

Materiały 7. Konferencji  
*Zastosowanie Komputerów w Zakładach  
Przetwórstwa Metali*

---

**KomPlasTech2000**  
*Krynica - Czarny Potok*  
*16-19 stycznia 2000*

---

## **Koncepcja stochastycznego mikro -modelowania procesów krystalizacji**

S. Ciszewski<sup>1</sup>, M. M. Duras<sup>2,3</sup>, S. Bieniasz<sup>1</sup>, M. Kisiel-Dorohinicki<sup>1</sup>, E. Nawarecki<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Katedra Informatyki Akademii Górniczo-Hutniczej, al. Mickiewicza 30, Kraków

<sup>2</sup>Katedra Automatyki Akademii Górniczo-Hutniczej, al. Mickiewicza 30, Kraków

<sup>3</sup>Instytut Fizyki Politechniki Krakowskiej, ul. Podchorążych 1, Kraków

---

### **Concept of stochastic micro-modelling of crystallisation**

#### **Abstract**

An application of stochastic cellular automaton (SCA) to discrete micro-modelling of crystallisation described in this paper. The model presented was inspired by 2D Ising model. The realised system was designed as a top layer for MAFES, which models the crystallisation in macro scale. Some experimental results of the considered model conclude the work.

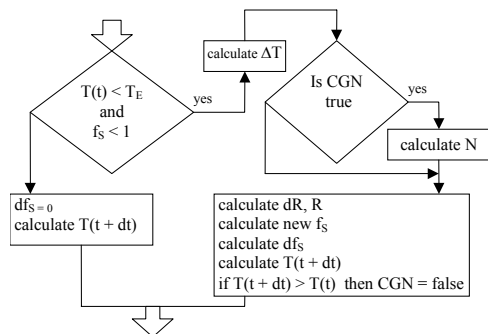
---

*Słowa kluczowe: modele przemian fazowych, krystalizacja metali, metoda elementów skończonych (FEM), stochastyczne automaty komórkowe (SCA)*

#### **WSTĘP**

Modele symulacyjne procesów fizycznych w skali makro, stosowane z powodzeniem w wielu dziedzinach nauki, przynoszą szereg interesujących rezultatów. Ciągły rozwój technologii wymaga jednak coraz głębszego poznawania natury zjawisk,

nie tylko w skali makro, ale także na poziomie mikro-struktury. Potrzebę taką odczuwa się w szczególności w odniesieniu do badań związanych z krystalizacją metali. Modele makro nie pozwalają bowiem na dokładne określenie właściwości mechanicznych odlewów (odnalezienie miejsc potencjalnych defektów i pęknięć).



Rys. 1 Schemat algorytmu obliczeń algorytmu krystalizacji w systemie MAFES

Przedstawiona w pracy koncepcja zmierza do utworzenia efektywnego modelu uwzględniającego zjawiska zachodzące w trakcie rozważanych przemian fazowych na poziomie gron kryształów. Model ten ma stanowić uzupełnienie modelu symulacyjnego, bazującego na metodzie elementów skończonych, MAFES.

Rozważania zilustrowano przykładami wyników eksperymentów symulacyjnych.

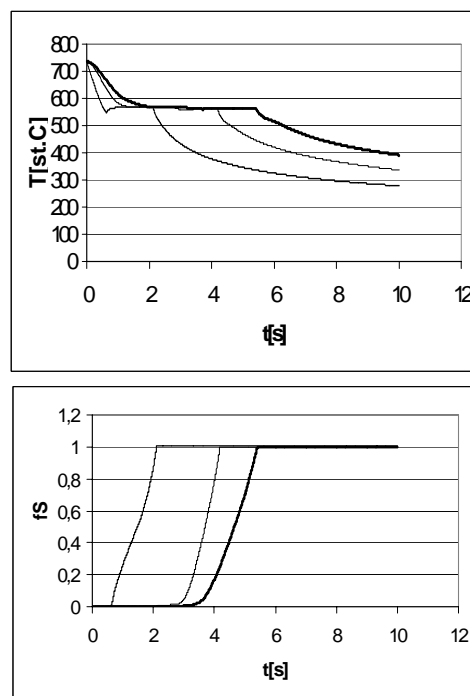
## SYSTEM MAFES

Systemy symulacyjne umożliwiające modelowanie zjawisk termicznych w skali makro bazują na klasycznym równaniu różniczkowym:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{k}{c g} \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + \frac{L_H}{c} \frac{\partial f_S}{\partial t}$$

wywodzącym się z zasady zachowania energii cieplnej, uwzględniającej: ciepło akumulowane, ciepło wymieniane z otoczeniem oraz ciepło wydzielane przy powstawaniu kryształów.

