

УДК 628:536.421.4:658.012

**А.Н. Доний, ст. науч. сотр., канд. техн. наук, доцент**

*Национальный технический Университет Украины «Киевский политехнический институт»,  
г. Киев, 01056, пр. Победы, 37, корп. №9.*

*E-mail: dosha@iff-kpi.kiev.ua*

## **ФИЗИЧЕСКИЕ ПРИНЦИПЫ ПОСТРОЕНИЯ ИМИТАЦИОННОЙ МОДЕЛИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ**

*Приведен общий анализ процесса кристаллизации металлов и сплавов, предложены физические принципы построения имитационной модели кристаллизации металлов и сплавов. Модель представляет собой вероятностный клеточный автомат, управляемый внешними условиями охлаждения системы. Предлагаемая модель позволяет исследовать процесс кристаллизации, формирования первичной структуры материалов при равновесных и неравновесных условиях.*

**Ключевые слова:** кристаллизация, имитационное моделирование.

**Вступление.** Кристаллизация металлов и сплавов лежит в основе многих технологических процессов, связанных с производством металлических изделий, конструкций, агрегатов и т.д., служебные свойства которых определяются в первую очередь структурой материала. Поэтому исследование процесса кристаллизации, его динамики, особенностей формирования первичной структуры материала при различных внешних условиях и воздействиях имеют научный и практический интерес.

Существующие математические модели в целом удовлетворительно описывают процесс кристаллизации. Однако ни одна из них не имеет принципиальной возможности для детального описания структуры, формирующейся при кристаллизации (например, дендритной). Так в работе [1] предлагается математическая модель роста изолированного дендрита, основана на совместном решении задачи теплопроводности и диффузии. Математические проблемы, возникающие при решении системы уравнений в частных производных, диктуют необходимость введения значительных упрощений физической картины процесса, который исследуется. В частности, в данной работе рассматривается рост изолированного дендритов при постоянном переохлаждении и в неограниченном пространстве. Очевидно, что подобная модель дает приемлемые результаты только для начальной стадии кристаллизации.

Учитывая, что в большинстве технологических процессов структура состоит из множества кристаллов, подобные задачи практически не будут иметь решение; в этом случае для каждого растущего кристалла необходимо записать свою систему уравнений. Взаимодействие кристаллов друг с другом, которое возникает в среднем при наличии 40–60 % твердой фазы, не может быть описано в рамках данной модели. Требование постоянной величины переохлаждения достаточно искусственно и практически не дает возможности учесть внешние условия охлаждения расплава, что является важнейшим фактором управления структурой, формирующей поликристалл. Вводимые упрощения затрудняют практическое использование получаемых результатов.

**Цель работы** – сформулировать основные физически обоснованные принципы построения модели кристаллизации металлов и сплавов, позволяющей исследовать процесс кристаллизации, формирования первичной структуры материалов при равновесных и неравновесных условиях.

Процесс формирования структуры при кристаллизации можно рассматривать как систему, которая характеризуется большим числом критерильных параметров, сложностью взаимосвязей между ними и наличием нелинейных ограничений. Принципы исследования сложных систем формулирует системный анализ [2] с использованием имитационного моделирования (от английского "simulation modeling"). Как определено в [3], процесс функционирования сложной системы представляется в виде определенного алгоритма, который реализуется на ЭВМ.

Имитационная модель отличается от математической [4]. На первом этапе формируются основные вопросы о поведении сложной системы, ответы на которые необходимо получить. Множество этих вопросов позволяет задать множество параметров, характеризующих состояние системы (так называемые векторы состояния). На втором этапе осуществляется декомпозиция системы на более простые части – блоки. В один блок объединяются "родственные", т.е. преобразованные по близким правилам, компоненты вектора состояния и процессы, которые их реализуют.

Третий этап посвящен формулировке законов и гипотез относительно поведения как системы в целом, так и отдельных ее частей. При этом очень важно отметить, что в каждом блоке для их описания можно использовать различный математический аппарат. Блочный принцип дает возможность при построении имитационной модели устанавливать необходимые пропорции между точностью описания каждого блока, обеспеченностью его информацией и необходимостью достижения цели моделирования. В зависимости от поставленных задач вводится параметр, который называется системное время. Он

моделирует ход времени в реальной системе. На четвертом этапе формализованным образом задаются необходимые феноменологические свойства системы и отдельных ее частей. В случае, когда эти свойства вообще не могут быть определены на современном уровне знаний и опираются на информацию, которая получена при длительном наблюдении за системой. Именно такая ситуация имеет место при исследовании процесса кристаллизации.

