

## Simulacija horizontalnega tlačnega testa z uporabo metode celičnih avtomatov

### Simulation of horizontal compression test by cellular automata approach

G. KUGLER & R. TURK

Naravoslovnotehniška fakulteta, Univerza v Ljubljani,  
Aškerčeva cesta 12, 1000 Ljubljana, Slovenia; e-mail: Goran.Kugler@ntf.uni-lj.si  
Faculty of Natural Sciences and Engineering, University of Ljubljana,  
Aškerčeva cesta 12, 1000 Ljubljana, Slovenia; e-mail: Goran.Kugler@ntf.uni-lj.si

Received: June 01, 2005 Accepted: September 15, 2005

**Izvelek:** Z uporabo CA metode smo študirali vpliv začetne mikrostrukture na obliko krivulj tečenja in na kinetiko dinamične rekristalizacije. S pomočjo simulacij smo zasledovali kako se med vročo deformacijo razvija povprečna velikosti zrn, mikrostruktura in hitrost nukleacije. Rezultati simulacij kažejo, da sta tako stacionarna napetost tečenja kot tudi stacionarna povprečna velikost zrn neodvisni od termomehanske zgodovine materiala, medtem ko je oblika krivulj tečenja zelo občutljiva na začetno mikrostrukturo. Bolj grobozrnatemu materialu ustreza višji maksimum napetosti tečenja kot finozrnatemu, krivulja tečenja pa preide iz oblike z enim maksimumom v oscilatorno obliko, ko je razmerje med stacionarno in začetno povprečno velikostjo zrn enako približno dva.

**Abstract:** A study of dynamic recrystallization under the same thermomechanical conditions, but different initial mean grain sizes were performed using CA method. During these simulations the evolution of mean-grain-size and microstructure, as well as the progress of dynamic recrystallization, were monitored. The simulated microstructures closely resemble typical microstructures after dynamic recrystallization. It was observed that both steady-state-stress and steady state mean grain size are independent on the thermomechanical history of the material. The simulations show that the shapes of the flow curves are very sensitive to the initial microstructures. It was identified that peak flow stresses are higher for coarser grained initial microstructures and that the transition between multiple and single peak mode occurred when the ratio between the initial and steady state mean grain size is approximately two.

**Ključne besede:** Dinamična rekristalizacija, Krivulje tečenja, Vroče preoblikovanje, Modeliranje, Celični avtomatizem, Plastična deformacija, Mikrostruktura

**Key words:** Dyanamic recrystallization, Flow curves, Hot working, Modeling, Cellular automaton, Plastic deformation, Microstructure

## UVOD

Po definiciji poteka vroče preoblikovanje pri temperaturah, ki so višje od polovice tempe-

rature tališča danega materiala, nad katerimi material rekristalizira. Rekristalizacija je

oblikovanje nove strukture zrn v deformiranem materialu z nastajanjem in migracijo velikokotnih mej zaradi deformacijske energije [1]. Energija za preoblikovanje je pri teh temperaturah manjša kot v primeru hladnega preoblikovanja. S pomočjo dinamične rekristalizacije lahko spremenimo materialu lito mikrostrukturo, v mikrostrukturo z boljšimi preoblikovalnimi lastnostmi. Poleg geometrijskih sprememb in trenja med preoblikovalnim orodjem in preoblikovancem ima odločujoč vpliv na energetiko preoblikovalnih postopkov preoblikovalna trdnost materiala, ki je odvisna od vsakokratnih termomehanskih pogojev preoblikovanja in izhodiščnega mikrostrukturnega stanja preoblikovanca.

Postopek vročega preoblikovanja je mogoče uspešno nadzorovati le, če poznamo mikrostrukturne spremembe in deformacijske mehanizme, ki potekajo med deformacijo in po njej. Le tako lahko uspešno napovedujemo in dosegamo zelene mehanske lastnosti končnih izdelkov. Kovine in zlitine se pri visokih temperaturah odzovejo na plastično deformacijo na dva načina. Pri materialih z visoko energijo napake zloga se vzpostavi dinamično ravnotežje med nastajanjem in kopičenjem dislokacij na eni strani ter anihilacijo in njihovim prerazporejanjem na drugi. Zato doseže pri določeni stopnji deformacije napetost tečenja stacionarno stanje. V materialih z nizko in srednjo energijo napake zloga pa je zaradi počasnejše dinamične poprave hitrost kopičenja dislokacij veliko večja. Zato nastajajo v teh materialih majhna področja brez dislokacij, ki nato rastejo v deformiran material. Takšna rekristalizirana področja so ločena od okoliškega materiala z velikokotnimi mejami. Tu prisotno nastajanje nukleusov in njihovo rast imenujemo dinamična rekristalizacija (DRX) [1].

Namen pričujočega dela je uporabiti CA metodo za študij vpliva začetne mikrostrukture na kinetiko DRX in na obliko krivulje tečenja s pomočjo simulacije tako imenovanega horizontalnega testa, kjer pri konstantni hitrosti deformacije in pri izotermnih pogojih, torej pri konstantnem Zener-Hollomonovem parametru  $Z$ , delamo poskuse z vzorci, ki imajo različne povprečne velikosti zrn.

