FIATAL MŰSZAKIAK TUDOMÁNYOS ÜLÉSSZAKA

Kolozsvár, 2003. március 21-22.

A SZERKEZETI ANYAGOK JÖVŐJE - SZIMULÁCIÓS MÓDSZEREK

(SZÁMÍTÓGÉPES ANYAGTUDOMÁNY)

Roósz András

Bevezetés

A szerkezeti anyagok (fémek és ötvözeik, kerámiák, műanyagok, kompozitok) fejlesztése még a legutóbbi időkben is még az eddigi elméleti és gyakorlati ismeretekre alapozva, de jobbra próbálkozással történt. A jövő század anyagait azonban bizonyosan nem lehetséges ezekkel a módszerekkel kifejleszteni. A nem túl távoli jövő feladata olyan eljárások (szimulációs technikák) kidolgozása, amelyekkel képesek leszünk u.n. első elvekből levezetni valamely összetétel és gyártási technológia ismeretében a tervezett anyag tulajdonságait. Ezt van hivatva szolgálni a Számítógépes Anyagtudomány (Computational Materials Science).

Az anyag jellemzői és a tulajdonságai közötti kapcsolat

A szerkezeti anyagok tulajdonságait a kémiai összetételük és a szerkezetük határozza meg. Mindkét anyagjellemző ismerete fontos, hiszen azonos összetételű de különböző szerkezetű anyagok tulajdonságai éppúgy nagyon különbözőek lehetnek, mint az azonos szerkezetű de különböző összetételű anyagok tulajdonságai. Az első állításra jó példa a 0.8 tömeg % korbont tartalmazó acél. Lassú hűtés után az acél mikroszerkezete kétfázisú (szilárdoldat és vegyület) lemezes szerkezet, perlit (La. ábra). Keménysége - a lemezek közötti távolság függvényében 150-250 HV. Ugyanez az acél gyors hűtés után martenzites szerkezetű (l.b. ábra, erősen torzult rácsú szilárdoldat) amelynek keménysége a 900 V-t is elérheti. A 2.a. ábrán látható Al-11.4 tömeg % Si ötvözet kétfázisú (szilárdoldat és Si) eutektikum, u.n. szilumin. A 2.b. ábrán Fe-4.3 tömeg % C ötvözet, fehér öntöttvas látható, ami keletkezése pillanatában szintén kétfázisú eutektikum (szilárdoldat és vegyület). A két szerkezet tulajdonságai között a különbség igen jelentős, a szilumint melegen igen jól lehet alakítani, míg a fehér öntöttvas rideg, alakíthatatlan. Az anyagok kémiai összetétele, mikroszerkezete előállításuk során alakul ki. Ha ismerjük a gyártási paraméterek és a szerkezet, valamint a kémiai összetétel, a szerkezet és a tulajdonságok kapcsolatát, akkor lehetőség nyílik az anyagok tervezésére.

A szimuláció szintjei

A szimuláció történhet atomi-, nano-, mikro- és makro- szinten. Az **atomi** szinten való szimuláció (a sok ion, sok elektron probléma megoldása) alapadatokkal szolgálhat a további szimulációs szintek számára. A Hamilton egyenlet megoldása útján megkaphatjuk azokat az atomok közötti kötési energiákat (2.ábra.) melyek felhasználásával meghatározhatók a rendszerben előforduló fázisok szabadentalpiája a koncentráció és a hőmérséklet függvényében (3.a. ábra.) Ezen függvények segítségével megadhatók az adott hőmérsékleten egymással egyensúlyt tartó fázisok és azok összetétele, ily módon közvetlenül kiszámíthatók az egyensúlyi fázisdiagramok vonalai. Hasonlóan meghatározható egy atom mozgékonyága egy adott rácsban, így kiszámíthatók a diffúziós együtthatók. A fajhő értékének kiszámítása (erre már Einstein is adott egy megoldást) egyrészt a szabadentalpia értékek meghatározásánál, másrészt a makro (többnyire hőtechnikai) szimulációknál jelent könnyebbiséget. Ezek az adatok ma még nagyrészt csak mérésekből állnak rendelkezésre.

Az atomi szintű szimulációk által szolgáltatott alapadatok felhasználásával alkalmas fizikai modellekre épített matematikai modellek és a matematikai modellekben szereplő differenciálegyenlet rendszerek megoldását biztosító szoftverek segítségével elvégezhetők a nano-, mikro- és makro- szintű szimulációk.