Под имитационной моделью обычно понимают комплекс программ для ЭВМ, описание функционирования отдельных блоков системы и правил взаимодействия между ними.

Образование структур в сложных системах рассматривается в синергетике, одним из основных объектов исследований в которой являются распределенные активные среды или однородные сети, построенные из одинаковых элементов и локально взаимодействующие друг с другом. В активных средах бистабильные (или триггерные) элементы, обладающие двумя стационарными состояниями (например 0 и 1). Внешнее воздействие может приводить к переходу из одного состояния в другое. Между данным вариантом возбуждающего элемента и расплавом, который кристаллизуется, можно провести аналогию. Расплав (или жидкий металл) можно рассматривать как активную среду, состоящую из бистабильных элементов, каждый из которых может находиться либо в жидком, либо в твердом состоянии. Распространение фронта кристаллизации визуально очень похоже на движение волны переключения, которая распространяется по активной среде (рисунок 1).

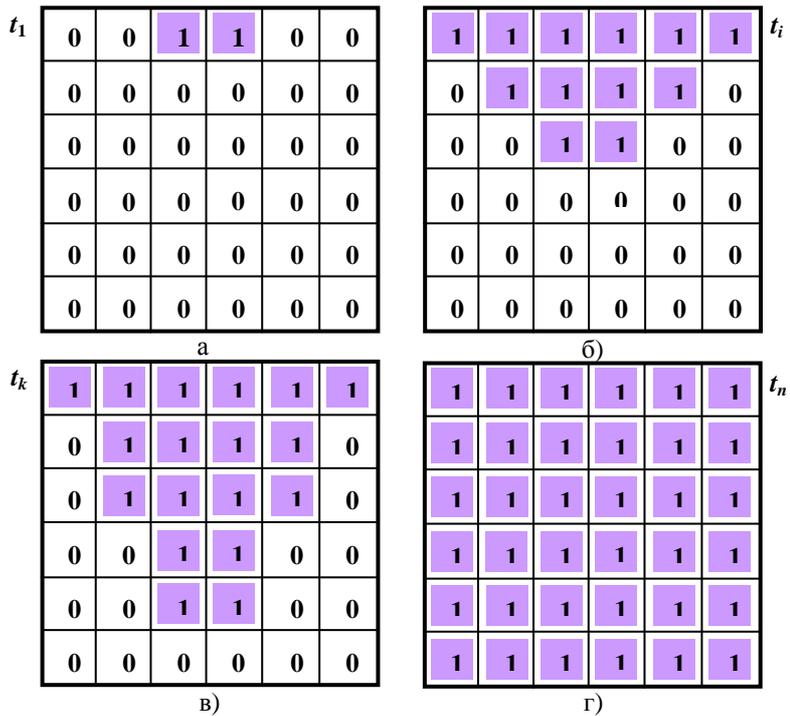


Рисунок 1 – Схема распространения волны переключения в двумерном активной среде, состоящей из бистабильных элементов (0 или 1) как аналогия распространения фронта кристаллизации (светлое поле – жидкое состояние, темное поле – твердое состояние: а), б), в), г) – состояния клеточного автомата или положение фронта кристаллизации в различные моменты времени  $t_1, t_i, t_k, t_n$

Помимо визуальной аналогии в работе [5] показано, что цепочка связанных между собой бистабильных элементов (в приближении непрерывной среды) описывается уравнением в частных производных параболического типа:

$$\frac{\partial U(r,t)}{\partial t} = a\Delta U(r,t) + F(r,t). \tag{1}$$

Такое же уравнение лежит в основе многих математических моделей кристаллизации и представляет собой уравнение теплопроводности, если функцию  $U(r,t)$  заменить температурой. Коэффициент “ $a$ ” в этом случае принимает смысл коэффициента температуропроводности, а функция  $F(r,t)$  описывает выделение теплоты кристаллизации.

Для создания модели кристаллизации металлов и сплавов, которая позволяла бы исследовать процесс образования структуры материала, можно использовать методологию имитационного моделирования, включающую в себя идею клеточных автоматов как средство реализации модели. Для разработки такой модели представляется целесообразным "подчинить" эволюцию клеточного автомата классическим законам теплоотдачи, которые учитывают влияние внешних условий.