## OPIS MODELA

Celični avtomati so algoritmi, ki s pomočjo lokalnih pravil med diskretnimi prostorskimi elementi opisujejo diskretni časovni razvoj kompleksnih sistemov [2-4]. Da postavimo model CA za rekristalizacijo, moramo prostor in čas najprej diskretizirati. Material razdelimo na enake volumske elemente, čas pa na enake časovne korake. Novo stanje vsake celice je odvisno od stanj sosednjih celic  $N(C)$  ter od stanja celice same. Časovni razvoj sistema določa prehodna funkcija, s katero izračunamo nova stanja vseh celic. Vrednost vektorja funkcij stanj  $\zeta$  poljubne celice v času  $t$  lahko izrazimo kot

$$\zeta^t(C) = F(\zeta^{t-\Delta t}(N(C)), \zeta^{t-\Delta t}(C)) \quad (1)$$

Simulacije dinamične rekristalizacije temeljijo na združenih obravnavi teoretskih spoznanj o deformaciji kovinskih materialov pri visokih temperaturah, ki smo jih vgradili v algoritme CA [5-10]. Iz eksperimentalnih razultatov je znano, da lahko pride do dinamične rekristalizacije le, če doseže gostota dislokacij v deformiranem materialu neko kritično vrednost, ki je odvisna od temperature in hitrosti deformacije. Razvoj mikrostrukture med vročim preoblikovanjem

določata nukleacija in rast novih zrn. Oba procesa sta v tesni povezavi z gostoto dislokacij oziroma s krajevno odvisnostjo energije, ki se med deformacijo kopiči v deformiranih in novonastalih zrnih. Zaradi kompleksnosti procesov, ki hkrati delujejo med vročim preoblikovanjem, smo obravnavo poenostavili s tremi privzetki:

- a) Gostota dislokacij je na začetku homogena in za vsa zrna enaka. Ko doseže kritično vrednost, se z nukleacijo prične dinamična rekristalizacija. Z deformacijo narašča gostota dislokacij v novonastalih zrnih od začetne do nasičene vrednosti. Njeno spreminjanje v začetnih in v novih zrnih lahko opišemo z modelom KM<sup>[11]</sup>.
- b) Do nukleacije lahko pride le na mejah zrn. To velja tako za meje začetnih kot tudi za meje novih zrn. Ta predpostavka izvira iz eksperimentalnih ugotovitev, da poteka nukleacija z izbočenjem velikokotnih mej. V našem modelu smo torej vse ostale visoko energijske napake znotraj zrn, kot so deformacijski pasovi, dislokacijski vozli, meje podzrn itd., ki so tudi lahko nukleacijska mesta, zanemarili.
- c) Energija velikokotne meje ni odvisna od medsebojne orientacije zrn.

V našem modelu ima vsaka celica tri funkcije stanja, kar pomeni, da je vektor  $\zeta$  tridimenzionalen s sledečimi komponentami: (a) število  $z$ , ki pove, kateremu zrnu celica pripada, (b) gostota dislokacij  $\rho_c$ , ki določa nukleacijo in rast zrn, in (c) pomik  $\rho_c$ , ki določa gibanje velikokotnih mej, ki jim moramo na začetku simulacije predpisati začetne vrednosti. Naš model dovoljuje, da je lahko začetna vrednost funkcije stanja  $\rho_c$  funkcija kraja  $\rho_c = \rho_c(\mathbf{r})$ , vendar smo pri vseh simulacijah v tem delu na začetku vsem celicam predpisali enako začetno vrednost

$\rho_{02} = 10^{10} \text{ m}^{-2}$ , kar fizikalno ustreza dobro žarjenemu materialu. Začetna vrednost funkcije stanja pomik je na začetki za vse celice  $r_c \equiv 0$ .

Kot smo prej omenili, opišemo časovni razvoj gostote dislokacij v posameznih zrnih z modelom KM, od koder za dano celico v času  $t$  velja

$$\rho^t = \rho^{t-\Delta t} + (k_1 \sqrt{\rho^{t-\Delta t}} - k_2 \rho^{t-\Delta t}) \Delta \varepsilon \quad (2)$$

kjer sta  $k_1$  in  $k_2$  materialni konstanti. Časovni korak  $\Delta t$  določimo iz razmerja med velikostjo osnovne celice in maksimalno hitrostjo gibanja velikokotne meje

$$\Delta t = \frac{d_o}{v_{\max}} \quad (3)$$

od tod pa zaradi enostavne zveze med časovnim in deformacijskim korakom pri konstantni hitrosti deformacije še  $\Delta \varepsilon = \dot{\varepsilon} \Delta t$ . Ker se optimalni deformacijski korak za izračun gibanja meje in gostote dislokacij lahko razlikujeta, po potrebi razdelimo izračun gostote dislokacij na primerno število podkorakov. Konstanti  $k_1$  in  $k_2$ , ki nastopata v enačbi (2), izračunamo iz<sup>[8]</sup>

$$k_1 = \frac{2\theta_o}{\beta G b} \quad \text{in} \quad k_2 = \frac{\beta G b k_q}{\sigma_m} \quad (4)$$

pri čemer vrednost konstante  $\theta_o$  določimo iz naklona krivulj tečenja v II. fazi utrjevanja,  $G$  je strižni modul,  $b$  je Burgersov vektor in  $\beta$  konstanta, ki določa stopnjo interakcije med dislokacijami. Maksimalno napetost tečenja  $\sigma_m$  za dane termomehanske pogoje pa dobimo iz<sup>[8]</sup>

