

基于 3D CA 的 AZ31 镁合金动态再结晶行为研究

李伟¹, 楚志兵^{1,2}, 王环珠¹, 马立峰¹, 李玉贵¹, 帅美荣¹, 苏辉¹, 薛春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 力学与建筑工程学院, 广东 广州 510632)

摘要: 建立了三维元胞自动机(3D CA)模型, 通过热压缩试验和电子背散射衍 (EBSD) 表征技术, 对 AZ31 镁合金在热变形过程中的微观组织演化规律进行可视化和定量预测。根据试验得出的真应力-应变曲线, 确定了 3D CA 模型参数在试验条件下的取值, 建立了模型参数与变形条件(应变、变形温度和应变速率)之间的关系。利用所建立的 3D CA 模型, 对 AZ31 镁合金在热变形过程中的流动行为和微观组织演化进行模拟和讨论。结果表明: 再结晶体积分数随着应变的增大而增加, 随着变形温度的增大或应变速率降低而增大, 提高应变速率或降低温度可以细化再结晶晶粒。模拟结果与实验结果吻合较好, 相对误差在 4.5%和 16.2%之间, 所建立的 3D CA 模型能够较准确地预测镁合金 AZ31 的微观组织演化。

关键词: AZ31 镁合金; 热变形; 三维元胞自动机; 动态再结晶; 微观组织演化

中图分类号: TG146.22

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2020)09-3091-08

镁合金因其密度低、比强度高和优异的导电性与导热性, 在电子、电器、航空航天和医疗等领域得到了广泛应用^[1-3]。特别是在汽车行业, 锻造 AZ31 镁合金是替代传统金属最为经济与环保的首选材料^[4]。对于镁合金而言, 其力学性能在很大程度上取决于其微观组织结构, 尤其是平均晶粒尺寸, 通过细化晶粒可显著提高其强度和延伸率^[5,6]。因此, 对镁合金微观组织演化规律的研究已经成为材料科学领域的前沿方向之一。

与传统模型相比, 元胞自动机(CA)法能够更真实、直观地模拟 DDRX 过程中的微观结构演化。此外, 在 CA 模型中, 动态再结晶的物理机制考虑得更为充分。1991 年, Hesselbarth 和 Güöbel^[7]等人首次采用元胞自动模拟了静态再结晶; Raabe^[8]等人于 1996 年模拟微观组织回复现象; Lépinoux^[9]等人于 1994 年模拟了位错演变情况。近年来, 元胞自动机持续发展: Goet 和 Seetharaman^[10]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; Jin 和 Cui^[11]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; Wang^[12]等人采用三维元胞自动机模型模拟了奥氏体晶粒生长, 得到平均晶粒尺寸与晶粒面数呈线性关系; 邓小虎^[13]等人建立了三维元胞自动机动态再结晶模型, 研究了热压缩过程中晶粒尺寸和热变形参数对再结晶过程中应力应变

曲线和再结晶动力学的影响。

目前, 通过 CA 法对 AZ31 镁合金 DRX 行为的研究还不够深入, 而采用 3D CA 对其的研究更是少之又少。其目的是通过热压缩变形实验研究 AZ31 镁合金在一定温度和应变速率范围内的动态再结晶行为。建立基于应力-应变曲线的 DRX 理论模型, 并通过 3D CA 模型来模拟 AZ31 镁合金在 DRX 期间的微观结构演化。详细讨论了 DRX 微观结构与变形参数(温度、应变和应变速率)之间的关系, 并通过 EBSD 技术对模拟结果进行了验证。

1 实验

1.1 材料与方案

采用银光镁业提供的 AZ31 镁合金棒材和管材作为坯料, 其化学成分见表 1。

将 AZ31 镁合金圆棒坯料加工成 $\Phi 8 \text{ mm} \times 12 \text{ mm}$ 的圆柱试样, 在 Gleeble-3500 热模拟试验机上, 对试样分

表 1 铸态 AZ31 镁合金化学成分

Table 1 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: 2019-12-11

基金项目: 国家重点研发计划项目(2018YFB1307902); 国家自然科学基金项目(U1710113); 中国博士后科学基金项目(2017M622903); 山西省重点研发计划重点项目(201703D111003, 201703D111002); 山西省研究生联合培养基地人才培养项目(2018JD33); 山西省研究生教育创新项目(2019SY482); 山西省高等学校优秀青年学术带头人(2019045); 山西省高等学校优秀成果培育项目(2019KJ027)

作者简介: 李伟, 男, 1994 年生, 硕士, 太原科技大学材料学院, 山西 太原 030024, 电话: 0351-2776763, E-mail: 854523935@qq.com

别在 200、250、300、350、400 °C，应变速率 0.01、0.1、1、10 s⁻¹ 下进行压缩，缩量为 30%、60%，升温速率为 5 °C/s，保温 90 s 后连续压缩变形，之后用水激冷，以保留热变形过程中的再结晶晶粒，如图 1a 所示。为了降低试样与压头之间的摩擦力对实验结果产生的影响，压缩前试样两端涂抹机油并黏贴石墨片。

将压缩试样沿平行与压缩方向的横截面切开，如图 1b 所示，区域 1 属于大变形区域，其应变基本为单轴压缩应变，区域 2 和 3 为难变形区域，其应变由于摩擦力的作用导致为三向应变，因此主要对区域 1 进行 EBSD 观察。

