

• 化学工程与材料工程 •

DOI:10.15961/j.jsuese.201800760

基于元胞自动机AZ31镁合金固溶处理研究

楚志兵^{1,2}, 李 伟¹, 王环珠¹, 薛占元¹, 李玉贵^{1*}, 刘光明¹, 胡建华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: 镁合金具有导热导电性好、电磁屏蔽性能优越、与环境相容性良好等诸多优点。但是镁合金在室温下塑性较差, 导致其在轧制过程中易出现裂纹从而影响其质量。为了有效提高其可塑性, 在加工前往往需要对其进行固溶处理。基于此, 通过金相实验, 得到AZ31镁合金管材原始晶粒组织, 基于晶粒长大的热力学机制、曲率驱动机制和能量耗散机制, 建立元胞自动机模型, 针对镁合金建立了三大晶粒演变规则, 研究AZ31镁合金在不同温度 and 不同时间下晶粒演变规律与边数变化情况, 最终获得晶粒均匀分布且以六边形为主的微观组织。通过晶粒长大拓扑学分析与晶粒尺寸分布统计, 得出晶粒尺寸在不同温度 and 时间内呈正态分布, 其中六边形晶粒最多; 在此基础上, 建立固溶情况下的晶粒长大数学模型, 合理预测并控制AZ31镁合金固溶后的晶粒尺寸和最终性能, 分析了晶粒长大动力学, 得出镁合金生长指数为0.87, 并通过实验验证了元胞自动机模型的正确性和合理性, 为研究镁合金在变形过程中的晶粒演变奠定基础。

关键词: AZ31镁合金; 元胞自动机; 固溶; 晶粒尺寸

中图分类号: TG335.7

文献标志码: A

文章编号: 2096-3246(2019)02-0185-08

Research of Solution Treatment of AZ31 Magnesium Alloy Based on Cellular Automata

CHU Zhibing^{1,2}, LI Wei¹, WANG Huanzhu¹, XUE Zhanyuan¹, LI Yugu^{1*}, LIU Guangming¹, HU Jianhua¹

(1. Heavy Machinery Eng. Research Center of Ministry of Education, Taiyuan Univ. of Sci. and Technol., Taiyuan 030024;

2. School of Mechanics and Civil Eng., Jinan Univ., Guangzhou 510632, China)

Abstract: Compared with traditional steel, magnesium alloy has many advantages such as small density, lightweight, high specific strength, high specific stiffness, good thermal conductivity and comprehensive performance and it has good application and broad prospects in petrochemical and information industry. However, it is poorly plastic at room temperature, which leads to cracks in the rolling process and affects their quality, therefore it is required to be solution-treated to improve its plasticity before processing. Taking into account this, the original grain structure of AZ31 magnesium alloy tube was obtained by metallographic experiment. Based on the thermodynamic mechanism of grain growth, the mechanism of curvature driving and the energy dissipation mechanism, a cellular automata model and three major grain evolution rules was established. And the grain evolution and edge number of AZ31 magnesium alloy at different temperatures and different times were studied. Finally, the microstructure with uniform grain distribution and hexagonal shape was obtained. Through the topological analysis of grain growth and grain size distribution statistics, it was found that the grain size is normally distributed at different temperatures and times, with hexagonal grains being the most. On this basis, the mathematical model of grain growth under the solid solution condition was established, and its grain size and final properties after solid solution were reasonably predicted and controlled. The analysis of the kinetics of grain growth showed that the growth index of magnesium alloy is 0.87. The correctness and rationality of the cellular automaton model were verified by experiments, which laid a foundation for studying the grain evolution of magnesium alloy during deformation.

Key words: AZ31 magnesium alloy; cellular automata; solid solution; grain size

收稿日期: 2018 - 07 - 06

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (U1710113; U1610256); 中国博士后科学基金资助项目 (2017M622903); 山西省留学基金资助项目 (2017-081); 山西省自然科学基金资助项目 (201601D011051); 山西省重点研发计划重点项目资助 (201703D111003; 201703D111002); 山西省重点研发计划一般项目资助 (201703D121008); 山西省研究生优秀创新项目资助 (2017SY077)

作者简介: 楚志兵 (1981—), 男, 教授, 博士后。研究方向: 重型机械机构优化设计。E-mail: chuzhibing@tyust.edu.cn

* 通信联系人 E-mail: liyugu2008@163.com

网络出版时间: 2019 - 02 - 20 15 : 12 : 53

网络出版地址: <http://kns.cnki.net/kcms/detail/51.1773.TB.20190220.1145.007.html>

<http://jsuese.ijournals.cn>

<http://jsuese.scu.edu.cn>

镁合金管材由于轻质和可回收等特点可以作为一种新兴环保材料,满足节能环保新形势的发展^[1],但是,镁合金在室温下塑性较差,导致其在轧制过程中易出现裂纹从而影响其质量,在加工前往往需要对其进行固溶处理,以提高镁合金的塑性,因此,研究和控制镁合金在固溶过程中晶粒演变对成品镁合金的晶粒尺寸及最终性能具有重要意义,为研究镁合金在变形过程中的晶粒演变奠定了基础。

