

# 不同初始组织的 3D 晶粒长大仿真及其准稳态分布研究

王 浩<sup>1</sup>, 刘国权<sup>1</sup>, 秦湘阁<sup>2</sup>

(1. 北京科技大学 新金属材料国家重点实验室, 北京 100083)

(2. 佳木斯大学, 黑龙江 佳木斯 154007)

**摘 要:** 设计了晶粒尺寸分别呈  $\beta=2.96$  与  $\beta=3.47$  的 Weibull 分布的 2 种 3D 初始晶粒组织, 采用 Potts 模型 Monte Carlo 改进算法进行了界面曲率驱动的 3D 晶粒长大过程的仿真研究。晶粒仿真长大过程遵循抛物线长大规律, 且晶粒生长指数非常接近于理论值 0.5。仿真结果表明: 源于 2 种初始组织所得准稳态晶粒尺寸均趋于  $\beta=2.80\pm 0.03$  的同种 Weibull 分布, 准稳态晶粒面数则均呈对数正态分布。进一步分析发现, 刘国权及其合作者近年来基于不同长大速率理论模型导出的两类 3D 准稳态晶粒尺寸分布函数与本文仿真实验所得数据相互吻合。

**关键词:** 三维晶粒长大; Monte Carlo 仿真; 晶粒尺寸分布

中图分类号: TG111; O189

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2009)01-0126-05

晶粒长大对多晶材料的硬度、强度和韧性等材料性能有重要作用, 因此关于晶粒长大的研究对控制和提高材料的物理机械性能具有重要意义。采用计算机仿真技术(特别是采用 Potts 模型 Monte Carlo 方法)仿真晶粒长大的过程已经有了广泛的研究<sup>[1-8]</sup>, 但已有的 3D 仿真大多只是对某种单一初始组织的仿真, 无法考察不同初始组织对晶粒长大的影响进行研究。文献[8,9]对不同参数的二维(2D) Weibull 尺寸分布初始晶粒组织的演变进行了仿真研究, 发现不同的 2D 初始组织在准稳态长大阶段的尺寸分布趋于相同参数的同一种 Weibull 尺寸分布; 但该文献中没有考察不同初始组织对三维(3D)晶粒长大演变的影响。

本研究设计了参数  $\beta=2.96$  与  $\beta=3.47$  的 2 种 Weibull 尺寸分布的 3D 初始晶粒组织, 并采用一种改进的 Potts 模型 Monte Carlo 算法进行了正常晶粒长大过程的仿真实验, 对准稳态晶粒尺寸分布、晶粒拓扑特征演变、晶粒长大动力学进行了研究, 并探讨了晶粒的初始尺寸分布对 3D 晶粒长大过程的影响。此外, 刘国权及其合作者近年来基于不同长大速率理论模型推导出了两类 3D 准稳态晶粒尺寸分布函数, 本研究采用此 2 种解析理论分布函数对仿真实验的数据进行了对比分析。仿真采用的是一种改进的 Potts 模型 Monte Carlo 算法<sup>[10]</sup>, 该算法吸收了元胞自动机法的思

想, 使一个仿真步长(Monte Carlo Step, 简称为 MCS)内, 各个单元同时进行再取向尝试, 每个单元再取向的结果只取决于此刻它的邻域状态。利用 C 语言实现上述仿真算法<sup>[10]</sup>, 且已证明该算法具有较高的仿真效率。

## 1 改进的 Potts 模型 Monte Carlo 方法

将仿真系统离散成  $300\times 300\times 300$  分立的格点, 由一系列随机整数来表征格点的微观取向, 作为构成晶粒的最小单元, 整个系统以一个简立方点阵表达。采用 Laguerre tessellation 方法设计生成具有不同参数  $\beta$  的 2 种 Weibull 尺寸分布 3D 晶粒组织, 生成的初始组织中, 相邻且取向相同的微单元群体构成同一晶粒, 取向不同的近邻单元之间存在晶界。系统界面能由描述原子相互作用的哈密顿算子(Hamiltonian)定义, 表示为:

$$E = -J \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{NN} (\delta_{S_i S_j} - 1), \quad \delta_{S_i S_j} = \begin{cases} 1, & S_i = S_j \\ 0, & S_i \neq S_j \end{cases} \quad (1)$$

