

Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie

Wydział Inżynierii Metali i Informatyki Przemysłowej

Katedra Informatyki Stosowanej i Modelowania



Rozprawa doktorska

**Wykorzystanie statystycznej reprezentacji mikrostruktury do
modelowania przemian fazowych w stalach DP poprzez
rozwiązanie równania dyfuzji**

Krzysztof Bzowski

Promotor:

dr hab. inż. Łukasz Rauch, prof. AGH

Kraków 2019



Podziękowania

Autor pracy pragnie

*podziękować: Promotorowi,
za opiekę merytoryczną i praktyczne wskazówki,
za zaangażowanie, oraz optymizm dzięki którym możliwe było napisanie tej pracy,*

*Profesorowi Maciejowi Pietrzykowi,
za opiekę merytoryczną oraz cenne uwagi i sugestie,*

*Profesorowi Romanowi Kuziakowi,
za pomoc w przygotowaniu materiału do weryfikacji modelu numerycznego,*

*Profesorowi Krzysztofowi Muszce oraz Marcinowi Kwietniowi za pomoc w
przygotowaniu próbek oraz wykonaniu badań eksperymentalnych,*

*Monice Pernach i Annie Smyk,
za pomoc i motywację w pisaniu pracy,*

*Żonie,
za wsparcie i wyrozumiałość,*

*Dziękuję też tym wszystkim, których nie wymieniłem tu z imienia i nazwiska, a którzy
byli mi życzliwi i pomocni w realizowaniu tej pracy.*

Praca finansowana w ramach projektu badawczego Narodowego Centrum Nauki:
*„Wykorzystanie statystycznej reprezentacji mikrostruktury do modelowania przemian
fazowych w stalach DP poprzez rozwiązanie równania dyfuzji”*,
nr 2015/17/N/ST8/01024.

Praca została zrealizowana jako część badań podstawowych finansowanych przez
Akademię Górniczo-Hutniczą w Krakowie.

Praca została wykonana z wykorzystaniem Infrastruktury PLGrid.

Praca zrealizowana w oparciu o wyniki uzyskane przy wykorzystaniu zasobów
obliczeniowych ACK CYFRONET AGH.

SPIS TREŚCI

1. WSTĘP	9
2. PRZEMIANY W STALACH DWUFAZOWYCH DP	11
2.1. Mechanizm przemiany α - γ (przy nagrzewaniu).....	14
2.2. Mechanizm przemiany γ - α (przy chłodzeniu).....	15
2.2.1. Zarodkowanie.....	16
2.2.2. Wzrost	18
2.3. Mechanizm przemiany martenzytycznej.....	18
3. MODELOWANIE PRZEMIAN FAZOWYCH W STALACH.....	23
3.1. Modele przemian fazowych wykorzystujące równania empiryczne.....	23
3.2. Modele przemian fazowych wykorzystujące wirtualną reprezentację mikrostruktur.....	26
3.3. Podsumowanie problematyki modelowania przemian fazowych	41
4. TEZA I CEL PRACY.....	43
5. MODELOWANIE PRZEMIAN FAZOWYCH Z JAWNYM WYKORZYSTANIEM MIKROSTRUKTUR MATERIAŁOWYCH.....	44
5.1. Reprezentatywny element objętości – RVE.....	44
5.2. Statystycznie reprezentatywny element objętości – SSRVE	47
5.3. Matematyczny opis mikrostruktur materiałowych.....	48
5.4. Metodyka wyznaczania elementów SSRVE.....	57
5.5. Przykładowe SSRVE dla mikrostruktur stali DP (wyniki ilościowe i jakościowe).....	59
5.6. Podsumowanie	73
6. MODEL PRZEMIAN FAZOWYCH WYKORZYSTUJĄCY ROZWIĄZANIE RÓWNAŃ DIFUZJI WĘGLA Z RUCHOMĄ GRANICĄ MIĘDZYFAZOWĄ	75
6.1. Modelowanie granicy międzyfazowej za pomocą metody poziomicy	75
6.2. Model MLS-DIFF	82
6.3. Założenia i szczegóły implementacyjne.....	90
6.4. Identyfikacja parametrów modelu i analiza wrażliwości.....	92
7. WERYFIKACJA OPRACOWANEGO MODELU	98
7.1. Metodyka badawcza.....	98
7.2. Walidacja mikrostrukturalna.....	103
7.3. Walidacja modelu przemian z wykorzystaniem SSRVE	115
7.4. Weryfikacja przemysłowa.....	125
8. OBLICZENIA Z WYKORZYSTANIEM ARCHITEKTUR SPRZĘTOWYCH WYSOKIEJ WYDAJNOŚCI.....	129
8.1. Efektywność obliczeniowa w architekturach HPC	129
8.2. Wyznaczenie optymalnych cykli obróbki cieplnej z wykorzystaniem elementów SSRVE	130
9. PODSUMOWANIE I WNIOSKI.....	134
10. LITERATURA.....	137

1. Wstęp

Od lat prowadzone są badania nad rozwojem stali o strukturze wielofazowej. Lata dziewięćdziesiąte ubiegłego stulecia i początek XXI wieku to okres intensywnego rozwoju zaawansowanych stali o wysokiej wytrzymałości (ang. *Advanced High Strength Steels* – AHSS). Produkty ze stali AHSS mogą być otrzymywane zarówno w procesie walcowania na gorąco i laminarnego chłodzenia, jak i w późniejszym procesie walcowania na zimno i ciągłego wyżarzania. Odpowiedni dobór warunków cyklu produkcyjnego, w szczególności procesu obróbki cieplnej, kształtuje stosunek faz i morfologię mikrostruktury gotowego wyrobu. Każda z faz posiada odmienne własności fizyczne i mechaniczne, a ich odpowiednia kompozycja pozwala na otrzymanie materiału łączącego wytrzymałość z plastycznością. Zaprojektowanie optymalnych parametrów procesu, takich jak np.: temperatura, czas, szybkość chłodzenia, możliwe jest dzięki symulacjom numerycznym, w których do wyznaczenia korelacji pomiędzy parametrami procesów technologicznych a zmianami mikrostruktury stali i jej własnościami służą modele numeryczne przemian fazowych. W literaturze znaleźć można opisy wielu modeli pozwalających przewidzieć kinetykę przemian fazowych oraz mikrostrukturę i własności stali poddanej cyklom nagrzewania i chłodzenia. Modele te charakteryzują się różnymi możliwościami predykcyjnymi oraz różną złożonością obliczeniową i skalowalnością. Zwykle modele o złożonej funkcjonalności nie są przydatne do zastosowań w symulacjach przemysłowych, a modele proste nie spełniają postawionych przed nimi coraz bardziej wygórowanych wymagań. To praktycznie przekreśla możliwość wykorzystania zaawansowanych matematycznie modeli w przemyśle, gdzie czas prowadzonych obliczeń jest równie ważny jak rzetelność otrzymywanych wyników. Z drugiej zaś strony obserwowany rozwój architektur komputerowych wysokiej wydajności (ang. *High Performance Computing* – HPC) próbuje sprostać rosnącym wymaganiom stawianym modelom numerycznym. Niebagatelny jest obserwowany rozwój metod i bibliotek numerycznych, których celem jest przyspieszenie obliczeń przez optymalizację kodu numerycznego, wprowadzenie optymalnych struktur danych czy w końcu zastosowanie metod dekompozycji przestrzeni obliczeniowej. Nie należy jednak traktować tych narzędzi jako złotego środka pozwalającego na przeprowadzenie dowolnie skomplikowanej symulacji numerycznej.

Wyzwaniem jest zatem stworzenie modelu na tyle zaawansowanego, aby pozwalał na symulację złożonych zjawisk zachodzących w mikrostrukturze materiału, jak np.: dyfuzja węgla i zmiana morfologii ziaren, przy jednoczesnym zachowaniu satysfakcjonujących czasów obliczeniowych. Dlatego za główny cel niniejszej rozprawy postawiono sobie opracowanie i zaimplementowanie numerycznego modelu przemian fazowych, bazującego na rozwiązaniu równania dyfuzji z ruchomą granicą międzyfazową. Założono, że w ten sposób opracowany model pozwoli przewidzieć rozkład stężenia węgla w austenicie, wielkość ziarna austenitu, kinetykę przemian fazowych oraz ułamki objętości i morfologię poszczególnych faz. Aby jednocześnie spełnić wymaganie niskich czasów obliczeń, zdecydowano się na implementację modelu w sposób zrównoleglony, dzięki czemu możliwe jest wykonanie symulacji z wykorzystaniem architektur HPC. Dodatkowo zdecydowano się wykorzystać koncepcję statystycznie podobnego reprezentatywnego elementu objętości (ang. *Statistically Similar Representative Volume Element* – SSRVE) w celu zredukowania złożoności

domeny obliczeniowej. Założenie to zostało zrealizowane poprzez przekształcenie skomplikowanych obrazów mikrostruktur materiałowych w prostsze obiekty, charakteryzujące się podobnymi cechami jak ich oryginalne odpowiedniki. Przygotowany model został następnie zintegrowany z symulacjami numerycznymi w skali makro oraz procedurą optymalizacji, umożliwiającą dobór parametrów cyklu temperatur w wybranych procesach przemysłowych. Ostatecznie model został zweryfikowany w oparciu o dane eksperymentalne, co pozwoliło potwierdzić słuszność zaprezentowanego rozwiązania.

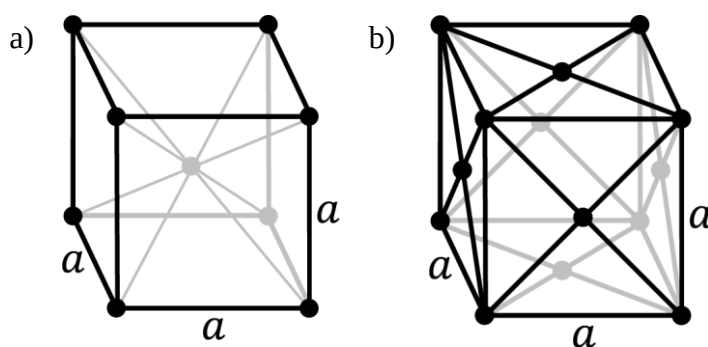
Fizyczne i chemiczne podstawy przemian fazowych przy nagrzewaniu i chłodzeniu oraz próby ich matematycznego sformalizowania przedstawiono w rozdziale 2. Przegląd wybranych, konwencjonalnych prób modelowania tych zjawisk został przedstawiony w rozdziale 3. Pozwoliło to, na postawienie tezy rozprawy w rozdziale 4. W rozdziale 5 przedstawiono przegląd metod wykorzystywanych do formalnego opisu mikrostruktury materiału oraz zaprezentowano wyniki analiz z wykorzystaniem wybranych współczynników geometrycznych i funkcji statystycznych. W ten sposób uzyskane dane referencyjne pozwoliły na konstrukcję elementu statystycznie reprezentatywnego. W rozdziale 6 przedstawiono szczegóły autorskiego modelu przemian przy nagrzewaniu i chłodzeniu stali dwufazowej (ang. *Dual Phase* – DP). W rozdziale 7 wykonano weryfikację eksperymentalną zaprezentowanego rozwiązania oraz pokazano możliwość zastosowania koncepcji SSRVE w modelowaniu przemian fazowych. Pracę wieńczy prezentacja praktycznego wykorzystania modelu do projektowania cykli laminarnego chłodzenia z wykorzystaniem technik optymalizacji, wyniki uzyskane dla architektur HPC oraz wnioski i potencjalne dalsze kierunki rozwoju przedstawionego rozwiązania. Uzyskane wyniki pozwolą na opracowanie zaleceń dla przemysłu i przyczynią się do polepszenia technologii wytwarzania elementów eksploatacyjnych ze stali dwufazowej oraz będą mogły być wykorzystane do dalszych badań nad mikrostrukturą tych stali.

2. Przemiany w stalach dwufazowych DP

Obróbka cieplna stali jest definiowana jako kontrolowane nagrzewanie i chłodzenie metali i stopów w celu dokonania zmian mikrostrukturalnych prowadzących do otrzymania produktu o specyficznych właściwościach. Obróbka cieplna przeprowadzana jest poniżej temperatury solidus stopu a jej celem jest zmiana właściwości stopu w stanie stałym. Możliwość kształtowania własności mechanicznych poprzez obróbkę cieplną w znacznym stopniu przyczyniła się do zwiększenia użyteczności metali i ich stopów w wielu różnych zastosowaniach począwszy od wyrobów płaskich dla sektora motoryzacyjnego po stal narzędziową. W rozdziale zostaną omówione zagadnienia związane z budową, właściwościami i przemianą fazową w stalach, ze szczególną uwagą poświęconą stalom podeutektoidalnym.

Stal to stop żelaza z węglem oraz innymi pierwiastkami stopowymi wpływającymi na jej właściwości oraz zastosowanie. Celem stosowania dodatków stopowych jest podniesienie wytrzymałości otrzymanego produktu. Węgiel, jako pierwiastek międzywęzłowy, choć wpływa na zwiększenie wytrzymałości stali, jest rzadko używany do utwardzania w fazie stałej ze względu na jego ograniczoną rozpuszczalność w żelazie- α .

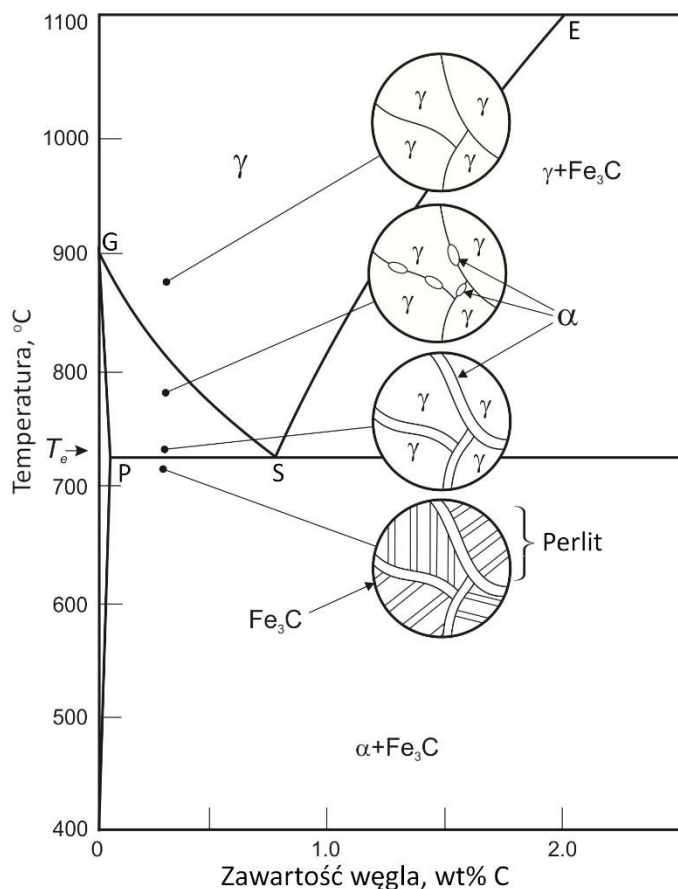
Ważniejszą rolą węgla jest jego wpływ na tworzenie się składnika strukturalnego zwanego austenitem. Żelazo jako pierwiastek alotropowy, ma możliwość zmiany struktury krystalicznej w ściśle określonych dla danego stopu temperaturach transformacji. Jedną z odmian krystalicznych żelaza jest forma regularna przestrzennie centrowana A2 (rysunek 1a), stabilna w zakresie temperatur pokojowych, aż do 912°C. Forma ta powszechnie jest znana jako ferryt- α . Austenit lub żelazo- γ jest fazą o sieci regularnej ściennie centrowanej A1 (rysunek 1b). Faza ta występuje w zakresie temperatur 912 – 1394°C. Podobnie jak żelazo- α , żelazo- δ posiada również strukturę A2, występuje jednak w temperaturach powyżej 1394°C.



Rysunek 1. Forma krystaliczna: A2 żelaza- α (a), A1 żelaza- γ (b).

Węgiel odgrywa kluczową rolę w procesach obróbki cieplnej, gdyż jego zawartość w stali rozszerza zakres temperatur w których austenit jest fazą stabilną. Wyższa zawartość węgla obniża temperaturę austenitizowania (przebudowy sieci krystalicznej do odmiany A1). W warunkach normalnych w temperaturze pokojowej, austenit nie może istnieć w stalach węglowych, obserwowany jest tylko w podwyższonych temperaturach w obszarze

wyznaczonym przez linie AGFED wykresu równowagowego żelazo-cementyt Fe_3C (rysunek 2).



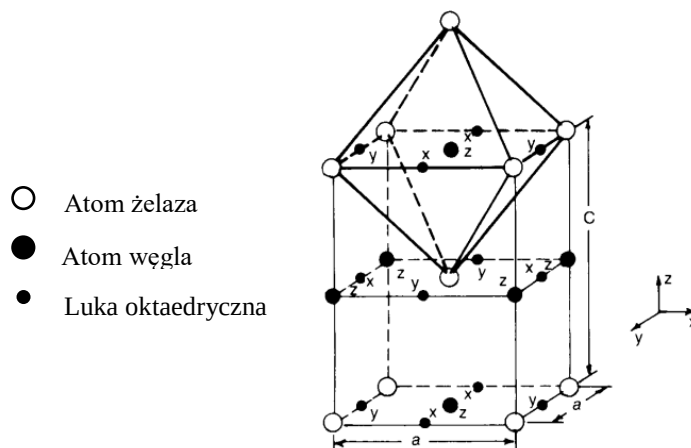
Rysunek 2. Fragment wykresu równowagi stabilnego układu żelazo-węgiel.

Austenityzowanie może być pierwszym etapem z wielu w przypadku obróbki cieplnej stali. Stanowi pierwszy etap zarówno cyklu ciągłego wyżarzania jak i hartowania. Na etapie chłodzenia mogą zachodzić złożone przemiany fazowe w zależności od przyjętych cykli zmian temperatury.

Węgiel jest praktycznie nierozpuszczalny w ferrycie, ponieważ międzywęzłowe przestrzenie sieci A2 są zbyt małe by pomieścić atomy węgla. Węgiel z łatwością rozpuszcza się w austenicie, na co pozwala sieć A1. Rozpuszczalność węgla w żelazie- α waha się od 0.008wt% w temperaturze -18°C do 0.022wt% w temperaturze 727°C . Dla kontrastu – maksymalna rozpuszczalność węgla w austenicie to około 2%.

Kiedy austenitzowana stal zostaje schłodzona do temperatury występowania stabilnego ferrytu, rozpuszczony w austenicie węgiel nie może przejść do sieci A2 ferrytu, co sprawia, że jest on wypychany z ziarna ferrytu podczas przemiany fazowej. Jeśli prędkość chłodzenia jest relatywnie mała, atomy węgla w procesie dyfuzyjnym łączą się z żelazem tworząc nową fazę – cementyt. Cementyt stanowi węglik żelaza o wzorze chemicznym Fe_3C . Na każdy atom węgla przypadają trzy atomy żelaza, co daje 25at.%C, co odpowiada stężeniu węgla na poziomie 6.7wt% w cementycie. Cementyt jest fazą o budowie krystalicznej rombowej. Nie jest to faza stabilna, gdyż w szczególnych warunkach węgiel w cementycie rozkłada się na grafit.

W przypadku intensywnego chłodzenia do temperatury pokojowej obserwowany jest inny rodzaj przemiany fazowej. W związku z ograniczonym czasem, atomy węgla nie mogą ulec pełnemu przemieszczeniu na mocy dyfuzji. W związku z czym, część (lub wszystkie) atomy węgla zostają uwięzione w siatce ferrytu powodując przesylenie. Stan taki powoduje zniekształcenie siatki krystalograficznej, co w efekcie prowadzi do transformacji do nowej fazy – martenzytu. Struktura siatki martenzytu jest podobna do struktury siatki A2, przy czym jedna z osi komórki elementarnej jest dłuższa niż dwie pozostałe. Struktura taka nazywana jest tetragonalnie przestrzennie centrowana (rysunek 3).



Rysunek 3. Struktura krystaliczna BCT martenzytu [1].

Martenzyt nie występuje na wykresach równowagi fazowej ze względu na swoją metastabilną strukturę uzyskiwaną przy bardzo szybkim chłodzeniu. Budowa martenzytu powoduje, że jest on fazą bardzo twardą. Hartowanie jest obróbką cieplną polegającą na nagrzaniu stali do temperatur występowania austenitu, austenitzowaniu i ochłodzeniu w celu uzyskania struktury martenzytycznej. Hartowanie ma na celu podniesienie twardości i wytrzymałości.

W procesach obróbki cieplnej stali wyróżnia się trzy podstawowe temperatury definiujące początek poszczególnych przemian fazowych (tzw. temperatury krytyczne):

- A_1 – Temperatura rozpoczęcia przemiany austenitycznej, temperatura eutektoidalna.
- A_3 – Temperatura pełnego zajścia przemiany austenitycznej w stalach podeutektoidalnych.
- A_{cm} – Temperatura pełnego zajścia przemiany austenitycznej w stalach nadeutektoidalnych.

Krytycznym czynnikiem w oszacowaniu wartości temperatur krytycznych dla przemian jest proces nagrzewania lub chłodzenia, dlatego w literaturze temperatury te najczęściej podawane są z indeksem *c* (nagrzewanie), *r* – (chłodzenie), *e* – (warunki równowagowe), np. temperatura rozpoczęcia oraz zakończenia przemiany austenitycznej w warunkach równowagowych oznaczone będą jako A_{e1} i A_{e3} . W praktyce, temperatury krytyczne przy chłodzeniu mają niższe wartości niż przy nagrzewaniu i w dużym stopniu zależą od

prędkości zmiany temperatury. Temperatury krytyczne wyznaczone są eksperymentalnie, choć pewne ich przybliżenie jest możliwe dla stali podeutektoidalnych [1]:

$$\begin{aligned}A_{c1} (^{\circ}C) &= 723 - 10.7(\%Mn) - 16.9(\%Ni) + 290(\%As) \\&\quad + 29.1(\%Si) + 16.9(\%Cr) + 6.4(\%W) \\A_{c3} (^{\circ}C) &= 910 - 203\sqrt{\%C} - 15.2(\%Ni) + 44.7(\%Si) \\&\quad + 104(\%V) + 31.5(\%Mo) + 13.1(\%W)\end{aligned}\tag{1}$$

Przemianę austenityczną można rozpatrywać w trzech podstawowych odmianach, w zależności od zawartości węgla w stali:

- stale eutektoidalne, o zawartości węgla bliskiej punktowi eutektyki S – 0.77wt.%,
- stale podeutektoidalne, o zawartości węgla poniżej punktu eutektycznego,
- stale nadeutektoidalne, o zawartości węgla powyżej punktu eutektycznego.

Z definicji, przemiana przebiegająca w punkcie eutektoidalnym pozwala na otrzymanie dwóch faz z jednej. W przypadku binarnego systemu żelazo-węgiel rozróżnia się trzy stabilne fazy w punkcie eutektyki: austenit, ferryt i cementyt. Bazując na fundamentalnej regule faz Gibbsa, eutektoid definiuje niezmienny punkt w układzie żelazo-węgiel.

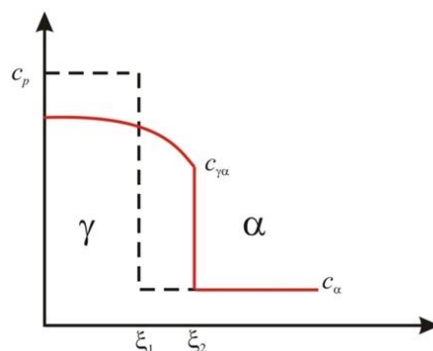
Klasycznym przykładem jest eutektoid o składzie 0.77%C. Kiedy, podczas schładzania austenit osiąga temperaturę 727°C następuje rozkład eutektoidu. W przypadku wolnego chłodzenia austenit ulega transformacji do ferrytu i cementytu, tworząc płytkową strukturę perlitu.

W przypadku stali podeutektoidalnych o niskiej (mniej niż 0.3%C) lub średniej (0.3 – 0.6%C) zawartości węgla obserwowane jest zarodkowanie niskowęglowych ziaren ferrytu- α na granicach ziaren austenitu. W miarę wzrostu ziaren ferrytu, węgiel dyfunduje z granicy nowo utworzonych ziaren ferrytu w głąb ziaren austenitu i wzbogaca je w węgiel.

W stalach nadeutektoidalnych o zawartości węgla powyżej 0.77wt%C, wraz ze wzrostem stężenia węgla w austenicie wypychane są atomy żelaza, co powoduje ostatecznie utworzenie osobnych ziaren cementytu po osiągnięciu limitu rozpuszczalności węgla w austenicie. Mikrostrukturę będą stanowić ziarna ferrytu i cementytu wtórnego.

2.1. Mechanizm przemiany α - γ (przy nagrzewaniu)

Podczas nagrzewania powyżej temperatury A_1 rozpoczyna się tworzenie austenitu na granicy ziaren ferrytu i cementytu. Kinetyka przemiany zależy od początkowej mikrostruktury (tj. poprzedniej obróbki cieplnej) oraz prędkości i czasu nagrzewania. Przemiana obejmuje zarodkowanie i wzrost ziaren austenitu. W początkowym etapie przemiany, ilość uformowanych ziaren austenitu jest duża ze względu na dużą przestrzeń, w której zarodkowanie może swobodnie zachodzić. W kolejnym etapie, następuje dyfuzyjny wzrost ziaren w osnowie ferrytycznej (rysunek 4) połączony z przebudową siatki krystalicznej A_2 ferrytu do A_1 austenitu.



Rysunek 4. Profil stężenia węgla w kierunku normalnym do granicy γ/α , ξ_1 , ξ_2 – położenie granicy w dwóch krokach czasowych, $c_{\gamma\alpha}$ – stężenie węgla na granicy austenit/ferryt, c_α – stężenie węgla w ferrycie.

Rozpoczęcie przemiany wymaga czasu na inkubację zarodków, po czym prędkość przemiany ulega znacznemu przyspieszeniu. W przemianie obserwowane jest monotoniczne zwiększenie prędkości transformacji wraz ze wzrostem temperatury. Prędkość przemiany rośnie również wraz z zawartością austenitu szcążkowego w mikrostrukturze, co obserwowane jest w szczególności przy wzroście austenitu w mikrostrukturze bainitycznej [2, 3]. Kinetyka przemiany zależy również od początkowej mikrostruktury. W przypadku mikrostruktury ferrytycznej, w której cementyt tworzą sferoidalne cząstki, przemiana zachodzi wolniej niż w przypadku mikrostruktury ferrytyczno-perlitycznej, gdzie ułożone blisko siebie płytki ferrytu i cementytu zmniejszają zasięg dyfuzji dla tworzącego się austenitu [4]

Po zakończeniu przemiany austenitycznej, kontynuowanie nagrzewania prowadzi do rozrostu ziaren austenitu. Na rozrost ziaren oddziałują również wydzielania drobnych węglikoazotków, które hamują ich wzrost. Jednak podniesienie temperatury ponad temperaturę rozpuszczalności tych wydzielen pozwala na uzyskanie mikrostruktury o większych ziarnach. Większość przemiany austenitycznej jest kontrolowana przez dyfuzję, jednak w przypadku intensywnego nagrzewania przemiana może być kontrolowaną mobilnością granicy.

2.2. Mechanizm przemiany $\gamma-\alpha$ (przy chłodzeniu)

Przemiana fazowa austenitu w ferryt w stopach żelaza odgrywa kluczową rolę w hutnictwie stali, gdyż kontroluje końcową morfologię mikrostruktury i skład fazowy a tym samym wpływa bezpośrednio na własności stali.

Przemiana ferrytyczna zachodzi gdy austenit o odpowiednim składzie chemicznym zostanie ochłodzony do temperatury poniżej A_{r3} . Przemiana $\gamma-\alpha$ należy do grupy przemian dyfuzyjnych. W mechanizmie przemiany wyróżnić można przebudowę sieci krystalicznej Fe- γ w Fe- α i zachodzącą równocześnie dyfuzję węgla, która jest uwarunkowana dużymi różnicami w jego rozpuszczalności w austenicie i ferrycie. Przemiana odbywa się przez zarodkowanie oraz wzrost ziaren ferrytu. Postęp obu procesów decyduje o prędkości przemiany. Siłą pędzą procesy zarodkowania jest z różnica energii swobodnych Gibbsa pomiędzy fazami γ i α . Na etapie zarodkowania pojawiają się nowe granice faz, które oddzielają ferryt od rodzimego austenitu. Prędkość migracji granicy ziaren jest determinowany przez intensywność dyfuzji węgla oraz przez

mobilność granicy. Silny wpływ na morfologię mikrostruktury ma typ zderzeń pomiędzy rosnącymi ziarnami ferrytu. Przemiana γ - α charakteryzuje się następującymi cechami:

- brak relacji pomiędzy źródłową i wynikową orientacją sieci krystalograficznej ziaren,
- wystąpienie zarodkowania i wzrostu ziaren nowej fazy,
- niezmienność składowa – oznacza to, że zachowany jest skład chemiczny źródłowej jak i pochodnej fazy.

W zależności od sposobu w jakim zachodzi zarodkowanie mogą występować dwa typy kinetyki przemiany (normalna i anormalna). Normalna przemiana ma miejsce w przypadku wystąpienia pojedynczego maksimum w ilości przemienionego ferrytu w funkcji stopnia przemiany. Anormalna przemiana cechuje się więcej niż jedną wartością maksymalną prędkości przemiany w funkcji przemienionego ułamka fazy [5, 6]. Anormalną przemianę tłumaczy się powtarzającym się zarodkowaniem (tzw. zarodkowaniem autokatalicznym) na granicy faz γ/α .

W ogólnym rozumieniu, prędkość przemiany może być kontrolowana dwoma procesami: dyfuzją węgla i mobilnością granicy międzyfazowej. Redystrybucja węgla za pomocą dyfuzji z frontu przemiany do ziaren austenitu prowadzi do wzrostu ziaren sterowanego dyfuzją.

Niepomijalnym jest również uwzględnienie stanu odkształcenia w kinetyce zachodzenia przemiany. Naprężenia w materiale mogą być skutkiem działania zewnętrznych sił lub wewnętrznych (naprężenia rezydualne). Energia odkształcenia elastycznego i plastycznego oraz różnice w objętościach faz mają obserwowalny wpływ na prędkość granicy fazowej [7-9].

2.2.1. Zarodkowanie

Zarodkowanie w stanie stałym ma charakter heterogeniczny. Zarodki pojawiają się w miejscach, charakteryzujących się wysoką energią, takich jak: punkty potrójne, granice ziaren, czy dyslokacje. Czynnikiem sprzyjającym powstawaniu zarodków jest obniżenie bariery zarodkowania: w pierwszym przypadku na skutek eliminacji części istniejącej granicy ziaren, w drugim na skutek znoszenia się odkształceń sprężystych osnowy z polem dyslokacji.

Zmiana energii swobodnej ΔG towarzysząca powstawaniu zarodka związana jest przede wszystkim z wydatkiem energii na tworzenie nowych powierzchni międzyfazowych, a w przypadku przemiany w stanie stałym, dodatkowo na powstanie odkształceń sprężystych, które kompensują różnice objętości. Wielkość energii swobodnej powierzchniowej zależy od powierzchni zarodka oraz napięcia międzyfazowego. Kształt zarodka jest wynikiem kompromisu pomiędzy energią odkształceń sprężystych i energią powierzchniową.

W literaturze wyróżnione są różne typy zarodkowania, m.in. zarodkowanie ciągłe, zarodkowanie na bazie istniejących zarodków, zarodkowanie Avramiego czy zarodkowanie mieszane [10].

Termin nasycenie miejsc zarodkowania (ang. *site saturation*) jest używany w przypadkach, gdy ilość zarodków nie ulega zmianie podczas przemiany. Oznacza to, że

N^* zarodków przypada na jednostkę objętości fazy podstawowej w czasie $t=0$ i rozpoczyna wzrost od tego czasu. W takim przypadku prędkość zarodkowania może być dana:

$$N(t) = N^* d(t-0) \quad (2)$$

gdzie δ odnosi się do funkcji Diraca w postaci:

$$\begin{cases} \delta(t-0) = 0 & t \neq 0 \\ \int_0^t \delta(t-0) = 1 & t = 0 \end{cases} \quad (3)$$

Zarodkowanie autokatalityczne jest konsekwencją odmiennej objętości fazy macierzystej i pochodnej, co prowadzi do wzrostu energii odkształcenia fazy macierzystej przed postępującym frontem przemiany. Przemianie austenit-ferryt towarzyszy znaczny wzrost energii odkształcenia wywołanej zmienną gęstością faz. Wzrost ziaren ferrytu może generować wady w osnowie austenitu. Odkształcony austenit na froncie przemiany ferrytycznej pozwala na łatwiejsze zarodkowanie nowych ziaren ferrytu niż nieodkształcony. Stąd też możliwe jest ponowne zarodkowanie ferrytu na froncie przemieszczającej się przemiany ferrytycznej i znaczny wzrost prędkości zarodkowania prowadzący do anormalnej kinetyki przemiany spowodowanej zarodkowaniem autokatalitycznym. Ponowne zarodkowanie może być matematycznie opisane zmienną ilością punktów zarodkowania N , daną w postaci [11]:

$$N = p f_p \quad (4)$$

gdzie: p – współczynnik autokatalityczny, f_p – ułamek fazy przemienionej.

Relacja (4) zawyża całkowitą ilość punktów zarodkowania na pewnym etapie wzrostu, ponieważ ciągły wzrost istniejących ziaren pochłania ziarna zarodkowane autokatalitycznie, czego nie uwzględnia relacja. Rozwiązaniem jest wprowadzenie współczynnika korygującego [12] w postaci zależności gęstości zarodkowania od stopnia przemiany w postaci:

$$\frac{f_{tr} - f_p}{f_{tr} - f_{st}} \quad (5)$$

gdzie: f_{st} i f_{tr} – ułamki przemienionej fazy na początku i końca etapu wzmożonego zarodkowania autokatalitycznego. Uwzględniając zależność (5), ilość zarodków na jednostkę objętości w zarodkowaniu autokatalitycznym można wyrazić w postaci:

$$N = p \left(f_p - f_{st} \right) \left(\frac{f_{tr} - f_p}{f_{tr} - f_{st}} \right) \quad (6)$$

Praktycznie, najczęściej obserwowane jest zarodkowanie pośrednie: znaczna ilość zarodków jest obecna przed startem przemiany, kolejne formują się podczas jej zajścia. Na bazie tych obserwacji zdefiniowano pojęcie zarodkowania mieszanego, uwzględniającego nasycenie miejsc zarodkowania oraz zarodkowanie autokatalityczne [10, 13]:

$$N = N^* + p(f_p - f_{st}) \left(\frac{f_{tr} - f_p}{f_{tr} - f_{st}} \right) \quad (7)$$

Podstawowym zadaniem modelowania przemian fazowych jest zdefiniowanie prędkości zarodkowania w funkcji temperatury i składu chemicznego.

2.2.2. Wzrost

Rozróżniane są dwa typy wzrostu ziaren ferrytu – sterowane dyfuzją oraz sterowane mobilnością granicy. W czasie t , objętość Y nowej fazy zarodkowanej w czasie τ może być wyrażona relacją [10, 13]:

$$Y(t_0, t) = g \left(\int_{t_0}^t v_p d\tau' \right)^{\frac{d}{m}} \quad (8)$$

gdzie: g – współczynnik geometryczny (dla ziaren sześciennych $g=1$, dla ziaren sferycznych $g=4\pi/3$), v_p – prędkość granicy, m – parametr wzrostu ziaren (dla wzrostu sterowanego mobilnością granicy $m=1$, dla wzrostu dyfuzyjnego $m=2$), d – wymiar wzrostu.

W przypadku wzrostu sterowanego granicą, prędkość granicy dana jest zależnością [14]:

$$v_p(T(t)) = M \exp \left(1 - \frac{\Delta G}{RT(t)} \right) = v_0 \exp \left(- \frac{\Delta G^a}{RT(t)} \right) \exp \left(1 - \exp \left(\frac{\Delta G}{RT(t)} \right) \right) \quad (9)$$

gdzie: M – zależna od temperatury mobilność granicy, v_0 – czynnik wzrostu (często zwany również czynnikiem wzrostu niezależnym od temperatury), ΔG^a – energia aktywacji atomów potrzebna do pokonania granicy międzyfazowej, ΔG – różnica w energii Gibbsa fazy rodzimej i pochodnej.

Dla dużych przechłódzeń $|\Delta G|$ jest znacznie większe niż RT przez co relacja (9) upraszcza się do:

$$v_p(T(t)) = M = v_0 \exp \left(- \frac{\Delta Q_G}{RT(t)} \right) \quad (10)$$

gdzie: $\Delta Q_G (= \Delta G^a)$ – energia aktywacji wzrostu, v_0 – niezależna od temperatury prędkość granicy. Dla małych przechłódzeń, siła pędna $|\Delta G|$ jest znacznie mniejsza niż RT , co upraszcza równanie (9) do postaci:

$$v_p(T(t)) = M (-\Delta G(T(t))) \quad (11)$$

Przedstawione w rozdziale podwaliny fizyczne i matematyczne wzrostu ferrytu w stalach podeutektoidalnych są wykorzystywane w bardziej zaawansowanych modelach predykcyjnych. Wybrane z nich zostały przedstawione w rozdziale 3.

2.3. Mechanizm przemiany martenzytycznej

Martenzyt jest fazą metastabilną tworzącą się przy nagłym chłodzeniu austenitu. Proces przemiany martenzytycznej jest procesem bezdyfuzyjnym, dlatego wynikiem jest nowa

faza o takim samym składzie chemicznym co macierzysty austenit. W związku z praktycznym brakiem zjawisk dyfuzyjnych, spowodowanym nagłym spadkiem temperatury, atomy węgla nie segregują pomiędzy ferrytem i cementytem i zostają uwięzione w strukturze A2 tworząc nową fazę. Rozpuszczalność węgla w strukturze A2 austenitu jest znacznie przekroczona podczas tworzenia się martenzytu, co prowadzi do zniekształcenia się komórki elementarnej do formy BCT. Martenzyt jest fazą metastabilną – oznacza to, że nagrzanie do temperatury, która pozwoli atomom węgla na większą mobilność sprawi, że węgiel zacznie dyfundować tworząc węgliki. W rezultacie tetragonalność sieci zostaje zmniejszona, a martenzyt rozkłada się do mieszaniny ferrytu i cementytu. Transformacja martenzytu do innych faz jest również możliwa w procesie odpuszczania. Do wystąpienia przemiany poza osiągnięciem tzw. krytycznej prędkości chłodzenia, istotna jest jeszcze temperatura. Przemiana zachodzi umownie w zakresie temperatur $M_s - M_f$, których wartości ściśle korelują ze składem chemicznym stopu i stężeniem węgla. Większość relacji pozwalających przybliżyć temperaturę M_s ma charakter empiryczny wyrażony zależnością uwzględniającą wpływ pierwiastków stopowych:

$$M_s (^{\circ}\text{C}) = k_0 + \sum_i k_i w_i \quad (12)$$

gdzie: k_0 – temperatura M_s czystego żelaza, w_i – zawartość i -tego pierwiastka w stopie, k_i – współczynnik zawartości i -tego pierwiastka. Grupę powszechnie używanych równań aproksymujących temperaturę M_s zebrano w tabeli 1.

Tabela 1. Zestawienie empirycznych równań aproksymujących temperaturę M_s .

Autor	Rok	Równanie	Literatura
Payson, Savage	1944	$M_s (^{\circ}\text{C}) = 930 - 570C - 60Mn - 50Cr - 30Ni - 20Si - 20Mo - 20W$	[15]
Carapella	1944	$M_s (^{\circ}\text{F}) = 925 (1 - 0.62C)(1 - 0.092Mn)(1 - 0.033Si)(1 - 0.045Ni)(1 - 0.07Cr)(1 - 0.029Mo)(1 - 0.018W)(1 - 0.120Co)$	[16]
Rowland, Lyle	1946	$M_s (^{\circ}\text{F}) = 930 - 600C - 60Mn - 50Cr - 30Ni - 20Si - 20Mo - 20W$	[17]
Grange, Stewart	1946	$M_s (^{\circ}\text{F}) = 1000 - 650C - 70Mn - 70Cr - 35Ni - 50Mo$	[18]
Nehrenberg	1946	$M_s (^{\circ}\text{F}) = 930 - 540C - 60Mn - 40Cr - 30Ni - 20Si - 20Mo$	[19]
Steven, Haynes	1956	$M_s (^{\circ}\text{C}) = 561 - 474C - 33Mn - 17Cr - 17Ni - 21Mo$	[20]
Andrews	1965	$M_s (^{\circ}\text{C}) = 539 - 423C - 30.4Mn - 12.1Cr - 17.7Ni - 7.5Mo$	[21]
Andrews	1965	$M_s (^{\circ}\text{C}) = 512 - 453C - 16.9Ni + 15Cr - 9.5Mo + 217(C)^2 - 71.5(C)(Mn) - 67.6(C)(Cr)$	[21]
Pietrzyk	2016	$M_s (^{\circ}\text{C}) = 409.058 - 21.44C$	[22]
Trzaska	2016	$M_s (^{\circ}\text{C}) = 541 - 401C - 36Mn - 10.5Si - 14Cr - 18Ni - 17Mo$	[23]

Bardziej złożone zależności rozwijają czysto chemiczne relacje empiryczne o wpływ wielkości ziarna austenitu oraz efekt umocnienia ziaren austenitu [24]. W wielu przypadkach jednak relacje empiryczne nie są wystarczające i do określenia temperatury początku przemiany wykorzystuje się bardziej złożone modele. Przykładem mogą być modele oparte o sieci neuronowe, charakteryzujące się wysokimi zdolnościami predykcyjnymi [25-28]. Temperatura M_f również może być wyrażona jako funkcja zależna od zawartości węgla w stali. Dokładne wyznaczenie temperatury M_f jest jednak niezwykle trudne, gdyż wiąże się z koniecznością eksperymentalnego wyznaczenia momentu przemiany ostatniego nieprzemienionego fragmentu austenitu [29]. W przypadku stopów z zawartością węgla większą niż 0.3wt% wartość temperatury M_f jest mniejsza niż temperatura pokojowa.

Kinetykę przemiany martenzytycznej można przedstawić relacją w postaci funkcji zależnej od stopnia przechłodzenia poniżej temperatury startu przemiany. Dla stali o zawartości 1.1wt% węgla [30]:

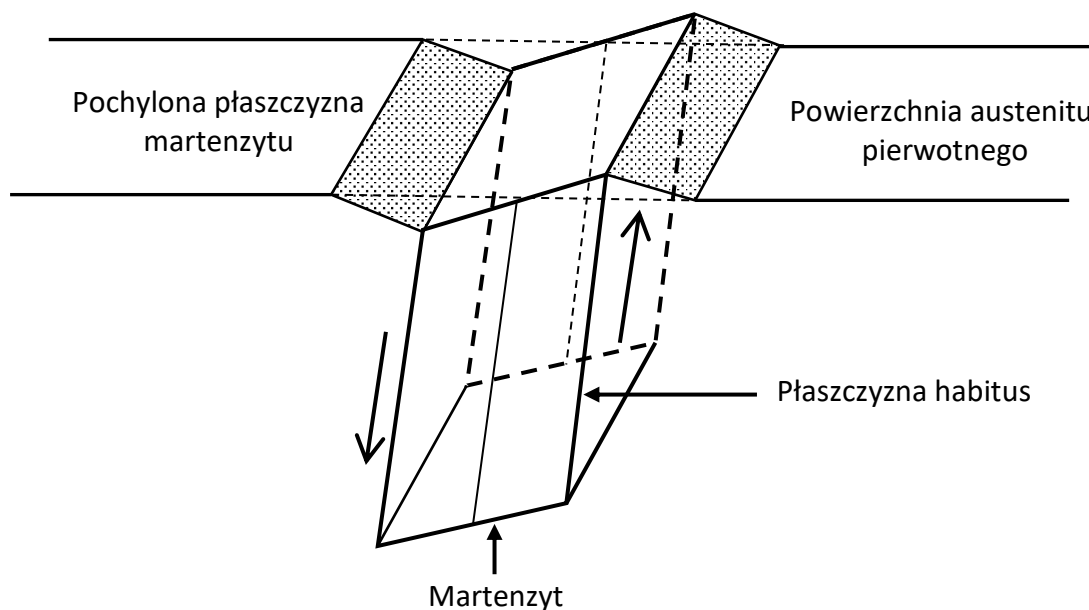
$$f_m = 1 - 6.96 \cdot 10^{-15} (455 - \Delta T)^{5.32} \quad (13)$$

oraz dla stopów o zawartości węgla w zakresie 0.37 – 1.1wt% [31]:

$$f_m = 1 - \exp(-1.10 \cdot 10^{-2} \Delta T) \quad (14)$$

gdzie: f_m – ułamek objętości martenzytu, ΔT – temperatura przechłodzenia poniżej M_s . Analiza porównawcza obu modeli w stosunku do danych eksperymentalnych wskazuje na znaczne rozbieżności predykcyjne przy dużych stopniach przechłodzenia [1]. Relacja (14) jest obecnie uważana za najwierniejsze przybliżenie kinetyki przemiany ze względu na zastosowanie badań opartych o tomografię rentgenowską (w odróżnieniu do mikroskopii optycznej wykorzystanej w [20, 30]).

Martenzyt tworzy się za pośrednictwem mechanizmu ścinania. Wiele atomów żelaza przemieszcza się wspólnie i niemal jednocześnie, co stoi w kontraście do mechanizmu ruchu atom-za-atomem poprzez granicę w przemianach dyfuzyjnych. Poprzez mechanizm ścinania nowopowstały kryształ martenzytu jest przesunięty częściowo nad i częściowo pod powierzchnią austenitu. Tak więc pierwotnie pozioma powierzchnia fazy macierzystej zostaje obrócona lub przechylona w nowym kierunku przez przemianę ścinającą (rysunek 5).

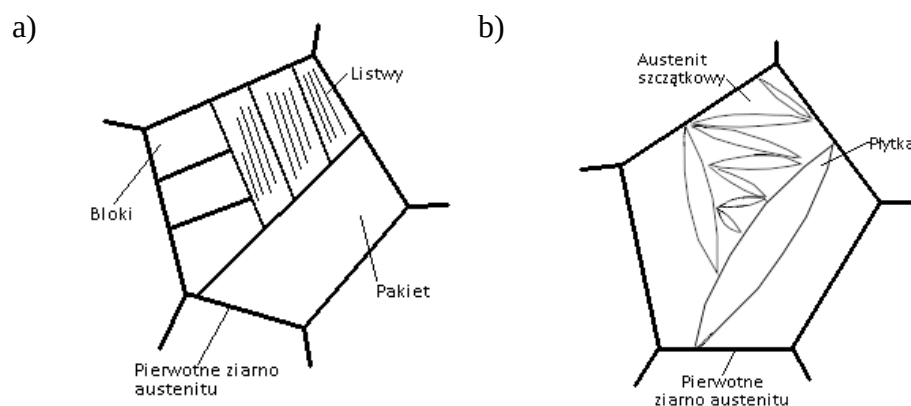


Rysunek 5. Schemat ścinania i obracania powierzchni przy tworzeniu płytki martenzytu.

Nachylenie powierzchni jest ważną cechą charakterystyczną przemian zachodzących mechanizmem ścinającym, które nie są obserwowane w przemianach dyfuzyjnych, gdzie powierzchnia nowej fazy jest równoległa do powierzchni fazy rodzimej. Przemianie martenzytycznej towarzyszy zauważalne odkształcenie plastyczne austenitu które przenosi się na tworzącą się płytkę martenzytu. Ostatecznie ograniczenia w fazie rodzimej ograniczają długość listew martenzytu i dalszej przemianie musi towarzyszyć zarodkowanie nowych płytek.

W idealnym przypadku kryształy martenzytu mają płaszczyzny styczne do rodzimego austenitu (zależności Kurdimowa-Sachsa). Preferowane płaszczyzny krystalograficzne austenitu, w których tworzyć się mogą kryształy martenzytu, nazywane są płaszczyznami habitus i są różne dla różnych stopów.

Wysoką twardość martenzyt zawdzięcza sieci BCT, która jest znacznie rzadziej upakowana atomami niż sieć austenitu. Z faktem tym, związane jest również zwiększenie objętości i zniekształcenie siatki krystalograficznej po osiągnięciu temperatury M_s , co prowadzi do zwiększenia wytrzymałości oraz twardości poprzez blokadę przemieszczeń dyslokacji. Podczas chłodzenia, osiągnięcie temperatury M_f kończy przemianę, a pozostały austenit uznawany jest za austenit szczątkowy. Zależność wartości temperatury M_s od stężenia węgla sprawia, że martenzyt może występować w formie płytkowej (rysunek 6b) jak i liściastej (rysunek 6a). Martenzyt płytkowy odnajdywany jest w stali o stężeniu węgla ponad 1.0wt%, a liściasty występuje w stalach o stężeniu węgla nie przekraczającym wartości 0.6wt%. W zakresie stężeń 0.6 – 1.0wt% występować może mieszanina obu typów morfologii [32].



Rysunek 6. Schemat budowy martenzytu listwowego (a) oraz płytkowego (b).

W rozdziale przedstawiono zarys metalurgicznych aspektów wybranych przemian fazowych w stalach przy nagrzewaniu i chłodzeniu oraz empiryczne wzory pozwalające przewidzieć częściowo ich aspekty (jak temperatury startu i końca). Należy zwrócić uwagę, że jest to opracowanie dość ogólne i skupia się tylko na najważniejszych aspektach wybranych przemian z naciskiem na przemiany zachodzące w stalach podeutektoidalnych. Kinetyka przemian zależy od wielu czynników: składu chemicznego, historii odkształcenia, zastosowanego schematu obróbki termicznej – powoduje to, że przewidywanie składu fazowego stopu stanowi spore wyzwanie, a istniejące zależności potrafią być niewystarczające w złożonych przypadkach. Właściwości stali zależą w dużej mierze od składu fazowego i morfologii mikrostruktury, dlatego możliwość ich prognozowania stała się kluczowa, przy projektowaniu nowych stopów oraz kształtowaniu właściwości istniejących.

3. Modelowanie przemian fazowych w stalach

Rozdział zawiera przegląd najpopularniejszych metod modelowania przemian fazowych w stalach. W zależności od celu przeprowadzenia modelowania jak i oczekiwanych typów wyników może zostać wykorzystany szeroki zakres technik modelowania, różniących się zarówno możliwościami predykcyjnymi, jak i prędkością obliczeń. Podstawowy podział technik numerycznych obejmuje metody wykorzystujące równania empiryczne, metody bazujące na rozwiązaniu równań różniczkowych oraz modele wykorzystujące wirtualną reprezentację mikrostruktur. W opracowaniu skupiono się jedynie na modelach mikrostruktury (kinetyka przemiany i morfologia) z pominięciem modeli zjawisk towarzyszących przemianom fazowym, takich jak naprężenia indukowane zmianą objętości.

3.1. Modele przemian fazowych wykorzystujące równania empiryczne

W obliczeniach inżynierskich, gdzie przede wszystkim kluczowa jest prędkość prowadzonych obliczeń, a od modeli oczekuje się głównie dostarczenia podstawowych informacji takich jak udział poszczególnych faz czy kinetyka przemiany, wykorzystywane są modele wykorzystujące równanie Avramiego [33-35], które w podstawowej formie ma postać:

$$X = 1 - \exp(-kt^n) \quad (15)$$

gdzie: X – ułamek objętości nowej fazy, k , n – współczynniki dobierane eksperymentalnie.

Pierwsze równanie Avramiego bazuje na założeniu równomiernego rozkładu zarodków. Konsekwencją tego założenia jest stały stosunek pomiędzy tempem wzrostu ziaren a prędkością zarodkowania. Dodatkowo, równanie jest prawdziwe w warunkach izotermicznych, gdyż nie uwzględnia zmiany temperatury. Warunki takie nazywane są warunkami izokinetycznymi. Założenia te ograniczają praktyczną stosowalność równania tylko do nielicznych przypadków co sprawiło, że nie miało ono w swojej bazowej formie zastosowania do większości procesów metalurgicznych, w których zachodziły przemiany fazowe.

Dalszy rozwój metody związany był z zastosowaniem zasady addytywności Sheila [36] w celu umożliwienia zastosowania równań do szerokiej gamy procesów. W uogólnieniu, miejsca zarodkowania stają się nasycone we wczesnym okresie przemiany i dalszy przebieg przemiany jest ściśle związany ze wzrostem ziaren. Obserwacja ta doprowadziła do opracowania warunku koniecznego do zastosowania zasady addytywności:

$$\frac{G(T)t_{0.5}}{D_\gamma} < 0.5 \quad (16)$$

gdzie: T – temperatura, D_γ – wielkość ziarna austenitu, $t_{0.5}$ – czas potrzebny do zajęcia 50% przemiany. Reguła addytywności pozwoliła na wprowadzenie do modelu czasu niezbędnego na rozpoczęcie zarodkowania nowej fazy. Zgodnie z regułą addytywności, przemiana rozpoczyna się wtedy, gdy suma poszczególnych ułamków osiągnie wartość równą 1:

$$\int_0^{\tau} \frac{dt}{\tau_n(T)} = \int_0^{\tau} \frac{1}{\tau_n(T)} \frac{dT}{dT} = \int_0^{\tau} \frac{1}{v\tau_n(T)} dT = 1 \quad (17)$$

gdzie: $\tau_n(T)$ - czas inkubacji w stałej temperaturze T , v – prędkość chłodzenia.

Głównym predykatem możliwości stosowania reguły addytywności, jest przesłanka, że postęp danego zjawiska w dowolnym momencie zależy tylko od temperatury. W równaniu (15) tylko współczynnik k jest zależny od temperatury, zatem z uwzględnieniem zasady addytywności równanie przybiera formę:

$$X = 1 - \exp \left[- \int_{T_0}^T \frac{k(T)^{1/n}}{v} dT \right] \quad (18)$$

gdzie: T_0 – temperatura końca inkubacji. Współczynnik k jest zwykle wyrażony w postaci funkcji zależnej od temperatury, w taki sposób by jej zmiana odzwierciedlała zachowanie diagramów CTP. Dobór funkcji k jest zwykle ściśle związany z modelowanym procesem. Donnay [37] zaproponował formę funkcji dla przemiany ferrytycznej w postaci:

$$k = k_{\max} \exp \left[- \left(\frac{T - T_{\text{nose}}}{k_1} \right)^{k_2} \right] \quad (19)$$

gdzie: $k_{\max}$, T_{nose} , k_1 , k_2 – współczynniki dobierane na podstawie diagramów CTP, wielkości ziarna austenitu i temperatury krytycznej.

Pietrzyk i Kuziak [38] zaproponowali następujące postacie funkcyjne współczynnika k do modelowania przemian w procesach laminarnego chłodzenia oraz ciągłego wyżarzania

$$k = \frac{k_3}{D_{\gamma}^{k_4}} \exp(k_2 - k_1 T) \quad (20)$$

$$k = k_3 \exp(k_2 - k_1 T) \quad (21)$$

gdzie współczynniki k_1 - k_4 są dobierane w procesie analizy odwrotnej dla prób dylatometrycznych.

Kolejną grupę modeli stanowią modele wykorzystujące rozwiązania równań różniczkowych, co znacząco przybliża je do fizyki procesu a zarazem pozwala na szeroką aplikowalność do zagadnień ze zmieniającą się temperaturą. Suehiro i Senuma zaproponowali w [39, 40] model przemiany ferrytycznej złożony z dwóch równań, odpowiednio dla zarodkowania i wzrostu (22) oraz wysycenia punktów zarodkowania (23):

$$\frac{dX_f}{dt} = a_1 (SIG^3)^{0.25} \left[\ln \left(\frac{1}{1 - X_f} \right) \right]^{0.75} (1 - X_f) \quad (22)$$

$$\frac{dX_f}{dt} = a_2 \cdot 10^{-12} \exp \left(\frac{a_3}{RT} \right) \frac{6}{D_{\gamma}} G (1 - X_f) \quad (23)$$

gdzie: X_f – ułamek przemienionej fazy, I – prędkość zarodkowania, G – prędkość przemiany, S – pole granic międzyfazowych, D_γ – wielkość ziarna austenitu, R – stała gazowa, T – temperatura.

Poszczególne współczynniki modelu zostały przedstawione za pomocą zależności:

$$\begin{aligned} I &= \frac{D}{\sqrt{\hat{T}}} \exp\left(\frac{-a_4 10^9}{R\hat{T}\Delta G^2}\right) \\ G &= \frac{1}{2r} D \frac{C_{\gamma\alpha} - C_\gamma}{C_\gamma - C_\alpha} \\ S &= \frac{6}{D_\gamma^4} \end{aligned} \quad (24)$$

gdzie: D – współczynnik dyfuzji węgla w austenicie, C_γ – średnie stężenie węgla w austenicie, C_α – stężenie węgla w ferrycie, C_0 – początkowa zawartość węgla w stali, $C_{\gamma\alpha}$ – stężenie węgla na granicy ferryt-austenit, ΔG – energia swobodna Gibbsa, r – promień krzywizny rosnącej fazy, $\hat{T}$ – temperatura bezwzględna.

Bardziej fizyczny model przemian został zaproponowany przez Leblonda i Devaux'a w [41], którzy wykazując liczne problemy z możliwością aplikacji wcześniejszych modeli w zmiennych warunkach termicznych zaproponowali równanie różniczkowe:

$$\frac{dX}{dt} = \frac{F_{fT} - F_{f\max}}{\tau(T)} \quad (25)$$

gdzie: X – ułamek objętości ferrytu, F_{fT} – równowagowy ułamek objętości ferrytu w temperaturze T , $F_{f\max}$ – maksymalny udział ferrytu w stali, τ – charakterystyczny czas przemiany w stałej temperaturze T .

Pomimo swojej prostoty, model wykazuje satysfakcjonujące możliwości predykcyjne dla szerokiej skali prędkości zmian temperatury. W pierwotnej formie model nie uwzględnia wpływu wielkości ziarna austenitu. Uwzględnienie tego wpływu staje się kluczowe w przypadku modelowania przemiany bainitycznej, której zakres temperaturowy zwiększa się wraz ze spadkiem czasu austenitizowania. Konieczne jest więc powiązanie równania (25) z modelem wzrostu ziarna austenitu:

$$\frac{d}{dt}(\bar{D}) = C \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) - \frac{X}{F_{f\max}} \bar{D}^a \quad (26)$$

gdzie: $\bar{D}$ – średnia wielkość ziarna, C , Q – współczynniki, R – stała gazowa

Model wykorzystujący równania teorii sterowania [42] stanowi rozwinięcie idei modelu Leblonda. Podstawową motywacją autorów modelu była przesłanka, że kinetyka transformacji fazowej jest podobna do odpowiedzi czwórnika elektrycznego drugiego rzędu w teorii sterowania. Koncepcja modelu zakłada wykorzystanie równania różniczkowego do opisu stanu przejściowego pomiędzy dwoma stanami równowagi fazowej. Model wprowadza do równania (25) człon odpowiedzialny za bezwładność drugiego stopnia, realizowany przez dwie stałe czasowe (B_1 , B_2):

$$B_1^2 \frac{d^2 X}{dt^2} + B_2 \frac{dX}{dt} + X = f(T) \quad (27)$$

$$f(T) = \frac{F_{fr}}{F_{f \max}}$$

gdzie: B_1 – parametr odpowiedzialny jest za początkowe opóźnienie rozpoczęcia przemiany z powodu zarodkowania i wyrażony został w postaci:

$$B_1 = a_1 \exp[-a_2 (A_{e3} - T)] \quad (28)$$

Parametr B_2 odpowiada za wzrost nowej fazy i może zostać skorelowany ze współczynnikiem dyfuzji oraz mobilnością granicy:

$$B_2 = \left(a_3 \exp \left(- \left(\frac{a_4 - T}{a_5} \right)^2 \right) \right)^{-1} \quad (29)$$

gdzie: $a_1 - a_5$ – współczynniki dobierane w analizie odwrotnej dla badań dylatometrycznych.

