

| 应变速率(s^{-1}) | 变形温度 (K) | | | |
|------------------|----------|---------|---------|---------|
| | 1323 | 1373 | 1423 | 1473 |
| 0.005 | 1.20158 | 1.16544 | 1.17451 | 1.17832 |
| 0.01 | 1.15462 | 1.12037 | 1.16083 | 1.26313 |
| 0.1 | 1.16640 | 1.16940 | 1.15522 | 1.21733 |
| 1 | 1.18869 | 1.24868 | 1.26237 | 1.22472 |

从表 3-1 可以看出，所有变形条件下的 B 值均大于 1.1，因此实验测得的流变应力都需要进行修正才能用于材料参数求解和本构方程构建，流变应力的摩擦修正公式可表示为：

$$\frac{P}{\sigma} = \frac{8bR}{H} \bullet \left\{ \left[\frac{1}{12} + \left(\frac{H}{Rb} \right)^2 \right]^{3/2} - \left(\frac{H}{Rb} \right)^3 - \frac{me^{-b/2}}{24\sqrt{3}(e^{-b/2} - 1)} \right\} \quad (3-2)$$

式中 σ 为修正后的真应力， P 为实验得到的真应力， b 为移动系数， m 为摩擦因子， R 和 H 分别为压缩过程中试样的瞬间直径和高度，且 $R = R_0 \exp(-\varepsilon/2)$ ， $H = h_0 \exp(-\varepsilon)$ 。 m 和 b 可以通过以下的方程得到：

$$m = \frac{R_f}{h} \times \frac{3\sqrt{3}b}{12 - 2b} \quad (3-3)$$

$$b = 4 \times \frac{R_M - R_T}{R_f} \times \frac{h}{h_0 - h} \quad (3-4)$$

R_f 为压缩后试样的平均直径, R_T 为压缩后端部直径, 分别可以表示为:

$$R_f = R_0 \sqrt{\frac{h_0}{h}} \quad (3-5)$$

$$R_T = \sqrt{3 \times \frac{h_0}{h} \times R_0^2 - 2R_M^2} \quad (3-6)$$

通过以上计算公式可见, 只需测量出压缩后试样的高度和最大直径即可计算出经过摩擦修正后的应力值。修正过程中测量和计算所得的各参数如表 3-2 所示。

表 3-2 摩擦修正过程中的各参数

Table 3-2 The parameters of material during friction correction

| T (K) | $\dot{\varepsilon}$ (s^{-1}) | R_0 (mm) | h_0 (mm) | R_M (mm) | h (mm) | b | m |
|---------|----------------------------------|------------|------------|------------|----------|---------|---------|
| 1323 | 0.005 | 4 | 12 | 5.89 | 6.65 | 1.60895 | 0.76921 |
| | 0.01 | 4 | 12 | 5.84 | 6.5 | 1.15065 | 0.51546 |
| | 0.1 | 4 | 12 | 5.76 | 6.75 | 1.35348 | 0.59769 |
| | 1 | 4 | 12 | 5.71 | 7.00 | 1.68678 | 0.76017 |
| 1373 | 0.005 | 4 | 12 | 5.89 | 6.45 | 1.21587 | 0.55853 |
| | 0.01 | 4 | 12 | 5.76 | 6.45 | 0.86987 | 0.37264 |
| | 0.1 | 4 | 12 | 5.90 | 6.45 | 1.24697 | 0.57656 |
| | 1 | 4 | 12 | 6.05 | 6.55 | 1.96366 | 1.04476 |
| 1423 | 0.005 | 4 | 12 | 5.78 | 6.75 | 1.42417 | 0.63891 |
| | 0.01 | 4 | 12 | 6.02 | 6.15 | 1.06725 | 0.51070 |
| | 0.1 | 4 | 12 | 6.03 | 6.10 | 1.01077 | 0.48409 |
| | 1 | 4 | 12 | 6.06 | 6.60 | 2.12260 | 1.16229 |
| 1473 | 0.005 | 4 | 12 | 6.09 | 6.10 | 1.17206 | 0.58009 |
| | 0.01 | 4 | 12 | 6.18 | 6.35 | 1.95832 | 1.09009 |
| | 0.1 | 4 | 12 | 6.19 | 6.10 | 1.45343 | 0.76387 |
| | 1 | 4 | 12 | 6.48 | 5.60 | 1.27636 | 0.73403 |

将各变形条件下的真应力进行修正后得到的真应力-真应变曲线如图 3-3 所示。由图可以看出, 经过摩擦修正后的真应力值低于测量所得的真应力值, 且随着变形温度的升高, 摩擦的影响减小, 随着应变速率的增加, 摩擦的影响增大。应变速率对摩擦的影响比变形温度更加显著, 变形温度为 1423K, 应变速率为 $0.005 s^{-1}$ 时, 修正后的流变应力比修正前低 14.7MPa, 应变速率为 $1 s^{-1}$ 时, 修正后的流变应力比修正前低 84.4MPa。应变速率为 $1 s^{-1}$, 变形温度为 1323K 时, 修正后的流变应力较修正前低 77MPa, 而变形温度为 1473K 时, 修正后的流变应力较修正前低 35.7MPa。

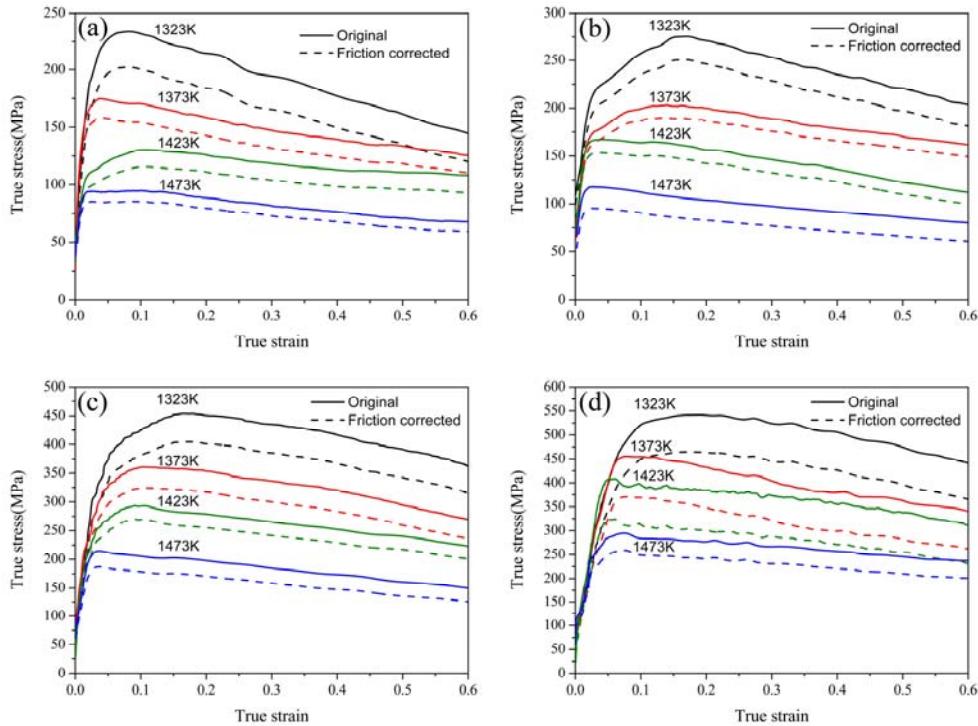


图 3-3 摩擦修正后的真应力-真应变曲线

Fig. 3-3 True stress-strain curves of alloy before and after friction corrected(a) 0.005s^{-1} (b) 0.01 s^{-1} (c) 0.1 s^{-1} (d) 1 s^{-1}

