

两种初始晶粒组织演变及准稳态的仿真研究 *

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 设计两种可由不同参量的 Weibull 尺寸分布函数表达的晶粒组织作为初始态, 采用 Potts Monte Carlo 方法对它们进行晶粒长大过程的仿真. 结果表明, 进入准稳态长大阶段后, 两种组织的晶粒尺寸分布几乎同趋于另一种 Weibull 分布, 而不是经典 Hillert 理论预测的 Hillert(尺寸分布因子 $\nu=4$) 分布. 该准稳态的晶粒尺寸分布也可用 $\nu < 4$ 的解析函数近似表示, 从而为 $\nu < 4$ 的准稳态晶粒尺寸分布的存在提供了仿真实验证据.

关键词 晶粒长大, 晶粒尺寸分布, 准稳态, Monte Carlo 仿真

中图分类号 TP391, TG111.7 **文献标识码** A **文章编号** 0412-1961(2003)06-0635-04

SIMULATION STUDY OF EVOLUTION AND QUASI-STATIONARY STATE FROM TWO INITIAL GRAIN STRUCTURES

WANG Chao, LIU Guoquan, QIN Xiangge

School of Materials Science & Engineering, University of Science & Technology Beijing, Beijing 100083

Correspondent: LIU Guoquan, professor, Tel: (010)62334314, Fax: (010)62327283,

E-mail: wangchaoyu@etang.com, G.Liu@ustb.edu.cn

Supported by National Natural Science Foundation of China (No.50171008)

Manuscript received 2002-07-12, in revised form 2002-10-14

ABSTRACT Monte Carlo simulations were performed to investigate the process of the normal grain growth starting from two microstructures, the grain size distributions of which could be well described by the Weibull function with different parameters. The results show that, during the quasi-stationary state stage, the grain size distributions of the two microstructures seemly approach to a similar distribution, which is quite different from the Hillert ($\nu=4$) distribution. However, the Weibull function with a parameter different from that of the initial fits the grain size distribution well. Meanwhile it can also be well described by the analytical solution, where ν is smaller than 4.

KEY WORDS grain growth, grain size distribution, quasi-stationary state, Monte Carlo simulation

晶粒长大是金属、合金、陶瓷等多晶体中很普遍的现象, 也是一种最基本的组织演变, 对材料的硬度、强度和韧性等材料性能有重要作用. 因此, 关于晶粒长大的理论研究不仅有着重要的理论意义, 而且在材料的晶粒尺寸及性能设计方面具有重要的指导实践的价值.

在众多的晶粒长大理论中, 著名的 Hillert 理论^[1]虽被人们广为接受, 但它所预测的关于准稳态长大的晶粒尺寸分布 (GSD), 即峰值右偏的 Hillert 分布, 至今未能为实验或仿真结果证实. Brown^[2]曾对传统的粒子粗化理论重新进行了研究, 并获 Coughlan 和 Fortes^[3]工作的

进一步的证实. 他们认为在粒子粗化过程中可得到多种可能的准稳态的晶粒尺寸分布函数 (GSDF), 而不只是唯一的一个分布函数. 鉴于 Hillert 晶粒长大理论直接来源于粒子粗化理论, 于海波^[4]和 Rios^[5]各自独立地把文献 [3] 的方法运用到二维晶粒长大的研究中, 得到了一系列准稳态 GSDF, 记作 $f(u)$, 它们是一个以 ν (ν 对分布函数的形状具有决定性意义, 具体的物理含义见文献 [1]) 为单参量的函数族, 其中 $\nu < 4$ 情况下的形式为

$$f(u) = \frac{2uH_0\nu^{H_0}}{[u^2 - \nu(u-1)]^{1+H_0}} \exp\left\{\left[-\frac{2H_0\nu}{\sqrt{4\nu - \nu^2}}\left(\arctg\left(\frac{2u - \nu}{\sqrt{4\nu - \nu^2}}\right) + \arctg\left(\frac{\nu}{\sqrt{4\nu - \nu^2}}\right)\right)\right]\right\} \quad (1)$$

在式 (1) 中, $u = R / \langle R \rangle$ 为归一化晶粒尺寸, R 和 $\langle R \rangle$ 分别为晶粒尺寸和平均晶粒尺寸. H_0 和 ν 的关

* 国家自然科学基金项目 50171008 资助

收到初稿日期: 2002-07-12, 收到修改稿日期: 2002-10-14

作者简介: 王超, 女, 1972 年生, 博士生

系由下式决定

$$\int_0^{u_{\max}} f(u)u du = 1 \quad (2)$$

其中, u_{\max} 为系统中晶粒尺寸的最大值.

