

## 正常晶粒长大的遗传算法模拟

张根元, 徐迈里, 文 芳, 陈洪莲

(河海大学 机电工程学院, 常州 213022)

**摘 要:** 引入遗传算法模拟正常晶粒长大过程, 基于正常晶粒长大动力学和能量最小原理, 建立晶粒长大的对应遗传规则和能量最小的适应度函数。该算法模拟结果表明: 系统的晶界总周长和系统晶界能随着遗传代数的传递不断减少, 系统的热力学状态趋于稳定; 在 5 000 GAS 前后阶段的晶粒长大指数  $n$  分别为 0.477 和 0.414, 与理论值 0.500 相近, 与正常晶粒长大的动力学规律较符合; 晶粒半径分布具有 Weibull 函数拓扑结构形式, 平均晶粒边数为 5.923。遗传算法可以根据实际晶粒长大过程的约束条件对遗传规则和适应度函数进行设置, 因而具有良好的柔性。

**关键词:** 遗传算法; 遗传规则; 适应度函数; 晶粒; 模拟

**中图分类号:** TG 111      **文献标识码:** A

## Genetic algorithm simulation of normal grain growth

ZHANG Gen-yuan, XU Mai-li, WEN Fang, CHEN Hong-lian

(College of Mechanical and Electrical Engineering, Hohai University, Changzhou 213022, China)

**Abstract:** The genetic algorithm method was introduced in the simulation process of grain growth. Genetic rules and fitness functions were used in the simulation based on the kinetics and the lowest energy principle of normal grain growth. The simulation results indicate that the system boundary length and boundary energy reduce unceasingly along with the increase of GAS, system's thermodynamics state tends to be stable. In the stage before and after the 5 000 GAS the grain growth exponent  $n$  is 0.477 and 0.414, respectively, close to the theoretical value 0.5, satisfying well to the kinetics of normal grain growth. The grain radius distribution agrees well with the Weibull function topology structural style, the average grain side is 5.923. In the genetic algorithm, the genetic rules and fitness functions may be established according to constraint condition in real grain growth process, so it has good flexibility.

**Key words:** genetic algorithm; genetic rule; fitness function; grain; simulation

材料的显微组织结构与其性能关系密切, 晶粒的平均尺寸是材料性能的重要指标, 其变化对材料的综合力学性能及机械加工性能具有重大的影响<sup>[1-2]</sup>。晶粒长大是多晶体材料中最基本的显微组织演变过程之一, 因此, 掌握和控制材料制备和材料加工中晶粒长大过程一直是学者们致力解决的热点问题<sup>[3-5]</sup>。

计算机技术发展为模拟研究材料的晶粒长大过程开辟了一条新途径<sup>[3-5]</sup>。晶粒长大的数值模拟是在晶粒长大动力学方程的基础上, 利用数值方法对方程进行

求解, 获得稳态晶粒尺寸分布函数及其相关变量之间的数学关系; 晶粒长大的图像模拟是设计一定几何阵列来构造初始组织, 依据晶粒长大的物理和数学规律通过程序操作使初始组织发生演化, 生动地再现材料的显微组织的演变过程。数值模拟依赖于理论模型的合理性; 图像模拟能综合地反映晶粒长大的动力学和拓扑学关系。常用的图像模拟方法有 Monte Carlo 法<sup>[5-12]</sup>和 Cellular Automation 法<sup>[13-16]</sup>。

在现有正常晶粒长大模拟研究基础上, 本文作者

将遗传算法引入到模拟正常晶粒长大过程中,建立其计算物理模型,并对此过程的长大动力学理论参数和拓扑学结构的相关指标模拟结果进行分析。

## 1 遗传算法简介

遗传算法(Genetic algorithm)是模拟自然界生物进化机制的一种算法<sup>[17]</sup>,即遵循适者生存、优胜劣汰的法则,在所有可能的解决方法中找出最符合该问题所要求的条件的最优解决方法。该算法包含繁殖、变异、竞争和选择这4个基本过程。

若用 $X_i(t)$ 表示第 $t$ 代种群的第 $i$ 个个体,则标准遗传算法的迭代过程可描述为:

第1步 置 $t=0$ ,随机产生初始种群 $X(0)=\{X_1(0), X_2(0), \dots, X_M(0)\}$ 。

第2步 独立地从当前种群中选取 $N$ 对母体。

第3步 独立地对所选 $N$ 对母体实施杂交生成 $N$ 个中间个体。

第4步 独立地对 $N$ 个中间个体进行变异得到第 $(t+1)$ 代种群 $X(t+1)=\{X_1(t+1), X_2(t+1), \dots, X_N(t+1)\}$ 。

第5步 停止或置 $t=t+1$ 并返回第2步。

遗传算法的终止条件常用的有:1)指定遗传代数 $t$ 后终止遗传;2)染色体的适应度达到某一指定值时终止;3)群体中所有的染色体都达到一定的相似程度时(多数染色体在许多位置都有相似的位)终止。

## 2 遗传算法模拟的建模

在正常晶粒长大过程中的 $t(1)$ 时刻晶粒的组织结构是由 $t(0)$ 时刻晶粒的组织结构按某些规则变化长大的,组织结构的变化是由其中的晶格单元所决定的。

基于正常晶粒长大过程,建立其遗传算法模型:假设 $t(n)$ 时刻的二维晶粒组织结构相当于二维染色体 $g(n)$ ,则组织结构中的晶胞相当于染色体中的基因;若1个基因周围相邻基因中不存在与其取向不同的基因,则其位于晶粒内部;若1个基因周围相邻基因中存在与其取向不同的基因,则它位于晶界上;由染色体 $g(n)$ 遗传变异生成染色体 $g(n+1)$ 的过程称为1个遗传步((Genetic algorithm step,简称GAS)。基于上述假设,正常晶粒长大过程描述成:“染色体由基因组成,染色体 $g(n+1)$ 是由染色体 $g(n)$ 按某些规则遗传变异和环境的自然选择得来的”,这正是遗传算法中精华所在,在遗传算法中可用转换规则表达遗传变异过程,

适应度函数表达自然选择过程。

遗传算法的具体步骤如下。

第1步 初始组织结构(染色体) $g(0)$ 按照具有物理意义的概率型转换规则产生 $n$ 个不同后代 $g(1a)$ , $g(1b)$ , $\dots$ 。

第2步 引入适应度函数,对 $n$ 个后代进行排序 $g(1a)$ , $g(1b)$ , $\dots$ 。

第3步 对前 $k(k < n)$ 个个体进行杂交、变异操作,产生 $m$ 个后代。将这 $m$ 个后代和前 $n$ 个后代用适应度函数重新排序。

第4步 重复第3步一定次数,选取最符合适应度函数的后代 $g(1a)$ 作为 $g(1)$ 。

第5步 对 $g(1)$ 重复第1~第4步中 $g(0)$ 的操作产生 $g(2)$ , $g(3)$ , $\dots$ ,最终模拟出正常晶粒长大的过程。

其中杂交可通过取 $g(1a)$ 上半部分和 $g(1b)$ 下半部分的组织结构重组成新的染色体实现;变异可通过对晶界处的基因重新取向来实现,通过其他符合意义的杂交、变异方法亦可。

遗传算法模拟正常晶粒长大过程具有如下特点:

1)遗传算法不仅能通过基因的遗传规则对晶粒长大中单个晶胞的转变进行约束,还能通过适应度函数对晶粒整体或局部组织结构进行判断选择;2)遗传算法可以自由地按照物理意义选择转换规则和适应度函数,对从单个晶胞转变到整体组织结构判断选择规则有很好的柔性;3)遗传算法的复杂性较高,程序编制较复杂,模拟效率较低。

## 3 正常晶粒长大的遗传算法

采用遗传算法模拟正常晶粒长大的具体算法如下。

第1步 确定晶粒组织(二维染色体)的结构,将所计算的二维区域离散成四边形网格作为基因,基因总数为 $N \times N$ ,采用周期性边界。

第2步 确定基因总取向数 $Q$ ,给初始染色体中每一基因随机赋予取向值 $q$ , $1 \leq q \leq Q$ ,并将此时刻的染色体记为 $g(0)$ 。

第3步 指定总遗传步数 $m$ GAS,遗传后代数 $I$ 。

第4步 对染色体中的基因按遗传规则进行遗传变异<sup>[13,15-16]</sup>。

规则1 如果目标基因和周围8个基因的状态相同,则下一时刻目标基因取向不变。

规则2 (a) 如果目标基因相邻的上、下、左、右这4个基因中任意3个同为A取向基因,那么,下一

时刻, 目标基因的状态转变为 A 取向基因; (b) 若目标基因相邻的左上、左下、右上、右下这 4 个基因中任意 3 个同为 A 取向基因, 则下一时刻, 目标基因的状态转变为 A 取向基因。