近几年来,很多学者运用元胞自动机对金属在挤压、拉拔、轧制和锻造等方面的晶粒演变模型进行了大量研究。Goet等^[2]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;Kugler等^[3]运用元胞自动机模型研究材料在热变形时的晶粒变化;Timoshenkov等^[4]运用元胞自动机模型研究钢的动态再结晶行为;Raabe等^[5]结合有限元法和元胞自动机法研究铝合金的静态再结晶;Chen等^[6]运用元胞自动机模型预测了30Cr2Ni4MoV钢的晶粒演变;Jin等^[7]运用统计学方法改进元胞自动机模型,并预测Q235钢的动态再结晶行为。以上研究大部分侧重于采用元胞自动机研究金属在变形过程中的晶粒变化,对金属在热处理过程中晶粒演变的研究较少。

作者结合生产实际情况,研究镁合金在固溶过程中的晶粒变化,建立元胞自动机模型,模拟固溶过程中的晶粒演变,对控制固溶后的晶粒尺寸和最终性能具有重要意义^[8]。

1 实验的建立

采用银光镁业提供的AZ31镁合金管材作为坯料,其化学成分见表1。

表 1 铸态AZ31镁合金化学成分

Tab. 1 Chemical composition of as-cast AZ31 magnesium alloy

$m(\text{Al})/\%$	$m(\text{Mn})/\%$	$m(\text{Zn})/\%$	$m(\text{Ca})/\%$	$m(\text{Ni})/\%$	$m(\text{Fe})/\%$	$m(\text{Si})/\%$	$m(\text{Mg})/\%$
2.5~3.5	0.15~0.5	0.6~1.4	0.05	0.005	0.005	0.1	余量

将镁合金管材在温度为200、300、400℃下分别保存6、8和12 h,固溶前对镁合金管材进行金相实验,得到原始晶粒组织,如图1所示。

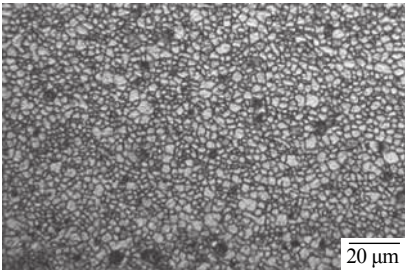


图 1 原始晶粒组织

Fig. 1 Original grain structure

2 元胞自动机模型的建立

2.1 元胞自动机模拟方法的原理

元胞自动机将晶粒在连续时间和连续空间内的复杂变化过程离散,具体采用元胞实现对空间的离散,采用时间步实现对时间的离散,通过在时间步之间、元胞与元胞之间采用确定性或者概率性的转变规则实现模拟晶粒复杂变化过程^[9]。

元胞自动机由5个主要部分组成,其中包括元胞、元胞状态、元胞空间、元胞邻居类型和转变规则,5部分之间关系如图2所示^[10]。

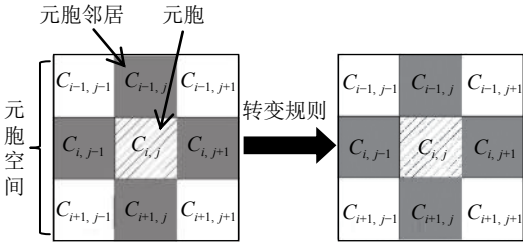


图 2 元胞自动机主要组成部分

Fig. 2 Main component of cellular automata

1)元胞

元胞是组成元胞自动机的基本要素,按照几何形状,可以分为三角形元胞、四边形元胞和六边形元胞,研究中采用四边形元胞,以便于计算机计算和显示。

2)元胞状态

元胞可以承载多个元胞变量。元胞采取两种状态,第1种状态是晶粒取向,用1~180的随机整数表示,相同的晶粒取向代表相同的晶粒,元胞通过晶粒取向的改变模拟原子在不同晶粒间的跃迁;第2种状态是晶界变量,晶界变量可以判断元胞是否处在晶界,或者是否属于晶界元胞,从而识别出元胞空间内所有晶界,晶内元胞的晶界变量为0,晶界元胞的晶界变量为1;采用的元胞边长为2 μm。

3)元胞空间

元胞空间就是元胞所处空间的集合,元胞空间可以分为1维空间、2维空间和3维空间,采用2维空间模拟晶粒变化;采用512×512个2维正方形元胞,由于晶粒尺寸要比工件尺寸小多个数量级,所以模拟工件全部晶粒演变会导致计算量过大而停止运算,因此必须设置边界条件以模拟局部晶粒变化。常用的边界条件有周期性边界条件、反射性边界条件和定值性边界条件,周期性边界条件上下连接、左右连接,这样使得边界晶粒也会相互影响,如图3(a)所示,作者采用周期性边界条件。

4)元胞邻居类型

采用Moore邻居类型,如图3(b)所示,Moore邻居中元胞 $C_{i,j}$ 在下一时间步的状态取决于本时间步内周

C_3	C_1	C_2	C_3	C_1
A_3	A_1	A_2	A_3	A_1
B_3	B_1	B_2	B_3	B_1
C_3	C_1	C_2	C_3	C_1
A_3	A_1	A_2	A_3	A_1

(a) 周期性边界条件

$C_{i-1,j-1}$	$C_{i-1,j}$	$C_{i-1,j+1}$
$C_{i,j-1}$	$C_{i,j}$	$C_{i,j+1}$
$C_{i+1,j-1}$	$C_{i+1,j}$	$C_{i+1,j+1}$

