文章编号：1004-0609(2008)04-0728-05

三维 Monte Carlo 法模拟不同点阵类型的晶粒长大过程

刘运腾，关小军，申孝民，麻晓飞，王丽君，曾庆凯，禹宝军

(山东大学 材料科学与工程学院，济南 250061)

摘　要：利用 Monte Carlo 方法模拟了 300×300×300 三维正常晶粒长大过程，研究密排六方点阵的应用可行性及其特点，比较不同点阵结构以及不同范围的近邻结点的能量计算对晶粒长大过程的影响。通过综合分析晶粒长大动力学和拓扑结构发现，密排六方的点阵结构以及考虑更大范围近邻结点的能量计算方式更适合正常晶粒长大过程的模拟。

关键词：晶粒长大；Monte Carlo；三维模拟；点阵类型

中图分类号：TG 111.7；TP 391.9　　**文献标识码**：A

Three-dimensional Monte Carlo simulation of grain growth with different lattice types

LIU Yun-teng, GUAN Xiao-jun, SHEN Xiao-min, MA Xiao-fei, WANG Li-jun, ZENG Qing-kai, YU Bao-jun

(School of Materials Science and Engineering, Shandong University, Ji'nan 250061, China)

Abstract: A 300×300×300 three-dimensional normal grain growth was simulated by using Monte Carlo method. Different lattice types and energy calculations considering different neighboring sites ranges were compared. It could be found that the triangular lattice and energy calculations considering a wide neighboring sites range are much more appropriate to simulate grain growth by comprehensive analyzing grain growth dynamics and topological microstructure.

Key words: grain growth; Monte Carlo; three-dimensional; simulation; triangular

计算机模拟是研究多晶体材料组织演变的有效方法，其中 Monte Carlo(MC)方法是广泛采用的一种。ANDERSON 和 SROLOVITZ[1−2]首先将这种方法用于晶粒长大过程模拟，随后，RADHAKRISHNAN 等[3]对这一模拟方法进行了改进。近年来，二维 MC 模拟得到了深入的研究并应用到异常晶粒长大、二相粒子和织构等相关组织演变的模拟[4−9]。

由于金属(或合金)、陶瓷等材料的组织演变大多发生在三维空间，因此三维计算机模拟相对二维模拟更具有实际意义。目前，三维 MC 模拟大多基于立方点阵模型[9−13]，关于其密排六方点阵的应用还未见报道。通过二维 MC 模拟发现，六边形点阵比四边形点阵更适合晶粒长大模拟，并且得到广泛的应用。因此，本文作者建立密排六方点阵的三维 MC 模型进行正常晶粒长大的模拟，并把模拟得到的晶粒长大拓扑结构和动力学与立方点阵模型的进行全面比较。

1　MC 模拟方法和过程

三维 MC 模拟基本过程与二维 MC 模拟相似。

1) 划分点阵

将多晶体基体离散成规则分布的点阵($ii\times jj\times kk$)，每个结点随机赋予一个整数 $S_i(1\leqslant S_i\leqslant Q)$，代表该结点处晶粒的取向，$Q$ 是最大取向数。取向相同的相邻结点表示处于一个晶粒内部；相邻结点取向不同，

基金项目：山东省国际科技合作计划资助项目(2006)；山东省自然科学基金资助项目(Y2007f06)
收稿日期：2007-07-30；**修订日期**：2007-11-29
通讯作者：关小军，教授；电话：0531-88396587；E-mail: guanxj2003@126.com

则认为这两个结点处于晶粒边界，晶界从两点之间穿过。

2) 能量描述

晶粒长大的驱动力是晶界能的降低，晶界能可由哈密顿函数描述：

$$E = J\sum_{j}^{nn}(1-\delta_{S_iS_j}) \quad (1)$$

式中 J 是晶界能的一个量度，在正常晶粒长大中假设 J=1；nn 是结点 i 的近邻结点数。δ_{ab} 是 Kronecher 函数，当 a=b 时，δ_{ab}=1；当 $a\neq b$ 时，δ_{ab}=0。

