

# 基于 Monte Carlo Potts 方法的三维大尺度晶粒组织仿真模型及定量表征

秦湘阁<sup>1,2)</sup> 刘国权<sup>1)</sup>

1)北京科技大学材料科学与工程学院,北京 100083 2)佳木斯大学材料工程学院,佳木斯 154007

**摘要** 为改善三维晶粒组织可视化模型的统计性,采用 Monte Carlo Potts 方法建立了材料多晶体组织的一种大尺度三维数字化模型,并实现了其定量表征和三维可视化.逾万晶粒的统计结果表明,该模型的平均晶粒面数为  $13.8 \pm 0.1$ ,晶粒尺寸分布和晶粒面数分布均可用 Log-normal 函数近似拟合,与实际材料晶粒组织情况相近.

**关键词** 三维晶粒组织模型;蒙特卡罗模拟;晶粒尺寸分布;晶粒拓扑学

**分类号** TG115.21; TP391.9

在一般的材料科学研究和工程中,材料的显微组织观测主要是借助光学显微镜和扫描电子显微镜在试样的二维截面上进行的,然后通过体视学关系公式将二维的组织参数换算成三维参量<sup>[1]</sup>,比如平均晶粒尺寸(或单位体积的晶粒数)、晶粒尺寸分布等.这主要是由于工程材料一般是不透明的,目前还无法直接观测和获得材料的三维显微组织图像.因此,建立数字化的、易于存储、分析和显示的近真实的材料三维显微组织的计算机模型已成为材料模型化研究的一个重要内容.

目前,在材料显微组织表征过程中,一般是利用单一尺寸和形状理想的几何体作为充满空间多晶体组织模型,比如球体和平截八面体、 $\alpha$ 十四面体和 $\beta$ 十四面体等多面体<sup>[2]</sup>.显然这类多面体的面数、边数和角点数以及面数分布等拓扑参数也是固定不变的.而实际的多晶材料一般是由不同尺寸、形状和拓扑参数的晶粒构成的,因此需要发展晶粒形状、尺寸分布和拓扑参数分布更接近实际材料的显微组织模型.

在晶粒长大的计算机模拟研究工作中,基于 Monte Carlo Potts 模型已经可以产生接近实际的晶粒组织<sup>[3-6]</sup>,但是已有的工作多缺乏对这种多晶

体组织模型的较为全面的定量表征,同时这些工作模拟组织的尺度比较小,影响模型的可用性和晶粒组织参数的统计性.为此,本文应用 Monte Carlo Potts 方法建立了多晶体材料显微组织的大尺度三维数字化模型,同时实现三维晶粒尺寸、形状和拓扑性质的定量表征以及这种模型的二维和三维可视化,并与已有理论模型、仿真模型以及实际晶粒组织进行了比较.

## 1 三维显微组织模型的建立及定量表征方法

### 1.1 三维 Monte Carlo Potts 方法及模拟程序

本文使用的 Monte Carlo Potts 法主要基于文献 [3] 的方法,实现了参数可变的多晶体组织三维模拟程序.材料显微组织被映射到一个简单立方点阵,点阵中的每个阵点代表一个小的体积元(对应于三维可视化中的体素),被赋予一个随机数  $S_i$  来表示晶体取向,具有相同取向数的两个相邻点阵位置属于相同的晶粒,而不同取向数的相邻点阵位置之间形成晶界.每个阵点的能量为:

$$E_i = J \sum_{j=1}^N (1 - \delta_{S_i S_j}) \quad (1)$$

其中,  $J$  为一个正的常数;  $S_i, S_j$  为第  $i$  个点阵位置和其邻居  $j$  的取向数;  $N$  是能量计算中考虑的近邻数目 ( $N=26$ , 包括第一、第二和第三近邻);  $\delta_{S_i S_j}$  为 Kronecker  $\delta$  函数.

