

doi:10.3969/j.issn.1005-3026.2016.10.008

三叉晶界优先形核模型及其动态再结晶仿真

关小军^{1,2}, 付杰^{1,2}

(1. 山东大学材料液固结构演变与加工教育部重点实验室, 山东 济南 250061; 2. 山东大学材料科学与工程学院, 山东 济南 250061)

摘 要: 为了实现三叉晶界处动态再结晶优先形核, 基于元胞自动机的摩尔邻居, 提出一个辨识三叉晶界处元胞的方法和三叉晶界优先形核模型, 通过 HPS485wf 钢动态再结晶过程的元胞自动机仿真检验了该模型的合理性和应用效果. 研究表明, 所提方法和优先形核模型可有效用于动态再结晶过程仿真; 与传统模型相比, 其仿真结果不仅保持了由传统模型仿真得到的动态再结晶的多轮次演变过程、组织形貌特征、“S型”的动态再结晶面积分数-应变曲线和全程流变应力模拟精度(0.1%), 而且能够在所辨识三叉晶界处实现优先形核, 更真实地反映了动态再结晶的形核现象.

关键词: 动态再结晶; 三叉晶界; 优先形核; 元胞自动机; 仿真

中图分类号: TG 111.7 文献标志码: A 文章编号: 1005-3026(2016)10-1403-04

Preferential Nucleation Model at Triple Junction and Its Dynamic Recrystallization Simulation

GUAN Xiao-jun^{1,2}, FU Jie^{1,2}

(1. Key Laboratory for Liquid-Solid Structural Evolution and Processing of Materials (Ministry of Education), Shandong University, Jinan 250061, China; 2. School of Materials Science and Engineering, Shandong University, Jinan 250061, China. Corresponding author: GUAN Xiao-jun, E-mail: xjguan@sdu.edu.cn)

Abstract: In order to perform preferential nucleation at triple junction during dynamic recrystallization (DRX), a method of identifying the cell existed at triple junction and a preferential nucleation model at triple junction were proposed on the basis of the Moore neighbor of cellular automata. The rationality and application of the model were proved by simulating the DRX process of HPS485wf steel. The results showed that the proposed method and model have the ability to simulate the DRX more effectively. Compared with those from the traditional models, the results from the present model don't only maintain the evolution of multiple rounds, microstructural feature, the "S-type" curve between area fraction and strain, the simulated flow stress with an accuracy of 0.1% in the process of DRX, and also reveal the preferential nucleation at triple junction, which would provide a more realistic DRX nucleation.

Key words: dynamic recrystallization; triple junction; preferential nucleation; cellular automata; simulation

材料热变形时,三叉晶界处比普通晶界处的应力集中程度更大、动态再结晶形核优势更强^[1-3].但是,迄今为止,单相金属材料动态再结晶模拟研究中均采用晶界形核假设而忽略了三叉晶界优先形核现象^[4-9].为了解决这一问题,本文提出了基于元胞自动机(CA)的二维正方形几何模型的摩尔邻居来辨识三叉晶界处元胞的方法及其相应的优先形核模型,以HPS485wf钢为研究

对象,结合前期所建的瞬态形核率和回复阶段位错密度优化的动态再结晶CA模型^[9-10],探讨了这一方法及其形核模型的合理性.

1 三叉晶界优先形核模型的建立

1.1 三叉晶界处元胞的识别

在CA模拟中,晶粒为取向数相同的元胞集

合. 若某一元胞与其邻居取向不同, 则认为此元胞位于晶界处. 若某一元胞中任意相邻的三个元胞中有两个取向不同且也与其取向不同, 则认为此元胞位于三叉晶界处.