$$\sigma_m = \alpha^{-1} A \text{sh}((A^{-1} \dot{\varepsilon} \exp(Q/RT))^{1/n}) \quad (5)$$

kjer so  $n$ ,  $\alpha$  in  $A$  materialne konstante,  $R$  je plinska konstanta in  $Q$  aktivacijska energija za deformacijo. Spreminjanje napetosti

tečenja med deformacijo izračunamo s pomočjo naslednje enačbe <sup>[1,11]</sup>

$$\sigma = \beta G b \sqrt{\bar{\rho}} \quad (6)$$

pri čemer upoštevamo za izračun gostote dislokacij prispevke vseh celic.

$$\bar{\rho} = \frac{1}{\kappa} \sum_{i=1}^{\kappa} \rho_i \quad (7)$$

Pri opisu gibanja velikokotne meje pod vplivom gonilnega tlaka lahko celica predstavlja posamezen atom, gručo atomov ali pa večje število atomov. Jasno je, da moramo v vsakem od naštetih primerov izbrati drugačno prehodno funkcijo oziroma diferencialno enačbo. Če predstavlja celica posamezne atome ali manjšo gručo, moramo računati z medatomskega potenciali, če pa je tako kot v našem primeru, ko predstavlja celica veliko število atomov, lahko računamo s statističnimi povprečji. Če želimo simulirati gibanje velikokotne meje za čisto kovino, lahko shajamo z mobilnostjo  $M$ , saj je v takšnem primeru hitrost v največkrat kar linearno odvisna od gonilnega tlaka  $p$

$$v = M \cdot p \quad (8)$$

kjer smo mobilnost izračunali iz <sup>[1]</sup>

$$M = \frac{b\delta D_b}{kT} \exp(Q_b / RT) \quad (9)$$

kjer je  $\delta$  karakteristična debelina meje zrna,  $D_b$  difuzijski koeficient meje,  $Q_b$  aktivacijska energija za difuzijo na meji zrna in  $k$  Boltzmannova konstanta. Gonilni tlak za gibanje velikokotne meje je posledica razlik gostote dislokacij na obeh straneh meje

$$p = \tau \Delta\rho - 2\gamma_m / R \quad (10)$$

kjer je  $\tau$  linijska energija dislokacij in  $\gamma_m$  specifična površinska energija. Drugi člen v tej enačbi je prispevek kapilarnega tlaka, ki deluje na vsak kristal in zmanjšuje gonilni tlak za rekristalizacijo. Ta prispevek, ki je posledica težnje po zmanjšanju površine, je lahko v resnici zelo komplicirana funkcija oblike zrna, ki jo največkrat zamenjamo s tem izrazom, kjer  $1/R$  predstavlja lokalno ukrivljenost meje.

Časovni razvoj funkcije stanja pomik  $r_c$  je odvisen od tega, ali dana celica leži na meji zrna ali pa se nahaja v njegovi notranjosti. Pomik v času  $t$  izračunamo iz vrednosti pomika v prejšnjem koraku

$$r^t = \begin{cases} r^{t-\Delta t}; & C \in NZ \\ r^{t-\Delta t}; & (C \in MZ) \wedge (v > 0) \end{cases} \quad (11)$$

kjer smo z  $NZ$  in  $MZ$  označili notranjost oziroma mejo zrna. Vse opisane zakonitosti smo zbrali v prehodno funkcijo (1), ki pove, kaj se bo s posamezno celico v določenem časovnem koraku zgodilo. Celica  $C$  bo v času  $t$  rekristalizirala, če so hkrati izpolnjeni naslednji pogoji:

- vrednost funkcije stanja  $z$  vsaj ene od sosednjih celic se razlikuje od vrednosti te funkcije stanja celice  $C$ ,
- hitrost rasti za dano celico je večja od nič,
- funkcija stanja pomik je večja od velikosti celice  $d_o$ ,
- izpolnjen mora biti pogoj:  $r < m/4$  ( $r \in [0,1]$ ), kjer je  $m$  število rekristaliziranih sosed in  $r$  naključno generirano število.

V primeru, da je celica rekristalizirala, ji postavimo pomik na vrednost nič. Od rastoče celice pa dobi vrednosti gostote dislokacij ter vrednost funkcije  $z$ . Če kateri od naštetih pogojev ni izpolnjen, ostane funkcija  $z$

**Tabela 1.** Vrednosti materialnih konstant, ki smo jih uporabili pri simulacijah horizontalnega testa.  
**Table 1.** The values of material parameters used in simulations of horizontal test.

