

## 单一晶粒长大过程的元胞自动机模拟

关小军<sup>1</sup>, 焦宪友<sup>1</sup>, 周家娟<sup>2</sup>, 张继祥<sup>1</sup>, 刘运腾<sup>1</sup>, 申孝民<sup>1</sup>, 麻晓飞<sup>1</sup>

(1. 山东大学 材料科学与工程学院, 济南 250061;

2. 山东大学 管理科学与工程学院, 济南 250014)

**摘 要:** 基于 Moore 型邻居及其相关转换准则的元胞自动机, 分别对与多个晶粒相邻的单一正四边形、六边形、八边形小晶粒在晶粒长大过程中的形态变化进行模拟。结果表明: 单一小晶粒形态变化规律与总体晶粒形态变化规律一致, 即随着晶粒长大过程的延长, 晶界边数大于 6 的晶粒会不断长大且边数趋于 6; 晶界边数小于 6 的晶粒则不断变小直至消失。所用模型具有较好的物理机制, 可以模拟材料晶粒长大过程。

**关键词:** 元胞自动机; 晶粒长大; 计算机模拟

**中图分类号:** TG 111; O 189

**文献标识码:** A

## Cellular automata simulation of single grain growth

GUAN Xiao-jun<sup>1</sup>, JIAO Xian-you<sup>1</sup>, ZHOU Jia-juan<sup>2</sup>, ZHANG Ji-xiang<sup>1</sup>, LIU Yun-teng<sup>1</sup>, SHEN Xiao-min<sup>1</sup>, MA Xiao-fei<sup>1</sup>

(1. School of Materials Science and Engineering, Shandong University, Ji'nan 250061, China;

2. School of Management Science and Engineering, Shandong University, Ji'nan 250014, China)

**Abstract:** Based on the cellular automata (shortly called CA) made up of Moore neighbor type and its translation rules, the variation of shape and size of three kinds of single and smaller grains was simulated in the process of grain growth. The grains are quadrilateral, hexagonal or octagon surrounded with a few grains, respectively. The results show that the changes of grains correspond to the general law of grain growth, that is, as extending the progress of grain growth, the grain whose boundary is more than six continues to grow and its boundary number approaches six, and the grain whose boundary is less than six continues to diminish until disappear. The model used has better physical basis to suit for simulating the progress of grain growth.

**Key words:** cellular automata; grain growth; computer simulation

1991 年, Hesselbarth 和 Göbel 首先采用元胞自动机(Cellular automata, CA)进行了材料再结晶形核及其晶粒长大的动力学模拟, 得出与 JAMK 理论相同的结果<sup>[1]</sup>。随后, 国际上基于 CA 的晶粒长大和再结晶过程模拟方法、理论以及与其相关的耦合方法的研究十分活跃<sup>[2-10]</sup>。其中, Davies 等做了大量工作, 研究了元胞邻居对静态再结晶动力学的影响, 指出模型结构并不会影响 JMAK 公式的时间因子和常数<sup>[2]</sup>; 在再结

晶晶核长大的 CA 模拟中, 采用实验数据转换方法将模拟时间-空间与真实时间-空间联系起来<sup>[3]</sup>; 进行冷轧 AA1050 铝合金静态再结晶 CA 模拟研究时, 模拟结果与实验结果在再结晶动力学、平均晶粒尺寸和体积分数方面基本一致<sup>[4]</sup>; 探讨了析出物粗化对再结晶 CA 的影响<sup>[5]</sup>。Rabbe 等<sup>[7]</sup>应用三维 CA 对包括位向变化和晶界运动在内的微观再结晶转变现象进行了预测<sup>[6]</sup>; 还以铝为研究对象, 采用 CA 与塑性有限元耦

基金项目: 山东省自然科学基金资助项目(Y2003F03)

收稿日期: 2005-12-13; 修订日期: 2006-04-08

通讯作者: 关小军, 教授; 电话: 0531-88396587, 0531-88655799; E-mail: xjguan@sdu.edu.cn; gxj522002@yahoo.com.cn

合模型进行了初始静态再结晶模拟研究<sup>[7]</sup>；并研究再结晶模拟的 MC 和 CA 的混合方法，考虑曲率和储存能共同驱动晶界迁移，保证了再结晶的物理本质，进一步提高了模拟与实际的拟合度<sup>[8]</sup>。

