

利用 Voronoi 图进行金属细观结构三维可视化仿真

卢石磊, 赵正旭*, 张效磊

(青岛理工大学 空间碎片监测与低轨卫星组网联合实验室, 青岛 266525)

摘要:金属材料细观尺度晶体三维模型数值模拟技术为深入研究材料塑性变形机制和材料成型工艺提供了新思路,而细观尺度晶体三维模型的精准度直接影响塑性数值模拟结果的可靠性。因此,利用 Voronoi 图构建方法,通过控制晶粒模型规整度和晶粒度,构建金属材料细观尺度晶体三维模型,能够准确反映金属材料晶粒的大小、形状和空间位置分布等细观结构特征,为分析细观结构对宏观力学性能的影响,进行可靠的数值模拟分析打下基础。

关键词:金属材料;三维模型;Voronoi;规整度;晶粒度

中图分类号: TB303 **文献标志码:** A **文章编号:** 1673-4602(2026)01-0053-07

DOI: 10.3969/j.issn.1673-4602.2026.01.007

The three-dimensional visualization simulation of metal micro-structure by Voronoi

LU Shilei, ZHAO Zhengxu*, ZHANG Xiaolei

(Space Debris Monitoring and LEO Satellite Networking Facility of Collaboration,
Qingdao University of Technology, Qingdao 266525, China)

Abstract: The three-dimensional model numerical simulation technology of mesoscopic crystal of metal materials offers a new idea for further research on material plastic deformation mechanism and material forming process. Nevertheless, the accuracy of the three-dimensional model of mesoscopic crystal directly influences the reliability of the numerical simulation outcomes of plasticity. Therefore, this study employs the Voronoi diagram construction method to create a three-dimensional model of metallic materials at the mesoscopic scale by controlling the regularity and grain size of the grain model. This model accurately reflects the mesoscopic structural features of metallic materials, such as the size, shape and spatial position of the grains, laying a foundation for analyzing the influence of mesoscopic structure on macroscopic mechanical properties and conducting reliable numerical simulation analyses.

Key words: metallic material; three-dimensional; Voronoi; regularity; grain size

航空航天、船舶制造以及高速铁路等领域向深空、深海快速发展,苛刻的工作环境对于高端装备材料

收稿日期:2024-03-05

基金项目:装备预先研究领域基金(80904010501)

作者简介:卢石磊(1989—),男,河北邢台人。在读博士,研究方向为材料结构设计方法。E-mail:18931996009@163.com。

* 通信作者:赵正旭(1960—),男,山东青岛人。博士,教授,主要从事航天可视化与遥操作方面的研究。

E-mail:zhaozhengxu@qut.edu.cn。

力学性能的要求越来越多元化,材料学单一学科“试错法”实验研究难以满足工业生产需求^[1]。鉴于金属材料的细观组织结构对宏观机械和力学性能的影响,金属材料变形的本质需要在细观尺度上进行更深层次的理论研究和探索^[2-3]。现代材料学和物理理论已经证明,材料多晶体结构排列的无序性可以使宏观金属材料塑性变形行为保持均匀性^[4]。因此数值模拟、计算机图形学以及虚拟现实技术的快速发展,使利用有限元数值模拟方法进行金属材料细观结构研究成为可能^[5]。

K-B-W 自洽模型^[6-7]和 Hill 自洽模型^[8]利用球体和椭球体代替金属晶粒模拟多晶体的变形,但此方法无法形成空间致密结构,影响晶体弹塑性变形的应力-应变响应;LIN 等^[9-10]通过建立空间正六面体立方晶格结构模拟细观多晶体结构,并采用等效面力法模拟了多晶体弹塑性变形响应,满足了空间结构的致密性要素,但是与真实晶粒结构形状存在较大差异;LIU 等^[11]利用 Neper 软件建立 Voronoi 图多晶模型,基于深度学习和 CPFEM 对异质多晶的微孔损伤进行统计预测;郑战光等^[12]开发了 Voronoi 图多晶体模型,实现了用 CPFEM 模拟的粗糙网格划分方法;张江湖等^[13]基于 Voronoi 图晶体建模方法建立了多晶体之间有晶界的模型;王姝予等^[14]在研究 CrMnFeCoNi 高熵合金拉伸断裂时晶界处的损伤演化和裂纹扩展力学行为时,建立了基于三维 Voronoi 图晶体模型的 Cohesive 单元晶界模型。

