**DOI:** 10.11858/gywlxb.20230780

# 相场模拟研究 AZ31B 镁合金的动态再结晶

许 可[1,2,3], 盛 杰[3], 刘 瑜[3], 黄厚兵[2], 施小明[4], 宋海峰[3]

(1. 北京理工大学材料学院, 北京 100081;
2. 北京理工大学前沿交叉科学研究院, 北京 100081;
3. 北京应用物理与计算数学研究所计算物理全国重点实验室, 北京 100094;
4. 北京科技大学数理学院, 北京 100083)

**摘要:** 镁合金被广泛应用于材料科学、航空航天及军事装备等领域。实验发现,镁合金材料在动态加载下的力学响应与介观尺度不连续动态再结晶紧密相关。为此,构建了镁合金动态再结晶的相场模型,以 AZ31B 镁合金为研究对象,模拟了不同温度(250～400 ℃)、低应变率($0.01$～$1.00\ s^{-1}$)加载下的不连续动态再结晶演化过程。再结晶相场模型耦合了塑性应变,实现了应力-应变曲线与再结晶组织演化的迭代求解。模拟发现,再结晶晶粒的体积分数和平均晶粒尺寸随温度的升高而明显增大,随应变率的增大而减小。

**关键词:** 相场模拟; 镁合金; 动态再结晶; 力学响应

**中图分类号:** O521.2; O347.3 **文献标志码:** A

镁合金作为一种优秀的轻质合金材料,在航空航天和军事装备等领域应用广泛。其中,具有代表性的变形镁合金 AZ31B 因其优异的抗震和抗冲击性能被广泛应用于车辆、飞行器的发动机、变速箱外壳、舱门等部件[1]。AZ31B 镁合金的加工制备离不开高温动态加载[2−3],如锻造、热轧等。材料的结构决定其力学性能,动态加载过程涉及的主要介观结构机制是不连续动态再结晶。实验上衡量动态再结晶的晶粒细化程度和完成度的主要参数是平均晶粒尺寸和再结晶体积分数[4−7]。实验温度、应变率、变形量以及材料体系等因素都会影响再结晶的晶粒细化现象,现有的表征手段较难实时、原位观测高温动态加载过程中的再结晶[8−12]。采用数值计算方法模拟动态加载下的再结晶动力学过程,建立介观组织演化与力学本构的耦合模型,有助于实验现象解读与实验设计[13−19]。相场法是一种介观尺度的材料模拟方法,其特点在于追踪不同相界面的演化过程,可用于描述再结晶相在初始多晶相中的形核长大过程。通过将驱动力项与动态加载力学本构耦合,就能模拟出不同结构 AZ31B 镁合金对应的应力-应变曲线。

晶粒生长的相场模型已经历了较长时间的发展。Chen 等[20] 提出了单一组织结构中晶粒生长的相场模型,模拟了基体材料中晶粒长大及相互吞并的过程。Moelans 等[21] 通过相场法建立了再结晶的 Landau 双势阱模型,形成了基体相和再结晶第二相两套序参量相场模型,由此研究了晶粒界面的迁移效应。Zhao 等[22] 通过再结晶相场模型耦合弹黏塑性-快速傅里叶变换(elasto-visco-plastic fast Fourier transform, EVP-FFT)模拟了多晶铜在高温准静态加载下的再结晶行为。Cai 等[23] 采用位错密度理论,实现了对 $10^{-3}$～$1.0\ s^{-1}$ 应变率加载下热变形 AZ80 镁合金宏观力学性能与微观结构演化过程的耦合,进一

* **收稿日期:** 2023-11-07; **修回日期:** 2024-01-19

**基金项目:** 国家科技部重点研发计划(2021YFB3501503); 国家自然科学基金(U2230401); 计算物理全国重点实验室基金

**作者简介:** 许 可(1996—),男,博士研究生,主要从事镁合金动态加载的相场模拟研究. E-mail: xukebit@qq.com

**通信作者:** 刘 瑜(1985—),男,博士,副研究员,博士生导师,主要从事高压物理、凝聚态物理、材料物理相关的理论研究. E-mail: liu_yu@iapcm.ac.cn

步提高了相场法对应力-应变曲线模拟的精度。

相场模拟结果的准确性极其依赖材料参数的选取。为进一步拓展动态再结晶相场模型的应用场景，本研究结合动态再结晶位错密度理论[24]，开发一套相场模拟软件，以镁合金 AZ31B 为研究对象，对晶界迁移速率和形核速率 2 个相场模型关键参数进行敏感性测试，进一步优化 AZ31B 的模拟参数，据此研究动态加载下温度、应变率和应变几个关键物理变量对材料介观组织和力学响应的影响。

# 1　相场模型

## 1.1　动态再结晶相场模型

选取初始变形晶粒序参量 $\eta_{\mathrm{def}}$ 和再结晶晶粒序参量 $\eta_{\mathrm{drx}}$ 两套序参量的相场模型，以描述初始变形晶粒与再结晶晶粒的界面演化竞争关系。总自由能 $F$ 由体自由能密度 $f_{\mathrm{bulk}}$、梯度能密度 $f_{\mathrm{grad}}$ 和弹塑性能密度 $f_{\mathrm{elas}}$ 在模拟体系下的体积分表示

$$F=\iiint\left[f_{\mathrm{bulk}}\left(\eta_{\mathrm{def}},\eta_{\mathrm{drx}}\right)+f_{\mathrm{grad}}\left(\eta_{\mathrm{def}},\eta_{\mathrm{drx}}\right)+f_{\mathrm{elas}}\left(\eta_{\mathrm{def}},\eta_{\mathrm{drx}}\right)\right]\mathrm{d}V \tag{1}$$