近年来，国内应用 CA 进行材料晶粒长大过程的模拟研究刚刚起步，仅限于二维晶粒长大过程<sup>[11-12]</sup>、钢坯加热期间奥氏体晶粒粗化过程等<sup>[13]</sup>。这些研究都是针对材料组织的总体晶粒变化，未涉及材料组织的单一晶粒变化。实际上，材料组织的总体晶粒变化源于大量的单一晶粒变化的集合，研究材料组织的单一晶粒变化规律对于全面认识其晶粒长大的微观过程是必要的。因此，本文作者在前期创建的反映总体材料晶粒组织变化的 CA 基础上，重点模拟了晶粒长大期间材料微观区域不同形貌的单一小晶粒的形态变化规律，展示了晶粒长大的微观过程，进一步验证了所建 CA 的物理本质及其合理性，为后续研究奠定基础。

## 1 模拟原理和方法

CA 是一种随机的数学模型，由元胞，元胞空间，邻居和转变规则这 4 个基本要素构成。

元胞空间可依据研究需求采用不同形状的网格划分，本文作者采用四边形网格，每一个网格代表一个元胞且由不同参数来表示其状态(晶粒取向)。时间单位为一个模拟时间步(简称为 1CAS)，定义为所有元胞都尝试了一次状态转变的时间间隔。

邻居定义为任一时刻所考察元胞的周围元胞。本文采用如图 1 所示的 Moore 型邻居定义。

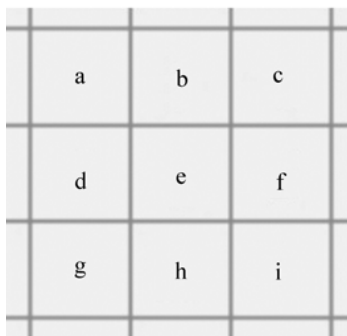


图 1 Moore 型邻居定义

Fig.1 Definition of Moore neighbor type

每一个元胞在  $t+1$  时刻的状态由其相邻元胞在  $t$  时刻的状态所决定，即

$$e(t+1)=F\{a(t), b(t), c(t), d(t), e(t), f(t), g(t), h(t), i(t)\}$$

式中  $e(t+1)$  为元胞  $e$  在  $t+1$  时刻的状态， $a(t), b(t), \dots, i(t)$  分别为元胞  $e$  及其相邻元胞在  $t$  时刻的状态， $F$  为元胞状态转变规则。在本文每一模拟时间步(1CAS)内，网格内每个元胞状态都按以下规则判断其是否转换。

1) 如元胞  $e$  周围的 8 个元胞  $a, b, c, d, f, g, h, i$  的状态均与其相同，则在下一个 CAS 时，元胞  $e$  的状态保持不变。

2) (a)如元胞  $b, d, f, h$  中任意 3 个同为  $A$  状态，则在下一个 CAS 时，元胞  $e$  的状态转变为  $A$ ；(b)如元胞  $a, c, g, i$  中任意 3 个同为  $A$  状态，则在下一个 CAS 时，元胞  $e$  的状态转变为  $A$ 。

3) 假设晶界能均质分布，元胞  $e$  必须克服能量壁垒而随机转变为任意邻居的状态，转变概率为  $P$ 。

具体判断、转换过程为：首先，选定一个元胞进行规则判断，顺序为规则(1)→规则(2a)→规则(2b)→规则(3)，当满足任意规则的条件时进行相应转换，后续判断步骤可略去；同样，依次进行所有元胞状态转换的判断，完成 1CAS 的元胞状态判断、转换过程。

在上述规则中，规则(1)判断晶界是否稳定或元胞是否在晶粒内部。如果晶界稳定或元胞在晶粒内部，继续判断下一元胞；规则(2)模拟曲率对晶界迁移的影响，由于表面张力的作用，晶界总是向其曲率中心运动且趋向于形成一直线。规则(2a)先进行、(2b)后进行的原因在于考虑最近邻居和次最近邻居影响的不同；规则(3)模拟了热激活条件和晶界能的影响，这对于保持晶界运动和促使小晶粒的消失尤为重要。本模拟中，晶界定义为联结两个状态不同的元胞之间最小长度单元。