$Q_b$ [kJ/mol]	$\delta D_b$ [ $m^3 s^{-1}$ ]	$\beta$ [/]	$G_o$ [Pa]	$b$ [m]	$\gamma_m$ [ $Jm^{-2}$ ]
193	$1,2 \cdot 10^{-12}$	0,8	$7,98 \cdot 10^{10}$	$2,49 \cdot 10^{-10}$	0,625
$Q_m$ [kJ/mol]	$N$ [/]	$A$ [ $s^{-1}$ ]	$\alpha$ [ $MPa^{-1}$ ]	$p_n$ [/]	$\theta_o$
329	7,3	$6,65 \cdot 10^{13}$	0,005	0,001	800

nespremenjena, gostoto dislokacij in pomik pa ji izračunamo po enačbi (2) oziroma po (11). Za vsako celico, ki zadošča samo prvemu pogoju, ne pa tudi ostalim, preverimo, če je njena gostota dislokacij večja od kritične gostote za nukleacijo, ki jo po ROBERTSU in AHLBLOOMU dobimo iz [12]

$$\rho_{kr} = \left( \frac{20\gamma_m \dot{\epsilon}}{3blM\tau^2} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (12)$$

kjer je  $l$  povprečna prosta pot dislokacij. V primeru, da je ta pogoj izpolnjen, postane celica potencialni nukleus in njene koordinate shranimo v posebni vektor, s katerim pred začetkom novega koraka CA kličemo rutino za nukleacijo, ki spremeni potencialni nukleus v realnega z verjetnostjo  $p_n$ . Če takšna celica postane nukleus, ji postavimo gostoto dislokacij na vrednost  $\rho_{o2}$ , pomik pa na vrednost nič. Poleg tega dobi tudi novo število  $z$ .

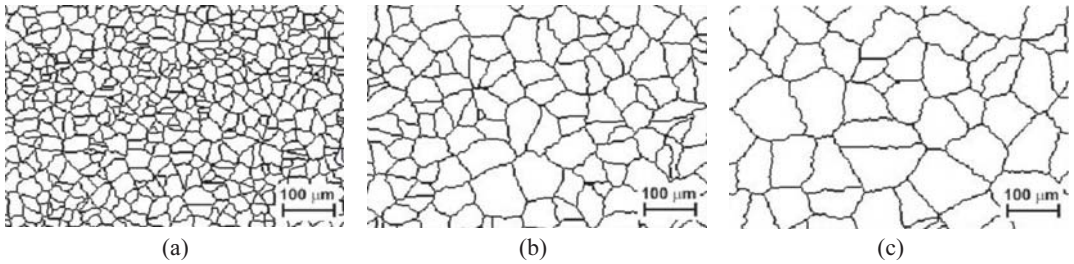
Vrednosti materialnih konstant, ki smo jih uporabili pri simulacijah, so zbrane v tabeli 1. Aktivacijsko energijo  $Q$  ter parametre  $n$ ,  $\alpha$  in  $A$  smo določili iz krivulj tečenja za Ni zlitino 200, in sicer iz maksimalnih napetosti tečenja. Tudi hitrost utrjevanja  $\theta_o$  smo določil iz teh krivulj tečenja. Za velikost Burgersovega vektorja  $b$ , površinsko energijo meje  $\gamma_m$  in odvisnost strižnega modula  $G$  od temperature smo v literaturi [13] poiskali vrednosti za čisti nikelj.

## REZULTATI IN DISKUSIJA

Za simulacije smo uporabili mrežo  $700 \times 700$  celic, torej skupno  $\kappa = 490.000$  celic, s periodičnimi robnimi pogoji. Velikost ene celice je  $d_0 = 2 \mu m$ . Stopnjo rekristalizacije za poljuben čas  $X(t)$  pa smo definirali z razmerjem med celicami, ki imajo  $z > 0$ , in celotnim številom celic.

Pri horizontalnih testih delamo poskuse pri eni hitrosti deformacije in pri eni temperaturi. Spreminjamo le začetno povprečno velikost zrn. V praksi to dosežemo s predhodnim žarjenjem materiala na različnih temperaturah. Za potrebe simulacij pa smo jih dobili s simulacijo homogene statične rekristalizacije z nasičeno nukleacijo. Tako dobljene začetne mikrostrukture s povprečnimi velikostmi zrn  $D = 25 \mu m$ ,  $D = 50 \mu m$  in  $D = 80 \mu m$  prikazuje slika 1.

Nasičeno nukleacijo pa smo izbrali zato, ker s tem dobimo mikrostrukturo z normalno porazdelitvijo po velikosti zrn. Da so dobljene porazdelitve res normalne vidimo iz slike 2, kjer smo simulirane porazdelitve pofitali z normalno porazdelitveno funkcijo. Na tem mestu je potrebno opozoriti, da naš model omogoča, da namesto omenjenih začetnih mikrostruktur v program naložimo kar mikrostrukturo realnega materiala, ki smo jo dobili z metalografskimi metodami. Seveda pa moramo takšno mikrostrukturo z uporabo primernega računalniškega programa predhodno pretvoriti v digitalno obliko.