Model wykazał się dobrymi możliwościami predykcyjnymi w przypadku modelowania przemiany ferrytycznej w procesach charakteryzujących się zmienną temperaturą.

Historycznie, pierwszą próbą modelowania przemian bezdyfuzyjnych była praca zespołu Koistinen i Marburger [43], którzy zaproponowali zależność empiryczną ułamka austenitu szczątkowego w funkcji temperatury. Model został opracowany poprzez aproksymację wyników badań laboratoryjnych przeprowadzonych na stopach żelaza i węgla bez dodatków stopowych:

$$X_\gamma = \exp \left[-1.10 \cdot 10^{-2} (M_s - T_q) \right] \quad (30)$$

$$M_s > T_q > -80^\circ\text{C}$$

gdzie: X_γ – ułamek austenitu resztkowego, T_q – najniższa temperatura osiągnięta w procesie hartowania, M_s – temperatura rozpoczęcia przemiany martenzytycznej.

3.2. Modele przemian fazowych wykorzystujące wirtualną reprezentację mikrostruktur

Modele oparte o wirtualną reprezentację mikrostruktury są modelami dyskretnymi, różniącymi się przede wszystkim sposobem przedstawienia samej mikrostruktury, tj. opisu granic ziaren. W grupie tych modeli wyróżniamy modele implicit (jawne) i explicit (niejawne). Modele jawne ujmują mikrostrukturę w sposób jednoznaczny, przypisując każdy punkt przestrzeni obliczeniowej do określonego ziarna i fazy. Do grupy tych modeli należą modele oparte o automaty komórkowe i metodę śledzenia frontu. W modelach niejawnych ziarna reprezentowane są przez funkcję pola, a granica między ziarnami stanowi obszar w którym funkcja ta się zmienia lub przyjmuje założone wartości. Do grupy tych modeli należą rozwiązania oparte o metodę pola faz czy metodę poziomic.

Modele oparte o automaty komórkowe sprowadzają się do podstawowych kroków: dyskretyzacja przestrzeni za pomocą komórek o regularnych kształtach, określenie

otoczenia (najbliższych sąsiadów) każdej z nich, określenie stanu początkowego i dopuszczalnych stanów jakie mogą przyjmować oraz reguł przejścia. Reguła przejścia określa przesłanki oraz sposób w jaki następuje zmiana stanu komórki. Przesłanki te mogą zależeć zarówno od stanu samej komórki, stanu jej sąsiadów jak i pewnych czynników zewnętrznych lub wartości losowych. W typowej implementacji modelu opartego o automaty komórkowe stan wszystkich komórek zmienia się synchronicznie wg. przyjętych reguł w danej chwili czasowej. Wyjątkiem są automaty komórkowe stochastyczne [44] oraz asynchroniczne [45]. Ze względu na regularność dyskretyzacji przestrzeni obliczeniowej, często w regułach przejścia wykorzystuje się dodatkowo aproksymację pewnych globalnych zmiennych, np. za pomocą metody różnic skończonych (FDM).

Teoria automatów z której bezpośrednio wywodzi się koncepcja automatów komórkowych została zaprezentowana w 1930 [46]. Historycznie, pierwsze prace na temat automatów komórkowych przypisuje się Stanisławowi Ulamowi, który wykorzystał modele oparte na kratownicy (ang. *lattice model*) w swoich badaniach nad wzrostem kryształów oraz Johnowi von Neumanowi badającemu układy samoreplikujące się. Ich wspólna praca zaowocowała koncepcją automatów komórkowych datowaną na początek lat 50. XX wieku [47]. Dalszy rozwój metodologii pozwolił na wykorzystanie automatów komórkowych w modelowaniu układów dynamicznych, w biologii, chemii, transporcie, kryptografii oraz modelowaniu fizyki wielu zjawisk.

Modelowanie zjawiska przemiany fazowych oraz ruchu granicy międzyfazowej idealnie wpasowuje się w podstawowe zasady rządzące automatami komórkowymi. Pierwsze próby zaadoptowania modelu CA do symulacji przemian fazowych w procesie ciągłego chłodzenia zostały przedstawione w [48]. Autorzy bazując na badaniach kinematyki przemian fazowych przedstawili uproszczony model zarodkowania i przemiany ferryt-austenit. Każda komórka automatu mogła przyjąć jedną z czterech stanów: austenit, austenit+ferryt, ferryt, austenit+ferryt+węgliki. Przyjęto, że wzrost ferrytu jest kontrolowany tylko przez dyfuzję węgla w austenicie, a na granicy międzyfazowej panują warunki równowagowe. Model zarodkowania oparto na idei zaczerpniętej z modeli krzepnięcia, w których zarodkowanie nowej fazy następowało natychmiastowo w uprzywilejowanych miejscach zaraz po osiągnięciu danego stopnia przechłodzenia. Prędkość zarodkowania opisano numerycznie krzywą Gaussa. Ruch granicy kontrolowany jest tylko przez zasadę zachowania masy. Każdej komórce przypisano średnie stężenie węgla, które zmieniało się pod wpływem dyfuzji węgla. Problem dyfuzji rozwiązano poprzez rozwiązanie równania Ficka za pomocą metody różnic skończonych. Wzrost ferrytu kontynuowany jest dopóki nie zostanie osiągnięta temperatura M_s . Model uwzględnia również zarodkowanie węglików, które powstrzymuje wzrost ferrytu. Prędkość wzrostu ferrytu została opisana równaniem:

$$V = \frac{dC_\gamma}{dn} \frac{D}{C_\gamma^* (1 - k_p)} \quad (31)$$

gdzie: dC_γ/dn – gradient stężenie węgla w kierunku normalnym do granicy, C_γ^* – równowagowe stężenie węgla w austenicie, k_p – współczynnik podziału węgla między austenitem a ferrytem, D – współczynnik dyfuzji węgla w austenicie.

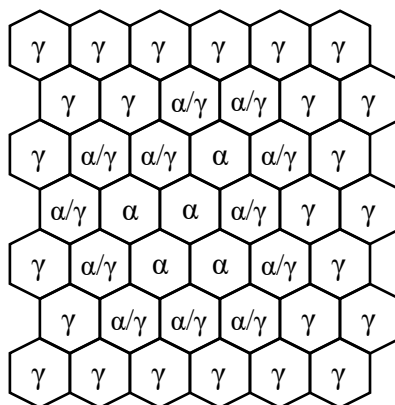
Położenie granicy jest śledzone na podstawie prędkości obliczonych w komórkach ulegających przemianie. Autorzy wskazali na pojawienie się anizotropii ruchu granicy, która w przedstawionym modelu nie może być jednak kontrolowana. Przedstawiony model był w stanie w znacznym stopniu odwzorować kinetykę przemian w szerokim zakresie temperatur i prędkości chłodzenia, jednak znaczne niedokładności pojawiają się w stosunku do zmiennej wielkości ziarna austenitu.

Rozwinięciem modelu Kumara dla stali stopowych niskowęglowych jest bazujący na idei siatki heksagonalnej model Zhanga [49]. Model czerpie szeroko z podejścia wykorzystującego metodę objętości skończonych [50] i z koncepcji podobieństwa zachowania niskowęglowych stopów $Fe - \sum X_i - C$ do niskowęglowego stopu Fe-C, nazwanego w pracy super-pierwiastkiem S [51]. W modelu położono duży nacisk na mechanizm zarodkowania ferrytu i wpływu redystrybucji węgla na zarodkowanie i rozrost ziaren. Ilość nowych zarodków utworzonych w danej temperaturze została podana w postaci:

$$\begin{aligned}
 p_{nuc} &= \delta n \cdot S_\gamma \\
 n(T) &= \int_T^{A_{23}} \frac{I(T') [1-f]}{Q} dT' \\
 I(T') &= K_1 (kT')^{-0.5} D_\gamma \exp \left(-\frac{K_2}{kT' (\Delta G_N^{\gamma \rightarrow \alpha})} \right) \\
 \Delta G_N^{\gamma \rightarrow \alpha} &= \Delta G_S^{\gamma \rightarrow \alpha} - RT' \ln a_S^\gamma \\
 \Delta G_S^{\gamma \rightarrow \alpha} &= 141 \sum x_i (\Delta T_M^i - \Delta T_{NM}^i) + \Delta G_{Fe(S)}^{\gamma \rightarrow \alpha} \\
 \Delta G_{Fe(S)}^{\gamma \rightarrow \alpha} &= 20853.06 - 466.35T' - 0.046304T'^2 + 71.147T' \ln T' \\
 \ln a_S^\gamma &= \frac{\ln \left(\frac{1 - \left(14 - 12 \exp \left(\frac{W_\gamma}{RT'} \right) x_C^\gamma \right)}{1 - x_C^\gamma} \right)}{13 - 12 \exp \left(\frac{W_\gamma}{RT'} \right)}
 \end{aligned} \tag{32}$$

gdzie: p_{nuc} – prawdopodobieństwo zarodkowania ferrytu w komórce austenitu o powierzchni S_γ , $I(T')$ – szybkość zarodkowania ferrytu na jednostkę powierzchni w temperaturze T' , Q – prędkość chłodzenia, K_1 – stała związana z gęstością zarodkowania, K_2 – stała związana z energią powierzchniową między fazami ferrytu i austenitu, k – stała Boltzmana, $\Delta G_N^{\gamma \rightarrow \alpha}$ – siła pędna zarodkowania ferrytu, $\Delta G_S^{\gamma \rightarrow \alpha}$, $\Delta G_{Fe(S)}^{\gamma \rightarrow \alpha}$ – energie swobodne super-pierwiastka S i żelaza w funkcji S w przemianie austenit-ferryt. x_i – ułamek molowy pierwiastka stopowego X_i , ΔT_M^i , ΔT_{NM}^i – parametry Zenera, a_S^γ – współczynnik aktywności super-pierwiastka S, W_γ – stała reprezentująca wymianę energii pomiędzy atomami węgla w austenicie.

W modelu wykorzystano siatkę heksagonalną, co umożliwiło redukcję anizotropii wywołanej dyskretyzacją. Komórki mogą przybierać jeden z trzech stanów: ferryt, austenit, granica α/γ (rysunek 7). Każdej komórce przypisano również orientację krystalograficzną, losowo z zakresu $\langle 1,100 \rangle$, choć jej wpływ na przemianę nie został przedstawiony. W modelu przyjęto równomierny początkowy rozkład węgla. Wykorzystano periodyczne warunki brzegowe, oraz liniowy i równomierny spadek temperatury na całej przestrzeni, sterowany ogólnie przyjętą prędkością chłodzenia.



Rysunek 7. Przykład siatki wykorzystany w modelu CA przemian fazowych.

Komórki austenitu mogą ulec przemianie w ferryt na skutek zarodkowania nowych ziaren lub rozrostu istniejących ziaren ferrytu. Po zmianie stanu komórki na ferryt, część zmagazynowanego węgla jest rozdzielana wśród sąsiednich komórek, a otaczające komórki austenitu stają się granicą międzyfazową. Graniczne prawdopodobieństwo zarodkowania ferrytu jest określone losowo w komórkach należących do granicy ziaren austenitu przed rozpoczęciem symulacji. Prawdopodobieństwo transformacji komórki w ferryt zostało wyrażone w postaci:

$$p_{cap} = \frac{\int_{t_0}^t v_n dt}{L_{CA}} \quad (33)$$

$$v_n = \frac{D_\gamma \left. \frac{\partial c_\gamma}{\partial n} \right|_{\alpha/\gamma} - D_\alpha \left. \frac{\partial c_\alpha}{\partial n} \right|_{\alpha/\gamma}}{c_\alpha^{\alpha/\gamma} - c_\gamma^{\alpha/\gamma}}$$

gdzie: c_v – stężenie węgla w fazie v , D_v – współczynnik dyfuzji węgla w fazie v , $c_\alpha^{\alpha/\gamma}$, $c_\gamma^{\alpha/\gamma}$ – stężenie węgla w fazie α i γ blisko frontu przemiany, v_n – prędkość ruchu granicy międzyfazowej w kierunku normalnym, L_{CA} – odległość pomiędzy środkami sąsiednich komórek.

Dyfuzję węgla modelowano wykorzystując rozwiązanie metodą objętości skończonych. Wyniki uzyskiwane z modelu wykazały dużą zgodność dla małych prędkości chłodzenia ($<20^\circ\text{C/s}$). W przypadku większych prędkości chłodzenia duże rozbieżności tłumaczono niedoskonałościami modelu zarodkowania, którego rola jest intensyfikowana w przemianie zachodzącej przy dużych prędkościach chłodzenia.

Van Leeuwen w [52] zwraca uwagę na gromadzenie się węgla przy granicy międzyfazowej podczas przemiany. Gromadzący się węgiel zmniejsza siłę pędną przemiany. Autorzy wskazują, że istnieją dwa podstawowe procesy definiujące prędkość ruchu granicy międzyfazowej: prędkość przebudowy siatki sieci A1 na A2 oraz prędkość dyfuzji węgla w ziarnie austenitu. Zaproponowano podejście mieszane (ang. *mixed-mode approach*) do opisu przemian uwzględniający oba zjawiska. W przypadku gdy stężenie węgla przy granicy α - γ jest zbliżone do stężenia równowagowego przemiana jest kontrolowana głównie przez dyfuzję. Jeśli dyfuzja przebiega szybko, a stężenie jest bliższe średniemu stężeniu węgla w austenicie, przemiana jest kontrolowana mobilnością granicy. Autorzy [19] zdefiniowali strumień węgla na granicy γ - α jako iloczyn prędkości granicy wg modelu Christiana [53] i różnicy stężenia węgla:

$$J_{\gamma\alpha} = (c_{\gamma}^{a/\gamma} - c_{\alpha}) M_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \Delta G_2 \quad (34)$$

Gdzie: $c_{\gamma}^{a/\gamma}$ - stężenie węgla w austenicie przy granicy, c_{α} - stężenie węgla w ferrycie, M_0 - współczynnik przedwykładniczy, Q - energia aktywacji dyfuzji węgla, R - uniwersalna stała gazowa, T - temperatura, ΔG_2 - energia swobodna Gibbsa migracji granicy.

Z powodu możliwej akumulacji węgla charakter przemiany może ulegać zmianie z jednego typu na drugi. Testowy model oparty na siatce z kwadratowymi komórkami i periodycznymi warunkami brzegowymi został wykorzystany do przeprowadzenia testów numerycznych. W pracy wykazano, że graniczną zawartością węgla w stali zmieniającą charakter przemiany γ - α z kontrolowanej głównie przez ruch granicy na kontrolowaną głównie przez dyfuzję jest 0.18%wt C.

Sietsma i van der Zwaag [54] przedstawili koncepcję parametru Z^B pozwalającego na klasyfikację sposobu w jaki zachodzi ruch granicy międzyfazowej. Parametr Z^B jest proporcjonalny do dyfuzyjności segregującego pierwiastka oraz stosunku powierzchni do objętości rosnącego ziarna nowej fazy.

$$Z^B = \frac{D}{M_{\chi}} \frac{A^{\alpha}}{V^{\alpha}} \quad (35)$$

Parametr Z zmienia się w tym podejściu od 0 do nieskończoności, gdzie 0 oznacza, że ruch granicy kontrolowany jest tylko przez dyfuzję pierwiastka, a nieskończoność – przez mobilność granicy. W pracy [21] wykazano, że wszystkie dyfuzyjne przemiany fazowe są początkowo sterowane mobilnością granicy i wraz ze wzrostem fazy stają się sterowane dyfuzją. Zmiana typu przemiany wiąże się ze znacznym wzrostem prędkości ruchu granicy.

W pracy [55] autorzy rozwinęli metodologię modelowania o uwzględnienie mobilności granicy międzyfazowej w warunkach nierównowagowych. Prędkość ruchu granicy międzyfazowej zdefiniowano opierając się na pracy [56] w postaci iloczynu mobilności i siły pędnej:

$$\begin{aligned}
v(c_{\alpha}^{a/\gamma}, c_{\gamma}^{a/\gamma}) &= MF \\
M &= M_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \\
F &= \mu_{\gamma}^{Fe}(c_{\gamma}^{a/\gamma}) - \mu_{\alpha}^{Fe}(c_{\alpha}^{a/\gamma})
\end{aligned} \tag{36}$$

gdzie: M – efektywna mobilność granicy, F – chemiczna siła pędna, $\mu_{\gamma}^{Fe}(c_{\gamma}^{a/\gamma}), \mu_{\alpha}^{Fe}(c_{\alpha}^{a/\gamma})$ – potencjał chemiczny żelaza w austenicie i ferrycie obliczany za pomocą modelu roztworu regularnego [57], M_0 – współczynnik przedwykładniczy, Q – energia aktywacji dyfuzji węgla, R – uniwersalna stała gazowa, T – temperatura [K].

W pracy pominięto modelowanie zarodkowania ferrytu i zdecydowano się je zastąpić wynikami obserwacji mikroskopowych, z których wywnioskowano ilość zarodków na jednostkę objętości. Czas inkubacji został pominięty. Testy modelu wykazały dużą dokładność i stabilność wyników dla rozwiązania 2D w warunkach izotermicznych. Autorzy zauważyli jednak, znaczną zależność otrzymywanych wyników od wielkości siatki automatów użytych w symulacji. Jak pokazano w [58] zastosowanie podejścia mieszanego nie implikuje konieczności modelowania dyfuzji węgla podczas procesu, które jest obliczeniowo wymagające, do otrzymania rzetelnych wyników.

Odmienne podejście w którym przedstawiono zależność prędkości ruchu granicy międzyfazowej bezpośrednio od szybkości dyfuzji przedstawiono w [59] w postaci relacji:

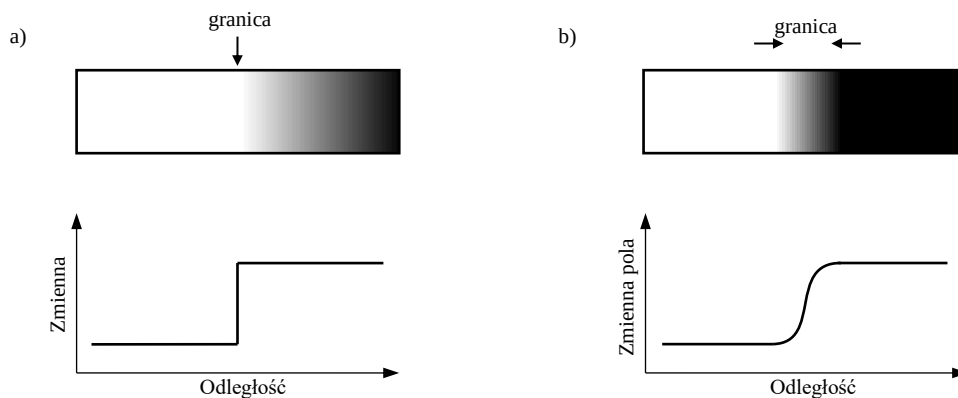
$$v = \frac{D \cdot \nabla c}{c_{\gamma}^{eq}(1-K)} \tag{37}$$

gdzie: D – współczynnik dyfuzji węgla, ∇c - gradient dyfuzji węgla w kierunku normalnym do granicy, K – współczynnik podziału węgla pomiędzy austenit i ferryt, c_{γ}^{eq} - równowagowe stężenie węgla na granicy międzyfazowej. W pracy wykorzystano model zarodkowania ferrytu oparty o klasyczną teorię zarodkowania wraz z losowym rozmieszczeniem punktów nukleacji w każdym kroku czasowym. Model oparto na siatce komórek czworokątnych i sąsiedztwie Von Neumanna.

Dalsze prace związane z modelowaniem przemian fazowych za pomocą automatów komórkowych przedstawiają głównie ich zastosowanie w różnych procesach przemysłowych [60-62], rozwijają metodologię do modelowania w przestrzeni 3D [63] oraz skupiają się na aspektach numerycznych, takich jak wpływ siatki na anizotropię uzyskiwanych wyników [64], czy w końcu uwzględnieniem dyfuzji innych pierwiastków [65]. Modele oparte o metodę automatów komórkowych są często łączone z innymi sposobami modelowania zjawisk skali makro tworząc modele wieloskalowe [66, 67].

Kolejną grupą modeli wykorzystywaną w modelowaniu zmian mikrostruktury są modele z dyfuzyjną granicą międzyfazową, w których rozdzielenie faz nie następuje skokowo, ale jest ciągle na pewnym wąskim obszarze. W konwencjonalnych technikach modelowania przemian fazowych i ewolucji mikrostruktury granicę między różnymi fazami przyjmuje się za ostrą – oznacza to, że zmiana własności materiału następuje skokowo wraz ze zmianą położenia granicy. Dla każdego z obszarów rozwiązywany jest

zestaw równań różniczkowych pozwalających uzyskać rozkład szukanej zmiennej (np. stężenia pierwiastka), dodatkowo na granicy konieczne jest często zadanie warunku brzegowego w postaci strumienia masy oraz podjęcia kroków w kierunku zapewnienia prawdziwości równań konstytutywnych równowagi termodynamicznych. Kluczowym staje się śledzenie granicy pomiędzy poszczególnymi domenami i reagowanie na zmiany morfologiczne, takie jak łączenie i rozdzielanie pod obszarów. W przypadku granic dyfuzyjnych mikrostruktura reprezentowana jest przez zbiór zmiennych stanowiących ciągle funkcje zarówno w domenie przestrzeni obliczeniowej jak i czasie. W obrębie tej samej domeny (np. ziarna) wartości funkcji jest taka sama jak w przypadku modeli z ostrą granicą (rysunek 8). Przejście pomiędzy sąsiednimi domenami nie jest jednak skokowe a ciągle. Położenie granicy jest zatem pośrednio określone przez przyjętą wartość izolinie zmiennej pola, a jej położenie ewoluuje dzięki zadanemu równaniu kinetyki granicy. Wykorzystując granice dyfuzyjne możliwa jest predykcja nawet złożonych morfologii mikrostruktur jak i również ich przemian. Mechanizmy rozdziału oraz łączenia się faz nie wymagają podejmowania dodatkowych kroków. Zastosowanie metod dyfuzyjnych granic sprawia, że wiele własności przemian mikrostruktury może być bezpośrednio ujęte w funkcji ruchu granicy i nie musi być zadawane w sposób jawny na granicy.



Rysunek 8. Przykład granicy ostrej (a) oraz dyfuzyjnej (b).

Do grupy modeli z dyfuzyjną granicą zaliczamy modele oparte o metodę pola faz oraz metodę izolinii. Zastosowanie metody pola faz w symulacjach przemian fazowych bazuje na koncepcji metody wielu faz przedstawionej przez Stainbacha w [68], która umożliwia łatwą korelację parametrów numerycznych z fizycznymi (takimi jak mobilność granicy międzyfazowej czy energie). W podejściu tym, do każdego składnika mikrostruktury, np. ziarna, jest przypisany osobny parametr pola $\phi_i [i = 1, \dots, N]$, gdzie ϕ_i przyjmuje wartość równą 1 wewnątrz ziarna i 0 na zewnątrz. Na granicy dwóch ziaren następuje stopniowa zmiana odpowiadających sobie parametrów pola od 0 do 1 tak, że spełniony jest warunek $\sum_i^N \phi_i(r, t) = 1$ dla każdego punktu r domeny obliczeniowej zawierającej N ziaren.

Szybkość zmiany wartości parametrów pola jest opisana sprzężonymi równaniami różniczkowym w postaci:

$$\frac{d\phi_i}{dt} = \sum_{i \neq j} \mu_{ij} \left[\sigma_{ij} \left\{ \phi_j \nabla^2 \phi_i - \phi_i \nabla^2 \phi_j + \frac{\pi^2}{2\eta_{ij}^2} (\phi_i - \phi_j) \right\} + \frac{\pi}{\eta_{ij}} \sqrt{\phi_i \phi_j} \Delta G_{ij} \right] \quad (38)$$

gdzie: μ_{ij} - mobilność granicy, σ_{ij} - energia granicy, η_{ij} - szerokość granicy, ΔG_{ij} - siła pędna,

Ewolucja parametrów pola fazowego opisujących mikrostrukturę przebiega poprzez minimalizację całkowitej energii swobodnej systemu. Równanie pola faz może być sprzężone z równaniem dyfuzji węgla i innych pierwiastków oraz równaniami termodynamicznymi. Model numeryczny w takiej postaci umożliwia wprowadzenie praktycznie nieograniczonej ilości dodatkowych parametrów, np. orientacje krystalograficzne. Zaletą tego rozwiązania jest możliwość uwzględnienia anizotropii właściwości tych parametrów. Należy jednak zauważyć, że dokładne wartości poszczególnych parametrów, a w szczególności mobilności, nie są poznane. Model pola faz nie obejmuje w swoich założeniach zarodkowania, które musi być uwzględnione w inny sposób. Sama natura modelu dyfuzyjnej granicy sprawia, że konieczne staje się określenie szerokości granicy, które odbywa się zwykle na podstawie przeprowadzonych analiz asymptotycznych. Dodatkowo, konieczne jest przyjęcie odpowiednich założeń do warunków panujących w tym regionie: traktowanie go jako mieszaniny dwóch faz o takim samym składzie chemicznym [69], lub określonym stosunku każdego składnika [70]. Pomimo wyzwań związanych z modelowaniem granicy, na pierwszy plan wychodzi łatwość modelowania złożonych kształtów mikrostruktur (płytki, igły czy regularne ziarna) i brak konieczności jawnego śledzenia punktów granicy.

Pierwsze próby zastosowania metody pola faz do modelowania przemian fazowych zostały przedstawione w [71] dla modelu pararównowagi (ang. *paraequilibrium*). Model ten odnosi się do warunków zajścia przemiany fazowej, które wykluczają dyfuzję pierwiastków stopowych, zaś zrównoważenie potencjału chemicznego zapewnia dyfuzja węgla między składnikami fazowymi stali. Model czerpie szeroko z zależności łączącej ewolucję pola fazowego i dyfuzji z funkcjonalem swobodnej energii Landau-Ginzberga $F(\phi, c_1, c_2, \dots)$. W przypadku stopów wieloskładnikowych F jest funkcjonalem zmiennych: pola faz i stężenia składników. Zdefiniowano ciągłą funkcję pola $\phi(x, t)$ przyjmującą wartości z zakresu $\langle 0, 1 \rangle$, gdzie wartości skrajne przyporządkowano fazie α i ϕ . Równania nadrzędne wyprowadzono w postaci:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} &= M_\phi \left[\varepsilon^2 \nabla^2 \phi - h'(\phi) (f^\alpha - f^\gamma) - \omega g'(\phi) \right] \\ \frac{\partial c_k}{\partial t} &= \nabla \left(\sum_{i=1}^{n-1} M_{ki} \nabla \frac{\partial f}{\partial c_i} \right) \end{aligned} \quad (39)$$

gdzie: $g(\phi)$ – potencjał z podwójnym minimum, reprezentujący barierę energetyczną przemiany fazowej, $h(\phi)$ - znormalizowane pole pod $g(\phi)$, M_{ki} – macierz mobilności atomów, M_ϕ - mobilność pola fazowego, ε, ω - parametry związane z własnościami granicy międzyfazowej, σ - energia granicy, f^α, f^γ - gęstość energii swobodnej faz α i γ , f – gęstość energii swobodnej.

Granicę międzyfazową zdefiniowano jako obszar, w którym funkcja pola zmienia się w zakresie $\langle 0.1, 0.9 \rangle$. Testy modelu przeprowadzono w warunkach izotermicznych dla stali

Fe-Cr-Ni i Fe-Mn-C otrzymując wyniki w postaci kinetyki przemiany i stężenia molowego składników. Wyniki uzyskane dla przestrzeni jednowymiarowej zostały ocenione jako realistyczne ze wskazaniem na konieczność uwzględnienia w analizach numerycznych dodatków substytucyjnych jak i międzywęzłowych, ze względu na ich różny wpływ na mobilność granicy.

Koncepcja zaprezentowana w [72] bazuje na podstawowej zależności termodynamicznej przemian fazowych. Siłą napędową każdej przemiany jest zmniejszenie całkowitej wolnej entalpii w układach izochorycznych lub całkowitej energii swobodnej w układach izobarycznych. Wieloskładnikowy wielofazowy model oparty o metodę pola faz zaimplementowano w oparciu o oprogramowanie Micress. Każde ziarno reprezentowane jest przez oddzielne pole fazowe ϕ_i . Ewolucja morfologii w czasie realizowane jest przez zestaw równań wyprowadzonych z poprzez minimalizację funkcjonału energii swobodnej.

$$\dot{\phi}_i = \sum_j \mu_{ij} \left[\sigma_{ij} \left(\phi_i \nabla^2 \phi_j - \phi_j \nabla^2 \phi_i + \frac{36}{\eta_{ij}^2} \phi_i \phi_j (\phi_i - \phi_j) \right) + \frac{6}{\eta_{ij}} \phi_i \phi_j \Delta G_{ij} \right] \quad (40)$$

gdzie: μ_{ij} - mobilność granicy, σ_{ij} - energia międzyfazowa, η_{ij} - szerokość granicy, ΔG_{ij} - zmiana energii Gibbsa przy przemianie z fazy i na j . W przypadku stopów zmiana energii Gibbsa jest związana ze stężeniem poszczególnych pierwiastków:

$$\Delta G_{ij} = G_M^j(c_k^j) - \sum_{k=1}^n c_k^i \mu_k^i(c_k^i) \quad (41)$$

gdzie: c_k^i - ułamek molowy składnika k w fazie i , μ_k^i - potencjał chemiczny składnika k w fazie i , G_M^j - molowa energia Gibbsa fazy j . Dyfuzja poszczególnych składników traktowana jest globalnie. Dla wybranej fazy j , równanie transportu zostało użyte w postaci:

$$\dot{c}(\vec{x}, t) = \nabla \left(\sum_{i=1}^n \phi_i D_i \nabla (k_{ij} c_j) \right) \quad (42)$$

gdzie: D_i - współczynnik dyfuzji i -tego składnika, k_{ij} - równowagowy współczynnik podziału i -tego składnika w fazie j , c_j - koncentracja fazy j .

Zarówno równanie kinematyki jak i transportu zostały sprzężone poprzez wspólny parametr ϕ . W pracy [39] uwzględniono dyfuzję węgla i manganu. Model został przetestowany dla stali niskowęglowych ULC i IF dając dobrą zbieżność z wynikami eksperymentalnymi. Autorzy wskazali na konieczność dokonania pełnych analiz w stosunku do wielkości ziarna austenitu oraz zarodkowania ferrytu.

Mecozzi i współautorzy [73] zastosowali model oparty o pole faz w symulacji przemiany γ - α w stalach stopowych. Autorzy wyszli z koncepcji zastosowania minimalizacji funkcjonału całkowitej swobodnej energii układu do opisu kinetyki przemiany austenit-ferryt za pomocą równania pola fazowego. Korzystając z równań Gibbsa-Thomsona autorzy zastąpili parametry numeryczne równania fizycznymi parametrami materiałowymi.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \mu \left(\sigma \left[\nabla^2 \phi - \frac{18}{\eta^2} (1-\phi) \phi \left(\frac{1}{2} - \phi \right) \right] + \frac{6\Delta G(c, T)}{\eta} (1-\phi) \phi \right) \quad (43)$$

gdzie: μ - mobilność granicy, σ - energia granicy, η - szerokość granicy.

W prezentowanym modelu równanie (43) zostało sprzężone z równaniem dyfuzji węgla w postaci:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} &= \nabla \cdot \left\{ D^*(\phi) \left[\nabla C - \frac{C(k-1)}{1+\phi(k-1)} \nabla \phi \right] \right\} \\ D^*(\phi) &= \frac{D_g^C + \phi(kD_\alpha^C - D_\gamma^C)}{1+\phi(k-1)} \end{aligned} \quad (44)$$

gdzie: k – współczynnik podziału stężenia na granicy, D_α^C, D_γ^C - współczynniki dyfuzji węgla w austenicie i ferrycie.

Autorzy pracy [40] zdecydowali się wykorzystać prosty model zarodkowania, poprzez pojawienie się zarodka nowej fazy w miejscu przekroczenia krytycznego przesycenia w węzłach i na granicy ziaren. Porównanie kinetyki przemiany przewidzianej przez model z obserwacjami eksperymentalnymi przy ciągłym chłodzeniu z prędkościami 0.05, 0.4 i 10 K/s wykazało dobrą zgodność. Dodatkowo model dostarcza informacji o morfologii jak i rozkładzie stężenia węgla. Do osiągnięcia wysokiej zbieżności model wymagał dobrania takich parametrów jak: gęstość zarodkowania i współczynnik mobilności granicy. Autorzy wskazują jednak, że przy dużych prędkościach chłodzenia początkowe dopasowanie współczynników modelu było niewystarczające i prowadziło do sporych różnic w kinetyce przemiany. Aby poprawić zbieżność zaproponowano rozwinięcie modele zarodkowania ferrytu również do wewnątrz ziaren austenitu. Autorzy zauważają, że początek zachodzącej przemiany, jest zawsze kontrolowany przez mobilność granicy, a dopiero następnie, w zależności od morfologii, zmienia swój charakter.

W pracy [74, 75] wykazano na podstawie badań EBSD, że błędne są założenia towarzyszące modelowaniu przemian takie jak: nukleacja nasyciona zarodkowo, czy bagatelizacja wzrostu ziaren poza frontem przemiany. W celu pokazania wpływu tych czynników na przemianę zaproponowano wykorzystanie modelu pola faz bazującego na sumie energii swobodnych w postaci energii objętościowej i energii powierzchniowej na granicy. Do celów pracy przyjęto następujący funkcjonal:

$$F = \int_V \left[f(\phi, C) + \frac{k_\phi}{2} |\nabla \phi|^2 + \frac{k_\xi}{2} |\nabla \xi|^2 + su(\xi) |\nabla \theta| + tv(\xi) |\nabla \theta|^2 \right] dV \quad (45)$$

gdzie: $f(\phi, C)$ - gęstość energii objętościowej, ϕ - zmienna stanu reprezentująca ułamek austenitu, ξ - zmienna stanu reprezentująca ułamek ferrytu, C – stężenie węgla, k_ϕ, k_ξ, s, t - stałe parametry modelu, $u(\xi) = v(\xi) = \xi^2$. Ewolucja zmiennych pola fazowego odbywa się poprzez monotoniczną minimalizację energii swobodnej Gibbsa przy zachowaniu stałego stężenia rozpuszczonych składników. Do opisu modelu wykorzystano następujący układ równań nadrzędnych:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{M_\phi} \frac{\partial \phi}{\partial t} &= k_\phi \nabla^2 \phi - \frac{\partial f}{\partial \phi} \\
\frac{\partial \theta}{\partial t} &= \nabla \left[M_\theta \left(\frac{s \cdot u(\xi)}{|\nabla \theta|} + t \cdot v(\xi) \right) \nabla \theta \right] \\
\frac{1}{M_\xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} &= k_\xi \nabla^2 \xi - s \frac{\partial u}{\partial \xi} |\nabla \theta| - t \frac{\partial v}{\partial \xi} |\nabla \theta|^2 \\
\frac{\partial C}{\partial t} &= \nabla \left[M_C \nabla \left(\frac{\delta F}{\delta C} \right) \right] = \nabla \cdot \frac{D(C, \phi)}{\partial^2 f / \partial C^2} \nabla \left(\frac{\partial f}{\partial C} \right)
\end{aligned} \tag{46}$$

gdzie: M_ϕ - mobilność granicy międzyfazowej, M_ξ - mobilność granicy ferrytu, M_θ - obrót ziaren ferrytu, M_C - mobilność węgla, $D(C, \phi)$ - współczynnik dyfuzji węgla. Energię objętościową f przyjęto w postaci zależności:

$$\begin{aligned}
f &= (1 - p(\phi)) f^\gamma(C) + p(\phi) f^\alpha(C) + g(\phi) w \\
g(\phi) &= \phi^2 (1 - \phi)^2 \\
p(\phi) &= \phi^3 (10 - 15\phi + 6\phi^2)
\end{aligned} \tag{47}$$

gdzie: $g(\phi)$ – potencjał z podwójnym minimum, reprezentujący barierę energetyczną przemiany fazowej, $p(\phi)$ - ułamek fazy ferrytu, $f^\alpha(C)$, $f^\gamma(C)$ - energie swobodne Gibbsa fazy α i γ wg modelu Gustafsona. Do rozwiązania problemu numerycznego wykorzystano schemat pół niejawną metody spektralnej (ang. *semi-implicit spectral method*) oraz metodę różnic skończonych. Model zarodkowania oparto na koncepcji stochastycznego szumu [76], zakładającego losowe rozłożenie zarodków nowej fazy zależnie od stopnia przesycenia przestrzeni. Zarodkowanie odbywa się poprzez oznaczenie wybranych komórek siatki jako środków ziarna ferrytu oraz utworzenie gradientu pola ϕ wokół tego punktu. Autorzy zwracają uwagę na zależność pomiędzy mobilnością granicy międzyfazowej M_θ i fizycznymi własnościami granicy α/γ , przez co mobilność granicy pola fazowego nie jest czysto numerycznym parametrem, który można dowolnie regulować:

$$\begin{aligned}
M_\phi &= k_M \cdot M_p \cdot \frac{I_\sigma \sigma}{k_\phi} \\
M_p &= 3.5 \exp\left(\frac{140000}{RT}\right) \left[\frac{\text{mol} \cdot \text{m}}{\text{Js}} \right]
\end{aligned} \tag{48}$$

gdzie: M_p - fizyczna mobilność granicy, k_M - parametr korekcyjny, dobierany na podstawie wyników eksperymentów, k_ϕ - wysokość bariery energetycznej, σ - energia powierzchniowa. Z pracy [75] płyną następujące wnioski: prędkość, umiejscowienie i kształt zarodków mają kluczowe znaczenie dla otrzymanej morfologii mikrostruktury, koalescencja (łączenie) ziaren poprzez zanik granicy między sąsiadującymi ziarnami zachodzi wtedy, gdy rosnące ziarna mają taką samą orientację krystalograficzną (w modelu wyrażoną w postaci rotacji). W pracy przedstawiono zarówno wyniki w postaci kinetyki przemiany jak i morfologii mikrostruktur w 2D.

Naturalnym krokiem w rozwoju modeli PF było przejście do przestrzeni 3D [77]. Jak zauważają autorzy, pominięcie jednego wymiaru w modelach 2D sprawia, że niektóre parametry modeli (np. mobilność granicy) są zaniżane w symulacjach numerycznych w stosunku do obserwacji eksperymentalnych. Autorzy zwracają uwagę, iż w przypadku wyników dwu-wymiarowych morfologia przemienionych faz jest w wielu przypadkach nierealistyczna. Do opisu ewolucji parametrów pola faz wykorzystano metodę superpozycji oddziaływania par sąsiadujących ziaren:

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = \sum_j \mu_{ij} \left[\sigma_{ij} \left(\phi_i \nabla^2 \phi_j - \phi_j \nabla^2 \phi_i + \frac{\pi^2}{2\eta_{ij}^2} (\phi_i - \phi_j) \right) + \frac{\pi}{\eta_{ij}} \sqrt{\phi_i \phi_j} \Delta G_{ij} \right] \quad (49)$$

gdzie: μ_{ij} - mobilność granicy, σ_{ij} - energia powierzchniowa granicy, η_{ij} - szerokość granicy, ΔG_{ij} - siła pędna przemiany.

W pracy [78] autorzy zwracają uwagę na wpływ odkształcenia wywołanego niedopasowaniem austenitu i ferrytu na kinetykę przemiany. W tym celu zaproponowano podejście oparte o minimalizację funkcjonału energii będącego sumą gęstości energii granic ziaren F^{GB} i gęstości swobodnej energii odkształcenia sprężystego F^{el} :

$$F = \int_{\Omega} F^{GB} + F^{el} \quad (50)$$

Część odpowiedzialną za energię sprężystą funkcjonału zdefiniowano w postaci:

$$F^{el} = \frac{1}{2} \sum_q^n \phi_q \left(\varepsilon_q^{ij} - \varepsilon_q^{*ij} \right) C_q^{ijkl} \left(\varepsilon_q^{kl} - \varepsilon_q^{*kl} \right) \quad (51)$$

Natomiast gęstość energii granic ziaren:

$$F^{GB} = \sum_{r,q=1}^n \frac{\varepsilon_{rq}^2}{2} \left| \nabla \phi_r \cdot \nabla \phi_q \right| + \omega_{qr} \left| \phi_r \phi_q \right| \quad (52)$$

gdzie: $\omega_{qr}, \varepsilon_{rq}$ są parametrami związanymi z gęstością energii granic ziaren i szerokością granicy, ε_q^{ij} - pole naprężeń ziarna q , C_q^{ijkl} - macierz sztywności ziarna q .

Naprężenie wywołane zarodkowaniem i wzrostem ferrytu zmienia warunki równowagowe przemiany γ/α . Istnienie naprężeń wywołanych przemianą tłumi dalsze zarodkowanie ferrytu, co sprawia, że temperatura początkowa wzrostu ferrytu obniża się, a ułamek ferrytu ulega nasyceniu w niższych temperaturach. W konsekwencji cała krzywa kinetyki przemiany ferrytycznej zostaje przesunięta w kierunku niższych temperatur. W pracy [45] przeprowadzono analizę wpływu miejsc zarodkowania oraz kąta zwilżania na morfologię ferrytu. Kąt zwilżania zdefiniowano jako:

$$\theta = 2 \cos^{-1} \left(\frac{\sigma_{\gamma\gamma}}{\sigma_{\alpha\gamma}} \right) \quad (53)$$

gdzie: $\sigma_{\gamma\gamma}$ - gęstość energii granicy ziaren austenitu, $\sigma_{\alpha\gamma}$ - gęstość energii na granicy austenit-ferryt.

Mecozzi, w pracy [79] wskazuje na bardzo proste do implementacji modele zarodkowania wykorzystywane w dotychczasowych modelach przemiany γ/α opartych o

metodę pola faz. Krytykuje wykorzystanie stałej prędkości zarodkowania oraz modele wykorzystujące przesycenie miejsc zarodkowania. W pracy dokonano analizy wpływu miejsca i prędkości zarodkowania na kinetykę przemiany i wielkość ziaren ferrytu. W tym celu wykorzystano opracowany model oparty na polu faz (49). Wnioski płynące z badań wskazują, że duża zgodność wyników dotychczasowych symulacji z eksperymentami była wynikiem starannie dobranej wartości parametru mobilności granicy, który jednak traktowany jako parametr numeryczny nie reprezentował fizycznej własności materiału. Wyniki symulacji na płaszczyźnie dwuwymiarowej nie mogą oddać w pełni fizyki zarodkowania, która odbywa się w całej objętości, a trzeci wymiar ma znaczący wpływ na morfologię mikrostruktury. Pokazano, że mobilność granicy jest zależna od prędkości chłodzenia, a jako przyczynę takiego zachowania uznano możliwy wpływ segregacji atomów manganu na froncie przemiany. Autorzy pracy [79] wskazują również na silną zależność między efektywną mobilnością granicy międzyfazowej oraz zakresem temperatur, w których następuje zarodkowanie.

Wpływ pierwiastków stopowych (głównie manganu) na migrację granic podczas przemiany austenit-ferryt stanowi temat najnowszych badań z wykorzystaniem modeli pól fazowych. Dwa klasyczne modele: pararównowagowy (PE) i lokalnej równowagi (LE) są używane do opisu wpływu pierwiastka X na ruch granicy w stopach Fe-C-X (np. Mn, Cr, Ni, Mo).

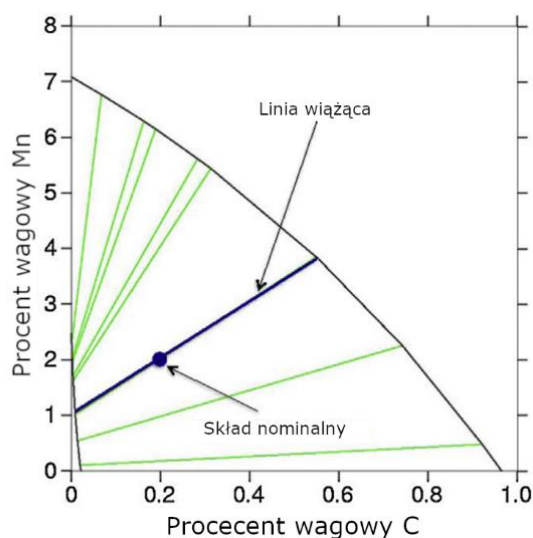
W warunkach PE przyjmuje się, że potencjał chemiczny węgla μ_C po obu stronach granicy jest taki sam, a potencjał chemiczny Fe i X ma inne wartości. Innymi słowy model PE zakłada, że przebieg przemiany fazowej zależy tylko od dyfuzji węgla a pierwiastek substytucyjny jest niemobilny:

$$\begin{cases} \mu_C^\alpha = \mu_C^\gamma \\ \mu_X^\gamma - \mu_X^\alpha = -\frac{\chi_{Fe}}{\chi_X}(\mu_{Fe}^\gamma - \mu_{Fe}^\alpha) \end{cases} \quad (54)$$

Z kolei model LE zakłada, że również potencjał chemiczny pierwiastka X jest stały:

$$\begin{cases} \mu_C^\alpha = \mu_C^\gamma \\ \mu_{Fe}^\alpha = \mu_{Fe}^\gamma \\ \mu_X^\alpha = \mu_X^\gamma \end{cases} \quad (55)$$

W konsekwencji (55), w danym czasie i temperaturze skład granicy w warunkach LE jest kształtowany przez tzw. linię wiążącą (ang. *operative tie-line*). Linia musi spełniać warunki lokalnej równowagi (55), a skład chemiczny na granicy musi być tak dobrany, że zachowany jest bilans mas węgla i pierwiastka X [80]. Przykładowe linie wiążące pokazano na rysunku 9.



Rysunek 9. Przykładowe linie wiążące (kolor zielony) oraz równowagowa linia wiążąca (kolor niebieski) dla stopu Fe-C-Mn [80].

W przypadku znacznych różnic w dyfuzyjności między C i X wyróżnia się dwa warunki podziału (ang. *partitioning modes*). W pierwszym kinetykę przemiany kontroluje węgiel, a koncentracja pierwiastka X w nowej fazie jest taka sama jak w fazie rodzimej. Warunek ten jest często nazywany równowagą lokalną z nieznacznym podziałem (ang. *local equilibrium with negligible partitioning, LE-NP*). Przez podział (ang. *partitioning*) rozumiana jest redystrybucja pierwiastka substytucyjnego na duże odległości. Jeśli przemiana zachodzi w warunkach LE-NP obserwowany jest wąski szpic w profilu koncentracji X przy froncie przemiany. Warunek ten jest uznawany za fizycznie nierealistyczny ze względu na szerokość wysokiej koncentracji gradientu przy granicy mniejszą niż dystans międzyatomowy [81]. W warunkach równowagi lokalnej z podziałem (LE-P) gradient stężenia węgla jest pomijalnie mały, jednak gradient X jest znaczny. Skutkuje to wolną przemianą kontrolowaną przez dyfuzję X. Przejście pomiędzy różnymi modelami podczas przemiany jest możliwe i opisywanie przez wiele modeli. Wpływ segregacji pierwiastka X na granicę opisuje mechanizm ciągnięcia substancji rozpuszczonej (ang. *solute drag*) [82] oraz teoria dyssypacji energii [83]. Mechanizm ciągnięcia substancji rozpuszczonej zakłada, że ruchliwość granicy międzyfazowej jest proporcjonalna do dyfuzyjności objętościowej rozpuszczonego składnika, a także do nadmiarowego stężenia tego składnika na granicy ziaren. Zgodnie z teorią dyssypacji energii swobodnej Gibbsa, dyfuzja składników przez granicę powoduje rozpraszanie energii co wpływa na prędkość granicy. Badania pokazały, że oba mechanizmy są sobie równoważne. W pracy [84] rozpatrzono trzy różne podejścia do uwzględnienia wpływu manganu na przemianę γ/α : tylko dyfuzję węgla, dyfuzję węgla i manganu, dyfuzję węgla z dyssypacją energii na skutek obecności manganu. Podejście II i III spowalniają prędkość przemiany i obniżają znacząco finalny udział ferrytu. Rudnizki [85] wskazuje na trudność doboru szerokości granicy w modelach uwzględniających pierwiastki stopowe ze względu na duże różnice w ich dyfuzyjności w stosunku do dyfuzyjności węgla. Powolna redystrybucja pierwiastków substytucyjnych w warunkach LE-NP na granicy międzyfazowej została uzyskana za pomocą modyfikacji zmiennych pola fazowego. Dla każdego pierwiastka o małej dyfuzyjności, nagły skok koncentracji

przy granicy został sztucznie przedłużony na całą szerokość granicy. Zabieg ten był poprawny przy założeniu że tak rozszerzone pole miało wpływ tylko na siłę pędną.

Próby uchwycenia wpływu pierwiastków stopowych na ruch granicy poprzez modyfikację mobilności zostały podjęte w [86, 87]. Warunki mieszane (ang. *mixed-mode*) zostały zaadaptowane w modelowaniu przemiany α/γ za pomocą pola faz w [88]. Autorzy zauważają, że do temperatury 800°C kinetyka przemiany jest kontrolowana tylko mobilnością granicy, a w wyższych temperaturach następuje przejście w model mieszany. Wpływ pierwiastków stopowych (głównie Mn), rozpuszczanie cementytu czy efekt „*solute drag*” został oddany numerycznie poprzez dobór współczynników równania mobilności Arrheniusa.

Kohtake [89] analizuje dyfuzję Mn w fazach α i γ podczas przemiany w warunkach izotermicznych. W pracy dokonano oceny wpływu mobilności granicy na prędkość dyfuzji Mn. Autorzy zauważają, że w przypadku wysokiej mobilności dyfuzja Mn z fazy α do γ jest znacząco spowolniona, co w praktyce sprowadza się do zajęcia przemiany w warunkach PE.

Loginova [90] wykorzystała w pracy możliwości modelowania anizotropii granicy za pomocą pola faz. W tym celu rozpatrywała energię granicy i jej szerokość jako funkcję zależną od orientacji krystalograficznej. Anizotropia została wprowadzona w postaci amplitudy zależności między maksymalną i minimalną energią granicy w celu oddania niespójnych wysokoenergetycznych i spójnych, niskoenergetycznych granic. Efektem prac było opracowanie modelu wzrostu ferrytu Widmanstättena. W pracy [91] zbadano wpływ anizotropii granicy i z powodzeniem przeprowadzono symulację transformacji ferrytu alotriomorficznego w ferryt Widmanstättena oraz dogłębną analizę wzrostu pojedynczej płytki tego ferrytu. Model rozwinięto w [92] zastępując równania Allena-Cahna i Cahna-Hilliarda równaniem Ginzburga-Landaua. Charakterystyczny wygląd ferrytu Widmanstättena osiągnięto dzięki zastosowaniu regularyzacji współczynnika gradientu energii ε (ang. *regularized gradient energy coefficient*), który pozwolił na uzyskanie szerokiego zakresu anizotropowego zachowania granicy, a szczególnie uzyskanie w symulacji ostrego wierzchołka płytki ferrytu charakterystycznego dla tego typu morfologii.

Wśród technik modelowania przemian fazowych wyróżniają się jeszcze modele oparte o metodę dynamiki molekularnej – MD (ang. *molecular dynamics*). Metoda dynamiki molekularnej pozwala na śledzenie położenia oddziaływujących ze sobą atomów w złożonych systemach. Idea metody sprowadza się do obliczenia sił działających na każdą cząstkę systemu, a następnie rozwiązania równań ruchu Newtona w celu otrzymania nowego położenia i prędkości każdej cząstki. Metodę MD wykorzystuje się głównie do opisu zjawisk zachodzących na poziomie atomowym, co sprawia że jej aplikacja do modelowania przemian fazowych jest ograniczona głównie do modelowania tylko wybranych aspektów tego zjawiska.

Przy wykorzystaniu metody MD w pracy [93] modelowano fizykę przebudowy sieci krystalicznej żelaza, a w [94] zbadano wpływ czynników zewnętrznych na fizykę zmian krystalograficznych podczas przemiany w czystym żelazie. W pracy [95] metodę MD wykorzystano do modelowania mobilności granicy γ/α i wyznaczenia jej wartości na podstawie prędkości granicy oraz siły pędnej przemiany dla czystego żelaza. W pracy

doktorskiej [96] autor wykorzystał metodę MD do symulacji zarodkowania ferrytu podczas przemiany γ/α w materiale o różnych stopniach odkształcenia oraz przemiany propagowanej w pojedynczym kryształcie.

Ostatnią z omawianych metod modelowania przemian fazowych jest rozwiązanie równania dyfuzji z ruchomą granicą międzyfazową. W pracy [97] autorzy zaproponowali rozwiązanie oparte o rozwiązanie drugiego Prawa Ficka za pomocą metody elementów skończonych dla prostych figur geometrycznych (sześciokąta i okręgu). Wykorzystano metodę śledzenia frontu (ang. *front-tracking*) w której równanie dyfuzji jest rozwiązywane dla stacjonarnej siatki w danym kroku czasowym. Granica ziarna jest przesuwana w przypadku, gdy następujące równanie bilansu masy przestaje być prawdziwe.

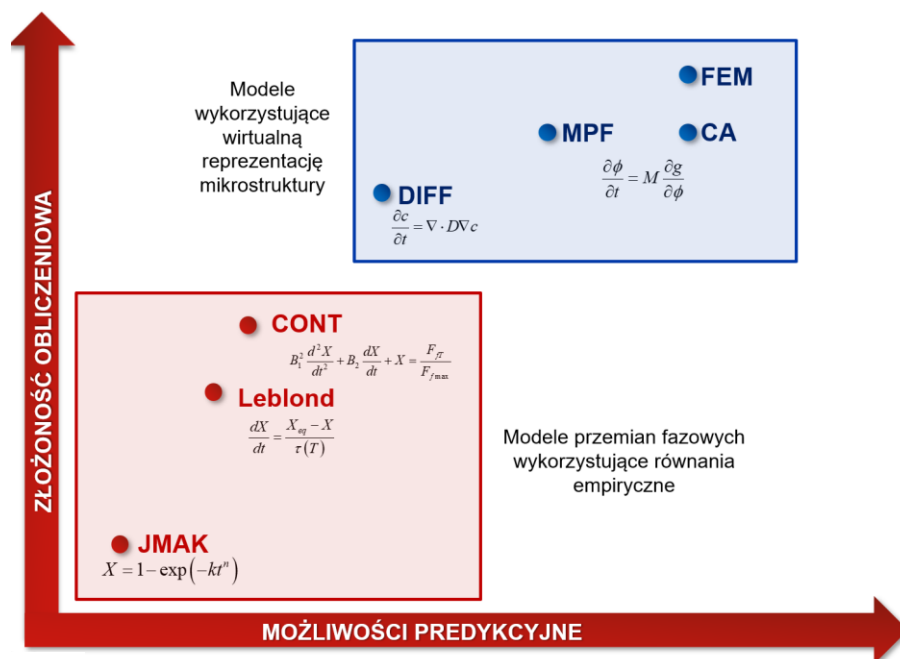
$$\int_{\xi}^{d_{\gamma}} c(x) dx - c_0 (d_{\gamma} - \xi) \geq dx (c_0 - c_{\alpha}) \quad (56)$$

Dla uproszczenia przyjęto w modelu, że granica porusza się o zadaną odległość wynikającą z bilansu masy tylko wzdłuż osi x . Model ograniczono do modelowania jednego zarodka ferrytu. Eksperymentalnie potwierdzono słuszność przedstawionego modelu przy czym wskazano na jego zastosowanie głównie do modelowania zjawisk zachodzących przy granicy międzyfazowej.

3.3. Podsumowanie problematyki modelowania przemian fazowych

W rozdziale przedstawiono historyczny przegląd modeli przemian fazowych w stalach niskowęglowych podczas chłodzenia, skupiając się na wybranych zagadnieniach istotnych w kontekście w przedstawionego w pracy rozwiązania. Należy podkreślić, że problem przewidywania składu fazowego jak i kinetyki przemiany jest o wiele bardziej rozległy. Nie omówiono tu rozwiązań półempirycznych, takich jak metoda CALPHAD, które wymagają dużej ilości wiarygodnych danych doświadczalnych do opisu właściwości termodynamicznych i układów równowagi fazowych. Pominięto również nieklasyczne metody statystyczne oraz te wykorzystujące uczenie maszynowe i sieci neuronowe.

Modele niewykorzystujące jawną reprezentację wirtualnej mikrostruktury charakteryzują się przede wszystkim wysokimi prędkościami obliczeń, co pozwala wykorzystywać je w zadaniach optymalizacyjnych i obliczeniach online. Często jednak, ich ograniczenia sprawiają, że nie mogą być one wykorzystywane w predykcji bardziej skomplikowanych zjawisk, szczególnie tych, związanych bezpośrednio z mikrostrukturą materiału (np. pękaniem). Z kolei modele jawnie wykorzystujące mikrostrukturę materiałową, dostarczając wiele dodatkowych wyników, jak morfologia faz, wielkość ziarna czy rozkład stężenie pierwiastków, znacząco zwiększają koszt czasowy obliczeń. Większość pozycji literatury nie podaje złożoności obliczeniowej czy czasów obliczeń dla poszczególnych rozwiązań numerycznych. Można, jednak próbować szacować złożoność tych algorytmów (rysunek 10).



Rysunek 10. Klasyfikacja złożoności obliczeniowej modeli przemian fazowych. Modele wykorzystujące: JMAK - równanie Avramiego, CONT - teorię sterowania, DIFF – rozwiązanie równania dyfuzji węgla, CA - automaty komórkowe, FEM – metodę elementów skończonych, MPF – metodę pola faz.

Koszt obliczeń jest zwykle proporcjonalny do wielkości dyskretyzowanego obszaru i dokładności dyskretyzacji – dokładność rozwiązania zwiększa jego koszt. Koszt rośnie znacząco wraz z możliwościami predykcyjnymi, szczególnie jeśli przestrzeń rozwiązań staje się trójwymiarowa, co staje się koniecznością przy rozwiązaniu wielu problemów sprzężonych. Przyszłość modelowania przemian fazowych musi leżeć w poszukiwaniu kompromisu – modeli i metod, które z jednej strony pozwolą na zachowanie wysokich możliwości predykcyjnych, z drugiej pozwolą na ograniczenie kosztu czasowego obliczeń.

