

文章编号:1006-3080(2016)03-0387-06

DOI:10.14135/j.cnki.1006-3080.2016.03.015

## 晶粒生长的双区域动力学蒙特卡洛模拟

张 平, 李建华, 李洪林

(华东理工大学信息科学与工程学院, 上海 200237)

**摘要:**现有的动力学蒙特卡洛方法模拟晶粒生长过程的结果与理论计算值之间大多存在偏差,其中重要的原因是现有方法大多采用只适用于计算小角度晶界 Read-Shockley 公式。针对此问题,本文提出了一种对大、小角度晶界都适用的双区域动力学蒙特卡洛模拟方法。该方法通过基于势函数的格点能量获得取向概率,从而避免使用 Read-Shockley 公式。为了解决引入势函数导致计算量大的问题,划分动力学蒙特卡洛的单区域结构为晶界区域和非晶界区域的双区域结构,并将势函数的计算限制在晶界区内,从而减少了计算时间。实验模拟结果表明:与传统的和改进的动力学蒙特卡洛方法相比,双区域动力学蒙特卡洛方法的微观组织演变更符合晶粒生长特征,晶粒生长指数也更接近理论值。

**关键词:**动力学蒙特卡洛; 晶粒生长; 微观组织; 晶粒生长指数

**中图分类号:**TP391

**文献标志码:**A

## Bi-region Kinetic Monte Carlo Simulation of Grain Growth

ZHANG Ping, LI Jian-hua, LI Hong-lin

(School of Information Science and Engineering, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China)

**Abstract:** There exist deviations between the results of most kinetic Monte Carlo (kMC) simulation of grain growth and the theoretical value of grain growth. An important reason is that the Read-Shockley formulation in most kMC simulation is only suitable for the computation of small-angle grain boundary. Aiming at this problem, a bi-region kMC method is proposed in this paper, which handles both situation of small-angle grain boundary and large-angle grain boundary. In the proposed method, the transition probability of orientation number is obtained using lattice energy based on potential functions, not using Read-Shockley formula. In order to solve the large computational problem caused by introducing potential functions, kMC single-region structure of traditional dynamics is divided into two regions; the one without grain boundary and the one with the grain boundary. Due to potential function computation only used in the region of grain boundary, the computing time is reduced. Experiment results show that the micro-structure evolution of bi-region kMC method is more consistent with the feature of grain growth than that of existing traditional and improved kMC, and the grain growth exponent is closer to the theoretical value than that of existing kMC.

**Key words:** kMC; grain growth; micro-structure; grain growth exponent

收稿日期:2015-09-25

作者简介:张 平(1991-),男,江苏常州人,硕士生,研究方向为计算机辅助设计。E-mail:zhangping\_1@foxmail.com

通信联系人:李建华, E-mail:jhli@ecust.edu.cn

晶粒生长是影响多晶材料物理和机械性能的一个重要过程。目前,已有很多种理论和实验方法用于研究晶粒生长,其中比较常见的方法有相场法<sup>[1]</sup>、蒙特卡洛(Monte Carlo)法<sup>[2]</sup>和动力学蒙特卡洛(Kinetic Monte Carlo, kMC)法<sup>[3-6]</sup>。

动力学蒙特卡洛方法是用于模拟自然界中某些随时间演变过程的一种蒙特卡洛方法<sup>[7]</sup>。由于动力学蒙特卡洛方法的基础是随机性,使得它非常适合描述某些过程,例如空位扩散、生长、化学反应等。

众多学者在用动力学蒙特卡洛方法模拟晶粒生长时均使用 Read-Shockley 模型<sup>[8]</sup>计算晶界能。该模型由 Read 和 Shockley 于 1950 年提出<sup>[9]</sup>,由于其只适用于小角度,对大角度晶界的计算结果往往偏离真实值。国内外的学者对此都提出了改进方法。张继祥等<sup>[10]</sup>提出将大角度晶界的能量设为常数;Mallick 等<sup>[11]</sup>在计算小角度晶界能时用 Read-Shockley 模型,在计算大角度晶界能时尝试将公式进行标准化扩展,虽然扩展公式的变化趋势符合原公式,但是计算得到的晶界区的能量却与原来的值存在差别。虽然已有学者对 Read-Shockley 模型提出了改进,但是改进方法对于大角度晶界的计算仍然无法得到理想值。

