

Dr inż. Tomasz A. WALASEK, dr inż. Elżbieta MORYŃ-KUCHARCZYK,
dr inż. Zygmunt KUCHARCZYK
Politechnika Częstochowska, Instytut Technologii Mechanicznych, Częstochowa
mgr inż. Dorota MORAWSKA-WALASEK
Wyższa Szkoła Lingwistyczna, Częstochowa
Kontakt: tomasz.walasek@gmail.com

Komputerowa symulacja procesu rekrystalizacji statycznej

Computer simulation of the static recrystallization process

Streszczenie

Materiał ciągły zastosowany do modelowania procesu rekrystalizacji oparto na dwuwymiarowej tablicy zawierającej 40000 elementów. Porównano cztery typy nukleacji: nukleację nasyconą zarodkowo, nukleację o prędkości ciągłej, o prędkości zmiennej rosnącej i malejącej. Sigmoidalny kształt krzywej objętości zrekrystalizowanej od czasu obserwowany w symulacji jest często podkreślany w literaturze i znajduje potwierdzenie w przeprowadzonym doświadczeniu. Współczynnik Avramiego $n = 2$ został prawidłowo odwzorowany w symulacji. Wykazuje, że model odpowiada zmianom stopnia energii zmagazynowanej H/J .

Abstract

The continuum material has been modeled employing a 2D discrete lattice containing 200x200 elements. Four different nucleation models, i.e. site saturation, continuous, increasing and decreasing nucleation rate were compared. The sigmoidal time dependence of recrystallized volume fraction observed in the simulation is often emphasized in the literature and finds its justification in the experiment. The Avrami exponent $n = 2$ is properly reproduced by the simulations. It has been shown that the model correctly responds to the change in the degree of stored energy H/J .

Słowa kluczowe: rekrystalizacja, symulacja Monte Carlo, metoda Monte Carlo, modelowanie komputerowe, rozrost ziaren

Keywords: recrystallization, Monte Carlo simulation, Monte Carlo method, computer simulation, grain growth

1. WPROWADZENIE

Obróbkę plastyczną na zimno cechują niehomogeniczne odkształcenia skutkujące umocnieniem materiału. W skali mikroskopowej stan materiału odkształconego zawiera zwiększoną liczbę defektów struktury, takich jak: błędy ułożenia, wakanse i dyslokacje. W skali makro odkształcenie plastyczne jest charakteryzowane przez deformację ziaren. Zwiększona jest energia zmagazynowana układu. Ten niestabilny stan może zostać usunięty przez wyżarzanie w temperaturze rekrystalizacji.

1. INTRODUCTION

Cold metal forming processes are characterized by inhomogeneous plastic deformation which results in the phenomenon of hardening of the material. In the micro scale, as a result of cold plastic deformation, increase in the dislocation and point defects density occurs. In the macro scale the plastic strain is characterized by the grain deformation. The energy stored in the material increases. This unstable state can only be eliminated by annealing in the recrystallization temperature.

Rekrytalizacja pierwotna jest procesem, w którym odkształcona na zimno struktura zmienia się w strukturę wolną od naprężeń poprzez nukleację (zarodkowanie) i rozrost wolnych od naprężeń ziaren.

Przewidywanie mikrostrukturalnych parametrów struktury poddanej odkształceniom plastycznym i obróbce cieplnej, takich jak: kinetyka rekrytalizacji, wielkość i struktura ziarna jest konieczne, by zoptymalizować warunki procesu oraz właściwości produktu końcowego.

Opracowanie analitycznego modelu, który w pełni opisuje proces rekrytalizacji byłoby idealnym i wielce pożądanym rozwiązaniem omawianego problemu. Do tej pory nie udało się go jednak opracować ze względu na złożoność procesu interakcji ziaren.

Podstawy większości modeli analitycznych zostały opracowane niezależnie przez Johnson'a i Mehl'a, Avrami'ego oraz Kolmogorov'a i znane są powszechnie pod nazwą teorii JMAK. Zakładając że miejsca nukleacji są przypadkowe, rozrost ziaren jest izotropowy, a prędkość wzrostu jest stała, teoria JMAK przewiduje, że objętość rekrytalizowanego materiału X w danym czasie t wynosi:

$$X = 1 - \exp(-kt^n), \quad (1)$$

gdzie k oraz n są stałymi, a n określane jest jako współczynnik Avrami'ego [1].

