Чернышев, Н.П. Моделирование эволюции зеренной структуры в процессе кристаллизации методом клеточных автоматов / Н.П. Чернышев, Р.П. Давлятшин, П.С. Волегов. – DOI: 10.15593/perm.mech/2025.6.07 // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2025. – № 6. – С. 71–82.

Perm Polytech Style: Modeling the grain structure evolution during crystallization by cellular automata. *PNRPU Mechanics Bulletin,* 2025, no. 6, pp. 71–82. DOI: 10.15593/perm.mech/2025.6.07

пермский политех

ВЕСТНИК ПНИПУ. МЕХАНИКА
№ 6, 2025
PNRPU MECHANICS BULLETIN
https://ered.pstu.ru/index.php/mechanics/index



Научная статья

DOI: 10.15593/perm.mech/2025.6.07
УДК 539.53, 548.4

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ ЗЕРЕННОЙ СТРУКТУРЫ В ПРОЦЕССЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ МЕТОДОМ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ

Н.П. Чернышев, Р.П. Давлятшин, П.С. Волегов

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Российская Федерация

О СТАТЬЕ

Получена: 18 августа 2025 г.
Одобрена: 15 ноября 2025 г.
Принята к публикации:
10 декабря 2025 г.

Ключевые слова:

кристаллизация, зеренная структура, математическое моделирование, клеточные автоматы, дендритный рост, стохастическое зарождение, гетерогенное зарождение, гомогенное зарождение, столбчатые зерна, равноосные зерна, метод децентрированного квадрата, скорость охлаждения, сплав Al7Si.

АННОТАЦИЯ

Механические свойства металлических изделий в значительной степени определяются зеренной структурой, ключевыми характеристиками которой являются размер, форма и кристаллографическая ориентация кристаллических решеток зерен. Особое внимание при изготовлении ответственных деталей необходимо уделять росту столбчатых зерен, наличие которых характерно для аддитивного производства и литья. Их рост приводит к анизотропии, а следовательно, к снижению прочностных свойств изделия. Для прогнозирования и целенаправленного управления этими характеристиками необходимо глубокое понимание процессов кристаллизации, в ходе которой формируется зеренная структура. Целью исследования является разработка и верификация математической модели кристаллизации на основе метода клеточных автоматов, позволяющей прогнозировать эволюцию зеренной структуры с учетом стохастического зарождения и анизотропного роста. Разработанная модель включает стохастические алгоритмы гетерогенного и гомогенного зарождения зерен на поверхности и в объеме расплава. Для сохранения первоначальной кристаллографической ориентации растущего зерна был применен метод децентрированного квадрата. Проведена серия численных экспериментов по затвердеванию сплава Al7Si. Исследовано влияние скорости охлаждения, критической температуры зарождения и максимальной плотности зародышей на формирование зеренной структуры. Результаты показали, что модель корректно воспроизводит ключевые физические механизмы: рост столбчатых зерен от границ с последующим переходом к равноосной структуре в центре, а также конкурентный рост зерен с предпочтительной ориентацией. Установлено, что увеличение скорости охлаждения и плотности зародышей приводит к уменьшению среднего размера зерна, а рост критической температуры зарождения способствует расширению зоны столбчатых зерен. Реализованная и верифицированная двумерная модель процесса кристаллизации представляет собой начальный этап разрабатываемого программного комплекса, объединяющего метод клеточных автоматов и метод гидродинамики сглаженных частиц для моделирования процессов проволочной наплавки металлов.

© **Чернышев Никита Павлович** – студент, e-mail: cherv75@bk.ru.
Давлятшин Роман Позолович – кандидат физико-математических наук, e-mail: romadavly@gmail.com.
Волегов Павел Сергеевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математического моделирования систем и процессов, e-mail: crocinc@mail.ru.

Nikita P. Chernyshev – Student, e-mail: cherv75@bk.ru.
Roman P. Davlyatshin – PhD in Physical and Mathematical Sciences, e-mail: romadavly@gmail.com.
Pavel S. Volegov – PhD in Physical and Mathematical Sciences, Ass. Professor, Department of Mathematical Modeling of Systems and Processes, e-mail: crocinc@mail.ru.

Эта статья доступна в соответствии с условиями лицензии Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)
This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

MODELING THE GRAIN STRUCTURE EVOLUTION DURING CRYSTALLIZATION BY CELLULAR AUTOMATA

N.P. Chernyshev, R.P. Davlyatshin, P.S. Volegov

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

ARTICLE INFO

Received: 18 August 2025
Approved: 15 November 2025
Accepted for publication:
10 December 2025

Keywords:

solidification, grain structure, mathematical modeling, cellular automata, dendritic growth. stochastic nucleation, heterogeneous nucleation, homogeneous nucleation, equiaxed grains, columnar grains, decentered square method, cooling rate, Al7Si alloy

ABSTRACT

The mechanical properties of metallic components are largely governed by the grain structure, whose key characteristics are grain size, morphology, and the crystallographic orientation of grain lattices. When manufacturing critical parts, particular attention must be paid to the growth of columnar grains, which are characteristic of additive manufacturing and casting processes. Their growth induces anisotropy and, consequently, reduces strength. Predictive and targeted control of these characteristics requires a deep understanding of the solidification processes by which the grain structure forms. The aim of this study is to develop and verify a cellular-automaton-based mathematical model of solidification that predicts the evolution of grain structure while accounting for stochastic nucleation and anisotropic growth. The model incorporates stochastic algorithms for heterogeneous and homogeneous nucleation on the surface and in the bulk of the melt. To preserve the initial crystallographic orientation of a growing grain, we employ the decentered square algorithm. A series of numerical experiments was performed for the solidification of an Al7Si alloy. We investigated the influence of cooling rate, critical nucleation temperature, and maximum nucleation density on the resulting grain structure. The results demonstrate that the model accurately reproduces key physical mechanisms, including the growth of columnar grains from boundaries, followed by a transition to an equiaxed structure in the center (columnar-to-equiaxed transition, CET), as well as the competitive growth of grains with preferential orientation. It is established that increasing the cooling rate and nucleation density decreases the mean grain size, whereas increasing the critical nucleation temperature broadens the columnar zone. The developed and validated two-dimensional solidification model represents the initial stage of the developing software framework, combining the cellular automaton method with the smoothed particle hydrodynamics method for modeling metal wire-arc additive manufacturing processes.