于海波^[4]在晶粒长大数值模拟中, 观察到了 $\nu < 4$ 的晶粒尺寸分布, 但是由于数值计算对模型假设本身合理性的依赖, 以及对晶粒组织自身拓扑性质的不充分考虑, 该数值仿真结果尚待新研究结果的进一步证实.

Potts Monte Carlo(简称 PMC) 仿真^[6-9], 作为一种有效的图像仿真方法, 能够方便地计入晶粒组织自身的拓扑学约束, 且便于对组织进行多种参量的表征, 是研究晶粒长大的便捷工具. 但已有仿真大多限于对某单一初始组织的仿真, 因为不同初始组织设计与生成相当困难.

本文将设计和生成两种不同的初始组织, 并通过对它们的晶粒长大过程的仿真, 探讨初始晶粒的尺寸分布对晶粒长大过程及其对准稳态尺寸分布的影响.

1 仿真方法

1.1 初始组织的设计与生成

初始组织的生成采用 Laguerre tessellation 方法^[10]. 图 1 表示了晶粒 p_1 的生成方法, 其中 L_{16} 为晶粒 p_1, p_6 之间的晶界, L_{126} 代表晶粒 p_1, p_2, p_6 的三晶交点. 具体方法如下: 将仿真系统离散成一系列由随机整数表征其微观取向的格点, 这些格点以正六边形表示, 并作为构成晶粒的最小单元. 随机选取格点 (以位置坐标 $p_1(x_1, y_1)$ 表示), 并以其为圆心, 做一个半径为 r_1 的圆, r_1 的大小由呈 Weibull 分布的随机数决定, 该圆所围格点的取向数均取同一值; 再随机选取点 $p_2(x_2, y_2)$, 若 p_2 落在 p_1 为圆心的圆内, 则弃之不用, 另选一点 p_2 为圆心, 同样以随机数 r_2 为半径作圆, 以此类推, $p_3(x_3, y_3), p_4(x_4, y_4), p_i(x_i, y_i) \dots$ 直至选取 n 个随机点. 若不同的圆之间存在重叠, 重叠部分点 $p_0(x_0, y_0)$ 的取向值由它与相应圆心的

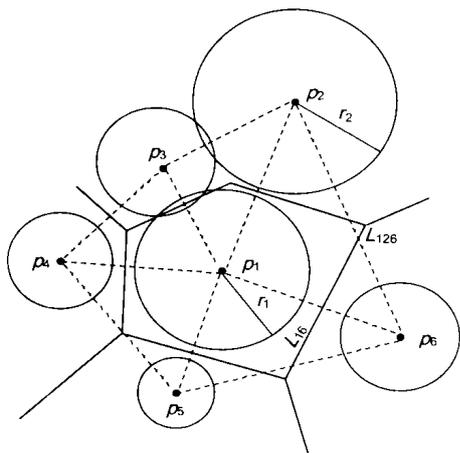


图 1 用于仿真研究的初始晶粒组织生成方法示意图

Fig.1 Generation of the initial grain structure used in simulation study

距离 $|p_0 - p_i|$ 与相应半径 r_i 的差值决定; 若 $||p_0 - p_i| - r_i|$ 最小, 则 p_0 的取向值与 p_i 相同. 与此类似, 仿真区域内有未被赋取向值的点 $q(x, y)$, 其取向由与其最相邻圆的取向确定. 设圆心及半径分别为 $p_i(x_i, y_i)$ 和 r_i , 若 p_i 和 r_i 满足: $||p_i - q| - r_i|$ 最小, q 的取向值与 p_i 相同.

1.2 Potts Monte Carlo 仿真过程

对于由一系列离散格点 (每个均被赋以具体的由随机整数表示的微观取向) 组成的仿真系统, 具体的仿真过程如下^[6]:

(1) 随机选取取向为 S_i 的格点 (site), 判断其是否在晶界上;

(2) 若 S_i 在晶界上, 从其最近邻或次近邻格点中随机抽取格点 S_j , 尝试 $S_i \rightarrow S_j$;

(3) 计算取向相关能 E 满足: $E = -J \sum (\delta_{S_i S_j} - 1)$, 其中 J 是正比于晶界能的常数, $\delta_{S_i S_j}$ 是 Kronecher 函数, S_i 为某被选定格点的取向, S_j 为与其相邻格点的取向值 (一般为其最近邻或次近邻格点), 求和包括所有的近邻格点;

(4) 通过计算与上述过程 (2) 的尝试再取向相关的能量变化 ΔE , 确定成功实现 $S_i \rightarrow S_j$ 再取向的概率 ρ

$$\rho = \begin{cases} 1 & \Delta E \leq 0 \\ 0 & \Delta E > 0 \end{cases} \quad (3)$$

(5) 重复过程 (1) — (4), 对仿真系统中所有格点都尝试完一遍, 记为一个 Monte Carlo 步, 简记为 MCS.