1.2 实验结果

图 2 为不同温度和应变速率时的真应力应变关系，是由实验得出的名义应力应变曲线按照转变公式而来，转变公式为：

$$\sigma_1 = \sigma_0(1 - \varepsilon_0) \tag{1}$$

$$\varepsilon_1 = -\ln(1 - \varepsilon_0) \tag{2}$$

式(1)和式(2)中， σ_0 、 ε_0 为由热压缩实验得出的名义应力、应变， σ_1 、 ε_1 为真应力、应变^[14]。Arrhenius 本构模型可以用下式表示：

$$\dot{\varepsilon} = AF(\sigma)\exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \tag{3}$$

$$F(\sigma) = \begin{cases} \sigma^n & (\alpha\sigma < 0.8) \\ \exp(\beta\sigma) & (\alpha\sigma > 1.2) \\ [\sinh(\alpha\sigma)]^n & (\text{all}) \end{cases} \tag{4}$$

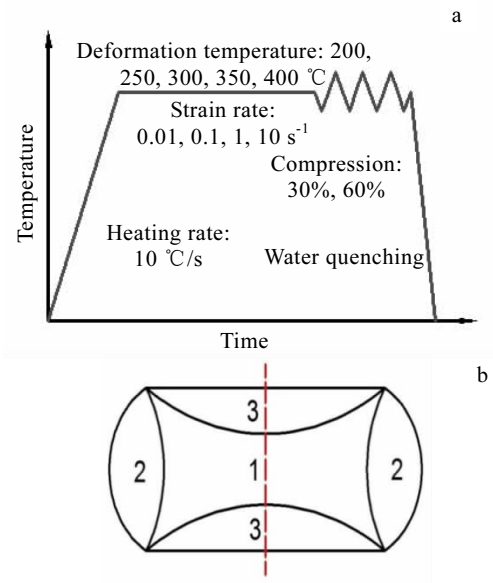


图 1 变形区域分布与压缩实验流程

Fig.1 Distribution of deformation zone (a) and compression experimental procedure (b)

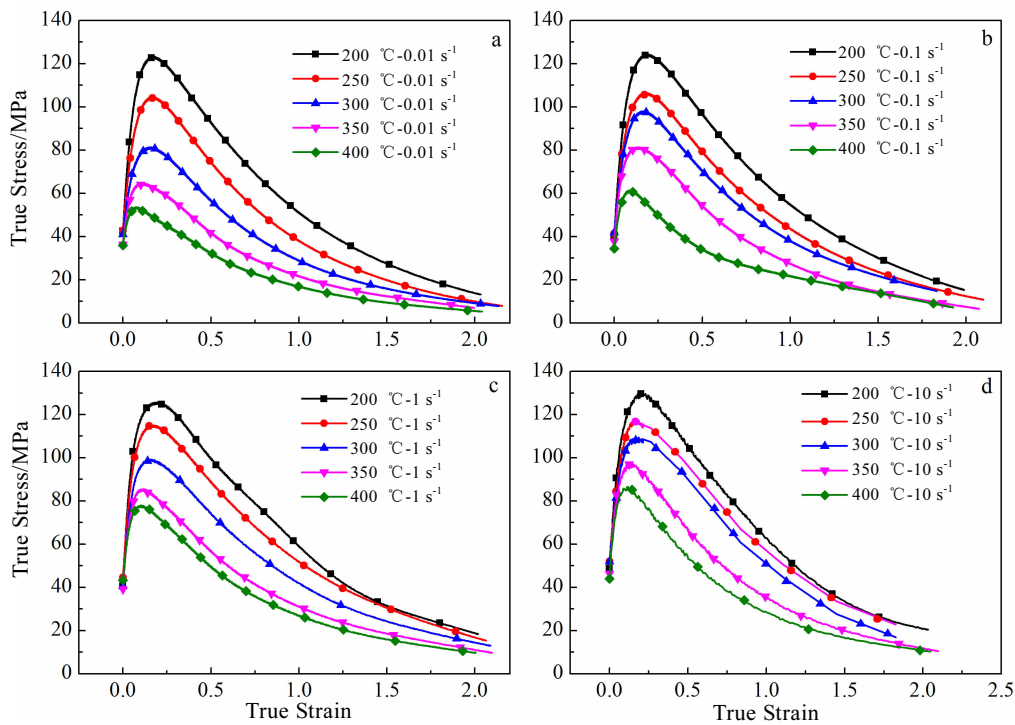


图 2 不同温度和应变速率下 AZ31 镁合金的真应力应变曲线

Fig.2 True stress-strain curves of AZ31 magnesium alloy at different temperatures and strain rates: (a) 0.01 s⁻¹, (b) 0.1 s⁻¹, (c) 1 s⁻¹, and (d) 10 s⁻¹

在式(3)和式(4)中, σ 为真应力, $\dot{\epsilon}$ 为应变率, Q 为变形激活能 ($\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$), R 为气体常数, 取 $8.314 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, T 为温度 (K), n_1 、 β 、 α 和 n 均为材料参数, 且 $\alpha=\beta/n_1$ 。

