

## ФРОНТАЛЬНЫЕ КЛЕТОЧНЫЕ АВТОМАТЫ

### Постановка проблемы

Прогноз микроструктуры и свойств материала является одной из основных проблем в материаловедении и инженерии материалов. Для определения микроструктуры могут быть использованы разные методы: узловые модели (vertex models [1]), модели фазовых полей (phase field models [2]), метод Монте-Карло-Поттс (Monte Carlo Potts [3]), метод конечных элементов [4] и клеточные автоматы [5]. Интерес к использованию клеточных автоматов для моделирования сложных явлений, происходящих в материале, в последнее время постоянно растет. Клеточные автоматы используются для моделирования кристаллизации [6, 7], динамической и статической рекристаллизации [8-10], фазовых превращений [10], развития трещин, микрополос и полос скольжения [11] и т. п. Основным преимуществом клеточных автоматов есть способность получить высокую корреляцию между микроструктурой и свойствами материала при моделировании на микро и мезо уровне. Модели, основанные на клеточных автоматах, разработаны и, в основном, используются в двумерной версии [12-14]. Главной причиной использования двумерных клеточных автоматов является время вычислений. Двумерные модели проще и быстрее, имеют меньше элементов и связей, используют более простые алгоритмы и проще в разработке, использовании и визуализации. В то же время развитие микроструктуры имеет ярко выраженный трехмерный характер и результаты полученные двумерными моделями не всегда могут быть непосредственно перенесены на трехмерные процессы.

Целью работы является разработки трехмерной модели, основанной на фронтальных клеточных автоматов, позволяющей моделировать развития микроструктуры.

### Классические клеточные автоматы

В классических клеточных автоматах их поведение на правилах перехода из одного состояния в другое и может быть сформулирован

следующим образом. Состояние клетки в следующем шаге вычислений зависит от ее текущего состояния и текущего состояния соседних клеток. В простейших автоматах клетка может находиться в двух состояниях. Назовем их начальным  $q_0$  и конечным  $q_1$ . Рассмотрим в качестве примера один из простейших алгоритмов создания микроструктуры. В начале моделирования все клетки находятся в начальном состоянии  $q_0$  и во время моделирования посредством зародышеобразования и росту зерна переходят в конечное состояние  $q_1$ . Опишем правила перехода в следующей формулой:

$$I_1 = p \vee c_n, \quad (1)$$

где,  $I_1$  – условие перехода из состояния  $q_0$  в состояние  $q_1$ ;  $p$  – случайная составляющая, связанная с появлением новых зерен;  $c_n$  – наличие в окружении клетки, клеток в состоянии  $q_1$ .

Таким образом, классические клеточные автоматы позволяют определить состояние клетки на основе исследования ее окружения. Что приводит к необходимости сканирования всего пространства клеток и исследования окружения каждой клетки.

### **Фронтальные клеточные автоматы**

Рассмотрим поведение клеточных автоматов в стационарных условиях, когда около выбранной клетки не происходят никакие изменения. Точнее говоря, интересуют нас клетки окружения  $c_n$ , поскольку именно они могут воздействовать на состояние клетки. Во фронтальных клеточных автоматах основной принцип формулируется иначе. Если в состоянии клеток окружения не происходят изменения и сама клетка не находится в переходном состоянии, а также на нее не действует случайная составляющая, в соответствии с правилами перехода, нет оснований ожидать изменения текущего состояние клетки. То есть, если имеются средства позволяющие выявить стационарные условия в той или иной части пространства, можно было бы исключить эту область из вычислений в текущей итерации. Определение области находящейся в стационарных условиях – достаточно трудная задача, намного проще определить области в которых происходят изменения. Тогда предполагаем, что область и клетка находятся в стационарных условиях, если не выполняется обратное условие. Индикатором происходящих изменений будет

изменение состояния клетки. Соответственно, изменяется и основной принцип клеточных автоматов.

Напоминаем, что поведение клеточного автомата можно описать следующим образом: состояние клетки зависит от состояния клеток ее окружения. Подчеркиваем, что тут нет речи о происходящих изменениях в состоянии ни самой клетки, ни ее окружения. Но главным остается зависимость состояния клетки от состояния окружения. А что будет, если мы заменим местами клетку и ее окружение? Такая замена может звучать, например, так: состояние клеток окружения зависит от состояния нашей клетки! Все также остается влияние одной клетки на другую, только в классических автоматах сразу же считается эффект воздействия всего окружения на клетку, во фронтальных же автоматах только действие отдельной клетки, но на все ее окружение. Воздействие отдельной ячейки при необходимости может суммироваться или передаваться непосредственно, как простых алгоритмах роста.

Замена ролей клетки и окружения в соединении с определением областей нестационарности позволяет получить настолько поразительный результат в ускорении вычислений, что кажется использование классического подхода есть совершенно необоснованным. Однако всегда необходимо помнить, не будут ли потеряны важные свойства автоматов при использовании предложенного подхода.

Рассмотрим подробнее действие фронтальных автоматов в алгоритме роста зерна. Если в клетке не происходят изменения, то ее влияние на соседние клетки не изменяется и нет смысла исследовать соседние клетки. Клетки, которые находятся на определенном отдалении от границы растущего зерна, остаются в стационарных условиях, независимо, находятся ли они в начальном  $q_0$  или конечном состоянии  $q_1$ . Не происходит в них никаких изменений и могут они полностью быть исключены из вычислений на определенных стадиях вычислений. Значит, фактически, нас интересует не состояние клетки, а переход из одного состояния в другое. В классическом автомате только состояние  $q_1$  определяет изменение состояния клетки. То есть  $sp = q_1$  вызывает появление условия  $I_1$ , которое затем переведет клетку в новое состояние. В то же время, известно конечное состояние  $q_1$ , является следствием

исполнения условия  $I1$ . Другими словами, условие  $I1$  для одной клетки является причиной исполнения условия  $I1$  для окружающих клеток. Тогда условие приводит не только к изменению состояния клетки на состояние  $q1$ , но и исполнения условия для остальных клеток. При этом часто нет необходимости исследовать все соседние клетки, не говоря уже о том, что большая часть пространства, остающаяся в стационарных условиях, не изменяет своего состояния и не рассматривается. В результате количество исследуемых клеток на предмет изменения их состояния многократно уменьшается, что с учетом исследования не всех соседей значительно сокращает время вычислений.