2 仿真结果

2.1 用于仿真的两种初始组织

采用前述方法生成了如图 2 所示的显微组织, 相应的 GSDs 示于图 3. 对图 3 的 GSDs 采用最小二乘法拟合, 发现它们可分别用形状因子 $\beta=1.92$ 和 $\beta=2.90$ 的 Weibull 函数^[11], 即尺寸分布变异系数 (记为 $CV(R)$) 分别为 0.52 和 0.37 的 Weibull 函数很好地描述, 拟合 χ^2 值小于 0.003 (χ^2 值为拟合优度的特征量).

2.2 晶粒长大过程

运用前述的 PMC 方法仿真晶粒长大过程. 仿真初期, 由抛物线长大方程定义的长大指数^[12] 约为 0.6 左右, 经过 3000 MCS 的演化后, 晶粒长大指数约为 0.52, 这与稳态长大的理论值 0.5 指数已相当接近, 说明已基本接近晶粒长大的稳态生长阶段.

在整个仿真过程中, 晶粒长大的 GSDs 是逐渐发生演化的. 不同仿真时刻的归一化 GSDs 示于图 4. 可以看出, 经过 3000 MCS 的演化, GSDs 已经基本保持不变. 这也说明仿真实现了晶粒的稳态长大. 对图 4 中不同仿真时刻的 GSDs 可以用 Weibull 函数进行拟合, 相应于图 4a 和 b 中参数 β 的拟合值分别为 2.43 和 2.40, 其拟合 χ^2 值均小于 0.007, 则在误差范围内可以认为拟合参

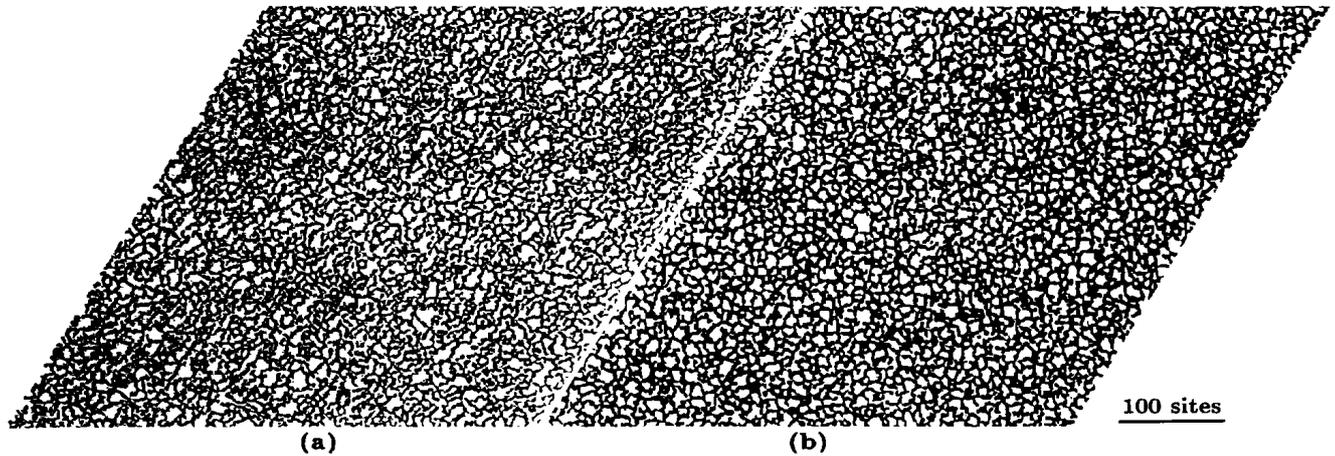


图 2 具有 Weibull 晶粒尺寸分布的初始组织形貌

Fig.2 Initial microstructures with the Weibull GSD with $CV(R)=0.52$ (a) and $CV(R)=0.37$ (b) (the structure shown here is only 1/16 of the structure in size of 2000×2000 sites)