3.2.3 应力-应变曲线的温升修正

在高温压缩时，流变软化是应力-应变曲线中最常见的特征，这种软化是由于变形热或者材料显微组织的变化导致，在本研究的压缩实验中，温度由热电偶来测量，但是热电偶的灵敏度有限，当应变速率较高时，热电偶则不能及时地测量试样的瞬间温度^[98]，也就是说不能控制温度使其保持恒温，这时压缩过程则不是完全的等温变形。实验得到流变应力值则不能完全对应预设的实验温度。为了能够得到准确的流变应力值，进而计算材料常数，建立准确的流变模型，需要对流变应力进行温升修正。当应变速率为 10^{-3} 或者更低时，温升效应很小，并且温升值也可以通过热模拟试验机采集的动态温度值直接获得。对于应变速率较高时则需要根据相应的模型进行计算。本研究中的温升修正按照公式 3-7 进行^[99]，计算值加上初始预设温度值则为试样在变形过程中的实际温度。

$$\Delta T = \frac{0.95\eta \int_0^{\varepsilon} \sigma d\varepsilon}{\rho C_p} \quad (3-7)$$

式中 ΔT 为温度变化， η 为绝热校正因子， $\int_0^{\varepsilon} \sigma d\varepsilon$ 为应力-应变曲线下面的面积（本研究中按照经过摩擦修正之后的应力-应变曲线计算）， ρ 为合金密度，本

研究的粉末冶金 Ti-47Al-2Cr-2Nb-0.2W 合金密度为 $3.9\text{g}/\text{cm}^3$, C_p 为比热, 本实验合金比热值为 $0.9\text{J}/\text{g}\cdot\text{K}$, ρC_p 表示比热容, 其值为 $3.5\text{ J}/\text{cm}^3\cdot\text{K}$ 。常数 0.95 为机械功转变为热的比例。当应变速率 $\leq 10\text{s}^{-1}$ 时, 绝热校正因子 η 为 0, 当应变速率 $\geq 10^1\text{s}^{-1}$ 时, η 为 1, 当应变速率在 10s^{-1} 和 10^1s^{-1} 之间时, Goetz 和 Semiatin^[99] 发现绝热校正因子的大小与应变速率、变形温度、应变、工模具的导热性能以及接触界面的热传导系数有关。Dadras 和 Thomas^[100] 发现在 Ti-6Al-2Sn-4Zr-2Mo-0.1Si 合金中 η 随着 $\log(\dot{\varepsilon})$ 的变化呈线性变化, 因此本研究中应变速率为 0.005s^{-1} 、 0.01s^{-1} 、 0.1s^{-1} 和 1s^{-1} 时, η 分别取 0.175、0.25、0.50 和 0.75。

通过公式 3-7 计算出变形温度分别为 1323 K, 1373 K, 1423 K 以及 1423 K, 应变速率分别为 0.01s^{-1} , 0.1s^{-1} , 和 1s^{-1} 时, 变形过程中的温升值, 如图 3-4 所示。从图中可以看出当应变速率为 0.01s^{-1} 和 0.1s^{-1} 时, 试样的温升非常小, 只有当应变速率为 1s^{-1} 时才有明显的温升, 并且温升值随着真应变的增加线性递增, 初始预设温度越低, 温升速度越快, 当真应变达到 0.6 时, 预设初始温度为 1323K、1373K、1423K 和 1473K 的试样变形后的温升分别达到 50K、38K、33.6K 和 27.5K。可见当应变速率为 1s^{-1} 时, 试样在变形过程中出现显著的温升现象, 所以实验得到的流变应力-应变曲线必须进行温升修正。

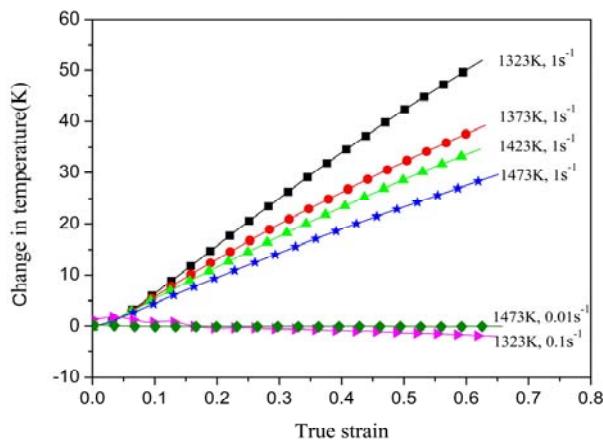


图 3-4 合金在不同变形条件下的温升

Fig. 3-4 Temperature rises of alloy at different deformation conditions

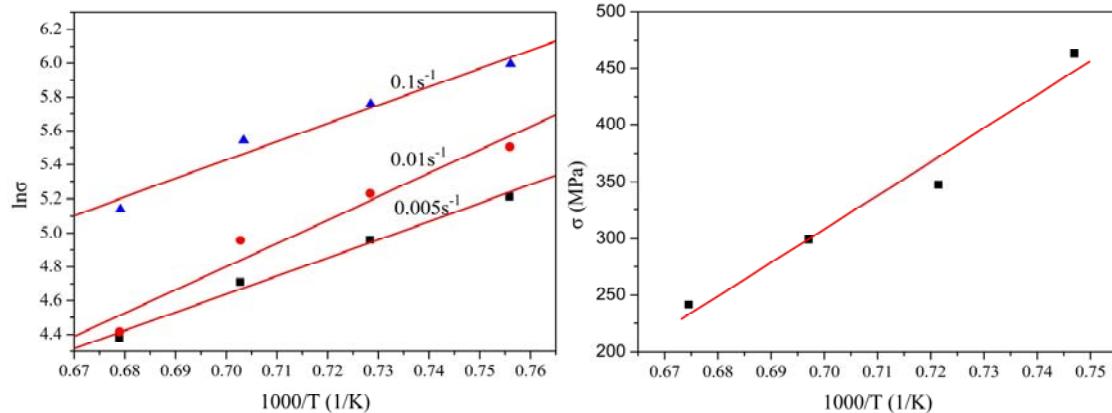
目前用于温升修正的方法很多, 本研究采用外推法进行温升修正, 即在真应变和应变速率一定的情况下, 对实际温度对应的真应力值进行线性拟合, 通过拟合直线外推出预设温度下的真应力值, 对不同真应变量和应变速率条件下进行类似的外推, 则可得到所有所需修正条件下的流变应力值。温升修正可采用以下公式进行计算^[101-103]:

$$\text{低应力水平下: } Z = A_1 \sigma^{n_1} = \dot{\varepsilon} \exp\left(\frac{Q}{RT}\right) \quad (3-8)$$

$$\text{高应力水平下: } Z = A_2 \exp(\beta\sigma) = \dot{\varepsilon} \exp\left(\frac{Q}{RT}\right) \quad (3-9)$$

$$\text{所有应力水平下: } Z = A[\sinh(\alpha\sigma)]^n = \dot{\varepsilon} \exp\left(\frac{Q}{RT}\right) \quad (3-10)$$

式中, Z 为 Zener-Hollomon 参数, Q 为激活能(KJ/mol), R 为摩尔气体常数(8.314J/mol·K), T 为变形温度(K), A_1 、 A_2 、 A 、 β 、 n_1 、 n 和 α 为材料常数, 且 $\alpha = \beta/n_1$ 。式 3-10 中, α 为可调常数, 当温度一定时, $\ln[\sinh(\alpha\sigma)]$ 与 $\ln\dot{\varepsilon}$ 呈线性关系, 且不同温度下相互平行时, 可得到最优的 α 值。但是本研究中, 在高应变速率下变形时, 试样的实际温度与设定温度不同, 不能得到恒变形温度条件下的真应力-真应变曲线, 所以 α 值不能利用实验所得的未进行温度修正的曲线直接计算获得。需要采用公式 3-8 和 3-9 分别对低应变速率和高应变速率条件下进行修正。当应变速率为 0.005s^{-1} 、 0.01s^{-1} 和 0.1s^{-1} 时, 通过绘制 $\ln\alpha - 1000/T$ 曲线, 线性拟合后外推可得到预设温度下的真应力值, 如图 3-5 所示(真应变为 0.2)。当应变速率为 1s^{-1} 时, 通过绘制 $\alpha - 1000/T$ 曲线, 线性拟合后外推可得到预设温度下的真应力值, 如图 3-6 所示(真应变为 0.2)。

