

Геометрическое моделирование процессов образования и роста кристаллов

В.В. Карабчевский¹, А.С. Казакова¹

¹ Донецкий национальный технический университет, Артема, 58, Донецк, 283001, Россия

Аннотация

Выполнен анализ существующих методов моделирования кристаллизации в различных средах, особое внимание уделено методам и алгоритмам моделирования и визуализации геометрической структуры материалов. Рассмотрены векторный и воксельный методы моделирования, обосновано преимущество комбинированного векторно-воксельного метода геометрического моделирования кристаллизации чистых металлов и сплавов, основанного на геометрических особенностях формирования кристаллов, учете изменения формы зародыша в процессе роста. На основании предложенного алгоритма создан программный комплекс, позволяющий в процессе моделирования кристаллизации металлов и сплавов варьировать скорость зарождения кристаллов, изменять размер зародышей кристаллов и их огранку, задавать соотношение скоростей роста различных кристаллографических граней, учитывать влияние изменения температуры на скорость роста кристаллизованных областей. Применение такого комплекса позволит прогнозировать свойства сплавов для различных исходных данных, возможно его применение для моделирования процессов кристаллизации и в других областях.

Ключевые слова

Кристаллизация, структурообразование, геометрическое моделирование, воксель.

Geometric Modeling of the Processes of Formation and Growth of Crystals

V.V. Karabchevsky¹, A.S. Kazakova¹

¹ Donetsk National Technical University, Artema, 58, Donetsk, 283001, Russia

Abstract

The analysis of the existing methods for modeling crystallization in various media is carried out, special attention is paid to methods and algorithms for modeling and visualizing the geometric structure of materials. The vector and voxel modeling methods are considered, the advantage of the combined vector-voxel method of geometric modeling of crystallization of pure metals and alloys, based on the geometric features of crystal formation, taking into account changes in the shape of the nucleus during growth, is substantiated. Based on the proposed algorithm, a software package has been created that allows, in the process of modeling the crystallization of metals and alloys, to vary the rate of crystal nucleation, change the size of crystal nuclei and their faceting, set the ratio of the growth rates of various crystallographic faces, and take into account the effect of temperature changes on the growth rate of crystallized regions. The use of such a complex will make it possible to predict the properties of alloys for various initial data; it can also be used to model crystallization processes in other areas.

Keywords

Crystallization, structure formation, geometric modeling, voxel.

ГрафиКон 2023: 33-я Международная конференция по компьютерной графике и машинному зрению, 19-21 сентября 2023 г., Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова Российской академии наук, г. Москва, Россия

EMAIL: karabchevski@mail.ru (В.В. Карабчевский); anytka_k@bk.ru (А.С. Казакова)

ORCID: 0000-0003-2941-9916 (В.В. Карабчевский); 0009-0008-1842-2427 (А.С. Казакова)



© 2023 Copyright for this paper by its authors.

Use permitted under Creative Commons License Attribution 4.0 International (CC BY 4.0).

1. Введение

Развитие и совершенствование методов и средств моделирования процессов формирования структуры при кристаллизации в различных средах является актуальной задачей современной фундаментальной и прикладной науки. Во многих случаях полезной, а иногда и необходимой частью таких моделей является геометрическое отображение структуры на различных этапах процесса. Наличие такого отображения, которое в дальнейшем будем называть геометрической моделью, повышает наглядность представления процессов образования и роста кристаллов, а в ряде случаев может быть использовано для прогнозирования различных характеристик формирующейся или сформированной кристаллической структуры.