Рассматривая кристаллизацию чистого металла или бинарного сплава при построении имитационной модели можно выделить основные макрофизические процессы (рисунок 2). Во-первых, это теплопередача, которая происходит в объеме расплава под воздействием внешних факторов. Под этим процессом понимается тепловой поток с поверхности тигля с жидким металлом или расплавом, который направлен от нагретого тела в окружающую среду. Он обуславливает определенную скорость

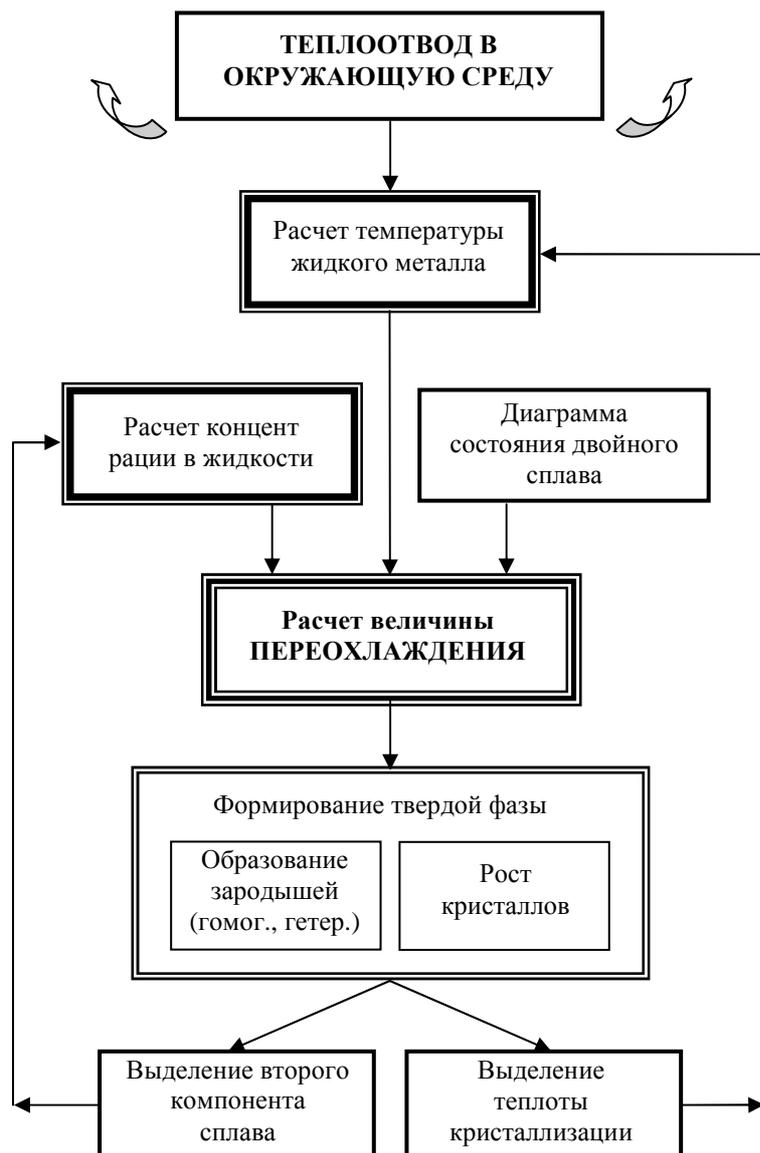


Рисунок 2 – Схематическое изображение взаимодействия физических процессов, которые являются основными при разработке алгоритма имитационной модели кристаллизации

охлаждения в системе и температурный градиент в ней. Этот процесс является определяющим, так как одним из важнейших параметров при формировании структуры кристаллов является температурный градиент [6]. Поэтому основным блоком, который задает динамику работы модели, должен быть блок определения температурного поля металла или сплава (т.е. значение температуры в произвольной точке пространства системы в произвольный момент времени) в течение всего процесса. В его основу положено уравнение теплопроводности Фурье [7]. При формулировке граничных условий, несмотря на относительно высокие температуры, характерные для промышленных расплавов, для упрощения задачи радиационной составляющей тепловода с поверхности системы можно пренебречь, несколько при этом увеличив коэффициент теплоотвода с поверхности кристаллизующегося тела.