图 3-5 低应变速率下的 $\ln\sigma - 1000/T$ 曲线图 3-6 高应变速率下的 $\sigma - 1000/T$ 曲线**Fig. 3-5** Plot of $\ln\sigma - 1000/T$ at low strain rates **Fig. 3-6** Plot of $\sigma - 1000/T$ at high strain rate

由于公式 3-8 和 3-9 中没有包含真应变这一参数, 所以温度修正需要对每一个特定真应变条件下进行分别修正。将经过摩擦修正后的真应力对应相应的变形条件绘制修正后的真应力-真应变曲线如图 3-7 所示。图中显示了经过温度修正和摩擦修正以后的真应力-真应变曲线对比。由图可以看出在应变速率为 0.005s^{-1} , 0.01s^{-1} 和 0.1s^{-1} 时, 温升修正前后的应力值差别不大, 在应变速率为 1s^{-1} 时, 温升修正前后的应力值差别很明显, 尤其当变形温度较低时差别更加显著, 这与图 3-4 所示的温升值规律一致。当真应变为 0.6, 初始预设温度为 1323K, 应变速率为 1s^{-1} 时, 温度修正前后的真应力差值高达 70MPa。

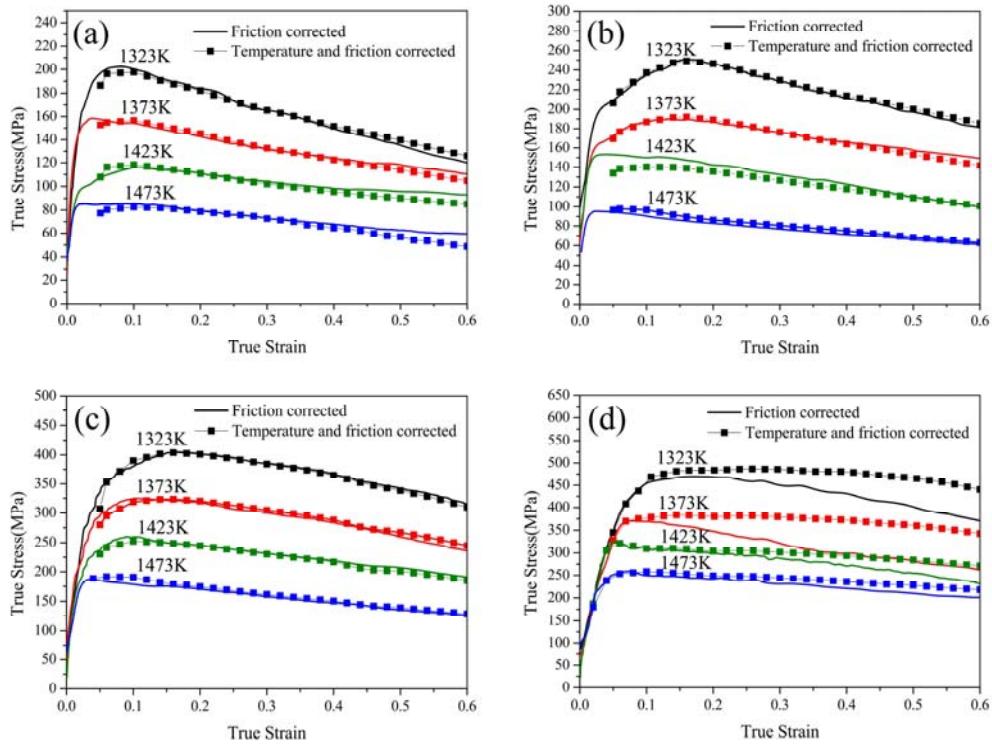


图 3-7 温度修正后的真应力-真应变曲线

Fig. 3-7 True stress-strain curves of alloy before and after temperature corrected(a) 0.005s^{-1} (b) 0.01s^{-1} (c) 0.1s^{-1} (d) 1s^{-1}

3.2.4 材料常数和本构方程求解

在描述材料高温变形时的流变应力、应变速率和变形温度之间的关系时，通常有几种不同的表达式，如公式 3-8、3-9 和 3-10 所示的指数关系、幂指数关系和双曲正弦关系。但是这些公式中均不包含真应变这一参数，也就是说在使用这些公式进行表达时，认为当温度和应变速率一定时，流变应力与真应变无关，而从图 3-7 可以看出，流变应力会随着真应变的变化而发生变化，因此使用这些方程只能得到某一真应变条件下的材料参数和本构方程，本研究以真应变为 0.3 为例进行计算。

公式 3-8 和 3-9 可以表达为：

$$\text{低应力水平下: } \ln \dot{\varepsilon} = n_1 \ln \sigma + \ln A_1 - \frac{Q}{RT} \quad (3-11)$$

$$\text{高应力水平下: } \ln \dot{\varepsilon} = \beta \sigma + \ln A_2 - \frac{Q}{RT} \quad (3-12)$$

在低应力水平时，通过绘制一定温度下的 $\ln \sigma - \ln \dot{\varepsilon}$ 关系曲线，该曲线的斜率即为 n_1 ；在高应力水平下通过绘制一定温度下的 $\sigma - \ln \dot{\varepsilon}$ 关系曲线，其斜率即为 β 值。将真应变为 0.3 时，经过摩擦和温度修正后的真应力对应相应的应变速率带入公式 3-11 和 3-12 后，可以绘制真应力和应变速率的关系曲线，如图 3-8 所示。

可以发现,不同温度下的拟合直线基本平行,所以 n_1 和 β 的值可以分别取图3-8(a)和(b)中四条直线的平均斜率,其值分别为 $n_1=4.76058$ 和 $\beta=0.02556 \text{ MPa}^{-1}$,同时也可以得到 $\alpha=\beta/n_1=0.005369 \text{ MPa}^{-1}$ 。

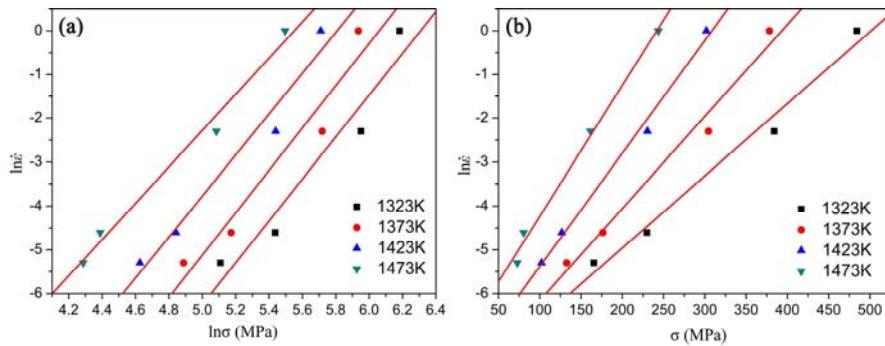


图 3-8 流变应力和应变速率关系曲线

Fig. 3-8 Relationship between flow stress and strain rate

(a) $\ln \sigma - \ln \dot{\epsilon}$ (b) $\sigma - \ln \dot{\epsilon}$

对于所有应力水平,公式3-10可以表示为:

$$\dot{\epsilon} = A \ln[\sinh(\alpha\sigma)]^n \exp(-\frac{Q}{RT}) \quad (3-13)$$

