

文章编号: 1671-0118(2009)05-0401-06

多晶体材料微结构的仿真与取向分布函数计算

李俊琛^{1,2}, 李旭东^{1,2}, 盛捷³

(1. 兰州理工大学 甘肃省有色金属新材料省部共建国家重点实验室; 2. 兰州理工大学
材料科学与工程学院; 3. 兰州理工大学 生命科学工程学院, 兰州 730050)

摘要: 为解决多晶体材料结构的可视化, 设计 Voronoi 增量式外存算法, 开发了多晶体材料微结构的“海量”级仿真技术, 获得了数值化的晶粒几何信息数据。利用 OpenGL 图形接口, 实现了一般多晶体及表层晶粒细化多晶体材料微结构的可视化仿真, 并在此基础上采用 Bunge 符号的级数展开法模型, 计算了各个晶粒的取向分布函数 (ODF), 实现了取向分布函数值在取向空间内与实际晶体取向分布的一一对应; 开发了软件 ProDesign 为三维多晶体材料微结构的力学响应计算提供了基础性仿真工具, 为识别“材料结构弱点”、评估微裂纹 (群) 的启裂及扩展、推演“微结构虚拟失效”行为搭建了支撑性平台。

关键词: 多晶体材料; 微结构; 取向分布函数; 可视化仿真; Voronoi 增量算法

中图分类号: TG113; TB33; TP311.1

文献标识码: A

Simulation of polycrystalline material microstructures and calculation of its orientation distribution function

LI Junchen^{1,2}, LI Xudong^{1,2}, SHENG Jie³

(1. State Key Laboratory of Gansu Advanced Non-ferrous Metal Materials Lanzhou University of Technology;

2. College of Materials Science and Engineering Lanzhou University of Technology;

3. School of Life Science and Engineering Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, China)

Abstract: Targeted at the better visualization of polycrystalline material this paper introduces the design of the incremental out-of-core algorithm for Voronoi diagram and the development mass grade simulation technology for polycrystalline material for numerical geometric data of grain. Visualize simulation of microstructure for polycrystal and the microstructure of the surface layer of polycrystal is realized by OpenGL. The paper describes the use of Bunge's series expansion method to calculate each grain's orientation distribution function (ODF), and accomplish one-to-one correspondence between orientation distribution function value and crystal orientation distribution. The paper highlights the development of the software the ProDesign which serves as basic simulation tool with which to calculate mechanical response for three-dimensional microstructures of polycrystalline material and serves to build up supportive platforms for identifying “material structure weakness”, evaluating initiation and expansion of micro-cracks and deducing the behavior of “virtual failure of microstructure”.

Key words: polycrystalline material; microstructures; orientation distribution function; visualized simulation; incremental out-of-core algorithm for Voronoi

收稿日期: 2009-09-08

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (50571042)

作者简介: 李俊琛 (1981-), 男, 甘肃省合作人, 博士研究生, 研究方向: 数字材料. E-mail: lijunchen603@163.com.

0 引言

运用有限元方法实现多晶体材料微结构在各种复杂工况下的力学响应计算,首先要建立多晶体材料微结构模型,并且材料模型要反映微结构的几何形状、分布和晶体学取向。通常的做法是设计一个代表性体积单元来表示具有周期规则的、周期性分布的细观结构。但对于多晶体材料,它不能表示具有任意取向、形状等参数的晶粒组织。长期以来,材料细观力学有限元计算极少使用接近真实材料的三维微结构模型,重要原因之一就是缺乏有效的数值化仿真微结构模型。

Voronoi图是一个经典的几何数学问题。它在几何形体重构、计算机图形学、图象处理与模式识别等领域都有广泛的应用。构造 Voronoi图的算法很多^[1-5],以 Voronoi算法为基础的计算机仿真技术也已广泛的应用于各个学科。在材料领域,由于 Voronoi晶胞的形态学结构与多晶体晶粒非常相似,能够从统计学意义上仿真微结构的任意性,可以通过细观力学模型的计算来从数值上区分 Voronoi晶胞,进而评价微结构模型的合理性、优化仿真模型参数^[6]。因此,将此算法推广到三维多晶体材料微结构的仿真是现实可行的。