Użyteczność metod analitycznych służących do przewidywania kinetyki rekrytalizacji oraz struktury ziarna, opartych na równaniu Avrami'ego, jest nadal dość ograniczona ze względu na złożoność parametrów równania. Symulacje numeryczne oparte na podobnym modelu wydają się bardzo obiecujące, ale nadal nie są one wystarczająco zaawansowane, by dokładnie odtworzyć rzeczywisty rozkład wielkości ziarna [2]. Komputerowe symulacje rozrostu ziaren i rekrytalizacji mogą zatem przyczynić się do lepszego zrozumienia tego zjawiska i umożliwić przewidywanie końcowych mikrostruktur.

2. TECHNIKA MONTE CARLO

Jedną z wiodących technik symulacji mikrostruktury jest metoda Monte Carlo, która

Primary recrystallization is the process in which a cold-worked matrix is transformed into a strain-free structure by the nucleation and growth of strain-free grains.

Prediction of microstructural parameters of the structure exposed to plastic deformation and heat treatment, such as the recrystallization kinetics, grain size, and texture, is required to optimise the processing conditions and the properties of the finished products.

The analytical model of recrystallization, able to describe it completely, would be an ideal and highly desired solution to the discussed problem. However, such a model has not yet been created due to the complexity of the grain interactions.

The basis for most analytical models was developed independently by Johnson and Mehl, Avrami and Kolmogorov and is known as the JMAK theory. Assuming that the nucleation sites are randomly distributed, grain growth is isotropic, and the growth rate remains constant, the JMAK theory predicts that the volume fraction of recrystallized material X in time is given by:

$$X = 1 - \exp(-kt^n), \quad (1)$$

where k and n are constants and n is usually referred to as the Avrami exponent [1].

For prediction of the kinetics of recrystallization and the resulting grain structure, analytical methods based on the Avrami equation are still limited, because of the complexity of the parameters in the equation. Numerical simulations based on a similar model show great promise but are still not sufficiently sophisticated to accurately reproduce the grain size distributions found in practice [2]. Computer simulations of grain growth and recrystallization may contribute to a better understanding of the phenomena and enable prediction of the final microstructures.

2. THE MONTE CARLO TECHNIQUE

One of the prominent techniques for the simulation of the microstructure is the Monte

jest stosowana do symulowania przemiany fazowej z paramagnetycznej na ferromagnetyczną, przejścia od stanu uporządkowanego do nieuporządkowanego i wzrostu kryształu [3, 4], krzepnięcia, rozrostu ziaren [5, 6], rekrytalizacji [7-10, 14-16] i przemiany fazowej [13].

W artykule omówiono zastosowanie algorytmu Monte Carlo do modelowania pierwotnej rekrytalizacji o zmiennej prędkości nukleacji.

W obecnym modelu struktura ciągła jest przedstawiona jako tablica dwuwymiarowa o rozmiarze 200x200 elementów dyskretnych. Orientacja krystalograficzna ziaren, wyrażona numerem od 1 do Q , jest przypisana każdemu elementowi tablicy ij . Pierwsza tablica jest tworzona poprzez losowe przypisanie numerów od 1 do Q . W każdym kroku obliczeń, dla wszystkich elementów tablicy, w losowej kolejności jest wyznaczona nowa liczba z przedziału od 1 do Q , określająca jego nową, możliwą orientację. Dla takiego elementu są obliczane zmiana wartości energii swobodnej granicy ziaren oraz wnętrza ziaren ΔE . Jeśli zmiana energii, spowodowana reorientacją, spełnia warunek $\Delta E \leq 0$, wówczas następuje transpozycja orientacji S_i danego elementu na nową orientację. W przeciwnym wypadku nie dochodzi do modyfikacji orientacji S_i . Zmiana orientacji elementu znajdującego się na granicy ziaren na orientację najbliższego sąsiedniego elementu wskazuje na ruch granicy ziarna. Dla tablicy o rozmiarze N , N prób zmian orientacji określa się jako jeden krok Monte Carlo (MCS). Aby zapobiec łączeniu się ziaren o tej samej orientacji, przyjęto $Q = 48$. Zrekrytalizowane zarodki dane są orientacjami S_i w zakresie od 49 do 64 [8,11]. Żądany stopień odkształcenia jest wprowadzony do początkowej tablicy.

3. WYNIKI SYMULACJI

3.1. Model procesu rekrytalizacji

Wykonano zestaw testów rekrytalizacji statycznej. Uważa się, że siłą dominującą rekrytalizacji jest energia zmagazynowana odkształcenia plastycznego rozłożona we wnętrzu

Carlo method, which has already been used for the simulation of paramagnetic to ferromagnetic phase transition, order-disorder transition and crystal growth [3, 4], solidification, grain growth [5,6], recrystallization [7-10, 14-16] and phase transformation [13].

