

# 存储能对合金晶粒长大影响的相场模拟研究

李学雄, 张金虎, 许海生, 马英杰, 王 峰, 王清江, 徐东生

(中国科学院金属研究所, 辽宁 沈阳 110016)

**摘要:** 采用优化加速的多相场模型, 研究了存储能大小及分布方式对合金组织晶粒长大的影响。结果表明, 模型实现并加速了较多的结构场变量组织演化, 合金存储能升高, 加快合金晶粒长大演化, 平均晶粒尺寸增大, 组织演化前中期高存储能晶粒降低组织中局域区域的晶粒尺寸均匀性; 存储能分布非均匀性增加, 可加速组织前中期存储能释放进程, 获得较大尺寸晶粒, 后期获得较小且更均匀的晶粒尺寸。本研究可为合金微观集成计算提供多晶几何模型, 为高温变形后晶粒长大尺寸精细参数变化分析提供理论基础。

**关键词:** 相场模型; 晶粒长大; 存储能分布方式; 晶粒尺寸

中图分类号: O792

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2026)05-1216-07

## 1 引言

晶粒长大是纯金属及合金中普遍存在的现象, 而晶粒长大过程中晶粒大小的平均值、均匀性等直接影响材料的强度、塑性、韧性等关键性能<sup>[1]</sup>。Chen等<sup>[2]</sup>基于Ginzburg-Landau理论建立的晶粒长大相场模型物理意义更加明显, 避免对界面的显示追踪。合金的晶粒度控制, 主要通过变形获得变形存储能, 再通过热处理实现晶粒形核、长大等组织演化, 可以实现合金性能优化<sup>[3]</sup>。实际合金变形基体中常分布有不均匀的变形存储能<sup>[4-5]</sup>, 并且微观组织中晶粒变形后的存储能同变形方式、晶粒取向密切相关, 尤其是密排六方(HCP)等各向异性晶体结构的材料<sup>[6]</sup>。目前研究存储能对晶粒长大的影响, 主要通过控制合金整体存储能大小的方式实现, 而考虑存储能空间分布不均匀性对合金晶粒长大影响的研究较少。

传统晶体长大相场模型, 虽然组织演化的多晶晶粒数目多, 但涉及的序参量较少, 序参量较多时计算时间和存储能会明显增加, 对于非均匀存储能空间分布下, 晶粒长大的分析需要多序参量才具备统计意义, 并且目前微观组织层面集成计算中相场-晶体塑性力学性能评估的研究<sup>[7-8]</sup>, 也提出采用多序参量描述组织特征的需求。因此有必要建立加速传统晶粒长大的相场模型, 从而实现精细化存储能空间分布方式对晶粒长大的影响, 并为多晶材料的性能评估、晶粒长大后晶粒尺寸的协同分析等提供理论基础。

## 2 晶粒生长模型及加速算法

相场方法在描述介观尺度相变或组织演化中, 主要是通过一系列非守恒场变量来描述不同晶粒或相, 以及守恒场变量来描述组织中成分的扩散, 根据不同的研究对象, 选择相应的非守恒和守恒场变量, 通过对应的Ginzburg-Landau方程<sup>[9]</sup>和Cahn-Hilliard方程<sup>[10]</sup>计算来研究问题。相场方法相对其它介观尺度组织模拟方法, 其场变量连续变化, 基于自由能泛函和热力学势驱动原则, 能够自然模拟复杂界面形貌和拓扑变化, 并且方便耦合多物理场, 成为研究材料微观组织演化和设计的重要工具。

对于高温变形后的晶粒长大, 文中采用多场变量模型, 在该模型中多晶结构场变量可用一组连续序参量来表达 $\{\eta_1(r,t), \eta_2(r,t), \dots, \eta_p(r,t)\}$ , 其中 $\eta_i(r,t)$  ( $i=1, 2, 3, \dots, p$ ) 是对应序参量编号 $i$ 在空间位置 $r$ 和时间 $t$ 下的瞬时态,  $p$ 为序参量总数。相场模型由于其复杂界面模拟能力和物理机制描述准备, 已开始应用于合金辐照缺陷、再结晶、异常晶粒长大等热点问题<sup>[11-15]</sup>, 可揭示新的相变和变形机制, 从而为组织设计和性能提升提供重要应用价值<sup>[16-18]</sup>。

合金变形后的体系总自由能表达式如下:

$$F = \int \left\{ f_0 + \sum_{i=1}^p \frac{k_i}{2} |\nabla \eta_i|^2 + [E_s \eta_i^3 (10 - 15\eta_i + 6\eta_i^2)] \right\} dV \quad (1)$$

式中, 第1项 $f_0$ 为局域自由能密度, 第2项为梯度能, 晶界

收稿日期: 2025-05-01

基金项目: 辽宁省科技重大专项(2024JH1/11700028); 国家科技重大专项(J2019-VI-0005-0119); 国家重点研发计划(2024YFB3714201); NSFC“叶企孙”科学基金重点支持项目(U2241245); 广西科技重大专项(AA23023029)