2. Анализ существующих методов и средств моделирования

На данный момент существует несколько подходов для изучения свойств микроструктуры. Наиболее обширная группа методов – численные методы, решающие термодинамические уравнения с некоторым шагом по времени, что позволяет получить состояние затвердевающей системы в заданной пользователем точке объема в заданное время. К этим методам относятся метод конечных объемов (МКО), метод конечных элементов (МКЭ), метод конечных разностей (МКР). При этом МКО сочетает в себе достоинства МКР и МКЭ, такие как простота генерации расчетной сетки и высокая точность представления структуры моделируемого образца. МКЭ и МКО реализованы программно и много лет успешно используются в программных комплексах SIMTEC/WinCast (разработчик "RWP GmbH", Германия), VESTA (Япония) и ProCAST ("ESI Group", Франция) [1-4].

Большой наглядности позволяет достичь метод, использующий так называемое геометрическое приближение, когда одиночные кристаллы (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 [5]. Однако для моделирования взаимодействия растущих кристаллов при их соприкосновении необходима разработка новых алгоритмов и соответствующих программных продуктов.

3. Алгоритм моделирования зарождения и роста кристаллов

Зародыши кристаллов будем моделировать многогранниками одного или нескольких видов. Их можно задать списком координат вершин, что при заданном типе многогранника определяет плоскости граней. Генерацию зародышей следует производить, как правило, на каждом такте моделирования, при этом следует игнорировать зародыши, попавшие при распределении в объем, занятый другими кристаллами. Рост кристаллов моделируется движением каждой грани в направлении нормали [6]. Скорость роста может оставаться постоянной на протяжении всего времени моделирования, но может и изменяться. Такой способ моделирования будем называть векторным [7, 8]. На каждом такте роста следует проверять пересечение оболочек кристаллов, если оболочки пересекутся, это будет означать возможность соприкосновения граней. При взаимном пересечении ребер и граней или граней с гранями необходимо произвести разбиение ребер или граней на фрагменты, необходимо также учитывать невозможность роста в направлении занятых другими кристаллами областей. Такая необходимость усложняет моделирование роста областей кристаллизации и визуализацию результатов.

Для моделирования соприкасающихся кристаллов целесообразен переход к воксельной модели в областях соприкосновения.

При вокселизации объем моделирования разбивается на пространственные ячейки и к описанию вокселизуемого кристалла (кристаллической области) добавляется информация о состоянии ячеек, принадлежащих его границам. Ячейка пространства может находиться в одном из трех состояний:

1. Внутри кристаллической области;
2. В составе граней (формируется список ячеек для каждой грани);
3. Свободна.

Добавление ячеек к описанию кристалла происходит в случаях 1 и 2. Формирование списка ячеек для каждой грани выполняется в соответствии с трехмерным алгоритмом Брезенхема. В дальнейшем движение грани моделируется захватом прилегающих к грани свободных ячеек в соответствии с направлением движения грани и его скоростью, и включением их в состав грани. Освободившиеся в результате движения ячейки переходят в первое состояние. Моделирование останавливается на заданном такте или в случае невозможности дальнейшего движения [8, 9].

Наиболее выгодным по вычислительной сложности представляется комбинированный алгоритм, который можно назвать векторно-воксельным [10, 11, 12]. Рост кристаллов до соприкосновения оболочек предлагается моделировать векторным методом, после соприкосновения следует перейти к воксельной модели.

На основе изложенного алгоритма была выполнена разработка нескольких версий комплекса программ, ниже проиллюстрированы результаты его применения.

На данном этапе для визуализации результатов моделирования предусмотрена возможность генерации сечения области моделирования на заданном уровне. Вид сечения моделирует фотографию микрошлифа и формируется в виде матрицы пикселей, соответствующих вокселям этого уровня. Для невокселизованных кристаллов формируются пиксели, соответствующие сечениям граней многогранников, моделирующих эти кристаллы, плоскостью, лежащей на уровне сечения. Воксели, принадлежащие кристаллической области, порождают пиксели серого цвета, принадлежащие границам – черного, свободные – белого (рисунок 1).