体自由能密度由双势阱函数[21, 23]表示

$$\begin{aligned}f_{\mathrm{bulk}}\left(\eta_{\mathrm{def}},\eta_{\mathrm{drx}}\right)=&\frac{6\gamma_{\mathrm{gb}}}{W_{\mathrm{gb}}}\left\{\left[\sum_{i=1}^{N_{\mathrm{g}}}\left(\frac{\eta_{\mathrm{def},i}^4}{4}+\frac{\eta_{\mathrm{drx},i}^4}{4}-\frac{\eta_{\mathrm{def},i}^2}{2}-\frac{\eta_{\mathrm{drx},i}^2}{2}\right)+\frac{1}{4}\right]+\right.\\&\left.\frac{3}{2}\left(\sum_{i=1}^{N_{\mathrm{g}}}\sum_{j>i}^{N_{\mathrm{g}}}\eta_{\mathrm{def},i}^2\eta_{\mathrm{def},j}^2+\sum_{i=1}^{N_{\mathrm{g}}}\sum_{j=1}^{N_{\mathrm{g}}}\eta_{\mathrm{def},i}^2\eta_{\mathrm{drx},j}^2+\sum_{i=1}^{N_{\mathrm{g}}}\sum_{j>i}^{N_{\mathrm{g}}}\eta_{\mathrm{drx},i}^2\eta_{\mathrm{drx},j}^2\right)\right\}\end{aligned} \tag{2}$$

式中：$\gamma_{\mathrm{gb}}$ 为晶界能，$W_{\mathrm{gb}}$ 为晶界宽度，$N_{\mathrm{g}}$ 为晶粒取向个数，下标 $i$ 和 $j$ 对应 9 种晶粒取向。多晶材料需考虑不同取向晶粒之间的相互作用，而 9 种晶粒取向足以确保相邻晶粒取向的随机性。因此，本研究设置 $N_{\mathrm{g}}=9$，即初始多晶结构有 9 种不同取向，形核产生的再结晶晶粒也会通过随机函数，赋予其 9 种取向中的任意一种。

本工作通过位错密度推导出流动应力与应变的本构关系，故多晶取向的不同主要体现在体自由能构造方面，如图 1[25] 所示。

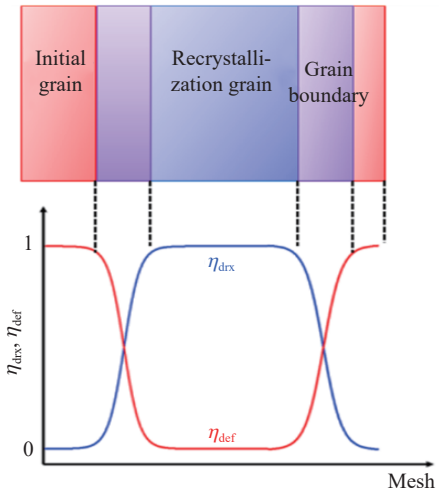



图 1　初始多晶与再结晶晶粒序参量构造示意图[25]

Fig. 1　Schematic diagram of the order parameter configuration of initial polycrystalline and recrystallized grains[25]

梯度能密度由序参量 $\eta_{\mathrm{def}}$ 和 $\eta_{\mathrm{drx}}$ 的空间分布梯度决定，梯度能密度的表达式为

$$f_{\mathrm{grad}}=\frac{3\gamma_{\mathrm{gb}}W_{\mathrm{gb}}}{8}\sum_{i=1}^{N_{\mathrm{g}}}\left[\left(\nabla\eta_{\mathrm{def},i}\right)^2+\left(\nabla\eta_{\mathrm{drx},i}\right)^2\right] \tag{3}$$

弹塑性能密度的表达式为

$$f_{\mathrm{elas}}=\alpha\mu b^2\rho\sum_{i=1}^{N_{\mathrm{g}}}\frac{\eta_{\mathrm{def},i}^2}{\eta_{\mathrm{def},i}^2+\eta_{\mathrm{drx},i}^2} \tag{4}$$

式中：$\alpha$ 为材料常数，$\mu$ 为剪切模量，$b$ 为伯氏矢量，$\rho$ 为位错密度。利用含时间项的 Ginzburg-Landau（TDGL）方程，对序参量 $\eta_{\mathrm{def}}$ 和 $\eta_{\mathrm{drx}}$ 在空间各处随时间迭代演化，具体方程为

$$\begin{cases}\dfrac{\partial\eta_{\mathrm{def},i}}{\partial t}=-L\dfrac{\delta F}{\delta\eta_{\mathrm{def},i}} & i=1,\,2,\,\cdots,\,N_{\mathrm{g}}\\[2ex]\dfrac{\partial\eta_{\mathrm{drx},i}}{\partial t}=-L\dfrac{\delta F}{\delta\eta_{\mathrm{drx},i}} & i=1,\,2,\,\cdots,\,N_{\mathrm{g}}\end{cases} \tag{5}$$

为了将相场方程与动态再结晶力学本构曲线耦合，需要建立流动应力与相场方程驱动力的联系，

推动初始变形晶粒与再结晶晶粒随应变增大进一步演化。本研究采用 Kocks-Mecking(K-M)模型，以位错密度为关键变量，建立应力与弹塑性驱动力的联系。初始变形晶粒相和再结晶晶粒相的应力随外加应变变化的本构关系[23] 分别为

$$\sigma_{\mathrm{def}}=\sigma_{\mathrm{sat}}-(\sigma_{\mathrm{sat}}-\sigma_0)\exp\left(-\frac{\Omega\varepsilon}{2}\right) \tag{6}$$

$$\sigma_{\mathrm{drx}}=\sigma_{\mathrm{ss}}-\left(\sigma_{\mathrm{ss}}-\alpha\mu b\rho_0^{1/2}\right)\exp\left[-\frac{\Omega(\varepsilon-\varepsilon_{\mathrm{crit}})}{2}\right] \tag{7}$$

式中：$\sigma_{\mathrm{def}}$ 为初始变形晶粒的平均应力，$\sigma_{\mathrm{drx}}$ 为再结晶晶粒的平均应力，$\sigma_{\mathrm{sat}}$ 为饱和应力，$\sigma_{\mathrm{ss}}$ 为稳定应力，$\sigma_0$ 为初始应力，$\rho_0$ 为初始位错密度，$\Omega$ 为动态回复系数，$\varepsilon$ 为应变，$\varepsilon_{\mathrm{crit}}$ 为临界形核应变。设 $\sigma_{\mathrm{ave}}$ 为模拟体系的总平均应力，$\rho_{\mathrm{ave}}$ 为模拟体系的总平均位错密度，则

$$\sigma_{\mathrm{ave}}=\alpha\mu b\rho_{\mathrm{ave}}^{1/2} \tag{8}$$

式 (6) 表示初始变形晶粒的应力-应变本构关系，如图 2 所示。从图 2 可以看出：初始变形晶粒的流动应力 $\sigma_{\mathrm{def}}$ 由于位错增殖逐渐达到饱和应力 $\sigma_{\mathrm{sat}}$；超过临界形核应变 $\varepsilon_{\mathrm{crit}}$ 后，再结晶相开始形核，最初再结晶相的应力由初始位错密度 $\rho_0$ 决定，随着应变进一步增大，再结晶相的本构模型根据式 (7) 演化，最终达到稳定应力 $\sigma_{\mathrm{ss}}$，此时，模拟体系基本被再结晶相占据，平均应力 $\sigma_{\mathrm{ave}}\approx\sigma_{\mathrm{ss}}$。应力-应变曲线由初始晶粒相和再结晶相各自的流动应力插值求解，并在模拟体系中通过求平均值获得，如式 (8) 所示。