将式(4)代入式(3), 然后对式(3)两边取对数得到:

$$\ln \dot{\epsilon} = \ln A_1 - \frac{Q}{RT} + n_1 \ln \sigma \quad (5)$$

$$\ln \dot{\epsilon} = \ln A_2 - \frac{Q}{RT} + \beta \sigma \quad (6)$$

$$\ln \dot{\epsilon} = \ln A - \frac{Q}{RT} + n \ln [\sinh(\alpha \sigma)] \quad (7)$$

将不同应变率下的峰值应力代入式(5)和式(6)中, 分别绘制不同温度下的 $\ln \dot{\epsilon}-\ln \sigma$ 曲线和 $\ln \dot{\epsilon}-\sigma$ 曲线, 如图 3a 和图 3b 所示。对 $\ln \dot{\epsilon}-\ln \sigma$ 曲线和 $\ln \dot{\epsilon}-\sigma$ 曲线的斜率取平均值, 得到 n_1 值和 β 值, 分别为 12.9626 和 0.4952, 由 $\alpha=\beta/n_1$ 得出 $\alpha=0.0382$, 代入式(7)。

对式(7)两边进行微分, 得到:

$$Q = R \left\{ \frac{\partial \ln \dot{\epsilon}}{\partial \ln [\sinh(\alpha \sigma)]} \right\}_T \left\{ \frac{\partial \ln [\sinh(\alpha \sigma)]}{\partial (1/T)} \right\}_{\dot{\epsilon}} \quad (8)$$

绘制不同温度下的 $\ln \dot{\epsilon}-\ln [\sinh(\alpha \sigma)]$, 如图 4a 所示, 对其斜率取平均值, 得到 $\partial \ln \dot{\epsilon} / \partial \ln [\sinh(\alpha \sigma)]$ 的值, 就是 n 值, n 值拟合得 38.24, 绘制不同应变率下的

$\ln [\sinh(\alpha \sigma)]-1/T$, 如图 4b 所示, 对斜率取平均值, 得到 $\partial \ln [\sinh(\alpha \sigma)] / (1/T)$ 的值, 记为 M , 则 $Q = RnM$, 得出 $Q=204.58 \text{ kJ/mol}$ 。

根据式(3)和式(4), 结合双曲正弦函数, 流变应力可以写为:

$$\sigma = \frac{1}{\alpha} \ln \left\{ \left(\frac{Z}{A} \right)^{\frac{1}{n}} + \left[\left(\frac{Z}{A} \right)^{\frac{2}{n}} + 1 \right]^{\frac{1}{2}} \right\} \quad (9)$$

式(9)中, A 为材料常数, Z 为 Zener-Hollomon 参数, $Z = \dot{\epsilon} \exp(Q/RT)$ 。

综上所述, AZ31 镁合金的传统 Arrhenius 本构模型可以表达为:

$$\sigma = \frac{1}{0.009} \ln \left\{ \left(\frac{Z}{1.9478e^{35}} \right)^{\frac{1}{38.24}} + \left[\left(\frac{Z}{1.9478e^{35}} \right)^{\frac{1}{19.12}} + 1 \right]^{\frac{1}{2}} \right\} \quad (10)$$

$$Z = \dot{\epsilon} \exp(204580/RT)$$

2 仿 真

2.1 动态再结晶理论模型

2.1.1 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, 假设每个晶粒中位错密度是均匀一致的, 引入

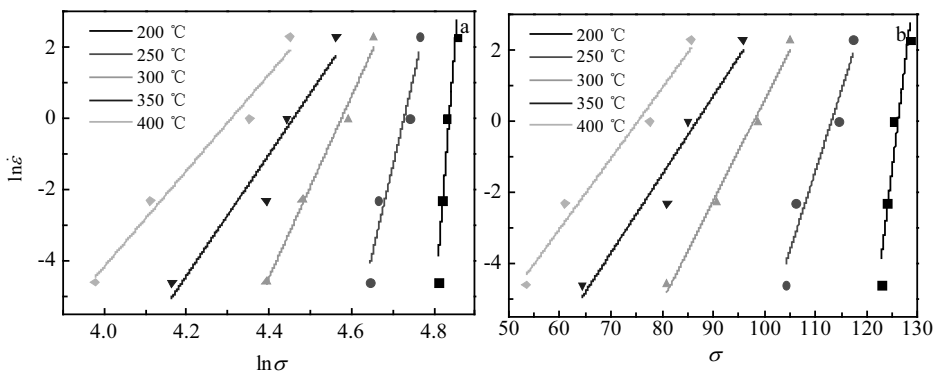


图 3 $\ln \dot{\epsilon}-\ln \sigma$ 曲线和 $\ln \dot{\epsilon}-\sigma$ 曲线

Fig.3 Curves of $\ln \dot{\epsilon}-\ln \sigma$ (a) and $\ln \dot{\epsilon}-\sigma$ (b)

