

复相材料中第二相的空间分布状况的描述方法综述

汪海英 尚嘉兰

中国科学院力学研究所非线性力学实验室, 北京 100080

刘国权 秦湘阁 宋晓艳

北京科技大学材料科学与工程学院, 北京 100083

摘要 对复相材料二维截面中第二相的空间分布状况的多级判别的模式识别方法作了较全面的综述, 并对第二相的三维空间分布状况的一些体视学观测研究方法, 尤其是近年来发展的新方法作了较为系统的介绍. 指出在实际材料微结构设计和性能预测的过程中, 应针对所研究的具体的材料特点、具体的机械性能类型以及材料性能力学计算工作的需求来确定恰当的描述尺度, 选择合适的描述方法, 以确定夹杂物或第二相的空间分布对材料机械性能的定量影响, 尤其应注意发挥体视学在其中的重要作用.

关键词 复相材料, 第二相, 空间分布, 偏聚, 体视学

1 引言

与常规的单相工程材料相比, 两相材料以及多相材料(如合金和复合材料等)以其优越的性能引起了世界范围的广泛关注^[1]. 随着两相材料研究的深入发展, 了解两相材料的性能与其微观结构的相互关系就显得尤为重要. 显然, 两相材料中第二相的形态、平均大小及尺寸分布, 含量, 第二相在基体中的空间分布状况以及与基体内界面的相互作用等都是影响两相材料机械性能的重要微结构因素^[2]. 目前, 相对于其它因素的影响而言, 第二相的空间分布状况对材料机械性能(如强度、韧性、疲劳性能、耐磨性)等的影响的研究还很少, 而要研究两相材料性能与第二相分布的关系, 就需要建立和选择一种有效地描述第二相分布状况的方法, 这对于评价材料的生产工艺, 优化材料的微观结构设计, 预测和提高材料机械性能具有非常重要的意义; 此外, 这些方法对于描述材料中小裂纹等其它夹杂的空间分布也具有一定的借鉴意义. 本文即是对近年来这方面文献的综述, 主要包括第二相在基体中的二维空间分布状况的多级判别的模式识别和三维空间分布状况的体视学表征两方面.

第二相在基体中的空间分布状况可定性地分为均匀的(图1(a))、随机的(图1(b))、有偏聚的(图1(c), (d))三种类型, 其中有偏聚的分布又可分成聚集成团(图1(c)), 聚集成线(图1(d))

收稿日期: 1998-08-26, 修回日期: 2000-06-02

以及聚集成面(层状分布)等多种型式. 在实际材料中, 第二相均匀有序地分布是比较少见的, 大多数材料中第二相的分布是随机的或有偏聚的状态. 因此, 描述第二相空间分布的过程是一个多级判别的模式识别过程^[3]: 第一级判别, 确定第二相的分布是均匀的, 随机的, 还是有偏聚的; 对于有偏聚的分布再进行第二级判别以区分其聚集类型, 以及聚集体的分布状况. 有效地描述第二相分布的方法还应在此基础上建立一个或几个参数来描述分布状况, 以便建立分布状况与材料机械性能的定量关系. 目前, 广泛采用的描述方法有统计决策学的方法和数学形态学的方法. 第一级判别中用到的多为统计决策学的方法, 第二级判别中两种方法都有应用.

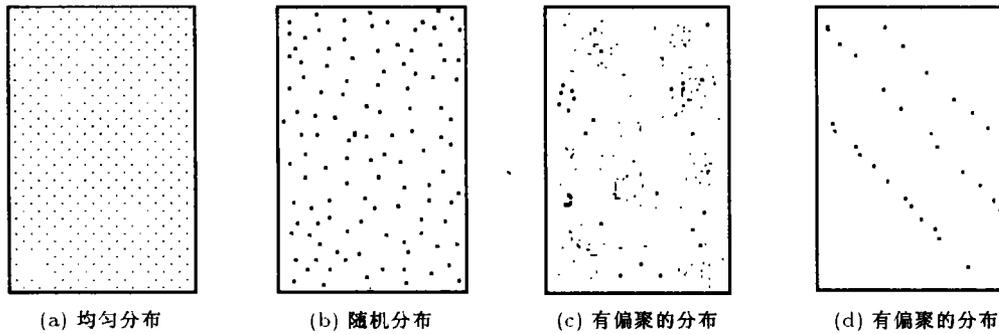


图1 第二相的几种分布状态

2 第一级判别

第一级判别的目的是为了区分第二相的空间分布状况是均匀的, 随机的还是有偏聚的, 并且判断第二相的分布是否是各向同性的. 用于第一级判别的方法主要是统计决策学的方法, 如基于第二相数密度, 第二相面积百分比, 第二相间距以及基体平均截断长度的统计分析方法.

2.1 基于第二相数密度的描述方法

考察平面上第二相的分布, 假设各第二相的粒度相差不大, 将材料的观察表面划分成若干个面积相等的小区域, 若第二相粒子的空间分布状况是完全随机的, 则各小区域内的第二相粒子的个数满足泊松分布, 则其数密度满足正态分布^[4].

为评价实际材料中第二相的分布情况, 可将材料的表面划分成小区域, 测出各区域内粒子数密度 N_A , 作出数密度的直方图或者分布曲线, 统计出其平均值 N_A 和标准差 s_{N_A} , 算出其方差系数 CV_{N_A} , CV_{N_A} 表示了第二相分布的均匀性 (均匀分布时, $CV_{N_A} \approx 0$); 对于非均匀的分布, 可再用 χ^2 和偏度、峰度检验法来检验实际分布的随机性, 计算表征 N_A 分布曲线的偏度和峰度的两个参数 β_1 和 β_2 (随机分布时, N_A 满足正态分布, $\beta_1 = 0, \beta_2 = 3.0$), 由 β_1 和 β_2 与正态分布时 β_1 和 β_2 的差异就可了解第二相分布的随机性的程度^[5~8].

另一种基于数密度的分析方法如下: 建立一个行、列数与材料表面局域划分相同的矩阵, 测出材料表面各局域的第二相数密度 N_A , 若 N_A 大于某一临界值 N_{Ac} , 则在矩阵对应位置置 1, 否则置 0 (此矩阵称为 N_A 的 0-1 矩阵). 假设矩阵中所有元素的个数 n , 统计矩阵中元素 1 的个数 n_1 及各行、各列中元素 1 的个数 n_{ri} 和 n_{ci} , 再分别统计出 n_{ri} 和 n_{ci} 的标准差 s_r 和 s_c ; 比值 $\eta = s_r/s_c$ 反映了第二相分布的各向异性, 比值 $\rho = n_1/n$ 反映了第二相偏聚的程度 (ρ 越大, 第二相聚集的小区域越多), 比值 $\delta = \eta/\rho$ 反映了颗粒间分离的程度 (δ 越小, 颗粒间离得越近). 也可以将所测的 N_A 作为矩阵的元素, 统计出各行、各列的 N_A 的平均值 N_{Ari} 和 N_{Aci} , 分别统计出和的方差 s_r 和 s_c , 及整个矩阵的方差 s , 则 $\eta' = s_r^2/s_c^2$ 反映了第二相夹杂分布的各向异性的

程度.