(b) Moore邻居类型

图3 边界条件及邻居类型

Fig. 3 Boundary conditions and neighborhood types

围上、下、左、右、左上、左下、右上、右下8个邻居的状态,即 $C_{i-1,j-1}$ 、 $C_{i-1,j}$ 、 $C_{i-1,j+1}$ 、 $C_{i,j-1}$ 、 $C_{i,j+1}$ 、 $C_{i+1,j-1}$ 、 $C_{i+1,j}$ 和 $C_{i+1,j+1}$ 的状态^[11]。

5) 转变规则

元胞自动机中的转变规则是指本时间步内元胞 $C_{i,j}$ 如何根据邻居元胞状态判别下一时间步内元胞 $C_{i,j}$ 的状态,转变规则在元胞自动机中至关重要,直接决定最终的模拟形态。

2.2 元胞转变规则及物理意义的描述

规则1: 晶粒长大的过程实际上是晶界原子不断跃迁的过程。图4表示一个原子从一个晶粒跃迁到另一个晶粒的能量转化过程,原子从晶粒1跃迁到晶粒2所需要的能量是 ΔG_A ,从晶粒2跃迁回到晶粒1所需要的能量为 $\Delta G_A + \Delta G$,其中 $\Delta G = G_{B1} - G_{B2}$, G_{B1} 和 G_{B2} 分别是晶粒1和晶粒2的晶界能^[12]。

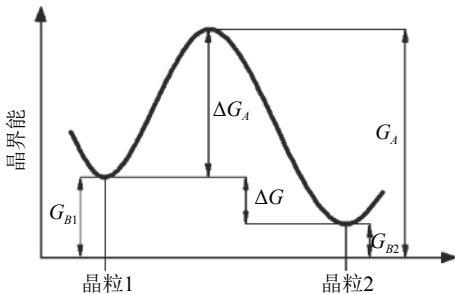


图4 原子在跃迁过程中的能量转化

Fig. 4 Energy transformation of the atom during the transition process

原子从晶粒1跃迁到晶粒2的概率为 P_1 ,原子从晶粒2跃迁到晶粒1的概率为 P_2 ,原子从晶粒1跃迁到晶粒2的最终概率为 P ,可以由式(1)表示:

$$\begin{cases} P_1 = \exp(-\Delta G_A/RT), \\ P_2 = \exp(-\Delta G_A + \Delta G/RT), \\ P = P_1 - P_2 = P_1(1 - P_2) \end{cases} \quad (1)$$

式中, T 为绝对温度, R 为气体常数,其中, $P_3 = \exp(-\Delta G/RT)$ 。在元胞自动机的每一步迭代过程中,每个元胞按照概率 P 进行转化。

规则2: 一般认为,晶粒达到稳定的条件是晶晶晶界平直且内角成 120° ,此时的晶粒为六边形晶粒,如图5(a)所示,处于最稳定状态;对于大于六边的晶粒,如图5(b)所示,晶界内角为了达到 120° ,晶界必须形成内凹形,而晶粒稳定还需晶界平直,于是晶界又会自发的向外扩张,扩张后内角大于 120° ,为保证内角 120° 便又形成内凹形,如此反复,使大于六边的晶粒逐渐长大,直达到稳定状态;对于小于六边的晶粒,如图5(c)所示,晶界内角为了达到 120° ,晶界必须形成外凸形,而晶界为了达到平直又会自发地向内收缩,收缩后内角小于 120° ,为保证内角 120° 便又形成外凸形,如此反复,使小于六边的晶粒逐渐缩小最终消失,基于此,制定了元胞转变规则2-1~2-3。

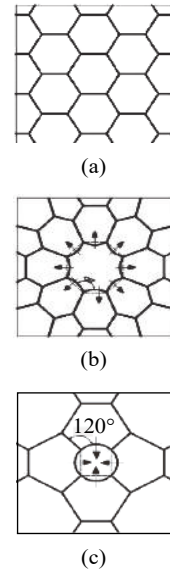


图5 不同边数晶粒的扩张方向

Fig. 5 Expanded direction of grain with different edges

规则2-1: 根据晶界平直原则,规定本时间步内如果 $C_{i,j}$ 周围8个邻居中有5个连续邻居的状态一致,那么在下个时间步内, $C_{i,j}$ 的状态转变为该连续5邻居的状态,如图6(a)所示。

规则2-2: 根据晶界平直原则,规定本时间步内 $C_{i-1,j-1}$ 、 $C_{i-1,j+1}$ 、 $C_{i+1,j-1}$ 和 $C_{i+1,j+1}$ 这4邻居中任意3个处于相同的状态,则在下一个时间步内, $C_{i,j}$ 的状态转变为该3邻居的状态,如图6(b)所示。

规则2-3: 根据晶界平直原则,规定本时间步内 $C_{i-1,j}$ 、 $C_{i,j-1}$ 、 $C_{i,j+1}$ 和 $C_{i+1,j}$ 四邻居中任意3个处于相同的状态,则在下一个时间步内, $C_{i,j}$ 的状态转变为该3邻居的状态,如图6(c)所示。