## 2 模拟的初始和边界条件

为了研究方便，模拟中仅分别对单一的正多边形小晶粒与 4 个、6 个、8 个晶粒相邻的局部区域的晶粒变化过程进行模拟，相应的初始和边界条件如下。

采用  $100 \times 100$  四边形网格，并应用非周期性边界以反映有限区域的相邻晶粒组织；分别对该晶粒及其相邻晶粒的元胞集合初始状态赋予不同的取向数  $q_i$  ( $i=1, 2, \dots, 5$ ; 或  $i=1, 2, \dots, 7$ ; 或  $i=1, 2, \dots, 9$ )，最大取向数  $Q$  为 1 000；元胞状态随机转变概率  $P$  取为 0.02，以代替晶界能和热激活条件的综合影响；总模拟时间为 2 000 CAS。

### 3 模拟结果分析

随着模拟时间不断增加, 正四边形晶粒不断缩

小、形状基本不变直至消失, 相邻晶粒不断增大, 结果如图 2~4 所示; 正六边形晶粒及其相邻晶粒的形状和大小基本保持不变; 正八边形晶粒逐渐长大、形状趋于正六边形, 相邻晶粒逐渐减小、形状变化不大。

由晶粒长大理论可知<sup>[14]</sup>, 晶粒长大过程中, 在晶

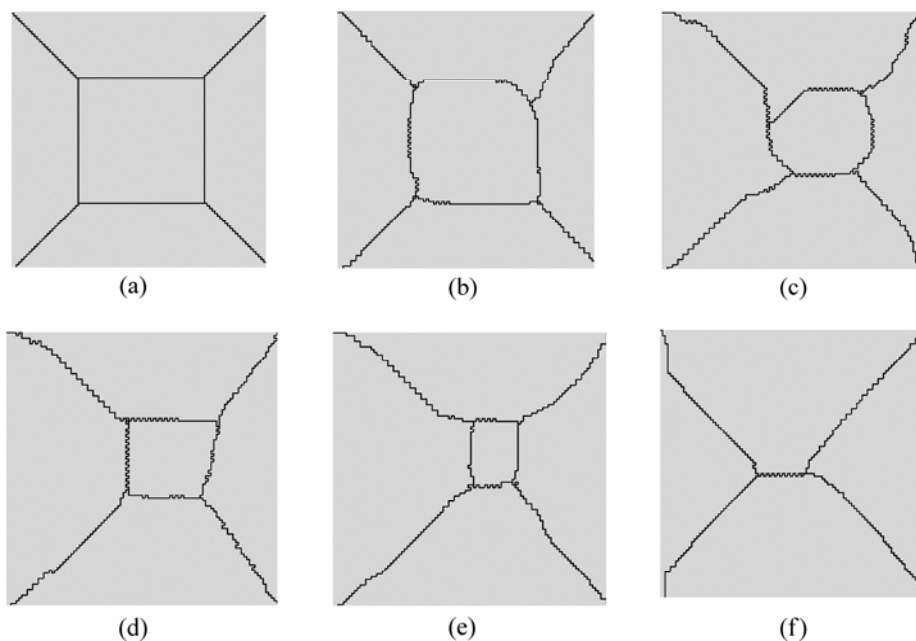


图 2 四边形小晶粒形态变化过程

**Fig.2** Process of shape change of quadrilateral and small grain: (a)  $t = 0$  CAS; (b)  $t = 200$  CAS; (c)  $t = 900$  CAS; (d)  $t = 1100$  CAS; (e)  $t = 1300$  CAS; (f)  $t = 1650$  CAS