In the paper the Monte Carlo algorithm has been applied to model the primary recrystallization of variable nucleation rate.

In the present model the continuum microstructure is divided into a number of discrete points using a two dimensional 200x200 lattice. The crystallographic orientation of grains, expressed by a number from 1 to Q , is assigned to each lattice site ij . Assigning numbers ranging from 1 to Q at random creates the first lattice. Having selected both random lattice site and a new possible orientation from 1 to Q , the change in energy ΔE , associated with the re-orientation, is calculated. The new orientation is accepted if ΔE is less than or equal to zero. A lattice site whose orientation is different from a neighbouring one is regarded part of a grain boundary. Otherwise the lattice site belongs to the grain interior. The successful re-orientation of a site belonging to a grain boundary to an orientation of neighbouring, different site is considered to be boundary motion. For the lattice size N , N re-orientation attempts are referred to as one Monte Carlo step (MCS). In order to prevent the impingement of grain of the same orientation, the Q number is chosen 48. Recrystallized nuclei are given orientations S_i ranging from 49 to 64 [8, 11]. The requested degree of deformation is set to the initial lattice.

3. RESULTS OF THE SIMULATION

3.1. Recrystallization model

In the present paper a number of tests on the static recrystallization were performed. The dominant driving force for recrystallization is assumed to be stored energy of plastic

odkształconych ziaren w postaci defektów punktowych i dyslokacji. Testy obejmowały modele o różnej prędkości nukleacji I różnym stopniu energii zmagazynowanej H/J . Współczynnik H/J oznaczono jako stopień energii zmagazynowanej i stosowano w symulacji do sterowania procesem rekrytalizacji. Wstępna tablica służąca do symulacji procesu rekrytalizacji została wykonana przy pomocy symulacji rozrostu ziaren metodą Monte Carlo, a następnie odkształcona.

Częstotliwość zarodkowania występującego w narożach ziaren, na granicy ziaren oraz w ich wnętrzu omawiana jest przez Saito [7]. W czasie symulacji zaobserwowano, że zarodkowanie wewnątrz ziaren wynosi zero lub jest bardzo małe przy $H/J = 1$ lub $1,5$. Zarodki rozrastają się tylko na granicy ziaren lub na styku trzech granic. Zjawisko to określa się mianem nukleacji heterogenicznej. Dla $H/J = 2$ oraz $2,5$ zarodki krytyczne powstają w każdym miejscu tablicy. Dominuje zarodkowanie wewnątrz ziaren. Jest to nukleacja homogeniczna. Przeprowadzono symulację czterech typów nukleacji:

- nukleacja nasycona zarodkowo – $I = 200$ zarodków umieszczonych losowo na tablicy w czasie $t = 0$ i nie powstały nowe zarodki,
- stała prędkość nukleacji – $I = 10$ zarodków umieszczonych losowo na tablicy po każdym kroku Monte Carlo,
- rosnąca prędkość nukleacji – $I = n(i-1)/10$ nowych zarodków umieszczonych na tablicy po każdym 10 MCS aż do $I = 100$; $n = 10$, $i = 1, 11, 21, \dots, 101$ MCS,
- malejąca prędkość nukleacji – co 10 MCS, $I - n(i-1)/10$ zarodki umieszczano losowo na tablicy. W artykule przyjęto $I = 100$ (malejąca prędkość nukleacji I) oraz $I = 200$ (malejąca prędkość nukleacji II), $n = 10$ oraz $i = 1, 11, 21, \dots$ MCS.

Każdy typ nukleacji był symulowany przy czterech stopniach energii zmagazynowanej $H/J = 1; 1,5; 2$ oraz $2,5$ [8, 11].

deformation distributed in the interior of the deformed grains, in the form of point defects and dislocations. The tests included different models of nucleation rates and different degrees of the stored energy H/J . The H/J coefficient was described as the degree of stored energy and was used in the simulation to control the recrystallization process. The initial lattice for the recrystallization simulation was created by the Monte Carlo grain growth simulation and then deformed.