对公式3-13微分变换可以得到:

$$Q = R \left\{ \frac{\partial \ln \dot{\epsilon}}{\partial \ln[\sinh(\alpha\sigma)]} \right\}_T \left\{ \frac{\partial \ln[\sinh(\alpha\sigma)]}{\partial (1/T)} \right\}_{\dot{\epsilon}} \quad (3-14)$$

由公式3-14可以看出, Q 值可以通过 $\ln \dot{\epsilon} - \ln[\sinh(\alpha\sigma)]$ 和 $\ln[\sinh(\alpha\sigma)] - 1/T$ 关系式的斜率得到。将真应变为0.3时,经过修正后的流变应力,以及对应的温度和应变速率带入公式3-14,通过线性拟合即可获得 $\ln \dot{\epsilon} - \ln[\sinh(\alpha\sigma)]$ 和 $\ln[\sinh(\alpha\sigma)] - 1/T$ 关系曲线的斜率,拟合曲线如图3-9所示。由于不同拟合直线基本平行,可将其斜率的平均值用于计算变形激活能。通过计算,合金的变形激活能为468.5 KJ/mol。

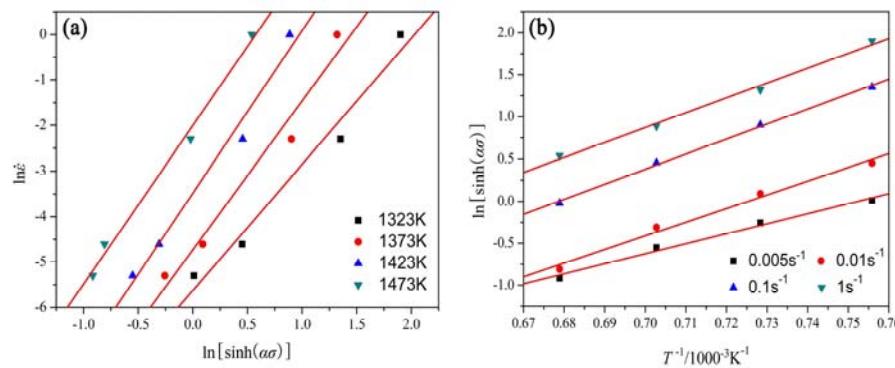


图 3-9 流变应力与应变速率和温度之间的关系曲线

Fig. 3-9 Relationship between flow stress and strain rate and temperature

(a) $\ln \dot{\epsilon} - \ln[\sinh(\alpha\sigma)]$ (b) $\ln[\sinh(\alpha\sigma)] - 1/T$

将计算得到的 Q 值, 对应相应的 $\dot{\varepsilon}$ 和 T 值带入公式 3-10, 可以得到不同变形参数下的 Z 值, 进一步求出 $\ln Z$ 的值。

对公式 3-10 两边取自然对数可得:

$$\ln Z = \ln A + n \ln[\sinh(\alpha\sigma)] \quad (3-15)$$

可见 $\ln A$ 和 n 为 $\ln Z - \ln[\sinh(\alpha\sigma)]$ 关系曲线的截距和斜率, 将对应的参数带入后, 利用最小二乘法线性回归绘制 $\ln[\sinh(\alpha\sigma)]$ - $\ln Z$ 关系曲线图, 如图 3-10 所示。从而可以得到 $\ln Z$ 和 n 分别为 36.27 和 3.32 MPa^{-1} 。

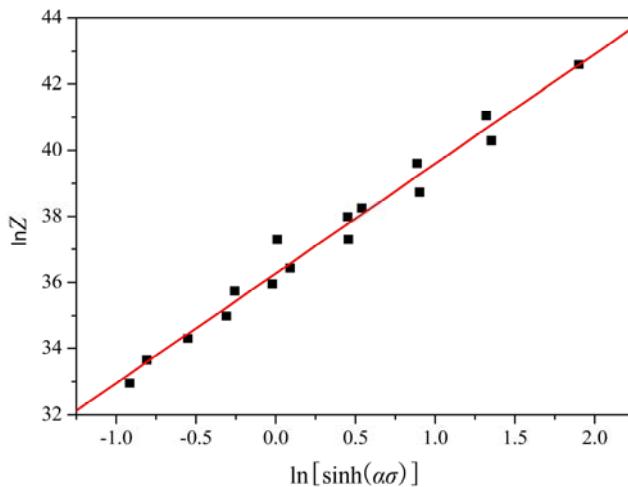


图 3-10 $\ln Z$ 和 $\ln[\sinh(\alpha\sigma)]$ 的关系曲线

Fig. 3-10 Relationship between $\ln Z$ and $\ln[\sinh(\alpha\sigma)]$

公式 3-10 中并没有考虑真应变对本构方程的影响, 然而真应变对流变应力的影响不可忽略。在确定应变对本构方程的影响前, 假设材料常数(n 、 α 、 β 、 Q 和 A)与真应变呈多项函数关系。通过本小节的方法可以分别计算出不同真应变条件下的各种材料常数。然后将这些材料常数进行多项式拟合, 拟合方程分别从 2 次到 9 次进行拟合, 选取其中拟合程度最高的 n 次多项式进行最终参数拟合, 经各种多次多项式验证, 5 次多项式拟合具有最好的拟合度, 即能够最好地反映粉末冶金 Ti-47Al-2Cr-2Nb-0.2W 合金在高温变形时材料常数与真应变的关系, 拟合方程如公式 3-16 所示。拟合曲线如图 3-11 所示。从图中可以看出各材料常数随着真应变的增加呈现明显的变化。

$$\begin{cases} \alpha = B_0 + B_1 \varepsilon^1 + B_2 \varepsilon^2 + B_3 \varepsilon^3 + B_4 \varepsilon^4 + B_5 \varepsilon^5 \\ \beta = C_0 + C_1 \varepsilon^1 + C_2 \varepsilon^2 + C_3 \varepsilon^3 + C_4 \varepsilon^4 + C_5 \varepsilon^5 \\ n = D_0 + D_1 \varepsilon^1 + D_2 \varepsilon^2 + D_3 \varepsilon^3 + D_4 \varepsilon^4 + D_5 \varepsilon^5 \\ Q = E_0 + E_1 \varepsilon^1 + E_2 \varepsilon^2 + E_3 \varepsilon^3 + E_4 \varepsilon^4 + E_5 \varepsilon^5 \\ \ln A = F_0 + F_1 \varepsilon^1 + F_2 \varepsilon^2 + F_3 \varepsilon^3 + F_4 \varepsilon^4 + F_5 \varepsilon^5 \end{cases} \quad (3-16)$$