为此,本文提出将势函数引入晶界区格点能量的计算中,避免 Read-Shockley 模型的局限性,模拟了各向异性条件下晶粒生长的组织结构演化过程。

## 1 晶粒生长的 kMC 模拟

### 1.1 晶粒生长

多晶材料中的晶粒生长是一个自发的过程,可以形象地形容为“大晶粒吞并小晶粒”。由于实际晶粒组织的复杂性,对晶粒的形状简化假设都是基于统计平均的方法。Hillert<sup>[12]</sup>从统计角度出发,提出晶粒长大模型如下:

$$\frac{dR}{dt} = \frac{\alpha}{2} M \gamma \left( \frac{1}{R_c} - \frac{1}{R} \right) \quad (1)$$

其中: $M$  为晶界迁移率; $\gamma$  为晶界区的能量; $R$  为晶粒半径; $R_c$  为临界半径; $\alpha$  为常数。实验研究<sup>[13]</sup>和计算机模拟<sup>[14]</sup>结果表明,晶界区的能量可以改变晶粒的生长行为。传统的计算晶界区能量的方法是采用 Read-Shockley 公式,见式(2)。

$$\gamma(\theta_{ij}) = \begin{cases} J \frac{\theta}{\theta'} \left[ 1 - \ln \left( \frac{\theta}{\theta'} \right) \right], & \theta \leq \theta' \\ J, & \theta > \theta' \end{cases} \quad (2)$$

其中: $\theta'$  为晶粒间取向差,常设置为 0 到  $\pi$  的某个

值; $\theta$  为晶界夹角; $J$  为大角度晶界能。

公式中的实际晶粒取向通过如下方法与模拟中随机生成的取向数相对应<sup>[10]</sup>:在直角坐标系中,对于二维中的晶粒有  $0 \sim 360^\circ$  的取向,由于晶粒取向的特殊性可表示为  $0 \sim 180^\circ$ ,因此用 180 个取向数表示,每个取向数代表一个对应的晶体取向。晶界两侧的取向差  $\Delta\theta$  (即晶界夹角)的计算如下:

$$\Delta\theta = \begin{cases} \frac{\pi |S_{G1} - S_{G2}|}{Q}, & 0 \leq \frac{\pi |S_{G1} - S_{G2}|}{Q} \leq \pi - \theta' \\ \pi - \frac{\pi |S_{G1} - S_{G2}|}{Q}, & \pi - \theta' \leq \frac{\pi |S_{G1} - S_{G2}|}{Q} \leq \pi \end{cases} \quad (3)$$

其中: $S_{G1}$  和  $S_{G2}$  为晶界两侧格点内的取向数; $Q$  为总取向数。

### 1.2 晶粒生长的传统动力学蒙特卡洛方法

在介观尺度观察晶粒生长的过程中,可以将该过程看成是晶粒从一种状态到另一种状态的跃迁,而 kMC 是适用于系统状态转变的方法。kMC 是由 Bortz 等<sup>[15]</sup>在蒙特卡洛算法基础上提出的 NFW(N-Fold Way)方法演化而来,目前已有十几种不同版本的 kMC 方法。

kMC 方法的具体思路是:首先确定系统中发生的事件的个数  $M$  以及每个事件发生变化的速率  $k_{ij}$ ,然后由  $[0, 1]$  之间的随机数确定从初始态到下一个状态发生变化所需的时间  $\tau$ ,以及选择要发生的事件,发生相应的变化后系统将从初始态跃迁到下一个状态,如此反复,直到所设定的限制条件。跃迁时间的计算公式如下:

$$\tau = \int_0^\infty t P(t) dt = \frac{1}{k_{\text{tot}}} \quad (4)$$

其中: $\tau$  表示跃迁平均时间; $P(t)$  为一次跃迁的概率分布函数; $k_{\text{tot}} = \sum_j k_{ij}$  为事件跃迁速率的总和。

在晶粒生长中,动力学蒙特卡洛方法首先将多晶体材料的连续微观组织结构映射到离散的二维网格上,即对于每个网格点随机赋予一个整数值,具有相同整数值的相邻网格点表示一个晶粒,不同整数的交界作为晶界。具体的生长算法如下:

(1) 设置初始时间  $t=0$ 。

(2) 每个事件(网格点)有相应的发生转换的概率  $\rho$ ,所有事件组成一个概率事件列表,

$$\rho = \begin{cases} \frac{M(\theta_{ij}) \gamma(\theta_{ij})}{M_{\text{max}} \gamma_{\text{max}}}, & \Delta E \leq 0 \\ \frac{M(\theta_{ij}) \gamma(\theta_{ij})}{M_{\text{max}} \gamma_{\text{max}}} \exp\left(\frac{\Delta E}{T_s}\right), & \Delta E > 0 \end{cases} \quad (5)$$

其中:常数  $\gamma_{\text{max}}$  和  $M_{\text{max}}$  分别表示晶界移动的最大能

量和迁移率;  $\Delta E$  表示晶界区格点能量;  $T_s$  为模拟温度。

(3) 依次选取每个事件尝试新取向, 计算概率, 然后在  $[0, 1]$  内随机产生一个分布均匀的数  $\epsilon$ ,  $\epsilon = \epsilon \rho_0$ , 如果  $\rho > \epsilon$ , 则表示该网格点的新取向是可以被接受的, 也就表示重新取向可被接受, 则晶界发生迁移; 如果  $\rho \leq \epsilon$ , 则表示该网格点的新取向是不可以被接受的, 也就是此网格点会继续保持原来的取向。

(4) 更新时间  $t = t + \Delta t$ , 其中  $\Delta t = R_N^{-1} \left( \ln \frac{1}{u} \right)$ ,  $R_N$  为速率之和,  $u' \in (0, 1]$  为一个新的随机数。

(5) 返回步骤(2)。

### 1.3 格点能量计算的传统方法及其改进

传统 kMC 方法中计算格点能量公式如下:

$$E_i = \sum_j^n \gamma(\theta_{ij}) (1 - \delta S_i S_j) \quad (6)$$

其中:  $\gamma(\theta_{ij})$  表示在格点间随着取向差  $\theta_{ij}$  变化的单位面积的能量,  $\gamma(\theta_{ij})$  计算采用 Read-Shockley 公式, 即公式(2);  $\delta S_i S_j$  表示 Kronecker 函数;  $n$  为近邻的网格点数。

目前已有的改进 kMC 中比较典型的方法是 Mallick<sup>[11]</sup> 提出的将 Read-Shockley 中大角度计算进行标准化扩展, 扩展公式如下:

$$\gamma(\theta_{ij}) = \sin(2\Delta\theta) \{1 - r \ln[\sin(2\Delta\theta)]\} \quad (7)$$

其中:  $r$  为常数, 取 0.618;  $\Delta\theta$  为取向差。图 1 示出了采用传统和扩展的 kMC 计算得到的大角度晶界能。传统 kMC 中大角度晶界能设置为常数, 而扩展的 kMC 大角度晶界能随取向差的增大而逐渐增大。但是扩展的 kMC 中, 当取向差角度大于  $20^\circ$  时, 晶界能成为固定值, 这与实际情况不符合。

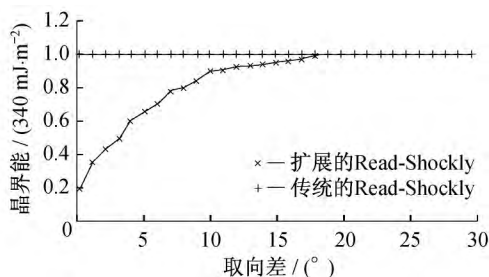


图 1 扩展 Read-Shockley 公式拟合大角度晶界能

Fig. 1 Extended Read-Shockley formula fitting energy in large angle grain boundary

为了进一步模拟真实的晶粒形貌的演化, 本文将格点分为晶界区和非晶界区, 并将势函数引入到晶界区格点能量计算。考虑到不同取向的晶粒之

间存在不同能量, 用该格点能量代替传统的计算结果实现模拟。由于只在晶界区引入势函数, 所以减少了计算量。

## 2 晶粒生长的双区域 kMC 模拟方法

### 2.1 现有 kMC 计算晶界区格点能量的缺点

在各向同性模拟中, 晶界区格点能量可视为相同的值; 在各向异性模拟中, 则必须将其设为不同值, 即将晶界分为大角度和小角度两种晶界。而当 Read-Shockley 公式用于各向异性的计算时, 由于其只适用于小角度晶界的计算, 对于大角度的计算结果会出现偏差<sup>[16]</sup>, 因此会导致最终的模拟生长过程偏离预测值。本文在原有方法中将势函数加入晶界区格点能量计算中, 重新计算得到取向数的转换概率, 避免使用 Read-Shockley 公式。

