

基于元胞自动机 AZ31 镁合金微观组织模型

楚志兵^{1,2}, 张 铎¹, 江连运¹, 马立峰¹, 李玉贵¹, 黄庆学¹

(1. 太原科技大学 重型机械教育部工程研究中心, 山西 太原 030024)

(2. 暨南大学, 广东 广州 510632)

摘 要: 以 AZ31 镁合金在热压缩过程中微观组织演变为基础, 结合元胞自动机模型(CA), 建立了镁合金变形过程中再结晶晶粒尺寸模型和动态再结晶百分数模型。通过对铸态 AZ31 镁合金在不同变形条件下的热压缩实验, 推导出镁合金的位错密度模型、临界位错密度模型、形核率模型和晶粒长大模型。结合元胞自动机具体演变规则, 建立元胞自动机模型, 并利用应力应变曲线及晶粒大小验证元胞自动机的模拟结果, 验证该模型的准确性, 结合实验数据和 JMAK 理论, 推导出再结晶晶粒尺寸模型和动态再结晶百分数模型。借助 DEFORM-3D 分析软件得到镁合金在变形过程中, 晶粒尺寸分布的变化情况以及动态再结晶百分数分布的变化情况。

关键词: AZ31 镁合金; 元胞自动机模型; 晶粒尺寸模型; 动态再结晶百分数模型

中图分类号: TG146.22

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2018)03-0884-11

材料在塑性变形过程中, 不仅应具有精确的形状与尺寸, 而且应具有优良的组织与性能^[1]。通过物理实验已经证明, AZ31 镁合金在变形过程中, 会发生动态再结晶, 实现晶粒细化, 因此找到合适的变形工艺, 使镁合金变形后达到最佳晶粒细化效果和最高性能是研究关键所在^[2]。

在预测微观组织方面, 存在很多数学模型, 其中比较著名的是 Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (JMAK) 理论, 该理论广泛用于生产实际中, 且将材料在变形后的晶粒尺寸和再结晶百分数视为关于应变、温度和应变率的函数。然而, 由于实验中很难对变形过程进行即时观察、存在难于严格区分再结晶晶粒和非再结晶晶粒、难于记录和判断再结晶晶粒形核的起始时刻以及需要大量实验积累等方面的问题, 使得通过实验确定最佳工艺的成本较高且误差较大^[3]。

随着计算机技术的不断发展, 促进了微观组织模拟的发展, 尤其是元胞自动机的出现, 在对凝固组织、晶粒长大、静态再结晶以及动态再结晶等方面有着广泛的应用, 元胞自动机模型(CA), 因其具有准确简单的优点而快速发展。R. Goet 和 V. Seetharaman^[4]运用元胞自动机模型研究单相合金的静态再结晶和动态再结晶, G. Kugler 和 R. Turk^[5]运用元胞自动机模型研究了材料在热变形时的晶粒变化。A. Timoshenko^[6]等运用元胞自动机模型研究了钢的动态再结晶行为。D.

Raabe 和 R. C. Becker^[7]结合有限元法和元胞自动机法研究了铝合金的静态再结晶。F. Chen^[8]等人运用元胞自动机模型预测了 30Cr2Ni4MoV 钢的晶粒演变。Z. Y. Jin 和 Z. S. Cui^[9]运用统计学方法改进了元胞自动机模型, 并预测 Q235 钢的动态再结晶行为。虽然元胞自动机模型可以很好的预测材料的微观组织, 但仅仅局限于一小块区域, 而在生产实际中, 往往需要得到材料整体的晶粒分布。

本研究通过铸态 AZ31 镁合金热压缩实验, 推导出可以准确预测材料一定区域内微观组织演变的元胞自动机模型, 结合 JMAK 理论, 建立可以预测材料整体尺寸分布的再结晶晶粒模型和再结晶百分数模型, 实现既可以得到局部区域的晶粒组织还可以得到整体材料的晶粒分布情况。

1 实 验

采用银光镁业提供的铸态 AZ31 镁合金作为坯料, 其化学成分见表 1。

表 1 铸态 AZ31 镁合金化学成分

Table1 Chemical composition of as-cast AZ31 magnesium alloy (wt%)

Al	Mn	Zn	Ca	Ni	Fe	Si	Mg
2.5~3.5	0.15~0.5	0.6~1.4	0.05	0.005	0.005	0.1	Bal.

收稿日期: 2017-03-18

基金项目: 国家自然科学基金51375325; 山西省青年科技研究基金项目(2015021111); 山西省重点研发计划(201703D121008); 山西省重点学科建设经费资助

作者简介: 楚志兵, 男, 1981 生, 博士, 副教授, 太原科技大学材料学院, 山西 太原 030024, E-mail: piegen@163.com

将坯料加工成 $\Phi 8 \text{ mm} \times 15 \text{ mm}$ 的圆柱试样，在 Gleeble-3500 热模拟试验机上，对试样分别在温度为 250、300、350、400、450 $^{\circ}\text{C}$ 下，应变速率为 0.005、0.05、0.5、5 s^{-1} 下进行压缩，压缩量为 60%，压缩量和真应变之间的关系如式(1)所示，压缩前试样的上下 2 个端面涂抹机油粘上石墨片，以降低试样与压头之间摩擦力对实验造成的影响，实验中加热区域为中段 10 mm，升温速率为 5 $^{\circ}\text{C}/\text{s}$ ，保温 90 s 后连续压缩变形，变形后用水激冷，以保持高温时试样的再结晶组织。然后将试样沿平行与压缩方向的横截面切开，对试样进行研磨与抛光，再经过腐蚀液腐蚀，得到试样的金相组织，本研究所取金相组织均为压缩试样中心处的金相组织，图 1 为试样在压缩变形前的微观组织。图 2 为经过元胞自动机模拟得到的初始晶粒组织。2 种初始晶粒组织的平均尺寸均为 94 μm ，初始晶粒的生成方法采用 Y. Z. He^[10]等人提出的最小能量法。

$$\varepsilon = -\ln(1-x) \tag{1}$$

式(1)中， x 为压缩量， ε 为真应变。

2 实验结果

图 3 所示材料的流变应力与应变之间有着重要关系。同时，流变应力也受到应变速率和温度的影响。在温度和应变速率不变的情况下，流变应力在前期会随着应变的增加而迅速增加，此时加工硬化占主导地位。