在金属材料的微细观尺度变形中,研究者们对实际晶体中存在的多形态晶体结构模型的研究较少,对于金属材料晶体结构存在的晶粒形状、尺寸随机且位置分布不可控的问题,缺乏有效的构建方法^[15]。然而建立符合金属材料实际结构的晶体模型对研究细观晶体变形机制,提高晶体塑性变形数值模拟的可靠性以及细观尺度材料结构设计有重要意义^[16]。本文提出一种基于 Voronoi 图利用数值建模方法对金属晶体细观结构进行三维可视化仿真的方法,探究多晶体晶粒间变形物理机制。

利用 Voronoi 图进行金属细观结构三维可视化仿真并结合模型规整度控制和晶粒度控制方法得到的金属结构三维模型能够准确反映金属材料晶粒的大小、形状和空间位置等细观结构特征,进而分析细观结构对宏观力学性能的影响^[17-18],且通过将 Voronoi 图与晶体塑性理论相结合,可以模拟面心立方多晶集合体在单轴单向拉伸过程中的应力-应变响应,真实反映金属材料的应力随应变速率增加而变化的规律。

1 Voronoi 图建模原理

1.1 二维 Voronoi 图

Voronoi 图被定义为区域内相邻两点的垂直平分线所组成的连续多边形域,即对于给定种子点集合 P ,依据最临近原则,每个多边形域包含且仅包含种子点 P_i ,且域内的任意一点到 P_i 的距离比其他点更近。任意种子点集合 $P = \{P_1, P_2, \dots, P_n\}$ 中的 P_i 和拥有边界 Ω 的空间区域 R 被 Voronoi 图多边形剖分成任意单域 R_i ,表示为

$$R_i = \{x \in \mathbb{R}^2 \mid d(x, P_i) \leq d(x, P_j), i = \{1, 2, 3, \dots, n\}, i \neq j\} \quad (1)$$

式中: \mathbb{R}^2 为平面直角坐标系; $d(x, P_i)$ 为点 x 和 P_i 之间的欧几里得距离。

Voronoi 图结构如图 1 所示。

Voronoi 图作为一种空间结构剖分算法,是对二维平面图形或三维立体图形基体的结构划分,而基体图形被划分成 Voronoi 图结构区域的数量以及形状取决于基体图形内种子点的分布数量和分布紊乱程度,因此可以通过控制种子点坐标改变 Voronoi 图的封闭凸多边形形状,控制种子点分布密度改变 Voronoi 图的封闭凸多边形大小。

1.2 三维 Voronoi 图结构

三维立体 Voronoi 图晶体建模与二维平面 Voronoi 图建模方法相似,将 Voronoi 图种子点

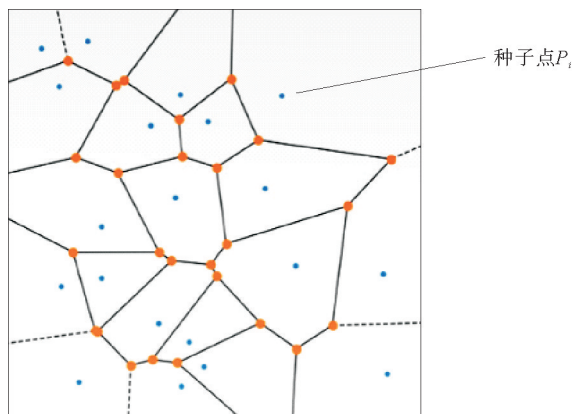


图 1 Voronoi 图结构

分布在三维空间内,用空间垂直平分面代替平面垂直平分线即可获得对应的三维 Voronoi 图立体结构。图 2 分别是以正方体、圆柱体和球体为基体并随机植入 100 个种子点生成的三维 Voronoi 图立体结构。