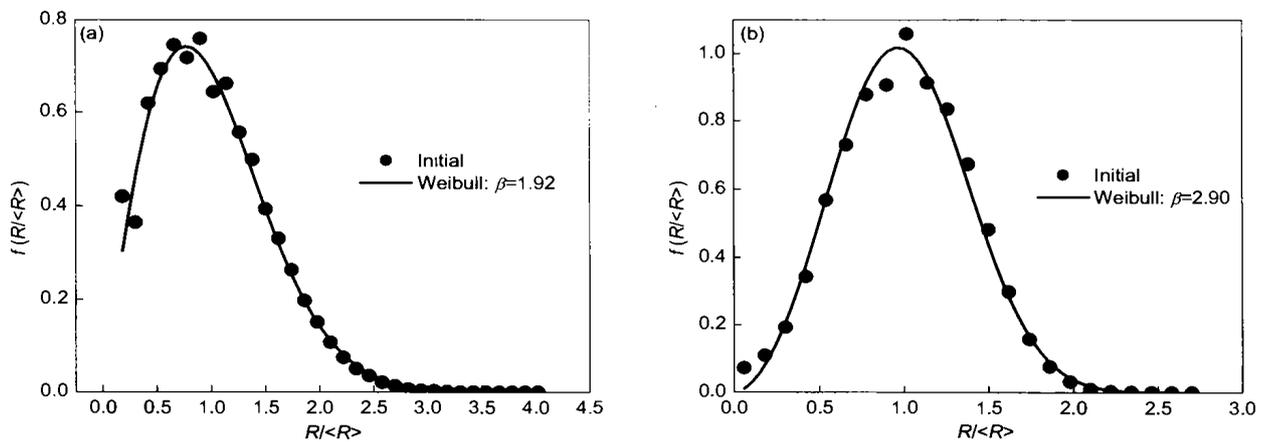


图 3 图 2 所示初始晶粒组织相应的晶粒尺寸分布

Fig.3 Initial GSDs for Fig.2 with the variation coefficient $CV(R)=0.52$ (a) and $CV(R)=0.37$ (b)

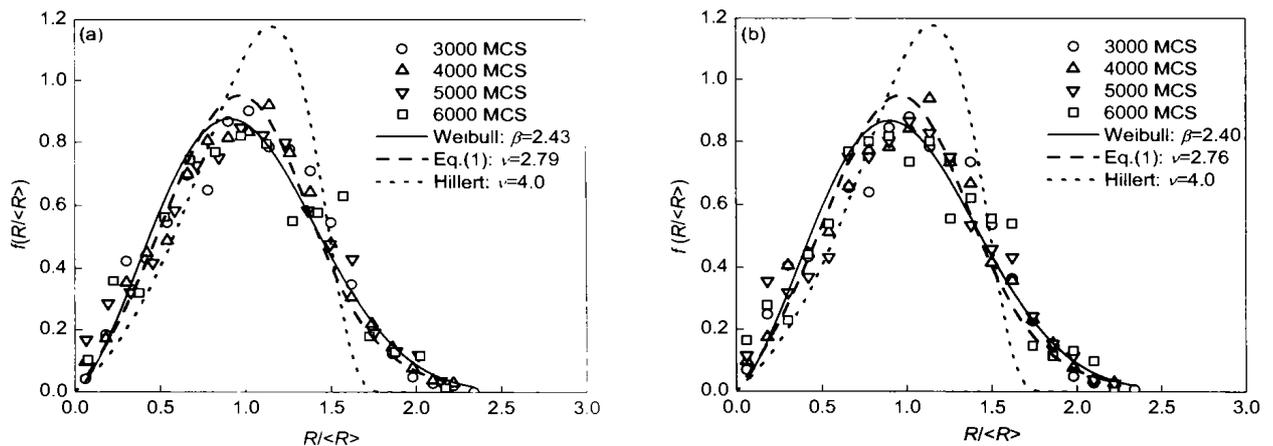


图 4 初始具有 Weibull 晶粒尺寸分布的两种组织在不同仿真时刻的晶粒尺寸分布

Fig.4 Time evolution of the GSDs starting from the Weibull GSDs with the variation coefficient $CV(R)=0.52$ (a) and $CV(R)=0.37$ (b)

数 β 具有相同的取值. 这表明: 所采用的初始迥异的两种组织演化到稳态长大阶段时已成为具有几乎相同 GSD 的组织. 为了比较, Hillert 所预言的准稳态尺寸分布也在图 4 中给出, 很显然用它来描述准稳态的尺寸分布并不合适.

