

Водка О.О.

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»

Панаріна О.Д.

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»

РОЗРОБКА МЕТОДІВ КОМП'ЮТЕРНОГО СИНТЕЗУ ТА АНАЛІЗУ ХАРАКТЕРИСТИК МАТЕРІАЛІВ НЕОДНОРІДНОЇ СТРУКТУРИ¹

Метою роботи є розроблення програмного забезпечення для моделювання мікроструктури металів. Розроблено програмне забезпечення з використанням методу кліткових автоматів, який на основі випадковим чином заданих центральних точок, ядер зерен дає змогу отримати повну картину процесу кристалізації металу. Отримані результати порівняні із уже відомими результатами, отриманими іншими методами.

Ключові слова: мікроструктура металів, штучне відтворення мікроструктури, метод кліткових автоматів, програмне забезпечення.

На мікрорівні металеві матеріали являють собою полікристалічну структуру, причому кожен кристал має свою орієнтацію в просторі. За мікрокристалічної структури кожен кристал полікристалічної структури володіє анізотропними (залежними від напрямку) механічними властивостями. Врахування анізотропії матеріалу на мікрорівні дає змогу оцінити скачки в напруженому стані, що виникають між кристалами. Саме вони є джерелами мікро- і макротріщин [1–8].

Беручи до уваги те, що мікроструктура є досить складною, необхідно моделювати форми кристалів, що може дати можливість передбачити поведінку металів у разі дії різного роду навантаження.

Для моделювання виділяється декілька методів штучного відтворення мікроструктури металів: тесцеляція Вороного, принцип клітинних автоматів, метод Монте-Карло.

Найбільш простим методом моделювання є метод кліткових автоматів. Саме цей метод було розглянуто в роботі.

Постановка задачі. У роботі пропонується розробити програмне забезпечення, що дає змогу моделювати мікроструктуру металів із використанням методу кліткових автоматів. Для цього необхідно виконати такі задачі:

- розглянути методи штучного відтворення мікроструктури металів;
- вивчити метод кліткових автоматів моделювання мікроструктур;

– розробити програмне забезпечення (ПЗ), що дає змогу моделювати мікроструктури металів по випадковим чином заданих центрах зерен;

– протестувати роботу ПЗ та порівняти результати з уже відомими результатами, отриманими іншими методами моделювання мікроструктур.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Термін «кліткові автомати» почав використовуватись у середині ХХ ст. для позначення сукупності залежних елементів із заданими станами і правилами, згідно з якими стани цих елементів і залежності між ними змінюються в часі. Час і стани при цьому дискретні. Використання описаних моделей для формального моделювання самовідтворюваних організмів вперше запропоновано в роботі Фон Неймана. Елементи кліткових автоматів запропоновано представити одновимірними або двовимірними нескінченними прямокутними таблицями. Стан елемента змінюється залежно від його стану і від стану двох (або чотирьох – для двовимірного випадку) найближчих сусідів.

Клітковий автомат – дискретна модель, що вивчається в математиці, теорії обчислення, фізиці, теоретичній біології і мікромеханіці. Включає регулярну сітку клітинок, кожна з яких може перебувати в одному зі станів скінченної множини, таких як 1 і 0. Решітка може бути будь-якої розмірності. Для кожної клітинки визначено безліч клітинок, які називаються околицею. Приміром, околиця може бути визначена як всі клітинки на відстані не більше 2 від поточної (околиця фон Неймана рангу 2). Для роботи клітинного автомата потрібно задання початкового стану всіх

¹ Дана робота виконана за підтримки МОН України в рамках реалізації Науково-Дослідної Роботи "Розробка методів математичного моделювання поведінки нових та композиційних матеріалів для оцінки ресурсу та прогнозування надійності елементів конструкцій" (№ ДР 0117U004969).

клітинок і правил переходу клітинок з одного стану в інший. На кожній ітерації, використовуючи правила переходу і стану сусідніх комірок, визначається новий стан кожної клітинки. Зазвичай правила переходу однакові для всіх клітинок і застосовуються одразу до всієї решітки.