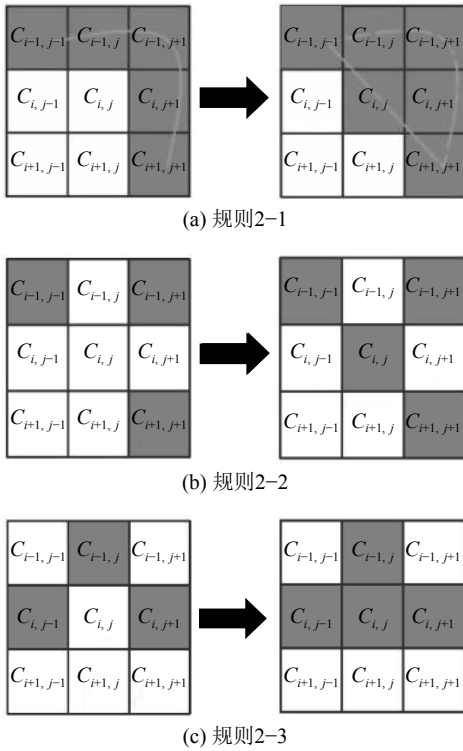


图 6 规则2晶界移动示意图

Fig. 6 Rule 2 schematic diagram of grain boundary movement

规则3: 一些三叉晶粒交界的元胞, 往往不满足规则2, 因此, 根据晶粒长大过程中能量的变化, 制定规则3。

元胞自动机模型将晶粒的晶界能离散到各元胞之中, 每个元胞的晶界能采用Hamilton函数表示, 元胞 $C_{i,j}$ 的晶界能可以表示为:

$$E_{ij} = J \sum_{k=1}^n (1 - \delta_{S_{ij}S_k}) \quad (2)$$

式中, n 为元胞 $C_{i,j}$ 的邻居数, 本文取8; J 是晶界能量度, 假设晶粒长大为各向同性, 所以 J 取1; $S_{i,j}$ 为元胞 $C_{i,j}$ 的取向数, 不同取向数代表不同的晶粒; S_k 为元胞 $C_{i,j}$ 第 k 个邻居的取向数; δ 为Kronecker符号, 具有以下特征:

$$\delta_{S_{ij}S_k} = \begin{cases} 0, & S_{ij} \neq S_k; \\ 1, & S_{ij} = S_k \end{cases} \quad (3)$$

因此整个系统的能量变化可以表示为:

$$E = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n E_{ij} \quad (4)$$

式中, E 为系统总能量, m 、 n 分别为所有元胞的总行数和总列数。

晶粒长大过程中逐渐达到稳定状态, 系统总能量逐渐降低, 而元胞自动机中每次微观转变都是只

有一个元胞的取向数发生变化, 整个系统中只有该元胞的晶界能发生变化而其他元胞的晶界能不变, 因此系统晶界能的变化与该元胞晶界能的变化一致, 这给编程带来了很大的方便, 系统晶界能的变化可以表示为:

$$\Delta E = E_{ij}^{t+1} - E_{ij}^t = J \sum_{k=1}^n (1 - \delta_{S_{ij}S_k})_{t+1} - J \sum_{k=1}^n (1 - \delta_{S_{ij}S_k})_t \quad (5)$$

式中, ΔE 为系统能量变化量, E_{ij}^t 为 t 时间步内元胞 $C_{i,j}$ 的晶界能, E_{ij}^{t+1} 为 $t+1$ 时间步内元胞 $C_{i,j}$ 的晶界能。由于系统总能量逐渐降低, 因此元胞的晶界能也是逐渐降低。当元胞转变过程中不满足规则2时, 需要计算元胞 $C_{i,j}$ 取向数分别转变为8个邻居元胞后, 系统晶界能的变化。当 $\Delta E \leq 0$ 时, 转变的概率为1, 如果元胞 $C_{i,j}$ 在转变为8个邻居元胞的过程中, 有不止1个邻居元胞可以使 $\Delta E \leq 0$, 则随机选取1个邻居元胞进行转变; 当 $\Delta E > 0$ 时, 元胞 $C_{i,j}$ 不发生转变^[12]。

图7为规则3在三叉晶粒交界处的应用。图7(a)表示在 t 时间步内元胞自动机模型所形成的晶粒示意图, 此时带框元胞不满足规则2, 因此采用晶界能判断是否发生转变。该元胞的晶界能按式(5)计算为6, 将其向8个邻居转变后并计算转变后的晶界能, 发现取向数转变为3后, 此时晶界能为4, 则晶界能变化量为-2, 因此在下一时间步内, 带框元胞的取向数由2转变为3, 如图7(b)所示。