3) 模拟过程

采用逐步迭代方法模拟晶粒长大。首先，从系统中随机选择一个结点，尝试将该结点取向 S_i 变为近邻取向(随机从近邻取向中选取)S_j，计算转变前后的能量 E，如果能量降低或不变，取向转变成功，如果能量升高，转变成功的概率为：exp(−ΔE/kT)，其中ΔE 是取向转变后能量增加值，k 是波尔兹曼常数，T 为模型温度；然后，随机选择下一个结点，重复前面过程。每尝试 ii×jj×kk 次即为一个 Monte Carlo 步(Monte Carlo Step，简写为 MCS)。

2　模拟的条件

2.1　模拟的点阵类型

图 1 和 2 所示分别为简单立方点阵和密排六方点阵的示意图。如图 1 和图 2 所示，本文建立了两种类型的点阵：简单立方点阵和密排六方点阵。简单立方(图 1(a))在模拟过程中考虑第一、第二和第三近邻点，共 26 个近邻结点。若计算结点周围能量是仅考虑最近邻点，如图 1(b)所示共 12 个近邻结点。若考虑次近邻的，如图 1(c)共 50 个近邻结点。密排六方点阵的示意图如图 2 所示，采用 ABCABC 类型的点阵结构。基于以上两种点阵类型及其能量计算时考虑的近邻结点数，本研究建立了如表 1 所列的 3 个模型。

表 1　3 种不同类型点阵模型

Table 1　Three models with different lattice types

Model	Lattice type	Numbers of neighboring sites for energy calculations
1	Cubic	26
2	Triangular	12
3	Triangular	50

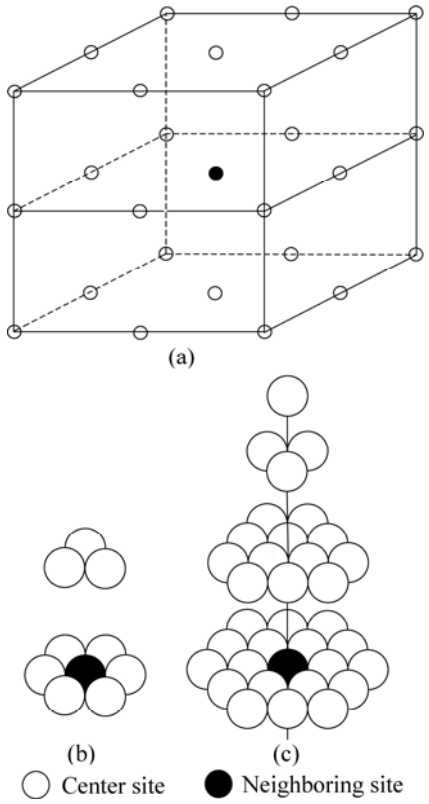


图 1　简单立方点阵和密排六方点阵示意图

Fig.1　Sketch diagrams of cubic(a) and triangular lattice(b), (c)

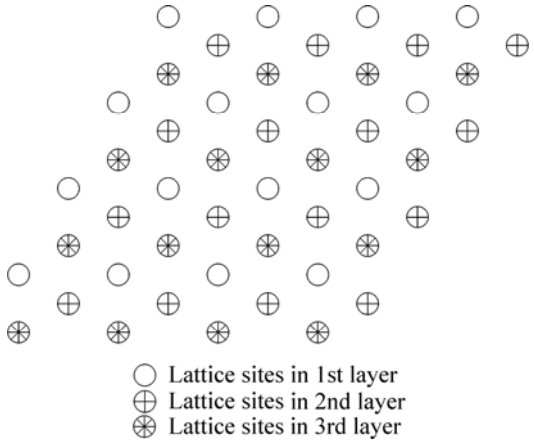


图 2　密排六方点阵(ABC)示意图

Fig.2　Stacking modes of two-dimensional lattice planes to form a three-dimensional triangular lattice (ABC type) for MC simulation

2.2　模拟的初始条件

本研究分别基于上述 3 种模型进行模拟：点阵尺寸为 300×300×300，最大取向数为 10 000，模型温度 T=2 J/K，初始组织通过随机赋值产生。本研究的模拟结果是 5 次模拟结果的平均值。

3 模拟结果

3.1 三维正常晶粒长大的组织及其演变动力学

图 3 所示为三维晶粒长大的微观组织及其演变。图中不同的颜色表示不同的晶粒取向。可以看出，模拟组织的形貌与实际晶粒组织非常相似。因此，简单立方与密排六方的点阵结构都能模拟正常晶粒长大过程。