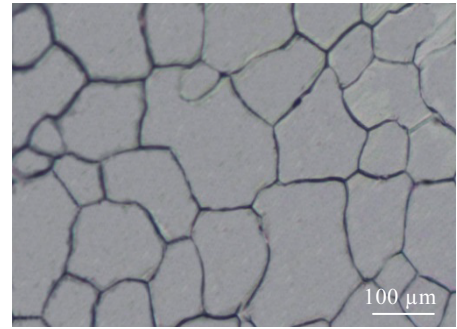


图 1 铸态 AZ31 镁合金试样初始微观组织

Fig.1 Initial microstructure of as-cast AZ31 magnesium alloy

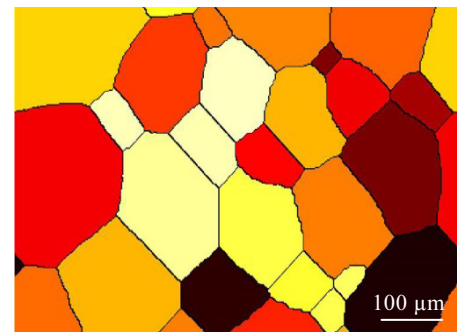


图 2 元胞自动机模拟得到的初始晶粒组织

Fig.2 Initial grain structure obtained using CA simulation

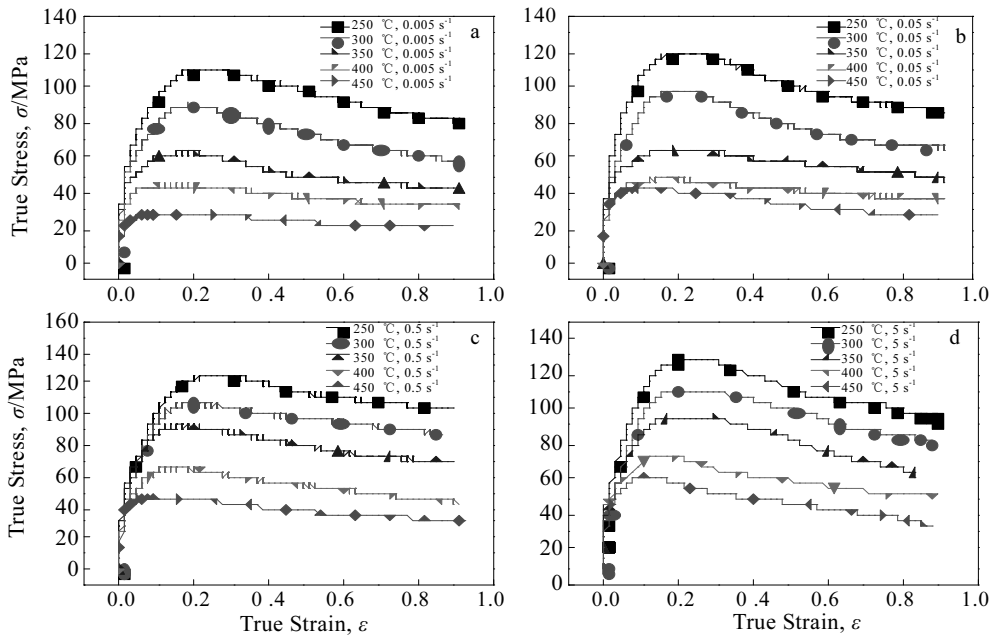


图 3 不同温度和应变速率下铸态 AZ31 镁合金的真应力-应变曲线

Fig.3 True stress-strain curves of as-cast AZ31 magnesium alloy at different temperatures and strain rates: (a) 0.005 s^{-1} , (b) 0.05 s^{-1} , (c) 0.5 s^{-1} , and (d) 5 s^{-1}

一般认为，材料的加工硬化率与位错密度成正比，随着应变的增加，流变应力继续增加，位错密度也继续增加。当位错达到临界值时，材料开始发生动态再结晶，此时，软化作用占据主导地位。一般认为，软化系数与位错密度的 1/2 次成正比，随着应变的继续增加，流变应力达到稳态应力，位错密度也达到稳定值并不再发生变化^[11]。

3 元胞自动机模型

为了能够精确且直观的描述铸态 AZ31 镁合金在压缩过程中晶粒的演变过程，引入元胞自动机模型，来模拟动态再结晶过程中晶粒的变化情况。元胞自动机模型采用一定的转化规则去模拟晶粒在动态再结晶期间晶粒尺寸、再结晶形核的变化过程。

本研究以下部分将建立铸态 AZ31 镁合金的位错密度模型、形核率模型和晶粒长大模型，对与各模型中的参数，建立详细的推导过程，将各个模型的计算结果以及对应函数导入元胞自动机模型中，用来更精确的模拟晶粒演变。

3.1 位错密度模型

位错密度模型是用来描述材料内部位错密度的变化，引入 Kocks 和 Mecking 模型来描述位错密度随应力应变的变化情况^[12]：

$$\sigma = \alpha \mu b \sqrt{\rho} \tag{2}$$

$$\frac{d\rho}{d\varepsilon} = k_1 \sqrt{\rho} - k_2 \rho \tag{3}$$

式(2)中， σ 为流变应力， α 为材料常数，对大部分金属而言，取 0.5， ρ 为位错密度函数， μ 为剪切模量， b 为柏氏矢量，式(3)中， ε 为应变， k_1 为位错增大系数， k_2 为位错消亡系数。

当应变为 0 时，位错密度也为 0，当位错密度达到饱和时，此时位错密度不随应变的变化而变化，则 $d\rho/d\varepsilon = 0$ ，带入式(3)并两边对 ε 求积分，得到：

$$\rho_{sat} = \left(\frac{k_1}{k_2} \right)^2 \tag{4}$$

式(4)中， ρ_{sat} 为饱和位错密度。

将式(2)和(4)带入式(3)，得到材料在动态回复阶段流变应力的表达式：

$$\sigma = \sigma_{sat} - (\sigma_{sat} - \sigma_0) e^{-\frac{k_2}{2}\varepsilon} \tag{5}$$

式(5)中， σ_{sat} 为饱和应力， σ_0 为屈服应力，饱和应力和屈服应力均可由真应力应变曲线得出，具体推导过程参照文献[13]。

$$\sigma_0 = 1.1 \ln Z^2 - 20.59 \ln Z + 398.23 \tag{6}$$

$$\sigma_{sat} = 85.91 \sinh^{-1} (0.012 Z^{0.07}) \tag{7}$$

式(7)中， Z 为 Zener-Hollomon 参数，可以表示为

$Z = \dot{\varepsilon} \exp(Q_{act}/RT)$ ，其中 $\dot{\varepsilon}$ 为应变率， Q_{act} 为变形激

活能， R 为气体常数， T 为绝对温度，结合式(5)、(7)以及真应力应变曲线，即可得到 k_2 的值，由于 k_2 的值与温度和应变率均有关系，所以引入 Zener-Hollomon 参数 Z 来表示 k_2 ，如图 4 所示，对 $\ln k_2$ 与 $\ln Z$ 进行线性拟合，得到：

$$k_2 = \frac{6.88 \times 10^{51}}{Z^{14.72}} \tag{8}$$

结合式(4)、(7)、(8)，可以求出 k_1 的值：

$$k_1 = \frac{1.16 \times 10^{53} \sinh^{-1} (0.012 Z^{0.07})}{Z^{14.72}} \tag{9}$$

综上所述，铸态 AZ31 镁合金的位错密度函数为：

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\rho}{d\varepsilon} = k_1 \sqrt{\rho} - k_2 \rho \\ k_1 = \frac{1.16 \times 10^{53} \sinh^{-1} (0.012 Z^{0.07})}{Z^{14.72}} \\ k_2 = \frac{6.88 \times 10^{51}}{Z^{14.72}} \\ Z = \dot{\varepsilon} \exp(Q_{act}/RT) \end{array} \right. \tag{10}$$