A **nano** szerkezetek (néhány tíz vagy száz atomból álló struktúrák) fejlesztése, vizsgálata az utóbbi néhány év slágere. Az USA-ban kormány szintű program indult a nano szerkezetek kutatása területén. A nano szintű szimuláció a következő években -követve az ilyen jellegű kutatások robbanásszerű fejlődését- szintén nagymértékű fejlődés előtt áll.

A **mikro** szintű szimulációkkal az anyagok mikroszerkezete - a fázisok minősége, mennyisége és morfológiája - határozható meg. A termodinamikai szimulációval az egyensúlyi fázisok minősége és mennyisége, míg a fázis átalakulási folyamatok szimulációjával a morfológiai részletek valamint az egyensúlytól való eltérések számíthatók ki. Az 5. ábrán a képlékeny alakítás és az azt követő újrakristályosodás szimulációjára mutatok be egy példát. A hőntartás során kialakult viszonylag nagy szemcsékből álló darabot (5.a. ábra) hengerléssel alakítva (5.b. ábra) a szemcsék megnyúlnak, energiájuk megnő. A hengerlés után ugyanazon a hőmérsékleten tartva a darabot a szemcsehatárokon új, kisebb energiájú (az egyensúlyhoz közelebb álló) szemcsék (csírák) keletkeznek (5.c. ábra), majd ezek növekedésével az egész szerkezet újrakristályosodik (5.d. ábra). Az újrakristályosodással létrejött szemcseszerkezet finomabb, kisebb szemcsékből áll.

A **makro** szintű szimuláció a kristályosodás során áramló olvadék valamint a különböző technológiai folyamatoknál a (kristályosodás, melegalakítás, hőkezelések) a darabban kialakuló hőmérséklet mezők számítását jelentik.

Ezek a szimulációk szolgáltatni fogják az anyagok szerkezetét és a szerkezetekhez kapcsolódó fizikai, kémiai és mechanikai tulajdonságait.

Szimulációs technikák

A matematikai modellekben szereplő differenciál egyenletek alapvetően kétféle módszerrel oldhatók meg. A számítástechnika robbanásszerű fejlődését megelőzően az analitikus (determinisztikus) megoldások játszották a fő szerepet. Ezeknek a megoldásoknak nagy hátrányuk volt, hogy rendkívül komplikált egyenletekre vezettek, igen sok esetben zárt alakban megoldás nem is létezett. Másik hátrányuk, hogy az egyenletekben szereplő hőmérsékletfüggő fizikai paraméterek (pl. diffúziós együttható, fajhő, hővezető képesség) hőmérsékletfüggését nem lehetett figyelembe venni. A kapott eredmények nem voltak szemléletesek, csak a változók átlagértékeit lehetett meghatározni (pl. a már említett újrakristályosodásnál az átalakult térfogat hányadot lehetett kiszámítani, azonban az egyes szemcsék viselkedéséről nem lehetett információt kapni). A különböző numerikus eljárások (véges differencia, véges elemes módszerek) segítségével számos differenciálegyenlet könnyen megoldhatóvá vált, igaz azon az áron, hogy a számítási igény nagyságrendekkel megnőtt. Mivel a numerikus eljárások eredményei jelentős mértékben függenek attól, hogy a differenciálegyenletekben szereplő végtelenül kis értékeket mekkora véges értékekkel helyettesítjük, a számítások pontosságát ellenőrizni kell. Az ellenőrzéshez ma is az analitikus megoldások által szolgáltatott eredményeket használjuk. A numerikus módszerek, bár számos területen jelentős előrelépést hoztak, a szemléletességen nem javítottak. Igen nagy előrelépést hozott ezen a területen a valószínűségi elven alapuló technikák (Potts, Monté Carlo, Cella Automata) kidolgozása és elterjedése. Igaz, ezek elterjedését a számítástechnika nagyarányú fejlődése tette lehetővé. Az 5. ábrán bemutatott szimulációt Cella Automata módszerrel végeztük. A kétdimenziós szimulációnál a cellák száma $200 \times 200 = 40\,000$ volt, egy szimulációs lépéshez kb. 1 másodperc CPU idő szükségeltetett (360 MHz, Celeron CPU). A folyamat modellezéséhez néhány ezer lépés - így néhány óra- kellett. A térbeli szimuláció esetén ez az érték 200x nagyobb, ami újabb jelentős számítási igényt jelent. A parallel processzoros (Magyarországon két helyen is építettek) számítógépeket kifejezetten az ilyen problémák megoldására fejlesztették ki.

