



MSE



科技创新与论文写作

科技论文的写作

袁志钟

材料科学与工程学院



MSE



科技创新与论文写作-科技论文的写作

知识点

学术论证的原则与方法

袁志钟

材料科学与工程学院

含氮奥氏体钢时效析出 Cr_2N 的数值模拟

戴起勋, 袁志钟, 程晓农, 顾新福

(江苏大学材料科学与工程学院, 江苏 镇江 212013)

摘要: 研究 Fe-24Mn-18Cr-3Ni-0.6N 高氮奥氏体钢在 1 023 ~ 1 223 K 温度范围内时效过程中 Cr_2N 的析出规律. 根据析出相变热力学和动力学建立 Cr_2N 析出的定量计算的数理模型. 利用人工神经网络进行计算和验证, 结果是满意的. 该数学模型可用于高氮奥氏体钢时效 Cr_2N 析出的计算设计和预测.

关键词: 奥氏体不锈钢; 氮化物; 神经网络; 数学模型

中图分类号: TG142.25 **文献标识码:** A **文章编号:** 1671-7775(2004)02-0168-04

Numerical simulation of Cr_2N age-precipitation for high nitrogen stainless steels

DAI Qi-xun, YUAN Zhi-zhong, CHENG Xiao-nong, GU Xin-fu

(School of Materials Science and Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang, Jiangsu 212013, China)

Abstract: At the temperatures ranging from 1 023 K to 1 223 K, the Cr_2N age-precipitation for high nitrogen austenitic stainless steels was studied. A mathematical model of Cr_2N age-precipitation was established based on the thermodynamics and kinetics of phase transformation. The results were tested by artificial neural network and proved to be satisfactory. The mathematical model can be used in the calculation design and predication of Cr_2N age-precipitation in high nitrogen stainless steels.

Key words: austenitic stainless steels; nitride; neural network; mathematical model

含氮奥氏体钢在 773 ~ 1 323 °C 温度范围内时效过程中对 Cr_2N 等化合物的析出比较敏感. 这些化合物的析出会降低钢的塑韧性, 特别是低温韧性, 对钢的腐蚀和磨损性能也有较大的影响. 研究这类钢的中温析出过程对钢的热处理、轧制等生产过程的控制及使用有很大的实际意义. Simmons^[1]研究了 Fe-19Cr-5Ni-5Mn-3Mo-0.7N 奥氏体钢中 Cr_2N 脱溶沉淀的规律及对性能的影响. Satyanarayana 等^[2]研究了 Fe-Cr-Ni-Al-Zr 奥氏体钢的析出相 NiAl 的晶体学关系. 对于 Fe-Mn-Cr-N 系列的高强度奥氏体钢中温组织稳定性所见报道不多, 而建立相关的数理模型尚未见有报道. 在受热条件下, 不同成

分奥氏体钢的第二相析出比较复杂, 析出相也很多, 而且不同化合物的析出机制和规律可能也有所不同. 在工程应用层次的奥氏体钢设计系统中, 中温组织稳定性也是重要的一方面^[3]. 作者研究了含氮奥氏体钢的 Cr_2N 析出形貌^[4], 本文从建立数理模型的角度对含氮奥氏体钢的 Cr_2N 脱溶沉淀动力学过程进行数值模拟的研究, 并利用 BP 人工神经网络进行验证.

1 试验材料与方法

实验材料为 Fe24Mn18Cr3Ni0.62N, 主要成分

收稿日期: 2003-10-28

基金项目: 江苏省蓝青工程人才基金资助项目

作者简介: 戴起勋(1948-), 男, 江苏吴江人, 教授, 博士生导师, 主要从事新材料开发与计算设计、材料激光物理、材料的形变断裂及强韧化的研究.

的质量分数 w : Mn 24.62%, Cr 13.18%, Ni 3.23%, N 0.62%, C 0.051%。固溶处理 (1 373 K × 1 h) 后金相组织为单相奥氏体, 晶粒度 7~8 级。将试验材料在 1 123、1 073 和 1 023 K 都进行 10、30、60、120、240、480 和 720 min 的等温试验, 在 1 173 K 只进行 10、30、60、90、120 和 240 min 的等温试验。金相试验所采用的腐蚀剂配比是硝酸:盐酸:甘油 = 1:2:2。在 JX-840A 型电子探针的 X 射线能谱成分分析仪上测定析出物化学成分。