Моделювання за допомогою кліткових автоматів. Клітковий автомат K – це впорядкована множина з чотирьох компонентів:

$$K = \langle z^d, N, A, \varphi \rangle, \quad (1)$$

де z^d – множина d -мірних векторів з цілочисельними координатами – клітковий простір;

N – скінченна множина потужності m векторів з z^d :

$N = \{n_i \mid n_i = (x_{i1}, \dots, x_{id}), \exists n_i = 0\}, i = 1, \dots, m$, з нульовим вектором – шаблон сусідства клітинки;

A – скінченна множина потужності k станів клітинки з виділеним станом спокою, \emptyset – алфавіт кліткового автомата;

φ – локальна функція переходів, визначена в дискретні моменти часу, яка змінює стани клітинки, що є нульовим елементом у шаблоні, залежно від стану клітинок, що складають шаблон сусідства $\varphi : A^m \rightarrow A$; при цьому $\varphi(\emptyset, \emptyset, \dots, \emptyset) = \emptyset$. Стан усіх клітинок у момент часу t створює поточну конфігурацію: $c^t : z^d \rightarrow A$.

Застосування локальної функції переходів до поточної конфігурації задає глобальну функцію переходів: $c_{j1} = g(c_j)$. Впорядкована сукупність конфігурацій, що отримується з початкової послідовним застосуванням глобальної функції переходів, утворює еволюцію e кліткового автомата: $e = \langle c_0, c_1, \dots, c_s \rangle$ [1]. Тобто кліткові автомати – дискретна динамічна система, що є сукупністю однакових клітинок, однаковим чином сполучених між собою. Всі клітинки утворюють так звану решітку кліткового автомата. Решітки можуть бути різних типів, відрізняючись як за розмірністю, так і за формою клітинок. Кожна клітинка є скінченним автоматом, стани якого визначаються станами сусідніх клітинок і, можливо, її власними станами.

Відзначимо, що в кліткових автоматах як в обчислювальних моделях не розглядаються вхідні і вихідні дії. В апаратній реалізації кліткові автомати зазвичай називають однорідними структурами.

Кліткові автомати в загальному випадку характеризуються такими властивостями:

1. Зміна значень усіх клітинок відбувається одночасно після обчислення нового стану кожної клітинки решітки.

2. Решітка однорідна. Неможливо відрізнити жодні два місця на решітці за ландшафтом.

3. Взаємодії локальні. Лише околишні клітинки (як правило, сусідні) здатні вплинути на цю клітинку.

4. Множина станів клітинки кінцева [2].

В одновимірному (лінійному) КА решітка являє собою ланцюжок клітинок (одновимірний масив), в якій для кожної з них, крім крайніх, є по два сусіди. Для усунення крайових ефектів решітка «загортається» у тор. Це дає змогу використовувати таке співвідношення для всіх клітин автомата:

$$y'[i] = f(y[i-1], y[i], y[i+1]), \quad (1)$$

де f – функція переходів клітинки;

$y'[i]$ – стан i -ої клітинки в наступний момент часу;

$y[i-1]$ – стан $(i-1)$ -ої клітинки в даний момент часу;

$y[i]$ – стан i -ої клітинки в даний момент часу;

$y[i+1]$ – стан $(i+1)$ -ої клітинки в даний момент часу.

У двовимірному (площинному) КА решітка реалізується двовимірним масивом. У ній кожна клітинка має вісім сусідів. Для усунення крайових ефектів решітка так само, як і в попередньому випадку, «загортається» у тор. Це дає змогу використовувати таке співвідношення для всіх клітинок автомата:

$$y'[i][j] = f \left(\begin{array}{l} y[i][j], y[i-1][j], y[i-1][j+1], y[i][j+1], \\ y[i+1][j+1], y[i+1][j], y[i+1][j-1], \\ y[i][j-1], y[i-1][j-1] \end{array} \right). \quad (2)$$

На практиці широкого поширення здобули околи Мура та окіл фон Неймана (рис. 1). В околі Мура клітинки вважаються сусідами, коли вони мають спільну сторону або вершину. Тобто кожна клітинка має 8 рівнозначних сусідів. В околі фон Неймана сусідами клітинки є тільки ті клітинки, які мають із цією клітинкою спільну сторону, тобто в локальному околі цієї клітинки є чотири клітинки.