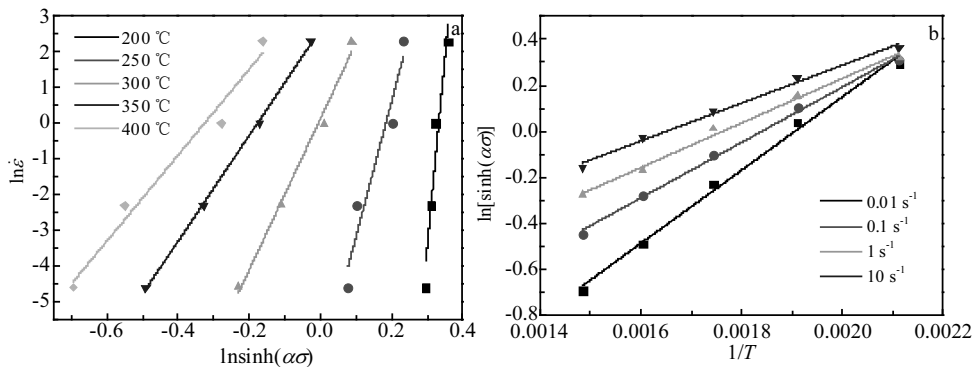


图 4 $\ln \dot{\epsilon}-\ln [\sinh(\alpha \sigma)]$ 曲线和 $\ln [\sinh(\alpha \sigma)]-1/T$ 曲线

Fig.4 Curves of $\ln \dot{\epsilon}-\ln [\sinh(\alpha \sigma)]$ (a) and $\ln [\sinh(\alpha \sigma)]-1/T$ (b)

Kocks 和 Mecking 模型来描述位错密度随应力应变变化情况^[15]:

$$\sigma = \alpha \mu b \sqrt{\bar{\rho}} \quad (11)$$

$$\frac{d\rho_{i,j}}{d\varepsilon} = k_1 \sqrt{\rho_{i,j}} - k_2 \rho_{i,j} \quad (12)$$

式(11)中, σ 为流变应力, α 为材料常数, $\bar{\rho}$ 为平均位错密度函数, μ 为剪切模量, b 为柏氏矢量, 式(12)中, ε 为应变, k_1 为位错增大系数, k_2 为位错消亡系数, $\rho_{i,j}$ 为元胞 $C_{i,j}$ 平均位错密度函数。

2.1.2 临界位错密度模型

本文仅考虑位错形核机制, 即当位错达到一定程度后, 镁合金开始发生动态再结晶, 材料内部便会会出现新的晶核。因此, 临界位错密度可以表示为^[16]:

$$\rho_c = \left(\frac{20\gamma_i \dot{\varepsilon}}{3bIM\tau^2} \right)^{1/3} \quad (13)$$

式(13)中, ρ_c 为临界位错密度, γ_i 为晶界能, 可以由式(14)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(16)得出, M 为晶界迁移率, 可由式(17)得出, τ 为单位位错线能量, 可由式(18)得出。

$$\gamma_i = \begin{cases} \gamma_m & \theta_i \geq 15^\circ \\ \gamma_m \frac{\theta_i}{\theta_m} \left[1 - \ln \left(\frac{\theta_i}{\theta_m} \right) \right] & \theta_i < 15^\circ \end{cases} \quad (14)$$

式(14)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(15)得出, θ_m 为大角度晶粒取向角, 取 15° 。

$$\gamma_m = \frac{\mu b \theta_m}{4\pi(1-\nu)} \quad (15)$$

$$l = \frac{K_1 \mu b}{\sigma} \quad (16)$$

$$M = \frac{\delta D_{0b} b}{K_2 T} \exp\left(-\frac{Q_b}{RT}\right) \quad (17)$$

$$\tau = c \mu b^2 \quad (18)$$

式(15)中, ν 为泊松比, 式(16)中, K_1 为常数, 式(17)中 M 为晶界迁移率, δ 为材料的晶界厚度, D_{0b} 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(18)中, c 为常数, 取 0.5, 将式(14)~(18)代入式(13)中, 得到式(19)。

$$\rho_c = \infty \left\{ \dot{\varepsilon} T \exp\left(\frac{Q_b}{RT}\right) \right\} \quad (19)$$

2.1.3 形核率模型

假设形核位置只出现在初始晶粒晶界和再结晶晶粒晶界, 不考虑晶内形核, 形核率是温度和应变率的函数^[17], 表示为:

$$\dot{n}(\dot{\varepsilon}, T) = C \dot{\varepsilon}^m \exp\left(-\frac{Q_{act}}{RT}\right) \quad (20)$$

式(20)中, $\dot{n}(\dot{\varepsilon}, T)$ 为形核率, C 和 m 为材料参数, 均为常数, m 取 1, 本文通过反分析法来确定 \dot{n} 。

2.1.4 晶粒长大模型

再结晶晶粒长大速度与驱动力成正比, 晶粒长大速度^[17]可以表示为:

$$V = MP \quad (21)$$

式中, 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(17)计算得出。

2.2 仿真结果

采用 CA 方法对 DRX 组织演变过程进行模拟, AZ31 镁合金的材料参数如表 2 所示。设置元胞边长为 $2 \mu\text{m}$, 模拟区域为 $0.4 \text{ mm} \times 0.4 \text{ mm} \times 0.4 \text{ mm}$, 在 CA 模型中, 该区域被划分为一个大小为 $200 \times 200 \times 200$ 网格。为了可以更加清晰的区分原始晶粒与再结晶晶粒, 用彩色区域表示动态再结晶晶粒, 白色区域表示原始晶粒, 黑色表示原始晶粒的晶界。本文所用的镁合金参数见表 2。