在仿真得到多晶体材料微结构几何模型后,需要考虑一个问题:绝大多数多晶体材料整体呈各向同性、局部呈各向异性。局部各向异性主要是由微观织构的各向异性造成的,对局部性能的研究比宏观性能研究更具指导意义。织构是多晶体材料的一个基本结构参数,是材料科学中倍受重视的研究内容之一。作为材料的某种几何特征在一定范围内的平均,微观织构描述中不仅要考虑空间取向还要考虑边界形貌(引进三个位置变量)。通常所说的晶体学织构往往是从统计的角度出发来观察多晶体材料取向分布状况的,不能直接揭示或说明多晶体材料的微观细致过程。为同时满足宏观统计分析与微观局域分析的研究需要,可引入一个取向-位置分布函数 $w(g, X) = w(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, x, y, z)$ ^[7]来描述微观织构中各晶粒的取向分布和位置之间的关系,再计算每个晶粒的取向分布函数(ODF),定量地表示材料微结构的织构内容。

笔者研究的工作包括:(1)开发以 Voronoi增量式外存算法为基础的仿真软件 ProDesign 结合 C语言程序设计,利用 OpenGL图形接口,实现一般及具有表层细化晶粒三维多晶体材料微结构的可视化仿真。(2)采用 Bunge符号的级数展开法

模型,程序化计算多晶体中每个晶粒的 ODF值,并将多晶体晶粒的几何信息数据与其 ODF数据一一对应,实现多晶体材料各晶粒 ODF值分布的可视化仿真。

1 三维多晶体材料微结构的仿真

在指定长方体区域内仿真符合设计要求的多晶体材料微结构,首先需要给定金相学分析获得的统计意义上的平均晶粒尺寸,然后将 Voronoi晶胞等效为直径等于平均晶粒尺寸的球体,计算出晶粒聚合物中晶粒的数量 n ,通过一个伪随机数发生程序在区域内产生 n 个形核点的坐标,对由 n 个点构成的空间点集进行 Voronoi划分就可以构筑 Voronoi晶粒聚合物。所设计的流程可以同步核实构筑的晶粒聚合体内是否出现“裂缝”,那些导致“裂缝”出现的形核点自动被随机生成的新品核取代,从而保证了晶粒聚合体的致密性与完整性。

1.1 算法设计

仿真三维情况下多晶体材料微结构的具体步骤如下:

步骤 1:输入构造多晶体材料微结构的空间区域;选择生成 Voronoi晶胞的控制方式。如果按照指定晶粒个数进行控制,输入所需晶粒个数;如果按照指定晶粒的平均晶粒尺寸进行控制,输入所需平均晶粒尺寸值,程序自动计算出形核的数量。

步骤 2:程序运行生成第一个空间随机点 P_1 ,并将输入的空间区域赋给此点,认为空间区域就是点 P_1 的 Voronoi晶胞,同时将几何信息数据写入相关文件。

步骤 3:生成空间随机点 P_i ,判断 P_i 落入哪个 Voronoi晶胞内(做 P_i 与先前所有生成子之间的距离,则 P_i 落入与其距离最小的生成子所在的 Voronoi晶胞内);从相关文件读此晶胞及邻近受影响晶胞的几何信息数据到计算机内存参与运算,生成 P_i 所在的新晶胞数据并储存到过渡结构体数组,逐个修改 P_i 邻近受影响晶胞的几何信息数据;然后用修改后的新数据定位替代文件中过时的数据。最后,将 P_i 生成的新晶胞数据追加到储存多晶体微结构几何信息数据的文件末尾。当 $i < n$ 时,生成下一个空间随机点 P_i ,循环执行步骤 3直到生成 n 个 Voronoi晶胞构造的多晶体材料微结构。