式中,  $J$  是正的常数,  $\delta_{S_i S_j}$  是 Kronecker delta 函数,  $S_i$ 、 $S_j$  分别对应于单元  $i$  和  $j$  的取向,  $NN$  为单元  $i$  的所有近邻格点总数, 这里  $NN$  取 26, 即考虑单元的 6 个最近邻格点与 12 个次近邻格点以及 8 个第三近邻的格点

收稿日期: 2008-01-17

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(50671010)

作者简介: 王 浩, 男, 1979 年生, 博士生, 北京科技大学材料科学与工程学院, 北京 100083, 电话: 010-62334314, E-mail: xiaohao\_2001@163.com

(如图 1 所示)。点阵的所有单元同时进行再取向尝试，每个单元随机地再取向为其  $NV$  个邻域取向中的一个取向，取向改变的概率定义为：

$$W = \begin{cases} 1 & , \Delta E \leq 0 \\ \exp(-\Delta E / kT) & , \Delta E > 0 \end{cases} \quad (2)$$

其中  $\Delta E$  为单元  $i$  再取向前后的能量差,  $k$  为 Boltzmann 常数,  $T$  为仿真温度。取  $kT=0.5$ , 仿真温度的提高有助于减小点阵的各向异性。晶界处格点成功再取向为其近邻取向, 对应着晶界的迁移。所有单元同时进行一次再取向尝试之后增加一个时间单位 MCS。为了仿真封闭、完整的大体积系统, 使用周期性边界条件。

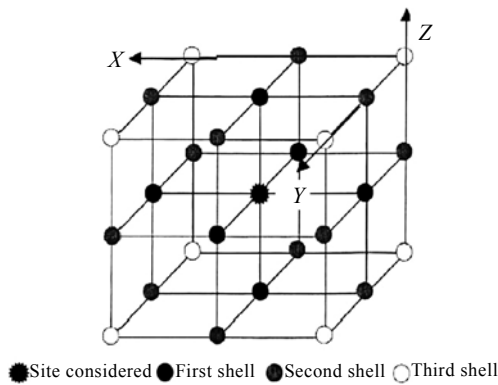


图 1 简单立方点阵中的 26 个近邻格点示意图

Fig.1 The 26 neighborlattices in the three nearest shells in a cubic grid<sup>[11]</sup>

## 2 仿真结果与讨论

### 2.1 2 种初始组织

设计生成的 2 种 3D 初始组织, 晶粒尺寸分布数据分别如图 2a、2b 所示。采用最小二乘法拟合, 发现它们可分别用形状因子  $\beta=2.96$ 、 $\beta=3.47$  的 Weibull 函

数很好的描述, 这里分别记为 WI、WII 组织, 拟合  $\chi^2$  值均小于 0.001 ( $\chi^2$  值为拟合优度的特征量)。

### 2.2 组织演变过程的仿真实验结果

图 3 是 WI 与 WII 2 种 3D 晶粒组织可视化图像, 不同取向的晶粒被映射成不同的颜色 (灰度)。可见, 随着仿真时间的增加, 平均晶粒度明显增大, 每个 3D 图像的表面也是 3D 组织模型的 2D 截面, 其上三晶交点处夹角接近于  $120^\circ$ , 大多数晶粒的边界呈平滑弯曲线, 边数少于 5 的晶粒一般呈现凸出形状而边数大于 6 的晶粒边界具有内凹的特征, 这些都与实际材料再结晶退火态或其后正常晶粒长大过程形成的显微组织