2.2.1 应变对微观组织的影响

应变对初始晶粒形态及再结晶晶粒百分数的影响至关重要, 图 5a~5d 为镁合金在 200°C , 应变速率为 0.01 s^{-1} , 应变分别为 0、0.16、0.35 和 0.92 时的微观晶粒组织, 对应的再结晶体积分数分别为 0%、5.6%、18.3%和 37.7%。图 5a 表示再结晶模型的原始晶粒, 原始晶粒中组织分布均匀, 较大晶粒与较小晶粒很少; 图 5b 表示再结晶形核, 当应变较小时, 彩色再结晶晶粒在晶界处形核; 图 5c、5d 表示随着应变的增加, 再结晶晶粒逐渐长大, 原始晶粒逐渐被再结晶晶粒所取

表 2 AZ31 镁合金的材料参数

Table 2 Material parameters of AZ31 magnesium alloy	
Parameter	Value
k_1	1.7928×10^9
k_2	37.53
$\delta D_{0b}/\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$	5.0×10^{-9}
K_1	10
$Q_b/\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$	134
μ/GPa	16.7
$K_2/\text{J} \cdot \text{K}^{-1}$	1.3806×10^{-23}
b/m	3.21×10^{-10}
ν	0.34
$R/\text{J} \cdot (\text{K} \cdot \text{mol})^{-1}$	8.314

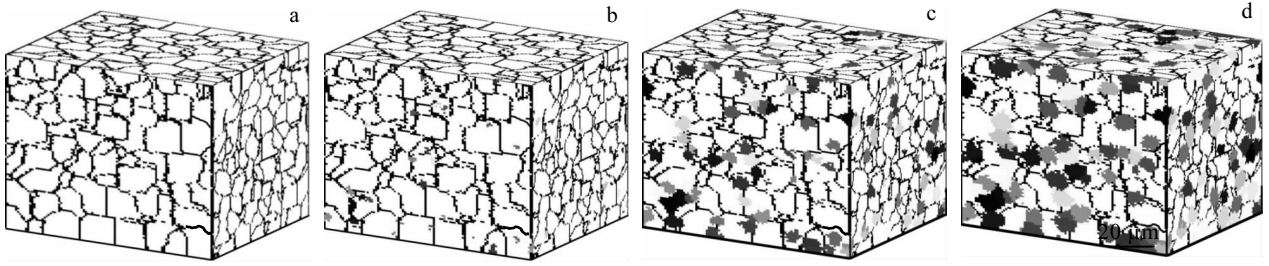


图5 温度 200 °C，应变速率 0.01 s⁻¹ 时应变对再结晶晶粒的影响

Fig.5 Effect of strain on recrystallized grains at strain rate of 0.01 s⁻¹ and temperature of 200 °C: (a) ε= 0, (b) ε= 0.16, (c) ε= 0.35, and (d) ε= 0.92

代，再结晶体积分数增加。结果表明：AZ31 镁合金在一定热变形条件下能够发生动态再结晶，但是由于内部组织具有一定的变形激活能，当变形程度满足变形所需要的激活能即宏观表示为应力达到一定程度时，才会充分发生再结晶现象。

2.2.2 应变速率对微观组织的影响

图 6a 和图 6b 是温度为 300 °C，应变为 0.35 时，应变率分别在 0.01 和 1 s⁻¹ 下的微观晶粒组织，对应的再结晶体积分数分别为 41.7%和 11.9%。当应变速率较大时，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，在高应变率下，位错没有足够的时间进行扩展和重新排列，且由于应变速率较大导致变形时间较短，在短时间内再结晶晶界没有足够时间发生迁移，因此再结晶晶粒没有充分时间进行长大。而应变较低时，则恰恰相反，原始晶粒的晶界处大量的再结晶晶粒形核并迅速长大，再结晶体积分数也较高。结果表明：在满足再结晶的条件下，较高的应变速率可以获得更为细小的再结晶晶粒，而较低的应变速率下动态再结晶体积分数则较高，但再结晶晶粒也更为粗大。

2.2.3 温度对微观组织的影响

图 7a 和图 7b 为镁合金在应变速率为 0.01 s⁻¹，应变为 0.35 时，分别在 200 和 300 °C 下的微观晶粒组织，对应的再结晶体积分数分别为 18.3%和 41.7%。温度较高时，再结晶体积分数较高，而再结晶晶粒也较大，这是因为一方面晶界迁移率随温度的上升而增大，再结晶形核率增大；另一方面，较高的温度为再结晶的形核和生长提供了能量，再结晶晶粒容易长大。结果表明：温度对再结晶晶粒大小和再结晶体积分数都有促进作用，在晶粒尺寸控制过程中，温度过高会导致晶粒组织较为粗大，而适当降低变形温度虽然会导致再结晶速度的降低，但可以获得晶粒相对细小的再结晶组织。

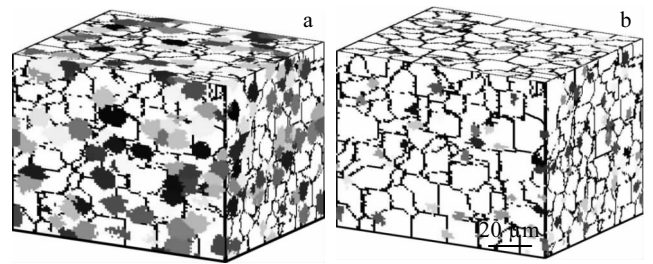


图6 温度 300 °C，应变 0.35 时不同应变率对再结晶晶粒的影响

Fig.6 Effect of different strain rates on recrystallized grains at 300 °C and strain of 0.35: (a) ε̇=0.01 s⁻¹ and (b) ε̇=1 s⁻¹