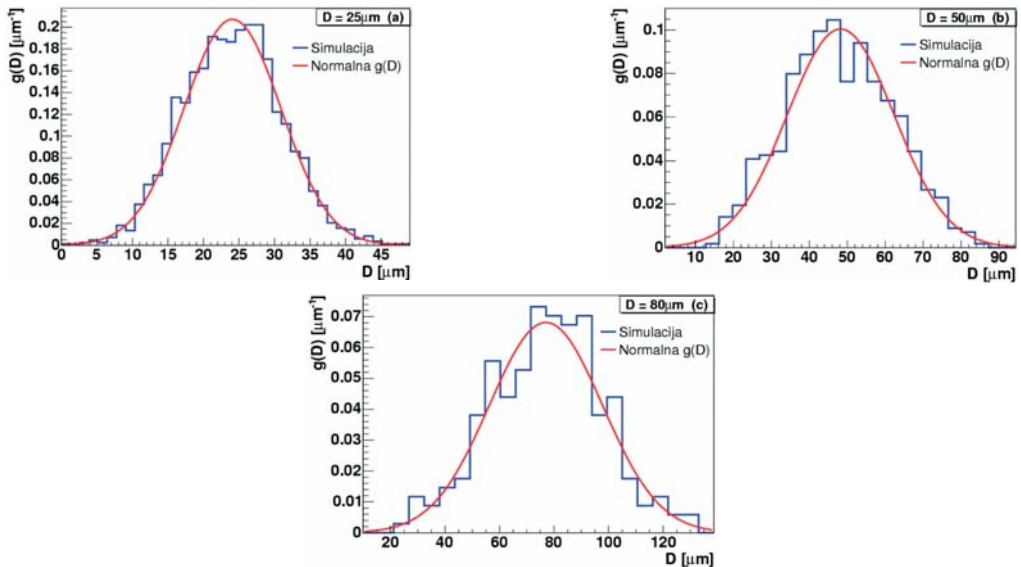


**Slika 1.** Začetne mikrostrukture za simulacijo horizontalnega testa s povprečnimi velikostmi zrn  $D = 25 \mu\text{m}$  (a),  $D = 50 \mu\text{m}$  (b) in  $D = 80 \mu\text{m}$  (c).

**Figure 1.** Initial microstructures for simulation of horizontal test with mean grain sizes of:  $D = 25 \mu\text{m}$  (a),  $D = 50 \mu\text{m}$  (b), and  $D = 80 \mu\text{m}$  (c).

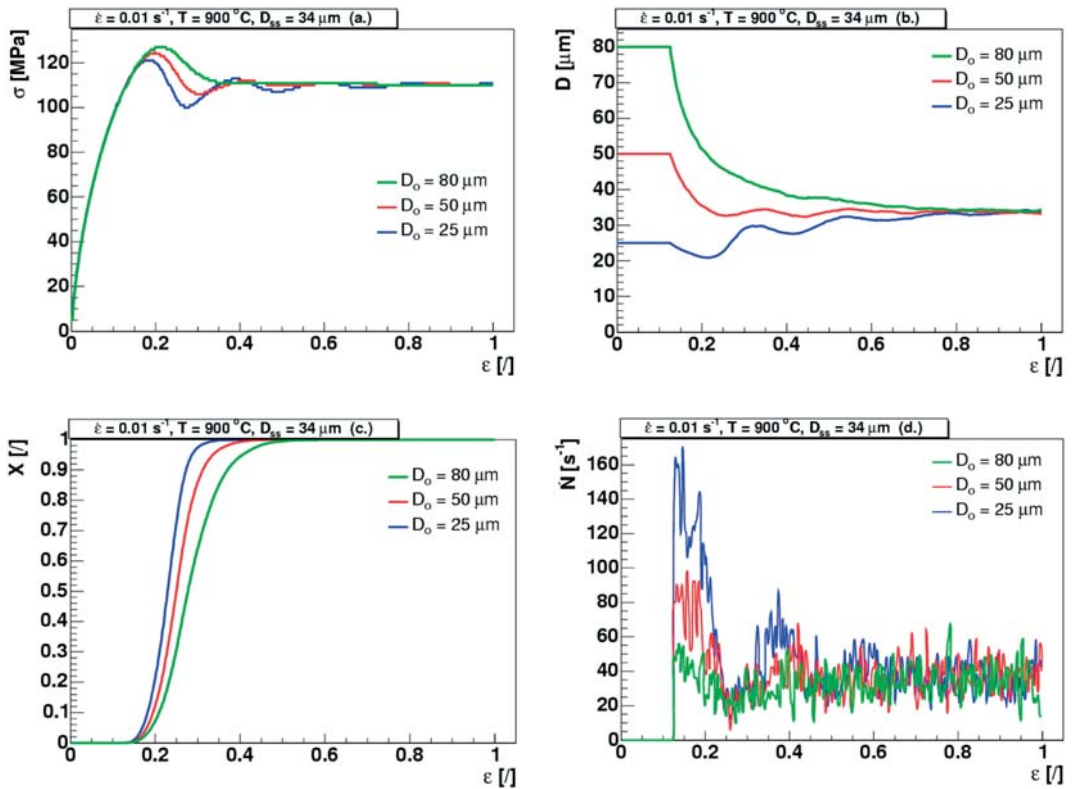
Za simulacije horizontalnega testa smo izbrali hitrost deformacije  $\dot{\varepsilon} = 0.01 \text{ s}^{-1}$  in temperaturo  $900 \text{ }^\circ\text{C}$ . Vse simulirane krivulje tečenja dosežejo po določeni stopnji deformacije enako stacionarno stanje, ki ni odvisno od tega, kakšno začetno povprečno velikost zrn smo izbrali (slika 3a). Ta rezultat je v skladu z eksperimentalnimi opažanji mnogih avtorjev, ki so študirali DRX <sup>[1,15-17]</sup>.