图 2(a) 和图 2(b) 是同种材料中横、纵截面的照片, 图 3(a) 和图 3(b) 是对应的数密度直方图及拟合的分布曲线, 表 1 为对应表面的 N_A 的 0-1 矩阵及 N_A 矩阵的统计结果. 由图 2 可看出 a 截面比 b 截面的粒子分布更随机, 图 3(a) 中的拟合曲线的偏度 β_1 、峰度 β_2 比图 3(b) 更接近于随机分布时的 β_1 和 β_2 ; 图 2(a) 中夹杂分布大致呈各向同性, 图 2(b) 中的夹杂的间距比图 2(a) 中的大, 且夹杂的分布有取向性, 表 1 中横截面对应的 $\eta, \eta' \sim 1$, 纵截面对应的 δ 比横截面对应的 δ 大, 截面对应的 η, η' 都不等于 1. 这个例子表明, 基于夹杂数密度来描述夹杂的空间分布是可行的.

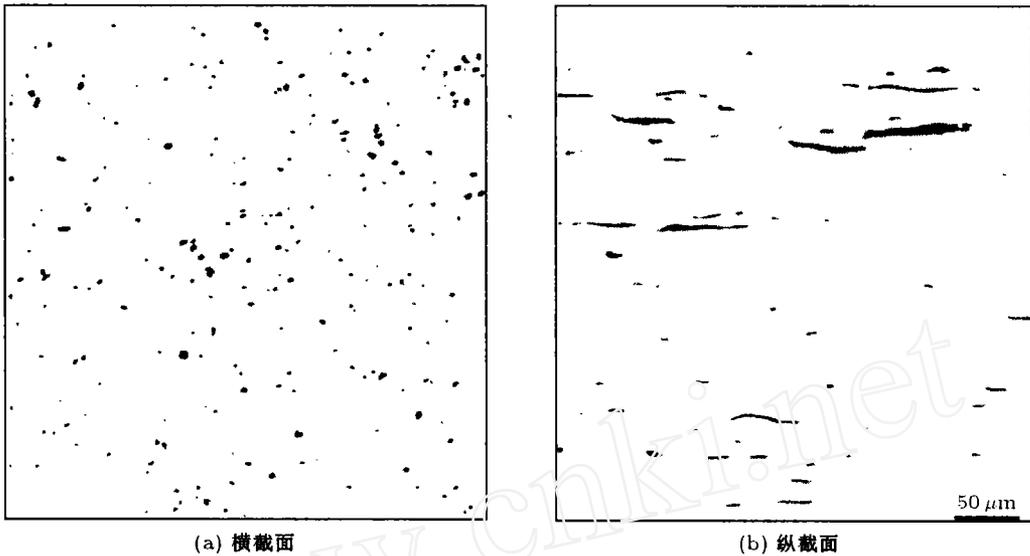


图 2 不锈钢横纵截面的金相照片 (基体: 不锈钢, 夹杂: 硫化物)

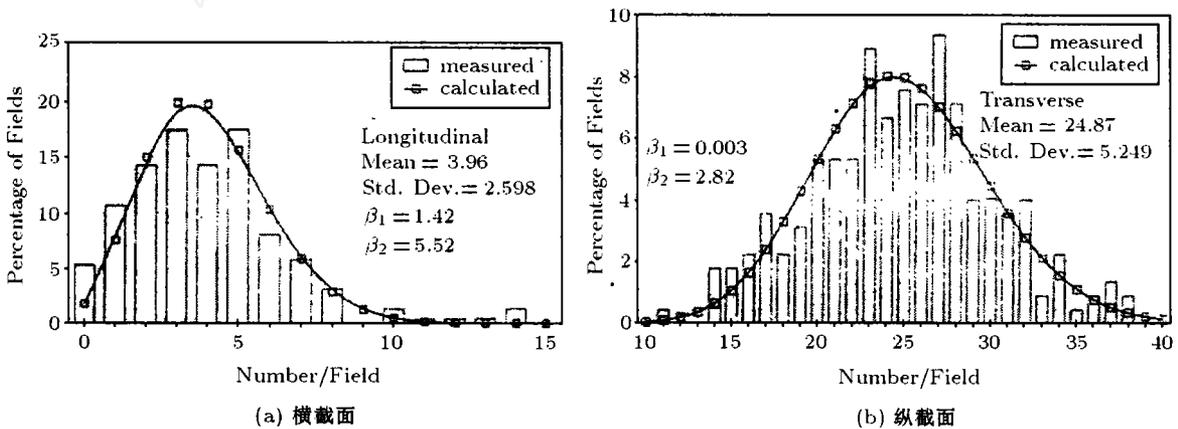


图 3 图 2 中的 N_A 的直方图及其拟合曲线

基于第二相数密度的分析方法比较简单, 实施也很方便, 但由于这种方法不考虑第二相夹杂的粒度和形状, 因此当第二相夹杂的粒度差异较大或夹杂的长细比很大时, 判断结果会较强

地依赖于小区域的划分情况。此外，当第二相的粒度较小且分布很稀疏时，就必须增大放大倍数来发现夹杂，这就意味着视场很小，从而要求很多的视场来达到足够的统计精度，这时用这一类方法就不太方便了。

表 1 对图 2(a) 和图 2(b) 的 N_A 的 0-1 矩阵及 N_A 矩阵的统计结果

平面	s_r	s_c	η	ρ	δ	η'
横截面	2.236	2.171	1.03	0.533	1.931	0.94
纵截面	2.8	1.457	1.92	0.524	3.163	0.38

2.2 基于第二相面积百分比的分析方法

当第二相粒子的空间分布是完全随机时，材料表面各小区域内的第二相的面积百分比满足正态分布。

与基于夹杂数密度的分析方法类似，将试样表面划分成若干个局域，测出各局域的第二相面积百分比 A_f ，统计出其平均值 \bar{A}_f 和标准差 s_A ，算出方差系数 CV (CV 反映了第二相在母相中分布的均匀性。对于均匀分布， $CV = 0$)。也可构造 A_f 的 0-1 矩阵和 A_f 矩阵，分别统计出矩阵中各行、各列元素平均值，再统计出各行、各列平均值的标准差 s_r 和 s_c ，算出 $\eta, \rho, \delta, \eta'$ [9]。表 2 分别是对图 2(a) 和图 2(b) 的 A_f 的 0-1 矩阵和 A_f 矩阵的统计结果，它与表 1 的结果基本一致 (这是因为两个表面的夹杂物的粒度都比较均匀)。