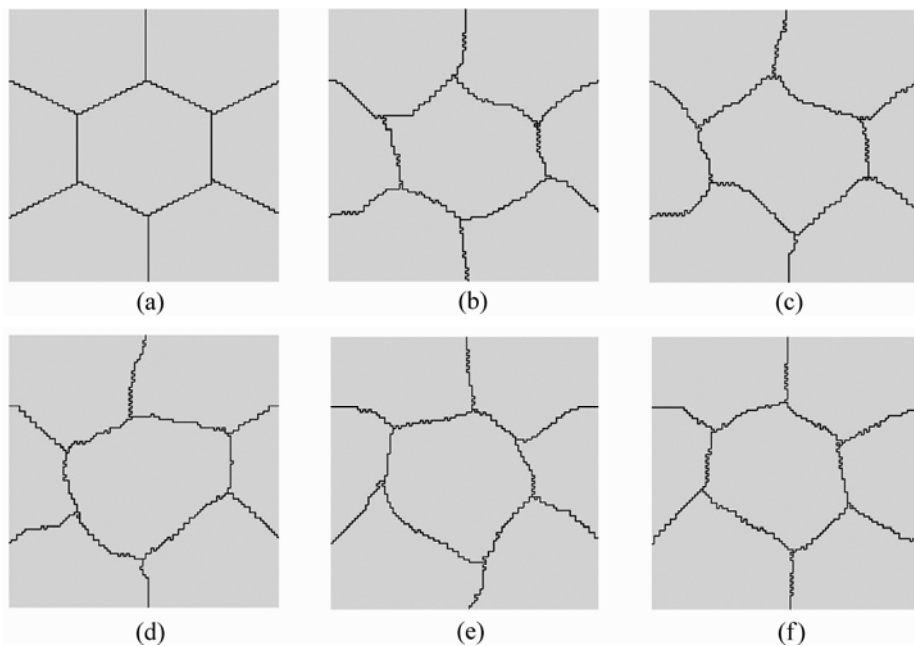


图 3 六边形小晶粒形态变化过程

**Fig.3** Process of shape change of hexagonal and small grain: (a)  $t = 0$  CAS; (b)  $t = 100$  CAS; (c)  $t = 300$  CAS; (d)  $t = 500$  CAS; (e)  $t = 900$  CAS; (f)  $t = 1100$  CAS

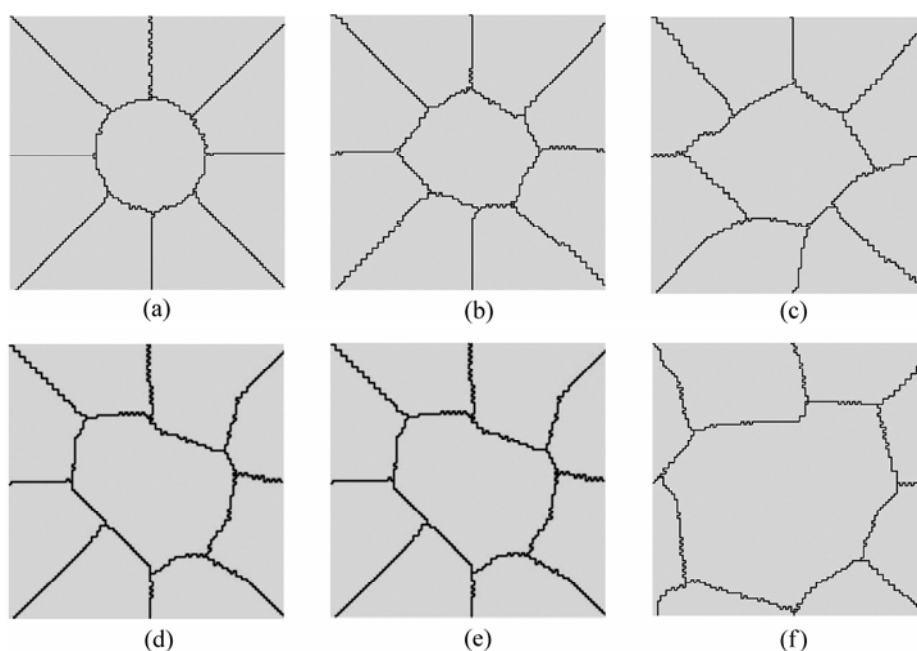


图 4 八边形小晶粒形态变化过程

**Fig.4** Process of shape change of octagon and small grain: (a)  $t = 1$  CAS; (b)  $t = 200$  CAS; (c)  $t = 600$  CAS; (d)  $t = 800$  CAS; (e)  $t = 1\,000$  CAS; (f)  $t = 2\,000$  CAS