Frequency of the nucleation occurring at the grain corners, grains boundaries and grain interior was discussed by Saito [7]. It was observed that, in the simulation, nucleation at the grain interior is zero or very low at $H/J = 1$ or 1.5 . The nucleus will grow only on the grain boundary or in the junction of three boundaries. It is considered to be heterogeneous nucleation. For $H/J = 2$ and 2.5 the critical nuclei can grow when placed anywhere in the lattice. Nucleation on the grain interior becomes dominant. This can be referred to as homogeneous nucleation. Four types of nucleation were simulated:

- *site saturated – $I = 200$ nuclei were randomly placed on the lattice in $t = 0$ and no additional nuclei were created,*
- *constant nucleation rate – $I = 10$ nuclei were randomly placed on the lattice after each Monte Carlo Step,*
- *increasing nucleation rate – $I = n(i-1)/10$ new nuclei were placed on the lattice every 10 MCS until $I = 100$; $n = 10$, $i = 1, 11, 21, \dots, 101$ MCS,*
- *decreasing nucleation rate – every 10 MCS, $I - n(i-1)/10$ nuclei were randomly placed on the lattice. In the present paper $I = 100$ (decreasing nucleation rate I) and $I = 200$ (decreasing nucleation rate II), $n = 10$ and $i = 1, 11, 21, \dots$ MCS were used.*

Each nucleation type was simulated using four degrees of stored energy $H/J = 1; 1.5; 2$ and 2.5 [8, 11].

3.2. Objętość zrekrystalizowana F

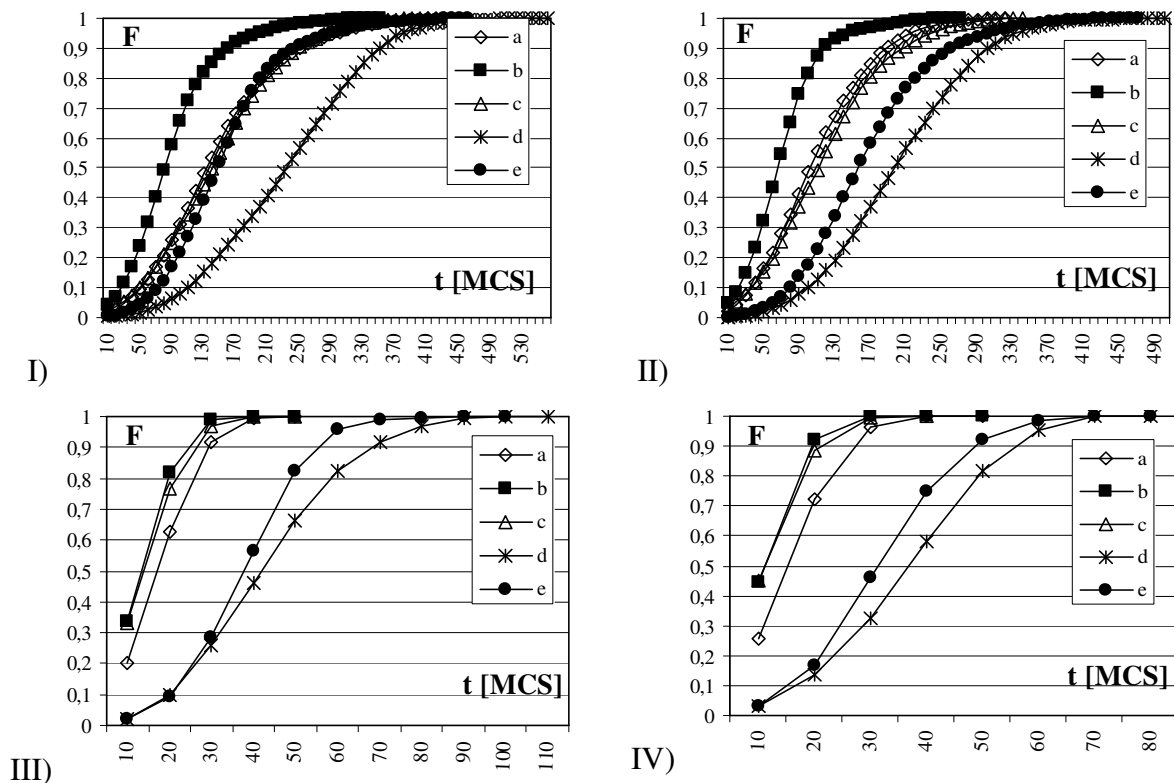
Na rysunku 1 przedstawiono zależność objętości zrekrystalizowanej F w funkcji czasu wyrażonego krokami Metody Monte Carlo – MCS. Dla małych wartości energii zmagazynowanej $H/J = 1$ (rys. 1 I) oraz $H/J = 1,5$ (rys. 1 II) najszybszym modelem rekrytalizacji jest malejąca prędkość nukleacji II (b) oraz I (a). Następne w kolejności są modele nukleacji nasyconej zarodkowo (c), o stałej prędkości nukleacji (e) oraz o rosnącej prędkości nukleacji (d).

