



# 不同形核机制下对动态再结晶过程模拟研究

张立文\*, 卢瑜, 邓小虎, 裴继斌, 张国梁

(大连理工大学材料工程学院, 辽宁大连 116024)

**摘要:** 为了研究形核机制对多晶金属材料热加工过程的影响,通过建立动态再结晶的二维元胞自动机模型,模拟了3种形核机制下动态再结晶组织的演化过程,得到了热加工过程中再结晶平均晶粒尺寸的变化规律及生长动力学特征.模拟结果表明,再结晶平均晶粒尺寸的变化规律由形核机制和生长方式共同决定,但稳态时的平均晶粒尺寸只与总的形核数目有关;生长动力学曲线均呈S形,其变化规律符合JMAK理论;Avrami指数的大小取决于晶核的空间分布.

**关键词:** 动态再结晶(DRX);元胞自动机(CA);形核机制;生长动力学

**中图分类号:** TG14 **文献标志码:** A

## 0 引言

多晶金属材料的热加工过程是一个复杂的、动态的、带有随机性的问题,难以实时观察,因此一直都缺乏定量的数学描述.元胞自动机(CA)最早是由Neumann<sup>[1]</sup>作为生物机体的一种可能的理想化模型而提出来的,具有利用简单的、局部规则的、离散的方法描述复杂的、全局的、连续系统的能力,非常适于由局域相互作用产生复杂物理现象与形态的体系的模拟.

近年来,利用元胞自动机方法模拟材料的动态再结晶过程日益受到国内外学者<sup>[2~7]</sup>的青睐.Goetz等<sup>[2]</sup>在Hesselbarth等<sup>[3]</sup>静态再结晶模型的基础上,采用CA技术,模拟了等温、固定应变率下的动态再结晶过程,考察了位错密度变化率对应力-应变曲线、再结晶动力学特征、形核密度、应变率的影响及初始晶粒组织与流动应力曲线的关系.Ding等<sup>[4]</sup>将金属学基本原理与元胞自动机方法相耦合,模拟了不同热加工参数下热加工过程的微观组织演化和塑性流变行为.Kugler等<sup>[5]</sup>利用元胞自动机技术,模拟了金属等温退火时亚动态再结晶过程的动力学行为,研究了应变、温度、应变率对动态软化行为的影响.2004年,肖宏等<sup>[6]</sup>结合金属塑性变形过程的冶金学原理,建

立了动态再结晶过程的元胞自动机模型,比较了不同温度和不同应变率下动态再结晶组织随应变的变化.何燕等<sup>[7]</sup>在2005年建立了多晶金属材料动态再结晶过程的二维元胞自动机模型,考察了不同应变率下的生长动力学理论及动态再结晶的平均晶粒尺寸与初始晶粒大小的关系.迄今为止,国内外所开展的数值模拟研究工作主要是探讨宏观变形参数对动态再结晶过程的影响,而很少有人研究形核机制对动态再结晶过程的影响.

本文在前期工作<sup>[7]</sup>的基础上,通过建立多晶金属材料热加工过程的二维元胞自动机模型,模拟固定形核数式形核、恒定速率式形核、改进恒定速率式形核等3种形核机制下动态再结晶微观组织的演变过程,得到动态再结晶过程中再结晶平均晶粒尺寸的变化规律及生长动力学特征,并将3种形核方式下的模拟结果进行比较与讨论.

## 1 模型的建立

### 1.1 模型概述

元胞自动机是一种时间、空间、状态均离散,空间上的相互作用及时间上的因果关系皆局部的网格动力学模型.建立CA模型必须确定:(1)元胞空间;(2)邻域类型;(3)边界条件;(4)元胞状态;(5)转变规则.本模型将二维平面划分为大小

相等、均匀分布的  $500 \times 500$  的正方形网格, 每个网格代表一个元胞, 元胞尺寸为  $2 \mu\text{m}$ , 因此所模拟的区域代表  $1 \text{mm} \times 1 \text{mm}$  的实际样品. 为减小编程工作量, 提高运算效率, 采用 Neumann 四邻居模型, 即规定每一个元胞在计算下一个状态时, 只考虑与之最近邻的 4 个元胞. 为了用有限网格代替二维无限平面, 采用了周期性边界条件. 更详细的内容见文献[7].

