

TC21 钛合金动态再结晶行为的元胞自动机模拟

孙越, 孙勇, 杨勇, 袁超, 凌云汉

(中国机械总院集团北京机电研究所有限公司, 北京 100083)

摘要: 为研究热加工工艺不同变形参数对 TC21 钛合金塑性成形过程中微观组织的影响, 利用 Gleeble-3500 型热模拟试验机进行等温恒应变速率热压试验, 研究了 TC21 钛合金在不同变形条件下的热变形行为; 并以 TC21 钛合金在热压缩过程中微观组织演变为基础, 通过对 TC21 钛合金的位错密度模型、再结晶形核和晶粒长大模型的推导, 建立了元胞自动机模型, 并基于元胞自动机模型对 TC21 钛合金 β 单相区变形过程中的动态再结晶行为进行了模拟和验证。结果表明: 该合金的流变应力随着温度的降低和应变速率的升高而增大; 结合元胞自动机模拟结果分析得, 在 β 单相区内该合金动态再结晶体积分数与变形温度成正比, 而与应变速率成反比。

关键词: TC21 钛合金; 热变形; 元胞自动机模型; 动态再结晶; 晶粒尺寸模型

中图分类号: TG146.23

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2023)09-3139-08

具有低密度、高比强度、耐高温和耐腐蚀性等优点的钛及钛合金作为关键结构材料被广泛应用于航天航空、军工和医疗等领域中^[1-2]。其中, TC21 钛合金是一种 $\alpha+\beta$ 钛合金, 由于其具有强度高、断裂韧性高、裂纹扩展速率较低以及优越的耐损伤性能等特点^[3], 常被用于制造航天航空和军工领域各种类型的结构锻件和其他重要部件。

在实际生产中, 热加工是钛合金获得理想的微观组织和优异力学性能的方法之一^[4]。通过研究钛合金材料在热加工塑性变形中的机制, 有助于理解钛合金材料微观组织演变的规律, 进而定向调控其微观组织达到优化钛合金力学性能的目的。但是由于热加工过程中塑性变形条件的不同, 导致微观组织产生的动态再结晶 (dynamic recrystallization, DRX) 和动态回复程度有所差异。于是人们通常采用实验方法研究不同变形条件下钛合金微观组织演变的规律和再结晶行为来确定合适的热加工参数。虽然这种方法易操作, 但是存在周期普遍较长, 成本较高等问题。随着集成计算材料工程 (integrated computational materials engineering, ICME) 在塑性成形领域的迅速发展, 计算材料学为低成本、高准确性预测钛合金在热加工变形中的微观组织演变提供了新思路^[5]。其中, 元胞自动机 (cellular automata, CA) 法是一种通过应用元胞网络的简单规则来模拟复杂系统的动力学模型, 近年来常被用于模拟材料

的动态再结晶行为。例如, 卢瑜^[6]等基于改进动态再结晶二维元胞自动机模型模拟了纯铜的动态再结晶行为; 楚志兵等人^[7]结合有限元法和元胞自动机法研究了镁合金的动态再结晶行为; 李伟等人^[8]基于热力学转换机制和能量迁移原理基于元胞自动机模型对镁合金三维晶粒长大进行了模拟; 韩栋等人^[9]基于有限元软件通过元胞自动机模型模拟了 TA15 钛合金累积叠轧后组织的动态球化过程, 但是目前人们对 TC21 钛合金微观组织演变的模拟仍然有限, 尤其是对不同热加工参数下动态再结晶行为的研究。

本研究通过调整热压缩试验的变形参数, 研究不同变形参数对 TC21 钛合金微观组织演变的影响; 基于元胞自动机 (CA) 法建立 TC21 钛合金 β 单相区动态再结晶动力学模型; 结合组织观察, 验证并且预测不同热变形参数对 TC21 钛合金动态再结晶行为的影响规律, 旨在为 TC21 钛合金的组织调控提供科学依据。

1 实验

本工作研究的 TC21 钛合金相变点在 950 °C, 其成分为 Ti-6Al-2Zr-2Sn-3Mo-1Cr-2Nb, 其化学成分见表 1。

基于 Gleeble-3500 热模拟机进行热压缩试验, 试验条件为恒应变速率等温压缩。压缩试样直径为 8 mm, 高度为 13 mm。升温速率为 10 °C/s, 到达预定

收稿日期: 2023-02-20

基金项目: 国家重点研发计划 (2022YFB3706904)

作者简介: 孙越, 男, 1997 年生, 硕士生, 中国机械总院集团北京机电研究所有限公司, 北京 100083, E-mail: 578347945@qq.com

表 1 TC21 钛合金化学成分

Table 1 Chemical composition of TC21 titanium alloy (ω/%)

Si	Cr	Ni	Mo	Nb	Al	Sn	Zr	Ti
0.084	1.56	0.0071	2.86	1.97	6.44	2.06	2.16	Bal.