规则 3 假设晶界能均质分布, 且 1 个基因必须克服变异能量壁垒而随机转变为任意邻居基因的状态, 其变异概率为  $p$ 。

上述规则的变异优先级由规则 1、规则 2(a)、规则 2(b)到规则 3 依次递降, 当满足任一规则时进行相应遗传变异, 后续规则判断步骤可略去。

对染色体上所有基因进行 1 次遗传变异后, 得出  $g(0)$  的一个后代  $g(1a)$ 。

第 5 步 重复步骤 4, 产生  $g(1)$  的  $i$  个不同后代:  $g(1a), g(1b), g(1c), \dots$ , 并对后代进行简单的杂交处理以产生新的个体;

第 6 步 引入适应度函数: 即系统整体晶界能为最小。系统的整体晶界能采用下式计算<sup>[13]</sup>:

$$E = J \sum_{i=1}^{NN} \sum_{j=1}^{NN} (1 - \delta_{s_i s_j}) \quad (1)$$

式中 脚标  $s_i, s_j$  为第  $i$  个基因及其相邻基因  $j$  的取向;  $T$  为四边形基因周边基因个数, 值为 8;  $J$  为相邻基因对晶界能所做的贡献, 其值正比于晶界能;  $\delta_{s_i s_j}$  为 Kronecker 函数:  $s_i \neq s_j$  时,  $\delta_{s_i s_j} = 0$ ;  $s_i = s_j$  时,  $\delta_{s_i s_j} = 1$ 。

通过计算  $g(0)$  的所有后代  $g(1a), g(1b), g(1c), \dots$  的晶界能, 并选择其中晶界能最小的后代作为  $g(1)$ , 完成 1 个 GAS。

第 7 步 对染色体  $g(t)$  重复步骤 4~6, 产生  $g(t+1)$ , 直到完成指定遗传步数  $t=m$ , 则整个遗传过程结束。

基于界面张力提供晶粒长大驱动力原理<sup>[1, 13, 15-16]</sup>建立了本算法中的遗传规则, 即若目标基因位于晶粒内部, 则其后代基因取向保持不变; 若目标基因位于晶界上, 则晶界受表面张力约束作用向其曲率中心迁移, 并趋于直线状态, 即晶界迁移判断; 系统能量起伏(即热激活条件变化)影响晶界的迁移, 基因按一定概率发生变异。

本算法中引入系统晶界能作为适应度函数, 即晶粒长大总是朝着晶界能减少的方向进行, 对晶界能进行择优选择。基于曲率驱动原理的遗传规则和基于能量最小原理的适应度函数的引入很好地符合了晶粒长大的物理模型。通过增加具有物理意义的遗传规则和适应度函数使遗传算法与实际晶粒长大过程能一一对应, 这样使得算法的物理意义更为明确。

