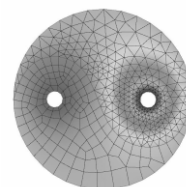




Wydawnictwo
Naukowe
AKAPIT



ZASTOSOWANIE AUTOMATÓW KOMÓRKOWYCH DO WIELOSKALOWEJ ANALIZY ZJAWISK W INŻYNIERII METALI

JERZY GAWĄD, ŁUKASZ MADEJ

TYTUŁ W J. ANG.

Abstract

The problems of development of an alternative computational tool, which is capable of including in models the stochastic and discontinuous phenomena occurring in materials, are discussed in this paper. The outlook of solutions, which are based on the Cellular Automata (CA) approach, is presented. Various kinds of applications of the CA method to the modeling of metallurgical processes are described. Examples of application of the multiscale methods based on the combination of the CA method and the macro scale analysis techniques based on the finite element approach are discussed, as well. The purpose of CA technique in multiscale analysis is a link between various phenomena in the microscopic scale and macroscopic mechanical properties. Variety of practical applications makes this method a very powerful computational tool. This paper is a study of possibilities given by those relatively new computational techniques. The advantages and limitations occurring during metal forming applications of the methods are also discussed.

1. WPROWADZENIE

Zastosowanie metody automatów komórkowych w zagadnieniach metalurgicznych jest stosunkowo nowym zagadnieniem. Dlatego też w celu wprowadzenia w podstawy teoretyczne tej metody zostaną podane jej główne definicje, jak również w dalszej części pracy zaprezentowane zostaną dotychczasowe zastosowania. Coraz częściej również tworzone są modele analizy wieloskalowej opartej na połączeniu metody analizy mikro, automatów komórkowych, z metodami analizy makro, które opisują zachowanie materiału w skali globalnej. Przegląd interesujących zastosowań różnych metod wieloskalowych wykorzystujących automaty komórkowe, również przedstawiony jest w niniejszej pracy.

2. ZARYS TEORII METODY AUTOMATÓW KOMÓRKOWYCH

Za twórcę automatów komórkowych uważa się Johna von Neumann'a, Węgry pracującego w Princeton, autora *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*. Wprowadził on jako pierwszy do powszechnego użytku określenie automatu komórkowego (Neumann, 1966). Definicja zakłada, że deterministyczny automat komórkowy określony jest poprzez następujące parametry:

- Siatkę komórek, z których każda charakteryzuje się ściśle określonym stanem, dostępnym ze skończonego zbioru wszystkich stanów k ,
- Otoczenie, nazywane także sąsiedztwem, uniwer-

salne dla wszystkich komórek, określające najbliższych sąsiadów danej komórki (dla komórek sąsiadujących z rozpatrywaną w danej chwili czasowej komórką wierzchołkiem lub też krawędzią przyjmuje się, iż promień otoczenia $r = 1$),

- Zbiór reguł przejścia Ω , ściśle określających zachowanie się komórki w czasie $t + 1$ w zależności od stanów swoich sąsiadów oraz jej samej w czasie t . Pojedyncza reguła przejścia przyjmuje postać:

$$\gamma_i(t+1) = f(\gamma_j(t)) \quad (1)$$

gdzie $j \in N(i)$, $N(i)$ – otoczenie i -tej komórki, γ_i – stan i -tej komórki.

Podstawową zaletą takiego podejścia jest założenie skończonych rozmiarów siatki komórek, których stany zmieniają się synchronicznie w dyskretnie zdefiniowanym kroku czasowym. Poprzez założenie oddziaływania tylko z najbliższymi sąsiadami pomijane są wpływy oddziaływań dalekiego zasięgu. Automaty komórkowe mogą być rozpatrywane zarówno w przestrzeni jedno, dwu, jak i trójwymiarowej, charakteryzując się przy tym różnorodnymi kształtami komórek i definicjami sąsiedztwa.

- Przestrzeń 1D automatów komórkowych.

Automaty definiowane są jako kolonia w kształcie linii prostej (rysunek 1). Są one ułożone jeden obok drugiego, a każda komórka posiada dwóch najbliższych sąsiadów ($r = 1$). Jest to grupa automatów deterministycznych o dwóch dostępnych stanach komórki ($k = 2$). W powszechnie stosowanej notacji automaty te oznaczają się jako (2,1).

Jest to najprostsza forma automatu komórkowego nazwana przez Wolfram'a (1994; 2002), *automatami elementarnymi*. Stwierdził on, że przy istnieniu tylko dwóch sąsiadów, z których każdy może przyjmować dwa różne stany, istnieje 256 reguł przejścia dla takich automatów.



Rysunek 1. Otoczenie komórki w przestrzeni 1 D.
Figure 1. Surrounding of the cell in the 1 D domain.

- Przestrzeń 2 D automatów komórkowych.

W tym przypadku kształt przestrzeni automatów komórkowych określony jest przez kształt pojedynczej komórki automatu. Zazwyczaj przyjmuje się kształt kwadratu, w konsekwencji czego kształt przestrzeni automatów jest prostokątem, spotyka się jednak również komórki w kształcie sześciokątów. Definiowanie sąsiedztwa w tym przypadku jest jedną z kluczowych zagadnień wpływających na uzyskiwane obliczenia. Najpowszechniej stosuje się dwa typy są-

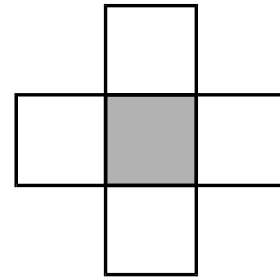
siedztwa (Balakrishnan i Ranganathan, 1999):

- Sąsiedztwo von Neumann'a (rysunek 2) - charakteryzujące się tym, iż każda komórka otoczona jest poprzez 4 sąsiadów ($r = 1$). Reguły przejścia przyjmują wówczas postać:

$$\gamma_{i,j}(t+1) = \begin{pmatrix} \gamma_{i-1,j}(t) & \gamma_{i,j}(t) & \gamma_{i,j+1}(t) \\ \gamma_{i,j-1}(t) & \gamma_{i,j}(t) & \gamma_{i,j+1}(t) \\ \gamma_{i+1,j}(t) & \gamma_{i,j}(t) & \gamma_{i,j+1}(t) \end{pmatrix} \quad (2)$$

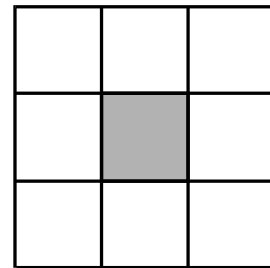
- Sąsiedztwo Moore'a (rysunek 3) – charakteryzujące się tym, iż każda komórka otoczona jest poprzez 8 sąsiadów ($r = 1$):

$$\gamma_{i,j}(t+1) = \begin{pmatrix} \gamma_{i-1,j-1}(t) & \gamma_{i-1,j}(t) & \gamma_{i-1,j+1}(t) \\ \gamma_{i,j-1}(t) & \gamma_{i,j}(t) & \gamma_{i,j+1}(t) \\ \gamma_{i+1,j-1}(t) & \gamma_{i+1,j}(t) & \gamma_{i+1,j+1}(t) \end{pmatrix} \quad (3)$$



Rysunek 2. Schemat otoczenia von Neumann'a w przestrzeni dwuwymiarowej.

Figure 2. von Neumann neighborhood in the 2D domain.

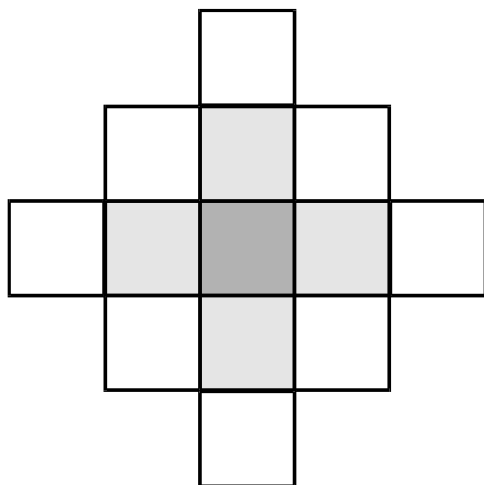


Rysunek 3. Schemat otoczenia Moore'a w przestrzeni dwuwymiarowej.

Figure 3. Moore neighborhood in the 2D domain.

Wykorzystywane jest również sąsiedztwo stanowiące połączenie sąsiedztwa Moore'a oraz von Neumann'a (rysunek 4), dla którego reguły przejścia uzależnione są od stanu 12 komórek sąsiednich:

$$\gamma_{i,j}(t+1) = \left(\begin{array}{ccccccc} & & & & \gamma_{i-2,j}(t) & & \\ & & & & \gamma_{i-1,j-1}(t) & \gamma_{i-1,j}(t) & \gamma_{i-1,j+1}(t) \\ \gamma_{i,j-2}(t) & \gamma_{i,j-1}(t) & \gamma_{i,j}(t) & \gamma_{i,j+1}(t) & \gamma_{i,j+2}(t) & & \\ & \gamma_{i+1,j-1}(t) & \gamma_{i+1,j}(t) & \gamma_{i+1,j+1}(t) & & & \\ & & \gamma_{i+2,j}(t) & & & & \end{array} \right) \quad (4)$$



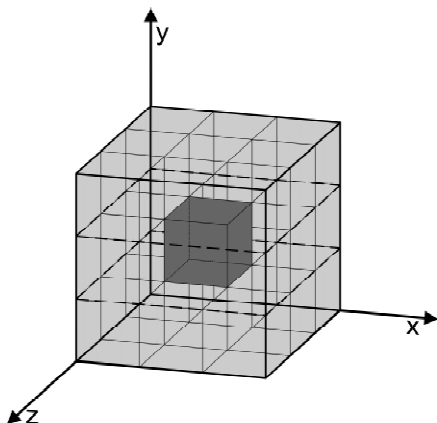
Rysunek 4. Schemat połączonego otoczenia Moore'a oraz von Neumann'a w przestrzeni dwuwymiarowej.

Figure 4. Combined Moore and von Neumann neighborhood in the 2D domain.

Przedstawione wyżej typy sąsiedztwa nie wyczerpują zbioru możliwych otoczeń w przestrzeni dwuwymiarowej. Szeroki przegląd możliwych rodzajów sąsiedztwa, występujących w metodzie automatów komórkowych, przedstawiony został w pracy (Terrier, 2003).

- Przestrzeń 3D automatów komórkowych.

Najpopularniejszym otoczeniem trójwymiarowym jest trójwymiarowa wersja otoczenia Moore'a (rysunek 5), rozpięta na sześciangłach. Zatem pojedyncza komórka centralna otoczona jest poprzez 26 sąsiadów tworząc sześciangł.



Rysunek 5. Schemat otoczenia Moore'a w przestrzeni trójwymiarowej.

Figure 5. Moore neighborhood in the 3D domain.

2.1. Klasyfikacja automatów komórkowych

Najpowszechniej przyjętą klasyfikację CA wprowadził Wolfram (1994), w wyniku jego wieloletnich badań nad zachowaniem układów automatów komórkowych. Klasyfikację swoją oparł na długiej obserwacji kolejnych stanów sieci, oraz na analizie wpływu chaotycznie ustalanych konfiguracji początkowych. W konsekwencji wyróżnił on 4 klasy automatów komórkowych:

- Klasa 1 – automat komórkowy ewoluuje do stanu jednorodnego, osiągając punkty graniczne, w których stan wszystkich komórek jest taki sam i nie zmienia się w przestrzeni czasu,
- Klasa 2 – automat komórkowy dąży do prostych izolowanych struktur periodycznych,
- Klasa 3 – automat komórkowy na drodze ewolucji w przestrzeni czasu osiąga stan zachowań chaotycznych, tworząc skomplikowane wzory. Klasa ta jest bardzo wrażliwa na wszelkie zakłócenia czy też zmiany warunków otoczenia,
- Klasa 4 – automat komórkowy na drodze ewolucji w przestrzeni czasu osiąga stan trwałych konfiguracji o długich czasach życia. O ile ze względu na dużą wrażliwość klasy 3, jej zastosowanie do obliczeń czy też przechowywania informacji jest mocno ograniczone, to automaty klasy 4 z powodu małej wrażliwości są predestynowane do wykonywania obliczeń.

Ideę metody automatów komórkowych można zrozumieć analizując najbardziej rozpoznawalny algorytm oparty o tę metodę, jakim jest *Gra w życie*. Podstawowe założenia algorytmu opracowane przez Conway'a (1976) zaprezentowane są w kolejnej części pracy.

2.2. Gra w Życie (Game of Life)

Gra w życie opracowana przez J.H. Conway'a w 1976 roku jest jednym z najbardziej rozpowszechnionych algorytmów opartych o metodę automatów komórkowych. Mimo, iż obecnie stanowi głównie źródło fascynacji i zabawy, to jednak gra w życie zrodziła się na drodze poważnych rozważań, dotyczących sformułowania matematycznego modelu opisującego zachowanie się niektórych organizmów żywych.

Wykorzystany w obliczeniach automat komórkowy w przestrzeni dwuwymiarowej oparto na otoczeniu Moore'a (3). Każda komórka mogła przybierać dwa stany: 1 – żywy, 0 – martwy. Zastosowano zespół trzech reguł przejścia opisujących ewolucję układu:

- Każda komórka posiadająca trzech żywych sąsiadów (komórki w stanie 1), pozostaje żywą (utrzymuje stan 1), lub też rodzi się (zmienia swój stan z 0 na 1),



- Każda żywa komórka posiadająca dwóch żywych sąsiadów pozostaje żywa (utrzymuje swój stan),
- Każda żywa komórka posiadająca więcej niż 3 żywych sąsiadów umiera z „natłoku” (zmienia swój stan z 1 na 0), oraz każda żywa komórka posiadająca mniej niż dwóch sąsiadów również umiera, z „samotności” (zmienia swój stan z 1 na 0).

Początkowo prace nad rozwojem automatu prowadzone były głównie w zakresie teoretycznym, jednakże szybki rozwój technik komputerowych umożliwił znaczny postęp w badaniach. Okazało się, iż na bazie takich kilku prostych reguł z powodzeniem można modelować zachowanie żywych populacji. Co ciekawe, w wyniku zaburzania niektórych reguł pojawiały się bardzo nieoczekiwane zjawiska, co jednak w trakcie dalszych eksperymentów było potwierdzane przez rzeczywiste zachowanie się przyrody.

3. ZASTOSOWANIA METODY AUTOMATÓW KOMÓRKOWYCH

Metoda automatów komórkowych znajduje coraz większe zastosowanie w wielu dziedzinach nauki oraz życia codziennego:

- fizyka magnetyzmu,
- socjofizyka – formowanie opinii społecznej,
- fizyka powierzchni – modelowanie wzrostu warstw i ich powierzchni,
- hydrodynamika – gaz sieciowy,
- fizyka medyczna – elektroforeza żelowa,
- chemia – modelowanie reakcji katalitycznych,
- elektronika – modelowanie transportu ładunku w półprzewodnikach,
- ochrona środowiska – modelowanie rozprzestrzeniania się pożarów,
- urbanistyka – modelowanie natężenia ruchu.

Szeroki opis wielu z w/w zastosowań można znaleźć w pracach (Malarz, 2003; Kułakowski, 2000).

Niniejsza praca jest poświęcona wykorzystaniu automatów komórkowych w kolejnej dziedzinie nauki – metalurgii. Przez kilka ostatnich lat w literaturze naukowej pojawiają się informacje o nowych zastosowaniach metody automatów komórkowych właśnie do modelowania zjawisk metalurgicznych, takich jak:

- rekrytalizacja statyczna,
- rekrytalizacja dynamiczna,
- inicjalizacja pęknięć,
- zjawiska termomechaniczne,
- przemiany fazowe.

Poniżej zaprezentowano omówienie opublikowanych prac dotyczących wybranych zagadnień. Stanowią one przegląd osiągnięć w tej stosunkowo nowej dziedzinie obliczeń, jaką jest aplikacja metody automatów komórkowych oraz jej połączenie z metodami

analizy makro w zagadnieniach metalurgii.