Следует упомянуть особенности моделирования после вокселизации: формирование общего фронта роста для двух граней (что отображает процесс срастания у реальных кристаллических областей в расплавах), появление «пустых» ячеек внутри областей, появление лишних ячеек в составе граней и разрывов граней. Заметим также, что результаты сильно зависят от размерностей используемых переменных и способов округления, а также от соотношения размеров кристаллических областей и вокселей. При правильном подборе такого отношения вышеупомянутые особенности не оказывают существенного влияния на результаты анализа визуальной модели микрошлифа.

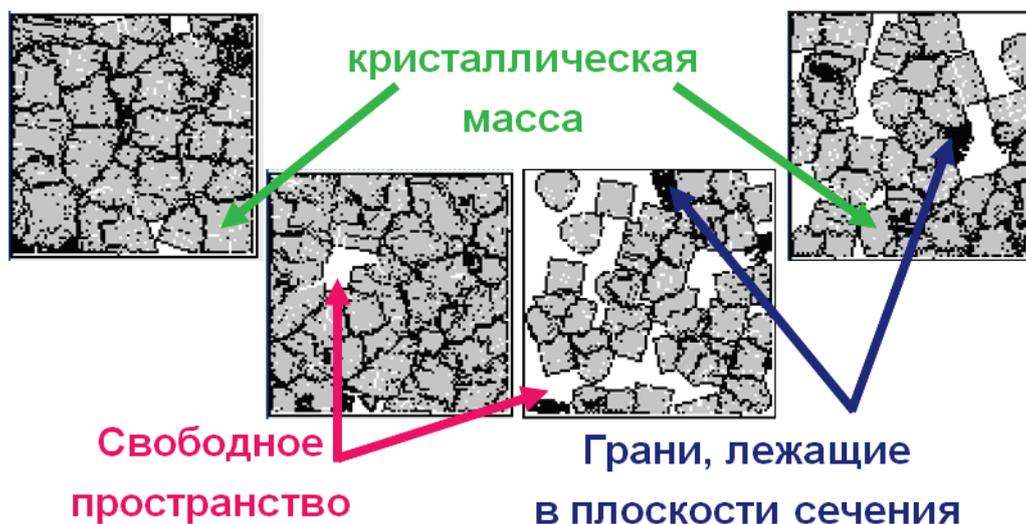


Рисунок 1– Сечения пространства моделирования

На рисунке 2 представлено сечение пространства моделирования при разном количестве тактов роста.

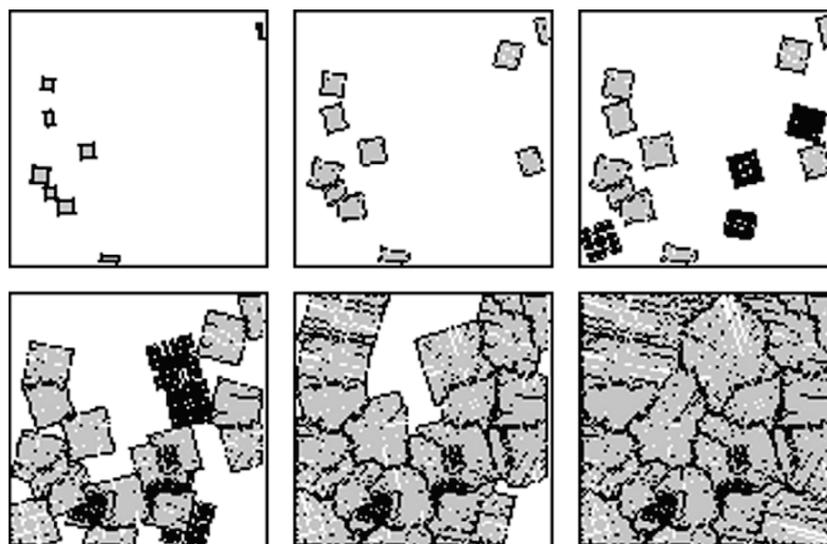


Рисунок 2– Сечение пространства моделирования при разном количестве тактов роста

На рисунке 3 приведены сечения пространства моделирования на разных уровнях после его окончания.