界曲率的作用下,稳定的晶界之间夹角应该趋于  $120^\circ$  且晶界边数趋于 6,总晶界能减小。正四边形晶粒的 4 个内角均小于  $120^\circ$ ,曲率相对较大,首先收缩,随后导致各外凸晶界相应收缩,晶粒自身不断缩小;不同的是,相邻的 4 个晶粒相互作用,它们的晶界发生相应变化,但仍趋于原始位向,致使该晶粒形状基本不变,总晶界长度减小。正八边形晶粒的 8 个内角均大于  $120^\circ$ ,在晶粒生长过程中,一些内角会变小,使晶界内凹,并在曲率驱动下不断向外移动;另一些内角会变大至  $180^\circ$ ,使相交的两条晶界成为一条平直晶界,致使该晶粒形状趋于正六边形;同时,相邻的 8 个晶粒相互作用,它们的晶界亦发生相应变化,但仍趋于原始位向,总晶界长度减小。正六边形晶粒符合稳定晶界的条件,其形状、大小和总晶界长度基本保持不变;相邻的 6 个晶粒相互作用,导致该晶粒形状有些畸变。

由此可知,在理想状态下,随着模拟时间增加,晶界边数大于 6 的晶粒会不断长大且边数趋于 6,总晶界能减小;晶界边数小于 6 的晶粒则不断变小直至消失,总晶界能亦减小;正六边形晶粒的尺寸和形状以及总晶界能基本上保持不变。因此,随着晶粒长大过程的进行,晶粒组织趋于稳定状态,最终材料组织中六边形晶粒及其邻近边数晶界的晶粒应居多,采用 CA 法模拟的材料总体晶粒长大拓扑特征(图 5)及实际

材料退火期间总体晶粒长大演变过程(图 6)都证实了这一点<sup>[12, 15]</sup>。可见,该 CA 所模拟的材料微观区域单一晶粒变化规律不仅符合晶粒长大理论,而且反映了实际材料的总体晶粒变化规律,进一步表明该模型选择的邻居类型及其转换规则是合理的,具有较好的物理基础,为后续进一步改进模型以进行具体材料晶粒长大过程的模拟研究创造了条件。

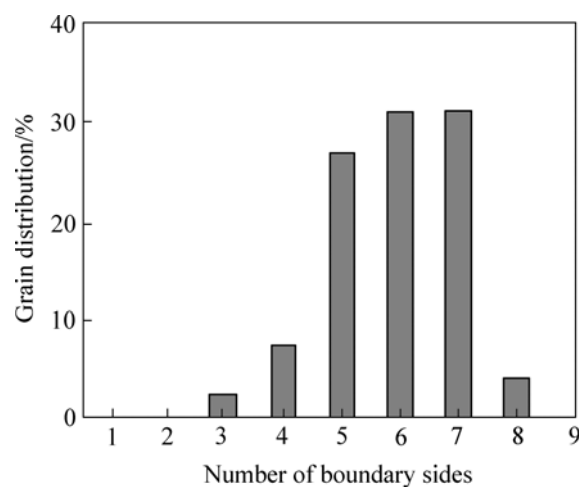


图 5 CA 法模拟的材料晶粒长大过程总体晶粒拓扑学特征<sup>[12]</sup>

**Fig.5** General characteristic of topological structure of grain in process of grain growth simulated by CA method

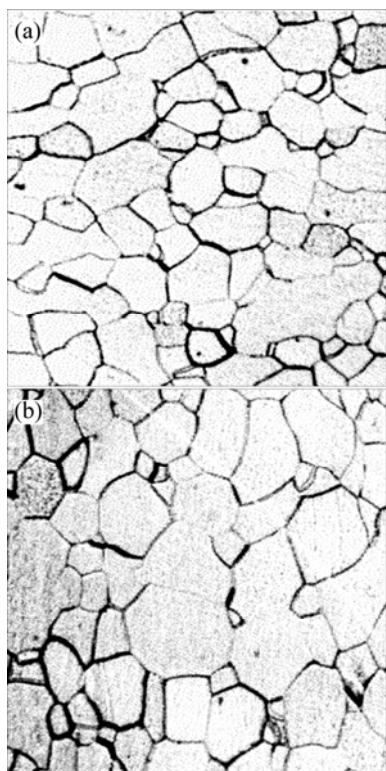


图 6 超低碳高强度烘烤硬化钢板退火期间晶粒长大阶段组织演变<sup>[15]</sup>

**Fig.6** Simulated images of microstructures for grain growth when steel sheet was annealed: (a) Grains grew for 90 s; (b) Grains grew for 120 s (Thickness of an extra low carbon and high strength bake-hardened steel sheet is 2 mm, cold rolling reduction is 46%, and soaking temperature is 910 °C)