A szimuláció lépései

A szimuláció az alábbi lépésekre bontható (6. ábra.)

- a fizikai modell megalkotása
- a matematikai modell felírása
- szoftver írás
- számítások végzése és a számítások pontosságának ellenőrzése
- a számítások ellenőrzése kísérleti adatokkal
- az új ismeretek felhasználása a szimuláció továbbfejlesztéséhez

A szimuláció kezdetekor valamely anyagról vagy folyamatról korlátozott ismeretekkel rendelkezünk. A szimuláció eredményeként kapott új ismeretek felhasználhatók a szimuláció továbbfejlesztéséhez vagy az iparban az anyagok tulajdonságainak javítására illetve folyamatok irányítására.

A szimulációk eredményei

A szimulációk változatos eredményre vezethetnek. Egy, a szerkezeti anyagot előállító folyamat esetében a termodinamikai számítások megadhatják azt az energiát, ami minimálisan szükséges a folyamathoz. A folyamat szimulációja alapján készített energiamérleg kimutathatja, hogy a technológia melyik pontján lehet és érdemes változtatni annak érdekében, hogy a felhasznált energia mennyisége csökkenjen. Alumínium olvadék elektrolízissel történő előállításánál az alábbi bruttó kémiai reakció megy végbe:

A termodinamikai egyenletek felhasználásával kiszámított minimálisan szükséges energia 6.34 kWh/kg alumínium. A legfejlettebb technológiával dolgozó üzemek ezzel szemben ≈ 11 kWh/kg energia felhasználásával állítják elő az alumíniumot. (Megjegyzendő, a magyar üzemekben ez az érték lényegesen nagyobb). Látható, hogy az energiafálgó kohászati üzemekben is lényeges tartalékokat tárhat fel a szimuláció.

Mint a fenti példa is mutatja, a szimuláció segítségével ismert anyagokról, folyamatokról pontosabb ismeretek kaphatók. Jó szimuláció kidolgozásához nagyon alaposan végig kell gondolni a folyamatot, amit szimulálni akarunk, és a lehetőség szerinti (a rendelkezésre álló ismeretek korlátain belül) legjobb fizikai modellt kell kidolgozni. Sok esetben a fizikai modell kidolgozása során is új ismeretekhez jutunk, például választ kaphatunk a *miért* kérdéseire. A kísérletekkel ellenőrzött számításokkal a *hogyan* kérdéseire találhatók meg a válaszok. Ezek jelentős előrelépést jelentenek a kísérletekhez képest, mert a kísérletekkel csak az tárható fel, hogy *mi történik*.

A szimulációs csapat

A műszaki tudományok területén a szimulációk többnyire ipari problémák megoldását célozzák, még akkor is, ha a kidolgozott eljárások bevezetése az iparban nem túl egyszerű. A szimulációs csapat optimális felépítését a 7. ábra mutatja. Az akadémiai (egyetemi) csoport rendelkezik az elméleti ismeretekkel, többnyire az ötlet is innen származik. A szoftvereket a fiatal kutatók (PhD hallgatók, posztdoktorok) dolgozzák ki, akik magas szintű számítástechnikai ismeretekkel rendelkeznek. Ha a szimuláció nem kizárólag ismeretszerzést szolgál, hanem az ipari bevezetés is cél, szükséges egy ipari csoport is, akik a technológia részleteit megfelelő részletességgel ismerik, de elméleti ismeretekkel is rendelkeznek. Ez a csoport az ipari kutatóintézetekben található a fejlett ipari országokban. A kidolgozott szoftvert az ipari szoftveres csoport veszi át, és amennyiben szükséges, adaptálja azt az ipari körülményekre. A felhasználóknak sem elméleti ismeretekkel, sem

szoftveres (szoftver írási) ismeretekkel nem kell rendelkezni, kizárólag a szoftver kifogástalan működtetését kell biztosítani.