图 1 为位于三叉晶界处的元胞识别图. 可见, 对于二维正方形 CA 空间的摩尔型邻居而言, 若元胞 C5 的取向数 S_{Q5} 与其邻居元胞 i 的取向数 S_{Qi} 满足下列 16 组布尔逻辑关系中任意一组时, 即

- (a) $S_{Q5} \neq S_{Q2} \wedge S_{Q2} \neq S_{Q1} \wedge S_{Q1} \neq S_{Q4} \wedge S_{Q5} = S_{Q4}$;
- (b) $S_{Q5} \neq S_{Q4} \wedge S_{Q5} \neq S_{Q2} \wedge S_{Q4} \neq S_{Q1} \wedge S_{Q1} = S_{Q2}$;
- (c) $S_{Q5} \neq S_{Q4} \wedge S_{Q4} \neq S_{Q1} \wedge S_{Q1} \neq S_{Q2} \wedge S_{Q5} = S_{Q2}$;
- (d) $S_{Q5} \neq S_{Q4} \wedge S_{Q5} \neq S_{Q2} \wedge S_{Q1} \neq S_{Q2} \wedge S_{Q1} = S_{Q4}$;
- (e) $S_{Q5} \neq S_{Q2} \wedge S_{Q2} \neq S_{Q3} \wedge S_{Q3} \neq S_{Q6} \wedge S_{Q5} = S_{Q6}$;

- (f) $S_{Q5} \neq S_{Q6} \wedge S_{Q5} \neq S_{Q2} \wedge S_{Q3} \neq S_{Q6} \wedge S_{Q2} = S_{Q3}$;
- (g) $S_{Q5} \neq S_{Q2} \wedge S_{Q2} \neq S_{Q3} \wedge S_{Q5} \neq S_{Q6} \wedge S_{Q3} = S_{Q6}$;
- (h) $S_{Q5} \neq S_{Q6} \wedge S_{Q2} \neq S_{Q3} \wedge S_{Q3} \neq S_{Q6} \wedge S_{Q5} = S_{Q2}$;
- (i) $S_{Q5} \neq S_{Q4} \wedge S_{Q5} \neq S_{Q8} \wedge S_{Q4} \neq S_{Q7} \wedge S_{Q7} = S_{Q8}$;
- (j) $S_{Q5} \neq S_{Q8} \wedge S_{Q7} \neq S_{Q8} \wedge S_{Q4} \neq S_{Q7} \wedge S_{Q5} = S_{Q4}$;
- (k) $S_{Q5} \neq S_{Q4} \wedge S_{Q7} \neq S_{Q8} \wedge S_{Q4} \neq S_{Q7} \wedge S_{Q5} = S_{Q8}$;
- (l) $S_{Q5} \neq S_{Q8} \wedge S_{Q5} \neq S_{Q4} \wedge S_{Q7} \neq S_{Q8} \wedge S_{Q4} = S_{Q7}$;
- (m) $S_{Q5} \neq S_{Q8} \wedge S_{Q5} \neq S_{Q6} \wedge S_{Q6} \neq S_{Q9} \wedge S_{Q8} = S_{Q9}$;
- (n) $S_{Q5} \neq S_{Q8} \wedge S_{Q8} \neq S_{Q9} \wedge S_{Q6} \neq S_{Q9} \wedge S_{Q5} = S_{Q6}$;
- (o) $S_{Q5} \neq S_{Q8} \wedge S_{Q5} \neq S_{Q6} \wedge S_{Q8} \neq S_{Q9} \wedge S_{Q6} = S_{Q9}$;
- (p) $S_{Q5} \neq S_{Q6} \wedge S_{Q6} \neq S_{Q9} \wedge S_{Q6} \neq S_{Q9} \wedge S_{Q5} = S_{Q8}$.

则认为元胞 C5 位于三叉晶界处.