晶粒的长大依赖于晶界区提供的驱动力。引入势函数计算时, 需要对每个格点分别进行计算, 增加了计算量, 因此本文只在晶界区引入势函数进行计算。

### 2.2 模拟晶粒生长的双区域 kMC 方法

2.2.1 概述 双区域 kMC 方法主要分为非晶界区和晶界区, 分别计算各自的取向数。在晶界区域中引入势函数, 通过计算格点能量引入到取向数转换概率的计算中, 优点是不用区别大、小角度晶界, 而且可以对不同类型的晶界使用合适的势函数, 以此来弥补传统方法的不足。由于 kMC 格点取向数的改变会影响周围取向数的变化, 因此两区域 kMC 能够较好地连接。

2.2.2 非晶界区域和晶界区域的划分 如图 2 所示, 整个区域的划分依据是势函数的截断半径。由于采用的是 Lennard-Jones 势函数, 所以将距离交界线的两个格点的长度作为晶界区域, 其余为非晶界区域。图中三角形表示晶界区域, 椭圆表示非晶界区域, 不同的颜色表示界线两侧不同取向数的晶粒。

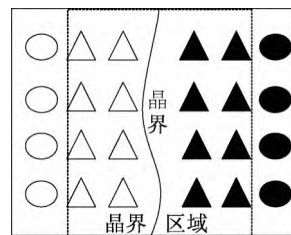


图 2 区域划分示意图

Fig. 2 Schematic diagram of regional division

划分晶界区域的大小对生长情况和计算量存

在着影响。相同模拟时间内,如果晶界区扩大,则计算量增大,但是晶粒平均尺寸相同,原因是超过截断半径的晶粒之间无法相互影响;相同模拟时间内,如果晶界区缩小,则计算量减小,但是晶粒平均尺寸减小,原因是驱动晶粒生长的晶界能减小。

2.2.3 非晶界区域的计算 非晶界区域的生长方法如上述传统 kMC 算法所示,对非晶界区域的格点随机赋予取向数,再通过计算格点的转换概率来判断是否产生新的取向。

2.2.4 晶界区域的计算 多晶材料是由许多取向不同的单晶组成的,不同种取向之间的区域称为晶界区。由于同种取向间的作用力小于不同种取向间作用力,因此在晶界区就有取向不同而产生的力,称为取向力。采用势函数直接计算取向力,然后再求晶界区格点能量。势函数选用 Lennard-Jones 势函数,LJ 势函数方法简单、计算量小,公式如下:

$$V_{LJ} = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (8)$$

其中: $\epsilon$  表示两个原子间相互吸引作用的强弱; $\sigma$  为作用势等于 0 时原子间的距离。

传统 kMC 中将  $\Delta E$  作为格点能量,在双区域 kMC 中设置晶界区格点能量为  $\frac{\Delta E}{T_s}$ ,原因是模拟温度  $T_s$  不与真实温度有直接关系<sup>[12]</sup>。因此可以将势函数计算得到的取向力通过模拟温度传入格点能量的计算中。对于系统中格点  $i$  的能量  $E_i$ ,

$$E_i = \sum_j^n (1 - \delta S_i S_j) \quad (9)$$

模拟温度的计算公式如下:

$$T_s = T(1 + s) \quad (10)$$

其中: $s$  为取向力; $v = s \times d_{\text{距离}}$ , $d_{\text{距离}}$  表示力方向的移动距离。

格点取向数的转换概率计算公式如下:

$$\rho = \begin{cases} 1, & \Delta E \leq 0 \\ \exp\left(-\frac{\Delta E}{KT(1+s)}\right), & \Delta E > 0 \end{cases} \quad (11)$$

最后再通过计算得到的取向数的转换概率判断得到格点取向。

2.2.5 非晶界区域和晶界区域的连接 kMC 方法中的取向数是向二维网格中八边形的点阵赋予一个整数值(如图 3 所示)。

在系统的取向数变化过程中,当相邻格点间取向一致时,则式(9)中的  $\delta S_i S_j$  为 0,不一致时则为 1。因此 kMC 方法中的每个格点取向数的计算会影响到其周围邻居点的取向数的变化,即晶界区域