2 Cr_2N 沉淀析出数理模型

从固溶体中脱溶析出第二相是一个形核长大的过程。一般来说, 其热力学驱动力来源于脱溶前后两种状态之间的体积自由焓之差。对于奥氏体钢在中温阶段时效析出第二相过程, 可设临界驱动力为 ΔG^* , 按经典形核理论它是由体积自由焓之差 ΔG_V 和界面能及应变能组成。需重视的是等温析出第二相的动力学, 即温度-时间的 TTP 图。这是一个形核动力学中的形核速率问题。形成 n^* 个析出相所需要的时间 t_S 可写为

$$t_S \approx \frac{n^*}{N_0} \cdot \frac{1}{Z\beta_K} \cdot \exp\left(\frac{\Delta G^*}{kT}\right) \quad (1)$$

式中, Z 为比例常数 Zeldovich 因子; N_0 是单位体积中可供形核地点的数目; k 是波尔兹曼常数; T 是绝对温度; β_K 是单位时间中与临界晶核相碰撞的原子数目。形核速率是热力学和动力学的综合问题。当温度降低, 即 ΔT 增大, ΔG_V 增大, ΔG^* 就降低, 其结果是减少 t_S 。 ΔT 增大, N_0 也增大, 结果是析出速度增大; 但另一方面, 脱溶析出相的形核长大是要靠原子的扩散来进行的。 β_K 是形核长大所需原子扩散的有效性因素, 它与原子扩散系数 D 成正比, $\beta_K \propto D \exp(-Q/kT)$ 。随着温度的变化, 由于热力学和动力学的综合作用, 形核速率形成了大家熟悉的“C”曲线形状 (见图 1)。

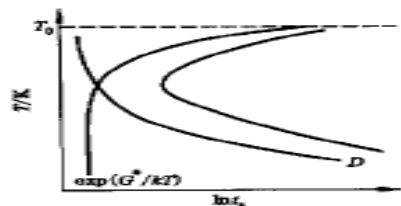


图 1 ΔG^* 与 D 综合作用下 t_S 与 T 的关系示意图
Fig. 1 Relation of t_S vs. T under the comprehensive influence of ΔG^* and D

所以, 式 (1) 可写成

$$t_S \approx \frac{n^*}{N_0} \cdot \frac{K}{Z} \cdot \exp\left(\frac{Q + \Delta G^*}{kT}\right) \quad (2)$$

在一定温度范围内, Q 与 ΔG^* 都主要和固溶体合金成分直接相关, 是合金成分的函数, 即 $Q + \Delta G^* = f(\text{Me})$ 合金元素。并设 $N_0 \propto \Delta T$, 一般认为 Cr_2N 会在 1 348 K 完全溶解^[5]。简化式 (2) 可得到

$$\ln t_S = \ln A + \ln \frac{1}{1348 - T} + \left[\frac{Q + \Delta G^*}{kT} \right] = \ln A + \frac{f(\text{Me})}{kT} + \ln \frac{1}{1348 - T} \quad (3)$$

合金元素的作用采用与作者其他数值模拟^[6,7]相一致的处理方式, 将式 (3) 写成

$$\ln t_S = a_0 + a_1/(1348 - T) + [a_2 + a_3 w(\text{Mn}) + a_4 w(\text{Cr}) + a_5 w(\text{Ni}) + a_6 (w(\text{N}) + w(\text{C})) + a_7 w(\text{Mo}) + a_8 w(\text{V})] / T \quad (4)$$

根据试验结果和有关文献报道的数据^[4,8-15], 将 Cr_2N 析出数据、材料成分及有关试验数据列于表 1。对式 (4) 进行计算机数据处理, 可得到计算表达式

$$\ln t_S = -9.91 + 324.80/(1348 - T) + 10723.72/T + 88.97 w(\text{Mn})/T + 130.6 w(\text{Cr})/T - 171.49 w(\text{Ni})/T - 3241.67(1.2 w(\text{N}) + w(\text{C}))/T + 44.54 w(\text{Mo})/T - 3701.26 w(\text{V})/T \quad (5)$$

式中 w 为合金元素质量分数, T 为绝对温度, t_S 的计算值见表 1。回归模型式 (5) 的相关系数 $R = 0.916$; F 检验的可信度达到 100%。总的来说这个模型的相关情况比较好。 t 检验的显著性很好, 只有 $w(\text{Mo})/T$ 项的显著性较差 ($t = 0.65$), 其他各项系数的可信度较高。图 2 是试验的 Cr_2N 析出的 TTP 曲线。

