

# 一种自相似二维晶粒长大过程的 Monte Carlo 仿真

王超 刘国权 秦湘阁

北京科技大学材料科学与工程学院,北京 100083

**摘要** 采用 Monte Carlo 方法仿真了以 Weibull 尺寸分布为初始组织的正常晶粒长大过程. 结果显示,二维正常晶粒长大发展到准稳态长大阶段时,其晶粒尺寸分布不是经典 Hillert 理论所预测的尺寸分布,而是仍然保持 Weibull 分布,并且参数基本不发生变化. 与国际上同类研究成果的比较进一步表明,不同  $\beta$  值的 Weibull 分布很适用于表征二维晶粒长大的准稳态晶粒尺寸分布,且表征效果优于文献中的已有工作.

**关键词** Monte Carlo 仿真;晶粒长大;显微组织演化

**分类号** TG 111; O 242; TP 391

关于晶粒长大的经典 Hillert 理论<sup>[1]</sup>已为人们所熟知,但是它所预测的 Hillert 准稳态晶粒尺寸理论分布至今极少得到实验或仿真结果的证实<sup>[2]</sup>. 最近, Battaile 和 Holm<sup>[3]</sup>的工作表明:初始具有 Hillert 尺寸分布的显微组织在二维晶粒长大过程中趋于另外某种尺寸分布. Fayad 等<sup>[4]</sup>的仿真工作表明 Weibull 函数比 Rayleigh, Log-normal, Gamma 等分布函数更好地描述准稳态条件下的二维晶粒尺寸分布.

关于晶粒长大的仿真,主要有两类:一类是数值仿真,一类是图像仿真. 数值仿真认为晶粒组织的初始分布对晶粒长大过程有着重要影响<sup>[5]</sup>,但它主要集中于晶粒长大动力学和晶粒尺寸分布的研究,对晶粒形状等拓扑学特性却难以全面考虑. 实际上,晶粒长大是晶粒尺寸变化和拓扑演变密切相关的过程. 图像仿真中,连续扩散界面场<sup>[6,7]</sup>、顶点模型<sup>[8]</sup>、Monte Carlo<sup>[9-12]</sup>、表面演化<sup>[13]</sup>、晶界追踪<sup>[4]</sup>等方法都可成功地用于晶粒长大仿真,但现有工作大多限于对某种无定形组织的晶粒长大过程. 在众多的图像仿真方法中, Monte Carlo(简称 MC)方法能够方便地把组织本身的拓扑学特性全面地考虑在内,并且可以直观显示材料组织及其演变过程,以及对组织进行多

种参数的表征<sup>[9-12]</sup>,一直颇受关注. 因此,在对晶粒尺寸分布对晶粒长大及组织演化影响的研究中,MC 方法是很重要的.

若呈 Hillert 分布形式的晶粒组织是不稳定的,呈 Weibull 分布形式的晶粒组织情况又如何? 为此,本文采用具有 Weibull 尺寸分布的晶粒组织作为初始组织,仿真其正常晶粒长大过程,研究其演化规律.

## 1 晶粒长大与 Monte Carlo 仿真

### 1.1 晶粒长大的物理过程

晶粒长大是无应变多晶材料退火过程中平均晶粒尺寸逐步增大的现象,是一个晶粒个数减少,晶界能降低的过程. 正常晶粒长大的主要特征之一是晶粒长大速度和尺寸基本均匀.

### 1.2 Monte Carlo 仿真的基本思想

MC 仿真正常晶粒长大的基本过程是<sup>[14]</sup>:将仿真区域离散化为若干被赋以随机整数的微单元,相邻近且取向相同的微单元群体构成同一个晶粒,取向不同的近邻单元之间存在晶界. 相应于每个晶粒的随机整数与其晶粒取向相对应. 随机选定微单元,进行再取向尝试,通过计算因微单元取向改变而引起的组态能量的变化  $\Delta E$ , 确定该单元成功再取向的概率  $p$  为:

$$p = \begin{cases} 1 & \Delta E \leq 0 \\ 0 & \Delta E > 0 \end{cases} \quad (1)$$

收稿日期 2002-09-23 王超 女,30岁,博士研究生

\* 国家自然科学基金项目资助课题(No.50171008)

其中,  $E = -J\sum(\delta_{S_i S_j} - 1)$  (2)

$J$ 是正比于晶界能的常数,  $\delta_{S_i S_j}$ 是 Kronecher 函数,  $S_i$ 为某被选定单元的取向,  $S_j$ 为与其相邻微单元的取向值(一般为其最近邻或次近邻单元), 求和包括所有近邻微单元. 晶界附近微单元取向状态的转换对应于晶界移动, 即晶粒长大.

