

Пашинская А.В.

кафедра прикладной математики и информатики, Донецкий национальный технический университет, anna.pashinskaya@mail.ru

СИСТЕМАТИЗАЦИЯ И СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Пашинская А.В., В работе проводится сравнительный анализ методов моделирования процесса кристаллизации. Автором систематизированы существующие методы, а так же предложено четыре варианта алгоритма геометрического моделирования процесса кристаллизации.

Введение. Моделирование — исследование объектов познания на их моделях; построение и изучение моделей реально существующих объектов, процессов или явлений с целью получения объяснений этих явлений, а также для предсказания явлений, интересующих исследователя.

В силу многозначности понятия «модель» в науке и технике не существует единой классификации видов моделирования: классификацию можно проводить по характеру моделей, по характеру моделируемых объектов, по сферам приложения моделирования (в технике, физических науках, кибернетике и т. д.). Например, можно выделить следующие виды моделирования: информационное, компьютерное математическое молекулярное, цифровое, логическое, статистическое, структурное, физическое, графическое и геометрическое моделирование и т.д.

Компьютерное трехмерное геометрическое моделирование позволяет получить и исследовать геометрические параметры объекта, проанализировать механические свойства, динамику поведения и взаимодействия объектов. Многообразие задач геометрического моделирования требует разработки эффективных методов и алгоритмов формирования компьютерных трехмерных геометрических моделей, способных обеспечить высококачественную и информативную визуализацию в реальном времени, используя стандартные современные программно-аппаратные средства.

Целью данной статьи является систематизация и обобщение существующих методов моделирования кристаллизации, проведение их сравнительного анализа, выбор условий использования методов, учитывающих изменение геометрии кристалла.

Актуальность данного исследования обусловлена возможностью использования на практике при подготовке производственного эксперимента компьютерного моделирования процесса кристаллизации, что сокращает время и денежные издержки на проведение опытных экспериментов.

Анализ последних достижений. Как показывает современная практика, наиболее распространенными методами моделирования кристаллизации являются численные методы [1-2, 4-6], которые позволяют предсказать общую

структуру кристаллизовавшегося вещества. Тем не менее, есть ряд физических задач, для решения которых необходимо знать структуру слитка на уровне отдельных кристаллов, поэтому в настоящее время получают дальнейшее развитие геометрические методы моделирования [3,7-8].

Сравнительный анализ методов моделирования. Геометрическое моделирование процесса кристаллизации - процесс создания трехмерной модели зародышей кристаллов, имеющих формы призм, в некотором замкнутом объеме с последующей возможностью расчета форм кристаллов в процессе их роста, т.е. в процессе затвердевания вещества.

Для моделирования процессов кристаллизации могут использоваться методы, обобщенные в таблице 1.

Таблица 1 – Методы моделирования кристаллизации

Название	Среда кристаллизации	Описание
Численный подход		
метод Монте-Карло	газовая	моделируется реальное течение разреженного газа с помощью большого количества (до 10^7) моделирующих молекул. Одна моделирующая частица представляет очень большое число реальных молекул. В основе метода лежит идея расщепления непрерывного процесса движения молекул и их столкновений в разреженном газе на два последовательных этапа на временном шаге Δt .
прямого статистического моделирования	газовая	расчётная область разбивается на столкновительные ячейки, сначала молекулы передвигаются на расстояния, соответствующие малому шагу Δt , затем в каждой ячейке производятся столкновения между молекулами. Процесс повторяется циклично.
метод молекулярной динамики	аморфная	для описания движения атомов или частиц применяется классическая механика. Закон движения частиц находят при помощи аналитической механики. Силы межатомного взаимодействия можно