温度后保温 3 min 使试样均匀受热，之后开始压缩，变形程度为 60%。压缩结束后采用气冷方式进行冷却，冷却速率为 40 °C/s。变形温度选取为 830、860、890、920、950、980、1010 °C，应变速率为 0.01、0.1、1、10 s⁻¹。实验步骤示意图如图 1 所示，压缩前将热电偶焊接在试样侧面的中间，这样可以实现温度的实时控制。并且需要将钼芯片放置在样品的上下表面，以减少试样与测试器压头的摩擦。实验开始前需将试验机抽真空。

热压缩试验结束后，将试样沿着压缩方向切开，进行打磨抛光与腐蚀，得到试样的金相组织。之后在光学显微镜（OM）下对处理后的试样进行观察。图 2a 为 TC21 钛合金在变形温度 980 °C 时，未变形的原始组织图。图 2b 为经过元胞自动模拟得到的初始晶粒组织。

2 实验结果

基于热压缩试验数据绘制 TC21 钛合金真应力-应变曲线，图 3 为 TC21 钛合金在 0.01、0.1、1、10 s⁻¹ 变形速率下不同变形温度的真应力-应变曲线。如图所示，在同一应变速率下，TC21 钛合金的流变应力随着变形温度的升高而减小。在同一变形温度下，TC21 钛合金的流变应力随着应变速率的升高而增大。在压缩变形开始阶段，随着应变的增加，试样的流动应力迅速上升至最高点，但随着应变的继续增加，流动应力逐渐减小并趋于稳定。这种行为是由于合金在高温下变形，随着变形的进行导致位错数量增加，并减少了位错滑移的阻碍。

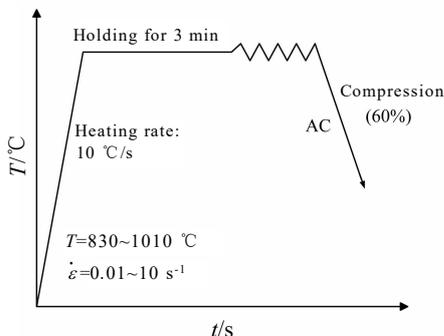


图 1 热压缩试验步骤示意图

Fig.1 Schematic diagram of hot compression process

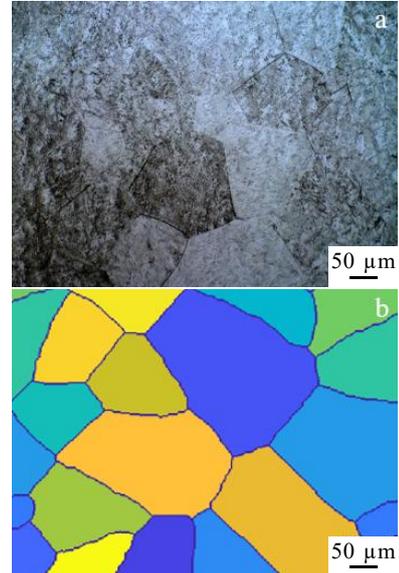


图 2 TC21 钛合金在 980 °C 未变形的初始组织

Fig.2 Undeformed initial microstructure of TC21 titanium alloy at 980 °C: (a) OM microstructure and (b) initial grain structure obtained by CA simulation

当位错密度达到临界水平时，合金发生动态回复或动态再结晶，导致位错的重组和消除，细胞壁整合成亚晶粒，亚晶粒合并，导致流动应力逐渐降低并最终达到稳定。

3 CA 模型的建立

3.1 动态再结晶动力学模型

动态再结晶行为的发生取决于位错的密度。在热变形过程中，当合金的位错产生并达到一定程度，即当变形程度大于临界应变时，DRX 晶粒就会在晶界附近形核并生长。通过 Arrhenius 模型描述动态再结晶的临界应变与峰值应变之间的关系^[10]，如式（1）所示：