表 2 对图 2(a) 和图 2(b) 的 A_f 的 0-1 矩阵及 A_f 矩阵的统计结果

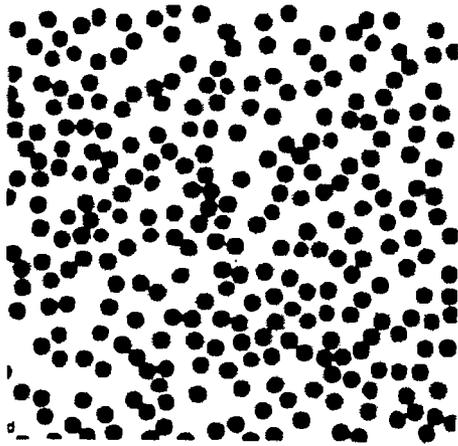
	s_r	s_c	η	ρ	δ	η'
横截面	1.759	1.877	0.337	0.469	1.917	1.04
纵截面	2.61	2.193	1.19	0.356	3.347	0.46

假设 \bar{a} 和 σ_a 分别为观察表面上的单个第二相夹杂的面积的平均值和方差。将材料表面划分成长为 L 的面积相等的正方形小区域，各小区域内第二相的面积百分比 A_f 的平均值为 \bar{A}_f ，方差为 σ ，Hilland 和 Cahn 的分析表明，当第二相夹杂在表面上随机分布时， \bar{A}_f 与 σ 满足

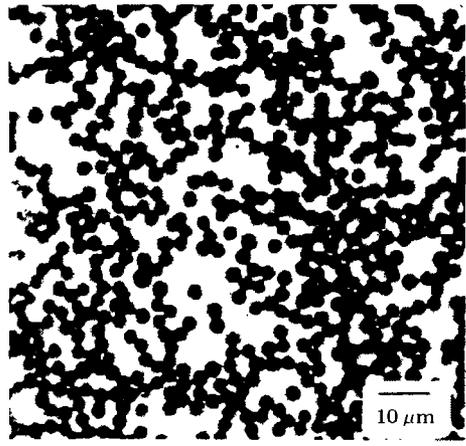
$$\left(\frac{\sigma}{\bar{A}_f}\right)^2 = \frac{\bar{a}}{l^2 \bar{A}_f} \left[\left(\frac{\sigma_a}{\bar{a}}\right)^2 + 1 \right]$$

因此，改变的 L 值，统计出不同值对应的 \bar{A}_f 和 σ ，以 $\log \left[\left(\frac{\sigma}{\bar{A}_f}\right)^2 \right]$ 和 $\log \left[\frac{1}{L^2 \bar{A}_f} \right]$ 为轴作曲线，若第二相随机分布，那么将得到一条斜率为 1 的直线，比较实际曲线与这条直线的差异，即可定性地判断第二相分布的随机程度 [10]。

图 4(a) 为由计算机生成的含有随机分布的圆形夹杂的正方形面 [11]，图 4(b) 为实际材料的某一表面。取 $L = L_0, L_0/2, L_0/4, L_0/8, \dots, L_0/2^n$ ，统计出对应的 \bar{A}_f 和 σ ，再作 $\log \left[\frac{1}{L^2 \bar{A}_f} \right]$ 与 $\log \left[\left(\frac{\sigma}{\bar{A}_f}\right)^2 \right]$ 的关系曲线。图 5(a), 5(b) 所示分别为对这两个面取不同 L_0 时所作的曲线。由图 5(a) 可看出，不同 L_0 对应的拟合直线非常接近，当夹杂随机分布时，其斜率大致为 1；图 5(b) 中实际测量曲线的拟合直线与理想随机分布曲线的斜率的差异反映了图 4(b) 的夹杂分布的随机性程度。

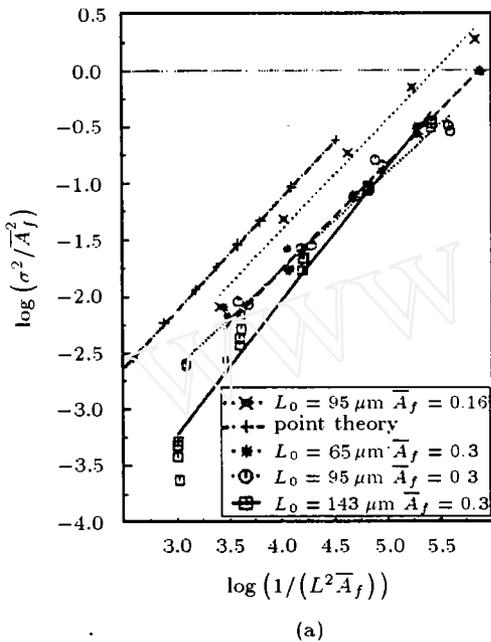


(a) 计算机生成的含随机分布的圆形夹杂的表面

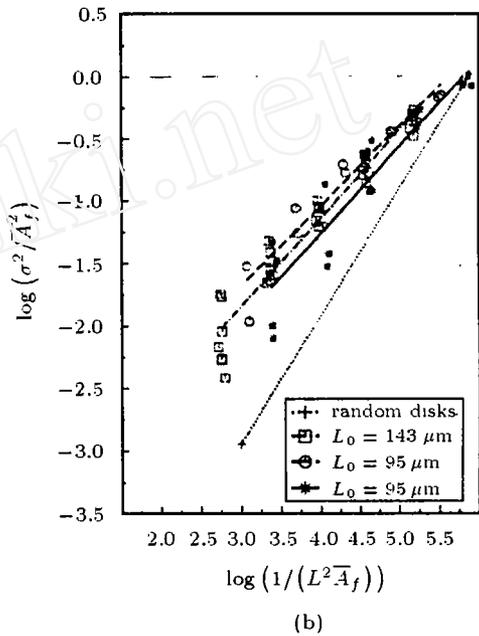


(b) Al_2O_3 纤维增强的 Al-Cu 合金的横截面的金相照片

图 4 计算机生成的含随机分布夹杂的表面以及实际材料的横截面照片



(a)



(b)

图 5 图 4(a), (b) 对应的 $\log \left[\left(\frac{\sigma}{A_f} \right)^2 \right]$ 与 $\log \left[\frac{1}{L^2 A_f} \right]$ 的关系曲线

2.3 基于夹杂间距的描述方法

定义某夹杂的最近邻距离 (r_1) 为该夹杂中心与周围其他夹杂中心间距离的最小值, 若夹杂在空间是完全随机分布的, 那么 r_1 满足以下分布:

$$f(r_1) = 2\pi N_A r_1 e^{-\pi N_A r_1^2}$$

其中, N_A 为夹杂在整个观察表面上的平均数密度. 因此, r_1 的平均值与方差分别为:

$$E(\bar{r}_1) = \frac{1}{2\sqrt{N_A}}, \quad E(s_1^2) = \frac{4-\pi}{4\pi} \cdot \frac{1}{N_A}$$

假设实际材料表面各夹杂的 r_1 的平均值和方差分别为 \bar{r}_1 和 s_1^2 , 定义比值

$$Q = \frac{\bar{r}_1}{E(\bar{r}_1)}, \quad R = \frac{s_1^2}{E(s_1^2)}$$

则对于随机分布, 规则分布, 有偏聚的分布, Q 和 R 有不同的取值范围^[12]:

随机分布: $Q \approx 1, R \approx 1$

规则分布: Q 为 $1 \sim 2, R$ 为 $0 \sim 1$

有偏聚的分布: Q 为 $0 \sim 1, R$ 为 $0 \sim 1$

对于实际材料, 测出各夹杂的 r_1 , 计算出 Q 和 R , 即可定性地了解夹杂的空间分布状况.