MAFES (Multi Agent Finite Element System) jest systemem służącym do symulacji komputerowej procesów termicznych przy pomocy metody elementów skończonych (FEM). Pozwala on na określenie pól skalarnych: gęstości kryształów  $N(x,y,z,t)$ , średniego promienia kryształu  $R(x,y,z,t)$  oraz udziału fazy stałej  $f_S(x,y,z,t)$ , na podstawie modelu krystalizacji danego przez równania:



Rys. 2 Zmiany temperatury i frakcji stałej w przykładowej symulacji MAFES

$$N(t) = \Psi \Delta T(t)^2$$

$$\frac{dR}{dt} = \mu \Delta T(t)^2$$

$$\Delta T(t) = T_E - T(t)$$

$$f_S(t) = \frac{4}{3} \pi N(t) R(t)$$

Rys. 1 pokazuje schemat blokowy modelu symulacyjnego. Parametry modelu zidentyfikowano na podstawie rzeczywistych pomiarów [1].

Przykładowe wyniki w postaci charakterystyk czasowych temperatury  $T$  oraz ilości fazy stałej  $f_S$  w trzech różnych punktach odlewu przedstawiono na rysunku 2.

## **KOMÓRKOWY MODEL PRZEMIANY CIECZ – CIAŁO STAŁE**

Inspiracją do stworzenia modelu przedstawianego w artykule, były podstawowe modele komórkowe rozważane na gruncie fizyki statystycznej oraz model rozchodzenia się ciepła. Istotną cechą wymienionych modeli jest dosyć restryktywne ograniczenie rozważań do dyskretnej dwu- lub trójwymiarowej siatki regularnej. Elementom znajdującym się w konkretnych polach przypisane są dyskretne wartości opisujące stan pewnej grupy cząstek. Przyjmuje się następujące założenia:

- 1) przy elementarnym kroku obliczeń oddziaływania między grupami cząsteczek można przybliżyć przy pomocy oddziaływań cząstek zagregowanych przez pola siatki (komórki),

- 2) oddziaływania istotne dla badanego procesu są wyrażalne poprzez oddziaływania komórek z sobą sąsiadujących.

Ogólny schemat przetwarzania danych w modelu można określić następująco:

W pierwszym kroku przypisujemy wartości początkowe wszystkim komórkom. Przyjmujemy przy tym zazwyczaj pewien rozkład prawdopodobieństwa cech rozważanego obiektu.

W drugim kroku dokonujemy modyfikacji wartości komórek zgodnie z przyjętym przekształceniem elementarnym. Funkcja wyrażająca to przekształcenie przyjmuje za argumenty stany komórek sąsiednich do danej. Podstawowy schemat często rozszerzany jest o elementy losowe które możemy traktować jako dodatkowe zmienne w tym przekształceniu. Wynikiem jego działania jest nowy stan komórki.

Przekształcenie elementarne jest iteracyjnie stosowane do wszystkich komórek siatki poprzez  $n$  kroków symulacji. Cel tego zabiegu stanie się jasny jeśli uświadomimy sobie, że z punktu widzenia oddziaływań międzykomórkowych losowe wartości generowane na początku nie są zazwyczaj poszukiwanym naturalnym uporządkowaniem w równowadze termodynamicznej układu. Daleką analogią jest iteracyjne znajdowanie minimum energii poprzez wprowadzanie deterministycznych bądź losowych poprawek do kolejnych przybliżeń rozwiązania.

W trzecim kroku, obliczamy interesujące nas wartości opisujące stan modelu.

Istotną cechą rozważanej klasy modeli jest ich uniwersalność. Mówiąc

ściślej, przy pomocy jednego modelu, identyfikując jego parametry z różnymi własnościami możemy symulować, a zarazem wnioskować o zjawiskach dotyczących fizycznie różnych procesów.