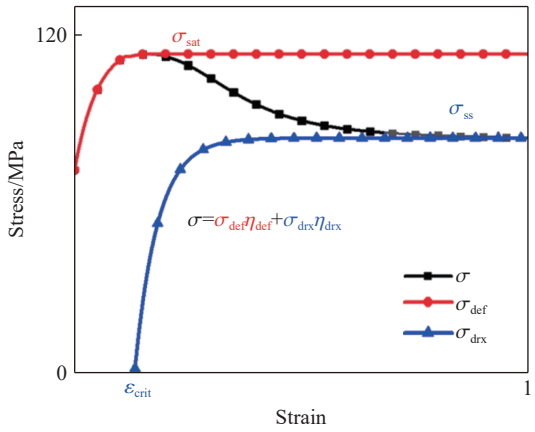



图 2　动态再结晶本构模型构造示意图

Fig. 2　Schematic diagram of the constitutive model of dynamic recrystallization

再结晶相场模型中晶界迁移速率 $M_{\mathrm{gb}}$ 和形核率 $\dot{n}$ 可以表示为

$$M_{\mathrm{gb}}(\dot{\varepsilon},T)=C_{\mathrm{m}}\dot{\varepsilon}^{q}\frac{W_{\mathrm{gb}}D_{\mathrm{gb}}b}{k_{\mathrm{B}}T}\exp\left(-\frac{Q_{\mathrm{self}}}{RT}\right) \tag{9}$$

$$\dot{n}(\dot{\varepsilon},T)=C_{\mathrm{n}}\dot{\varepsilon}^{m_{\mathrm{n}}}\exp\left(-\frac{Q_{\mathrm{drx}}}{RT}\right) \tag{10}$$

式中：$\dot{\varepsilon}$ 为应变率，$T$ 为温度，$W_{\mathrm{gb}}$ 为晶界宽度，$D_{\mathrm{gb}}$ 为晶界自扩散系数，$k_{\mathrm{B}}$ 为玻尔兹曼常数，$Q_{\mathrm{self}}$ 为自扩散激活能，$C_{\mathrm{m}}$ 为平均晶粒尺寸修正系数，$C_{\mathrm{n}}$ 为反分析法求得的形核率常数，$q$ 和 $m_{\mathrm{n}}$ 为应变率敏感因子，$Q_{\mathrm{drx}}$ 为再结晶形核势垒，$R$ 为气体常数。

不连续动态再结晶需要将形核率与时间步长关联。本工作采用随机形核模型，在每个时间步内，在晶界的每个格点进行形核判断。当应变超过形核应变时，每步迭代后会对晶界范围进行判断，若 $\eta_{\mathrm{drx}}<0.9$ 且 $0.1<\eta_{\mathrm{def}}<0.9$，则格点被判定为时刻 $t$ 的可形核位点。遍历所有符合判定的格点后，根据给定形核率常数进行随机数判断，若形核率常数大于随机数，则对该格点及其相邻格点赋予 $\eta_{\mathrm{drx}}=1.0$。应变率主要由应变增量与单位时间步长共同决定

$$\dot{\varepsilon}=\frac{\Delta\varepsilon}{\Delta t},\qquad \Delta t^{*}=\frac{\Delta t}{L_t} \tag{11}$$

式中：$\Delta\varepsilon$ 为单位应变步长，$\Delta t$ 为真实的单位时间步长，$\Delta t^{*}$ 为无量纲化后的单位时间步长，$L_t$ 为无量纲化系数。根据应变率的不同，单位应变步长 $\Delta\varepsilon$ 对应的真实时间步长 $\Delta t$ 不同，进而决定了形核率。

## 1.2　模拟参数

本研究针对 AZ31B 镁合金开展模拟，其介观组织的三维模拟尺寸为 $512\Delta x\times512\Delta y\times\Delta z$（$\Delta x=\Delta y=$

$\Delta z$=1 μm)。边界条件：对晶粒序参量、应力、应变、位错密度等物理量均应用周期性边界条件。AZ31B镁合金材料的相场模型参数如表 1、表 2 和表 3 所示，其中：$\varepsilon_{\mathrm{end}}$ 为动态加载结束时的应变。

**表 1　AZ31B 镁合金的相场模型参数[23, 26]**

**Table 1　Model parameters for phase-field simulation of AZ31B magnesium alloy[23, 26]**

| $\alpha$ | $\mu$/GPa | $b$/m | $Q_{\mathrm{drx}}$/(kJ·mol$^{-1}$) | $Q_{\mathrm{self}}$/(kJ·mol$^{-1}$) |
|---|---|---|---|---|
| 0.5 | 17.0 | $3.2\times10^{-10}$ | 158.7 | 156.2 |
| $\gamma_{\mathrm{gb}}$/(J·m$^{-2}$) | $D_{\mathrm{gb}}$/(m$^2$·s$^{-1}$) | $q$ | $k_{\mathrm{B}}$/(J·K$^{-1}$) | $R$/(J·mol$^{-1}$·K$^{-1}$) |
| 0.55 | $3.2\times10^{-8}$ | 0.634 | $1.38\times10^{-12}$ | 8.314 |

**表 2　AZ31B 镁合金的相场模拟初始化参数[23]**

**Table 2　Initialization parameters for phase-field simulation of AZ31B magnesium alloy[23]**

| $W_{\mathrm{gb}}$/μm | $\Delta\varepsilon$ | $\varepsilon_{\mathrm{end}}$ | $N_{\mathrm{g}}$ | $T$/℃ | $\dot{\varepsilon}$/s$^{-1}$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 1.0 | 0.001 | 1.0 | 9 | 250−400 | 0.01−1.00 |