作者简介: 李学雄, 男, 1987年生, 博士, 助理研究员, 中国科学院金属研究所, 辽宁 沈阳 110016, 电话: 024-23971946, E-mail: lixx@imr.ac.cn

能与梯度能系数  $k$  成正比关系,第3项是变形存储能项,  $E_s$  是变形存储能密度,其中  $f_0$  函数的选择满足每个晶粒具备一个简并势阱,其具体表达式如下<sup>[19]</sup>:

$$f_0 = \sum_{i=1}^p \left( -\frac{a}{2} \eta_i^2 + \frac{b}{4} \eta_i^4 \right) + \frac{c}{2} \sum_{i=1}^p \sum_{j=1, j \neq i}^p \eta_i^2 \eta_j^2 \quad (2)$$

式中,  $a, b, c$  是正实数,  $f_0$  满足了多维双势阱,有  $2p$  个最小值,最后一项是能垒项。模型中设定  $a=b=1.0, c=2.0$ ,忽略存储能项,当  $p=2$  时,其体系自由能密度分布如图1所示,该模型适用于描述晶粒的长大和粗化过程。

体系结构场变量随时间的演化满足 Ginzburg-Landau 方程如下:

$$\frac{\partial \eta_i}{\partial t} = -L \frac{\delta F}{\delta \eta_i} = -L \left[ \frac{\partial f_0}{\partial \eta_i} - k \nabla^2 \eta_i + 30 \eta_i^2 (1 - \eta_i)^2 E_s \right] \quad (3)$$

式中,  $t$  为时间,  $\frac{\partial f_0}{\partial \eta_i} = -a \eta_i + b \eta_i^3 + c \eta_i \sum_{j=1, j \neq i}^p \eta_j^2$ ,  $L$  为动力学系数,与界面迁移率相关<sup>[20]</sup>。计算中采用离散网格,有限差分法求解,其向前差分形式如下:

$$\eta_i^{t+dt} = \eta_i^t - dt L \left[ \frac{\partial f_0}{\partial \eta_i} - k \nabla^2 \eta_i + 30 \eta_i^2 (1 - \eta_i)^2 E_s \right] \quad (4)$$

多晶晶粒长大应用于较大体系中时,需要的结构序参量数目较多,本模型计算中采用了400个结构序参量。序参量数目的增加,对于常规网格中每个格点都存储并计算全部序参量的方法,计算时间较长,并且消耗内存及存储巨大,当序参量超过100个时就计算困难。因此本模型计算中采用 Kim 等人<sup>[21]</sup>提出的压缩算法,并进行改进。其算法是从网格每个格点,只需要考虑5个(2D)或6个(3D)序参量,就足以描述该位置的情况。并且相场演化组织中,大部分都是晶内的格点,这可大大压缩计算量,重点追踪界面的演化就可高效实现组织演化。其压缩算法基本步骤如下:

(1)每个格点只采用5个场变量来描述,直接计算量从  $O(N^2)$  降低到  $O(5^2)$  计算量(其中  $N$  是序参量总数,计算量同体系中序参量二次方线性相关降低到固定值),且多数情况下的计算只包含2个场变量,这显著压缩了计算

时间。

(2)对每个网格点,采用两种变量来描述该格点的数据结构,一个是序参量数组(整形数值),另一个是场变量值数组(对应序参量数组的双精度数值)。将5场变量分解为整数性指标数组和体积比数组,这有利于计算中将部分浮点计算变为整型计算,并且对于输出的文件大小,能高效压缩。

(3)设立场变量计算门槛值为0.000 01,可剔除大量晶内无效计算点,计算量集中在界面附近。

(4)求解后,对各格点的场变量值从大到小排列,对应的序参量编号也排列,去除较小场变量值,更新场变量值  $\eta_i^* = \eta_i / \sum_{j=1}^n \eta_j$ ,使其满足  $\sum_{i=1}^n \eta_i^* = 1$ 。

另外,从两方面优化计算效率,一方面利用 Fortran 自身数值按列优先排列特征,内层循环设置对行数据结构访问,外层循环设置对列访问。另一方面,网格自身具备规整特点,对其中计算量大的循环结构,如所有格点一个时间步内组织演化,加入 OpenMP 语句,实现多线程并行,一个时间步后整个网格新数值同时更新,这保证了数值稳定性。

本研究的计算效率同传统计算方法对比如图2所示,从图中可看出,序参量数量增加,常规计算方法消耗时间和存储量线性增加,而 Kim 方法几乎对其不敏感,如图2a中序参量400时, Kim 方法相对传统模型计算加速比可超过10。因此对于大体系多序参量的组织演化,采用该方法是必要的。