3.2 临界位错密度模型

当材料内部位错密度达到临界值时，材料就会发生动态再结晶，材料内部便会出现新的晶核。因此，研究临界位错密度，对建立完整而精确的元胞自动机模型有着重要的意义。一般认为，材料的临界位错密度可以表示为^[14]：

$$\rho_c = \left(\frac{20\gamma_i \dot{\varepsilon}}{3bIM\tau^2} \right)^{1/3} \tag{11}$$

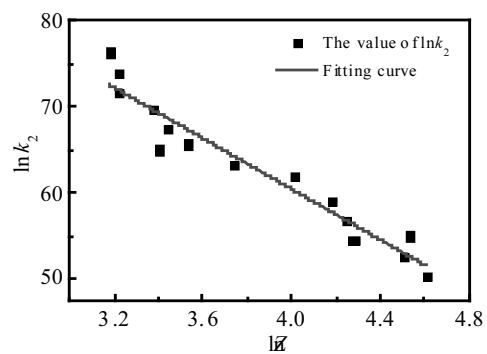


图 4 $\ln k_2$ 与 $\ln Z$ 曲线

Fig.4 Plot of $\ln k_2$ and $\ln Z$

式(11)中, ρ_c 为临界位错密度, γ_i 为晶界能, 可以由式(12)得出, l 为位错平均自由长度, 近似等于材料的亚晶粒尺寸, 可由式(14)得出, M 为晶界迁移率, 可由式(15)得出, τ 为单位位错线能量, 可由式(16)得出。

$$\gamma_i = \begin{cases} \gamma_m & \theta_i \geq 15^\circ \\ \gamma_m \frac{\theta_i}{\theta_m} \left[1 - \ln \left(\frac{\theta_i}{\theta_m} \right) \right] & \theta_i < 15^\circ \end{cases} \quad (12)$$

式(12)中 θ_i 表示第 i 个再结晶晶粒与周围晶粒的晶粒取向差, γ_m 为大角度晶粒晶界能, 可由式(13)得出, θ_m 为大角度晶粒取向角, 取 15° 。

$$\gamma_m = \frac{\mu b \theta_m}{4\pi(1-\nu)} \quad (13)$$

$$l = \frac{k_1 \mu b}{\sigma} \quad (14)$$

$$M = \frac{\delta D_{ob} b}{k_2 T} e^{-\frac{Q_b}{RT}} \quad (15)$$

$$\tau = c \mu b^2 \quad (16)$$

式(13)中, ν 为泊松比, 式(14)中, k_1 为常数, 式(15)中 M 为晶界迁移率, δ 为材料的晶界厚度 D_{ob} , 为绝对零度的晶界自扩散系数, k_2 为波尔兹曼常数, Q_b 为晶界扩散激活能, 式(16)中, c 为常数, 取 0.5, 将(13)~(16)带入式(11)中可得到:

$$\rho_c = 5.0 \times 10^{22} \gamma_i T \dot{\epsilon} \sigma e^{\frac{1.6 \times 10^7}{T}} \quad (17)$$

$$\gamma_i = \begin{cases} 18.44 & \theta_i \geq 15^\circ \\ 1.23 \theta_i \left[1 - \ln \left(\frac{\theta_i}{15} \right) \right] & \theta_i < 15^\circ \end{cases} \quad (18)$$

从式(17)中可以得出临界位错密度与材料温度、应变率和应力之间均有联系, 随着温度的上升, 材料的临界 W 界位错密度会减小, 容易形成新的晶核, 随着应变率变大和流变应力的增加, 材料的临界位错密度会变大, 不易形核, 本研究模拟所用参数均见表 2。

表 2 铸态 AZ31 镁合金的材料参数

Table 2 Material parameters of as-cast AZ31 magnesium alloy

Material parameters	Value
$\delta D_{ob}/m^3 \cdot s^{-1}$	5.0×10^{-12} [15]
k_1	10^{16}
$Q_b/kJ \cdot mol^{-1}$	134 [16]
$Q_{act}/kJ \cdot mol^{-1}$	192
μ/GPa	16.7 [17]
$k_2/J \cdot K^{-1}$	1.3806×10^{-23}
b/m	3.21×10^{10} [17]
ν	0.34
$R/J \cdot (K \cdot mol)^{-1}$	8.314

3.3 形核率模型

当动态再结晶发生时, 出现再结晶晶粒, 再结晶晶粒一般出现在晶界上, 其中包括原始晶粒晶界和再结晶晶粒的晶界, 一般认为, 形核率是温度和应变率的函数, 可以表示为^[18]:

$$\dot{n}(\dot{\epsilon}, T) = C \dot{\epsilon}^m e^{-\left(\frac{Q_{act}}{RT}\right)} \quad (19)$$

式(19)中, $\dot{n}(\dot{\epsilon}, T)$ 为形核率, C 和 m 为材料参数, 均为常数, m 取 1, 确定 C 的方法有实验法和反分析法, 实验法参照文献[19], 反分析法参照文献[20]。

3.4 晶粒长大模型

经过动态再结晶后, 出现再结晶晶粒, 再结晶晶粒随着应变的增加而长大, 由于再结晶晶粒与周围晶粒的位错密度不同, 便产生了促使新晶粒长大的驱动力, 一般认为, 再结晶晶粒长大速度与驱动力成正比, 晶粒长大速度可以表示为:

$$V = MP \quad (20)$$

式(20)^[21]中, V 为晶粒长大速度, P 为作用在单位面积上的晶粒长大驱动力, M 为晶界迁移率, 由式(15)计算得出。

晶粒在长大过程中, 除引起晶界长度减小的界面能外, 变形产生的畸变能对新晶粒的生长更是显得尤为重要。因此, 动态再结晶晶粒长大的驱动能量由界面能和畸变能组成, 当第 i 个再结晶晶粒由半径 r_i 变为 $(r_i + dr_i)$ 时, 晶粒能量变化可表示为:

$$dW_i = dW_i^{sur} + dW_i^{vol} \quad (21)$$

式(21)中, dW_i 表示驱动能的变化, dW_i^{sur} 表示晶界能的变化, dW_i^{vol} 表示畸变能的变化, 假设新晶粒是球状的, 则 dW_i^{sur} 和 dW_i^{vol} 可以表示为:

$$dW_i^{sur} = -d(4\pi r_i^2 \gamma_i) = -8\pi r_i \gamma_i dr_i \quad (22)$$

$$dW_i^{vol} = 4\pi r_i^2 \tau \Delta \rho dr_i \quad (23)$$

因此, 第 i 个再结晶晶粒长大的驱动力可以表示为:

$$F_i = \frac{dW_i}{dr_i} = 4\pi r_i^2 \tau \Delta \rho - 8\pi r_i \gamma_i \quad (24)$$

式(24)中, F_i 为第 i 个再结晶晶粒的驱动力, r_i 为第 i 个再结晶晶粒的晶粒半径, $\Delta \rho$ 为第 i 个再结晶晶粒与周围晶粒的位错密度差, γ_i 为第 i 个再结晶晶粒的晶界能, τ 为单位位错线能量。