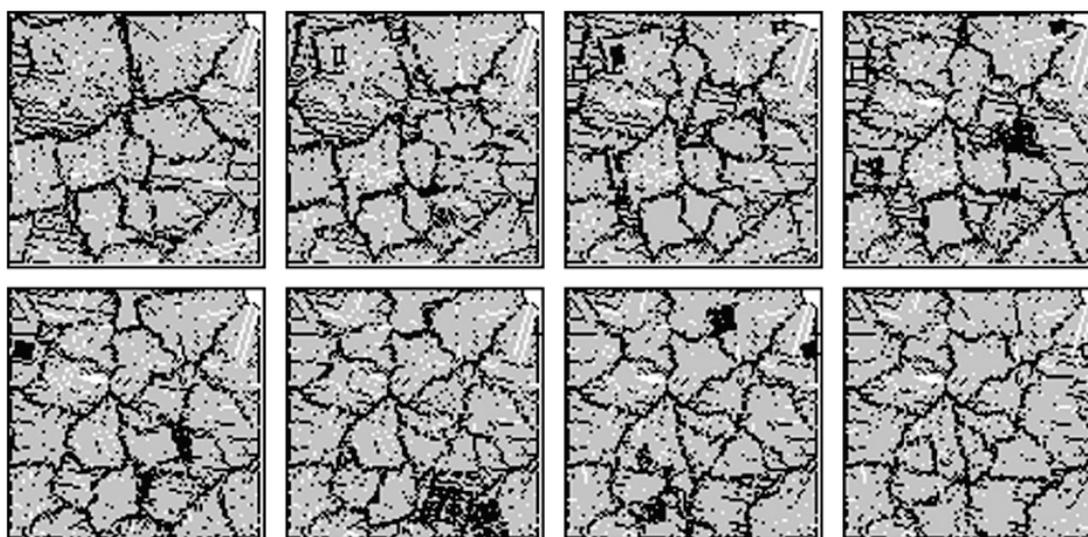


Рисунок 3– Сечения пространства моделирования на разных уровнях

4. Применение разработанных средств

Разработанный программный продукт был протестирован при моделировании застывания образцов твердых сплавов различных составов. Применена только кубическая сингония, формы кристаллов – призмы с прямоугольными и треугольными основаниями. Прочие параметры моделирования также выбирались в соответствии с физическими характеристиками компонентов сплавов и режимов застывания. Учитывалось, что 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, или температура падает ниже заданной, процесс застывания считается окончанным. На рисунке 4 приведены сгенерированное сечение (слева) и фотография микрошлифа реального образца (справа). Темные области на фотографии соответствуют как границам областей кристаллизации, так и свободному пространству.