### 3 存储能大小对晶粒长大的影响

在高温变形后晶粒长大的计算过程中,选取  $1000 \times 1000$  网格体系,采用周期性边界条件。组织中包含400个序参量,其中200个序参量是无存储能晶粒,另外的200个是具有存储能的晶粒。对比研究组织中存储能大小对晶粒长大的影响,主要是通过设置存储能密度  $E_s$  分别为0.0、0.0025、0.005、0.0075和0.01  $J \cdot m^{-3}$  来实现的,其它参数设置为:  $a=1.0, b=1.0, c=2.0, k=2.0, L=4.0, dt=0.1$ 。

图3是不同初始存储能大小对晶粒长大影响的组织演化图,图3a表示初始组织采用了400个序参量,其中  $p$  值为序参量值,  $p(0,1)$  范围为晶界,  $p[1,400]$  为序参量编号。采用 Voronoi 方法构造的周期性几何构型,图3b是标定了存储能晶粒的初始组织图,其中红色晶粒是序参量1~200的晶粒,红色晶粒是设定存储能的对象,而绿色晶粒是序参量201~400的晶粒,无变形存储能,图3c和图3h中红色晶粒标定了序参量1~200的晶粒,但不包含存储能,这是方便比对包含不同存储能大小晶粒的演化特征设定的。相同的几何构型和存储能空间分布形式设定,是保证获得存储能大小对晶粒长大的影响规律,无其它因素的干扰。对比5种大小的存储能(0.0、0.0025、

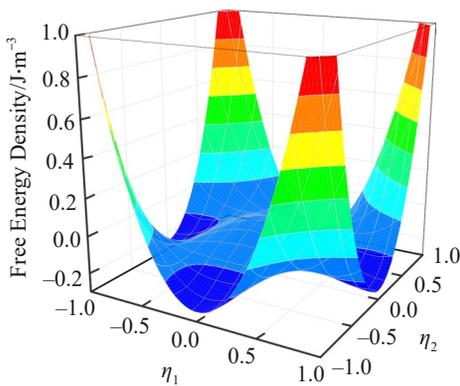


图1 两个结构场变量的自由能密度函数曲面

Fig.1 Free energy density function surfaces of two order parameters

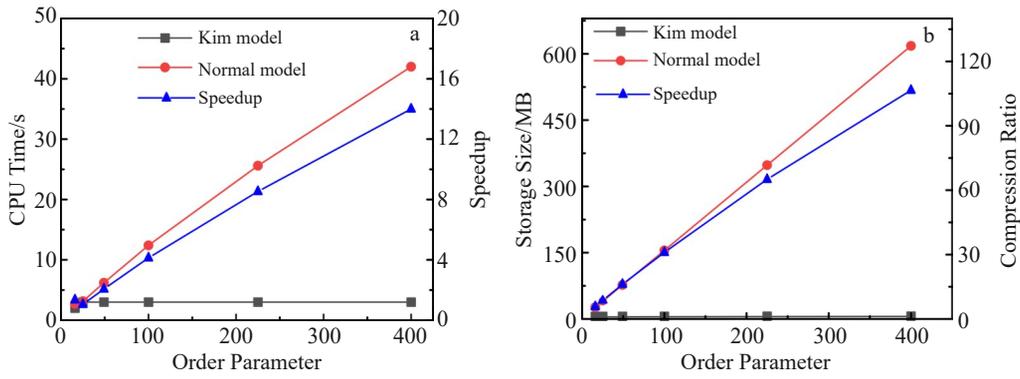


图2 Kim模型和传统模型晶粒长大计算效率对比

Fig.2 Comparison of efficiency using Kim model and traditional model (256×256, steps=50)