4. ZASTOSOWANIA AUTOMATÓW KOMÓRKOWYCH DO SYMULACJI MIKROSTRUKTURY

Zawarta w tym rozdziale część pracy ma na celu wprowadzenie czytelnika w istniejące modele dotyczące rekrytalizacji i zjawisk z nią związanych, zbudowane w oparciu o metodę automatów komórkowych (CA). Omawiane zagadnienie obejmuje stosunkowo szeroką gamę zjawisk, w tym rekrytalizację statyczną (SRX), dynamiczną (DRX) i metadynamiczną (MDRX). Wyśmienitym przewodnikiem, prezentującym aktualny stan wiedzy dotyczącej rekrytalizacji, jest praca (Doherty i in., 1997). Przegląd nowych dokonań z zakresu badań teoretycznych i doświadczalnych nad dynamiczną rekrytalizacją przedstawiono np. w pracy (McQueen, 2004).

Ponieważ zagadnienia te wiążą się ściśle z powstawaniem i rozrostem nowych ziaren, cytowane będą także wybrane prace, dotyczące wzrostu ziaren w trakcie krzepnięcia. Należy przy tym pamiętać, że mechanizmy fizyczne procesów krzepnięcia są zasadniczo odmienne od występujących w materiałach w fazie stałej, podlegających rekrytalizacji. Jednakże niektóre elementy metodyki konstruowania modeli mogą, po odpowiednich modyfikacjach, zostać przeniesione do modeli rekrytalizacji.

4.1. Literatura podsumowująca zagadnienie

Wcześniejsze prace (Rollett, 1997; Holm i Battaille, 2001; Miodownik, 2002) podsumowujące rozwój modelowania zjawisk rekrytalizacji dostarczają przeglądu stosowanych metod obliczeniowych. Publikacje te poświęcają jednak automatom komórkowym stosunkowo niewielką uwagę, koncentrując się głównie na metodzie Monte-Carlo (MC) Potts'a. Natomiast praca (Raabe, 2002) poświęcona jest przeglądowi zastosowań CA w symulacji rekrytalizacji. W książce (Raabe, 1998) jeden z rozdziałów poświęcono zastosowaniom automatów komórkowych w inżynierii materiałowej. Praca ta zawiera listę publikacji do roku 1998 oraz krótki przegląd literatury przedmiotu.

Stosunkowo obszerną grupę modeli SRX oraz DRX, zarówno klasycznych, jak i opartych o symulację rozwoju mikrostruktury, omówił w swojej rozprawie doktorskiej Kroc (2001). Praca ta wprowadza także nowe modele SRX i DRX oparte o CA, które omówione zostaną w dalszej części pracy.

W literaturze polskojęzycznej Burbelko opublikował monografię (Burbelko, 2004), poświęconą rekrytalizacji dendrytycznej. Praca ta zawiera bogaty prze-

gląd bibliograficzny, poświęcony modelowaniu zjawisk krystalizacji, zarówno z wykorzystaniem modeli konwencjonalnych jak i przy użyciu CA.

Automaty komórkowe stosowane w modelowaniu zjawisk rekrytalizacji wykorzystują podział modelowanego obszaru z wykorzystaniem regularnej siatki komórek. W literaturze można napotkać w większości modele dwuwymiarowe (2D), zdecydowanie rzadsze są przykłady modeli trójwymiarowych (3D), m.in. (Davies, 1997; Goetz i Seetharaman, 1998; Davies i Hong, 1999; Marx i in., 1999; Mukhopadhyay i in., 2004). W przypadku modeli 2D siatka automatów komórkowych traktowana jest jako obraz zglądu mikrostruktury, natomiast dla modeli 3D jako przestrzenie ułożone, sąsiadujące ziarna.

Zasadniczym celem budowy modelu opartego o CA jest powiązanie gęstości dyslokacji oraz parametrów opisujących mikrostrukturę z obrazem mikrostruktury. Przez obraz mikrostruktury należy rozumieć informację o przestrzennym ułożeniu ziaren oraz ich wielkości i orientacji. Przekłada się to na rozmieszczenie na siatce CA informacji o stanie komórek, w tym ich przynależności do poszczególnych ziaren, oraz innych danych, potrzebnych w obliczeniach, np. lokalnej gęstości dyslokacji, orientacji itp.

W przypadku symulacji DRX i SRX z wykorzystaniem CA wymagane jest utworzenie obrazu mikrostruktury początkowej. Wszystkie dotychczasowe prace dotyczące tego zagadnienia wykorzystują odrębny algorytm tworzenia mikrostruktur początkowych, zwykle opierający się na założeniu swobodnego wzrostu ziarna (Ding i Guo, 2001) lub np. w wyniku wcześniejszej SRX (Kroc, 2001; Kroc, 2002). W przypadku symulacji SRX wykorzystywano także obrazy symulowanej próbki, uzyskane za pomocą metody EBSD (ang. Electron Back Scattered Diffraction) (Rabe i Hantcherli, 2005).

W większości przypadków dla siatki automatów komórkowych zakłada się periodyczne warunki brzegowe, choć niektórzy autorzy prowadzą obliczenia bez ich wprowadzania (Svyetlichnyy i Milenin, 2005).

Definicje sąsiedztwa wykorzystywane w różnych pracach niejednokrotnie odbiegają od standardowych typów Moore'a i von Neumann'a. Więcej informacji o wykorzystywanych typach sąsiedztwa oraz ich wpływie na uzyskiwane wyniki przedstawiono w rozdziale 5.1.

4.2. Rekrytalizacja statyczna i wzrost ziaren – modele CA

W ostatnich latach pojawił się szereg publikacji, zajmujących się symulacją rekrytalizacji za pomocą CA. Warto zwrócić uwagę, że większość tych prac koncentruje się na modelowaniu SRX.

W jednej z pierwszych, wykorzystujących nowoczesne podejście do konstrukcji modeli wykorzystujących CA, przedstawiono opracowany przez Hesselbarth'a i Göbel'a (1991) model rekrytalizacji statycznej (SRX). W podejściu tym zakłada się, że komórki CA mogą znajdować się w jednym z dwóch stanów: zrekrystalizowanym i niezrekrystalizowanym. Autorzy przyjęli, że proces rekrytalizacji składa się z dwóch niezależnych procesów – zarodkowania i wzrostu ziarna.

Davies (1995) rozważał wpływ sąsiedztwa na kinetykę procesu rekrytalizacji. Zaproponował również zastosowanie nowego rodzaju sąsiedztwa heksagonalnego, utworzonego przez losowe dobieranie par diagonalnych sąsiadów w sąsiedztwie Moore'a.

Niewiele późniejsza praca (Baudin i in., 1996) prezentuje zastosowanie CA do symulacji rozrostu ziaren. Pomimo stosunkowo prostej konstrukcji modelu uzyskane wyniki wskazują na poprawne odwzorowanie co najmniej rozkładu wielkości ziaren w mikrostrukturze wynikowej. W pracy tej zamiast wprowadzania równań określających kinetykę wzrostu ziaren proponuje się zastosowanie bariery energetycznej, (podobnie jak w modelach MC), której przekroczenie warunkuje rozrost ziarna. Autorzy wprowadzają też pojęcie orientacji ziarna, choć wykorzystywana jest ona wyłącznie do określenia zderzenia ziaren, a nie do wyznaczenia prędkości ruchu granicy. Natomiast wydaje się, że autorzy mylnie interpretują reguły przejścia stanu komórek, prowadzące do migracji granicy ziarna w wyniku jej krzywizny. Nie umniejsza to zalet przedstawionej w pracy metody, co pozwala na jej wykorzystanie jako wydajnego sposobu generowania początkowych mikrostruktur dla dalszych obliczeń symulacji DRX.

Davies (1997) opracował dwa modele 3D dla wzrostu ziarna, różniące się równaniem prędkości ruchu granicy ziarna. W pracy tej zastosowano probabilistyczne reguły wzrostu ziarna. Zarodkowanie zostało uwzględnione za pomocą arbitralnie dobranego równania. Ułamki rekrytalizacji uzyskane z obu modeli zostały porównane z wynikiem doświadczalnym oraz rozwiązaniem analitycznym. Porównanie to wskazuje na dobrą zdolność obu modeli do odtworzenia zachowania się materiału.

Kinetyka zarodkowania homogenicznego i heterogenicznego w materiale jednofazowym była przedmiotem pracy (Goetz i Seetharaman, 1998a). Opracowany został model zarówno 2D jak i 3D. Rozważano zarodkowanie w schemacie z wysyceniem miejsc zarodkowania oraz ze stałą prędkością zarodkowania. Na podstawie przeprowadzonych eksperymentów obliczeniowych autorzy stwierdzili, że dla zarodkowania o stałej prędkości uzyskiwane są mikrostruktury blaszkowe. Ponadto stwierdzono, że dla niskich prę-



kości zarodkowania uzyskiwane są struktury z ziarnami grupującymi się w klastry. Natomiast dla wysokich prędkości zarodkowania uzyskano strukturę naszyjnikową (ang. Necklace Structure), podobną do mikrostruktur uzyskiwanych w wyniku DRX.

Kolejny model 3D zaproponowali Marx i in. (1999). Praca ta wnosi interesujące uwagi zarówno do konstrukcji obliczeniowej modelu jak i do zarodkowania oraz wzrostu ziaren. W pracy tej proponuje się m. in. nowe rodzaje sąsiedztwa wraz z kryteriami ich stosowalności (rozdział 5.1) Ponadto przedstawiono przykład implementacji, w której zastosowano połączenie szybkiej pamięci operacyjnej, wykorzystywanej do śledzenia frontu ruchu granic ziaren, oraz wolniejszej pamięci dyskowej, służącej do przechowywania informacji o wnętrzu ziaren. Rozwiązanie to pozwala na prowadzenie obliczeń dla siatek o dużej gęstości. Model ten pozwalał na symulację zachowania mikrostruktury w trakcie rekrytalizacji i obejmował rozwój tekstury oraz anizotropię wzrostu ziaren poprzez zróżnicowanie prędkości wzrostu ziaren w zależności od orientacji.

W kolejnej pracy Davies i Hong (1999) zaprezentowali model, pozwalający na symulację rekrytalizacji z uwzględnieniem składowych tekstury. Uzyskane wyniki zostały porównane z rezultatami doświadczenia. Otrzymano dobrą zgodność oszacowanej kinetyki zjawiska, natomiast rozkład rozmiaru ziarna cechował się rozbieżnościami.

Kroc poświęcił swoją rozprawę doktorską (Kroc, 2001) głównie budowie modelu dynamicznej rekrytalizacji. Ponieważ jednak potraktował on symulację DRX jako uogólnienie SRX, w pracy tej znaleźć można także propozycję nowego modelu dla tego zjawiska. Nowością w modelu jest włączenie parametrów probabilistycznych do reguł przejścia, opisujących zarówno zarodkowanie jak i rozrost ziaren. Takie sformułowanie problemu pozwoliło m.in. na uzyskanie globularnego kształtu rosnących ziaren z wykorzystaniem standardowego sąsiedztwa Moore'a. W pracy tej zaproponowano także wprowadzenie dodatkowej zmiennej stanu, określanej jako czas oczekiwania (ang. Wait Time), pomagającej w kontrolowaniu kinetyki procesu.

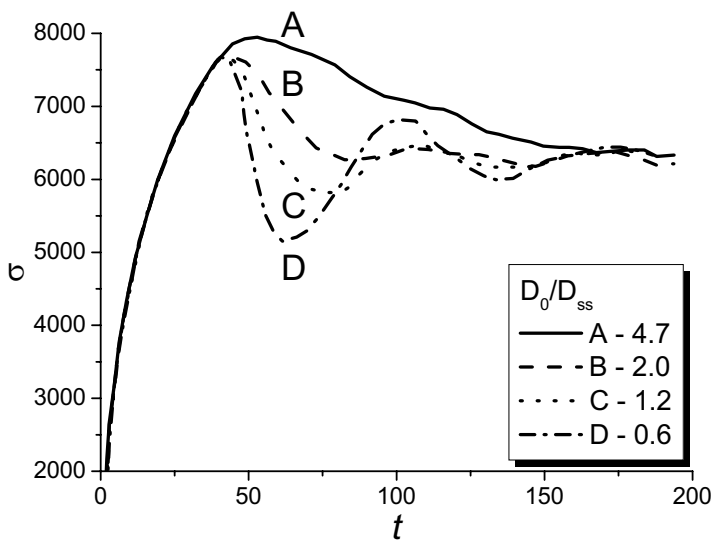
Rollett i Raabe (2001) opracowali hybrydowy model rekrytalizacji, łączący model MC Potts'a i automaty komórkowe. Motywacją tej pracy była perspektywa wyeliminowania wad poszczególnych modeli obliczeniowych w zakresie uwzględnienia sił pędnych rozrostu ziaren. Według (Rollett i Raabe, 2001) ograniczeniem CA jest brak możliwości uwzględnienia krzywizny granicy ziarna jako siły pędnej rozrostu ziarna, z kolei MC nie daje zadowalających możliwości w zakresie uwzględnienia energii zmagazynowanej w postaci defektów struktury. Oprócz opisu mo-

delu hybrydowego praca zawiera interesujący rozdział dotyczący skalowania parametrów modelu dla uzyskania wartości fizycznych.

4.3. Rekrytalizacja dynamiczna – modele CA

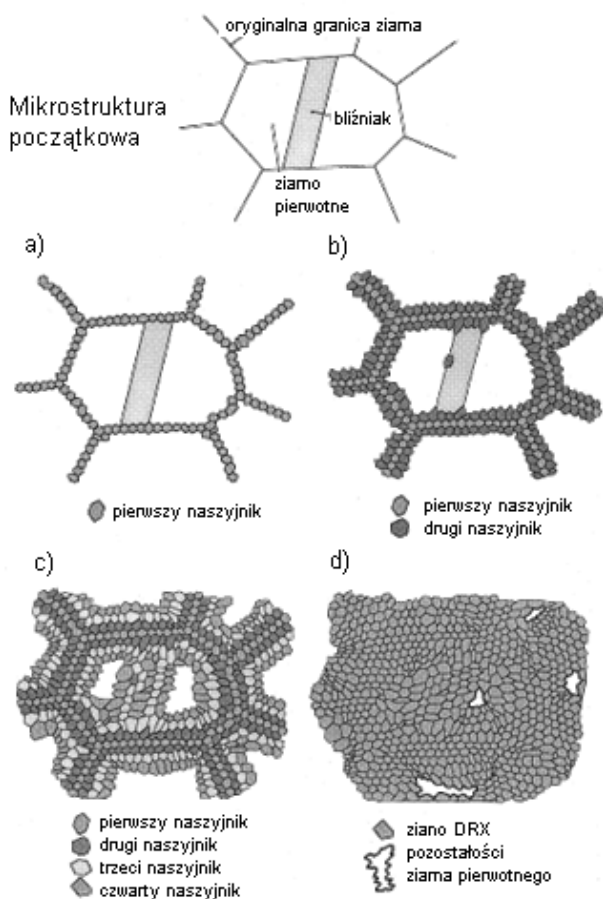
Przedstawiony w poprzednim rozdziale przegląd prac dotyczących SRX świadczy o stosunkowo długim zainteresowaniu badaczy rozwojem CA w tym zakresie. Zdecydowanie mniejszym zainteresowaniem cieszyło się DRX, świadczy o tym fakt, że do roku 2000 ukazała się zaledwie jedna szerokodostępna praca (Goetz i Seetharaman, 1998), poruszająca tą tematykę.