### Model Isinga

Jednym z najbardziej znanych modeli rozważanego typu jest model Isinga [2,4,8]. W artykule omówiony zostanie jego podstawowy wariant dotyczący układów dwuwymiarowych na siatce kwadratowej. Podstawowym zastosowaniem tego modelu jest wskazanie zachowania ferromagnetyków w szerokim zakresie temperatur.

Komórkę modelu identyfikujemy z dostatecznie małą grupą dipoli charakteryzującą się jednakowym namagnesowaniem. Utworzony w ten sposób wirtualny komórkowy dipol może przyjmować dwa stany  $-1$  i  $+1$  określające jego wkład do globalnej magnetyzacji całego układu. Przyjmujemy, zgodnie z podstawowymi założeniami, że wkład dwóch komórek wynosi zero jeśli nie sąsiadują z sobą krawędzią. Jeżeli ich stany

są zgodne wnoszą one do całkowitej energii układu wartość  $J$ . W przypadku niezgodności stanów wkład ten wynosi  $-J$ .

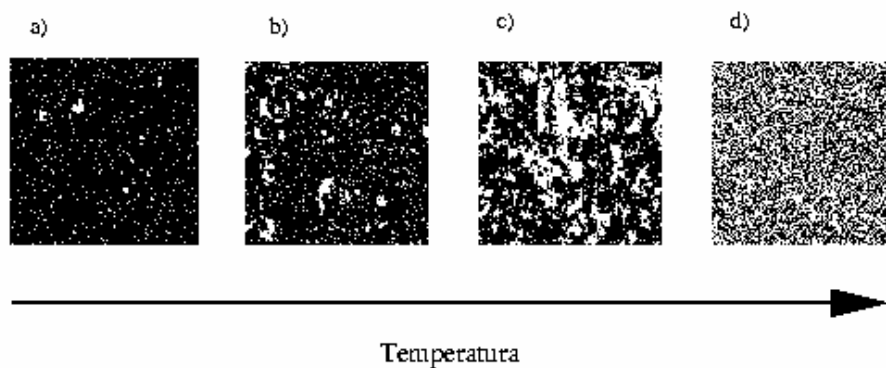
Wnioskujemy z tego, iż całkowita energia układu opisywana przez jego hamiltonian wyraża się wzorem:

$$H = \frac{1}{2} \sum J_{ij} x_i x_j$$

gdzie:  $J_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{gdy } i \text{ i } j \text{ nie są sąsiadami} \\ J & \text{w przeciwnym wypadku} \end{cases}$

a  $x_i$  i  $x_j$  są wartościami stanów komórek.

Rozważając otoczenie danej komórki możemy zauważyć, iż zmiana stanu dipola nie zwiększająca całkowitej energii układu może odbyć się w przypadku gdy suma wartości określających stany jego czterech sąsiadów równa jest  $0$ . Dostajemy w ten sposób przepis na prosty algorytm pozwalający na symulację całego układu w określonym stanie energetycznym rozumianym jako temperatura bezwzględna. Parametr ten identyfikowany jest z prawdopodobieństwem wylosowania dipola o zadanej wartości.



Rys. 3 Zmiana struktury ferromagnetyka przy zmianie temperatury (czarne pola oznaczają +1, białe -1)

Rysunek 3 przedstawia rozmieszczenia dipoli otrzymane w symulacjach dla różnych wartości temperatur. Dla  $T = T_{kr}$  możemy zauważyć równoliczność dipoli zorientowanych w obu kierunkach (rys. 3c). W takiej temperaturze namagnesowanie równe jest namagnesowaniu spontanicznemu. Powyżej tej temperatury układ staje się paramagnetykiem. W temperaturze maksymalnej namagnesowanie jest całkowicie losowe (rys. 3d). W temperaturach niższych od krytycznej w rozważanym układzie namagnesowanie stale rośnie osiągając maksimum (równe ustawienie wszystkich dipoli) dla skrajnie niskich temperatur (rys. 3a i 3b).