则作用在在单位面积上的晶粒长大驱动力 P 可以表示为:

$$P = \frac{F_i}{4\pi r_i^2} \quad (25)$$

将式(15)、(18)、(24)和(25)代入式(20)中, 得到铸态 AZ31 镁合金的晶粒长大模型为:

$$\begin{cases} V = \frac{221.12}{T} \left(3.11 \times 10^{-9} \Delta \rho - \frac{2\gamma_i}{r_i} \right) e^{-\frac{1.6 \times 10^7}{T}} \\ \gamma_i = \begin{cases} 18.44 & \theta_i \geq 15^\circ \\ 1.23\theta_i \left[1 - \ln\left(\frac{\theta_i}{15}\right) \right] & \theta_i < 15^\circ \end{cases} \end{cases} \quad (26)$$

3.5 模拟过程

元胞自动机模型采用二维正方形网格描述了一个离散的空间, 用 $S'(i)$ 和 $S'(N(i))$ 来代表元胞 i 和它周围元胞的状态, 从时间 t 到时间 $t + \Delta t$ 的过程中, 元胞 i 的演变过程可以表示为:

$$S^{t+\Delta t}(i) = f(S'(i), S'(N(i))) \quad (27)$$

式(27)中, f 为演变规则, 以下介绍演变规则。

假设再结晶形核只会发生在晶界上, 其中包括原始晶粒晶界和再结晶晶粒晶界, 每个元胞状态用 5 个变量表示, 第 1 个变量为晶粒取向, 晶粒取向用来区分不同的晶粒, 相同的晶粒取向为一个晶粒, 不同的晶粒取向为不同的晶粒; 第 2 个变量为位错密度; 第 3 个变量表示是否发生动态再结晶; 第 4 个变量表示发生动态再结晶的时间; 第 5 个变量表示晶粒长大速度。

在模拟前, 要设置一个时间步长 Δt 将时间进行离散化, Δt 定义为元胞尺寸和最大迁移率的比值:

$$\Delta t = \frac{C_d}{V_{\max}} \quad (28)$$

式(28)中, C_d 为元胞尺寸, V_{\max} 为每一步系统中最大的晶界移动速度。

通过对时间的离散, 应变、形核率和位错密度都可以通过时间进行离散, 如式(29)~(31)。

$$\varepsilon^{t+\Delta t} = \varepsilon^t + \dot{\varepsilon} \Delta t \quad (29)$$

$$\Delta n = \dot{n} \Delta t \quad (30)$$

$$\rho^{t+\Delta t} = \rho^t + \Delta \rho = \rho^t + \left(k_1 \sqrt{\rho^t} - k_2 \rho^t \right) \Delta \varepsilon \quad (31)$$

当位错密度达到临界值时, 开始发生动态再结晶, 按照式(30)进行形核, 对所有的晶界元胞进行判别, 如果 2 个晶界元胞之间的位错密度大于临界位错密度, 就是 1 个可能的形核位置, 所有可能的形核位置按照概率 P_1 进行形核, 概率 P_1 的按照式(32)计算, 对所有可能的形核位置进行判别, 直到达到 Δn 为止, 新生成晶核的晶粒取向设置成周围 2 个元胞晶粒取向的平均值, 其初始位错密度设置为 0。

$$P_1 = \frac{\rho_{\text{local}}}{\rho_{\max}} \quad (32)$$

式(32)中, ρ_{local} 为此处 2 个元胞的位错密度, ρ_{\max} 为该模拟步中最大的位错密度。

当形核完成后, 再结晶晶粒按照各自的晶界迁移速度进行长大, 晶界迁移距离按照式(33)计算所得, 再结晶元胞采用 Von. Neumann 邻居进行判断, 所以每个再结晶元胞可以计算 4 个方向的迁移速度及迁移距离, 迁移速度由式(20) $V=MP$ 得到, 而再结晶元胞能否发生迁移及发生迁移的方向则通过判断是否满足下列 4 个条件:

(1) 再结晶元胞 4 个方向的迁移距离至少有 1 个大于元胞边长;

(2) 由计算机生成的 0~1 之间的随机数必须小于概率 P_2 , 概率 P_2 的计算公式见式(34);

(3) 当满足条件 (1) 和 (2) 时, 再结晶元胞向迁移速度最大的方向迁移, 此转换条件会使系统储能下降最快^[22], 满足物理规则;

(4) 当该晶粒长大驱动力为 0 时, 该再结晶元胞停止转变。

$$D^{t+\Delta t} = D^t + V \Delta t \quad (33)$$

$$P = N_i / 4 \quad (34)$$

式(33)中, $D^{t+\Delta t}$ 和 D^t 分别为在时间 $t + \Delta t$ 和 t 时的迁移距离, V 为迁移速度, 式(34)中, N_i 为该元胞邻居中再结晶元胞的个数。

以上便是动态再结晶元胞自动机模型的演变规则, 图 5 为模拟流程图。在变形开始前, 所有初始晶粒的位错密度都设置为 10^{14} m^{-2} , 随着应变的增加, 晶粒的位错密度增加, 当系统达到临界位错密度时, 晶粒发生动态再结晶, 按照形核率, 开始形成新的晶粒, 即再结晶晶粒, 再结晶晶粒的位错密度设置为 0, 此时系统的位错密度下降, 再结晶晶粒按照迁移距离长大, 当应变继续增加时, 位错密度继续增加, 再次达到临界位错密度后, 开始第 2 次形核并长大, 从而发生了第 2 次动态再结晶, 以上流程持续进行, 从而实现连续动态再结晶, 直到应变不再增加为止, 即变形结束为止。

本研究在实验范围内建立 400×400 的元胞, 每个元胞代表的实际长度为 $2.5 \mu\text{m}$, 则实际模拟的范围为 $0.1 \text{ mm} \times 0.1 \text{ mm}$, 模拟过程中, 采用周期边界条件。

4 模型验证

元胞自动机模型可以很好地预测材料的流变应力、晶粒尺寸、以及动态再结晶百分数, 本研究将对流变应力和晶粒尺寸在实验结果和预测结果之间的差别来验证本研究建立的元胞自动机模型。

流变应力可通过以下公式计算得出:

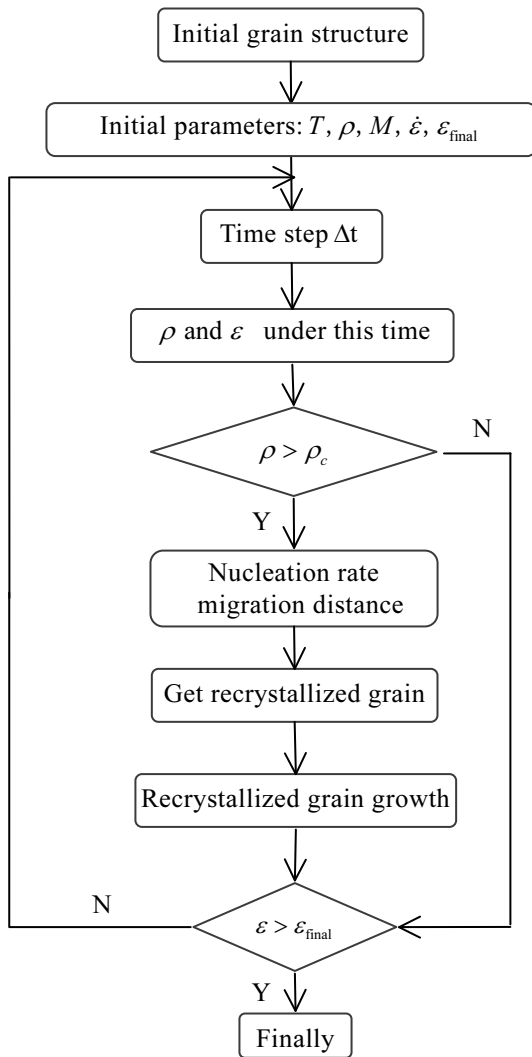


图 5 元胞自动机模型的程序框图

Fig.5 Program flowchart of CA model

$$\begin{cases} \bar{\rho} = \frac{1}{N_c} \sum_{i=1}^{N_c} \rho_i \\ \sigma = \alpha \mu b \sqrt{\bar{\rho}} \end{cases} \quad (35)$$

式(35)中, $\bar{\rho}$ 为每一时间步中系统平均位错密度, N_c 为元胞总数, ρ_i 为每一时间步中第 i 个晶粒的位错密度。根据式(35)计算这一时间步内的平均位错密度和流变应力, 而这一时间步内的应变可由式(29)计算得出, 从而可以对比实验得出的流变应力曲线和元胞自动机模拟得到的流变应力曲线。

图 6 是应变速率为 0.005 s^{-1} 下流变应力的实验值与预测值的对比。图 7 是 $450 \text{ }^\circ\text{C}$ 时, 应变速率分别为 0.005 、 0.5 和 5 s^{-1} 压缩后微观组织的实验结果和预测结果。

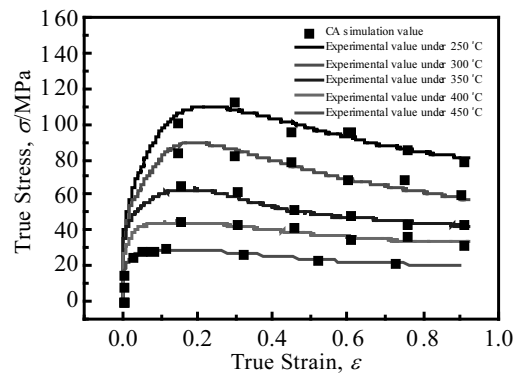


图 6 0.005 s^{-1} 下流变应力的实验值与预测值

Fig 6 Comparison of experimental and calculated values at the strain rate of 0.005 s^{-1}

图 8 是应变率为 0.005 s^{-1} , 温度分别为 300 、 400 和 $450 \text{ }^\circ\text{C}$ 下微观组织的实验结果和预测结果, 以上压缩量均为 60% 。表 3 是应变率为 0.005 s^{-1} , 不同变形条件下晶粒尺寸的实验值和预测值。通过对比以上实验结果和预测结果, 可以得出本研究建立的元胞自动机模型可以很好地预测材料流变应力和晶粒尺寸。

5 动态再结晶模型

5.1 晶粒尺寸影响因素

通过以上分析可知, 动态再结晶后晶粒尺寸受到应变、应变率以及温度的影响, 本研究结合有限元软件, 获得压缩试样在不同变形条件下的应变、应变率和温度的分布情况, 将不同区域的应变、应变率和温度输入到元胞自动机模型中。

上文所建立的元胞自动机模型可以直观而准确的模拟材料在变形过程中某一区域的晶粒演变情况, 但在实际生产过程中, 仅研究某一区域的晶粒组织是远远不够的, 通常还需要研究材料变形后晶粒分布, 实现对材料性能的准确把握和精确控制, 因此需要建立再结晶晶粒尺寸模型和动态再结晶百分数模型来预测材料在经过变形之后的晶粒分布。

实验方法在推导动态再结晶模型时, 区分再结晶晶粒和原始晶粒中存在误差, 结合上文所建立的元胞自动机模拟, 对原始晶粒用白色表示, 再结晶晶粒用彩色表示, 如图 9 所示, 减小实验方法在区分再结晶晶粒与原始晶粒过程中产生的误差。

同时, 实验方法在推导动态再结晶模型时, 受到实验条件的制约, 所拟合的数据有限, 尤其在应变方面, 由于热压缩实验通常都是采用固定压缩量, 导致

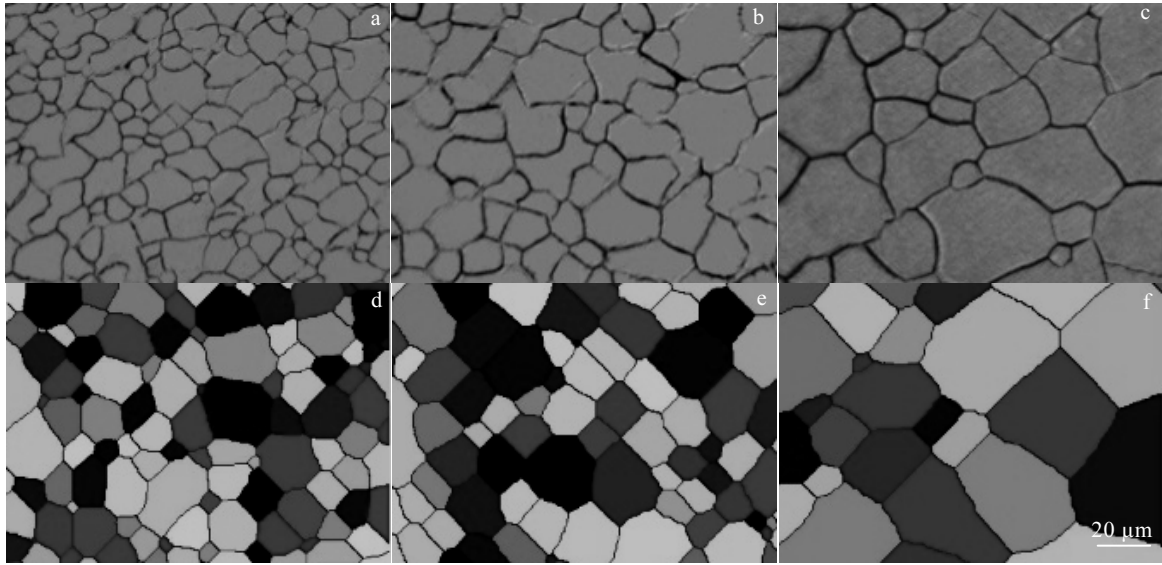


图 7 不同应变率下微观组织的实验结果和预测结果

Fig.7 Comparison of experimental (a~c) and calculated (d~f) values at different strain rates: (a, d) 0.005 s^{-1} , (b, e) 0.5 s^{-1} , and (c, f) 5 s^{-1}