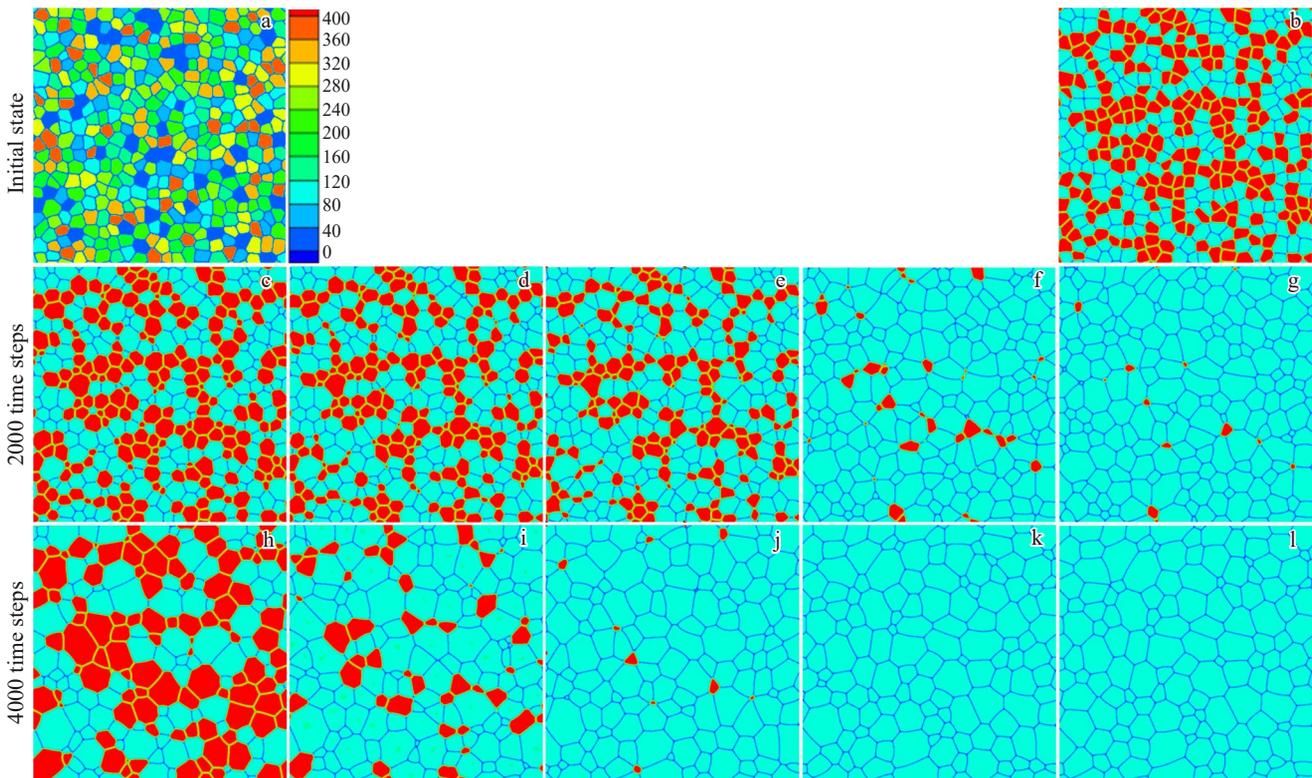


图3 存储能对晶粒长大影响的组织演化图

Fig.3 Microstructural evolutions of grain growth with different stored energies: (a) initial grain; (b) initial stored energy distribution; (c, h) without stored energy; (d, i) stored energy=0.0025 J·m<sup>-3</sup>; (e, j) stored energy=0.005 J·m<sup>-3</sup>; (f, k) stored energy=0.0075 J·m<sup>-3</sup>; (g, l) stored energy=0.01 J·m<sup>-3</sup>

0.005、0.0075、0.01 J·m<sup>-3</sup>) 2000步和4000步演化后的组织,可知存储能越高,组织中包含存储能的晶粒,消失也越快,从图4b中存储能释放曲线也验证这一点,这是因为含存储能的晶粒,其热力学稳定性较低,易优先被其它晶粒吞并。Liu等<sup>[22]</sup>研究变形铝合金退火时,应变引起含低存储能基体晶粒区域,容易出现异常晶粒长大,也证实了这一点。上述5种大小存储能的组织,演化的共同特征是随时间步增加,小晶粒消失,大晶粒长大,这是系统降低总界面能的结果。图4a是平均晶粒半径随时间变化的曲线。从图中可知,组织初始存储能越高,其晶粒长

大后平均尺寸越大,说明存储能加快晶粒长大演化过程,这在图3中也可观察到类似结果。

图4c为5种组织2000时间步后的晶粒半径频度统计曲线,其分布方式符合典型的正态分布特征。存储能的增加,使晶粒长大的平均尺寸增加,但降低尺寸分布的均匀性。结合图3,这种晶粒半径非均匀分布区域,往往出现在原存储能消失的地方,这表明存储能引入,虽加快晶粒长大演化进程,但同时在前期演化中增加晶粒长大的扰乱程度,从而导致晶粒尺寸非均匀分布,该效应只有到后期高存储能晶粒完全被吞并后才能被消除。因此,

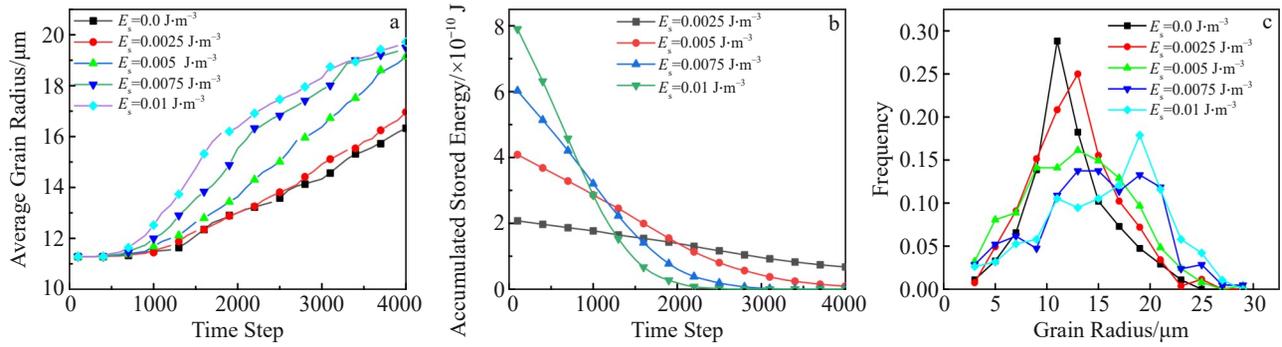


图4 不同存储能下平均晶粒半径、总储能演化及晶粒半径频率统计曲线

Fig.4 Effect of stored energy on average grain radius (a) and accumulated stored energy (b); grain radius frequency statistics distributions (c)