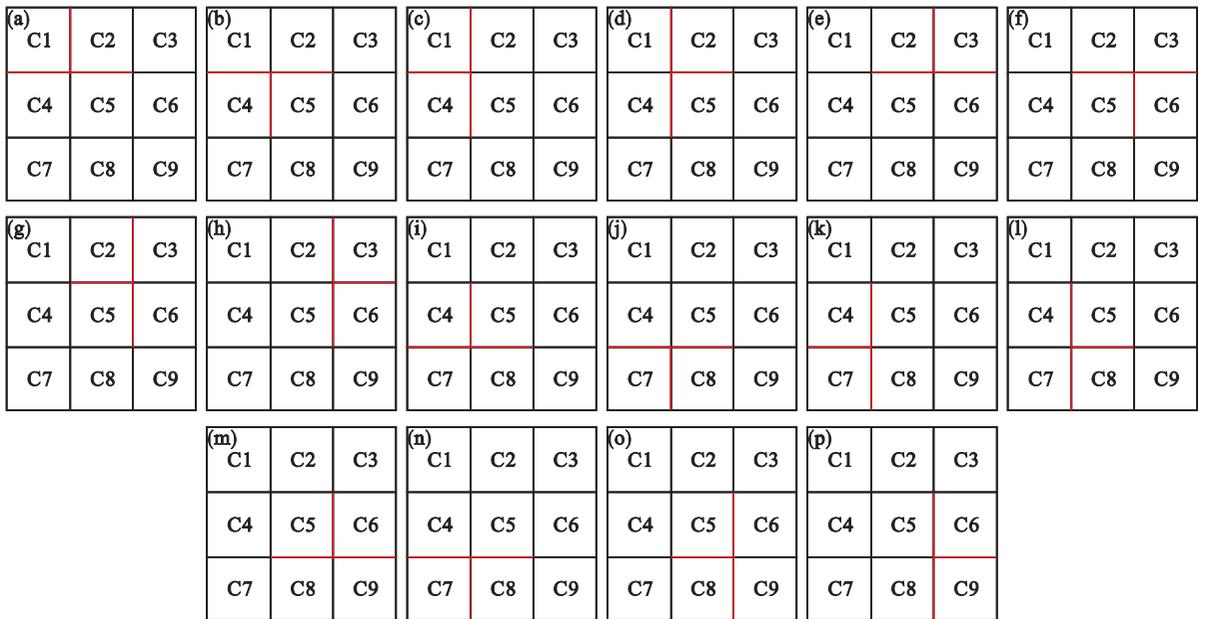


图 1 位于三叉晶界处的元胞识别图

Fig. 1 Identification of cells at triple junction

1.2 三叉晶界优先形核模型及其模拟流程

当满足形核条件时, 位于三叉晶界处的元胞优先、随机形核. 其次, 若形核数量大于三叉晶界处的元胞数量, 则位于普通晶界处的元胞随机形核. 显然, 与传统的动态再结晶形核模型相比, 本文提出的动态再结晶形核模型在保持晶界随机形核的同时, 又有在三叉晶界处优先形核的特点.

鉴于多轮次动态再结晶发生的情况^[8-9], 形核前后的元胞取向数 S_{ij} 和 S'_{ij} 的赋值范围分别为

$$nS_{Q_{max}} + 1 \leq S_{ij} \leq (n + 1)S_{Q_{max}}, \quad (1)$$

$$(n + 1)S_{Q_{max}} + 1 \leq S'_{ij} \leq (n + 2)S_{Q_{max}}. \quad (2)$$

式中 n 为元胞当前所处的动态再结晶轮次; $S_{Q_{max}}$ 为元胞所在晶粒的最大取向数.

形核模拟流程如下:

1) 当应变变量达到临界应变 ε_c 后, 设置元胞

选择次数 $m = 0$, 动态再结晶轮次变量 $n = 1$, 已形核元胞的统计数 $N_n = 0$ ($n = 1, 2, \dots, n_{max}$, 为动态再结晶轮次; n_{max} 为当前可发生动态再结晶的最高轮次).

2) 进行三叉晶界形核的判断和实施过程. 令 $m = m + 1$, 随机选择一个取向数为 S_{ij} 的元胞 (i, j), 判断其是否同时满足位于三叉晶界处 (具有图 1 的任意一组关系) 和属于第 $n - 1$ 轮次动态再结晶. 若满足, 则该元胞 (i, j) 开始形核且被随机赋予新的取向 S'_{ij} , 位错密度 ρ_{ij} 降低至 ρ_0 , 所对应的动态再结晶轮次的形核元胞数 $N_n = N_n + 1$, 进入下一步骤; 若不满足, 随机选择其他元胞, 重复上述过程, 直至 m 达到其总次数 m_{max} 为止.