本文遗传算法的计算程序流程如图 1 所示。

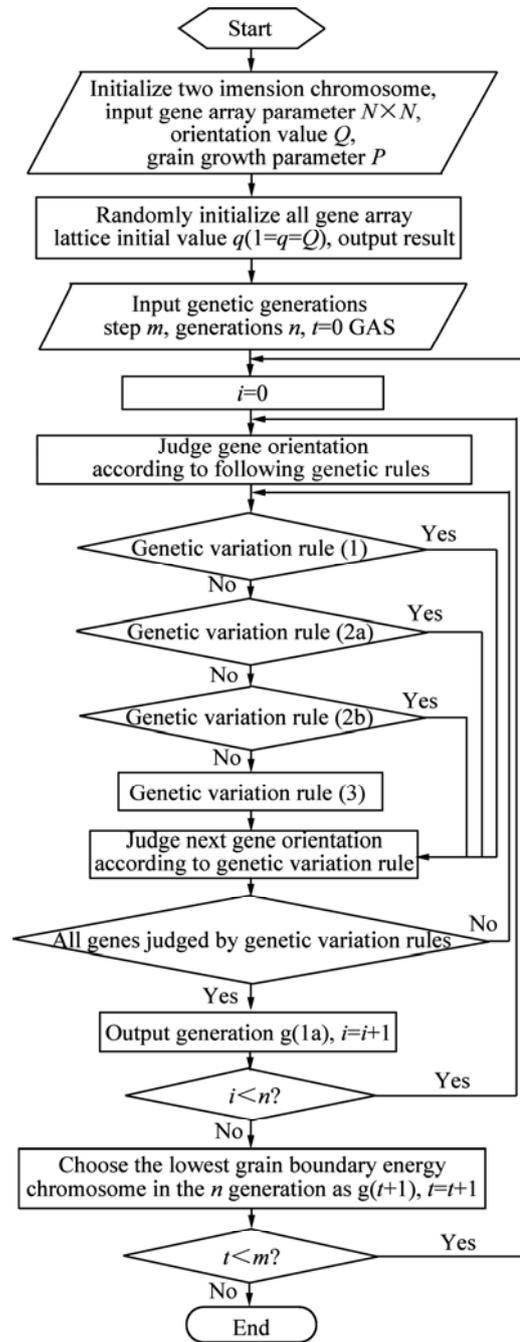


图 1 遗传算法程序流程图

Fig.1 Flow chart of genetic algorithm program

## 4 模拟结果与分析

本文遗传算法的算例采用  $200 \times 200$  的基因阵列组成二维染色体, 周期性边界条件, 总模拟步数为 40 000 GAS, 系统基因总取向状态  $Q$  取 1 000, 遗传后代数  $n$  取 10, 晶粒长大参数  $P$  取 0.02。

正常晶粒长大的组织结构模拟演化如图 2 所示。可见, 随系统模拟步数 GAS 增加, 晶粒不断长大; 尺寸

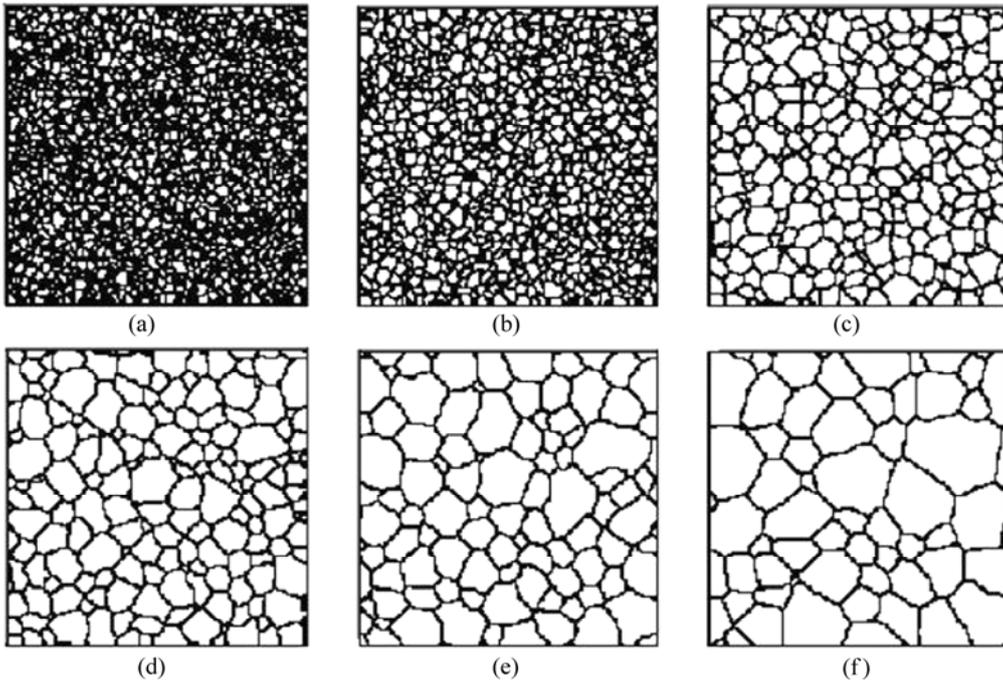


图 2 遗传算法模拟晶粒长大的组织结构演变

Fig.2 Micrograph development processes for normal grain growth by different GAS: (a) 500 GAS; (b) 1 000 GAS; (c) 5 000 GAS; (d) 10 000 GAS; (e) 20 000 GAS; (f) 40 000 GAS