W pracy (Goetz i Seetharaman, 1998) zaproponowano pierwszy model DRX oparty o automaty komórkowe. Zademonstrowano w niej m.in. zmianę charakteru krzywej naprężenia w zależności od stosunku rozmiaru ziarna początkowego i końcowego. Uzyskane wyniki (rysunek 6) zgodne są z tezami pracy (Sakai, 1995), w której przedstawiono kryterium przejścia charakterystyki krzywej płynięcia materiału z jednopikowej do wielopikowej. Kryterium to zakłada, że dla co najmniej dwukrotnego rozdrobnienia ziarna na krzywej naprężenia uzyskuje się pojedynczy pik, natomiast dla mniejszego rozdrobnienia krzywa ta zawiera oscylacje. Spełnienie kryterium Sakai stanowiło duży postęp w porównaniu do wcześniejszych prac, wykorzystujących metodę MC, (np. (Peczak, 1995)), których kryterium spełnione było jedynie z dużym przybliżeniem. Praca (Goetz i Seetharaman, 1998) przynosi także propozycję nowego typu siedmioelementowego sąsiedztwa, prowadzącego do globularnego kształtu ziaren. Ponadto zaprezentowano tworzenie się struktur naszyjnikowych dla dużych prędkości odkształcenia. Struktura naszyjnikowa powstaje w wyniku zarodkowania na granicach rozrastających się niewielkich ziaren wtórnych. W ten sposób na granicach ziaren pierwotnych obserwuje się dużą ilość niewielkich ziaren, układających się warstwami w charakterystyczne pierścienie. Kolejne warstwy ziaren wrastają w obszar ziaren pierwotnych. Mechanizm powstawania takiej mikrostruktury w trakcie DRX omówiono w pracy (Ponge i Gottstein, 1998). Schematyczną ilustrację zaczerpniętą z tej pracy podano na rysunku 7. Dla porównania na rysunku 8. przedstawiono przykładowe obrazy mikrostruktur otrzymanych w wyniku symulacji (Goetz i Seetharaman, 1998) Mikrostruktury te wskazują, że wraz ze wzrostem dp/dt od 10 do 1000 prędkość zarodkowania znacząco rośnie, natomiast rozrost ziaren jest w coraz większym stopniu ograniczany odkształceniem. W wyniku tego uzyskiwane są drobnoziarniste struktury naszyjnikowe.



Rysunek 6. Krzywe naprężenia dla $d\rho/dt=10$ i czterech różnych rozmiarów ziarna początkowego D_0 i ustalonym rozmiarze ziarna końcowego D_{ss} (Goetz i Seetharaman, 1998).

Figure 6. Flow stress for $d\rho/dt=10$ and four different initial grain size D_0 and the same final grain size D_{ss} (Goetz i Seetharaman, 1998).



Rysunek 7. Schematyczna ilustracja rozwoju mikrostruktury naszynekowej w trakcie DRX (Ponge i Gottstein, 1998).

Figure 7. Schematic illustration of necklace microstructure evolution during DRX (Ponge i Gottstein, 1998).

Kroc (2001) jako pierwszy wprowadził do symulacji DRX metodą CA rozwiązanie równania różniczkowego, opisującego rozwój dyslokacji z uwzględnieniem

umocnienia i zdrowienia. Oprócz równania, opracowanego oryginalnie przez Kocks'a i Mecking'a, przetestował on szereg jego wariantów. W pracy tej podjęto także temat wpływu zmiany prędkości odkształcenia na przebieg DRX. Przykłady uzyskanych wyników przedstawiono na rysunku 9. Podsumowanie najistotniejszych zagadnień poruszanych w (Kroc, 2001) można odnaleźć w późniejszych pracach (Kroc, 2002; Kroc i Paidar, 2003). Wadą pracy jest brak uzyskanych wyników dla realistycznych materiałów. Otrzymane wyniki mają więc charakter jakościowy – autor pozostaje na etapie obliczeń dla arbitralnych jednostek czasu, odkształcenia, naprężenia itp. Utrudnia to zarówno praktyczne zastosowanie rezultatów pracy, jak i weryfikację poprzez porównanie z danymi literaturowymi.

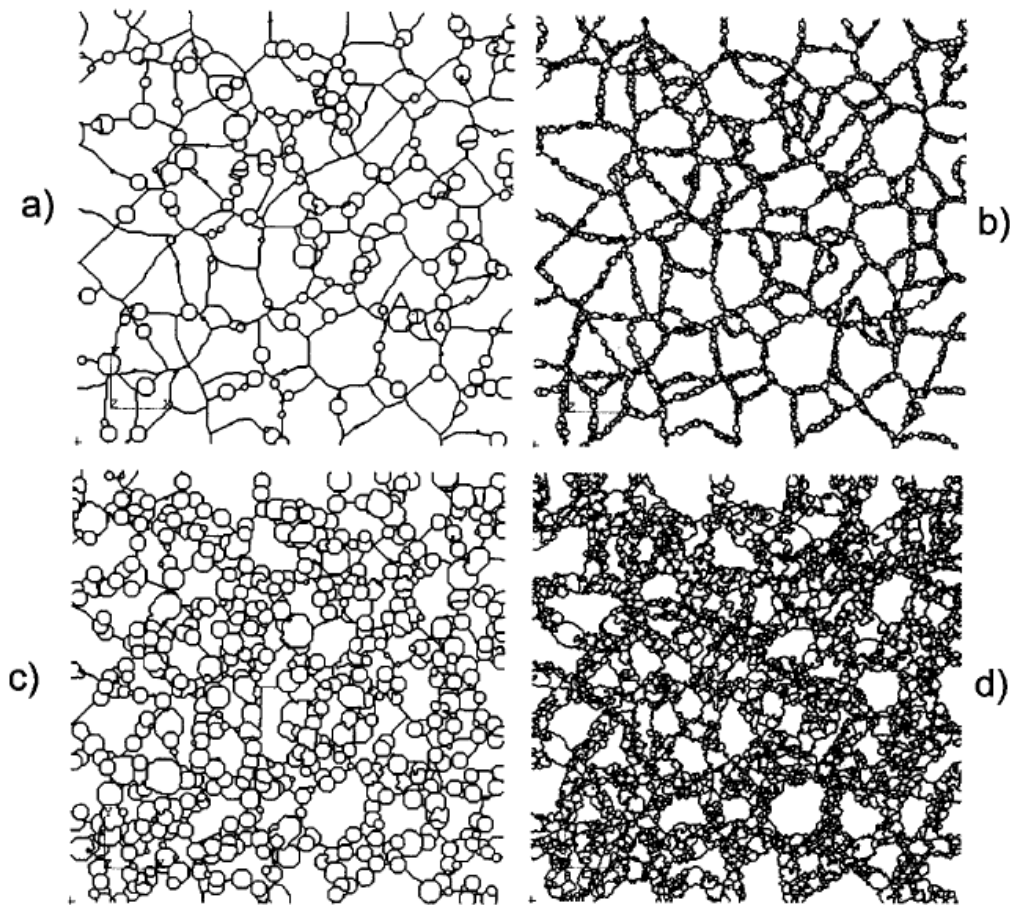
Ding i Guo ze współpracownikami opublikowali cykl artykułów (Ding i Guo, 2001; Ding i Guo, 2002; Qian i Guo, 2004), prezentujących zaawansowany model DRX. W pracy (Ding i Guo, 2001), niezależnie od (Kroc, 2001), pojawia się koncepcja wykorzystania równania Kocks'a-Mecking'a. Przedstawiony model uwzględniał również orientację ziaren i wpływ dezorientacji granic na kinetykę wzrostu ziaren. Uzyskane wyniki symulacji porównano z rezultatami doświadczeń, otrzymując zadowalającą zgodność (rysunek 10). Model ten pozwalał także na śledzenie rozwoju mikrostruktury dla różnych odkształceń (rysunek 11).

Kugler i Turk (2004) opracowali model, podsumowujący poprzednio przedstawione rozwiązania dotyczące DRX. W pracy wprowadzono generalizację wcześniejszych modeli (Goetz i Seetharaman, 1998; Kroc, 2002; Ding i Guo, 2001), pozwalającą na uwzględnienie mięknięcia materiału w trakcie rekrytalizacji metadynamicznej (MDRX). Rysunek 12 przedstawia rozwój mikrostruktury w trakcie procesu. Przerwa w odkształceniu i towarzyszące jej wytrzymanie w podwyższonej temperaturze skutkuje wzrostem ziarna (rysunek 12c). W pracy przedstawiono także kolejne potwierdzenie dla kryterium zmiany charakteru krzywej płynięcia, podanego w (Sakai, 1995).

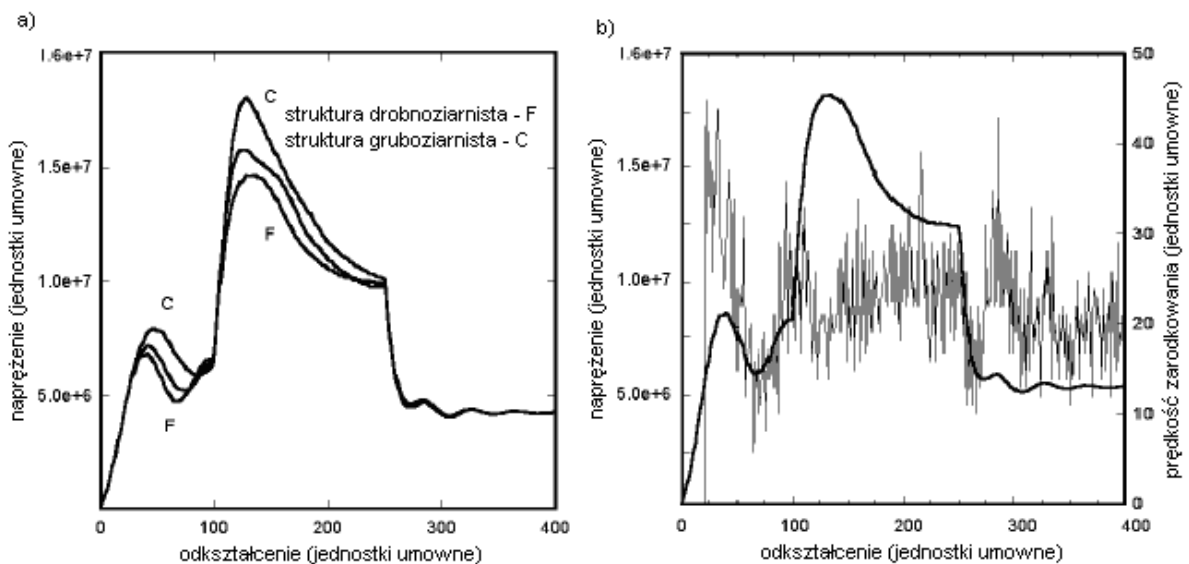
W pracy (Madej i in., 2004) przedstawiono powiązanie modelu zmiennej wewnętrznej IVM (ang. Internal Variable Model) z CA. W pracy tej wykorzystano uprzednio zidentyfikowane parametry modelu IVM jako zmienne wejściowe dla symulacji CA. Uzyskane z obu modeli krzywe naprężenia nie zostały jednak porównane, gdyż rezultat obliczeń CA przedstawiono w jednostkach umownych.

Gawąd i in. (2004; 2005) przedstawili kolejną propozycję modelu DRX. W pracy wykorzystano współczynniki otrzymane z modelu IVM jako zmienne wej-



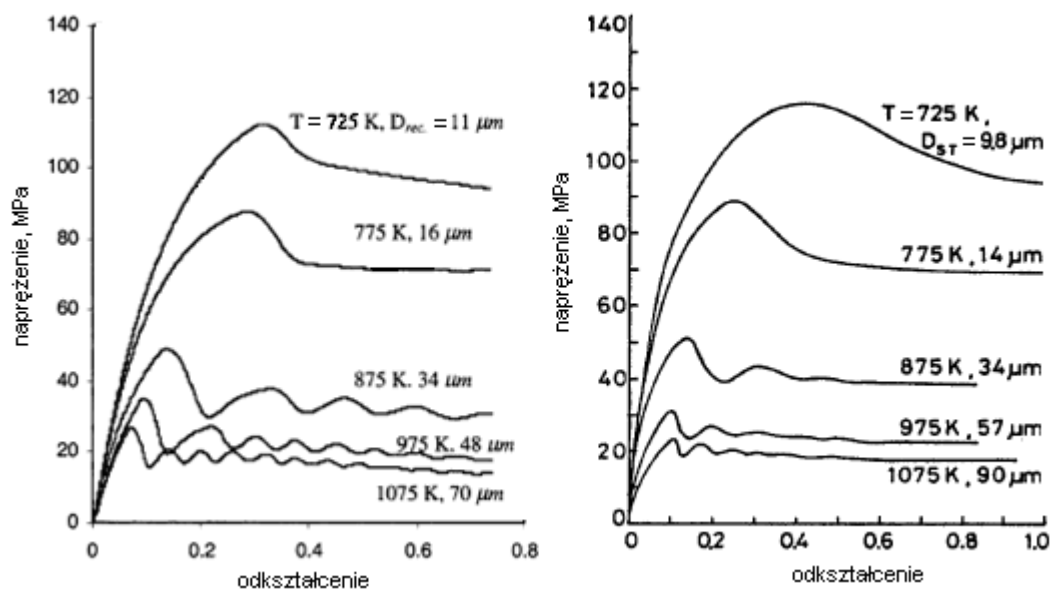


Rysunek 8. Obrazy mikrostruktury dla różnych prędkości generowania dyslokacji oraz ułamków rekrytalizacji x_{rec} : a) $dp/dt = 10$, $x_{rec} = 0,1$ b) $dp/dt = 1000$, $x_{rec} = 0,1$ c) $dp/dt = 10$, $x_{rec} = 0,5$ d) $dp/dt = 1000$, $x_{rec} = 0,5$ (Goetz i Seetharaman, 1998).
 Figure 8. Images of microstructure for various rates of nucleation of dislocation and various recrystallization volume fractions x_{rec} : a) $dp/dt = 10$, $x_{rec} = 0,1$ b) $dp/dt = 1000$, $x_{rec} = 0,1$ c) $dp/dt = 10$, $x_{rec} = 0,5$ d) $dp/dt = 1000$, $x_{rec} = 0,5$ (Goetz i Seetharaman, 1998).



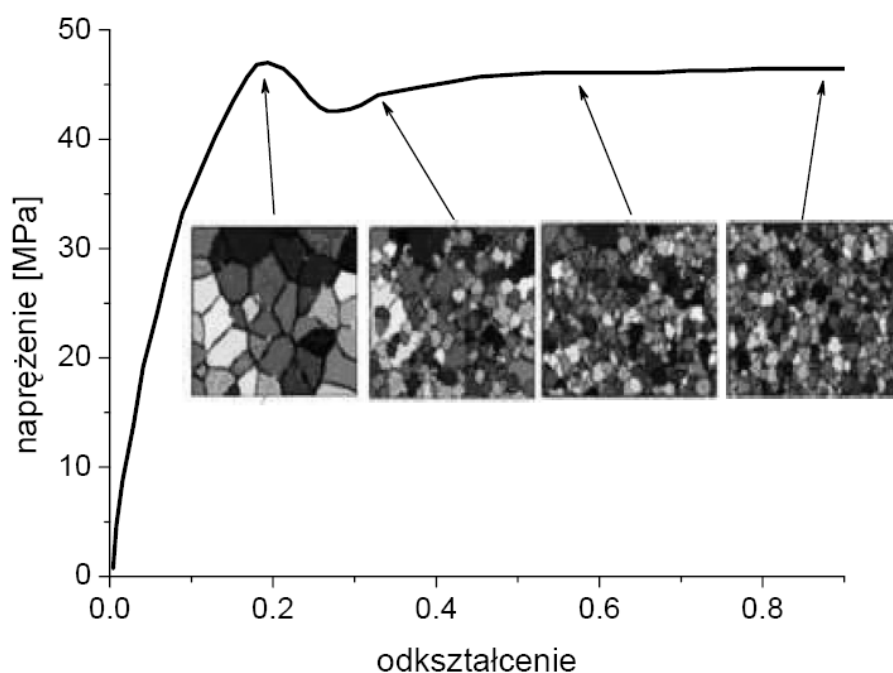
Rysunek 9. Wpływ zmiany prędkości odkształcenia w cyklu $1,4 \cdot 10^{-3} s^{-1}$, $3,7 \cdot 10^{-2} s^{-1}$ i ponownie $1,4 \cdot 10^{-3} s^{-1}$ a) Krzywe naprężenia dla trzech różnych średnich rozmiarów ziarna początkowego (MSG), b) Porównanie krzywych naprężenia i prędkości zarodkowania pod wpływem zmiany prędkości odkształcenia (Kroc, 2001).