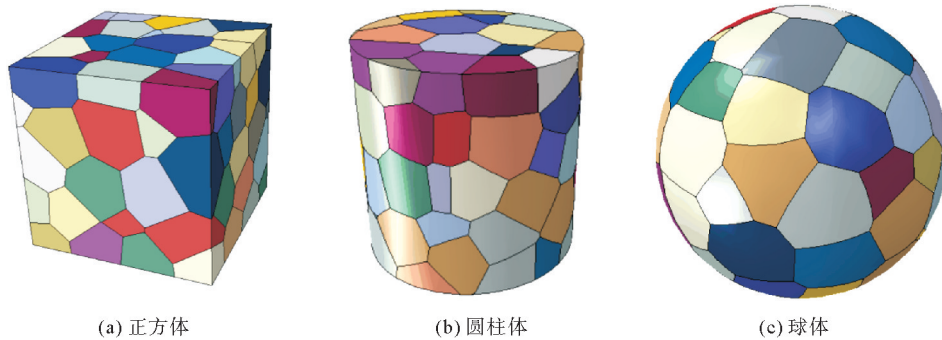


图 2 三维 Voronoi 图立体结构

2 Voronoi 图晶体模型构建

根据 Voronoi 图的结构特点,利用 ABAQUS 软件构建基体几何图形,通过 Python 生成种子点并进行网格划分得到单元空间排布,生成晶粒的基础模型。

Voronoi 图算法生成模型不拘泥于图形结构形式,可以对任意二维或三维图形进行剖分生成细观 Voronoi 图结构,且 Voronoi 图算法剖分空间结构不受基体形状的限制,可以对任意几何结构进行剖分。基体边界会对边界处 Voronoi 图结构进行切割布尔运算,因此在基体边界处无法形成完整的 Voronoi 图结构。Voronoi 图算法生成晶粒模型过程如下:

- 1) 建立二维或三维基体几何图形,在基体图形内插入种子点;
- 2) 判断设置的种子点是否存在四点共圆(圆内无其他点)种子点,如果不存在,直接利用 Voronoi 图算法对基体图形进行剖分,生成 Voronoi 图晶体几何模型;如果存在,则在圆内插入干扰种子点后利用 Voronoi 图算法生成晶体几何模型。

晶体模型生成流程如图 3 所示。

3 晶体模型的形态控制

平衡状态的金属材料细观组织晶体是分布均匀且大小相同的,但由于界面能的存在,晶粒界面会发生界面转动以及曲面晶界的平直化运动,最终形成的平衡态组织形貌呈无规律状分布,且彼此之间存在相互制约力和影响力,而金属材料细观组织的晶体结构模型的精准度会影响结构数值模拟结果的可靠性。因此需要通过改变 Voronoi 图种子点坐标和密度的方式进行晶体模型规整度控制和晶粒度控制。

3.1 模型规整度控制

由于金属材料晶粒分布的随机性,晶体模型不需要与真实晶体组织形貌完全重合,但是应保持晶体模型和真实晶体结构晶粒尺寸和形状的相似性,即对晶体模型晶粒规整度进行控制。采用对平衡态正六边形 Voronoi 图晶体结构进行干扰控制,对有序种子点坐标进行排列调整得到需要的晶体模型的方式进行规整度控制。晶体模型规整度控制具体过程如下:

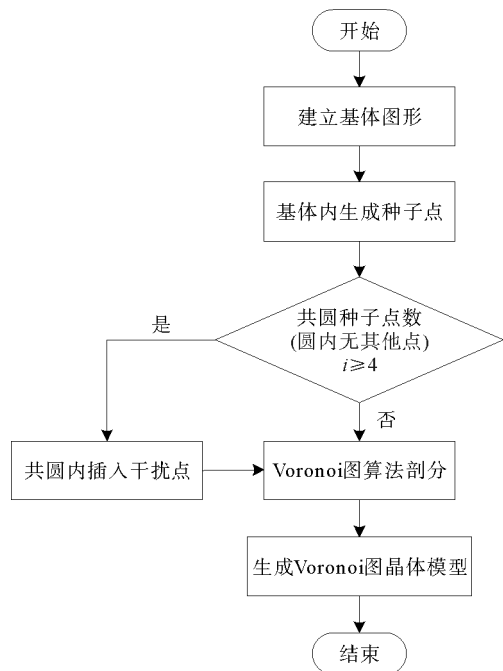


图 3 Voronoi 图晶体模型构建流程

1) 插入 Voronoi 图晶体结构种子点。相邻种子点的坐标值差为 $k = x_{i+1} - x_i$ ($k > 0$), 偏移因子为 λ ($0 \leq \lambda \leq 1$), 则每个坐标的偏移量为 λk , 而要改变原晶体模型规整度, 对坐标进行偏移时应当随机增加或减少偏移量, 且每个坐标的偏移量应有所区别, 因此利用随机函数 $\text{random}(-\lambda k, \lambda k)$, 在区间 $(-\lambda k, \lambda k)$ 内生成一个随机数作为坐标的偏移量, 设为 m 。

2) 遍历每一个坐标点, 通过随机函数 $\text{random}(-\lambda k, \lambda k)$ 进行偏移生成新的种子点坐标, 通过 Voronoi 图算法生成不同规整度晶体模型。

设置 Voronoi 图种子点坐标, 控制晶体模型规整度流程如图 4 所示。

以二维 Voronoi 图为例, 首先改变平衡态正六边形 Voronoi 图结构, 即对原有序种子点坐标 (x_i, y_i) 插入偏移因子, 根据偏移种子点坐标重新生成晶体模型, 具体过程如图 5 所示。

在 10×10 的二维正方形 (将尺寸单位设为 1) 基体内插入 100 个种子点, 设置 Voronoi 图算法种子点坐标偏移因子 λ 值分别为 0、0.2、0.4、0.6、0.8、1.0, 得到 6 种不同尺寸形态的单元结构。6 种偏移因子构建的模型如图 6 所示。