Richmond 和他的合作者们提出了一种基于夹杂间距的“狄里克莱”(Dirichlet) 镶嵌的方法^[13], 其作法如下: 在每个夹杂周围作“狄里克莱”区域, 此区域是由到该夹杂中心的距离比到周围其他夹杂中心距离小的全部平面(或空间)点的集合, 这样就将材料中离散的平面(或空间)点转化成为一个二维或三维的网格. k_i 为与第 i 个夹杂所在的“狄里克莱”区域的边数(即周围的“狄里克莱”区域的个数), 统计 k_i 的平均值和方差, 就可以大致了解夹杂的空间分布状况. 若再以某夹杂为中心, 以某一半径 R 作圆, 该圆与周围 $n-1$ 个“狄里克莱”区域相重叠, 则认为这 n 个“狄里克莱”区域构成了一个大小为 n 的块, 在 N 个随机分布的夹杂中, 可形成的大小为 n 的块的个数为 $C_n = Np_1(1-p_1)^{n-1}/n$, 可形成的所有大小块的个数为 $C_A = Np_1 \log p_1 / (p_1 - 1)$, 其中概率 $p_1 = e^{-\pi R^2 N_A}$, N_A 为夹杂的平均数密度. 因此, 测出某一实际材料中的大小为 n 的块的个数, 与随机分布的 C_n 比较, 可以判断夹杂分布的随机性的程度. 另外, 还可定义“狄里克莱”近邻距离 s_j^i ($j = 1, 2, \dots, k_i$) 为第 i 个夹杂与周围第 j 个“狄里克莱”区域中的夹杂中心的距离, 测出各 s_j^i , 作其分布的直方图, 对于有偏聚的分布, s_j^i 的直方图往往分成几段, 对应于较小 s_j^i 值的段反映了偏聚体内部的近邻距离, 对应于较大 s_j^i 值的段反映的是偏聚体之间的距离. 图 6(a) 为某一有偏聚的分布, 图 6(b) 为对应的 s_j^i 的直方图, 直方图左段对应的 s_j^i 较小, 这些间距多是偏聚体内部的间距分布, 直方图右段对应的 s_j^i 较大 (7.45 cm), 反映的是两个聚集团内的夹杂之间的间距分布. “狄里克莱”镶嵌的方法还可用于判别分布的各向异性等.

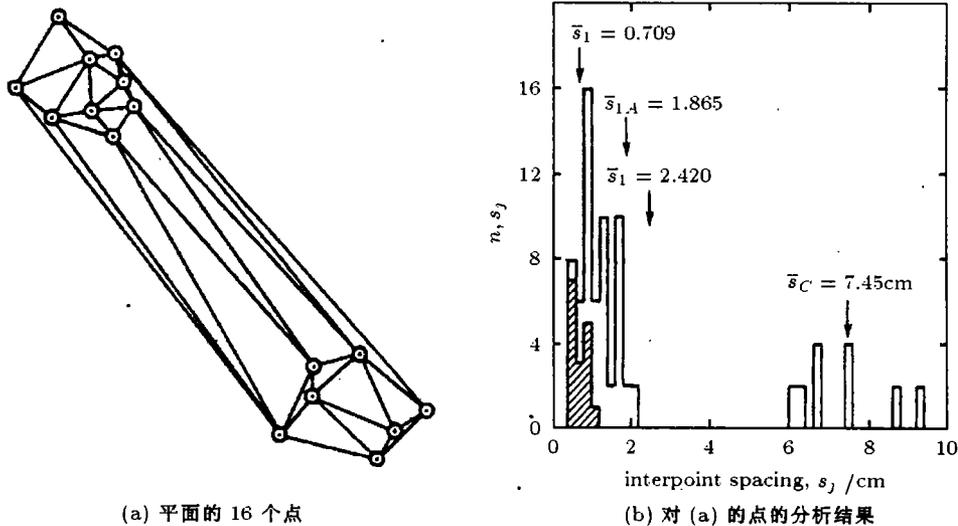


图 6 “狄里克莱”镶嵌的方法对平面的 16 个点的分析

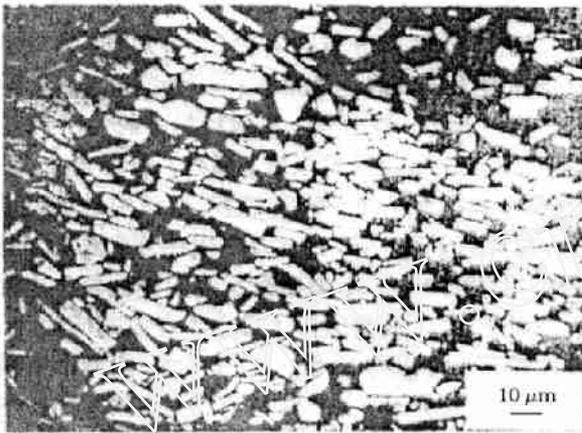
J.J. Lewandowski^[15] 等曾将此方法用于研究 SiCp/Al 中颗粒分布与裂纹扩展路径的关系, 结果表明, 这种方法能较好地表征夹杂的空间分布情况。

基于夹杂间距的描述方法与基于数密度的方法类似, 也忽略了夹杂的大小、形状等, 因此这种方法也不适用于夹杂粒度分散度大的情况。“狄里克莱”镶嵌法虽然能较全面地反映夹杂的空间分布状况, 但分析过程复杂, 必须借助大型计算机和功能很强的分析软件才能实施。

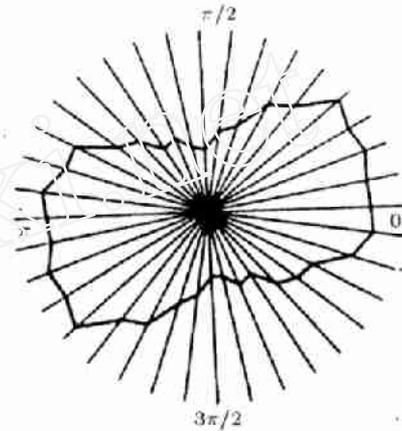
2.4 基于基体截断长度或投影长度的描述方法

基体的截断长度是两个相邻夹杂与基体界面间的距离, 该距离在各方向的平均即夹杂的平均自由程。理论分析表明^[15], 对于给定形状、大小的夹杂, 在夹杂含量一定时, 各夹杂的平均自由程的均值 λ 一定。Maccoy^[16] 提出用经验参数 $R = N_{<D}/N_\lambda$ 来表示夹杂分布的偏聚情况, $N_{<D}$ 为平均自由程小于 D 的夹杂个数, N_λ 为平均自由程在 λ 附近的夹杂个数, D 一般考虑夹杂的粒度和含量来选择。