Figure 9. Effect of change of strain rate during a cycle $1,4 \cdot 10^{-3} s^{-1}$, $3,7 \cdot 10^{-2} s^{-1}$ and again $1,4 \cdot 10^{-3} s^{-1}$ a) Flow stress curves for three different initial average grain sizes (MSG), b) Comparison of flow stress curves and nucleation rates influenced by changes of strain rate (Kroc, 2001).



Rysunek 10. Porównanie krzywych płynięcia materiału dla zestawu temperatur (725-1075 K) i prędkości odkształcenia $2,0 \cdot 10^{-3}$: a) wyniki symulacji, b) wyniki doświadczalne (Ding i Guo, 2001).

Figure 10. Comparison of flow stress curves for temperatures (725-1075 K) and strain rates $2,0 \cdot 10^{-3}$: a) results of simulation, b) experimental data (Ding i Guo, 2001).

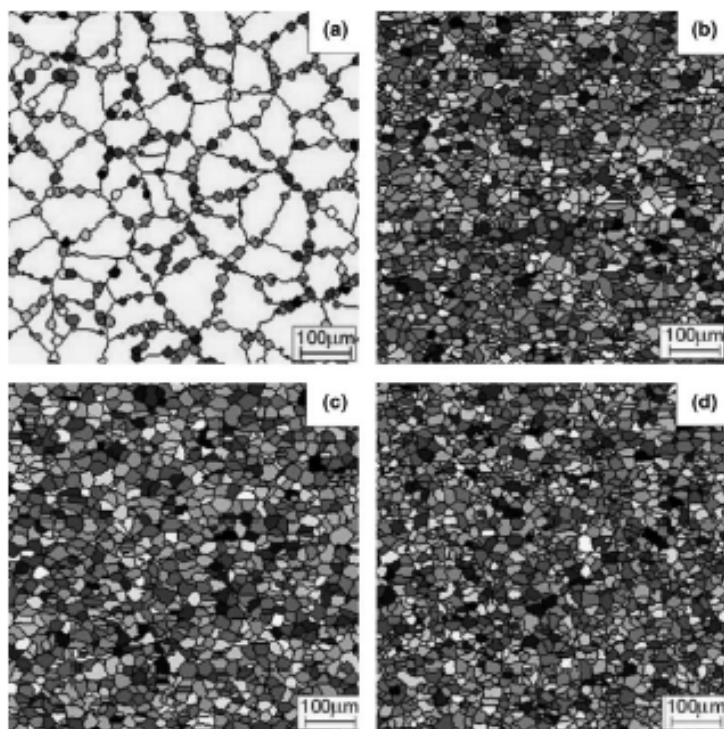


Rysunek 11. Rozwój mikrostruktury na poszczególnych etapach umocnienia dla stali HY-100 ($T = 1100^{\circ}\text{C}$, $\dot{\epsilon} = 0,01 \text{ s}^{-1}$) (Qian i Guo, 2004).
Figure 11. Microstructure evolution at subsequent stages of hardening for steel HY-100 ($T = 1100^{\circ}\text{C}$, $\dot{\epsilon} = 0,01 \text{ s}^{-1}$) (Qian i Guo, 2004).

ściowe symulacji CA. Uzyskane wyniki porównano z danymi doświadczalnymi, uzyskując dość dobrą zgodność dla małych prędkości odkształcenia ($0,1\text{s}^{-1}$) oraz znaczące rozbieżności dla większych prędkości (1s^{-1}). W pracy (Gawąd i in., 2005) przedstawiono także kolejne potwierdzenie dla kryterium Sakai (1995). Ponadto zaprezentowano przykłady wpływu sąsiedztwa zarówno na otrzymywane mikrostruktury jak i uzyskiwane wykresy naprężenia.

Svyetlichnyy i Milenin (2005) badali wpływ prędkości zarodkowania i prędkości rozrostu ziaren na charakter krzywej naprężenia. W pracy wskazano m.in., że krytyczna gęstość dyslokacji nie wyznacza jednoznacznie ani odkształcenia pikowego, ani naprężenia pikowego. Uzyskane w pracy wyniki wskazują dobrą jakościową zgodność z danymi dostępnymi w literaturze.





Rysunek 12. Symulacja mikrostruktury: a) przy odkształceniu 0,17 i b) 0,4, c) po wytrzymaniu w temperaturze 750 K przez 100 s, d) przy dalszym odkształceniu 0,9 (Kugler i Turk, 2004).

Figure 12. Simulation of microstructure: a) after the strain of 0,17 and b) 0,4, c) after maintaining in the temperature 750 K for 100 s, d) after further deformation with the strain of 0,9 (Kugler i Turk, 2004).

5. WYBRANE ZAGADNIENIA MODELOWANIA CA PROCESÓW REKRYSALIZACJI

Kolejny rozdział poświęcony jest kluczowym problemom, które napotyka się w trakcie budowy modeli rekryształizacji. Wybór ten został poprzedzony wcześniejszymi doświadczeniami Autorów niniejszej pracy w tworzeniu własnych modeli, opartych o CA. Autorzy starali się przedstawić zakres problemów, dla których napotyka się w literaturze przedmiotu rozbieżne rozwiązania.

5.1. Wpływ doboru sąsiedztwa

Dobór sąsiedztwa wpływa w dużym stopniu na zachowanie modelu. Wpływ ten obserwować można zarówno w kinetyce procesu jak i w uzyskanym kształcie symulowanych ziaren i co za tym idzie w końcowej mikrostrukturze. Szczególnie istotne jest uzyskanie ziaren o kształcie globularnym (np. heksagonalnych lub oktagonalnych) na etapach symulacji poprzedzających zderzenie rozrastających się ziaren. Autorzy poszczególnych prac proponują rozmaite strategie, prowadzące do odtworzenia realistycznego kształtu ziaren w trakcie wzrostu.

Dobór sąsiedztwa jest arbitralnie obieralną częścią

konstrukcji modelu, choć uzależniony jest od rodzaju siatki i ilości wymiarów. Autorzy przyjmują różne typy sąsiedztwa, jak sąsiedztwo von Neumann'a (Ding i Guo, 2001; Ding i Guo, 2002) lub Moore'a (Kroc, 2001; Svyetlichnyy i Milenin, 2005). Goetz i Seetharaman (1998) zastosowali sąsiedztwo zbudowane z 7 komórek, dzięki czemu uzyskano kształt ziaren przed zderzeniem zbliżony do ośmiokątnego. W pracy (Hesselbarth i Göbel, 1991) przetestowano kilka rodzajów sąsiedztwa, zarówno klasyczne von Neumann'a i Moore'a jak i rozszerzone sąsiedztwo Moore'a o szerokości „ściany” $r = 2$, oraz sąsiedztwo heksagonalne. Ten ostatni typ sąsiedztwa wykorzystywano także w pracy (Gawąd i in., 2004).

Odmienne podejście do odtworzenia globularnego kształtu ziaren zaproponowano w (Kroc, 2001). Wykorzystuje się tam sąsiedztwo Moore'a, natomiast w regułach przejścia uwzględniono probabilistyczne zachowanie ruchu granic ziaren. Podejście to zastosowano zarówno w modelu SRX jak i DRX, przedstawionym w tej pracy. W obu przypadkach zachowano globularny kształt ziaren w trakcie rozrostu. Metodę podaną w (Kroc, 2001) z powodzeniem zastosowano później w pracy (Kugler i Turk, 2004), z tym, że jako sąsiedztwo bazowe wykorzystano sąsiedztwo von Neumann'a.

Davies (1995) rozważał wpływ rodzaju sąsiedztwa na kinetykę modelu rekryształizacji. Przedmiotem jego badań były standardowe sąsiedztwo von Neumann'a oraz zmodyfikowane sąsiedztwo Moore'a. Modyfikacja tego ostatniego polegała na wykorzystywaniu jedynie 6 komórek, poprzez odrzucenie losowo jednej spośród diagonalnych par komórek. Konkluzją z pracy jest brak wpływu rodzaju sąsiedztwa na kinetykę zjawiska. Autor zastosował statystyczny test t-test, w wyniku którego stwierdził, że z 95% pewnością rodzaj sąsiedztwa nie wpływa na wartość parametru eksponenty czasowej (eksponenty Avramiego) w modelu Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (JMAK).

Porównanie sąsiedztwa Moore'a i heksagonalnego zostało przedstawione w pracy (Kroc, 2005). Rozważano tam wpływ rodzaju sąsiedztwa na przykładzie kurczenia się doskonale okrągłych ziaren (przez doskonale okrągłe należy rozumieć w tym wypadku: doskonale okrągłe w granicach rozdzielczości siatki obliczeniowej). Stwierdzono, że całkowity obszar zajmowany przez ziarna jest liniową funkcją czasu dla obydwu rodzajów sąsiedztwa. Podobne wyniki uzyskali autorzy pracy (Baudin i in. 1996), wykorzystując sąsiedztwo von Neumann'a. Nowością w pracy (Kroc, 2005) jest wskazanie, że współczynnik kierunkowy (nachylenie) tej funkcji liniowej silnie zależy



od przyjętego sąsiedztwa.

Wpływ doboru sąsiedztwa na symulowany rozwój mikrostruktury oraz na przebiegi krzywych naprężenia badano w pracy (Gawąd i in., 2005). W pracy tej potwierdzono znany wcześniej wpływ sąsiedztwa na kształt ziaren. Ponadto wskazano, że wykresy naprężenia, uzyskiwane w symulacjach różniących się wyłącznie typem sąsiedztwa, odbiegają znacząco przebiegami. Wynik ten tłumaczono wpływem łącznej długości granic ziarna, która jest efektywnie różna dla sąsiedztwa von Neumann'a i heksagonalnego.

W przypadku modeli 3D interesującą koncepcję przedstawili Marx i in. (1999). Zastosowali oni specjalny parametr Δx , określający maksymalny możliwy przyrost wielkości ziarna w trakcie pojedynczego kroku CA. Dla poszczególnych rodzajów sąsiedztwa obliczono odpowiadające im zakresy wartości Δx , a następnie dobierano takie rozszerzenie sąsiedztwa, aby przyrosty ziarna nie przekraczały dopuszczalnych wartości. Praca (Marx i in., 1999) zawiera też analizę wpływu rozmiaru sąsiedztwa na kształt ziaren przed zderzeniem. Sugeruje się, że zadowalające wyniki (tj. sferyczny kształt ziaren) uzyskiwane są dla sąsiedztwa o promieniu ok. 7 komórek.

5.2. Zarodkowanie

Proces zarodkowania jest kluczowy dla procesów rekrytalizacji. Paradoksalnie, właśnie ten element sprawia największe trudności w budowie modeli opartych o CA. Jak zostanie wykazane dalej, w szeregu prac składowa ta jest wyznaczana przy pomocy oddzielnego modelu, który jedynie współdziała z CA. Jedną z przyczyn takiego postępowania jest trudność w poprawnym uwzględnieniu w modelu zjawisk prowadzących do pojawienia się zarodka, zachodzą one bowiem w skali o rzędy wielkości mniejszej niż skala używana w symulacji. Wyodrębnienie osobnego modelu zarodkowania znaleźć można także w pracach dotyczących krystalizacji, np. dla polimerów (Raabe, 2004) lub struktur globularnych, wykorzystywanych w formowaniu tiksotropowym (Gawąd i in., 2005).

5.3. Zarodkowanie SRX

Algorytm zarodkowania przedstawiony w (Marx i in., 1999) zakłada, że zarodki nowych ziaren tworzone są na początku symulacji. Jako zarodek w pracy tej rozumiana jest sfera o określonym rozmiarze (co oznacza, że zarodek składa się z wielu komórek CA), orientacji krystalograficznej i położeniu w przestrzeni. Wprowadzana jest także funkcja $N_i = f(T, t_i)$, określająca ile zarodków pojawi się w punkcie czasowym symulacji t_i i w temperaturze T .

Model SRX przedstawiony w (Kroc, 2001) zakłada, że ilość zarodków generowana jest na podstawie równania:

$$\frac{\Delta N}{\Delta t} = \dot{N}(1 - F) \quad (5)$$

gdzie ΔN – liczba zarodków powstałych w trakcie kroku czasowego, \dot{N} – prędkość zarodkowania, F – współczynnik skalujący. Utworzone zarodki są następnie rozmieszczane losowo w siatce CA. Ponieważ model zakłada, że jest możliwe utworzenie zarodka wyłącznie wewnątrz osnowy, rzeczywista ilość powstałych zarodków sukcesywnie spada w trakcie symulacji. Jak widać, ponownie model kinetyki zarodkowania został przeniesiony na zewnątrz CA.

W pracy (Raabe i Hantcherli, 2005) przyjęto, że miejsca zarodkowania wyznaczane są jedynie na początku symulacji. Odpowiada to schematowi wysycenia miejsc zarodkowania (ang. Site Saturated Nucleation). W pracy tej przyjęto, że do zajścia zarodkowania wymagane jest spełnienie kryteriów termodynamicznej i kinetycznej niestabilności. Określenie miejsc zarodkowania zostało zrealizowane przez dodatkowy algorytm, pracujący poza zestawem reguł CA.

Zarodkowanie homogeniczne i heterogeniczne było przedmiotem badań w pracy (Goetz i Seetharaman, 1998). W homogenicznym schemacie zarodkowania przyjęto, że zarodki pojawiają się w losowych miejscach na początku symulacji. Natomiast zarodkowanie heterogeniczne zasymulowano dwuetapowo. W pierwszym etapie za pomocą zarodkowania homogenicznego wygenerowano strukturę początkową dla etapu drugiego. W drugim etapie wprowadzono zasadę, że nowe zarodki mogą pojawiać się wyłącznie na granicach wcześniejszych ziaren. W tym etapie przeprowadzono obliczenia dla schematu z wysyceniem miejsc zarodkowania oraz ze stałą prędkością zarodkowania.

5.4. Zarodkowanie DRX

Proces zarodkowania DRX wydaje się bardziej złożony niż w przypadku symulacji rozrostu ziarna. Zwykle nie jest możliwe wykorzystanie założenia o wysyceniu miejsc zarodkowania, a tworzenie zarodków odbywa się heterogenicznie i z różną w czasie kinetyką, zależną od przebiegu procesu odkształcenia. W praktycznie wszystkich pracach powstanie zarodka nowego ziarna uzależnione jest od jednoczesnego spełnienia szeregu warunków. Poniżej omówiono pokrótce najczęściej wykorzystywane spośród nich.

Jako pierwszy warunek przyjmuje się, że zarodkowanie następuje wyłącznie na granicach ziaren, zarówno pierwotnych jak i wtórnych. Założenie to od-



powiada zarodkowaniu w wyniku wybrzuszenia granic ziaren (Ding i Guo, 2001). Mechanizm ten znajduje dobre potwierdzenie eksperymentalne (Ding i Guo, 2001), jednakże wiadomo też, że uprzywilejowanymi miejscami zarodkowania są również wtrącenia obcych faz, granice podziaren i struktur bliźniaczych i in. Jak dotąd został opracowany zaledwie jeden model DRX (Goetz, 2005) oparty o CA, wykorzystujący inne miejsca zarodkowania niż granice ziaren. W pracy tej wprowadzono do modelu zarodkowanie na wydzieleniach (PSN) (ang. Particle Stimulated Nucleation).