3) 判断 $N_n = \dot{N}_n$, 若成立, 执行步骤 6); 否则, 进入下一步骤.

4) 判断 $m = m_{\max}$ 若成立, 进入下一步骤; 反之, 返回步骤 2)。

5) 进行普通晶界形核的判断和实施过程(与三叉晶界形核过程相似), 直至 $N_n = \dot{N}_n$ 。

6) 判断当前的所有动态再结晶轮次的形核是否完成 ($n = n_{\max}$) 若完成, 形核模拟流程结束, 进入后序的晶粒长大阶段模拟流程; 反之, 循环运行步骤 2) ~ 步骤 6), 直至 $n = n_{\max}$ 。

2 仿真检验

为了检验本文所提出的三叉晶界优先形核模型的可行性, 在文献 [9 - 10] 的非恒形核率与动态回复位错密度优化的动态再结晶 CA 模型(模型 A)中, 引入三叉晶界优先形核模型而得到改进的动态再结晶 CA 模型(模型 B), 且分别采用两种模型对相同变形条件的 HPS485wf 钢动态再结晶过程进行了仿真。在模型 B 及其模拟流程中, 除了三叉晶界优先形核取代了晶界形核之外,

其余均与模型 A 相同。

鉴于 CA 模型的随机特点, 两种模型均进行了 5 次模拟, 且分别对它们的微观组织演变、应力相对误差平方 δ 、真应力 - 真应变曲线和动态再结晶面积分数进行了分析与比较。

2.1 模拟条件

模拟区域及其网格划分同文献 [10], 元胞选择总次数 m_{\max} 为 40 000, 采用周期性边界条件。模拟的变形参数: $T = 1\ 373\ \text{K}$, $\dot{\epsilon} = 0.1\ \text{s}^{-1}$, $\epsilon_e = 0.8$ 。模拟的初始组织平均晶粒尺寸为 $50\ \mu\text{m}$, 与热模拟实验值相似 [11], 由晶粒正常长大 CA 模型仿真得到 [12]。初始位错密度为 $10^9\ \text{m}^{-2}$, 最大晶粒取向数 $S_{Q\max}$ 为 180。相关模拟参数 [9-10]: $\Delta\text{CAS}_m = 80$, $\text{CAS}_0 = 800$, $\delta_0 = 0.1\%$ 。材料参数见文献 [13]。