1.2 可视化方法

仿真程序结束后,检验仿真得到的多晶体材

料微结构几何信息数据是否正确、使计算机能在三维空间中直观表现材料微结构, 需要一种三维表现技术。这种技术以三维形体来表示这些复杂的几何信息, 能够在三维空间中对材料微结构进行可视化。在此, 借助 OpenGL 三维图形软件包, 用它的基本图形函数来建立三维模型, 实现了三维多晶体材料微结构的可视化。图 1 即为该仿真算法构造的一个包含 11 891 个晶粒的多晶体材料微结构模型。

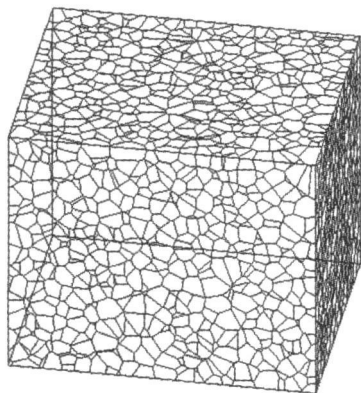


图 1 三维多晶体材料微结构模型

Fig 1 3D microstructure model of polycrystalline material

1.3 可视化仿真

仿真一类表层晶粒细化的多晶体材料微结构, 需要在长方区域内划分出表层区域, 使两类有着不同平均晶粒尺寸、任意分布的形核点 (或有预定分布的形核点) 分布在相应区域内。将两组原始的形核点合并为一组初始的形核点集合, 就可以对此空间点集进行 Voronoi 划分, 实现此类多晶体材料微结构的仿真。图 2 展示的是可视化仿真表层具有细化晶粒的多晶体材料微结构模型。

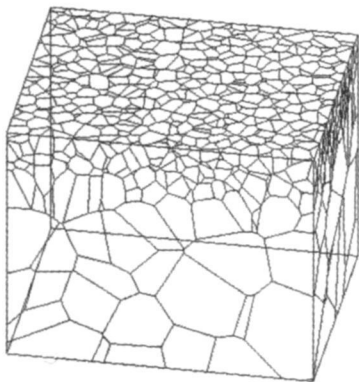


图 2 表层晶粒细化的多晶体材料微结构模型

Fig 2 Microstructure model of polycrystalline material with surface grain refinement

2 ODF 的数学模型及程序化

通常要从实测极密度数据出发进行一定的计算才能获得 ODF。为节省计算时间, 可以将一部分固定不变的数据计算出来存入指定的库文件 (Library Program), 供计算机随时调用。

文中 Euler 角定义采用 Bunge 定义的符号, 方位角 φ_1 、极角 Φ 和旋转角 φ_2 的取值范围分别是: $\varphi_1 \in [0, 2\pi]$, $\Phi \in [0, \pi]$, $\varphi_2 \in [0, 2\pi]$ 。立方系多晶体材料是材料科学研究和工业生产中最常见的晶体, 其结构具有很高的对称性, 考虑取向在取向空间内出现的多重性或重复性, 其取向空间范围可缩小为 $\left[\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2} \right]$ 。

极图只是晶面指数 (HKL) 的极密度等值线的集合。逐点计算极图中的极密度分布 $p^j(\alpha, \beta)$ 值只在计算被测材料的取向分布函数或某些特殊的场合下才需要^[8]。

极密度分布 $p^j(\alpha, \beta)$ 表达了多晶体内各晶粒的 $\{HKL\}$ 晶面法向在 (α, β) 处分布的强弱, 其数值与 α, β 和第 j 个极密度分布所对应的晶面指数有关。不同样品测算得到的极密度分布 $p^j(\alpha, \beta)$ 值在给定的 (α, β) 位置上通常是不相等的^[9]。这里 $\alpha \in [0, \pi]$, $\beta \in [0, 2\pi]$, 取 α 以 5° 为步长递增, β 以 10° 为步长递增。

为了与后面的计算对应起来, 在 ECPDF (Expansion Coefficients of Pole Density Function) 模块中用随机数发生器产生 24 组极密度分布数据, 其晶面指数 (HKL) 分别为 (100), (110), (111), (102), (112), (122), (103), (113), (315), (335), (551), (117), (553), (137), (337), (157), (203), (123), (223), (104), (114), (331), (124), (115)^[9]。将生成的这 24 组极密度分布函数数据分别存储于与晶面指数名称相对应的 pole-figure 100, ..., pole-figure 115 这 24 个文件中。每个文件中有 3 个参数, 分别为 $p^j(\alpha, \beta)$ 、 α 、 β 。