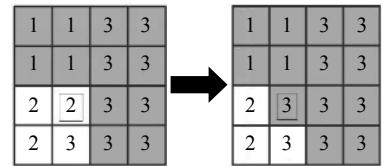
(a) t 时刻晶粒示意图 (b) $t+1$ 时刻晶粒示意图

图 7 规则3晶界移动示意图

Fig. 7 Rule 3 schematic diagram of grain boundary movement

2.3 晶粒正常长大程序框图

图8为某一时间步下晶粒长大流程图。

第1步: 元胞在生成过程中会被赋予一定的元胞空间和元胞状态变量, 元胞空间用于确定要模拟实际空间的尺寸, 元胞状态需要区分不同晶粒及确定晶内和晶界元胞。

第2步: 根据规则1确定某一元胞的转变概率 P_3 , 借助计算机得到0~1的随机数, 通过比较随机数和 P_3 的大小, 确定该元胞是否可能发生转变。

第3步: 由第2步确定的可能发生转变的元胞, 依次判断该元胞是否满足规则2-1、规则2-2、规则2-3、规则3。

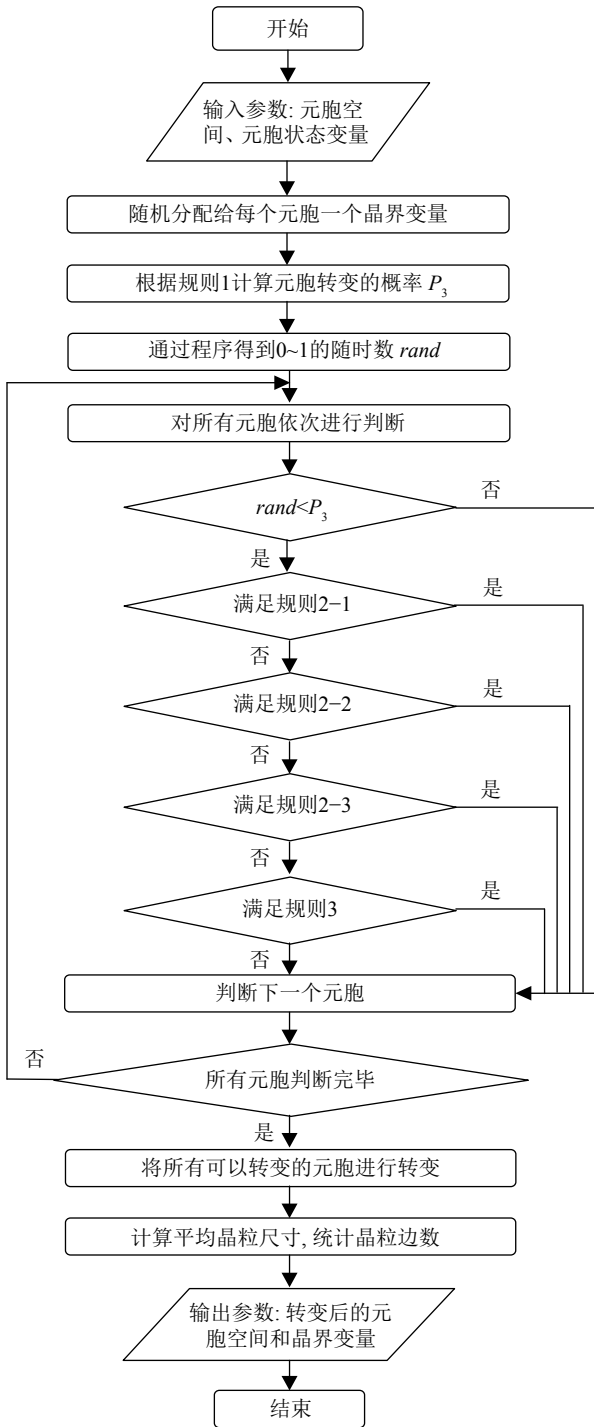


图8 晶粒长大流程图

Fig. 8 Flow chart of grain growth

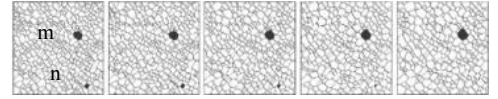
第4步: 遍历所有元胞, 每个元胞都要经过第2步和第3步的所有判断; 判断结束后, 将满足规则的元胞实现转变, 开始进入下一时间步进行判断; 在晶粒长大过程中, 要不断调用该程序, 使晶粒逐渐长大。

3 模拟结果与结果分析

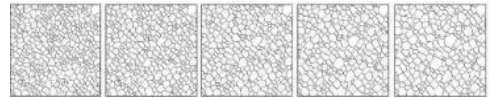
3.1 模拟结果分析

图9展示了不同温度下镁合金晶粒的长大过程。

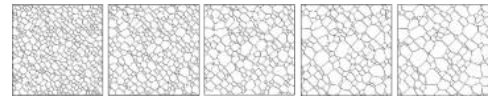
从图9中可以看出, 随着迭代步数的增加, 大晶粒逐渐吞噬小晶粒而长大, 小晶粒则逐渐消失, 如图9(a)中温度为200℃时, n晶粒在晶粒演变过程中逐渐被吞噬, 而m晶粒在晶粒演变过程中逐渐长大。因此, 随着迭代步数的增加, 平均晶粒尺寸逐渐增加, 而且晶界逐渐变平直, 在同一时间步下, 晶粒尺寸随着温度的增加而变大, 整个模拟过程中, 晶粒等轴长大, 没有出现超大晶粒, 属于理想晶粒正常长大的过程^[13]。