**表 3　相场模拟使用的力学本构参数[26–27]**

**Table 3　Constitutive parameters used for phase-field simulations[26–27]**

| $T$/℃ | $\dot{\varepsilon}$/s$^{-1}$ | $\sigma_{\mathrm{sat}}$/MPa | $\sigma_{\mathrm{ss}}$/MPa | $\Omega$ | $\varepsilon_{\mathrm{crit}}$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 250 | 1.00 | 187 | 130 | 26.35 | 0.320 |
| 300 | 0.01 | 87 | 59 | 42.31 | 0.093 |
| 300 | 0.10 | 117 | 75 | 31.97 | 0.112 |
| 300 | 1.00 | 155 | 77 | 28.07 | 0.180 |
| 350 | 1.00 | 116 | 65 | 30.44 | 0.110 |
| 400 | 1.00 | 86 | 61 | 39.65 | 0.200 |

## 2　结果与讨论

以 AZ31B 镁合金多晶材料为研究对象，讨论了热变形动态加载过程中温度和应变率对动态再结晶组织演化的影响，在模拟中统一将动态加载结束时的应变 $\varepsilon_{\mathrm{end}}$ 设定为 1.0。为了更方便地分析再结晶组织演化的模拟结果，在绘制序参量演化过程的图像时，将变形晶粒序参量 $\eta_{\mathrm{def}}$ 和再结晶晶粒序参量 $\eta_{\mathrm{drx}}$ 进行求和处理，得到了平均序参量 $\eta$ 的空间分布。这种处理方式更利于分析晶粒细化和晶界等关键特征，并且不会影响组织演化的准确性。

图 3 显示了应变率对再结晶组织的影响。经过对比分析发现，增大应变率会使临界形核应变增大，需要更大的变形才能促使再结晶晶粒成核。此外，提高应变率不利于再结晶晶粒长大，使得相同应变时再结晶体积分数下降。

图 4 显示了温度对再结晶组织的影响，其中，应变率保持 1.00 s$^{-1}$ 不变，温度范围为 250～400 ℃。在相同的应变下，温度上升会使再结晶形核时间提前，即温度上升有利于临界形核应变下降，较小的变形量就足以驱动再结晶晶粒形核。其主要原因是再结晶形核是热激活机制，更高的温度促进了晶界处晶核的产生。此外，温度升高明显地促进了动态加载过程中再结晶体积分数的增加，对加载终态的再结晶平均晶粒尺寸也有一定的影响。

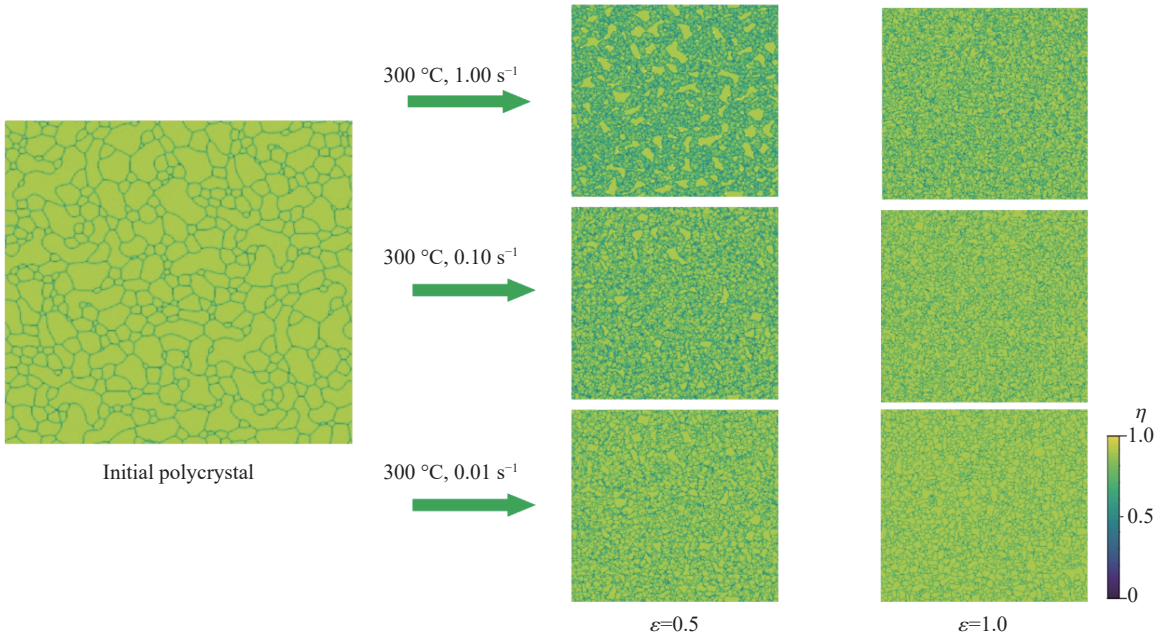



图 3　AZ31B 镁合金多晶在 300 ℃、不同应变率动态加载下的微观组织(序参量 $\eta$)演化

Fig. 3　Microstructure ($\eta$) evolution of AZ31B magnesium alloy polycrystal under dynamic loading at a temperature of 300 °C and different strain rates

