

12. Современные материалы хирургических имплантатов и инструментов / В.В. Савич, М.Г. Киселев, А.И. Воронович. – 2-е изд. перераб. и доп. – Минск: ООО «ДокторДизайн», 2004. – 104 с.
13. Dr. K.E. Beljavin, Prof. V.K. Sheleg, Dr. D.V. Minko. Application of Porous Products of Spherical Titanium Powders in Implant Surgery. Euro PM2004, Vol.5: PM Applications, p.515-521
14. Порошковая металлургия. Спеченные и композиционные материалы. Под ред. В. Шатта. Пер. с нем. - М.: Металлургия. - 1983 -520с
15. Акэти К, Хара Д Микроструктура и коррозионная стойкость сплавов титана, полученных из смешанного порошка методом спекания сопротивлением //Сэйсан Кэнкю -1976 -т. 28 - N 24. -С. 30-32.
16. К.Е. Белявин, В.В. Мазюк, Д.В. Минько, В.К. Шелег. Теория и практика электроимпульсного спекания пористых порошковых материалов. – Минск. Ремико. – 1997. – 180 с.

УДК. 004.94; 004.942; 519.245

ПРОБЛЕМА ОПРЕДЕЛЕНИЯ НОРМАЛИ К ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА В ДИСКРЕТНЫХ ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННЫХ МОДЕЛЯХ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ: ПУТИ ЭФФЕКТИВНОГО РЕШЕНИЯ

Шевченко С. В., Стеценко Н. Н., Руцак Е. О.

*Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,
Киев, Украина*

Рассмотрена проблема обеспечения точного кристаллографического представления поверхностей раздела (границ зерен, межфазных границ, поверхности образца) в дискретных объемных моделях поликристаллических твердых тел. В таких моделях как, например, Монте-Карло, модель рекристаллизации и роста кристаллического зерна (модель Потса) поликристаллический модельный объем представлен в виде набора узлов, характеризующихся диапазоном допустимых дискретных состояний (кристаллографическая ориентация, фазовый состав узла, температура и пр.) причем локальные взаимодействия соседних узлов определяются набором правил взаимодействия. Предложен алгоритм определения нормали к границе раздела, основными достоинствами которого являются: отсутствие необходимости вычислений пространственных функций, однозначность результата, легкость фиксации тройных стыков и четверных узлов для исключения их из процедуры расчета. Применение предложенного алгоритма делает возможным учет зависимостей границ зерен от локального наклона границы.

Алгоритм разработан для кубических модельных решеток, однако допускает обобщение на тетраэдрические решетки, так же часто используемые в вычислительном моделировании.

Введение

Исследование и оптимизация микроструктуры поликристаллов играет большую роль в материаловедении, поскольку является основой для управления и прогнозирования структурно-зависимых свойств материалов. В настоящее время особое место в этой области занимает вычислительное материаловедение [1], и, в частности, дискретные методы моделирования пространственного и временного поведения сложных систем, использующие локальные (детерминированные или случайные) методы преобразова-

ния модельного объема. Например, модели клеточных автоматов и Монте-Карло модели Потса широко применяются при исследовании явлений возврата, рекристаллизации и роста зерен [2], диффузионных фазовых превращений и т.п.

Как правило, модельный объем представлен в виде набора узлов, характеризующихся диапазоном допустимых дискретных состояний (кристаллографическая ориентация, фазовый состав узла, температура и пр.) причем локальные взаимодействия соседних мест определяются набором правил взаимодействия. При всех достоинствах такого подхода, он приводит к серьезным проблемам при учете параметров, зависящих от точной геометрии границ раздела, в частности межфазных границ или границ зерен, поскольку в модельном объеме эти границы не представлены в явном виде. В то же время известно, что свойства и структура межзеренной границы точно определяются тремя параметрами кристаллографической разориентации и направлением нормали к границе раздела (или наклоном границы) [3]. Если параметры разориентации постоянны и могут быть учтены в векторе состояния узла, то наклон границы изменяется постоянно при ее миграции и, в отличие от разориентации, в разных точках границы различен (определен локально). В настоящее время авторам известна лишь одна попытка учета наклона границы раздела в дискретном моделировании [4], однако довольно громоздким и неэффективным способом.

Очевидно, что решение задачи путем построения поверхности, наилучшим образом проходящей через пограничные узлы с последующим определением касательной плоскости, не представляет сложности в каждом конкретном случае. Однако применение такой процедуры необходимо перед каждым элементарным актом моделирования, что делает вычисления практически невозможными, особенно в современных программных комплексах для трехмерного моделирования эволюции микроструктуры и текстуры при термомеханической обработке материала [5].