4. Teza i cel pracy

Modelowanie numeryczne bazujące na cyfrowej reprezentacji materiału jest bardzo kosztowne obliczeniowo, dlatego prowadzone są liczne próby przyspieszenia obliczeń bazujących na mikrostrukturze materiału. Do jednych z nich należy redukcja skomplikowania modelu poprzez wykorzystanie statystycznie podobnych reprezentatywnych elementów objętości, które wykorzystywane są w symulacjach numerycznych zamiast skomplikowanych mikrostruktur. Utworzenie elementu SSRVE jest typowym zadaniem optymalizacyjnym, w którym reprezentatywny element mikrostruktury (RVE) zawierający wiele ziaren opisany zostaje pewną grupą współczynników, która pozwala na formalny opis cech charakterystycznych morfologii. Następnie poszukiwany jest wirtualny kształt, który pod względem statystycznym będzie odwzorowywał parametry bazowej mikrostruktury.

Na podstawie zasygnalizowanych powyżej przesłanek, w pracy postawiono następującą tezę: *Zastosowanie statystycznie podobnego reprezentatywnego elementu objętości w symulacjach przemian fazowych umożliwi poprawę efektywności obliczeniowej modeli deterministycznych w projektowaniu cykli cieplnych procesów wytwarzania elementów ze stali AHSS, przy jednoczesnym zachowaniu wysokiej wiarygodności wyników.*

Aby udowodnić tak postawioną tezę, postanowiłem na potrzeby niniejszej pracy opracować i zaimplementować numeryczny model przemian fazowych wykorzystujący rozwiązanie równania dyfuzji z ruchomą granicą międzyfazową, a następnie pokazać jego praktyczne zastosowanie z wykorzystaniem elementów SSRVE.

W pracy postawiono następujący zakres programowy:

1. Opracowanie i implementacja modelu przemian fazowych opartego o rozwiązanie równania dyfuzji węgla oraz równanie ruchu granicy z wykorzystaniem metody elementów skończonych.
 - a) opracowanie modelu przemiany austenitycznej przy nagrzewaniu,
 - b) opracowanie modelu przemiany ferrytycznej przy chłodzeniu,
2. Opracowanie metodyki SSRVE dla mikrostruktury stali dwufazowych:
 - a) implementacja wyznaczania elementu SSRVE w oparciu o współczynniki kształtu,
 - b) opracowanie metody oceny reprezentatywności,
 - c) implementacja miar statystycznych.
3. Wykonanie identyfikacji parametrów modelu oraz wskazanie zakresu dozwolonych parametrów.
4. Wykonanie testów ilościowych i jakościowych modelu przemian fazowych oraz porównanie wyników RVE i SSRVE.
5. Implementacja procedury optymalizacyjnej pozwalającej na dobór pożądanego cyklu laminarnego chłodzenia w celu określenia preferowanego składu fazowego.
6. Walidacja eksperymentalna z wykorzystaniem testów dylatometrycznych oraz mikroskopii elektronowej.

5. Modelowanie przemian fazowych z jawnym wykorzystaniem mikrostruktur materiałowych

Niesłabnąca potrzeba udoskonalania produktów oraz rosnące możliwości obliczeniowe współczesnych komputerów sprawiają, że modelowanie numeryczne staje się koniecznością na wielu etapach produkcji. Często jednak symulacje numeryczne ograniczające się do makro-skali nie są w stanie udzielić odpowiedzi na postawione problemy. Szerokie zastosowanie materiałów wielofazowych wymusza potrzebę rozpatrywania takich zagadnień w wielu skalach, sprawiając że dziedzina modelowania wielkoskalowego odgrywa kluczową rolę w projektowaniu procesów obróbki cieplno-plastycznej. Choć w wielu przypadkach zastosowanie w skali mikro równań empirycznych pozwala relatywnie szybko otrzymać zadowalające wyniki obliczeń, to nie są one w stanie dostarczyć kompleksowych informacji o zachowaniu materiału. Wykorzystanie mikrostruktur materiałowych w symulacjach numerycznych stanowi ciągle żywy i aktualny temat badań [98, 99]. Prace prowadzone są ze względu na optymalizację prędkości obliczeń, analizę i wyznaczanie reprezentatywności mikrostruktur, techniki dyskretyzacji przestrzeni [100] czy efektywną wymianę danych pomiędzy różnymi skalami [101]. Niniejszy rozdział pracy zawiera przegląd wybranych zagadnień związanych z modelowaniem mikrostruktur, doбором przestrzeni obliczeniowej oraz próbami poprawy efektywności obliczeń numerycznych z wykorzystaniem mikrostruktur materiałowych. Szczególny nacisk został położony na modelowanie z wykorzystaniem metody SSRVE. Rozdział zawiera krytyczny przegląd metod wykorzystywanych do statystycznego opisu mikrostruktury, ideę metody SSRVE oraz zaproponowaną przez autora pracy modyfikację tej metody poprzez wykorzystanie współczynników kształtu i topologicznej optymalizacji wykorzystującej algorytm genetyczny.

5.1. Reprezentatywny element objętości – RVE

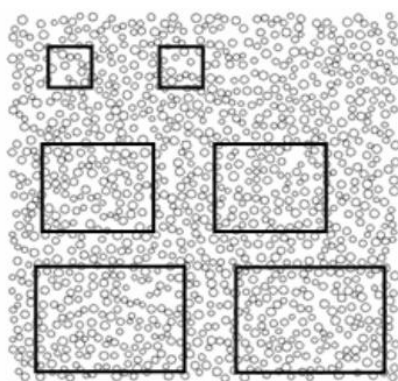
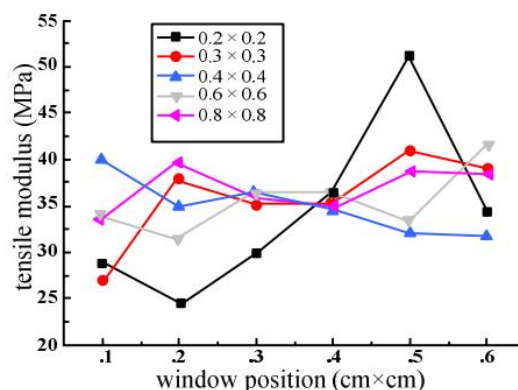
Analiza numeryczna heterogenicznych mikrostruktur materiałowych nierozłącznie wiąże się z koniecznością wyznaczenia reprezentatywnego obszaru do analizy, nazywanego najczęściej – reprezentatywnym elementem objętości (ang. *Representative Volume Element*, *RVE*). Istnieje kilka definicji elementu reprezentatywnego. Najczęściej cytowaną w literaturze jest zaproponowana przez Drugana i Willisa [102] definicja elementu reprezentatywnego jako najmniejszej objętości kompozytu, dla której makroskopowe związki konstytutywne w wystarczający sposób oddają średnią konstytutywną odpowiedź materiału. Innymi słowy element RVE musi być na tyle dużym fragmentem materiału, by w statystyczny sposób reprezentować zachowanie niejednorodnej mikrostruktury. RVE musi zawierać wystarczającą liczbę mikro-heterogeniczności (takich jak: ziarna, wtrącenia, pustki czy włókna) by oddać ich ogólny wpływ na zachowanie materiału, przy czym musi być na tyle mały, by ciągle być uznawany za element objętościowy w rozumieniu mechaniki ośrodków ciągłych [103]. Bez względu na to, którą definicję przyjmujemy, w niniejszej pracy pojęcie RVE traktowane będzie jako najmniejsza objętość materiału, która wiernie oddaje średnie reologiczne własności materiału w skali makro. W zależności od przyjętej konwencji, reprezentatywna objętość może być rozumiana jako dwu- lub trój- wymiarowa cyfrowa reprezentacja materiału (ang. *Digital Material Representation*, *DMR*). W przypadku

reprezentacji dwuwymiarowej RVE będzie stanowił płaski obraz mikrostruktury materiałowej uzyskany z obserwacji mikroskopem optycznym, SEM lub EBSD powierzchni zglądu. Finalna reprezentacja mikrostruktury jest efektem zastosowania cyfrowego przetwarzania obrazów, na które składają się zarówno algorytmy filtracyjne jak i rekonstrukcyjne, pozwalające uzyskać jednoznaczne, graficzne odwzorowanie morfologii mikro-heterogeniczności [104]. W przypadku trójwymiarowego RVE konieczne staje się dodatkowo zastosowanie rekonstrukcji objętościowej na podstawie serii uzyskanych obrazów 2D [105]. Przetworzony obraz mikrostruktury uzyskany z obserwacji mikroskopowej nie spełnia zwykle wymogów formalnych do bycia elementem reprezentatywnym bez przeprowadzenia stosownej analizy reprezentatywności. Powszechnie uznaje się, że mikrostruktura jest reprezentatywna, jeśli spełniony jest warunek energetyczny Hilla [106] w postaci:

$$\langle \sigma : \epsilon \rangle = \langle \sigma \rangle : \langle \epsilon \rangle \quad (57)$$

gdzie: $\langle \cdot \rangle$ jest operatorem uśrednienia. Wg warunku (57) średnia wielkość iloczynu skalarnego pól naprężeń i odkształceń jest równa iloczynowi ich średnich wielkości. Teoretyczne aspekty wyznaczania wielkości reprezentatywnych mikrostruktur poruszono już w pracy [102], gdzie autorzy analizowali hipotetyczną mikrostrukturę złożoną z losowo rozproszonych nienakładających się na siebie identycznych sfer. Na podstawie przeprowadzonych badań, zaproponowano kryterium minimalnej wielkości RVE wyrażonego jako podwójna wielkość średnicy najtwardszego wtrącenia. Skuteczność tego kryterium została następnie potwierdzona w kolejnych pracach [107, 108]. Kryterium zależności od ułamka objętości jest jednak zasadne tylko przy analizach numerycznych nie wykraczającej poza zakres liniowej sprężystości. W problemach, gdzie występuje akumulacja odkształcenia plastycznego konieczne jest wykorzystanie dodatkowych miar oceny reprezentatywności. Problem ten adresuje koncepcja SERVE, która zakłada, że zachowanie materiału heterogenicznego powinno być oceniane na podstawie serii statystycznie równorzędnych próbek RVE [109]. Wybór próbek bazuje na statystycznych współczynnikach, takich jak średnia wartość, wariancje czy funkcje gęstości prawdopodobieństwa. Aby osiągnąć zadowalający poziom wiarygodności, liczba próbek SERVE powinna przekroczyć pewną wartość progową, którą można określić na podstawie przyjętego marginesu błędu, poziomu ufności i odchylenia standardowego. Badania [110] pokazują, że liczba koniecznych do analizy RVE może się znacząco różnić, ale w większości analiz 15-25 próbek jest wystarczające. Otwartym problemem jest jednak pytanie, jak dobrać wielkość SERVE, szczególnie jeśli celem homogenizacji nie jest tylko predykcja uśrednionej wartości, ale również innych charakterystyk statystycznych zachowania materiału.

Bardziej pragmatyczne podejście do problemu wyznaczania wielkości RVE obejmuje tak zwaną metodę ruchomego okna (ang. *moving-window method*) [111]. Polega ona na wyznaczeniu wirtualnego ruchomego obszaru (okna) poruszającego się nad obrazem mikrostruktury materiałowej. Wybrane parametry materiału są szacowane w obrębie okna. Następnie położenie i wielkość okna są zmieniane dopóty, dopóki najmniejsza przyjęta wielkość okna ciągle pozwala na uzyskanie akceptowalnych wyników.



Rysunek 11. Schematyczny diagram przedstawiający ideę ruchomego okna oraz przykładowy wynik analizy przy jego użyciu [111].

Metoda warunków brzegowych zaproponowanych w [103] pozwala oszacować docelową wielkość RVE bazując na przeświadczeniu, że reprezentatywna próbka musi zachowywać się w sposób spójny bez znaczenia, jakiego typu warunki brzegowe są wykorzystywane w symulacji: statyczne, kinematyczne czy okresowe. Innym praktycznym sposobem wyznaczania wielkości elementu RVE jest podejście zbieżności rozmiaru (ang. *size convergence approach*). Pozwala ono na oszacowanie wielkości RVE bazując na wyznaczeniu zależności średniej energii sprężystej i naprężeń szczątkowych w funkcji wielkości komórki elementarnej, a następnie oszacowaniu wielkości, dla których wartości funkcji się stabilizują.

Koncepcję zbieżności obszaru rozwija Gitman [112], zauważając że nie dla każdego materiału można wyznaczyć element reprezentatywny. Autor zauważa, że materiał ulegający osłabieniu traci reprezentatywność i RVE nie może zostać skutecznie wyznaczony, gdyż materiał o lokalnym zachowaniu traci statystyczną jednorodność, a RVE można znaleźć tylko dla materiałów statystycznie jednorodnych.

Cechą wspólną powyższych metod jest długi czas konieczny na analizę i wyznaczenie komórki elementarnej. Problem ten adresuje Różański [113] wykorzystując prawdopodobieństwo dwupunktowe wystąpienia każdej z mikro-heterogeniczności. Prawdopodobieństwo dwu-punktowe wystąpienia wtrącenia S oznacza prawdopodobieństwo, z jakim dwa losowo rzucone na obszar ośrodka punkty znajdują się w tym wtrąceniu. Poszukiwany jest minimalny wymiar obszaru, który będzie odwzorowaniem (ze względu na zgodność prawdopodobieństwa dwupunktowego) dużej mikrostruktury. Łydźba [114] rozwinął koncepcję statystycznego opisu mikrostruktury o wykorzystanie do oceny RVE funkcji *lineal-path*, która określa prawdopodobieństwo, że losowo odcinek o zadanej długości w całości znajdzie się w jednym składniku mikrostruktury.

Pelissou [115] rozwija dalej koncepcję statystyczno-numerycznego wyznaczania RVE proponując zaawansowaną strategię próbkowania podobszaru oraz wykorzystanie teorii niepewności estymacji do identyfikacji wielkości elementu. Połączenie obu algorytmów znacząco zmniejsza liczbę symulacji numerycznych koniecznych do oceny obszaru reprezentatywnego.

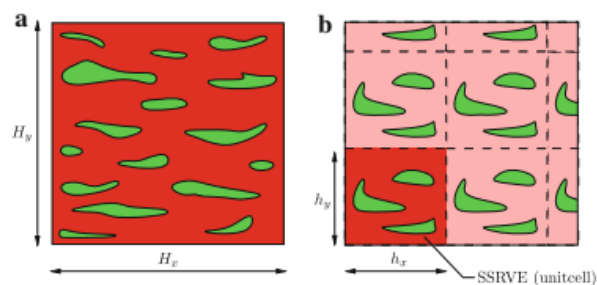
Dobór wielkości, kształtu [116] i liczebności [117] komórek RVE jest przedmiotem ciągłych dyskusji. Wybór metody i miary reprezentatywności mikrostruktury często zależy od celów, w jakich ma być ona wykorzystana (np. rodzaju symulacji numerycznej [118]) oraz od typu materiału [119]. Olbrzymią rolę odgrywają niejednorodności struktury [120], które wymagają przyjęcia dodatkowych miar reprezentatywności, np. poprzez wykorzystanie klasteryzacji mikro-heterogeniczności [121].

Zagadnienie reprezentatywnego elementu objętości opisane w rozdziale stanowi tylko przegląd kluczowych procedur. RVE jest szeroko wykorzystywaną metodą modelowania wielu zjawisk i w każdym przypadku konieczne jest indywidualne podejście do metodologii oceny i wyznaczania elementu jednostkowego. Różnorodność typów mikrostruktur materiałowych powoduje, że opracowanie uniwersalnego algorytmu ewaluacji staje się niezmiernie trudnym zadaniem. W literaturze obserwowane jest przede wszystkim odchodzenie od czasochłonnych analiz reprezentatywności wykorzystujących iteracyjne porównanie odpowiedzi z numerycznych symulacji podobszarów na rzecz wykorzystania miar statystycznych, które nie wymagają znacznych nakładów obliczeniowych.

5.2. Statystycznie reprezentatywny element objętości – SSRVE

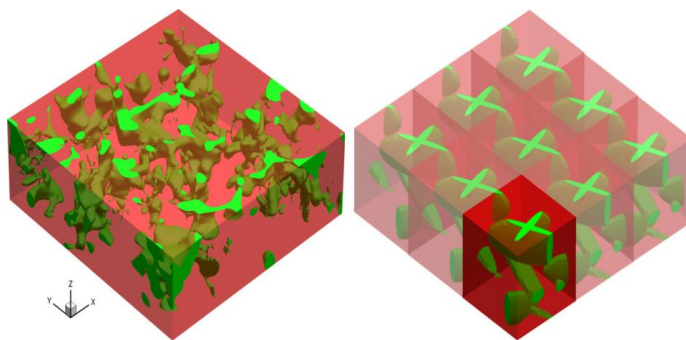
Reprezentatywne Elementy Objętościowe, choć z definicji stanowić powinny najmniejsze akceptowalne komórki elementarne, w wielu przypadkach są ciągle zbyt duże, by w efektywny sposób wykorzystać je w obliczeniach numerycznych. W przypadku złożonych morfologii ziaren struktur wielofazowych, wyznaczenie komórki elementarnej i ocena reprezentatywności są często czasochłonne albo wręcz niemożliwe.

Wzrost zainteresowania obliczeniami wieloskalowymi a szczególnie FE^2 sprawił, że konieczne stało się nie tylko opracowanie nowych algorytmów i metod zrównoleglenia zadań obliczeniowych, ale również poszukiwanie metod upraszczania domeny obliczeniowej. Zastosowanie statystycznej analizy do modelowania wpływu morfologii mikrostruktury na własności materiału z wykorzystaniem RVE nie jest koncepcją nową [122, 123]. Balzani i in. w [124] zaproponowali stworzenie sztucznej, periodycznej komórki elementarnej, która w statycznie podobny sposób mogłaby zastąpić element reprezentatywny RVE. Ideą statystycznie podobnego reprezentatywnego elementu objętościowego (SSRVE) jest minimalizacja za pomocą metody najmniejszych kwadratów różnicy między wybranymi, zmierzonymi parametrami referencyjnej mikrostruktury a wygenerowaną sztucznie komórką elementarną. Przy tym z definicji, rozmiar komórki powinien być zdecydowanie mniejszy niż rozmiar referencyjnego obrazu mikrostruktury (rysunek 12).



Rysunek 12. Idea statystycznie podobnego elementu reprezentatywnego. a – referencyjny obraz mikrostruktury, b – periodyczny element SSRVE [125].

Autorzy [27] zwracają uwagę na trudność w opracowaniu poprawnej metody optymalizacji, wskazując w [126] szczególnie na trudności związane z minimami lokalnymi przy zastosowaniu metod gradientowych. W celu przezwyciężenia pojawiających się trudności autorzy zaproponowali algorytm ruchomej ramki. Celem algorytmu jest budowa podprzestrzeni (ramki) o zadanym rozmiarze, w której poszukiwane jest optymalne rozwiązanie. W tym celu losowo wybierany jest punkt $M_{0,k}$ stanowiący środek ramki (punkt przecięcia średnic) oraz n punktów kontrolnych $M_{j,k}$ definiujące kształt krzywej. Stopień dopasowania kształtu utworzonego z punktów kontrolnych jest szacowany, a następnie środek ramki przesuwany jest na kolejny punkt dopóki wartość błędu dopasowania nie zmniejszy się lub zadana ilość cykli nie osiągnie wartości maksymalnej. Algorytm powtarzany jest wielokrotnie dla różnych położań punktów. Jak zaznaczają sami autorzy, zaproponowany przez nich algorytm stanowi tylko statystyczną metodą służącą do znajdowania minimów i należy rozważyć inne możliwości np. poprzez wykorzystania dedykowanych metod rozwiązań nieróżniczkowalnych problemów optymalizacyjnych. Metodyka SSRVE może zostać wykorzystana do uproszczenia zarówno dwu- jak trójwymiarowej cyfrowej reprezentacji mikrostruktury [127], ten drugi przypadek pokazano na rysunku 13.



Rysunek 13. Przykład SSRVE uzyskanego dla cyfrowej reprezentacji mikrostruktury w 3D [127].

5.3. Matematyczny opis mikrostruktur materiałowych

Formalny opis cyfrowych reprezentacji mikrostruktur materiałowych może być prowadzony w czterech kategoriach:

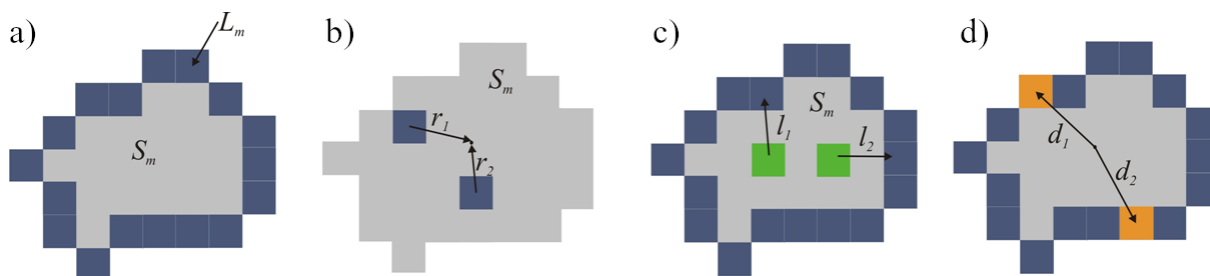
- współczynników geometrycznych,
- funkcji statystycznych,
- odpowiedzi reologicznej,
- analizie częstotliwości.

Współczynniki geometryczne [128] wykorzystywane są do matematycznego sformalizowania opisu kształtu poszczególnych ziaren mikrostruktury. Obraz dwuwymiarowy składa się z punktów (pikseli) o określonych współrzędnych całkowitych na płaszczyźnie kartezjańskiej. Każdy ze współczynników może zostać dostosowany również do opisu obiektów trójwymiarowych. W takim przypadku, będzie mowa o woksela, pole figury we wzorach zostanie zastąpione pojemnością, a obwód polem powierzchni. Dla jasności, w niniejszym rozdziale skupiono się na współczynnikach przystosowanych do opisu mikrostruktury dwuwymiarowej. Współczynniki bazujące na relacji pomiędzy poszczególnymi punktami obrazu oraz powierzchnią i obwodem figury zestawiono w tabeli 2.

Tabela 2. Współczynniki kształtu I.

Współczynnik	Wzór	Komentarz
Malinowska	$R_M = \frac{L}{2\sqrt{\pi S}} - 1$	gdzie: S – powierzchnia obiektu, L – obwód obiektu. Przyjmuje tym większe wartości im obiekt jest bardziej wydłużony. Nie wykazuje dużej wrażliwości na zmianę skali ani obrót obiektu. Ideę wyznaczania pokazano na rysunku 14a.
Blair-Bliss	$R_B = \frac{S}{\sqrt{2\pi \sum_{i=0}^n r_i^2}}$	gdzie: S – powierzchnia obiektu, n – liczba wszystkich punktów obiektu, r_i – odległość między punktem a środkiem ciężkości. Nie wykazuje wrażliwości na zmianę skali i obrót obiektu. Ideę wyznaczania pokazano na rysunku 14b.
Danielsson	$R_D = \frac{S^3}{\left(\sum_{i=0}^n l_i\right)^2}$	gdzie: S – powierzchnia obiektu, n – liczba wszystkich punktów obiektu, l_i – minimalna odległość między punktem a konturem. Przyjmuje szeroki zakres wartości, nieodporny na zmianę skali ani obrót obiektu. Ideę wyznaczania pokazano na rysunku 14c.
Haralick	$R_H = \sqrt{\frac{\left(\sum_{i=0}^n d_i\right)^2}{n \sum_{i=0}^n d_i^2 - 1}}$	gdzie: n – liczba wszystkich punktów obiektu, d_i – odległość między punktem a środkiem ciężkości. Przyjmuje bardzo wąski zakres wartości, odporny na zmianę kształtu i obrót. Ideę wyznaczania pokazano na rysunku 14d.

Mz	$R_{Mz} = \frac{2\sqrt{\pi S}}{L}$	gdzie: S – powierzchnia obiektu, L – obwód obiektu. Stanowi odwrotność współczynnika Malinowskiej.
----	------------------------------------	--



Rysunek 14. Schemat wyznaczania współczynnika a) Malinowskiej b) Blaira-Blissa c) Danielssona d) Haralicka.

Inna grupa współczynników geometrycznych opisuje ogólną relację między polem i obwodem analizowanej figury [129]. Zestawienie tych współczynników przedstawiono w tabeli 3.

Tabela 3. Współczynniki kształtu II.

Współczynnik	Wzór	Komentarz
Stosunek obwodu do pola	$R_{LS} = \frac{L}{S}$	gdzie: L – obwód obiektu, S – pole obiektu
Średnica Fereta	$R_F = \frac{L_h}{L_v}$	gdzie: L_h – wysokość obiektu, L_v – szerokość obiektu.
Współczynnik okrągłości (I)	$R_{C1} = \sqrt{\frac{4S}{\pi}}$	gdzie: S – pole obiektu. Wyznacza średnice hipotetycznego okręgu o takim samym polu jak analizowany kształt. Ściśle zależy od rozmiaru obiektu.
Współczynnik okrągłości (II)	$R_{C2} = \frac{L}{\pi}$	gdzie: L – obwód obiektu. Określa średnicę okręgu o obwodzie równym obwodowi analizowanego obiektu. Bardzo wrażliwy na rozmiar obiektu.
Kompaktowość	$R_{compact} = \frac{L^2}{S}$	gdzie: L – obwód obiektu, S – pole obiektu. Dla koła przyjmuje wartość 4π . Przyjmuje wysokie wartości dla wydłużonych kształtów
Lp1	$Lp_1 = \frac{r_{min}}{r_{max}}$	gdzie: r_{min} , r_{max} – odpowiednio najmniejsza i największa odległość między środkiem ciężkości a punktem na obwodzie. Dobrze oddaje podobieństwo do okręgu, dla którego wartość współczynnika równa jest 1

Lp2	$Lp_2 = \frac{l_{max}}{L}$	gdzie: l_{max} – największa odległość między dwoma punktami figury, L – obwód obiektu. Dobrze oddaje wydłużenie regularnych kształtów. W przypadku poszarpanych konturów współczynnik osiąga małe wartości.
Lp3	$Lp_3 = \frac{l_{max}}{l_{min}}$	gdzie: l_{max} – największa odległość między dwoma punktami figury, l_{min} – wektor prostopadły do l_{max} , taki że otrzymany prostokąt zawiera cały obiekt. Dobrze oddaje wydłużenie obiektu dla regularnych kształtów.

Ostatnią grupę współczynników stanowią współczynniki „zaawansowane” wymagające podjęcia dodatkowych operacji numerycznych w celu uzyskania wyników.

Dopasowanie do elipsy – określa w jakim stopniu kształt jest zbliżony do elipsy o takim samym polu i proporcjach wysokości i szerokości:

$$R_{EF} = 2 \frac{(x, y) \in v_m : \varepsilon_m(x, y) \leq 1}{V_m} - 1 \quad (58)$$

gdzie: v_m – zbiór punktów należących do ziarna, ε_m – zbiór punktów należących do elipsy. Osie elipsy są równe długościom średnic Fereta obliczonych z wykorzystaniem analizy głównych składowych (*ang. principal component analysis*).

Krzywizna jest miarą zakrzywienia krzywej w punkcie. W analizie płaskich kształtów najczęściej wykorzystywana jest jej ogólna definicja: dla płaskiej krzywej zdefiniowanej na płaszczyźnie kartezjańskiej w postaci $y = f(x)$ krzywizna κ dana jest w postaci:

$$\kappa = \frac{|y''|}{(1 + y'^2)^{\frac{3}{2}}} \quad (59)$$

W analizie obrazów podstawowe znaczenie ma krzywizna średnia:

$$R_{\kappa}^{Mean} = \frac{1}{2V} \int (\min[\kappa] + \max[\kappa]) ds \quad (60)$$

Z punktu widzenia analizy kształtu ziaren istotna może być również wartość krzywizny oraz krzywizna całkowita. Krzywizna całkowita definiowana jest jako całka krzywizny wzdłuż krzywej wyznaczonej w oparciu o długości łuku:

$$R_{\kappa}^{Total} = \frac{1}{V} \int \min[\kappa] \max[\kappa] ds \quad (61)$$

Tensor Minkowskiego to współczynnik kształtu w postaci tensora umożliwiającego ilościową charakterystykę anizotropii materiału, który jest szczególnie dobrze przystosowany do tworzenia relacji mikrostruktura-własność dla materiałów, w których własności są zależne od orientacji mikrostruktury. Stanowią uogólnienie koncepcji

objętości, powierzchni i całkowitej krzywizny [130]. W analizie kształtów najczęściej wykorzystywany jest tensor Minkowskiego 2-go rzędu, stanowiący iloczyn tensorowy wektora położenia $\mathbf{r}$ i wektora normalnego $\mathbf{n}$ względem powierzchni granicznej ∂K :

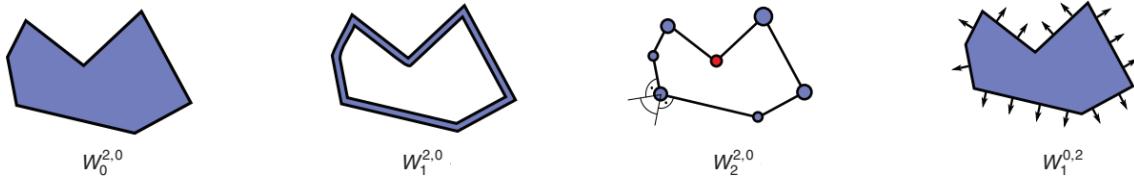
$$\mathbf{W}_0^{2,0}(K) := \int_K \mathbf{r} \otimes \mathbf{r} dA \quad (62)$$

$$\mathbf{W}_1^{2,0}(K) := \frac{1}{2} \int_{\partial K} \mathbf{r} \otimes \mathbf{r} dr \quad (63)$$

$$\mathbf{W}_2^{2,0}(K) := \frac{1}{2} \int_{\partial K} \kappa(\mathbf{r}) \mathbf{r} \otimes \mathbf{r} dr \quad (64)$$

$$\mathbf{W}_1^{0,2}(K) := \frac{1}{2} \int_{\partial K} \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} dr \quad (65)$$

Tensor $\mathbf{W}_0^{2,0}$ może być interpretowany jako tensor momentu bezwładności ciała stałego K określający ilościowy rozkład masy wewnątrz obiektu. Podobnie $\mathbf{W}_1^{2,0}$ jako tensor momentu bezwładności pustego obiektu o jednorodnym rozkładzie masy na powierzchni K . W przypadku wielokątów $\mathbf{W}_2^{2,0}$ może być postrzegany jako tensor momentu obiektu, w którym cała masa zlokalizowana jest w wierzchołkach (masa ta musi być proporcjonalna do dyskretnej krzywizny aby zapewnić addytywność). Tensor $\mathbf{W}_1^{0,2}$ stanowi rozkład wektorów normalnych w obiekcie. Graficzną reprezentację tensorów bezwładności dla figur dwu-wymiarowych przedstawiono na rysunku 15.



Rysunek 15. Graficzna reprezentacja tensorów momentów bezwładności [130].

Funkcje statystyczne

Prawdopodobieństwo n -punktowe określa rozkład przestrzenny składnika w kompozycie [131]. Dla każdego składnika i pewnej dwu fazowej mikrostruktury zajmującej obszar V można zdefiniować funkcję charakterystyczną w postaci:

$$I^{(i)}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{dla } \mathbf{x} \in V_i \\ 0, & \text{dla } \mathbf{x} \notin V_i \end{cases} \quad (66)$$

Prawdopodobieństwo jedno-punktowe określa szansę, że losowy punkt znajdzie się w składniku i :

$$S_1^{(i)} = \langle I^{(i)}(\mathbf{x}) \rangle \quad (67)$$

gdzie: $\langle * \rangle$ – operator uśrednienia objętościowego. Dla nieskończonej ilości punktów jedno-punktowa funkcja prawdopodobieństwa (66) jest tożsama z ułamkiem fazowym i określa udział objętości składnika i w materiale wielofazowym:

$$S_1^{(i)} = \frac{V_i}{\sum_{i=1}^n V_i} \quad (68)$$

Analogicznie definiowane jest **prawdopodobieństwo dwupunktowe** S_2 , określające szansę wystąpienia punktu $\mathbf{x}$ w fazie i oraz punktu oddalonego o odległość r w fazie j .

$$S_2^{(i,j)}(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{r}) = \langle I^{(i)}(\mathbf{x}) I^{(j)}(\mathbf{x} + \mathbf{r}) \rangle \quad (69)$$

Corson [131] zaproponował funkcję opisującą prawdopodobieństwo dwupunktowe dla materiału dwufazowego w postaci:

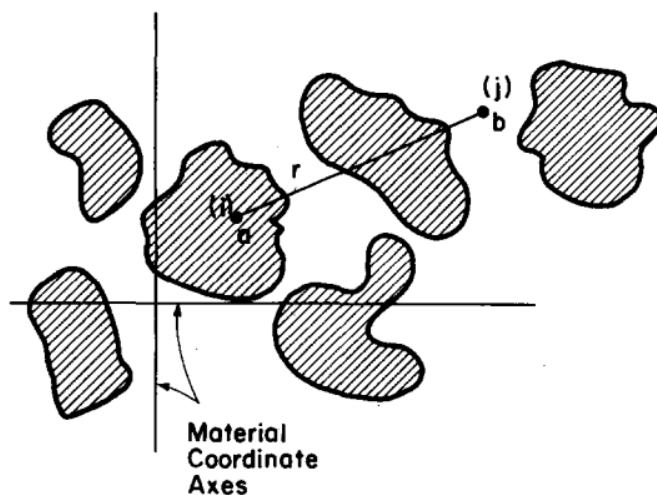
$$P_{ij}(r) = \alpha_{ij} + \beta_{ij} e^{-m_{ij} r^{n_{ij}}}, \quad \text{dla } i, j \in [1, 2] \quad (70)$$

gdzie: $P_{ij}(r)$ – prawdopodobieństwo, że wektor o długości r będzie miał początek w fazie i oraz koniec w fazie j , α_{ij}, β_{ij} – stałe materiałowe, zależne od udziału poszczególnych faz (tabela 4), m_{ij}, n_{ij} – parametry rozkładu mikrostruktury, dobierane metodą najmniejszych kwadratów.

Tabela 4. Parametry równania (70) prawdopodobieństwa dwu-punktowego.

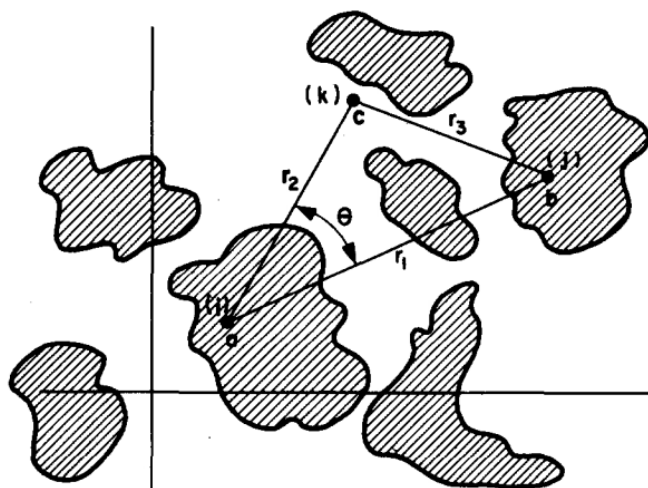
P _{ij}	Warunki brzegowe		Współczynniki	
	$r = 0$	$r \rightarrow \infty$	α_{ij}	β_{ij}
P ₁₁	V_1	V_1^2	V_1^2	$V_1 V_2$
P ₁₂	0	$V_1 V_2$	$V_1 V_2$	$-V_1 V_2$
P ₂₁	0	$V_1 V_2$	$V_1 V_2$	$-V_1 V_2$
P ₂₂	V_2	V_2^2	V_2^2	$V_1 V_2$

Dla mikrostruktury dwufazowej prawdopodobieństwa P_{11} i P_{22} reprezentują średnią wielkość ziaren, P_{12} i P_{21} – średnią odległość pomiędzy ziarnami różnych faz [132]. W praktyce prawdopodobieństwo dwupunktowe wyznacza się poprzez utworzenie wektorów o długości r i orientacji θ w losowej liczbie punktów nad mikrostrukturą. Najczęściej w analizach numerycznych wykorzystywane są wektory o orientacji 0° , 45° , 90° względem przyjętego układu odniesienia (rysunek 16).



Rysunek 16. Schemat wyznaczania prawdopodobieństwa dwu-punktowego [131].

Funkcja prawdopodobieństwa trzypunktowego S_3 określa szansę znalezienia punktów a, b, c odpowiednio w fazach i, j, k , gdzie $i, j, k = 1, 2$. Schematyczny sposób wyznaczania funkcji prawdopodobieństwa trój-punktowego przedstawiono na rysunku 17.

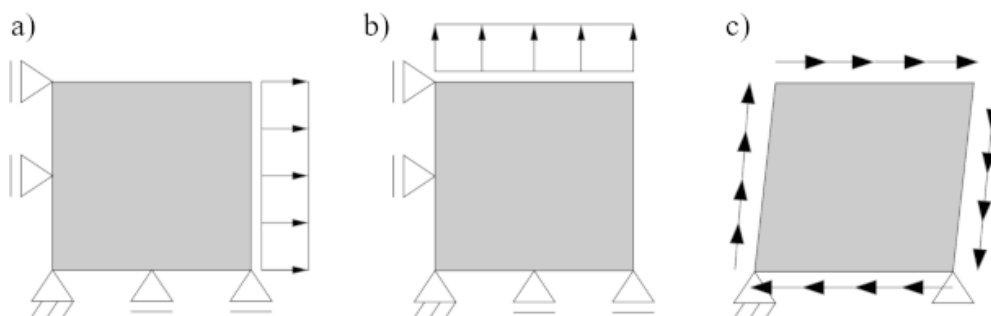


Rysunek 17. Schemat wyznaczania prawdopodobieństwa trój-punktowego [131].

Funkcje prawdopodobieństwa wyższego rzędu ($n \geq 3$) pozwalają na sformalizowany opis morfologii i tekstury mikrostruktury [133]. Rzadko jest spotykane ich praktyczne wykorzystanie ze względu na trudność w aproksymacji i prezentacji wyników.

Funkcja ścieżki liniowej (ang. *lineal path function*) określa prawdopodobieństwo, że losowy odcinek $L^{(i)}(r)$ o długości r w całości znajduje się w składniku i [134]. Dla układów trójwymiarowych dowiedziono, że $L^{(i)}(z)$ jest tożsame z ułamkiem fazowym mierzonym na rzucie obrazu na płaszczyznę. Dla izotropowego medium funkcja ścieżki liniowej zależy tylko od odległości r pomiędzy dwoma punktami. Dla $r = 0$ funkcja ścieżki liniowej jest tożsama z ułamkiem fazowym. Celem wykorzystania funkcji ścieżki liniowej jest uwydatnienie informacji o klasteryzacji faz, która nie jest dostępna wykorzystując funkcję S_2 [135].

Odpowiedź reologiczna mikrostruktury może być uzyskana na drodze homogenizacji pola naprężeń uzyskanego z numerycznego testu odkształcenia. Balzani i in. w [124] zaproponowali trzy proste testy numeryczne do porównania zachowania materiału w skali micro: jednoosiową próbę statycznego rozciągania w dwóch kierunkach oraz próbę czystego ścinania. Schematyczne reprezentacje przeprowadzenia tych eksperymentów numerycznych pokazano na rysunku 18.



Rysunek 18. Schemat wykonania testów reologicznych: a – próba jednoosiowego rozciągania wzdłuż osi 1, b – próba jednoosiowego rozciągania wzdłuż osi 2, c – próba ścinania [124].

Wynikiem każdego testu jest dwuwymiarowy rozkład naprężeń i odkształceń, który do celów porównawczych musi zostać uśredniony w procesie numerycznej homogenizacji:

$$\begin{aligned}\tilde{\sigma}_{ij} &= \frac{1}{S} \oint_s \sigma_{ij} ds \\ \tilde{\varepsilon}_{ij} &= \frac{1}{S} \oint_s \varepsilon_{ij} ds\end{aligned}\tag{71}$$

gdzie: i, j – przyjmują wartości kierunku odkształcenia $i, j = 1, 2$; $\tilde{\sigma}, \sigma_{ij}$ – średnie naprężenie i składowa tensora naprężenia w kierunku i, j ; $\tilde{\varepsilon}, \varepsilon_{ij}$ – średnie odkształcenie i składowa tensora odkształcenia w kierunku i, j ,

W wielu przypadkach homogenizacja wyników uzyskanych tylko z testu odkształcenia będzie niewystarczająca do charakteryzacji mikrostruktury. Dobór testów numerycznych powinien być ściśle uzależniony od celu, w jakim wykonywana jest charakteryzacja mikrostruktury. Ostoja-Starzewski w [119] zaproponował zestaw charakterystycznych miar do oceny zachowania mikrostruktury w zastosowywaniu do wybranego problemu fizycznego.

Tabela 4. Zestawienie charakterystycznych miar dla wybranych problemów fizycznych

Zagadnienie fizyczne	Parametry	
	Naprężenie	Odkształcenie
Plastyczność	Naprężenie	Odkształcenie
Antypłaska sprężystość	Naprężenie	Odkształcenie
Przewodność cieplna	Gradient temperatury	Strumień ciepła
Skręcanie	Naprężenie	Odkształcenie
Przewodność elektryczna	Natężenie prądu	Gęstość prądu

Elektrostatyka	Intensywność pola elektrycznego	Indukcja pola elektrycznego
Magnetostatyka	Intensywność pola magnetycznego	Indukcja pola magnetycznego
Dyfuzja	Gradient masy	Strumień masy

Ostatnia grupa współczynników ma swoje oparcie w teorii przetwarzania sygnałów. **Funkcja widmowej gęstości mocy** (ang. *power spectral density*) $\mathcal{P}$ stanowi iloczyn dyskretnej transformaty Fouriera $\mathcal{F}$ oraz zespolonego sprzężenia widma wyznaczone dla wybranej fazy. Funkcja ta jest zdefiniowana dla obrazu binarnego w sposób następujący:

$$\mathcal{F}(m, k) = \sum_{p=1}^{N_x} \sum_{q=1}^{N_y} \exp\left(\frac{2i\pi mp}{N_x}\right) \exp\left(\frac{2i\pi kq}{N_y}\right) I^{(1)}(p, q) \quad (72)$$

$$\mathcal{P}_{SD}(m, k) := \frac{1}{2\pi N_x N_y} |\mathcal{F}(m, k)|^2$$

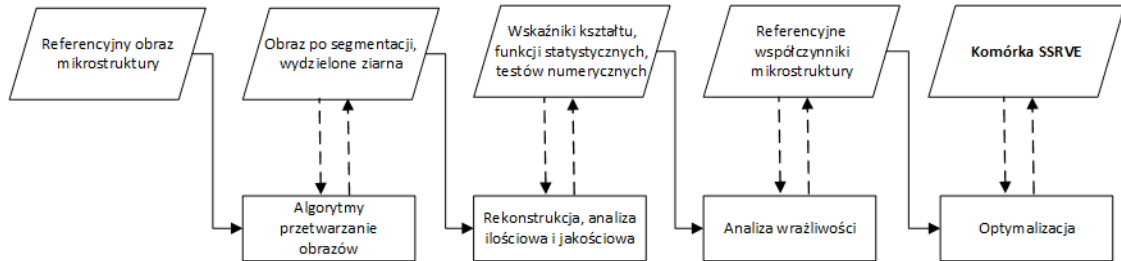
gdzie: N_x, N_y – sumaryczna ilość pikseli w kierunku x i y . Dyskretna funkcja widmowej gęstości mocy pozwala na uwidocznienie cech obrazu niezauważalnych w dziedzinie przestrzennej, jak np. periodyczności, i jest odporna na szum. Wynikiem działania funkcji jest **periodogram**.

Torquato [136] wskazuje jeszcze na inne miary będące specyficznymi modyfikacjami przedstawionych w tym rozdziale współczynników, ale ze względu na ich ograniczoną stosowalność do opisu mikrostruktury stali dwu fazowej ich opis w tym rozdziale zostanie pominięty.

Pomimo dostępności szerokiego grona różnych metod pozwalających na charakteryzację mikrostruktury, nie każda z nich jest możliwa do wykorzystania przy każdym typie mikrostruktury. Dobór odpowiednich współczynników ma szczególne znaczenie w przypadku współczynników kształtu. Charakteryzacja mikrostruktury musi być poprzedzona jakościową analizą wyników oraz analizą wrażliwości i korelacji współczynników. W wielu przypadkach konieczne jest również uwzględnienie czasu koniecznego na przeprowadzenie analizy mikrostruktury. W przypadku współczynników kształtu czas potrzebny na analizę jest zależny od ilości ziaren obserwowanych na zdjęciu mikrostruktury oraz od rozdzielczości zdjęcia – jest on jednak pomijalnie mały w porównaniu do innych metod. Funkcje statystyczne wymagają znacząco więcej czasu ze względu na czasochłonne próbkowanie obrazu, przy czym wynik będzie tym wiarygodniejszy im więcej wykonane zostanie próbkowań. W przypadku testów numerycznego odkształcenia czas będzie silnie zależał do ilości elementów skończonych wykorzystanych w dyskretyzacji przestrzeni obliczeniowej, a w przypadku analizy obrazu w zakresie częstotliwości czas zależny będzie głównie od rozdzielczości materiału źródłowego.

5.4. Metodyka wyznaczania elementów SSRVE

Procedura wyznaczanie komórki elementarnej Statystycznie Podobnego Reprezentatywnego Elementu Objętości (SSRVE) jest typowym zagadnieniem optymalizacyjnym (rysunek 19).



Rysunek 19. Schemat wyznaczania elementu reprezentatywnego za pomocą algorytmu SSRVE.

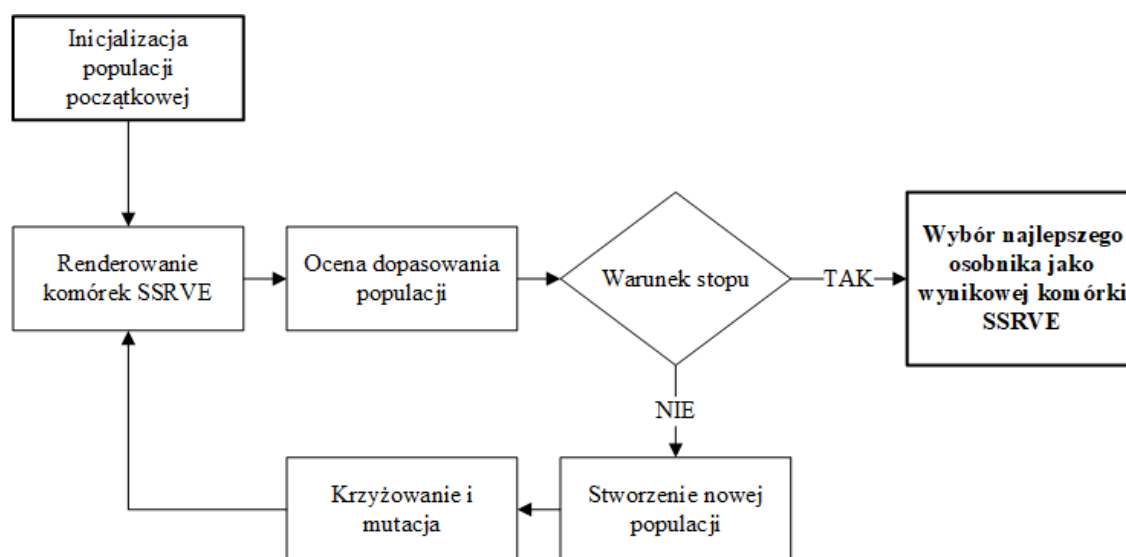
Pierwszą operacją jest uzyskanie danych referencyjnych charakteryzujących wybraną mikrostrukturę materiałową. W tym celu zdjęcie mikrostruktury materiału pozyskane z mikroskopu optycznego lub SEM poddaje się obróbce z wykorzystaniem algorytmów przetwarzania obrazu, tak by w wyniku otrzymać odwzorowanie binarne, w którym ziarna jednej fazy są jednoznacznie widoczne na tle osnowy. Dobór algorytmu progowania (prosty, adaptacyjny, Otsu) oraz jego parametrów jest w dużej mierze zależny od jakości fotografii [137]. Często konieczne jest jednak zastosowanie procedur rekonstrukcyjnych takich jak otwieranie, domykanie czy dedykowane algorytmy [104, 138]. Ostatnim etapem przygotowawczym jest rozdzielanie poszczególnych ziaren wykorzystując do tego celu np. algorytm etykietowania połączonych komponentów [139]. Tak przygotowana mikrostruktura z wykonaną segmentacją ziaren może być następnie poddana ocenie ilościowej, której mechanizmy przedstawiono w rozdziale 5.3. Współczynniki kształtu analizowane są dla każdego ziarna z osobna. Funkcje statystyczne, odpowiedź reologiczna oraz analiza w zakresie częstotliwości przeprowadzana jest dla całościowego, przetworzonego zdjęcia mikrostruktury. Wybór współczynników stanowiących referencyjne dane do analizy jest kluczowy i przekłada się na zbieżność wyników oraz czas obliczeń. Analiza wrażliwości współczynników kształtu polega na analizie histogramu występowania przedziałów wartości dla poszczególnych ziaren oraz wyznaczenia środkowej wartości w grupie najczęściej występujących. W przypadku, gdy histogram posiada więcej niż jedną dominującą wartość – mogą być one traktowane jako zbiór referencyjny. W przypadku, gdy rozkład na histogramie nie posiada dominującego przedziału, współczynnik taki nie powinien być wykorzystywany w analizie. W każdej iteracji procedury optymalizacyjnej kształt i wielkość ziarna (lub ziaren) w komórce SSRVE są modyfikowane. Minimalizowana funkcja celu stanowi błąd średniokwadratowy między wartościami referencyjnymi a oszacowanymi dla analizowanego kształtu w danej iteracji.

$$\frac{1}{k} \left[\sum_{i=1}^k w_i \left(\zeta_i^{SSRVE} - \zeta_i^{REF} \right)^2 \right] + \phi_p \rightarrow \min \quad (73)$$

gdzie: ζ_i^{REF} – referencyjna wartość współczynnika, ζ_i^{SSRVE} – wartość współczynnika dla komórki SSRVE, w_i – waga współczynnika, ϕ_p – wartość funkcji kary.

Innymi słowy celem procedury optymalizacyjnej jest minimalizacja błędu dopasowania statystycznych współczynników komórki SSRVE do wzorcowej mikrostruktury poprzez modyfikację kształtu sztucznych ziaren.

Pierwotna koncepcja SSRVE zakładała zastosowanie krzywych *B*-sklejanych (*B-spline*) do modelowania kształtu ziaren [140]. Wykorzystanie funkcji sklejanych jest numerycznie efektywne ze względu na możliwość kontroli, nawet skomplikowanych kształtów, za pomocą stosunkowo małej liczby punktów kontrolnych. Opis kształtu ziaren mikrostruktury za pomocą splinów prowadzić może jednak do uzyskania nienaturalnych kształtów (z ostrymi rogami). W pracy zdecydowano się wykorzystać krzywe NURBS (*Non-Uniform Rational B-Spline*) stanowiące uogólnienie *B*-splinów i omijające pewne ograniczenia pierwowzoru [141]. Krzywa NURBS definiowana jest przez wektor punktów kontrolnych, wektor węzłów i stopień krzywej. Punkty kontrolne determinują kształt krzywej, węzły określają wpływ każdego z punktów kontrolnych na krzywą, a odpowiednia sekwencja węzłów pozwala na uzyskanie zamkniętych krzywych. Stopień krzywej określa, ile punktów kontrolnych wpływa na jeden rzeczywisty punkt na krzywej. W procedurze zmienne optymalizacyjne stanowią położenia punktów kontrolnych w przestrzeni. Stopień krzywej oraz ilość punktów kontrolnych stanowią parametr wejściowy algorytmu. Wykorzystana procedura optymalizacji bazuje na zmodyfikowanym algorytmie genetycznym [142]. Idea procedury optymalizacyjnej została przedstawiona na rysunku 20.



Rysunek 20. Schemat procedury optymalizacyjnej SSRVE.

Procedura optymalizacji obejmuje następujące etapy:

- a) Inicjalizacja populacji początkowej, która polega na utworzeniu twj populacji w postaci przyjętej ilości osobników o zadanym genotypie. Osobnik stanowi zbiór punktów kontrolnych krzywych NURBS w przestrzeni 2D. Punkty zawarte w genotypie mogą składać się na jedną lub więcej nieprzecinających się krzywych. Początkowe punkty rozłożone są równomiernie na okręgach o ustalonym promieniu początkowym. W celu dywersyfikacji osobników w populacji dodawany jest szum poprzez translację każdego z punktów kontrolnych o losowy wektor.

- b) Renderowanie komórki – na podstawie każdego osobnika tworzona jest komórka SSRVE poprzez rasteryzację krzywych NURBS do grafiki bitmapowej. Wielkość komórki jest z góry ustalona. Jeżeli krzywa NURBS nie mieści się w całości w zadanym obszarze, stosowane są okresowe warunki brzegowe.
- c) Ocena przystosowania – każda komórka SSRVE w populacji podlega ocenie liczbowej. Ocena wyznaczana jest w postaci błędu średniokwadratowego pomiędzy zbiorem wybranych współczynników referencyjnych a ich odpowiednikami uzyskanymi dla komórki SSRVE. W rezultacie osobnik o najmniejszej wartości funkcji błędu uznawany jest za najlepiej dopasowany do referencyjnej mikrostruktury. W przypadku wykrycia błędnego kształtu w wyniku np. przecięcia się krzywych, ocena osobnika jest zawyżana o wartość funkcji kary ϕ_p .
- d) Sprawdzenie warunków stopu tj. osiągnięcia maksymalnej ilości iteracji algorytmu lub uzyskanie błędu dopasowania poniżej przyjętej granicy.

Po zakończeniu każdej iteracji tworzona jest nowa populacja z najlepiej przystosowanych osobników. Zastosowanie dodatkowych operatorów genetycznych na losowej części populacji pozwala na ominięcie minimów lokalnych:

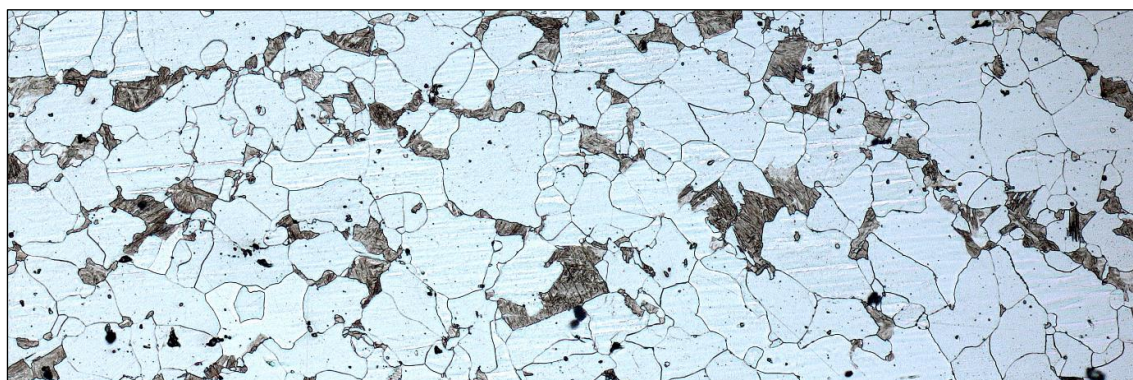
- a) operator krzyżowania – pozwala na wymianę losowej liczby punktów kontrolnych pomiędzy dwoma osobnikami.
- b) Operator mutacji I – zmienia położenie losowych punktów kontrolnych osobnika poprzez translację ich o losowy wektor.
- c) Operator mutacji II – zmienia położenie wszystkich punktów kontrolnych na raz w obrębie komórki SSRVE (tzn. zmienia położenie ziaren)

Procedura optymalizacyjna kończy działanie, jeśli osiągnięto któryś z zadeklarowanych warunków stopu. Osobnik z populacji o najmniejszym błędzie dopasowania do referencyjnej mikrostruktury jest traktowany jako wynikowa komórka elementarna SSRVE.

5.5. Przykładowe SSRVE dla mikrostruktur stali DP (wyniki ilościowe i jakościowe)

W niniejszej pracy przeprowadzono analizę jakościową oraz ilościową zdjęć mikrostruktury typowej stali ferrytyczno-perlitycznej 15G2ANb o zawartości 0.15% węgla, a następnie na ich podstawie utworzono statystycznie podobne elementy objętości o różnej ilości ziaren.

Przykład I (rysunek 21).

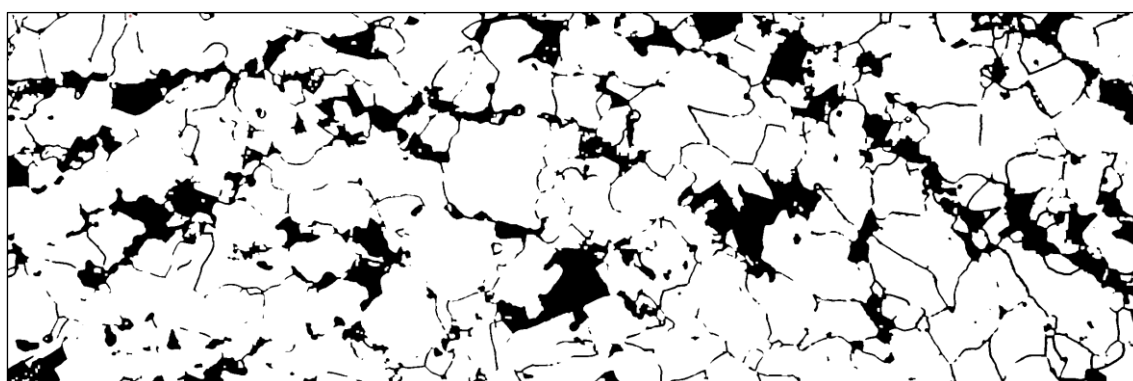


Rysunek 21. Zdjęcie mikrostruktury stali 15G2ANb uzyskane z obserwacji mikroskopem optycznym.

Przed przystąpieniem do wyznaczenia parametrów statystycznych na zdjęciu mikrostruktury zastosowano algorytmy przetwarzania obrazu oraz manualną korektę w celu uzyskania jednoznacznego przypisania każdego z punktów obrazu do jednej z faz, usunięcia wtrąceń (które nie są analizowane), oraz rekonstrukcji morfologii. W tym celu zastosowano kolejno:

- rozmycie z maską 5x5,
- progowanie metodą Otsu [143],
- erozję oraz dylatację z maską 5x5,

Parametry algorytmów zostały dobrane metodą prób i błędów na podstawie wizualnej oceny końcowego wyniku. Referencyjny obraz mikrostruktury posiadał wyraźnie wytrawione granice ziaren oraz liczne wtrącenia które nie mogły zostać automatycznie usunięte przez algorytmy przetwarzania obrazu. Zastosowano algorytm etykietowania połączonych komponentów w celu przeprowadzenia filtracji małych obiektów. Wynik działania filtrów przedstawiono na rysunku 22.