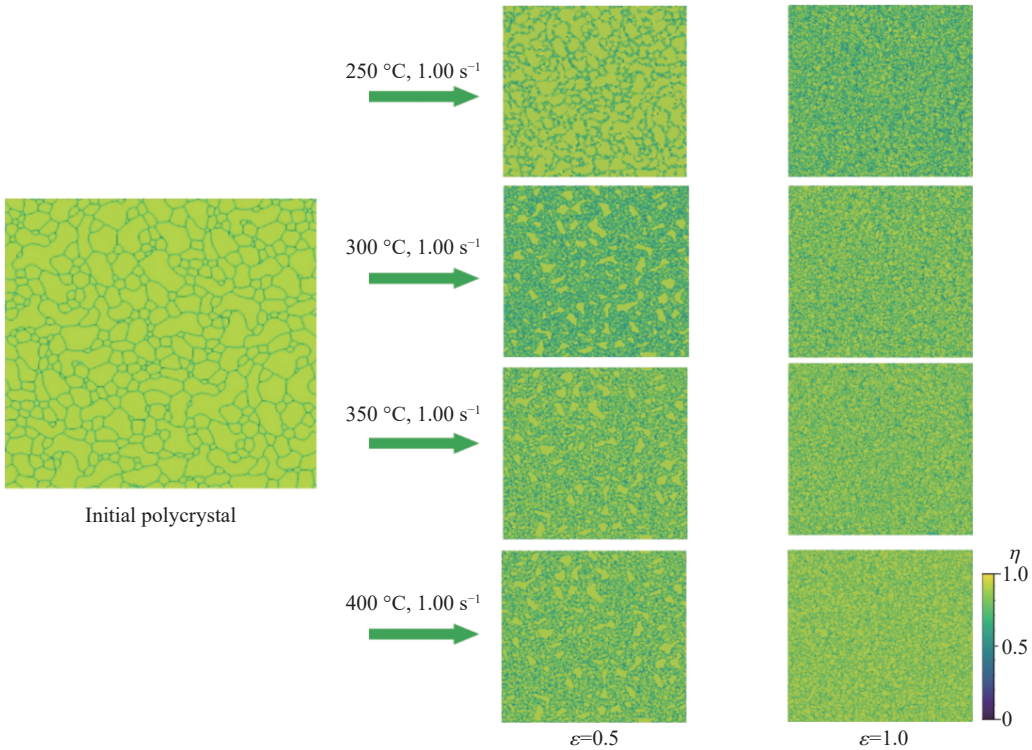



图 4　AZ31B 镁合金多晶在应变率为 1.00 $s^{-1}$、不同温度动态加载下的微观组织(序参量 $\eta$)演化

Fig. 4　Microstructure ($\eta$) evolution of AZ31B magnesium alloy polycrystal under dynamic loading at a strain rate of 1.00 $s^{-1}$ and different temperatures

为了更加清晰地分析再结晶组织，统计应变从零增加至 1.0 的动态加载过程中再结晶体积分数($\varphi_{rx}$)演化和再结晶稳定平均晶粒尺寸($D_{rx}$)，以量化研究不同加载条件对再结晶介观组织演化过程的影响。图 5(a) 和图 5(b) 分别显示了温度和应变率对再结晶体积分数动力学过程的影响。可见，加载温度升高促进了再结晶相演化，主要体现在：在相同的应变下，温度越高，再结晶体积分数越大，越早达到再

结晶饱和状态，最终稳定时的再结晶体积分数也越大。与之相反，动态加载应变率增大抑制了再结晶演化。图 5(c) 和图 5(d) 显示了晶粒尺寸与动态加载条件的关系，当应变率均为 1.00 $s^{-1}$、温度由 250 ℃ 升高到 400 ℃ 时，再结晶晶粒最终稳定的平均直径从 4.5 μm 逐渐增大至 8.8 μm。当加载温度保持 300 ℃ 不变，应变率从 0.01 $s^{-1}$ 提高至 1.00 $s^{-1}$ 时，平均晶粒直径由 9.6 μm 缩小至 5.8 μm，提高应变率抑制了再结晶晶粒尺寸增大。此规律与 Li 等[28] 报道的 AZ31B 镁合金再结晶晶粒尺寸的应变率依赖性变化趋势相同，模拟与实验中晶粒尺寸的误差可能源于统计误差。

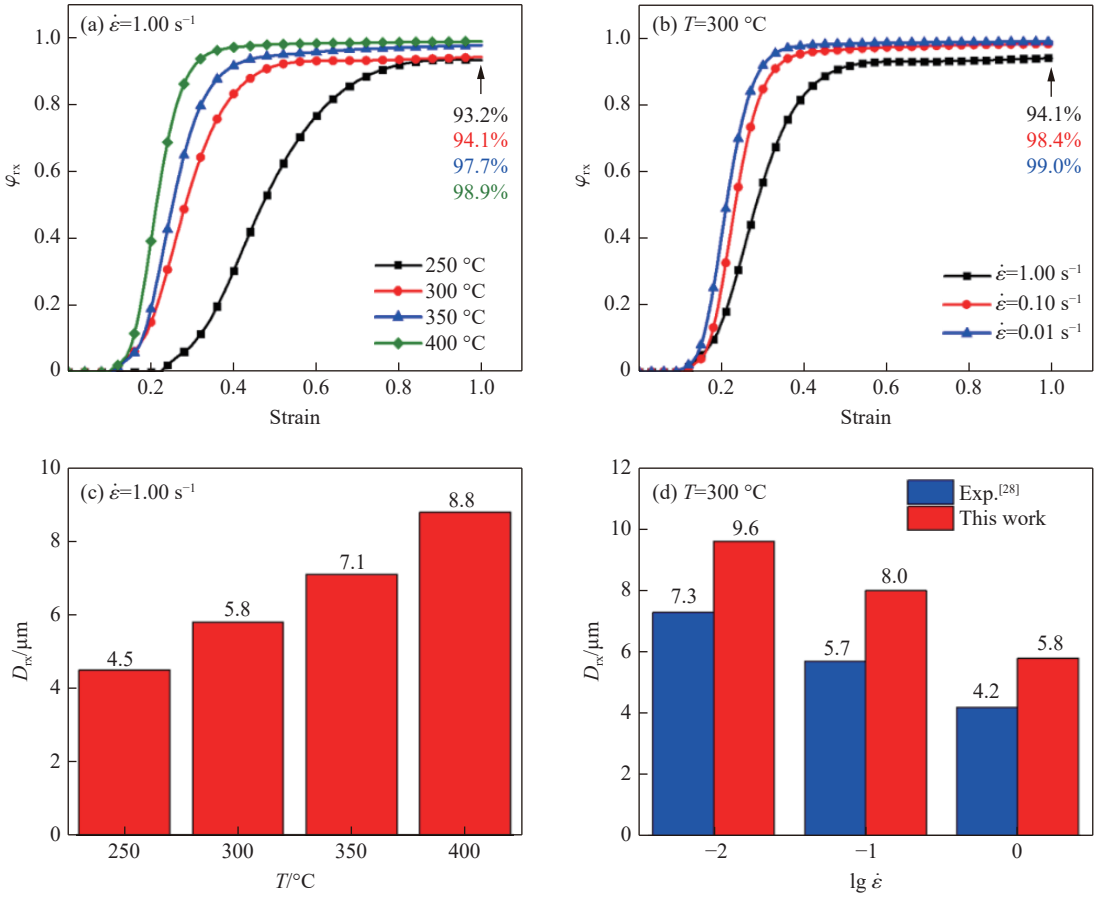



图 5　动态再结晶体积分数与 (a) 温度和 (b) 应变率的关系以及再结晶平均晶粒尺寸随应变的演化与 (c) 温度和 (d) 应变率的关系

Fig. 5　Recrystallization volume fraction of dynamic recrystallization versus (a) temperature and (b) strain rate, and the evolution of average grain size with strain versus (c) temperature and (d) strain rate