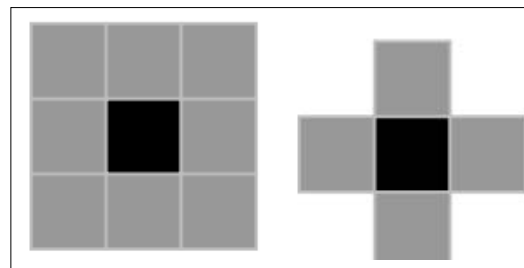


Рис.1. Окіл Мура та окіл фон Неймана

Для реалізації методу кліткових автоматів було розроблено програмне забезпечення, яке дає змогу моделювати мікроструктури металів по випадковим чином заданих центрах зерен.

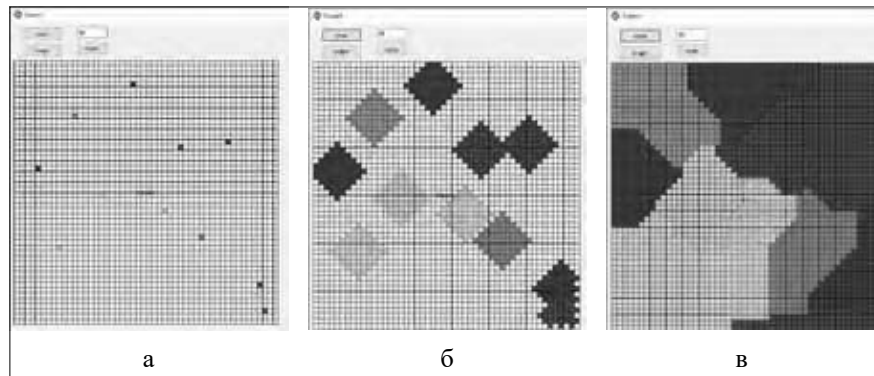


Рис. 2. Стадії роботи алгоритму: а – початкові точки; б – стадія розростання зерен; в – результат