		представить в форме классических потенциальных сил (как градиент потенциальной энергии системы). Точное знание траекторий движения частиц системы на больших промежутках времени не является необходимым для получения результатов макроскопического (термодинамического) характера. Наборы конфигураций, получаемые в ходе расчетов методом молекулярной динамики, распределены в соответствии с некоторой статистической функцией распределения, например отвечающей микроканоническому распределению.
методы конечных элементов, разностей, объемов, примененные в узловых точках регулярных пространственных сеток	газовая, жидкая	основанны на решении термодинамических уравнений с некоторым шагом по времени, что позволяет получить состояние системы в заданной точке объема в заданное время.
Системный подход		
метод построения математических моделей отдельных подсистем слитка	жидкая	Построение математических моделей отдельных подсистем затвердевающего слитка базируется на представлении о взаимосвязи и взаимном влиянии различных физических явлений в охлаждаемом расплаве - тепло- и массообмена, движения расплава, зарождения и роста кристаллов.
Геометрический подход		
модель роста кристаллических агрегатов в идеальных	жидкая	Для описания процесса используется так называемое геометрическое приближение, когда одиночные кристаллы

стационарных условиях на бесконечной плоской подложке без образования полостей		(монокристаллические области) представляются в виде изменяющихся определенным образом многогранников. Эта модель описывает рост кристаллических агрегатов (поликристаллов, двойников, сростков и других кристаллических структур, состоящих из нескольких монокристаллов), не имеющих полостей, из раствора или расплава в условиях, близких к естественным или стационарным. В качестве приложения данная модель может быть использована для исследования процесса выращивания кристаллов берилла из раствора на подложке.
метод расчета кинетики кристаллизации (изотермальная кристаллизация)	жидкие композитные материалы	на основе решения кинетических уравнений, описывающих изотермическую кристаллизацию в композитных материалах, делается пиксельная закрашка областей затвердевания, показывающая эволюцию структуры кристалла

Как видно из таблицы 1, методы, моделирующих напрямую взаимодействие кристаллов в расплаве, развиты недостаточно.

Автором статьи предложено несколько алгоритмов [9-12], позволяющих предсказать структуру слитка на основе геометрических соотношений в кристалле. В основе всех алгоритмов лежат закономерности изменения структуры кристалла в процессе роста.

Предложенные алгоритмы можно разбить на 2 группы: для двухмерного и трехмерного моделирования. Схема дальнейшего разбиения представлена на рисунке 1.



Рисунок 1 – Схема разбиения алгоритмов моделирования кристаллизации

Описание характерных особенностей алгоритмов приведены в таблице 2. Методика расчета временных затрат для воксельного базового (воксельного) и воксельного модифицированного (векторно-воксельного) алгоритмов основана на следующих параметрах: количество кристаллов, длина стороны кристалла, количество шагов роста.

Эффективность работы алгоритма с точки зрения качества результирующего изображения и по времени работы проверялась для n кристаллов кубической формы с длиной стороны l в течение m шагов моделирования.

Таблица 2 – Сравнение предложенных методов геометрического моделирования кристаллизации.

Название	Описание характерных особенностей	Временная сложность работы алгоритма для n кристаллов и m шагов моделирования роста	Качество результирующего изображения
Векторный	Кристаллы описываются как совокупности вершин и ребер. При взаимодействии ребер или проекций граней проводится переразбиение ребра или грани на фрагменты	$O(4 * l * n^m)$	низкое, недостаточное для анализа
Растровый	Кристаллы представлены как совокупность пикселей, расположенных в плоскости сечения. Каждый пиксель имеет собственный набор	$O(l^2 * n * m)$	Высокое, достаточно для полуавтоматического анализа, адекватно физическим образцам

	характеристик.		
Воксельный базовый	Кристаллы представлены как совокупность вокселей. Каждый воксель имеет собственный набор характеристик.	$O(6 \cdot l^2 \cdot n \cdot m)$	Высокое, достаточно для полуавтоматического анализа, адекватно физическим образцам. Можно строить трехмерные схемы затвердевшего вещества.
Воксельный модифицированный	Кристаллы представлены как список вершин и ребер до тех пор, пока нет пересечений в процессе роста. Если возникла пересечение, происходит вокселизация кристалла. Каждый воксель имеет собственный набор характеристик.	$O(m + m^2 + l^3)$	Высокое, достаточно для полуавтоматического анализа, адекватно физическим образцам. Можно строить трехмерные схемы затвердевшего вещества.