## 1.2 位错密度随应变的变化

热加工前, 假设初始晶粒组织的位错分布均匀, 且密度相等. 热变形开始后, 位错密度  $\rho$  随应变增加, 其增长速率为  $d\rho/dt$ . 根据位错理论[8], 材料内部的流变应力来自位错运动的阻力, 此时, 流变应力与位错密度有如下关系:

$$\sigma = \alpha G b \sqrt{\rho} \quad (1)$$

式中:  $\alpha$  为位错密度交互作用系数,  $G$  为剪切模量,  $b$  为 Burgers 矢量,  $\bar{\rho}$  为平均位错密度. 一般情况下取  $\alpha = 0.5$ .

## 1.3 动态回复

回复表现为残余应力的消除和位错密度的减少, 它是一弛豫过程, 越接近起始阶段回复效应越大. 研究表明, 形变过程中的回复(即所谓的动态回复)总是处于弛豫过程的起始阶段, 因此动态回复对动态再结晶的影响不可忽略. 本文中采用 Goetz 等[2]的回复模型, 即元胞如果发生动态回复, 元胞中的位错密度就减少一半.

## 1.4 晶粒的形核与长大

金属的热变形是通过位错的运动来实现的. 位错在运动中遇到点缺陷、晶界、第二相等障碍时, 将受到巨大的阻力, 极容易塞积, 从而形成了高位错密度区. 这些区域会优先生成晶核, 然后晶核不断长大直至新再结晶晶粒组织完全覆盖初始晶粒组织, 应变达到预定的应变量为止. 研究表明, 只有在位错密度达到一个临界值  $\rho_c$ , 动态再结晶才开始形核. 以下分 3 种情况讨论形核的机制.

1.4.1 固定形核数式形核 初始晶粒组织中存在大量的晶界, 为动态再结晶过程的非均匀形核提供大量的形核位置. 假设再结晶晶核只在母相晶界析出, 形核位置从母相晶界元胞(初始组织中位于晶界上的元胞)中随机选取, 总形核数  $n^0$  固定. 固定形核数可用形核数密度  $n_s$  与母相晶界元胞总数  $n_{\text{gb}}$  的乘积来表示. 这里取  $n_s = 0.006$ .

1.4.2 恒定速率式形核 此模型初次形核时形核位置从母相晶界元胞中随机选取. 初次形核后

晶粒长大, 在其前端出现大量再结晶晶粒与母相晶粒界面(新晶界). 再次形核时, 形核位置从母相晶界元胞和新晶界元胞中随机选取. 整个过程中, 每一时间步均有一固定的形核数, 即形核速率恒定, 可用下式描述:

$$\dot{n} = C \dot{\epsilon}^\alpha \quad (2)$$

式中:  $\alpha$  为常数, 约为 0.9, 本文中近似取  $\alpha = 1$ ;  $C$  也为常数, 取  $C = 200$ ;  $\dot{\epsilon}$  为应变速率. 这一关系式是 Peczak 等[9]根据已有的关系式推导出来的.

1.4.3 改进恒定速率式形核 Vandermeer 等[10]对含有  $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{SiO}_2$  和  $\text{GeO}_2$  粒子的铝的再结晶过程的研究表明, 再结晶时不仅能在大角度晶界处形核, 也能在弥散分布的第二相的周围形核. Humphreys[11]的进一步研究表明, 第二相必须具有足够大的尺寸才能在其周围的变形基体里形成高位错密度和高取向区, 从而促进形核. 在铝基和铜基固溶体中能引起非自发形核的第二相的最小尺寸为  $1 \mu\text{m}$ , 铁基合金中约为  $0.8 \mu\text{m}$ . 第二相间距对再结晶也起着重要作用, 较大的间距会加速再结晶的进行, 而间距过小会推迟或完全抑制再结晶的进行. 因此, 这里假设第二相为一个元胞大小, 第二相体积约占所模拟的总体积的 0.04%, 且随机地分布在基体里, 则第二相粒子数目

$$U = 0.0004 \times M \quad (3)$$

其中  $M$  为 CA 模型中总元胞数.