对图 4 中不同仿真时刻的 GSDs 还采用式 (1) 进行了最小二乘拟合. 结果显示, 参数 ν 的拟合值分别为 2.79 和 2.76, 在误差范围内可以认为 ν 的取值是相同的. 因此, 本文仿真所得准稳态下的晶粒尺寸分布也可用以 $\nu < 4$ 为参量的解析函数来近似, 表明 $\nu < 4$ (而不是经典 Hillert 晶粒长大理论预报的 $\nu \equiv 4$) 条件下的理论解是有效的.

本文中的 Weibull 函数具有如下形式^[11]

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

其中, $\alpha = 1/\Gamma(1 + 1/\beta)$. 它与式 (1) 相同都是单参数函数, β 或 ν 对其形式具有决定作用. 通过比较发现, 当 ν 取值在 2.06—3.42 范围内, Weibull 函数的 β 取值为 2.1—3.3 时, 二者几乎重合, 可以相互替代 (见图 5).

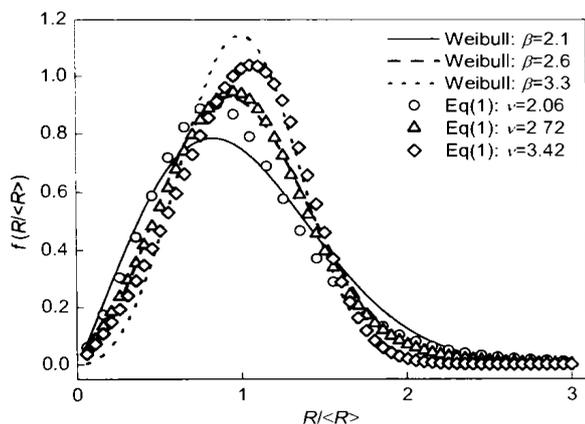


图 5 Weibull 函数与解析式 (1) 的关系

Fig.5 Comparison of the Weibull function and the analytical Eq.(1)

至于所有不同初始组织在晶粒长大达到准稳态时, 是否都能够获得 $\nu \approx 2.8$ 的晶粒尺寸分布, 还需要进一步的研究.

3 结论

(1) 实现了两种晶粒尺寸分布迥异的显微组织的设计与生成, 并对其晶粒长大过程进行了 Potts Monte Carlo 仿真, 达到了晶粒长大的稳态生长阶段.

(2) 初始晶粒尺寸分布不同的两种组织经过一定时间的演化后, 形成了晶粒尺寸分布的函数形式和参数基本相同的组织, 其尺寸分布可以用 Weibull 函数较好地近似, 用经典的 Hillert 分布表达则明显不合适.

(3) 演化到稳态长大阶段的上述晶粒尺寸分布也可以用相关的解析理论预测的晶粒尺寸分布函数来表达, 相应的 ν 参数约为 2.8, 为 $\nu < 4$ 的准稳态晶粒尺寸分布的存在提供了仿真实验证据.

参考文献

- [1] Hillert M. *Acta Metall*, 1965; 13: 227
- [2] Brown L C. *Acta Metall*, 1989; 37: 71
- [3] Coughlan S D, Fortes M A. *Scr Metall Mater*, 1993; 28: 1471
- [4] Yu H B. *PhD Dissertation*, University of Science and Technology Beijing, 1997
(于海波. 北京科技大学博士学位论文, 1997)
- [5] Rios P R. *Scr Mater*, 1999; 40: 665
- [6] Song X, Liu G. *J Mater Sci*, 1999; 34: 2433
- [7] Radhakrishnan B, Zacharia T. *Metall Mater Trans*, 1995; 26A(1): 167
- [8] Ye R Q, Zhao J H, He L H. *J Inorg Mater*, 2001; 16(1): 122
(叶日晴, 赵建华, 何陵辉. 无机材料学报, 2001; 16(1): 122)
- [9] Song X Y, Liu G Q, He Y Z. *Prog Natural Sci*, 1998; 8: 337
(宋晓艳, 刘国权, 何宜柱. 自然科学进展, 1998; 8: 337)
- [10] Telley H, Liebling T M, Mocellin A. *Philos Mag B*, 1996; 73B: 395
- [11] Rios P R. *Scr Mater*, 2000; 42: 349
- [12] Atkinson H V. *Acta Metall*, 1988; 36: 469