В результате такой модификации автоматов отпадает необходимость исследования всех клеток и их окружения. Изменения доходят к клетке как внешний сигнал, который автоматически втягивает ее в процесс изменения состояния. Похоже это на принцип домино. Одна падающая косточка вызывает падение следующей, которая тянет за собой очередную. Причем падение вызывает не состояние упавшей косточки (как в классических клеточных автоматах), а сам процесс перехода из одного состояния (стоящего) в другое (лежащее). И для исследования всего процесса нет смысла исследовать все время косточки, которые находятся далеко от подвижного фронта, в котором собственно и происходят все изменения. И не зависит, пропускаем ли мы еще стоящие косточки домино, или уже упавшие. В этом смысле, переходим от исследования всего пространства к очень ограниченной области, а точнее к исследованию подвижного фронта происходящих изменений. Отсюда и происходит название таких автоматов как фронтальные. В применении к моделированию процесса роста зерен подвижному фронту соответствует граница растущего зерна и тонкий слой клеток, прилегающий по обе стороны этой границы.

### **Результаты использования фронтальных клеточных автоматов**

Попробуем оценить затраты на вычисления для нескольких вариантов.

Первый вариант: двумерное пространство  $100 \times 100$  клеток с одним зародышем, соседством фон Неймана (четыре соседа) без задержки на переход из начального состояния в конечное.

Второй вариант: двумерное пространство  $100 \times 100$  клеток с одним зародышем, соседством Мура (8 соседей), зерно растет в форме круга со средней задержкой перехода из начального состояния в конечное равным трем итерациям.

Третий вариант: трехмерное пространство  $100 \times 100 \times 100$  клеток с одним зародышем, соседством Мура (26 соседей), зерно растет в форме шара со средней задержкой перехода из начального состояния в конечное равным трем итерациям.

Количество итераций до наполнения всего пространства по вариантам: 100, 180, 210.

Количество исследуемых клеток для классических автоматов: 106;  $1,8 \cdot 106$ ;  $2,1 \cdot 108$ , для фронтальных автоматов: 104; 104; 106.

Количество исследуемых соседей во всех итерациях для классических автоматов:  $4 \cdot 106$ ;  $1,14 \cdot 107$ ;  $5,5 \cdot 109$ , для фронтальных автоматов:  $4 \cdot 104$ ;  $8 \cdot 104$ ;  $2,6 \cdot 107$ .

По последнему показателю трехмерные фронтальные клеточные автоматы с окружением Мура сравнимы по быстродействию с двумерными классическими клеточными автоматами.

### **Выводы**

Использование предложенного метода фронтальных клеточных автоматов позволяет значительно сократить затраты на моделирование явлений происходящих в материале, которые отличаются ярко выраженной границей происходящих изменений. Фронтальные автоматы могут быть применены для моделирования затвердевания металла, кристаллизации, рекристаллизации, фазовых превращений.

Работа проводится в рамках проектов №№ N508 002 32/0158 и N508 3812 33, финансируемых Министерством Науки и Высшего Образования Польши в 2006-2010 годах.

### **ЛИТЕРАТУРА**

1. Weygand, D., Brechet, Y., Lepinoux, J., Adv. Engng. Mater. 3, 67-71 (2001).
2. Fan, D., Chen, L.Q. Acta Mat. 44, 611-622 (1997).
3. Holm, E.A., Hassold G.N., Miodownik, M.A., Acta Mat. 49, 2981-2991 (2001).
4. Bernacki, M., Chastel, Y., Digonnet, H., Resk, H., Coupez, T., Loge, R.E., Comp. Meth. .Mat. Sci.. 7 (2007) 142-149.

5. Davies, C. H. J., *Scr. Mater.* 36 35-40 (1997).
6. Rappaz, M., Gandin, C.-A., *Acta Metal. Mater.* 41 345-360 (1993).
7. Raabe, D., *Acta Mater.* 52 2653-2664 (2004).
8. Hurley, P. J., Humphreys, F. J., *Acta mater.* 51 3779-3793 (2003).
9. Qian, M., Guo, Z. X., *Mater. Sci. Eng. A*, A365, 180-185 (2004).
10. Kumar, M., Sasikumar, R., Kesavan, Nair, P., *Acta Mater.* 46 6291-6303 (1998).
11. Das, S., Palmiere, E. J., Howard, I. C., “CAFE: a Tool for Modeling Thermomechanical Processes”, in *Thermomech. Processing: Mechanics, Microstructure & Control* eds., Palmiere, E.J., Mahfouf, M., Pinna, C., Conference Proceedings, Sheffield, 2002, pp. 296-301.
12. Kugler, G.; Turk, R., *Comp. Mater. Sci.* 37 284-291 (2006).
13. He, Y., Ding, H., Liu, L., Shin, K., *Mater. Sci. Eng. A* A429 236-246 (2006).
14. Raabe, D., Hantcherli, L., *Comp. Mater. Sci.* 34 299-313 (2005).

Получено 04.03.2008 г.