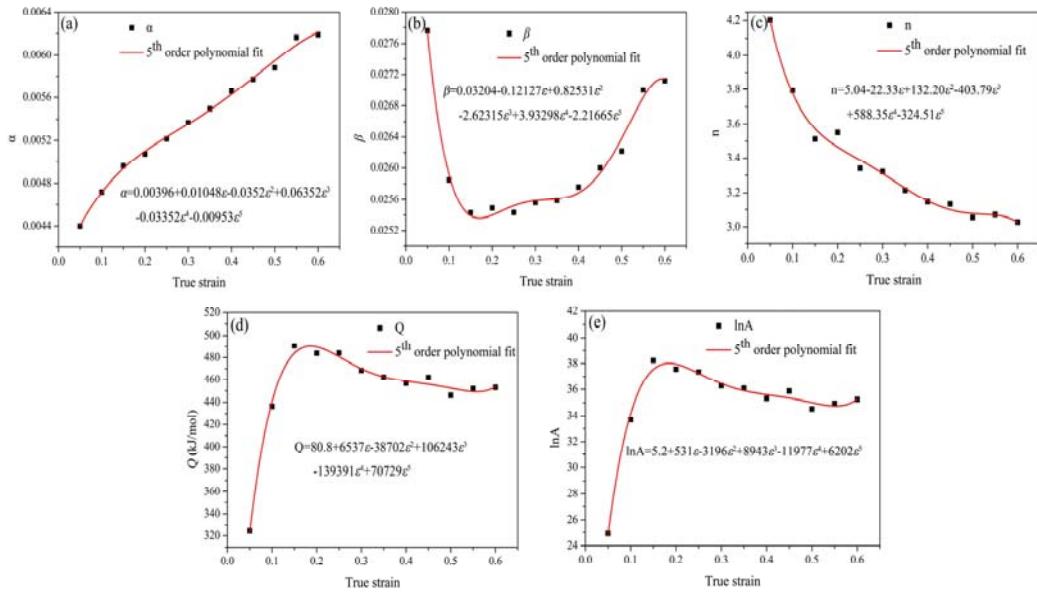


图 3-11 材料常数和真应变的多项式拟合关系

Fig. 3-11 Relationship between material constants and true strain by polynomial fit(a) α (b) β (c) n (d) Q (e) $\ln A$

当真应变为 0.05 时，合金的激活能高于 Ti/Al 原子间 Ti 原子的自扩散激活能 (260 kJ/mol)，低于 Al 原子的自扩散激活能 (390 kJ/mol)^[20, 104]，与单向 γ -TiAl 合金中的 Ti-Al 界面扩散激活能 (390 ± 10 kJ/mol)^[105] 相近，说明在此阶段，TiAl 合金的变形机制为 Ti-Al 界面扩散。但是真应变大于 0.05 时，合金的激活能高于 Ti-47Al-2Mn-2Nb-1B (331.4 kJ/mol)^[106]，Ti-47Al-2Cr-0.2Mo (313.53 kJ/mol)^[107]，Ti-47Al-2Cr-4Nb (300 kJ/mol)^[108] 以及 Ti-48Al-2Cr-2Nb (355 kJ/mol)^[109] 等合金。这不仅与动态再结晶导致的合金局部软化有关，也与 W 元素的加入有利于合金中的位错滑移和攀移有关，另外压缩变形前合金的显微组织为近 γ 组织，这种组织比较粗大，不易变形，使变形过程中晶界滑移受阻，造成了较大的应力集中。

材料常数确定以后，就可得到各应变下的应力值，所以包含应变的本构方程可以表示为：

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma = \frac{1}{\alpha} \ln \left\{ \left(\frac{Z}{A} \right)^{1/n} + \left[\left(\frac{Z}{A} \right)^{2/n} + 1 \right]^{1/2} \right\} \\ Z = \dot{\varepsilon} \exp \left(\frac{Q}{RT} \right) \\ \alpha = 0.00396 + 0.01048\varepsilon - 0.0352\varepsilon^2 + 0.06352\varepsilon^3 - 0.03352\varepsilon^4 - 0.00953\varepsilon^5 \\ n = 5.04 - 22.33\varepsilon + 132.20\varepsilon^2 - 403.79\varepsilon^3 + 588.35\varepsilon^4 - 324.51\varepsilon^5 \\ Q = 80.8 + 6537\varepsilon - 38702\varepsilon^2 + 106243\varepsilon^3 - 139391\varepsilon^4 + 70729\varepsilon^5 \\ \ln A = 5.2 + 531\varepsilon - 3196\varepsilon^2 + 8943\varepsilon^3 - 11977\varepsilon^4 + 6202\varepsilon^5 \end{array} \right. \quad (3-17)$$

3.2.5 本构方程验证

通过公式 3-17 可以计算得到各变形条件下不同真应变时的真应力值, 与经过摩擦和温度修正后的应力-应变曲线对比如图 3-12 所示, 由图 3-12 可以看出, 除了变形温度为 1323K, 应变速率为 0.005s^{-1} 的条件下, 其它实验条件下的预测值与修正后的应力值基本一致。也就是说低温低应变速率条件下利用该本构方程进行流变应力预测时存在一定误差, 这可能是由于在此变形条件下, 合金发生不稳定流变所致。

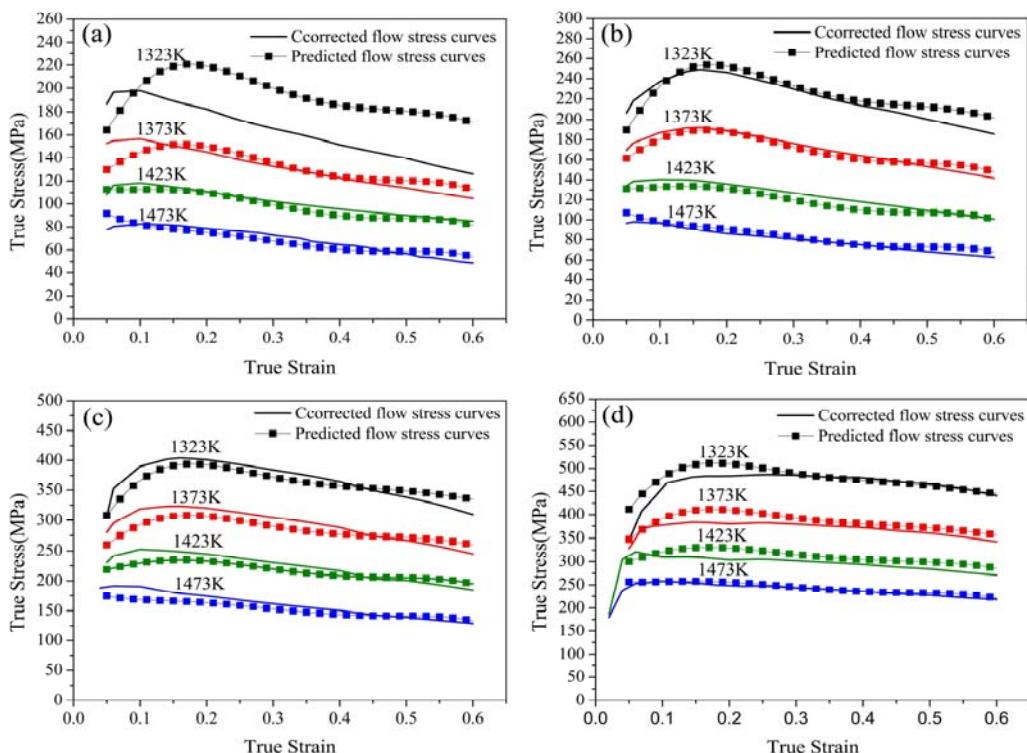


图 3-12 预测和实验流变应力曲线对比

Fig. 3-12 Comparison between the predicted and the experimental flow stress curves

(a) 0.005s^{-1} (b) 0.01 s^{-1} (c) 0.1 s^{-1} (d) 1 s^{-1}

本构方程的预测能力也可以通过相关系数(R)和绝对平均相对误差来表示(AARE), 它们表示为^[110]:

$$R = \frac{\sum_{i=1}^n (E_i - \bar{E})(P_i - \bar{P})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (E_i - \bar{E})^2 \sum_{i=1}^n (P_i - \bar{P})^2}} \quad (3-18)$$

$$\text{AARE}(\%) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{E_i - P_i}{E_i} \right| \times 100 \quad (3-19)$$

