FIATAL MŰSZAKIAK TUDOMÁNYOS ÜLÉSSZAKA

Kolozsvár, 2000. március 24-25.

CELLA-AUTOMATA MÓDSZERREL GENERÁLT 3- DIMENZIÓS SZEMCSÉK ALAKJÁNAK KVANTITATÍV MINŐSÍTÉSE

Quantitative shape characterization of 3-D particles generated by cellular automata

Hojtsy Sándor és Réti Tamás

Abstract

A simple computational procedure for shape characterization of 3-D objects is presented. The technique proposed is based on the computation of a shape factor defined as a function of the volume and the polar moment of 3-D particles. The method is demonstrated by an application which concerns the simulation of phase transformations in alloys by means of a stochastic cellular automaton algorithm.

1. BEVEZETÉS

A cella-automata algoritmusok széles körben használatosak fémötvözetekben végbemenő átalakulási folyamatok, így például folyékony halmazállapotú anyagok csíráképződéssel és csíranövekedéssel jellemzett kristályosodásának modellezésére. A csírák növekedése folyamán kialakuló mikroszerkezet, a képződő szemcsék geometriai-topológiai tulajdonságainak számszerű jellemzése napjainkban is egyike az érdeklődésre számot tartó kutatási területeknek.

Jelen dolgozatban cella-automata algoritmuson alapuló 3-dimenziós csíranövekedési folyamatok modellezésére irányuló azon szimulációs kísérletek eredményeit ismertetjük, amelyeknek középpontjában a képződő szemcsék alakjának kvantitatív minősítése áll. Számítógépes vizsgálatokra támaszkodva demonstrálni fogjuk, hogy a szimuláció révén generált egyedi térbeli szemcsék alakjának jellemzésére sikerrel alkalmazható a súlypontra vonatkozó poláris nyomaték és a szemcsetérfogat függvényeként származtatott alaktényező.

2. HÁROM DIMENZIÓS NÖVEKEDÉSI MODELL

A fizikai-metallurgiai folyamat, amelyek modellezésével a következőkben foglalkozunk azon a hipotézisen alapul, hogy a kiinduló mikroszerkezetet, amelyet kezdetben egyazon α fázis alkot, az idő múltával ún. csírák képződése és növekedése eredményeként fokozatosan β fázissá alakul át. A diszkrét típusú növekedési modellben a modelltér 3 dimenziós, amely egy köbös, $128 \times 128 \times 128$ cellából álló számmátrixszal reprezentálható.

A mátrix elemeit alkotó cellák valójában L-oldalélhosszúságú kockák, és a képződő szemcsék ezekből épülnek fel. A szimulációs modell feltételezzük, hogy az átalakulás kezdeti

pillanatában a β fázis N_0 számú csíra, (azaz N_0 számú cella) formájában már jelen van, és e csírák növekedését a számítógépes szimuláció során egy sztochasztikus növekedési szabály írja le. Maga növekedés szkenelési ciklusonként, azaz diszkrét lépésekben történik.

A β fázis növekedését oly módon képzeljük el, hogy feltételezzük, hogy a cellamátrix azon “ α ” fázisú elemei - amelyeknek közvetlen környezetében már található β fázisú cella - a növekedési szabály által definiált P_c valószínűséggel képesek “ β ” fázisú cellává átalakulni. A növekedési folyamat szimulációja akkor fejeződik be, amikor az “ α ” fázisú cellák teljesen eltűntek, vagyis β fázissá alakultak át. Számítástechnikai korlátokból adódóan a modellterben elhelyezhető csírák maximális száma $N=254$.

A növesztési szabály definiálásakor abból indultunk ki, hogy minden egyes cellának $3^3-1=26$ közvetlen szomszédja van, és ezek közül 6 érintkezik lapjával az átalakulásra hajlamos “ α ” fázist reprezentáló cellához. Amint az 1. ábrán is látható, ezen 6 lapszomszédos környezet szolgált alapul a modellben a növekedési szabály definiálásához.

1. ábra A környezetet képező 6 szomszédos cella elhelyezkedése

A növekedési szabály értelmében egy “ α ” fázisú cella “ β ” fázisú cellává

$$P_c = \begin{cases} 0 & \text{ha } \eta = 0 \\ \frac{1}{8-\eta} & \text{ha } \eta > 0 \end{cases} \quad (1)$$

valószínűséggel alakul át. A (1) képletben η az előző iterációs lépésben a vizsgált cella 6-szomszédos környezetében lévő “ β ” fázisú cellák száma. Az η értékkészletét a $[0,1,2,3,4,5$ és $6]$ véges halmaz alkotja. A növesztési szabály értelmében bármely csírából olyan topológiailag összefüggő, 3 dimenziós alakzat képződik, amely azonos nagyságú kockákból áll.

3. HÁROM DIMENZIÓS SZEMCSÉK ALAKJÁNAK JELLEMZÉSE

A szimuláció során létrejött térbeli alakzatok alábbi két geometriai jellemzőjét határoztuk meg minden egyes iterációs lépésben: a csíra térfogatát (V) és a csíra poláris nyomatékát (I_p). Feltételezve, hogy a V térfogatú alakzat pontosan m darabszámú, L oldalél-hosszúságú kockából épül fel, a csíra térfogata $V=m \cdot L^3$, míg az alakzatnak a csíráközponttra vonatkoztatott poláris nyomatéka

$$I_p = \int_V r^2 dV = \sum_{i=1}^m \left(L^3 \cdot r_i^2 + \frac{1}{4} L^5 \right) = \quad (2)$$

$$= \sum_{i=1}^m \left(L^3 \cdot r_i^2 \right) + \frac{m}{4} L^5 = V \left(\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m r_i^2 \right) + V \frac{L^2}{4}$$

ahol

m az alakzatot alkotó cellák száma,

r_i az i . cella középpontjának euklideszi távolsága a csíráközponttól.