第二相一般比较坚硬, 位错只能切过, 切过后会留下一个包围着第二相的位错环. 为简化模型, 不考虑此种位错增殖机制引起的第二相周围基体位错密度的增加, 第二相仅被看做一种可能的形核位置, 当该位置的元胞位错密度大于临界值时开始形核. 将式(2)修正后, 得到下式:

$$\dot{n} = (C + U) \dot{\epsilon}^\alpha \quad (4)$$

假设晶粒形核后, 其内部位错密度为零, 随后按照一定的速率  $d\rho/dt$  增长. 当位错密度增长到饱和值  $\rho_s$  时, 晶粒停止生长; 或当与另一新生晶粒在某一方向发生碰撞时, 两晶粒在此方向同时停止生长.  $\rho_c$  和  $\rho_s$  的表达式见文献[7].

## 2 模拟结果与讨论

初始晶粒组织是采用随机 CA 法模拟均匀形核与正常晶粒长大得到的, 平均晶粒尺寸为  $79.80 \mu\text{m}$ , 如图 1 所示. 图中采用不同的灰度表示不同的晶粒.

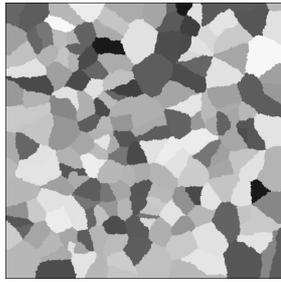


图1 初始晶粒组织的形态  
Fig.1 Original grain topography

图2、3和4分别给出了在应变速率为0.006 4/s时3种形核模型动态再结晶微观组织的形成过程.从图2(a)~(b)可以看出,热变形开始后,晶核在母相晶界处同时析出,然后不断长大(CAS表示CA步).图3(a)所示为恒定速率式的初次形核过程,与图2(a)相比,晶核数目相对较少.一段时间后,晶核逐渐长大,形成大量的新晶界,这为形核提供了大量潜在位置.从图3(b)可以看出,再次形核时,在母相晶界和新晶界处均有晶核析出.在图4(b)中发现A、B、C等再结晶晶粒位于母相晶粒内部,这说明在这些母相晶粒中存在能引起新晶粒非自发形核的第二相.从图2(c)~(d)、3(c)~(d)、4(c)~(d)可以看出,晶粒的生长受到碰撞和饱和位错密度这两个因素的制约,最终均得到大小不均匀的等轴晶粒组织.

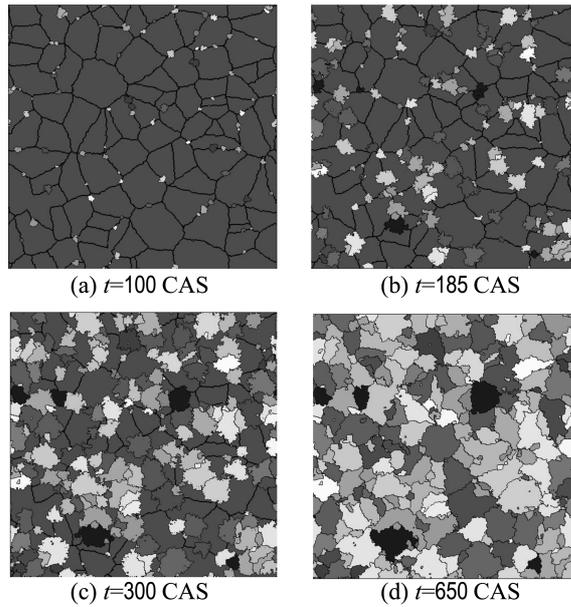


图3 恒定速率式形核模型的微观组织演化过程  
Fig.3 Simulated microstructure for a constant-rate nucleation model