根据立方晶体的实际计算可知, 当 $l=22$ ($l \in \mathbb{N}$) 时有 $M(l)=2$ 。也就是说, 对立方晶体只需要两个完整的极密度分布就可以使 ODF 的展开式计算到 $l=22$ 。当 l 达到 22 时所得到的 ODF 的对称广义球谐函数展开式的精度已经能够满足实际应用的需要了, 故通常采用 $l_{\max}=22$ ^[8-9]。

2.1 ODF 计算主程序

ODF 计算程序流程如图 3 所示。用户建立一个用来存储需要计算的欧拉角和晶面指数的文件,

并从主程序中读入此文件名。先利用定义的 Trans 函数将用户输入的欧拉角由角度值转化成为弧度值,再经过运行子模块 FCNALF (Fourier Coefficients of the Normalized Associated Legendre Functions)、SSH (Symmetric Spherical Harmonics)、ECPDF、CODF (Coefficients of the Orientation Distribution Function)、GSH (Generalized Spherical Harmonics)、SGSH (Symmetric Generalized Spherical Harmonics)、ODF 来计算所需要的 ODF 值。计算结果将在 result.txt 文件中输出。

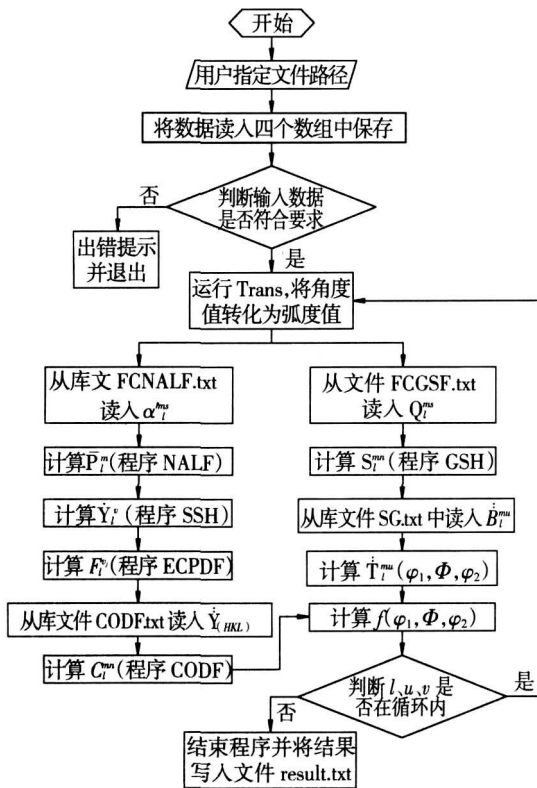


图 3 程序流程
Fig 3 Program flow chart

2.2 归一化连带勒让德函数的计算

$$P_l^m(\cos \alpha) = \sum_{s=0}^{l_{\max}} \alpha_1^{ms} \cos s\alpha,$$

其中, $P_l^m(x)$ 为归一化连带勒让德函数 (NALF, Normalized Associated Legendre Functions); α_1^{ms} 为归一化连带勒让德函数的傅里叶系数。

在程序模块 NALF 中实现归一化连带勒让德函数的计算, 参数分别为 l, m, α 。这里 α_1^{ms} 的值作为库文件是已知的, 可直接求得 $P_l^m(\cos \alpha)$ 的值。定义四个全局数组 NALFa [340]、NALFb [340]、NALFc [340]、NALFd [340], 从库文件 FCNALF.txt 中读入 α_1^{ms} 、 l, s, m 的值, 分别存储在以上定义的四组数组当中。

2.3 对称球谐函数的计算

$$\dot{Y}_l^v(\alpha, \beta) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \dot{P}_l^{(v-1)^2}(\cos \alpha) \cos[(v-1)2\beta],$$

