

УДК 004.9

Методы моделирования роста кристаллов в расплавах

В.В. Карабчевский, А.В. Пашинская
Донецкий национальный технический университет
anna.pashinskaya@mail.ru

Abstract

Karabchevskiy V.V., Pashinskaya A.V. Methods of crystal growth modeling in liquid melt. Main factors that have influence on growth process in 3D space are determined. Basic distinctions and geometrical relations of crystal characteristics for different type of lattice are described. Succession of action which is necessary for ingot model building is formulated. Algorithm for realization of proposed approached is developed, realized and analyzed.

Введение

Решение проблемы моделирования реалистичного с точки зрения физических законов взаимодействия между трехмерными объектами имеет много областей применения (таких как создание реалистичных изображений, расчет и решение инженерных задач, предсказание поведения групп объектов в заданных условиях и пр.). Необходимость разработки таких систем вызвана ограниченностью возможностей человека рассчитать результат определенных экспериментов, в ходе которых возможно влияние большого количества неслучайных и случайных факторов.

В отдельных случаях (к примеру, при моделировании поведения совокупности элементарных частиц), когда набор случайных факторов ограничен, а так же если ключевые характеристики системы (виды частиц, тип взаимодействия, условия остановки и начала взаимодействия и т.д.) жестко заданы некоторыми математическими законами, программное моделирование является наиболее оптимальным способом изучения поведения системы, так как позволяет получить быстрый результат и гибко управлять процессом получения результата. Классическим примером такой системы является система застывающего слитка, в которой в качестве элементарных частиц понимаются кристаллы (зерна). При этом проведение большого количества натурных экспериментов связано со значительным расходом ресурсов, тогда как использование компьютерной модели является дешевым и быстрым способом получения результата.

Анализ исследований и публикаций

Методы, предназначенные для моделирования роста кристаллов, рассматривают процесс кристаллизации для нескольких возможных исходных условий: кристаллизация в газе, в жидкости, переход из аморфного

состояния. Каждый из методов опирается на закономерности поведения частиц в заданном состоянии системы, а так же учитывает ограничения, которые накладываются типом вещества (или смеси веществ), входящих в данную систему. Рассмотрим методы подробнее.

Для моделирования роста кристаллов в газе разработан метод Монте-Карло, программная реализация которого имеет название LeoCrystal [1]. Суть метода сводится к тому, что на ЭВМ 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 . В современных методах прямого статистического моделирования 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 [2].

Исследование структуры вещества при переходе в кристаллическое состояние из аморфного производится с помощью метода молекулярной динамики [3]. С помощью данного метода можно исследовать влияние начальных условий при формировании аморфного образца и температуры его нагрева на возникающую структуру.

При рассмотрении кристаллизации как совокупности таких физических явлений, как тепло- и массоперенос, движение расплава, возникновение и рост кристаллов, используется метод построения математических моделей отдельных подсистем слитка [4]. Процесс кристаллизации рассматривается с позиции системного анализа, позволяющего объяснить природу образования дефектов слитка.

Для определения служебных свойств изделия необходимо исследовать его микроструктуру (число кристаллов, их форму и

размеры, а также микроструктурные параметры кристаллов – дендритные параметры). В этом случае процесс затвердевания отливки необходимо рассматривать на уровне кинетики кристаллизации, которая учитывает процессы зарождения, роста и столкновения кристаллов [5].

В настоящий момент существует несколько программных комплексов, моделирующих процесс затвердевания расплава. В основу моделей положены различные численные методы и теории: неравновесная теория кристаллизации многокомпонентного сплава (реализована в LVMFlow, [6]), оригинальный подход, состоящий в применении теории клеточного автомата к процессу коллективного роста кристаллов в отливке (ProCAST, [5]), метод конечных объемов (МКО) используется в FLOW-3D ([7]), метод конечных элементов (МКЭ) реализован в WinCast ([8]), метод конечных разностей (МКР) реализован в MAGMASoft, POLIGON ([9]). При этом МКО сочетает в себе достоинства МКР и МКЭ, такие как простота генерации расчетной сетки и высокая точность представления геометрии. Однако существует необходимость создания метода, который бы учитывал особенности формирования зерна в расплаве, изменение его формы в процессе роста, т.е. опирался на геометрические соотношения конкретных кристаллических решеток. Такой подход основывается на анализе возможных типов кристаллов и возможности перехода от одного типа решетки к другому.