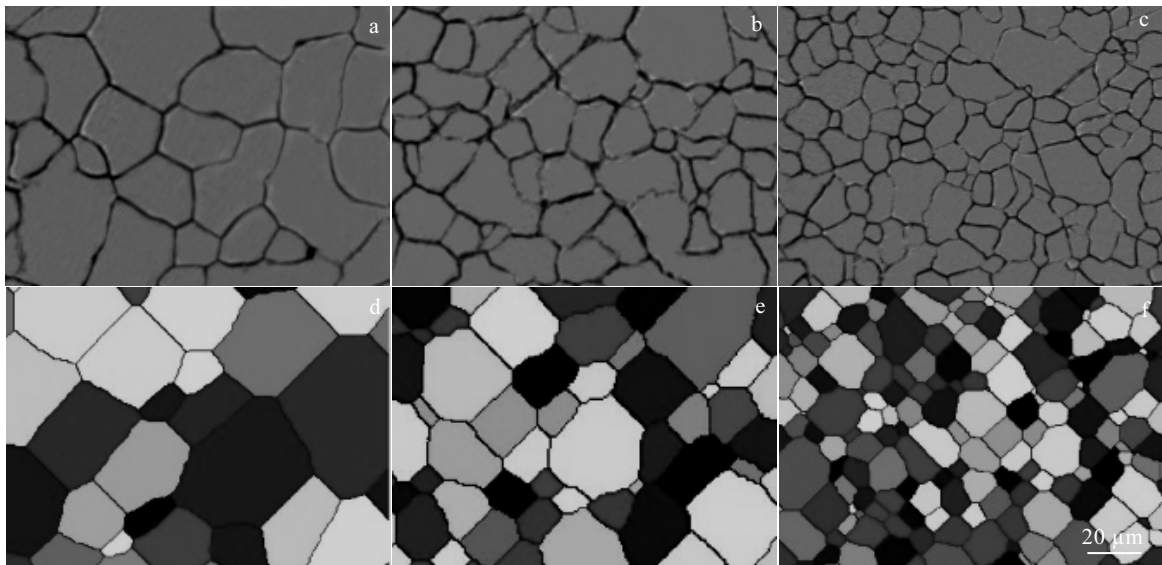


图 8 不同温度下微观组织的实验结果和预测结果

Fig.8 Comparison of experimental (a~c) and calculated (d~f) values at different temperatures: (a, d) $300\text{ }^{\circ}\text{C}$, (b, e) $400\text{ }^{\circ}\text{C}$, and (c, f) $450\text{ }^{\circ}\text{C}$

实验方法推导出的动态再结晶模型时，均忽略应变对最终晶粒的影响，造成模型误差较大，而且在应变率和温度方面，只能采用由有限温度梯度和应变率梯度得出的实验数据，导致拟合数据有限，影响模型精度，本研究结合元胞自动机模型和实验数据，可以模拟任意温度、应变率和应变下的晶粒组织变化，大大增加了所拟合的数据，提升所建模型的精度。

图 9a 是应变为 0.5，应变率为 0.005 s^{-1} ，温度为 $250\text{ }^{\circ}\text{C}$ 下的晶粒组织。图 9b 是应变为 0.2，应变率为 0.005 s^{-1} ，温度为 $250\text{ }^{\circ}\text{C}$ 下的晶粒组织。图 9c 是应变为 0.5，应变率为 0.005 s^{-1} ，温度为 $400\text{ }^{\circ}\text{C}$ 下的晶粒组织。图 9d 是应变为 0.5，应变率为 0.5 s^{-1} ，温度为 $250\text{ }^{\circ}\text{C}$ 下的晶粒组织。对比图 9a 和图 9b，发现应变对最终晶粒尺寸影响较大，根据位错密度模型可知，位错

表3 不同变形条件下晶粒尺寸的实验值和预测值

Table 3 Experimental and predicted results of grain size at different deformation condition (μm)

Deformation condition	Experimental value	Predicted value
300 °C	7.9	8.3
450 °C	17.1	18.9
0.005 s ⁻¹	21.0	22.3
5 s ⁻¹	7.1	7.6

密度与应变有着直接的关系，而临界位错密度又直接影响材料是否发生动态再结晶，因此应变与材料是否发生动态再结晶有着重要联系；对比图 9a 和图 9d，发现在应变速率较大的情况下，形成的再结晶晶粒尺寸较小，这是由于镁合金有着较低的堆垛层错能，在高应变速率下，位错没有足够的时间进行扩展和重新排列^[23]，使得镁合金发生动态回复较为困难，且在高应变速率下，形核率较大而晶界没有足够的时间发生晶界

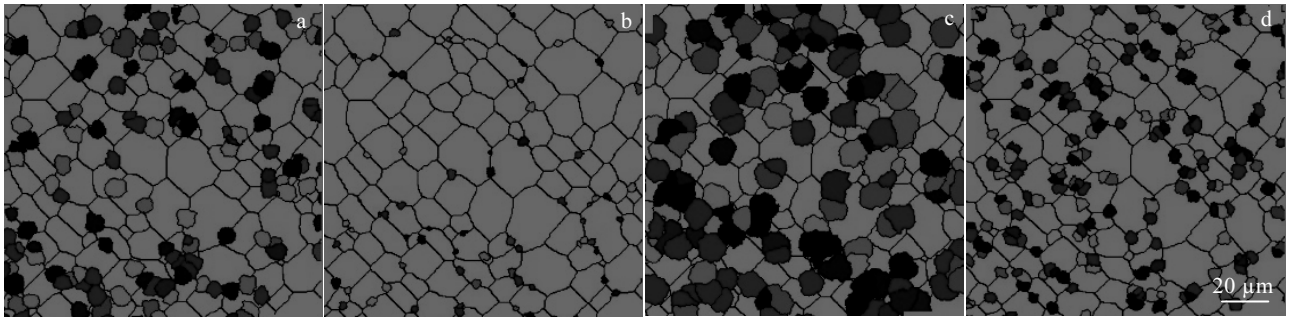


图9 不同变形条件下的元胞自动机模拟结果

Fig.9 Comparison of grain structures obtained using CA simulation under different deformation conditions: (a) $\dot{\epsilon} = 0.005 \text{ s}^{-1}$, $T = 250 \text{ }^\circ\text{C}$, $\epsilon = 0.5$; (b) $\dot{\epsilon} = 0.005 \text{ s}^{-1}$, $T = 250 \text{ }^\circ\text{C}$, $\epsilon = 0.2$; (c) $\dot{\epsilon} = 0.005 \text{ s}^{-1}$, $T = 400 \text{ }^\circ\text{C}$, $\epsilon = 0.5$; (d) $\dot{\epsilon} = 0.5 \text{ s}^{-1}$, $T = 250 \text{ }^\circ\text{C}$, $\epsilon = 0.5$

迁移，但是在应变速率较小时，形核率较小晶界有足够的时间发生晶界迁移，从而导致再结晶晶粒较大；对比图 9a 和图 9c，发现温度较高时，再结晶晶粒较大，这是因为晶界迁移率随温度的上升而变大，因此晶粒在高温下容易长大。