较小的晶粒不断被相邻尺寸较大的晶粒吞并;模拟到一定步数时,晶界趋向于直线,三叉晶界夹角趋向于 120°,四叉晶界基本消失,符合晶粒长大理论<sup>[1]</sup>和实际情况。

### 4.1 晶粒长大的热力学与动力学

系统的晶界总周长和系统晶界能随着遗传代数的传递不断减少,系统在热力学上趋于稳定状态。图 3 所示为系统的晶界总周长和系统晶界能随遗传代数传递的变化趋势。

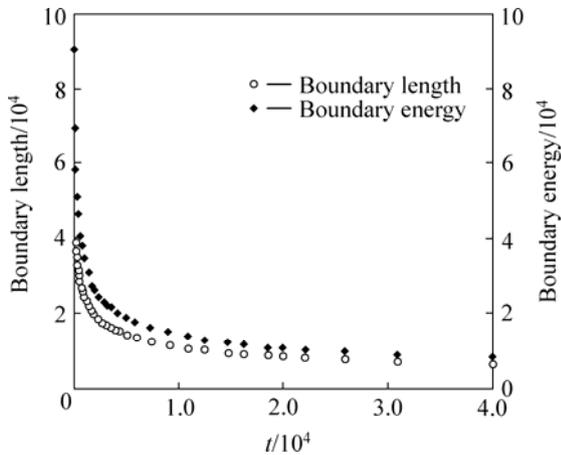


图 3 系统晶界总周长和晶界能与遗传步数的变化关系

Fig.3 Relationship between of grain boundary total length and energy of grain boundary by induced genetic step

正常晶粒长大动力学方程<sup>[1]</sup>为  $r^{1/n} - r_0^{1/n} = M(t - t_0)$ 。式中:  $r$  和  $r_0$  分别为  $t$  和  $t_0$  时刻晶粒的平均晶粒半径;  $n$  为晶粒长大指数;  $M$  为晶界迁移率。图 4 所示为系统晶粒的平均半径  $r$  随遗传代数  $t$  的变化关系。实验结果表明,在 5 000 GAS 前后阶段的晶粒长大指数  $n$  分别为 0.477 和 0.414,均与理论值 0.5 相近,该结果说明遗传前期的平均晶粒尺寸较小,晶界曲率半径较小,界面高能量迁移易进行,反映小晶粒的消失较容易;后期长大到一定平均尺寸的晶粒消

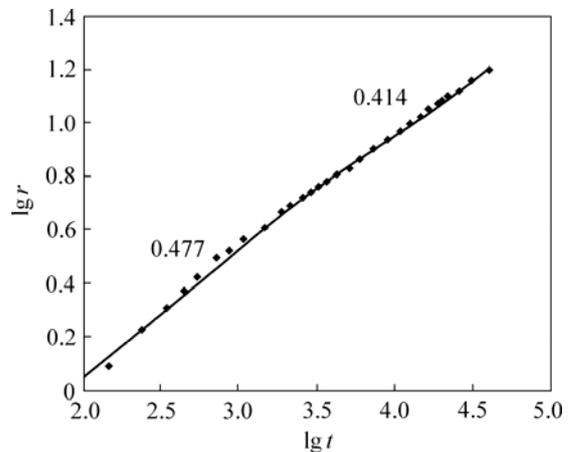


图 4 晶粒平均半径与遗传步数的变化关系

Fig.4 Relationship between mean grain size and genetic step

失的可能性降低, 导致晶粒长大指数偏低。

#### 4.2 晶粒长大拓扑学分析

现有研究表明准稳态晶粒半径分布具有 Weibull 分布函数形式<sup>[19-21]</sup>, 图 5 所示为进行 2 000 GAS 遗传后晶粒半径标准化统计分布图。采用 Weibull 分布函数

$$f(x) = \frac{b}{a^b} x^{(b-1)} \exp\left(-\frac{x}{a}\right)^b$$

拟合处理实验, 所获

得晶粒尺寸分布数据, 得出相关参数为:  $a=1.15$ ,  $b=2.821$ , 复相关系数平方为 0.988 8, 接近 1。图 5 中  $R$  和  $R_a$  分别为统计晶粒半径及该时刻的晶粒半径平均值, 可见遗传算法的结果与采用 Monte Carlo 法<sup>[18]</sup>、Cellular Automation 法<sup>[14]</sup>和 Phe Field Simulation 法<sup>[19]</sup>模拟处理结果基本相符。