若以平面上的某一点为中心, 测出平面上各不同方向单位长度上的基体投影长度(或第二相夹杂的投影长度), 作成极图, 则可较直观地反映夹杂分布的各向异性。图 7(a) 为一材料表面的扫描照片, 图 7(b) 为以此照片为基础做成的极图^[17], 可见, 图 7(b) 较好地反映了图 7(a) 中夹杂分布的各向异性。



(a) SiC 颗粒增强 Al 合金的金相照片



(b) 图 7(a) 中颗粒分布的极图

图 7 SiC 颗粒增强 Al 合金的金相照片及相应的极图

3 第二级判别

经过第一级判别, 已将夹杂的空间分布状况分成了均匀的、随机的、和有偏聚的三大类, 对于有偏聚的分布, 常常还必须进行第二级判别。第二级判别的目的是对聚集形式(成团、链、分层等)、偏聚体的大小、密度等进行判断和描述。用于第二级判别的方法主要有数学形态学的方法和统计决策学的方法, 数学形态学的方法主要用于聚集形式的判断和分离, 统计决策学的方法多用于对偏聚体大小、密度等的描述。

3.1 夹杂聚集形式的判断和分离

两相材料中, 第二相夹杂的聚集形式的不同往往会导致材料的宏观力学行为有很大的差异, 因此对于有偏聚的分布, 还必须对其聚集形式(团、线、层等)进行判断, 对于多种聚集形式耦合的分布, 还必须对各种形式进行分离。以积分几何和随机集论为基础的数学形态学的发展

展为这项工作提供了一个有力的工具. 数学形态学的方法主要是通过设计一种收集信息的“结构元素”, 一套变换(运算)、概念和算法, 以描述一图像的基本特征或基本结构, 即一图像各元素或各部分之间的关系^[2,18]. 对同一图形, 选取不同的结构元素, 进行不同的运算可得到不同的聚类结果.

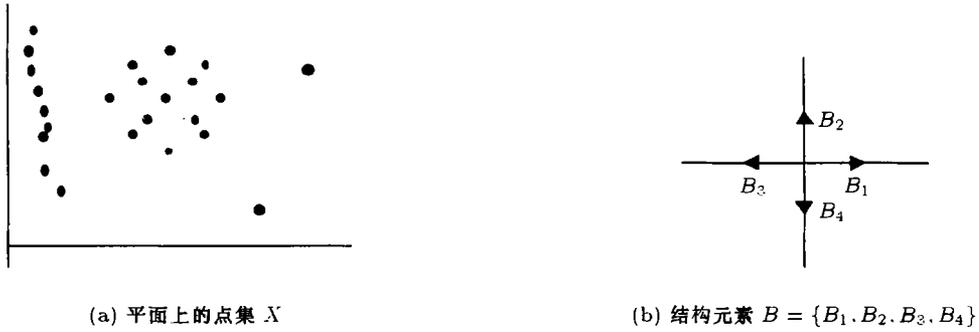


图 8 平面上的点集和结构元素

假设平面上夹杂的分布形式如图 8(a) 所示, 将此夹杂的集合记为 X , 取结构元素 B 由 B_1, B_2, B_3, B_4 组成(图 8(b)), 图 9 分别为图 8 经不同运算所得的结果. 由图 9 可见, 适当选择结构元素和算法, 可以实现不同聚集形式的判断和分离, 这对于研究不同聚集形式下两相材料的力学行为是很有意义的.

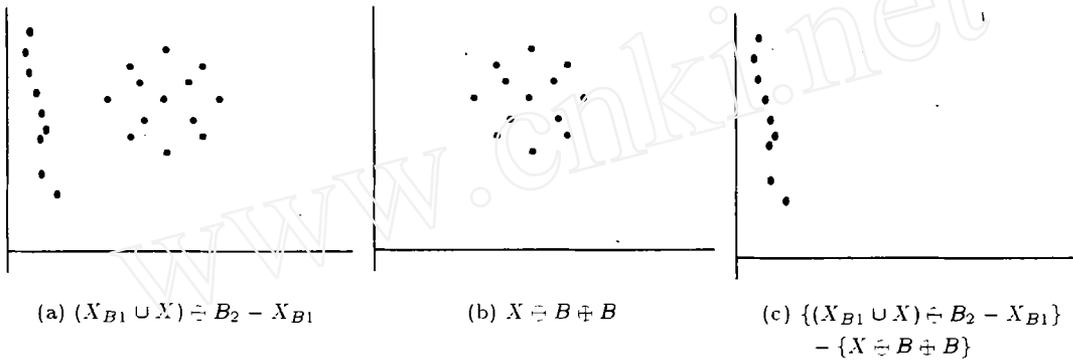


图 9 图 8(a) 经不同运算后的结果

3.2 对偏聚体的大小、密度、分布等的描述

对偏聚体的大小、密度、分布等的描述主要分两步: 第一, 应用数学形态学的运算将偏聚体内部各元素融合成一个大的元素; 第二步, 应用前面所述的各类方法对融合后的图形进行分析^[10]. 第一步的作法主要是: 定义某一结构元素, 对各夹杂作适当的膨胀运算, 若某些夹杂经此运算后相重叠, 则认为这些夹杂融合成为一体. 在第二步的分析时, 将这些夹杂当作一个夹杂处理.

4 第二相的三维空间分布状况的体视学定量表征

前文中用到的个数密度, 面积分数, 平均自由程等许多组织参量及其测量均可视为体视学范畴的问题, 应用尚仅限于二维图像的分析测量. 另外, 由于这些二维图像均为三维实际组织结构的二维截面, 如何获得所要求的有代表性的二维截面亦是极为重要的问题, 不容忽视. 体

视学的取样方法亦可供借鉴 [2].

当必须定量描述第二相的三维空间分布状况时, 体视学 [2,15,19] 就更是不可缺少的工具了. 现仅给出几个例子.

4.1 二维空间分布分析方法向三维空间的推广

(1) 基于粒子数密度的方法: 本方法在二维空间中使用的组织参量为单位面积内粒子个数密度 N_A , 在三维空间中对应的组织参量则为单位体积内粒子个数密度 N_V . 若粒子为直径为 D 的等体积球体或平均切直径为 D 的等体积同形状凸粒子, 则 N_V 可由 D 和 N_A 通过如下精确关系式求得 [2]: $N_A = DN_V$, 式中 N_A 为第二相粒子断面数量密度平均值. 对于散在的或充满空间的任意形状和尺寸分布的粒子体系, 则 N_V 需用双截面法 (disector) 实验测量 [20]. 由此, 基于粒子数密度的方法可以推广应用于定量测估散在的或充满空间的粒子的三维空间分布状况.