E 为实验值 P 为预测值, \bar{E} 和 \bar{P} 分别为 E 和 P 的平均值, n 为数值个数。

相关系数通常是通过对实验数据和预测数据进行逐项的相对误差对比，来统计和提供线性关系的信息。通过将实验值和预测进行线性拟合，如图 3-13 所示，可以看出，预测值和实验值的相关系数 $R=0.995$ ，绝对平均相对误差 AARE 为 4.21%，说明当应变速率为 $0.005\text{s}^{-1}\sim 1\text{s}^{-1}$ ，变形温度为 1323K~1473 K 范围内，该本构方程能够很好地预测粉末冶金 Ti-47Al-2Cr-2Nb-0.2W 合金的热变形流变应力。

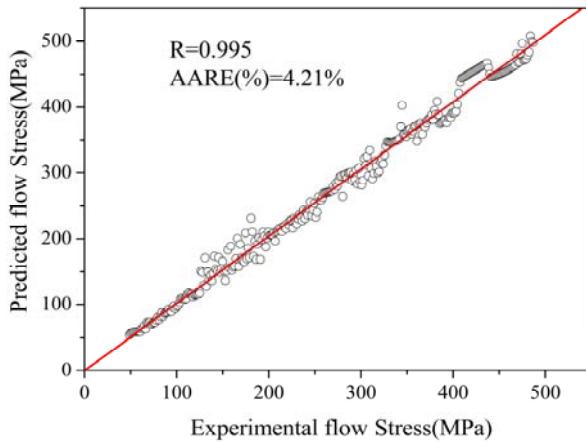


图 3-13 预测和实验流变应力的相关性

Fig. 3-13 Correlation between the experimental and predicted flow stress data

3.3 TiAl 合金的热加工图

3.3.1 热加工图理论

加工图是基于动态材料模型 (Dynamic Material Modeling, DMM) 的基本原理上建立起来的^[111]。在 DMM 模型中，将热加工材料料认为是一个非线性能量耗散体。在加工过程中，外界对材料所做的功 P 主要用于两个方面：一方面为塑性变形消耗，用 G 表示，其中大部分能量转变为热量，只有少部分储存在被加工材料中，主要与材料的塑性失稳和断裂过程有关；第二方面用于微观组织演变，如回复、再结晶、相变等，该部分能量用 J 表示^[112]。它们之间的关系可以表示为：

$$P = \sigma \dot{\varepsilon} = G + J = \int_0^{\dot{\varepsilon}} \sigma d\dot{\varepsilon} + \int_0^{\sigma} \dot{\varepsilon} d\sigma \quad (3-20)$$

式中： σ 为流变应力(MPa)， $\dot{\varepsilon}$ 为应变速率(s^{-1})。 J 和 G 的分配比例可表示为：

$$J/G = \partial(\ln \sigma)/\partial(\ln \dot{\varepsilon}) = m \quad (3-21)$$

m 值为应变速率敏感因子。

在一定的温度和应变条件下，热加工工件所受的应力 σ 与应变速率 $\dot{\varepsilon}$ 存在以下本构关系：

$$\sigma = K \dot{\varepsilon}^m \quad (3-22)$$

结合公式 3-20、3-21 和 3-22 可以将变形过程中因组织演变而消耗的功 J 表示为:

$$J = \sigma \dot{\varepsilon} - \int_0^{\dot{\varepsilon}} K \dot{\varepsilon}^m d\dot{\varepsilon} = \frac{m}{m+1} \sigma \dot{\varepsilon} \quad (3-23)$$

当材料处于理想线性耗散状态时, $m=1$, 这时 J 达到最大值, 即 $J_{\max} = \sigma \dot{\varepsilon} / 2$, 定义反映材料功率散耗特征的无量纲参数(能量散耗效率因子)为 η , 即:

$$\eta = \frac{J}{J_{\max}} = \frac{2m}{m+1} \quad (3-24)$$

能量耗散因子 η 是一个关于温度、应变和应变速率的三元变量, 它反映出在一定变形温度和应变速率范围内变形时, 材料的显微组织变化机制^[113]。因此在热加工中, 能量耗散因子 η 对于加工参数的选择具有重要指导意义。

在一定应变下, 绘制能量耗散效率因子与温度和应变速率的关系图, 便可得到能量耗散图。

在能量耗散图中, η 值越大, 并不一定意味着材料的加工性越好。因为材料加工区间的选择还应考虑到材料变形失稳行为, 在加工失稳区能量耗散效率可能也很高, 所以还有必要确定材料的加工失稳区。Prasad 根据最大熵原理, 用无量纲参数 $\zeta(\dot{\varepsilon})$ 来表示塑性变形时的连续失稳判据, 表示为:

$$\zeta(\dot{\varepsilon}) = \frac{\partial \ln(\frac{m}{m+1})}{\partial \ln \dot{\varepsilon}} + m < 0 \quad (3-25)$$

该判据的物理意义为, 当一个系统的熵产生率小于施加在系统上的应变速率, 那么塑性流变将会局部化, 从而发生流变失稳。在参数 ζ 关于温度和应变速率的关系图中, 标出 ζ 值为负的区域, 即可得到加工失稳图。

将能量耗散图和加工失稳图进行叠加, 便得到材料的加工图, 其能够很好地描述材料高温变形时的组织演化与塑性变形参数间的关系, 为合金变形参数的选择提供参考范围。

3.3.2 热加工图构建

加工图建立时需要用的重要参数为流变应力, 而流变应力的大小取决于变形温度、应变速率和应变。对于动态回复型金属而言, 流变应力在短时内达到峰值以后, 随着真应变的增加不发生变化, 在不同真应变条件下建立的加工图则无明显差别, Sivakesavam 和 Prasad 在最初建立加工图时也是基于这种流变应力特征, 因此得到的不同应变条件下的加工图基本相似。但是对于动态再结晶型的金属, 流变应力达到峰值以后, 随着应变的增加逐渐减小, 利用峰值应力建立的加

工图则不能真实反应整个变形过程中的加工特性。由于 TiAl 基合金在热加工过程中容易发生动态再结晶，所以在建立加工图时，必须考虑真应变的影响，才能准确地反映合金的热加工特性。因此本文分别绘制了真应变为 0.1、0.2、0.3、0.4、0.5、0.6 条件下的加工图。

由公式 3-17 可以计算出经过修正之后各变形条件下的真应力值，利用三次样条插值函数拟合 $\ln(\sigma)$ - $\ln \dot{\epsilon}$ 关系曲线，如图 3-14 所示。

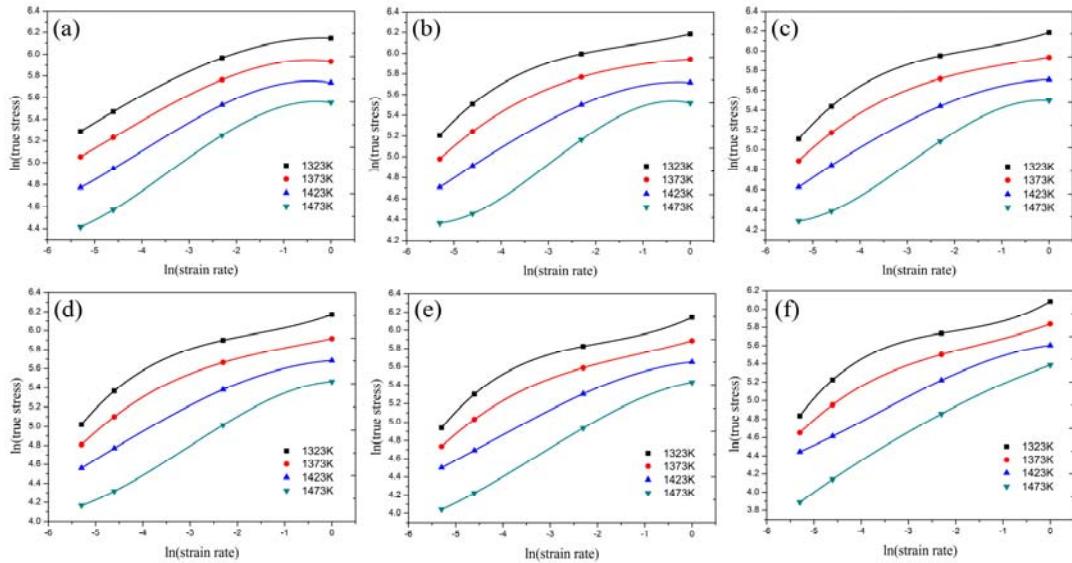


图 3-14 不同真应变下的三次插值样条曲线

Fig. 3-14 The interpolating curves at various true strains

(a) 0.1 (b) 0.2 (c) 0.3 (d) 0.4 (e) 0.5 (f) 0.6

图 3-14 中拟合后各条件下的相关系数都大于 0.99，说明该拟合函数具有很好的效果，拟合结果可信， $\ln\sigma$ 关于 $\ln\dot{\epsilon}$ 拟合函数关系为：