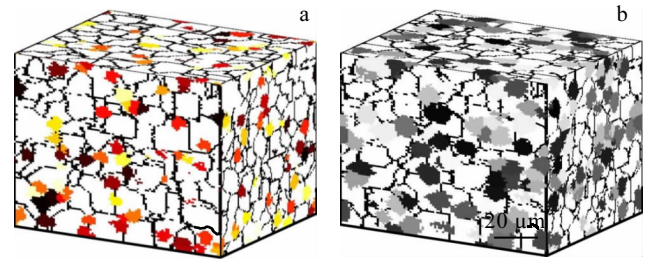


图7 应变速率 0.01 s⁻¹，应变 0.35 时不同温度对再结晶晶粒的影响

Fig.7 Effect of different temperatures on recrystallized grains at strain rate of 0.01 s⁻¹ and strain of 0.35: (a) 200 °C and (b) 300 °C

3 结果分析

CA 模型可以很好的预测材料的流变应力、晶粒尺寸和动态再结晶百分数，对比流变应力和晶粒尺寸在实验结果和预测结果之间的差别可以验证本文建立的 CA 模型的正确性。

3.1 宏观验证

流变应力可通过式(22)计算得出:

$$\begin{cases} \bar{\rho} = \frac{1}{N_c} \sum_{i=1}^{N_c} \rho_i \\ \sigma = \alpha \mu b \sqrt{\bar{\rho}} \end{cases} \quad (22)$$

式(22)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 为某一时间步中第 i 个元胞的位错密度, 由此计算处该时间步内平均位错密度, 而不同时间步对应不同的应变, 因此可以得到相应的位错密度-应变曲线, 如图 8 所示。图中展示了平均位错密度和单个元胞位错密度随应变的变化过程, 元胞 1 位错密度的跳跃体现了镁合金在热压缩过程中出现的动态再结晶现象。

结合式(22)和图 8, 得到镁合金热变形应力-应变曲线, 如图 9 所示。对比热压缩实验得出的流变应力曲线和 CA 模拟得到的流变应力, 模拟结果与实验结果基本一致, 从宏观角度验证了本文所建模型的正确性。

3.2 微观验证

图 10 为 AZ31 镁合金在不同变形条件下热压缩过程中微观组织演变的电子背散射衍射(EBSD)图像, 为了获得再结晶百分数, 需要对图像中的再结晶组织与原始组织进行区分, 在规定一个晶粒内彼此取向差 $< 2^\circ$ 的为再结晶晶粒(Recrystallized), 用蓝色表示; 晶粒取向差在

$2^\circ \sim 7.5^\circ$ 之间的为变形晶粒(Deformed), 用红色表示; 晶粒取向差在 $7.5^\circ \sim 15^\circ$ 之间的为亚晶粒(Substructured), 用黄色表示。可以发现, 几乎所有的动态再结晶晶粒核都出现在晶界处, 这与模拟过程中观察到现象相同, 说明模拟中再结晶的形核方式是正确的。

图 11a 为不同变形条件下再结晶分数的统计情况。当温度为 200°C , 应变速率为 0.01 s^{-1} , 应变分别为 0.35 和 0.92 时, 再结晶分数分别为 15.8% 和 39.5%; 当应变速率为 0.01 s^{-1} , 应变为 0.35, 温度分别为 200 和 300°C 时, 再结晶分数分别为 15.8% 和 39.2%; 当温度为 300°C , 应变为 0.35, 应变速率分别为 0.01 和 1 s^{-1} 时,