其中, \dot{Y}_l^v 为对称球谐函数 (SSH); $\dot{P}_l^m(x)$ 为对称勒让德函数 (SLF, Symmetric Legendre Function), $v=1, 2, \dots, \left[\frac{l}{2} + 1\right]$ 。

在程序模块 SSH 中实现对称球谐函数的计算, 参数分别为 l, v, α, β 。通过模块 NALF 计算出 $P_l^m(x)$ 的值, 通过式 (1) 计算得到 $\dot{P}_l^m(x)$ 。

$$\frac{\epsilon^v}{\sqrt{2}} P_l^m(x) = \dot{P}_l^m(x) \left[\epsilon^v = \begin{cases} 1, & v=1 \\ \sqrt{2}, & \neq 1 \end{cases} \right]. \quad (1)$$

2.4 极密度函数展开式系数的计算

$$F_l^j = \sum_{\alpha=0(\Delta\alpha)}^{\pi} \sum_{\beta=0(\Delta\beta)}^{2\pi} p^j(\alpha, \beta) \dot{Y}_l^v(\alpha, \beta) \sin \alpha \Delta\alpha \Delta\beta,$$

其中, F_l^j 为极密度函数的展开式系数 (ECPDF); $p^j(\alpha, \beta)$ 为晶面 j 的极密度分布函数。

在程序模块 ECPDF 中实现极密度函数展开式系数的计算, 参数分别为 l, v, j (其中 j 为第 j 个极密度分布所对应的晶面指数 HKL)。通过模块 SSH 计算出 $\dot{Y}_l^v(\alpha, \beta)$ 的值, 可以直接得到 F_l^j 的值。在这里需要调用存储极密度分布函数的 24 个文件, pole-figure 100, ..., pole-figure 115, 其中 $\alpha, \beta, \Delta\alpha, \Delta\beta$ 的取值与主程序中一致。定义三个数组 a [1 369]、b [1 369]、c [1 369], 根据用户对晶面指数的不同选择, 调用不同的存储极密度分布函数的文件。将调用文件中的三个参数 $p^j(\alpha, \beta)$ 、 α, β 分别存储于数组 a [1 369]、b [1 369]、c [1 369] 中。

2.5 取向分布函数系数的计算

$$F_l^j = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{u=1}^{M(l)} C_l^{uv} Y_{(HKL)},$$

其中, C_l^{uv} 为 ODF 的系数 (CODF); $\dot{Y}_{(HKL)}$ 为晶面 {HKL} 的对称球谐函数 (SSHCP, Symmetric Spherical Harmonics of Crystal Plane {HKL}); $M(l)$ 是独立的球谐函数数量, 反映了晶体对称性, 由不同的 l 决定。

在程序模块 CODF 中实现 ODF 系数的计算, 参数分别为 l, u, HKL 。定义四个全局数组 CODFa [360]、CODFb [360]、CODFc [360]、CODFd [360], 从库文件 SSHCP.txt 中读入 $\dot{Y}_{(HKL)}$ 、 l, u, HKL 的数据, 并分别存储在定义的四组数组中。

2.6 广义球谐函数的计算

$$S_l^m(g) = \sum_{s=0(2)}^{l_{\max}} 2Q_l^{ms} Q_l^{ns} \cos s\Phi \cos m\varphi_2 \cos n\varphi_1 - \sum_{s=1(2)}^{l_{\max}} 2Q_l^{ms} Q_l^{ns} \cos s\Phi \sin m\varphi_2 \sin n\varphi_1,$$

其中, $S_l^m(g)$ 为广义球谐函数 (GSH); $Q_l^m(x)$ 为广义调和函数。

在程序模块 GSH 中实现广义球谐函数的计算, 参数分别为 $l, v, n, \varphi_1, \Phi, \varphi_2$ 。用户给定的三个欧拉角程序, 在此模块中才开始真正参与运算。从库文件 FCGSF.txt 中读入 Q_l^m, m, s_l 的数据分别存储到定义的四个全局数组 GSHa[645]、GSHb[645]、GSHc[645]、GSHd[645] 中。在此模块的计算中, Q_l^m, Q_l^m 参加了两次运算, 第一次参与运算时的取值是 $[0, 1]$ 的偶数, 第二次参与运算时的取值是 $[0, 1]$ 的奇数。