(2) 基于第二相所占百分比的方法: 本方法在二维空间中使用的组织参量为第二相面积百分比 A_A , 在三维空间中对应的组织参量则为第二相体积百分比 V_V . 体视学中的 Delesse 定律指出 [2]: 在随机截面上测得的 A_A 与三维空间中对应的 V_V 等值. 从而, 在使用随机截面的情况下, 基于第二相所占百分比的方法亦可用于定量表征第二相的三维空间分布状况.

(3) 第二相在基体上分布的平均自由程的统计分析方法: 第二相粒子在基体上的自由程定义为任意两个粒子任意方向上从粒子边缘到边缘间的距离 [2], 其平均值即平均自由程. 据体视学知, 在随机均匀取向截面上测得的平均自由程也是反映粒子在三维空间中的平均自由程. 据此, 在使用随机均匀取向截面的条件下, 基于第二相粒子在基体上分布的平均自由程的统计分析方法亦可推广应用于定量描述第二相的三维空间分布状况.

另外, 三维空间的数学形态学变换运算亦可实现. 从而, 3.1 和 3.2 节介绍的方法亦可望推广应用至三维空间.

除以上方法向三维空间的推广应用外, 尚有如下若干方法可用于定量表征第二相的三维空间分布状况.

4.2 第二相粒子相对于基体内界面的三维空间分布的定量分析

在三维空间, 第二相粒子可能位于基体晶粒内部、晶界面上、三晶棱上和四晶粒交汇点处. 这些粒子对基体内界面钉扎力不同, 对材料的力学性能影响规律不同. 然而, 其实验观测的难点是, 二维截面上粒子与晶界或其它内界面的相对位置不是两者在三维空间中位置的真实反映, 由截面图像无法直接观察第二相粒子相对于基体内界面的三维空间分布. 近年来, 刘国权研究组提出逆体视学原理 [21] 及一系列相应方法 [19,21~24], 为解决这一难题提供了一条可行途径.

在三维空间, 维数为 i 和 j 的两个几何元素集合能够获得截痕的条件是 [2] $i + j \geq 3$. 设第二相粒子 (P) 的几何元素集合为 P_i , 当 $i = 3, 2, 1$ 时 P_i 分别对应粒子体积子集 P_3 , 两粒子间界面子集 P_2 和三个粒子间形成的三棱线子集 P_1 ; 设基体晶粒的几何元素集合为 M_j , 当 $j = 2, 1, 0$ 时 M_j 分别对应晶界面子集 M_2 , 三晶棱子集 M_1 和四晶交点子集 M_0 . 表 3 总结了 P_i 和 M_j 的各种可能交集, 即第二相粒子与基体晶粒在三维空间交截时可能形成的各种截痕集合, 以及可能的用于表征二者关联程度的参量等 [19,21~24].

对于多相组织中不同几何元素间的交互作用, 刘国权则提出如下广义逆体视学原理 [21]: 当符合获得截痕条件时, 组织中任一几何元素集合 Y_j ($0 \leq j \leq 3$) 均可被视作同一组织中另一几何元素集合 Y_i ($0 \leq i \leq 3$) 的测试器集合, 反之亦然, 其中 i, j 为几何元素的维数. 如果 T_j 为人为叠加在组织空间中的无方向性、均匀、随机的 j 维测试器集合, 当 Y_j 集合相对于 Y_i 集合两类几何元素理想地均匀随机交截时, 截痕集合 $Y_i \cap Y_j$ 和交集 $Y_i \cap T_j$ 在统计意义上具有相等关系. 如果两者不等, 其参量间的差异则标志着 Y_i 和 Y_j 中两类几何元素间交互作用的不随机程

表 3 两相组织中第二相粒子集合 (P_i) 与基体内界面集合 (M_j) 间的关联类型与表征^[24]

几何元素集合的关联配对 ¹⁾	二者维数之和 ($i+j$)	配对几何元素集合的交集类型	交集痕迹 (其维数等于 $i+j-3$)	可能的用于表征二者关联程度的参量
P_3-M_2	5	第二相粒子体位于两个基体晶粒之间形成的晶界面上	第二相粒子体在基体晶界面上的二维截痕集合	第二相粒子体占据的晶界面面积分数 S_S 与面接触度 $C_b = S_S/V_V$ (均可在二维截面上实验测得 ²⁾); 晶界面上的第二相粒子个数密度等
P_3-M_1	4	第二相粒子体位于三个基体晶粒之间形成的棱线上	第二相粒子体在基体三晶棱上的一维截痕集合	第二相粒子体占据的三晶棱长度分数 L_L 与棱接触度 $C_e = L_L/V_V$ (均可在二维截面上实验测得); 三晶棱上的粒子个数密度等
P_3-M_0	3	第二相粒子体位于四个基体晶粒交汇点处	第二相粒子体占据的四个基体晶粒交汇点集合	第二相粒子体占据的四晶粒交汇点分数 P_P 与交汇点接触度 $C_c = P_P/V_V$
$(PM)_2-M_2$	4	相界面与基体扩展晶界面的真实部分交集	$(PMM)_1$ 集合的真实部分, 即两个基体晶粒与一个第二相粒子形成的三重棱线集合	单位体积内真实 $(PMM)_1$ 三重棱线长度 (其值可在二维截面上实验测得)
P_2-M_2	4	第二相粒子间界面与基体扩展晶界面被第二相粒子体占据的虚拟部分 ²⁾ 交集	$(PMM)_1$ 三重棱线集合中被第二相粒子体占据的虚拟部分	单位体积内被第二相粒子体占据的 $(PMM)_1$ 三重棱线的虚拟长度 (其值可实验测得)
$[(PM)_2 + P_2]-M_2$	4	$(PM)_2-M_2$ 和 $[(PM)_2 + P_2]-M_2$ 两类交集事件之和	真实的与被第二相占据的两部分 $(PMM)_1$ 三重棱线集合之和	单位体积内两类 $(PMM)_1$ 三重棱线的长度和, 某些接触度参量 ^[25] (其值均可在二维截面上实验获得) 等等
$(PM)_2-M_1$	3	相界面与基体三晶棱线交集	三个基体晶粒与一个第二相粒子形成的 $PMMM$ 四粒子交汇点集合	单位体积内 $PMMM$ 类四粒子交汇点的个数等
P_2-M_1	3	第二相粒子间界面与基体三晶棱线被第二相粒子体占据的虚拟部分交集	第二相粒子体内的虚拟空间点集合	单位体积内该类虚拟交汇点的个数等
$(PPM)_1-M_2$	3	$(PPM)_1$ 三重棱线与基体扩展晶界面的真实部分交集	$PPMM$ 四粒子交汇点集合	单位体积内 $PPMM$ 类四粒子交汇点的个数等
P_1-M_2	3	P_1 或 $(PPP)_1$ 三重棱线与基体扩展晶界面被第二相粒子体占据的虚拟部分交集	第二相粒子体内的虚拟空间点集合	单位体积内该类虚拟交汇点的个数等
$(PMM)_1-M_2$	3	已包含在前述 $(PM)_2-M_2$ 交集中: $(PMM)_1$ 即截痕, 无须再重复考虑		