Začetna velikost zrn močno vpliva na obliko krivulje tečenja. Za  $D_0 = 25 \mu\text{m}$  in  $D_0 = 50 \mu\text{m}$  smo dobili ciklični krivulji tečenja, med tem ko ima krivulja tečenja za  $D_0 = 80 \mu\text{m}$  en sam maksimum. SAKAI, SAKUI IN JONAS so eksperimentalno ugotovili, da so oscilacije krivulje tečenja povezane z razmerjem med začetno  $D_0$  in stacionarno  $D_{ss}$  povprečno velikostjo zrn <sup>[15-17]</sup>. Če je  $D_0/D_{ss} < 2$ , je na



**Slika 2.** Porazdelitve po velikosti zrn za mikrostrukture na sliki 1. Porazdelitve so pofitane z normalno porazdelitveno funkcijo. Vse porazdelitve so normirane s pogojem  $\int_0^{\infty} g(D,t)dD = 1$ .

**Figure 2.** Grain size distributions for microstructures shown on Fig. 1. All distributions are normalized with condition  $\int_0^{\infty} g(D,t)dD = 1$ .



**Slika 3.** Rezultati simulacije horizontalnega testa pri temperaturi  $900\text{ }^{\circ}\text{C}$  in hitrosti deformacije  $\dot{\epsilon} = 0.01\text{ s}^{-1}$  za začetne povprečne velikosti zrn 25, 50 in  $80\text{ }\mu\text{m}$ : krivulje tečenja (a), odvisnost povprečne velikosti zrn od deformacije (b), odvisnost stopnje DRX od deformacije (c) in hitrost nukleacije v odvisnosti od deformacije (d).

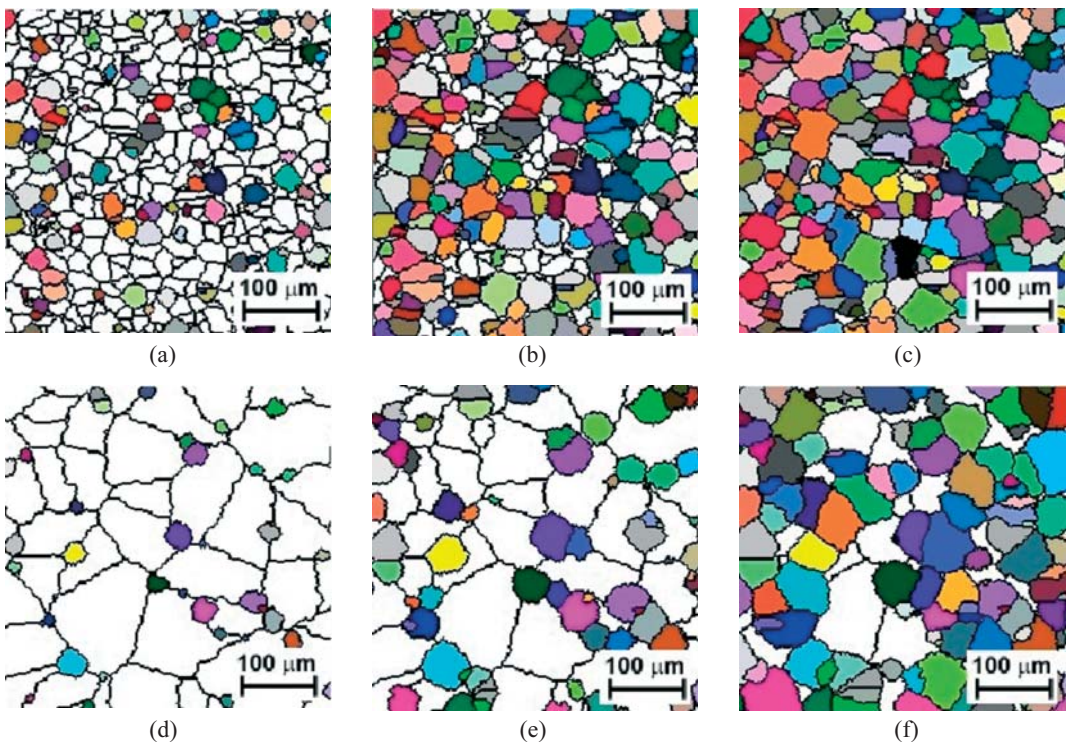
**Figure 3.** Results of the horizontal test simulations at temperature of  $900\text{ }^{\circ}\text{C}$  and strain rate of  $\dot{\epsilon} = 0.01\text{ s}^{-1}$  for initial mean grain sizes of 25, 50 in  $80\text{ }\mu\text{m}$ : flow curves (a), mean grain size dependance on strain (b), fraction of DRX as a function of strain (c), and nucleation rate vs. strain (d).