(a) 温度为 200℃



(b) 温度为 300℃

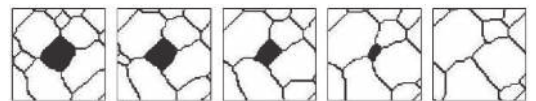


(c) 温度为 400℃

图9 不同温度下镁合金晶粒生长过程

Fig. 9 Grain growth process of magnesium alloys at different temperatures

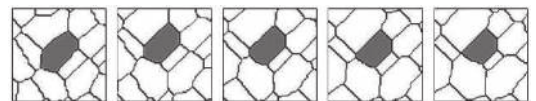
图10为不同边数的晶粒在演变过程中的变化。



(a) 四边形晶粒



(b) 八边形晶粒



(c) 六边形晶粒

图10 元胞自动机模拟不同边数晶粒演变图

Fig. 10 Cellular automata simulation of grain evolution with different edge numbers

通过晶粒周围的晶粒数来定义晶粒的边数, 八边形晶粒的体积在演变过程中逐渐长大, 六边形晶粒的体积基本不变, 四边形晶粒的体积逐渐变小并消失, 同时晶粒逐渐平直, 这不仅符合规则2中晶粒逐渐达到稳定的条件, 也符合Mullins于1956年提出的晶粒拓扑特征^[14], 如式(6)所示:

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\pi\mu}{3}(n-6) \quad (6)$$

式中： n 为所研究晶粒的边数； μ 为晶界能与晶界迁移率之间的比例常数； A 为晶粒面积，将晶粒所包含的元胞数作为晶粒的面积。

3.2 晶粒长大拓扑学分析

图11(a)为不同温度和时间下的晶粒边数的分布情况。由图11(a)发现，晶粒边数分布基本符合正态分布，大于九边的晶粒和小于四边的晶粒在各种温度和时间步下都比较少，六边晶粒最多，所以在研究晶粒长大动力学中通常只研究四到九边数的晶粒；同时，发现晶粒边数分布基本不受温度和时间的影响。图11(b)为晶粒在整个演变过程中不同边数晶粒的变化趋势。由图11(b)可见，大于六边的晶粒在演变过程中逐渐长大，小于六边的晶粒在演变过程中逐渐减小，而六边晶粒在演变过程中基本保持不变，这一结论更全面地证明了本文所建元胞自动机的合理性。

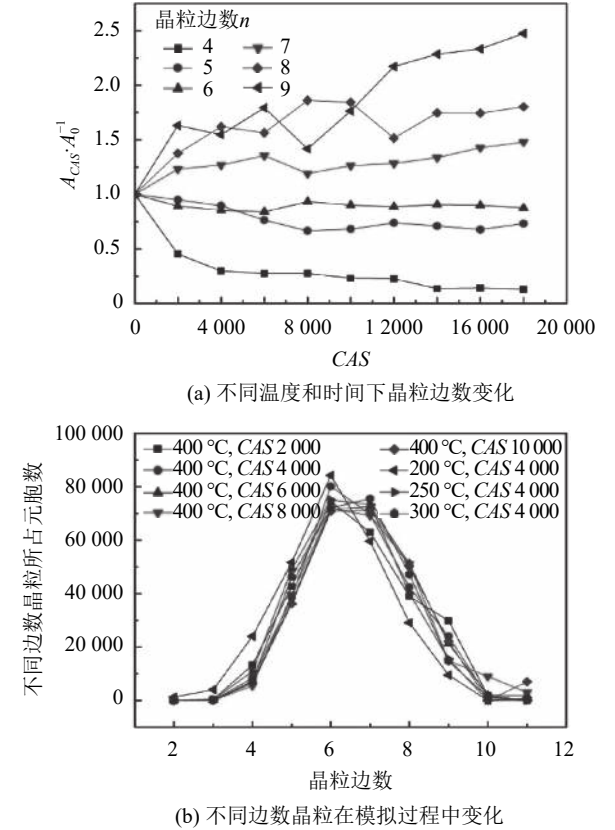


图 11 晶粒边数变化

Fig. 11 Evolution of grain edge numbers

3.3 晶粒尺寸分布

晶粒尺寸分布是描述微观组织均匀性的一个重要参数^[15]，图12为不同温度 and 不同时间下的晶粒尺寸分布。由图12可知，随着时间步的增加，平均晶粒尺寸增多，基本符合正态分布。其中： $R/R_m \approx 1.0$ 的晶粒分布最大，意味在晶粒演变的过程中，晶粒尺寸接近于平均晶粒尺寸的晶粒在整个晶粒中占比最多； $R/R_m >$