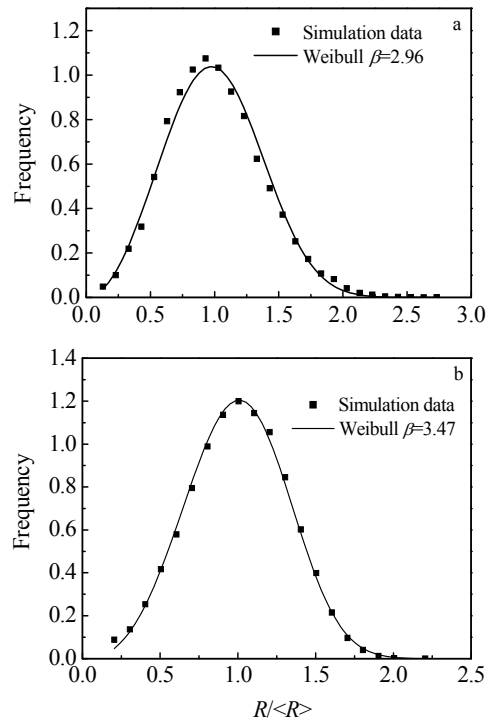


图 2 初始晶粒尺寸分布

Fig.2 The initial grain size distributions: (a) WI and (b) WII

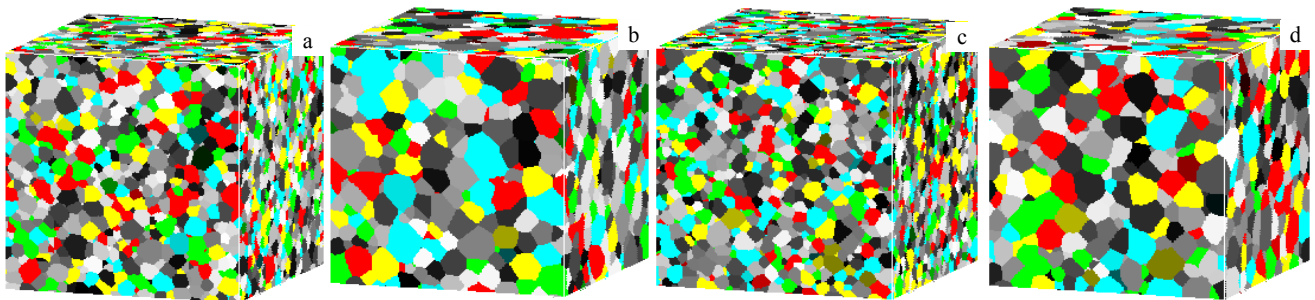


图 3 仿真晶粒长大过程中的瞬时图像

Fig.3 The instantaneous evolution of the simulated grain structure: (a)WI (10716 grains,  $t=600$  MCS), (b) WI (2174 grains,  $t=2000$  MCS), (c) WII (12 090 grains,  $t=600$  MCS), and (d) WII (2052 grains,  $t=2100$  MCS)

极为相似。

### 2.3 仿真 3D 晶粒长大动力学

2 种组织的晶粒长大仿真过程很好地符合如下正常晶粒长大的抛物线方程：

$$\langle R_t \rangle = [K(t-t_0) + \langle R_0 \rangle^{1/n}]^n \quad (3)$$

式中， $\langle R_t \rangle$  是时间为  $t$  时的平均晶粒尺寸（等体积球半径）， $t_0$  是初始时刻， $\langle R_0 \rangle$  是初始平均晶粒尺寸，而  $K$  是常数。图 4 是本次仿真过程中平均晶粒尺寸随时间的变化曲线以及根据上述公式拟合的晶粒长大动力学曲线。可以看到，在经过 100 MCS 初始演化之后，WI、WII 2 种组织的动力学曲线非常接近，晶粒生长指数  $n$  与理论值  $n=0.5$  几乎一致，这表明 2 种不同的初始晶粒组织在晶粒长大过程中具有相似的晶粒长大动力学。

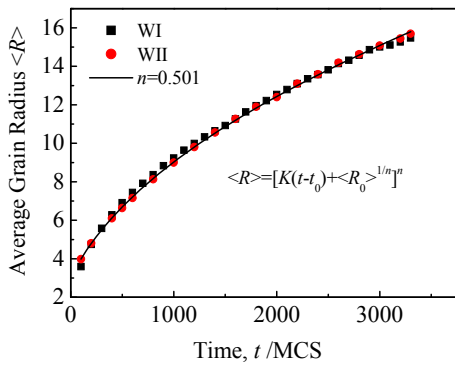


图 4 晶粒长大动力学曲线

Fig.4 Kinetics curve of grain growth

### 2.4 准稳态晶粒尺寸分布

在众多晶粒长大理论中，著名的 Hillert 理论<sup>[12]</sup>虽被人们广为接受，但他所预测的关于准稳态长大的晶粒尺寸分布，至今未能被实验或仿真结果证实。Fayad<sup>[13]</sup>、王超<sup>[8,9]</sup>基于二维晶粒长大的计算机仿真结果均证明 Weibull 分布能够比 Lognormal 和经典的解析理论分布更好地描述准稳态晶粒尺寸分布。Weibull 分布的概率密度函数为：

$$f(u) = \frac{\beta}{\alpha^\beta} u^{\beta-1} \exp[-(\frac{u}{\alpha})^\beta] \quad (4)$$