取向数的改变会导致非晶界区域的变化。

2	1	2
1	?	1
2	1	2

图 3 模拟体系中四边形点阵

Fig. 3 Quadrilateral lattice in simulation system

在双区域 kMC 方法中,通过只在晶界区中引入势函数计算得到晶界区格点能量,然后通过取向数的计算将两区域较好地连接,避免了由 Read-Shockley 公式引起的不足,模拟结果也更符合理论规则。

### 3 实验分析

#### 3.1 实验设置

实验模拟采用 spparks 开源软件<sup>[12]</sup> 实现了一个原型系统来模拟晶粒生长。参数设置为  $50 \times 50$  网格,格点取向数为 180 种,势函数采用 LJ 势函数。

#### 3.2 各向异性对晶粒长大特征的影响

3.2.1 组织演变 图 4 所示为晶粒的组织结构随模拟时间的演化图,采用了各向异性条件。图中不同类型的晶粒用不同的颜色表示。可以看出,在各向异性条件下,组织中晶粒尺寸趋于非均匀,形状趋于不规则晶粒,说明各向异性阻碍晶粒长大,降低组织均匀化程度。

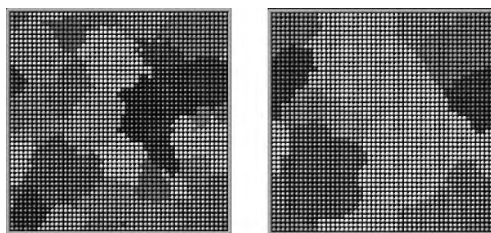


图 4 各向异性条件下双区域 kMC 模拟的晶粒生长微观组织演变

Fig. 4 Microstructures evolution in anisotropic grain growth with bi-region kMC

3.2.2 晶粒尺寸分布 平均晶粒尺寸的测量是在模拟二维图中随机布置 3 条平行于边界的直线(横向或纵向),计算每条直线上的晶粒平均截距(覆盖在一个晶粒上的测量线段的长度称为截距),取算术平均值作为晶粒平均直径<sup>[17]</sup>。其中,晶粒平均截距 = 长度 / 截到的晶粒个数。

本文随机选取纵向的 3 条直线,统计直线所截的晶粒尺寸和平均尺寸,并计算算术平均值。

图5示出了最大晶粒直径与晶粒平均直径的比值  $D_b/D_m$ , MCS 表示蒙特卡洛时间步长。图中显示,  $D_b/D_m$  比值大于 2.5, 但小于 4。以上模拟结果符合各向异性条件下的正常晶粒长大特征, 与文献 [18] 相符。

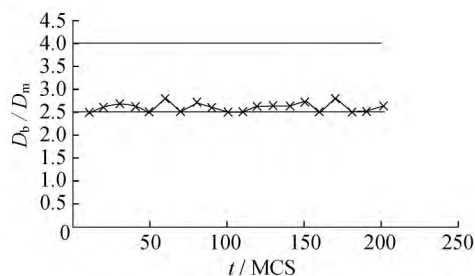


图5 最大晶粒尺寸与平均尺寸比值

Fig. 5 Maximum grain size and average size ratio

### 3.3 双区域 kMC 与传统 kMC 的对比

图6示出了不同晶界夹角情况下, 由 Read-Shockley 公式计算得到的晶界区能量变化过程。可以看出, 虽然变化趋势基本符合要求, 但是对于大角度晶界(即夹角大于  $15^\circ$ )不符合实际情况<sup>[19]</sup>。从图中也发现, 生长过程中大角度晶界所占的数量多于小角度晶界。

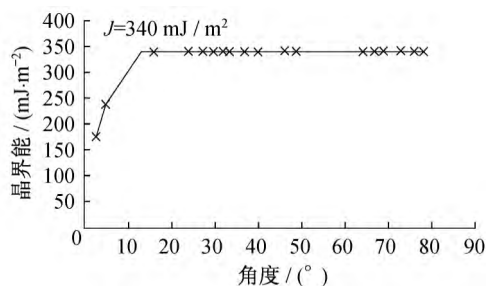


图6 Read-Shockley 公式拟合晶界区格点能量

Fig. 6 Read-Shockley formula fitting energy in grain boundary

图7、图8分别示出了传统动力学蒙特卡洛和双区域动力学蒙特卡洛的模拟结果。将两种 kMC 方法对比发现, 采用双区域 kMC 的模拟方法得到的模拟结果更加接近理论值。