$$\epsilon_c = a\epsilon_p \tag{1}$$

式中， ϵ_c 为动态再结晶临界应变、 ϵ_p 为动态再结晶峰值应变，其中 $a=0.83$ ，即

$$\epsilon_c = 0.83\epsilon_p \tag{2}$$

峰值应变模型，如式(3)所示：

$$\epsilon_p = A \dot{\epsilon}^B \exp(Q/RT) \tag{3}$$

$$Z = \dot{\epsilon} \exp(Q/RT) \tag{4}$$

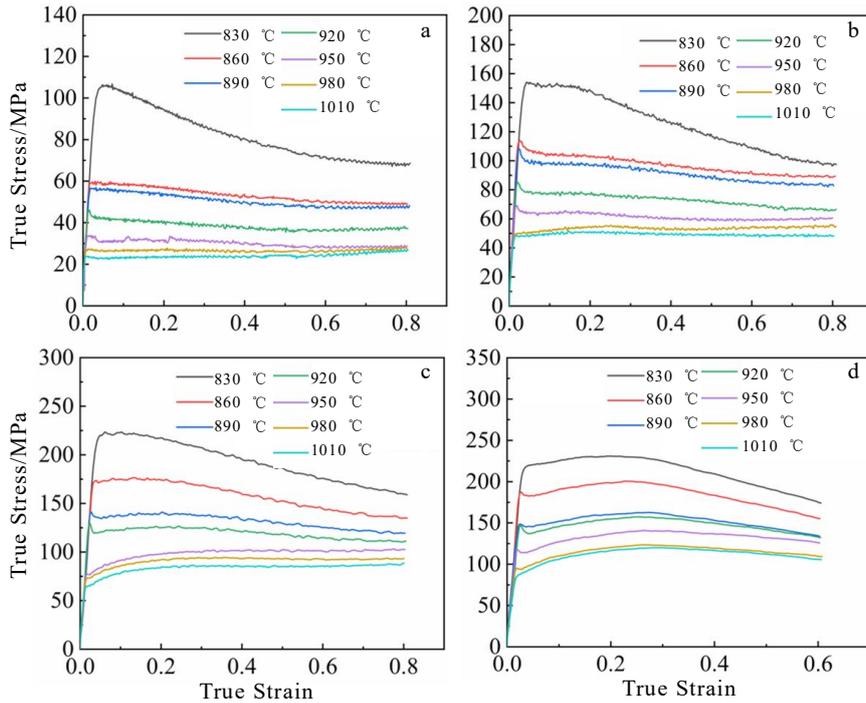


图 3 不同温度下 TC21 钛合金的真应力-应变曲线

Fig.3 True stress-strain curves of TC21 titanium alloy at different temperatures: (a) 0.01 s⁻¹, (b) 0.1 s⁻¹, (c) 1 s⁻¹, and (d) 10 s⁻¹

峰值应变基于温度补偿应变速率因子 Z 参数来表示^[11], 其中 Q 为热变形激活能, R 为气体常数。 Q 取值 258 600 J/mol, R 取值 8.314。拟合 $\ln \varepsilon_p$ 与 $\ln Z$ 参数曲线, 如图 4 所示, 计算求得峰值应变模型为:

$$\varepsilon_p = 3.2334 \times 10^{-4} Z^{0.13391} \quad (5)$$

基于 JMAK 方程^[12]建立再结晶体积分数的演变模型:

$$X_{DRX} = 1 - \exp \left[-\beta_d \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_c}{\varepsilon_p} \right)^{k_d} \right] \quad \varepsilon \geq \varepsilon_c \quad (6)$$

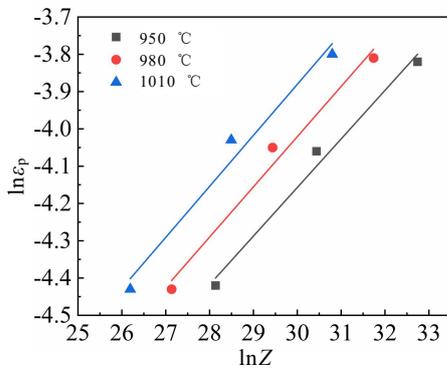


图 4 TC21 钛合金 $\ln \varepsilon_p$ 与 $\ln Z$ 关系曲线

Fig.4 Relationships between $\ln \varepsilon_p$ and $\ln Z$ of TC21 titanium alloy at different temperatures

式中, X_{DRX} 为动态再结晶体积分数, β_d 和 k_d 均为常数, 对式(6)等式求自然对数, 得:

$$\ln(1 - X_{DRX}) = -\beta_d \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_c}{\varepsilon_p} \right)^{k_d} \quad \varepsilon \geq \varepsilon_c \quad (7)$$

对式(7)两边再次求自然对数, 得:

$$\ln[-\ln(1 - X_{DRX})] = \ln(\beta_d) + k_d \ln \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_c}{\varepsilon_p} \right) \quad \varepsilon \geq \varepsilon_c \quad (8)$$

通过 Sellars 数学模型求解动态再结晶体积分数^[13], 如式(9)所示:

$$X_{DRX} = \frac{\sigma_c - \sigma}{\sigma_c - \sigma_s} \quad (9)$$

式(9)中, σ_c 为临界应力值, σ_s 为稳态应力值。

将不同变形条件下的 X_{DRX} 及 ε_p 的值代入式(8)并绘制 $\ln[-\ln(1 - X_{DRX})] - \ln[(\varepsilon - \varepsilon_c)/\varepsilon_p]$ 关系曲线, 如图 5, 求得 β_d 、 k_d 的值。