式中  $\beta$  为参数，对其形式具有决定作用。 $\alpha=1/\Gamma(1+1/\beta)$ ， $\Gamma$  为 Gamma 函数。

基于 1996 年导出的 3D 个体晶粒长大速率拓扑依赖性理论方程<sup>[14,15]</sup>，于海波和刘国权根据 Brown 对 LSW 理论的修正方法推导出一种准稳态尺寸分布函数<sup>[15]</sup>：

$$f(u) = \frac{2H_0 u v^{H_0}}{(u^2 - v u + v)^{1+H_0}} \exp\left[\frac{-2H_0 v}{\sqrt{4v-v^2}} \left(\arctan\left(\frac{2u-v}{\sqrt{4v-v^2}}\right) + \arctan\left(\frac{v}{\sqrt{4v-v^2}}\right)\right)\right] \quad (5)$$

式中， $u=R/R_{cr}$ ， $v$  是唯一参数， $H_0$  由下面的数值积分求得：

$$\int_0^{u_{max}} u f(u) du = 1 \quad (6)$$

式中  $u_{max}$  是相对晶粒尺寸  $u$  的最大值。当  $v < 4$  时，公式 (5) 为一系列以  $v$  为单参数的准稳态晶粒尺寸分布函数。当  $v$  趋近于 4 时，公式 (5) 等同于 Hillert 理论分布。其后 Rios<sup>[16,17]</sup>亦独立导出类似于式 (5) 的尺寸分布函数。

2007 年，Macpherson 和 Srolovitz<sup>[18]</sup>在 Nature 杂志上提出 1 个新的 3D 个体晶粒长大速率拓扑依赖性理论方程。结合 3D 个体晶粒尺寸-面数定量关系，借鉴关于粒子粗化理论中的晶粒长大连续方程对 3D 准稳态晶粒尺寸分布函数进行了求解，基于 MacPherson-Srolovitz 拓扑依赖速率方程获得了一个新的含有单参量的解析函数<sup>[19,20]</sup>：

$$f(r) = \left(-\frac{H_0}{T}\right) \left[\frac{ar^2 + br + b(1+\varepsilon) + c}{b(1+\varepsilon) + c}\right]^{\frac{H_0}{a}} \exp\left[\frac{-2bH_0}{a\sqrt{-\Delta}} \left(\arctan\frac{2ar+b}{\sqrt{-\Delta}} - \arctan\frac{b}{\sqrt{-\Delta}}\right)\right] \quad (7)$$

式中  $a$  是唯一的参数， $T(r) = \frac{ar^2 + b\sqrt{r^2 + 2r + \xi} + c}{2r}$ ， $b$ 、

$c$ 、 $\xi$ 、 $\varepsilon$  为常数。该尺寸分布函数与文献中顶点法、基元演化法、相场模型和蒙特卡罗法 4 种晶粒长大仿真方法所得三维准稳态晶粒尺寸分布数据以及纯铁实验数据吻合很好，因此也是 1 种可能的描述三维准稳态晶粒尺寸分布的函数<sup>[20]</sup>。

图 5 为仿真 WI 和 WII 2 种组织在准稳态阶段不同仿真时刻的归一化晶粒尺寸分布以及采用公式 (4)、(5) 和 (7) 所示几种分布函数进行拟合的拟合曲线。可以看出，在准稳态阶段，WI 和 WII 2 种组织在不同时刻的晶粒尺寸分布基本保持不变，具有自相似性。2 种组织的准稳态晶粒尺寸分布均可以用参数  $\beta=2.80 \pm 0.03$  的 Weibull 分布来很好的描述，拟合优度  $\chi^2$  值小于 0.003。这表明初始尺寸分布不同的 2 种组织在准稳态长大阶段时已演变成具有几乎相同尺寸分布的组织。

将不同仿真时刻的准稳态晶粒尺寸分布采用式 (5) 进行最小二乘拟合，结果显示 WI 和 WII 组织的参数  $v$  拟合值分别为  $v=2.96$  和  $v=2.92$ ；若采用最新分布函数式 (7) 进行最小二乘拟合，则发现 WI 和 WII

组织的拟合参数分别为  $a=-1.63$  和  $a=-1.65$ 。采用式 (5) 和式 (7) 对所有准稳态晶粒尺寸分布仿真结果拟合的优度  $\chi^2$  值均小于 0.005, 因此源于 2 种不同初始晶粒组织所得准稳态晶粒尺寸分布仿真结果既可以用理论分布函数式 (7) 很好地近似表达, 又可以以  $\nu < 4$  为参量的函数式 (5) 很好地近似表达, 二者的表达质量近乎相同。