再结晶介观组织演化的影响因素一般可归结为材料体系、加载温度以及加载应变率。相关研究大多从定性的角度将晶粒体积分数和晶粒尺寸的变化规律解释为应变率增大导致形核率增大以及晶粒生长时间缩短。本研究绘制了如图 6 所示的关于形核率($\dot{n}$)和晶界迁移速率($M_{gb}$)的再结晶平均晶粒尺寸相图，以探究相场模型关键参数对再结晶平均晶粒尺寸的影响。观察图 6 可以发现，形核率的增大抑制了再结晶相晶粒长大，晶界迁移速率的提高促进了晶粒尺寸增大。当晶界迁移速率足够高、形核率足够小时，出现了最大平均晶粒尺寸，约为 18.3 μm。相场模型要求相界面具有一定的厚度，在当前精度的网格划分下，对于晶粒尺寸小于 4 μm 的再结晶晶粒，模拟误差较大，因此，未对直径小于 4 μm 的再结晶进行测试。

应力-应变曲线对描述镁合金动态加载过程的力学性能起着重要作用。控制温度和应变率，模拟了 AZ31B 镁合金的应力-应变曲线，如图 7 所示，可见，模拟结果与实验数据的相对误差在 10% 以内。如图 7(a) 所示，温度的影响主要体现在 AZ31B 镁合金的热软化特性，当温度从 250 ℃ 升高到 400 ℃

时，应力有较为明显的下降趋势。如图 7(b) 所示，随着应变率由 0.01 $s^{-1}$ 提高到 1.00 $s^{-1}$，应力出现明显的集中现象。

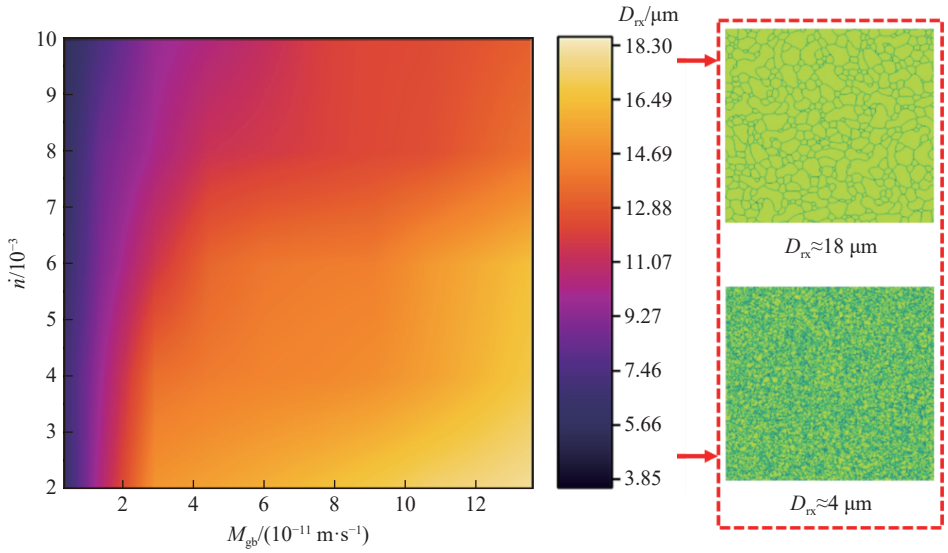



图 6　动态再结晶关于形核率$\dot{n}$与晶界迁移速率 $M_{gb}$ 的平均晶粒尺寸相图(形核速率和晶界迁移速率均采用真实数值)

Fig. 6　Phase diagram of the average grain size of dynamic recrystallization with respect to the nucleation rate ($\dot{n}$) versus the grain boundary migration rate $M_{gb}$, where real values are used for both the nucleation rate and the grain boundary migration rate

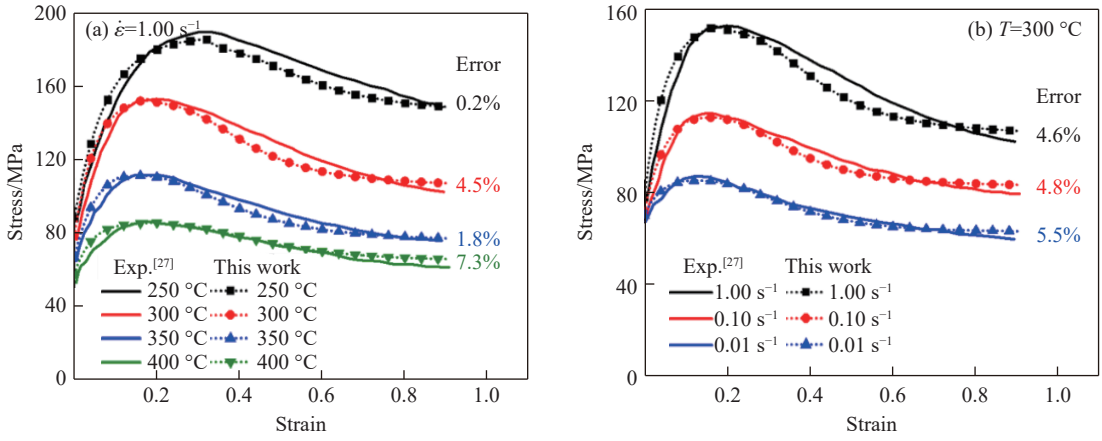



图 7　AZ31B 镁合金在动态加载下的应力-应变曲线(实线为实验测量数据[27]，样条为相场模拟结果)