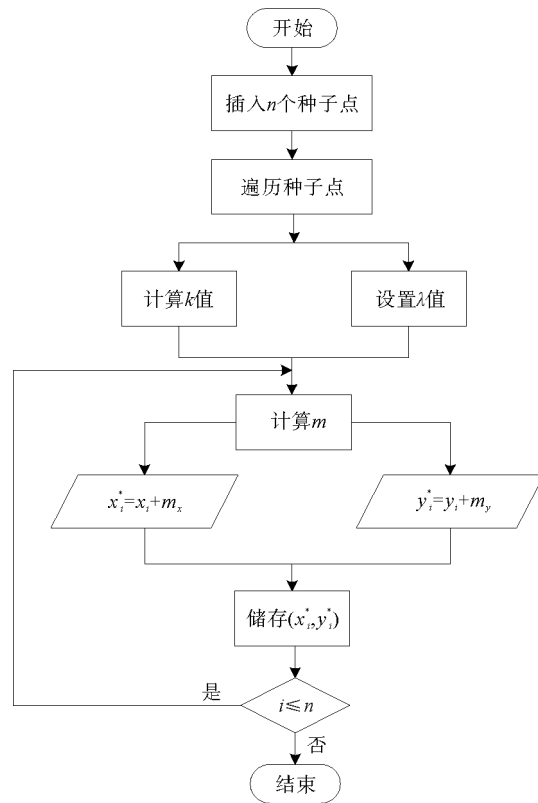


图 4 Voronoi 图晶体规整度控制流程

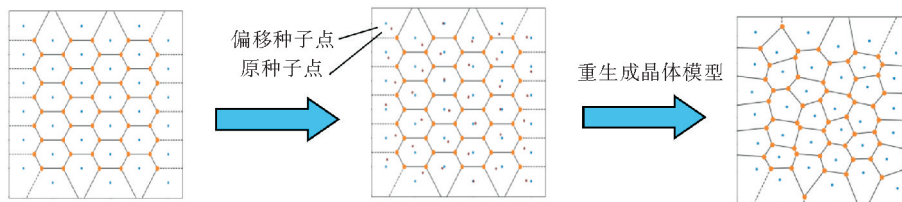


图 5 种子点偏移示意

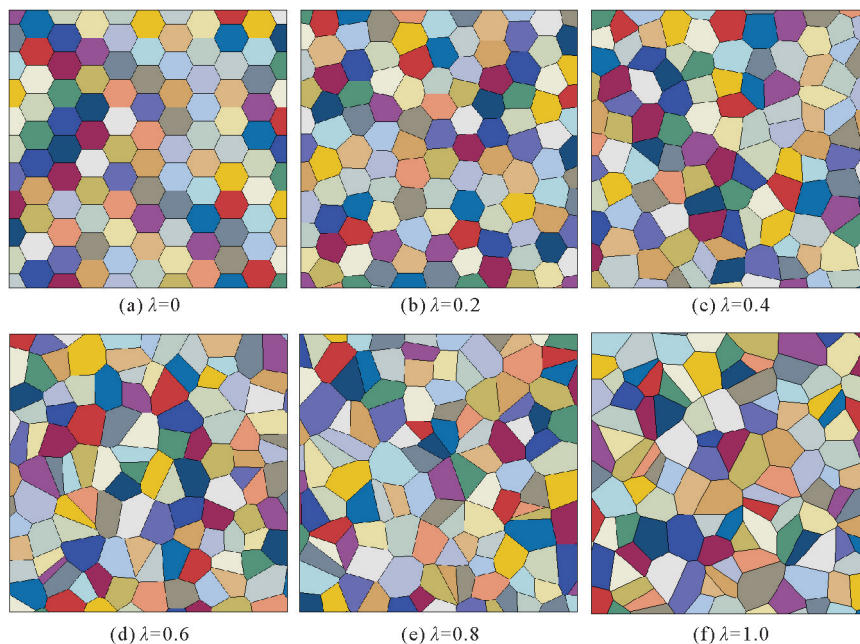


图 6 不同规整度 Voronoi 图

由图 6 可以看出,随偏移因子 λ 值增加,单元形状和大小逐渐多样化,排列分布也越来越无序。当偏移因子 $\lambda=0.2$ 时,单元形状基本呈六边形形态,单元位置排列分布也与 $\lambda=0$ 时相似;随偏移因子 λ 值逐渐增加,单元形状愈发不规则,排列分布规律也愈发混乱。当偏移因子 $\lambda=1.0$ 时,单元已经是随机排列,从正六边形规则形状变为无规律的不规则形状。

3.2 模型晶粒度控制

利用平衡态正六边形晶体模型种子点坐标偏移方法实现了晶粒尺寸的规整度控制,但是建立的晶体模型仅适用于材料中晶粒尺寸差距较小的等轴晶粒结构,对于晶粒尺寸相差几倍或几十倍的多晶粒度晶体的金属材料还需要进行晶粒度控制,以实现对多晶粒度晶体结构的真实描述。对种子点密度进行迭代,通过控制 Voronoi 图结构种子点密度的方法构建多晶粒度晶体模型。由初始 Voronoi 图晶体模型经过 1 次迭代得到的多晶粒度晶体模型如图 7 所示。