1.3 Monte Carlo 方法的改进

在传统的 MC 算法中, 由于微单元选取的任意性及再取向尝试的随机性, 晶粒长大的仿真工作往往需要在中、大型计算机上进行. 经过文献 [14] 的改进之后, 大大提高了仿真效率, 使得晶粒长大的仿真工作能够在微机上进行<sup>[9-12,14]</sup>, 但这种方法的仿真效率仍然不是很高, 在晶粒长大的后期则更低. 被选定单元(取向为  $S_i$ )进行再取向尝试时, 假设再取向值为  $S_j$ , 如果  $S_i = S_j$ , 则这种再取向无论成功与否, 对晶粒长大而言均无任何意义, 此时若仍然计算与再取向相关的能量变化, 只能是徒耗时; 只有  $S_i \neq S_j$  情况下的再取向才有可能成为有效再取向, 才有可能对晶粒长大有贡献.

改进方法是: 在文献 [14] 的基础上, 随机选取微单元并从中抽取取向, 比较二取向值, 若二者相同, 则放弃再取向尝试, 进行再一次微单元的随机选取; 如果取向不同, 则计算相关的能量变化以确定所微单元再取向的成功与否. 经过修正后, 实现晶粒长大的算法为: (1) 随机选取取向为  $S_i$  的微单元. (2) 从 (1) 中所选微单元的六个最近邻中随机抽取其再取向值  $S_j$ . (3) 判断  $S_i, S_j$  是否相等. 若  $S_i = S_j$ , 则重复 (1); 若  $S_i \neq S_j$ , 表明所选微单元存在于晶界上, 继续 (4). (4) 根据式 (2) 计算与可能的取向变化相关的能量变化. (5) 根据式 (1) 确定取向  $S_i$  是否发生向  $S_j$  的转变; (6) 重复 (1)~(5). 每当某一微单元被随机选中, 仿真时间则增加  $(1/N)$  Monte Carlo 步(简记为 MCS).  $N$  为系统中微单元总数.

2 仿真结果与讨论

2.1 Monte Carlo 仿真过程

(1) 初始组织的生成. 将仿真区域离散成由  $2000 \times 2000$  个正六边形组成的微单元群体. 设随机数  $\xi$  呈 Weibull 分布, 其具体形式为:

$$f(r) = \frac{\beta}{\alpha^\beta} r^{\beta-1} \exp[-(\frac{r}{\alpha})^\beta] \quad (3)$$

其中,  $\alpha = 1/\Gamma(1+1/\beta)$ ,  $\Gamma$  为 Gamma 函数. 根据  $\pi\xi^2$  (相

应于晶粒面积)的大小确定随机选定微单元和与其相邻且取向相同的微单元的个数, 允许晶粒迅速长大. 进行 700 MCS 的演化后, 获得晶粒尺寸分布满足 Weibull 分布且具有充满空间特性的初始组织见图 1 (a), 平均晶粒大小为 20.1 (任意单位), 图 1(b) 为相应的晶粒尺寸分布, 晶粒尺寸以等面积圆半径的相对值  $r=R/\langle R \rangle$  表示, 其中  $R, \langle R \rangle$  分别代表晶粒半径及其平均值. 此时晶粒尺寸分布的其变异系数为 0.391. 分别采用 Weibull ( $\beta=2.73$ ), Gamma, Lognormal 分布函数对初始组织中的晶粒尺寸分布进行拟合, 相应的  $\chi^2$  值分别为 0.000 89, 0.005 和 0.010. 这表明, 在这些分布函数中  $\beta=2.73$  的 Weibull 函数可以最好地表述初态组织的晶粒尺寸分布.