5.2 再结晶晶粒尺寸模型

通过以上分析可知，再结晶晶粒尺寸与温度、应变、应变速率均有关系，再结晶晶粒尺寸可以表示为：

$$d_{\text{rex}} = a\epsilon^n \dot{\epsilon}^m e^{\frac{bQ_b}{RT}} \quad (36)$$

式(36)中， d_{rex} 为再结晶晶粒尺寸， a 、 b 、 n 和 m 为常数，对式(36)左右两边求对数，得到：

$$\ln d_{\text{rex}} = \ln a + n \ln \epsilon + m \ln \dot{\epsilon} + \frac{bQ_b}{RT} \quad (37)$$

将预测出的数据带入式(37)进行线性拟合，对不同温度下的斜率值取平均值，得到 m 值。图 10 展示了应变速率为 0.005 s⁻¹时，不同温度下的再结晶晶粒尺寸，拟合得到斜率，对不同应变速率下的斜率取平均值得到 b 值。图 11 展示了温度为 250 °C，应变速率为 0.005 s⁻¹时，再结晶晶粒尺寸随应变的变化，拟合得到斜率，对不同变形情况下的斜率取平均值，得到 n 值。

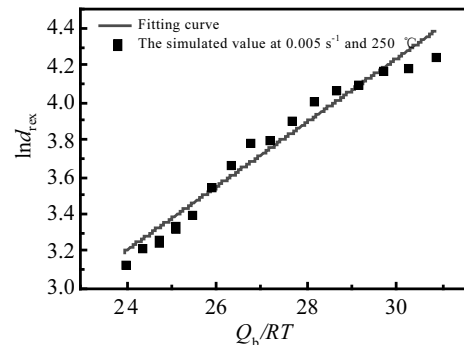


图 10 250 °C、0.005 s⁻¹时 $\ln d_{\text{rex}} - Q_b/RT$ 曲线

Fig.10 Plot of $\ln d_{\text{rex}}$ and Q_b/RT at 250 °C and 0.005 s⁻¹

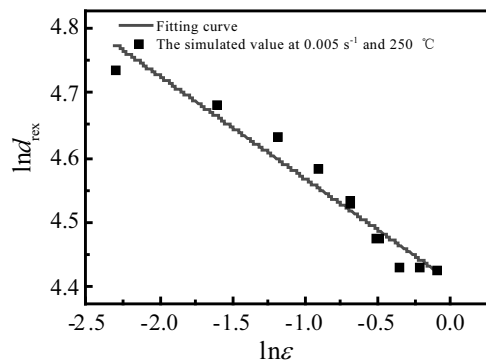


图 11 250 °C、0.005 s⁻¹时 $\ln d_{\text{rex}} - \ln \epsilon$ 曲线

Fig.11 Plot of $\ln d_{\text{rex}}$ and $\ln \epsilon$ at 250 °C and 0.005 s⁻¹

综上所述，铸态 AZ31 镁合金再结晶晶粒尺寸模型为：

$$d_{\text{rex}} = 585.95 \varepsilon^{-0.56} \dot{\varepsilon}^{-0.15} e^{-\frac{0.17Q_0}{RT}} \quad (38)$$

将铸态 AZ31 镁合金再结晶晶粒尺寸模型和本构模型导入 DEFORM 分析软件中，模拟压缩过程，可以得到铸态 AZ31 镁合金晶粒尺寸分布图，以温度为 250 °C，应变速率为 0.005 s⁻¹，压缩量 60%为例，如图 12 和图 13 所示。

圆柱试件中心区域为易变形区域，该区域变形量大、应变大、产生的再结晶晶粒多，所以晶粒细化比较明显，晶粒尺寸明显下降，两段区域属于难变形区域，没有发生动态再结晶，所以晶粒尺寸没有发生变化。

5.3 动态再结晶百分数模型

动态再结晶百分数是用来衡量材料动态再结晶的程度，根据 JMAK 理论，动态再结晶百分数可以表示为^[24]：

$$X_d = 1 - \exp \left[-k_1 \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_c}{\varepsilon_p} \right)^{k_2} \right] \quad (39)$$

式(39)中，X_d 为动态再结晶百分数，可由实验和公式(40)得出，k₁ 和 k₂ 为系数，ε_c 临界应变，ε_p 为峰值应变，临界应变和峰值应变均可由应力应变曲线得出，具体方法可参照文献[25]。

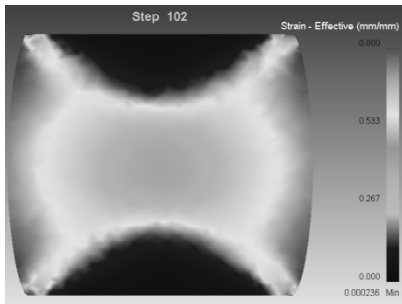


图 12 压缩过程中应变分布图

Fig.12 Strain distribution during compression

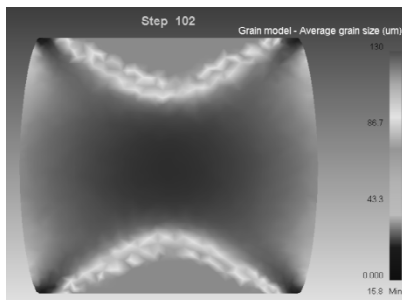


图 13 压缩过程中平均晶粒尺寸分布图

Fig.13 Average grain size distribution during compression

$$X_d = \frac{N_r}{N_c} \quad (40)$$

式(40)中，N_r 为动态再结晶晶粒数目，N_c 为总晶粒数目；结合元胞自动机模型和实验得出材料在 300 °C 时，不同应变率下的动态再结晶百分数，如图 14 所示，结合元胞自动机模型和实验得出在应变速率为 0.005 s⁻¹ 时，不同温度下的动态再结晶百分数，如图 15 所示。

由图 14 和图 15 可知，再结晶百分数增长速率随温度的升高而增大，随应变率的降低而增大，结合元胞自动机模型模拟得出的数据，对式(39)进行拟合，得到铸态 AZ31 动态再结晶百分数模型为：

$$\begin{cases} X_d = 1 - \exp \left[-0.159 \times \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_c}{\varepsilon_p} \right)^{2.114} \right] \\ \varepsilon_p = 0.029z^{0.027} \\ \varepsilon_c = 0.007z^{0.01} \end{cases} \quad (41)$$

同理，将式(41)导入分析软件中，以温度 300 °C，应变速率为 0.005 s⁻¹，压缩量 60%为例，得到铸态 AZ31 动态再结晶百分数分布图，如图 16 所示。最后，对比 DEFORM-3D 模拟结果和热压缩实验，发现基本吻合，验证其实用性。

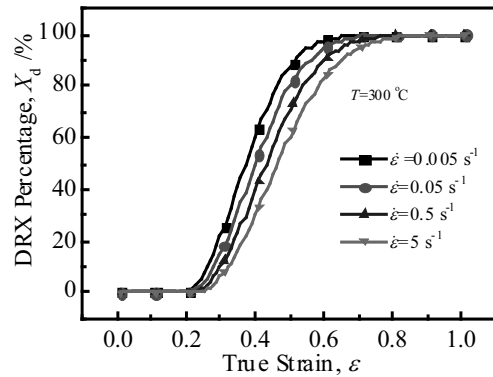


图 14 300 °C 时不同应变率下的动态再结晶百分数

Fig.14 Percentage of dynamic recrystallization at 300 °C and different strain rates