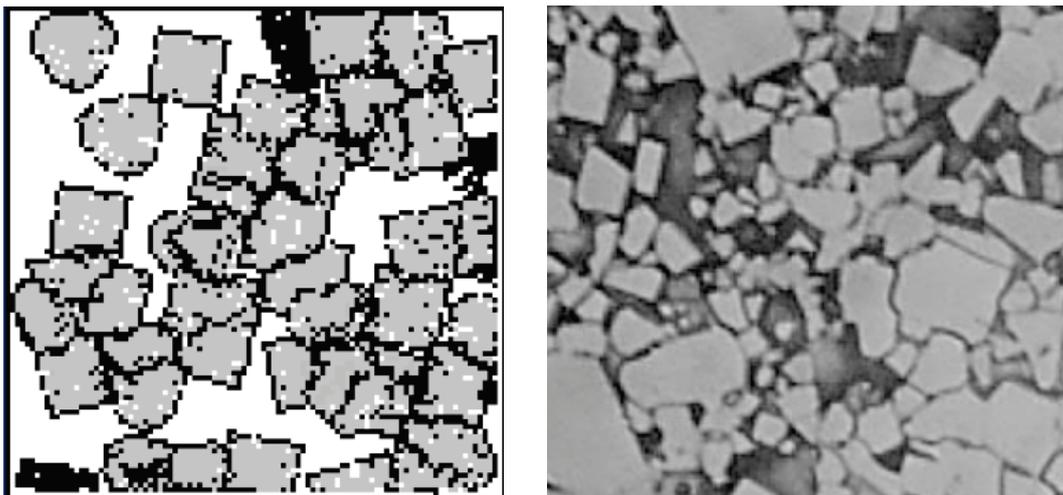


Рисунок 4– Результат моделирования и фотография микрошлифа

Полученные изображения были обработаны методом линейного анализа, позволяющего определить геометрические характеристики результатов – средний размер зерен, распределение зерен по размеру, площадь соприкосновений кристаллов. От этих характеристик зависят свойства сплава. Результаты линейного анализа левого и правого изображений отличаются для рисунка 4, поэтому были приняты меры для достижения адекватности модели – усовершенствование алгоритма и, главным образом, уточнение соответствия между физическими характеристиками процесса и геометрическими настройками программы.

Принятые меры принесли успех, программа была протестирована для нескольких реальных образцов, пример приведен на рисунке 5. Несмотря на визуальные отличия, результаты линейного анализа приведенных на этом рисунке изображений в соответствии с оценкой по методу Вилкинсона, Манна и Уитни [12] достаточно близки для того, чтобы использовать разработанные средства для прогнозирования свойств сплавов при различных исходных данных.

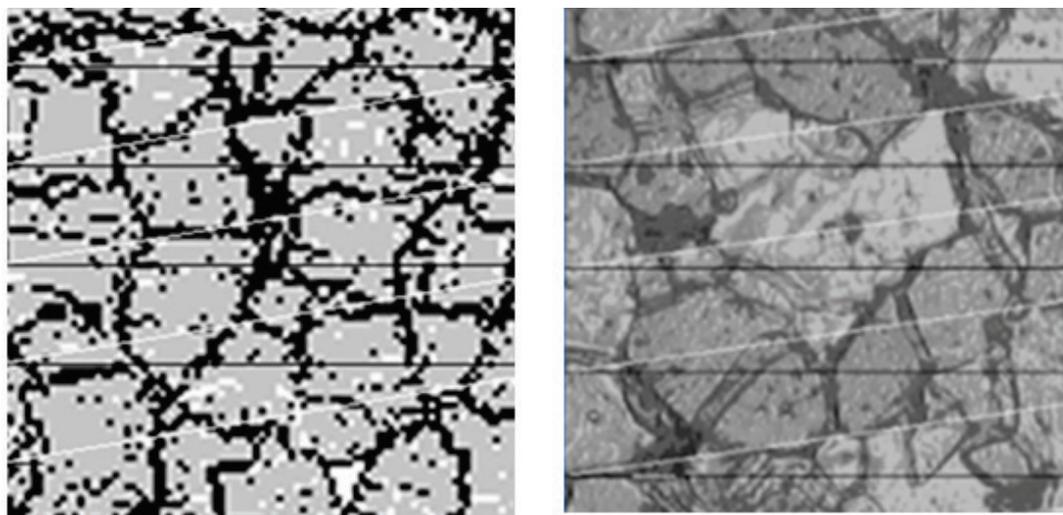


Рисунок 5– Линейный анализ сгенерированного изображения и фотографии микрошлифа

5. Выводы

Предложенные методы моделирования позволяют получить визуальное представление сечения области моделирования, необходимое для расчета характеристик распределения кристаллов и прогнозирования свойств образца. Для устранения проблем, связанных с особенностями разработанного алгоритма и проявляющихся в процессе движения границы

кристаллической области, рекомендуется использовать более точный критерий принадлежности вокселей границам области, и повысить точность вычислений. Не менее важным направлением дальнейших исследований видится формализация связей между физическими характеристиками процесса и геометрическими настройками программы, которая позволит получить систему, пригодную к применению специалистами в предметной области без содействия разработчиков. Уместно также добавить возможность визуализации трехмерного представления кристаллической структуры.

6. СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

- [1] Computer modeling of isothermal crystallization in short fiber reinforced composites [Электронный ресурс] / C. Ruan, J. Ouyang, S. Liu, L. Zhang // Computers & Chemical Engineering. – 2011. – Vol. 35, Issue 11. – P. 2306-2317. URL: https://www.researchgate.net/publication/220340887_Computer_modeling_of_isothermal_crystallization_in_short_fiber_reinforced_composites (дата обращения 29.06.2023).
- [2] Yin H. Modeling of dendrite growth with cellular automaton method in the solidification of alloys [Электронный ресурс] / Mississippi State University. ProQuest Dissertations and Theses. – 2010. – 194 p. URL: <https://scholarsjunction.msstate.edu/cgi/viewcontent.cgi?article=4149&context=td> (дата обращения 29.06.2023).
- [3] Koichi Momma, Fujio Izumi. VESTA: a three-dimensional visualization system for electronic and structural analysis. [Электронный ресурс] // Journal of Applied Crystallography, Volume 44, Issue 6, December 2011, Pages 1272-1276. <https://pdfslide.net/documents/vesta3-for-three-dimensional-visualization-of-crystal-volumetric.html?page=1> (дата обращения 29.06.2023).
- [4] Castsoft. ProCast. Casting Simulation Software. [Электронный ресурс] URL: http://castsoft.ru/soft/pc/pc_info.htm (дата обращения 30.06.2023).
- [5] Бреднихина А.Ю. Разработка средств геометрического моделирования и научной визуализации для поддержки обучения и исследований в области кристаллографии: автореферат дис. ... канд. техн. наук: 05.13.18 / Ин-т вычисл. математики и мат. геофизики. – Новосибирск, 2009. – 16 с. (автореферат диссертации).
- [6] Шаскольская М.П. Кристаллография. Учебник для вузов. – М.: Высш. школа, 1976. – 391 с.
- [7] Карабчевский В.В., Пашинская А.В. Моделирование и визуализация процесса кристаллообразования в расплавах // Сборник научных трудов конференции «Геометрическое и компьютерное моделирование». – Харьков: ХДУХТ, 2009 – С. 51-56.
- [8] Карабчевский В.В., Пашинская А.В. Геометрическое моделирование роста кристаллов в расплавах // Межведомственный научно-технический сборник "Прикладная геометрия и инженерная графика". Вып.85. – К: КНУБА, 2010. – С. 19-24.
- [9] Карабчевский В.В., Пашинская А.В. Методы моделирования роста кристаллов в расплавах // Научные труды Донецкого национального технического университета. – Донецк: ДонНТУ, 2010. – Вып.11(164). – С. 165-171. (серия: Информатика, кибернетика и вычислительная техника).
- [10] Карабчевский В.В., Пашинская А.В. Особенности воксельной модели процесса роста многогранников. // Межведомственный научно-технический сборник «Прикладная геометрия и инженерная графика». Выпуск 87. – К.:КНУБА, 2011 р. – С. 149-153.
- [11] Пашинская А.В. Компьютерное моделирование роста и взаимодействия многогранников // Межведомственный научно-технический сборник "Техническая эстетика и дизайн". Вып.89. – К.: КНУБА, 2012. – С. 166-170.
- [12] Пашинская А.В. Геометрическое моделирование в изучении процессов структурообразования при кристаллизации металлов и сплавов // Металлургические процессы и оборудование. Международный научно-технический и производственный журнал. Вып. №2 – Донецк, 2013 г. – С. 32-38.