FIATAL MŰSZAKIAK TUDOMÁNYOS ÜLÉSSZAKA

Kolozsvár, 1999. március 19-20.

Kristályosodási folyamatok modellezése cella-automata módszerrel

Hojtsy Sándor és Réti Tamás

Abstract

A stochastic cellular automaton algorithm is developed that simulates the growth process of nuclei during crystallization. The algorithm is implemented in 2D in a digital image matrix, using discrete pixels to represent continuum objects. By employing a Monte-Carlo technique the stochastic model is compared with the classical Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov kinetic law. It has been shown that the outlined cellular automaton-type kinetic model can reproduce real transformation processes, and it can be advocated previously for enormously complicated problems where the microscopic growth mechanisms are unknown.

Bevezetés

Fázisok képződésének, növekedésének és átalakulásának modellezésére számos matematikai és fizikai-metallurgiai modellt dolgoztak ki az elmúlt évtizedek folyamán. Újabban, a digitális számítástechnika térhódítása következtében mindinkább előtérbe került az ún. átalakulási diszkrét modellek tanulmányozása, különösképpen pedig ezek determinisztikus és sztochasztikus változatainak kutatása. A következőkben egy olyan 2-dimenziós részecske növekedési modellt ismertetünk, amely bár alapvetően geometriai-valószínűségelméleti megfontolásokon alapul, mindazonáltal - esetleges módosításokkal - kiindulási alapnak tekinthető fázisok növekedési kinetikájának szimulációs elemzésére. Szimulációs vizsgálatokra támaszkodva demonstrálni fogjuk, hogy a javasolt új típusú 2-dimenziós, diszkrét-sztochasztikus növekedési modell olyan eredményeket szolgáltat, amelyek összhangban vannak a tradicionális Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov -féle csíráképződési és növekedési modellel (JMAK modellel).

A Növekedési Modell Jellemző Sajátosságai

Tekintettel arra, hogy a modell 2-dimenziós és diszkrét típusú, ezért egy négyzetes alakú $N \times N$ méretű $\mathbf{X}^{(0)}$ képmátrixszal reprezentálható a $t_0=0$ kiinduló állapotot. A kiinduló állapotban e mátrix elemei $x^{(0)}(i,j)$, ahol $1 \leq i,j \leq N$ teljesül. Az $x^{(0)}(i,j)$ mátrixelemek, amelyeket képelemeknek nevezzünk, kétfélék lehetnek, attól függően, hogy az α vagy a β fázishoz tartoznak. Feltételezés szerint az α fázist és a β fázist egységnyi területű "a" valamint "b" képelemek alkotják. Az utóbbiakat tekintjük a növekedésre képes β fázis alkotóelemeinek. A "b" elemek alkotta fázis növekedését oly módon képzeljük el, hogy feltételezzük, hogy a képmátrix "a" elemei - amelyeknek közvetlen 8-szomszédos környezetében már található 0,1,2,...vagy 8 számú "b" elem - adott körülmények között, meghatározott valószínűséggel képesek "b" elemmé átalakulni. A teljes növekedési folyamat szimulációja számítási ciklusok sorozataként megy végbe. Egy számítási ciklus (szokásos szóhasználatnál Monte-Carlo step, MCS ciklus) alatt a képmátrix teljes "leszkenelését" és transzformációját értjük. A k-adik ciklus eredményeként azon $\mathbf{X}^{(k)}$ képmátrix adódik eredményül, amely a növesztési folyamat k-adik generációját demonstrálja. Definíció szerint a kiindulási $\mathbf{X}^{(0)}$ képmátrix a $k=0$ generációt képviseli.

A növekedési modell sajátossága, hogy minden egyes MSC ciklust követően növekszik a “b” elemek alkotta β fázis összterülete az α fázis rovására. A növesztési algoritmus segítségével minden egyes $x(i,j)$ képelemhez egyértelműen hozzárendelhető egy $\chi(8,S)$ jelű, un. 8-elemű, kvadrátikus topológiai környezet. Ez utóbbi egy 3×3 -méretű, un. ablakmátrixszal (maszkkal) definált. A képmátrix (i,j) -edik rácspontjához tartozó 3×3 méretű részmatricát az 1.a ábra mutatja, míg az 1.b ábra a megfelelő $\chi(8,S)$ jelű környezetet demonstrálja. Ez utóbbi centrumát Z_c jelöli, míg $Z_1, Z_2, \dots, Z_8$ rendre a környezet rácspontjainak pozícióját jelöli. Ebből adódóan a $\chi(8,S)$ környezetben összesen 8 rácsponti pozíció szerinti elrendeződésben találhatók “a” illetve “b” képelemek, és ezek maximálisan $2^8 = 256$ számú konfigurációban helyezkedhetnek el. (A Z_c centrum definíció szerint nem tartozik a környezet rácspontjai közé.)