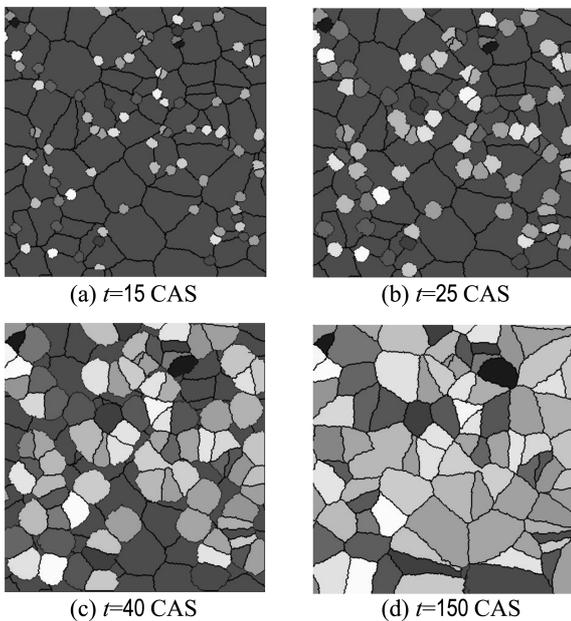


图2 固定形核数式形核模型的微观组织演化过程  
Fig.2 Simulated microstructure for a fixed-nuclei nucleation model

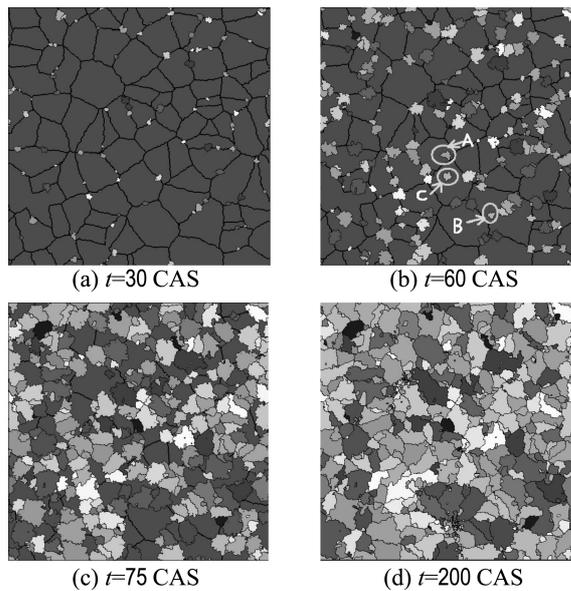


图4 改进恒定速率式形核模型的微观组织演化过程  
Fig.4 Simulated microstructure for a modified constant-rate nucleation model

图5给出了不同形核模型再结晶平均晶粒尺寸随应变的变化.恒定速率式和改进恒定速率式形核模型的平均晶粒尺寸随应变的变化曲线存在一个最大值,而固定形核数式形核模型的曲线并没有出现峰值.这是由于固定形核数式经历初始

形核后,形核位置已经饱和,在完成再结晶之前,只有晶粒的长大.而恒定速率式和改进恒定速率式在应变较小时,平均晶粒尺寸主要受晶粒长大速率的控制,随真应力的急剧下降,再结晶晶粒迅速长大,因此平均晶粒尺寸迅速增加,并达到最大;随后当应变继续增加时,晶界迁移驱动力迅速减小,晶粒长大速率也快速减小,同时新晶粒的数量不断增加,所以过峰值之后,平均晶粒尺寸随之减小.由此可见,形核机制和生长方式共同决定了再结晶平均晶粒尺寸的变化规律.

