

Spis treści

Przedmowa	9
Część pierwsza. Podstawy frontalnych automatów komórkowych	11
1. Wstęp	13
1.1. Rys historyczny	14
1.2. Klasyfikacja automatów	18
1.3. Automaty komórkowe a modelowanie zjawisk mikrostrukturalnych	21
1.4. Automaty komórkowe a problemy związane z ich stosowaniem	23
2. Algorytmy rozrostu ziarna	29
2.1. Klasyczny algorytm rozrostu ziarna	29
2.2. Algorytm rozrostu ziarna z zastosowaniem losowych reguł	34
2.3. Algorytm rozrostu ziarna ze sterowaniem prędkości rozrostu	38
2.4. Izotropia przestrzeni	41
2.4.1. Algorytm dla niezmiennych warunków rozrostu ziarna	42
2.4.2. Algorytm uwzględniający zmienną prędkość rozrostu	44
2.4.3. Algorytm uwzględniający odkształcenie lub dowolny kształt komórek	48
2.4.4. Zmodyfikowany algorytm do wyznaczenia czasu przejścia	52
2.5. Sterowanie kształtem rosnącego ziarna	54
2.5.1. Globalne i lokalne współrzędne ziarna	54
2.5.2. Algorytm rozrostu ziarna w kształcie kuli	57
2.5.3. Algorytm rozrostu ziarna w kształcie elipsoidy	57
2.5.4. Algorytm rozrostu ziarna w kształcie prostopadłościanu	59
2.5.5. Algorytm rozrostu ziarna w kształcie ośmiościanu	61
2.5.6. Algorytm rozrostu ziarna w kształcie walca	62
3. Warunki brzegowe i reorganizacja przestrzeni komórkowej	64
3.1. Wymagania stawiane warunkom brzegowym	64
3.2. Warunki brzegowe przy stałej topologii automatów komórkowych	66

3.3. Warunki brzegowe	
przy zmiennej topologii automatów komórkowych	75
3.3.1. Odrzucenie połowy modelowej przestrzeni (<i>halving</i>)	76
3.3.2. Przecinanie i składanie przestrzeni (<i>cutting and bonding</i>)	80
3.3.3. Podwojenie przestrzeni	83
3.3.4. Wyprostowanie przestrzeni automatów komórkowych	84
3.4. Wskazówki do wyboru warunków brzegowych	85
4. Opracowanie i zastosowanie frontalnych automatów komórkowych	87
4.1. Konwencjonalne automaty komórkowe	87
4.2. Frontalne automaty komórkowe	89
4.3. Przykłady oszacowań nakładów obliczeniowych	94
4.4. Uniwersalny frontalny automat komórkowy	95
5. Przygotowanie danych do tworzenia siatki	
metody elementów skończonych	101
5.1. Zasady przygotowania danych	101
5.1.1. Wczytywanie informacji o mikrostrukturze	103
5.1.2. Sprawdzenie ciągłości ziaren	103
5.1.3. Eliminacja zbyt drobnych ziaren	106
5.1.4. Stworzenie listy komórek leżących na granicach ziaren	106
5.1.5. Lista płaszczyzn styku ziaren	106
5.1.6. Uporządkowanie ścianek komórek na powierzchni styku dwóch ziaren, sprawdzenie ich ciągłości i wyznaczenie konturu każdej płaszczyzny	107
5.1.7. Stworzenie listy linii dla każdej płaszczyzny	108
5.1.8. Stworzenie listy wszystkich linii	109
5.1.9. Algorytm sprawdzania linii	109
5.1.10. Stworzenie i wypełnienie listy linii dla każdego ziarna	111
5.1.11. Stworzenie i wypełnienie listy wierzchołków	111
5.1.12. Stworzenie i wypełnienie listy wierzchołków dla każdej płaszczyzny i ziarna oraz list płaszczyzn i ziaren dla każdego wierzchołka	112
5.1.13. Zapisywanie wyników do plików	112
5.2. Przykłady siatek MES	114
Część druga. Modelowanie zjawisk mikrostrukturalnych	115
6. Modelowanie początkowej mikrostruktury o zadanych parametrach	117
6.1. Zasady i struktura modelu kształtowania początkowej mikrostruktury	117
6.2. Wybór, określenie warunków symulacji i symulacja	118