### Model krystalizacji

Zasadniczą kwestią wykluczającą zastosowanie modelu Isinga i jego pochodnych do przemian fazowych zachodzących w przypadku ciec – ciało stałe jest konieczność rozważania transportu

ciepła. W przypadku krystalizacji w ośrodku o małym cieple właściwym powstanie struktury krystalicznej wiąże się z oddaniem i rozproszeniem ciepła przemiany fazowej. Przejście odwrotne wiąże się z pobraniem pewnej ilości ciepła z otoczenia. Powstałe różnice muszą zostać uzupełnione poprzez jego rozpraszanie. Tak więc istotną różnicą pomiędzy skonstruowanym modelem a modelami klasycznymi jest modyfikowanie stanu wielu komórek w elementarnym przekształceniu.

Komórkę w modelu opisują dwa parametry  $\tau$  oraz  $\kappa$ . Pierwszy z nich oznacza bezwymiarową temperaturę. Parametr ten przyjmuje wartości dyskretne z przedziału  $[-N, N]$ . Zerowa wartość tego parametru oznacza typową temperaturę przy której zachodzi przejście fazowe. Drugi parametr,  $\kappa$ , wskazuje na stan skupienia cząsteczek w komórce. Przyjmuje wartość  $-1$  i  $1$  gdy komórka jest odpowiednio w stanie ciekłym lub stałym. Ponadto przyjmujemy, iż pewne stany układu są zakazane. W odpowiednio

wysokiej (niskiej) temperaturze musi zachodzić przemiana fazowa.

Ograniczenia temperaturowe wprowadzono przy pomocy wielkości  $\sigma_i$ , która wyraża temperatury graniczne. Poprzez

$$\xi_i = \tau_i - \frac{1}{2} \sigma_i \kappa_i$$

oznaczamy bezwymiarową znormalizowaną temperaturę komórki. Hamiltonian modelu wyrażamy poprzez:

$$H = \sum h_{ij}(\xi_i, \xi_j)$$

gdzie:

$$h_{ij}(\xi_i, \xi_j) = \begin{cases} 0 & \text{gdy } i \text{ i } j \text{ nie są sąsiadami} \\ |\xi_i - \xi_j| & \text{w przeciwnym wypadku} \end{cases}$$

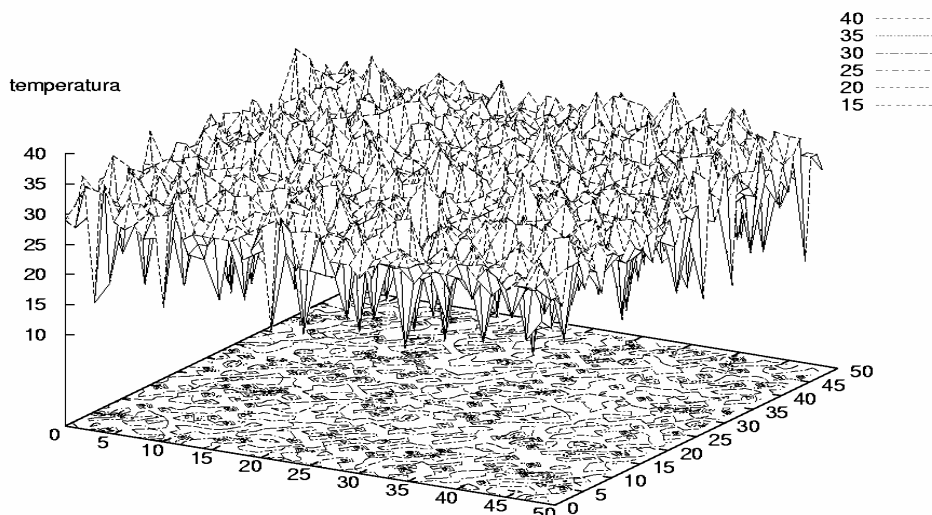
Mając zadany hamiltonian, podobnie jak w przypadku modelu Isinga, rozpatrujemy układ pięciopunktowy. Załóżmy dla uproszczenia, iż gęstości oraz ciepło właściwe kryształu i cieczy są jednakowe. W przypadku gdy nie zachodzi przemiana fazowa, temperatury powinny dążyć do

wyrównania swoich poziomów przy jednoczesnym zachowaniu równości:

$$\tau_1 + \tau_2 + \tau_3 + \tau_4 - 4\tau_0 = 0$$

gdzie  $\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4$  są sąsiadami  $\tau_0$ , będącego dyskretyzacją równania Laplace'a. Łatwo zauważyć, że przy takim przekształceniu energia wyrażana przez hamiltonian powinna maleć. W przypadku gdy zachodzi przemiana fazowa, pewna ilość ciepła (wyrażona poprzez  $\sigma_i$ ) musi zostać oddana lub pobrana z otoczenia. Zatem operacja elementarna odpowiadająca przemianie fazowej powoduje wzrost wartości hamiltonianu.

