РОЗРОБКА ПРОГРАМНОГО ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ МІКРОСТРУКТУРИ МАТЕРІАЛІВ МЕТОДОМ КЛІТИННИХ АВТОМАТІВ

канд. техн. наук, доц. О.О. Водка, студ. О.Д. Панаріна, Національний технічний університет "Харківський політехнічний інститут", м. Харків

Реальні метали, що використовуються у техніці, зазвичай не являються чистими, а є сплавами, вони складаються з великої кількості зерен, орієнтація яких є випадковою, а самі зерна містять атоми різних компонент. Причиною зернистої будови металів і сплавів є те, що вони кристалізуються відразу з декількох центрів, що призводить до їх складної мікроструктури.

З огляду на складну мікроструктуру, необхідно моделювати форми кристалів, що може дати можливість передбачити поведінку металів при прикладенні до них різного роду зовнішнього навантаження.

Для моделювання мікроструктури виділяється декілька методів: тесцеляція Вороного, принцип клітинних автоматів, метод Монте-Карло. У роботі розглянутий метод клітинних автоматів.

На першому кроці алгоритму створюється деякий дискретний простір, який складається з клітинок клітинних автоматів. На наступному етапі випадковим чином обирається набір початкових клітинок, а далі змінна стану, що описує стан клітинок, встановлюється у "вже виросли". Ці клітинки представляють собою ядро зерна. Другий крок алгоритму оснований на рості зерна. Правило переходу на цьому етапі визначається так: коли сусід конкретної клітинки на попередньому кроці знаходився у стані "вже виросли", то ця клітинка може також змінити свій стан у "вже виросли". Зерна можуть рости в усіх напрямках до тих пір, поки він не зустрінеться з іншим зерном. Після цього ріст продовжується тільки у тих напрямках, де ще немає зерен. Цей процес виконується до тих пір, поки досліджуваний простір не заповнюється зернами.

У процесі вивчення цього методу було розглянуто декілька правил переходу, та всі вони були порівняні з уже відомими результатами.

Переваги даного методу полягають основним чином у простоті моделювання форми зерна. Недоліком методу є те, що границі кліток є дискретними.

В результаті було розроблено програмне забезпечення для моделювання мікроструктури металу методом кліткових автоматів, розглянуто декілька правил переходу, та порівняно результати із уже відомими.