收稿日期 2003-06-10 秦湘阁 男,40岁,副教授

\* 国家自然科学基金(No.50171008)和国家教委“跨世纪优秀人才”基金资助项目

通过改进 Monte Carlo 过程<sup>[4]</sup>进行晶界迁移的过程模拟。在模拟过程中,随机选取一个点阵位置 $S_i$ ,随机赋予它任意一个近邻的取向数 $S_i^*$ ,从 $S_i$ 向 $S_i^*$ 的转变按照如下概率进行:

$$P(S_i \rightarrow S_i^*) = \begin{cases} 0, & \Delta E > 0 \\ 1, & \Delta E \leq 0 \end{cases} \quad (2)$$

其中,能量差 $\Delta E = E_i^* - E_i$ 。

Monte Carlo 过程的时间单位为 MCS (Monte Carlo Step),即模拟点阵中的所有阵点平均完成一次再取向尝试则 MCS 增加 1。模拟采用周期性边界条件。

文献 [3] 曾经指出,要想获得可靠的统计结果,模拟点阵的边长(即简单立方点阵每条边包含的阵点数目)应该在 200 以上;作为可以定量表征的数字化材料显微组织,尤其需要大尺度的模型。但已有工作采用的点阵边长几乎都在 200 以下<sup>[5-6]</sup>。通过提高算法的时间效率,在当前主流的个人计算机上,本文首次实现了点阵边长为 400 的三维 Monte Carlo Potts 模拟计算,模型包含的总阵点数为  $400 \times 400 \times 400$  个,可用的模拟组织中晶粒数目可以从几个到几百个之间,极大地提高了显微组织模型参数测量、统计的可靠性和模型的可用性。通过可视化模块把三维模拟组织转化为三维数字图像,其分辨率在材料显微组织数字图像分析的常用分辨率之间,这为模型的应用和定量表征结果的验证奠定了基础。

模拟程序包括 Monte Carlo Potts 模拟模块、组织定量表征模块和可视化模块,采用 C++ 语言,在 VC6.0 开发环境下编程。其中组织定量表征模块可以测量模拟组织中的晶粒数目以及个体晶粒的尺寸参数和拓扑参数,测量结果的统计分析则利用通用的统计软件进行。

三维显微组织模型中的晶粒数目取决于模拟时间 MCS 值大小。随着 MCS 值增加,晶粒数目减少,晶粒平均尺寸增大。模拟程序在每个 MCS 时刻测量模型组织中的晶粒数目,一旦达到输入的晶粒尺寸要求就可以输出三维模型文件和测量数据文件。

### 1.2 三维显微组织尺寸参数的测量

晶粒尺寸可以用晶粒体积、晶粒等体积球半径(或晶粒等体积球直径)、晶粒切直径等参数表示。晶粒体积 $V$ 采用该晶粒包含的体积单元数目表示。在三维模拟显微组织的数据结构中,可以直接测量得到晶粒的真实体积,则晶粒等体积球

半径 $R = (3V/4\pi)^{1/3}$ 。在研究三维晶粒尺寸分布时,一般使用相对晶粒尺寸 $u$ ,这里 $u = X_i/X_{ave}$ ,其中 $X_i$ 是个体晶粒尺寸的测量值, $X_{ave}$ 是测量值的平均值。

晶粒切直径 $D_i$ 是截过晶粒的两个平行面之间的最大距离,一般使用不同方向切直径的平均值。本程序沿着正交的三个坐标轴方向分别测量了切直径 $D_1, D_2, D_3$ ,使用三者的平均值 $D_i$ 作为晶粒的平均切直径。比值 $D_i/D_i$ (这里 $i=1,2,3$ )可以表示晶粒的各向同性程度。

### 1.3 三维显微组织拓扑参数的测量

多晶体组织的拓扑参数主要是个体晶粒的面数 $F$ ,边数 $E$ 和顶点数 $C$ 以及每个面的平均边数 $E_f$ 。

根据本程序的数据结构,晶粒面数 $F$ 的测量采用的是面向晶粒的算法:(1)首先建立一个晶粒的邻居堆栈,该堆栈只保存完全不同的邻居晶粒取向数。(2)遍历一个晶粒的所有阵点位置,确定一个阵点是否位于边界。(3)如果一个阵点位于边界,则将其的 26 个邻域阵点<sup>[9]</sup>的取向分别与邻居堆栈中的元素比较,如果不同则入栈。(4)最终邻居堆栈中元素的数目即该晶粒的面数。(5)清空堆栈对下一个晶粒重复步骤(2)-(4)。

对于多面体晶粒,其他拓扑参数与面数存在确定的拓扑关系<sup>[9]</sup>,可以进而推算,此处略。

## 2 结果及分析

### 2.1 显微组织形态的观察

图 1 显示了具有不同晶粒数目的两个三维单相多晶体组织模型的可视化图像。不同取向的晶粒被映射成不同的颜色,每个三维图像的表面也是三维组织模型的二维截面,在三维图像的棱边上清晰地显示了模型采用的周期性边界条件。模型中的不同尺寸的晶粒几乎都为等轴晶,其二维截面上三晶棱线之间的夹角接近于  $120^\circ$ ,大多数晶粒的边界呈平滑弯曲状,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极为相似。更为重要的是,模型组织中从晶粒到晶粒其形状和尺寸均可以通过对数字模型进行三维晶粒尺寸分布和三维晶粒拓扑分析加以表征,而这在实际材料的实验观测时是极难实现的。