Dla wyższych wartości, gdzie $H/J = 2$ (rys. 1 III) oraz $2,5$ (rys. 1 IV) szybciej zrekrystalizuje materiał symulowany nukleacją nasyconą zarodkowo. Dzieje się tak dlatego, że dla wyższych wartości energii zmagazynowanej H/J , czas całkowitej rekrytalizacji wynosi 50 MCS dla modeli a), b) oraz d) a w tak krótkim czasie niezwykle istotna jest ilość zarodków wprowadzonych do struktury w czasie $t = 0$.

3.2. Recrystallized volume fraction F

It can be noticed from figure 1 that for the small values of stored energy $H/J = 1$ (fig. 1 I) and $H/J = 1.5$ (fig. 1 II) the fastest model of recrystallization is the decreasing nucleation rate II (b) and I (a) followed by the site saturated model (c), continuous nucleation rate model (e) and the model of increasing nucleation rate (d).

For higher values of $H/J = 2$ (fig. 1 III) and 2.5 (fig. 1 IV) the material simulated with the site saturated nucleation model recrystallized first. It is because for the higher values of the degree of the stored energy H/J , the time of completed recrystallization is 50 MCS for models a), b) and d) and in such a short time the amount of nuclei introduced into microstructure at $t = 0$ is crucial.



Rys. 1. Objętość zrekrystalizowana $F(t)$ obliczona dla stopnia energii zmagazynowanej I) $H/J=1$, II) $H/J=1,5$, III) $H/J=2$ oraz IV) $H/J=2,5$ i różnych modeli nukleacji: a) malejąca prędkość nukleacji I, b) malejąca prędkość nukleacji II, c) nukleacja nasycona zarodkowo, d) rosnąca prędkość nukleacji oraz e) ciągła (stała) prędkość nukleacji

Fig. 1. Recrystallized volume fraction $F(t)$ for the degree of stored energy I) $H/J=1$, II) $H/J=1.5$, III) $H/J=2$ and IV) $H/J=2.5$ and different models of nucleation: a) decreasing nucleation rate I, b) decreasing nucleation rate II, c) site saturated, d) increasing nucleation rate and e) continuous nucleation rate

Dla nukleacji nasyconej zarodkowo, jak i dla malejącej prędkości nukleacji II liczba zarodków przy $t = 0$ wynosi 200, tj. dwa razy więcej niż dla malejącej prędkości nukleacji I. W dłuższym okresie czasu te proporcje ulegają zmianie. Wprowadzenie do układu większej energii swobodnej powoduje znaczny wzrost prędkości rekrytalizacji. Porównanie danych z rysunków 1-4 wskazuje, że dla $H/J = 1$ rekrytalizacja zakończyła się dla czasu $t = 350$ MCS dla nukleacji o prędkości malejącej II, podczas gdy dla nukleacji o prędkości rosnącej dla czasu $t = 560$ MCS. Dla $H/J = 2$ czasy wynoszą odpowiednio $t = 50$ MCS i $t = 110$ MCS. Zakłada się, że stopień energii zmagazynowanej H/J odzwierciedla zarówno wartość odkształcenia, jak i temperaturę rekrytalizacji. Zaobserwowano, że wyższa wartość współczynnika H/J skutkuje większą prędkością rekrytalizacji. Zjawisko to jest zgodne z prawami rekrytalizacji sformułowanymi przez Burke'a i Turnbull'a w 1952 roku, a opisanymi przez Byrne'a [1].

3.3. Graficzna prezentacja współczynnika Avrami'ego

Współczynnik Avrami'ego n jest określony przez kąt nachylenia wykresu Avrami'ego:

$$n = \frac{\partial \log(\ln(1/(1-F)))}{\partial \log t} \quad (2)$$

Rysunek 2 przedstawia wykres Avrami'ego dla różnych modeli nukleacji przy założeniu, że stopień energii zmagazynowanej $H/J = 1$. Współczynnik Avrami'ego $n = 2$, oczekiwany dla rekrytalizacji dwuwymiarowej jest zaznaczony jako kąt nachylenia przeciwprostokątnej w trójkącie. Wykres Avrami'ego powinien być liniowy o pochyleniu równym współczynnikowi Avrami'ego n . Odchylenie od liniowości obserwowane podczas symulacji, zwłaszcza w początkowym okresie, może być spowodowane wprowadzeniem do układu stosunkowo dużej liczby zarodków w czasie $t = 0$. Ponadto, klasyczna teoria JMAK zakłada tę samą stałą prędkość nukleacji. W niniejszej symulacji to założenie nie jest spełnione. Dodatkowo, wielu autorów, np. Srolovitz et al. [9], uważa, że takie zachowanie liniowe nigdy jest obserwowane w badaniach doświadczalnych.