计算求得 $k_d = 1.432$, $\beta_d = 0.1236$ 将数值代入式(6)中, 则 TC21 钛合金动态再结晶体积分数表达式为:

$$X_{DRX} = 1 - \exp \left[-0.1236 \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_c}{\varepsilon_p} \right)^{1.432} \right] \quad (10)$$

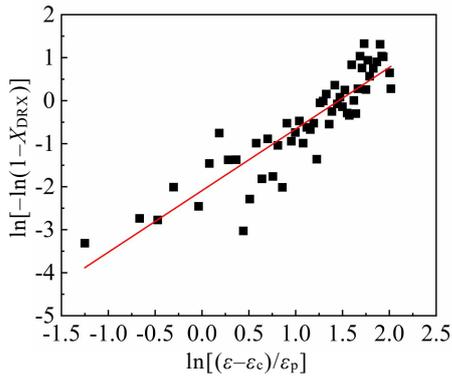


图 5 ln[-ln(1-X_{DRX})]与 ln[(ε-ε_c)/ε_p]的关系曲线

Fig.5 Relationship between ln[-ln(1-X_{DRX})] and ln[(ε-ε_c)/ε_p]

3.2 位错密度模型

位错密度的演变是决定材料强度、延展性和疲劳行为的重要因素。在塑性变形过程中，位错的产生并相互作用生成位错网格，导致位错密度增加。加工硬化和动态软化行为会影响材料位错密度的演变。本研究基于 *K-M* 唯象模型建立位错密度模型^[14]，如式(11)所示：

$$\frac{d\rho}{d\varepsilon} = k_1\sqrt{\rho} - k_2\rho \quad (11)$$

式中， $k_1\sqrt{\rho}$ 表示加工硬化， $k_2\rho$ 表示动态软化。对式(11)左右积分，得到位错密度随应变的变化表达式(12)：

$$\rho = \left(\frac{k_1}{k_2} - \frac{k_1}{k_2} e^{-\frac{k_2}{2}g} + \sqrt{\rho_0} e^{-\frac{k_2}{2}g} \right)^2 \quad (12)$$

式中， k_1 、 k_2 由式(13)、式(14)表示：

$$k_1 = 2\theta/(\alpha_1 Gb) \quad (13)$$

$$k_2 = 2\theta/\sigma_s \quad (14)$$

式中， G 为剪切模量， σ_s 为稳态应力， b 是伯格矢量， α_1 是位错密度相关系数，其中 $\alpha_1=0.5$ ，取值 $\theta=0.69$ ；因此，高温流变应力 σ 与晶粒的平均位错密度的关系^[15]可由式(15)表示：

$$\sigma = \alpha_1 Gb \sqrt{\bar{\rho}} \quad (15)$$

式中， $\bar{\rho}$ 是平均位错密度，其值与所有元胞的位错密度有关，其关系式如下：

$$\bar{\rho} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \rho_i \quad (16)$$

式中， N 是元胞空间的晶粒数。

3.3 动态再结晶形核模型

动态再结晶形核是指材料在塑性变形过程中形成新晶粒的过程，这一过程伴随着位错密度的降低

和材料微观结构的改变。动态再结晶形核速率受温度、应变速率、晶粒尺寸等因素的影响，根据 Roberts 等^[16]的研究：

$$\dot{n}(\dot{\varepsilon}, \dot{T}) = C \dot{\varepsilon}^m \exp(-Q_{act}/RT) \quad (17)$$

式中， C 、 m 均为常数， Q_{act} 表示形核所需的激活能， R 为气体常数。

临界位错密度^[17]为：

$$\rho_c = \left(\frac{20\gamma\dot{\varepsilon}}{3bIM\tau^2} \right)^{1/3} \quad (18)$$

式中， M 为晶界迁移率， γ 为晶界能量， τ 为线位错能。

材料在高温热变形过程中，晶界迁移率与应力成线性关系^[18]，晶界迁移会为晶粒长大提供驱动力，根据 Nernst-Einstein 方程得式(19)^[19]：

$$v = MF \quad (19)$$

式中， F 为晶界迁移驱动力， M 是晶界迁移率，其中 M 表达式^[20]为：

$$M = M_0 \exp(-Q_b)/(k_B T) \quad (20)$$

式中， Q_b 是晶界迁移的激活能， k_B 是玻尔兹曼常数。

根据 Gibbs-Thomson 公式可知^[21]，晶界迁移的驱动力 F 由下式所示：

$$F = \gamma k = \gamma/R \quad (21)$$

式中， γ 表示单位面积上的晶界自由能， R 为曲率半径。

$$\gamma_i = \begin{cases} \gamma_m \theta_i / \theta_m [\ln(\theta_i / \theta_m)] & \theta_i < \theta_m \\ \gamma_m & \theta_i \geq \theta_m \end{cases} \quad (22)$$