Rysunek 22. Obraz mikrostruktury stali po zastosowaniu algorytmów wstępnego przetwarzania obrazu.

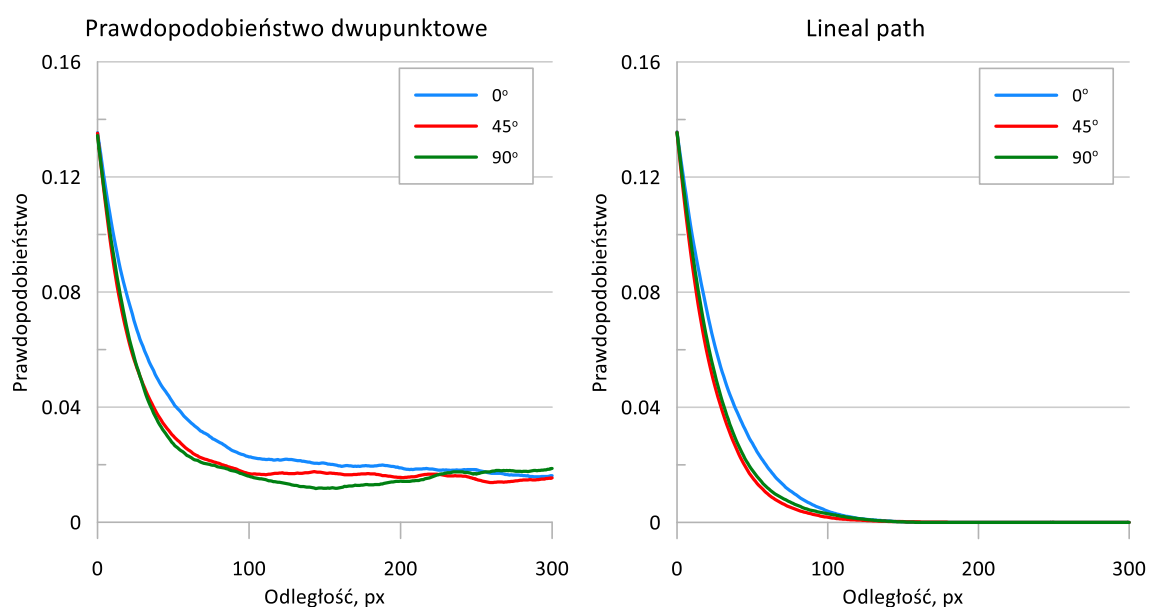
W obecnej postaci obraz nie nadaje się do analizy statystycznej ze względu na obecne bardzo zróżnicowane geometrycznie granice ziaren, których detekcja automatyczna byłaby utrudniona. Konieczna była ręczna korekta polegająca na usunięciu niepożądanych obiektów z obrazu oraz rekonstrukcji wnętrza ziaren. Wynikowy obraz

mikrostruktury spełniający wymagania pozwalające na dalszą analizę statystyczną przedstawiono na rysunku 23.



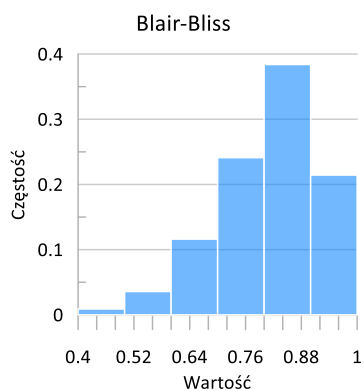
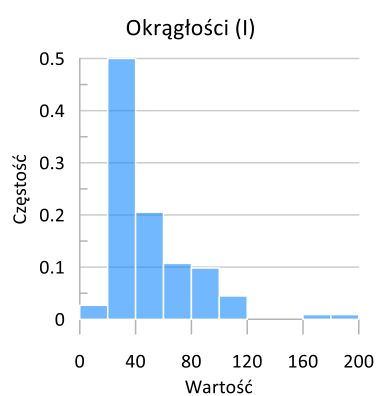
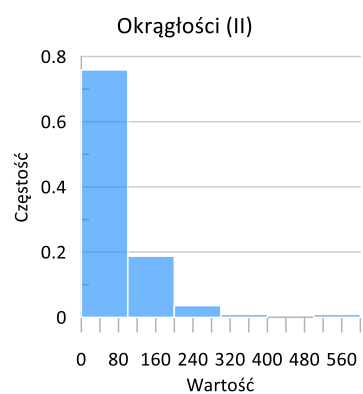
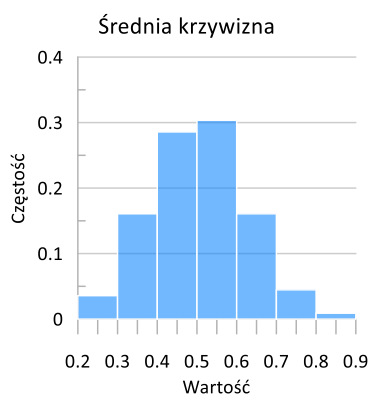
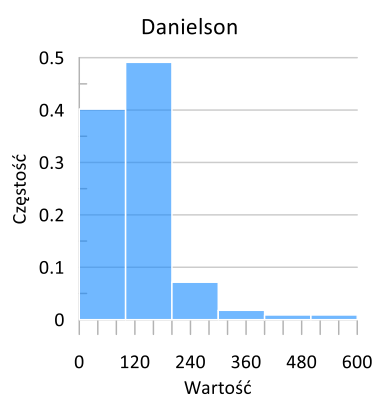
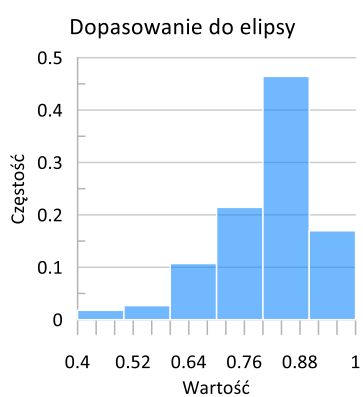
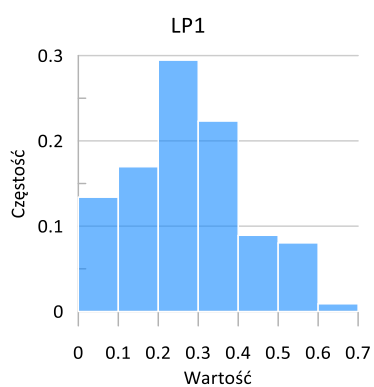
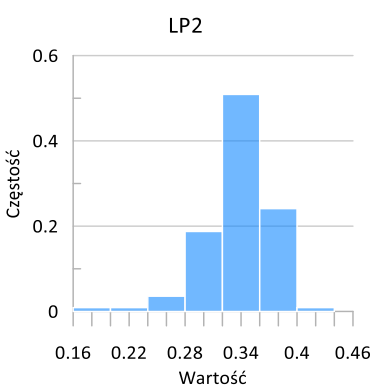
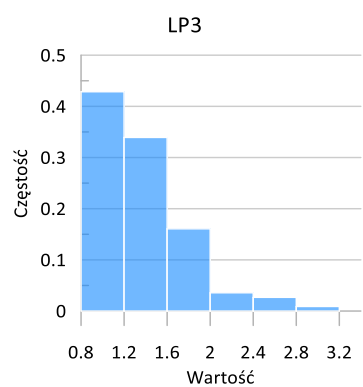
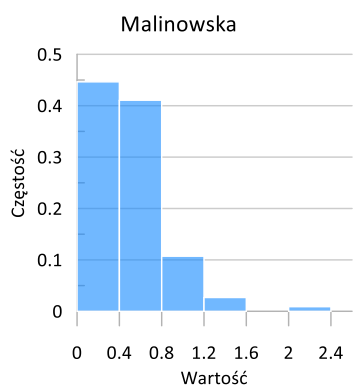
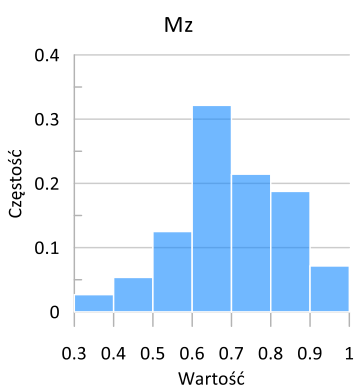
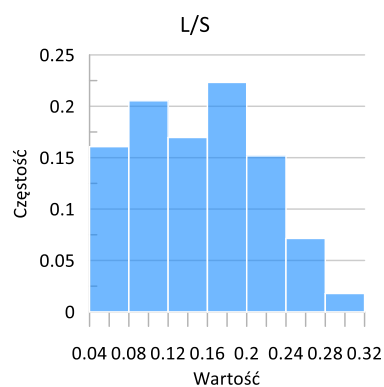
Rysunek 23. Wejściowy obraz mikrostruktury przeznaczonej do analizy statystycznej.

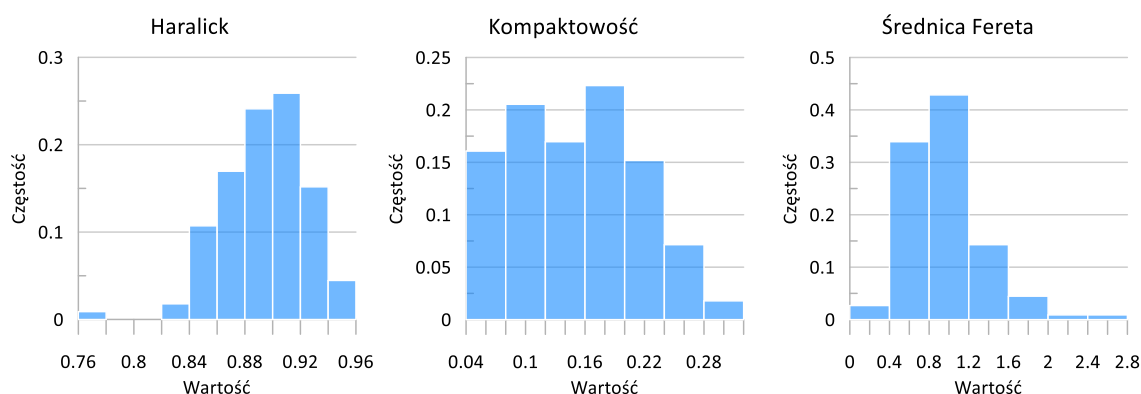
Na analizę statystyczną składało się na wyznaczenie miar statystycznych oraz częstości występowania współczynników kształtu. Ułamek fazowy perlitu (ciemna faza) wyniósł: 0.13. Rysunki 24, 25 przedstawiają wyniki uzyskane w analizie zdjęcia mikrostruktury I.



Rysunek 24. Rozkład wartości funkcji prawdopodobieństwa dwupunktowego oraz lineal path

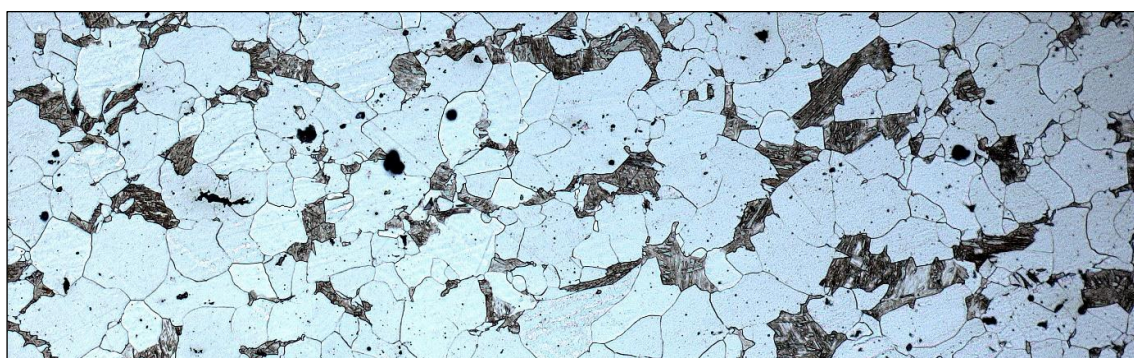
Rozkład prawdopodobieństwa dwupunktowego wyraźnie wskazuje na ukierunkowany poziomo rozkład ziaren, z kolei funkcja *lineal path* na wydłużony charakter pojedynczych ziaren, aż do wielkości 100px odpowiadającej 27 μ m rzeczywistej mikrostruktury.





Rysunek 25. Rozkład prawdopodobieństwa wystąpienia wartości współczynników kształtu.

Przykład II (rysunek 26).

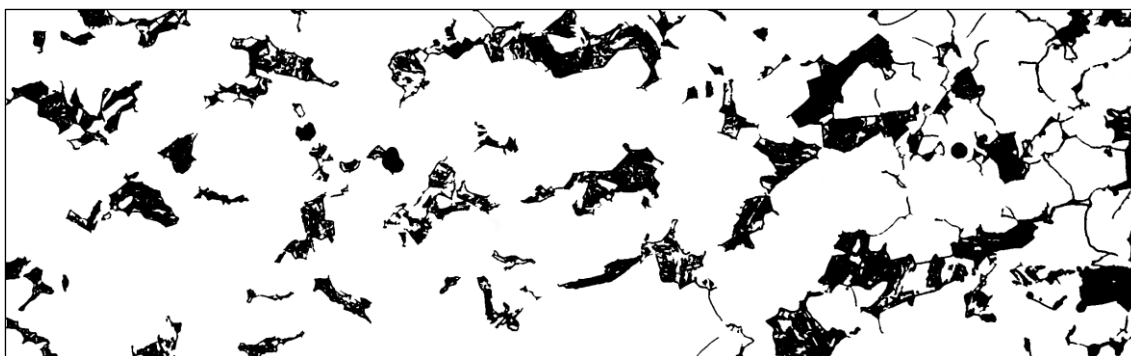


Rysunek 26. Zdjęcie mikrostruktury stali 15G2ANb uzyskane z obserwacji mikroskopem optycznym.

W przykładzie wykorzystano zdjęcie mikrostruktury stali 15G2ANb. Tak jak w przykładzie I, zdjęcie wymaga uprzedniego zastosowania filtrów i rekonstrukcji, aby móc go wykorzystać w dalszej analizie. Zastosowano następujące filtry:

- rozmycie z maską 5x5,
- binaryzacja z progiem 140,
- domykanie i otwieranie z maską 3x3,
- usuwanie małych obiektów

Parametry algorytmów dobrano metodą prób i błędów, tak aby uzyskany wynik posiadał najmniej niepożądanych artefaktów oraz zachował najwięcej cech morfologii wzorcowej mikrostruktury materiału. Wynik działania powyższych algorytmów przedstawiono na rysunku 27.



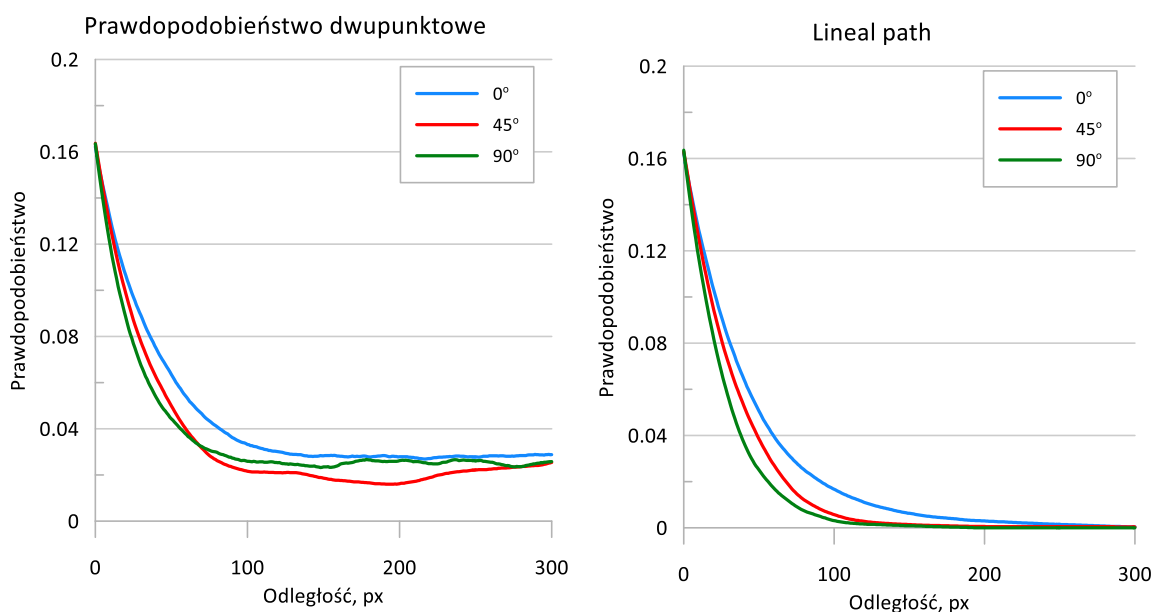
Rysunek 27. Wynik działania automatycznych algorytmów przetwarzania obrazu mikrostruktury.

Głównym problemem jaki napotkano, to utrata ciągłości w przypadku wielu ziaren. Wnętrze ziaren podczas binaryzacji zostało błędnie przydzielone do koloru białego. Finalny obraz mikrostruktury po ręcznej korekcie przedstawiono na rysunku 28.



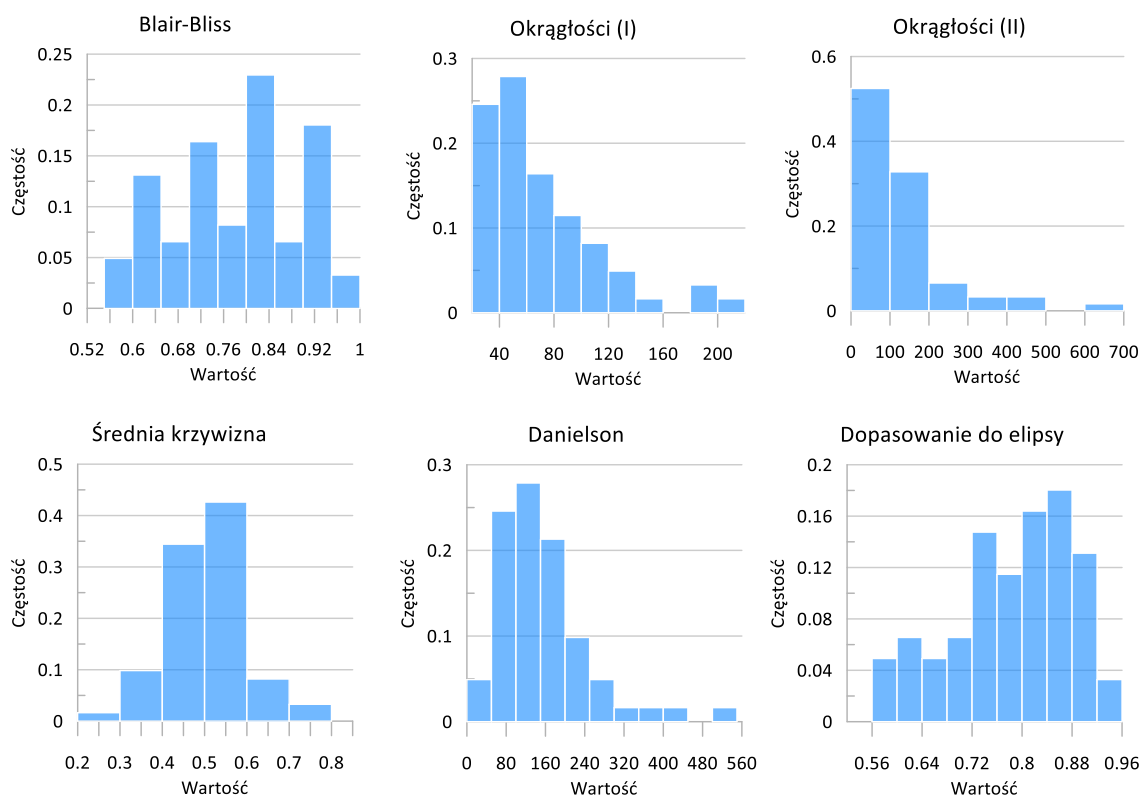
Rysunek 28. Wejściowy obraz mikrostruktury przeznaczonej do analizy statystycznej.

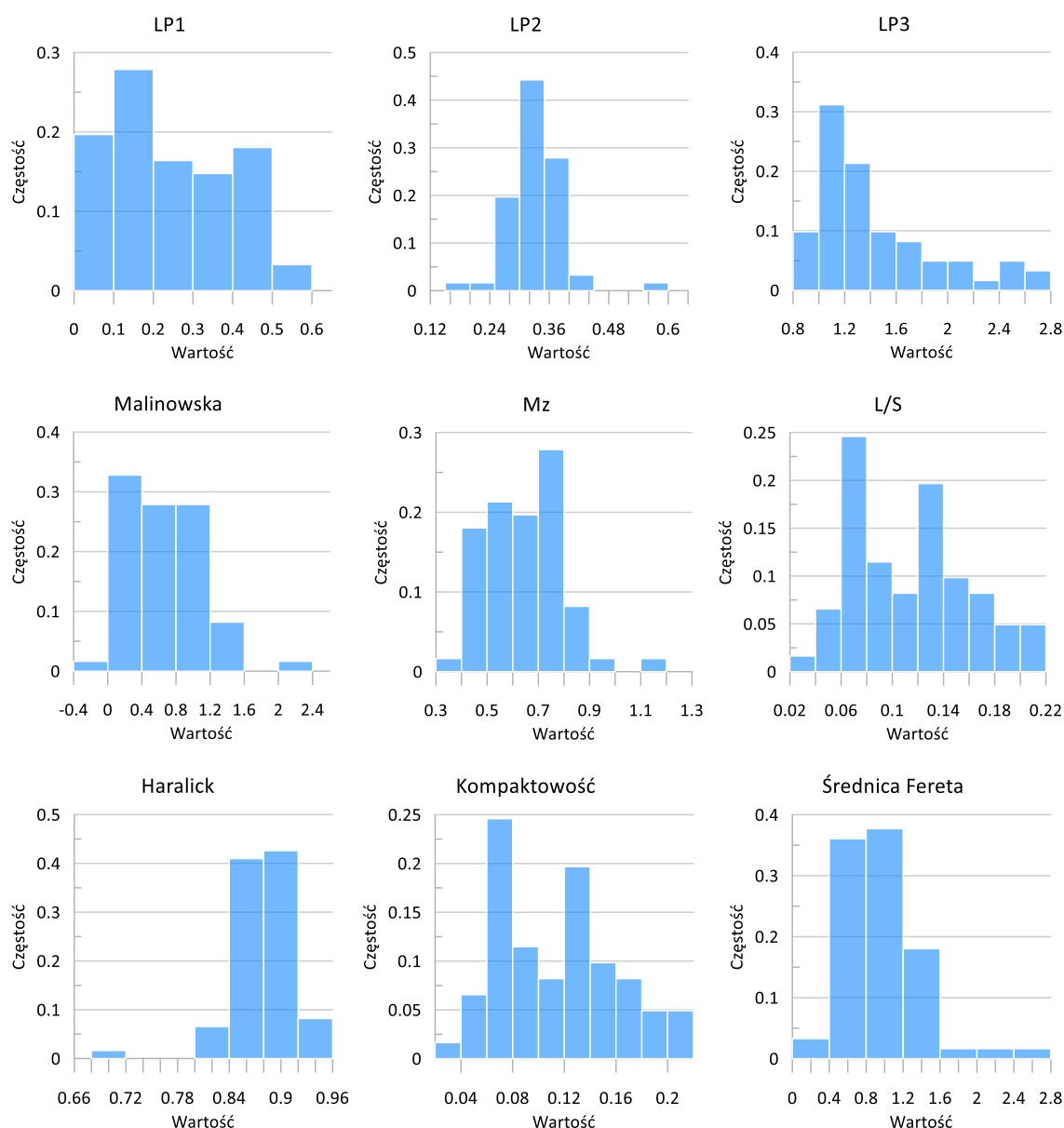
Ułamek fazowy perlitu (ciemna faza) wyniósł 0.16. Rysunki 29, 30 przedstawiają wyniki uzyskane w analizie zdjęcia mikrostruktury z rysunku 28.



Rysunek 29. Rozkład wartości funkcji prawdopodobieństwa dwupunktowego oraz lineal path.

W tym przypadku analiza prawdopodobieństwa dwupunktowego również wskazuje na wyraźny poziomy rozkład ziaren perlitu, a *lineal path* na ich wydłużony charakter sięgający nawet 67 μ m. Obserwowana jest również znaczna ilość ziaren nachylonych pod kątem 45° o wymiarze sięgającym 30 μ m.





Rysunek 30. Rozkłady prawdopodobieństwa wystąpienia współczynników kształtu.

Do oszacowania ilości przedziałów histogramów wykorzystano regułę Freedmana–Diaconisa [144]:

$$h = 2 \frac{IQR(x)}{\sqrt[3]{n}} \quad (74)$$

gdzie: h – wielkość przedziału, IQR – przedział międzykwartylowy, n – ilość obserwacji w próbce x .

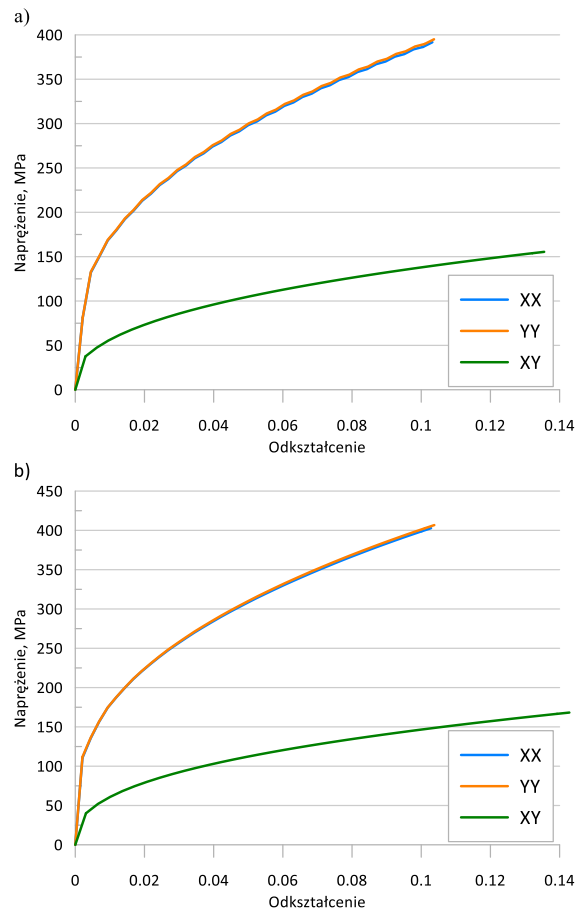
Zdjęcia mikrostruktury w przykładzie I i II zostały uzyskane z tej samej próbki, jednak przedstawiona analiza wykazała nieznaczne różnice w uzyskiwanych wynikach. Jako miarę reprezentatywności współczynnika przyjęto, że wartość dominująca powinna dotyczyć znacznej ilości ziaren w porównaniu do innych wartości. W tabeli 5 zestawiono ocenę reprezentatywności współczynników kształtów dla obu przykładów.

Tabela 5. Reprezentatywne współczynniki kształtu dla przykładów I i II.

Nazwa współczynnika	Wykorzystano w analizie I	Wykorzystano w analizie II
Blair-Bliss	✓	✗
Okrągłości I	✓	✓
Okrągłości II	✓	✓
Średnia krzywizna	✓	✓
Danielson	✓	✓
Dopasowanie do elipsy	✓	✗
LP 1	✓	✗
LP 2	✓	✓
LP 3	✓	✓
Malinowska	✓	✗
Mz	✓	✗
L/S	✗	✓
Haralick	✓	✓
Kompaktowość	✗	✗
Średnica Fereta	✓	✓

Przedstawione zestawienie pokazuje, że wybór reprezentatywnych współczynników jest ściśle uzależniony od wybranego zdjęcia mikrostruktury i nawet dla tych samych materiałów wybór współczynników musi być każdorazowo dokonany osobno. Ilość wartości dominujących na histogramach sugeruje również ilość wtrąceń w komórce SSRVE. Sytuacja taka może być wynikiem błędnej klasyfikacji na etapie automatycznej segmentacji obrazu lub niedoskonałościami na wzorcowym zdjęciu. W procedurze SSRVE zdecydowano się wykorzystać tylko te współczynniki, które były uznane za reprezentatywne zarówno dla mikrostruktury I jak i II.

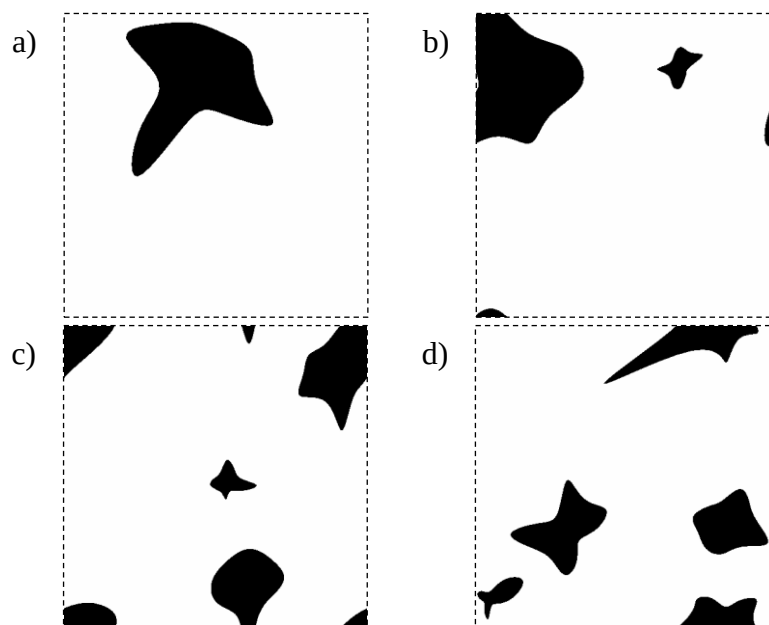
Wykonano również numeryczne testy reologiczne: próby spęczania wzdłuż dwóch osi oraz próbę ścinania. Obliczenia prowadzono z założeniem płaskiego stanu odkształcenia. Numeryczne próby wykonano w aplikacji Abaqus. Wyniki po homogenizacji w postaci krzywych odkształcenie-napężenie przedstawiono na rysunku 31.



Rysunek 31. Krzywe płynięcia uzyskane z testów numerycznych a) dla przykładu I, b) dla przykładu II.

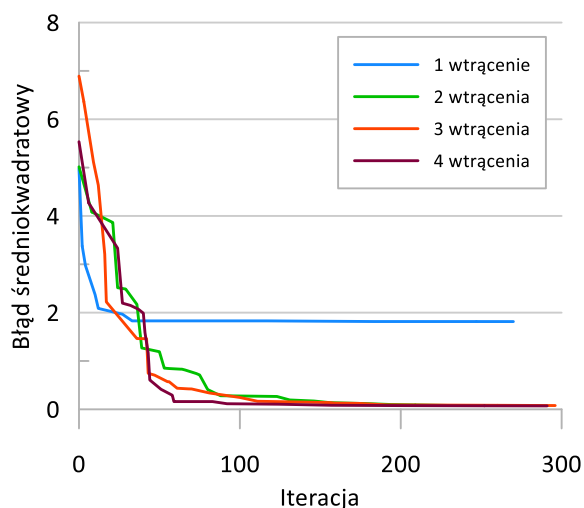
Różnice w charakterystykach krzywych płynięcia są przede wszystkim podyktowane różnicami w ilości perlitu.

Na podstawie uzyskanych danych referencyjnych wygenerowano przykładowe elementy SSRVE zawierające od 1 do 4 wtrąceń perlitu, co przedstawiono na rysunku 32.



Rysunek 32. Przykładowe elementy SSRVE uzyskane dla mikrostruktury I: jednym (a) dwoma (b), trzema (c) i czterema (d) wtrąceniami.

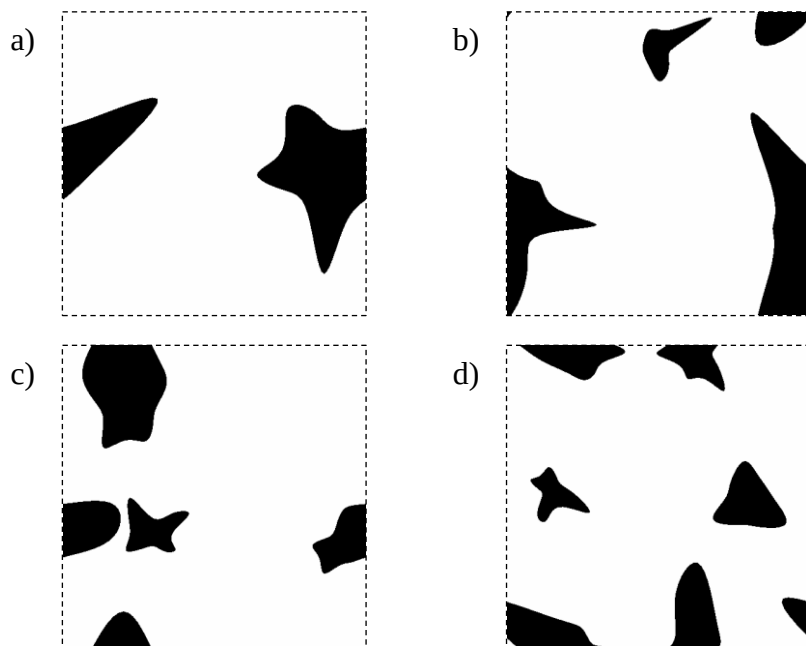
W każdym przypadku funkcja celu stanowiła błąd średniokwadratowy ujmujący wybrane reprezentatywne współczynniki kształtu (z wagą 1) oraz ułamek objętości perlitu (z wagą 100). Warunek zakończenia optymalizacji został ustalony na 1000 iteracji lub osiągnięcie wartości błędu poniżej 0.001. Zestawienie wyników optymalizacji przedstawiono na rysunku 33.



Rysunek 33. Zmiana błędu dopasowania SSRVE w poszczególnych iteracjach optymalizacji dla mikrostruktury I.

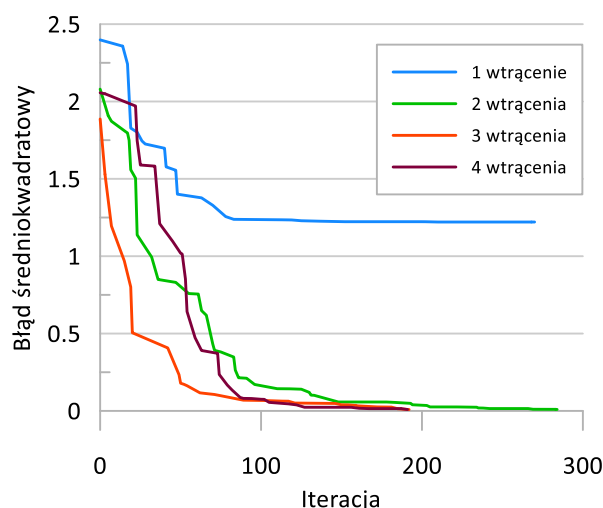
W każdym przypadku optymalizacja kończyła się z powodu spełnienia pierwszego warunku. Funkcja celu nie ulegała znacznej poprawie już po 200-ej iteracji (50 w przypadku jednoelementowego SSRVE). Zebrane wyniki pokazują, że stopień dopasowania jednoelementowego SSRVE był zdecydowanie niższy niż SSRVE wieloelementowych. Sytuację tę można tłumaczyć dużą szerokością poszczególnych przedziałów histogramu współczynników, co powodowało, że dokładne odwzorowanie wartości nie było możliwe w przypadku elementu SSRVE z pojedynczym wtrąceniem.

Podobną metodologię zastosowano w przypadku mikrostruktury II. Na podstawie wybranych, reprezentatywnych współczynników kształtu i ułamka fazowego utworzono cztery komórki elementarne, różniące się ilością wtrąceń (rysunek 34).



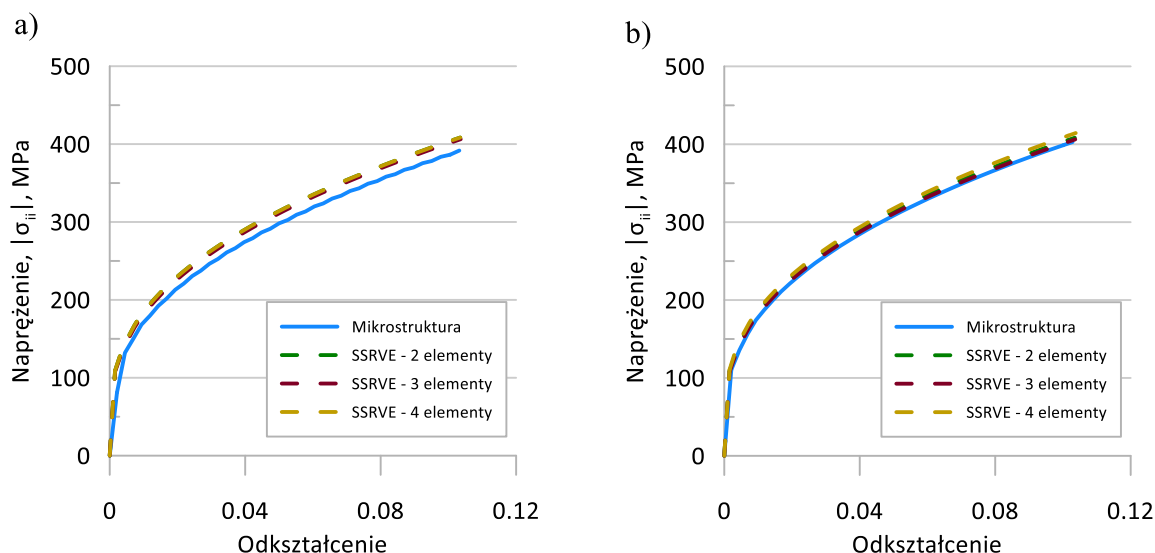
Rysunek 34. Przykładowe elementy SSRVE uzyskane dla mikrostruktury II: jednym (a) dwoma (b), trzema (c) i czterema (d) wtrąceniami.

Podobnie jak w poprzednim przypadku dokonano analizy zmiany błędu dopasowania w kolejnych iteracjach optymalizacji (przyjęto takie same miary wag), która pokazała, że pojedynczy element nie jest w stanie przybliżyć parametrów referencyjnej mikrostruktury tak dobrze, jak wieloelementowe SSRVE.



Rysunek 35. Zmiana błędu dopasowania SSRVE w poszczególnych iteracjach poszukiwania SSRVE dla mikrostruktury II.

W ramach weryfikacji wykonano test jednoosiowego spęczania elementów SSRVE. Wyniki w postaci krzywych płynięcia uzyskanych po numerycznej homogenizacji zaprezentowano na rysunku 36.



Rysunek 36. Krzywe płynięcia z testu jednoosiowego śpężania a) SSRVE dla mikrostruktury I, b) SSRVE dla mikrostruktury II.

Najlepsze dopasowanie uzyskano dla krzywych czteroelementowych, w których średnia kwadratowa błędów wyniosła odpowiednio 11.15 (mikrostruktura I) oraz 9.36 (mikrostruktura II).

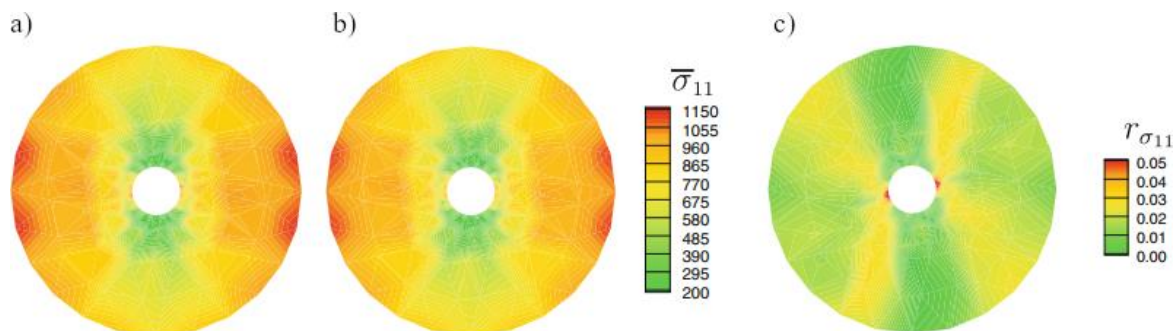
Przeprowadzone testy numeryczne pozwoliły na wyciągnięcie wniosków i sformułowanie wytycznych dla opracowania najlepszego SSRVE w niniejszej pracy. W związku ze znacznym wpływem losowości na uzyskiwane wyniki – płynącej z samej natury optymalizacji opartej o algorytm genetyczny – tworzenie elementów SSRVE nie jest procedurą deterministyczną. Dlatego konieczne było wykonanie testów wielokrotnie dla tych samych założeń. Na potrzeby niniejszej pracy, każdy test wykonano trzykrotnie. Choć morfologia ziaren perlitu zmieniała się w każdym przypadku, stopień dopasowania i ogólne wnioski pozostawały jednak niezmiennie w każdej z prób.

5.1.1. Praktyczne wykorzystanie elementów SSRVE w symulacjach numerycznych

Statystycznie Podobny Reprezentatywny Element Objętości znalazł zastosowanie głównie w obliczeniach wielkoskalowych typu FE^2 , gdzie w dwóch lub więcej skalach prowadzone są symulacje numeryczne z wykorzystaniem metody elementów skończonych. Ideą metody FE^2 jest podpięcie elementu reprezentatywnego mikrostruktury do każdego punktu makrostruktury. Podstawową zaletą procedury jest możliwość zastąpienia fenomenologicznego prawa konstytutywnego dla makrostruktury uśrednionymi wynikami naprężenia i odkształcenia uzyskanymi z mikrostruktury [145]. Ze względu na wielkość elementu RVE może być to procedura niezwykle kosztowna obliczeniowo. Dlatego spodziewane są znaczące korzyści z wykorzystania w tym zakresie komórek SSRVE.

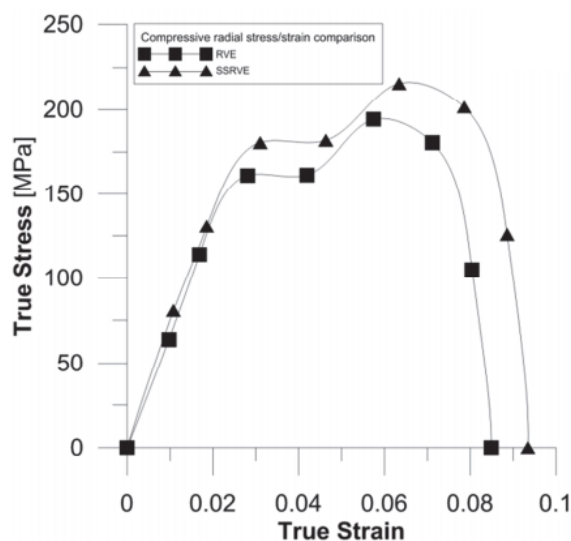
Balzani i in. zastosowali proste testy numeryczne w celu walidacji i weryfikacji poprawności elementów SSRVE [124]. Jak już wspomniano, ograniczały się one do prób rozciągania dwuwymiarowej komórki SSRVE w ortogonalnych kierunkach oraz próby ścinania. We wszystkich przypadkach uzyskano bardzo dobrą zgodność wyników. Podobną zgodność w odpowiedzi mechanicznej potwierdzili Scheunemann i in. dla

reprezentatywnych elementów trójwymiarowych [146]. Schröder i in. [125] wykorzystali elementy SSRVE w numerycznych testach FE^2 typu Hole Expansion dysku ze stali dwu fazowej osiągając bardzo mały błąd bezwzględny (rysunek 37).



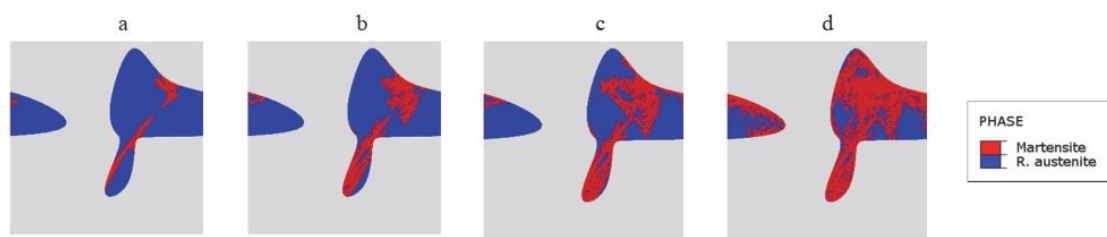
Rysunek 37. Rozkład naprężeń w teście Hole Expansion z wykorzystaniem a) elementu RVE b) elementu SSRVE oraz c) różnice w otrzymanych wynikach [125].

W pracy [147] zastosowano elementy SSRVE w symulacji numerycznej przemysłowego procesu tłoczenia elementu typu crashbox ze stali dwu fazowej. Porównano czasy obliczeń z uwzględnieniem elementów RVE i SSRVE osiągając znaczące przyspieszenie obliczeń. Metodyka SSRVE znalazła również praktyczne zastosowanie w wieloskalowej analizie numerycznej ciągnięcia prętów ze stali ferrytyczno-perlitycznej [148] oraz stali TRIP [149]. W obydwu przypadkach udało się uzyskać zadowalającą zgodność wyników z RVE (rysunek 38).



Rysunek 38. Porównanie krzywych płynięcia z homogenizacji elementu RVE i SSRVE w symulacjach ciągnięcia [148]

W pracy [150] wykorzystano z powodzeniem SSRVE w symulacjach przemiany TRIP (ang. *transformation induced plasticity*) zachodzącej podczas odkształcenia plastycznego i transformacji austenitu szczątkowego w martenzyt (rysunek 39). W efekcie czas obliczeń został znacząco skrócony.



Rysunek 39. Wzrost ziaren martenzytu w poszczególnych etapach przemiany w komórce SSRVE.

Metodyka SSRVE nie ogranicza się tylko do materiałów stalowych. SSRVE zostało wykorzystane w [151] do uproszczenia mikrostruktury nieciągłych kompozytów włóknistych. Porównano własności mechaniczne referencyjnego RVE i wygenerowanej komórki, co potwierdziło po raz kolejny słuszność zastosowania tego rozwiązania do redukcji kosztów obliczeniowych.

5.6. Podsumowanie

W niniejszym rozdziale pokazano, że metodyka SSRVE może być z powodzeniem stosowana w zagadnieniach mechanicznych do obniżenia kosztów i czasu obliczeń wielkoskalowych symulacji numerycznych przy zachowaniu dużego stopnia wiarygodności wyników. W pracy [150] pokazano, że nie jest ona tylko ograniczona do symulacji odkształceń i może zostać zaadaptowana również w problematyce przemian fazowych. Zagadnienie wykorzystania SSRVE w symulacjach przemian fazowych będzie dalej badane w niniejszej pracy. Dotychczasowe prace poświęcone metodzie tworzenia statystycznych reprezentacji mikrostruktur skupiały się głównie na idei samej metody oraz na podstawach matematycznych oceny reprezentatywności generowanych mikrostruktur materiałowych. Autorzy metody SSRVE wykorzystali w swoim podejściu funkcję widmowej gęstości mocy i funkcję prawdopodobieństwa jednopunktowego, a w późniejszych pracach również średnią krzywiznę i tensor Minkowskiego. O ile wybór ten wydaje się słuszny w kontekście wykorzystania elementów reprezentatywnych w symulacjach odkształcenia, to brak ujęcia w funkcji celu morfologii ziaren może znacząco obniżyć wiarygodność SSRVE w przypadku innych symulacji numerycznych, np. przemian fazowych. Kontrowersyjne wydaje się również wykorzystanie przez autorów tylko prostych kształtów opartych o krzywe sklejące z czterema punktami kontrolnymi. Dodatkowo, jak zauważają sami autorzy, użycie metod optymalizacji gradientowych powoduje znaczne trudności w znalezieniu globalnego minimum funkcji celu. Rozwiązanie tego problemu autorzy poszukiwali w metodzie ruchomej ramki. Wydaje się jednak, że zastosowanie metod optymalizacji inspirowanych naturą stanowiłoby alternatywne, o ile nie lepsze rozwiązanie pod kątem zbieżności i prędkości obliczeń. W niniejszej pracy zdecydowano się na stworzenie reprezentacji SSRVE za pomocą znacznie bardziej elastycznych krzywych NURBS trzeciego stopnia, w który wykorzystano 14 punktów kontrolnych pozwalających w znacznie szerszym zakresie modyfikować kształt ziaren. Dodatkowo, do opisu mikrostruktury zastosowano, obok funkcji statystycznych, szereg miar geometrycznych, których wybór uwarunkowano uprzednią analizą reprezentatywności. Wysoka zbieżność wyników pokazuje, że takie podejście stanowi alternatywę dla wcześniej przedstawionych miar. W pracy wykorzystano metodę optymalizacji wykorzystującą zmodyfikowany algorytm genetyczny pozwalający na przeprowadzenie optymalizacji topologicznej ziaren

mikrostruktury opisanych krzywymi NURBS. Przeprowadzona analiza pokazała, że przyjęta metoda posiada dobrą zbieżność i pozwala na skuteczne unikanie minimów lokalnych. Wykonane testy numeryczne pokazały zbliżone zachowanie w warunkach odkształcenia do zachowania referencyjnej mikrostruktury. Kwestią otwartą zostaje ocena jednoznaczności otrzymywanych wyników. Należy również wykonać dodatkowe testy z wykorzystaniem symulacji numerycznych w których morfologia mikrostruktury odgrywa kluczową rolę w celu oceny poprawności przyjętych miar. Słabym punktem przyjętej przeze mnie procedury jest duża zależność uzyskiwanych wyników od jakości danych wejściowych, tj. dokładności dopasowania binarnej mikrostruktury do referencyjnego obrazu. Część cech morfologicznych może ulec utraceniu w trakcie działania algorytmów przetwarzania obrazu lub manualnej korekcie, szczególnie w przypadku błędnej identyfikacji obiektu na obrazie (np. wtrącenia lub granice ziarna). Rozdzielczość referencyjnego obrazu jak również komórki SSRVE nie pozostają również bez znaczenia w kwestii dokładności opisu morfologii. Przedstawione powyżej testy numeryczne i wyciągnięte z nich wnioski stanowiły podstawę do zbudowania w rozdziale 7 komórek SSRVE wykorzystywanych do modelowania przemian fazowych.

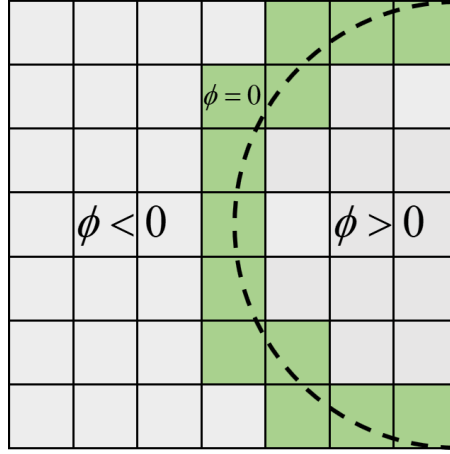
6. Model przemian fazowych wykorzystujący rozwiązanie równania dyfuzji węgla z ruchomą granicą międzyfazową

Rozdział zawiera opis modelu przemian fazowych w stalach wykorzystującego rozwiązanie równania ruchu granicy międzyfazowej i dyfuzji węgla. Analizowane były dwa typy przemian fazowych: austenityczna (przy nagrzewaniu) oraz ferrytyczna (przy chłodzeniu). W rozdziale omówione są matematyczne i numeryczne aspekty rozwiązania problemu ruchu granicy z wykorzystaniem metody zbioru poziomic, jak również rozwiązanie równania dyfuzji węgla. Przedstawione są założenia oraz konieczne modyfikacje metody pozwalające na przeprowadzenie symulacji numerycznej dyfuzyjnych przemian fazowych w stalach z uwzględnieniem obrazu mikrostruktury zawierającego wiele ziaren. Wykonana została identyfikacja współczynników oraz analiza wrażliwości zaprezentowanego rozwiązania.

6.1. Modelowanie granicy międzyfazowej za pomocą metody poziomic

Metoda zbioru poziomic (ang. *Level Set Method*, *LSM*) należy do grupy metod niejawnych śledzenia frontu przemiany. Oznacza to, że granica nie jest zadana bezpośrednio za pomocą zbioru punktów lub krzywych, a jest wynikiem ewaluacji pewnej funkcji. Metoda LSM opracowana została przez Oshera i Sethiana w 1988 roku [152] i została doceniona w zróżnicowanych problemach modelowania położenia i przemieszczania się obszarów rozdzielonych ostrą granicą. Obecnie metoda ta jest szeroko wykorzystywana w symulacjach wielofazowych przepływów w mechanice płynów [153], mechanice ciał stałych [154], biologii [155], medycynie [156], grafice [157], zagadnieniach optymalizacyjnych [158] oraz w wytwarzaniu przyrostowym [159]. Wszechstronność tej techniki została również zauważona w modelowaniu zjawisk zachodzących w obrębie mikrostruktury materiału, o czym świadczą prace z zakresu modelowania rozrostu ziaren [160] czy rekrytalizacji materiałów polikrystalicznych [161].

LSM zakłada rozdzielenie przestrzeni obliczeniowej na dwa regiony tj. dodatni i ujemny. Miejsce gdzie oba regiony spotykają się wyznacza granicę faz, zwaną zerową poziomicą – *zero level set* (rysunek 40).



Rysunek 40. Podział przestrzeni obliczeniowej w metodzie poziomicy.

Każdy z regionów reprezentuje oddzielną fazę lub oddzielne własności materiału. Matematyczna postać granicy podziału Γ w metodzie poziomicy zapisana może zostać formalnie:

$$\Gamma = \{x \in \Omega \mid \phi(x) = 0\}, \quad \phi: \Omega \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \quad (75)$$

Zakładając, że przemieszczenie granicy następuje z prędkością F normalną do granicy, otrzymujemy:

$$\frac{d\Gamma}{dt} = F\vec{n} \quad (76)$$

oraz zakładając, że granica w każdym kroku czasowym t zawsze położona jest na zerowej poziomicy:

$$\phi(\Gamma(t), t) = 0 \quad \forall t \quad (77)$$

to pochodna zupełna po czasie musi być równa 0:

$$0 = \frac{d}{dt} \phi(C(t), t) = \nabla \phi \frac{dC}{dt} + \partial_t \phi \quad (78)$$

Pozwala to wyprowadzić zależność na ewolucję funkcji ϕ w czasie:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\nabla \phi \frac{dC}{dt} = -\nabla \phi F \vec{n} \quad (79)$$

gdzie jednostkowy wektor normalny do granicy międzyfazowej jest zapisany jako stosunek gradientu funkcji ϕ do modułu gradientu:

$$\vec{n} = \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \quad (80)$$

Finalna postać równania poziomicy przyjmuje postać:

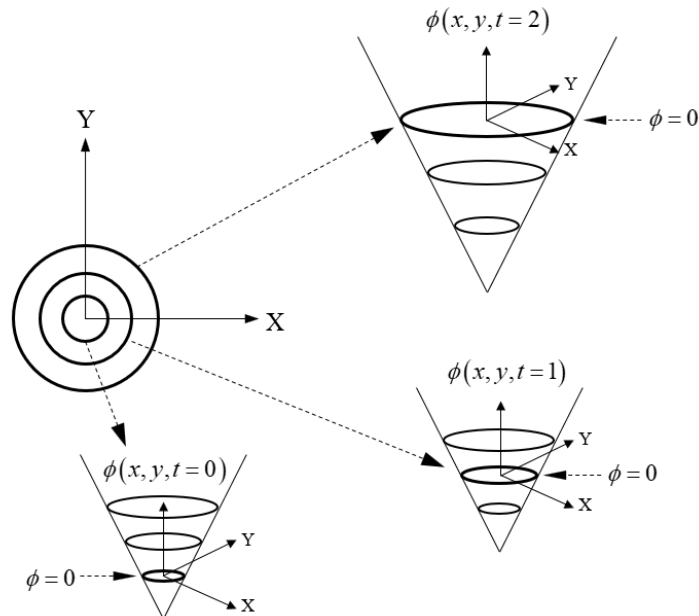
$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + F |\nabla \phi| = 0 \quad (81)$$

gdzie funkcja pola F definiuje prędkość granicy zależną od sił zewnętrznych i wewnętrznych. W praktyce rozpatrywane są zwykle zagadnienia ruchu granicy z prędkością w kierunku normalnym do jej powierzchni zdefiniowanym równaniem (80)

oraz ruch sterowany średnią krzywizną, która w przypadku metody LSM przyjmuje postać:

$$\kappa = \nabla \cdot \vec{n} = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right) \quad (82)$$

Rozwiązanie równania (81) pozwala na uzyskanie położenia granicy w kolejnych krokach czasowych, co schematycznie pokazano na rysunku 41.

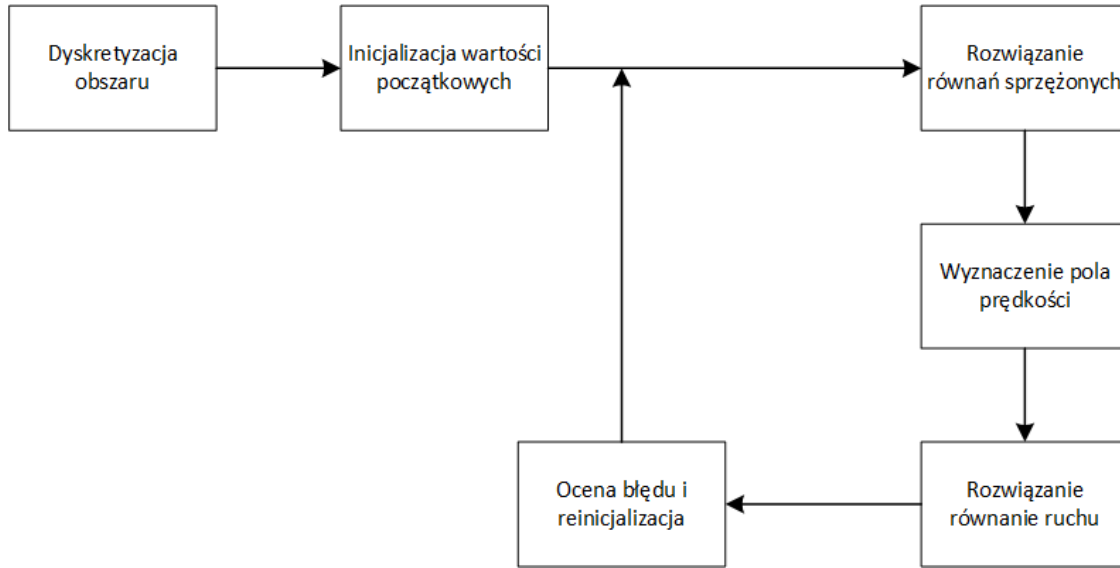


Rysunek 41. Schemat ewolucji granicy za pomocą metody Level Set.

Z numerycznego punktu widzenia równanie (81) należy do grupy równań hiperbolicznych adwekcji i jego rozwiązanie numeryczne wymaga podjęcia dodatkowych kroków w celu uzyskania stabilnego rozwiązania bez oscylacji. W tym celu wprowadza się do równania sztuczny człon dyfuzji lub lepkości, który działa tylko w kierunku ruchu [162].