结合模拟中变量和获得规律,思考实际合金加工和热处理,一般情况下热加工变形量越大,可对应合金变形存储能越高;热处理保温时间可对应模拟时间步。根据合金组织控制不同晶粒尺寸等级和均匀性的要求,应综合考虑加工存储能和热处理保温时间的控制。

综合存储能大小对高温晶粒长大的相场组织演化计算结果表明:存储能升高,加快晶粒长大的演化进程,导致其平均晶粒尺寸变大;晶粒长大前、中期,高存储能晶粒降低局部区域的晶粒尺寸的均匀性,后期该效应消失。高存储能晶粒其储能释放速率更快。

#### 4 存储能空间分布方式对晶粒长大的影响

实际合金变形后,各晶粒的变形存储能不可能完全相同。为此计算在相同总存储能条件下,存储能的不同分布方式对高温晶粒长大影响。计算采用相同的体系累积存储能,但存储能分布有平均分布(uniform)、线性分布(linear)、正态分布(normal)、等级分布(grade)等4种方式,4种存储能分布方式设计如图5所示。组织中200个晶粒的存储能设置如下:平均存储能大小 $0.005 \text{ J}\cdot\text{m}^{-3}$ ,最高值 $0.009 \text{ J}\cdot\text{m}^{-3}$ ,最低值 $0.001 \text{ J}\cdot\text{m}^{-3}$ ,其中等级分布,采用2个能量等级,这4种分布方式的根本区别是存储能空间非均匀性依次增加。

图6为包含3种存储能分布方式的组织演化图(图中无存储能晶粒为绿色,存储能晶粒数值越高颜色越接近红色,晶界呈蓝色),相应的平均分布组织演化参考图3。等级分布中的高能晶粒在2000时间步相比其它形式优先消失,但低能晶粒尺寸合并长大相比其它形式的尺寸更大。4000时间步等级分布储能晶粒反而是最多的,结合图7b也表明这一点,这说明储能分布差异性的增强,有利于高存储晶粒在前中期快速释放存储,晶粒快速消失,这和上节的结论是相似的。高存储能晶粒存储能优先释放后,组织变成类似低存储能量级的形式,从而使其后期存储能释放速率几乎平缓,晶粒长大缓慢,其累积存储能释放速率小于平均分布方式。对比4种存储能分布方式平均晶粒尺寸时间演化来看,等级分布方式在2000

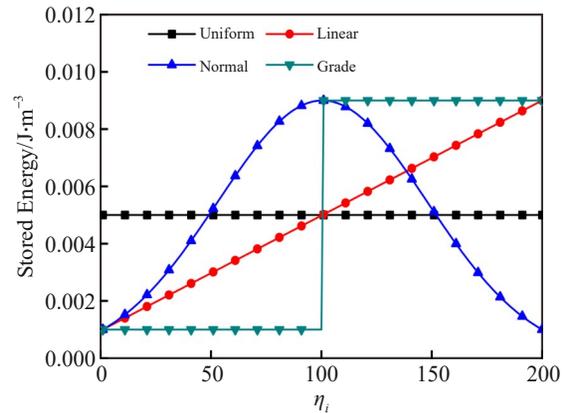


图5 存储能的不同空间分布方式示意图

Fig.5 Schematic of different stored energy distributions

时间步平均晶粒尺寸较大,而4000时间步时最小,线性分布和正态分布平均晶粒尺寸适中,2000~4000步之间,正态分布平均晶粒尺寸稍高于线性分布,这和存储能释放特征是一致,图8定量化地统计了该过程。

从晶粒尺寸分布的均匀性来看,等级分布2000和4000时间步的晶粒均匀性均优于前两者,这是因为高能晶粒快速释放存储能,将组织提前进入极低存储能状态,其晶粒长大进程变慢,因此相同时间晶粒长大后,其晶粒尺寸均匀性反而良好。从这可类似推断,实际加工热处理中,晶粒变形的不协调行为,可加速后续热处理晶粒回复长大的进程,缩短热处理时间,并且可获得晶粒尺寸分布较均匀组织,但是该过程对时间把握精准要求高,需要保证储能晶粒不能完全消失,保留一部分低储能晶粒,避免组织进入晶粒长大的快速生长期。