Kolejny warunek związany jest z krytyczną gęstością dyslokacji. Sprawdzany jest warunek, czy gęstość dyslokacji przekracza wartość krytyczną dla zarodkowania ρ_c . Wartość ta jest przyjmowana jako stała (Kugler i Turk, 2004; Svyetlichnyy i Milenin, 2005) lub obliczana na podstawie równań, np. Roberts'a i Ahlblom'a (Ding i Guo, 2001; Ding i Guo, 2002; Ding i Guo, 2004; Qian i Guo, 2004). W odróżnieniu od pozostałych prac dotyczących DRX, w pracy (Kroc, 2001) przyjęto, zamiast przekroczenia krytycznej gęstości dyslokacji, przekroczenie krytycznej różnicy gęstości dyslokacji pomiędzy komórką a tym spośród sąsiadów, który posiada największą gęstość dyslokacji.

Największą trudnością wydaje się określenie ilości zarodków, pojawiających się w kolejnych krokach symulacji oraz ich rozmieszczenia w siatce obliczeniowej. Szczególnie istotne jest to w przypadku, gdy wartości gęstości dyslokacji są identyczne w całych ziarnach bądź np. w komórkach, które dołączają do ziaren w tych samych krokach czasowych. W literaturze można wyróżnić cztery rozwiązania tego problemu.

Pierwszym z nich jest wprowadzenie równania, pozwalającego na obliczenie ilości zarodków N lub prędkości zarodkowania w kroku czasowym Δt . Wartości te uzależniane są od parametrów symulowanego procesu, takich jak temperatura i prędkość odkształcenia. Następnie obliczona ilość zarodków jest rozmieszczana losowo w przestrzeni automatów komórkowych poprzez zmienienie stanów wybranych w ten sposób komórek. Zatem wybrane komórki są „wyznaczone” do zostania zarodkiem nowego ziarna. Rozwiązanie to wykorzystano np. w pracach (Ding i Guo, 2001; Ding i Guo, 2004; Qian i Guo, 2004; Svyetlichnyy i Milenin, 2005). Można więc stwierdzić, że tworzenie zarodków jest rolą modelu zewnętrznego względem CA. Co więcej, przeczy ono założeniu lokalności oddziaływań w modelach CA, gdyż zakłada ingerencję zewnętrznego modelu, dysponującego globalną wiedzą o całym układzie. Wiedza ta obejmować musi efektywną prędkość zarodkowania. Podejście takie pomimo podanego wcześniej zastrzeżenia posiada także ważną zaletę, jaką jest dość dokładna kontrola nad

procesem zarodkowania.

Drugie rozwiązanie zostało zaproponowane w pracy (Goetz i Seetharaman, 1998). Wykorzystuje ono dwa jednocześnie mechanizmy: pierwszym jest zapewnienie niejednorodności poprzez wyznaczenie N losowych komórek do obniżenia gęstości dyslokacji w wyniku zdrowienia. Postępowanie to wynika z faktu, że w pracy tej celowo nie wykorzystano do obliczania gęstości dyslokacji żadnego wariantu modelu Kocks'a-Mecking'a, stąd konieczne było uwzględnienie procesów umocnienia i zdrowienia w inny sposób. Drugi mechanizm polega na wyznaczeniu M komórek jako potencjalnych miejsc zarodkowania. Rozwiązanie to cechuje się podobnymi słabościami co podejście pierwsze, wynikającymi z ingerencji w przestrzeń CA na podstawie wiedzy dostępnej wyłącznie globalnie. Krytyka tego mechanizmu podana została też w (Kroc, 2001).

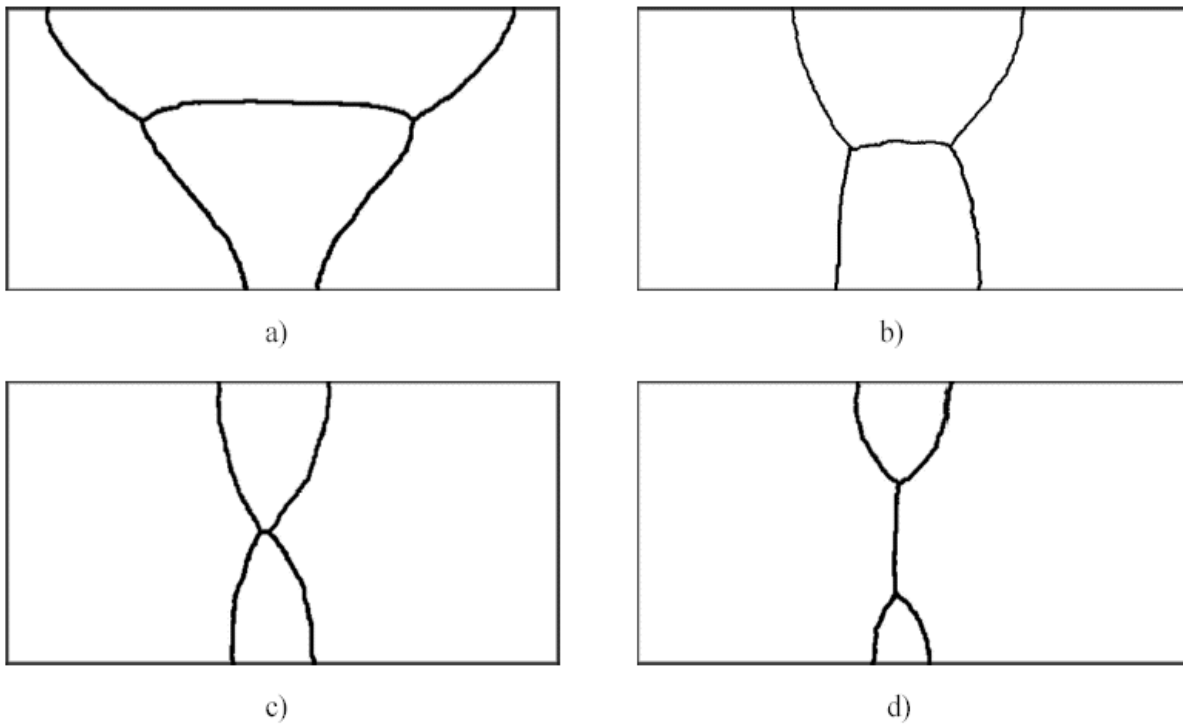
Trzecie rozwiązanie zdecydowanie lepiej wkomponowane jest w paradygmat CA. Zakłada się, że utworzenie zarodka wymaga przekroczenia pewnej dodatkowej bariery, realizowanej za pomocą liczby losowej skorygowanej o pewien współczynnik. Podejście to pozwala na wbudowanie zarodkowania w reguły przejścia CA, stosowane lokalnie w obrębie sąsiedztwa. Rozwiązanie to zostało wykorzystane w pracach (Kroc, 2001; Kugler i Turk, 2004).

Odmienne od przedstawionych wyżej jest rozwiązanie ostatnie, wykorzystywane w pracach (Gawąd i in., 2004; Gawąd i in., 2005). Jego główną ideą jest ominięcie utrudnień, wynikających z lokalnej (w obrębie ziarna lub jego strefy) jednorodności zmiennej stanu, determinującej zajście zarodkowania w wyniku przekroczenia wartości krytycznej. Metoda ta polega na zapewnieniu niejednorodności tej zmiennej w całym obszarze lub w obszarze powiązany z pojedynczym ziarnem, dzięki czemu proces zarodkowania można sprowadzić do deterministycznych reguł przejścia. W odróżnieniu od rozwiązania drugiego, nie jest konieczne losowe wyznaczanie zarodków. Wadą metody jest konieczność zmiany sposobu obliczania gęstości dyslokacji na taką, która zapewni jednoczesną zgodność ilościową z równaniami rozwoju dyslokacji i niejednorodną ich dystrybucję.

5.5. Rozrost ziarna

Rozrost ziaren jest drugim najistotniejszym procesem w trakcie rekrytalizacji i związany jest ściśle z migracją granic ziaren (Gottstein i Shvindlerman, 1999).

Stosowane w większości omawianych prac modele kinetyki rozwoju ziaren zakładają, że prędkość wzrostu ziarna jest proporcjonalna do iloczynu mobilności granicy ziarna M oraz siły napędowej F :



Rysunek 13. Rozwój mikrostruktury dla przykładowej konfiguracji ziaren w kolejnych krokach czasowych, a) $t = 2 \cdot 10^3$, b) $t = 2 \cdot 10^4$, c) $t = 3,6 \cdot 10^4$, d) $t = 4 \cdot 10^4$ (Kroc i Paidar, 2001).

Figure 13. Microstructure evolution for the arbitrary configuration of grains in subsequent time steps, a) $t = 2 \cdot 10^3$, b) $t = 2 \cdot 10^4$, c) $t = 3,6 \cdot 10^4$, d) $t = 4 \cdot 10^4$ (Kroc i Paidar, 2001).

$$v = MF \quad (6)$$

Odmienne podejście prezentuje praca (Raabe i Lücken, 2002), w której wykorzystywane jest termodynamicznie umotywowane równanie Turnbull'a.

Davies (1997) uzależnia wzrost ziarna od parametru probabilistycznego, związanego z równaniem prędkości wzrostu. W pracy tej wskazano możliwość włączenia arbitralnego modelu prędkości wzrostu ziarna do modelu opartego o CA. Praca ta nie prezentuje jednak metody uwzględnienia dużych prędkości wzrostu, przekraczających możliwości kinetyki wynikające z topologii siatki i sąsiedztwa. Próbę uniezależnienia od topologii siatki podjęto w pracy (Marx i in., 1999), w której rozważano problem wzrostu kierunkowego. Zaproponowano tam rozszerzenie sąsiedztwa w taki sposób, aby wyeliminować problemy z oszacowaniem prędkości wzrostu występujące dla standardowych typów sąsiedztwa.

Uproszczony model ruchu granic ziarna przedstawiony w (Kroc i Paidar, 2003) zademonstrowano na przykładzie układu, złożonego z czterech ziaren o różnej orientacji. W symulacji wykorzystywano jako jedyną siłę napędową ruchu granicy zasadę minimalizacji długości linii granicy ziarna w obrębie sąsiedztwa. Pomimo daleko idących uproszczeń modelu udało się uzyskać efekt formowania złączy pomiędzy trzema ziarnami (ang. Triple Junctions). Więcej układów granic pomiędzy ziarnami przedstawiono w pracy (Kroc i Paidar, 2001). Przykładowe wyniki

przedstawiono na rysunku 13.

Mobilność (ruchliwość) granicy ziarna w pracach dotyczących DRX (Ding i Guo, 2001; Ding i Guo, 2002; Ding i Guo, 2004; Qian i Guo, 2004; Kugler i Turk, 2004; Svyetlichnyy i Milenin, 2005) traktuje się jako aktywowaną termicznie i niezależną od dezorientacji granicy ziarna. Z kolei w pracy (Raabe i Hantcherli, 2005), zajmującej się rekrytalizacją statyczną, wykorzystywana jest empiryczna zależność mobilności granicy ziarna od kąta dezorientacji, z pominięciem wpływu temperatury.

W wielu opisywanych wcześniej pracach energię granicy ziarna traktuje się jako składową siły napędowej rozrostu ziarna. Znajduje to potwierdzenie w rozważaniach teoretycznych (Winning i in., 2002). W pracach (Ding i Guo, 2001; Ding i Guo, 2002; Ding i Guo, 2004; Qian i Guo, 2004; Kugler i Turk, 2004; Raabe i Hantcherli, 2005) wykorzystuje się równanie Read'a-Shockley'a, opisujące zależność energii granicy ziarna od dezorientacji granicy. Równanie to jest z powodzeniem wykorzystywane w także w pracach stosujących metodę MC, np. w (Yu i Esche, 2002).

5.6. Rozwój tekstury

W pracy (Davies i Hong, 1999) zaproponowano model 3D statycznej rekrytalizacji. Wprowadzone zostały trzy klasy tekstury, kubiczna, losowa oraz tekstura walcowania. Dane o teksturze zostały powiąza-



ne z prędkością migracji granicy ziaren. Wyniki symulacji dla trzech tekstur osobno oraz rozważanych łącznie zostały porównane z danymi doświadczalnymi w postaci rozkładów wielkości ziarna. Rozbieżności pomiędzy wynikami doświadczalnymi i obliczeniami wyjaśniono przez pominięcie w modelu termodynamicznie niestabilnych ziaren, które w rzeczywistym doświadczeniu pochłaniane są przez inne ziarna.

W pracy (Marx i in., 1999) przedstawiono wyniki modelowania 3D rekrytalizacji. Mikrostrukturę początkową wygenerowano na podstawie informacji uzyskanych doświadczalnie, z założeniem losowego rozkładu orientacji oraz zarodkowania z wysyconymi miejscami zarodkowania. Wyniki obliczeń pozostają w dobrej zgodności z wynikami doświadczalnymi, otrzymanymi dla materiału o losowym rozkładzie orientacji ziaren, w którym zarodkowanie rekrytalizacji następuje na wtrąceniach faz obcych. Warto jednak zaznaczyć, że w modelu nie uwzględniano zarodkowania na wtrąceniach, zatem porównanie wyników nie wydaje się do końca wiarygodne.

Niedawno Raabe i Hantcherli (2005) zademonstrowali wykorzystanie CA do symulacji rozwoju tekstury w trakcie SRX w stalach IF. Do wygenerowania mikrostruktury początkowej wykorzystał dane, pochodzące z metody EBSD, w tym informacje o składowych tekstury w próbce.

W pracach dotyczących modelowania DRX występują co prawda zagadnienia orientacji ziaren oraz rozrostu zależnego od orientacji, jednak żadna dotychczasowa praca nie przedstawia wyczerpującej analizy uzyskanych tekstur.

Podsumowując podrozdział można stwierdzić, że metoda CA stanowi użyteczne i efektywne narzędzie modelowania zjawisk takich jak np. rekrytalizacja. Możliwości zastosowania tej metody są szerokie, a jej zalety sprawiają, że jest stosunkowo powszechnie stosowana.

6. METODA CAFE

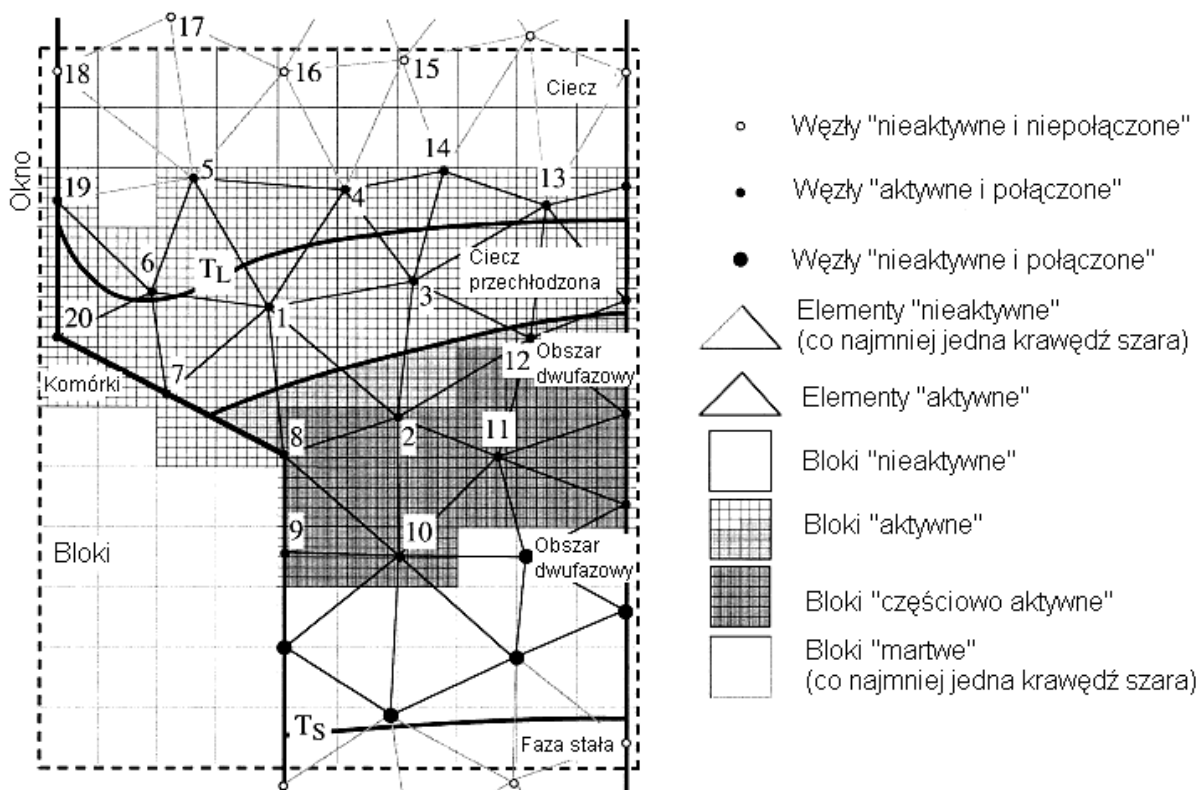
W literaturze napotkać można próby tworzenia modeli wykorzystujących CA, które nie ograniczają się jedynie do opisu materiału na poziomie mikro. Do tej grupy modeli należą połączenia metody CA z różnymi metodami analizy makro, np. z Metodą Elementów Skończonych (MES) lub Metodą Różnic Skończonych (MRS). Opracowane w ten sposób modele mają charakter wieloskalowy i oferują, w porównaniu do modeli konwencjonalnych, bardziej kompleksową informację o stanie materiału.