Choć równanie poziomic jest wystarczające do rozwiązania samego problemu ruchu granicy, wymaga ono zdefiniowania wektorowego pola prędkości migracji granicy. Dlatego w praktycznych rozwiązaniach jest ono zwykle sprzężone z równaniami, które pozwalają na oszacowanie prędkości granicy bezpośrednio np. za pomocą równania Naviera-Stokesa lub pośrednio z wykorzystaniem gradientu temperatury lub energii.

Konwencjonalne rozwiązanie problemu wykorzystującego metodę LSM zakłada iteracyjne wykonanie określonego zbioru kroków w celu ewaluacji rozwiązania w każdym kroku czasowym (rysunek 42).



Rysunek 42. Schemat algorytmu LSM.

Dyskretyzacja obszaru obliczeniowego jest ściśle związana ze sposobem i formą rozwiązania równania poziomicy. Wielkość elementu skończonego musi być jednak dobrana tak, by uwzględnić początkowy stan układu (wielkość poszczególnych regionów). Zastosowanie zbyt rzadkiej siatki może prowadzić do wprowadzenia do rozwiązania błędów numerycznych już na etapie inicjalizacji rozwiązania.

Inicjalizacja początkowego rozwiązania polega na zastosowaniu funkcji charakterystycznej do opisu regionu Ω w pierwszym kroku czasowym. Dominującą metodą inicjalizacji spotykaną w literaturze jest zastosowanie funkcji odległości ze znakiem (ang. *Signed Distance Function, SDF*). Każdemu stopniowi swobody w układzie przypisana jest wartość równa odległości danego punktu, w układzie globalnym, do najbliższego punktu na granicy. W zależności od fazy (obszaru) przypisana wartość ma znak dodatni lub ujemny. Jeśli punkt leży na granicy przyjmuje on wartość równą 0.

$$\phi(\mathbf{x}) = \begin{cases} +d(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Omega^+ \\ 0 & \mathbf{x} \in \Gamma \\ -d(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Omega^- \end{cases} \quad (83)$$

$$d(\mathbf{x}) = \min_{\mathbf{x}_0 \in \Gamma} |\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|$$

W literaturze spotykane są również rozwiązania wykorzystujące funkcję skokową Heaviside'a, choć już w [163] autorzy zauważają, że funkcje gładkie (o ciągłych pochodnych cząstkowych wszystkich rzędów) dają dokładniejsze rozwiązania.

Prędkość w problemach ruchu granicy jest zwykle zależnością wynikającą pośrednio lub bezpośrednio z podstaw fizycznych danego zjawiska lub właściwości ośrodka. W każdym punkcie granicy wektor prędkości może mieć inną wartość oraz kierunek wynikające z aktualnego stanu układu. W większości problemów numerycznych prędkość granicy może zostać wyznaczona tylko bezpośrednio na samej granicy, jednak charakter różniczkowy funkcji ruchu sprawia, że konieczne jest wykonanie ekstrapolacji wektora prędkości na cały region obliczeniowy. Procedura ta w terminologii funkcji poziomicy nazywana jest przedłużeniem prędkości (ang. *velocity extension*). Trywialna

forma tej procedury obejmuje przypisanie każdemu stopniowi swobody w siatce wektora prędkości z najbliższego punktu na granicy obszarów. Elastyczność metody LSM pozwala jednak na dowolną implementację tej procedury uwzględniając nieciągłości domeny czy nagłe, lokalne zmiany prędkości w danym miejscu. Jedną z pierwszych metod implementacji procedury przedłużenia prędkości była metoda szybkiego marszu (ang. *fast marching* [164]). Z kolei Chen [165] zaproponował procedurę przedłużenia prędkości poprzez rozwiązanie równania adwekcji.

Zdefiniowane pole prędkości pozwala rozwiązać problem ruchu granicy. Po przejściu na sformułowanie słabe równanie różniczkowe jest możliwe do rozwiązania konwencjonalnymi metodami obliczeniowymi, takimi jak metoda różnic skończonych czy metoda elementów skończonych. W niniejszej pracy została wykorzystana metoda rozwiązania równania (81) bazująca na wprowadzeniu członu dyfuzyjnego i zastosowaniu stabilizacji metodą Streamline Upwind Petrov Galerkin (SUPG) [166]. W metodzie tej funkcja wagowa jest zdefiniowana w postaci:

$$W_I = N_I + \frac{\alpha h u_k}{2 |\mathbf{u}|} \frac{\partial N_I}{\partial x_k} \quad (84)$$

gdzie: N_I – standardowa funkcja interpolacyjna w metodzie Galerkin, h – wymiar charakterystyczny siatki, u_k – prędkość adwekcji, α – parametr wagowy schematu SUPG. Końcowy układ równań przyjmuje postać:

$$\mathbf{M}\dot{\phi} + \mathbf{K}\phi = 0 \quad (85)$$

gdzie macierze mas ($\mathbf{M}$) oraz sztywności ($\mathbf{K}$) przyjmują następujące postacie:

$$\begin{aligned} \mathbf{M} &= \int \left(N_I N_J + \frac{\alpha h u_k}{2 |\mathbf{u}|} \frac{\partial N_I}{\partial x_k} N_J \right) d\Omega \\ \mathbf{K} &= \int \left(N_I u_p \frac{\partial N_J}{\partial x_p} + \frac{\alpha h u_k}{2 |\mathbf{u}|} \frac{\partial N_I}{\partial x_k} u_p \frac{\partial N_J}{\partial x_p} \right) d\Omega \end{aligned} \quad (86)$$

gdzie: $I, J = 1, \dots$, ilość stopni swobody, $k, p = 1, \dots$, ilość wymiarów.

Zgodnie z warunkiem Couranta–Friedrichsa–Lewy’ego (CFL) dla schematów explicite [167], krok czasowy Δt w dyskretyzacji czasowej musi spełniać warunek:

$$CFL = \frac{\|\mathbf{u}\| \cdot \Delta t}{h} \leq 1 \quad (87)$$

W obliczeniach przyjęto schemat całkowania po czasie θ :

$$\phi_j^{n+1} = (\mathbf{M} + \Delta t \theta \mathbf{K})^{-1} (\mathbf{M} - \Delta t (1 - \theta) \mathbf{K}) \phi_j^n \quad (88)$$

gdzie: $\theta = 0$ – schemat jawny Eulera (ang. *explicit Euler forward*), $\theta = 1/2$ – schemat Cranka-Nicholsona, $\theta = 2/3$ – schemat Galerkin, $\theta = 1$ – schemat niejawny Eulera (ang. *implicit Euler backward*). W prezentowanych w pracy modelach numerycznych wykorzystano niejawny schemat Eulera.

Stabilizacja równania za pomocą sztucznego członu dyfuzji prowadzi do utraty własności przez funkcję odległości wraz z kolejnymi iteracjami algorytmu. Na pogorszenie jakości rozwiązania ma również wpływ akumulacja błędów numerycznych rozwiązań. Oba te

czynniki sprawiają, że zerowa poziomica może ulec degradacji, co prowadzić będzie do jej zniekształcenia lub rozciągnięcia i spowoduje znaczną degradację rozwiązania. Dlatego w niezmodyfikowanych wersjach metody zbioru poziomicy konieczne jest okresowe przeprowadzenie tzw. reinicjalizacji rozwiązania (ang *redistancing*), polegającej na przywróceniu własności funkcji odległości bez zmiany położenia zerowej poziomicy. Reinicjalizacja może zostać zrealizowana zarówno poprzez rozwiązanie równania różniczkowego [168] jak i metodami analitycznymi. W pierwszym przypadku konieczne jest rozwiązanie równania w postaci:

$$\phi_t = \text{sgn}(\phi_0)(1 - |\nabla \phi|) \quad (89)$$

z warunkiem początkowym w postaci aktualnego rozkładu poziomicy odległości ϕ_0 , w sposób iteracyjny do momentu uzyskania stanu ustalonego w całości domeny obliczeniowej rozwiązania, tj. spełnienia warunku:

$$|\nabla \phi| = 1 \quad (90)$$

Równanie (89), pomimo relatywnie szybkiej zbieżności wymaga jednak wielokrotnego rozwiązania w całej domenie, co zdecydowanie zwiększa czas obliczeń.

Modyfikacje metody [169, 170] wprowadzają ograniczenie do lokalnych modyfikacji czy gładką funkcję signum, w postaci:

$$\text{sgn}(\phi) = \frac{\phi}{\sqrt{\phi^2 + \varepsilon^2}} \quad (91)$$

gdzie: ε – wartość tożsama z wielkością elementu siatki.

Metody reinicjalizacji wykorzystujące algorytmy analityczne obejmują zastosowanie algorytmów Dijkstry, Tsitsiklisa, *fast marching* czy *fast sweeping*. Algorytmy te stosuje się w celu wprowadzenia korekty do rozwiązania poprzez znalezienia najbliższego punktu leżącego na granicy i na podstawie ich położenia aproksymacji poprawnej odległości dla każdego węzła siatki.

Dobre efekty reinicjalizacji uzyskano za pomocą tzw. metody geometrycznej [171] wykorzystującej własności funkcji kształtu MES do znalezienia dokładnego położenia zerowej poziomicy w obrębie elementu dyskretyzującego powierzchnię. Dla każdego elementu, przez który przechodzi zerowa poziomica, tj. dla każdego elementu, dla którego spełnione jest kryterium:

$$\forall_{\phi \in \Omega_E} \min(\phi) \cdot \max(\phi) \leq 0 \quad (92)$$

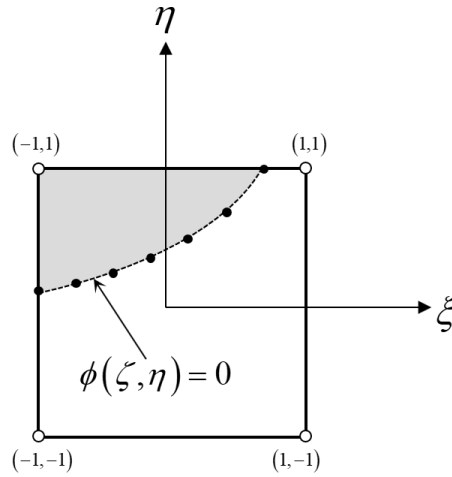
wyznaczany jest pewien zbiór punktów leżących na zerowej poziomicy. Funkcje kształtu elementu w lokalnym układzie współrzędnych są wykorzystywane do oszacowania współrzędnych miejsc, w których granica przecina boki elementu referencyjnego. Np. w przypadku elementu czworobocznego z interpolacją I rzędu wykorzystywana pozycja punktów na zerowej poziomicy jest interpolowana w lokalnym układzie odniesienia elementu za pomocą równania:

$$\begin{aligned}\phi(\xi, \eta) = & \frac{1}{4}(1-\xi)(1-\eta)\Phi_e(-1, -1) + \frac{1}{4}(1+\xi)(1-\eta)\Phi_e(1, -1) \\ & + \frac{1}{4}(1-\xi)(1+\eta)\Phi_e(-1, 1) + \frac{1}{4}(1+\xi)(1+\eta)\Phi_e(1, 1)\end{aligned}\quad (93)$$

Gęstość próbkowania jest kontrolowana za pomocą parametru n_p .

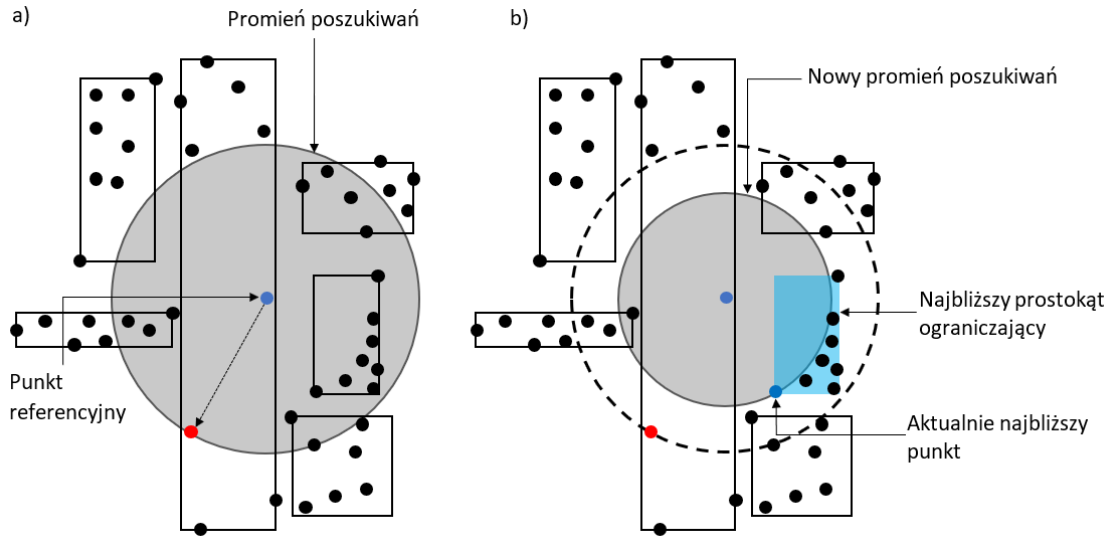
$$\begin{aligned}(\xi, \eta) = & \left(-1 + \frac{2}{n_p}k, \eta\right) \quad \text{dla } k = 0, 1, \dots, n_p \\ (\xi, \eta) = & \left(\xi, -1 + \frac{2}{n_p}k\right) \quad \text{dla } k = 0, 1, \dots, n_p\end{aligned}\quad (94)$$

Następnie dla każdego stopnia swobody algorytm odtwarza poprawną odległość poprzez znalezienie punktu granicy znajdującego się najbliżej. Idę metody reinicjalizacji geometrycznej przedstawiono na rysunku 43.



Rysunek 43. Idea dyskretyzacji granicy w metodzie reinicjalizacji geometrycznej.

W niniejszej pracy rozwinięto metodę geometryczną poprzez wprowadzenie do algorytmu r -drzew wspomagających wyszukiwanie punktów na granicy w procesie reinicjalizacji. R -drzewo jest rozwinięciem koncepcji b -drzewa (drzewa przechowującego dane w postaci klucz-wartość) i często jest wykorzystywane w bazach danych przestrzennych, takich jak systemy informacji geograficznej GIS [172]. Kluczową ideą r -drzew jest wprowadzenie tzw. ramek ograniczających, które pozwalają na szybkie oszacowanie czy szukana wartość znajduje się w danym poddrzewie. Dzięki temu znacząco unika się zbędnego odwiedzania węzłów przy zachowaniu odpowiednio zbalansowanej struktury. Procedura wyszukiwania najbliższego punktu polega na znalezieniu najbliższej ramki ograniczającej zbiór punktów, a następnie najbliższego punktu wewnątrz tej ramki (rysunek 44a). Odległość do tego punktu określa nowy promień wyszukiwania (rysunek 44b). Procedura jest wykonywana dopóki wszystkie potencjalne ramki ograniczające nie zostaną sprawdzone i wyłonić zostanie najbliższy punkt.



Rysunek 44. Idea przechowywania i wyszukiwania danych za pomocą r-drzew - krok pierwszy (a), krok drugi (b).

Elastyczność tej struktury danych sprawia, że może ona w sposób naturalny zostać również zastosowana do usprawnienia procesu ekstrapolacji prędkości granicy na pozostałe węzły domeny obliczeniowej.

Bez względu na wykorzystaną metodę, reinicjalizacja stanowi zawsze dodatkowy krok zwiększający obciążenie numeryczne. Na znaczne zainteresowanie metodą zbioru poziomik wskazuje ilość publikacji dostępnych w najnowszej literaturze. Szczególne znaczenie mają najnowsze prace zmierzające do modyfikacji sformułowania, w taki sposób by wykluczyć z procesu czasochłonną reinicjalizację [173-175].

W niniejszej pracy zdecydowano się wykorzystać klasyczną implementację metody zbioru poziomik z okresową reinicjalizacją ograniczającą przyrost błędu numerycznego. Opisane w rozdziale metody i struktury danych zostały wykorzystane w implementacji modelu MLS-DIFF.

6.2. Model MLS-DIFF

Model MLS-DIFF stanowi sprzężenie rozwiązań wykorzystujących sformułowanie problemu ruchu granicy (przy użyciu metody wielu poziomik) oraz dyfuzji węgla stanowiącej siłę pędą przemiany. Prędkość granicy zdefiniowano w postaci klasycznej zależności [176]:

$$v = M \Delta G \quad (95)$$

gdzie: M – mobilność granicy zdefiniowana w postaci:

$$M = M_0 \exp\left(-\frac{Q_M}{RT}\right) \quad (96)$$

gdzie: M_0 – stała mobilności, Q_M – energia aktywacji, R – uniwersalna stała gazowa, T – temperatura w skali bezwzględnej.

Siła pędą ΔG w równaniu (21) uzależniona jest od stężenia węgla i przyjmuje postać:

$$\Delta G = \chi \left(C_{eq}^{\gamma\alpha} - C^\gamma \right) \quad (97)$$

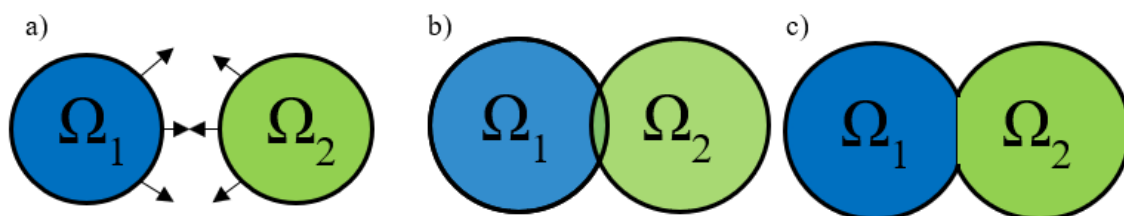
gdzie: χ - współczynnik proporcjonalności (obliczany za pomocą oprogramowania Thermo-Calc), $C_{eq}^{\gamma\alpha}$ - równowagowe stężenie węgla w austenicie, C^{γ} - średnie stężenie węgla w austenicie.

Jednym z głównych założeń metody zbioru poziomicy jest rozdzielenie granicą od siebie dwóch regionów. Ponieważ bez modyfikacji możliwe jest uzyskanie więcej regionów za pomocą jednej funkcji poziomicy, należy wziąć pod uwagę, że jeśli ewolucja granicy doprowadzi do ich połączenia, staną się jednym regionem a granica pomiędzy nimi zaniknie. O ile takie założenie sprawdza się jeśli oba regiony mają te same właściwości i w rzeczywistości ich połączenie prowadzi do stworzenia koherentnej fazy (np. w przepływie dwufazowym), to zupełnie nie spełnia swojej roli w przypadku mikrostruktury polikrystalicznej, w której rosnące ziarna nie ulegają zwykłe połączeniu ze względu na odmienną orientację krystalograficzną. W przypadku symulacji ewolucji takiej mikrostruktury istotne staje się zachowanie morfologii oraz wielkości pojedynczych ziaren, na co nie pozwala podstawowe sformułowanie metody.

Problem ten rozwiązuje modyfikacja metody wprowadzająca oddzielne rozwiązania cząstkowe, które są następnie łączone w końcowe złożenie [177] – Multiple Level Set (MLS). W niniejszej pracy przyjęto, że każde modelowane ziarno stanowi osobny region o dodatnich wartościach funkcji odległości. Na kształt ziarna i prędkość ruchu granicy podczas przemiany wpływ mają pozostałe ziarna, z którymi sąsiaduje. Choć ruch granicy wszystkich ziaren jest obliczany na bazie jednej siatki, każde ziarno posiada w sposób indywidualny zainicjalizowane stopnie swobody i pole prędkości. Takie postawienie problemu niesie ze sobą konieczność uwzględnienia kolizji ziaren, czyli sytuacji, w której rosnące ziarna będące niezależnymi funkcjami ulegają zetknięciu, przez co bez ingerencji okupowałyby jeden fizyczny obszar. W metodzie MLS po każdym kroku czasowym występuje dodatkowy krok korekcyjny. Jeśli wartość funkcji w danym węźle siatki jest dodatnia dla więcej niż jednej funkcji poziomicy, to wszystkie stopnie swobody będące w konflikcie są korygowane za pomocą równania:

$$\phi_i^c = \frac{1}{2} \left(\phi_i^p - \max_{i \neq j} (\phi_j^p) \right) \quad (98)$$

gdzie: ϕ_i^c - wartość i -tej funkcji poziomicy dla danego stopnia swobody po korekcie, ϕ_j^p - wartość j -tej funkcji poziomicy przed korektą. Schemat korekcji funkcji poziomicy przedstawiono na rysunku 45.



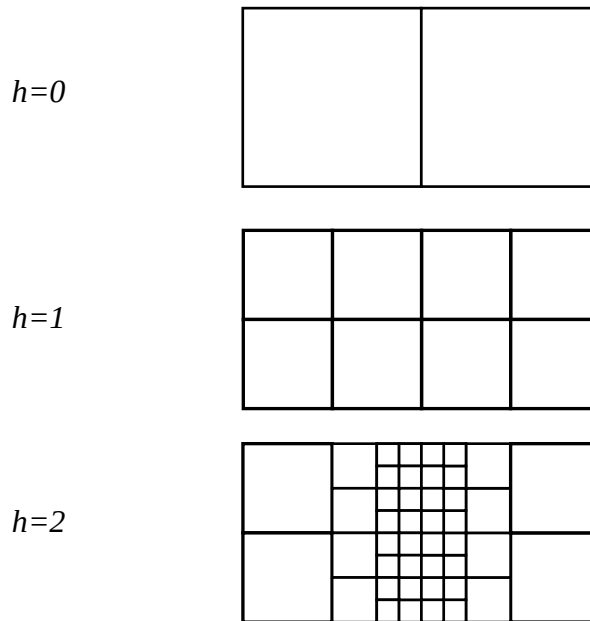
Rysunek 45. Idea korekcji oddzielnych funkcji poziomicy: a) sytuacja w kroku t^n , b) konflikt bez korekcji w kroku czasowym t^{n+1} , c) rozwiązanie konfliktu w kroku czasowym t^{n+1} .

Kończącą morfologię ziaren uzyskuje się wykorzystując własność funkcji odległości – sumę, która zachowa położenie granic:

$$\tilde{\phi} = \forall_{x \in \Omega} \max(\phi_i) \quad (99)$$

gdzie x – węzeł siatki, ϕ_i – wartość funkcji poziomicy w danym węźle siatki.

Model przemian fazowych przedstawiony w tej pracy wykorzystuje koncepcję MLS sprzężoną z rozwiązaniem równania dyfuzji węgla. Ruch zerowej poziomicy w metodach implicite nie gwarantuje, że w każdym kroku czasowym będzie występować ona zawsze w węzłach siatki. Stanowi to wyzwanie w przypadku problemów sprzężonych, w których na granicy konieczne jest zadanie warunku brzegowego. W literaturze problem ten najczęściej rozwiązywano wykorzystując przebudowę siatki (ang. *remeshing*), poprzez zastosowanie r -adaptacji, w której węzły siatki przyciągane są do granicy [178]. W rozumieniu autora, metoda ta jest kosztowna obliczeniowo i może prowadzić do akumulacji błędu rozwiązania poprzez tworzenie elementów o niekorzystnych wymiarach (np. ostrych kątach). Dlatego w niniejszej pracy zastosowano h -adaptację, polegającą na lokalnym zagęszczeniu elementów poprzez ich podział hierarchiczny (rysunek 46). Metoda ta polega na zmniejszaniu charakterystycznej długości elementów, dzieląc element na dwa lub więcej elementów bez zmiany ich rodzaju. Podejście takie wymaga jednak uwzględnienia tzw. wiszących węzłów (ang. *hanging nodes*). Dyskusyjny jest również stopień h -adaptacji, czyli ilość podziałów, która ciągle będzie zmniejszać błąd dyskretyzacji.



Rysunek 46. Schemat h -adaptacji.

Dyfuzyjny transport składnika (węgla) opisuje II Prawo Ficka w postaci:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \nabla^2 c \quad (100)$$

gdzie: D – współczynnik dyfuzji węgla, c – stężenie węgla

Równanie (100) opisuje zmiany stężenia składnika w czasie. Wartość współczynnika dyfuzji węgla uzależniona jest od temperatury, typu sieci krystalicznej, niedoskonałości krystalicznych oraz stężenia substancji dyfundujących. Dokładna wartość współczynnika

dyfuzji węgla w ferrycie i austenicie jest przedmiotem licznych dyskusji [51, 179, 180]. W pracy przyjęto, że współczynnik dyfuzji węgla w austenicie opisany jest równaniem Ågrena [181], gdyż uwzględnia zarówno wpływ stężenia węgla jak i temperatury:

$$D = 4.53 \times 10^{-7} \left[1 + \frac{y_c (1 - y_c) 8339.9}{T} \right] \exp \left((T^{-1} - 2.221 \times 10^{-4}) (17767 - 26436 y_c) \right) m^2 s^{-1}$$

$$y_c = \frac{x_c}{1 - x_c}$$

(101)

gdzie: x_c – procent molowy węgla.

W przypadku dyfuzji węgla w ferrycie, typowym jest wykorzystanie relacji zaproponowanej przez da Silva [182]:

$$\ln D = -2.087 - 1.197 \chi + 0.0037 \chi^2$$

$$\chi = \left(\frac{10^4}{T} \right)$$

(102)

Dyfuzyjność węgla jest znacznie wyższa w żelazie alfa z powodu mniejszego stopnia upakowania atomowego i większych przestrzeni międzywęzłowych w porównaniu do struktury żelaza gamma. Limitowana rozpuszczalność węgla w żelazie alfa, sprawia, że dyfuzja jest znacznie ograniczona i z punktu widzenia rozwiązania numerycznego jest pomijalnie mała. Numeryczne rozwiązanie (100) sprowadza się do utworzenia i rozwiązania układu równań liniowych w postaci:

$$c_j^{n+1} = (\mathbf{M} + \Delta t \theta \cdot \mathbf{K})^{-1} (\mathbf{M} - \Delta t (1 - \theta) \cdot \mathbf{K}) c_j^n$$

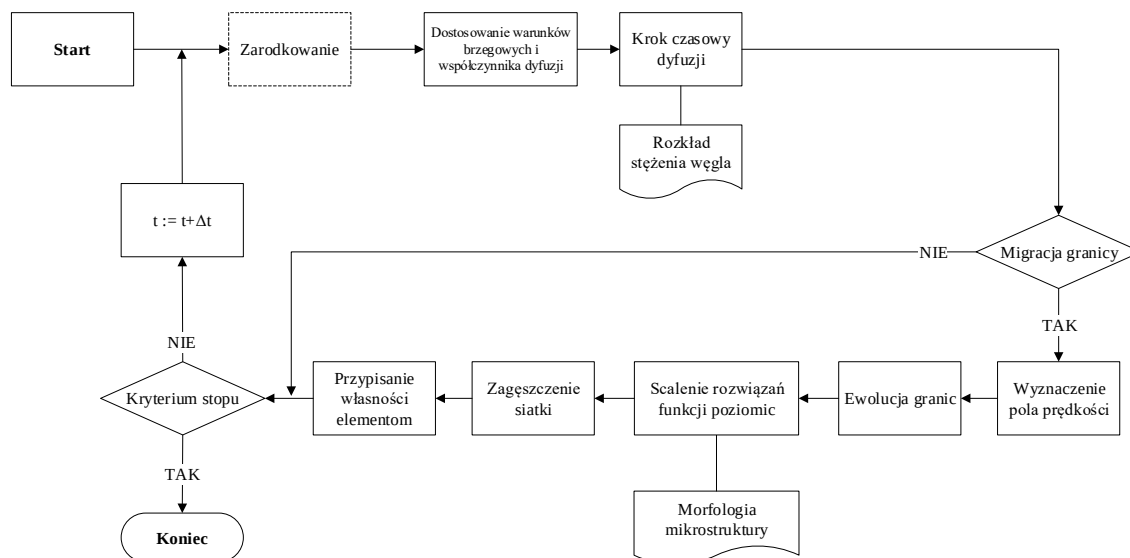
$$\mathbf{M} = \int (N_I N_J) d\Omega$$

$$\mathbf{K} = D \int \left(\frac{\partial N_I}{\partial x_i} \frac{\partial N_J}{\partial x_j} \right) d\Omega$$

(103)

wraz z warunkami brzegowymi i początkowymi wynikającymi z warunków symulacji. W wyniku rozwiązania otrzymuje się rozkład stężenia węgla w austenicie.

Ramowy schemat algorytmu symulacji przemian fazowych z wykorzystaniem metody MLS-DIFF przedstawiono na rysunku 47.



Rysunek 47. Schemat algorytmu modelu przemian fazowych.

Poszczególne etapy algorytmu są tożsame zarówno dla przemiany zachodzącej przy nagrzewaniu jak i chłodzeniu, różnicę stanowi etap zarodkowania, występujący tylko przy chłodzeniu. W symulacji nagrzewania etap zarodkowania jest pomijany i mikrostruktura początkowa traktowana jest jako austenityczno-ferrytyczna. Ramowy schemat algorytmów symulacji przemian przedstawia się następująco:

- a) **Przemiana austenityczna:** wejściem do algorytmu jest morfologia mikrostruktury w postaci pliku graficznego oraz opis procesu. Obraz mikrostruktury przedstawiający cyfrową reprezentację mikrostruktury stali ferrytyczno-perlitycznej, zawiera morfologię ziaren perlitu (kolor czarny) i ferrytu (inne kolory niż czarny). Założono, że granice ziaren nie są explicite zaznaczone oddzielnym kolorem (rysunek 48).



Rysunek 48. Przykładowa reprezentacja mikrostruktury ferrytyczno-perlitycznej.

Definicję procesu (cykl temperaturowy), własności fizyczne materiału oraz parametry działania algorytmu (krok czasowy, wielkości charakterystyczne elementów siatki itp.) są pobierane z pliku wejściowego. Etap inicjalizacji

obejmuje automatyczną dyskretyzację obszaru za pomocą regularnej siatki czworokątnej oraz alokację wszystkich funkcji zbioru poziomic. Alokacja robiona jest osobno dla każdego ziarna perlitu za pomocą funkcji odległości, tak, że wartości dodatnie zawsze znajdują się wewnątrz ziarna. Algorytm nie obejmuje symulacji procesu rozpuszczania perlitu i zarodkowania austenitu, czyli po wzroście temperatury każde ziarno perlitu traktowane jest w symulacji jako pojedyncze ziarno austenitu. Na podstawie morfologii mikrostruktury początkowej inicjowana jest pojedyncza symulacja dyfuzji węgla. Warunkiem początkowym dla stopni swobody w ziarnie austenitu jest stężenie węgla w punkcie eutektyki w temperaturze Ae1. Zakładając, że graniczne linie stężenia węgla w stopie GS i SE opisane są przez liniowe funkcje $C_{\gamma\beta}$ oraz $C_{\gamma\alpha}$ w postaci:

$$\begin{aligned} C_{\gamma\beta} &= a_1 T + b_1 \\ C_{\gamma\alpha} &= a_2 T + b_2 \end{aligned} \quad (104)$$

to temperaturę Ae1 stanowi punkt przecięcia tych prostych:

$$Ae1 = \frac{b_2 - b_1}{a_1 - a_2} \quad (105)$$

a stężenie w punkcie eutektyki uzyskuje się poprzez podstawienie temperatury Ae1 do dowolnej funkcji (104). Na podstawie aktualnej wartości czasu symulacji wyznaczana jest wartość temperatury, na podstawie której obliczana jest wartość współczynnika dyfuzji oraz warunek ruchu granicy. Dla uproszczenia przyjęto, że dyfuzja węgla zachodzi tylko w austenicie, co jest podyktowane ograniczoną rozpuszczalnością węgla w ferrycie. Rozwiązanie równania (100) przeprowadzane jest za pomocą metody elementów skończonych. Warunkiem ruchu granicy dla każdego ziarna jest przekroczenie na granicy średniego stężenia węgla równego maksymalnej zawartości węgla w austenicie w tej temperaturze:

$$c_r(T) \geq C_{\gamma\alpha}(T) \quad (106)$$

Ruch granicy pociąga za sobą konieczność wyznaczenia pola prędkości, a następnie rozwiązania równania (81) dla każdego ziarna wymagającego dostosowania położenia granicy. Ewolucja choćby jednego ziarna wiąże się z wykonaniem algorytmu MLS dla wszystkich składowych zbiorów funkcji poziomic (tj. z korektą i złączeniem składowych funkcji). Na granicy ziaren przeprowadzane jest lokalna h -adaptacja, a następnie przypisanie własności każdego z elementów siatki do austenitu lub ferrytu, w zależności od wartości funkcji poziomic po kroku ewolucji. Ostatnim elementem iteracji w kroku czasowym jest sprawdzenie warunku stopu algorytmu, którym jest osiągnięcie zadanej temperatury lub czasu nagrzewania. Jeżeli warunek stopu nie jest osiągnięty, algorytm przechodzi do symulacji kolejnego kroku czasowego. Wyznacznikiem czasu symulacji jest proces dyfuzji, którego upływ odpowiada zachodzącej przemianie. Równanie ruchu, granicy, choć sprzężone z dyfuzją, posiada osobny krok czasowy, którego charakter jest bardziej wirtualny. Symulacja może zakończyć się na etapie nagrzewania, w którym skład fazowy materiału będzie zawierał austenit lub austenit z nieprzemienionym ferrytem (tzw. ferrytem zrekrytalizowanym), lub przejść do etapu chłodzenia.

b) **Przemiana ferrytyczna:** wejściem do przemiany mogą być zarówno wyniki otrzymane z procesu nagrzewania jak i cyfrowa reprezentacja mikrostruktury. DMR obejmuje morfologię austenitu. W takim przypadku poszczególne ziarna austenitu powinny być oznaczone różnymi kolorami w celu ich odróżniania i wyznaczenia punktów potrójnych (rysunek 49).



Rysunek 49. Przykładowa reprezentacja mikrostruktury austenitycznej.

Parametry symulowanego procesu jak i własności materiału pobierane są z pliku definicji symulacji. W etapie inicjalizacji przeprowadzana jest jedynie dyskretyzacja obszaru. Alokacja rozwiązania funkcji poziomiej następuje stopniowo na etapie zarodkowania. W pracy zdecydowano się wykorzystać model zarodkowania [183] pozwalający na oszacowanie prędkości zarodkowania I_v w postaci:

$$I_v = N_{het} v \exp\left(\frac{-\Delta G^*}{kT}\right) \exp\left(\frac{-E_M}{RT}\right) \quad (107)$$

gdzie: v - Częstotliwość Debye'a ($\sim 10^{13} \text{ s}^{-1}$), k – stała Boltzmana, T – temperatura w skali bezwzględnej, R – uniwersalna stała gazowa, E_M – energia aktywacji dyfuzji międzyfazowej, N_{het} – gęstość miejsc zarodkowania, ΔG^* - energia bariery zarodkowania, która musi zostać pokonana, aby wytworzyć zarodek o krytycznym rozmiarze. Energia bariery zarodkowania wyznaczana jest z zależności:

$$\Delta G^* = \frac{\Psi}{\Delta g_v} \quad (108)$$

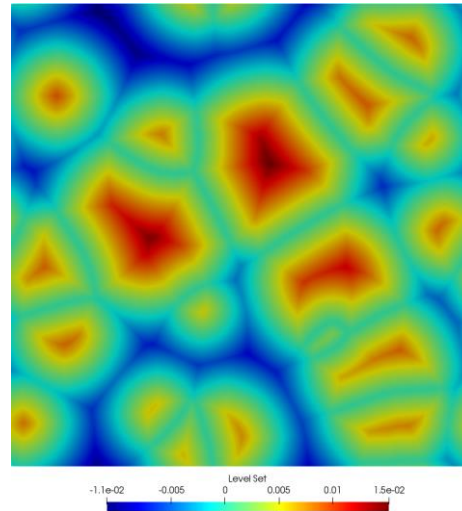
gdzie: Ψ - współczynnik ujmujący różnicę pomiędzy energią fazy rodzimej i granicą zarodka oraz kształt zarodka ($2.1 \times 10^{-6} \text{ J}^3 / \text{m}^6$) [184], Δg_v - siła pędna zarodkowania (różnica w swobodnej energii Gibbsa na jednostkę objętości między fazą macierzystą a formującą się fazą).

Gęstość miejsc zarodkowania to potencjalna ilość miejsc uprzywilejowanych (krawędzi, narożników, punktów potrójnych) na jednostkę objętości. Wartość ta uzależniona jest przede wszystkim od wielkości ziarna fazy rodzimej (austenitu). Cahn [185] zaproponował do jej opisu zależność w postaci:

$$N_{het} = n_v \left(\frac{\delta}{d_\gamma} \right)^{3-v} \quad (109)$$

gdzie: n_v – ilość atomów węgla na jednostkę objętości, ρ - efektywna grubość granicy ziaren ($2.5 \cdot 10^{-10} m$), d_γ – średnica ziarna fazy rodzimej, v – współczynnik ujmujący wymiar miejsc zarodkowania (zarodkowanie homogeniczne – 3, po płaszczyźnie granicy ziaren – 2, po krawędziach ziaren – 1, w punktach potrójnych – 0).

Pierwszym krokiem każdej iteracji algorytmu jest obliczenie wartości temperatury dla aktualnego czasu symulacji na podstawie przyjętego cyklu. Na podstawie temperatury obliczana jest zarówno wartość współczynnika dyfuzji z równania (101) jak i warunku brzegowego.. W każdym kroku czasowym głównej pętli algorytmu obliczana jest prędkość zarodkowania oraz ilość aktywnych zarodków w domenie obliczeniowej. Jeśli wielkość ta przekroczy ilość aktywnych punktów zarodkowania, aktywowane są nowe w ustalonej kolejności. Każde nowe ziarno przekłada się na uruchomienie nowego rozwiązania funkcji zbioru poziomomic zainicjalizowanego za pomocą funkcji odległości tak, że wartości dodatnie przypadają wewnątrz ziarna ferrytu. Następnie rozwiązania są łączone wg typowego podejścia MLS opisanego wcześniej. Przykładowy obraz mikrostruktury, stanowiący sumę poszczególnych funkcji zbioru poziomomic przedstawiono na rysunku 50.



Rysunek 50. Obraz mikrostruktury opisanej funkcjami zbioru poziomomic.

Przyjęto, że nowe ziarna mają kształt okręgów o zadanym promieniu. W każdym kroku czasowym na granicy α/γ zadawane jest równowagowe stężenie węgla równe $C_{\gamma\alpha}(T)$ w postaci warunku Dirichleta. Wartość stężenia na granicy obliczana jest na podstawie linii GS wykresu równowagi. Warunkiem początkowym dla symulacji dyfuzji jest zadana koncentracja węgla na obszarze austenitu równa średniej zawartości węgla w stali. Rozkład koncentracji może być jednorodny lub niejednorodny, w zależności od założeń symulowanego procesu. Po rozwiązaniu równania dyfuzji następuje sprawdzenie warunku zachowania masy (stężenia węgla) będącego predykatem ruchu granicy:

$$\int_{\Omega_\gamma} (c(x) - c_0) d\Omega_\gamma > \int_{\Omega_\alpha} (c_0 - c_\alpha) d\Omega_\alpha \quad (110)$$

W przypadku, gdy warunek nie jest spełniony, obliczany jest kolejny krok czasowy dyfuzji. Jeśli zachodzi konieczność ruchu granicy, wyznaczone jest pole prędkości dla każdego z ziaren ferrytu, a następnie rozwiązywane jest równanie MLS i scalane są oddzielne rozwiązania. Analogicznie jak w przypadku przemiany austenitycznej, elementom przypisywane są własności ferrytu lub austenitu w zależności od znaku wartości funkcji ϕ . Na granicy, do której wykrycia wykorzystywana jest zależność (92), przeprowadzana jest h -adaptacja w celu zmniejszenia błędu dyskretyzacji dla warunku brzegowego. Kończącym etapem jest sprawdzenie warunku stopu w sposób analogiczny jak w poprzedniej definicji.

6.3. Założenia i szczegóły implementacyjne

Model MLS-DIFF został zaimplementowany z wykorzystaniem biblioteki deal.II [186], która jest biblioteką programistyczną języka C++ wspierającą tworzenie kodów z wykorzystaniem metody elementów skończonych.

Model MLS-DIFF inicjowany jest obrazem mikrostruktury, na podstawie którego konstruowana jest siatka elementów skończonych. Do wykrycia punktów granicy ziaren wykorzystano bibliotekę OpenCV¹, która jest zbiorem algorytmów i struktur danych do rozpoznawania i przetwarzania obrazów i video. W modelu nagrzewania, na podstawie współrzędnych granic ziaren perlitu (kolor czarny) inicjalizowane jest położenie zerowej poziomicy dla pierwszego kroku czasowego. W modelu chłodzenia przyjęto, że każde ziarno austenitu jest oznaczone innym kolorem. Miejsca uprzywilejowane w zarodkowaniu wymagają uprzedniego wyznaczenia. Punkty potrójne są wykrywane poprzez wyszukiwanie pikseli obrazu, w których otoczeniu występują odpowiednio więcej niż 3 różne kolory. Punkty zarodkowania znajdujące się zbyt blisko siebie są usuwane z puli.

W modelu MLS-DIFF równanie dyfuzji jest pomijane na obszarze ferrytu i przyjmowana jest stała stężenie węgla równe 0.02. Obszar ferrytu zmienia się w trakcie przemiany, dlatego każdy element zakwalifikowany do tej fazy ma usuwane stopnie swobody (wykorzystano elementy typu *FE_Nothing*). Na obszarze austenitu Równanie dyfuzji rozwiązywane jest na regularnej siatce czworokątnej wykorzystującej elementy *FE_Q* drugiego rzędu, będące implementacją skalarnego elementu skończonego w ciągłej przestrzeni z interpolacją za pomocą wielomianu Lagrange'a i całkowaniem zrealizowanym za pomocą metody Gaussa-Lobatto. Ten sam typ elementów wykorzystano w implementacji rozwiązania Level Set. Symulacja sterowana jest zmianą temperatury, która ma charakter jednorodny w całej przestrzeni obliczeniowej. Sterowanie w modelu odbywa się za pomocą zdefiniowanego zbioru par punktów kluczowych czas-temperatura, które definiują zmieniającą się prędkość nagrzewania lub chłodzenia.

¹ <https://opencv.org/>

Na zewnętrzne boki przestrzeni obliczeniowej zadawane są periodyczne warunki brzegowe w postaci:

$$\begin{aligned} u(0, y) &= u(x_{\max}, y) & y \in (0, y_{\max}) \\ u(x, 0) &= u(x, y_{\max}) & x \in (0, x_{\max}) \end{aligned} \quad (111)$$

Zagęszczenie siatki jest kluczowe przede wszystkim na granicy ziaren, ze względu na znaczny gradient stężenia węgla oraz możliwość utraty pewnych cech morfologicznych ziaren w przypadku zbyt dużych elementów. Identyfikacji elementów, przez które przechodzi granica ziarna, można dokonać z wykorzystaniem relacji (92). Wybrane elementy mogą ulec podziałowi na cztery równe pod względem powierzchni sub-elementy. W symulacji z góry określona jest maksymalna ilość podziałów elementów. W trakcie każdego przeszukania siatki, dany element może zostać podzielony tylko jeden raz. Jeśli konieczny jest wyższy poziom podziału niż 1, konieczne jest powtórzenie przeszukania siatki. Po każdym zagęszczeniu siatki przeprowadzana jest regularyzacja, której celem jest wygładzenie siatki. W tym przypadku poprzez wygładzenie rozumiane jest wykonanie podziału dodatkowych elementów tak, aby uniknąć sytuacji, że krawędzie pomiędzy dwoma sąsiadującymi elementami są podzielone więcej niż raz.

Pozostawienie zagęszczonych elementów siatki po przejściu granicy miałoby negatywny wpływ na prędkość obliczeń. Dlatego w przypadku wykrycia zagęszczonych elementów w dalszej odległości od granicy przeprowadzany jest odwrotny mechanizm mający na celu obniżenie lokalnego zagęszczenia poprzez stopniowe rozrzedzenie siatki aż do uzyskania pierwotnej wielkości elementów. Rozrzedzanie siatki polega na połączeniu 4 elementów w większy element, jeśli gradient stężenia węgla jest wystarczająco niski.

Założenia odnośnie zagęszczenia siatki są w swoisty sposób interpretowane na granicy obszaru obliczeniowego. Wykorzystanie elementów skończonych z różnymi stopniami swobody oraz o różnej wielkości może stanowić znaczne wyzwanie dla konstrukcji warunków brzegowych na granicy przestrzeni obliczeniowej. W prezentowanym modelu problem dotyczy warunków periodycznych. Rozwiązaniem tej kwestii jest uprzednie maksymalne zagęszczenie skrajnej warstwy elementów tak, aby uzyskać spójną wielkość elementów z każdej strony przestrzeni rozwiązań. Wielkość elementów na granicy jest stała, zatem rozrzedzanie siatki na granicy nie jest przeprowadzane.

W modelu wykorzystano adaptację kroku czasowego dla rozwiązania równania dyfuzji. Jeśli w przeciągu 10 iteracji algorytmu nie następuje ruch granicy, krok czasowy zwiększany jest dwukrotnie. Maksymalny krok czasowy ustalono na 0.1s. W przypadku wykonania ruchu granicy wielkość kroku czasowego przywracana jest do wartości domyślnej.

Do rozwiązania końcowego układu równań wykorzystano solver UMFPACK należący do klasy dokładnych solverów wielofrontalnych, wykorzystujących metodę faktoryzacji LU dla rzadkich układów równań symetrycznych i niesymetrycznych. Rozważano również wykorzystanie solverów iteracyjnych wykorzystujących metodę gradientów sprzężonych CG lub uogólnioną metodę najmniejszego residuum GMRES. Wykonane testy numeryczne pokazały jednak, że wykorzystanie solvera dokładnego w modelu jest numerycznie efektywniejsze zarówno dla rozwiązania równania dyfuzji jak i dla zbioru poziomic.

Większość struktur danych, które wykorzystano do implementacji modelu oferuje zsynchronizowany dostęp z wielu wątków. Pozwoliło to na wykorzystanie wielowątkowości w następujących etapach rozwiązania:

- przygotowanie układu równań MES,
- rozwiązywanie układu równań MES,
- zagęszczenie siatki elementów i transfer wyników do nowej przestrzeni rozwiązań,
- reinicjalizacja rozwiązań z wykorzystaniem metody geometrycznej,
- wyznaczanie pola prędkości granicy.

W podrozdziale przedstawiono założenia oraz szczegóły implementacyjne modelu przemian fazowych. Wykorzystanie struktury danych zaimplementowanych w bibliotece deal.II pozwoliło w znacznym stopniu uprościć wykonywanie procedur na siatce elementów skończonych operacji na wektorach danych oraz przeprowadzenie efektywnego rozwiązania układu równań.

6.4. Identyfikacja parametrów modelu i analiza wrażliwości

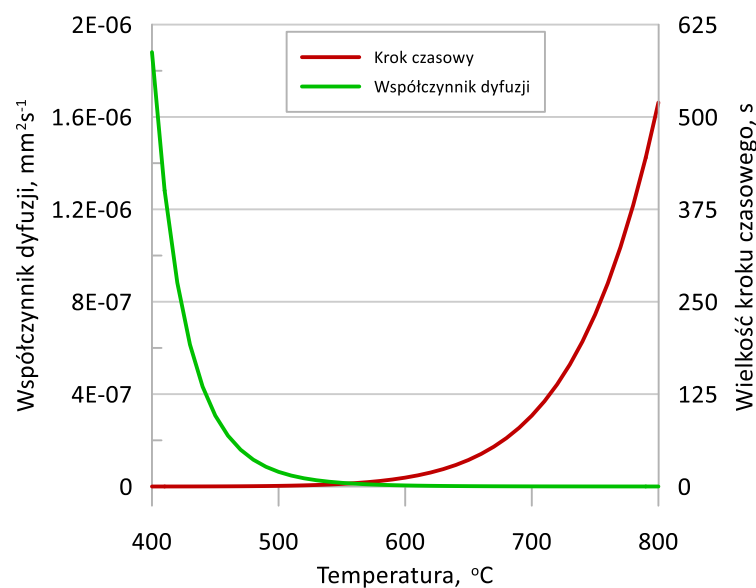
Analiza parametrów modelu rozpatrywana była oddzielnie dla rozwiązania równania dyfuzji i równania zbioru poziomicy. Oba te równania, choć sprzężone, nie współdzielią parametrów innych niż wielkość siatki dyskretyzującej obszar obliczeń.

W modelu MLSDIFF wykorzystywane są dwa kroki czasowe: rzeczywisty krok czasowy dla symulacji dyfuzji oraz krok czasowy do obliczenia równania ruchu granicy. Warunek stabilności rozwiązania równania dyfuzji przyjmuje postać:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2D} \quad (112)$$

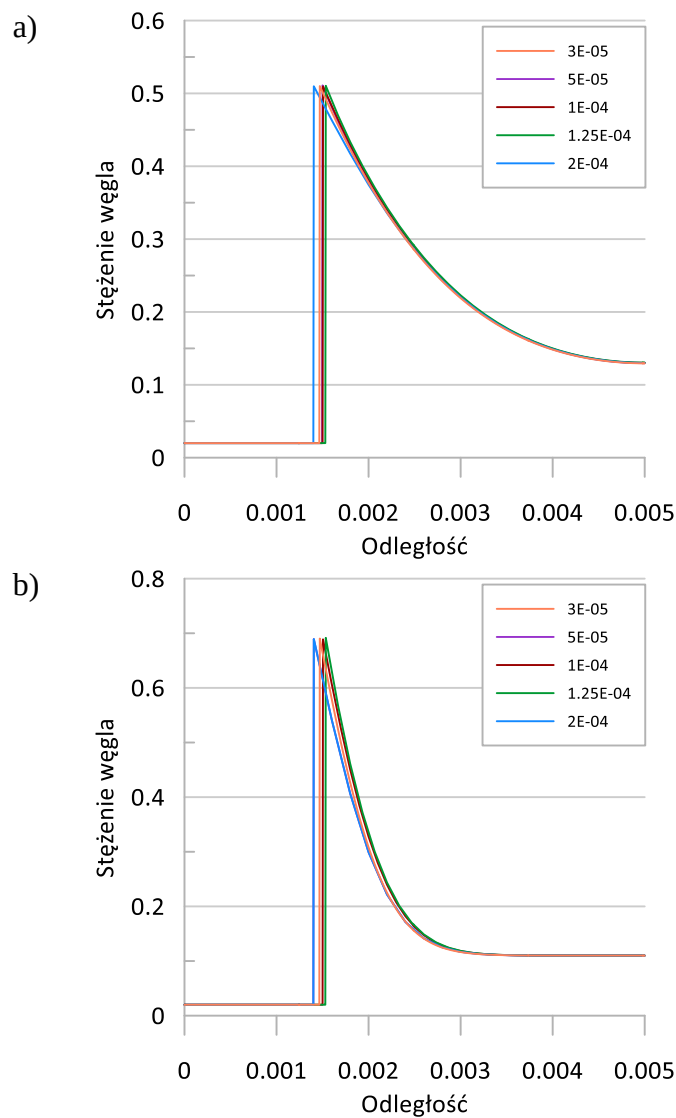
gdzie: Δt – wielkość kroku czasowego, Δx – wielkość elementu, D – współczynnik dyfuzji.

Dobór kroku czasowego rozwiązania równania dyfuzji musi uwzględniać zmienność warunków symulacji (zmienność prędkości chłodzenia), zależność temperaturową współczynnika dyfuzji oraz czas obliczeń. Wartość współczynnika dyfuzji węgla w austenicie, a tym samym kryterium maksymalnego kroku czasowego w zakresie temperaturowym 400-800°C, ulegają znaczącym zmianom (rysunek 51).



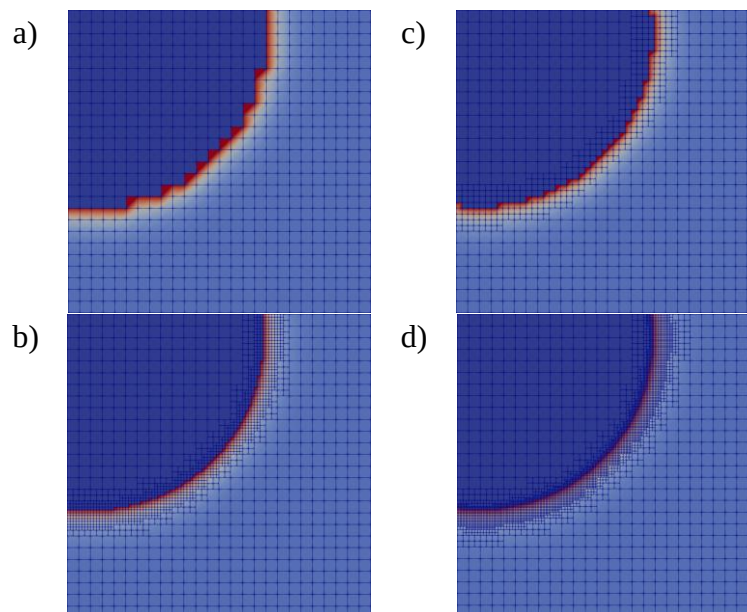
Rysunek 51. Wartość współczynnika dyfuzji węgla w austenicie oraz maksymalna wielkość kroku czasowego w funkcji temperatury (dla elementu o wielkości 2×10^{-4} mm).

Uzyskane wyniki wyraźnie pokazują znaczącą zależność dopuszczalnego kroku czasowego od temperatury i znaczny zakres wartości współczynnika dyfuzji. W celu sprawdzenia wpływu wielkości elementu na rozkład stężenia węgla, przygotowano test imitujący typowy dyfuzyjny transport węgla spiętrzonego na granicy międzyfazowej do austenitu. Wykreślono profil stężenia węgla w pewnej odległości od granicy w kierunku normalnym. Wyniki tego testu przedstawiono na rysunku 52.



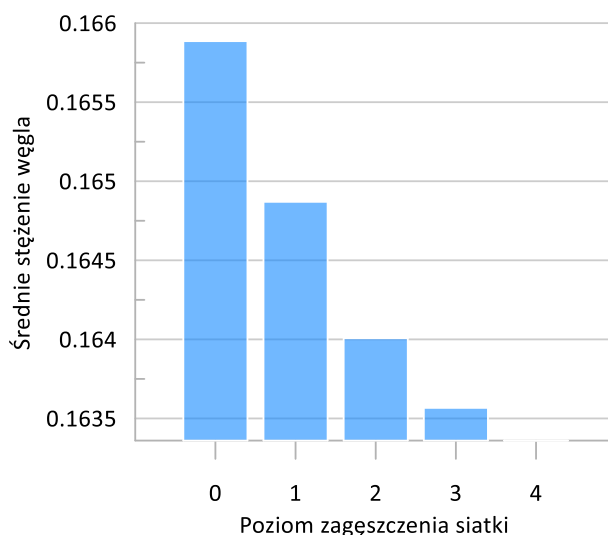
Rysunek 52. Wpływ wielkości elementu (mm) na profil stężenia węgla w austenicie w temperaturze a) 820°C, b) 450°C.

Przedstawione wyniki są porównywalne, widać, że w obu przypadkach profil węgla uzyskany dla siatki o wielkość elementu na poziomie 2×10^{-4} mm nieznacznie różni się od pozostałych. Można zatem traktować wielkość elementu na poziomie 1.25×10^{-4} mm jako graniczną, dla której mogą być prowadzone obliczenia. Inną kwestią jest jednak dokładność odwzorowania morfologii ziaren. Naturalne jest przyjęcie założenia, że gęsta siatka pozwoli na lepsze odwzorowanie morfologii ziaren uzyskanych z rozwiązania wykorzystującego metodę zbioru poziomic. Zagęszczenie siatki prowadzi jednak nieuchronnie do wydłużenia czasu obliczeń. Model MLS-DIFF wraz z biblioteką deal.II wspiera lokalne zagęszczenie siatki. Na rysunku 53 pokazano jak zagęszczenie siatki wpływa na reprezentację granicy rosnącego ziarna ferrytu.



Rysunek 53. Wpływ lokalnego zagęszczenia siatki przy granicy międzyfazowej na morfologię ziarna oraz rozkład koncentracji węgla. Brak zagęszczenia (a), zagęszczenie pojedyncze (b), podwójne (c), potrójne (d).

Dla siatki o wielkości elementu 1×10^{-4} mm przyjęto kolejno trzy stopnie zagęszczenia. Już jednokrotne zagęszczenie siatki znacząco wygładziło rozkład stężenia węgla. Szczegółowa analiza modelu pokazała, że dokładniejsze odwzorowanie granicy ma charakter głównie wizualny i nie wpływa znacząco na uzyskiwane wyniki numeryczne. Przeprowadzono test, mający na celu ocenę błędu wynikającego z przyjętego stopnia dyskretyzacji poprzez pomiar średniego stężenia węgla w austenicie dla różnych stopni lokalnego zagęszczenia granicy. Wyniki tego testu przedstawiono na rysunku 54.



Rysunek 54. Wpływ zagęszczenia siatki przy granicy ziarna na średnie stężenie węgla.

Otrzymane wyniki pokazują wpływ zagęszczenia siatki na otrzymywane wyniki. Należy podkreślić, że różnice są pomijalnie małe i sięgają dopiero trzech miejsc po przecinku.