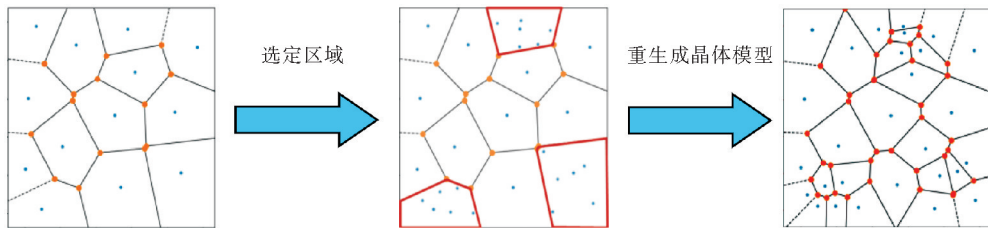


图 7 种子点区域密度叠加示意

Voronoi 图结构中每一个凸多边形只被 1 个种子点占据,凸多边形的数量和种子点数量呈正相关,因此,在基体内选择特定区域增加种子点密度将使选定区域被划分成新的 Voronoi 图凸多边形。金属材料中细小晶粒的组织排布复杂,对于多晶粒度晶体结构的模型构建可以在材料细小晶粒实际所在位置增加种子点密度,生成多晶粒度晶体模型。选择晶体中较大尺寸的晶粒,生成晶体模型,然后在实际材料中细小晶粒所对应的 Voronoi 图凸多边形中增加种子点密度,通过重复此步骤生成需要的多晶粒度晶体模型。多晶粒度晶体建模主要步骤如下:

1) 根据金属材料的大晶粒分布情况生成初始 Voronoi 图晶体模型,对比实际晶体结构中细小晶粒所在位置,选择初始晶体模型中的凸多边形区域适当增大种子点密度,将初始种子点和插入种子点共同作为二代 Voronoi 图种子点,重新生成 Voronoi 图晶体模型;

2) 对比二代晶体模型与金属材料晶体结构,再次选择需要增大种子点密度的凸多边形区域,重复第 1) 步,生成三代晶体模型,并依次迭代生成晶体模型。

具体流程如图 8 所示。

随迭代次数的增加,模型中晶粒细化程度随之增加。其中多晶粒度晶体模型中改变部分区域的种子点密度,用于细化选定区域晶粒的同时也会影响其他区域的晶粒形状尺寸。因此,在构建多晶粒度晶体模型时,初始 Voronoi 图晶体模型的晶粒尺寸可以适当增加,以提高晶体建模时的容错性;此外,布置区域的种子点时也应适当减小密度值,增加建模的迭代次数,以获得更高质量的多晶粒度晶体模型。经过 4 次迭代得到的多晶粒度晶体模型如图 9 所示。