更精细分析不同存储能分布方式晶粒长大演化过程中晶粒尺寸频率统计结果,如图8a所示,随存储能非均匀性升高,合金晶粒尺寸分布更集中,这意味着组织晶粒半径均匀性提高;如图8b~8e从时间演化角度分析,4种存储能分布方式的晶粒半径均匀性都降低,其中存储能均匀性较低的等级存储能分布形式,晶粒尺寸较大;并且4000时间步均出现双峰形态,这是因为晶粒长大过程

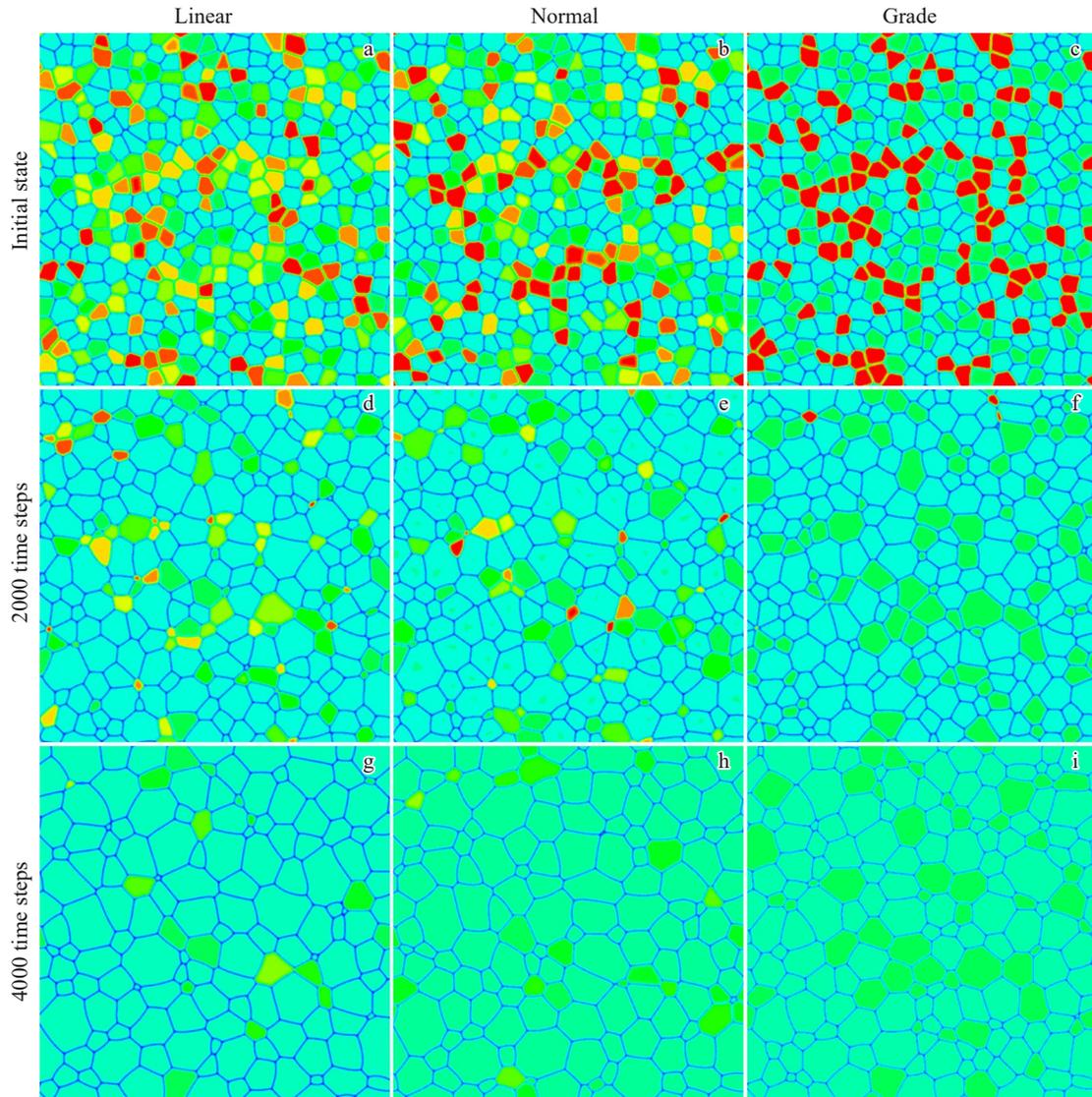


图 6 不同存储能空间分布方式的微观组织演化

Fig.6 Microstructural evolutions simulated with different initial stored energy distributions

