Egyfázisú anyagok újrakristályosodásának szimulációja cella automata módszerrel

(PhD értekezés tézisei)

Készítette:
Barkóczy Péter

Miskolci Egyetem
Fémtani Tanszék

2004.

Tudományos vezető:
Dr. Roósz András

1. Bevezetés

Képlékeny alakítás hatására a fémekben és ötvözetekben több léptékben is változás következik be. A legszembetűnőbb változás a makroszkópikus méretekben történik, megváltozik a test alakja. A mikroszerkezetben is hasonlóan változik meg a szemcsék alakja, mint a makroszkópikus geometria. Atomi léptékben diszlokációk elmozdulása és sokszorozódása következik be. A diszlokációk hatásövezetében az atomok nincsenek a rács által megadott helyükön, hanem attól eltérő nagyobb energiájú helyen találhatók meg a legnagyobb valószínűséggel, azaz a diszlokáció hatásövezete energiát tárol. Alakítás hatására a diszlokációk száma növekszik, ezáltal megnő a fém vagy ötvözet térfogatában tárolt energia. Ez a tárolt energia lesz a hajtóereje az újrakristályosodásnak. Ha a darab hőmérséklete elegendően magas, vagy a darabot felmelegítjük, megkezdődik az újrakristályosodás, amely lecsökkenti a fém vagy ötvözet energiáját az alakítás előtti értékre.

Az újrakristályosodás során kis diszlokációsűrűségű csírák keletkeznek, amelyek addig nőnek, amíg össze nem érnek, vagy meg nem szűnik a folyamat hajtóereje. Az újrakristályosodás végén a szemcseszerkezetet ekviaxiális szemcsék építik, ugyanúgy, mint az alakítás előtti szemcseszerkezetet. Az újrakristályosodás szorosan összekapcsolódik a képlékenyalakítással. Ha az alakítás hőmérsékletén nem megy végbe az újrakristályosodás, akkor hidegalakításról beszélünk. Ha újrakristályosítani szeretnénk a terméket, akkor ebben az esetben a képlékeny alakítás után hőkezeljük. Az ekkor végbemenő újrakristályosodást statikus újrakristályosodásnak nevezzük. Ha az alakváltozás hőmérsékletén végbemegy az újrakristályosodás, akkor melegalakításról beszélünk. Az alakítás közben végbemenő újrakristályosodás a dinamikus újrakristályosodás, míg az alakítás után végbemenő újrakristályosodás ezúttal is statikus újrakristályosodás. A megújulás folyamatától nem választható el az újrakristályosodás. Az újrakristályosodás hajtóereje megszűnik, ha az alakított térfogatrészek energiája a megújulás hatására lecsökken. Lokálisan megszűnhet az újrakristályosodás hajtóereje akkor is, ha a növekvő csíra energiája megnövekszik további képlékeny alakítás hatására. Az újrakristályosodást követően a szemcsedurvulás az átlagos szemcseméretet növeli, azaz a szemcsedurvulás is hozzájárul az újrakristályosodott szemcseszerkezet kialakításához.

Az újrakristályosodás egy sokat vizsgált, jól ismert folyamat, mégis jelentős mennyiségű cikk foglalkozik napjainkban is a tématerülettel. Ennek egyik oka, hogy a méréstechnika és a mérőberendezések fejlődésével egyre pontosabban és részletesebben ismerhetjük meg az átalakulási folyamatokat, egyre pontosabban határozhatjuk meg az anyagokra

jellemző paraméterek értékeit. A másik oka, hogy egyre nagyobb követelményeket támaszt a piac a termékekkel szemben. Ez új, szigorúbb technológiai szabályozást hív életre, amely igényli az átalakulási folyamatok szigorú kézbentartását és pontos vezetését. A téma népszerűségének harmadik oka a szimulációk elterjedése. A számítástechnika és a numerikus módszerek fejlődése egyre több kutatót csábít a számítások oldalára és egyre pontosabb és részletesebb szimulációk látnak napvilágot, amelyek értékes információkat szolgáltatnak mind a termelés, mind a kutatás számára.