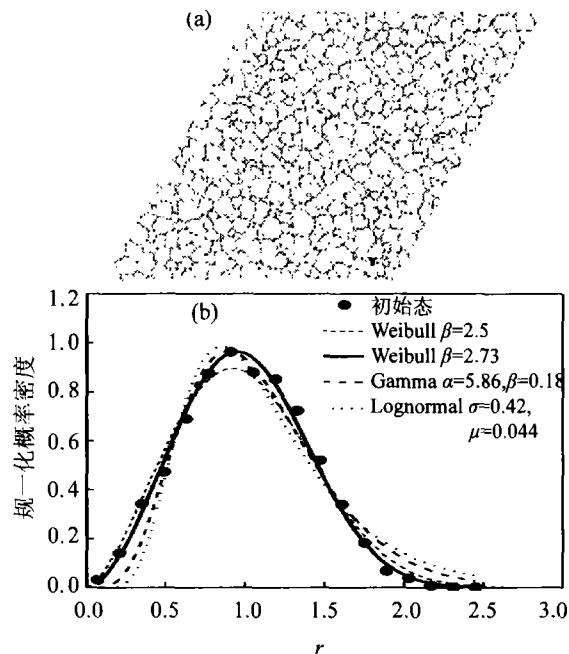


图 1 初始组织(a)(大小仅为仿真组织整体的 1/16)和相应的晶粒尺寸分布(b)

Fig.1 Initial microstructure with the Weibull grain size distribution and the corresponding grain size distribution functions

(2) 组织演化的仿真. 采用前述经过修正的 MC 算法, 仿真了正常晶粒长大过程. 图 2 是不同仿真时刻下的组织形貌. 可以看出, 晶粒组织均匀, 平均晶粒尺寸的增大也比较明显.

2.2 晶粒长大的动力学与晶粒尺寸分布的演化

(1) 晶粒长大动力学. 正常晶粒长大动力学的基本方程为:

$$R^n - R_0^n = M(t - t_0) \quad (4)$$

其中,  $R$  和  $R_0$  分别为  $t$  和初始  $t_0$  时刻晶粒的平均晶

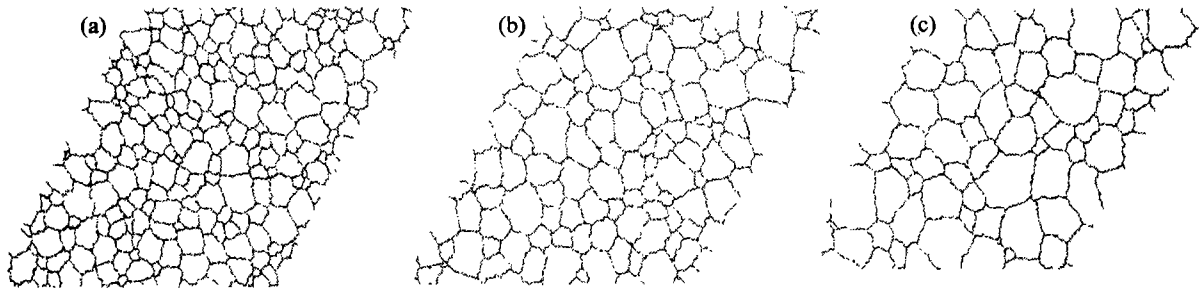


图2 不同仿真时刻的组织(大小仅为仿真组织整体的 1/16). (a)  $t=1000$  MCS; (b)  $t=3000$  MCS; (c)  $t=6000$  MCS

Fig.2 Microstructures at different Monte Carlo steps

粒尺寸,  $m$  为晶粒长大指数  $n$  的倒数,  $M$  为晶界迁移率.

对图3中平均晶粒尺寸—时间变化曲线进行拟合表明: 在初始阶段, 晶粒长大指数为 0.493; 在 2000 MCS 以后, 晶粒长大指数为 0.506, 这与理论上 0.5 的长大指数非常接近. 说明本次仿真的晶粒长大过程发展到了经典理论预言的准稳态阶段.