Постановка проблемы

В случае рассмотрения системы, объединяющей большое количество случайных трехмерных объектов (кристаллов), взаимодействующих в заданном объеме, в качестве случайных факторов могут выступать количество объектов, их положение в пространстве, форма. В качестве неслучайных факторов – особенности взаимодействия друг с другом растущих кристаллов, закономерности перехода от одной кристаллической решетки к другой, определяемые температурой, концентрация исходных веществ, задающаяся диаграммой состояний (для многокомпонентных систем). Необходимо разработать алгоритм, отражающий зарождение кристаллов в расплаве и их рост, учитывающий возможность изменения решетки растущего кристалла в зависимости от температуры и состава расплава. В результате программной реализации разработанного алгоритма возможно быстрое получение компьютерной трехмерной модели застывшего слитка, которую можно использовать для предсказания свойств изделия и изучения его структуры.

Характеристики объектов

Под трехмерными объектами будем понимать кристаллы в любой момент их существования (от появления зародыша до формирования отвердевшей массы). Для описания объектов введем следующую систему обозначений (рис.1): x, y, z – длины сторон объектов, α, β, γ – углы между сторонами. Различные соотношения этих параметров задают возможные сингонии кристаллов, представленные в таблице 1 [10].

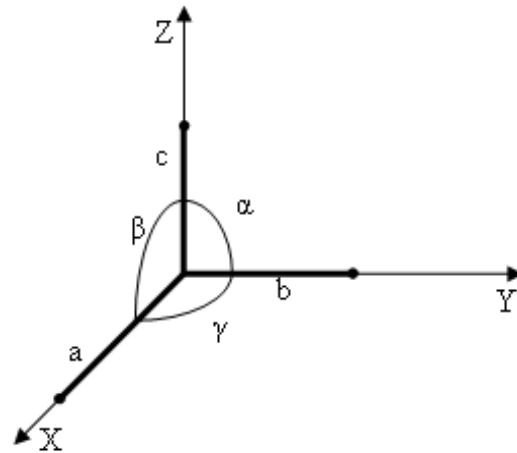


Рисунок 1 – Система обозначений для описания объекта

Решетки кристаллов в зависимости от характера взаимного расположения основных параметров a, b, c или по расположению углов α, β, γ можно разбить на 4 основных типа (табл. 2): примитивные (P), базоцентрированные (C, B, A – в зависимости от того, какая пара граней центрирована), объемно-центрированные (I), гранецентрированные (F). Для триклинной, тригональной (ромбоэдрической), гексагональной сингоний возможны только простые типы решеток. При изменении температуры кристаллизующееся вещество может менять структуру, т.е. переходить от одного типа решетки к другому. Так же наличие дополнительных атомов в решетках типа C, B, A, I, F приводит к развитию дополнительных граней (рис. 2).

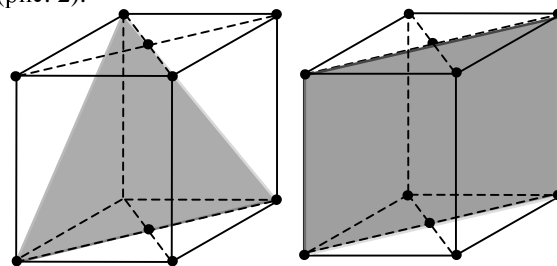


Рисунок 2 – Дополнительные грани объекта

Таблица 1. Виды сингоний

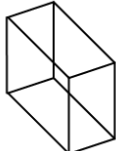
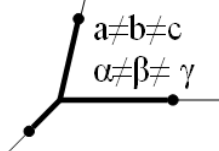
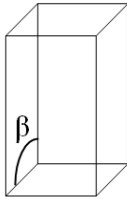
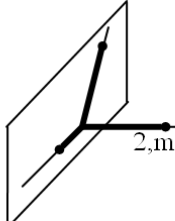
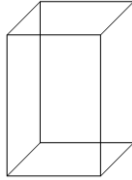
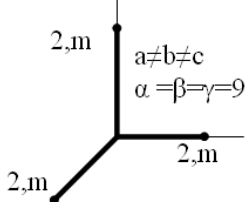
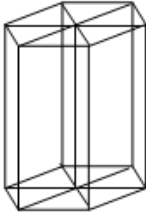
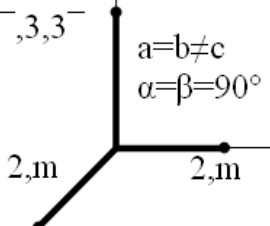