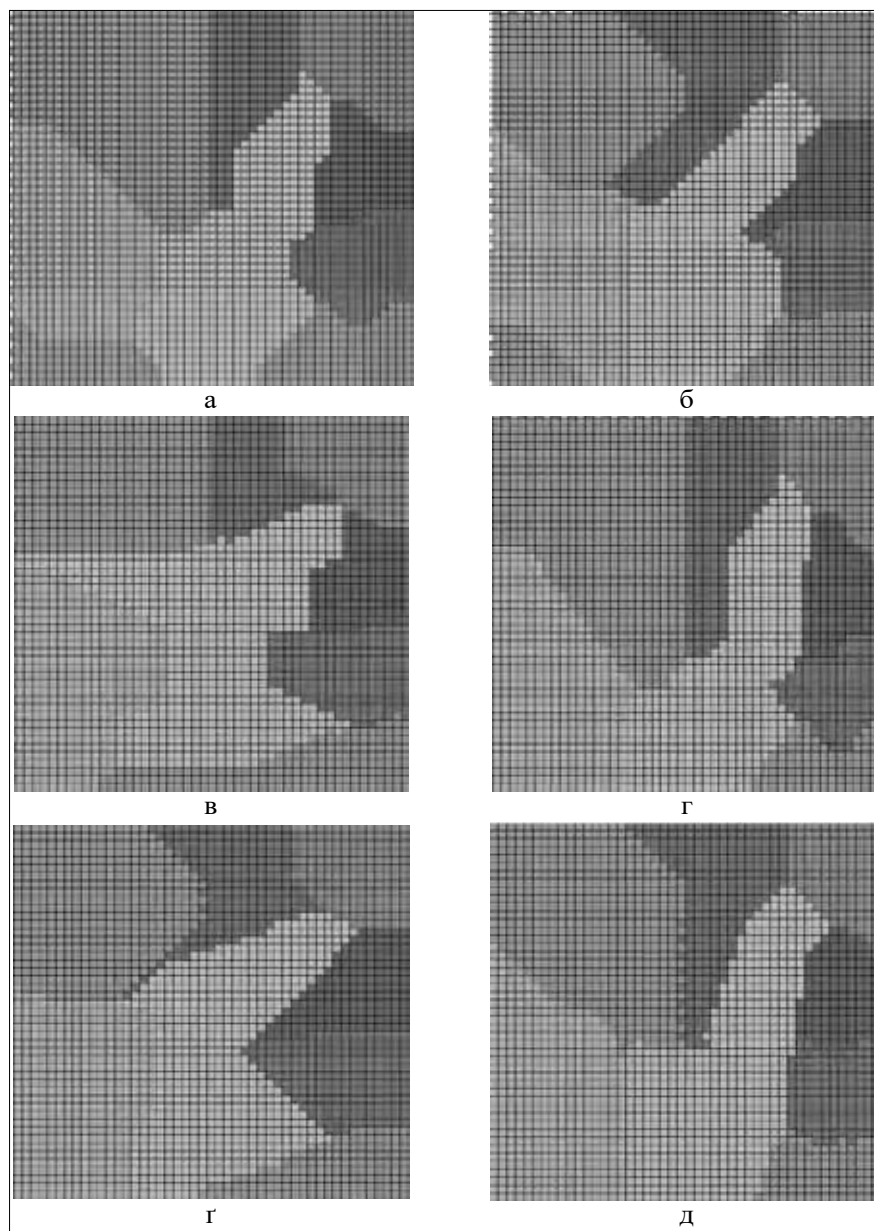


Рис. 3. Результати роботи алгоритму:
а – окіл фон Неймана; б – окіл Мура; в, г – кристалізація відбувається швидше у напрямку осі x, окіл фон Неймана та Мура; з, д – кристалізація відбувається швидше у напрямку осі y, окіл фон Неймана та Мура

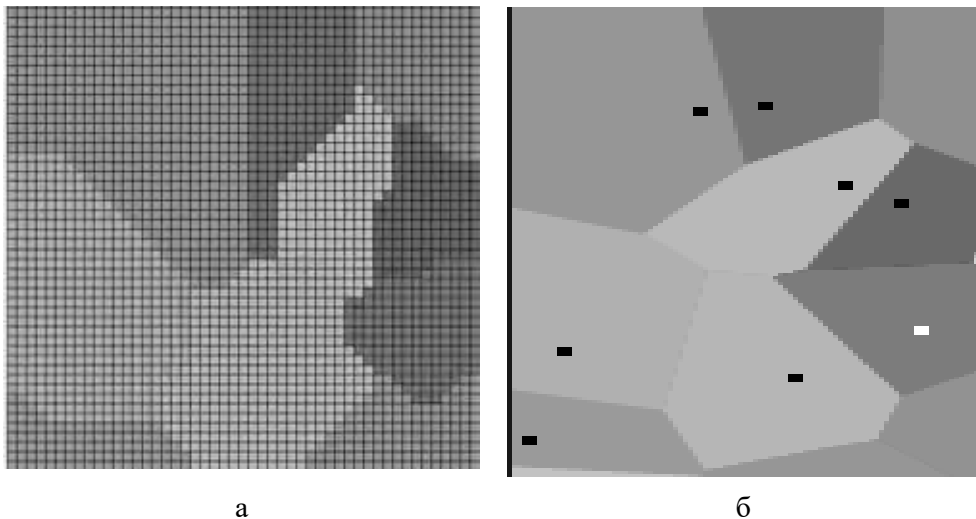


Рис. 4. Порівняння результатів роботи алгоритмів:
а – метод клітинних автоматів; б – тесеція Вороного

Метод кліткових автоматів широко використовується в моделюванні мікроструктури металів. На першому кроці алгоритму росту зерна формується деякий дискретний простір кліткового автомата, який складається з клітинок кліткових автоматів (рис. 2).

На наступному етапі випадковим чином обирається набір початкових клітинок, а далі змінна стану, що описує стан клітинок, встановлюється в «вже виролі». Ці клітинки являють собою ядро зерна (рис. 2 а).

Другий крок алгоритму оснований на рості зерна. Правило переходу на цьому етапі визначається так: коли сусід конкретної клітинки на попередньому кроці перебував у стані «вже виролі», то ця клітинка може також змінити свій стан у «все виролі» (рис. 2 б).

Зерна можуть рости в усіх напрямках до тих пір, поки воно не зустрінеться з іншим зерном. Після цього ріст триває тільки у тих напрямках, де ще немає зерен. Цей процес виконується до тих пір, поки досліджуваний простір не заповнюється зернами (рис. 2 в) [3].