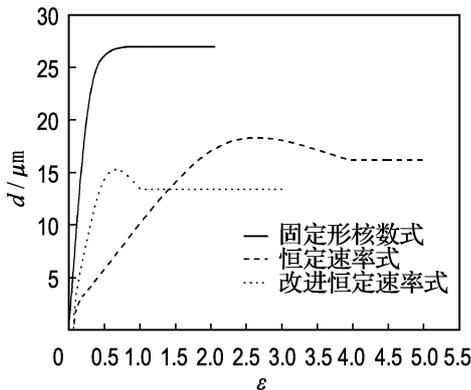


图 5 不同形核模型下再结晶平均晶粒尺寸随应变的变化曲线  
Fig. 5 Curves of mean size of R-grains vs. strain for different nucleation models

从图 5 还可以看出,3 个形核模型的平均晶粒尺寸变化曲线存在一个共同特点:当应变大于某一临界值时,其平均晶粒尺寸不再变化.由于 3 个模型都通过碰撞和饱和位错密度控制生长,一旦再结晶已经完成,且不再形核,所有再结晶晶粒就会保持不变.由于固定形核数式模型总的形核数目最少,其再结晶完成时的平均晶粒尺寸最大,然后依次是恒定速率式、改进恒定速率式.这说明稳态时再结晶晶粒的平均大小只与总的形核数目有关.总形核数目越大,意味着再结晶晶粒数越多,再结晶晶粒平均尺寸越小.

图 6 给出了 3 个形核模型的动力学再结晶百分比随时间的变化.横坐标  $t$  为发生动态再结晶的时间,纵坐标  $f$  为动态再结晶百分比.图 6 表明,3 个形核模型的再结晶动力学曲线均呈 S 形,发生再结晶均需要一段孕育期.开始再结晶时,转变速率很低;随着转变量的增加,转变速率逐渐加快;到转变量为 50% 时速率最快,转变量再增加,速率又减慢.由此可见,转变量的增加遵循 JMAK 方程

$$f = 1 - \exp(-Bt^k) \quad (5)$$

式中: $k$  为 Avrami 指数, $B$  为常数.

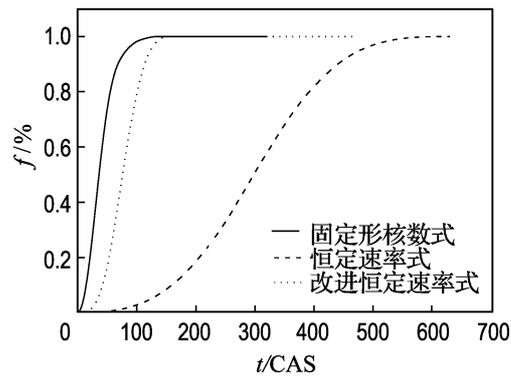


图 6 不同形核模型下动态再结晶百分比随时间的变化曲线  
Fig. 6 Curves of the percentage of DRX vs. time for different nucleation models

如果将图 6 中的数据作对数变换,就得到图 7 所示的不同形核模型动态再结晶的对数曲线.将式(5)变形,两边同时取对数,可得

$$\log(-\ln(1-f)) = k \log t + \log B \quad (6)$$

即  $\log(-\ln(1-f))$  与  $\log t$  成一次线性关系,一次项系数  $k$  为 Avrami 指数.从图 7 可以看出,3 个模型中  $\log(-\ln(1-f))$  随  $\log t$  的变化曲线均呈直线,直线的斜率即为方程(6)的一次项系数.这再次说明 3 种模型的动力学行为符合 JMAK 理论.从图 7 还可以看出,改进恒定速率式模型的 Avrami 指数最大.这是因为改进恒定速率式模型中晶核的分散程度比固定形核数式和恒定速率式模型的要大.这表明 Avrami 指数的大小与晶核的空间分布有关,分散度越大,Avrami 指数越大.