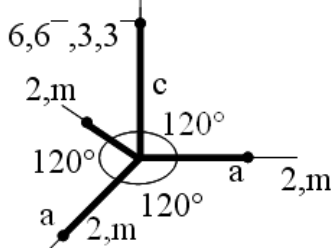
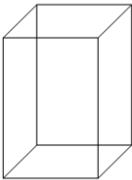
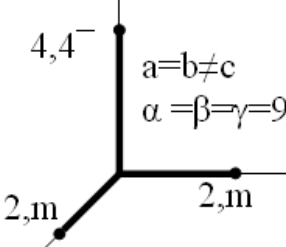
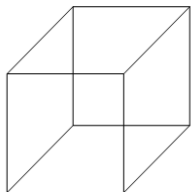
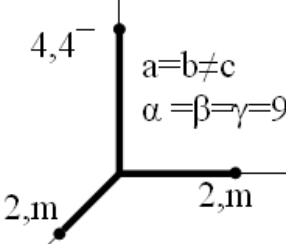
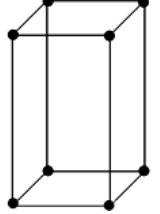
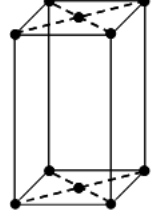
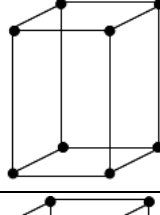
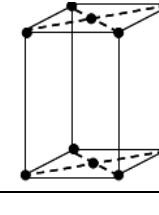
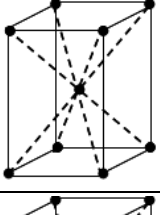
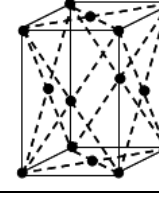
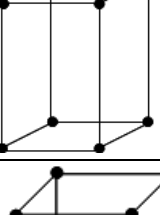
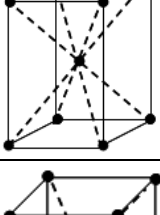



Сингония	Формы примитивных ячеек	Системы координат (линии со значком m означают нормаль к плоскости симметрии; 2,3,4,6,3 ⁻ ,4 ⁻ ,6 ⁻ – оси симметрии)
Триклинная		 $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$
Моноклинная		 $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
Ромбическая		 $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Гексагональная (оси 3,3 ⁻ ,6,6 ⁻ принимают за ось Z)		 $6,6^-,3,3^-$ $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ \quad \gamma = 120^\circ$
Тригональная (три примитивные ячейки вместе составляют шестигранную призму)		 $6,6^-,3,3^-$ 120° 120° 120° a, a, c
Тетрагональная		 $4,4^-$ $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Кубическая		 $4,4^-$ $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Таблица 2. Типы решеток

Сингония	Тип решетки			
	Примитивная	Базо-центрированная	Объемно-центрированная	Гране-центрированная
Моноклинная	 P	 C		
Ромбическая	 P	 C	 I	 F
Тетрагональная	 P		 I	
Кубическая	 P		 I	 F

Дополнительные грани могут проявляться как на этапе возникновения кристалла, так и в процессе роста, что должно учитываться при разработке модели.

Особенности роста объектов

Основной проблемой моделирования является моделирование процесса роста (увеличения) объектов. Так как количество атомов, входящих в кристалл, может исчисляться миллионами, то прямое моделирование присоединения атомов к поверхности кристалла требует слишком больших вычислительных ресурсов и не является оправданным. Однако известно [10], что основные соотношения между образовавшимися гранями остаются теми же, что и в решетке кристалла. Таким образом, возможно отказаться от прямого воксельного моделирования, заменив его на численное, векторное, геометрическое.