## 4 结论

采用 CA 模拟的单一小晶粒形态变化规律与模拟材料和实际材料的总体晶粒形态变化规律一致, 即随着晶粒长大时间增加, 晶界边数大于 6 的晶粒会不断长大且边数趋于 6; 晶界边数小于 6 的晶粒则不断变小直至消失; 晶粒长大过程遵循能量降低原则和晶粒长大理论。这表明, 本实验所用模型具有较好的物理机制, 进一步改进后可以模拟实际材料的晶粒长大过程。

## REFERENCES

[1] von Neumann J. The general and logical theory of automata. Papers of John von Neumann on computing and computer theory (Volume 12). In the Charles Babbage Institute reprint series for the history of computing[M]. MIT Press, 1987.

[2] Hesselbarth H W, Göbel I R. Simulation of recrystallization by

cellular automata[J]. Acta Metallurgica, 1991, 39: 2135–2144.

[3] Davies C H J. The effect of neighborhood on the kinetics of a cellular automaton recrystallization model[J]. Scripta Metallurgica et Materialia, 1995, 33: 1139–1154.

[4] Davies C H J. Growth of nuclei in a cellular automaton simulation of recrystallization[J]. Scripta Materialia, 1997, 36: 35–46.

[5] Davies C H J, Hong L. Cellular automaton simulation of static recrystallization in cold-rolled AA1050[J]. Scripta Materialia, 1999, 40: 1145–1152.

[6] Young M J, Davies C H J. Cellular automaton modelling of precipitate coarsening[J]. Scripta Materialia, 1999, 41: 697–708.

[7] Raabe D. Introduction of a scaleable 3D cellular automaton with a probabilistic switching rule for the discrete mesoscale simulation of recrystallization phenomena[J]. Philosophical Magazine A, 1999, 79: 2339–2358.

[8] Raabe D, Becker R. Coupling of a crystal plasticity finite element model with a probabilistic cellular automaton for simulating primary static recrystallization in aluminum[J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2000, 8: 445–462.

[9] Rollett A D, Rabbe D. A hybrid model for mesoscopic simulation of recrystallization[J]. Computational Materials Science, 2000, 21: 69–78.

[10] Marx V, Reher, F R, Gottstein G. Stimulation of primary recrystallization using a modified three-dimensional cellular automaton[J]. Acta Materialia, 1998, 47: 1219.

[11] Liu Y, Baudin T, Penelle R. Simulation of grain growth by cellular automata[J]. Scripta Materialia, 1996, 34: 1679.

[12] 夏维国. 晶粒长大动力学的计算机模拟[J]. 株洲工学院学报, 2003, 17(5): 36–38.

XIA Wei-guo. Computer simulation of grain growth in kinetics[J]. Journal of Zhuzhou Institute of Technology, 2003, 17(5): 36–38.

[13] 焦宪友, 关小军, 刘运腾, 等. 基于元胞自动机法的晶粒长大模拟[J]. 山东大学学报(工学版), 2005, 35(6): 24–28.

JIAO Xian-you, GUAN Xiao-jun, LIU Yun-teng, et al. Simulation of grain growth based on Cellular Automata method[J]. Journal of Shandong University (Engineering Science), 2005, 35(6): 24–28.

[14] YU Wan-hua, Palmiere E J, Banks S P, et al. Cellular automata modelling of ausenite grain coarsening during reheating - I normal grain coarsening[J]. Journal of University of Science and Technology (English Edition), 2004, 11(6): 517.

[15] 毛卫民, 赵新兵. 金属的再结晶与晶粒长大[M]. 北京: 冶金工业出版社, 1994.

MAO Wei-min, ZHAO Xin-bin. Recrystallization and grain growth of metals[M]. Beijing: Metallurgical Industry Press, 1994.

[16] 张继祥, 关小军, 孙 胜. 一种改进的晶粒长大 Monte Carlo 模拟方法[J]. 金属学报, 2004, 40(5): 457–461.

ZHANG Ji-xiang, GUAN Xiao-jun, SUN Sheng. A modified monte carlo method in grain growth simulation[J]. Acta Metallurgica Sinica, 2004, 40(5): 457–461.

(编辑 龙怀中)