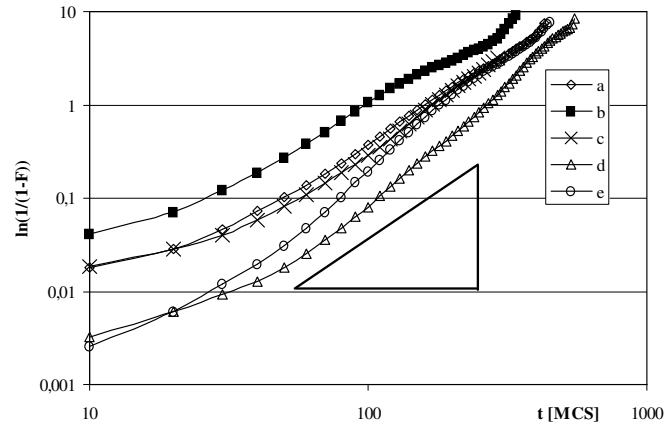
For the site saturated nucleation as well as for the decreasing nucleation rate II the amount of the nuclei at $t = 0$ is 200 that is e.g. twice as much as for the decreasing nucleation rate I. In a longer time these proportions change. Setting higher energy causes a significant increase in the nucleation rate. Comparing data from fig. 1-4 it can be noticed that for $H/J = 1$ recrystallization was completed at $t = 350$ MCS for the decreasing nucleation rate II while for the increasing nucleation rate at $t = 560$ MCS. For $H/J = 2$ the times are $t = 50$ MCS and $t = 110$ MCS respectively. It is assumed that the degree of the stored energy H/J reflects both the amount of deformation and the recrystallization temperature. Thus it can be observed that higher values of H/J result in a higher recrystallization rate. It is in agreement with the recrystallization rules formulated by Burke and Turnbull in 1952 and cited by Byrne [1].

3.3. Graphical representation of the Avrami exponent

The Avrami exponent n (1) is determined by the slope of the Avrami plot:

$$n = \frac{\partial \log(\ln(1/(1-F)))}{\partial \log t} \quad (2)$$

The Avrami plots for different nucleation models and the example value of $H/J = 1$ are shown in figure 2. The Avrami exponent $n = 2$, expected for the 2D recrystallization, is indicated by the slope of the triangle. The Avrami plot is expected to be linear, with a slope equal to the Avrami exponent n . The departure from linearity observed in the simulation results, especially for the early times, may be caused by putting a relatively large number of nuclei into the initial matrix in $t = 0$. In the classical JMAK theory the same constant growth rate for all the recrystallized grains is assumed. In the present simulation that assumption is not satisfied. Furthermore many authors, e.g. Srolovitz et al. [9], stated that this linear behavior is never observed in experiment.



Rys. 2. Graficzna interpretacja równania JMAK dla stopnia energii zmagazynowanej $H/J = 1$ oraz różnych modeli nukleacji: a) nukleacja o prędkości malejącej I, b) nukleacja o prędkości malejącej II, c) nukleacja nasycona zarodkowo, d) nukleacja o prędkości rosnącej oraz e) nukleacja o prędkości ciągłej

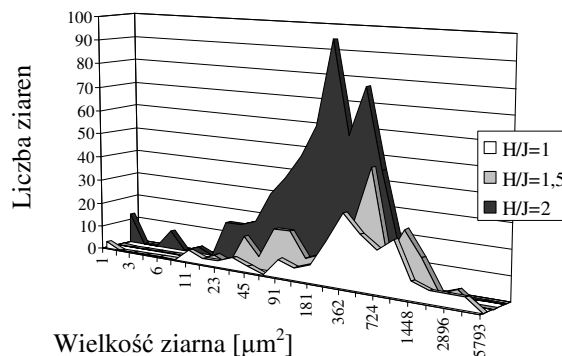
Fig. 2. The Avrami plots for the degree of stored energy $H/J = 1$ and different nucleation models: a) decreasing nucleation rate I, b) decreasing nucleation rate II, c) site saturated, d) increasing nucleation rate and e) continuous nucleation rate

3.4. Struktury otrzymane w wyniku symulacji

Jedną z największych zalet modelowania procesu rozrostu ziaren i rekrytalizacji za pomocą metody Monte Carlo jest możliwość wygenerowania złożonych mikrostruktur przy zastosowaniu prostych postulatów. Badania hipotez teoretycznych mogą być zatem prowadzone przez porównanie mikrostruktur uzyskanych w wyniku symulacji i obserwowanych w doświadczeniu. Rys. 3 przedstawia przykładowy rozkład wielkości ziaren uzyskany w wyniku symulacji, podczas której prędkość nukleacji malała, a stopień energii zmagazynowanej wynosił $H/J = 1$, $H/J = 1,5$ and $H/J = 2$.