2.2 模拟结果与分析

图 2 为两种模型模拟的热压缩 HPS485wf 钢动态再结晶过程不同时刻的微观组织演变。

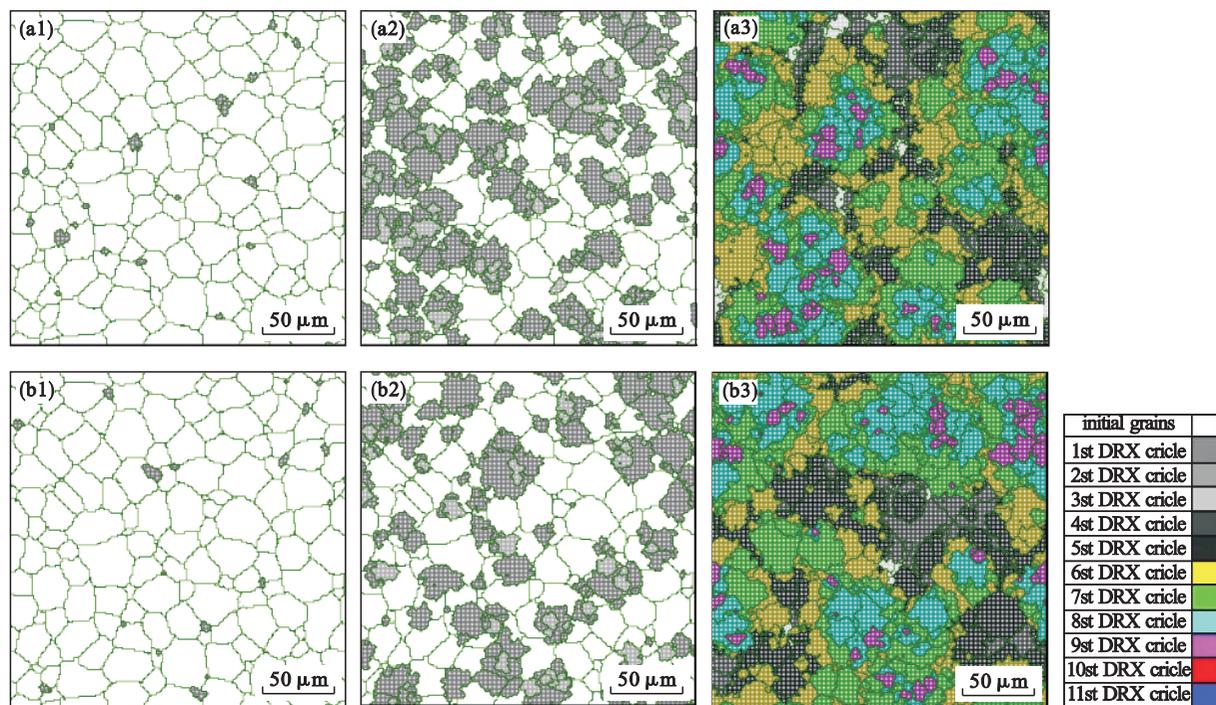


图 2 两种模型所模拟的微观组织随应变的变化 ($T = 1\ 373\ \text{K}$, $\dot{\epsilon} = 0.1\ \text{s}^{-1}$)

Fig. 2 Microstructural evolution simulated by model A and B, respectively at $T = 1\ 373\ \text{K}$ and $\dot{\epsilon} = 0.1\ \text{s}^{-1}$
(a1, b1) — $\epsilon = 0.12$; (a2, b2) — $\epsilon = 0.24$; (a3, b3) — $\epsilon = 0.8$; (a1 ~ a3) — 模型 A; (b1 ~ b3) — 模型 B.

由图 2a1 ~ 2a3 可知, 在模型 A 所模拟的动态再结晶过程中, 再结晶晶核主要在晶界处生成, 只有个别晶核生成于三叉晶界处; 由图 2b1 ~ 2b3 可知, 在模型 B 所模拟的动态再结晶过程中, 再结晶晶核优先生成于三叉晶界处, 只在动态再结晶后期看到个别晶核生成于普通晶界。可见本

文所提出的三叉晶界处元胞识别方法及其优先形核模型行之有效。此外, 除了形核位置不同, 两种模型所模拟的组织演变过程相同, 均呈现了动态再结晶组织形貌特征, 变形结束时已发生 9 轮动态再结晶。这表明三叉晶界优先形核模型不影响动态再结晶演变及其组织形貌特征, 只是致使随

机形核局面发生一些有序改变. 两种模型所得到的动态再结晶应力-应变曲线和面积分数-应变曲线近乎相同, 两者的动态再结晶应力-应变曲线都均匀分布在热模拟实验曲线附近, 而它们的动态再结晶面积分数-应变曲线都与热模拟实验曲线的变化趋势一致, 呈典型的“S 型”^[10].

不论是各模拟次数的数值, 还是 5 次模拟次数的平均数值, 两种模型的系统平均流变应力值与热模拟实验应力值相对误差平方的最大值 δ_{\max} 及其平均值 $\bar{\delta}$ 均未超过设定的模拟精度 0.1%, 且两者的模拟精度差别很小.

综上分析, 模型 B 只是实现了动态再结晶在三叉晶界处优先形核, 对于动态再结晶的演变过程、组织形貌特征、全程流变应力的模拟精度没有影响.

3 结 论

1) 基于二维元胞自动机的摩尔邻居, 提出了三叉晶界处元胞的识别方法及其优先形核原则, 据此改进了传统的动态再结晶元胞自动机形核模型, 并通过 HPS485wf 钢的动态再结晶仿真探讨了这一模型的实用效果.