$$\ln \sigma = a + b \ln \dot{\epsilon} + c (\ln \dot{\epsilon})^2 + d (\ln \dot{\epsilon})^3 \quad (3-26)$$

式中参数 a、b、c 和 d 是关于温度的常数。根据拟合后的方程可以直接得到各拟合函数的 a、b、c、d 值。

由公式 3-21 可得：

$$m = \partial(\ln \sigma) / \partial(\ln \dot{\epsilon}) = b + 2c \ln \dot{\epsilon} + 3d (\ln \dot{\epsilon})^2 \quad (3-27)$$

将拟合所得的常数 b、c 和 d 对应相应的应变速率带入公式 3-27 可得到不同温度和应变速率条件下的 m 值。然后通过公式 3-24，可以计算出不同变形温度和应变速率下的能量耗散因子 η ，在 $T - \ln \dot{\epsilon}$ 平面内绘制 η 的等值轮廓线，即为能量耗散图，如图 3-15 所示。

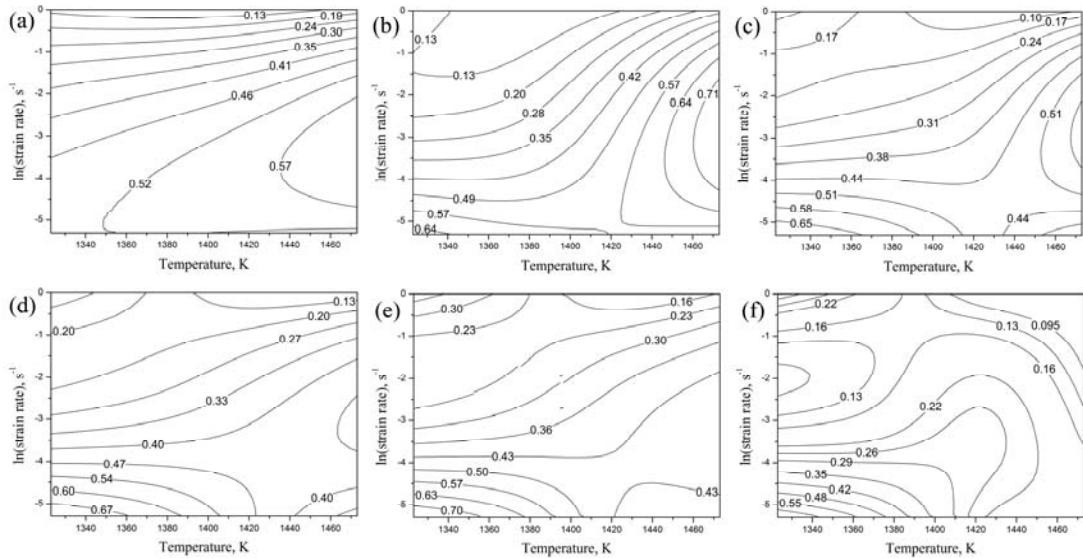


图 3-15 不同真应变下的能耗图

Fig. 3-15 Power dissipation maps at various true strains

(a) 0.1 (b) 0.2 (c) 0.3 (d) 0.4 (e) 0.5 (f) 0.6

能量耗散值代表了合金塑性变形的能力与变形机制，一般来说，能量耗散值小于零时，为流变失稳状态，即直接动态失效或微裂纹产生和扩展。能耗值较大时合金具有较好的变形能力，甚至超塑性。当能耗值的等轮廓线较密时，说明变形参数的微小变化即对能耗值产生较大的影响，塑性变形不稳定，加工工艺选择时应尽量避免这些区域；等轮廓线稀疏时，说明合金在其对应的变形条件下能够产生稳定的流变行为。从图 3-15 可以看出，在变形的初始阶段，即真应变为 0.1 时，高应变速率条件下的能耗值较小，且等轮廓线密集，随着应变速率降低，能耗值增加，等轮廓线密度变得稀疏，说明合金变形初期不宜采用较高的应变速率变形。随着真应变的增加，位于高温高应变速率区域的能耗值均比较低，能耗值较高的区域为低温低应变速率的区域，然而当真应变值大于 0.4 以后，低温低速区域虽然能耗值较高，但是等轮廓线密度随着真应变的增加而增加。这说明，随着变形的进行，低温低速的变形条件下，即使能耗值较高，却并非最佳的变形条件。值得注意的是在低温高速的区域，随着变形的进行，能耗值增加，并且等轮廓线的密度变得稀疏，更有利于合金变形。考虑到加工参数的选择不仅要参考能耗图，还应该结合失稳图进行综合考虑。所以需要绘制不同真应变条件下的失稳图。

将由公式 3-27 带入公式 3-25 可得到失稳参数的表达式为：

$$\zeta(\dot{\varepsilon}) = \frac{\partial \ln\left(\frac{m}{m+1}\right)}{\partial \ln \dot{\varepsilon}} + m = \frac{2c + 6d(\ln \dot{\varepsilon})}{m(m+1)} + m \quad (3-28)$$

将不同条件下的 m 值带入公式 3-28，可以计算得到不同变形条件下的失稳参数 $\zeta(\dot{\epsilon})$ 值，在 $T - \ln \dot{\epsilon}$ 平面内绘制 $\zeta(\dot{\epsilon})$ 的等值轮廓线，将 $\zeta(\dot{\epsilon}) < 0$ 的区域用阴影标示，表示为材料发生失稳的区域，如图 3-16 所示。图中阴影部分即为合金变形失稳区。