式中， θ_i 为第 i 个再结晶晶粒与临近晶粒的取向差； θ_m 为定值，表示大角度晶界取向值，取值为 15° ； γ_m 为晶界能，其表达式为：

$$\gamma_m = Gb\theta_m/4\pi(1-\nu) \quad (23)$$

式中， ν 为泊松比， $\nu=0.38$ 。

4 元胞自动机模拟结果与分析

4.1 模拟条件

元胞自动机模型可以很好地预测材料晶粒尺寸和动态再结晶分数，但在模拟晶粒形状方面存在一定局限性，模拟中使用的演化规则通常旨在促进晶粒在各个方向上的均匀生长，因此模拟中所有晶粒生长为等轴晶粒的形式进行。本研究基于元胞自动机模型对 TC21 钛合金高温热变形过程中的晶粒尺寸变化及动态再结晶行为进行预测，揭示合金微观组织演变规律。其中元胞自动机模拟流程如图 6 所示。

TC21 钛合金动态再结晶元胞自动机模拟材料参数如表 2 所示^[22], 每个元胞赋予 4 个状态变量和 2 个结构变量。其中, 4 个状态变量分别为: (1) 位错密度变量: 用位错密度变量反映位错密度随应变的变化情况, 用于表征再结晶特性; (2) 晶粒取向变量: 用 1~180 间随机整数来区分不同的晶粒, 不同的取向值呈现出不同的晶粒。产生新晶粒时, 将赋予母晶粒一个新的取向值; (3) 晶界变量: 规定元胞位置; (4) 再结晶次数。2 个结构变量分别为: (1) 晶粒颜色变量: 采用不同颜色来对不同晶粒进行区分; (2) 晶粒编号变量: 统计再结晶平均晶粒尺寸。

转变规则: 元胞如果发生动态再结晶行为, 需满足: (1) 元胞位错密度大于临界值; (2) 元胞位于晶界上, 且存在已结晶形核的相邻元胞; (3) 满足以上 2 个条件之后, 该元胞的形核率为 $P=m/4$, 其中 m 为邻居中具有相同位向的元胞个数, 4 位邻居总数。

4.2 结果分析

动态再结晶行为是影响钛合金组织和力学性能的重要因素。动态再结晶行为受变形温度、应变速率、初始晶粒尺寸、化学成分以及晶粒取向等的影响。将不同变形温度以及应变速率输入到元胞自动机模型中, 可以直观并准确的模拟材料在变形过程

表 2 TC21 钛合金的材料参数

Table 2 Material parameters of TC21 titanium alloy^[22]

Parameter	Value
$Q_{act}/kJ \cdot mol^{-1}$	153
$b/\times 10^{-10} m$	2.86
G/MPa	20 500
$\delta D_b/\times 10^{-17} m^3 \cdot s^{-1}$	5.4
$\theta_m/(^\circ)$	15
ν	0.38
$R/J \cdot (K \cdot mol)^{-1}$	8.314

中的晶粒演化情况。图 7 是变形速率为 $0.01 s^{-1}$, 压缩量为 60%时在温度 950、980、1010 °C 下微观组织的实验结果和预测结果。表 3 为不同变形参数下晶粒尺寸的实验结果与模拟结果, 元胞自动机模型晶粒尺寸预测度约为 95%。结合实验结果分析得, TC21 钛合金晶粒尺寸随着温度的升高而减小。在高温变形过程中, 温度的升高提供了更多的热能, 晶粒边界迁移速率增加, 导致晶粒尺寸减小。图 8 是变形温度为 980 °C, 压缩量为 60%时, 应变速率分别为 0.1 和 $0.01 s^{-1}$ 压缩后微观组织的实验结果和预测结果。结合实验结果与模拟结果分析得, 随着应变速率的增加, 变形过程中会产生大量的变形热, 即单位时间内产生的热量增多, 散失减少, 因此变形体内温升高, 从而导致晶粒尺寸增大。

图 9a 是温度为 950 °C, 应变速率为 $0.1 s^{-1}$ 下的元胞自动机模拟结果。图 9b 是温度为 950 °C, 应变速率为 $0.01 s^{-1}$ 下的元胞自动机模拟结果。图 9c 是温度为 980 °C, 应变速率为 $0.01 s^{-1}$ 的元胞自动机模拟结果。对比分析得变形温度和应变速率都对再结晶行为有显著影响, 随着变形温度的升高, 增加的热能通过降低再结晶所需的活化能并促进晶粒生长来促进再结晶过程, 动态再结晶晶粒尺寸的增大, 导致动态再结晶体积分数增加; 随着应变速率的增加, 会抑制再结晶行为保留原始组织, 在较低的应变速率下, 再结晶过程时间增加, 从而产生较大的动态再结晶晶粒尺寸, 导致动态再结晶体积分数减小。