Disszertációm az előző bekezdésben megjelölt harmadik csoporthoz tartozik. Munkám célja egy olyan újrakristályosodás szimuláció elkészítése volt, amely minél több részletét veszi figyelembe az újrakristályosodásnak, nem megfeledkezve a kísérő jelenségekről sem. Az irodalomban található szimulációk áttanulmányozása után ez azt jelenti, hogy a szimulációnak, illetve a szimulátornak a következő követelményrendszert kell kielégítenie:

- az újrakristályosodás szimulációját meg kell előznie, illetve ki kell egészítenie egy képlékeny alakváltozás szimulációnak,
- ugyanannak a módszernek kell alkalmazhatónak lennie mind statikus, mind dinamikus újrakristályosodás szimulációjára,
- az idealizált izoterm körülményeken kívül a valós hőkezelési viszonyokat is kezelnie kell,
- hasonló elveken felépített módszerekkel figyelembe kell vennie a megújulás és a szemcsedurvulás hatását is,
- a lehető legtöbb eredményt kell szolgáltatnia a lehető legszemléletesebben.

A megoldáshoz a cella automata módszer kínálkozott a legjobb megoldásnak. Azon túl, hogy ennek alkalmazásával a részfolyamatok könnyen egymás mellé kapcsolhatók, a szimuláció eredménye a szemcseszerkezet fejlődése, ami - akár egy film - megtekinthető, akár képenként elemezhető, így a szükséges adatok kinyerhetők belőle.

2. A szimuláció leírása

A munkám célja egy olyan szimuláció kidolgozása volt, amely újrakristályosodás során számítja a szemcseszerkezet megváltozását. Ehhez készítettem egy képlékeny alakváltozás és egy újrakristályosodás szimulációt. A két eljárás kombinálásával a módszer képes mind a statikus, mind a dinamikus újrakristályosodás szimulálására állandó és változó hőmérséklet mellett. A módszer figyelembe a megújulást, illetve számítja szemcsedurvulást is.

Az újrakristályosodás szimulációjához a cella automata módszert alkalmaztam. Ebből következően a szimuláció bemenő adata az anyag- és technológiai paramétereken kívül egy szemcseszerkezet. A szemcseszerkezet szemcséinek ismert a három *Euler* szöggel megadott kristálytani orientációja . A szemcsék alakját két dimenzióban egy négyzet-, három dimenzióban egy kockarács írja le, amelyben a rácspontok öröklik az őket tartalmazó szemcsék kristálytani orientációját.

Ezen a szemcseszerkezeten végez geometriai transzformációt a képlékeny alakváltozás szimulátora. Két dimenzióban hengerlés, három dimenzióban hengerlés és húzás hatására kialakuló szemcseszerkezet számítható ki a segítségével. A szimulátor mindegyik rácspont helyvektorát megszorozza az alakváltozási tenzorral, amely nem függ a helytől és az időtől, csak az alakváltozás mértékétől. A cella automatával történő összehangolás következtében az alakváltozott szemcseszerkezetet ugyanolyan osztású rácsnak kell leírnia, mint a kiinduló szemcseszerkezetet. Ebből következik, hogy az alakváltozott szemcseszerkezetnek lesznek olyan rácspontjai, amellyel jellemzett térelemekbe a transzformáció után nem mutat helyvektor. Ennek a problémának a feloldására kidolgoztam a szubcellákra osztás módszerét, ahol minden rácsponthoz egy alrácsot rendel a szimulátor, amelyben az új rácspontok ugyanazzal a kristálytani orientációval rendelkeznek, mint az eredeti rácspont. Ezekkel az alrácsokkal elvégezve a transzformációt már biztosítható, hogy az alakváltozott szemcseszerkezet rácsának minden rácspontjában megmondható legyen a kristálytani orientáció. Természetesen ez a módszer jelentősen megnöveli a futási időt, ezért az alakítás függvényében meghatároztam azt a minimális alrácsméretet, amely még megfelelő eredményt ad.

A képlékeny alakváltozás szimulációjának másik feladata, hogy meghatározza a tárolt energiát. A szimulációban a tárolt energia nem függ a kristálytani orientációtól, azaz a szemcseszerkezet minden egyes pontjában azonos lesz az értéke. Részben saját mérések, részben irodalmi adatok felhasználásával megállapítottam a tárolt energia alakítási mértéktől való függését. Irodalmi adatokat elemezve megállapítot-

tam, hogy hogyan függ a tárolt energia az alakítási hőmérséklettől és az alakítatlan szemcseszerkezet átlagos szemcseátmérőjétől. A kapott adatokból megállapítottam, hogy az átlagos szemcseátmérő változtatásának hatása elhanyagolható befolyással van a tárolt energia értékére, ezért csak az alakítási mérték és az alakítási hőmérséklet hatása került beépítésre a szimulációba.