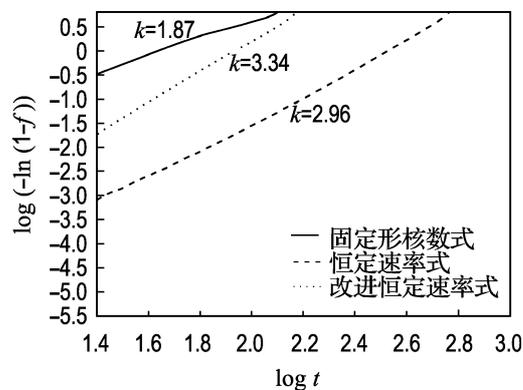


图 7 不同形核模型动态再结晶的对数曲线  
Fig. 7 Logarithm curves of DRX for different nucleation models

### 3 结 论

(1)利用 CA 方法,成功地模拟了热加工过程晶粒的形核、生长情况,并可以连续地、动态地观察再结晶微观组织的变化过程。

(2)再结晶平均晶粒尺寸的变化规律由形核机制和生长方式共同决定,而稳态的平均晶粒尺寸只与总的形核数目有关。

(3)三种形核机制下的生长动力学曲线均呈 S 形,其变化规律符合 JMAK 理论。

(4)Avrami 指数的大小取决于晶核的空间分布。

### 参 考 文 献:

- [1] NEUMANN J V. **Theory of Self-reproducing Automata** [M]. Champaign: University of Illinois Press, 1966
- [2] GOETZ R L, SEETHARAMAN V. Modeling dynamic recrystallization using cellular automata [J]. **Scripta Materialia**, 1998, **38**:405-413
- [3] HESSELBARTH H W, GÖBEL I R. Simulation of recrystallization by cellular automata [J]. **Acta Metallurgica et Materialia**, 1991, **39**:2135-2143
- [4] DING R, GUO Z X. Coupled quantitative simulation

- of microstructural evolution and plastic flow during dynamic recrystallization [J]. **Acta Materialia**, 2001, **49**:3163-3175
- [5] KUGLER G, TURK R. Modeling the dynamic recrystallization under multi-stage hot deformation [J]. **Acta Materialia**, 2004, **52**:4659-4668
- [6] 肖 宏,柳本润. 采用 Cellular automaton 法模拟动态再结晶过程的研究 [J]. **机械工程学报**, 2005, **41**(1):148-152
- [7] 何 燕,张立文,牛 静,等. 元胞自动机方法对动态再结晶过程的模拟 [J]. **材料热处理学报**, 2005, **26**(4):120-125
- [8] 毛卫民,赵新兵. **金属的再结晶与晶粒生长** [M]. 北京:冶金工业出版社, 1994:215
- [9] PECZAK P, LUTON M. The effect of nucleation models on dynamic recrystallization I: homogenous stored energy distribution [J]. **Philosophical Magazine B**, 1993, **68**:115-144
- [10] VANDERMEER R A, GORDON P. Edged-nucleated, growth-controlled recrystallization in aluminum [J]. **Transactions on AIME**, 1959, **215**:577-588
- [11] HUMPHREYS F J. Recrystallization mechanisms in two-phase alloys [J]. **Metal Science**, 1979, **13**(3):136-145

## Simulation of effect of nucleation mechanism on dynamic recrystallization process

ZHANG Li-wen\*, LU Yu, DENG Xiao-hu, PEI Ji-bin, ZHANG Guo-liang

( School of Materials Science and Engineering, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China )

**Abstract:** In order to study the effect of nucleation mechanism on the hot working process of polycrystalline metals, the evolvement of dynamic recrystallization microstructure under three nucleation mechanisms was simulated by developing a two-dimension cellular automaton model. The variation of the mean size of recrystallization grains(R-grains) and the characteristics of growth kinetics during the hot working process were obtained. The simulated results of the three models were discussed and compared together. It is found that the variation of the mean size of recrystallization grains is decided by the nucleation mechanism and the growth mode. However, the steady mean size only depends on the total number of nuclei. The curve of the growth kinetics looks like the shape of "S" and its variation follows the JMAK theory. The Avrami exponent is decided by the spatial distribution of nuclei.

**Key words:** dynamic recrystallization(DRX); cellular automaton(CA); nucleation mechanism; growth kinetics