Ведущим параметром при анализе особенностей роста является скорость роста. Каждый тип грани растет с определенной скоростью. Первой особенностью является расстояние, на которое смещается грань за один такт роста (под тактом роста понимается время, необходимое для присоединения некоторого

количества атомов, образующих новую грань). К примеру, для кубической примитивной сингонии шаг грани равен a , для кубической гранецентрированной сингонии – $a\sqrt{2}/2$. Второй особенностью является количество тактов в единицу времени, т.е. грань, состоящая из 3 атомов, в единицу времени переместится на большее количество шагов, чем грань, состоящая из 4 атомов, т.к. процесс присоединения атома к кристаллу является случайным процессом. Т.е. скорость роста прямо пропорциональна количеству атомов, образующих грань, и рассчитывается как отношение количества атомов, входящих в грань, к площади грани.

Тип решетки определяется температурой расплава. С изменением температуры необходимо производить перерасчет скоростей. При этом, с падением температуры меняются процентные отношения твердого и жидкого веществ в расплавах. Как только все вещество переходит в кристаллическую форму, процесс застывания считается окончанным.

Исходное количество объектов (зародышей кристаллов), рассчитывается по известным физическим формулам [11].

Таким образом, алгоритм генерации и роста объектов выглядит как последовательность следующих действий:

1. Задається процентное соотношение исходных веществ.
2. Задається текущая температура расплава.
3. Определяется вид решетки для исходных веществ. Рассчитывается количество объектов, появляющихся в единицу времени в данном объеме и скорости роста граней.
4. Реализуется рост расплава в течение некоторого времени Δt (до определенного соотношения твердой и жидкой фазы).
5. Если кристаллизация не окончена, то уменьшаем температуру и возвращаемся к пункту 3. Иначе конец моделирования.

Чем меньше шаг Δt , тем точнее результат моделирования. Значения температур начала и конца кристаллизации, соотношения жидкой и твердой фазы в расплаве задается графически в виде диаграмм состояний, что ставит дополнительную задачу (не рассматриваемую в данной статье) оцифровки существующей базы изображений.

Компьютерное моделирование кристаллизации

В настоящий момент программно реализована упрощенная схема генерации и роста объектов. Введены следующие упрощения в модель: рассматривается только кубическая сингония, тип решетки в процессе роста не меняется. Пространство моделирования представляет собой совокупность трехмерных ячеек, каждая описывает точку в пространстве (координаты в ДПСК) и содержит информацию, необходимую для описания движения каждой конкретной ячейки. Такая структура является своеобразной расчетной сеткой, для которой производятся вычисления. Однако в данном случае первична сетка, а не объект, т.к. объект на этапе создания задается с учетом особенности сетки: как совокупность ячеек кубической формы с длиной стороны, равной единице, имеющих такую же систему координат, как и мировая (система координат объекта может не совпадать с мировой). Ячейки, принадлежащие внутреннему пространству объекта или являющиеся свободными, не имеют способностей к перемещению. Ячейки, описывающие поверхность объекта могут перемещаться вдоль нормалей к поверхности объекта, при этом пересчитываются координаты точки, соответствующей ячейке. Ячейка, соответствующая старым координатам (ячейка-источник), становится внутренней ячейкой объекта, а новая (ячейка-претендент) наследует способности к перемещению старой.

Каждая грань объекта растет вдоль нормали к своей поверхности. Если грани различных объектов соприкасаются, то рост в этом месте останавливается. При росте ребер и вершин объекта каждая ячейка может двигаться в

нескольких направлениях: вдоль каждой нормали всех смежных с ней граней и вдоль всех возможных сумм нормалей.

Изначальное заполнение ячеек и дальнейший рост объектов происходит с помощью пространственных алгоритмов, аналогичных растровым на плоскости [12]. Для генерации объектов в пространстве задаются координаты их вершин, ячейки, соответствующие целым частям координат помечаются как занятые. Рассчитываются коэффициенты a_i, b_i, c_i уравнения $a_i \cdot x + b_i \cdot y + c_i \cdot z + d_i = 0$ плоскостей, содержащих грани объектов. Векторы $n_i = (a_i, b_i, c_i)$, задающие перпендикуляр к плоскости, нормируются, что дает возможность использовать их коэффициенты для расчета новых координат ячеек грани на этапе роста. Составляется таблица значений этих векторов (нормалей). Выбор ячеек, соответствующих ребрам, происходит по следующему принципу: рассчитывается и нормируется вектор, направленный от одной вершины ребра к другой; координаты каждой ячейки-претендента являются суммой координат ячейки-источника и параметров вектора. Для заполнения ячеек граней строятся три проекции этих граней и три проекции точки-претендента. Если проекция точки принадлежит проекциям грани и с некоторой погрешностью ε удовлетворяет уравнению плоскости, то помечаем ее как занятую и переходим к рассмотрению новой точки, отличающейся на единицу по одной или более координат. Внутреннее пространство кристалла заполняется, начиная от центра, ограничением для функции заполнения является оболочка, состоящая из ячеек поверхности объекта. Для каждой ячейки указываются соответствующие ей нормали (ячейкам грани – одна, ячейкам ребер – две нормали смежных с ними граней, ячейкам вершин – по количеству смежных граней, внутренним ячейкам – ни одной).