W odróżnieniu od rozwiązania równania dyfuzji w MES, gdzie relacje pomiędzy parametrami są powszechnie znane, rozwiązania problemów numerycznych za pomocą

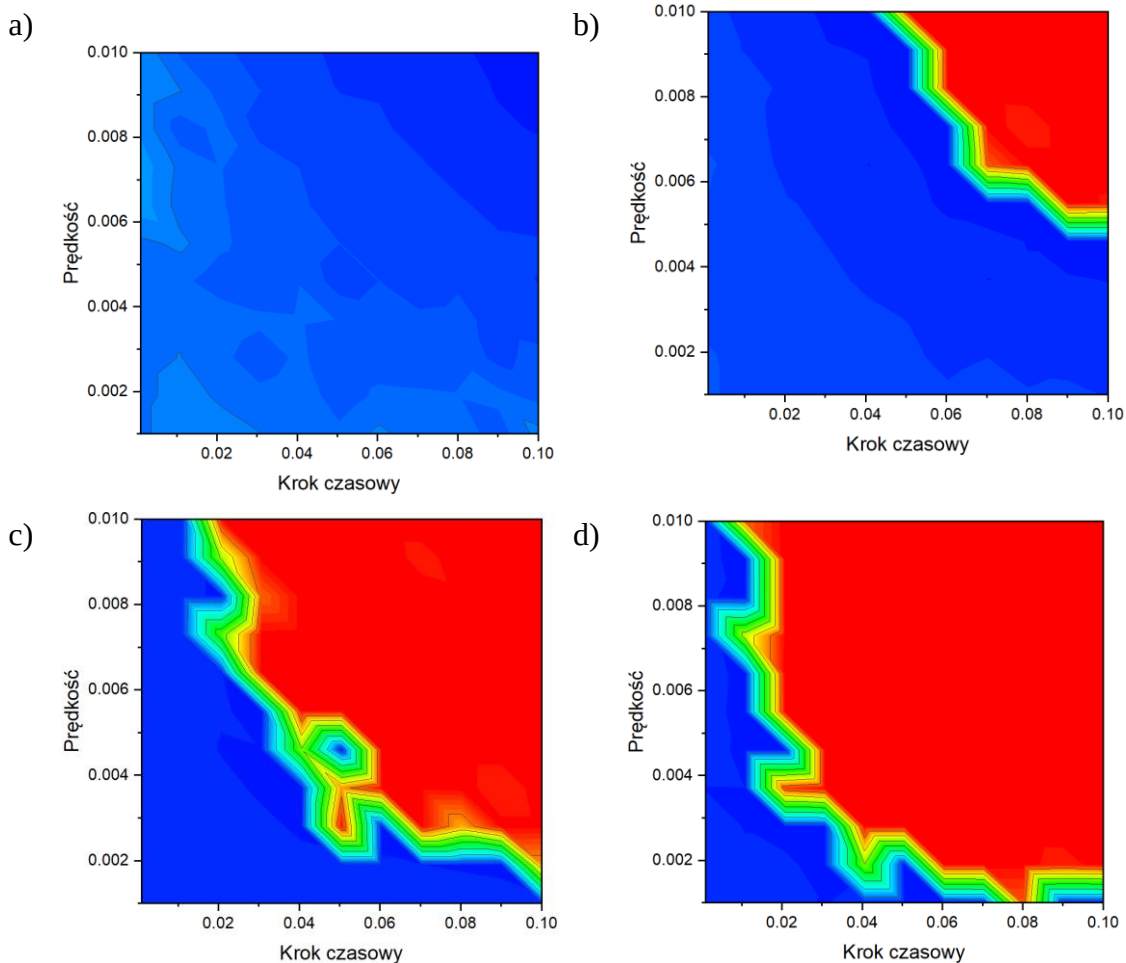
zbioru poziomice są uzależnione od sposobu, w jaki sformułowano zagadnienie (np. zastosowany schemat numerycznej stabilizacji).

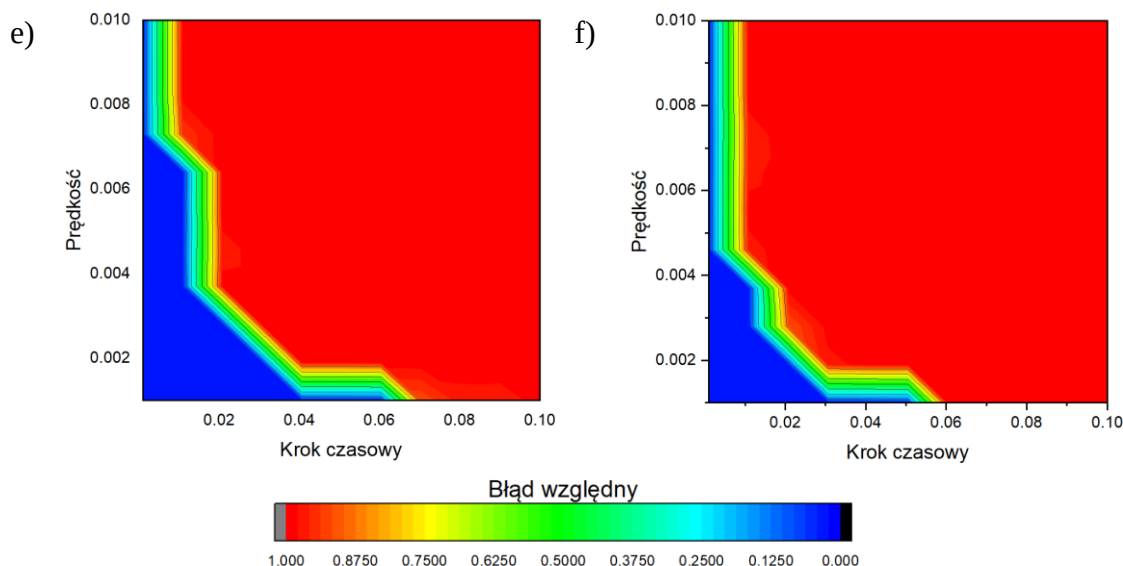
W przypadku rozwiązania równania poziomice wytypowano trzy główne parametry modelu: krok czasowy, wielkość elementu siatki oraz prędkość granicy. Zaproponowano numeryczny test mający na celu sprawdzenie zakresu stosowania powyższych parametrów. W tym celu przygotowano symulację z liniowym rozrostem ziarna w kształcie okręgu, a następnie poprzez zmianę wielkości siatki, kroku czasowego oraz prędkości dokonano analizy końcowego położenia granicy. Określono miarę błędu względnego w postaci:

$$\varepsilon_d = \frac{d_{\max} - d_{\min}}{d_{\max}} \quad (113)$$

gdzie: $d_{\max}$ – maksymalna odległość granicy od środka okręgu, $d_{\min}$ – minimalna odległość od granicy do środka okręgu.

W przypadku idealnie gładkiej granicy wartość ε_d powinna zmierzać do 0. Wartości (0,1) występowały w przypadku utraty gładkości granicy, np. poprzez pojawienie się oscylacji rozwiązania. W przypadku, gdy solver numeryczny nie uzyskał wymaganej zbieżności, przyjęto wartość 1. Uzyskane wyniki dla różnych wielkości elementów przedstawiono na rysunku 54 w postaci map przestrzeni dozwolonych parametrów modelu.





Rysunek 55. Mapa przestrzeni dozwolonych parametrów modelu zbioru poziomicy w zależności od wielkości elementu dyskretyzującego przestrzeń: a) 2×10^{-4} , b) 1×10^{-4} , c) 6.67×10^{-5} , d) 5×10^{-5} , e) 4×10^{-5} , f) 3.33×10^{-5} mm.

Zebrane wyniki pokazują dużą zależność pomiędzy parametrami modelu zbioru poziomicy a poprawnością otrzymanego rozwiązania. Trudno jest określić jednoznacznie zależność pomiędzy wszystkimi parametrami w postaci jednej relacji matematycznej.

Przeprowadzoną analizę wpływu parametrów można zaklasyfikować do tzw. lokalnej analizy wrażliwości. Uzyskane wyniki pozwoliły na numeryczną kalibrację modelu i uniknięcie sytuacji, w których błędnie przyjęte parametry modelu oddziaływałyby na uzyskiwane wyniki. Analiza pozwoliła na wybór bezpiecznych zakresów parametrów numerycznych.

7. Weryfikacja opracowanego modelu

W rozdziale opisano metodykę oraz weryfikację modelu MLS-DIFF poprzez porównanie uzyskanych wyników z rezultatami badań doświadczalnych. Do badań wybrano dwie stale niskowęglowe S235JR oraz S243 [187], których skład chemiczny przedstawiono w tabeli 5.

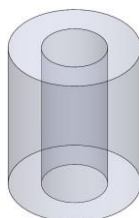
Tabela 5. Skład chemiczny stali S235JR i S243

	C	Al	Cr	Cu	Mn	Mo	Ni	Si	N	P	S
S235JR	0.13	0.003	0.06	0.27	0.47	0.02	0.09	0.16	0.009	0.018	0.025
S243	0.09	0.053	0.35	0.03	1.42	0.005	0.01	0.1	0.009	0.011	0.01

Badania podzielono na trzy etapy. Celem pierwszego cyklu badań była ocena możliwości modelu w zakresie przewidywania parametrów w skali mikro, głównie segregacji pierwiastków. Zadaniem drugiego etapu badań była porównanie modeli RVE i SSRVE oraz weryfikacja modelu w zakresie opisu globalnego zachowania się materiału, przede wszystkim przez porównanie zmierzonej i obliczonej kinetyki przemian fazowych dla różnych cykli cieplnych. Ostatni etap stanowiła weryfikacja z wykorzystaniem procesu przemysłowego.

7.1. Metodyka badawcza

Materiał do pierwszego cyklu badań stanowiło 11 próbek wytoczonych w formie standardowych rurek o wymiarach $\varnothing 4 \times \varnothing 2 \times 10 \text{ mm}$, których kształt przedstawiono na rysunku 56. Próbkę poddawano różnym cyklom cieplnym i następnie wykonano badania rozkładu stężenia węgla



Rysunek 56. Kształt próbek dylatometrycznych stosowanych w eksperymentach.

Przygotowanie próbek poprzez realizację różnych cykli cieplnych wykonano za pomocą dylatometru DIL805A/D/T (TA Instruments, rysunek 57), wyposażonego w głowicę pomiarową typu LVDT, o teoretycznej rozdzielczości: $\pm 0.05 \mu\text{m}$. Dylatometr posiada komputerowy system sterowania i rejestrowania danych doświadczalnych. Grzanie w dylatometrze realizowane jest metodą indukcyjną za pomocą generatora o częstotliwości 250 kHz. Dylatometr wyposażony jest w elektroniczną stabilizację tzw. „zimnych końców” i wskazania czujnika temperatury nie zależą od zmiany temperatury otoczenia w granicach ($-20^{\circ}\text{C} \div 50^{\circ}\text{C}$).

Nagrzewanie oraz wytrzymanie w zadanej temperaturze prowadzono w próżni ($< 5 \times 10^{-4} \text{ mbar}$). Chwilowe odchyłki temperatury od zadanej wartości nie przekraczały $\pm 1.0^{\circ}\text{C}$. Pomiar temperatury wykonywano za pomocą termoelementu typu S (PtRh10-Pt –

standardowy termoelement stosowany w dylatometrze), o średnicy drutów 0.1mm, wykonanych w klasie I. Obie końcówki termoelementów zgrzewano do próbek w środku ich długości, zachowując odstęp równy około dwóch średnic drutu, w osłonie strumienia argonu.



Rysunek 57. Widok ogólny dylatometru DIL805 A/D/T z głowicą pomiarową typu LVDT oraz laserem [autor: IMŻ Gliwice].

W ramach pracy wykonano szereg badań dylatometrycznych, zestawienie których przedstawiono w kolejnym rozdziale. W celu precyzyjnego wycięcia próbek wykorzystano przecinarkę do cięcia próbek Brillant 201 firmy PROSPECTA. (rysunek 58a).

a)



b)



Rysunek 58. Przecinarka do cięcia próbek Brillant 201 firmy PROSPECTA (a). Prasa hydrauliczna do inkludowania próbek na gorąco firmy PROSPECTA (b).

Przygotowanie próbek do badań rozpoczęto od zainkludowania ich na gorąco w bakelicie przy wykorzystaniu specjalnej prasy hydraulicznej (rysunek 58b). Próbki poddano następnie szlifowaniu papierami ściernymi o różnej gradacji (360, 600, 800, 1000, 1200, 1400, 2000) na ręcznej szlifierko-polerce (rysunek 59a). Ostatni etap obejmował

polerowanie powierzchni przy zastosowaniu polerki automatycznej firmy Stuers LaboPol5 (rysunek 59b). Do polerowania wykorzystano filcowe tarcze polerskie MDNap z pastami diamentowymi o wielkości ziarna 9, 6, 3 i 1 μm wraz z płynem chłodzącym Blue firmy Struers.

a)



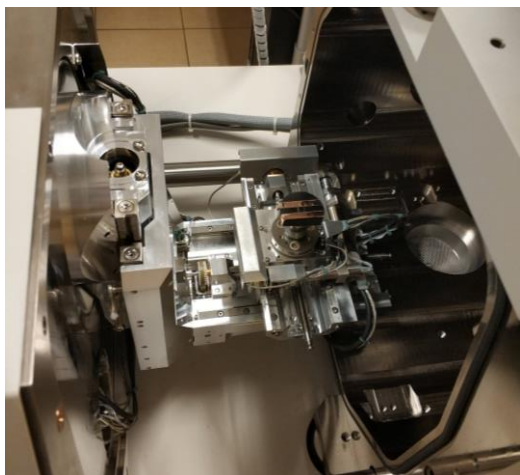
b)



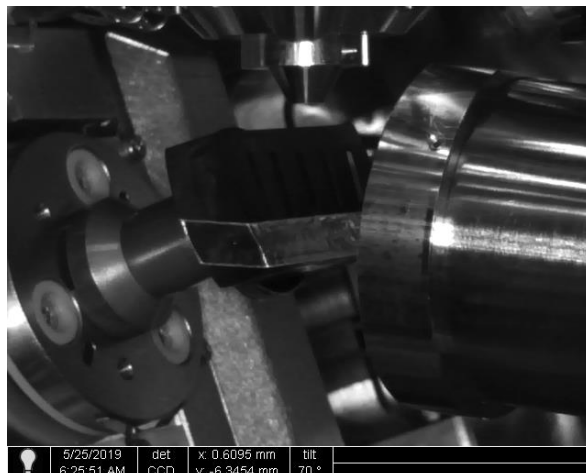
Rysunek 59. Szlifierko-polerka LaboPol 5 (a), automatyczna Szlifierko-polerka firmy STUERS (b).

Próbki przygotowane do badań, zamontowane na stoliku mikroskopu elektronowego przedstawiono na rysunku 60.

a)



b)



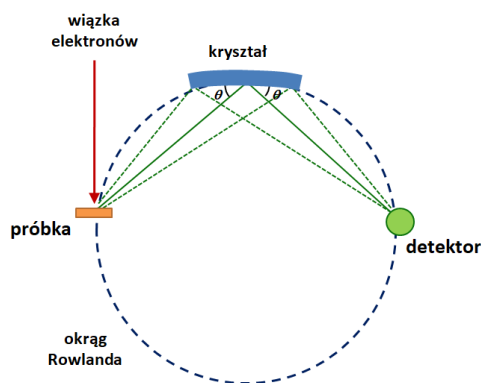
Rysunek 60. Komora mikroskopu elektronowego. Widok z zewnątrz (a) i wewnątrz (b).

Podczas badań mikrostrukturalnych wykorzystano skaningowy transmisyjny mikroskop elektronowy FEI Nova NanoSEM450, będący częścią wyposażenia laboratorium na Wydziale Inżynierii Metali i Informatyki Przemysłowej AGH.



Rysunek 61. Skaningowy transmisyjny mikroskop elektronowy FEI Nova NanoSEM 450 (STEM), przystawka analizująca WDS „IBEX” oraz przystawka EBSD.

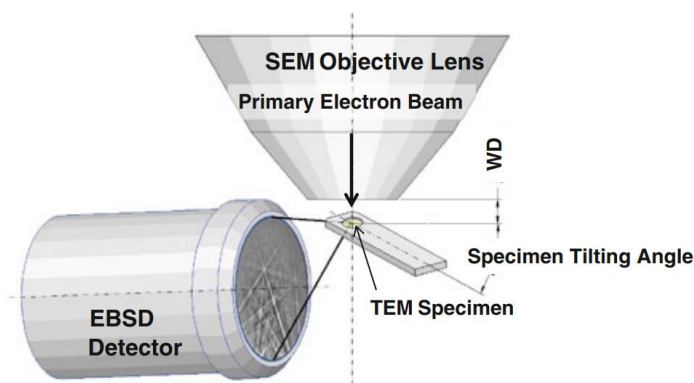
Badania stężenia węgla w próbkach po różnej historii przeróbki termicznej wykonano przy pomocy detektora długości fal WDS (ang. *Wavelength Dispersive Spectroscopy*). Zastosowana metoda WDS może być wykorzystywana w badaniach podczas obserwacji, analizy i charakterystyki powierzchni materiałów, w tym głównie morfologii oraz zawartości poszczególnych pierwiastków. Zasada pomiaru z wykorzystaniem WDS została przedstawiona na rysunku 62.



Rysunek 62. Schematyczne przedstawienie zasady działania detektora WDS (konfiguracja próbki, kryształu analitycznego i detektora w okręgu Rowlanda).

Metoda WDS jest jedną z technik mikroanalizy rentgenowskiej wykorzystującą dyfrakcję rentgenowską do oddzielenia promieni rentgenowskich o różnych długościach fal. Spektrometr składa się z kryształu analizującego oraz detektora. Promienie rentgenowskie padające na kryształ analizujący ulegają odbiciu. Przy zmieniających się kątach ugięcia spełnione musi zostać prawo Bragga. Określenie stężenia danego pierwiastka jest wykonywane poprzez porównanie spektrum z badanej próbki ze spektrum wzorca o znanym stężeniu badanego pierwiastka. Metoda ta charakteryzuje się wysoką dokładnością pomiaru, dzięki czemu możliwe jest wykonanie zarówno analizy jakościowej jak i ilościowej rozkładu pierwiastków wzdłuż linii oraz pełnych map obejmujących interesujący obszar badanego materiału. W niniejszych badaniach analizie poddano stężenie węgla w próbkach po różnych wariantach obróbki cieplnej. Badania prowadzono przy napięciu przyspieszającym 10kV, WD = 6.3mm i powiększeniach 2500-10000x.

Dodatkowo wykonano szczegółową analizę mikrostrukturalną badanych próbek. W tej części badań wykorzystano metodę dyfrakcji elektronów wstecznie rozproszonych EBSD (ang. *Electron Backscatter Diffraction Analysis*), która pozwala m. in. na określenie orientacji krystalograficznych poszczególnych ziaren, kąta dezorientacji pomiędzy nimi, rodzaju występujących granic ziaren oraz tekstury badanego materiału. W metodzie EBSD próbka umieszczana jest w komorze mikroskopu skaningowego (SEM) w taki sposób, aby padająca wiązka elektronów uderzała w powierzchnię próbki nachyloną pod kątem 70° . Odbijające się od warstw przypowierzchniowych analizowanego materiału elektrony ulegają rozproszeniu tworząc obraz linii dyfrakcyjnych na płaszczyźnie luminoforu. Elektrony, które uległy elastycznemu ugięciu na płaszczyźnie krystalicznej, zgodnie z prawem Bragga, tworzą dwa stożki rozpraszania nazwane stożkami Kossela. Efektem przecięcia stożków Kossela z płaszczyzną luminoforu jest obraz linii dyfrakcyjnych zwanych liniami Kikuchiego. Położenie tych linii jest charakterystyczne dla danej orientacji krystalicznej (rysunek 63).



Rysunek 63. Schematyczne przedstawienie zasady działania oraz głównych składników systemu EBSD [188].

W prezentowanych badaniach analizowane były próbki poddane procesowi nagrzewania oraz chłodzenia w różnych warunkach zgodnie z prezentowanymi wariantami. Badanie prowadzono przy napięciu przyspieszającym 20kV, WD = 9mm na obszarze 100x100 μ m z krokiem indeksowania 200nm. Zarówno sposób przygotowania zglądu oraz historia obróbki cieplnej, jak i odpowiednie ustawienie parametrów EBSD może wpływać na wysokość stopnia indeksowania. W celu eliminacji niezindeksowanych obszarów oraz punktów zindeksowanych w sposób niewłaściwy w procedurze postprocesowej wykonano redukcję szumów. Podczas obróbki danych uzyskanych z analizy mikrostrukturalnej za pomocą detektora EBSD wykorzystano oprogramowanie TSL OIM.

7.2. Walidacja mikrostrukturalna

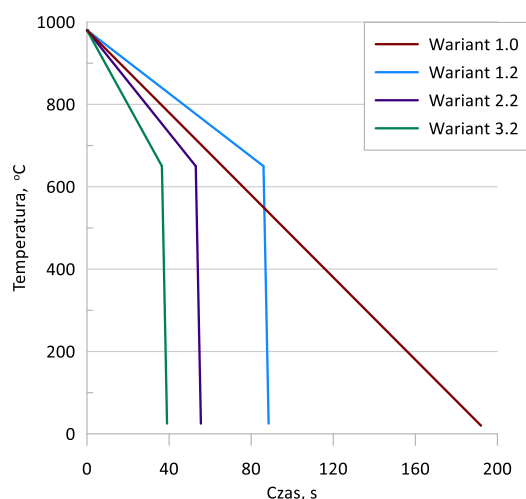
Walidację i weryfikację modelu wykonano z wykorzystaniem badań mikroskopowych stali S235JR należącej to typowych stali konstrukcyjnych ogólnego przeznaczenia. W ramach pracy doktorskiej zaprojektowano 11 wariantów cieplnych, którym poddano próbki (tabela 6) z wykorzystaniem dylatometru.

Tabela 6. Warianty przebiegów cieplnych, według których wykonano eksperymenty.

Wariant 1.0 Austenityzacja 980°C/20 min → chłodzenie z szybkością 5°C/s do temperatury otoczenia.
Wariant 1.1 Austenityzacja 980°C/20 min → chłodzenie z szybkością 5°C/s do temperatury 750°C → intensywne chłodzenie helem.
Wariant 1.2 Austenityzacja 980°C/20 min → chłodzenie z szybkością 5°C/s do temperatury 650°C → intensywne chłodzenie helem.
Wariant 2.0 Austenityzacja 980°C/20 min → chłodzenie z szybkością 10°C/s do temperatury otoczenia.

Wariant 2.1 Austenitizacja 980°C/20 min → chłodzenie z szybkością 10°C/s do temperatury 750°C → intensywne chłodzenie helem.
Wariant 2.2 Austenitizacja 980°C/20 min → chłodzenie z szybkością 10°C/s do temperatury 650°C → intensywne chłodzenie helem.
Wariant 3.0 Austenitizacja 980°C/20 min → chłodzenie z szybkością 20°C/s do temperatury otoczenia.
Wariant 3.1 Austenitizacja 980°C/20 min → chłodzenie z szybkością 20°C/s do temperatury 750°C → intensywne chłodzenie helem.
Wariant 3.2 Austenitizacja 980°C/20 min → chłodzenie z szybkością 20°C/s do temperatury 650°C → intensywne chłodzenie helem.
Wariant 4.1 Austenitizacja 980°C/20 min → chłodzenie z szybkością 125°C/s do temperatury 750°C/20 s → chłodzenie z szybkością 125°C/s.
Wariant 4.2 Austenitizacja 980°C/20 min → chłodzenie z szybkością 125°C/s do temperatury 750°C/40 s → chłodzenie z szybkością 125°C/s.

Do weryfikacji modelu wybrano warianty 1.0, 1.2, 2.2 oraz 3.2., których przebieg przedstawiono na rysunku 64. Wybór wariantów podyktowany był chęcią uzyskania szerokiego zakresu morfologii i składu fazowego.



Rysunek 64. Warianty temperaturowe wykorzystane do weryfikacji modelu.

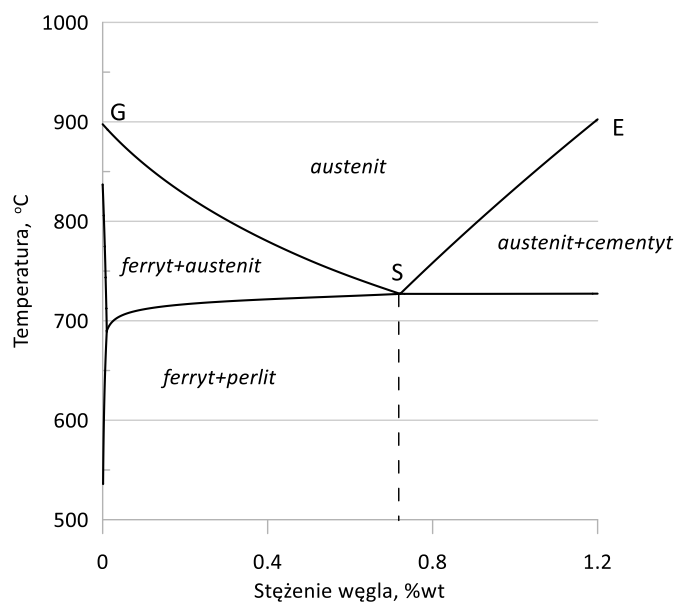
Plan badań obejmował wykonanie z wykorzystaniem mikroskopu EBSD zdjęć mikrostruktury w celu oceny składu fazowego, a następnie wykonanie dla każdej z wybranych próbek liniowego pomiaru stężenia węgla w wybranych miejscach. Każdy z wybranych cykli temperaturowych odwzorowano z wykorzystaniem modelu MLS-DIFF. W tym celu, przygotowano cyfrową reprezentację mikrostruktury bazowej o wielkości $100 \times 100 \mu\text{m}$ i średniej wielkości ziarna $30 \mu\text{m}$ (rysunek 65), na której przeprowadzono symulacje.

.



Rysunek 65. Cyfrowa reprezentacja mikrostruktury stali SJ235.

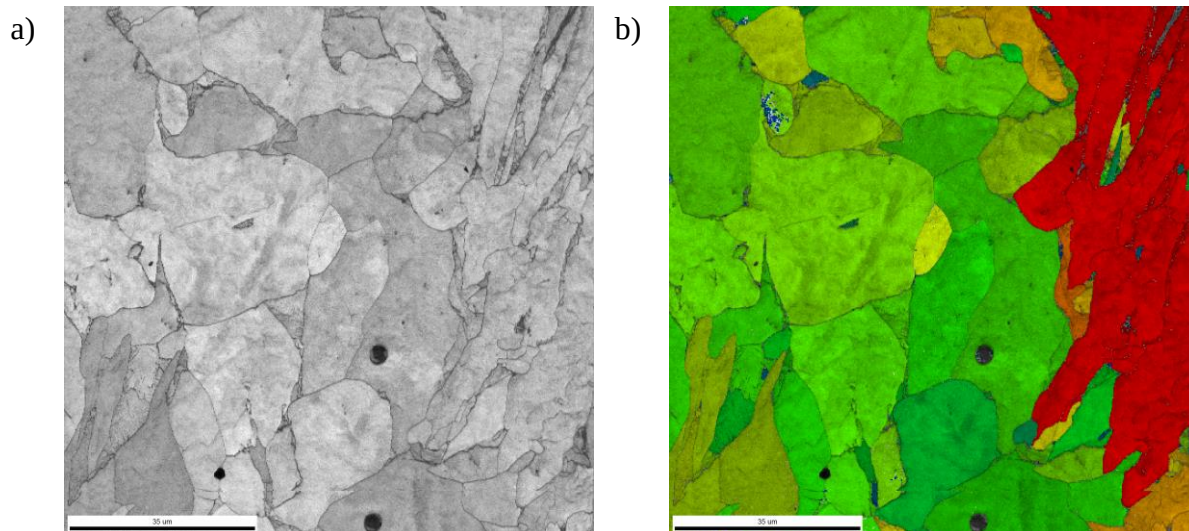
Wykres równowagi fazowej przygotowano na podstawie składu chemicznego za pomocą oprogramowania JMatPro (rysunek 66). Na potrzeby obliczeń numerycznych wykonano aproksymację równań linii charakterystycznych (GS i SE).



Rysunek 66. Fragment wykresu równowagi fazowej stali S235JR.

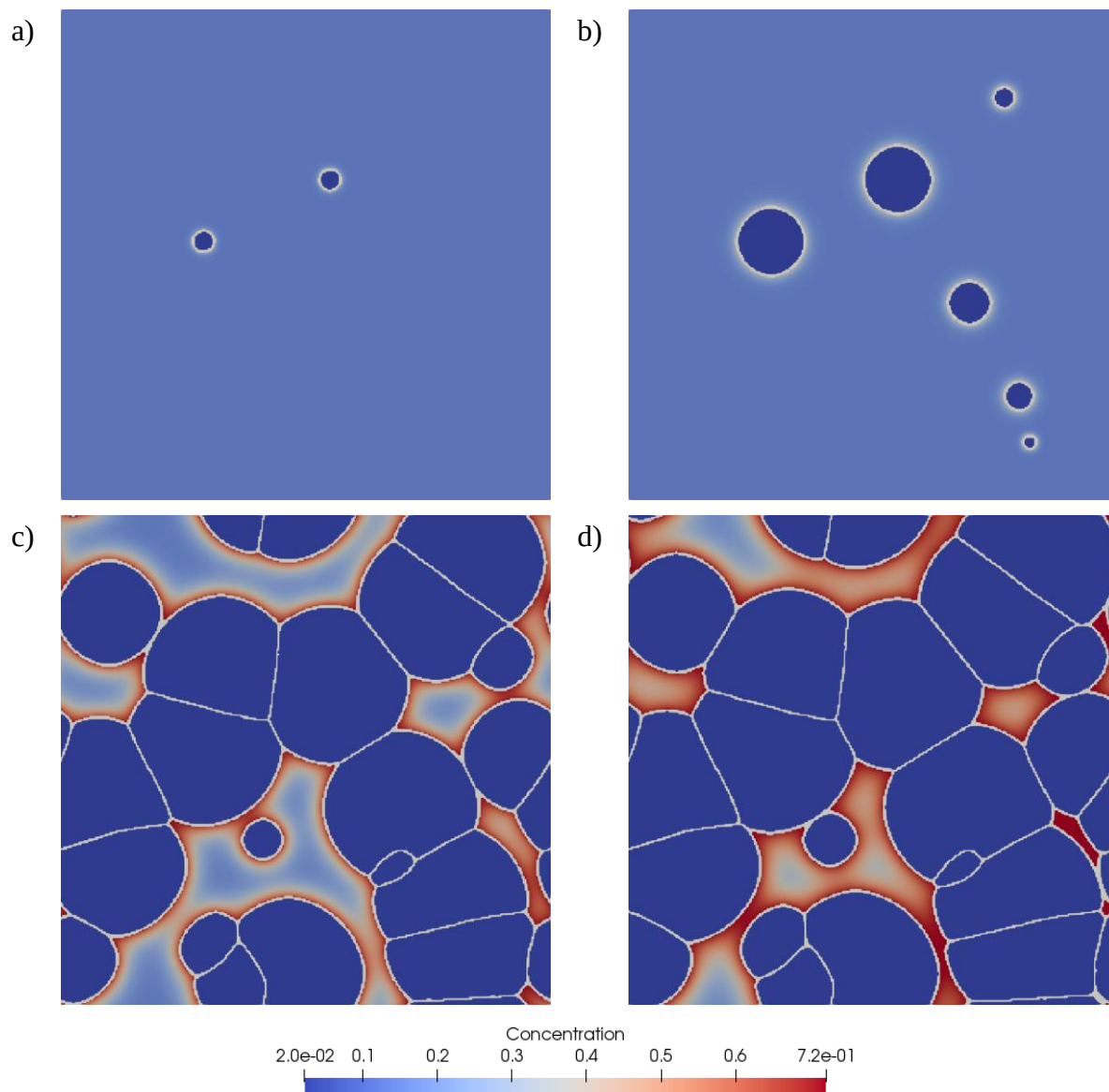
Wariant 1.0.

Na podstawie zdjęć z mikroskopu EBSD oceniono zawartość ferrytu na 79% (rysunek 67).



Rysunek 67. Zdjęcie EBSD mikrostruktury dla wariantu 1.0. Parametr jakości obrazu (ang. *index quality map*, IQ) – (a), rozkład orientacji ziaren (ang. *grain orientation spread*, GOS) – (b).

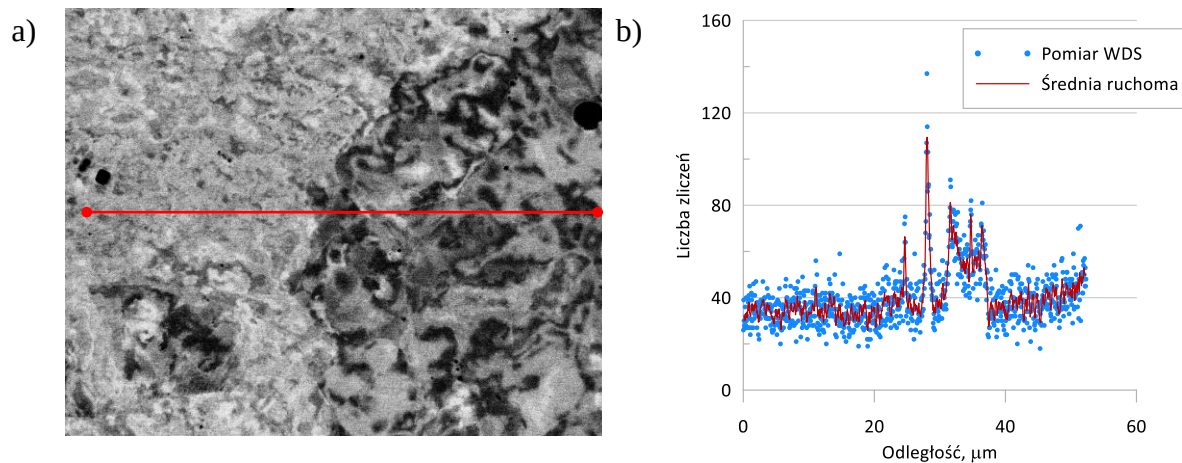
Na rysunku 68 przedstawiono odpowiadające cyklowi 1.0 wyniki z symulacji numerycznej.



Rysunek 68. Rozkład stężenia węgla i morfologia mikrostruktury wg modelu MLS-DIFF (wariant 1.0) w temperaturach: a) 800°C, b) 767°C, c) 400°C, d) 20°C.

Model przemian fazowych pozwolił na oszacowanie zawartości ferrytu na 78%. Za pomocą mikroskopu elektronowego wykonano również pomiar stężenia węgla na granicy dwóch ziaren.

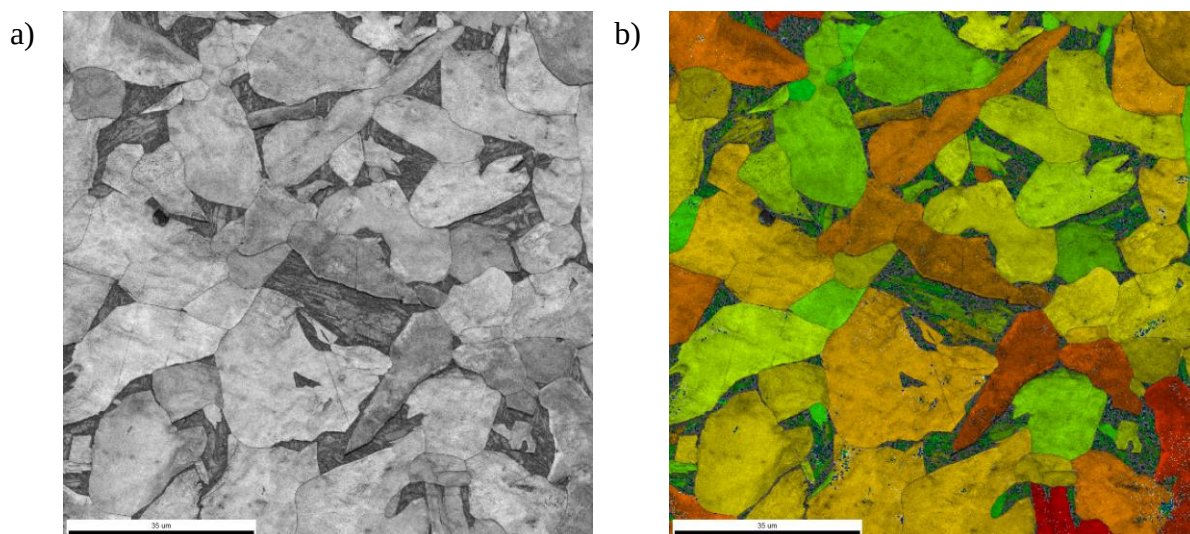
Wyniki uzyskane z modelu przedstawiono za pomocą aplikacji ParaView, wspierającej wizualizację danych z formatu VTU, do którego zapisywane były wyniki z poszczególnych kroków czasowych. W związku z faktem, że w ujęciu globalnym morfologia stanowi sumę poszczególnych funkcji poziomic, granica ziaren przebiega przez obszary, gdzie wartość sumy funkcji poziomic jest najmniejsza. Granice zostały zwizualizowane poprzez zastosowanie filtra progowania wartości (ang. *thresholding*) bliskich zerowej poziomicy.



Rysunek 69. Obraz z mikroskopu SEM (detektor CBS) wraz z zaznaczoną linią pomiaru WDS dla wariantu 1.0 (a), profil stężenia węgla wzdłuż linii pomiarowej (b).

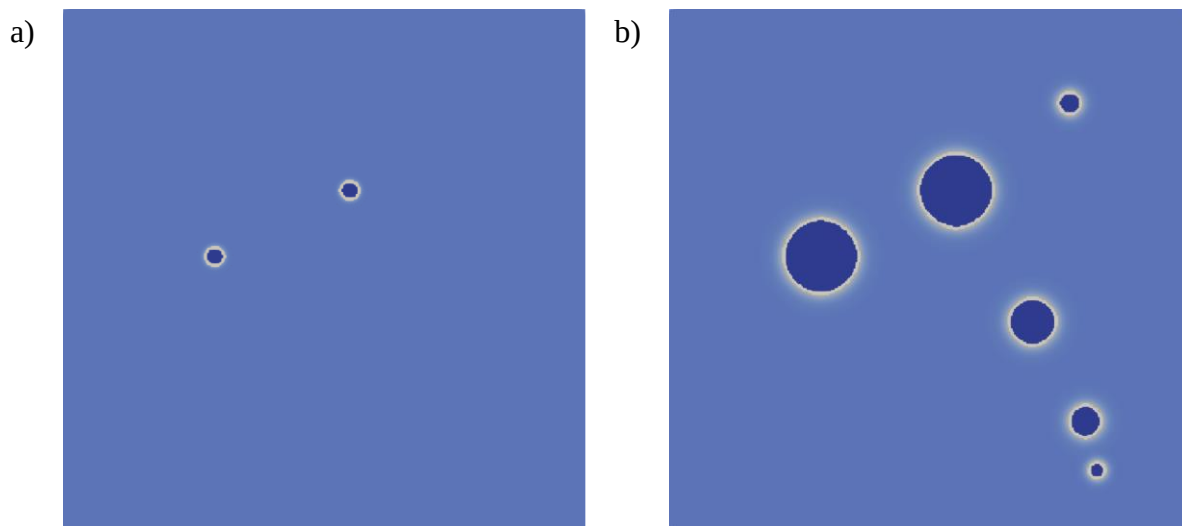
Wariant 1.2

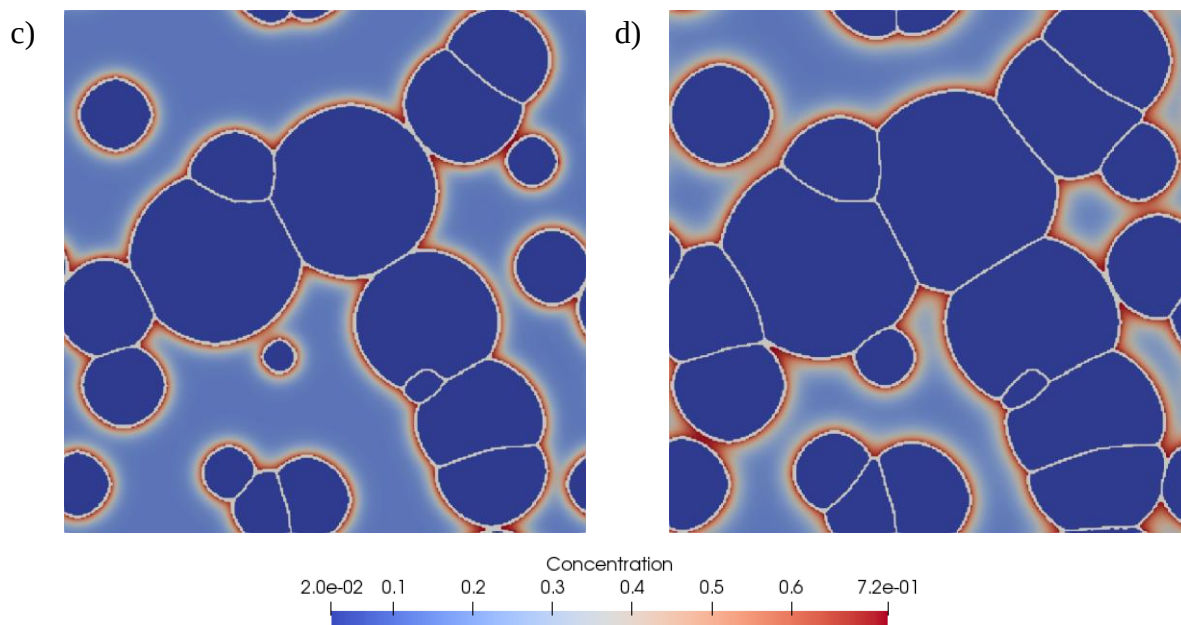
Na podstawie zdjęć z mikroskopu elektronowego oceniono zawartość ferrytu na 73% (rysunek 70).



Rysunek 70. Zdjęcie EBSD mikrostruktury wariantu 1.2. Parametr jakości obrazu (a), rozkład orientacji ziaren (b).

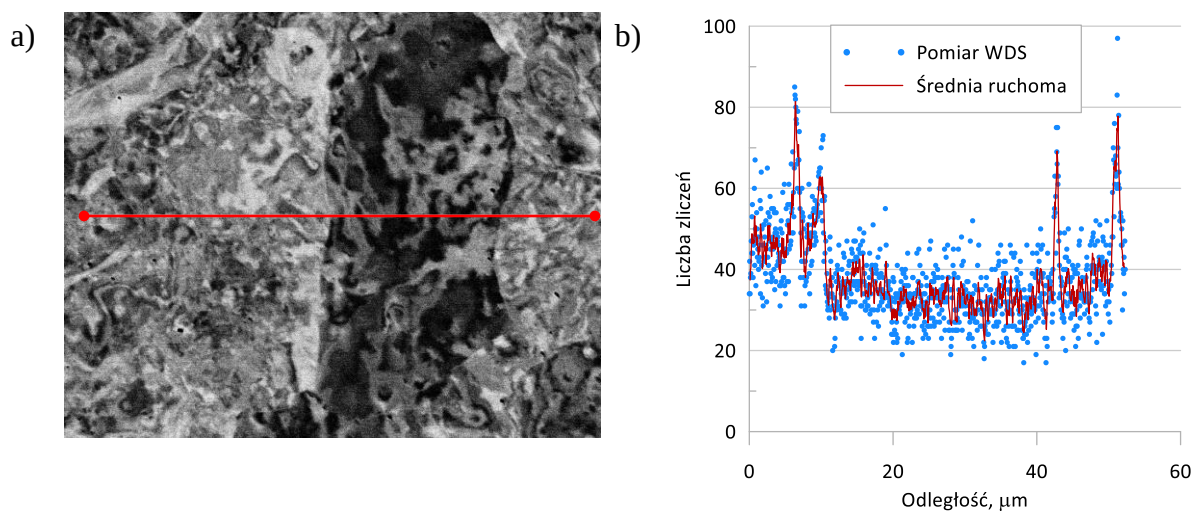
Na rysunku 71 przedstawiono odpowiadająco cyklowi 1.2 wyniki symulacji numerycznej.





Rysunek 71. Rozkład stężenia węgla i morfologia mikrostruktury wg. modelu MLS-DIFF (wariant 1.2) w temperaturach: a) 830°C, b) 767°C, c) 684°C, d) 400°C.

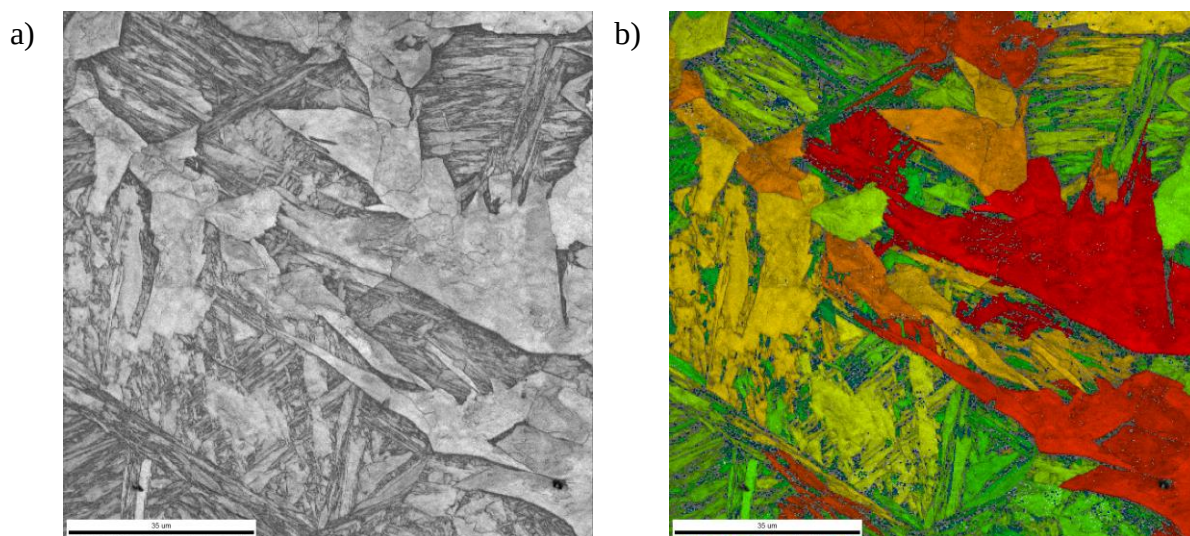
Model przemian fazowych pozwolił na oszacowanie zawartości ferrytu na 73%. Za pomocą mikroskopu elektronowego wykonano również pomiar stężenia węgla na granicy dwóch ziaren (rysunek 72).



Rysunek 72. Obraz z mikroskopu SEM (detektor CBS) wraz z zaznaczoną linią pomiaru WDS dla wariantu 1.2 (a), profil stężenia węgla wzdłuż linii pomiarowej (b).

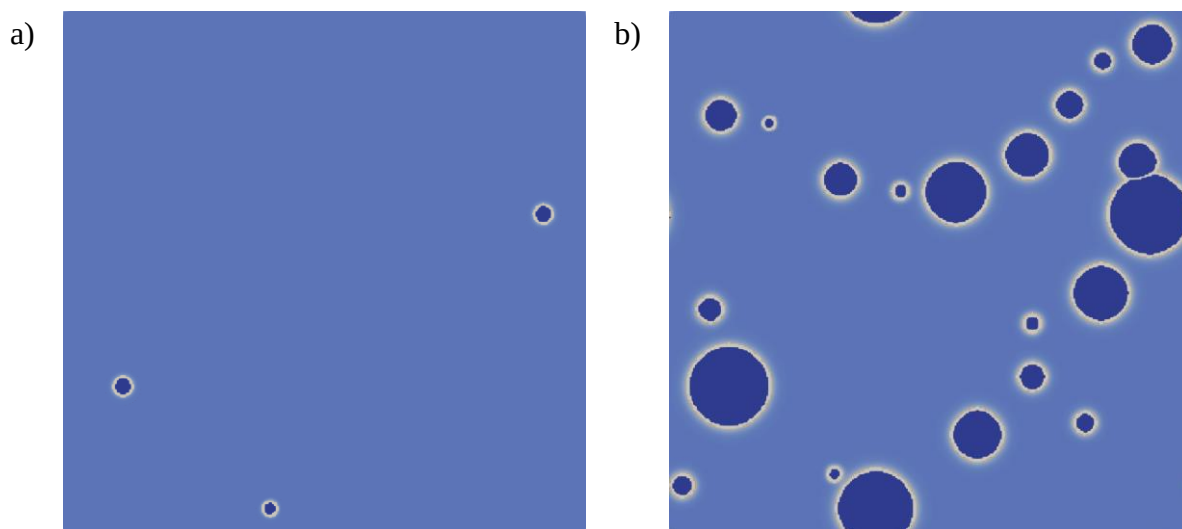
Wariant 2.2

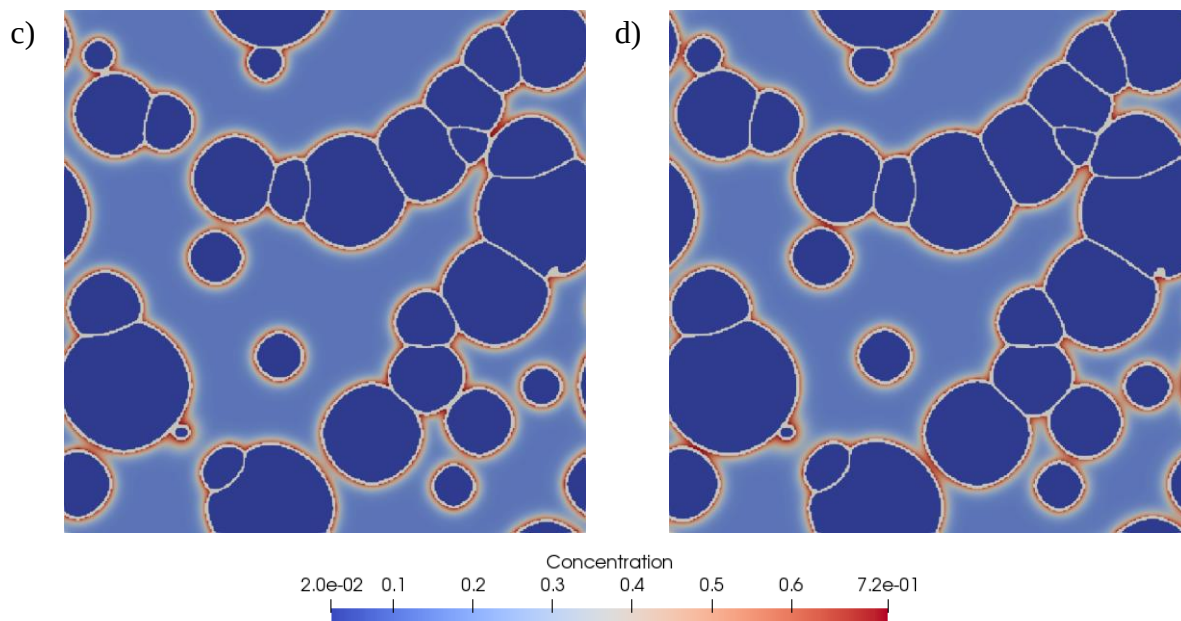
Na podstawie zdjęć z mikroskopu elektronowego oceniono zawartość ferrytu na 60% (rysunek 73).



Rysunek 73. Zdjęcie EBSD mikrostruktury dla wariantu 2.2. Parametr jakości obrazu (a), rozkład orientacji ziaren (b).

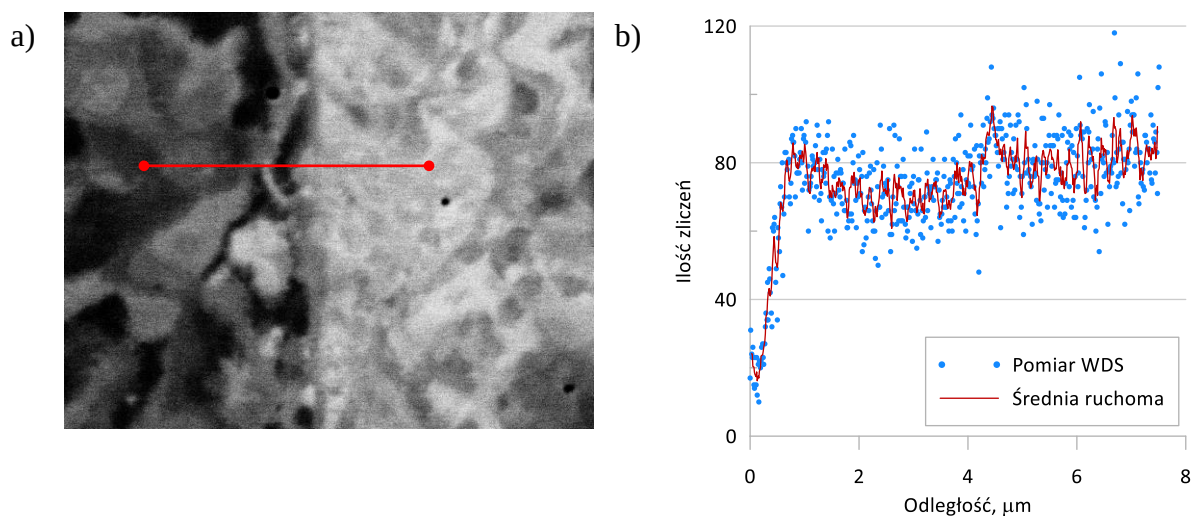
Na rysunku 74 przedstawiono odpowiadające cyklowi 2.2 wyniki symulacji numerycznej.





Rysunek 74. Rozkład stężenia węgla i morfologia mikrostruktury wg. modelu MLS-DIFF (wariant 1.2) w temperaturach: a) 830°C, b) 767°C, c) 684°C, d) 400°C.

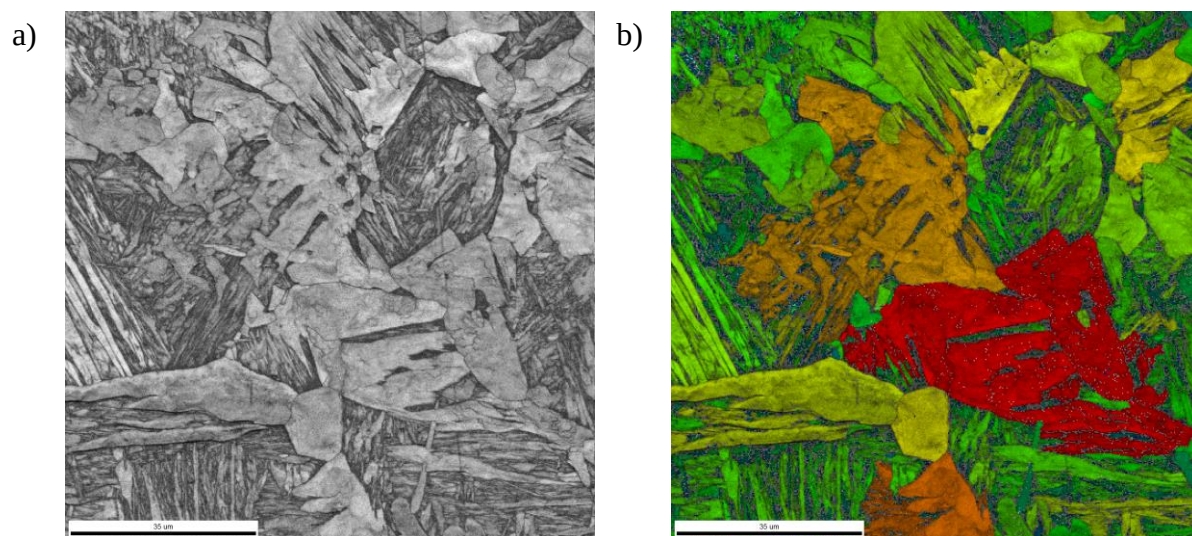
Model przemian fazowych pozwolił na oszacowanie zawartości ferrytu na 56%. Za pomocą mikroskopu elektronowego wykonano również pomiar stężenia węgla na granicy dwóch ziaren (rysunek 75).



Rysunek 75. Obraz z mikroskopu SEM (detektor CBS) wraz z zaznaczoną linią pomiaru WDS dla wariantu 2.2 (a), profil stężenia węgla wzdłuż linii pomiarowej (b).

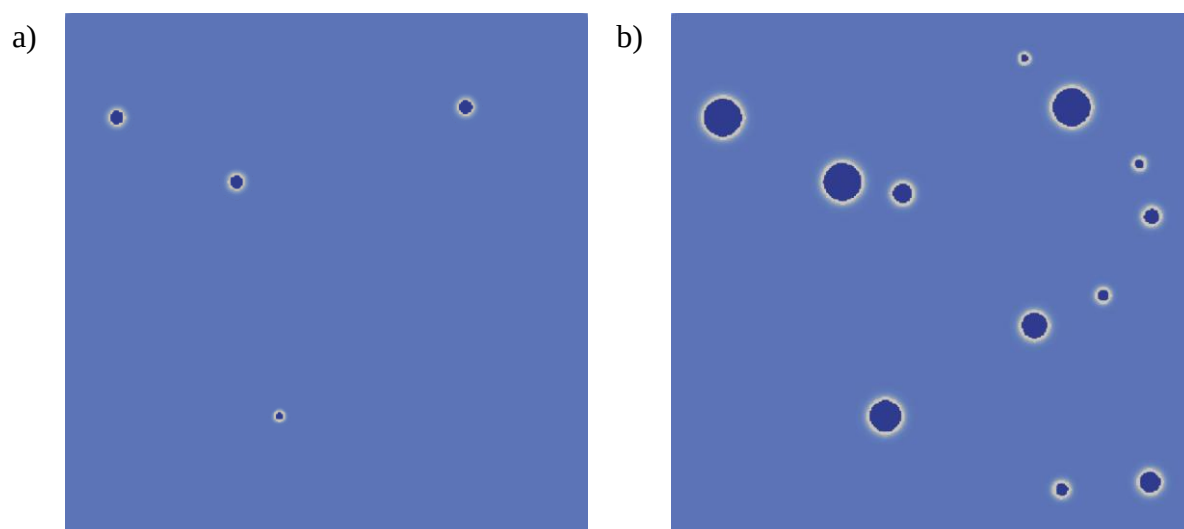
Wariant 3.2

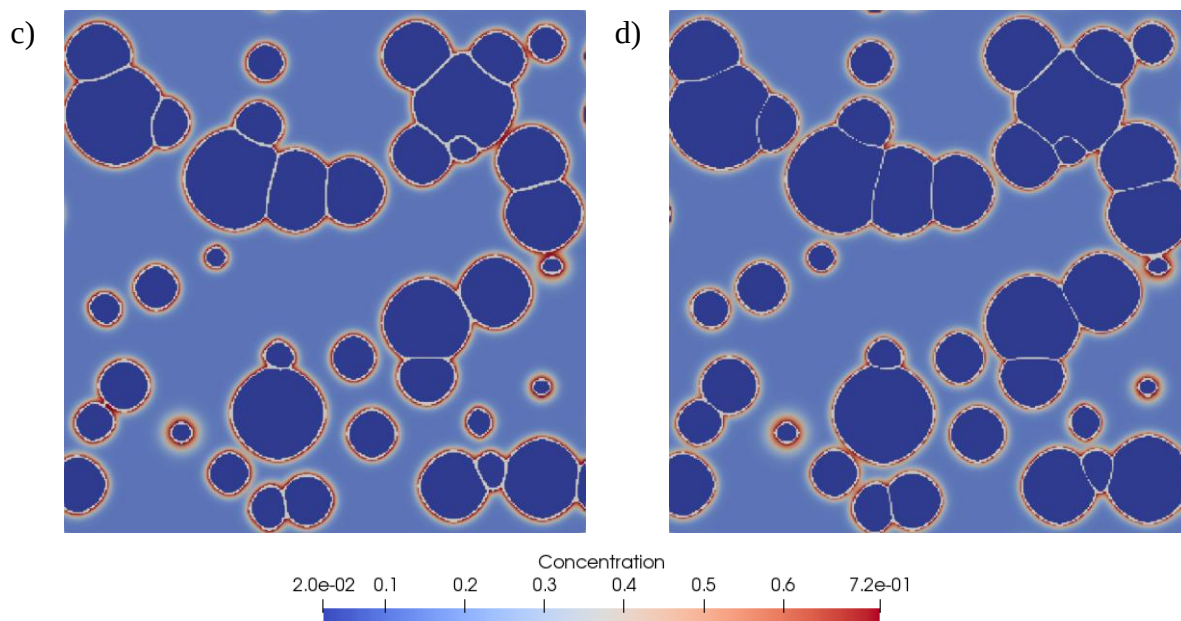
Na podstawie zdjęć z mikroskopu elektronowego oceniono zawartość ferrytu na 35% (rysunek 76).