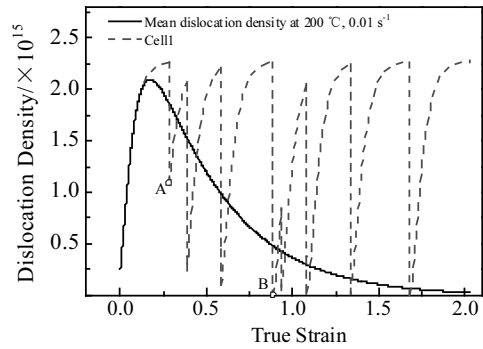


图 8 位错密度随应变变化曲线

Fig.8 Curve of dislocation density changing with strain

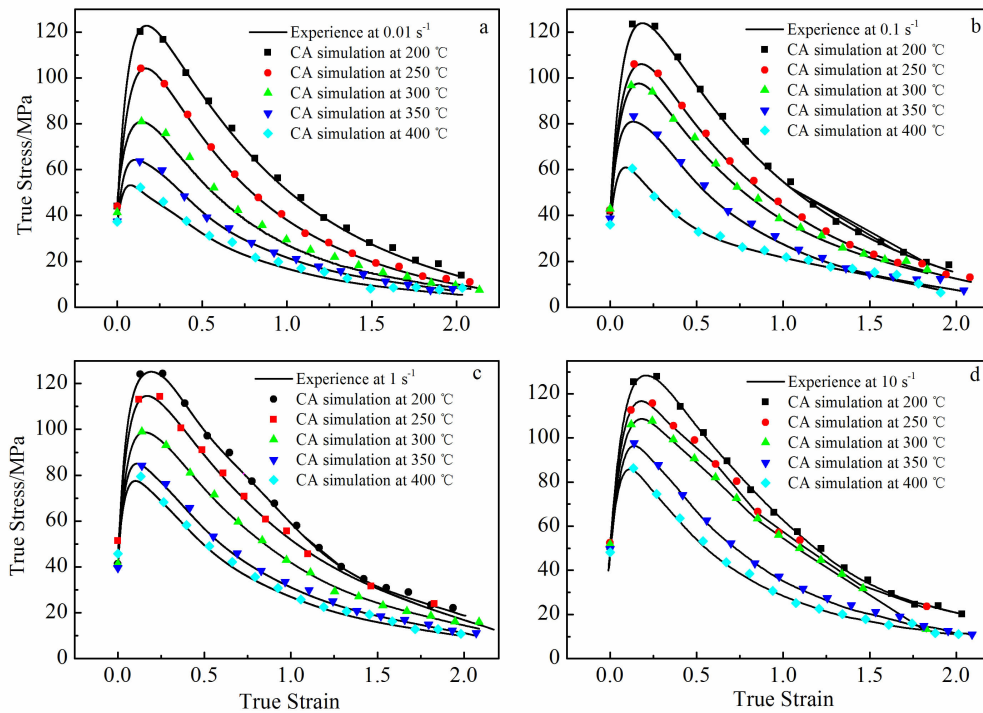


图 9 不同变形条件下 CA 模拟应力应变与实验应力应变的对比

Fig.9 Comparison of stress-strain between experiment and cellular automata simulation under different deformation conditions:

(a) 0.01 s^{-1} , (b) 0.1 s^{-1} , (c) 1 s^{-1} , and (d) 10 s^{-1}

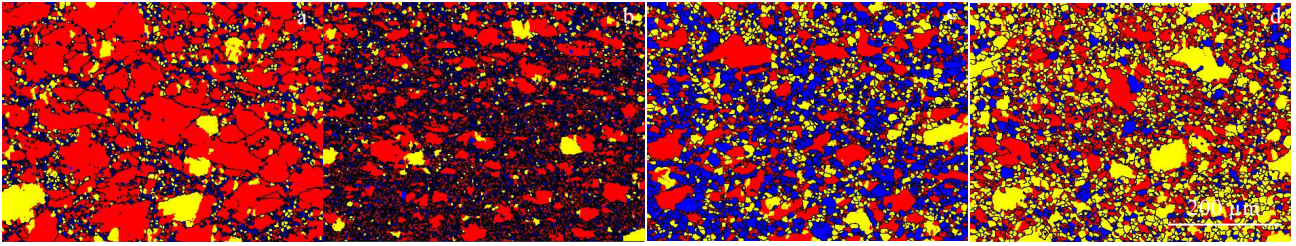


图 10 不同变形条件下再结晶晶粒分布情况

Fig.10 Recrystallization grain distribution under different deformation conditions: (a) 0.01 s⁻¹, (b) 0.1 s⁻¹, (c) 1 s⁻¹, and (d) 10 s⁻¹

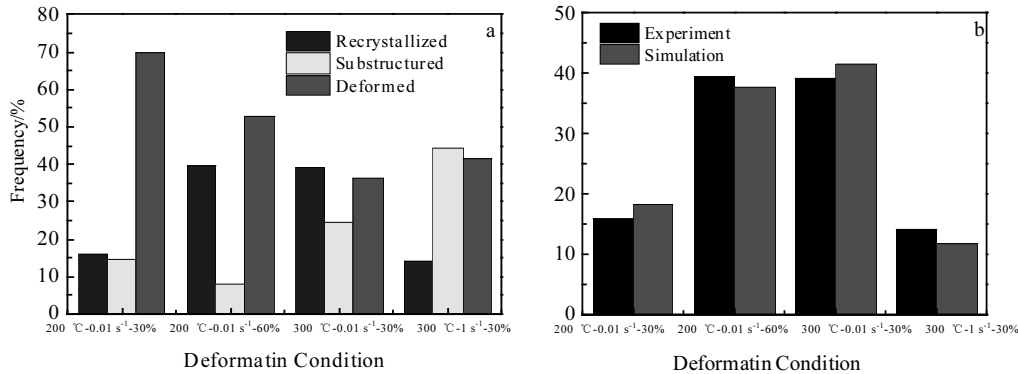


图 11 再结晶百分数分布情况

Fig.11 Recrystallization percentage distribution: (a) experimental results under different deformation conditions and (b) comparison of experimental and simulated results

再结晶分数分别为 39.2%和 14.2%；实验结果与模拟结果吻合较好，即再结晶体积分数随着应变的增大而增加，随着变形温度的升高或应变速率降低而增大。

图 11b 为模拟和实验得到的再结晶百分数对比结果，对其进行计算分析可到，模拟结果与实验结果相对误差值在 4.5%~16.2%之间。进一步分析可得，存在误差的原因主要有：模拟中为了模拟不同晶粒的取向，模型对不同的晶粒设置了不同的取向数，但取向数的大小只能使得模拟结果进一步接近于实验结果并不能完全与实验结果相同；而 EBSD 表征技术测量再结晶百分数的比例是通过规定亚结构取向差其周围晶粒取向差，通过比较、计算对其进行数字化定量表示，因此与人为设定参数有一定关系，对其结果存在些许误差。