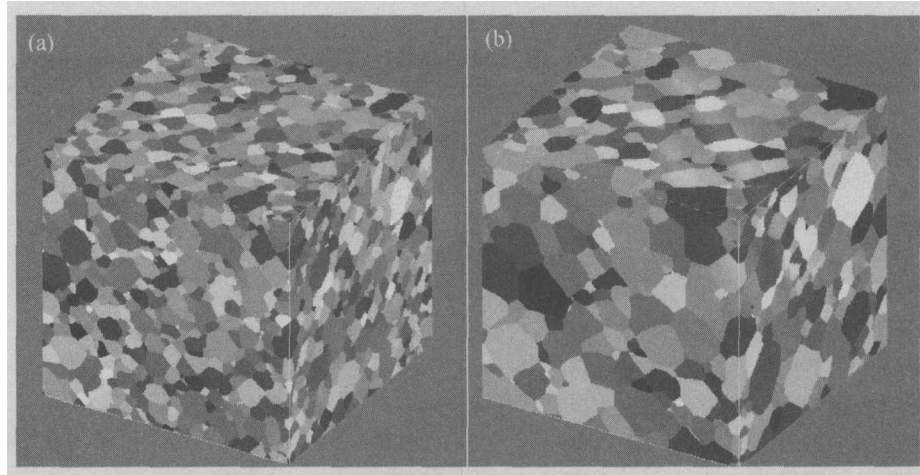


图1 由晶粒长大过程不同阶段提取的两个多晶体组织三维模型(a)和(b)

Fig.1 Two 3D models (a) and (b) of polycrystalline microstructure at different times of grain growth

图1中组织模型(a)和(b)的晶粒数目分别为10085和2009,平均晶粒体积分别为6346.0和31856.6(量纲为单个体素的体积),平均切直径分别为22.5和37.6(量纲是单个体素的边长)。

需要指出的是,三维多晶体组织模型既要求包含数目足够多的晶粒以获得较高的统计精度,又要使平均晶粒体积足够大以避免确定体积时相对误差增大和数字离散化对模型可用性的影响.本文的大尺度三维组织模型同时满足了上述要求。

## 2.2 三维晶粒尺寸和晶粒尺寸分布

采用归一化的晶粒等体积球半径表述晶粒尺寸分布.将归一化的晶粒尺寸 $u=R/R_{ave}$ 作为横坐标,按照相对晶粒尺寸将所有晶粒从0到3.2分成32组,每组宽度为0.1,统计各个组内晶粒的数目 $N_i$ ,将 $N_i$ 除以总晶粒数 $N_s$ 得到归一化的频率作为纵坐标,则得示于图2的三维晶粒尺寸分布直方图.可见用Lognormal函数可以较好地拟合本文模型的三维晶粒尺寸分布.这与文献中较小尺度模型的结果一致<sup>[3,4,6]</sup>,亦与低碳钢奥氏体晶粒尺寸分布形式<sup>[7]</sup>相当吻合。

## 2.3 三维晶粒拓扑分析

对图1所示(a)和(b)两个组织模型的综合分析表明,晶粒面数的平均值为 $13.8 \pm 0.1$ ,与Coxeter理想多面体模型相当接近,与低碳钢奥氏体晶粒组织数据<sup>[7]</sup>亦相差不大(表1).由上述模型观测到的晶粒面数最小值为2,最大值为55,则后者比晶粒剥离法和系列截面法所能测得的最大晶粒面数大得多<sup>[1]</sup>.这极可能是由于对实际材料实验测量时统计性不足而导致的差别。

本文所建模型的晶粒面数分布示于图3.可以看出,由本文模型测得的晶粒面数分布既可以用Lognormal函数拟合,也可以用Gamma函数拟合,但Lognormal拟合函数的平均值和变异系数比Gamma函数的对应值更接近于模型组织的测量值。