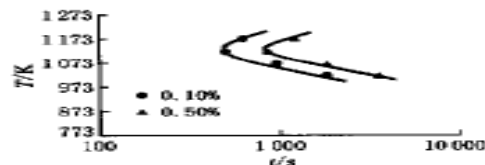


图 2 Cr_2N 等温析出动力学曲线
Fig. 2 Isothermal precipitation kinetics curve of Cr_2N

从式 (5) 可看出, N 元素是强烈的缩短析出时间; Mn 和 Cr 提高 N 元素固溶度, 所以都延缓 Cr_2N 的析出; V 是强烈的碳氮化合物形成元素, 起了促进析出的作用; Ni 降低 N 在奥氏体中的固溶度, 因

此缩短 Cr₂N 的析出时间。

表 1 钢的成分及 t_s 试验值与计算结果的比较
Tab. 1 Compositions of steels and calculation results

序号	化学成分 w/ %							数据 来源文献	时效 T/ K	t _g / min		
	Mn	Cr	Ni	N	C	Mo	V			试验值	计算值	BP 值
1	3.88	24.32	15.07	0.32	0.04	0	0	8	1 223	3.0	3.0	2.9
2	3.88	24.32	15.07	0.32	0.04	0	0	8	1 173	2.0	2.0	2.2
3	3.88	24.32	15.07	0.32	0.04	0	0	8	1 073	2.2	2.4	2.0
4	3.88	24.32	15.07	0.32	0.04	0	0	8	1 023	3.0	3.1	3.1
5	3.88	24.32	15.07	0.32	0.04	0	0	8	973	6.0	4.6	5.1
6	10.13	12.01	11.79	0.236	0.025	4.94	0	8	1 223	5.0	3.3	5.8
7	10.13	12.01	11.79	0.236	0.025	4.94	0	8	1 123	2.5	2.2	2.5
8	10.13	12.01	11.79	0.236	0.025	4.94	0	8	1 073	2.5	2.6	2.1
9	10.13	12.01	11.79	0.236	0.025	4.94	0	8	1 023	3.0	3.5	2.6

3 利用神经网络验证和预测

利用 BP 人工神经网络,可对建立的数学模型

所得到的结果进行验证,也可直接对 Cr₂N 的析出时间进行预测。作者计算采用的是 Neural Shell 2 软件。在计算过程中,定义合金元素质量分数 *w* 和温度 *T* 作为输入,*t* 作为输出。各合金元素的 *w* 值

为: Mn, 1 %~35 %; Cr, 12 %~25 %; Ni, 0 %~25 %; N, 0.05 %~1.2 %; C, 0 %~0.1 %; Mo, 0 %~10 %; V, 0 %~0.5 %; T 的范围 900~1 300 K. 时间 t 为: 0~1 000 min. 采用三层隐型 BP 网络, 计算结果列入表 1. 然后利用 Neural Shell 2 自带的代码生成器, 将计算代码以 C 语言格式导出, 并用 Visual C++ 编程计算, 生成可执行软件, 依次输入合金元素的质量分数和温度, 就可以对合金的 Cr_2N 沿晶析出的孕育期进行计算, 求出开始析出的时间来对材料的中温组织稳定性进行预测.

4 结 论

对 Fe-Cr-Mn-Ni-N 系奥氏体钢中温时效 Cr_2N 析出时间的数理模型进行了探讨, 根据理论分析和试验结果, 建立可定量计算预测的数学模型表达式 (5), 并利用 BP 人工神经网络对 Cr_2N 的析出数据进行处理, 可预测 Cr_2N 的开始析出时间, 同时也对计算模型进行验证, 计算结果是满意的.

参考文献(References)

- [1] Simmons J W. Influence of nitride (Cr_2N) precipitation on the plastic flow behavior of high-nitrogen austenitic stainless steel[J]. *Scripta Metallurgica et Materialia*, 1995, 32(2): 265 - 270.
- [2] Satyanarayana D V V, Malakondaiah G, Sarma D S. Characterization of age-hardening behavior of a precipitation-hardenable austenitic steel[J]. *Materials Characterization*, 2001, 47: 61 - 65.
- [3] 戴起勋, 程晓农, 等. 工程应用层次的奥氏体钢计算设计系统[J]. 江苏大学学报(自然科学版), 2003, 24(1): 75 - 78.
DAI Qi-xun, CHENG Xiao-nong, et al. Calculation design system of austenitic steels for engineering application[J]. *Journal of Jiangsu University (Natural Science Edition)*, 2003, 24(1): 75 - 78. (in Chinese)
- [4] 袁志钟, 戴起勋, 程晓农, 等. 高氮奥氏体钢的中温稳定性研究[J]. 金属热处理, 2004. (待发表)
YUAN Zhi-zhong, DAI Qi-xun, CHENG Xiao-nong, et al. Structure stability of high nitrogen stainless steels at elevated temperature[J]. *Metal Heat Treatment*, 2004.