然而, Hillert 所预言的三维尺寸分布<sup>[11]</sup>与本次仿真得到的晶粒尺寸分布数据差异明显偏大, 故不适合描述晶粒准稳态尺寸分布。

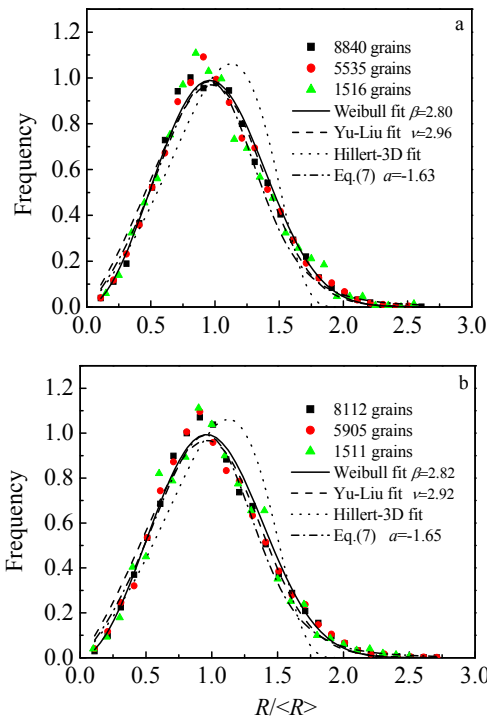


图 5 源于 2 种初始组织的不同时刻准稳态晶粒尺寸分布  
Fig.5 The instantaneous evolution of grain size distributions starting from two different initial microstructures: (a) WI and (b) WII

### 2.5 准稳态晶粒面数分布

三维晶粒的拓扑学经常用三维晶粒的面数来表示。图 6 为本次仿真不同时刻三维晶粒面数  $F$  的分布曲线及采用对数正态分布函数进行数据拟合的曲线。可以看出, 在从 8000 个晶粒到 1500 多个晶粒的准稳态演化过程中, 晶粒面数分布基本保持不变。WI 与 WII 组织分别可以用参数  $\sigma = 0.35$ 、 $\mu = 11.86$  以及  $\sigma = 0.35$ 、 $\mu = 11.87$  的对数正态分布很好的描述, 因此 2 种不同尺寸分布的初始组织, 在经过仿真演化后, 在准稳态晶粒的面数分布亦趋于一致。

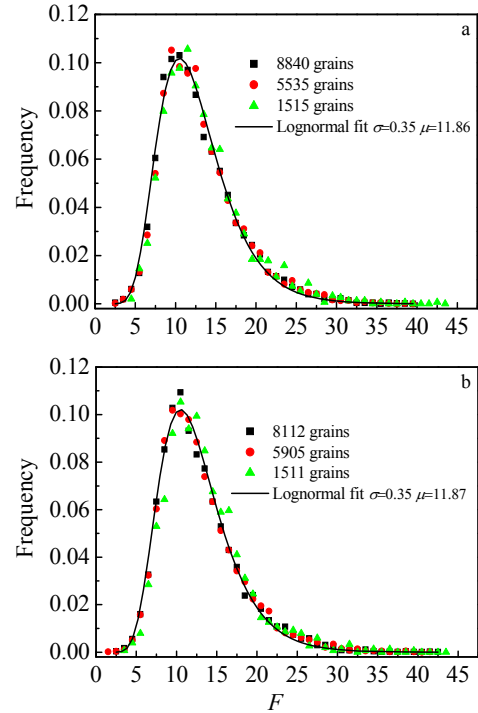


图 6 不同时刻晶粒面数分布

Fig.6 The instantaneous evolution of face number distributions: (a) WI and (b) WII

## 3 结 论

1) 初始晶粒尺寸分布不同的 2 种组织, 经过一定时间演化后, 形成了晶粒尺寸分布函数形式和参数基本相同的准稳态组织。仿真所得准稳态晶粒尺寸分布可用参数  $\beta = 2.80 \pm 0.03$  的 Weibull 函数描述。

2) 经典的 Hillert 尺寸分布函数与本仿真实验所得准稳态晶粒尺寸分布数据不符。然而, 近年来基于不同长大速率理论模型导出的两类 3D 准稳态晶粒尺寸分布函数, 式 (5) 和式 (7), 与本文仿真实验所得所有的准稳态晶粒尺寸分布数据相当吻合。