Sajnálatos módon Magyarországon akadémiai kutatóhely a fémes szerkezeti anyagok terén nem létezik. Léteznek apró akadémiai kutató csoportok, egyetemi tanszékeken is folyik elszigetelten kutatás a fémes szerkezeti anyagok területén, de a kritikus tömeget sehol sem érik el. *Megoldást jelenthetne, ha az egyébként esetenként jól felszerelt egyetemi tanszékek mellett már működő kutatócsoportok létszámát a kritikus tömeg (5-8 kutató, 5-10 PhD hallgató) fölé emelnénk.*

Példa egy komplex szimulációra

A fémes szerkezeti anyagok területén az egyik legfejlettebb az öntvények dermedésének szimulációja.

A szimuláció az alábbi lépésekből áll:

- öntvényrajz készítés CAD rendszerben
- forma és beömlő tervezés
- háló generálás
- formatöltés szimulációja
- hőmérsékletmező szimulációja
- mikroszerkezet szimulációja
- feszültség szimuláció
- tulajdonság szimuláció.

A szimuláció véges elem vagy véges differencia módszert használ az olvadékáramlás, a hőmérséklet mező és a feszültség állapot kiszámításához. A mikroszerkezet jellegzetes paramétereinek meghatározása után a megfelelő összefüggések ismeretében a tulajdonságok is becsülhetők. A 8. ábrán egy szelepház rajza látható a számításokhoz generált hálóval.

Anyagtervezés a XXI században

A szimulációs technikák fejlődésével az anyagtervezés alapvetően meg fog változni. A XX. században az ismereteket könyvekben, atlaszokban gyűjtöttük. Ezek az adatok a szimulációk számára közvetlenül nem használhatók, ezért mindenképp a már megszerzett ismeretek feldolgozásával adatbankokat hozunk létre. Az adatbankok fogják tartalmazni az alapadatokat, melyeket molekula dinamikai szimulációk eredményeként kapunk (pl. egyensúlyi fázisdiagramok). Az alapadatokat ismeretében a nano és mikro szintű szimulációkat igen nagyszámú paraméter együttes esetére lefuttatva számos származtatott adatmező jön létre melyek a nano és mikroszerkezet jellegzetes paramétereit tartalmazzák (pl. átalakulási diagramok). A szerkezeti paraméterek és a tulajdonságok közötti kapcsolat ismeretében előáll a felhasználó számára legfontosabb adatmező, amelyből a tulajdonságok határozhatók meg. A három adatmező felhasználásával az összetétel és a technológia ismeretében egyszerű módon meghatározható lesz a várható tulajdonság. Az adatmezők nyilván

fordítva is használhatók, adott tulajdonság együtteshez kikereshető a legmegfelelőbb anyag és technológia. A szimulációk alkalmasak lesznek új anyagok, valamint az anyagok előállításának tervezésére. A fent leírtaknak már számos eleme létezik. Nagymértékben gátolja azonban az elterjedést az, hogy egyelőre az adatok, valamint a szimulációs szoftverek jelentős része nagy értékű kereskedelmi áru.

1.a. ábra. Fe-0.8t% C, perlít
Nagyítás:1000x

1.b. ábra. Fe-0.8 t% C, martenzit
Nagyítás: 1000x

2.a. ábra. Al-11.4t% Sí, eutektikum
Nagyítás: 250x

2.b. ábra. Fe-4,3 t% C, eutektikum
Nagyítás:250x

3. ábra. Kötési energiák az atomok között

4. ábra. Szabadentalpia görbék és a származtatott egyensúlyi fázisdiagram.

5.a. ábra. A hűtéstől kialakult szemcseszerkezet

5.b. ábra. Az alakításnál megváltozó szemcseszerkezet

5.c. ábra. A szemcseszerkezet az újrakristályosodás közben

5.d. ábra. Az újrakristályosodott szemcseszerkezetTM

A szimulációs csoport szerkezete
A szimulációs csoport szerkezete

7. ábra. A szimulációs csoport szerkezete

8. ábra. Szelepház a beömlő rendszerrel és a felöntésekkel. A fehér vonalak a generált hálót szemléltetik.

Roósz András, DsC, Tanszékvezető

Miskolci Egyetem, Fémtani Tanszék

H-3515 Miskolc-Egyetemváros, Miskolci Egyetem, Anyagtudományi Intézet, Fémtani Tanszék

Tel: +3646-565111-1543

Fax: +3646-565201

E-mail: femroosz@gold.uni-miskolc.hu