(2) 晶粒尺寸分布的演化. 在对初始组织所进行的 6000 MCS 的演化过程中, 晶粒尺寸的分布形式在 2000 MCS 之后基本保持不变(见图 4), 这也说明晶粒长大达到了准稳态生长阶段. 对其中经过 6000 MCS 演化后组织的晶粒尺寸分布用 Weibull 函数进行了拟合, 其  $\chi^2$  值达 0.001 4. 图 5 中

晶粒尺寸分布的变异系数在整个组织演化过程中基本保持在 0.40 左右, 明显偏离 Hillert 分布的变异系数 0.331. 这表明初始具有 Weibull 晶粒尺寸分布的组织是稳定的, 而用 Hillert 分布函数描写这种准稳态晶粒尺寸分布是不合适的. 文献 [3] 的工作也表明: 初始具有 Hillert 分布的组织在演化过程中将发展成另外一种截然不同的分布, Rios 对文献 [3] 中组织演化的结果进行了拟合(见图 6 的点划线)<sup>[3]</sup>. 本文重新拟合了文献 [3] 中的仿真结果, 发现两种不同初始组织(都具有 Hillert 晶粒尺寸分布)发展到准稳态阶段的晶粒尺寸分布可分别用  $\beta=2.13$  和  $\beta=2.07$  的 Weibull 分布函数表达, 其拟合  $\chi^2$  值分别为  $1.1 \times 10^{-3}$  和  $9.9 \times 10^{-4}$ . 从图 6 中可以看出, Weibull 函数的拟合结果要优于文献

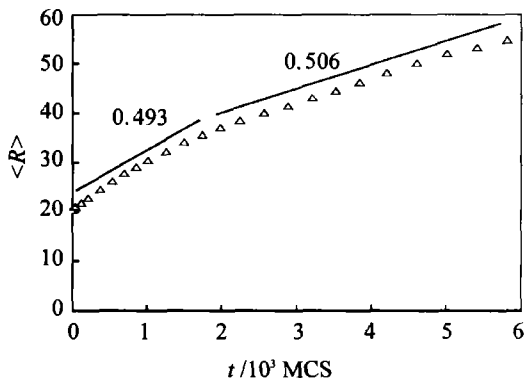


图3 平均晶粒尺寸与时间关系曲线

Fig.3 Mean grain size vs simulation time

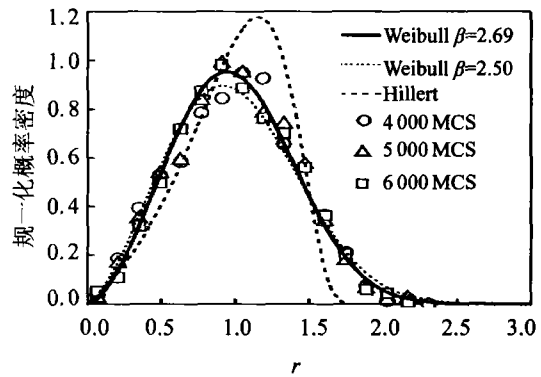


图4 相对晶粒尺寸分布

Fig.4 Distribution of relative grain size

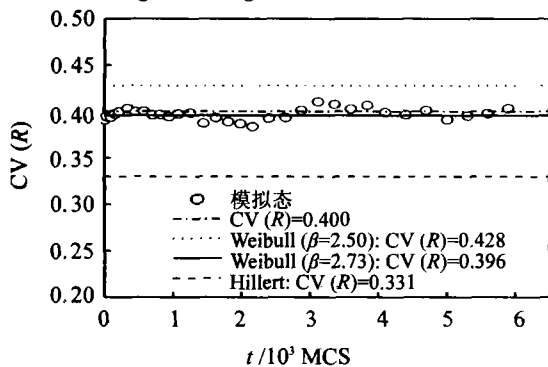


图5 尺寸分布变异系数与时间关系曲线

Fig.5 Variation coefficient of grain size distribution vs Monte Carlo steps

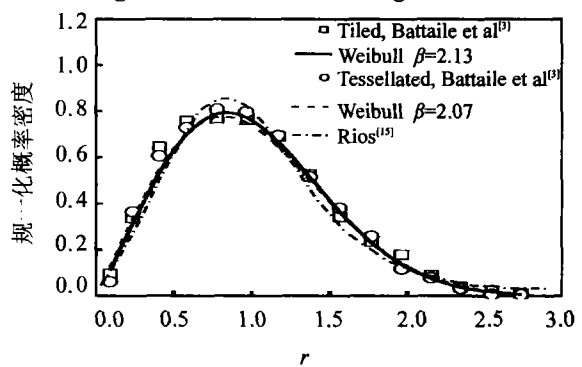


图6 文献[3]中结果的拟合曲线

Fig.6 Fitting curves of results from reference [3]

[15]的工作.文献[4]采用前沿追踪法仿真初始无定形组织的晶粒长大过程,亦获得具有 $\beta=2.5$ 的Weibull分布形式的准稳态晶粒尺寸分布.综合本文的仿真结果与文献[3,4]的仿真数据,可推知在稳态条件下的晶粒尺寸分布可能是多种 $\beta$ 值的Weibull分布,而不是某个惟一 $\beta$ 值Weibull分布函数.