Istotnym elementem algorytmu jest zrównoważenie przemian fazowych, zwiększających wartość energii, poprzez proces rozchodzenia się ciepła. Obraz który dostajemy po  $n$  krokach iterowania operacji podstawowych, powinien odzwierciedlać stan, w którym znajduje się układ przy energii zbliżonej do minimalnej.



Rys. 4 Rozkład temperatury.

W implementacji modelu wykorzystano metody modelowania stochastycznego. Korzystając z analogii z modelami fizyki statystycznej, przyjęto, iż przemiana fazowa zachodzi z prawdopodobieństwem wyznaczonym przez równość:

$$P(a_1 \rightarrow a_2) = e^{-\frac{|r \pm \sigma_i|}{\sigma_i}}$$

Wyraz w wykładniku można interpretować, jako kwant energii pary komórek (przypadający na maksymalną bezwzględną temperaturę w której zachodzi przejście fazowe) gdy bezwymiarowa temperatura drugiego elementu wynosi 0 i jego stan jest przeciwny. W trakcie przemiany fazowej, temperatura komórki zostaje zmodyfikowana o wielkość  $dx$ . Temperatury sąsiadów zostają wtedy zmienione o  $dy$ , gdzie spełniona jest

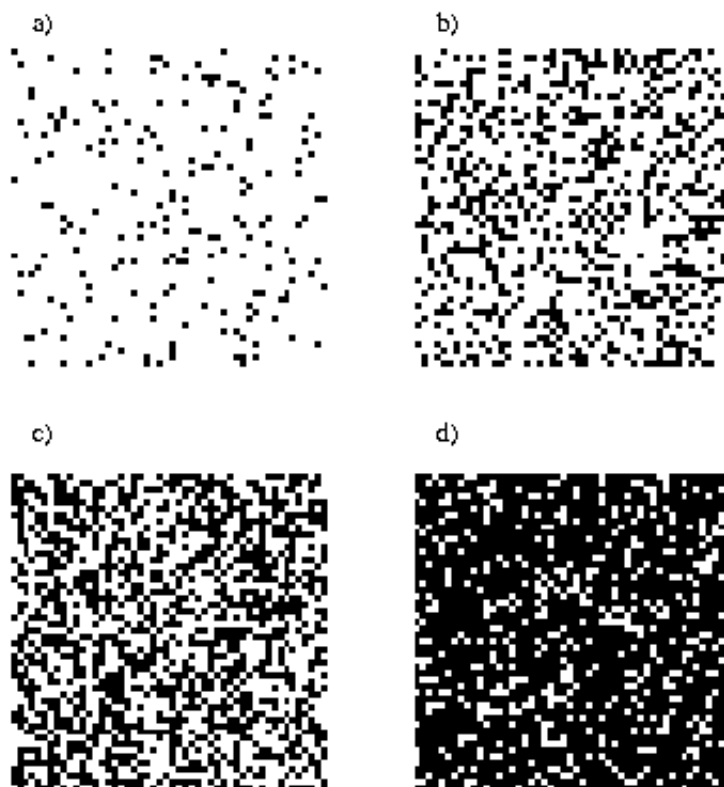
nierówność:  $dx \leq 4dy$ . Uwzględniamy w ten sposób ciepło przemiany fazowej.

Ze względu na bardzo silne oddziaływanie na model operacji symulującej rozchodzenie się energii, przyjęto iż w każdym kroku iteracji wylosowane zostanie  $n$  par sąsiadujących ze sobą komórek, dla których nastąpi zmiana temperatur proporcjonalna do ich różnicy.

Układ inicjowano zadając we wszystkich komórkach stałą temperaturę. Wartości określające stan skupienia były losowane z jednakowym prawdopodobieństwem.