本文构建的模型和多种已有晶粒组织几何模型的拓扑参数和尺寸参数<sup>[2]</sup>的比较列于表1.表中 $E_r$ , $F$ , $E$ 和 $C$ 分别为晶粒每面平均边数、面数、边数和顶点数, $D_i$ 和 $D$ 分别为晶粒切直径和等体积球直径.本文模型组织的上述参数是模型中所有晶粒的平均值.本文模型不但具有与三种十四面

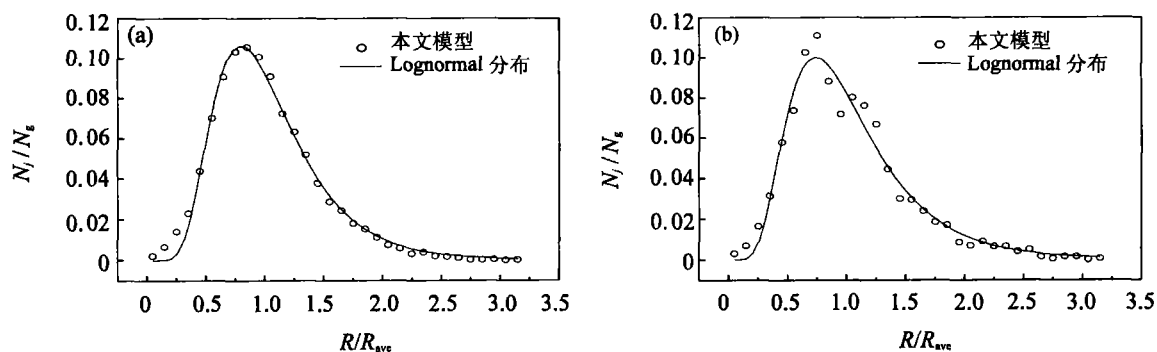


图2 三维晶粒尺寸分布及其拟合函数.(a)和(b)分别对应于图1(a)和(b)的组织

Fig.2 3D grain size distributions and fitting functions of microstructures in Fig.1 (a) and (b)

表1 多晶体组织模型与晶粒几何模型的拓扑参数比较

Table 1 Topological parameters of Potts models and geometrical models of polycrystalline microstructure

模型	$E_r$	$F$	$E$	$C$	$D/D$
球体	—	—	—	—	1
立方体	4	6	12	8	1.209
菱形十二面体	4	12	24	14	1.279
正五边形十二面体	5	12	30	20	1.081
平截八面体	5.143	14	36	24	1.077
Kelvin $\alpha$ 十四面体	5.143	14	36	24	—
Williams $\beta$ 十四面体	5.143	14	36	24	—
Coxeter 理想多面体统计模型 <sup>[6]</sup>	5.104	13.398	34.194	22.796	—
低碳钢奥氏体晶粒组织 <sup>[7]</sup>	5.069	12.890	32.670	21.780	~1.361
本文所建组织模型(a)	5.008	13.873	35.617	23.745	1.146
本文所建组织模型(b)	4.996	13.816	35.447	23.632	1.157

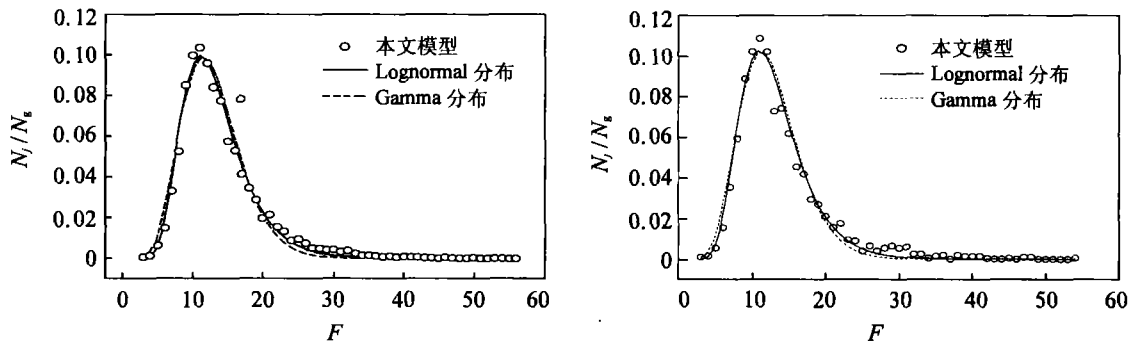


图3 三维晶粒面数分布及拟合函数。(a)和(b)分别对应于图1(a)和(b)的组织

Fig.3 Grain face number distributions and fitting functions of microstructures in Fig.1 (a) and (b)

体平均晶粒模型以及 Coxeter 理想多面体晶粒组织统计模型<sup>[6]</sup>十分接近的各类特征参量平均值,更可以提供上述几种模型无法提供的分布类定量信息和实际材料观测难以获得的三维空间结构信息,从而是可用于了解三维多晶体组织定量几何特征的有用几何模型.更进一步,由于本文所建组织模型具有晶粒尺寸分布和晶粒面数分布,并非由单一尺寸和形状晶粒组成,故远比经典的 $\alpha$ 或 $\beta$ 十四面体平均晶粒模型更接近实际材料组织.