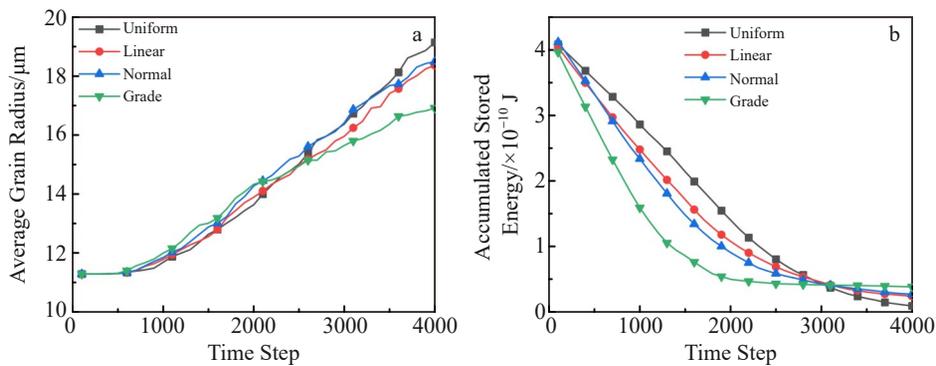


图 7 不同存储能分布方式下晶粒半径和总存储能变化曲线

Fig.7 Variation curves of average grain radius (a) and accumulated stored energy (b) over time with different stored energy distributions

中,高存储能晶粒驱动无存储能基体晶粒快速长大,而存储能晶粒在基体晶粒间合并缩小,因此出现双峰晶粒平均半径形态,该组织包含两种主要晶粒尺寸的微观组织,其可能带来较好的强韧性协调关系。类似的 Bhuiyan

等<sup>[13]</sup>采用多相场方法研究分散的细颗粒钉扎状导致晶粒长大组织中出现异常晶粒长大,也获得双峰晶粒尺寸的组织,这种双峰形态同样来自晶粒长大竞争不平衡。

综上所述,不同存储能分布下高温晶粒长大相场模

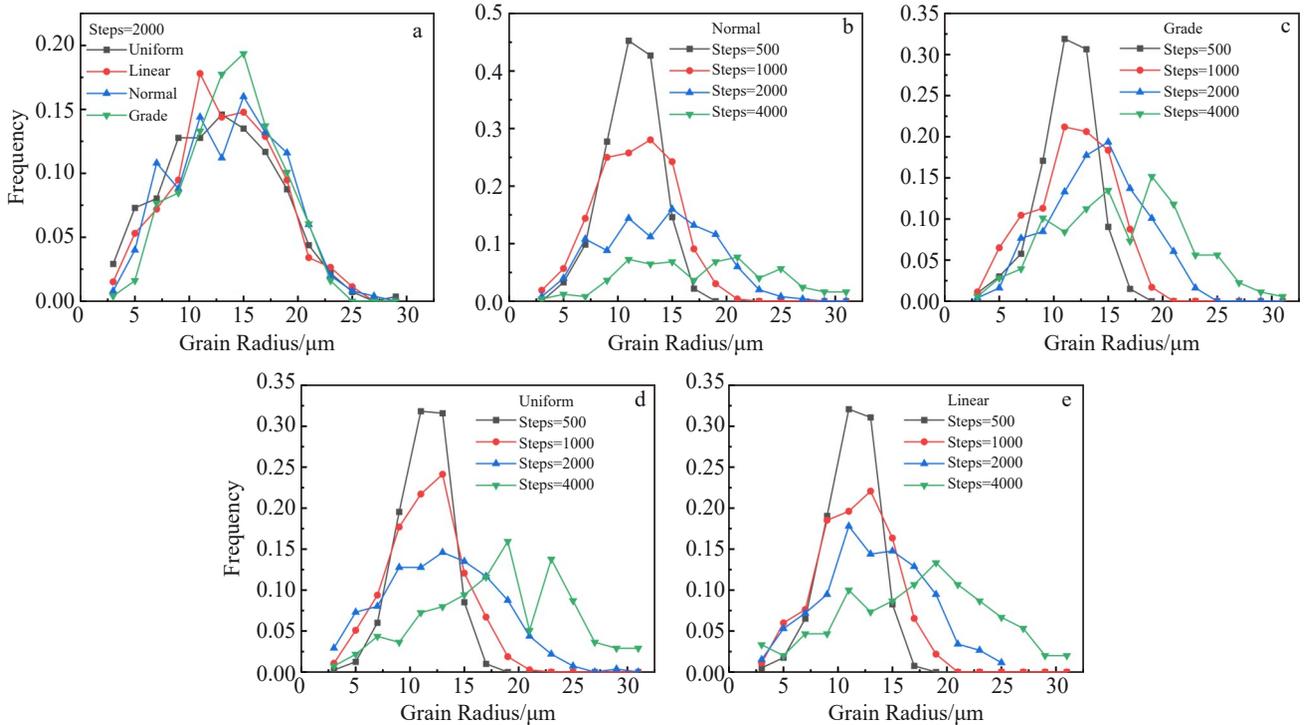


图8 不同存储能分布方式下晶粒半径频率统计曲线

Fig.8 Grain radius frequency distribution curves over time with different stored energy distributions