Az újrakristályosodás szimulációjánál a cella automatában a cellák két dimenzióban négyzetek, három dimenzióban kockák. Ezért szükséges a kiinduló szerkezetet négyzet-, illetve kocka ráccsal megadni. A cellák állapothatározói a kristálytani orientáció, és a cella energiája. Szomszédságként a *Neumann* szomszédságot alkalmaztam. A cellatér határán lévő cellák kezeléséről a periodikus határfeltétel gondoskodik. Külön szabályrendszert alkottam a csíraképződéshez, a csíranövekedéshez, a megújuláshoz és a szemcsedurvuláshoz.

Mindegyik szabályrendszerben közös, hogy egy energetikai és egy konfigurációs feltételből áll. Az irodalomban található szimulációktól eltérően az adott szabályrendszer által meghatározott állapotváltozás csak akkor mehet végbe, ha a cella energiája meghaladja az adott folyamat aktiválási energiáját. A cella energiája három tagból áll: a tárolt energiából, a határenergiából és a termikus gerjesztettségből. A tárolt energiát a képlékeny alakváltozás szimulációja számítja. Szemcsehatár ott található a cellatérben, ahol eltérő orientációjú cellák vannak egymás szomszédságában. Ezekben az esetekben a cellák többletenergiát kapnak, amelyet az orientációs szögek különbségéből számít az automata a dőlt és csavart határ geometriai viszonyainak figyelembevételével. A termikus gerjesztettséget a hőmérséklet értékéből számítja az automata annak figyelembevételével, hogy a cellák energiája a *Maxwell-Boltzman* eloszlást kövesse.

A konfigurációs feltétel határozza meg, hogy az adott szabályrendszer a cellatér melyik pontjaira alkalmazható. A csíraképződés csak alakított anyagrészben mehet végbe, azaz az energetikai feltételt teljesítő cellák közül csak azok válnak csírává, amelyek és amelyek szomszédai egy kritikus értéket meghaladó tárolt energiával rendelkeznek. Ekkor a cella elveszti a tárolt energia tartalmát és új, véletlenszerűen megállapított kristálytani orientációt kap.

Csíranövekedés során a növekvő csíra határán lévő alakított cellák válhatnak a növekvő csíra részévé, ha az alakított cella energiája eléri vagy meghaladja a csíranövekedés aktiválási energiáját. Ekkor a cella elveszti a tárolt energia értékét, és felveszi annak a szomszédjának az orientációját, amelyik a növekvő csírához tartozik.

Megújulás során az alakított térfogatrészekben csökken a tárolt energia. A megújulásban tehát azok a cellák vesznek részt, amelyek

teljesítik az energetikai feltételt, és a tárolt energiájuk nagyobb egy kritikus értéknél. Az ilyen cellák tárolt energiáját csökkenti az automata az aktuális érték egy megadott hányadával.

Az irodalomban található szimulációktól eltérően a cella automata a szemcsedurvulást nem két szimulátor összekapcsolásával veszi figyelembe, hanem rendelkezik egy beépített szemcsedurvulás szabályrendszerrel. Szemcsedurvulás csak újrakristályosodott anyagrészben mehet végbe, azaz azon celláknak és azok minden szomszédjának, amelyek teljesítik az energetikai feltételt, egy kritikus értéknél kisebb tárolt energiával kell rendelkeznie. Ekkor az automata meghatározza, hogy a vizsgált cella számára melyik szomszédságában megtalálható kristálytani orientáció biztosítja a legkisebb határenergiát. Az eredményül kapott orientációt veszi fel a vizsgált cella.

Ha minden cellára az aktiválási energiája szerinti csökkenő sorrendben alkalmazzuk a szabályrendszereket, megkapjuk az újrakristályosodás szimulációjának egy lépését. Ha a képlékeny alakváltozás szimuláció eredményezte szemcseszerkezeten több újrakristályosodási szimulációs lépést végrehajtunk, a statikus újrakristályosodás szimulációját kapjuk. A bemutatott rendszerben a dinamikus újrakristályosodás szimulációs lépése egy képlékeny alakváltozási szimulációs lépést és egy újrakristályosodási lépést jelent. A képlékeny alakváltozás és az újrakristályosodás szimulátorok ilyen összekapcsolása biztosítja, hogy a szakirodalomban található megoldásoktól eltérően ugyanaz az eljárás alkalmas mind a statikus, mind a dinamikus újrakristályosodás szimulációjára.