4 结 论

1) AZ31 镁合金的流动应力对变形速率和变形温度有很强的依赖性。应变速率的增大和变形温度的降低都能促进流动应力的增大。因此，AZ31 镁合金的 Arrhenius 本构模型可以表达为：

$$\sigma = \frac{1}{0.009} \ln \left\{ \left(\frac{Z}{1.9478e^{35}} \right)^{\frac{1}{38.24}} + \left[\left(\frac{Z}{1.9478e^{35}} \right)^{\frac{1}{19.12}} + 1 \right] \right\}$$

$$Z = \dot{\epsilon} \exp(204580 / RT)$$

2) 建立了包含位错密度模型、临界位错密度模型、形核率模型和再结晶晶粒长大模型的 3D CA 模型，利用所建立的模型对不同温度、应变和应变速率下的再结晶微观组织演化及其再结晶分数进行较好的定量预测，揭示了再结晶晶粒形核及其生长的规律。

3) 通过热压缩试验和 EBSD 技术对热变形过程中真应力应变曲线与再结晶晶粒特征表征，其相对误差值在 4.5%~16.2%之间，模拟结果与实验结果吻合较好。因此，仿真结果可以为控制 AZ31 镁合金在热变形过程中的组织和性能提供理论参考。

参考文献 References

[1] Cheng Y Q, Chen Z H. *Advanced Materials Research*[J], 2011, 314-316: 1121

[2] Fernández, José-Luis, Forder J *et al. Acta Biomaterialia*[J], 2010, 6(5): 1792

[3] Jahedi M, McWilliams B A, Moy P *et al. Acta Materialia*[J],

- 2017, 131: 221
- [4] Chen M S, Yuan W Q, Li H B *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2017, 136: 163
- [5] Asgari H, Odeshi A G, Szpunar J A *et al.* *Materials Characterization*[J], 2015, 106: 359
- [6] Lin Y C, Liu Z H. *Materials Science and Engineering A*[J], 2013, 573: 234
- [7] Hesselbarth H W, Göbel I R. *Acta Metallurgica Et Materialia* [J], 1991, 39(9): 2135
- [8] Raabe D. *Computational Materials Science: The Simulation of Materials, Microstructures and Properties*[M]. Wiley-VCH, 1998
- [9] Gerland M, Mendez J, J Lépinoux *et al.* *Materials Science & Engineering A*[J], 1993, 164(1-2): 226
- [10] Goetz R L, Seetharaman V. *Scripta Materialia*[J], 1998, 38(3): 405
- [11] Jin Z, Cui Z. *Materials Science & Engineering A*[J], 2010, 527(13-14): 3111
- [12] Wang M, Zhou J, Yin Y *et al.* *Metallurgical & Materials Transactions B*[J], 2017, 48(5): 1
- [13] Deng Xiaohu(邓小虎), Zhang Liwen(张立文), Lu Yu(卢瑜) *et al.* *Metal Heat Treatment(金属热处理)*[J], 2009, 34 (4): 96
- [14] Liu Y X, Lin Y C, Li H B *et al.* *Materials Science & Engineering A*[J], 2015, 626: 432
- [15] Ding R, Guo Z X. *Acta Materialia*[J], 2001, 49(16): 3163
- [16] Yazdipour N, Hodgson P D, Madej L *et al.* *Journal of Applied Mathematics & Computational Mechanics*[J], 2008, 13(4): 117
- [17] Lou Y, Wu W, Li L. *Journal of Materials Engineering & Performance*[J], 2012, 21(7): 1133

Dynamic Recrystallization Behavior of AZ31 Magnesium Alloy Based on 3D CA

Li Wei¹, Chu Zhibing^{1,2}, Wang Huanzhu¹, Ma Lifeng¹, Li Yugui¹, Shuai Meirong¹, Su Hui¹, Xue Chun¹

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

(2. School of Mechanics and Civil Engineering, Jinan University, Guangzhou 510632, China)

Abstract: A three-dimensional cellular automata (3D CA) model was established to visualize and quantitatively predict the microstructural evolution of AZ31 magnesium alloy during hot deformation by thermal compression test and electronic backscatter characterization (EBSD). According to the true stress-strain curve obtained from the test, the values of the parameters of the 3D CA model under the test conditions were determined, and the relationship between the parameters of the model and the deformation conditions (strain, deformation temperature and strain rate) was established. The flow behavior and microstructure evolution of AZ31 magnesium alloy during hot deformation were simulated and discussed by using the established 3D CA model. The results show that the recrystallization integral increases with the increase of strain, and increases with the increase of deformation temperature or the decrease of strain rate. Raising strain rate or decreasing temperature can refine recrystallized grains. The simulation results are in good agreement with the experimental results. The relative error is between 4.5% and 16.2%. The 3D CA model can accurately predict the microstructure evolution of AZ31 magnesium alloy.

Key words: AZ31 magnesium alloy; thermal deformation; 3D cellular automata; dynamic recrystallization; microstructure evolution

Corresponding author: Chu Zhibing, Ph. D., Professor, School of Materials Science and Engineering, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030024, P. R. China, E-mail: piegen@163.com