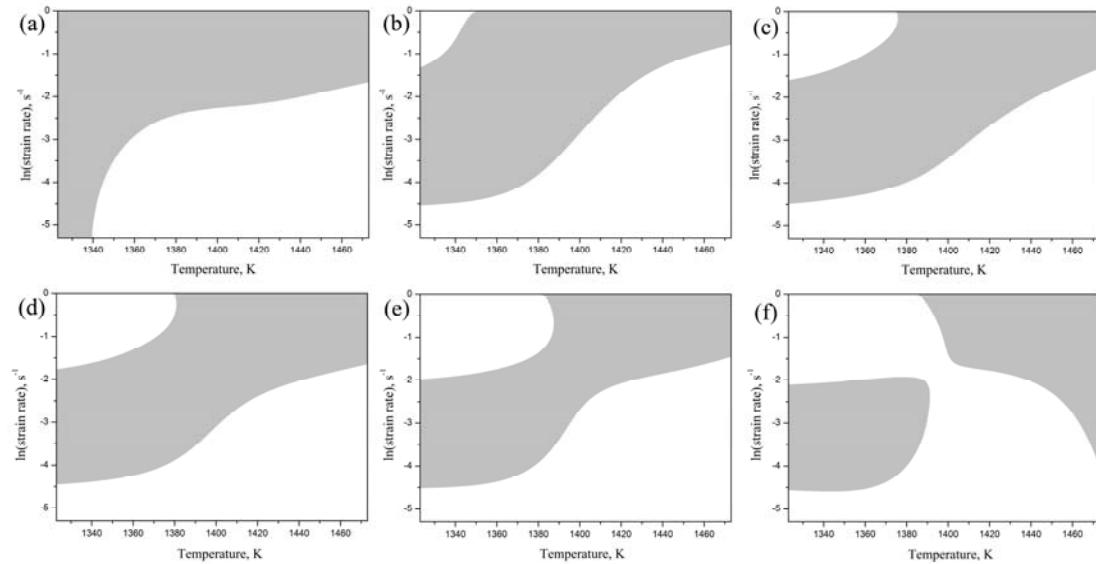


图 3-16 不同真应变下的失稳图

Fig. 3-16 Instability maps at various true strains

(a) 0.1 (b) 0.2 (c) 0.3 (d) 0.4 (e) 0.5 (f) 0.6

由图 3-16 可以看出，变形开始阶段，即真应变为 0.1 时，合金热变形时只存在一个安全变形区，该区域中 $\ln \dot{\epsilon}$ 小于 -3.5，且变形温度大于 1340K。随着变形的进行，失稳图中出现另外一个安全变形区，即低温高应变速率的区域，并且该安全变形区随着真应变的增加逐渐扩大，当真应变达到 0.6 时，该安全区与变形初期的安全区连通。尽管随着真应变的增加，加工图中出现新的安全区，并且逐渐增大，但是变形初期的安全区大小却随着真应变的增加而减小。结合本构方程，可以发现，高温低速条件对应的安全区为低 Z 值的区域。低温高速条件对应的安全区为高 Z 值的区域。虽然当真应变大于 0.2 以后，高 Z 值的区域出现安全变形的区域，但是在实际变形工艺选择时仍不易直接采用高 Z 值的变形参数，因为在变形的初期，高 Z 值的参数可能处于变形失稳的区域，失稳形式表现为宏观开裂，微裂纹或者剪切带等，这些均不利于合金后期的变形。

变形工艺参数的选择应综合考虑能耗图和失稳图，将能耗图和失稳图叠加后，可得到不同真应变条件下的加工图，如图 3-17 所示。由图可以看出，当真应变为 0.1 时，合金只有一个适宜的安全加工区，当真应变为 0.2 和 0.3 时，合金有两个安全区，但是对于低温高应变速率的安全区而言，范围较小，且能耗值较小，实际上并不适合加工，当真应变大于 0.4 时，合金有两个安全区，且随着

真应变的增加，安全区的范围扩大，说明，随着变形的进行，合金的变形能力得到提高，这主要归功于变形后组织变化，变形过程形成的再结晶晶粒有利于合金的塑性变形。从图中还可以看出，在低温低速的区域，虽然具有较高的能耗值，但是这些区域中能耗值的等轮廓线很密集，并且该区域较小，非常靠近变形失稳区，所以该区域并非理想的变形区域。根据加工图对加工工艺指导原则，在选择加工工艺时应在加工图的安全区选择能耗因子较高，且分布较稀疏的区域所对应的变形温度和应变速率。所以从图 3-17 所示的加工图中可以得到，Ti-47Al-2Cr-2Nb-0.2W 合金适宜的加工参数为：

真应变为 0.1 时： $0.005\text{s}^{-1} \leq \dot{\varepsilon} \leq 0.08\text{s}^{-1}$, $1067^\circ\text{C} \leq T \leq 1200^\circ\text{C}$

真应变为 0.2 时： $0.005\text{s}^{-1} \leq \dot{\varepsilon} \leq 0.08\text{s}^{-1}$, $1137^\circ\text{C} \leq T \leq 1200^\circ\text{C}$

真应变为 0.3 时： $0.005\text{s}^{-1} \leq \dot{\varepsilon} \leq 0.05\text{s}^{-1}$, $1137^\circ\text{C} \leq T \leq 1200^\circ\text{C}$

真应变为 0.4 时： $0.005\text{s}^{-1} \leq \dot{\varepsilon} \leq 0.037\text{s}^{-1}$, $1137^\circ\text{C} \leq T \leq 1200^\circ\text{C}$

和 $0.33\text{s}^{-1} \leq \dot{\varepsilon} \leq 1\text{s}^{-1}$, $1050^\circ\text{C} \leq T \leq 1100^\circ\text{C}$

真应变为 0.5 时： $0.005\text{s}^{-1} \leq \dot{\varepsilon} \leq 0.08\text{s}^{-1}$, $1127^\circ\text{C} \leq T \leq 1200^\circ\text{C}$

和 $0.22\text{s}^{-1} \leq \dot{\varepsilon} \leq 1\text{s}^{-1}$, $1050^\circ\text{C} \leq T \leq 1100^\circ\text{C}$

真应变为 0.6 时： $0.005\text{s}^{-1} \leq \dot{\varepsilon} \leq 0.1\text{s}^{-1}$, $1117^\circ\text{C} \leq T \leq 1177^\circ\text{C}$

和 $0.15\text{s}^{-1} \leq \dot{\varepsilon} \leq 1\text{s}^{-1}$, $1050^\circ\text{C} \leq T \leq 1112^\circ\text{C}$

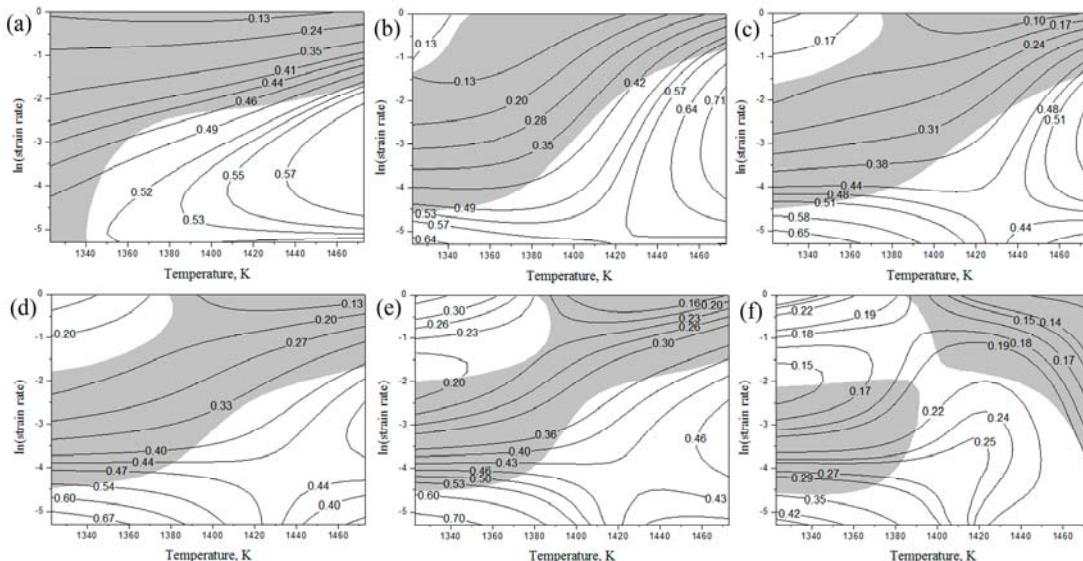


图 3-17 不同真应变下的加工图

Fig. 3-17 Processing maps at various true strains

(a) 0.1 (b) 0.2 (c) 0.3 (d) 0.4 (e) 0.5 (f) 0.6

3.3.3 热加工图的验证

从图 3-17 合金的热加工图中可知，在应变速率为 $0.2\text{s}^{-1} \leq \dot{\varepsilon} \leq 0.3\text{s}^{-1}$ ，变形温度