W tej części pracy przedstawiono przegląd zastosowań metod wieloskalowych, opartych o metodę CA. Dzięki skojarzeniu dwóch metod obliczeniowych,

metody analizy mikro, jaką jest szeroko opisana w poprzednich rozdziałach metoda automatów komórkowych, z metodami analizy makro, uzyskano bardzo rozbudowane narzędzie obliczeniowe, którego podstawową zaletą jest możliwość połączenia symulacji zjawisk w materiale, zachodzących jednocześnie w różnych skalach. Przykładem takiej metody analizy wieloskalowej jest metoda określona akronimem CAFE - Cellular Automata in Finite Element.

W dotychczasowej literaturze dotyczącej zagadnień związanych z rekrytalizacją nie odnaleziono prac, prezentujących połączenie metody elementów skończonych (MES) i automatów komórkowych. Prace takie publikowano natomiast dla zagadnień krzepnięcia. W pracy (Gandin i Rappaz, 1994) przedstawiono połączenie symulacji MES i CA dla rozwoju struktur dendrytycznych podczas krzepnięcia wlewka. W podejściu tym równanie różniczkowe opisujące pole temperatur rozwiązywane jest za pomocą MES. Natomiast CA wykorzystano do opisu rozwoju mikrostruktury i uwalniania w wyniku krzepnięcia ciepła utajonego. Modelowany obszar został w całości zdyskretyzowany oddzielnymi siatkami MES i CA. Wykorzystywana była regularna, czworokątna siatka CA, wielokrotnie gęstsza od siatki MES, wykorzystującej elementy trójkątne. Dla tak zdefiniowanej dyskretyzacji obszaru określone zostały funkcje interpolujące pomiędzy punktami węzłowymi MES i komórkami CA.

Rozwinięciem koncepcji przedstawionej wcześniej jest praca (Gandin i in., 1999). Wykorzystano w niej symulację 3D MES oraz CA oraz zaproponowano zaawansowaną technikę podziału obszaru ze względu na zachodzące zjawiska. Służy temu wprowadzenie dodatkowych poziomów grupowania komórek CA. Autorzy wyodrębnili *bloki*, będące zbiorami komórek, oraz *okna*, powstałe przez zgrupowanie bloków. Ponadto wprowadzone zostały zmienne w czasie i uzależnione od przebiegu procesu powiązania pomiędzy elementami skończonymi i blokami komórek. Schemat łączenia elementów i bloków przedstawiono na rysunku 14. Obliczenia pola temperatur są używane do określenia lokalnego przechłodzenia w skali mikrostruktury, wprowadzając siłę napędową do wzrostu dendrytów. Prezentowany model uwzględnia też powstawanie i rozwój tekstury. W pracy (Gandin, 2001), będącej kontynuacją omawianych wcześniej badań, przedstawiono porównanie wyników symulacji oraz pomiarów metodą EBSD próbek wykonanych z różnych materiałów i poddanych różnego rodzaju obróbce. Zarówno obrazy mikrostruktury jak i otrzymane figury biegunowe wskazują na bardzo dobrą zgodność obliczeń i prób doświadczalnych. Podane w pracy dokładne informacje o rozmiarze obliczane-go problemu (ilości komórek CA i elementów MES) oraz czasie obliczeń na maszynie o przeciętnej wy-



Rysunek 14. Schemat dynamicznego przyporządkowania komórek i elementów skończonych w modelu 3D CAFE. Przedstawiono bloki, okna i komórki. Zaznaczono także stan węzłów, elementów i bloków (Gandin i in., 1999).

Figure 14. Scheme of dynamic allocation of cells and finite elements in the 3D CAFE model. Blocks, windows and cells are presented. State of nodes, elements and blocks is marked (Gandin i in., 1999).

dajności pozwalają na bardzo pozytywną ocenę zastosowanych usprawnień modelu, zaczerpniętych z (Gandin i in., 1999).

Założenia przyjęte w pracy (Gandin i in., 1999) zostały zweryfikowane w pracy (Guillemot i in., 2004). Obliczenia wykonane modelem CAFE porównano z wynikami obliczeń metodą śledzenia frontu FT (ang. Front Tracking). Jako główne słabości przyjętej metody łączenia obliczeń CA i MES uznano przeszacowanie ciepła uwalnianego w trakcie krzepnięcia. Jako remedium zaproponowano wprowadzenie korekty, uwzględniającej stopniowe oddawanie ciepła i biorącej pod uwagę lokalną entalpię objętościową i ułamek objętości komórek w regionie krzepnięcia.

Zdecydowanie odmienne podejście do łączenia symulacji skali makro i mikro zaprezentowano w pracy (Yu i Esche, 2005). Autorzy rozważają tam połączenie symulacji MC rozrostu ziaren (Yu i Esche, 2002) z symulacją MES procesu kucia stopu Waspaloy. Należy zaznaczyć, że w pracy tej nie uwzględniono zajścia dynamicznej rekrytalizacji. Model MC wykorzystywano do obliczenia energii zmagazynowanej w materiale. W połączonym modelu założono, że obliczenia MC są prowadzone jedynie dla tzw. reprezentatywnych rejonów materiału, wybieranych na podstawie analizy wartości maksymalnych, minimalnych oraz gradientów energii zmagazynowanej w

materiale, uzyskanych z MES. Niestety autorzy nie podają metody propagowania uzyskanych wyników do pozostałej części materiału.

Prace (Beynon i in., 2000; Beynon i in., 2002; Das i in., 2002; Das 2002) są natomiast pierwszymi wykorzystującymi możliwości metody CAFE do zagadnień związanych z mechaniką pęknięcia. Autorzy stworzyli model rozwoju mikrostruktury w trakcie walcowania oraz propagacji pęknięć w warstwie przypowierzchniowej. Dzięki wykorzystaniu metody automatów komórkowych możliwe było uwzględnianie elementów struktury takich jak granice ziaren, wtrącenia obcej fazy, wnętrze ziarna, oraz ich wpływu na zachowanie struktury materiału w trakcie odkształcenia. Opracowany algorytm zakłada trzy główne etapy analizy: rozwój pierwotnej mikrostruktury, przekazanie wartości makroskopowych uzyskanych z MES do mezoskali, oraz w końcowej fazie obliczeń zwrotne przekazanie wartości obliczonych w CA do MES. Informacja do przestrzeni automatów komórkowych przekazywana jest z każdego punktu całkowania Gaussa.

W przypadku tworzenia pierwotnej mikrostruktury wykorzystano podejście zaproponowane w pracy (Davis, 1997). W przestrzeni automatów komórkowych w sposób losowy wygenerowano komórki stanowiące zarodki ziaren. W kolejnych iteracjach zarodki te ulegają rozrostowi z prędkością v_{gb} , wyrażoną



równaniem:

$$\dot{\epsilon}_{gb} = C_0 t^{-n} \quad (7)$$

gdzie: C_0 – stała, n – wykładnik równy 0,6.

W przypadku spotkania dwóch rozbudowujących się granic ziaren rozrost zostaje zatrzymany. Jest to często stosowany algorytm wykorzystywany do określenia pierwotnej mikrostruktury, w którym rozmiar ziarna jest zależny od początkowej liczby rozlosowanych zarodków.

Tak utworzoną mikrostrukturę w skali mikro w przestrzeni CA połączono z siatką elementów skończonych. W modelu tym przestrzeń automatów komórkowych nie jest w sposób sztywny związana z danym punktem całkowania Gaussa. Ponadto przestrzeń ta ulega deformacji w trakcie odkształcenia, co jest niewątpliwą zaletą tego rozwiązania. Do określenia przynależności komórek do danego punktu całkowania oraz określenia komórek sąsiednich wykorzystywana jest procedura triangulacji, szeroko opisana w (Das, 2002).

W kolejnych etapach informacje dotyczące rozkładu naprężeń i temperatury wewnątrz materiału, zawarte w węzłach siatki, wykorzystano jako dane wejściowe dla przestrzeni automatów komórkowych, modelujących rozwój mikrostruktury lub propagację pęknięć w oparciu o warunki panujące w materiale. Odkształcenie obliczane w symulacji CA powiązane z odkształceniem makroskopowym, uzyskanym z MES, za pomocą równania skalującego:

$$\epsilon_{CA}^i = f^i \epsilon_{FE}^j \quad (8)$$

gdzie: f – współczynnik skalujący, zależny od rodzaju elementu struktury ($f = 1$ dla wnętrza ziarna, 1,2 dla granicy ziarna, 3 dla wtrąceń), j – numer punktu całkowania (np. $j = 1; 2; 3; 4$ dla czterech punktów całkowania Gaussa).

W pracy tej założono, iż zjawiska migracji dyslokacji oparte są o przeciwstawne procesy generowania i anihilacji dyslokacji o przeciwnych znakach. Skorzystano z przystosowanego do nomenklatury automatów komórkowych równania:

$$d\rho_{CA}^i = d\rho_{CA}^+ - d\rho_{CA}^- = \left(\frac{M}{bl} - A\rho_{CA}^i \exp \frac{Q}{RT} \right) d\epsilon_{CA}^i \quad (9)$$

gdzie: ρ – gęstość dyslokacji, M – stała, Q – energia aktywacji, R – stała gazowa, T – temperatura, b – wektor Burgersa, l – średnia droga linii dyslokacji.

W wyniku obliczeń uzyskano pełną informację o gęstości dyslokacji w każdej komórce przestrzeni automatów komórkowych z uwzględnieniem procesów takich jak powstawanie pęknięć oraz rozwój rekrytalizacji dynamicznej. Założono, że w przypadku osiągnięcia krytycznej wartości odkształcenia komórka CA

może stać się zarodkiem rekrytalizacji dynamicznej, a wówczas gęstość dyslokacji spada do poziomu przed odkształceniem. Jest to często wykorzystywany mechanizm uwzględniający zjawisko DRX w skali mikro. W przypadku modelowania warstwy przypowierzchniowej uwzględniono również proces propagacji pęknięć. Czynnikiem kontrolującym powstanie pęknięcia jest krytyczna wartość odkształcenia, po przekroczeniu której komórka oznaczana jest jako zawierająca pęknięcie. Do modelowania propagacji pęknięć w warstwie przypowierzchniowej zdefiniowano zmodyfikowane sąsiedztwo Moore'a. Modyfikacja ta miała na celu poprawniejsze odwzorowanie opisywanego zjawiska, co jednak wydaje się być pewnym sztucznym zabiegiem autora. W rezultacie wynikiem rozwijającego się pęknięcia jest zwiększający się współczynnik FFI (ang. Final Failure Index) określający stosunek komórek CA z pęknięciem do całkowitej liczby komórek w przestrzeni.

Ostatnim krokiem jest przekazywanie informacji z układu CA do układu FE, zatem uzyskane jest pełne sprzężenie zwrotne pomiędzy modelami składowymi skali makro i mikro. Aby przekazać tę informację do przestrzeni elementów skończonych dokonano ich aglomeracji w celu uzyskania pojedynczych wartości umożliwiających przesłanie do skali makroskopowej. Przykładem może być obliczana wartości naprężenia uplastyczniającego zgodnie ze wzorem:

$$\sigma_{FE}^j = \sigma_0 + \alpha G(T) b \sqrt{\rho_{FE}^j} \quad (10)$$

$$\rho_{FE}^j = \frac{\sum_{i=1}^{N_A} \rho_{CA}^i}{N_{CA}} \quad (11)$$

gdzie: α – stała, $G(T)$ – moduł ścinania, N_{CA} – liczba komórek skojarzona z punktem całkowania Gaussa.

W przypadku modelowania propagacji pęknięć modyfikowana jest sztywność w skali makro:

$$E^{t+1}(T) = E^t(T) (1 - FFI^t) \quad (12)$$

gdzie: t – krok czasowy.

Dzięki temu autor nie musiał wprowadzać mechanizmu usuwania poszczególnych elementów skończonych z siatki MES w trakcie odkształcenia.

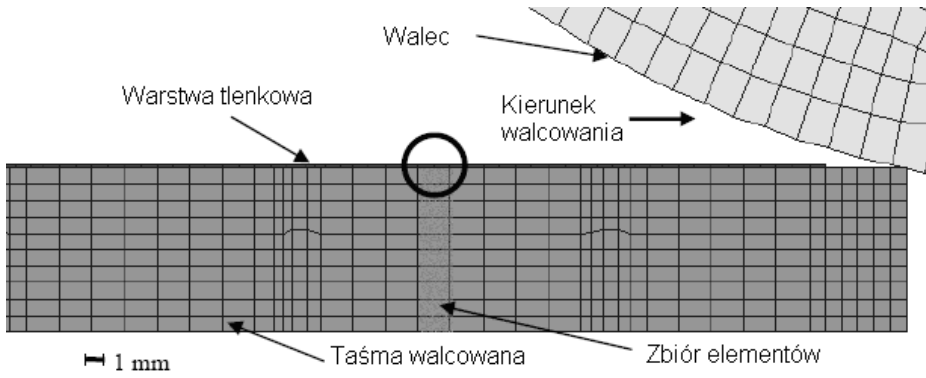
W wyniku propagacji pęknięć model CA zapewnia również informacje o modyfikacji współczynnika tarcia oraz współczynnika przewodności cieplnej pomiędzy pasmem a walcami zgodnie z równaniami:

$$\mu_{CAFE} = \mu_{lower} + FFI (\mu_{upper} - \mu_{lower}) \quad (13)$$

$$h_{CAFE} = h_{lower} + FFI (h_{upper} - h_{lower}) \quad (14)$$

gdzie indeksy *upper* i *lower* określają dolną i górną





Rysunek 15. Schemat modelu walcowania z wykorzystaniem metody CAFE (Das, 2002).
Figure 15. Scheme of model of rolling using CAFE method (Das, 2002).

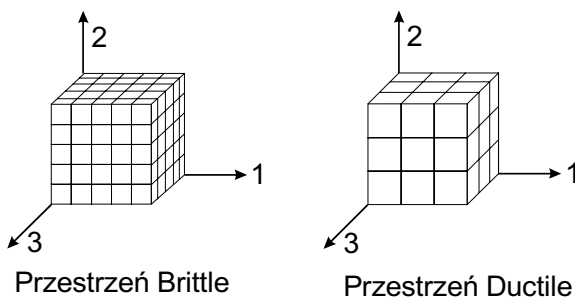
granicę dopuszczalnych zmian współczynników, μ – współczynnik tarcia, h – współczynnik przewodności cieplnej.