正常晶粒长大的动力学方程为[14]

$$R^m - R_0^m = Bt \tag{2}$$

式中 R 和 R_0 分别为 t 时刻和开始时刻的平均晶粒尺寸；m 为 Hillert 指数，晶粒长大指数 n=1/m；B 为一个与晶界迁移率有关的常数。根据统计模型，HILLERT[13]得到 m=2 的统计理论值，因此，晶粒长大指数的理论值 n=0.5。

本研究把 R_0、m 和 B 做为拟合参数，以式(2)为拟合公式得到晶粒长大指数，如图 4 所示。从图中的晶粒长大指数可以看出。模型 3(密排六方)的结果最接近理论值。模型 2(密排六方中能量计算仅考虑最近邻结点)得到的晶粒长大指数与理论值相差较大。这与文献[15]中仅考虑最近邻结点模型的模拟结果相似。因此，在 MC 模拟过程中，应该考虑较大范围的近邻结点对结点取向转换的影响。

3.2 三维晶粒长大的拓扑结构

图 5~7 所示分别为平均晶粒面数 F 随时间的变化、500 MCS 时晶粒面数的分布和晶粒尺寸分布。从图 5 中可以看出，3 个模型的平均晶粒面数都在 13 到 14 之间，模型 1 和 3 的不同时刻的平均晶粒面数是非

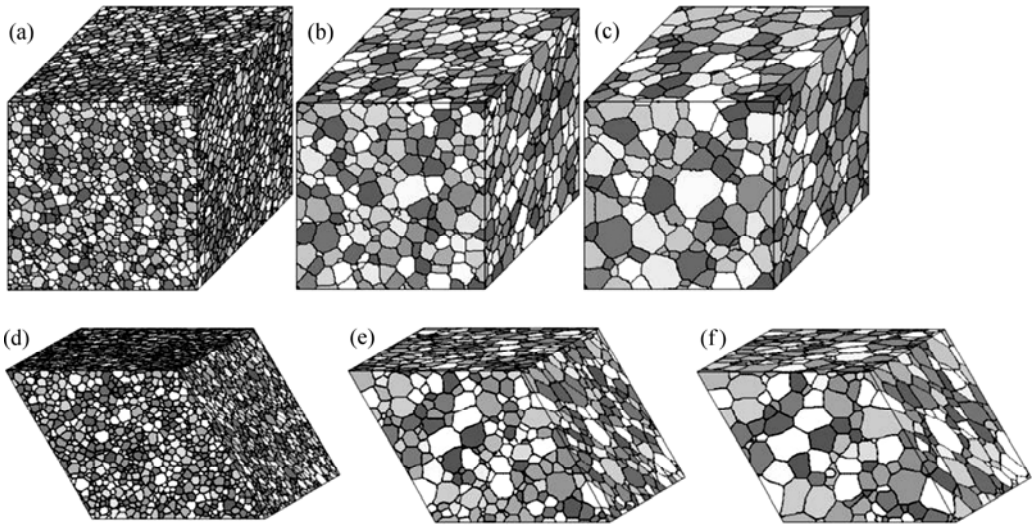


图 3 不同类型点阵不同模拟时间下的微观组织

Fig.3 Evolution of microstructure of different models: (a) 100 MCS for cubic lattice; (b) 500 MCS for cubic lattice; (c) 1 000 MCS for cubic lattice; (d) 100 MCS for triangular lattice; (e) 500 MCS for triangular lattice; (f) 1 000 MCS for triangular lattice