图 6 所示为不同遗传代数的晶粒边数分布频率曲线。图中不同遗传代数统计的平均晶粒边数为 5.923,

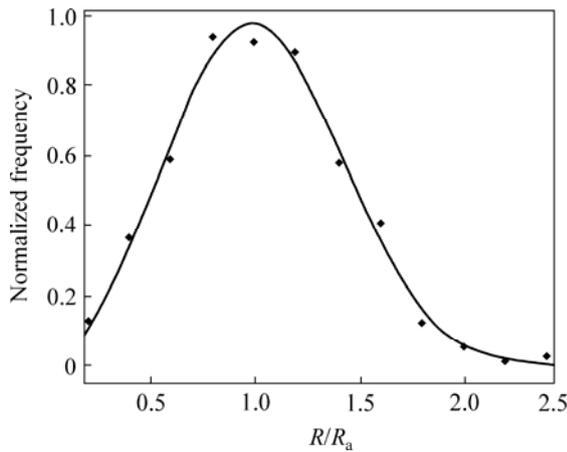


图 5 系统晶粒半径标准化统计分布图

Fig.5 Grain size distribution in two-dimensional systems

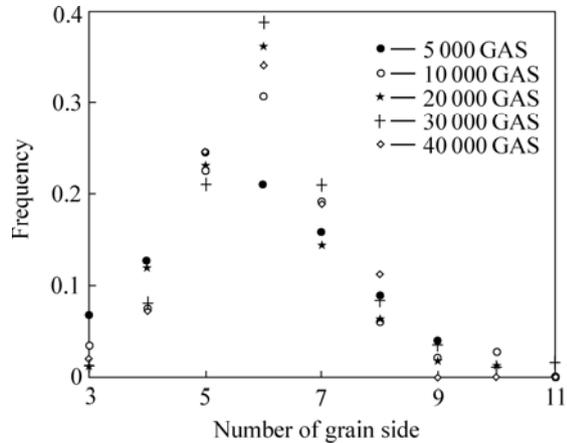


图 6 不同遗传步数的晶粒边数分布频率图

Fig.6 Grain side distributions at different GAS of normal grain growth

非常接近理论值 6<sup>[1]</sup>; 晶粒平均尺寸达到一定值后, 不同遗传代数的晶粒边数分布频率基本相同, 具有自相似性, 即六边形晶粒出现频率最多, 五边形、七边形晶粒出现频率次之, 基本符合晶粒长大实际过程。

## 5 结论

1) 基于正常晶粒长大动力学和能量最小原理, 引入遗传算法建立模拟正常晶粒长大的物理模型。

2) 遗传算法模拟结果表明, 系统的晶界总周长和系统晶界能随着遗传代数的传递不断减少, 系统热力学状态稳定; 模拟的晶粒长大指数较好地符合晶粒长大动力学理论参数, 晶粒半径分布具有 Weibull 拓扑结构, 平均晶粒边数接近 6。可见, 该算法可以用来模拟晶粒的长大过程。

3) 遗传算法可以通过对遗传规则设置和适应度函数合理选择来模拟实际条件下的晶粒长大过程。

## REFERENCES

[1] 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.

[2] RAABE D. 计算材料学[M]. 项金钟, 吴兴忠, 译. 北京: 化学工业出版社, 2002.  
RAABE D. Computational materials science[M]. XIANG Jin-zhong, WU Xing-zhong, transl. Beijing: Chemical Industry Press, 2002.

[3] 李立新, 刘雪峰, 汪凌云. 材料热加工组织性能数值模拟的现状与发展[J]. 特殊钢, 2000, 21(1): 1-6.  
LI Li-xin, LIU Xue-feng, WANG Ling-yun. State and development of mathematical simulation for microstructure and properties of material during hot working[J]. Special Steel, 2000, 21(1): 1-6.

[4] 龙文元, 蔡启舟, 魏伯康. 微观组织数值模拟发展概述[J]. 铸造, 2003, 52(3): 161-166.  
LONG Wen-yuan, CAI Qi-zhou, WEI Bo-kang. Overview on numerical simulation of solidification micro structure[J]. Foundry, 2003, 52(3): 161-166.