В данной работе поставлена и решена задача быстрого и максимально точного определения положения нормали к поверхности раздела в дискретной модели. Разработанный алгоритм обеспечивает среднюю точность определения нормали в 1.68 градуса для любых радиусов кривизны, превышающих 25 модельных узлов (т.е. среднего размера зерна больше 10-12 модельных узлов) хотя и приводит к статистически допустимым сбоям (ошибке более 10 градусов) для примерно 1% вычислений. Приведенные данные получены для сферических объектов различного радиуса, точка на поверхности которых выбиралась случайным образом – т.е. были равномерно представлены все возможные положения нормали и было возможно провести сравнение с точным значением.

Математическое и статистическое обоснование.

Рассмотрим алгоритм на примере описания межзеренной границы поликристаллического твердого тела в трехмерной дискретно модели, модельный объем которой составляют модельные узлы (МУ), размещенные в виде простой кубической решетки [2, 5]. В отличие от разориентации (GBM) кристаллических решеток на границе зерна, наклон (нормаль к плоскости границы, GBN), для искривленной границы не постоянна по ее поверхности и

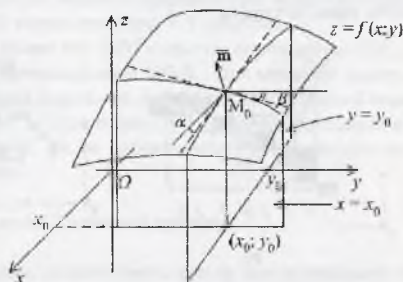


Рис. 1. Геометрия сечений пространства, параллельных плоскостям xz и yz , и график функции $z = f(x, y)$ близкой к границе раздела.

должна быть определена локально. Кроме того, значение GBI постоянно изменяется при миграции межзеренной границы. Таким образом, информация, полученная для данного шага моделирования, не может применяться в дальнейшем. По этой причине точное описание кристаллогеометрии подвижных границ раздела, в том числе, и в виде аналитических приближений, в практическом моделировании не применяется (за исключением единственной известной авторам попытки двумерного моделирования точной геометрии границы раздела [4]). Аналитические приближения не применяются также потому, что в обычных микроструктурах встречаются различные по пространственной протяженности границы, включающие от нескольких десятков до тысяч МУ, что делает создание единого алгоритма для аналитического приближения чрезвычайно сложной задачей.

Рассмотрим границу зерна, совпадающую с функцией $z = f(x, y)$ (рис. 1). Наше решение состоит в локальном определении GBI на основании набора плоских линейных аппроксимаций для трех сечений модельного объема, параллельных базисным плоскостям. Для двух из них, например, параллельных xz и yz , проходящих через точку, в которой необходимо определить GBI $M_0(x, y, z)$ частные производные $\frac{\partial f}{\partial x}$ и $\frac{\partial f}{\partial y}$ определяют наклоны касательных в каждом из сечений. Касательная к границе раздела плоскость, очевидно, включает обе касательных. При этом углы α и β определяются из линейного приближения. Положение нормали к границе раздела, однозначно характеризующей GBI в точке M_0 тогда можно записать как

$$\vec{m} = \left(\frac{\partial f}{\partial x}(M_0); \frac{\partial f}{\partial y}(M_0); -1 \right).$$

а уравнение прямой, содержащей нормаль к поверхности границы раздела:

$$\frac{x - x_0}{\frac{\partial f}{\partial x}(M_0)} = \frac{y - y_0}{\frac{\partial f}{\partial y}(M_0)} = \frac{z - z_0}{-1}.$$

Разработан алгоритм, определяющий положение нормали в точке, соответствующей данному МУ, с использованием плоской окрестности размером 7×5 (рис. 2а). Хотя, согласно предложенной процедуре, достаточно двух плоских сечений, в одном из них, в силу геометрических причин, может быть только один МУ, принадлежащий границе раздела (рис. 2б). Мы предлагаем всегда использовать три пары сечений, чтобы избежать такой ситуации.

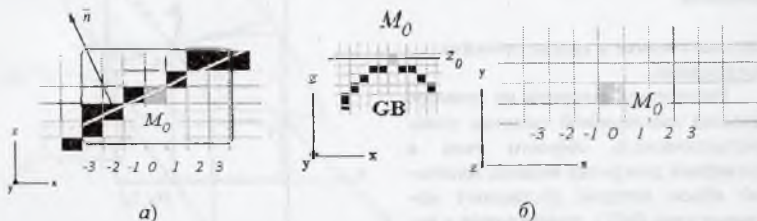


Рис. 2. Сечения поверхности границы раздела: (а) сечение, изображающее МУ, ближайшее M_0 , линейное приближение и проекцию нормали, (б) сечение, содержащее единственный МУ с границы раздела.