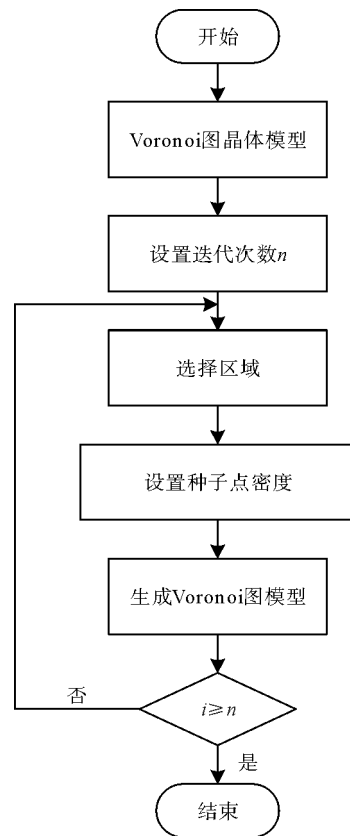


图 8 多晶粒度晶体建模示意

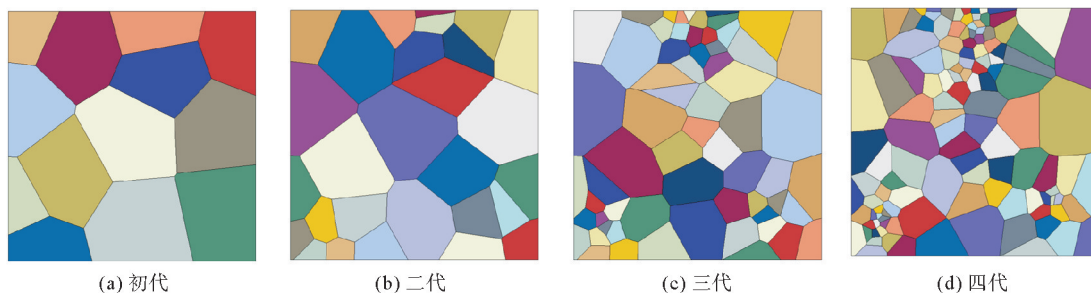


图9 多晶粒度模型

三维多晶粒度晶体模型的构建方法与二维模型类似,即将二维晶体模型规整度控制和晶粒度控制方法应用至三维晶体模型,在三维空间 Voronoi 图凸多面体内增加种子点密度,并进行种子点的偏移和密度迭代,实现结构单元的尺寸、形状以及位置分布可控,得到的金属材料三维多晶粒度晶体模型如图 10 所示。在晶体三维模型中不同形状和大小的单元即为金属结构晶粒,形状毫无规律,尺寸大小不一,且呈无序状分布,符合金属材料晶粒外形和分布的随机性特点。

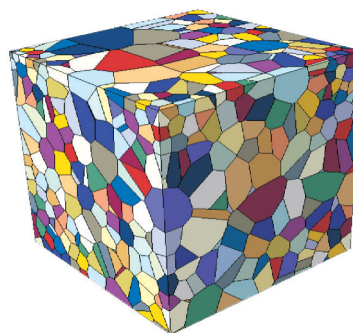


图10 三维多晶粒度晶体模型

4 结论

Voronoi 图凸多边形的形状和尺寸由种子点的坐标和密度决定,利用晶粒组织平衡态的六边形晶体模型,通过模型规整度控制和晶粒度控制方法,建立了对应的二维晶体模型,将二维晶体模型构建方法应用至三维模型构建,得到三维多晶粒度晶体模型,并实现了晶体模型形状、尺寸和位置分布控制。在构建 Voronoi 图单元时,通过插入干扰点的方法,消除了原 Voronoi 图单元中的四叉(或大于 4)界面结构,使最终生成的晶体模型更加符合真实晶体界面特征。

构建的三维晶体模型越接近金属晶体的实际结构,得到的力学模拟结果越接近材料的实际变形情况,但影响三维晶体模型的力学模拟结果的因素包括晶体内的杂质和第二相等,本文仅对晶体模型的晶粒形状和尺寸进行了控制,因此对于晶体结构力学性能的预测和模拟会有偏差。下一步将在现有的晶体模型的基础上,考虑晶体中杂质和第二相结构的建立方法,并进行有限元数值模拟,分析细观多晶体的变形特点以及晶体取向对多晶体变形的影响。

参考文献(References):

- [1] 符锐,冯宗强,黄晓旭. 位错三维表征技术[J]. 中国材料进展, 2021, 40(6): 417-426.
FU Rui, FENG Zongqiang, HUANG Xiaoxu. Three-dimensional characterization techniques of dislocations[J]. Materials China, 2021, 40(6): 417-426.
- [2] 李海勇,李赛毅. 纯 Al<111>对称倾斜晶界迁移行为温度相关性的分子动力学研究[J]. 金属学报, 2022, 58(2): 250-256.
LI Haiyong, LI Saiyi. Effect of temperature on migration behavior of <111> symmetric tilt grain boundaries in pure aluminum based on molecular dynamics simulations[J]. Acta Metallurgica Sinica, 2022, 58(2): 250-256.
- [3] 张登辉. 面向增材制造的镂空结构复合组体 CAD 建模方法研究[D]. 济南: 山东大学, 2018.
ZHANG Denghui. Research into the CAD modeling method of the hollow structure composite for additive manufacturing[D]. Jinan: Shandong University, 2018.
- [4] 张效磊. 多形态晶体模型构建及力学模拟研究[D]. 青岛: 青岛理工大学, 2022.
ZHANG Xiaolei. Construction of polymorphous crystal model and mechanical simulation[D]. Qingdao: Qingdao University of Technology, 2022.