Rysunek 76. Zdjęcie EBSD mikrostruktury dla wariantu 3.2. Parametr jakości obrazu (a), rozkład orientacji ziaren (b).

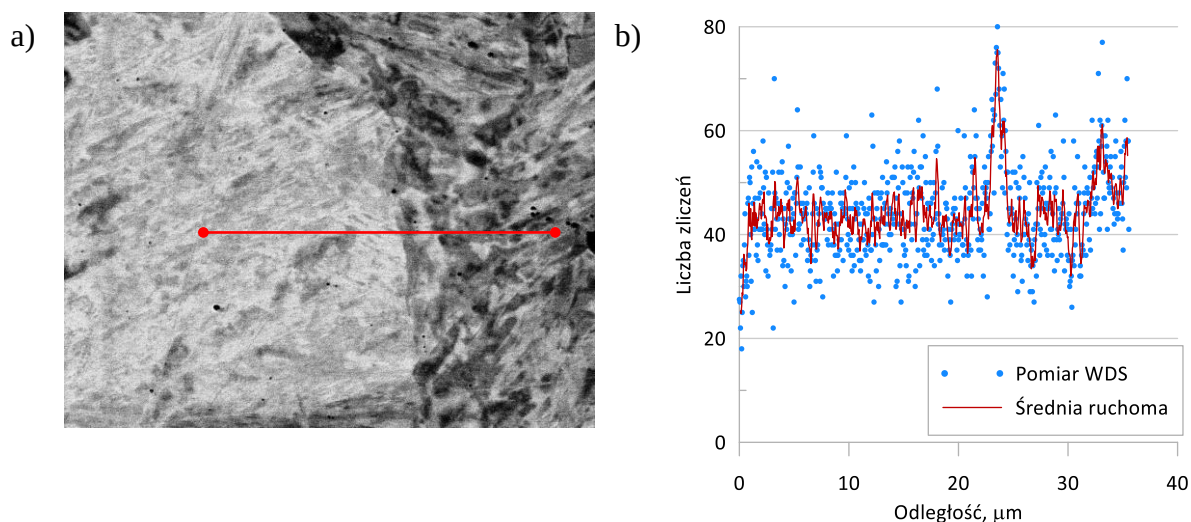
Na rysunku 77 przedstawiono odpowiadające cyklowi 3.2 wyniki symulacji numerycznej.





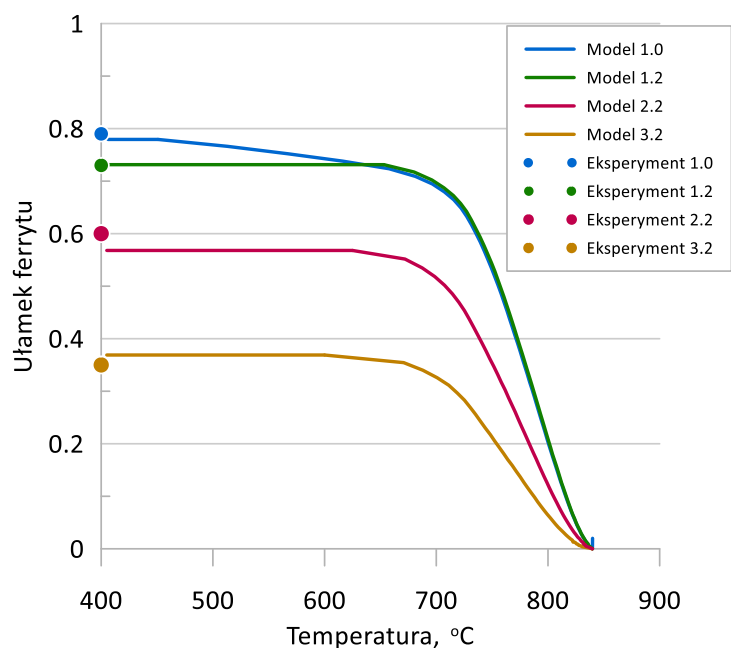
Rysunek 77. Rozkład stężenia węgla i morfologia mikrostruktury wg. modelu MLS-DIFF (wariant 3.2) w temperaturach: a) 800°C, b) 780°C, c) 680°C, d) 400°C.

Model przemian fazowych pozwolił na oszacowanie zawartości ferrytu na 36%. Za pomocą WDS wykonano również pomiar stężenia węgla na granicy dwóch ziaren (rysunek 78).



Rysunek 78. Obraz z mikroskopu SEM (detektor CBS) wraz z zaznaczoną linią pomiaru WDS dla wariantu 3.2 (a), profil stężenia węgla wzdłuż linii pomiarowej (b).

Na rysunku 79 przedstawiono kinetykę przemiany ferrytycznej dla omawianych wariantów oraz oszacowaną na podstawie wyników doświadczalnych zawartość ferrytu.



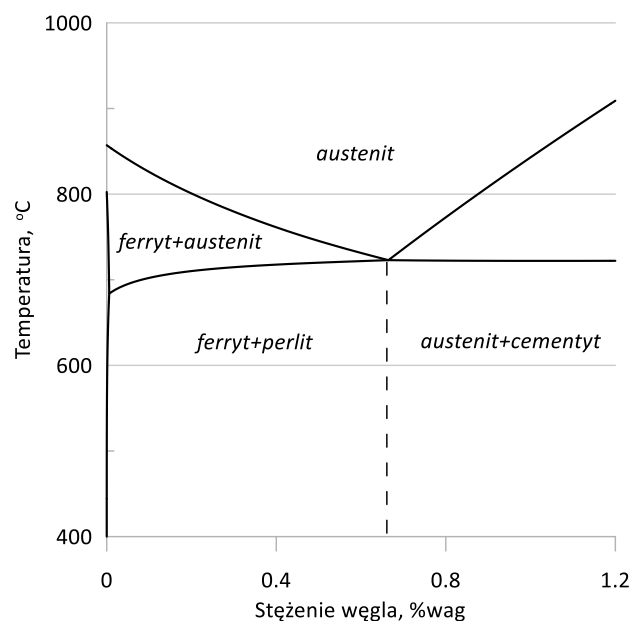
Rysunek 79. Kinetyka przemiany ferrytycznej wg. modelu MLS-DIFF, porównanie do wyników eksperymentalnych.

Analiza uzyskanych wyników wskazuje na zadowalającą zgodność prezentowanego modelu z wynikami eksperymentalnymi dla stali S235JR. Morfologia ziaren jest nieporównywalna ze względu na jej typ. Duże prędkości chłodzenia próbek skutkowy niedyfuzyjnym wzrostem ferrytu i w następstwie uzyskaniem mikrostruktury iglastej, czego prezentowany model dyfuzyjny nie był w stanie wiernie odwzorować.

Dokładny pomiar stężenia węgla za pomocą WDS jest niezmiernie trudny do przeprowadzenia ze względu na niską energię jonizacji węgla – niską energię fotonów promieniowania charakterystycznego węgla. Ponadto pomiar ten jest utrudniony przez występowanie zjawiska kontaminacji węglowej polegającej na osadzaniu się na powierzchni próbki usieciowanych cząsteczek organicznych pod wpływem interakcji ze skanującą wiązką elektronową. Pomiar punktowy stanowi uśrednioną wartość z punktu o średnicy około 0.5 μm . Stan powierzchni próbki, lokalne zanieczyszczenia czy w końcu dokładność urządzenia pomiarowego sprawiają, że przedstawione profile stężenia węgla mogą być interpretowane jedynie w sposób jakościowy. W każdym przypadku obserwowane było znaczne spiętrzenie stężenia węgla przy granicy ziaren a następnie spadek stężenia wraz z oddalaniem się od granicy.

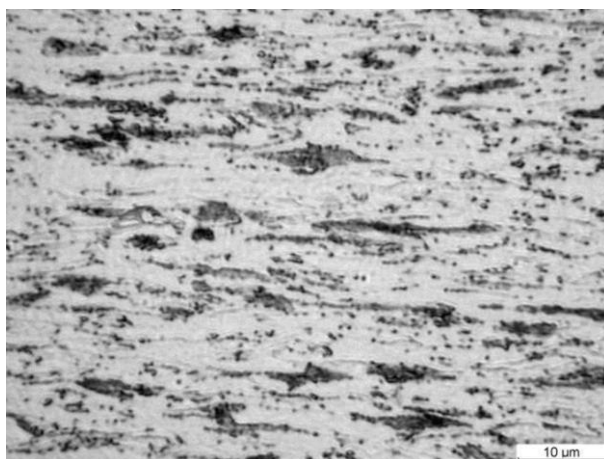
7.3. Walidacja modelu przemian z wykorzystaniem SSRVE

Porównanie wyników przemian fazowych dla RVE i SSRVE wykonano na stali S243, która należy do grupy stali dwufazowych DP. W symulacjach wykorzystano wykres równowagi fazowej opracowany przy pomocy oprogramowania JMatPro (rysunek 80).



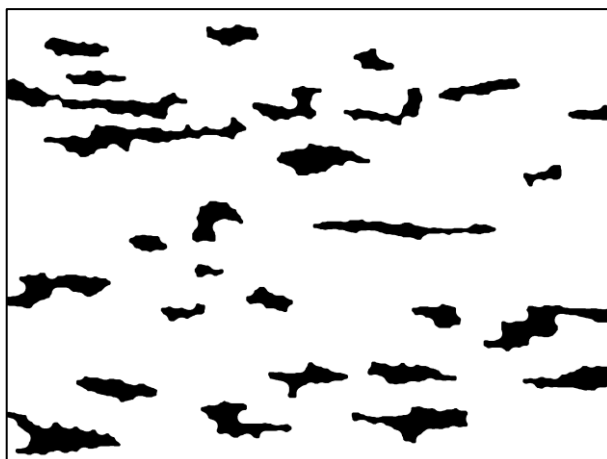
Rysunek 80. Fragment wykresu równowagi faz stali S243.

W celach testowych odwzorowano cykl ciągłego wyżarzania obejmujący nagrzewanie i chłodzenie. Na rysunku 81 przedstawiono strukturę blachy ze stali DP odwalcowanej na zimno z gniotem sumarycznym wynoszącym 74%.



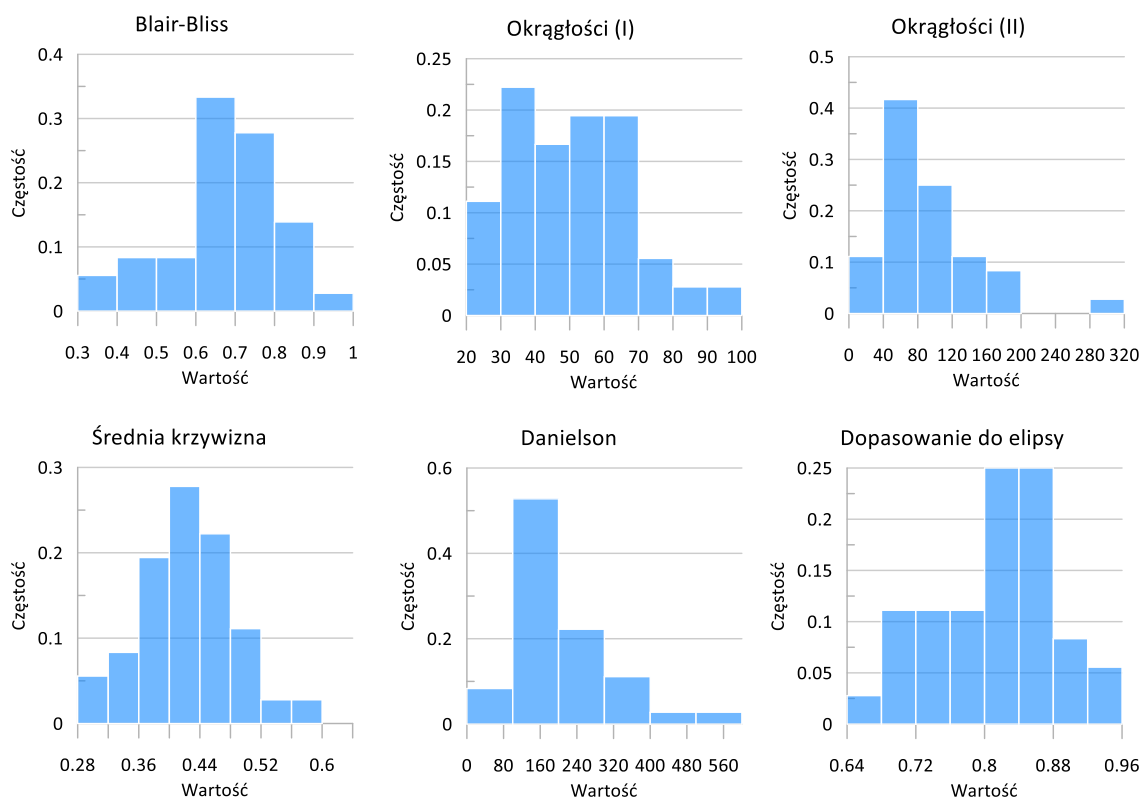
Rysunek 81. Zdjęcie mikrostruktury stali S243 w stanie po walcowaniu na zimno.

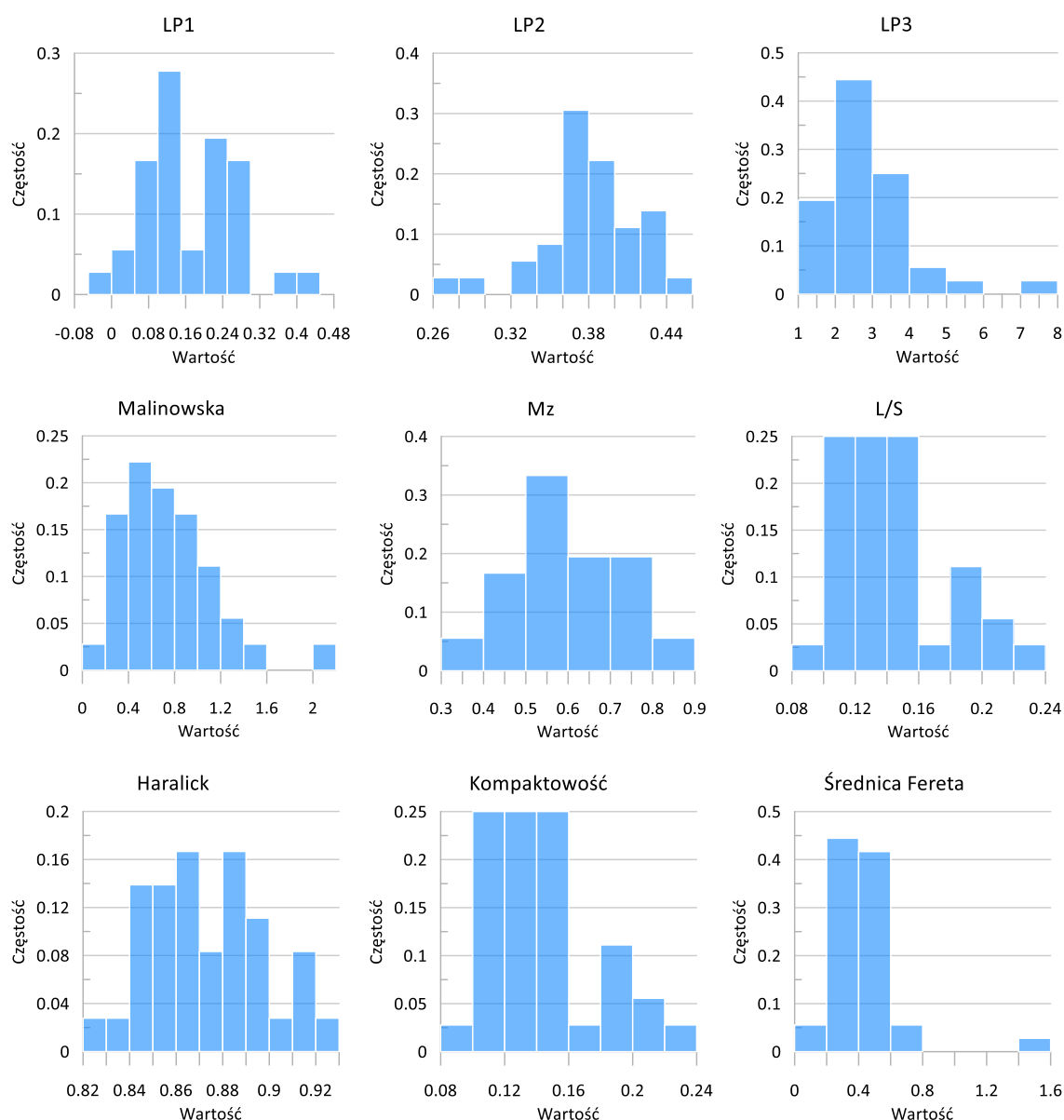
W przedstawionej strukturze widać ziarna perlitu, o charakterystycznej wydłużonej morfologii będącej następstwem odkształcenia w wyniku walcowania, w osnowie ferrytu. Zdjęcie poddano procedurze wstępnego przetwarzania w celu uzyskania jednoznacznego podziału na ziarna. Procedurę tą szeroko opisano w rozdziale 5. Wyniki zastosowanych algorytmów przedstawiono na rysunku 82.



Rysunek 82. Obraz mikrostruktury ferrytyczno-perlitycznej po zastosowaniu przetwarzania wstępnego.

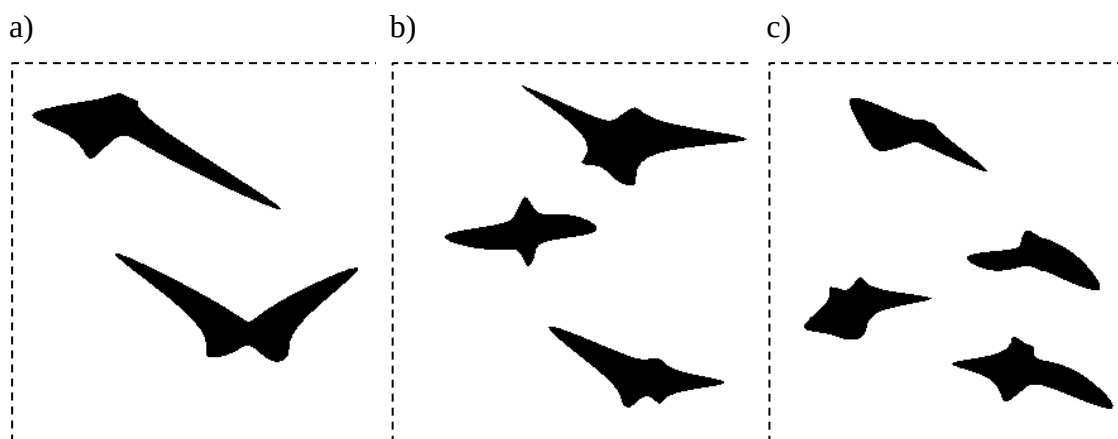
Przygotowane zdjęcie poddano analizie w celu znalezienia reprezentatywnych współczynników kształtu. Ułamek fazy ferrytu wyniósł 0.108. Częstość występowania poszczególnych współczynników zestawiono na rysunku 83.





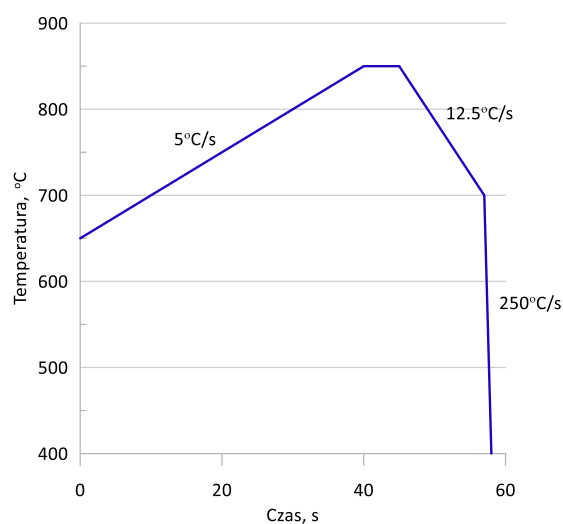
Rysunek 83. Częstość występowania współczynników kształtu dla mikrostruktury stali S235 po walcowaniu na zimno.

Na podstawie tak przygotowanych danych referencyjny zestawiono procedurę optymalizacyjną. Przy wyborze składowych funkcji celu kierowano się również koniecznością wyboru współczynników, które wiernie oddadzą wydłużony charakter ziaren perlitu. W funkcji celu procedury SSRVE wykorzystano: współczynnik Danielsona, okrągłości II, dopasowanie do elipsy, LP3 oraz ułamek fazowy. Przygotowano elementy SSRVE 2,3 i 4 elementowe, które przedstawiono na rysunku 84.



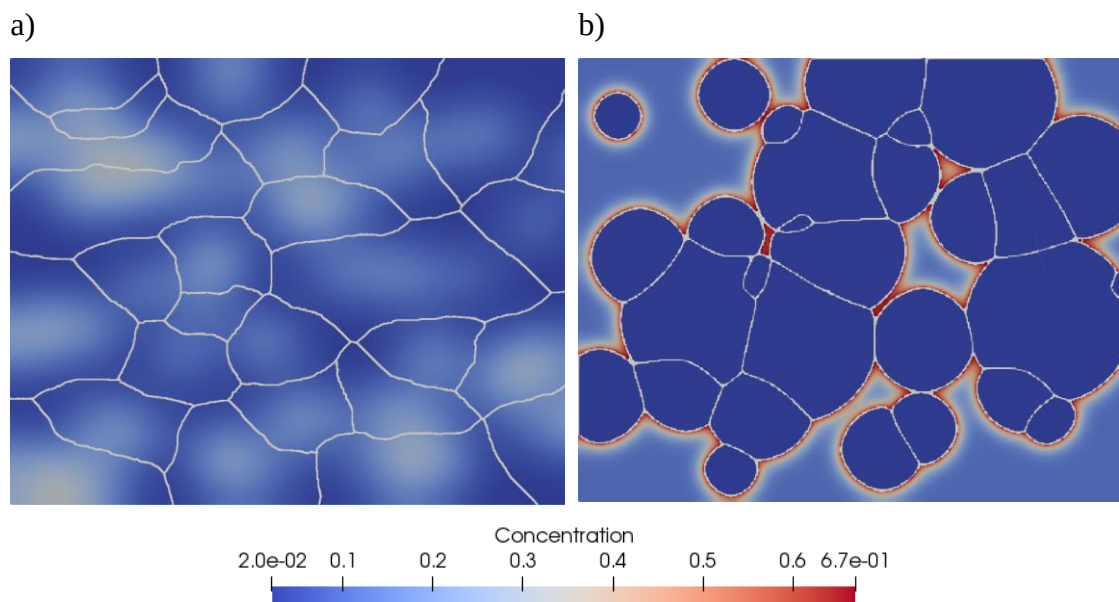
Rysunek 84. Przykładowe elementy SSRVE na podstawie mikrostruktury stali S243 z: dwoma (a), trzema (b) i czterema (c) ziarnami.

Pierwszy etap weryfikacji polegał na przeprowadzeniu pełnej symulacji austenityzowania z wykorzystaniem reprezentacji mikrostruktury ferrytyczno-perlitycznej (rysunek 82). Symulacja obejmowała nagrzewanie oraz chłodzenie (rysunek 85).



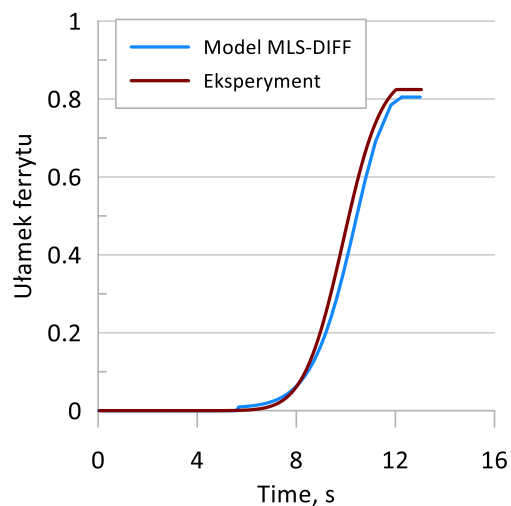
Rysunek 85. Cykl nagrzewania i chłodzenia wykorzystany w symulacjach.

Wyniki uzyskane z symulacji, po pełnej austenitizacji oraz chłodzeniu przedstawiono na rysunku 86.



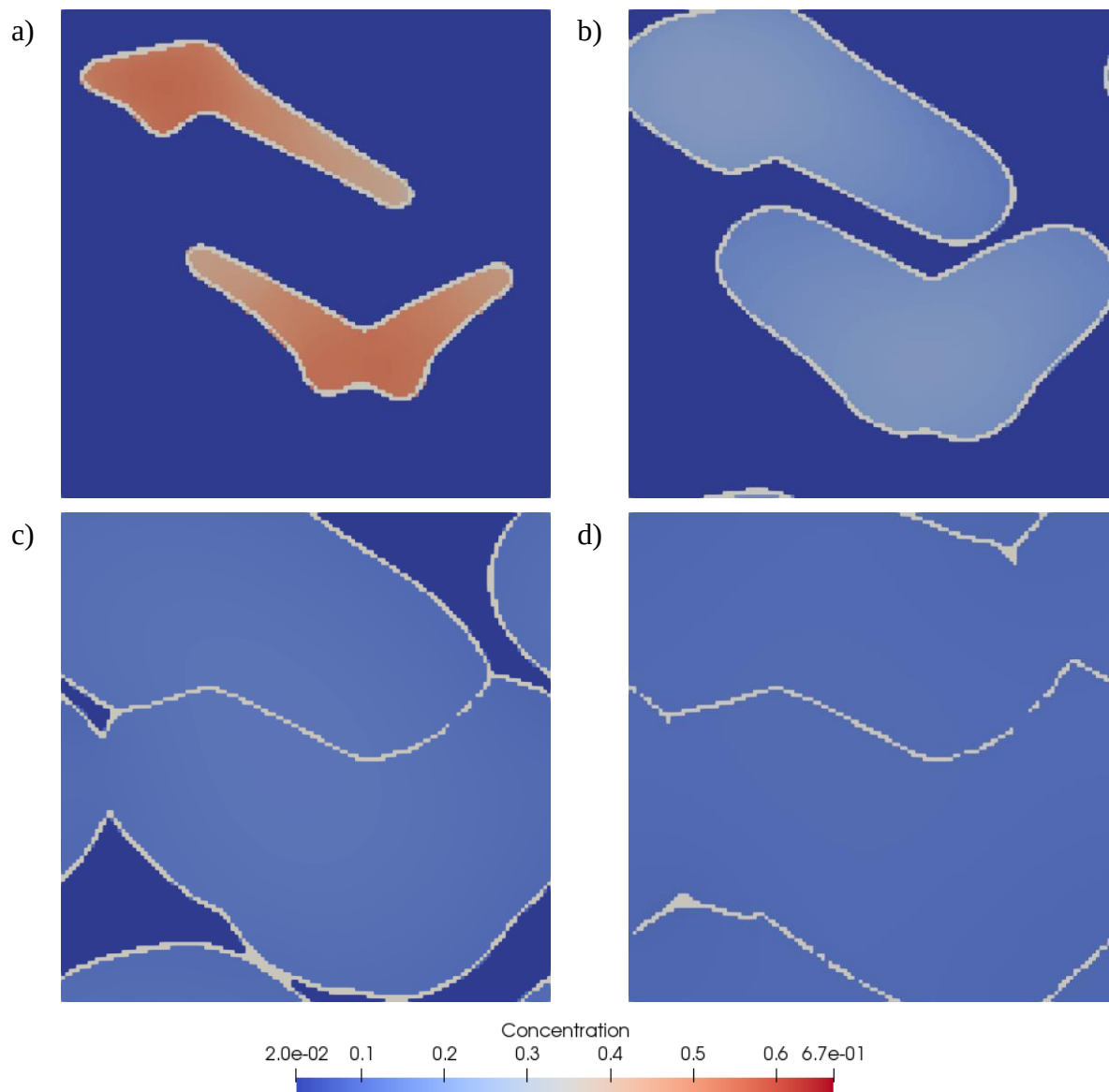
Rysunek 86. Morfologia oraz rozkład stężenia węgla w mikrostrukturze stali S243 w temperaturze 870°C (a) oraz morfologia po ochłodzeniu do temperatury pokojowej (b).

Kinetykę przemiany przy chłodzeniu porównano z wynikami doświadczalnymi i otrzymano dobrą zgodność, błąd dopasowania krzywych oszacowano na poziomie 3% (rysunek 87).



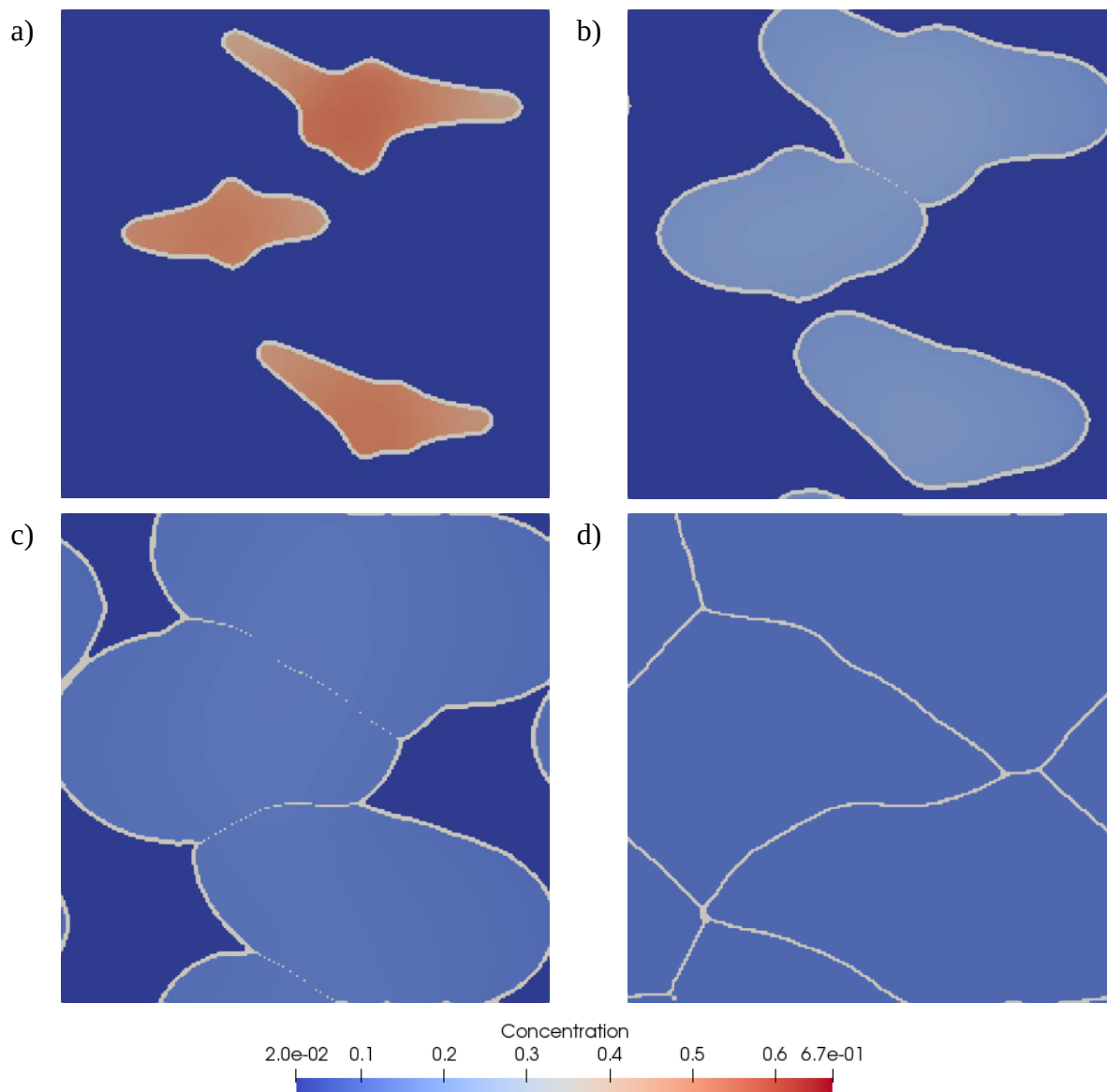
Rysunek 87. Kinetyka przemiany ferrytycznej. Porównanie modelu z wynikami doświadczalnymi.

Na rysunku 88 przedstawiono symulacje wzrostu austenitu podczas nagrzewania w elemencie SSRVE zbudowanym z 2 ziaren.



Rysunek 88. Symulacja przemiany fazowej przy nagrzewaniu z wykorzystaniem elementu SSRVE z dwoma ziarnami perlitu. Mikrostruktura w temperaturze a) 750°C, b) 810°C, c) 825°C, d) 830°C.

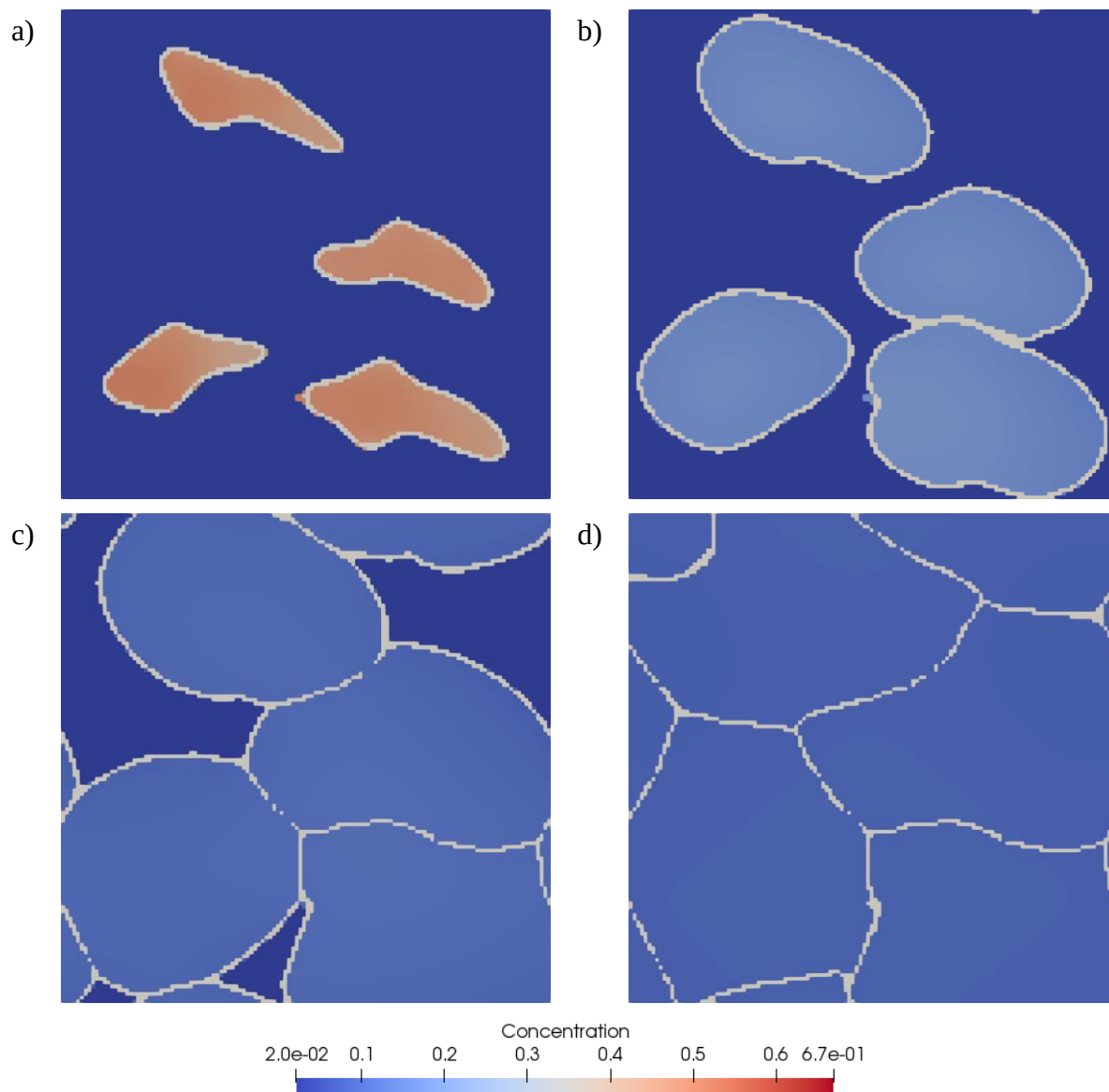
Wykonanie symulacji przemiany austenicznej z wykorzystaniem SSRVE z dwoma ziarnami pokazało, że otrzymana w wyniku morfologia zbudowana byłaby z nieskończenie długich ziaren bez punktów potrójnych. Przyczyną takiego stanu jest zastosowanie periodycznych warunków brzegowych. Choć zarodkowanie ferrytu po granicach ziaren jest możliwe, mikrostruktura pasmowa nie odzwierciedlałaby rzeczywistych mikrostruktur stali DP.



Rysunek 89. Symulacja przemiany fazowej przy nagrzewaniu z wykorzystaniem elementu SSRVE z trzema ziarnami perlitu. Mikrostruktura w temperaturze a) 750°C, b) 810°C, c) 825°C, d) 830°C.

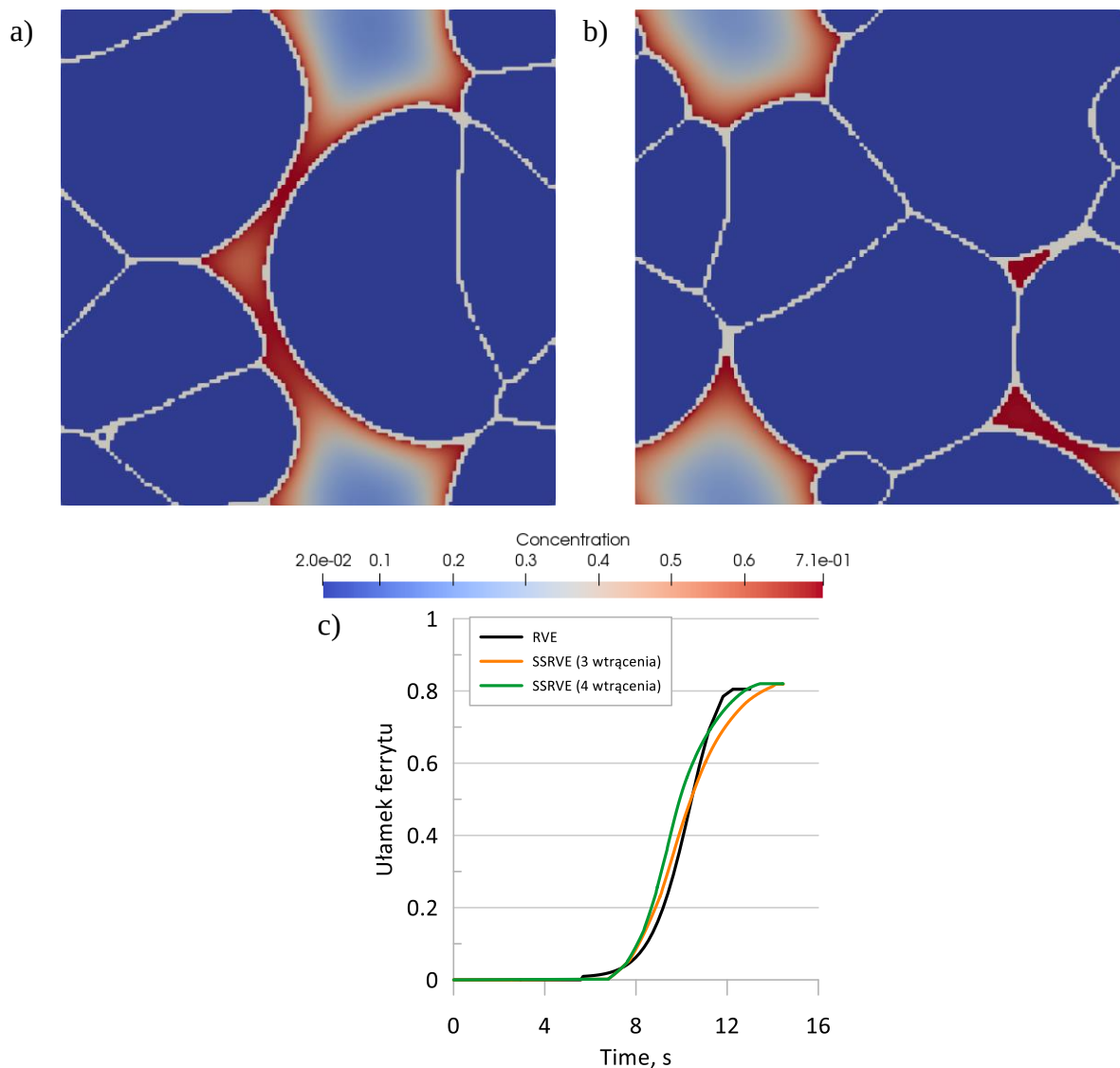
Uzyskana morfologia austenitu jest realistyczna, a wyniki mogą być wykorzystane do przeprowadzenia symulacji chłodzenia.

Na rysunku 90 przedstawiono symulacje wzrostu ziaren austenitu podczas nagrzewania w elemencie SSRVE zbudowanym z 4 ziaren.



Rysunek 90. Symulacja przemiany fazowej przy nagrzewaniu z wykorzystaniem elementu SSRVE z czterema ziarnami perlitu. Mikrostruktura w temperaturze a) 750°C, b) 810°C, c) 825°C, d) 830°C.

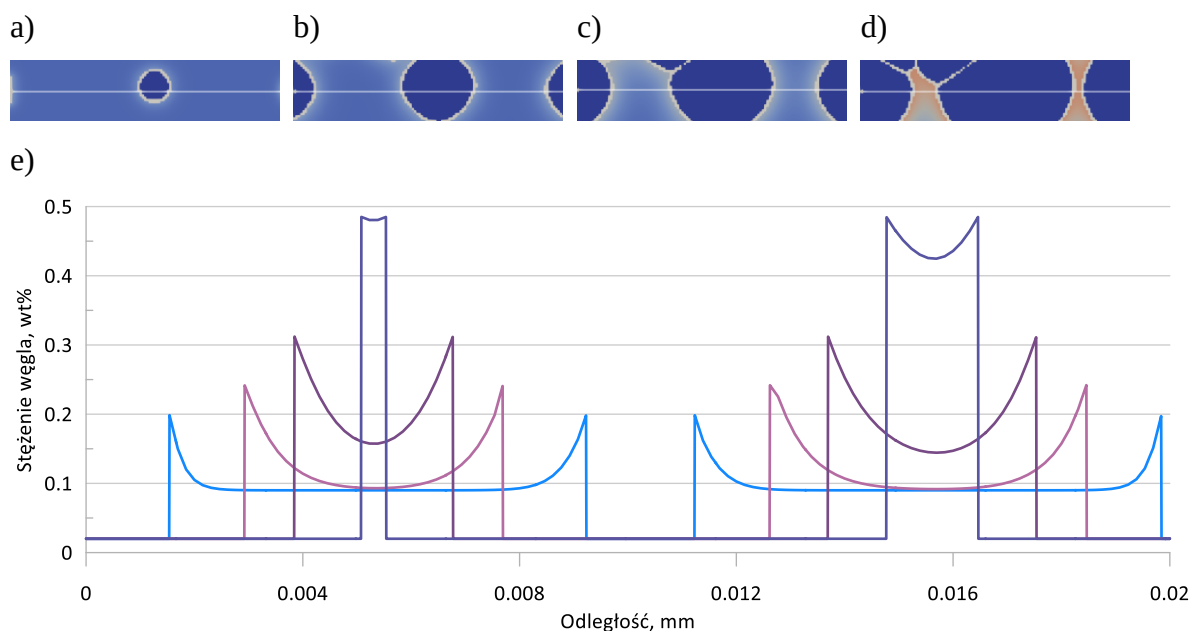
Do symulacji chłodzenia wykorzystano SSRVE trzy- i czteroelementowe. Uzyskane wyniki przedstawiono na rysunku 91.



Rysunek 91. Symulacja przemiany fazowej przy chłodzeniu z wykorzystaniem elementów SSRVE, z trzema ziarnami perlitu (a) i czterema ziarnami (b). Porównanie kinetyki przemiany uzyskanej dla SSRVE i RVE (c)

Obserwowana jest dobra zgodność wyników ilościowych. Końcowa zawartość ferrytu przewidywana przez model jest porównywalna dla RVE i SSRVE. Nieznaczne różnice w kinetyce przemiany są spowodowane, prawdopodobnie, ograniczoną ilością miejsc zarodkowania lub brakiem uwzględnienia periodyki w zastosowanym modelu zarodkowania. Błąd średniokwadratowy pomiędzy krzywymi kinetyki przemiany dla SSRVE i RVE wyniosły odpowiednio 0.04 i 0.05 dla elementów z 3 i 4 wtrąceniami. W mojej ocenie oba, z przedstawionych elementów SSRVE mogą zastąpić bardziej skomplikowane RVE w symulacji przemian fazowych.

Model pozwala na wyznaczenie profili stężenia węgla zarówno w zadanym punkcie (w funkcji czasu) jak również wzdłuż linii. Na rysunku 92 przedstawiono wyniki z czterech kroków czasowych przemiany oraz stężenie węgla wzdłuż linii pomiarowej.

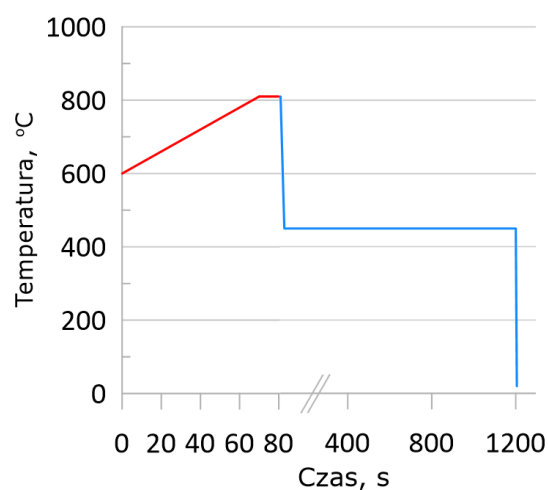


Rysunek 92. Wybrane profile koncentracji węgla wzdłuż odcinka. Fragmenty obrazów morfologii mikrostruktury w trakcie przemiany (a-d), profile koncentracji węgla wzdłuż odcinka pomiarowego (e).

Profil stężenia węgla wyznaczony wzdłuż odcinka obrazuje dokonującą się zmianę lokalnego składu chemicznego podczas zachodzącej przemiany. Analiza rozkładu stężenia węgla, na podstawie otrzymanych wyników, pozwala na oszacowanie lokalnych zmian mikrotwardości.

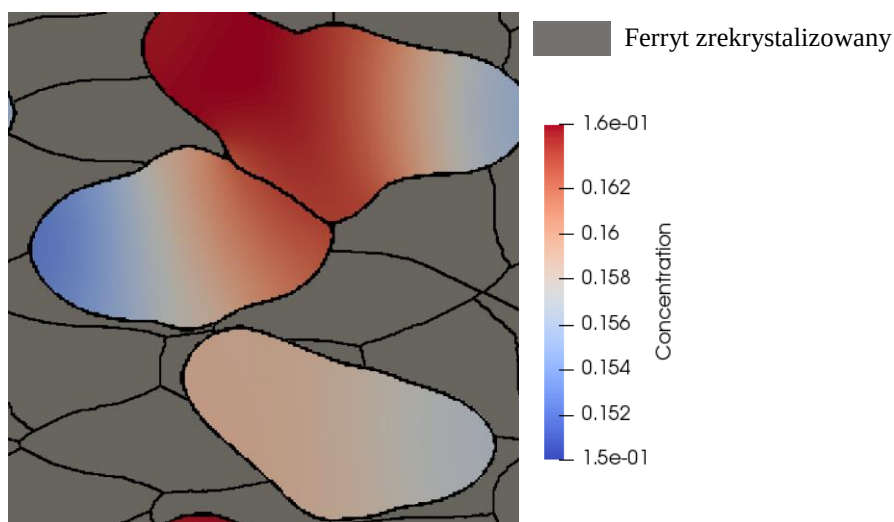
7.4. Weryfikacja przemysłowa

Wyżarzanie międzykrytyczne jest to proces obróbki cieplnej w przedziale temperatur Ac_1 i Ac_3 , w którym nie dochodzi do pełnej austenizacji. Model MLS-DIFF pozwala na przeprowadzenie symulacji takiego procesu. W tym celu przyjęto cykl temperaturowy przedstawiony na rysunku 93, który posłużył do przeprowadzenia sprzężonej symulacji nagrzewania i chłodzenia.



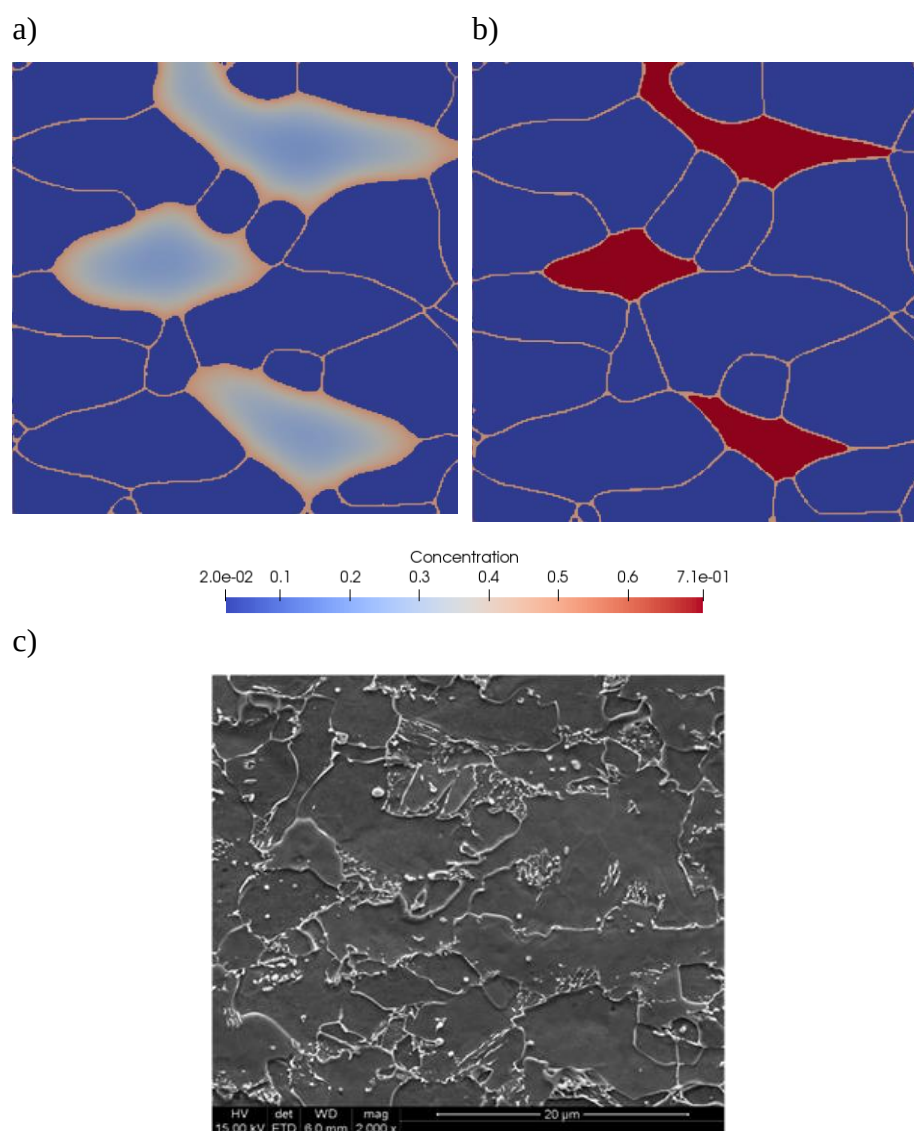
Rysunek 93. Cykl temperaturowy ciągłego wyżarzania.

Na rysunku 94 przedstawiono morfologię mikrostruktury w temperaturze 810°C. W mikrostrukturze na tym etapie pozostało około 50% ferrytu, co potwierdza raport [187].



Rysunek 94. Morfologia mikrostruktury stali S243 w temperaturze 810°C oraz rozkład stężenia węgla w ziarnach austenitu.

Na rysunku 95 przedstawiono stężenie węgla oraz morfologię mikrostruktury w trakcie oraz na koniec cyklu chłodzenia. Porównano obraz otrzymanej mikrostruktury z obserwacji mikroskopowymi.



Rysunek 95. Morfologia mikrostruktury oraz rozkład stężenia węgla przewidziany przez model: w temperaturze 450°C (a), na koniec cyklu chłodzenia (b), zdjęcie mikrostruktury po tym samym cyklu [187] (c).

Przedstawione wyniki są spójne, charakterystyczne cechy mikrostruktury zostały przez model dobrze uwydatnione, co znajduje odzwierciedlenie w zdjęciach mikroskopowych. Model przewidział końcową zawartość ferrytu w mikrostrukturze na 79%, co jest zbliżone do wyników eksperymentalnych [187], które wskazały wartość 80%.

W rozdziale przedstawiono możliwości predykcyjne modelu MLS-DIFF, jego weryfikację eksperymentalną oraz perspektywiczne zastosowania praktyczne. Możliwości predykcyjne modelu w zakresie prognozowania kinetyki przemian zostały zweryfikowane z eksperymentami dylatometrycznymi. W części eksperymentalnej zaprojektowano oraz przeprowadzono badania z wykorzystaniem stali S235JR. Wykazano dużą zgodność końcowego składu fazowego mikrostruktury z wynikami eksperymentalnymi. Porównanie morfologii ziaren na podstawie zdjęć mikroskopowych z wynikami modelowania było jednak bardzo utrudnione.

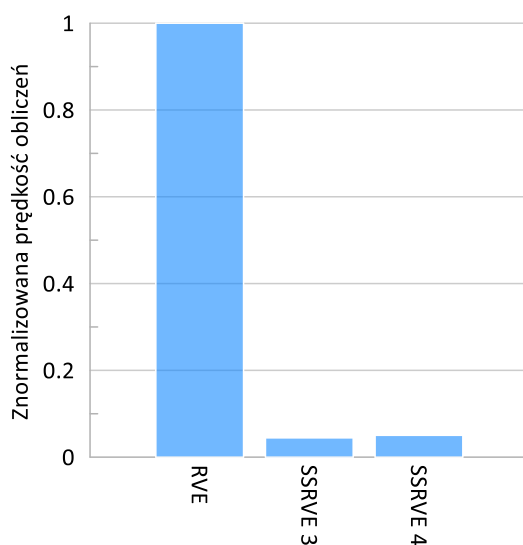
Utworzone elementy SSRVE dla obrazów mikrostruktury stali S243 zostały wykorzystane w modelowaniu pełnego cyklu nagrzewania i chłodzenia. Również w tym przypadku otrzymano dużą zgodność wyników. W rozdziale pokazano również możliwości praktycznego wykorzystania modelu MLS-DIFF oraz SSRVE w symulacji przemian fazowych zachodzących podczas wyżarzania międzykrytycznego w stalach DP.

8. Obliczenia z wykorzystaniem architektur sprzętowych wysokiej wydajności

8.1. Efektywność obliczeniowa w architekturach HPC

Na prędkość obliczeń prowadzonych przez model MLS-DIFF największy wpływ mają: liczba ziaren, gęstość siatki elementów skończonych oraz krok czasowy. W celu uzyskania rzetelnych wyników krok czasowy musi być relatywnie mały. Model adaptuje krok czasowy rozwiązania równania dyfuzji do warunków obliczeń. Szczegóły algorytmu adaptacji zostały przedstawione w rozdziale 0. Wykorzystanie elementów SSRVE pozwala na znaczne zmniejszenie przestrzeni obliczeniowej, a tym samym na redukcję liczby elementów skończonych potrzebnych do dyskretyzacji ziaren i liczbę miejsc zarodkowania.

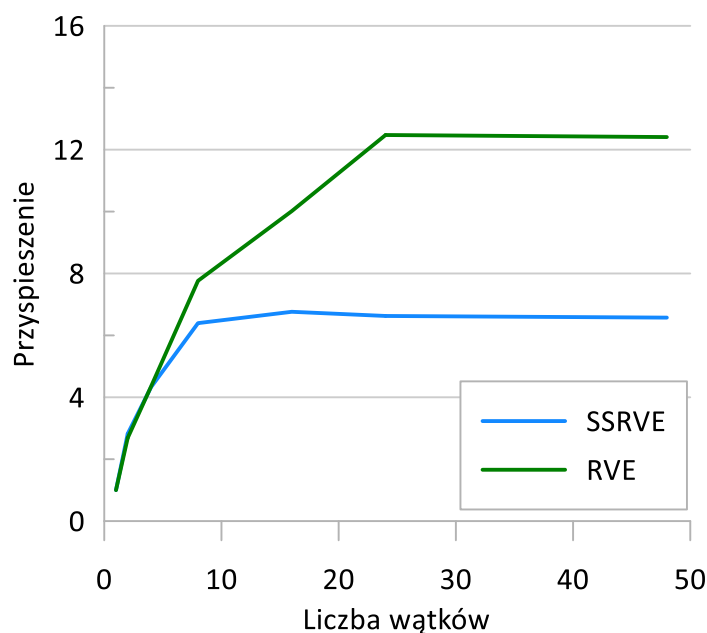
Testy wykorzystania prezentowanego rozwiązania na architekturze HPC podzielono na 2 etapy. Porównanie prędkości obliczeń modelu z wykorzystaniem RVE i SSRVE oraz testy skalowalności. Testy porównawcze wykonano na podstawie obrazu mikrostruktury (rysunek 86a) oraz SSRVE z 3 i 4 wtrąceniami (rysunek 89d i 90d). Zachowano taką samą wielkość elementów użytych w dyskretyzacji oraz 8 wątków obliczeniowych. Porównanie czasu obliczeń z wykorzystaniem RVE i SSRVE przedstawiono na rysunku 96.



Rysunek 96. Porównanie prędkości obliczeń z wykorzystaniem RVE i SSRVE.

Czas potrzebny na obliczenia z wykorzystaniem SSRVE stanowił około 5% czasu obliczeń z udziałem RVE. Jest to podyktowane zarówno ograniczeniem ilości elementów skończonych dyskretyzujących przestrzeń jak i ilością ziaren.

Przyspieszenie modelu zostało sprawdzona zarówno w przypadku obliczeń RVE jak i SSRVE. Wyniki analizy przedstawiono na rysunku 97.



Rysunek 97. Przyspieszenie uzyskane dla obliczeń z wykorzystaniem elementów SSRVE i RVE.

Uzyskane wyniki pozwoliły potwierdzić, że przyspieszenie wykazuje pewną zależność od wielkości zadania obliczeniowego. W przypadku elementów SSRVE większa liczba wątków niż 8 nie przynosi wzrostu prędkości obliczeń. Przedstawione wyniki wskazują na zdecydowaną przewagę wykorzystania elementów statystycznie podobnych w kontekście prędkości prowadzonych obliczeń. Choć skalowalność obliczeń wraz ze wzrostem ilości dostępnych rdzeni obliczeniowych jest znacznie mniejsza w przypadku mniejszych zadań (SSRVE), to ze względu na mniejszą ilość elementów dyskretyzujących przestrzeń oraz ilość ziaren prędkość obliczeń jest nieporównywalnie większa niż przy wykorzystaniu pełnej reprezentacji mikrostruktury.