Проведен статистический анализ погрешностей реализованного алгоритма. Причины возникновения погрешностей и методика их определения проиллюстрированы рисунком 3.

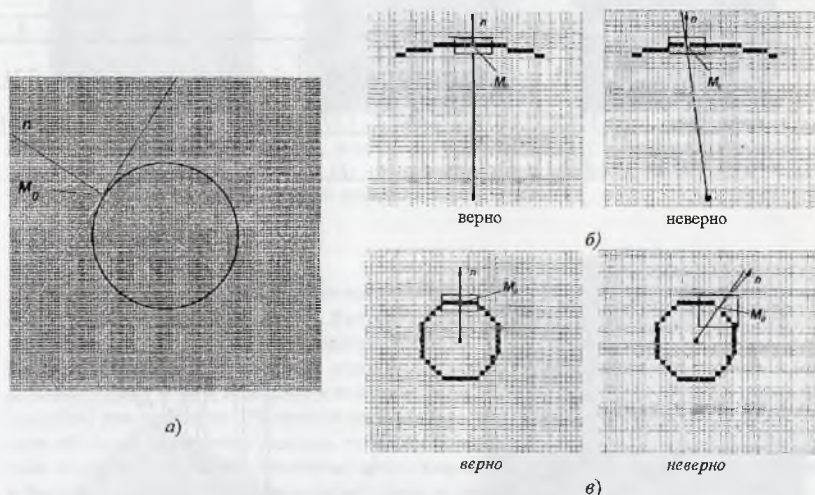


Рис. 3. Сечение тестовой модели, характеризующей точность определения GBI: (а) точный результат для $R = 50$ MU; (б), (в) причины ошибок метода для случая большого и малого радиусов кривизны границ раздела, соответственно.

Для статистического анализа использовалась модель сферической границы раздела с известным центром кривизны, что гарантирует проверку погрешности для всех возможных значений наклонов и позволяет оценить зависимость погрешности определения GBI от локальной кривизны границы раздела (использованы сферы различного диаметра). При этом допустимой ошибкой принято 2 угловых градуса, что соответствует минимальному шагу дискретности угловых величин современных моделей (обычно для построения полосных фигур или ФРО используют шаг в 5 градусов).

Приемлемые ошибки получены для более чем 99% попыток определения GBI для всех радиусов кривизны границ раздела, превышающих 20MU. Для меньших радиусов кривизны процент точных оценок снижается в среднем до 94%. Статистический анализ погрешностей метода представлен в табл. 1. Для радиусов кривизны, превышающих 50MU, средняя ошибка остается постоянной, т.е. не наблюдается улучшения результатов с дальнейшим ростом радиуса кривизны.

Приложение к трехмерной MC модели. Тестовый пример

В качестве тестового примера выбрана модель уменьшения изолированного зерна/растворения частицы в матрице другого химического состава. Тест повторяет геометрию MC модели [6], что позволило сравнить результаты моделирования со случаем сжатия сферического зерна в изоморфных условиях.

Разиориентация между зерном и матрицей была принята 35 градусов (чистое вращение вокруг оси (001)). Для оценки зависимости эффективной подвижности границы зерна от GBI использованы новейшие экспериментальные данные для системы NiAl [7], рис. 4, эффективная подвижность принята пропорциональной относительной энер-

гии границы зерна. В МС модели принята зависимость эффективной подвижности от соотношения наклон/поворот (tilt/twist component, TTC), как показано на рис. 4г.

Таблица 1. Статистический анализ погрешностей определения GBI.

Радиус кривизны, R	100	50	30	25	20	15	10	8
Средняя погрешность, град.	1.641	1.687	2.255	2.536	2.423	4.301	6.562	7.24
Стандартное отклонение, град.	1.029	1.039	1.642	1.77	1.643	3.002	4.301	4.167
Доля точного определения GBI, %	10.5	13.0	11	11	10	8	5	6