- [5] 李宏伟,孙新新,詹梅,等. 多晶体材料微观组织三维有限元建模方法[J]. 塑性工程学报,2020,27(7):6-12.
LI Hongwei,SUN Xinxin,ZHAN Mei,et al. Microstructure based 3D finite element modeling methods of polycrystalline materials[J]. Journal of Plasticity Engineering,2020,27(7):6-12.
- [6] KRONER E. Zur plastischen verformung des vielkristalls on the plastic deformation of polycrystals deformation plastique des polycristaux[J]. Acta Metallurgica,1961,9(2):155-161.
- [7] BUDIANSKY B,TAI T W. Theoretical prediction of plastic strains of polycrystal[C]//Proceedings of the 4th US National Congress of Applied Mechanics. Chicago,1962:1175.
- [8] HILL R. Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids,1965,13(2):89-101.
- [9] LIN T H,ITO Y M,YU C L,et al. A new slip theory of plasticity[J]. Journal of Applied Mechanics,1974,41(3):587-592.
- [10] LIN T H,ITO Y M. Theoretical plastic stress-strain relationship of a polycrystal and the comparisons with the von Mises and the Tresca plasticity theories[J]. International Journal of Engineering Science,1966,4(5):543-561.
- [11] LIU J,HUANG M,LI Z,et al. A deep learning method for predicting microvoid growth in heterogeneous polycrystals[J]. Engineering Fracture Mechanics,2022,264:108332.
- [12] 郑战光,汪兆亮,冯强,等. 一种基于 Voronoi 图的多晶体有限元建模方法[J]. 广西大学学报(自然科学版),2016,41(2):460-469.
ZHENG Zhanguang,WANG Zhaoliang,FENG Qiang,et al. A method of polycrystal finite element modeling based on Voronoi diagram[J]. Journal of Guangxi University (Natural Science Edition),2016,41(2):460-469.
- [13] 张江溯,李旭东. ABAQUS 二次开发在材料微结构计算中的应用[J]. 甘肃科学学报,2020,32(3):34-39.
ZHANG Jiangsu,LI Xudong. Application of ABAQUS secondary development in microstructural calculation of materials[J]. Journal of Gansu Sciences,2020,32(3):34-39.
- [14] 王姝予,宋世杰,陆晓翀,等. CrMnFeCoNi 高熵合金拉伸断裂的晶体塑性有限元模拟[J]. 机械工程学报,2021,57(22):43-51.
WANG Shuyu,SONG Shijie,LU Xiaochong,et al. Tensile fracture behavior of the CrMnFeCoNi high entropy alloy: A crystal plasticity finite element simulation[J]. Journal of Mechanical Engineering,2021,57(22):43-51.
- [15] 盛战鹰,贾彬,王汝恒,等. 基于内聚力模型的复合裂纹耦合扩展多尺度数值模拟研究与实验验证[J]. 材料导报,2022,36(4):199-208.
SHENG Ying,JIA Bin,WANG Ruheng,et al. Multiscale numerical simulation based on cohesive zone model and experimental verification of coupling compound crack propagation[J]. Materials Reports,2022,36(4):199-208.
- [16] ORHUN B,SADIK S A,TUNCAY Y. The influence of thickness/grain size ratio in microforming through crystal plasticity[J]. Procedia Structural Integrity,2022,35:228-236.
- [17] 黄丽容,罗开臣,谢俊杰,等. 基于 Voronoi 图的 WC 基硬质合金微观结构建模及优化[J]. 稀有金属,2023,47(10):1369-1379.
HUANG Lirong,LUO Kaichen,XIE Junjie,et al. Microstructure modeling and optimization of WC-based cemented carbide based on Voronoi diagram[J]. Chinese Journal of Rare Metals,2023,47(10):1369-1379.
- [18] NULAND T F W V,BELOTTI L P,DOMMELEN J A W V,et al. A novel 3D anisotropic Voronoi microstructure generator with an advanced spatial discretization scheme[J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering,2021,29(8):085014.

(责任编辑 赵金环;英文校审 程文华)