Opracowany model (Das, 2002) charakteryzuje się dużą innowacyjnością i stopniem skomplikowania. Uwzględnia równocześnie zjawiska rozwoju mikrostruktury w walcowanym paśmie jak również powstawanie pęknięć w warstwie przypowierzchniowej (rysunek 15), co zapewnia szczegółową analizę zjawisk zachodzących w trakcie procesu walcowania.

Podejście polegające na aglomerowaniu informacji ze skali mikro (przestrzeni CA) i przekazywaniu jej do skali makro (MES) jest szeroko stosowane do modelowania wielu procesów termomechanicznych także przez innych autorów, rozwijających metody CAFE.

Schterenlikht (2003) zaproponował analogiczne podejście analizy wieloskalowej do zjawiska pęknięcia. W pracy tej pewne rozwiązania zostały oparte o prace (Das, 2002), natomiast opracowany model dedykowany był zjawisku powstawania i propagacji kruchych oraz plastycznych pęknięć podczas testu Charpy'ego. W tym przypadku zjawisko zmian mikrostruktury odkształcanego materiału nie było brane pod uwagę.

W pracy (Schterenlikht, 2003) rozpatrywane zjawiska przebiegają w materiale w dwóch różnych skalach, dlatego wykorzystanie modelu CAFE było wskazane. Ciągłe pęknięcia propagują się na odległość 0,1–0,5 mm natomiast kruche na odległość 0,005–0,05



Rysunek 16. Przestrzenie automatów komórkowych w modelu (Schterenlikht, 2003).
Figure 16. Spaces of cells in the model (Schterenlikht, 2003).

mm. Tradycyjnie problem ten rozwiązuje się wprowadzając pośredni rozmiar elementu skończonego opisujący zarówno zjawisko kruchego oraz plastycznego pęknięcia (Shery i in., 1998; Howard i in., 2000). Wiąże się z tym naturalnie problemy z czasem i dokładnością obliczeń.

Aby uniknąć podobnych problemów w pracy (Schterenlikht, 2003) zdecydowano się na zastosowanie dwóch przestrzeni 3D automatów komórkowych, symulujących te zjawiska (rysunek 16). Przestrzenie różnią się ilością komórek, co bezpośrednio związane jest ze skalą modelowanych zjawisk.

Pierwsza przestrzeń nazwana *ductile*, oparta jest na dwóch możliwych stanach komórek (*alive* – komórka bez pęknięcia, *dead* – komórka z pęknięciem) oraz pojedynczej regule przejścia:

$$\Upsilon_{m(D)}(t_{i+1}) = \begin{cases} \text{alive} & \Leftrightarrow \beta_m(t_{i+1}) < \beta \\ \text{dead} & \end{cases} \quad (15)$$

gdzie: $\Upsilon_{m(D)}(t_{i+1})$ – stan komórki m z przestrzeni *ductile* w czasie t_{i+1} , β – zmienna określana z modelu Rousselier'a, opisującego zjawisko ciągliwego pęknięcia.

Informacje o propagującym pęknięciu przesyłane są do drugiej przestrzeni automatów nazwanej *brittle*, gdzie modelowane jest powstawanie i propagacja kruchego pęknięcia. Przestrzeń *brittle* opisana jest przez cztery możliwe stany komórek (*alive* – komórka bez pęknięcia, *aliveC* – komórka z wtrąceniem, *deadB* – komórka z pęknięciem powstałym zgodnie z mechanizmami kruchego pęknięcia, *deadD* – komórka z pęknięciem powstałym zgodnie z mechanizmami plastycznego pęknięcia) oraz pojedynczą regułą przejścia:

$$\Upsilon_{m(B)}(t_{i+1}) = \begin{cases} \text{deadB} & \Leftrightarrow A \\ \Upsilon_{m(B)}(t_i) & \end{cases} \quad (16)$$

gdzie:

$$\sigma_I^m(t_i) > \sigma_F^m \wedge \{ (\Upsilon_{m(B)}(t_i) = \text{aliveC}) \vee [\Upsilon_{l(B)}^m(t_i) = \text{deadB} \vee \Upsilon_{l(B)}^m(t_i) = \text{deadD}] \wedge | \alpha^m - \alpha^l | < \theta_F \}$$

$\Upsilon_{m(B)}(t_{i+1})$ – stan komórki m z przestrzeni *brittle* w



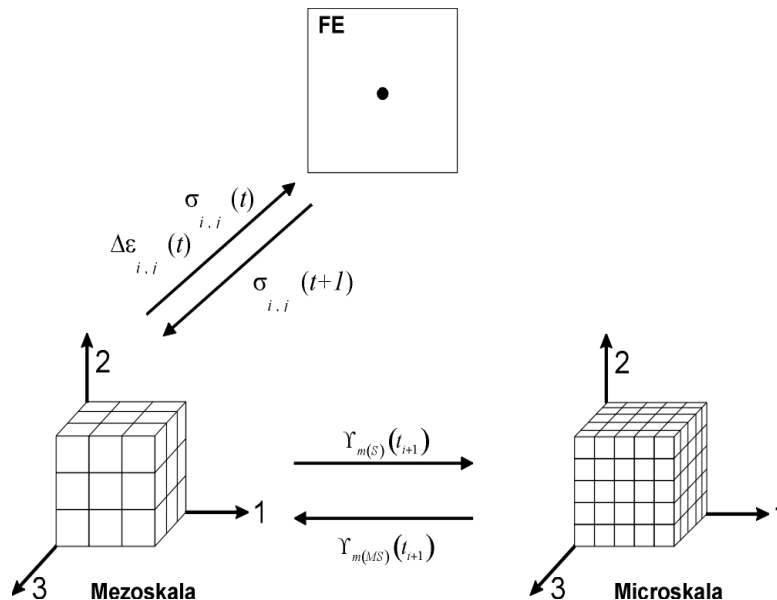
czasie t_{i+1} , σ_I – maksymalne naprężenie główne, σ_F – naprężenie pęknięcia, α – kąt dezorientacji, Q_F – wartość graniczna kąta dezorientacji.

Ilość dostępnych stanów komórek w przestrzeni *brittle* wiąże się z synchronizacją stanów komórek pomiędzy dwiema przestrzeniami automatów komórkowych. Informacje pomiędzy elementem skończonym a warstwami automatów komórkowych przesyłane są przy wykorzystaniu pojedynczego punktu całkowania Gaussa (rysunek 17).

Komunikacja oparta jest na prostej regule zakładającej, że gdy liczba martwych komórek, w którejkolwiek z przestrzeni osiągnie określoną wartość krytyczną, wówczas element skończony usuwany jest z siatki i nie bierze udziału w dalszych obliczeniach. Autor zastosował wersję kodu MES z wbudowanym algorytmem usuwającym elementy z siatki, co w pracy (Das, 2002) było niemożliwe.

Model, nazwany przez autorów ASCAFE, oparty jest na prostych założeniach i bardzo dobrze przewiduje zjawisko propagacji pęknięć w trakcie testu Charpy'ego (rysunek 18), a czas obliczeń uległ kilkukrotnemu zmniejszeniu w porównaniu z tradycyjnymi modelami opartymi na MES. Wiąże się to z możliwością zastosowania mniejszej liczby elementów skończonych, ponieważ zjawisko pęknięcia modelowane jest na niższych poziomach w przestrzeniach CA.

Wykorzystanie metody wieloskalowej CAFE do rozwiązywania podobnych problemów wydaje się bar-

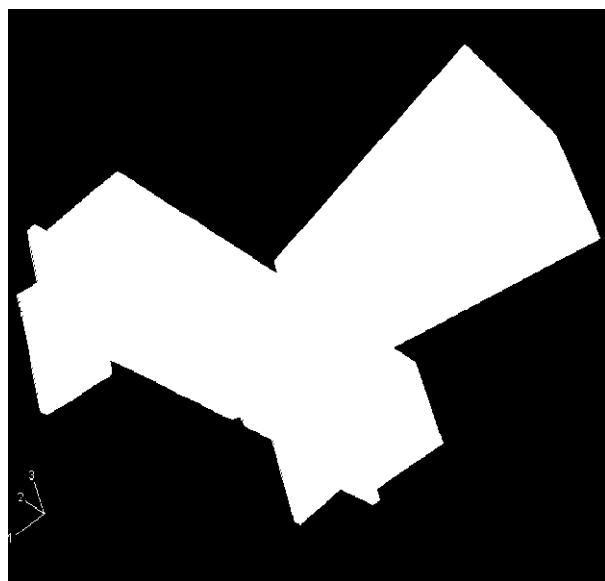


Rysunek 17. Schemat wieloskalowego modelu pęknięcia, wykorzystującego metodę CAFE (Schterenlikht, 2003).

Figure 17. Scheme of the multiscale model of fracture, based on the CAFE method (Schterenlikht, 2003).

dzo praktyczne, ponieważ jest ona w stanie uwzględnić zjawiska trudne w symulacji z użyciem tradycyjnych metod modelowania. Dodatkowo w takich zastosowaniach uzyskiwana jest znaczna redukcja czasu obliczeń w porównaniu z modelami FE, wiąże się to z możliwością zastosowania mniejszej liczby elementów skończonych. Zalety te są wykorzystywane również w innych zastosowaniach, które niejednokrotnie związane są ze zjawiskami opisanymi powyżej.

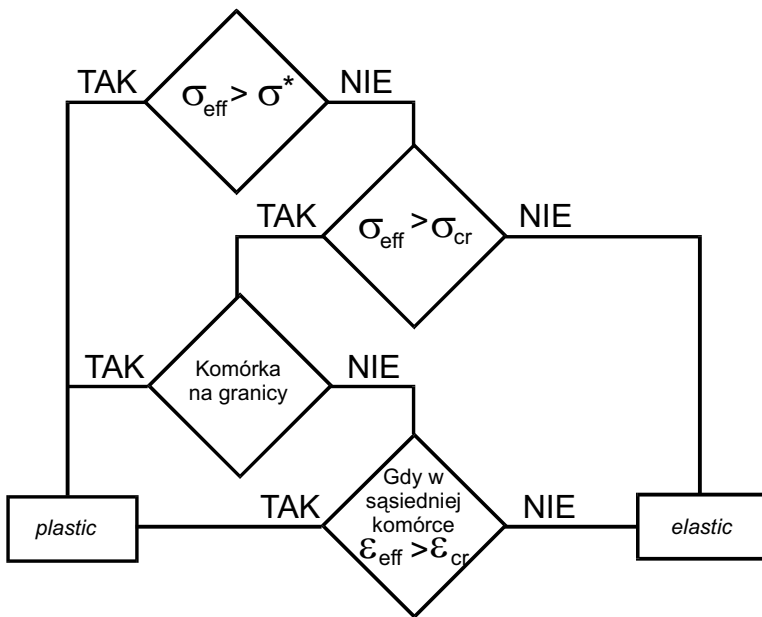
Przykładem może być powstawanie pęknięć, które jest nierozzerwalnie powiązane ze zjawiskiem lokalizacji odkształcenia, a to niejednokrotnie jest przyczynkiem do uszkodzenia materiału. Zjawisko lokalizacji odkształcenia z wykorzystaniem tradycyjnych metod FE również jest trudne do symulacji ze względu na swój nieciągły charakter oraz wieloskalowość. Dlatego naturalną próbą opisanie takich mechanizmów jest metodą analizy wieloskalowej oparta o metodę automatów komórkowych. Podejście oparte w dużej mierze o metodę CA połączoną z metodą analizy makro, jaką jest metoda różnic skończonych, zaprezentowano w pracy (Makarov i Romanova, 2000). Autorzy wykorzystując elementy metody CA uwzględnili zjawiska zachodzące na poziomie mezo: poślizgi zachodzące w pojedynczych kryształach, powstawanie i propagację pasm ścinania oraz rotację elementów struktury. W pracy tej założono dwa możliwe stany komórek w przestrzeniach CA, komórki mogą przyjmować dwa stany elastic oraz plastic. W pracy tej sformułowano również odpowiednie reguły przejścia umożliwiające modelowanie propagacji plastycznego odkształcenia w materiale. Reguły te schematycznie przedstawiono na rysunku 19.



Rysunek 18. Schemat testu Charpy'ego wykorzystany w pracy (Schterenlikht, 2003).

Rysunek 18. Scheme of the Charpy test used in (Schterenlikht, 2003).





Rysunek 19. Ilustracja reguł zmiany stanu, zdefiniowanych w pracy (Makarov i in., 2001).
 Figure 19. Illustration of the rules of changes of state, defined in (Makarov i in., 2001).

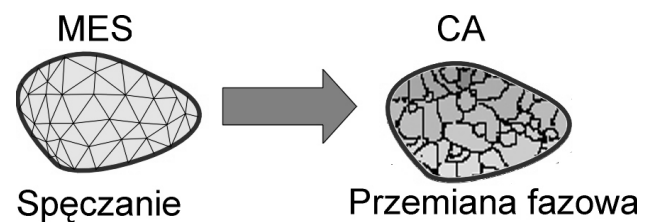
W pracach (Makarov i Romanova, 2000; Makarov, 2000; Makarov i in., 2001) założono, że propagacja plastycznego ścinania może zostać zainicjowana na granicach ziaren, wtrąceniach lub granicach międzyfazowych. Wówczas aby komórka CA przeszła w stan plastic wartość intensywności naprężenia σ_{eff} musi osiągnąć pewną wartość krytyczną σ_c . Wartość ta może być różna dla poszczególnych elementów struktury. Założono również, że komórki leżące wewnątrz ziarna mogą zmienić stan na *plastic* gdy wartość odkształcenia ε_{eff} w którejkolwiek komórce sąsiedniej przekroczyła wartość krytyczną ε_{cr} . W przypadku gdy te warunki nie są spełnione komórka odkształca się jako komórka w stanie *elastic*. W sytuacji gdy wartość naprężenia osiągnie wartość wytrzymałości na ścinanie σ^* komórka przechodzi w stan *plastic* niezależnie od położenia w ziarnie. Wyniki uzyskiwane przez w tych pracach są niezwykle interesujące i zachęcają do dalszego stosowania metod dyskretnych do zagadnień lokalizacji odkształcenia. Podstawową wadą tego podejścia jest brak wyników uzyskanych w trakcie modelowania rzeczywistego procesu przeróbki plastycznej.

Kolejnym zjawiskiem do modelowania którego wykorzystano z powodzeniem metody oparte na połączeniu metody FE i metody CA jest zjawisko przemian fazowych. Przemiana fazowa jest zjawiskiem bardzo dogodnym do symulacji z wykorzystaniem metody automatów komórkowych (Zhang i in., 2003). W pracy (Lan i in., 2005) szczegółowo przedstawiono sposób połączenia dwóch metod analizy, który odbiega od prezentowanego w dotychczasowych pracach podejścia (Makarov i in., 2001; Das, 2002; Schterenlikht, 2003). Autor wykorzystał bowiem metodę FE oraz CA praktycznie niezależnie. Metodę elemen-

tów skończonych wykorzystano do obliczeń spęczenia na gorąco próbki stalowej C-Mn. Każde ziarno w materiale opisano przez kilka elementów skończonych przez co rozmiar symulowanego obszaru ograniczono do kilku ziaren. Wynikiem obliczeń modelu MES jest wartość energii zakumulowanej oraz orientacja krystalograficzna ziaren w materiale. Dane te stanowią dane wejściowe do dalszej analizy zachowania materiału po odkształceniu. Z kolei zadaniem modelu opartego o automaty komórkowe jest symulacja przemiany fazowej austenit-ferryt po odkształceniu (rysunek 20).