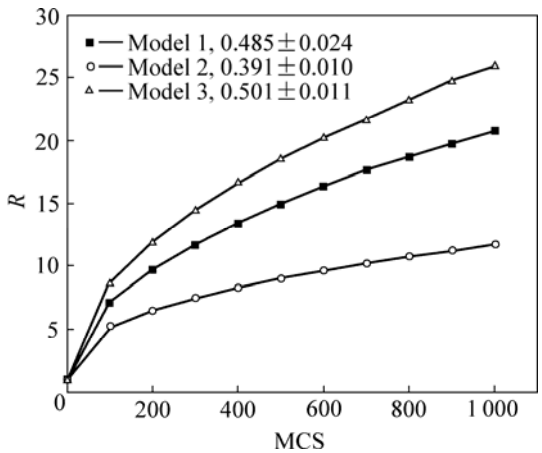


图 4 不同模型模拟得到的晶粒长大指数

Fig.4 Grain growth exponent for different models

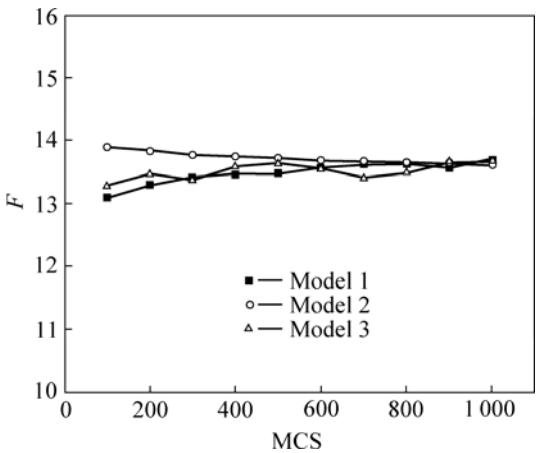


图 5 平均晶粒面数随时间的变化

Fig.5 Evolution of average number of grain surface

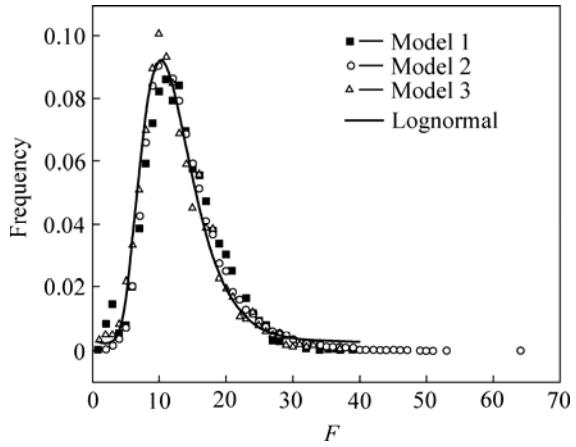


图 6　晶粒面数(F)的分布(500 MCS)

Fig.6　Distributions of grain surface number for 500 MCS

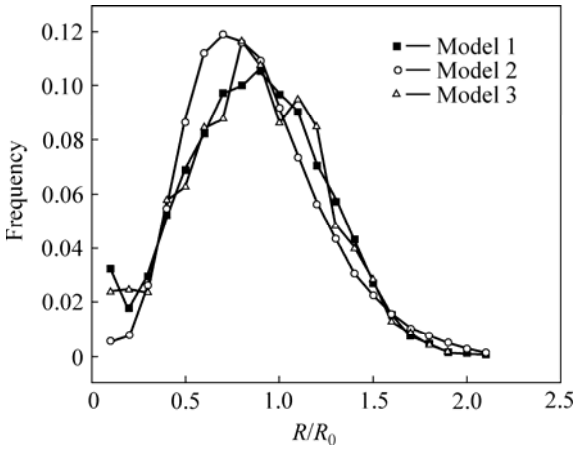


图 7　晶粒尺寸分布(500 MCS)

Fig.7　Distributions of grain size for 500 MCS

常接近的，并且在 1 000 MCS 时平均晶粒面数都在 13.5 左右。这与 Coxeter 理想多面体晶粒组织统计模型[16]的平均晶粒面数为 13.398 相吻合。从图 6 中可以看出，3 个模型模拟的晶粒面数分布都符合 Lognormal 分布。可见，3 个模型在晶粒面数模拟结果方面都能得到与理论分析相吻合的结果。

由图 7 可知，模型 1 和模型 3 产生的结果相近，而模型 2 的晶粒尺寸分布明显偏于小尺寸。这从另一方面证明了模拟过程中能量计算时仅考虑最近邻点是不合适的，所得到的晶粒尺寸分布与正常晶粒长大过程不符。

4　结论

1) 密排六方点阵模型的晶粒长大指数更接近理论值。

2) 两种点阵模型都能够模拟出理论所预测的晶粒面数分布。

3) 通过研究不同近邻结点对模拟结果的影响可知，考虑更大范围近邻结点的能量计算方式更适合对正常晶粒长大过程的模拟。

REFERENCES

[1] ANDERSON M P, SROLOVITZ D J, GREST G S, SAHNI P S. computer simulation of grain growth—Ⅰ. Kinetics[J]. Acta Metallurgica, 1984, 32(5): 783−791.