(to appear) (in Chinese)

- [5] Perter M Ålner. On the ductile to brittle transition in austenitic steel[J]. *Materials Science and Engineering*, 1997, A234 - 236: 94 - 97.
- [6] DAI Qi-xun, WANG Ai-dong, CHENG Xiao-nong, et al. Effect of Me and T on strength for cryogenic austenitic steels[J]. *Materials Science Engineer A*, 2001, 311(1/2): 205 - 210.
- [7] CHENG Xiao-nong, DAI Qi-xun, WANG Ai-dong, et al. Effect of Me and T on impact toughness for cryogenic austenitic steels[J]. *Materials Science Engineer A*, 2001, 311(1/2): 211 - 216.
- [8] Maribel L, Saucedo-Munoz, et al. Effect of microstructure evolution on fracture toughness in isothermally aged austenitic stainless steels for cryogenic applications[J]. *Cryogenics*, 2000, 40: 637 - 700.
- [9] Goykhenberg Yn N, Mirzaev D A, Zhuravlev L G, et al. 高氮铬锰奥氏体钢的应力腐蚀破裂抗力、微观组织和性能[A]. 见: 高钢译文集[C]. 上海: 上海钢铁研究所, 1992.
- [10] Tchavedar Andreev, Tsolo Reshev. 反压铸造法——一种生产高氮不锈钢的有效方法[A]. 见: 高氮钢译文集[C], 上海: 上海钢铁研究所, 1992.
- [11] Uggowitzer P J, Speidel M O. 超高强度奥氏体不锈钢[A]. 见: 高氮钢译文集[C]. 上海: 上海钢铁研究所, 1992.
- [12] 傅万堂, 王 正, 刘文昌, 等. 18Mn-18Cr-0.5N 钢氮化物等温析出动力学研究[J]. 钢铁, 1998, 33(9): 45 - 48.
FU Wang-tang, WANG Zheng, LIU Wen-chang, et al. Investigation on isothermal precipitation kinetics of nitrides in 18Mn-18Cr-0.5N steel[J]. *Iron and Steel*, 1998, 33(9): 45 - 48. (in Chinese)
- [13] Vanderschaeve F, Taillard R, Foct J. Discontinuous precipitation of Cr_2N in a high nitrogen, chromium-manganese austenitic stainless steel[J]. *Journal of Materials Science*, 1995, 30: 6035 - 6046.
- [14] Simmons J W. Overview: high-nitrogen alloying of stainless steels[J]. *Materials Science and Engineering*, 1996, A207: 159 - 169.
- [15] Santhi Srinivas N C, Kutumbarao V V. On the discontinuous precipitation of Cr_2N in Cr-Mn-N austenitic stainless steels[J]. *Scripta Materialia*, 1997, 37(3): 285 - 291.

面临两大挑战

**合理清晰的
呈现结果**

**令人信服的
论证讨论**

学术论证的基本原则



学术论证的基本原则

1

准确地把握科学术语的概念

学术论证的基本原则

1

准确地把握科学术语的概念

2

保持论证和论点的一致性

①必须保持论证和论点的一致性

②一篇论文必须有一个中心论题

③尽量避免“小题大作”、“大题小作”、“文不对题”等问题

学术论证的基本原则

1

准确地把握科学术语的概念

2

保持论证和论点的一致性

3

保证论据和结论的科学性与真实性

①保证论据和结论的真实性

②分论点和结论要协调

③消除歧义和漏洞

学术论证方法

学术 论证 方法

例证法：摆事实，讲道理，数据和结果都是证据

引证法：引经据典关键是可靠性、科学性和权威性

类比法：两类事物在性质、特征上的相近程度

对比法：直接比较，进行论证，使用比较广泛

喻证法：通过比喻论证。主要用于社会科学领域

反证法：从反面来间接证明论点的方法

小 结

知识点

学术论证的原则与方法

学术论证
原则

学术论证
方法



结果与讨论

谢 谢！