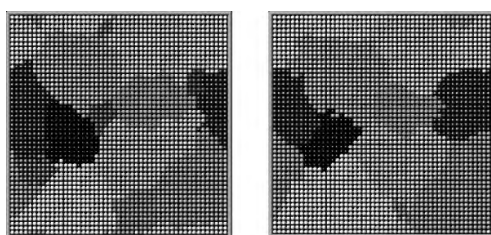


图7 传统动力学蒙特卡洛模拟结果

Fig. 7 Simulation results of traditional kinetic Monte Carlo

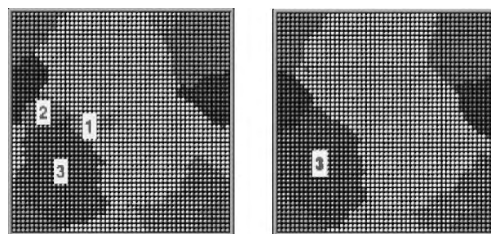


图8 双区域动力学蒙特卡洛模拟结果

Fig. 8 Simulation results of double-region kinetic Monte Carlo

晶粒生长过程中主要有两种拓扑演化机制: 小于六边形晶粒的消失和近邻切换机制。计算晶粒的边数可以通过计算其周围不同晶粒的种类获得。

图7示出了用传统方法模拟得到组织结构, 在相同时间步长的情况下, 与图8对比, 很明显地看出传统方法中没有出现边数小于六边形的晶粒消失的现象出现, 而双区域 kMC 方法中, 边数小于六边形的晶粒消失(如1和2); 边数等于六边形的晶粒(如3)保留, 这符合 Mullins 等<sup>[20]</sup>提出的晶粒长大动力学公式:  $\frac{dA}{dt} = k_N(n-6)$  (其中  $A$  代表晶粒的面积,  $n$  表示晶粒拓扑类型,  $k_N$  表示动力学常数)。我们还发现, 由于各向异性的原因, 导致出现个别晶粒异常长大的现象。

### 3.4 双区域 kMC 与改进 kMC 的对比

本文选取改进 kMC 中比较典型的扩展 Read-Shockley 方法<sup>[11]</sup>与双区域 kMC 方法做实验比较。通过图9和图10可以发现双区域方法比改进 kMC 更接近理论值。

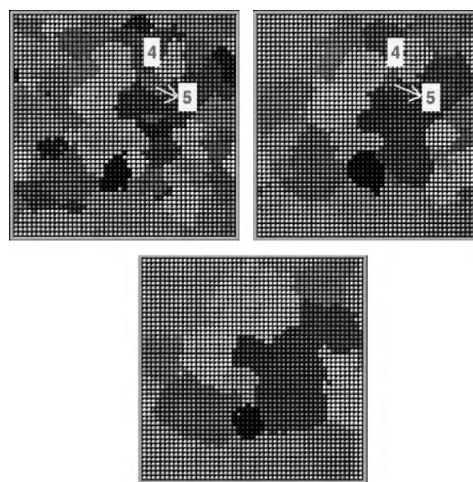


图9 近邻转换机制

Fig. 9 Nearest neighbor conversion mechanism

图9展示的是用双区域 kMC 模拟的近邻转换机制, 而用改进的 kMC 无法得到该结果。近邻转换机制指的是由于在晶粒生长过程中, 晶界能量会

不断减小,因此相邻的两个晶粒交接处的晶界会消失。如图 9 中,4 和 5 这两个相邻的晶粒之间的交界线消失。

图 10 示出了晶粒生长指数比较结果。从图中可以看出,改进的 kMC 的晶粒生长指数超过了 0.51,超过了理论最大值(晶粒长大指数  $n$  与 Hillert<sup>[15]</sup> 指数的关系  $n=1/m$ ,根据统计方法,理论最大值  $n=0.5$ ),而双区域 kMC 符合各向异性的晶粒生长指数的变化规律,即小于各向同性条件下的生长速度,也远小于最大理论值。