Mając na uwadze zweryfikowaną poprawność modelu oraz udowodniony przyrost prędkości obliczeń, postanowiono sformułować zagadnienie projektowania cykli cieplnych dla stali AHSS.

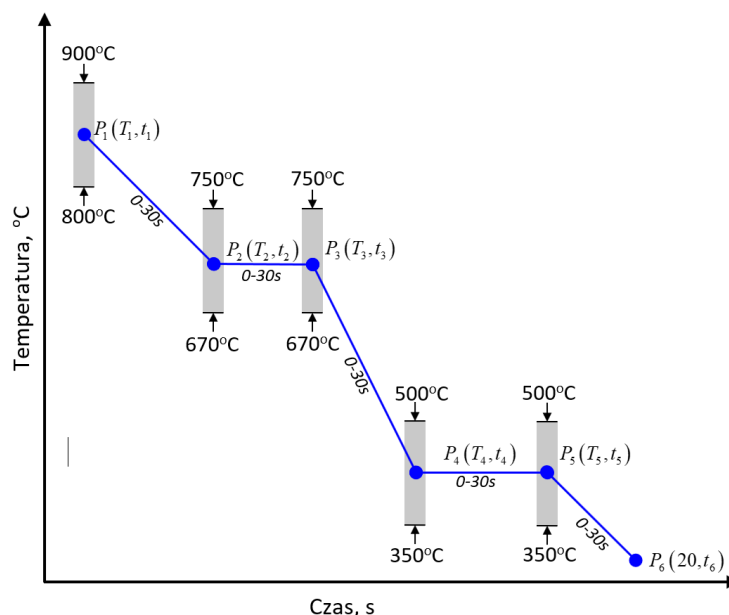
8.2. Wyznaczenie optymalnych cykli obróbki cieplnej z wykorzystaniem elementów SSRVE

Głównym celem zadania było opracowanie procedury optymalizacyjnej pozwalającej na znalezienie optymalnego cyklu chłodzenia w celu osiągnięcia zakładanego składu fazowego. W zaproponowanej procedurze zdecydowano się wykorzystać algorytm ewolucyjny oraz model przemian fazowych przedstawiony w pracy. Funkcję celu stanowi błąd średniokwadratowy pomiędzy oczekiwanym składem mikrostruktury a odpowiedzią modelu:

$$\varepsilon = \frac{1}{n} \sum_i^n (f_i - f_i')^2 + p \quad (114)$$

gdzie: f_i – procentowa wartość i -tej fazy otrzymana dla danego cyklu chłodzenia, f_i' – wartość oczekiwana i -tej frakcji fazowej, p – funkcja kary (obejmująca pojawienie się niepożądanych faz, np. bainitu).

Zmienne optymalizacji zostały zakodowane w postaci zbioru par czas-temperatura odpowiadających za krytyczne punkty zmiany prędkości chłodzenia. Założono, że cykl chłodzenia składa się z sześciu punktów, których dozwolone zakresy wartości przedstawiono na rysunku 98.



Rysunek 98. Projekt chłodzenia laminarnego z warunkami brzegowymi.

W implementacji posłużono się biblioteką *inspyred*² oraz następującymi założeniami:

- stała wielkość populacji – 30 osobników,
- rankingowy dobór osobników do następnej populacji – wybór osobników najlepiej przystosowanych na podstawie wartości funkcji celu,
- krzyżowanie arytmetyczne wraz z mutacją opartą o rozkład Gaussa,
- potomstwo tworzone jest za pomocą średniej ważonej odpowiadających sobie punktów pierwszego rodzica (z wagą 0.1), oraz drugiego rodzica (z wagą 0.9),
- mutacja Gaussa występuje z prawdopodobieństwem 0.1 dla każdego punktu w genotypie - w rozkładzie przyjęto standardowe odchylenie funkcji równe 1 oraz średnią równą 0,
- zastosowano algorytm wymiany tłumy (ang. *crowding replacement*) – jeżeli zidentyfikowano znaczną liczbę podobnych osobników w populacji, losowa próbka osobników jest zastępowana potomstwem o ile jest ono lepiej przystosowane niż wybrane osobniki,
- w przypadku gdy różnorodność populacji spadnie poniżej 0.001, nie zaobserwowano poprawy funkcji przystosowania przez ostatnie 10 pokoleń lub osiągnięto próg dopasowania algorytm kończy działanie.

Ewaluacja funkcji celu polegała na zapisie do pliku ocenianego cyklu chłodzenia, uruchomienie modelu przemian fazowych dla cyklu oraz odczyt wyników – składu

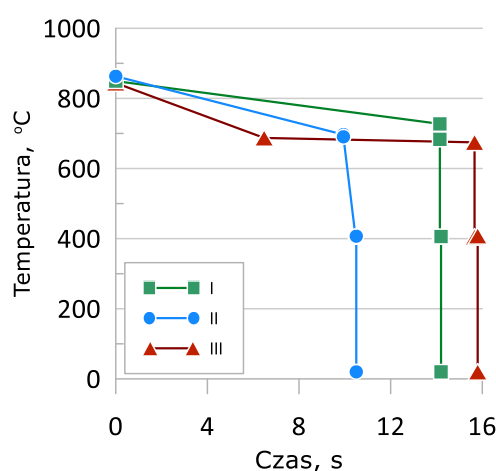
² <https://pythonhosted.org/inspyred/>

fazowego w ostatnim kroku czasowym. W obliczeniach wykorzystano element SSRVE utworzony dla stali S243, na podstawie którego przeprowadzono pełną symulację austenitowania z wytrzymaniem 100s w celu wyrównania stężenia węgla a następnie wykorzystano w procedurze optymalizacyjnej.

W testach prezentowanego rozwiązania przyjęto trzy warianty docelowe: otrzymanie mikrostruktury o następujących składach fazowych:

- wariant I: 70% ferrytu + 30% martenzytu,
- wariant II: 80% ferrytu + 20% martenzytu,
- wariant III: 85% ferrytu + 15% martenzytu,

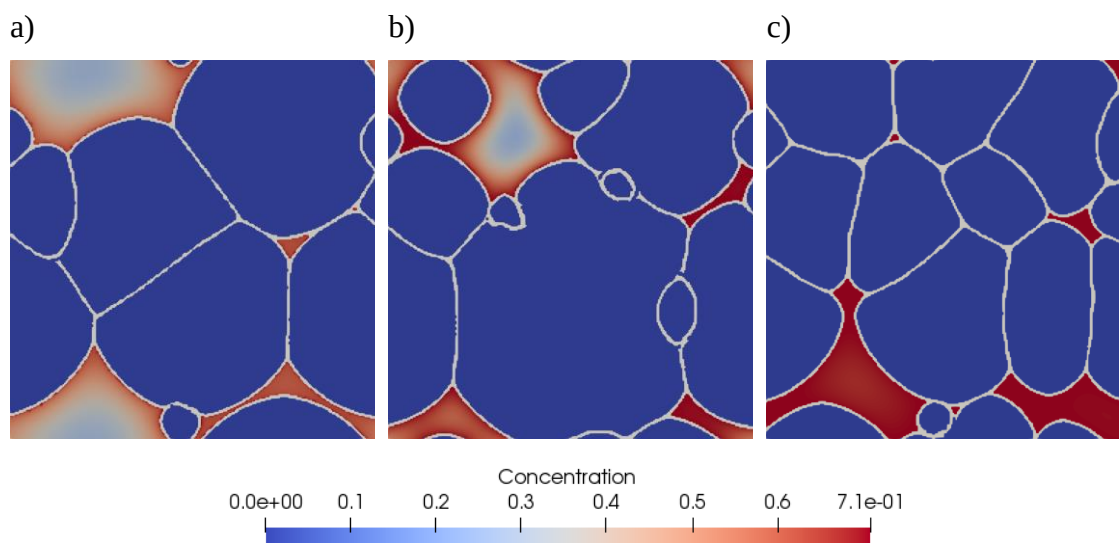
Na rysunku 99 przedstawiono cykle temperaturowe będące wynikami działania procedury optymalizacyjnej dla każdego z przyjętych wariantów.



Rysunek 99. Wynikowe cykle temperaturowe z procesu optymalizacji.

W każdym przypadku błąd średniokwadratowy nie przekroczył wartości 10^{-3} . W przypadku wariantów I i II zaproponowany cykl to wolne chłodzenie z prędkościami odpowiednio 8 i 16°C/s do temperatury 727 i 696°C, a następnie szybkie chłodzenie w celu zahartowania materiału. W celu uzyskania 85% ferrytu (wariant III) zaproponowano szybkie chłodzenie (24°C/s) do temperatury 680°C, wytrzymanie, a następnie zahartowanie austenitu.

Obraz morfologii mikrostruktury wraz ze średnim stężeniem węgla dla wariantów I-III przedstawiono na rysunku 100.



Rysunek 100. Morfologia mikrostruktury uzyskana w procesie optymalizacji cykli chłodzenia. Wariant I (a), II (b) i III (c).

W związku z charakterem przyjętej procedury optymalizacji, bazującej w dużej mierze na losowości, czas obliczeń był bardzo zróżnicowany. Wahał się od 2-3 dni w zależności od ilości przeprowadzonych iteracji. Czas ten mógłby zostać potencjalnie zmniejszony w przypadku wykorzystania rozproszonych obliczeń z wykorzystaniem architektury klastrowej.

W rozdziale chciałem pokazać możliwość praktycznego wykorzystania opracowanego modelu przemian fazowych, wraz z uproszczeniem mikrostruktury materiałowej za pomocą procedury SSRVE do rozwiązania problemu doboru optymalnego cyklu temperaturowego w celu uzyskania pożądanego składu fazowego produktu. Możliwości modelu numerycznego sprawiają, że w funkcji celu można docelowo wykorzystać również wielkość ziarna, czy optymalizację profilu stężenia węgla przed frontem ziarna.

9. Podsumowanie i wnioski

Stworzenie wiarygodnego modelu przemian fazowych w stalach stanowi znaczne wyzwanie, nie tylko metalurgiczne ale również numeryczne i implementacyjne. Istotną trudność stanowi sama natura modelowanego zjawiska, na którą wpływa znaczna ilość czynników. Charakter części z nich jest już dobrze poznany i opisany. Niektóre z tych czynników stanowią jednak ciągle wyzwanie wymagające dalszych badań, a walidacja modeli przemian fazowych jest nadal zagadnieniem trudnym. Aby poznać w pełni naturę procesu należałoby, w idealnym przypadku, wykonać eksperyment *in situ*, obserwując pełen proces, od zarodkowania poprzez wzrost ferrytu, skończywszy na tworzeniu się martenzytu. Byłby to eksperyment nieporównywalnie bardziej skomplikowany w zaprojektowaniu i wykonaniu, głównie ze względu na ograniczenia technologiczne związane choćby z prędkością skanowania powierzchni za pomocą mikroskopu elektronowego. Aby wiernie odwzorować zarodkowanie i wzrost ziaren, niezbędna jest również obszerna wiedza o składzie chemicznym próbki w danym regionie, lokalnych defektach, czy w końcu historii odkształcenia. Czynniki te sprawiają, że stworzenie wiernego i uniwersalnego modelu przemiany jest praktycznie niemożliwe.

Jak pokazano we wstępie do pracy, projektowanie wytwarzania wyrobów z zaawansowanych stali wielofazowych wymaga uwzględnienia skomplikowanych zjawisk zachodzących w czasie przemian fazowych i powinno być wspierane przez dokładne a zarazem efektywne modele numeryczne. Modele muszą z jednej strony być elastyczne w rozwoju, pozwalać na łatwą modyfikację parametrów, a z drugiej strony dostarczać wiarygodnych i kompleksowych wyników. Przedstawiony w pracy model MLS-DIFF może stanowić pewną ramę pod budowę bardziej zaawansowanych modeli. Wykorzystana w modelu metoda zbioru poziomic pozwala, w praktycznie nieograniczony sposób, na kontrolowanie prędkości granicy w każdym punkcie przestrzeni obliczeniowej. Prędkość granicy zależy głównie od siły pędnej przemiany, ale może też uwzględniać lokalne niejednorodności materiału.

W pracy skupiono się na dwóch przemianach: austenitycznej (przy nagrzewaniu) oraz ferrytycznej (przy chłodzeniu). Na potrzeby modelu przyjęto, że dyfuzja węgla stanowi główną siłę pędą obydwu przemian. Tak postawiony problem wymagał rozwiązania równania dyfuzji węgla w przestrzeni obliczeniowej. Ruch frontu przemiany został zamodelowany, wykorzystując rozwiązanie równania ruchu i metodę zbioru poziomic. Oba problemy numeryczne zostały rozwiązane za pomocą opracowanego w ramach pracy doktorskiej autorskiego oprogramowania wykorzystującego metodę elementów skończonych. Model pozwala na przeprowadzenie lokalnego zagęszczenia siatki przed frontem przemiany oraz ogranicza ilość stopni swobody w wybranych rejonach w celu zmniejszenia złożoności obliczeniowej. Prezentowane rozwiązanie, poprzez luźne sprzężenie dwóch modeli: dyfuzji oraz ruchu granicy pozwala na perspektywiczny dalszy rozwój metody w kierunku uwzględnienia wpływu rozkładu stężenia innych pierwiastków czy uwzględnienie stanu odkształcenia.

Model MLS-DIFF wyróżnia się jako pierwszy, który uwzględnia nierównomierny rozkład stężenia węgla po austenityzacji. Model pozwala na przeprowadzenie złożonej symulacji cyklu nagrzewania i chłodzenia oraz na transfer rozkładu stężenia pierwiastków pomiędzy tymi cyklami, co z kolei umożliwia wierniejsze odwzorowanie

procesu. Prezentowane rozwiązanie dostarcza informacji o morfologii mikrostruktury, wielkości ziarna oraz rozkładzie stężenia węgla. Model został zweryfikowany z badaniami eksperymentalnymi przeprowadzonymi na stalach niskowęglowych S235JR i S243. Na potrzeby pracy zaprojektowano oraz przygotowano eksperyment, którego celem było porównanie wyników ilościowych i jakościowych (morfologii mikrostruktury). Osiągnięto zadowalającą zbieżność ilościową, jednak nie było możliwości przeprowadzenia porównania jakościowego specyficznych cech morfologicznych modelowanych mikrostruktur z wynikami eksperymentalnymi. Wykonane testy numeryczne dla procesu przemysłowego potwierdziły poprawność zaprezentowanego rozwiązania.

Nawet najbardziej zaawansowany model może mieć jednak ograniczone zastosowanie, jeśli prędkość prowadzenia symulacji stanowi realną przeszkodę przed jego praktycznym wykorzystaniem. Każdy współczesny model numeryczny wykorzystuje elementy obliczeń wysokiej wydajności, czy to przez obsługę wielowątkowości, czy przez możliwość rozproszenia obliczeń na wiele węzłów. Zawsze istnieje pewna granica skalowalności rozwiązania, która ogranicza sens wykorzystania większej ilości zasobów. Nie zawsze jednak zwiększanie zasobów obliczeniowych jest jedynym rozwiązaniem problemu prędkości obliczeń. Wiele problemów numerycznych z dziedziny inżynierii materiałowej, szczególnie tych w skali micro, pozwala na uproszczenie domeny obliczeniowej i tym samym redukcję kosztów obliczeń. Przedstawionym w pracy sposobem na uproszczenie mikrostruktury materiału, było zastąpienie skomplikowanych morfologii mikrostruktury stali, periodycznymi komórkami statystycznie podobnymi do swoich referencyjnych pierwowzorów. W pracy omówiono metodykę tworzenia SSRVE, wskazano na liczne sposoby formalnego opisu morfologii ziaren oraz zdefiniowano geometryczne deskryptory kształtu. W części praktycznej zastosowano te współczynniki, do uproszczenia morfologii stali DP i wygenerowania SSRVE, które następnie użyto do przeprowadzenia symulacji procesu ciągłego wyżarzania, otrzymując zadowalającą zgodność wyników. Pomiar czasu obliczeń pokazały znaczne przyspieszenie przy wykorzystaniu elementów SSRVE w obliczeniach w porównaniu z klasycznym rozwiązaniem opartym o RVE. Wykorzystanie uproszczonej przestrzeni obliczeniowej nie ograniczyło jednak możliwości zastosowania w modelu obliczeń równoległych. Wiele elementów aplikacji, w tym solwer i operacje na siatce elementów skończonych, zostało zaimplementowanych w sposób umożliwiający prowadzenia obliczeń w infrastrukturach HPC.

Pracę zwięźcza prezentacja możliwości wykorzystania modelu w projektowaniu cykli laminarnego chłodzenia stali z gatunku AHSS. W tym celu wykorzystano opracowany w pracy model przemian oraz metody optymalizacji bazujące na algorytmie ewolucyjnym, co pokazało, że model ma praktyczne zastosowanie w rozwiązywaniu problemów inżynierskich.

Opracowanie i implementacja modelu przemian fazowych oraz jego walidacja i weryfikacja z wykorzystaniem cyfrowych reprezentacji mikrostruktur pod postacią RVE oraz SSRVE pozwoliły na sformułowanie następujących wniosków:

- Wykonany przegląd literatury pokazał silny trend ukierunkowany na poszukiwanie efektywnych metod przewidywania właściwości produktów

stalowych poddanych obróbce termicznej. Podstawowe informacje o ułamkach faz i kinetyce przemiany stają się jednak niewystarczające. Coraz większy nacisk kładziony jest na wykorzystanie wirtualnej reprezentacji mikrostruktury materiału w celu umożliwienia prognozowania jej ewolucji, rozkładu stężenia pierwiastków czy morfologii i wielkości ziaren. Poszukiwane są również metody pozwalające na przyspieszenie obliczeń.

- Metoda zbioru poziomów pozwala na efektywne przedstawienie ziarnistej mikrostruktury stali. Rozwiązanie równania ruchu, z kolei, umożliwia przewidywanie ewolucji położenia granicy ziaren w trakcie ich kontrolowanego wzrostu. Wykorzystanie metody poziomów sprzężonej z rozwiązaniem równania dyfuzji węgla pozwoliło na opracowanie modelu dyfuzyjnych przemian fazowych w stalach DP.
- Przedstawione w pracy model numeryczny wykorzystujący metodę poziomów oraz rozwiązanie równania dyfuzji węgla umożliwia prowadzenie symulacji przemiany austenicznej (przy nagrzewaniu) i ferrytycznej (przy chłodzeniu). Zarówno równanie dyfuzji jak i równanie ruchu zostało rozwiązane z wykorzystaniem MES i adaptacyjnej siatki elementów.
- Zaprezentowany model dostarcza zarówno odpowiedzi wizualnych w formacie VTU jak i liczbowych o kinetyce przemiany. Wyniki działania modelu pozwalają na wykonanie oceny wielkości ziarna oraz rozkładu stężenia węgla w austenicie, mogą być również wykorzystane w dalszych obliczeniach i analizach.
- Istnieją dalsze możliwości usprawnienia działania modelu MLS-DIFF, np. poprzez zmianę sformułowania numerycznego rozwiązania równania ruchu na niewymagające przeprowadzenia cyklicznej reinicjalizacji.
- Dzięki sformułowaniu zagadnienia z wykorzystaniem metody poziomów, możliwy jest dalszy rozwój modelu poprzez dostosowanie sformułowania prędkości granicy (np. uwzględnienie rozkładu stężenia innych pierwiastków, niejednorodności mikrostruktury czy wpływu odkształcenia).
- Wykorzystanie w modelu MLS-DIFF wielowątkowych obliczeń pozwoliło na przyspieszenie prowadzonych symulacji przemian fazowych. Dodatkowo, przedstawiona w pracy koncepcja statystycznie podobnego elementu objętościowego pozwoliła na znaczne skrócenie czasu obliczeń przy zachowaniu wysokiej wiarygodności wyników.
- Możliwe jest projektowanie złożonych cykli laminarnego chłodzenia i ciągłego wyżarzania poprzez wykorzystanie zaprezentowanego modelu oraz optymalizacji opartej o algorytmy ewolucyjne. Zastosowanie takiego rozwiązania pozwala na uzyskanie nie tylko pożądanego stosunku poszczególnych faz, ale również wielkości ziarna czy gradientu stężenia pierwiastków. Należy jednak zaznaczyć, że czas obliczeń w takim przypadku jest stosunkowo długi i konieczne może stać się wykorzystanie przetwarzania rozproszonego.
- Zastosowanie SSRVE w modelowaniu przemian fazowych może mieć kluczowe znaczenie dla efektywności prowadzenia obliczeń wieloskalowych, gdzie konieczne jest wielokrotne wykorzystanie mikrostruktur materiałowych.

10.Literatura

1. Krauss, G., *Steels: Processing, Structure, And Performance*. 2005: ASM International.
2. Yang, J.R., C.Y. Huang, Formation of austenite from a mixture of bainitic ferrite and austenite, *Materials Chemistry and Physics*, 1993. 35(2): p. 168-175.
3. Yang, J.R., H.K.D.H. Bhadeshia, Continuous heating transformation of bainite to austenite, *Materials Science and Engineering: A*, 1991. 131(1): p. 99-113.
4. Grossmann, M.A., E.C. Bain, *Principles of heat treatment*. 5th ed ed. 1964: American Society for Metals.
5. Liu, Y., F. Sommer, E.J. Mittemeijer, Abnormal Austenite-Ferrite Transformation Kinetics of Ultra-Low-Nitrogen Fe-N Alloy, *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2008. 39(10): p. 2306-2318.
6. Liu, Y.C., F. Sommer, E.J. Mittemeijer, Abnormal austenite-ferrite transformation behaviour in substitutional Fe-based alloys, *Acta Materialia*, 2003. 51(2): p. 507-519.
7. Mohapatra, G., F. Sommer, E.J. Mittemeijer, The austenite to ferrite transformation of Fe-Ni under the influence of a uniaxially applied tensile stress, *Acta Materialia*, 2007. 55(13): p. 4359-4368.
8. Liu, Y.C., F. Sommer, E.J. Mittemeijer, Austenite-ferrite transformation kinetics under uniaxial compressive stress in Fe-2.96at.% Ni alloy, *Acta Materialia*, 2009. 57(9): p. 2858-2868.
9. Liu, Y.C., F. Sommer, E.J. Mittemeijer, Kinetics of austenitization under uniaxial compressive stress in Fe-2.96at.% Ni alloy, *Acta Materialia*, 2010. 58(3): p. 753-763.
10. Liu, F., F. Sommer, C. Bos, E.J. Mittemeijer, Analysis of solid state phase transformation kinetics: models and recipes, *International Materials Reviews*, 2007. 52(4): p. 193-212.
11. Speich, G.R., A. Szirmai, M.J. Richards, Formation of Austenite from Ferrite and Ferrite-Carbide Aggregates, *Transactions of The Metallurgical Society of the American Institute of Mining*, 1969. 245: p. 1063-1074.
12. Porter, D.A., K.E. Easterling, M.Y. Sherif, *Phase transformations in metals and alloys*. 2009.
13. Mittemeijer, E.J., F. Sommer, Solid state phase transformation kinetics: a modular transformation model, *Zeitschrift für Metallkunde*, 2002. 93(5): p. 352-361.
14. Christian, J.W., *CHAPTER 12 - Formal Theory of Transformation Kinetics*, in *The Theory of Transformations in Metals and Alloys*. 2002, Pergamon: Oxford. p. 529-552.
15. Payson, P., C.H. Savage, Martensite Reactions in Alloy Steels, *Transactions ASM*. 33: p. 261-275.
16. Carapella, L.A., Computing A₁₁ or M_s (Transformation Temperature on Quenching) from Analysis, *Metal Progress*, 1944. 46: p. 108.
17. Rowland, E.S., S.R. Lyle, The Application of M_s Points to Case Depth Measurement, *Transactions ASM*, 1946. 37: p. 27-47.
18. Grange, R.A., H.M. Stewart, The Temperature Range of Martensite Formation, *Transactions AIME*, 1946. 167: p. 467-490.
19. Nehrenberg, A.E., *Transactions AIME*, 1946. 167(494-498).
20. Steven, W., A.G. Haynes, The temperature of formation of martensite and bainite in low-alloy steel, *Journal of the Iron and Steel Institute*, 1956. 183: p. 349-359.

21. Andrews, K.W., Empirical Formulae for the Calculation of Some Transformation Temperatures, *Journal of the Iron and Steel Institute*, 1965. 203: p. 721-727.
22. Pietrzyk, M., L. Madej, L. Rauch, D. Szeliga, *Conventional Modeling*, in *Computational Materials Engineering*. 2015, Butterworth-Heinemann: Boston. p. 69-151.
23. Trzaska, J., *Calculation of Critical Temperatures by Empirical Formulae*, in *Archives of Metallurgy and Materials*. 2016. p. 981.
24. van Bohemen, S.M.C., L. Morsdorf, Predicting the Ms temperature of steels with a thermodynamic based model including the effect of the prior austenite grain size, *Acta Materialia*, 2017. 125(Supplement C): p. 401-415.
25. Peet, M., Prediction of martensite start temperature, *Materials Science and Technology*, 2015. 31(11): p. 1370-1375.
26. Vermeulen, W.G., P.F. Morris, A.P. De Weijer, S. Van der Zwaag, Prediction of martensite start temperature using artificial neural networks, *Ironmaking and steelmaking*, 1996. 23(5): p. 433-437.
27. Garcia-Mateo, C., C. Capdevila, F.G. Caballero, C.G. de Andrés, Artificial neural network modeling for the prediction of critical transformation temperatures in steels, *Journal of Materials Science*, 2007. 42(14): p. 5391-5397.
28. Dobrzański, L.A., J. Trzaska, Application of neural networks for the prediction of continuous cooling transformation diagrams, *Computational Materials Science*, 2004. 30(3): p. 251-259.
29. Thomas, G., Retained austenite and tempered martensite embrittlement, *Metallurgical Transactions A*, 1978. 9(3): p. 439-450.
30. Harris, W.H., M. Cohen, Stabilization of the Austenite-Martensite Transformation, *Transactions AIME*, 1949. 180: p. 447-470.
31. Koistinen, D.P., R.E. Marburger, A general equation prescribing the extent of the austenite-martensite transformation in pure iron-carbon alloys and plain carbon steels, *Acta Metallurgica*, 1959. 7(1): p. 59-60.
32. Kędzierski, Z., *Przemiany fazowe w układach skondensowanych*. 2003, Kraków: Wydawnictwo AGH.
33. Avrami, M., Granulation, Phase Change, and Microstructure Kinetics of Phase Change. III, *The Journal of Chemical Physics*, 1941. 9(2): p. 177-184.
34. Avrami, M., Kinetics of Phase Change. II Transformation-Time Relations for Random Distribution of Nuclei, *The Journal of Chemical Physics*, 1940. 8(2): p. 212-224.
35. Avrami, M., Kinetics of Phase Change. I General Theory, *The Journal of Chemical Physics*, 1939. 7(12): p. 1103-1112.
36. Scheil, E., Anlaufzeit der Austenitumwandlung, *Archiv für das Eisenhüttenwesen*, 1935. 8(12): p. 565-567.
37. Donnay, B., J. C Herman, V. Leroy, B. Crm, U. Lotter, R. Grossterlinden, H. Pircher, T. Stahl, *Microstructure evolution of C-Mn steels in the hot deformation process: The STRIPCAM model*. 1996.
38. Pietrzyk, M., R. Kuziak, *Modelling phase transformations in steel*. 2012. p. 145-179.
39. Suehiro, M., T. Senuma, H. Yada, K. Sato, Application of mathematical model for predicting microstructural evolution to high carbon steels, *ISIJ International*, 1992. 32(3): p. 433-439.
40. Senuma, T., M. Suehiro, H. Yada, Mathematical Models for Predicting Microstructural Evolution and Mechanical Properties of Hot Strips, *ISIJ International*, 1992. 32(3): p. 423-432.

41. Leblond, J.B., J. Devaux, A new kinetic model for anisothermal metallurgical transformations in steels including effect of austenite grain size, *Acta Metallurgica*, 1984. 32(1): p. 137-146.
42. Milenin, I., M. Pernach, M. Pietrzyk, Application of the control theory to modelling austenite-ferrite phase transformation in steels, *Computer Methods in Materials Science*, 2015. 15: p. 327-335.
43. Koistinen, D.P., R.E. Marburger, General Equation Prescribing the Extent of the Austenite-Martensite Transformation in Pure IronCarbon Alloys and Plain Carbon Steels, *Acta Metallurgica*, 1959. 7: p. 59-60.
44. Louis, P.-Y., F.R. Nardi, *Probabilistic Cellular Automata: Theory, Applications and Future Perspectives*. Emergence, Complexity and Computation, ed. I. Zelinka, A. Adamatzky, and G. Chen. Vol. 27. 2018: Springer.
45. H. Bersini, V. Detours, Asynchrony induces stability in cellular automata based models, *Proceedings of the IVth Conference on Artificial Life*, 1994. 204(1-2): p. 382-387.
46. Hopcroft, J.E., R. Motwani, J.D. Ullman, *Introduction to Automata Theory, Languages, and Computation (3rd Edition)*. 2006: Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc.
47. Schiff, J.L., *Cellular Automata: A Discrete View of the World*. Vol. 1. 2011: John Wiley & Sons.
48. Kumar, M., R. Sasikumar, P. Kesavan Nair, Competition between nucleation and early growth of ferrite from austenite—studies using cellular automaton simulations, *Acta Materialia*, 1998. 46(17): p. 6291-6303.
49. Zhang, L., C.B. Zhang, Y.M. Wang, S.Q. Wang, H.Q. Ye, A cellular automaton investigation of the transformation from austenite to ferrite during continuous cooling, *Acta Materialia*, 2003. 51(18): p. 5519-5527.
50. Jacot, A., M. Rappaz, A two-dimensional diffusion model for the prediction of phase transformations: Application to austenitization and homogenization of hypoeutectoid Fe-C steels, *Acta Materialia*, 1997. 45(2): p. 575-585.
51. Bhadeshia, H.K.D.H., Diffusion of carbon in austenite, *Metal Science*, 1981. 15(10): p. 477-480.
52. Leeuwen, Y.v., J. Sietsma, S.v.d. Zwaag, The Influence of Carbon Diffusion on the Character of the γ - α Phase Transformation in Steel, *ISIJ International*, 2003. 43(5): p. 767-773.
53. Christian, J.W., *CHAPTER 11 - Theory of Thermally Activated Growth*, in *The Theory of Transformations in Metals and Alloys*. 2002, Pergamon: Oxford. p. 480-528.
54. Sietsma, J., S. van der Zwaag, A concise model for mixed-mode phase transformations in the solid state, *Acta Materialia*, 2004. 52(14): p. 4143-4152.
55. Lan, Y.J., D.Z. Li, C.J. Huang, Y.Y. Li, A cellular automaton model for austenite to ferrite transformation in carbon steel under non-equilibrium interface conditions, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2004. 12(4): p. 719.
56. Hillert, M., Solute drag, solute trapping and diffusional dissipation of Gibbs energy¹¹This paper is based on the Hume–Rothery Lecture presented at the 128th TMS Annual Meeting, 1 March 1999, San Diego, U.S.A, *Acta Materialia*, 1999. 47(18): p. 4481-4505.
57. Hillert, M., L.-I. Staffansson, The Regular Solution Model for Stoichiometric Phases and Ionic Melts., *Acta Chemica Scandinavica*, 1970. 24: p. 3618-3626.

58. Bos, C., J. Sietsma, A mixed-mode model for partitioning phase transformations, *Scripta Materialia*, 2007. 57(12): p. 1085-1088.
59. Kundu, S., M. Dutta, S. Ganguly, S. Chandra, Prediction of phase transformation and microstructure in steel using cellular automaton technique, *Scripta Materialia*, 2004. 50(6): p. 891-895.
60. Bos, C., M.G. Mecozzi, J. Sietsma, A microstructure model for recrystallisation and phase transformation during the dual-phase steel annealing cycle, *Computational Materials Science*, 2010. 48(3): p. 692-699.
61. An, D., S. Pan, L. Huang, T. Dai, B. Krakauer, M. Zhu, Modeling of Ferrite-Austenite Phase Transformation Using a Cellular Automaton Model, *ISIJ International*, 2014. 54(2): p. 422-429.
62. Guoming, Z., K. Yonglin, L. Chao, L. Shengci, Microstructure Evolution of Cold-Rolled Dual Phase Steel Simulated by Cellular Automata, *steel research international*, 2014. 85(6): p. 1035-1046.
63. Mecozzi, M., C. Bos, J. Sietsma, *3D Cellular Automata Modelling of Solid-state Transformations Relevant in Low-alloy Steel Production*. Vol. 172-174. 2011. p. 1140-1145.
64. Opara, J., R. Kuziak, H. Chen, S. Zwaag, A two- dimensional Cellular Automata model to simulate microstructure development and carbon redistribution during the phase transformation of austenite to ferrite using realistic angular starting microstructures, *Computer Methods in Materials Science*, 2012. 12(3): p. 207-217.
65. Su, B., Z. Han, B. Liu, Cellular Automaton Modeling of Austenite Nucleation and Growth in Hypoeutectoid Steel during Heating Process, *ISIJ International*, 2013. 53(3): p. 527-534.
66. Gołab, R., Ł. Madej, M. Pietrzyk, The Complex Computer System Based on Cellular Automata Method Designed to Support Modelling of Laminar Cooling Processes, *Journal of Machine Engineering*, 2014. 14(1): p. 63-73.
67. Monshat, H., S. Serajzadeh, Simulation of austenite decomposition in continuous cooling conditions: a cellular automata-finite element modelling, *Ironmaking & Steelmaking*, 2017: p. 1-9.
68. Steinbach, I., F. Pezzolla, B. Nestler, M. Seeßelberg, R. Prieler, G.J. Schmitz, J.L.L. Rezende, A phase field concept for multiphase systems, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 1996. 94(3): p. 135-147.
69. Wheeler, A.A., W.J. Boettinger, G.B. McFadden, Phase-field model for isothermal phase transitions in binary alloys, *Physical Review A*, 1992. 45(10): p. 7424-7439.
70. Tiaden, J., B. Nestler, H.J. Diepers, I. Steinbach, The multiphase-field model with an integrated concept for modelling solute diffusion, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 1998. 115(1): p. 73-86.
71. Yeon, D.-H., P.-R. Cha, J.-K. Yoon, A phase field study for ferrite-austenite transitions under para-equilibrium, *Scripta Materialia*, 2001. 45(6): p. 661-668.
72. Pariser, G., P. Schaffnit, I. Steinbach, W. Bleck, Simulation of the γ - α -transformation using the phase-field method, *Steel Research*, 2001. 72(9): p. 354-360.
73. Mecozzi, M.G., J. Sietsma, S. van der Zwaag, M. Apel, P. Schaffnit, I. Steinbach, Analysis of the $\gamma \rightarrow \alpha$ transformation in a C-Mn steel by phase-field modeling, *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2005. 36(9): p. 2327-2340.

74. Huang, C.-J., D.J. Browne, S. McFadden, A phase-field simulation of austenite to ferrite transformation kinetics in low carbon steels, *Acta Materialia*, 2006. 54(1): p. 11-21.
75. Huang, C.-J., D.J. Browne, Phase-field model prediction of nucleation and coarsening during austenite/ferrite transformation in steels, *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2006. 37(3): p. 589-598.
76. Simmons, J.P., C. Shen, Y. Wang, Phase field modeling of simultaneous nucleation and growth by explicitly incorporating nucleation events, *Scripta Materialia*, 2000. 43(10): p. 935-942.
77. Militzer, M., M.G. Meccozzi, J. Sietsma, S. van der Zwaag, Three-dimensional phase field modelling of the austenite-to-ferrite transformation, *Acta Materialia*, 2006. 54(15): p. 3961-3972.
78. Cha, P.-R., J.-Y. Kim, W.-T. Kim, S. Kim, *Phase Field Study on the Austenite/Ferrite Transition in Low Carbon Steel*. Vol. 25. 2010. p. 106-110.
79. Meccozzi, M.G., M. Militzer, J. Sietsma, S. van der Zwaag, The Role of Nucleation Behavior in Phase-Field Simulations of the Austenite to Ferrite Transformation, *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2008. 39(6): p. 1237-1247.
80. Gouné, M., F. Danoix, J. Ågren, Y. Bréchet, C.R. Hutchinson, M. Militzer, G. Purdy, S. van der Zwaag, H. Zurob, Overview of the current issues in austenite to ferrite transformation and the role of migrating interfaces therein for low alloyed steels, *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 2015. 92: p. 1-38.
81. Coates, D.E., Diffusional growth limitation and hardenability, *Metallurgical Transactions*, 1973. 4(10): p. 2313-2325.
82. Cahn, J.W., The impurity-drag effect in grain boundary motion, *Acta Metallurgica*, 1962. 10(9): p. 789-798.
83. Hillert, M., B. Sundman, A treatment of the solute drag on moving grain boundaries and phase interfaces in binary alloys, *Acta Metallurgica*, 1976. 24(8): p. 731-743.
84. Chen, H., B. Zhu, M. Militzer, Phase Field Modeling of Cyclic Austenite-Ferrite Transformations in Fe-C-Mn Alloys, *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2016. 47(8): p. 3873-3881.
85. Rudnizki, J., B. Böttger, U. Prahl, W. Bleck, Phase-Field Modeling of Austenite Formation from a Ferrite plus Pearlite Microstructure during Annealing of Cold-Rolled Dual-Phase Steel, *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2011. 42(8): p. 2516-2525.
86. Viardin, A., *Phase field modeling of allotriomorphic ferrite growth in Fe-C-Mn steels*. 2010, Institut National Polytechnique de Lorraine.
87. Perevoshchikova, N., *Modeling of austenite to ferrite transformation in steels*. 2012.
88. Ollat, M., M. Militzer, V. Massardier, D. Fabregue, E. Buscarlet, F. Keovilay, M. Perez, Mixed-mode model for ferrite-to-austenite phase transformation in dual-phase steel, *Computational Materials Science*, 2018. 149: p. 282-290.
89. Kohtake, T., M. Segawa, A. Yamanaka, Analysis of $\gamma \rightarrow \alpha$ transformation in Fe-C-Mn ternary alloy by phase-field simulation coupled with CALPHAD database, *Journal of Crystal Growth*, 2017. 468: p. 63-67.
90. Loginova, I., J. Ågren, G. Amberg, On the formation of Widmanstätten ferrite in binary Fe-C – phase-field approach, *Acta Materialia*, 2004. 52(13): p. 4055-4063.
91. Yamanaka, A., T. Takaki, Y. Tomita, Phase-Field Simulation of Austenite to Ferrite Transformation and Widmanstätten Ferrite Formation in Fe-C Alloy, *MATERIALS TRANSACTIONS*, 2006. 47(11): p. 2725-2731.

92. Yamanaka, A., T. Takaki, Y. Tomita, Phase-Field Modeling of Morphological Change of Ferrite during Decomposition of Austenite in Fe-C Alloy, *Key Engineering Materials*, 2007. 345-346: p. 935-938.
93. Song, H., J. Hoyt, *An atomistic simulation study of the migration of an austenite–ferrite interface in pure Fe*. Vol. 61. 2013. p. 1189–1196.
94. Engin, C., H.M. Urbassek, Molecular-dynamics investigation of the fcc→bcc phase transformation in Fe, *Computational Materials Science*, 2008. 41(3): p. 297-304.
95. Song, H., J.J. Hoyt, A molecular dynamics simulation study of the velocities, mobility and activation energy of an austenite–ferrite interface in pure Fe, *Acta Materialia*, 2012. 60(10): p. 4328-4335.
96. Biglari, M., *Simulation of the austenite-ferrite transformation; effect of applied stress*, in *Max-Planck-Institut für Intelligente Systeme*. 2013: Stuttgart.
97. Pernach, M., M. Pietrzyk, Numerical solution of the diffusion equation with moving boundary applied to modelling of the austenite–ferrite phase transformation, *Computational Materials Science*, 2008. 44(2): p. 783-791.
98. Basantia, S.K., V. Singh, A. Bhattacharya, N. Khutia, D. Das, Prediction of Tensile Behaviour of Ferrite-Martensite Dual Phase Steel using Real Microstructure-based RVE Simulations, *Materials Today: Proceedings*, 2018. 5(9): p. 18275-18280.
99. Ma, J., W. Du, W. Gao, P. Wriggers, X. Xue, Multiscale finite element analysis of uncertain-but-bounded heterogeneous materials at finite deformation, *Finite Elements in Analysis and Design*, 2018. 149: p. 15-31.
100. Kružel, F., Ł. Madej, K. Perzynski, K. Banaś, Development of three-dimensional adaptive mesh generation for multiscale applications, *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 2014. 12(3): p. 257-269.
101. Madej, L., M. Sitko, A. Legwand, K. Perzynski, K. Michalik, Development and evaluation of data transfer protocols in the fully coupled random cellular automata finite element model of dynamic recrystallization, *Journal of Computational Science*, 2018. 26: p. 66-77.
102. Drugan, W.J., J.R. Willis, A micromechanics-based nonlocal constitutive equation and estimates of representative volume element size for elastic composites, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1996. 44(4): p. 497-524.
103. Kanit, T., S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury, D. Jeulin, Determination of the size of the representative volume element for random composites: statistical and numerical approach, *International Journal of Solids and Structures*, 2003. 40(13): p. 3647-3679.
104. Rauch, L., K. Bzowski, Image processing methods for segmentation of microscopic pictures of the MgCa alloys, *Computer Methods in Materials Science*, 2011. 11(2): p. 350-356.
105. Rauch, Ł., K. Imiołek, Rekonstrukcja trójwymiarowych mikrostruktur stali jednofazowych, *Rudy i Metale Nieżelazne*, 2013. 58(11): p. 726-730.
106. Kröner, E., *Statistical Continuum Mechanics*. 1972: Springer-Verlag.
107. Gusev, A.A., Representative volume element size for elastic composites: A numerical study, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1997. 45(9): p. 1449-1459.
108. Segurado, J., J. Llorca, A numerical approximation to the elastic properties of sphere-reinforced composites, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2002. 50(10): p. 2107-2121.

109. Torquato, S., *Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties*. Interdisciplinary Applied Mathematics. Vol. 16. 2002, New York: Springer-Verlag.
110. Barrera, O., A. Cocks, A. Ponter, *Advances in Direct Methods for Materials and Structures*. 2017: Springer International Publishing.
111. Wang, Z.Q., X.Q. Wang, J.F. Zhang, S. Zhou, Parametric Modeling Method for Composite Microstructure Virtual Testing, *Advanced Materials Research*, 2010. 97-101: p. 1661-1664.
112. Gitman, I.M., H. Askes, L.J. Sluys, Representative volume: Existence and size determination, *Engineering Fracture Mechanics*, 2007. 74(16): p. 2518-2534.
113. Róžański, A., D. Łydźba, Uwagi o wielkości reprezentatywnej elementarnej objętości dla losowych mikrostruktur komórkowych, *Górnictwo i Geoinżynieria*, 2009. 33(1): p. 507-518.
114. Łydźba, D., A. Róžański, Microstructure measures and the minimum size of a representative volume element: 2D numerical study, *Acta Geophysica*, 2014. 62(5): p. 1060-1086.
115. Pelissou, C., J. Baccou, Y. Monerie, F. Perales, Determination of the size of the representative volume element for random quasi-brittle composites, *International Journal of Solids and Structures*, 2009. 46(14): p. 2842-2855.
116. Salmi, M., F. Auslender, M. Bornert, M. Fogli, Various estimates of Representative Volume Element sizes based on a statistical analysis of the apparent behavior of random linear composites, *Comptes Rendus Mécanique*, 2012. 340(4): p. 230-246.
117. Saiki, I., K. Terada, K. Ikeda, M. Hori, Appropriate number of unit cells in a representative volume element for micro-structural bifurcation encountered in a multi-scale modeling, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2002. 191(23): p. 2561-2585.
118. Bouchédjra, M., T. Kanit, C. Boulemia, A. Amrouche, M.E.A. Belouchrani, Determination of the RVE size for polycrystal metals to predict monotonic and cyclic elastoplastic behavior: Statistical and numerical approach with new criteria, *European Journal of Mechanics - A/Solids*, 2018. 72: p. 1-15.
119. Ostoja-Starzewski, M., S. Kale, P. Karimi, A. Malyarenko, B. Raghavan, S.I. Ranganathan, J. Zhang, *Scaling to RVE in Random Media*, in *Advances in Applied Mechanics*, S.P.A. Bordas and D.S. Balint, Editors. 2016, Elsevier. p. 111-211.
120. Shan, Z., A.M. Gokhale, Representative volume element for non-uniform microstructure, *Computational Materials Science*, 2002. 24(3): p. 361-379.
121. Harris, W.M., W.K.S. Chiu, Determining the representative volume element size for three-dimensional microstructural material characterization. Part 1: Predictive models, *Journal of Power Sources*, 2015. 282: p. 552-561.
122. Yin, X., W. Chen, A. To, C. McVeigh, W.K. Liu, Statistical volume element method for predicting microstructure–constitutive property relations, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2008. 197(43): p. 3516-3529.
123. Ostoja-Starzewski, M., Material spatial randomness: From statistical to representative volume element, *Probabilistic Engineering Mechanics*, 2006. 21(2): p. 112-132.
124. Balzani, D., J. Schröder, D. Brands, *FE2-Simulation of Microheterogeneous Steels Based on Statistically Similar RVEs*. 2010. p. 15-28.
125. Schröder, J., D. Balzani, D. Brands, Approximation of random microstructures by periodic statistically similar representative volume elements based on lineal-path functions, *Archive of Applied Mechanics*, 2011. 81(7): p. 975-997.

126. Balzani, D., D. Brands, J. Schröder, C. Carstensen, *Sensitivity analysis of statistical measures for the reconstruction of microstructures based on the minimization of generalized least-square functionals*. Vol. 30. 2010. p. 297-315.
127. Balzani, D., L. Scheunemann, D. Brands, J. Schröder, Construction of two- and three-dimensional statistically similar RVEs for coupled micro-macro simulations, *Computational Mechanics*, 2014. 54(5): p. 1269-1284.
128. Łukasz, R., P. Monika, B. Krzysztof, P. Maciej, On application of shape coefficients to creation of the statistically similar representative element of DP steels, *Computer Methods in Materials Science*, 2011. 11: p. 531-541.
129. Matusiewicz, P., A. Czarski, H. Adrian, Estimation of materials microstructure parameters using computer program SigmaScan Pro, *Metallurgy and Foundry Engineering*, 2007. 33(1): p. 33-40.
130. Schröder-Turk, G.E., W. Mickel, S.C. Kapfer, M.A. Klatt, F.M. Schaller, M.J.F. Hoffmann, N. Kleppmann, P. Armstrong, A. Inayat, D. Hug, M. Reichelsdorfer, W. Peukert, W. Schwieger, K. Mecke, Minkowski Tensor Shape Analysis of Cellular, Granular and Porous Structures, *Advanced Materials*, 2011. 23(22-23): p. 2535-2553.
131. Corson, P.B., Correlation functions for predicting properties of heterogeneous materials. II. Empirical construction of spatial correlation functions for two-phase solids, *Journal of Applied Physics*, 1974. 45(7): p. 3165-3170.
132. Belvin, A., R. Burrell, A. Gokhale, N. Thadhani, H. Garmestani, Application of two-point probability distribution functions to predict properties of heterogeneous two-phase materials, *Materials Characterization*, 2009. 60(9): p. 1055-1062.
133. Mikdam, A., A. Makradi, S. Ahzi, H. Garmestani, D.S. Li, Y. Remond, Effective conductivity in isotropic heterogeneous media using a strong-contrast statistical continuum theory, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2009. 57(1): p. 76-86.
134. Lu, B., S. Torquato, Lineal-path function for random heterogeneous materials, *Physical Review A*, 1992. 45(2): p. 922-929.
135. Yeong, C.L.Y., S. Torquato, Reconstructing random media, *Physical Review E*, 1998. 57(1): p. 495-506.
136. Torquato, S., *Microstructural Descriptors*, in *Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties*. 2002, Springer New York: New York, NY. p. 23-58.
137. Zou, Y., B. Lei, F. Dong, G. Xu, S. Sun, P. Xia, Structure similarity-guided image binarization for automatic segmentation of epidermis surface microstructure images, *Journal of Microscopy*, 2017. 266(2): p. 153-165.
138. Madej, Ł., M. Mojżeszko, J. Chrapoński, S. Roskosz, J. Cwajna, Digital Material Representation Model of Porous Microstructure Based on 3D Reconstruction Algorithm, *Archives of Metallurgy and Materials*, 2017. 62(2): p. 563-569.
139. He, L., X. Ren, Q. Gao, X. Zhao, B. Yao, Y. Chao, The connected-component labeling problem: A review of state-of-the-art algorithms, *Pattern Recognition*, 2017. 70: p. 25-43.
140. Balzani, D., J. Schröder, Some basic ideas for the reconstruction of statistically similar microstructures for multiscale simulations, *PAMM*, 2008. 8(1): p. 10533-10534.
141. Hughes, T.J.R., J.A. Cottrell, Y. Bazilevs, Isogeometric analysis: CAD, finite elements, NURBS, exact geometry and mesh refinement, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2005. 194(39): p. 4135-4195.

142. Rauch, Ł., D. Bachniak, K. Bzowski, Metodyka tworzenia statystycznie podobnego reprezentatywnego elementu objętościowego 3D, *Rudy i Metale Nieżelazne*, 2013. 58(11): p. 789-794.
143. Sezgin, M., B. Sankur, Survey over image thresholding techniques and quantitative performance evaluation, *Journal of Electronic Imaging*, 2004. 13(1): p. 146-165.
144. Freedman, D., P. Diaconis, On the histogram as a density estimator:L2 theory, *Zeitschrift für Wahrscheinlichkeitstheorie und Verwandte Gebiete*, 1981. 57(4): p. 453-476.
145. Schröder, J., *A numerical two-scale homogenization scheme: the FE2-method*, in *Plasticity and Beyond: Microstructures, Crystal-Plasticity and Phase Transitions*, J. Schröder and K. Hackl, Editors. 2014, Springer Vienna: Vienna. p. 1-64.
146. Scheunemann, L., D. Balzani, D. Brands, J. Schröder, Design of 3D statistically similar Representative Volume Elements based on Minkowski functionals, *Mechanics of Materials*, 2015. 90: p. 185-201.
147. Ambrozinski, M., K. Bzowski, L. Rauch, M. Pietrzyk, Application of statistically similar representative volume element in numerical simulations of crash box stamping, *Archives of Civil and Mechanical Engineering*, 2012. 12(2): p. 126-132.
148. Konstantinov, D., K. Bzowski, A. Korchunov, A. Pesin, M. Pietrzyk, Multiscale modelling of ferritic-pearlitic steel deformation in rod drawing process by using statistical representation of microstructure, *Computer Methods in Materials Science*, 2015. 15: p. 336-345.
149. Konstantinov, D.V., A.G. Korchunov, O.P. Shiryaev, M.V. Zaitseva, A.S. Kuznetsova, Multiscale Computer Simulation of Drawing with Statistical Representation of TRIP Steel Microstructure, *Steel in Translation*, 2018. 48(4): p. 262-267.
150. Rauch, L., M. Skora, K. Bzowski, M. Pietrzyk, Numerical model of cold deformation of TRIP steel, *Computer Methods In Materials Science*, 2017. 17(4): p. 207-217.
151. Sasagawa, T., M. Tanaka, R. Omote, D. Balzani, Construction of statistically similar representative volume elements for discontinuous fiber composites, *Composite Structures*, 2018. 203: p. 193-203.
152. Osher, S., J.A. Sethian, Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations, *Journal of Computational Physics*, 1988. 79(1): p. 12-49.
153. Sharma, A., Level set method for computational multi-fluid dynamics: A review on developments, applications and analysis, *Sadhana*, 2015. 40(3): p. 627-652.
154. Stolarska, M., D.L. Chopp, N. Moës, T. Belytschko, Modelling crack growth by level sets in the extended finite element method, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2001. 51(8): p. 943-960.
155. Duddu, R., S. Bordas, D. Chopp, B. Moran, A combined extended finite element and level set method for biofilm growth, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2008. 74(5): p. 848-870.
156. Li, C., R. Huang, Z. Ding, J.C. Gatenby, D.N. Metaxas, J.C. Gore, A Level Set Method for Image Segmentation in the Presence of Intensity Inhomogeneities With Application to MRI, *IEEE Transactions on Image Processing*, 2011. 20(7): p. 2007-2016.

157. Hong-Kai, Z., S. Osher, R. Fedkiw. *Fast surface reconstruction using the level set method*. in *Proceedings IEEE Workshop on Variational and Level Set Methods in Computer Vision*. 2001.
158. Allaire, G., F. Jouve, A.-M. Toader, Structural optimization using sensitivity analysis and a level-set method, *Journal of Computational Physics*, 2004. 194(1): p. 363-393.
159. Ye, Q., S. Chen, Numerical Modeling of Metal-Based Additive Manufacturing Using Level Set Methods, *Journal of Manufacturing Science and Engineering*, 2017. 139(7): p. 071019-071019-8.
160. Zhang, X., Chen, J.S., Osher, S., A Multiple Level Set Method for Modeling Grain Boundary Evolution of Polycrystalline Materials Interaction and Multiscale Mechanics, 2005. 1(2): p. 191-209.
161. Bernacki, M., R.E. Logé, T. Coupez, Level set framework for the finite-element modelling of recrystallization and grain growth in polycrystalline materials, *Scripta Materialia*, 2011. 64(6): p. 525-528.
162. Osher, S., R. Fedkiw, *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*. Applied Mathematical Sciences. 2003, New York: Springer-Verlag.
163. Mulder, W., S. Osher, J.A. Sethian, Computing interface motion in compressible gas dynamics, *Journal of Computational Physics*, 1992. 100(2): p. 209-228.
164. Adalsteinsson, D., J.A. Sethian, A Fast Level Set Method for Propagating Interfaces, *J. Comput. Phys.*, 1995. 118(2): p. 269-277.
165. Chen, S., B. Merriman, S. Osher, P. Smereka, A Simple Level Set Method for Solving Stefan Problems, *Journal of Computational Physics*, 1997. 135(1): p. 8-29.
166. Roh, W., N. Kikuchi, *Analysis of Stefan Problem with Level Set Method*. 2002.
167. Courant, R., K. Friedrichs, H. Lewy, Über die partiellen Differenzengleichungen der mathematischen Physik, *Mathematische Annalen*, 1928. 100(1): p. 32-74.
168. Sussman, M., P. Smereka, S. Osher, A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow, *Journal of Computational Physics*, 1994. 114(1): p. 146-159.
169. Cheng, L.-T., Y.-H. Tsai, Redistancing by flow of time dependent eikonal equation, *Journal of Computational Physics*, 2008. 227(8): p. 4002-4017.
170. Russo, G., P. Smereka, A Remark on Computing Distance Functions, *Journal of Computational Physics*, 2000. 163(1): p. 51-67.
171. Yamasaki, S., S. Nishiwaki, T. Yamada, K. Izui, M. Yoshimura, A structural optimization method based on the level set method using a new geometry-based re-initialization scheme, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2010. 83(12): p. 1580-1624.
172. Guttman, A., *R-trees: a dynamic index structure for spatial searching*, in *Proceedings of the 1984 ACM SIGMOD international conference on Management of data*. 1984, ACM: Boston, Massachusetts. p. 47-57.
173. Touré, M.K., A. Soulaïmani, Stabilized finite element methods for solving the level set equation without reinitialization, *Computers & Mathematics with Applications*, 2016. 71(8): p. 1602-1623.
174. Zhang, K., L. Zhang, H. Song, D. Zhang, Reinitialization-Free Level Set Evolution via Reaction Diffusion, *IEEE Transactions on Image Processing*, 2013. 22(1): p. 258-271.
175. Liu, C., Z. Pan, J. Duan, *New Algorithm for Level Set Evolution without Re-initialization and Its Application to Variational Image Segmentation*. Vol. 8. 2013.

176. Fang, H., M.G. Mecozzi, E. Brück, S. van der Zwaag, N.H. van Dijk, Analysis of the Grain Size Evolution for Ferrite Formation in Fe-C-Mn Steels Using a 3D Model Under a Mixed-Mode Interface Condition, *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2018. 49(1): p. 41-53.
177. Zhang, X., J.-S. Chen, S. Osher, A multiple level set method for modeling grain boundary evolution of polycrystalline materials, *Interaction and multiscale mechanics*, 2008. 1(2): p. 191-209.
178. Li, B., J. Shopp, An Interface-Fitted Finite Element Level Set Method with Application to Solidification and Solvation, *Communications in computational physics*, 2011. 10(1): p. 32-56.
179. Thibaux, P., A. Métenier, C. Xhoffer, Carbon Diffusion Measurement in Austenite in the Temperature Range 500 °C to 900 °C, *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2007. 38(6): p. 1169-1176.
180. Kattner, U., C. E. Campbell, *Invited review: Modelling of thermodynamics and diffusion in multicomponent systems*. Vol. 25. 2009. p. 443-459.
181. Ågren, J., A revised expression for the diffusivity of carbon in binary Fe-C austenite, *Scripta Metallurgica*, 1986. 20(11): p. 1507-1510.
182. da Silva, J.R.G., R.B. McLellan, Diffusion of carbon and nitrogen in B.C.C. iron, *Materials Science and Engineering*, 1976. 26(1): p. 83-87.
183. Strangwood, M., 6 - *Fundamentals of ferrite formation in steels*, in *Phase Transformations in Steels*, E. Pereloma and D.V. Edmonds, Editors. 2012, Woodhead Publishing. p. 187-224.
184. Offerman, S., N. van Dijk, J. Sietsma, S. Grigull, E. Lauridsen, L. Margulies, H.F. Poulsen, M. Rekveldt, S. Zwaag, *Grain Nucleation and Growth During Phase Transformations*. Vol. 298. 2002. p. 1003-5.
185. Cahn, J.W., The kinetics of grain boundary nucleated reactions, *Acta Metallurgica*, 1956. 4(5): p. 449-459.
186. Alzetta, G., D. Arndt, W. Bangerth, V. Boddu, B. Brands, D. Davydov, R. Gassmüller, T. Heister, L. Heltai, K. Kormann, M. Kronbichler, M. Maier, J.-P. Pelteret, B. Turcksin, D. Wells, The deal.II library, Version 9.0, *Journal of Numerical Mathematics*, 2018. 26(4): p. 173-183.
187. Collet, J.-L., N. Kwiaton, L. Madej, K. Radwański, T. Iung, C. Halder, R. Kuziak, J.C. Hell, J. Opara, W. Zalecki, A. Mazur, G. Lannoo, W. Madej, M. Pietrzyk, *Property oriented design of hard constituent hardness and morphology in continuously annealed/galvanised DP sheets*, in *VADPSheet, European Commission Research Programme of the Research Fund for Coal and Steel, Technical Group TGS 4*. 2015, European Commission: Luxembourg.
188. Suzuki, S., Features of Transmission EBSD and its Application, *JOM*, 2013. 65(9): p. 1254-1263.