Вторым наиболее существенным физическим явлением является диффузионное перераспределение компонентов расплава. То есть изменение концентрации в жидкости около границы раздела "твердое – жидкое" за счет различной растворимости второго элемента в жидком и твердом состояниях и ее дальнейшее перераспределение в пространстве системы. Учитывая значительную разницу коэффициентов диффузии в жидкости и в твердом состоянии, изменением концентрации второго компонента сплава в твердой

фазе можно пренебречь.

Количественные значения изменения концентрации в жидкой фазе при выделении второго компонента сплава можно определить путем введения соответствующей диаграммы состояния с ее характеристическими точками. Дальнейшая аппроксимация линий ликвидус и солидус позволит вычислить необходимые изменения концентрации жидкости после локальных фазовых превращений.

Для описания диффузии второго компонента в жидкости удобно использовать уравнения Фика. Граничные условия в этом случае должны предполагать отсутствие обмена веществом на границах системы. Неравномерность концентрации второго компонента в жидкости, которая обусловлена "разделительной диффузией", можно учитывать изменением начальных условий при каждом новом "тике" системного времени, то есть на каждом дискретном временном этапе вычислений. Системное время, который является общим для всех блоков модели (алгоритма), синхронизирует работу всего алгоритма и имеет дискретный характер, так как расчеты выполняются на ЭВМ.

Температура и концентрация второго компонента в каждой точке расплава определяют размер локального переохлаждения, которое рассчитывается как разница температуры ликвидус для этой точки и ее же температуры в данный момент времени (рисунок 2). Как известно [6], переохлаждение в жидком состоянии является основной движущей силой кристаллизации. При его наличии появляются условия образования кристалла или роста уже существующего зародыша. Поэтому на рисунке 2 блок расчета величины переохлаждения выделен, так как он является центральным блоком работы модели.

Также известно [8], что рост кристалла происходит при меньших переохлаждениях чем рост уже существующего кристалла, то есть энергетически эти процессы отличаются друг от друга. Поэтому они функционально разделены, что подчеркнуто на рисунке 2 существованием двух отдельных блоков при формировании твердой фазы. Также учитывая флуктуационную природу образования зародышей и роста кристаллов по нормальному механизму, который является характерным для металлов [9], желателен привнести в эти процессы элемент случая. Поэтому блок "Формирование твердой фазы" на рисунке 2 представляет собой клеточный автомат, который управляется блоками "Расчет температуры жидкого металла", "Расчет концентрации в жидкости" и "Диаграмма состояния двойного сплава" через блок "Расчет величины переохлаждения".

Фазовый переход, если он состоялся в определенном месте системы, сопровождается выделением тепла кристаллизации и изменением концентрации второго компонента в окрестности данной точки. В соответствующих блоках осуществляется формирование "импульсов" тепла и вещества, наличие которых учитываются при расчетах температуры и концентрации.

Тип клеточного автомата в данном случае нужно выбрать таким образом, чтобы модель отражала основные физические черты исследуемой системы. Для этого на качественном уровне рассмотрим начальную стадию процесса кристаллизации и опять применим метод аналогий.

В исходном состоянии температура жидкого металла или расплава превышает температуру кристаллизации или температуру ликвидус (далее для упрощения будем рассматривать расплав и, соответственно, говорить о температуре ликвидус). За счет теплоотдачи в окружающую среду температура системы (расплава) уменьшается и достигает точки ликвидус. Для начала кристаллизации должно появиться переохлаждение, которое и появляется при дальнейшем охлаждении расплава. Классическая теория кристаллизации рассматривает дальнейшее течение этого процесса при определенном постоянном переохлаждении. Но при реальных условиях для большинства технологических процессов скорость охлаждения значительна. И в этом случае система находится в нестационарном состоянии. С одной стороны тепло от объекта, в котором происходит кристаллизация, продолжает отводиться в окружающую среду. А с другой, начинает выделяться скрытая теплота кристаллизации. Как правило, общий теплоотвод в окружающую среду превышает тепловой поток, который появляется за счет образования твердой фазы. То есть переохлаждение, как минимум не исчезает, а, скорее всего, увеличивается.