可以得出, 变形温度和应变速率对 TC21 钛合金平均晶粒尺寸和动态再结晶体积分数都有显著的影响。当变形温度一定时, 随着应变速率的增加, 平均晶粒尺寸增大, 动态再结晶体积分数降低。当应变速率一定时, 随着温度的增加, 平均晶粒尺寸减小, 动态再结晶体积分数增大。因此, 可以通过提高变形温度和降低应变速率来获得细小均匀的微观组织, 进而提高强度和硬度。根据实际需求合理地选取热变形加工参数变形温度和应变速率的值来调控组织和性能对于工业生产来说有重要的意义。

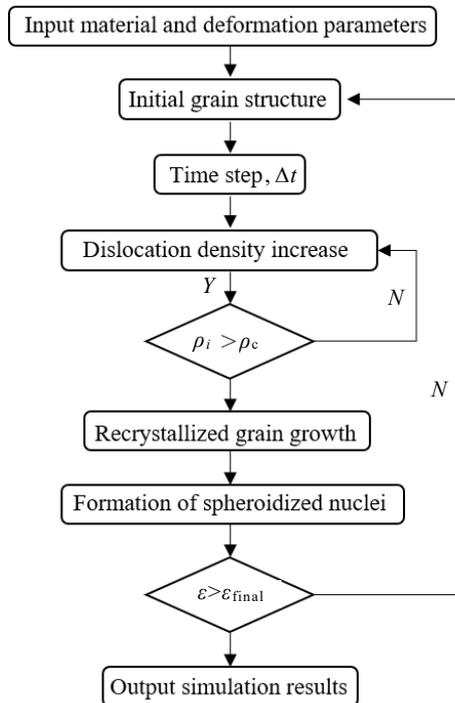


图 6 元胞自动机模拟流程图

Fig.6 Program flowchart of CA model

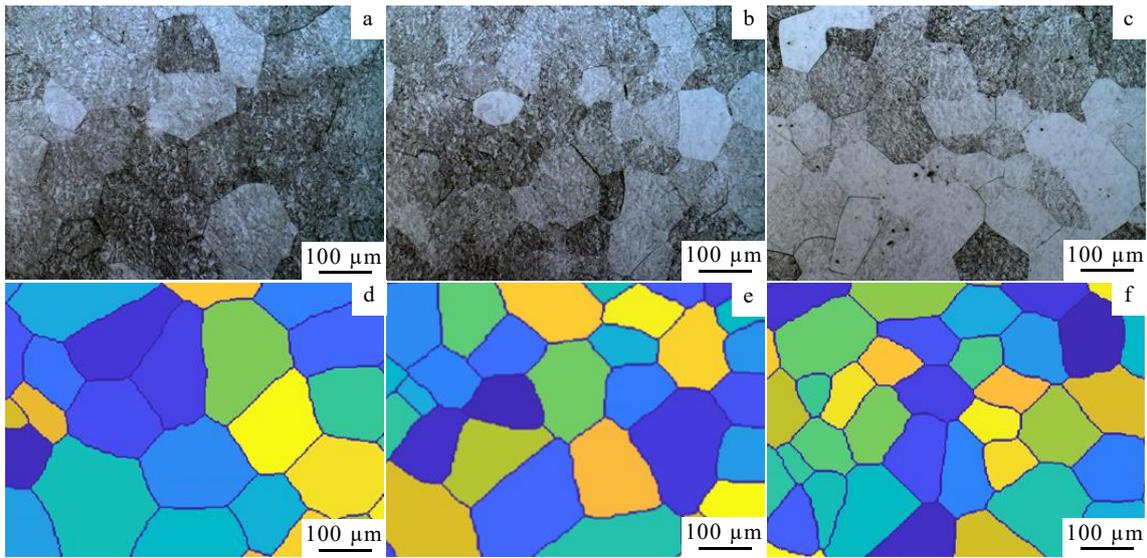


图 7 TC21 合金在 950、980、1010 °C 时的微观组织和预测结果

Fig.7 Microstructures (a-c) and predicted results (d-f) of TC21 alloy at 950 °C (a, d), 980 °C (b, e), and 1010 °C (c, f)