3. Tézisek

1. Kidolgoztam egy szimulációs eljárást két dimenzióban hengerlés, három dimenzióban hengerlés és húzás során megváltozott szemcseszerkezet és tárolt energia meghatározására.

   - A szemcseszerkezet felbontása miatt kerekítési hibák lépnek fel, amelyek mérséklésére a kidolgozott szubcellákra bontás módszere alkalmas. A szükséges szubcellák száma az alakítás mértékének a függvénye.
   - Részben mérési, részben irodalmi adatok elemzésének eredményeit alapul véve a számított tárolt energia az alakítás mértékének, az alakítás hőmérsékletének és a kiinduló szemcseszerkezet átlagos átmérőjének a függvénye. A szimuláció értelmezési tartományában a kiinduló szemcseszerkezet átlagos átmérője elhanyagolható mértékben befolyásolja a tárolt energia értékét.

2. Az irodalomtól eltérően energia alapokon fogalmaztam meg az újrakristályosodás szimulációjára kidolgozott cella automata módszer állapotváltási szabályait, amelyek szerint egy részfolyamat csak akkor mehet végbe, ha a cella energiája meghaladja a részfolyamathoz rendelt aktiválási energia értékét.

   - A cella energiája a tárolt-, a határ- és a termikus energiák összege.
   - A határenergiát a szomszédos cellák kristálytani orientációjának eltéréséből azámolja az automata, figyelembe véve a dőlt és csavart határ geometriai sajátosságait.
   - A termikus gerjesztettséget az automata a hőmérsékletből számolja úgy, hogy a cellák energiája *Maxwell-Boltzman* eloszlást kövessen.

3. Az újrakristályosodás szimulációjára kidolgozott cella automata módszer a csíraképződés és csíranövekedés mellett az irodalomtól eltérően azonos elveken számítja a megújulás és szemcsedurvulás szemcseszerkezetre gyakorolt hatását.

4. A szimuláció alkalmas hidegalakítást követő statikus, és melegalakítás során végbemenő dinamikus és statikus újrakristályosodás során kialakuló szemcseszerkezet meghatározására állandó illetve változó hőmérséklet esetén.

5. Hőmérséklet eloszlást számoló szimulátorral összekapcsolva, a szimuláció alkalmas a szemcseszerkezet számítására nagy darabok újrakristályosodása esetén is.

4. Gyakorlati alkalmazás lehetőségei

A szimuláció alkalmazható képlékeny alakváltozást követő statikus újrakristályosodás szimulációjára mind állandó, mind változó hőmérsékletű hőkezelés esetén. A módszerrel - ismerve a hőmérsékleteloszlás időbeli változását - elvégezhető a nagy méretű testek újrakristályosodásának szimulációja. A szimulátorral felvehetők újrakristályosodási diagramok. Kiszámítható továbbá segítségével a dinamikus újrakristályosodás során megváltozó szemcseszerkezet. Mivel a szimuláció eredménye maga a szemcseszerkezet, ezért az oktatásban az újrakristályosodás szemléltetésére használható. A hallgatók megismerhetik, hogy az egyes anyagi és technológiai paraméterek változása milyen változást okoz a szemcseszerkezetben.

5. Publikációk

5.1. Konferencia kiadványok:

1. Roósz A., Barkóczy P., Geiger J.: Cellular Automaton Simulation of Recrystallization and Grain Growth, Euromat 2001, Rimini, Olaszország, elektronikus formában (CD) kiadva.

2. Barkóczy P., Somogyi I., Roósz A., Tranta F.: Újrakristályosodás vizsgálata DSC méréssel, XIX. Hőkezelő és anyagtudomány a gépgyártásban országos konferencia, Székesfehérvár, 2000., pp. 53-57.

3. Roósz A., Barkóczy P., Geiger J.: A szemcseszerkezet változása képlékeny alakítás és az azt követő újrakristályosodás és szemcsedurvulás során, XIII. Kélékenyalakító Konferencia, Salgótarján, 2000., pp. 9-23.