Формируется относительно значительная зона пространства, в которой существует переохлаждение, величина которого изменяется как в пространстве, так и во времени. Эту зону с переохлаждением по аналогии, о которой говорилось выше, можно рассматривать как активную среду. И действительно, жидкая фаза в данном месте находится в неустойчивом состоянии и любая флуктуация может изменить фазовое состояние произвольного элемента пространства – сформировать начальный кристалл (или зародыш). При этом условия его дальнейшего роста сохраняются вследствие существующего переохлаждения, которое также сохраняется. Можно (и видимо надо) говорить о принципиальной нелинейности данного процесса. Так точка пространства, в которой осуществился фазовый переход, является точкой бифуркации, то есть точкой потери устойчивости, а это явление типично нелинейным [10]. Учитывая принципиальное влияние флуктуаций на процесс кристаллизации клеточный автомат, в данном случае, должен быть вероятностного типа, что отражается в условиях функционирования его элементов. В качестве ближайших соседей любой ячейки клеточного автомата рационально выбрать окрестность Мура, то есть восемь ближайших точек квадратной ячейки. Такой выбор является наиболее универсальным и не имеет благоприятной пространственной ориентации.

Таким образом, определившись с основными физическими явлениями, которые представляют собой кристаллизацию металлических расплавов, можно разработать общий алгоритм имитационной модели формирования структуры металлов и сплавов, используя условную схему, представленную на рисунке 2.

**Выводы.** Сформулированы основные физически обоснованные принципы построения имитационной модели кристаллизации металлов и сплавов, представляющей собой вероятностный клеточный автомат, управляемый внешними условиями охлаждения системы. Предлагаемая модель позволяет исследовать процесс кристаллизации и формирования первичной структуры материалов при равновесных и неравновесных условиях.

#### *Библиографический список использованной литературы*

1. Самойлович Ю.А. Системный анализ кристаллизации слитка / Ю.А. Самойлович. — Киев: Наукова думка, 1983. — 246 с.
2. Згуровский М.З. Системный анализ: проблемы, методология, приложения / М.З. Згуровский, Н.Д. Панкратова // НАН Украины; НТУУ «КПИ»; Ин-т прикладного системного анализа. — К.: Наукова думка, 2005. — 743 с.

3. Советов Б.Я. Моделирование систем / Б.Я. Советов, С.А. Яковлев. — М.: Высшая школа, 1985. — 271 с.
4. Горстко А.Б. Познакомьтесь с математическим моделированием / А.Б. Горстко. — М.: Знание, 1991. — 157 с.
5. Лоскутов А.Ю. Введение в синергетику / А.Ю. Лоскутов, А.С. Михайлов. — М.: Наука, 1990. — 376 с.
6. Чалмерс Б. Теория затвердевания / Б. Чалмерс. — М.: Metallurgy, 1968. — 288 с.
7. Тихонов А.Н. Уравнения математической физики / А.Н. Тихонов, А.А. Самарский. — М.: Наука, 1977. — 735 с.
8. Овсиенко Д.Е. Зарождение и рост кристаллов из расплава / Д.Е. Овсиенко. — Киев: Наукова думка, 1994. — 254 с.
9. Фольмер М. Кинетика образования новой фазы / М. Фольмер. — М.: Наука, 1986. — 208 с.
10. Ахромеева Т.С. Парадоксы мира нестационарных структур / Т.С. Ахромеева, С.П. Курдюмов, Г.Г. Малинецкий // Компьютеры и нелинейные явления. — М.: Наука. 1988. — С. 44–122.

*Поступила в редакцию 21.03.2014 г.*

#### **Доній О.М. Фізичні принципи побудови імітаційної моделі кристалізації**

У даній роботі дано загальний аналіз процесу кристалізації металів і сплавів та запропоновані фізичні принципи побудови імітаційної моделі кристалізації металів і сплавів. Дана модель являє собою імовірнісний клітинний автомат, який управляється зовнішніми умовами охолодження системи. Пропонована модель дозволяє досліджувати процес кристалізації, формування первинної структури матеріалів при рівноважних і нерівноважних умовах.

**Ключові слова:** кристалізація, імітаційне моделювання.

#### **Doniy A.N. Physical principles of creation of simulation model of crystallization**

This paper presents the general analysis of the process of crystallization of metals and alloys and physical principles of the creation of the simulation model of crystallization of metals and alloys. This model is probabilistic cellular automaton controlled by external conditions of cooling the system. The proposed model allows to investigate the crystallization process, the formation of the primary structure of materials under the conditions of equilibrium and non equilibrium.

**Keywords:** crystallization, simulation modeling.