2.0的晶粒占比很少。这一结果符合李旭等^[16]建立的晶粒演变最小能量准则。

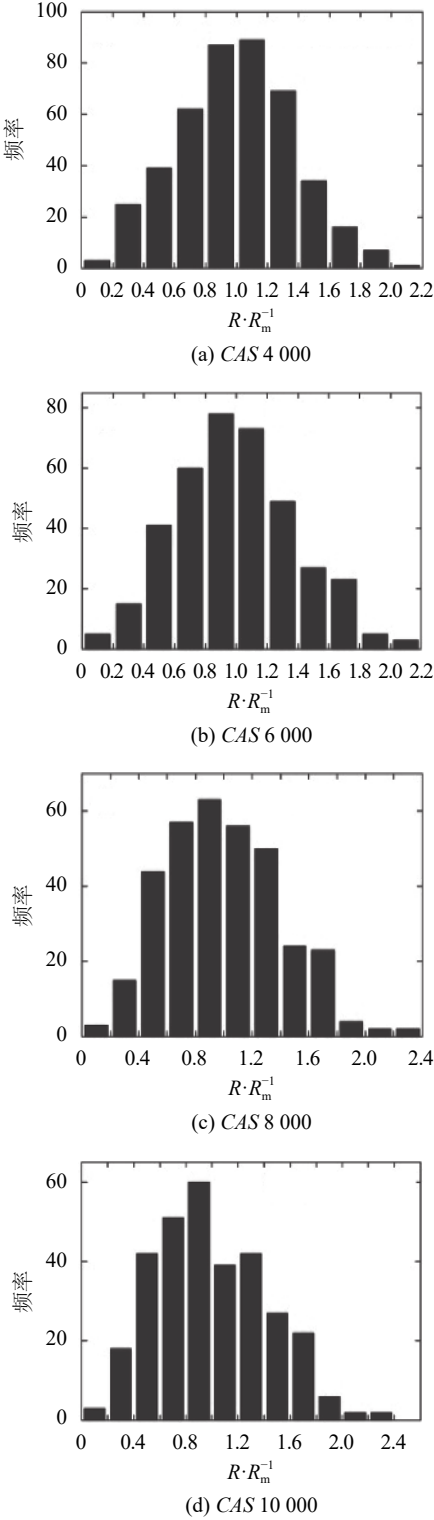


图 12 300 °C下不同时间步内平均晶粒尺寸分布

Fig. 12 Average grain size distribution at different time 300 °C

3.4 晶粒长大动力学分析

文献^[17]中根据实验结果提出了晶粒演变过程中平均晶粒尺寸随时间变化的关系，晶粒长大动力

学可以表示为:

$$R_m = Br^n \tag{7}$$

式中, R_m 为平均晶粒尺寸, B 为常数, n 为生长指数, t 为时间。由于元胞自动机中时间被离散成了时间步, 因此用式(8)描述晶粒演变过程中平均晶粒尺寸随时间步变化的关系。

$$R_m = Br_{CAS}^n \tag{8}$$

式中, t_{CAS} 为时间步。对式(8)两边取对数, 得到:

$$\ln R_m = \ln B + n \ln(t_{CAS}) \tag{9}$$

计算 $\ln R_m - \ln(t_{CAS})$ 在不同温度下曲线的斜率, 将其斜率平均, 得到生长指数为0.87。

3.5 建立晶粒长大预测模型

为了将所建立的元胞自动机模型运用到镁合金实际固溶过程中, 需要建立模拟步数和实际时间之间的关系, 如:

$$T = \frac{B}{\ln A + \ln(t_r/CAS)} \tag{10}$$

式中, T 为温度, t_r 为实际时间, CAS 为模拟步数, A 和 B 为常数。

选取不同温度下的模拟结果和实验情况, 对其进行拟合, 得到 $A = 0.007$, $B = 69\,523.2$ 。

3.6 实验验证

图13是在保温时间为12 h, 温度为200、300、400 ℃下, 模拟和实验中镁合金固溶处理后的晶粒情况。

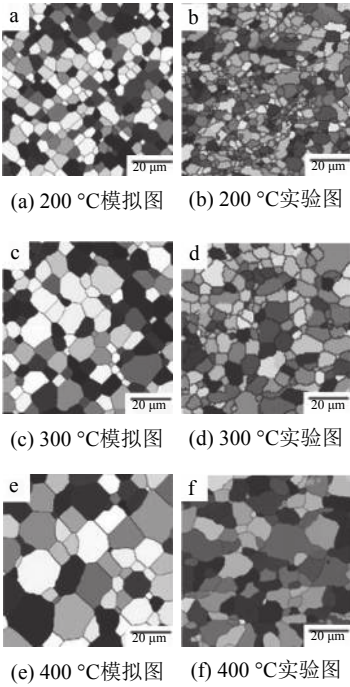


图 13 不同温度下固溶处理后晶粒大小

Fig. 13 Grain sizes after solution treatment at different temperatures

由图13可知, 实验中所得晶粒尺寸及分布规律与模拟结果接近。

表2是在温度分别为200、300和400 ℃时晶粒尺寸的实验值和预测值。由表2数据可知实验所得晶粒尺寸与模拟所得晶粒尺寸非常接近, 误差很小。在200 ℃时, 晶粒尺寸较小; 随着温度的升高, 晶粒尺寸变大, 因为晶粒在高温下容易长大, 也符合晶界迁移率随温度上升而变大的理论。

表 2 不同温度下晶粒尺寸的实验值和模拟值

Tab. 2 Experimental and simulated results of grain size under different temperatures

温度/℃	晶粒尺寸(实验值)/μm	晶粒尺寸(模拟值)/μm
200	4.8	5.1
300	9.6	9.8
400	20.1	19.8

4 结 论

1) 构建AZ31镁合金的元胞自动机模型, 针对固溶处理, 建立了三大元胞转变规则。

2) 研究了不同边数的晶粒在长大过程中的演变及分布情况, 得出晶粒尺寸在不同温度 and 时间内呈正态分布, 其中六边形晶粒最多, 分析了晶粒长大动力学, 得出镁合金生长指数为0.87。

3) 建立可以预测镁合金在固溶过程中晶粒演变的数学模型, 模拟镁合金在不同温度下晶粒的长大过程, 获得AZ31镁合金在不同温度条件下晶粒演变规律, 并通过实验验证了本模型的正确性。

参考文献:

[1] Li H,Zhang H Q,Yang H,et al.Anisotropic and asymmetric yielding and its evolution in plastic deformation: Titanium tubular materials[J].International Journal of Plasticity, 2017,90:177-211.