2.7 对称广义球谐函数的计算

$$\dot{T}(g) = \sqrt{2\pi} \epsilon_v \sum_{m=0(4)}^l \dot{B}_l^m S_l^{m(v-1)^2}(g), \quad (2)$$

其中, $\dot{T}(g)$ 为对称广义球谐函数 (SGSH); \dot{B}_l^m 为对称系数 (SC Symmetry Coefficients)。

在程序模块 SGSH 中实现对称广义球谐函数的计算, 参数分别为 $l, v, n, \varphi_1, \Phi, \varphi_2$ 。从库文件 SC.txt 中读入 \dot{B}_l^m, l, u, m 的值分别存入定义的全局数组 SGSHa[66]、SGSHb[66]、SGSHc[66]、SGSHd[66] 中。

2.8 ODF 的计算

$$f(g) = 1 + \sum_{l=1(2)}^{l_{max}} \sum_{u=1}^{M(l)} \sum_{v=1}^{N(l)} C_l^{uv} \dot{T}(g), \quad (3)$$

其中, $f(g)$ 为 ODF; $N(l)$ 是独立的球谐函数数量, 反映了样品对称性, 由不同的 l 决定。

在程序模块 ODF 中, 参数为用户输入的 $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$, 以及前面指定的 24 个晶面指数中的任一个。从 CODF 模块计算得到 ODF 展开式的各项系数 C_l^{uv} , 从 SGSH 模块计算得到 $\dot{T}(g)$, 则不难计算出 ODF $f(g)$ 来。

由式 (2) 可以知道, $\dot{T}(g)$ 是一个完全已知的标准函数, 只要给定三个 Euler 角的值即可将其求出。不同的取向分布函数 $f(g)$ 的差异全部反映在式 (3) 中的 ODF 的系数 C_l^{uv} 上。

2.9 取向分布函数的可视化

依据仿真得到的含 11 891 个晶粒的多晶体材料微结构模型, 首先将随机数发生器随机发生的数据代替实验数据, 生成对应于每个晶粒并符合正态分布的 Euler 角数据, 将 Euler 角数据写入外部文件; 其次将此外部文件导入 ODF 程序, 计算得到每个晶粒的 ODF 值, 并以二进制文件形式存储; 最后, 通过多晶体材料微结构仿真主程序预留的处理晶粒属性可视化的接口, 实现多晶体材料各晶粒 Euler 角和 ODF 值分布的可视化, 其结果如图 4、5 所示。其中, 图 4 为包含有 11 891 个晶粒的立

方晶体各晶粒的取向可视化结果, 图 5 为包含有 11 891 个晶粒的立方晶体各晶粒的 ODF 值可视化结果。

同理, 可以根据表层具有细化晶粒的多晶体材料微结构模型实现此种结构中晶粒 Euler 角和 ODF 值分布的可视化, 结果如图 6、7 所示。可以看出, 仿真得到的细化层晶粒的 Euler 角和 ODF 值与基体层晶粒相比较, 细化层晶粒的 Euler 角和 ODF 值更趋于一致。

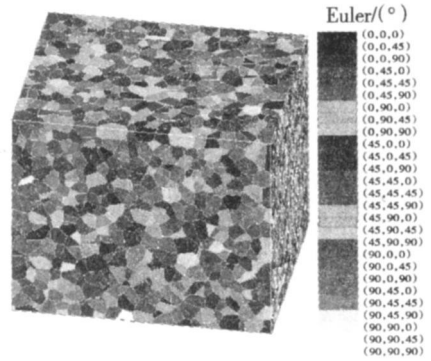


图 4 立方晶体中 11 891 个晶粒的取向
Fig. 4 Orientation to thousands of crystallites in cubic crystal