### 3 结论

利用 Monte Carlo Potts 方法建立了材料多晶体组织的 400×400×400 三维大尺度数字化模型.同时,模拟程序实现了多晶体组织模型的三维可视化以及模型包含的晶粒尺寸、拓扑参数及其分布的定量表征.对于逾万晶粒的分析结果表明,多晶体组织三维模型的晶粒尺寸分布和晶粒面数分布可以用 Lognormal 函数较好地拟合,平均晶粒面数为 13.8±0.1,其晶粒尺寸分布特征及晶粒拓扑特征与已有理论模型和实际材料相当类似.从而,这种三维大尺度数字化模拟组织可以

用作定量了解材料三维空间晶粒组织几何特征的、具有良好统计性的辅助模型.

### 参考文献

- 1 刘国权,张禹,秦湘阁,等.材料显微组织三维观测与基于图像模型的研究[J].中国体视学与图像分析,2001,6:46
- 2 余永宁,刘国权.体视学:组织定量分析的原理和应用[M].北京:冶金工业出版社,1998
- 3 Anderson M P, Grest G S, Srolovitz D J. Computer simulation of normal grain growth in three dimensions [J]. Philos Mag B, 1989, 59(3): 293
- 4 Radhakrishnan B, Zacharia T. Simulation of curvature-driven grain growth by using a modified monte carlo algorithm[J]. Metall Mater Trans A, 1995, 26A(1): 167
- 5 Song X, Liu G. A simple and efficient three-dimension monte carlo simulation of grain growth [J]. Scripta Mater, 1998, 38(11): 1691
- 6 秦湘阁,刘国权.多晶体晶粒尺度三维组织建模及可视化[J].北京科技大学学报,2001,23:519
- 7 Liu G, Yu H. Experiment evaluation of stereological methods for determining 3D grain size and topological distribution [J]. Image Anal Stereol, 2000, 19: 91
- 8 Coxeter H S M. Introduction to Geometry [M]. New York: John Wiley & Sons, 1961. 411

## Numerical Simulation and Manufacture of a Grid Frequency Synchronized Machine Drive Control System

XIE Lun<sup>1)</sup>, LU Yifang<sup>1)</sup>, WANG Zhiliang<sup>1)</sup>, XUE Weimin<sup>2)</sup>, SUN Yikang<sup>1)</sup>

1) Information Engineering School, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China

2) Automation School, Beijing United University, Beijing 100083, China

**ABSTRACT** The key structure of an Ac excited grid frequency synchronized machine (AEGFSM) was presented. The simulation of AEGFSM, cyclo-converter, field-oriented vector control algorithm was done according to their discrete mathematical model. An AEGFSM sample driven was fabricated. Simulation results are in excellent agreement with the experimental under the typical working condition. It is concluded that AEGFSM drives have the high-quality dynamic performances as DC drives and provide an applicable solution of middle-voltage frequency-variable drives.

**KEY WORDS** AEGFSM; cyclo-converter; field-oriented vector control algorithm; middle-voltage frequency-variable drive

~~~~~  
(上接第 52 页)

## Large-Scale 3D Model and Quantitative Characterization of Grain Microstructure Based on Monte Carlo Potts Simulation

QIN Xiangge<sup>1,2)</sup>, LIU Guoquan<sup>1)</sup>

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

2) College of Material Engineering, Jiamusi University, Jiamusi 154007, China

**ABSTRACT** In order to improve the statistics of 3D grain microstructure models, a large-scale 3D digital model of microstructures of polycrystalline materials was implemented using Monte Carlo Potts simulation. The quantitative characterization and 3D visualizing of the model were carried out. The results show that the grain size distribution and the grain face number distribution in this model can be fitted approximately by the lognormal function, with an average grain face number of  $13.8 \pm 0.1$ , very similar to the polycrystalline microstructure in real material.

**KEY WORDS** polycrystalline microstructure model; monte carlo simulation; grain size distribution; grain topology