2) 仿真结果证实了所改进的模型不仅呈现了更加符合实际的三叉晶界优先形核现象, 而且不影响动态再结晶的演变过程、组织形貌特征和全程流变应力的模拟精度.

参考文献:

- [1] Chen C R, Li S X, Wen J L, et al. Finite element analysis about effects of stiffness distribution on stresses and elastic strain energy near the triple junction in a tricrystal[J]. *Materials Science and Engineering A*, 2000, 282(1): 170 - 176.
- [2] Miura H, Andiarwanto S, Sato K, et al. Preferential dynamic nucleation at triple junction in copper tricrystal during high-temperature deformation[J]. *Materials Transactions*, 2002, 43(3): 494 - 500.
- [3] Hallberg H, Ristinmaa M. Microstructure evolution influenced by dislocation density gradients modeled in a reaction-diffusion system[J]. *Computational Materials Science* 2013, 67(2): 373 - 383.
- [4] Goetz R L, Seetharaman V. Modeling dynamic recrystallization using cellular automata[J]. *Scripta Materialia*, 1998, 38(3): 405 - 413.
- [5] Qian M, Guo Z X. Cellular automata simulation of microstructural evolution during dynamic recrystallization of an HY-100 steel[J]. *Materials Science and Engineering A*, 2004, 365(1/2): 180 - 185.
- [6] Yazdipour N, Hodgson P D, Davies C H J. Microstructure evolution modeling during and after deformation in 304 austenitic stainless steel through cellular automaton approach[J]. *International Journal for Multiscale Computational Engineering* 2009, 7(5): 381 - 393.
- [7] Chen F, Cui Z S, Liu J, et al. Modeling and simulation on dynamic recrystallization of 30Cr2Ni4MoV rotor steel using the cellular automaton method[J]. *Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering* 2009, 17(7): 5015 - 5022.
- [8] Yu B J, Guan X J, Wang L J, et al. Mesoscale simulation of discontinuous dynamic recrystallization using the cellular automaton method[J]. *ACTA Metallurgica Sinica(English Letters)* 2011, 24(4): 287 - 294.
- [9] 关小军, 付杰, 禹宝军, 等. 一种确定动态再结晶瞬态形核率的模拟方法[J]. *材料热处理学报*, 2015, 36(2): 231 - 236.
(Guan Xiao-jun, Fu Jie, Yu Bao-jun, et al. A method for identifying transient nucleation rate of dynamic recrystallization by simulation[J]. *Transactions of Materials and Heat Treatment* 2015, 36(2): 231 - 236.)
- [10] 付杰. 单相材料动态再结晶元胞自动机模型的改进[D]. 济南: 山东大学, 2014.
(Fu Jie. Improvement of dynamic recrystallization model for single-phase materials using cellular automata method[D]. Jinan: Shandong University 2014.)
- [11] 王丽君, 关小军, 赵健, 等. HPS485wf 桥梁钢奥氏体动态再结晶规律及其本构关系模型[J]. *材料热处理学报*, 2010, 31(10): 154 - 158.
(Wang Li-jun, Guan Xiao-jun, Zhao Jian, et al. Dynamic recrystallization and mathematic model of HPS485wf steel [J]. *Transactions of Materials and Heat Treatment* 2010, 31(10): 154 - 158.)
- [12] 麻晓飞, 关小军, 刘运腾, 等. 基于改进转变规则的晶粒长大 CA 模型[J]. *中国有色金属学报*, 2008, 18(1): 38 - 44.
(Ma Xiao-fei, Guan Xiao-jun, Liu Yun-teng, et al. Cellular automaton model for grain growth based on a modified transition rule[J]. *Transactions Nonferrous Metals Society China* 2008, 18(1): 38 - 44.)
- [13] 王丽君. 桥梁钢热压缩变形动态再结晶行为的双尺度模拟[D]. 济南: 山东大学, 2011.
(Wang Li-jun. Simulation on dynamic recrystallization behavior of bridge steels in two scales[D]. Jinan: Shandong University 2011.)