začetku v materialu dovolj nukleacijskih mest, zato se lahko nova zrna razvijajo s približno enako hitrostjo. Proces rekristalizacije je sinhroniziran in napetost tečenja oscilira. Po drugi strani pa, če je  $D_0/D_{ss} > 2$ , v materialu ni dovolj nukleacijskih mest in so zato različni deli materiala v danem trenutku, na različnih stopnjah rekristalizacije in proces ni sinhroniziran. Krivulja tečenja ima zato en sam maksimum, ki je povezan s prvim rekristalizacijskim ciklom. Povprečna stacionarna velikost zrn pri teh simulacijah je  $D_{ss} = 34\text{ }\mu\text{m}$ . Za ciklični

krivulji  $D_0 = 25\text{ }\mu\text{m}$  in  $D_0 = 50\text{ }\mu\text{m}$  sta ti razmerji  $D_0/D_{ss} = 0,73$ , oziroma  $D_0/D_{ss} = 1,47$ , za krivuljo tečenja z enim maksimumom  $D_0 = 80\text{ }\mu\text{m}$  pa  $D_0/D_{ss} = 2,35$ . Dobljeni rezultat torej potrjuje omenjene eksperimentalne rezultate. Kako se je med deformacijo spreminjala povprečna velikost zrn, prikazuje slika 3b. Vidimo, da se pri določeni stopnji deformacije vse tri krivulje združijo v eno. To je pričakovan rezultat, saj je iz eksperimentalnih opazovanj znano, da je povprečna velikost zrn v stacionarnem stanju enolično določena s temperaturno kompen-

zirano hitrostjo deformacije ter ni odvisna od začetne mikrostrukture. Krivulja za  $D_0 = 80 \mu\text{m}$  je gladka, medtem ko ostali dve krivulji, preden dosežeta stacionarno vrednost, oscilirata. Iz te slike se dobro vidi, pri kateri deformaciji se prične DRX. Zato lahko za vse tri krivulje izračunamo razmerja med tako imenovano kritično deformacijo  $\epsilon_c$  in deformacijo  $\epsilon_p$ , pri kateri ima krivulja tečenja maksimum. Ta razmerja  $\epsilon_c/\epsilon_p$  znašajo za krivulje  $D_0 = 25 \mu\text{m}$ ,  $D_0 = 50 \mu\text{m}$  in  $D_0 = 80 \mu\text{m}$ : 0,75, 0,66 in 0,62, kar se zopet odlično ujema z rezultati eksperimentov, saj je znano, da to razmerje leži na intervalu  $0,6 \leq \epsilon_c/\epsilon_p \leq 0,9$  [16].

Iz slike 3c, ki prikazuje stopnjo DRX  $X(\epsilon)$  v odvisnosti od deformacije, vidimo, da začetna velikost zrn vpliva tudi na kinetiko DRX. Tega ni težko razložiti, saj je hitrost, s katero nova struktura zamenja staro, odvisna od razpoložljivih nukleacijskih mest. V drobnozrnati mikrostrukturi lahko na začetku nastane veliko več novih zrn, ki nato hitreje zamenjajo začetno mikrostrukturo, kot pa v grobozrnati mikrostrukturi. To se vidi tudi iz slike 3d, ki prikazuje, kako se med deformacijo spreminja hitrost nukleacije. V drobnozrnatem materialu hitrost nukleacije na začetku močno naraste, in ko nova zrna



**Slika 4.** Simulacija spreminjanja mikrostrukture med deformacijo pri horizontalnem testu za hitrosti deformacije  $\dot{\epsilon} = 0.01 \text{ s}^{-1}$  pri  $T = 900 \text{ }^\circ\text{C}$ . Slike a-c prikazujejo del simuliranih mikrostruktur pri deformacijah 0,2, 0,25 in 0,34 za  $D_0 = 25 \mu\text{m}$ , slike d-e pa za  $D_0 = 80 \mu\text{m}$  pri enakem zaporedju deformacij.

**Figure 4.** Microstructure evolution during straining for horizontal test for strain rate of  $\dot{\epsilon} = 0.01 \text{ s}^{-1}$  at  $T = 900 \text{ }^\circ\text{C}$ . Figs. a-c show a part of simulated microstructures at strains of: 0,2, 0,25 and 0,34 for  $D_0 = 25 \mu\text{m}$ , and Figs. d-e for  $D_0 = 80 \mu\text{m}$  for the same strain sequence.



pokonzumirajo velik del velikokotnih mej, hitrost pade. Šele ko se novonastala zrna dovolj utrdijo, da se lahko na njihovih mejah sproži nov val nukleacije, hitrost ponovno naraste. Po nekaj ciklih tudi hitrost nukleacije doseže v povprečju stacionarno vrednost. Pri grobozrnatem materialu je hitrost nukleacije zaradi manj razpoložljivih nukleacijskih mest veliko manjša in se bolj gladko približa stacionarni vrednosti.

Razvoj mikrostrukture pri horizontalnem testu prikazuje slika 4. Nerekristalizirana zrna so bela, medtem ko so dinamično rekristalizirana zrna barvna. Barva na tej sliki ne predstavlja nobene fizikalne količine! Slike 4a-c prikazujejo mikrostrukture za  $D_0 = 25 \mu\text{m}$ , slike 4d-e pa za  $D_0 = 80 \mu\text{m}$ . Sliki (a) in (d) sta vzeti v bližini, kjer imata krivulji tečenja maksimum, torej pri deformaciji  $\varepsilon = 0,2$ . Vidimo, da je pri tej stopnji deformacije (slika 4a) rekristaliziralo veliko več materiala kot pa v primeru slike 4b, kar je, kot smo že prej omenili, povezano s številom razpoložljivih nukleacijskih mest.