1) P 和 M 的下标 i 和 j 均代表相应几何元素的维数。 $P_3, P_2, (PM)_2$ 分别代表第二相粒子体, 第二相粒子之间的界面, 第二相粒子与基体之间的相界面; $P_1, (PPM)_1$ 和 $(PMM)_1$ 分别代表三个第二相粒子之间的棱线, 两个第二相粒子与一个基体晶粒之间形成的棱线和一个第二相粒子与两个基体晶粒之间形成的棱线; M_2, M_1 和 M_0 分别代表假定不存在第二相粒子时的基体连续晶界面, 三个基体晶粒之间形成的连续棱线, 和四个基体晶粒之间形成的交汇点 (即“扩展晶界”^[22]的面集合、棱线集合、交汇点集合, 均为真实存在部分和已被第二相粒子体占据的虚拟部分二者之和)。

2) 基体晶界面虚拟部分和扩展晶界面的实验测量方法可参见文献 [22] 等, 第二相体积分数 V_V 测量则参见文献 [2] 等。

度的大小; 此时若已知其中一类在组织空间中无方向性地均匀随机分布, 此差异则标志着另一类几何元素在组织空间中不随机分布的程度和特点.

根据以上原理, 可通过定义第二相与基体晶界面的接触度 $C_b = S_S/V_V$, 与基体三晶棱线的接触度 $C_e = L_L/V_V$ 和与基体四晶交汇点的接触度 $C_c = P_P/V_V$ 三种接触度参量, 分别准确衡量第二相粒子与基体晶界面、晶粒棱和晶粒角隅三类几何元素的结合偏离理想均匀随机接触的程度^[21,24]. 三种接触度参量均包含了粒子数量、形状、尺寸、分布状态等多种信息, 是第二相粒子与基体晶界结合特征的定量表征, 但三者物理含义不同, 不能相互转换或替代(表 3). 在近年来有关第二相粒子钉扎力的研究中^[25], 有人引入了一种接触度 R , 侧重考虑粒子与晶界曲面的交互作用, 实际上等同于本文接触度含义中的一个, 即 C_b . 但应注意到, 仅以面接触度衡量粒子与扩展晶界的结合状态并认为粒子在晶界面、三晶棱和四晶交点处具有相同阻碍作用的这种计算模型是存在局限性的, 计算模型中应综合考虑前述所有三种接触度参量.

4.3 利用接触度定量分析同相粒子的三维空间团聚程度

同相粒子的团聚现象或邻接程度对材料的很多性能有显著影响. Gurland^[26], Cahn 和 Hilliard^[27] 及刘国权^[23] 分别定义了可用于定量分析同相粒子的团聚程度的不同接触度参量并给出了测量方法. 后者^[23] 将上述三类接触度参量同时应用于低碳钢中铁素体沿母相晶界择优形核程度的定量对比分析, 发现铁素体粒子之间沿母相晶界的邻接程度远远高于三维空间内的平均程度, 感兴趣的读者可参见原文献. 文献 [2] 中对 Gurland 接触度和 Cahn-Hilliard 接触度亦有介绍.

4.4 利用接触度定量分析异相在三维空间的邻接或交互作用程度

利用接触度定量分析表征第二相粒子相对于基体内界面的三维空间分布的例子已见于前文 4.2 节. 当需要定量分析表征复相材料中第二相与第三相或其它非基体相(如不同种类夹杂之间)的邻接程度时, 可仿照与 4.2 节中类似的方法定义合适的接触度参量并进行体视学测估. 文献 [19] 中公式 (40) 给出了一个借鉴 Gurland 接触度^[26] 定义的同相粒子和异相粒子通用的一种接触度参量的例子.

4.5 其它方法举例

除以上介绍的方法外, 随机几何方法^[28], 杨正伟等提出的空间点集“最近星距”分析法^[29], 空间点集的“最近邻距”法及其它二阶体视学(second-order stereology)方法^[30~32]等亦可用于粒子的二维和三维空间分布状况的定量描述. 二阶体视学以几何特征物空间分布状态的统计学描述为其研究内容, 一般比一阶体视学的计算量大得多, 故而当前高速发展的便宜的计算能力对开展其研究和应用很有利. 计算机可视化形态仿真方法也越来越多地应用于复相材料中第二相空间分布状态的定量分析以及相关测量方法的计算机实验验证^[24,29,31,33].

由于第二相的空间分布状况的全面准确描述非常复杂和困难, 本文介绍的各种方法一般只能定量描述分布状况的某些特征, 故应根据实际需要选用. 另一方面, 由有限元计算细观力学对材料力学行为的数值分析发展现状看, 将已可能获得的对实际材料中第二相的空间分布状况的定量描述方法与结果应用于材料性能的细观力学计算仍是亟待解决的一个重要问题, 目前所报道的这方面的进展仍然是十分有限的^[34]. 材料显微组织结构的模型化、定量表征方法的研究工作与材料性能的细观力学计算工作应跨学科合作, 相互密切配合进行.

5 小结

两相材料中第二相的空间分布状况的描述是一个非常复杂的问题, 这是因为第二相的分布

状况常常是多层次的,在不同空间尺度上看,其分布状况可能差异很大,比如夹杂和经一次融合后的聚集体的空间分布也许是有偏聚的,然而经两次数学形态学变换融合后的聚集体的空间分布则是随机的;并且对于一种具体的两相材料,不同的机械性能对夹杂的空间分布状况的敏感尺度、依赖程度也不同。

另一方面,必须高度重视三维组织结构的二维截面观测结果是否能代表实际组织结构中的三维空间分布这一敏感且困难的问题,因为多相材料的机械性能决定于三维空间组织结构特征,而二维空间截面图像仅包含三维空间组织结构特征的部分信息,有时甚至是误导性的。

因此,在实际材料微结构设计和性能预测的过程中,应针对所研究的具体的材料特点、具体的机械性能种类以及材料性能力学计算等工作需求来选择合适的定量描述方法,尽可能全面、准确地建立夹杂或第二相的空间分布对材料机械性能的定量影响规律。其中,尤其应注意发挥体视学在三维空间组织结构几何形态定量分析方面的重要作用。

致谢 本文中二维空间分布的相关内容汪海英和尚嘉兰完成,三维空间部分及统稿工作由刘国权等人完成。刘国权等人衷心感谢国家自然科学基金(项目号 59872003, 59771070 和 59271063)和国家教育部跨世纪优秀人才基金(1996~1999年)对其在本文中相关研究工作的经费支持。