型计算结果表明:存储能分布不均匀性增强,可加速前、中期高储能释放进程,获得尺寸相对较大晶粒,但后期,其存储能反而释放缓慢,可获得较小尺寸晶粒,并且其均匀性良好。因此从上述模拟获得的组织演化规律,同样结合实验热加工和热处理角度考虑,可推断存储能分布非均匀性增强,可缩短热处理时间,并能获得相对优良组织,但是它同时对热加工变形非均匀性和热处理时间控制,提出了更高要求。

## 5 结论

1)合金存储能升高,加快其晶粒长大演化进程,导致其平均晶粒尺寸较大。高存储能晶粒,组织演化前中期降低组织中局部区域的晶粒尺寸均匀性,后期该效应消退。

2)存储能按照平均分布、线性分布、正态分布、等级分布的顺序,其存储能分布非均匀性依次增加。该效应可加速前、中期高存储释放进程,获得尺寸相对较大晶粒,但后期其储能释放缓慢,获得较小尺寸晶粒,且均匀性良好。

### 参考文献 References

[1] Zeng Z, Li X Y, Xu D S *et al. Extreme Mechanics Letters*[J], 2016, 8: 213  
 [2] Chen L Q, Yang W. *Physical Review B*[J], 1994, 50: 15752  
 [3] Liu L L, Zhao G Q, Li Y X *et al. Journal of Material Science & Technology*[J], 2026, 252: 253

[4] Chai F, Ma Z Y, Han X H *et al. Journal of Alloys and Compounds*[J], 2025, 1020: 179410  
 [5] Chun Y B, Semiatin S L, Hwang S K. *Acta Materialia*[J], 2006, 54: 3673  
 [6] Balasubramanian S, Anand L. *Acta Materialia*[J], 2002, 50(1): 133  
 [7] Hao M Y, Li P, Li X X *et al. Journal of Materials Science & Technology*[J], 2022, 124: 150  
 [8] Zhang J H, Li X X, Xu D S *et al. Journal of Materials Science & Technology*[J], 2021, 90: 168  
 [9] Gunton J D, Miguel M S, Sahni P S. *The Dynamics of First-Order Phase Transitions, In: Phase Transitions and Critical Phenomena*[M]. London: Academic Press, 1983: 267  
 [10] Cahn J W. *Acta Metallurgica*[J], 1961, 9(9): 795  
 [11] Rezvani A, Ebrahimi R, Bagherpour E. *Advanced Engineering Materials*[J], 2025, 27(12): 2500117  
 [12] Miyoshi E, Ohno M, Shibuta Y *et al. Journal of Materials Science*[J], 2022, 57: 16690  
 [13] Bhuiyan M N, Frame L D, Mushongera L T. *Advanced Engineering Materials*[J], 2023, 25(19): 2300178  
 [14] Liu J W, Li X W, Fang W B. *Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2024, 53(3): 625  
 [15] Zhang Wei(张伟), Cheng Dazhao(程大钊), Liu Caiyan(刘彩艳) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2024, 53(10): 2926  
 [16] Xin T Z, Zhao Y H, Mahjoub R *et al. Science Advances*[J], 2021, 7(23): eabf3039  
 [17] Xin T Z, Tang S, Ji F *et al. Acta Materialia*[J], 2022, 239: 118248  
 [18] Li H Q, Zhao Y H, Song Z *et al. Acta Materialia*[J], 2025,

- 301: 121573
- [19] Fan D, Chen L Q. *Acta Materialia*[J], 1997, 45(2): 611
- [20] Radhakrishnan B, Sarma G B, Zacharia T. *Acta Materialia*[J], 1998, 46(12): 4415
- [21] Kim S G, Kim D I, Kim W T *et al.* *Physical Review E*[J], 2006, 74: 061605
- [22] Liu R X, Li K, Zhou G W *et al.* *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*[J], 2022, 32(12): 3873

## Phase-Field Simulation of Influence of Stored Energy on Grain Growth in Alloys

Li Xuexiong, Zhang Jinhu, Xu Haisheng, Ma Yingjie, Wang Hao, Wang Qingjiang, Xu Dongsheng  
(Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, China)

**Abstract:** The optimized accelerated multi-phase field model was used to investigate the influence of magnitude and distribution of stored energy on the grain growth of alloy microstructures. The results show that the model successfully simulates and accelerates the microstructure evolution of a system with multiple order parameters. An increase in stored energy of alloy accelerates grain growth, leading to an increase in average grain size. During the early-to-mid stages of microstructure evolution, grains with high stored energy reduce the uniformity of local grain sizes. An increase in the non-uniformity of stored energy distribution can expedite the release process of stored energy in the early-to-mid stages of microstructure evolution, leading to a larger grain size. In the later stage, smaller and more uniform grain size is obtained. This research develops a polycrystalline geometric model for integrated microscale simulation of alloys, providing a theoretical basis for analyzing fine-scale parameter changes in grain size after high-temperature deformation.

**Key words:** phase field model; grain growth; stored energy distribution; grain size

---

Corresponding author: Xu Dongsheng, Ph. D., Researcher, Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, P. R. China, E-mail: dsxu@imr.ac.cn