Pri deformaciji  $\varepsilon = 0,25$  se napetost tečenja za drobnozrnat material približuje minimalni vrednosti (glej sliko 3a) in je nova struktura že v veliki meri zamenjala staro (slika 4b), medtem ko je pri isti deformaciji na sliki 4e še veliko nerekristaliziranega materiala. Pri deformaciji  $\varepsilon = 0,34$  je za  $D_0 = 25 \mu\text{m}$  staro strukturo popolnoma zamenjala nova, za  $D_0 = 80 \mu\text{m}$  pa so še prisotni deli nerekristaliziranega materiala. Prikazane mikrostrukture predstavljajo samo 1/9 mikrostrukture, ki je bila v resnici simulirana.

## ZAKLJUČKI

S CA simulacijami smo poleg krivulj tečenja zasledovali tudi razvoj povprečne velikosti zrn, kinetiko DRX ter spreminjanje mikrostrukture med deformacijo. S horizontalnimi testi, kjer smo pri enakih termomehanskih pogojih spreminjali začetno povprečno velikost zrn, smo potrdili, da sta tako napetost tečenja kot tudi povprečna velikost DRX zrn v stacionarnem stanju neodvisni od termomehanske zgodovine materiala. Simulacije so pokazale, da je oblika krivulje tečenja zelo občutljiva na začetno mikrostrukturo. Do prehoda med krivuljo z enim maksimumom v krivuljo z več maksimumi je prišlo pri razmerju  $D_0/D_{ss} \sim 2$ , kar je v skladu z eksperimentalnimi opažanji drugih avtorjev. Dalje, potrdili smo tudi, da tako deformacija, pri kateri ima napetost tečenja prvi maksimum, kot tudi maksimalna napetost tečenja naraščata z naraščanjem povprečne velikosti zrn v začetni mikrostrukturi.

Iz predstavljenih rezultatov lahko ugotovimo, da ima model CA, ki smo ga razvili in uporabili za simulacijo opisanih visokotemperaturnih deformacijskih procesov, visoko reprodukcijsko zmožnost, ter se izkaže kot pomembno študijsko orodje pri odkrivanju oziroma napovedovanju procesov, ki potekajo med DRX. Opisani model omogoča natančno opazovanje parcialnih procesov in njihovih vplivov na integralne procese kot tudi njihovih sočasnih interakcij in ga bomo zato še naprej razvijali.

## LITERATURA

- [1] HUMPHREYS, F. J., HATERLY, M. (1995): *Recrystallization and Related Annealing Phenomena*, Pergamon Press, Oxford, UK.
- [2] WOLFRAM, S. (1986): *Theory and Applications of Cellular Automata*, World Scientific Publications, Singapore.
- [3] WEIMAR, J. R. (1997): *Simulation with Cellular Automata*, Logos-Verlag, Berlin.
- [4] RAABE, D. (1997): *Computational Material Science*, Wiley-VCH, New York, USA.
- [5] GOETZ, R. L., SEETHARAMAN, V. (1998): Modeling Dynamic Recrystallization Using Cellular Automata, *Scr. Mater.* 38, pp. 405-413.
- [6] KROC, J. (2002): Application of Cellular Automata Simulations to Modeling of Dynamic Recrystallization, *Lecture Notes in Computer Science* 2329, pp. 773-782.
- [7] DING, R., GUO, Z. X. (2001): Coupled quantitative simulation of microstructural evolution and plastic flow during dynamic recrystallization, *Acta Mater.* 49, pp. 3163-3175.
- [8] KUGLER, G. (2004): *Prediction of hot workability of metals by use of cellular automata*, Ph.D. Thesis, Ljubljana: University of Ljubljana 2004; 193 p.
- [9] KUGLER, G., TURK, R. (2004): Modeling the dynamic recrystallization under multi-stage hot deformation, *Acta Mater.* 52, pp. 4659-4668.
- [10] GOETZ, R. L. (2005): Particle stimulated nucleation during dynamic recrystallization using a cellular automata model, *Scr. Mater.* 52, pp. 851-856.
- [11] KOCKS, U. F., MECKING, H. (2003): Physics and phenomenology of strain hardening: the FCC case, *Prog. Mater. Sci.* 48, pp. 171-273.
- [12] ROBERTS, W., AHLBLOM, B. (1978): A nucleation criterion for dynamic recrystallization during hot working, *Acta Metall.* 26, pp. 801-813.
- [13] FROST, H. J., ASHBY, M. F. (1982): *Deformation-mechanism maps*, Pergamon Press, Oxford, UK.
- [14] SAKAI, T. (1995): Dynamic recrystallization microstructures under hot working conditions, *J. Mat. Proc. Tech.* 53, pp. 349-361.
- [15] SAKAI, T., OHASHI, M., CHIBA, K., JONAS, J. J. (1979): Recovery and recrystallization of polycrystalline nickel after hot working, *Acta Metall.* 36/7, pp. 1781-1790.
- [16] SAKAI, T., OHASHI, M. (1990): Dislocation Substructures Developed during Dynamic Recrystallization in Polycrystalline Nickel, *Mater. Sci. Tech.* 6, pp. 1251-1257.
- [17] SAKAI, T., JONAS, J.J. (1984): Overview No. 35 Dynamic recrystallization: Mechanical and microstructural considerations, *Acta Metall.* 32/2, pp. 189-209.