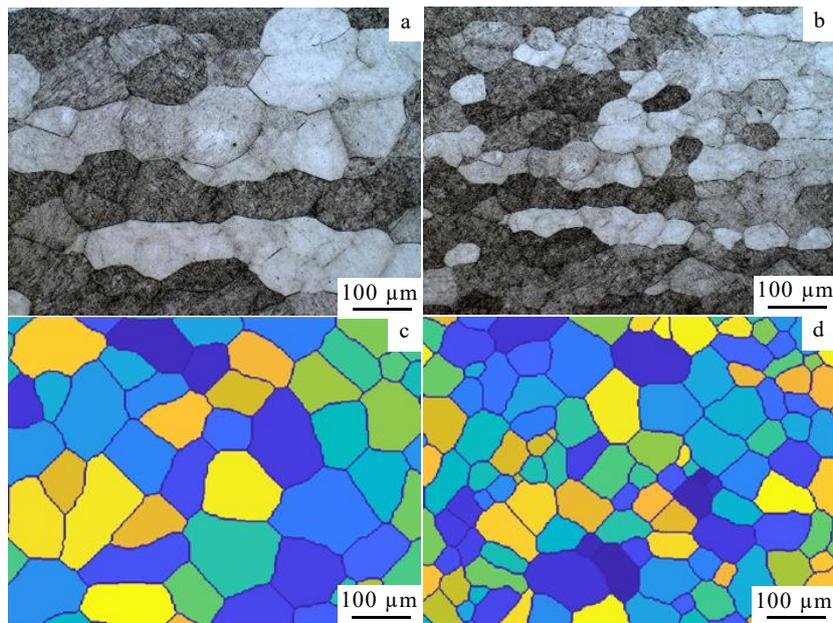


图 8 TC21 合金在不同应变速率时的微观组织和预测结果

Fig.8 Microstructures (a-b) and predicted results (c-d) of TC21 alloy at strain rates of 0.1 s^{-1} (a, c) and 0.01 s^{-1} (b, d)

表 3 不同变形条件下晶粒尺寸的实验值与预测值

Table 3 Experimental and predicted results of grain size under different deformation conditions (μm)

Deformation condition		Experimental	Predicted
Temperature/ $^{\circ}\text{C}$	Strain rate/ s^{-1}		
950	-	210	223
980	-	172	184
1010	-	152	160
-	0.1	158	162
-	0.01	96	99

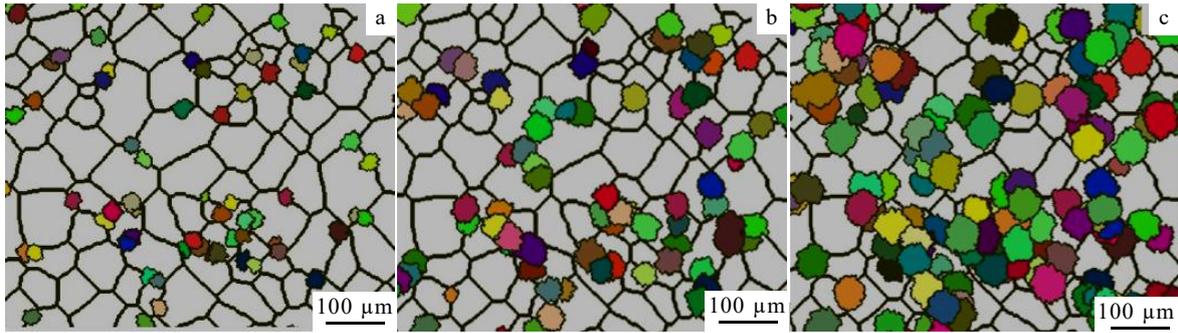


图9 不同变形条件下元胞自动机的模拟结果

Fig.9 Simulation results of cellular automata under different deformation conditions: (a) $T=950\text{ }^{\circ}\text{C}$, $\dot{\varepsilon}=0.1\text{ s}^{-1}$; (b) $T=950\text{ }^{\circ}\text{C}$, $\dot{\varepsilon}=0.01\text{ s}^{-1}$; (c) $T=980\text{ }^{\circ}\text{C}$, $\dot{\varepsilon}=0.01\text{ s}^{-1}$

5 结论

1) 研究了 TC21 钛合金的热压缩变形行为, 发现 TC21 钛合金的流变应力随变形温度降低和应变速率升高而增大。

2) 建立了 TC21 钛合金 β 单相区动态再结晶动力学预测模型:

$$\begin{cases} X_{\text{DRX}} = 0 & (\varepsilon < \varepsilon_c) \\ X_{\text{DRX}} = 1 - \exp\left[-0.1236\left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_c}{\varepsilon_p}\right)^{1.432}\right] & (\varepsilon \geq \varepsilon_c) \\ \varepsilon_p = 3.2334 \times 10^{-4} Z^{0.13391} \end{cases}$$