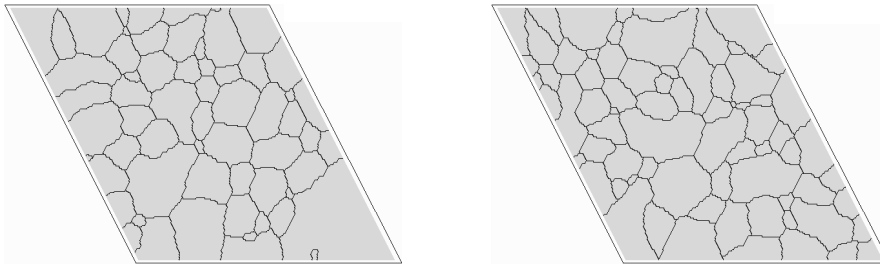
3.4. Simulated microstructures

One of the great advantages of the Monte Carlo method of simulating the grain growth and recrystallization is the possibility of modelling and obtaining the complex microstructure using simple postulates. Thus, the theoretical hypotheses can easily be verified by the comparison of the real microstructures and these from the simulation. In figure 3 an example of the grain size distribution obtained from the simulation is presented. The calculations were made for the decreasing nucleation rate and the degree of stored energy $H/J = 1$, $H/J = 1.5$ and $H/J = 2$.



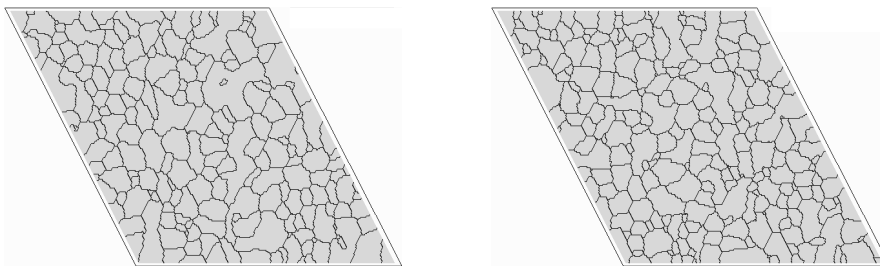
Rys. 3. Histogram rozkładu wielkości ziaren obliczony dla nukleacji o malejącej prędkości i stopniu energii zmagazynowanej $H/J = 1$, $H/J = 1,5$ oraz $H/J = 2$

Fig. 3. Histogram of the grain size distribution for the calculated microstructures for decreasing nucleation rate and the degree of stored energy $H/J = 1$, $H/J = 1.5$ and $H/J = 2$



Rys. 4. Mikrostruktura otrzymana w wyniku symulacji rekrytalizacji o prędkości nukleacji malejącej II oraz stopniu energii zmagazynowanej $H/J = 1$ (320 MCS) oraz $H/J = 1,5$ (280 MCS)

Fig. 4. Microstructures obtained from the simulations under decreasing nucleation rate II and degree of stored energy $H/J = 1$ and $H/J = 1.5$



Rys. 5. Mikrostruktura otrzymana w wyniku symulacji rekrytalizacji o prędkości nukleacji malejącej II oraz stopniu energii zmagazynowanej $H/J = 2$ (40 MCS) oraz $H/J = 2,5$ (37 MCS)

Fig. 5. Microstructure simulated under decreasing nucleation rate II and degree of stored energy $H/J = 2$ and $H/J = 2.5$

Mikrostruktury symulowane przy użyciu modelu nukleacji o prędkości malejącej II, i odpowiednio, $H/J = 1$; 1,5, 2 oraz 2,5 zaprezentowano na rysunkach 4 i 5. Zarówno otrzymany rozkład wielkości ziaren, jak i mikrostruktury, wskazują na znaczny wpływ wartości energii zmagazynowanej H/J . Stopień energii zmagazynowanej H/J jest ściśle związany z odkształceniem plastycznym na zimno zachodzącym przed procesem rekrytalizacji. Większa wartość H/J odpowiada więc większemu odkształceniu plastycznemu na zimno.