Рост объекта является совокупностью последовательных перемещений ячеек поверхности объекта. Координаты нового положения каждой точки являются, как и в случае с построением ребра, суммой старых координат и параметров соответствующей нормали (нормалей, если их несколько).

После каждого этапа работы программы строятся двумерные изображения – сечения всего пространства моделирования на заданном уровне.

Особенностью этих алгоритмов является определенная независимость поведения каждой отдельной ячейки, проявляющаяся в том, что для совершения перемещения ячейки ей не следует анализировать значение всех ячеек-соседей, кроме той, в которую исходная собирается переместиться. Это свойство позволяет существенно ускорить процесс моделирования

роста, однако приводит к образованию разрывов в гранях, связанных с округлениями мелких значений при вычислениях. Если разрыв произошел в середине грани, то он увеличивается на каждом шаге. Разрывы, образовавшиеся при росте ребер и ячеек склонны исчезать через несколько шагов (рис. 3), т.к. ячейки, расположенные рядом с разрывами имеют несколько направлений роста одновременно. Этот недостаток может быть устранен, если увеличивать точность вычислений, однако при генерации сетки большого объема это может потребовать существенного увеличения вычислительных ресурсов.

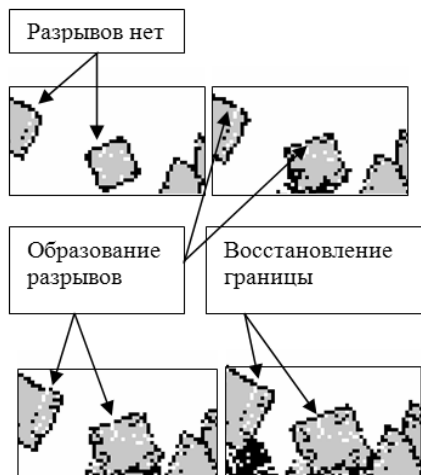


Рисунок 3 – Разрывы в гранях

При генерации объекта возможно образование грани, толщиной более чем в одну ячейку, что приводит к формированию остаточных ячеек, способных к перемещению, но находящихся во внутреннем пространстве объекта. Так же возможно образование ячеек, формально принадлежащих внутреннему пространству объекта, однако не подвергавшихся анализу и, следовательно, не помеченным как внутренние. Это связано с тем, что грань может быть повернута на произвольный угол относительно МСК, и ячейка-источник и ячейка-претендент отличаются более чем в одной координате (рис. 4). Несовпадение систем

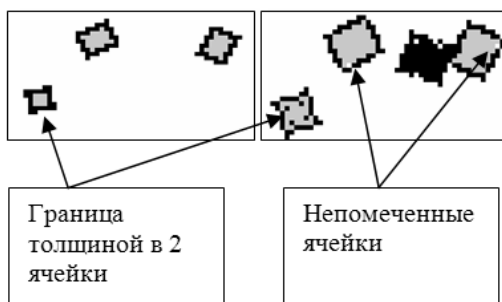


Рисунок 4 – Остаточные ячейки

координат объекта и МСК может приводить к визуальному искажению формы объектов в пределах одной или двух ячеек.

Программа допускает корректировку таких параметров как количество зародышей кристаллов, появляющихся в единицу времени, их форму, размер, ориентировку в пространстве, а так же количество ячеек, образующих пространство моделирования. Пользователю доступны функции запуска процесса кристаллизации, его остановки в произвольный момент или по достижению количества кристаллизовавшегося вещества, задания направления сечения объема. Программа автоматически генерирует плоское изображение, соответствующего сечению, и обновляет его после каждого шага моделирования.