参 考 文 献

- 1 Clyne T W, Withers P J eds. An Introduction to Metal Matrix Composites. Cambridge: Cambridge University Press, 1993
- 2 余永宁, 刘国权. 体视学 - 组织定量分析的原理和应用. 北京: 冶金工业出版社, 1983
- 3 王碧泉, 陈祖荫. 模式识别理论、方法和应用. 北京: 地震出版社, 1989
- 4 Horalek V, Benes V, Suchanek V. Stereology of structures with various types of spacing of dispersed spherical particles. *Practical Metallography*, 1988, 25(12): 596~603; 1989, 26(1): 25~34; and 1989, 26(2): 83~90
- 5 Weiss T. Homogeneity of dispersed phases. *Practical Metallography*, 1987, 24(11): 503~513
- 6 Gurland J. The measurement of distribution of discrete particles. In: DeHoff R T, Rhines F N, eds. Quantitative Metallography New York: McGraw-Hill, Co. 1968: 278~290
- 7 George F, Vander Voort. Evaluating clustering of second-phase particles. In: Micon 90; Advances in Video Technology for Microstructural Control, ASTM STP 1094. George F, Vander Voort eds. Philadelphia: American Society for Testing and Materials, 1990
- 8 盛骤, 谢式千, 潘承毅. 概率论与数理统计. 北京: 高等教育出版社, 1990
- 9 Ondracek G, Renz R. The quantitative evaluation of homogeneity (phase distribution) in multi-phase materials (composites). *Practical Metallography*, 1989, 26(7): 368~374
- 10 Boutin J, Baumer M. Planar morphology characterization of metal matrix composites. In: Micon'90: Advances in Video Technology for Microstructural Control, ASTM STP 1094, George F, Vander Voort, eds. American Society for Testing and Materials, Philadelphia, 1990
- 11 Li Q F, Smith R, McCartny D G. Quantitative evaluation of fiber distributions in a continuously reinforced aluminium alloy using automatic image analysis. *Materials Characterization*, 1992, 28: 189~203
- 12 Schwarz H, Exner H E. The characterization of the arrangement of feature centroids in planes and volumes. *Journal of Microscopy*, 1983, 129(2): 155~169
- 13 Wray P J, Richmond O, Morrison H L. Use of Dirichlet tessellation for characterizing and modelling nonregular dispersions of second-phase particles. *Metallography*, 1983, 16: 39~58
- 14 Lewandowski J J, Liu C. Effects of matrix microstructure and particle distribution on fracture of an aluminum metal matrix composite. *Materials Science and Engineering*, 1989, A107: 241~255
- 15 Dehoff R T, Rhines F N. Quantitative Microscopy. New York: McGraw-Hill, 1968. 283
- 16 Maccoy J W, Wawner F E. Dendritic segregation in particle-reinforced cast aluminum composites. In: Proceedings of the International Symposium on Advances in Cast Reinforced Metal Composites, Chicago, IL, USA, Sep 26~30 1998, New York: Springer-Verlag, 237
- 17 Geopetti K, Hiraga et al. Quantitative evaluation of microstructure in Si₃N₄/SiC platelet and particulate composites. *Journal of Materials Science*, 1993, 28: 4787~4798
- 18 唐常青, 吕宏伯等. 数学形态学方法及其应用. 北京: 科学出版社, 1990
- 19 Liu G, Yu H, Li W. Efficient and unbiased evaluation of size and topology of spacing-filling grains. *Acta Stereologica*, 1994, 13(2): 281~286

- 20 Liu G. Invited review: applied stereology in materials science and engineering. *Journal of Microscopy* (Oxford, UK), 1993, 171(1): 57~68
- 21 Liu G. Reversed stereology and its application to interaction between second phase and grain boundary. *Acta Stereologica*, 1993, 12(2): 109~114
- 22 刘国权. 扩展晶界参量的计算及实测. 北京科技大学学报, 1994, 16(4): 320~324, 367
- 23 Liu G, Yu H. Stereological characterization of particle contiguity. *Journal of Microscopy* (Oxford, UK), 1996, 181(1): 82~87
- 24 宋晓艳. 晶粒长大与显微组织的 Monte Carlo 仿真研究. [博士论文]. 北京科技大学, 1998. 130~133
- 25 Liu Y, Patterson B R. Stereological analysis of zener pinning. *Acta Materialia*, 1996, 44(11): 4327~4335
- 26 Gurland J. The measurement of grain contiguity in two-phase alloys. *Transaction of The Metallurgical Society of AIME*, 1958, 212: 452~455
- 27 Cahn J W, Hilliard J E. The measurement of grain contiguity in opaque samples. *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*, 1959, 215: 759~761
- 28 Stoyan D, Kendall W S, Mecke J. *Stochastic Geometry and Its Applications*. New York: John Wiley & Sons, 1987
- 29 Yang Z, Liu G, Wreford N G. A new distance method for the quantitative analysis of point pattern in space. *Acta Stereologica*, 1998, 17(2): 265~272
- 30 Stroeven P, Stroeven M. Application of second order stereological method to steel wire reinforced concrete. *Acta Stereologica*, 1992, 11/Suppl I: 605~610
- 31 Stroeven M, Stroeven P. Computer-simulated internal structure of materials. *Acta Stereologica*, 1996, 15(3): 247~252
- 32 Mattfeldt T, Clarke A, Archenhold G. Estimation of the directional distribution of spatial fibre processes using stereology and confocal scanning laser microscopy. *Journal of Microscopy* (Oxford, UK), 1994, 173:87~103
- 33 Song X, Liu G, Gu N. Influence of the second-phase particle size on grain growth based on computer simulation. *Materials Science and Engineering A*, 1999, 270(2): 178~182
- 34 方岱宁, 周储伟. 有限元计算细观力学对复合材料力学行为的数值分析. 力学进展, 1998, 28(2): 173~187

OVERVIEW ON DESCRIPTION METHODS FOR THE SPATIAL DISTRIBUTION OF THE SECOND PHASE IN MULTI-PHASE MATERIALS

Wang Haiying Shang Jialan

State Key Laboratory for Nonlinear Mechanics (LNM), Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences,
Beijing 100080, China

Liu Guoquan Qin Xiangge Song Xiaoyan

School of Materials and Engineering, Beijing University of Science and Technology, Beijing 100083, China

Abstract This paper presents a comprehensive review of description methods for the spatial distribution of the second phase in multi-phase materials. Stereological methods, especially, some new methods developed lately for description of three-dimensional distribution, are discussed. In order to get quantitative relationships between the spatial distribution of the second phase and material properties, it is necessary to select proper spatial scales and description methods to evaluate the distribution, according to specific material properties under investigation, as well as to use the computational simulation for material properties. Particular, attention should be paid on the important role of stereology.

Keywords multi-phase materials, second phase, spatial distribution, cluster, stereology