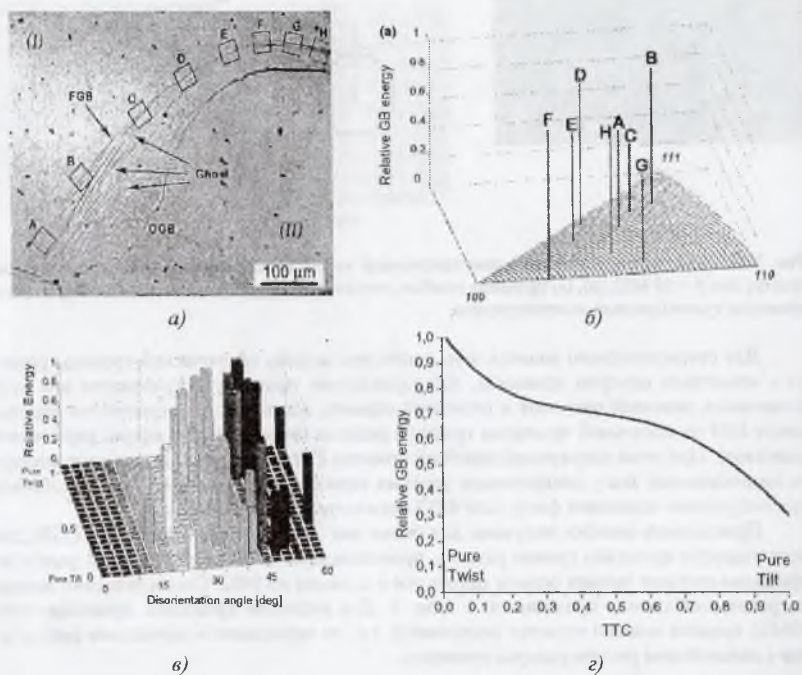


Рис. 4. Эффективная подвижность границы раздела как функция GBI [7]: (а) – граница зерна и ее исследованные участки; (б), (в) – экспериментальные зависимости эффективной энергии от GBI и компоненты наклон/поворот (TTC). г) – усредненная эффективная подвижность границы раздела для интервала разориентаций 30–45 градусов.

В общем случае $0 < TTC < 1$ компонента наклон/поворот представляет долю чистого поворота вокруг оси (001) одного из соседних зерен. Как и ожидалось, учет зависимости эффективной подвижности границы раздела от GBI приводит к различной кинетике границы зерна для различных TTC, и деформации формы зерна, как показано на рис. 5.



Рис. 5. Сечения сферического зерна, полученные при тестовом МС моделировании: (а) – исходное состояние для $R = 50\text{MU}$; (б), (в) – форма зерна после 50 и 100 циклов моделирования. Очевидны отклонения от сферической формы.

Выводы

Решена задача быстрого и точного определения положения нормали к поверхности раздела в дискретной модели. Разработанный алгоритм является быстрым, обеспечивает среднюю точность определения нормали в $1,68$ градуса для любых радиусов кривизны больших 25 модельных узлов (т.е. среднего размера зерна больше $10-12$ модельных узлов) хотя и приводит к статистически допустимым сбоям (ошибке более 10 градусов) для примерно 1% вычислений. Приведенные данные получены для сферических объектов различного радиуса, точка на поверхности которых выбиралась случайным образом – т.е. были равномерно представлены все возможные положения нормали и было возможно провести сравнение с точным значением.

Достоинства предложенного метода: отсутствие необходимости вычислений пространственных функций, однозначность результата, легкость фиксации тройных стыков и четверных узлов для исключения их из процедуры расчета. Его применение делает возможным, например, учет зависимостей границ зерен от локального наклона границы в современных трехмерных моделях, таких как [5]. Алгоритм разработан для кубических модельных решеток однако допускает обобщение на тетраэдрические решетки, так же часто используемые в вычислительном моделировании.

Список литературы

1. Кундас С.П. Вычислительное материаловедение – современное состояние и перспективы развития, сб. Актуальные проблемы прочности, Витебск, 2004, стр. 3-10.
2. Ivasishin O.M., Shevchenko S.V., Vasiliev N.L., Semiatin S.L., A 3-D Monte-Carlo (Potts) model for recrystallization and grain growth in polycrystalline materials. *Materials Science and Engineering A*, **433**, 2006, 216-232.
3. Артемьев А.В. Фионова Л.К. Машинное моделирование структуры границ зерен, сб. Моделирование на ЭВМ дефектов в металлах. Л.: Наука, 1990, стр. 76-92.
4. Raghavan S., Satyam S. Sahay, Modeling the grain growth kinetics by cellular automaton, *Materials Science and Engineering A*, **445-46**, 2007, 203-209
5. Васильев Н.Л., Шевченко С.В., Ивасишин О.М., Орнатский А.И. Трехмерное Монте-Карло моделирование рекристаллизации и роста зерна в поликристаллах: оптимизация модели Поттса и реализация программного комплекса. *Металлофизика и новейшие технологии*, т. 27, 2005, 1471-93
6. Ivasishin, O.M., Shevchenko, S.V., Vasiliev, N.L., and Semiatin, S.L., *Acta Mater.*, 2003, **51**, 1019-1034.
7. Amouyal Y., Rabkin E., Mishin Yu., Correlation between grain boundary energy and geometry in Ni-rich NiAl. *Acta Materialia*, **53**, 2005, 3795-3805.