## WSTĘPNE WYNIKI SYMULACJI

Przykładowy rozkład temperatury, dla wysokiej temperatury początkowej, przedstawia rysunek 4. Widoczne są duże



Rys. 5 Rozkład frakcji stałej dla różnych temperatur początkowych

fluktuacje. Minima rozkładu – duże wyiębienia – oznaczają miejsca w których następuje krystalizacja.

Kształty gron kryształów uzyskane w trakcie doświadczeń przedstawia rysunek 5. Przy wysokich temperaturach tworzą się pojedyncze kryształy. Wychłodzenie w okolicy powstającego kryształu przy niższych temperaturach odpowiada za tworzenie luźno związanych grup (rys. 5a). Wraz z dalszym spadkiem temperatury powstają z nich grona które najczęściej

przyjmują postać nitkowatych tworów. W gorącej przestrzeni pomiędzy grupami tworzą się nowe kryształy (rys. 5b). Obniżanie temperatury powoduje dalszy rozwój nitkowatych gron. Przy bezwymiarowej temperaturze równej 0 grona zaczynają rozwijać się również wszerek (rys. 5c). Dalsze chłodzenie powoduje przyrost fazy stałej. Zarysowują się wyraźne słabsze linie oddzielające większe skupiska kryształów (rys. 5d).



Analizując wykresy temperatury możemy zauważyć duże fluktuacje w stanach charakterystycznych (rys. 6a,b,c). W stanach ekstremalnych (rys. 6a,c) są one największe. W pierwszym przypadku silne wychłodzenia są spowodowane przez powstające kryształy (rys. 6a). Symetrycznie komórki zawierające rozgrzaną ciecz są powodem największych wzrostów temperatury w przypadku stygnącego metalu (rys. 6c).

### UWAGI KOŃCOWE

Prezentowana koncepcja modelu krystalizacji pozwala na obserwację procesów zachodzących w skali mikro i makro. Wykorzystanie stochastycznych automatów komórkowych umożliwia wizualizację procesu krystalizacji pozwalającą na ocenę jakościową zjawisk wzrostu gron kryształów. Tematem dalszych prac będzie dynamiczna identyfikacja parametrów modelu mikro przy pomocy wyników dostarczanych przez model makro.

### LITERATURA

1. S. Bieniasz, M. Warmuzek, et al., Computer simulation of the eutectic Al-Si alloys solidification, Proc. Intl Conference on Simulation, Designing and Control of Foundry Processes, Kraków 1999
2. J.J. Binney, N.J. Dowrick, A.J. Fisher, M.E.J. Newman, Zjawiska krytyczne. Wstęp do teorii grupy renormalizacji, PWN 1998
3. N.A. El Mahallawy, et. al., Solidification Simulation of Equiaxed Grains in Al-Si Eutectic Alloys, Vols. 217-222, pp.347-352, Materials Science Forum, Switzerland. 1996
4. E.Z. Ising, *der Physic* **31**, 235 (1925)
5. W. Kapturkiewicz (1988). Model i numeryczna symulacja krystalizacji odlewu. Zesz. Nauk. AGH, Kraków.
6. S. Kluska-Nawarecka, H. Połcik, M. Warmuzek Simulation and Control of the Metal Alloys Solidification Process. Proc. Int. Conf. on Management and Control of Production and Logistics - MCPL'97, IFAC/IFIP, Campinas, Brasil. 1997
7. E. Malder, et. al. Numerical calculation of the concentration distribution during the solidification of binary alloys allowing for dendrites arm coarsening, Vol. 13/14. *Mat. Sci. Form.* 1987
8. L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944)
9. M. Rappaport, et. al., Modeling of microstructural evolution, Vol. 15. *ASM Handbook.* 1992
10. P.R. Sahm, et. al., Casting of high quality casts parts by the gas counter-pressure casting process using numerical simulation, *Journal of Materials Science and Technology*, Vol. 5., 1997
11. N. Szczygiel, Numerical modeling of equiaxed microstructure formation in binary alloys, *Solid. of Metals and Alloys*, Vol. 17. 1992
12. Ph. Thever et. al., Modeling of equiaxed formation in casting, Vol. 20A. *Met. Trans. AFS.* 1989