Mikrostruktura w przestrzeni CA jest dyskretyzowana z wykorzystaniem komórek heksagonalnych. Każdą komórkę określono poprzez 5 zmiennych wewnętrznych: zmienną określającą

orientację krystalograficzną zarodka ziarna ferrytu, zmienną określającą wartość zakumulowanej energii, zmienną określającą fazę do której przynależy dana komórka (ferryt, austenit, faza g-a), zmienną określającą koncentrację węgla oraz zmienną określającą frakcję ferrytu w komórce. Kinetykę proponowanego modelu oparto na regułach przejścia bazujących na modelu zarodkowania oraz rozrostu nowych ziaren ferrytu. Założono, że zarodkowanie nowych ziaren ferrytu zachodzi na granicach oraz we wnętrzu ziaren austenitu. Atomy węgla z ferrytu są przekazywane do komórek w stanie $\gamma-\alpha$, a wartość zakumulowanej energii spada do 0 w danej komórce ferrytu. Dyfuzja węgla oraz ruch granicy austenit-ferryt określono w oparciu o modele analityczne (Lan i in., 2005). W przypadku gdy w komórce w stanie $\gamma-\alpha$ wartość zmiennej określającej ułamek ferrytu przekroczy 1, wówczas komórka taka zmienia stan na ferryt, a komórki sąsiednie przechodzą do stanu $\gamma-\alpha$ przejmując atomy węgla danej komórki. Proces ten przebiega do momentu ustalenia się koncentracji węgla w komórkach w stanie $\gamma-\alpha$.



Rysunek 20. Schemat jednokierunkowego przepływu informacji zastosowany w pracy (Lan i in., 2005).
 Figure 20. Scheme of one directional flow of information used in (Lan i in., 2005).



Zatem w tym przypadku nie zastosowano sprzężenia zwrotnego pomiędzy MES a CA. Informacja z MES jest jednokrotnie przekazana do przestrzeni CA i stanowi dane wejściowe do dalszych obliczeń rozwoju mikrostruktury. Model ten jednak pokazuje duże możliwości metody CA w zastosowaniach do symulacji procesów przemian fazowych.

7. PODSUMOWANIE

W pracy przedstawiono wybrane zagadnienia, związane z wykorzystaniem automatów komórkowych w inżynierii materiałowej. Oprócz wprowadzenia teoretycznego do tej metody symulacyjnej wskazano dziedziny nauki, w których została z powodzeniem zastosowana. Dużą uwagę poświęcono przeglądowi najnowszych dokonań w zakresie modelowania za pomocą CA zjawisk zachodzących w mikrostrukturze.

Nowoczesne trendy projektowania materiałów kładą nacisk na ich tworzenie kierowane planowanymi właściwościami. Oznacza to, że projektując proces technologiczny należy przewidywać właściwości otrzymanego materiału - co w wielu wypadkach sprowadza się do znajomości jego struktury.

Pomocnym narzędziem na takiej ścieżce projektowania są metody wieloskalowej. W niniejszej pracy omówiono przykłady jednego z podejść do analizy wieloskalowej - modelowania CAFE. Przedstawione zastosowania różnorodnych odmian tego paradygmatu obliczeniowego wskazują na jego znakomitą użyteczność i adaptowalność.

Uwaga końcowa: Praca zrealizowana w ramach projektu MEiN, nr. 11.11.110.643.

LITERATURA

Balakrishnan, R., Ranganathan, K., 1999, Vertex Cuts and Edge Cuts, A Textbook of Graph Theory, Springer-Verlag, New York.

Baudin, T., Penelle, R., Liu, Y., 1996, Simulation of normal grain growth by cellular automata, *Scripta Mater.*, 34, (11), 1679–1683.

Beynon, J.H., Das, S., Howard, I.C., Palmier, E.J., Shterenlikht, A., 2000, The combination of Cellular Automata and Finite Elements for the Study of Fracture; the CAFE model of Fracture., Mat. Konf., ECF14, ed., Neimitz, A., Rokach I.V., Kocańda, D., Gołoś, K., Kraków, 241-248.

Beynon, J.H., Das, S., Howard, I.C., Shterenlikht, A., 1976, Extending the Local Approach to Fracture; Methods for Direct Incorporation of Microstructural Effects into Finite Element Model of Fracture, Mat. Konf. ASME2002, ed., Brust, F.W., Vancouver, 2002, 229-237.

Burbelko, A., 2004, Mezomodelowanie krystalizacji metoda automatu komórkowego, Wydawnictwo AGH.

Conway, J.H., On Numbers and Games, Academic Press, New York.

Das S., Palmiere E.J., Howard I.C., 2002, CAFE: a Tool for Modeling Thermomechanical Processes, Proc. Thermomech.

Processing: Mechanics, Microstructure & Control, ed., Palmiere E.J., Mahfouf M., Pinna C., Sheffield, 296-301.

Das, S., 2002, The Effect Of Boundary Conditions And Material Data Representation On The Simulation Of Deformation During Hot Rolling, praca doktorska, Univeristy of Sheffield.

Davies, C.H.J. 1995, The effect of neighbourhood on the kinetics of a cellular automaton recrystallisation model. *Scripta Metall. et Mater.*, 33, (7), 1139–1143.

Davies, C.H.J., 1997, Growth of Nuclei in a Cellular Automaton Simulation of Recrystallization, *Scripta Mater.*, 36, (1), 35-40.

Davies, C.H.J., Hong, L., 1999, The cellular automaton simulation of static recrystallization in cold-rolled AA1050, *Scripta Mater.*, 40, (10), 1145–1150.

Ding, R., Guo, Z., 2001, Coupled quantitative simulation of microstructural evolution and plastic flow during dynamic recrystallization, *Acta Mater.*, 49, (16), 3163–3175.

Ding, R., Guo, Z., 2002, Microstructural modelling of dynamic recrystallisation using an extended cellular automaton approach, *Comp. Mat. Sci.*, 23, (1-4), 209–218.

Ding, R., Guo, Z., 2004, Microstructural evolution of a Ti–6Al–4V alloy during b-phase processing, experimental and simulative investigations. *Mat. Sci. and Eng., A*, 365, (1-2), 172–179.

Doherty, R., Hughes, D., Humphreys, F., Jonas, J., Jensen, D. J., Kassner, M., King, W., McNelley, T., McQueen, H., Rollett, A., 1997, Current issues in recrystallization, a review, *Mat. Sci. and Eng., A*, 238, (2), 219–274.

Gandin, C., 2001, Stochastic modelling of dendritic grain structures. *La Revuede Metallurgie*, (12), 1073–1077.

Gandin, C., Desbiolles, J., Rappaz, M., Th'évoz, P., 1999, A three-dimensional cellular automaton–finite element model for the prediction of solidification grain structures, *Metall. Mater. Trans. A*, 30A, 3153–3165.

Gandin, C. A., Rappaz, M. 1994. A coupled finite element - cellular automaton model for the prediction of dendritic grain structures in solidification processes, *Acta Metall.*, 42, (7), 2233–2246.

Gawąd, J., Macioł, P., Pietrzyk, M., 2005, Multiscale modeling of microstructure and macroscopic properties in thixofforming process using cellular automaton technique. *Arch. Metal. and Mater.*, 50, 549-562.

Gawąd, J., Madej, Ł., Szeliga, D., Pietrzyk, M., 2004, Microstructure evolution modeling based on the rheological parameters using the cellular automaton technique, Mat. Konf. Forming 2004, 67–70.

Gawąd, J., Madej, Ł., Szeliga, D., Pietrzyk, M., 2005, Cellular automaton technique as a tool for a complex analysis of the microstructure evolution and rheological behaviour, *Act. Met. Slov.*

Goetz, R., 2005, Particle stimulated nucleation during dynamic recrystallization using a cellular automata model. *Scripta Mater.*, 52, (9), 851–856.

Goetz, R., Seetharaman, V., 1998, Modeling dynamic recrystallization using cellular automata. *Scripta Mater.*, 38, (3), 405–413.

Goetz, R., Seetharaman, V., 1998a, Static recrystallization kinetics with homogeneous and heterogeneous nucleation using a cellular automata model, *Metal. Mater. Trans. A*, 29, 2307–2321.

Gottstein, G., Shvindlerman, L., 1999, *Grain Boundary Migration in Metals—Thermodynamics, Kinetics, Applications*, CRC Press.

Guillemot, G., Gandin, C. A., Combeau, H., Heringer, R., 2004, A new cellular automaton - finite element coupling scheme for alloy solidification. *Modelling and Simulation in Mat.*



- Sci. and Eng.*, 12, 545–556.
- Hesselbarth, H., Göbel, I. 1991. Simulation of recrystallization by cellular automata, *Acta Metall.*, 39, 2135–2143.
- Holm, E. A., Battaile, C. C., 2001, The computer simulation of microstructural evolution, *JOM*, 53, (9), 20–23.
- Howard, I.C., Li Z.H., Sheikh M.A., 2000, Modeling the ductile to cleavage transition in steels and structures, ed. Paris P. C., Jerina K. L., ASTM STP 1360, USA, 152–168.
- Kroc, J., Paidar, V., 2001, Modelling of the effect of triple junctions on grain boundary migration by a cellular automaton, *J. de Physique IV*, 11, 85–92.
- Kroc, J., Paidar, V., 2003, Modelling of Recrystallization and Grain Boundary Migration by Cellular Automata. *Mat. Sci. Forum*, vol. 426–432, 3873–3878.
- Kroc, J., 2001, Simulation of Dynamic Recrystallization by Cellular Automata. Praca doktorska, Mathematical and Physical Faculty of Charles University, Prague, Czech Republic.
- Kroc, J., 2002, Application of Cellular Automata Simulations to Modelling of Dynamic Recrystallization, *Lect. Notes in Comp. Sci.*, 2329, 773–782.
- Kroc, J., 2005, Influence of Lattice Anisotropy on Models Formulated by Cellular Automata in Presence of Grain Boundary Movement, a Case Study, *Mat. Sci. Forum*, 482, 195–198.
- Kugler, G., Turk, R., 2004, Modeling the dynamic recrystallization under multi-stage hot deformation. *Acta Mater.*, 52, (15), 4659–4668.
- Kułakowski, K., 2000, Automaty Komórkowe, Ośrodek Edukacji Niestacjonarnej, Kraków.
- Lan, Y.J., Xiao, N.M., Li, D.Z., Li, Y.Y., 2005, Mesoscale simulation of deformed austenite decomposition into ferrite by coupling a cellular automaton method with a crystal plasticity finite element model, *Acta Mater.*, 53, 991–1003.
- Madej, Ł., Hodgson, P., Gawąd, J., Pietrzyk, M., 2004, Modeling of rheological behavior and microstructure evolution using cellular automaton technique. Střren, S., redaktor, Mat. Konf. ESAFORM 2004, Trondheim, ed., Storen, S., 2004, 143–146.
- Makarov, P.V., Romanova, V.A., 2000, Mesoscale plastic flow generation and development for Polycrystals, *Theor. Appl. Fract. Mech.*, 33, 1–7.
- Makarov P.V., 2000, Localized deformation and fracture of polycrystals at mesolevel, *Theor. Appl. Fract. Mech.*, 33, 23–30.
- Makarov, P.V, Schmuader, S., Cherepanov, O.I., Smolin, I.Yu., Romanova, V.A., Balokhonov, R.R., Saraev, D.Yu., Soppa, E., Kizler, P., Fisher, G., Hu, S., Ludwig, M., 2001, Simulation of elastic-plastic deformation and fracture of materials at micro-, meso- and macrolevels, *Theor. Appl. Fract. Mech.*, 37, 183–244.
- Malarz, K., 2003, Wykład Automaty Komórkowe, Wydział Fizyki i Techniki Jądrowej AGH, Kraków.
- Marx, V., Reher, F. R., Gottstein, G., 1999, Simulation of primary recrystallization using a modified three-dimensional cellular automaton. *Acta Mater.*, 47(4), 1219–1230.
- McQueen, H., 2004, Development of dynamic recrystallization theory. *Mat. Sci. and Eng., A*, 387–389, 203–208.
- Miodownik, M. A., 2002, A review of microstructural computer models used to simulate grain growth and recrystallisation in aluminium alloys, *J. Light Metals*, 2, (3), 125–135.
- Mukhopadhyay, P., Loeck, M., Gottstein, G., 2004, Simulation of microstructure evolution during recrystallization using a high-resolution three-dimensional cellular automaton, *J. Phys. IV France*, (120), 225–230.
- Peczak, P. 1995. A Monte Carlo study of influence of deformation temperature on dynamic recrystallization, *Acta Metall. Mater.*, 43, (3), 1279–1291.
- Ponge, D., Gottstein, G., 1998, Necklace formation during dynamic recrystallization mechanisms and impact on flow behavior, *Acta Mater.*, 46, (1), 69–80.
- Qian, M., Guo, Z., 2004, Cellular automata simulation of microstructural evolution during dynamic recrystallization of an hy-100 steel, *Mater. Sci. Eng. A*, 365, (1-2), 180–185.
- Raabe, D., 1998, Computational Material Science, Wiley-VCH Verlag GmbH.
- Raabe, D., 2002, Cellular automata in materials science with particular reference to recrystallization simulation, *Ann. Rev. Mat. Res.*, 32, 53–76.
- Raabe, D., 2004, Mesoscale simulation of spherulite growth during polymer crystallization by use of a cellular automaton, *Acta Mater.*, 52, (9), 2653–2664.
- Raabe, D., Hantcherli, L., 2005, 2d cellular automaton simulation of the recrystallization texture of an if sheet steel under consideration of Zener pinning, *Comp. Mat. Sci.*, 34, (4), 299–313.
- Raabe, D., Lücken, 2002, H. Orientation dependence of recrystallization in aluminum– simulation and experiment. http://www.mpie-duesseldorf.mpg.de/forschungProjekte/ProjekteGesamtMU/aluminium_recrystallization_simulation.
- Rollett, A., 1997, Overview of modeling and simulation of recrystallization, *Progress in Mat. Sci.*, 42, (1-4), 79–99.
- Rollett, A., Raabe, D., 2001, A hybrid model for mesoscopic simulation of recrystallization, *Comp. Mat. Sci.*, 21, (1), 69–78.
- Sakai, T. 1995. Dynamic recrystallization microstructures under hot working conditions *J. Mat. Proc. Techn.*, 53, (1-2), 349–361.
- Sherry, A.H., Beardsmore D.W., Lidbury D.P.G, Sheikh M.A., Howard I.C., Remanent life assessment using the local approach - a prediction of the outcome of the NESC experiment, *Mech. Eng. Pub.*, UK, 1998, 87 - 103.
- Shterenlikht A., 2003, 3D CAFE Modeling of Transitional Ductile – Brittle Fracture in Steels, praca doktorska, Univeristy of Sheffiled, Sheffiled.
- Svyetlichnyy, D., Milenin, A., 2005, Modelowanie procesów rekrystalizacji za pomocą automatów komórkowych, ed., Piel, A., Lisok, J., Grosman, F., *Mat. 12. Konf. KomPlasTech 2005*, Ustroń, 115–122
- Terrier, V., 2003, Two-dimensional Cellular Automata and Their Neighborhoods, *Theor. Comp. Sci.*, Elsevier, 1–20.
- Von Neumann, J., 1966, Theory of Self Reproducing Automata, ed. Bamk A.W., University of Illinois, Urbana.
- Winning, M., Gottstein, G., Shvindlerman, L., 2002, On the mechanisms of grain boundary migration, *Acta Mater.*, 50, (2), 353–363.
- Wolfram, S., 1994, Universality and Complexity in Cellular Automata, *Physica*, D 10.
- Wolfram, S., 2002, A New Kind of Science , Wolfram Media, Champaign.
- Yu, Q., Esche, S. K., 2002, Modeling of grain growth kinetics with Read–Shockley grain boundary energy by a modified Monte Carlo algorithm, *Mat. Letters*, 56, (1-2), 47–52.
- Yu, Q., Esche, S. K., 2005, A multi-scale approach for microstructure prediction in thermo-mechanical processing of metals, *J. Mat. Proc. Tech.*, 169, (3), 493–502.
- Zhang, L., Zhang, C.B., Wang, Y.M., Wang, S.Q., Ye, H.Q., 2003, A cellular automaton investigation of the transformation from austenite to ferrite during continuous cooling, *Acta Mater.*, 51, 5519–5527

Artykuł otrzymano 2006 r.