Разработанная программа позволяет наблюдать процесс кристаллизации на различных стадиях с помощью построения двумерных срезов трехмерной модели слитка, что дает возможность отслеживать изменения в структуре слитка не только во времени, но и в пространстве. Т.е. возможно изучение изменения формы кристалла в пространстве (рис. 5).

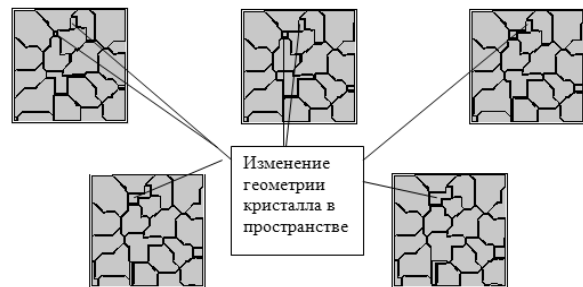


Рисунок 5 – Сечение слитка на разных уровнях

В рамках проведенной работы установлено, что реализованные алгоритмы отвечают структурообразованию следующих сплавов: жидкофазное спекание твердого сплава с содержанием связки 10%, горячая прокатка стали 10, термомеханическая обработка стали 10, горячее вакуумное прессование твердых сплавов с содержанием связки 15-25%.

Для дальнейшего развития модели используется расширение списка исходных данных (типы сингоний кристаллов, возможное образование дополнительных граней, переход от одного типа решетки к другому), а так же учитываются особенности, определяемые диаграммами состояний.

Выводы

В рамках проведенной работы выделены основные факторы, влияющие на процесс роста объектов в трехмерном пространстве, определены базовые отличия и геометрические соотношения

характеристик кристаллов различных типов решеток, сформулирована последовательность действий, необходимых для построения модели слитка. На основе разработанных алгоритмов реализована программа, итогом работы которой являются двухмерные изображения поверхности среза образца, выявлены и проанализированы особенности работы предложенного алгоритма. В результате реализации выявлены и проанализированы особенности работы

алгоритма. Для повышения точности модели следует увеличивать масштаб моделирования (т.е. количество ячеек, входящих в объект), а так же точность вычислений, производимых при расчете координат растущих ячеек.

Направлением для дальнейшего развития является усовершенствование разработанного алгоритма путем добавления новых факторов в систему моделирование роста объектов, а так же расширением списка входных параметров модели.

Литература

1. Crystal Growth simulation software [электронный ресурс] – 2004. – Режим доступа: <http://www.leokrut.com/leocrystal.html>.
2. http://ru.wikipedia.org/wiki/Прямое_Монте-Карло_моделирование.
3. 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
4. Самойлович Ю. А. Системный анализ кристаллизации слитка. – Київ: Наук. думка, 1983. — 248 с.
5. Вольнов И.Н. Системы автоматизированного моделирования литейных процессов – состояние, процессы, перспективы // Литейщик России. – 2007. - №6. – С. 14-17.
6. <http://www.castsoft.ru/Soft/LVM/LVM.htm>
7. Вольнов И.Н. Моделирование литейных процессов – современные вычислительные технологии // Литейщик России. – 2007. - №11. – С. 27-30.
8. WinCast - Компьютерное моделирование литейных технологий. – 2009. – Режим доступа: <http://cae.ustu.ru/cont/soft/wincast/wincast.htm>. – WinCast.
9. Компьютерное моделирование литейных технологий <http://cae.ustu.ru/cont/soft/poligon.htm>
10. Шаскольская М.П. Кристаллография. Учебник для вузов. – М.: Высш. школа, 1976. – 391 с.
11. Карабчевский В.В., Пашинская А.В. Моделирование и визуализация процесса кристаллообразования в расплавах. Збірник наукових праць конференції «Геометричне та комп'ютерне моделювання». – Харків: ХДУХТ, 2009 – с. 51-56.
12. Карабчевский В.В., Пашинская А.В. Разработка принципов геометрического моделирования кристаллизации в трехмерном пространстве. Сборник научных трудов конференции «Моделирование и компьютерная графика-2009». – Донецк 2009. С. 112-116.

Поступила в редакцию 29.03.2010