L a cella élhossza.

A (2) képletben az $L^5/4$ kifejezés az L oldalélű kocka saját súlypontjára vonatkoztatott poláris nyomatéka. Csíráközpont alatt a növekedés kezdetén generált, a nucleust jelképező cella középpontját értjük.

A súlyponti koordináták minden iterációs lépésben való újraszámítása a 3 dimenziós szimuláció során számítástechnikai okokból nehézkesnek bizonyult, ezért a poláris nyomaték meghatározása mindig a kezdeti csíráközpontra történt. Joggal feltételezhető, hogy az áttérés a súlypontról a csíra középpontra nem okoz lényegi eltérést a szimuláció eredményében.

A számított térfogat és poláris nyomaték (V , I_p) felhasználásával definiáltunk egy a generált térbeli alakzat "gömbszerűségét" számszerűen minősítő I_s alaktényezőt a következő módon.

$$I_s = \frac{I_p}{I_E} \quad (3)$$

ahol:

$$I_E = \frac{3Vr_e^2}{5} \quad (4)$$

az ekvivalens (azonos V térfogatú) gömb poláris nyomatéka, és

$$r_e = \sqrt[3]{\frac{3V}{4\pi}} \quad (5)$$

az ekvivalens sugár, a csírával azonos V térfogatú gömb sugara.

A (4) és (5) képletekből speciális esetként következik, hogy a V térfogatú gömb súlypontra vett poláris nyomatéka

$$I_E = \frac{3}{5} \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{2}{3}} V^{\frac{5}{3}} \approx 0.2309 V^{\frac{5}{3}} \quad (6)$$

A fenti képlet felhasználásával az I_s alaktényezőre a

$$I_s = \frac{\sum_{i=1}^n \left(L^3 * r_i^2 + \frac{1}{4} L^5 \right)}{\frac{3}{5} \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{2}{3}} V^{\frac{5}{3}}} \approx 4.33086 \frac{\sum_{i=1}^n \left(L^3 * r_i^2 + \frac{1}{4} L^5 \right)}{V^{\frac{5}{3}}} \quad (7)$$

képletet kapjuk.

Az I_s alaktényező mértékegység nélküli szám, értéke gömbre 1, bármely alakzatra 1-nél nagyobb szám. I_s viszonylag egyszerűen számítható, és mint említettük alkalmas arra, hogy kvantitatív módon jellemezze a vizsgált alakzat gömb alaktól való geometriai eltérését. Tekintetbe véve, hogy az I_s alaktényező az L nagyságától független, dimenzió nélküli mennyiség, ezért számításakor célszerű L értékét egységnyi hosszúságúra választani. Így $L=1$ választás eredményeként $V=m$ lesz, és az I_s alaktényezőre a következő egyszerű összefüggés adódik:

$$I_s \approx 4.33086 \frac{\sum_{i=1}^m r_i^2 + \frac{m}{4}}{m^{\frac{5}{3}}} \quad (8)$$

Amennyiben az alakzatot $V=1$ térfogatú kocka alkotja, m értéke 1, $r_1=0$, következésképpen az I_s alaktényező értékére speciális esetként $4.33086/4 = 1.0827$ adódik. Az 1. ábrán példaként egyetlen csíra növekedésre vonatkozó konkrét szimulációs kísérlet “köztes állapotait” demonstráljuk ($N_0 = 1$ eset).

1. **ábra** Egyetlen csíra növekedése, a modelltér három határoló síkján elhelyezkedő átalakult cellák a szimuláció MCS = 200., 220., 250., 280., 300. és 320. szimulációs ciklus után.

4. KÖVETKEZTETÉSEK

- i. A szimulációs vizsgálatokból kitűnt, hogy az (1) növekedési szabályt alkalmazva valóban “közel gömbalakú” szemcsék jönnek létre. Ezt alátámasztja az a megfigyelés, hogy egyetlen csíra növekedésekor a (8) képlettel számított I_s alaktényező 1.03 körüli konstans értékhez, majd a modelltérfallal való ütközést követően a kockára jellemző 1.082 elméleti értékhez tart. Az alaktényező tökéletes gömbre érvényes 1 értéke nyilván nem érhető el.
- ii. A cella-automata modellel végzett szimuláció során $N_0=254$ számú csíra növekedését tanulmányoztuk és meghatároztuk az alaktényezők eloszlását a növesztés minden egyes szimulációs ciklusában. Megfigyelhető volt, hogy a folyamat kezdetén, amikor a szemcséket még kevés számú cella alkotja, az alaktényező átlagértéke viszonylag nagy, vagyis a szemcsék alakja meglehetősen szabálytalan, eltér a gömbalaktól. Ezt követően fokozatosan érzékelhető a gömb alakú részecske-geometria kialakulása, így az alaktényező értéke folyamatosan csökken, majd eléri az 1.2 körüli minimumot. A továbbiak folyamán a szemcsék gátolt növekedése és folyamatos ütközése következtében az alaktényező értéke ismét növekszik, majd beáll egy konstans 1.63 körüli értékre.

dr. Réti Tamás, Hojtsy Sándor
Budapesti Műszaki Főiskola, Budapest Népszínház u. 8. H-1081