[2] Goetz R L,Seetharaman V.Modeling dynamic recrystallization using cellular automata[J].Scripta Materialia,1998, 38(3):405-413.

[3] Kugler G,Turk R.Modeling the dynamic recrystallization under multi-stage hot deformation[J].Acta Materialia,2004, 52(15):4659-4668.

[4] Timoshenkov A,Warczok P,Albu M,et al.Modelling the dynamic recrystallization in C-Mn micro-alloyed steel during thermo-mechanical treatment using cellular automata[J]. Computational Materials Science,2014,94(11):85-94.

[5] Raabe D,Becker R C.Coupling of a crystal plasticity finite element model with a probabilistic cellular automaton for simulating primary static recrystallization in aluminum[J]. Modelling & Simulation in Materials Science & Engineering,2000,8(4):445.

- [6] Chen F, Cui Z, Liu J, et al. Mesoscale simulation of the high-temperature austenitizing and dynamic recrystallization by coupling a cellular automaton with a topology deformation technique[J]. *Materials Science & Engineering (A)*, 2010, 527(21/22): 5539–5549.
- [7] Jin Z, Cui Z. Investigation on strain dependence of dynamic recrystallization behavior using an inverse analysis method[J]. *Materials Science & Engineering (A)*, 2010, 527(13/14): 3111–3119.
- [8] Chu Zhibing, Zhang Duo, Jiang Lianyun, et al. Microstructure model of magnesium alloy AZ31 based on cellular automata[J]. *Rare Metal Materials and Engineering*, 2018, 47(3): 884–894. [楚志兵, 张铎, 江连运, 等. 基于元胞自动机 AZ31 镁合金微观组织模型[J]. *稀有金属材料与工程*, 2018, 47(3): 884–894.]
- [9] Ji Haipeng. Prediction of dynamic recrystallization of 316LN stainless steel based on cellular automata[D]. Qinhuangdao: Yanshan University, 2013. [季海鹏. 基于元胞自动机法的 316LN 不锈钢动态再结晶组织预测[D]. 秦皇岛: 燕山大学, 2013.]
- [10] He Dong. Cellular automaton simulation of grain structure evolution[D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2007. [何东. 晶粒组织演化的元胞自动机模拟[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2007.]
- [11] Zheng Yi. Simulation of grain growth and recrystallization of LZ50 steel based on cellular automata[D]. Taiyuan: Taiyuan University of Science and Technology, 2015. [郑毅. 基于元胞自动机法的 LZ50 钢晶粒长大和再结晶模拟[D]. 太原: 太原科技大学, 2015.]
- [12] He Y, Ding H, Liu L, et al. Computer simulation of 2D grain growth using a cellular automata model based on the lowest energy principle[J]. *Materials Science & Engineering (A)*, 2006, 429(1): 236–246.
- [13] Ding Hanlin. Experimental study and numerical simulation of high temperature deformation behavior of AZ91 magnesium alloy[D]. Shanghai: Shanghai Jiaotong University, 2007. [丁汉林. AZ91 镁合金高温变形行为的实验研究与数值模拟[D]. 上海: 上海交通大学, 2007.]
- [14] Ma Xiaofei, Guan Xiaojun, Liu Yunteng, et al. CA model of grain growth based on improved transformation rule[J]. *Chinese Journal of nonferrous metals*, 2008(1): 138–144. [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(1): 138–144.]
- [15] Zhang H Q, Wang X F, Wei B L, et al. Effect of tooling design on the cold pilgering behavior of zircaloy tube[J]. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2017, 92(3): 1–15.
- [16] Li Xu. Microstructure evolution of TA9 titanium alloy during hot deformation[D]. Nanjing: Nanjing University of Aeronautics & Astronautics, 2012. [李旭. TA9 钛合金热变形过程微观组织演变的研究[D]. 南京: 南京航空航天大学, 2012.]
- [17] Zhu Peipei. Microstructure simulation of Ti-55 high temperature titanium alloy during hot deformation process based on cellular automata[D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2016. [祝培培. 基于元胞自动机法的 Ti-55 高温钛合金热变形过程组织模拟[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2016.]

(编辑 黄小川)

引用格式: Chu Zhibing, Li Wei, Wang Huanzhu, et al. Research of solution treatment of AZ31 magnesium alloy based on cellular automata[J]. *Advanced Engineering Sciences*, 2019, 51(2): 185–192. [楚志兵, 李伟, 王环珠, 等. 基于元胞自动机 AZ31 镁合金固溶处理研究[J]. *工程科学与技术*, 2019, 51(2): 185–192.]