为 TC21 钛合金的动态再结晶的模拟提供了新方法。

3) 利用构建的元胞自动机模型对不同变形温度及应变速率下合金晶粒尺寸进行了预测, 验证了该模型的准确性。

4) 合金动态再结晶体积分数与变形温度成正比, 而与应变速率成反比。

参考文献 References

- [1] Fu Yanyan(付艳艳), Song Yueqing(宋月清), Hui Songxiao(惠松骁) *et al. Chinese Journal of Rare Metals*(稀有金属)[J], 2006(6): 850
- [2] Jin Hexi(金和喜), Wei Kexiang(魏克湘), Li Jianming(李建明) *et al. The Chinese Journal of Nonferrous Metals*(中国有色金属学报)[J], 2015, 25(2): 280
- [3] Zhao Yongqing(赵永庆), Ge Peng(葛鹏). *Journal of Aeronautical Materials*(航空材料学报)[J], 2014(4): 51
- [4] Shan Debin(单德彬), Shi Ke(史科), Xu Wenchen(徐文臣) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2009, 38(4): 632
- [5] Zhan Mei(詹梅), Lei Yudong(雷煜东), Zheng Zebang(郑泽邦). *China Mechanical Engineering*(中国机械工程)[J], 2020(22): 2663
- [6] Lu Yu(卢瑜), Zhang Liwen(张立文), Deng Xiaohu(邓小虎) *et al. Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2008, 44(3): 292
- [7] Chu Zhibing(楚志兵), Zhang Duo(张铎), Jiang Lianyun(江连运) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2018, 47(3): 884
- [8] Li Wei(李伟), Chu Zhibing(楚志兵), Wang Huanzhu(王环珠) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2020, 49(12): 4088
- [9] Han Dong(韩栋), Zhao Yongqing(赵永庆), Zeng Weidong(曾卫东) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2021, 50(10): 3437
- [10] Afshari E, Serajzadeh S. *Journal of Materials Engineering and Performance*[J], 2012, 21(8): 1553
- [11] Wang Zhe(王哲), Wang Xinnan(王新南), Shang Guoqiang(商国强) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2018, 47(3): 810
- [12] Chen X M, Lin Y C, Wen D X *et al. Materials and Design*[J], 2014, 57: 568
- [12] Sellars C M, Whiteman J A. *Metal Science*[J], 1979, 13(3-4): 187
- [13] Mecking H, Kocks U F. *Acta Metallurgica*[J], 1981, 29(11): 1865
- [14] Li H W, Sun X X, Yang H. *International Journal of Plasticity*[J], 2016, 87: 154
- [15] Kurtz R J, Abe K, Chernov V M *et al. Journal of Nuclear Materials*[J], 2004, 329-333: 47
- [16] Roberts W, Ahlblom B. *Acta Metallurgica*[J], 1978, 26(5): 801

- [17] Yang Jieren(杨劫人), Zhang Liteng(张立腾), Gao Zitong (高子彤) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2021, 50(2): 699
- [18] Bai X M, Zhang Y, Tonks M R. *Acta Materialia*[J], 2015, 85: 95
- [19] Ning Y Q, Wang T, Fu M W *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2015, 642: 187
- [20] Sheikh-Ali A D. *Scripta Materialia*[J], 2007, 56(12): 1043
- [21] Ding R, Guo Z X. *Computation Materials Science*[J], 2002, 23(1-4): 2009

Cellular Automata Simulation of Dynamic Recrystallization Behavior of TC21 Titanium Alloy

Sun Yue, Sun Yong, Yang Yong, Yuan Chao, Ling Yunhan

(Beijing Research Institute of Mechanical & Electrical Technology Co., Ltd, CAM, Beijing 100083, China)

Abstract: In order to study the effect of different deformation parameters of thermal processing on the microstructure of TC21 titanium alloy during plastic forming, isothermal constant strain rate thermal compression experiments were performed on the thermal simulation testing machine, and the thermal deformation behavior of TC21 titanium alloy under different deformation conditions was studied. Based on the microstructure evolution of TC21 titanium alloy during thermal compression, a cellular automata was established by the derivation of dislocation density model, recrystallization nucleation and grain growth model of TC21 titanium alloy. Based on the cellular automaton model, the dynamic recrystallization behavior TC21 titanium alloy during deformation in the β single-phase region was simulated and verified. The results show that the flow stress of the alloy increases with the decrease in temperature and the increase in strain rate; according to the analysis of cellular automata simulation results, the dynamic recrystallization volume fraction of the alloy is positively proportional to the deformation temperature and inversely proportional to the strain rate.

Key words: TC21 titanium alloy; thermal deformation; cellular automata model; dynamic recrystallization; grain size model

Corresponding author: Sun Yong, Ph. D., Professor, Beijing Research Institute of Mechanical & Electrical Technology Co., Ltd, CAM, Beijing 100083, P. R. China, Tel: 0086-10-82415149, E-mail: sun_yong_89@163.com