[2] SROLOVITZ D J, ANDERSON M P, SAHNI P S, GREST G S. Computer simulation of grain growth —Ⅱ. Grain size distribution, topology, and local dynamics[J]. Acta Metallurgica, 1984, 32(5): 793−802.

[3] RADHAKRISHNAN B, ZACHARIA T. Simulation of curvature-driven grain growth by using a modified Monte Carlo algorithm[J]. Metallurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Materials Science, 1995, 26(1): 167−180.

[4] HOLM E A, MIODOWNIK M A, ROLLETT A D. On abnormal subgrain growth and the origin of recrystallization nuclei[J]. Acta Materialia, 2003, 51(9): 2701−2716.

[5] IVASISHIN O M, SHEVCHENKO S V, SEMIATIN S L. Modeling of abnormal grain growth in textured materials[J]. Scripta Materialia, 2004, 50(9): 1241−1245.

[6] 张继祥, 关小军. 异常晶粒长大的 Monte Carlo 模拟[J]. 中国有色金属学报, 2006, 16(10): 1689−1697.
ZHANG Ji-xiang, GUAN Xiao-jun. Simulation of abnormal grain growth by Monte Carlo[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2006, 16(10): 1689−1697.

[7] 申孝民, 关小军, 张继祥, 刘运腾, 麻晓飞, 赵宪明. 有限元与Monte Carlo方法耦合的冷轧纯铝板再结晶模拟[J]. 中国有色金属学报, 2007, 17(1): 124−130.
SHEN Xiao-min, GUAN Xiao-jun, ZHANG Ji-xiang, LIU Yun-teng, MA Xiao-fei, ZHAO Xiao-ming. Coupling of FEM with Monte Carlo for simulating recrystallization in cold rolling pure aluminum sheet[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2007, 17(1): 124−130.

[8] 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, 2006, 252(11): 3997−4002.

[9] GREST G S, ANDERSON M P, SROLOVITZ D J, ROLLETT A D. Abnormal grain growth in three dimensions[J]. Scripta Metallurgica et Materialia, 1990, 24(4): 661−665.

[10] ANDERSON M P, GREST G S, DOHERTY R D, LI Kang, SROLOVITZ D J. Inhibition of grain growth by second phase partciles: Three dimensional Monte Carlo computer simulations[J]. Scripta Metallurgica, 23(5): 753−758.

[11] IVASISHIN O M, SHEVCHENKO S V, VASILIEV N L, SEMIATIN S L. 3D Monte-Carlo simulation of texture-controlled grain growth[J]. Acta Materialia, 2003, 51(4): 1019−1034.

[12] 刘国权, 宋晓艳, 于海波, 谷南驹. 一种 Monte Carlo 仿真新算法及其对三维个体晶粒长大速率拓扑依赖性理论方程的验证[J]. 金属学报, 1999, 35(3): 245−248.
LIU Guo-quan, SONG Xiao-yan, YU Hai-bo, GU Nan-ju. Verification of topological dependence of three-dimensional individual grain's growth rate with Monte Carlo simulation[J]. Acta Metallurgica Sinica, 1999, 35(3): 245−248.

[13] YU Qiang, ESCHE S K. Three-dimensional grain growth modeling with a Monte Carlo algorithm[J]. Materials Letters, 2003, 57: 4622−4626.

[14] 毛卫民, 赵新兵. 金属的再结晶和晶粒长大[M]. 北京: 冶金工业出版社, 1994.
MAO Wei-min, ZHAO Xin-bing. Metal recrystallization and grain growth[M]. Beijing: Metallurgical Industry Press, 1994.

[15] KIM Y J, HWANG S K, KIM M H, KWUN S I, CHAE S W. Three-dimensional Monte-Carlo simulation of grain growth using triangular lattice[J]. Mater Sci Eng A, 2005, 408: 110−120

[16] COXETER H S M. Introduction to geometry[M]. New York: John Wiley & Sons, 1961.

(编辑 何学锋)