$x(i-1, j-1)$	$x(i-1, j)$	$x(i-1, j+1)$
$x(i, j-1)$	$x(i, j)$	$x(i, j+1)$
$x(i+1, j-1)$	$x(i+1, j)$	$x(i+1, j+1)$

1.a ábra

Z_1	Z_2	Z_3
Z_4	Z_c	Z_5
Z_6	Z_7	Z_8

1.b ábra

A növesztési szabály (algoritmus) matematikai megfogalmazásában alapvető jelentőségűek a P_c konfigurációs és a P_M mobilitási valószínűségi függvények. Származtatásuk a következő módon történik.

1. Tételezzük fel, hogy a képmátrix ciklusonkénti leszkeneleése során valamennyi $x(i,j)$ képelem megfelelő $\chi(8,S)$ környezetében ismert a $(k-1)$ - edik MCS ciklusban létrejött “b” elemek aktuális száma és pozíciója. Jelölje η_A és η_D a $\chi(8,S)$ környezetben a centrummal 4-összefüggő illetve a centrummal diagonálisan összefüggő “b” elemek számát. Nyilván ezek összegére $0 \leq \eta_A + \eta_D \leq 8$ teljesül. A P_c un. konfigurációs valószínűséget - amely a kerület lokális görbületét hivatott figyelembe venni a növekedési folyamatban -, az η_A és η_D elemek függvényeként számítjuk az alábbi képlet szerint:

$$P_c = \eta_v / (1 + \eta_v) \quad (1)$$

ahol

$$\eta_v = C_1(\eta_A + C_2 \eta_D) \quad (2)$$

az “a” képelemek virtuális száma a $\chi(8,S)$ környezetre vonatkozóan. A négyszomszédos és a diagonális környezeti képelemek számából és lehetséges pozíciójából adódik, hogy a konfigurációs valószínűségi függvény értékkészlete egy 25 elemű véges halmazzal reprezentálható. A C_1 és C_2 nemnegatív konstansok, amelyre a $0 \leq C_1, C_2 \leq 1$ korlátfeltételek teljesülnek. Itt jegyezzük meg, hogy a szimulációs modellben $C_1=1$ és $C_2=0,556$ konstans választással éltünk, ugyanis tapasztalataink szerint az izotróp és körszimmetrikus csíranövekedés követelménye ekkor érvényesül a leghatékonyabban.

2. A mobilitási P_M valószínűség, amely a hőmérséklet hatását hivatott figyelembe venni a β fázis növekedési sebességére nézve, az alábbi formulával számítható:

$$P_M = \exp[-E/(RT)] \quad (3)$$

ahol E folyamat látszólagos aktiválási energiája ($E=100$ J/mol), $R = 8.314$ J/(molK), ΔT az egyensúlyi hőmérséklettől mért eltérés mértéke, Kelvin-ben. Megjegyezzük, hogy a (3) formulának konkrét fizikai ill. kinetikai tartalom nem tulajdonítható, választását kizárólag a geometriai modellezés szempontjai indokolták.

3. A konfigurációs és a mobilitási valószínűségekből kiindulva a β fázis növesztési algoritmus az alábbiakban fogalmazható meg: A k-adik szkennelési ciklusban az $x(i,j)$ képelem helyére P_g valószínűséggel “b” képelem kerül, ha ugyanitt a (k-1)-edik ciklusban előzőleg “a” elem volt. Az (1 és 3) formulák felhasználásával a P_g növekedési valószínűséget a

$$P_g = P_C P_M = \begin{cases} 0 & \text{ha } \eta_v = 0 \\ \exp \left[\ln \left(\frac{\eta_v}{\eta_v + 1} \right) - \frac{E}{R\Delta T} \right] & \text{ha } \eta_v > 0 \end{cases} \quad (4)$$

szorzat típusú képlettel definiáltuk.