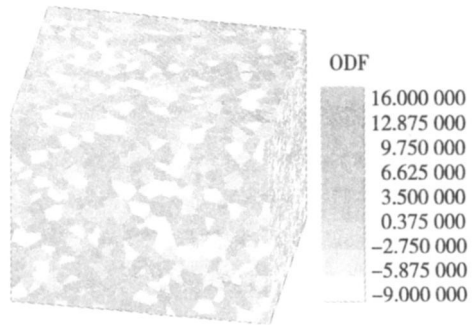


图 5 立方晶体中 11 891 个晶粒的 ODF 值
Fig. 5 ODF to thousands of crystallites in cubic crystal

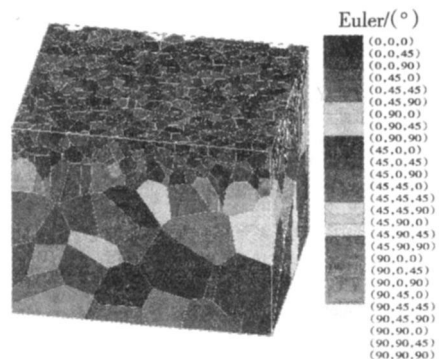


图 6 表层具有细化晶粒的立方晶体各晶粒的取向
Fig. 6 Orientation to thinning crystallite on surface in cubic crystal

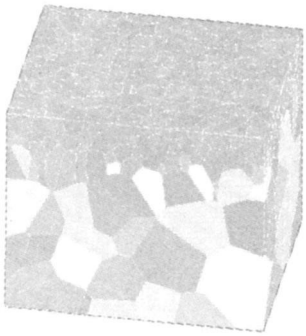


图 7 表层具有细化晶粒的立方晶体各晶粒的 ODF 值

Fig. 7 ODF to thinning crystallite on surface in cubic crystal

3 结 论

文中主要研究了在数字材料领域,可视化仿真三维多晶体材料微结构的计算机技术以及晶粒 ODF 的程序化计算与可视化问题。

(1)三维多晶体材料微结构的仿真设计,运用简单合理的空间数据结构,开发了基于计算机硬盘文件为运算及存储对象的三维空间 Voronoi 图增量式外存算法,在指定长方体区域内实现了“海量”级三维晶粒聚合体的构造。同时,利用 OpenGL 图形接口,实现了多晶体材料微结构的可视化。

(2)在多晶体材料微结构中,由每个晶粒的三个 Euler 角可以计算晶粒 ODF 值,据此设计了立方晶体 ODF 的计算程序。运行程序可以得到每个晶

粒对应的 ODF 值。同时,多晶体材料微结构仿真主程序将求得的 ODF 值与其几何信息数据相对应,实现了每个晶粒 ODF 的可视化,直观地显示了多晶体材料中 ODF 在各晶粒内的分布。

参考文献:

- [1] 李俊琛,李旭东,任淮辉.海量平面点集 Voronoi 图的构造算法[J].兰州理工大学学报,2007,33(4):102-105.
- [2] 李俊琛,李旭东,刘德学.空间点集 Voronoi 图的海量构造算法及可视化技术[J].兰州理工大学学报,2007,33(5):99-104.
- [3] LEE D T. Medial axis transformation of a planar shape[J]. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence 1982, 4(4):363-369.
- [4] SHAMOS M I HOEY D. Closest point problems[C]//Proceedings IEEE 16th Annual Symposium on Foundations of Computer Science USA; CA, 1975:151-162.
- [5] FORTUNE S. A sweepline algorithm for Voronoi diagrams[J]. Algorithmica 1987, 2:153-174.
- [6] LIXU DONG. Visualized simulation and modularized architecture of microstructure for composite materials[J]. Composite Interfaces 2005, 12(3-4):291-309.
- [7] BUNGE H J. Orientation stereology—a new branch in texture research[J]. Advance Engineering Materials 2001, 3(1-2):25-39.
- [8] BUNGE H J. Texture analysis in materials science[M]. London: Butterworths 1982.
- [9] 毛卫民,张新明.晶体学材料织构定量分析[M].北京:冶金工业出版社,1993.

(编辑 晁晓筠)