3) 初始晶粒尺寸分布不同的 2 种组织, 其准稳态晶粒面数分布亦趋于基本参数相同的对数正态分布。

### 参考文献 References

[1] Srolovitz D J, Anderson M P, Sahni P S *et al. Acta Metall* [J], 1984, 32(5): 793  
 [2] Radhakrishnan B, Zacharia T. *Metall Mater Trans* [J], 1995, 26A(1): 167  
 [3] Liu Guoquan(刘国权), Song Xiaoyan(宋晓艳), Yu Haibo(于海波) *et al. Acta Metallurgica Sinica* (金属学报)[J], 1999, 35(3): 245

- [4] Wang Chao(王超), Liu Guoquan(刘国权), Yu Haibo(于海波). *Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2004, 40(12): 1233
- [5] Song X Y, Liu G Q. *Scr Mater* [J], 1998, 38: 1691
- [6] Liu G, Yu H, Song X *et al. Mater Des* [J], 2001, 22: 33
- [7] Song X Y, Liu G Q. *J Mater Sci Technol* [J], 1998, 14: 506
- [8] Wang Chao(王超), Liu Guoquan(刘国权), Qin XiangGe(秦湘阁). *Acta Metallurgica Sinica* (金属学报) [J], 2003, 39(6): 635
- [9] Wang Chao(王超), Liu Guoquan(刘国权). *Rare Metal Materials and Engineering* (稀有金属材料与工程)[J], 2004, 33(2): 128
- [10] Qin Xiangge(秦湘阁). *Doctorate dissertation of University of Science and Technology Beijing*(北京科技大学博士论文)[D]. Beijing: Science and Technology Beijing, 2003
- [11] Li Hui, Wang Guanghou. *Materials Science and Engineering A*[J], 2003, 357: 153
- [12] Hillert M. *Acta Metall*[J], 1965, 13(3): 227
- [13] Fayad W, Thompson C V, Frost H J. *Scr Mater* [J], 1999, 40(10): 1199
- [14] Yu Haibo(于海波), Liu Guoquan(刘国权). *Chinese Science Bulletin*(科学通报) [J], 1996, 41(21): 2000
- [15] Yu Haibo(于海波). *Doctorate Dissertation of University of Science and Technology Beijing*[D]. Beijing: Science and Technology Beijing, 1997
- [16] Rios P R. *Scr Mater* [J]1999, 40(6): 665
- [17] Rios P R. *Scr Mater* [J], 1999, 41(12): 1283
- [18] MacPherson R D, Srolovitz D J. *Nature*[J], 2007, 446: 1053
- [19] Wang Hao(王浩), Liu Guoquan(刘国权). *Acta Metallurgica Sinica* (金属学报)[J], 2008, 44(1): 13
- [20] Wang Hao(王浩), Liu Guoquan(刘国权). *Acta Metallurgica Sinica* (金属学报)[J], 2008, 44(7): 769

## Simulation of 3D Grain Growth from Different Initial States and their Quasi-Stationary State Distributions

Wang Hao<sup>1</sup>, Liu Guoquan<sup>1</sup>, Qin Xiangge<sup>2</sup>

(1. State Key Laboratory for Advanced Metals and Materials, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China)

(2. Jiamusi University, Jiamusi 154007, China)

**Abstract:** The 3D capillarity-driven grain growth process was simulated using a modified Potts Monte Carlo technique, starting from two initial microstructures with the grain size distributions well described by Weibull functions of  $\beta=2.96$  and  $\beta=3.47$ , respectively. The process obeys the grain growth parabolic law very well, with the time exponent  $n$  very close to 0.5. The results show that the quasi-stationary grain size distributions finally turn to the same Weibull distribution with  $\beta=2.80\pm 0.03$  for two different initial microstructures and the grain face number distributions turn to a lognormal distribution. The two analytical 3D grain size distribution functions coincide with the two kinds of functions derived by Liu Guoquan and his coworkers recently based on the different grain growth rate equations.

**Key words:** three-dimensional grain growth; Monte Carlo simulation; grain size distribution

Biography: Wang Hao, Candidate for Ph.D., School of Materials Science and Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, P. R. China, Tel: 0086-10-62334314, E-mail:xiaohao\_2001@163.com