[5] 肖贡强, 王丽娟, 周天瑞, 王高潮, 熊洪淼. 晶粒长大的蒙特卡罗模拟及其算法应用研究[J]. 南昌大学学报: 工学版, 2004, 26(3): 36-40.  
XIAO Gong-qiang, WANG Li-juan, ZHOU Tian-rui, WANG Gao-chao, XIONG Hong-miao. Monte carlo simulation of grain growth and study of the algorithms[J]. Journal of Nanchang

- University: Engineering & Technology, 2004, 26(3): 36-40.
- [6] SROLOVITZ D J, ANDERSON M P, GREY G S, SAHNI P S. Grain growth in two dimensions[J]. *Scrip Metall*, 1983, 17: 241-246.
- [7] ANDERSON M P, SROLOVITZ D J, GREY G S, SAHNI P S. Computer simulation of grain growth[J]. *Acta Metall*, 1984, 32(5): 783-802.
- [8] RADHAKRISHNAN B, ZACHARIA T. Simulation of curvature driven grain growth by using a modified Monte Carlo algorithm[J]. *Metall Trans*, 1995, A26(7): 167-180.
- [9] HUANG C M, JOANNE C L, PATNAIK B S V, JAYAGANTHAN R. Monte Carlo simulation of grain growth in polycrystalline materials[J]. *Applied Surface Science*, 2005, 252(2006): 3997-4002.
- [10] 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.
- [11] 宋晓艳, 刘国权, 何宜柱. 一种改进的晶粒长大 Monte Carlo 模拟方法[J]. *自然科学进展*, 1998, 8(3): 337-341.  
SONG Xiao-yan, LIU Guo-quan, HE Yi-zhu. A modified Monte Carlo method in grain growth simulation[J]. *Progress in Natural Science*, 1998, 8(3): 337-341.
- [12] 张继祥, 关小军, 孙 胜, 申孝民, 董安平, 刘运腾. 晶粒长大过程微观组织演变 Monte Carlo 方法模拟[J]. *山东大学学报: 工学版*, 2005, 35(4): 1-5.  
ZHANG Ji-xiang, GUAN Xiao-jun, SUN Sheng, SHEN Xiao-min, DONG An-ping, LIU Yun-teng. Monte carlo simulation of microstructure evolution during grain growth[J]. *Journal of Shandong University: Engineering Science*, 2005, 35(4): 1-5.
- [13] LIU Y, BANDIN T, PENELLE R. Simulation of normal grain growth by cellular automata[J]. *Scripta Mater*, 1996, 34(11): 1679-1683.
- [14] HE Yi-zhu, DING Han-lin, LIU Liu-fa, SHIN K. Computer simulation of 2D grain growth using a cellular automata model based on the lowest energy principle[J]. *Mater Sci Eng A*, 2006, 29: 236-246.
- [15] 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.
- [16] 关小军, 焦宪友, 周家娟, 等. 单一晶粒长大过程的元胞自动机模拟[J]. *中国有色金属学报*, 2007, 17(5): 699-703.  
GUAN Xiao-jun, JIAO Xian-you, ZHOU Jia-juan, et al. Cellular automata simulation of single grain growth[J]. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*, 2007, 17(5): 699-703.
- [17] 徐宗本, 陈志平, 章祥荪. 遗传算法基础理论研究的新近发展[J]. *数学进展*, 2000, 29(2): 97-114.  
XU Zong-ben, CHEN Zhi-ping, ZHANG Xiang-sun. Theoretical development on genetic algorithms: A review[J]. *Advances in Mathematics*, 2000, 29(2): 97-114.
- [18] 王 超, 刘国权, 秦湘阁. 两种初始晶粒组织演变及准稳态的仿真研究[J]. *金属学报*, 2003, 39(6): 635-638.  
WANG Chao, LIU Guo-quan, QIN Xiang-ge. Simulation study of evolution and quasistationary state form two initial grain structures[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2003, 39(6): 635-638.
- [19] 孙 亚, 刘国权, 王 超. 相场仿真二维晶粒长大过程中的尺寸分布和拓扑演变[J]. *金属学报*, 2004, 40(6): 609-612.  
SUN Ya, LIU Guo-quan, WANG Chao. Grain size distribution and topological evolution in 2D grain growth process based on phase field simulation[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2004, 40(6): 609-612.

(编辑 龙怀中)