Fig. 7　Stress-strain curves of AZ31B magnesium alloy under dynamic loading (The solid lines represent the experimental data[27], and the splines represent the phase field simulation results)

## 3　结　论

主要分析了在应变率为 0.01～1.00 $s^{-1}$、温度为 250～400 ℃ 的加载条件下 AZ31B 镁合金的再结晶介观组织演化与力学响应，重点讨论了温度和应变率对再结晶体积分数和平均晶粒尺寸的影响。对晶界迁移速率和形核速率 2 个相场模型关键参数进行了敏感性测试，进一步优化了 AZ31B 镁合金的模拟参数。现有的不连续动态再结晶模型适用的应变率范围为 $10^{-3}$～1 $s^{-1}$，但在更高应变率($10^{2}$～$10^{5}$ $s^{-1}$)的动态加载实验中，再结晶机制将以连续再结晶为主，因此，相应相场模型的构造需额外考虑亚晶粒的形核与旋转实现再结晶[29–33]。此外，镁合金在动态加载过程中会产生较多的变形孪晶，孪晶的出现也会为再结晶提供形核位点，虽然孪晶与再结晶的相互作用在实验中已有较多的报道[34–38]，但是具体物理机制尚不明晰，仍有较大的理论研究空间。

此项工作是在国家超级计算天津中心的“天河一号”超级计算机上完成的，感谢“天河一号”的大力支持。感谢北京应用物理与计算数学研究所的王越超、刘海风、孙博、高兴誉，北京理工大学的陈子航、宋宇、王劲翔，北京科技大学的蔡赟、徐远骥对本研究工作的帮助。

## 参考文献：

[1] 谭叶, 肖元陆, 薛桃, 等. 镁铝合金的冲击熔化行为实验研究 [J]. 高压物理学报, 2019, 33(2): 020106.
TAN Y, XIAO Y L, XUE T, et al. Melting of MB2 alloy under shock compression [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2019, 33(2): 020106.

[2] 李定远, 朱志武, 卢也森. 冲击加载下 42CrMo 钢的动态力学性能及其本构关系 [J]. 高压物理学报, 2017, 31(6): 761–768.
LI D Y, ZHU Z W, LU Y S. Mechanical properties and constitutive relation for 42CrMo steel under impact load [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2017, 31(6): 761–768.

[3] 潘建华, 陈学东, 姜恒, 等. 准静态和动态加载对裂纹扩展阻力曲线的影响及其关系的研究 [J]. 高压物理学报, 2015, 29(2): 109–116.
PAN J H, CHEN X D, JIANG H, et al. Loading rate effect on crack resistance curves and their correlations [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2015, 29(2): 109–116.

[4] MALIK A, WANG Y W, CHENG H W, et al. Post deformation analysis of the ballistic impacted magnesium alloys, a short-review [J]. Journal of Magnesium and Alloys, 2021, 9(5): 1505–1520.

[5] MEDVEDEV A E, MACONACHIE T, LEARY M, et al. Perspectives on additive manufacturing for dynamic impact applications [J]. Materials & Design, 2022, 221: 110963.

[6] NAZEER F, LONG J Y, YANG Z, et al. Superplastic deformation behavior of Mg alloys: a-review [J]. Journal of Magnesium and Alloys, 2022, 10(1): 97–109.

[7] XU W L, YU J M, JIA L C, et al. Deformation behavior of Mg-13Gd-4Y-2Zn-0.5Zr alloy on the basis of LPSO kinking, dynamic recrystallization and twinning during compression-torsion [J]. Materials Characterization, 2021, 178: 111215.

[8] MALIK A, NAZEER F, NAQVI S Z H, et al. Microstructure feathers and ASB susceptibility under dynamic compression and its correlation with the ballistic impact of Mg alloys [J]. Journal of Materials Research and Technology, 2022, 16: 801–813.

[9] MALIK A, WANG Y W. A short review on high strain rate superplasticity in magnesium-based composites materials [J]. International Journal of Lightweight Materials and Manufacture, 2023, 6(2): 214–224.

[10] HE M F, CHEN L X, YIN M, et al. Review on magnesium and magnesium-based alloys as biomaterials for bone immobilization [J]. Journal of Materials Research and Technology, 2023, 23: 4396–4419.

[11] DONG J H, LIN T, SHAO H P, et al. Advances in degradation behavior of biomedical magnesium alloys: a review [J]. Journal of Alloys and Compounds, 2022, 908: 164600.

[12] 苏磊, 杨国强. 动态压力加载/卸载装置 dDAC 及原位表征技术研究进展 [J]. 高压物理学报, 2021, 35(6): 060102.
SU L, YANG G Q. Research progress of dynamic pressure loading/unloading device and *in-situ* characterization technology [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2021, 35(6): 060102.

[13] GOETZ R L, SEETHARAMAN V. Modeling dynamic recrystallization using cellular automata [J]. Scripta Materialia, 1998, 38(3): 405–413.

[14] JONAS J J, QUELENNEC X, JIANG L, et al. The Avrami kinetics of dynamic recrystallization [J]. Acta Materialia, 2009, 57(9): 2748–2756.

[15] KUBIN L P, CANOVA G, CONDAT M, et al. Dislocation microstructures and plastic flow: a 3D simulation [J]. Solid State Phenomena, 1992, 23/24: 455–472.

[16] MA A, ROTERS F. A constitutive model for fcc single crystals based on dislocation densities and its application to uniaxial compression of aluminium single crystals [J]. Acta Materialia, 2004, 52(12): 3603–3612.

[17] MA A, ROTERS F, RAABE D. A dislocation density based constitutive model for crystal plasticity FEM including geometrically necessary dislocations [J]. Acta Materialia, 2006, 54(8): 2169–2179.

[18] PÉREZ-PRADO M T, DEL VALLE J A, CONTRERAS J M, et al. Microstructural evolution during large strain hot rolling of

an AM60 Mg alloy [J]. Scripta Materialia, 2004, 50(5): 661–665.

[19] SAKAI T, BELYAKOV A, KAIBYSHEV R, et al. Dynamic and post-dynamic recrystallization under hot, cold and severe plastic deformation conditions [J]. Progress in Materials Science, 2014, 60: 130–207.