A sztochasztikus növekedési modellre alapozott szimulációs vizsgálatok

A sztochasztikus modellre alapozott szimulációs kísérletek alapvetően a következő problémák tanulmányozására irányultak:

- i. Az izotróp és körszerű egyedi részecskénövekedés feltételeinek tisztázása.
- ii. Az növekedési folyamat kinetikájának elemzése: nevezetesen a β fázis növekvő y területhányadának vizsgálata az MCS ciklusszám függvényében, különös tekintettel a kiindulási N_0 csíraszám és a ΔT hőmérséklet paraméter függvényében.
- iii. A sztochasztikus modellel valamint a 2-dimenziós JMAK kinetikai modellel kapott predikció eredményeinek összehasonlítása, a csíranövekedés lineáris sebességének becslése alapján.

Következtetések

A vizsgálatok céljára C++ nyelven írt számítógépes programot fejlesztettünk ki, amely maximálisan 400x400 méretű képmátrix felhasználásával valós idejű szimulációs kísérletek elvégzésére kínál sokoldalú lehetőséget. Az un. “befagyasztott csírák” kiindulási N_0 száma, mint input adat 1 és 10000 között tetszős szerint választható. A vizsgálatok részben egyetlen csíra növekedésének analízisére ($N_0 = 1$ eset) irányultak, részben pedig Poisson valószínűségi mező generálásával ($N_0 = 1 - 10000$) történtek.

A kísérletekből levont legfontosabb következtetések az alábbiakban összegezhetők:

1. Alaktényzők felhasználásával igazoltuk, hogy a $C_1=1$ és $C_2=0,556$ konstansok választása esetében az egyedi részecskék szimulált növekedésekor izotróp és körszerű alakzatok jönnek létre.
2. A növekedési kinetikák összehasonlításának megkönnyítésére, az MCS ciklusszám és az y kumulatív területhányad felhasználásával új, logaritmikus transzformációval nyert $X=\lg(\text{MCS})$ és $Y=\lg(-\ln(1-y))$ változókat definiáltunk. Ezen transzformált változók koordináta-rendszerében ábrázolva a számítások eredményeit, amelyek egy $Y=A+nX$ egyenessel közelíthetők, összehasonlítottuk a 2-dimenziós JMAK féle klasszikus modellt a sztochasztikus modellel (2-3.ábrák). Azt tapasztaltuk, hogy a JMAK modell esetében a diszkrét szimulációval kapott n_A Avrami exponens az 1.5-1.9 intervallumba esik, ez némileg kisebb mint az elmélet szerint várható $n_A=2$ érték. Másrészt ugyanezen koordináta rendszerben elemezve a sztochasztikus modell alapján generált adatokat, a becsült növekedési exponensre $n_s=1.8 - 2.1$ közötti értékek adódtak, (többféle, eltérő N_0 kiindulási csíraszámmal valamint ΔT hőmérsékleti paraméterrel végezve a szimulációt).
3. Bár mobilitási P_M valószínűség értelmezése fizikailag nem megalapozott, ennek ellenére azt tapasztaltuk, hogy a sztochasztikus modell a ΔT hőmérséklet-különbség hatását a növekedés kinetikáját tekintve “lényegében azonos módon” veszi figyelembe mint a klasszikus JMAK elmélet, azaz ΔT nagysága szinte kizárólag a csíranövekedés sebességét befolyásolja, vagyis az $Y=A+nX$ egyenletben az A konstans nagyságát. Következésképpen a ΔT hőmérséklet paraméternek, amelyet 4 és 400 K között változtattunk, úgy tűnik, nincs számottevő hatása az n_s exponens értékére. Ez utóbbi, mint már említettük, az 1.8 - 2.1 intervallumba esik.

2.ábra Szimulációs vizsgálatok X-Y koordináta rendszerben feltüntetett eredményei sztochasztikus modell esetében. A változtatott paraméter a ΔT .

3.ábra Szimulációs vizsgálatok X-Y koordináta rendszerben feltüntetett eredményei két dimenziós JMAK modell esetén. A változtatott paraméter az N_0 .

dr Réti Tamás, BDMF 1081 Budapest, Népszínház u. 8
E-mail: RETI@ZEUS.BANKI.HU