Результати роботи розробленого програмного забезпечення представлені на рис. 3. На рис. 3 а представлена мікроструктура з околom фон Неймана, на рис. 3 б – з околom Мура.

Також були розглянуті такі ситуації, коли зерна ростуть з різною швидкістю у різних напрямках: вдвічі швидше по x ніж по y (рис. 3 в) та вдвічі швидше по y ніж по x (рис. 3 г) при цьому точки мають окол фон Неймана, а також вдвічі швидше по x ніж по y (рис. 3 г) та вдвічі швидше по y ніж по x (рис. 3 д) при цьому точки мають окол Мура. Усі результати представлені за однакових центрів зерен кількістю 10 точок.

Порівняння результатів роботи програмного забезпечення проводилося методом порівняння результатів, отриманих методом кліткових автоматів (рис. 4 а), та уже відомих результатів, отриманих методом тесеції Вороного (рис. 4 б).

Як можна побачити на рисунках, результати, отримані за допомогою розробленого програмного забезпечення методом кліткових автоматів, та результати, отримані методом Вороного, є дуже подібними, що може свідчити про те, що розроблене програмне забезпечення працює коректно. Похибка в результатах може бути спричинена тим, що в методі кліткових автоматів границі клітинок є дискретними.

Висновки. У результаті було розроблено програмне забезпечення для штучного відтворення мікроструктури металу методом кліткових автоматів. Отримані результати були порівняні з уже відомими результатами, отриманими за методом Вороного.

Список літератури:

1. Захарчук И.И. и др. Обеспечение информационной защиты беспроводных сенсорных сетей на основе клеточных автоматов. Инженерный журнал: наука и инновации. 2013. №. 11. С. 45–45.
2. Наумов Л., Шалыто А. Клеточные автоматы. Реализация и эксперименты. URL: <http://www.softcraft.ru/auto/switch/kla/> (дата звернення: 2.11.2018)
3. Madej L. Digital/virtual microstructures in application to metals engineering – a review. Archives of Civil and Mechanical Engineering. 2017. Vol. 17, No. 4. P. 839–854.

4. Zinoviev A., Zinovieva O., Ploshikhin V. Evolution of grain structure during laser additive manufacturing simulation by a cellular automata method. *Materials & Design*. 2016. Vol. 106. P. 321–329.
5. Akbari M., Asadi P., Givi M. B., Zolghadr P. A cellular automaton model for microstructural simulation of friction stir welded az91 magnesium alloy. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2016. Vol. 24, No. 3. P. 035012.
6. Kühbach M., Gottstein G., Barrales-Mora L.A. A statistical ensemble cellular automaton microstructure model for primary recrystallization. 2016. Vol. 107. P. 366–376.
7. Raabe D. Mesoscale simulation of spherulite growth during polymer crystallization by use of a cellular automaton. *Acta Materialia*. 2004. Vol. 52, No. 9. P. 2653–2664.
8. Raabe D. Cellular automata in materials science with particular reference to recrystallization simulation. *Annual Review of Materials Research*. 2002. Vol. 32, No. 1. P. 53–76.

РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ КОМПЬЮТЕРНОГО СИНТЕЗА И АНАЛИЗА ХАРАКТЕРИСТИК МАТЕРИАЛОВ НЕОДНОРОДНОЙ СТРУКТУРЫ

Целью работы является разработка программного обеспечения для моделирования микроструктуры металлов. Разработано программное обеспечение с использованием метода клеточных автоматов, который на основе случайным образом заданных центральных точек, ядер зерен позволяет получить полную картину процесса кристаллизации металла. Полученные результаты сравнены с уже известными результатами, полученными другими методами.

Ключевые слова: микроструктура металлов, искусственное воспроизводство микроструктуры, метод клеточных автоматов, программное обеспечение.

DEVELOPMENT OF METHODS OF COMPUTER SYNTHESIS AND ANALYSIS OF THE CHARACTERISTICS OF MATERIALS OF INHOMOGENEOUS STRUCTURE

The aim of this work is to develop software for the simulation of the microstructure of metals. The software is developed using the method of cellular automata, which is based on randomly specified center points of the nuclei of the grains, allows obtain a complete picture of the crystallization process of the metal. The results are compared with already known results obtained by other methods.

Key words: microstructure of metals, artificial reconstruction of a microstructure, method of cellular automata, software.