[20] CHEN L Q, YANG W. Computer simulation of the domain dynamics of a quenched system with a large number of nonconserved order parameters: the grain-growth kinetics [J]. Physical Review B, 1994, 50(21): 15752–15756.

[21] MOELANS N, GODFREY A, ZHANG Y B, et al. Phase-field simulation study of the migration of recrystallization boundaries [J]. Physical Review B, 2013, 88(5): 054103.

[22] ZHAO P Y, SONG EN LOW T, WANG Y Z, et al. An integrated full-field model of concurrent plastic deformation and microstructure evolution: application to 3D simulation of dynamic recrystallization in polycrystalline copper [J]. International Journal of Plasticity, 2016, 80: 38–55.

[23] CAI Y, SUN C Y, LI Y L, et al. Phase field modeling of discontinuous dynamic recrystallization in hot deformation of magnesium alloys [J]. International Journal of Plasticity, 2020, 133: 102773.

[24] 姚松林, 裴晓阳, 于继东, 等. 基于位错动力学方法的动态塑性变形研究 [J]. 高压物理学报, 2019, 33(3): 030107.
YAO S L, PEI X Y, YU J D, et al. Overview of the study of dynamical plastic deformation based on dislocation dynamics method [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2019, 33(3): 030107.

[25] 许可. 相场模拟多物理场调控镁合金不连续动态再结晶 [D]. 北京: 北京理工大学, 2023.
XU K. Multi-physics-field manipulating discontinuous dynamic recrystallization in magnesium alloys via phase-field simulations [D]. Beijing: Beijing Institute of Technology, 2023.

[26] CHEN M S, YUAN W Q, LI H B, et al. Modeling and simulation of dynamic recrystallization behaviors of magnesium alloy AZ31B using cellular automaton method [J]. Computational Materials Science, 2017, 136: 163–172.

[27] LIU J, CUI Z, RUAN L. A new kinetics model of dynamic recrystallization for magnesium alloy AZ31B [J]. Materials Science and Engineering: A, 2011, 529: 300–310.

[28] LI Y, HOU P J, WU Z G, et al. Dynamic recrystallization of a wrought magnesium alloy: grain size and texture maps and their application for mechanical behavior predictions [J]. Materials & Design, 2021, 202: 109562.

[29] CHEN S F, LI D Y, ZHANG S H, et al. Modelling continuous dynamic recrystallization of aluminum alloys based on the polycrystal plasticity approach [J]. International Journal of Plasticity, 2020, 131: 102710.

[30] HUANG W Y, CHEN J H, ZHANG R Z, et al. Effect of deformation modes on continuous dynamic recrystallization of extruded AZ31 Mg alloy [J]. Journal of Alloys and Compounds, 2022, 897: 163086.

[31] LEONARD M, MOUSSA C, ROATTA A, et al. Continuous dynamic recrystallization in a Zn-Cu-Ti sheet subjected to bilinear tensile strain [J]. Materials Science and Engineering: A, 2020, 789: 139689.

[32] LIU L, WU Y X, AHMAD A S. A novel simulation of continuous dynamic recrystallization process for 2219 aluminium alloy using cellular automata technique [J]. Materials Science and Engineering: A, 2021, 815: 141256.

[33] ZHANG J J, YI Y P, HE H L, et al. Kinetic model for describing continuous and discontinuous dynamic recrystallization behaviors of 2195 aluminum alloy during hot deformation [J]. Materials Characterization, 2021, 181: 111492.

[34] GUO P C, LIU X, ZHU B W, et al. The microstructure evolution and deformation mechanism in a casting AM80 magnesium alloy under ultra-high strain rate loading [J]. Journal of Magnesium and Alloys, 2022, 10(11): 3205–3216.

[35] LI N L, HUANG G J, ZHONG X Y, et al. Deformation mechanisms and dynamic recrystallization of AZ31 Mg alloy with different initial textures during hot tension [J]. Materials & Design, 2013, 50: 382–391.

[36] POPOVA E, BRAHME A P, STARASELSKI Y, et al. Effect of extension $\{10\bar{1}2\}$ twins on texture evolution at elevated temperature deformation accompanied by dynamic recrystallization [J]. Materials & Design, 2016, 96: 446–457.

[37] XIE C, HE J M, ZHU B W, et al. Transition of dynamic recrystallization mechanisms of as-cast AZ31 Mg alloys during hot compression [J]. International Journal of Plasticity, 2018, 111: 211–233.

[38] XU S W, KAMADO S, MATSUMOTO N, et al. Recrystallization mechanism of as-cast AZ91 magnesium alloy during hot compressive deformation [J]. Materials Science and Engineering: A, 2009, 527(1/2): 52–60.

# Insight into Dynamic Recrystallization of AZ31B Magnesium Alloys by Phase-Field Simulations

XU Ke[1,2,3], SHENG Jie[3], LIU Yu[3], HUANG Houbing[2], SHI Xiaoming[4], SONG Haifeng[3]

（1. *School of Materials Science and Engineering*, *Beijing Institute of Technology*, *Beijing* 100081, *China*;
2. *Advanced Research Institute of Multidisciplinary Sciences*, *Beijing Institute of Technology*, *Beijing* 100081, *China*;
3. *Laboratory of Computational Physics*, *Institute of Applied Physics and Computational Mathematics*, *Beijing* 100094, *China*;
4. *School of Mathematics and Physics*, *University of Science and Technology Beijing*, *Beijing* 100083, *China*）

**Abstract:** Magnesium is widely used for materials science, aerospace, and military equipment. It is found that the mechanical property of magnesium under deformation loading is closely related to discontinuous dynamic recrystallization. In this work, we construct a dynamic recrystallization phenomenological model of magnesium alloy via phase-field methods. We choose AZ31B magnesium alloy as the research object and simulate grains and grain boundaries evolutions during dynamic recrystallization under 0.01–1.00 $s^{-1}$ and 250–400 ℃. Iterative solving methods of stress-strain curves and recrystallization evolutions are improved by introducing plastic deformation energy to phase-field model. The simulation results show the volume fraction of recrystallization grains and the average grain size of samples increase with the rise of temperature and decrease of strain rates.

**Keywords:** phase-field simulations; magnesium alloy; dynamic recrystallization; mechanical response