Проанализировав разработанные алгоритмы можно сказать, что наиболее приемлемым с точки зрения получения качественного изображения и с точки зрения скорости получения результата, является воксельный модифицированный (векторно-воксельный) алгоритм.

Адекватность модели и реального образца проверена статистически по методу Уилкоксона-Манна-Уитни

Выводы. В статье приведена систематизация существующих методов моделирования кристаллизации, приведено сравнительное описание разработанных автором алгоритмов геометрического моделирования кристаллизации. На основании анализа быстродействия алгоритмов и качества полученного изображения можно сказать, что для работы в двухмерном пространстве рекомендовано использовать растровое моделирование процесса роста и взаимодействия кристаллов в расплаве, для работы в трехмерном пространстве – воксельным модифицированным (векторно-воксельным) алгоритмом.

Список литературы

1. Grujicic M. Computer simulations of the evolution of solidification microstructure in the LENS™ rapid fabrication process. / M. Grujicic, G. Cao, R.S. Figliola // *Applied Surface Science* 183, 2001, pp. 43-57
2. Krill III C.E.. Computer simulation of 3-D grain growth using a phase field Model / C.E. Krill III, L.-Q. Chen. // *Acta Materialia* 50, 2002, pp. 3057-3073
3. Бреднихина А.Ю. Разработка средств геометрического моделирования и научной визуализации для поддержки обучения и исследований в области кристаллографии: автореферат дис. кандидата технических наук : 05.13.18 / Бреднихина Анна Юрьевна; [Место защиты: Ин-т вычисл. математики и мат. геофизики]. – Новосибирск , 2009, 16 с.
4. Лагунов В.А. Компьютерное моделирование формирования кристаллической структуры при переходе из аморфного состояния [электронный ресурс] / В.А. Лагунов, А.Б. Синани // *Физика Твёрдого Тела*. – 2000. – Т.42, В.6. – Режим доступа: http://www.physics.wups.lviv.ua/depts/KFM/prysjan/metals/p1087_1091.pdf
5. Самойлович Ю. А. Системный анализ кристаллизации слитка. / Ю. А. Самойлович // Киев: Наук. думка, 1983. — 248 с.
6. Вольнов И.Н. Системы автоматизированного моделирования литейных процессов – состояние, процессы, перспективы / И.Н. Вольнов // *Литейщик России*. – 2007. - №6. – С. 14-17.
7. Müller J. Volume modelling and rendering based on 3d voxel grids [электронный ресурс] / J. Müller // 2005. Режим доступа: <http://fullebooks.net>
8. Ruan C. Computer modeling of isothermal crystallization in short fiber reinforced composites / C. Ruan, J. Ouyang, S. Liu, L. Zhang. // *Computers & Chemical Engineering*, vol. 35. – 2011, № 11. 2306 - 2317p.
9. Карабчевский В.В. Моделирование и визуализация процесса кристаллообразования в расплавах. / В.В. Карабчевский, А.В. Пашинская // *Збірник наукових праць конференції «Геометричне та комп'ютерне моделювання»*. – Харків: ХДУХТ, 2009 – с. 51-56.
10. Карабчевский В.В. Геометрическое моделирование роста кристаллов в расплавах. / В.В. Карабчевский, А.В. Пашинская / *Міжвідомчий науково-технічний збірник «Прикладна геометрія та інженерна графіка»*. Випуск 85. – К:КНУБА, 2010 р. – с. 19-24
11. Карабчевский В.В. Особенности воксельной модели процесса роста многогранников. / В.В. Карабчевский, А.В. Пашинская // *Міжвідомчий науково-технічний збірник «Прикладна геометрія та інженерна графіка»*. Випуск 87. – К:КНУБА, 2011 р. – с. 149-153.
12. Карабчевский В.В. Методы моделирования роста кристаллов в расплавах. / В.В. Карабчевский, А.В. Пашинская // *Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія «Інформатика, кібернетика та обчислювальна техніка» (КОТ-2010)*. Випуск 11(164). – Донецьк: ДВНЗ «ДонНТУ». – 2010. – 165-171с.