4. WNIOSKI

Kinetyka rekrytalizacji statycznej została zamodelowana przy użyciu techniki Monte Carlo. Podczas symulacji różnicowano stopień energii zmagazynowanej H/J i modele nukleacji. Na podstawie otrzymanych wyników wyciągnięto następujące wnioski:

1. Przebieg krzywych objętości zrekrystalizowanej $F(t)$ otrzymanych w wyniku symulacji Monte Carlo rekrytalizacji pierwotnej, pozwala na stwierdzenie poprawności opra-

Figures 4 and 5 present microstructures simulated with the decreasing nucleation rate II and $H/J = 1$; 1.5, 2 and 2.5 respectively. Figures 3-5 indicate strong influence of H/J value on the recrystallized grain size and its distribution. The degree of stored energy H/J is strictly connected with the cold plastic deformation before the recrystallization. Higher value of H/J corresponds to bigger deformation.

4. SUMMARY

Static recrystallization kinetics has been simulated by the Monte Carlo technique. In the simulation the degree of stored energy H/J and the nucleation models have varied. The following conclusions have been drawn based on the obtained results:

1. *The Monte Carlo simulations of the primary static recrystallization confirm correctness of the models concerning the curves of the recrystallized volume fraction $F(t)$.*

cowanego modelu. Sigmoidalny kształt omawianych krzywych jest obserwowany zarówno w doświadczeniu jak i często podkreślany w opracowaniach innych autorów.

2. Odwzorowana w symulacji wielkość współczynnika Avramiego $n = 2$ potwierdza poprawność modelu, pozostając w zgodzie z cytowaną literaturą i badaniami doświadczalnymi.
3. Zależność pomiędzy wielkością zrekrystalizowanych ziaren, a energią zmagazynowaną H/J pozostaje w zgodzie z teoretycznymi i doświadczalnymi pracami innych autorów.

The sigmoidal time dependence of recrystallized volume fraction observed in the simulation is often emphasized in the literature and finds its justification in the experiment.

2. *The Avrami exponent $n = 2$ is properly reproduced by the simulations.*
3. *The dependence of the recrystallized grain size on the degree of stored energy H/J also remains in agreement with theoretical and experimental works of other authors.*

LITERATURA/REFERENCES

- [1] Byrne J.G.: Recovery, Recrystallization and Grain Growth, Macmillan, NY, (1965).
- [2] D.J. Srolovitz D.J.: Computer Simulation of Microstructural Evolution, TSM-AIME, Warrendale, PA, 1985.
- [3] Binder K.: Monte Carlo Methods in Statistical Physics, Spinger Verlag, Berlin, 1986.
- [4] Binder K.: Monte Carlo Simulation in Condensed Matter Physics, Springer Verlag, Berlin, 1992.
- [5] Anderson M.P., Srolovitz D.J., Grest G.S., Sahni P.S.: Computer Simulation of Grain Growth - I. Kinetics, Acta Metall., 32, 1984.
- [6] Srolovitz D.J., Grest G.S., Anderson M.P.: Computer Simulation of Recrystallization – I, Acta Metall., 34, 1986.
- [7] Saito Y.: The Monte Carlo Simulation of Microstructural Evolution in Metals, Materials Science and Engineering, A223, 1997.
- [8] Walasek T.A.: Experimental verification of Monte Carlo recrystallization model, Journal of Materials Processing Technology, 157 (2004).
- [9] Srolovitz D.J., Grest G.S., Anderson M.P., Rollett A.D.: Computer Simulation of Recrystallization - II, Acta Metall., 35, 1987.
- [10] Parkitny R., Walasek T.: The Monte Carlo Simulation of Primary Recrystallization, Materiały V Konferencji KomPlasTech'98, Bukowina Tatrzańska, 1998.
- [11] Walasek T.: Computer Modelling of Primary Recrystallization, Inżynieria Materiałowa, 4, 1998.
- [12] Parkitny R., Walasek T.: Verification of the Numerical Model of the Static Recrystallization of Armco Iron, Proceedings of 8th International Conference METALFORMING' 2000, Kraków, Poland, 2000.
- [13] Saito Y.: The Monte Carlo Simulation of Microstructural Evolution in Metals, Materials Science and Engineering, A223, 1997.
- [14] Sieradzki L., Madej L.: A perceptive comparison of the cellular automata and Monte Carlo techniques in application to static recrystallization modeling in polycrystalline materials, Computational Materials Science, 67, 2013.
- [15] Kazeminezhad M.: Combination of the upper bound and potts models for simulation of microstructure in wire drawing and annealing processes, Journal of Materials Engineering and Performance, 18/1, 2009.
- [16] Xiao-wu Nie, Shan Xie, Hua Xu, Yong Du: Simulation of the ultra-fine microstructure evolution during annealing of AZ31 processed by ECAP, Physica B: Condensed Matter, 405/8, 2010.