5.2. Cikkek:

1. Geiger J., Roósz A., Barkóczy P.: Simulation of Grain Coarsening in two Dimension by Cellular-Automaton, Acta Mater., Vol.: 49, pp.: 623-629, 2001

   Hivatkozások:

   (a) Romanova V., Balokhonov R., Makarov P., et al.: Simulation of elasto-plastic behaviour of an artificial 3D-structure under dynamic loading, Comp Mater Sci, Vol.: 28, pp.: 518-528, 2003

   (b) Di Nunzio PE: Grain growth in thin films by a discrete model based on pair interactions, Phys Rev B, Vol.: 68, art. no. 115432, 2003

   (c) Kermanpur A., Wang W., Lee PD., et al.: Scalable, continuous variable, cellular automaton model for grain growth during homogenisation of vacuum arc remelted Inconel*718, Mater Sci Tech-Lond, Vol.: 19, pp.: 859-865, 2003

   (d) Jing XN., Zhao JH., He LH.: 2D aggregate evolution in sintering due to multiple diffusion approaches, Mater Chem Phys, Vol.: 80, pp.: 595-598, 2003

   (e) Yu Q., Esche SK.: A Monte Carlo algorithm for single phase normal grain growth with improved accuracy and efficiency, Comp Mater Sci, Vol.: 27. pp.: 259-270, 2003

   (f) Sahay SS., Malhotra CP., Kolkhede AM.: Accelerated grain growth behavior during cyclic annealing, Acta Mater, Vol.: 51, pp.: 339-346, 2003

   (g) Raabe D.: Cellular automata in materials science with particular reference to recrystallization simulation, Ann Rev Mater Res, Vol.: 32, pp.: 53-76, 2002

   (h) Krill CE., Chen LQ.: Computer simulation of 3-D grain growth using a phase-field model, Acta Mater, Vol.: 50, pp.: 3057-3073, 2002

   (i) Upmanyu M., Hassold GN., Kazaryan A., et al.: Boundary mobility and energy anisotropy effects on microstructural evolution during grain growth, Interface Sci, Vol.: 10, pp.: 201-216, 2002

2. Barkóczy P., Roósz A., Geiger J.: Simulation of recrystallization by cellular automaton method, Mat. Sci. Forum, Vol.: 414-4, pp.: 359-363, 2003

5.3. Konferencia előadások:

1. Barkóczy P., Roósz A., Geiger J.: Dinamikus újrakristályosodás szimulációja, Fiatal Műszakiak Tudományos Ülésszaka VIII., Kolozsvár, 2003.

2. Barkóczy P., Roósz A., Geiger J.: Modelling of Recrystallization by Cellular Automata Method, Junior Euromat 2002, Lausanne, Svájc.

3. Barkóczy P., Roósz A., Geiger J.: Modelling of Recrystallization by CA Method, MicroCAD 2002, Miskolc.

4. Barkóczy P.: CA újrakristályosodás és szemcsedúrvulás szimulátor alkalmazása, Doktoranduszok Fóruma, Miskolc, 2002.

5. Roósz A., Barkóczy P., Geiger J.: Cellular Automaton Simulation of Recrystallization and Grain Growth, Euromat 2001, Rimini, Olaszország

6. Roósz A., Barkóczy P., Hoó Cs., Geiger J.: Real Time Simulation of Austenite Grain Growth by CA Method, MicroCAD 2001, Miskolc

7. Barkóczy P., Somogyi I., Roósz A., Tranta F.: Újrakristályosodás vizsgálata DSC méréssel, XIX. Hőkezelő és anyagtudomány a gépgyártásban országos konferencia, Székesfehérvár, 2000.

8. Roósz A., Barkóczy P., Geiger J.: A szemcseszerkezet változása képlékeny alakítás és az azt követő újrakristályosodás és szemcsedúrvulás során, XIII. Kéllékenyalakító Konferencia, Salgótarján, 2000

9. Barkóczy P., Roósz A., Geiger J.: Modelling of Recrystallization by Cellular Automata, Junior Euromat 2000, Lausanne, Svájc.

10. Barkóczy P.: Újrakristályosodás vizsgálata DSC méréssel, Doktoranduszok Fóruma, Miskolc, 2000.