6.3. Uzyskanie mikrostruktury o zadanym rozkładzie wielkości ziaren	126
6.3.1. Przedstawienie rozkładu teoretycznego w postaci szeregu rozdzielczego	126
6.3.2. Wyznaczenie liczby ziaren, reprezentatywnej objętości modelowej, sprawdzenie rozmiarów przestrzeni komórkowej	127
6.3.3. Zadanie warunków zarodkowania	128
6.3.4. Modelowanie mikrostruktury i wyznaczenie empirycznego rozkładu wielkości ziarna	128
6.3.5. Porównanie rozkładu empirycznego z teoretycznym, wyznaczenie błędu dopasowania	129
6.3.6. Sprawdzenie kryterium dopasowania i korekta warunków zarodkowania	130
6.3.7. Obliczenia końcowe prędkości zarodkowania oraz modelowanie sprawdzające	133
6.3.8. Określenie warunków zarodkowania	134
6.4. Przykład symulacji mikrostruktury i wyniki	137
6.5. Orientacja krystalograficzna ziaren	142
6.5.1. Dopasowanie rozkładu i orientacja ziaren	142
6.5.2. Dopasowanie rozkładu kąta dezorientacji granic ziaren	143
6.5.3. Dopasowanie rozkładu oraz orientacja ziaren i kąta dezorientacji granic	145
7. Krzepnięcie	146
7.1. Model FCA do modelowania makrostruktury podczas krzepnięcia	146
7.2. Założenia wstępne	149
7.3. Modelowanie zjawiska zmiany stanu skupienia materiału (krystalizacja)	151
Uwzględnienie pola temperatury podczas modelowania krzepnięcia	157
7.4. Opis modułu FCA	159
7.5. Wyniki modelowania	161
7.5.1. Modelowanie wlewków za pomocą FCA o dużej liczbie komórek	161
7.5.2. Wyznaczenie parametrów zarodkowania Modyfikacji programu FCA	166
7.6. Weryfikacja modelu i jego optymalizacja ze względu na nakłady obliczeniowe	173
8. Rekrystalizacja	183
8.1. Rozwój metod badania i modelowania rekrystalizacji	183
8.2. Główne założenia do modelowania rekrystalizacji	187
8.3. Podstawowe modele	188
8.3.1. Rozwój dyslokacji	188

8.3.2. Napężenie uplastyczniające	190
8.3.3. Zarodkowanie	191
8.3.4. Rozrost ziaren	194
8.4. Kinetyka rekrytalizacji	197
8.4.1. Warunki brzegowe	197
8.4.2. Wymiar przestrzeni	198
8.4.3. Kształt ziaren	202
8.5. Rekrytalizacja statyczna	204
8.5.1. Zarodkowanie przy rekrytalizacji statycznej	204
8.5.2. Kinetyka rekrytalizacji statycznej	208
8.6. Rekrytalizacja dynamiczna	214
8.6.1. Zarodkowanie i rozrost ziaren	215
8.6.2. Uwzględnienie geometrii odkształcenia	217
8.6.3. Napężenie uplastyczniające	219
8.6.4. Rekrytalizacja metadynamiczna	223
8.7. Wielkość ziarna	224
8.8. Kierunki dalszych badań rekrytalizacji	228
9. Przemiany fazowe w stanie stałym	230
9.1. Podstawowe wiadomości o przemianach fazowych w stali	230
9.2. Modelowanie przemian fazowych	233
9.3. Model przemian fazowych	236
9.4. Wyniki modelowania wstępnego	239
10. Rozdrobnienie mikrostruktury	243
10.1. Materiały drobnoziarniste	243
10.2. Model rozwoju mikrostruktury i własności mechanicznych materiałów silnie rozdrobionych	246
10.2.1. Modele oparte o metodę elementów skończonych: MES I i MES II	247
10.2.2. Automaty komórkowe	247
10.2.3. Zastosowanie teorii plastyczności kryształów	248
10.2.4. Napężenie uplastyczniające	249
10.2.5. Model oparty o metodę elementów dyskretnych	249
10.3. Modele automatów komórkowych	249
10.3.1. Model I	250
10.3.2. Model II	255
10.3.3. Model III	255
10.4. Weryfikacja parametrów automatów komórkowych	256
10.5. Zastosowanie opracowanego modelu do przeprowadzenia testowych obliczeń	257
10.5.1. Walcowanie pakietowe	257
10.5.2. Symulacja procesu MAXStrain [®]	263

11. Przykłady zastosowania frontalnych automatów komórkowych do modelowania mikrostruktury w procesie walcowania	266
11.1. Procesy wieloetapowego odkształcenia (walcowanie w wykrojach)	267
11.1.1. Warunki symulacji	268
11.1.2. Charakterystyka materiału	269
11.1.3. Wyniki modelowania MES	269
11.1.4. Modelowanie rozwoju mikrostruktury	271
11.2. Walcowanie wyrobów płaskich	278
11.2.1. Dane wejściowe	279
11.2.2. Wyniki symulacji	280
Podsumowanie części drugiej. Analiza wyników badań teoretycznych	285
Część trzecia. Praktyczny kurs automatów komórkowych	289
Ćwiczenia laboratoryjne 1. Automaty komórkowe. Podstawowe pojęcia. Jednowymiarowe CA. Lokalne reguły	293
Ćwiczenia laboratoryjne 2. Jednowymiarowe CA. Synchroniczne i asynchroniczne CA	297
Ćwiczenia laboratoryjne 3. Dwuwymiarowe CA	302
Ćwiczenia laboratoryjne 4. Otoczenie (Sąsiedztwo)	308
Ćwiczenia laboratoryjne 5. Sterowanie prędkością rozrostu. Izotropia przestrzeni	312
Ćwiczenia laboratoryjne 6. Frontalne automaty komórkowe	316
Ćwiczenia laboratoryjne 7. Kształt ziaren. Prostokąt	321
Ćwiczenia laboratoryjne 8. Początkowa mikrostruktura	324
Ćwiczenia laboratoryjne 9. Granice ziaren. Warunki brzegowe	326
Ćwiczenia laboratoryjne 10. Otwarte warunki brzegowe. Krok czasowy	329
Ćwiczenia laboratoryjne 11. Rozwój mikrostruktury. Przemiana fazowa	333
Literatura	335