### 3 结论

用Monte Carlo方法仿真了具有Weibull晶粒尺寸分布初始组织的二维正常晶粒长大过程,获得的准稳态的晶粒尺寸分布仍可以由Weibull分布函数表示,用Hillert理论分布来表示这种准稳态分布却是不合适的.本文的仿真结果与文献中已有的仿真数据都表明,二维准稳态长大条件下的晶粒尺寸分布可以用不同 $\beta$ 值的Weibull分布函数来很好地描述.

#### 参考文献

- Hillert M. On the theory of normal and abnormal grain growth [J]. Acta Metall, 1965, 13(3): 227
- Atkinson H V. Theories of normal grain growth in pure single phase system [J]. Acta Metall Mater, 1988, 36(3): 469
- Battaile C C, Holm E A. Evolution of 2D Potts model grain microstructures from an initial Hillert size distribution [A]. Weiland H, Adams B L, Rollert A D. Grain Growth in Polycrystalline Materials III [C]. TMS, Warrendale 1998. 119
- Fayad M, Thompson C V, Frost H J. Steady-state grain-size distributions resulting from grain growth in two dimensions [J]. Scripta Mater, 1999, 40(10): 1199
- Rios P R. Effect of size distribution kinetics of normal grain growth and of particle coarsening [J]. Acta Metall Mater, 1990, 38(10): 2017
- Chen L Q. A novel computer simulation technique for modeling grain growth [J]. Scripta Metall. 1995, 32(1): 115
- Fan D, Chen L Q. Computer simulation of grain growth using a continuum field model [J]. Acta Mater, 1997, 45(2): 611
- Weygand D, Brechet Y, Lepinoux J. A vertex dynamics simulation of grain growth on two dimensions [J]. Philosophical Magazine B, 1998, 78:329
- Song X, Liu G. Computer simulation of normal grain growth in polycrystalline thin films [J]. J Mater Sci, 1999, 34: 2433
- 宋晓艳, 刘国权, 何宜柱. 一种改进的晶粒生长 Monte Carlo 模拟方法[J]. 自然科学进展, 1998, 8(3): 337
- 钟晓征, 陈伟元, 王豪才, 等. 多晶材料晶粒生长的计算机仿真方法 III [J]. 功能材料, 1999, 30(3): 232
- 叶日晴, 赵建华, 何陵辉. 退火过程中晶粒生长的二维计算机仿真[J]. 无机材料学报, 2001, 16(1): 122
- Wakai F, Enomoto N, Ogawa H. Three-dimensional microstructural evolution in ideal grain growth—general statistics [J]. Acta Mater, 2000, 48:1297
- Radhakrishnan B, Zacharia T. Simulation of curvature-driven grain growth by using a modified Monte Carlo algorithm [J]. Metall Mater Trans, 1995, 26A(1): 167
- Rios P R. Comparison between a grain size distribution obtained by a Monte Carlo Potts model and by an analytical mean field model [J]. Scripta Mater, 1999, 41(12): 1283

## A Monte Carlo Simulation of Two-dimensional Grain Growth Process with Self-Similar Size Distribution

WANG Chao, LIU Guoquan, QIN Xiangge

Materials Science and Engineering School, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China

**ABSTRACT** To investigate the effect of initial grain size distribution on normal grain growth, Monte Carlo simulation was performed starting from an initial microstructure with the Weibull grain size distribution in two-dimension. The results show that the grain structure evolved alike with the initial, and the grain size distribution of the quasi-stationary state could be described well by the Weibull function but not by classical Hillert distribution. Comparison with some other results further suggests that Weibull distribution with different  $\beta$  values may well be used to describe the quasi-stationary grain size distribution.

**KEY WORDS** Monte Carlo simulation; grain growth; microstructure evolution