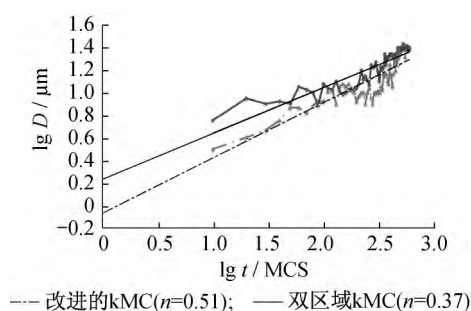


图 10 晶粒生长指数

Fig. 10 Grain growth exponent

#### 4 结束语

本文介绍了利用双区域动力学蒙特卡洛方法对各向异性的晶粒生长进行模拟,解决了传统蒙特卡洛模拟只适用于计算小角度晶界的限制。该方法将势函数通过计算格点能量引入取向数的转换概率计算中,并采用分区域方法减少计算量。双区域动力学蒙特卡洛方法与已有的传统动力学蒙特卡洛方法和改进的动力学蒙特卡洛方法的模拟结果相比,在相同的模拟时间内,双区域方法的微观组织演变更符合晶粒生长特征,晶粒生长指数也更接近理论值。

#### 参考文献:

[1] FAN D, CHEN L Q. Computer simulation of grain growth using a continuum field model[J]. *Acta Materialia*, 1997, 45 (2): 611-622.

[2] YU Q, NOSONOVSKY M, ESCHE S K. On the accuracy of Monte Carlo Potts models for grain growth[J]. *Journal of Computational Methods in Sciences & Engineering*, 2008, 8 (4/6): 227-243.

[3] FU K, FU Y. Kinetic Monte Carlo study of metal organic chemical vapor deposition growth mechanism of GaSb quantum dots[J]. *Applied Physics Letters*, 2008, 93 (10): 101906-10190-3.

[4] ANDERSON M P, SROLOVITZ D J, GRETT G S, *et al.* Computer simulation of grain growth: I. Kinetics[J]. *Acta Met allurgica*, 1984, 32(5): 783-791.

[5] PATTERSON B R, ROWENHORST D J, TIKARE V, *et al.* Affinities for topological arrangements in grain structures[J]. *Acta Materialia*, 2014, 79(30): 411-420.

[6] HOLM E A, HASSOLD G N, MIODOWNIK M A. On misorientation distribution evolution during anisotropic grain growth[J]. *Acta Materialia*, 2001, 49(15): 2981-2991.

[7] ROHRER G S. Influence of interface anisotropy on grain growth and coarsening[J]. *Annual Review of Materials Research*, 2005, 35(1):

[8] YU Q, ESCHE S K. Modeling of grain growth kinetics with Read-Shockley grain boundary energy by a modified Monte Carlo algorithm[J]. *Materials Letters*, 2002, 56: 47-52.

[9] BATTAILLE C C. The kinetic Monte Carlo method: Foundation, implementation, and application[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics & Engineering*, 2008, 197: 3386-3398.

[10] 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.

[11] MALLICK A, VEDANTAM S. Phase field study of the effect of grain boundary energy anisotropy on grain growth[J]. *Computational Materials Science*, 2009, 46(1): 21-25.

[12] HILLERT M. On the theory of normal and abnormal grain growth[J]. *Acta Met Allurgica*, 1965, 13(3): 227-238.

[13] GOTTSTEIN G, SHVINDLERMAN L S, GOTTSTEIN G, *et al.* Grain boundary migration in metals: Thermodynamics, kinetics, applications[J]. *Journal of Engineering Mechanics*, 1998, 126: 888.

[14] GRETT G S, SROLOVITZ D J, ANDERSON M P. Computer simulation of grain growth: IV. Anisotropic grain boundary energies[J]. *Acta Met allurgica*, 1985, 33(85): 509-520.

[15] BORTZ A B, KALOS M H, LEBOWITZ J L. A new algorithm for Monte Carlo simulation of king spin systems[J]. *Journal of Computational Physics*, 1975, 17: 10-18.

[16] GRUBER J, MILLER H M, HOFFMANN T D, *et al.* Misorientation texture development during grain growth: Part I. Simulation and experiment[J]. *Acta Materialia*, 2009, 57 (20): 6102-6112.

[17] RADHAKRISHNAN B, ZACHARIA T. Simulation of curvature-driven grain growth by using a modified monte carlo algorithm[J]. *Met allurgical & Materials Transactions A*, 1995, 26(1): 167-180.

[18] 张继祥, 关小军, 孙胜, 等. 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.

[19] OLMSTED D L, FOILES S M, HOLM E A. Survey of computed grain boundary properties in face-centered cubic metals: I. Grain boundary energy[J]. *Acta Materialia*, 2009, 57(13): 3694-3703.

[20] MULLINS W W. Two-dimensional motion of idealized grain boundaries[J]. *J Appl Phys*, 1956, 27: 900-904.