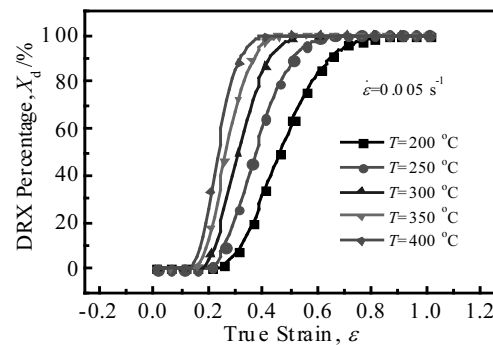


图 15 0.005 s⁻¹ 时不同温度下的动态再结晶百分数

Fig.15 Percentage of dynamic recrystallization at 0.005 s⁻¹ and different temperatures

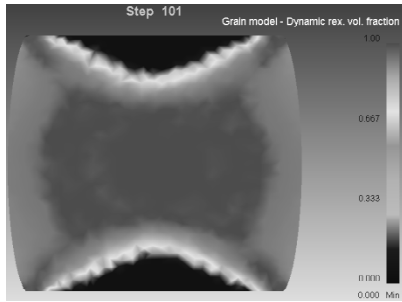


图 16 压缩过程中动态再结晶百分数分布图

Fig.16 Distribution of dynamic recrystallization percentage during compression

6 结论

1) 建立模拟组织变化的元胞自动机模型, 通过对比实验和模拟后的流变应力和晶粒尺寸, 验证元胞自动机模型的准确性。

2) 虽然应变、温度和应变率均影响最终晶粒尺寸, 但应变对最终晶粒尺寸影响最大; 在高应变率下, 镁合金形核率较大且晶界迁移缓慢, 导致晶粒变小; 在高温下, 由于晶界迁移率随温度的升高而变大, 导致晶粒变大。

3) 建立铸态 AZ31 镁合金的再结晶晶粒尺寸模型和动态再结晶百分数模型, 导入 DEFORM 有限元软件中, 得到在压缩过程中晶粒尺寸分布和动态再结晶百分数分布, 既得到局部区域的晶粒组织及整体材料晶粒分布情况。

参考文献 References

- [1] Li Miaoquan(李淼泉), Chen Shenghui(陈胜晖), Li Xiaoli(李晓丽). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2006, 35(2): 172
- [2] Liu Liufa(刘六法), Ding Hanlin(丁汉林), Kamado S(鎌土重晴) et al. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*(中国有色金属学报)[J], 2008, 18(2): 237
- [3] Liu Liufa(刘六法), Ding Hanlin(丁汉林), Kamado S(鎌土重晴) et al. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*(中国有色金属学报)[J], 2008, 18(2): 250
- [4] Goetz R, Seetharaman V. *Scr Mater*[J], 1998, 38(3): 405
- [5] Kugler G, Turk R. *Acta Mater*[J], 2004, 52: 4659
- [6] Timoshenkov A, Warczok P, Albu M et al. *Computational Materials Science*[J], 2014, 94: 85
- [7] Raabe D, Becker R C. *Modelling & Simulation in Materials Science & Engineering*[J], 2000, 8: 445
- [8] Chen F, Cui Z S, Liu J A et al. *Materials Science and Engineering A*[J], 2010, 527(21): 5539
- [9] Jin Zhanyang, Cui Zhenshan. *Materials Science and Engineering A*[J], 2010, 527(13): 3111
- [10] He Y Z, Ding H, Liu L et al. *Materials Science and Engineering A*[J], 2006, 429(1-2): 236
- [11] Liu Yanxing, Lin Y C, Li H B et al. *Materials Science and Engineering A*[J], 2015, 626: 432
- [12] Fei Chen, Ke Qi, Zhenshan Cui et al. *Computational Materials Science*[J], 2014, 83: 331
- [13] Zhang P, Yi C, Chen G et al. *Metals*[J], 2016, 6(7): 161
- [14] Yazdipour N, Davies C H J, Hodgson P D et al. *Computational Materials Science*[J], 2008, 44: 566
- [15] Hu Lijuan(胡丽娟). *Thesis for Doctorate*(博士论文)[D]. Shanghai: Shanghai Jiaotong University, 2010
- [16] Liu X, Li Luoxing, He Fengyi et al. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*[J], 2013, 23(9): 2692
- [17] Lou Y, Wu W, Li L. *Journal of Materials Engineering and Performance*[J], 2012, 21(7): 1133
- [18] Xiao Namin, Zheng Chengwu, Li Dianzhong et al. *Computational Materials Science*[J], 2008, 41: 366
- [19] Ding R, Guo Z X. *Acta Materialia*[J], 2001, 49(16): 3163
- [20] Lou Y, Wu W, Li L. *Journal of Materials Engineering and Performance*[J], 2012, 21(7): 1133
- [21] Lin Y C, Liu Yanxing, Chen Mingsong et al. *Materials and Design*[J], 2016, 99: 107
- [22] Hallberg H, Wallin M. *Computational Materials Science*[J], 2010, 49(1): 25
- [23] Jiang Dan(姜丹). *Thesis for Master*(硕士论文)[D]. Chongqing: Chongqing University, 2008
- [24] Chen X M, Lin Y C, Wen D X et al. *Materials and Design*[J], 2014, 57: 568
- [25] Solhjoos S. *Materials & Design*[J], 2010, 31(3):1360

Microstructure Model of AZ31 Magnesium Alloy Based on Cellular Automaton

Chu Zhibing^{1,2}, Zhang Duo¹, Jiang Lianyun¹, Ma Lifeng¹, Li Yugui¹, Huang Qingxue¹

(1. Engineering Research Center Heavy Machinery Ministry of Education, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030024, China)

(2. Jinan University, Guangzhou 510632, China)

Abstract: Based on the microstructure evolution of AZ31 magnesium alloy during hot compression, the recrystallization grain size model and dynamic recrystallization percentage model were established on the cellular automaton(CA) model. The dislocation density model, the critical dislocation density model, the nucleation rate model and grain growth model of magnesium alloy AZ31 were deduced by thermal compression experiments under different deformation conditions. Combining the specific evolution rules of cellular automata, the cellular automata model was established. The simulation results and accuracy of cellular automata were verified by stress-strain curves and grain size. Based on the experimental data and the JMAK theory, the recrystallization grain size model and dynamic recrystallization percentage model were deduced. By DEFORM-3D analysis software, the change of grain size distribution and dynamic recrystallization percentage distribution in deformation were obtained.

Key words: AZ31 magnesium alloy; cellular automaton model; grain size model; dynamic recrystallization percentage model

Corresponding author: Huang Qingxue, Ph. D., Professor, College of Mechanical, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, P. R. China, E-mail: 1914009646@qq.com