Введение

Механические свойства изделий существенным образом зависят от зеренной структуры [1]. Ключевыми параметрами ее являются размер, форма и ориентация кристаллических решеток зерен. Например, при мелком зерне в материале достигается более высокая прочность (до некоторого предела, ниже которого закон Холла-Петча перестает выполняться), а при преобладании определенных ориентировок зерен в поликристалле возникает анизотропия – различие механических свойств в разных направлениях. В процессе производства поликристалл подвергается воздействиям, в ходе которых формируется текстура. Например, после прокатки зёрна ориентируются вдоль направления прокатки, а при проволочной наплавке зёрна вырастают вдоль направления теплового потока [2]. Современная промышленность ставит высокие требования к используемым металлическим конструкциям, что делает необходимым тщательный контроль и управление структурой изделия в процессе его изготовления или обработки.

Ключевое влияние на формирование зеренной структуры оказывает процесс кристаллизации. Кристаллизация – процесс образования кристаллов при переходе расплава из жидкого состояния в твердое. Данный процесс начинается при достижении температуры ниже температуры плавления для чистых металлов и в промежутке между температурой ликвидуса и солидуса для сплавов. Кристаллизация состоит из двух основных этапов: возникновение центров кристаллизации (зародышей) и дальнейший рост кристаллов вокруг этих центров. Рост граней кристаллов происходит до момента «столкновения» фронтов соседних зерен, тогда образуются границы зерен и нарушается их правильная форма.

В материаловедении [3] выделяют 2 классических вида зарождения зерен – гомогенное и гетерогенное. Гомогенное зарождение происходит в объеме расплава в отсутствие примесей или поверхности раздела фаз. В этом случае зарождение вызвано флуктуацией энергии системы. Из-за высокого энергетического барьера для гомогенного зарождения необходимо высокое переохлаждение. На поверхностях раздела фаз происходит гетерогенное зарождение при меньшем значении температуры переохлаждения, так как наличие подложки уменьшает поверхностную энергию зародыша [4]. В реальных металлах и сплавах действуют оба механизма зарождения.

Рост кристаллов вызван увеличением переохлаждения расплава [5]. Чем выше переохлаждение в расплаве, тем быстрее происходит затвердевание. В кристаллах с кубической решеткой рост зерен происходит преимущественно в направлениях <100> из-за анизотропии кинетики дендритного роста [6].

В области металлического аддитивного производства возникает ряд проблем, связанных с особенностями формирования структуры изделия, в частности грубое дендритное строение, текстура и анизотропия [7; 8]. Экспериментальные исследования дают ценную информацию о процессе формирования зеренной структуры, однако ограниченность набора доступных технологий для проведения экспериментов и их высокая стоимость предопределяют интерес к численному моделированию процесса кристаллизации. Математическое моделирование позволяет изучить влияние параметров технологического режима на формирование конечной зеренной структуры материала.

Обзор методов моделирования зеренной структуры

Наиболее распространенными подходами к моделированию зеренной структуры являются метод фазового поля (ФП), методы на основе метода Монте-Карло и клеточные автоматы (КА) [8].

В основе метода Монте-Карло лежат термодинамические принципы: энергия системы определяется суммой удельных энергий границ зерен. Пространство покрывается регулярной сеткой, где каждой ячейке приписывается индекс (ориентация) зерна [9]. На каждом шаге метода выбирается случайная ячейка, которая принимает ориентацию одного из соседей, после чего происходит вычисление энергии системы. Решение о переходе из одного состояния в другое (смена индекса ячейки) принимается по критерию Метрополиса. Различные модификации стандартного алгоритма Монте-Карло были применены авторами статьи [10] для устранения «артефактов» стандартной модели и получения более достоверных результатов. В работе [11] была разработана модифицированная модель Поттса, учитывающая анизотропию границ зерен и эффект блокировки частицами, для моделирования эволюции зеренной структуры в двумерной постановке. Статья [12] посвящена разработке трехмерной модели изменения зеренной структуры в процессе отжига с использованием метода Монте-Карло. Авторами было исследовано влияние начальной текстуры и анизотропии границ зерен на кинетику роста в металлах. Еще одна модификация данного метода была применена в работе [13] для моделирования роста зерен в зоне сварки. Для этого в стандартную модель была добавлена функция температуры, которая зависит от положения и времени, зона плавления моделировалась путем разупорядочивания спинов (индексов принадлежности к определенному зерну). Для связи метода Монте-Карло с реальным временем и масштабом в статье [14] была применена процедура масштабирования на основе сравнения с экспериментальными данными. Авторы работы [15] предложили учитывать свойства материала и температурно-временную зависимость в определении временного шага метода Монте-Карло.

Преимуществами моделей на основе метода Монте-Карло являются простота реализации и возможности модифицировать модель для учета большого числа физических факторов. К недостаткам данного класса моделей можно отнести сложность сопряжения тепловой модели и модели эволюции микроструктуры, а также слабую физическую обоснованность [16].

Еще одним распространенным подходом к моделированию микроструктуры при кристаллизации является метод фазового поля (ФП). Преимущество этого метода заключается в использовании параметра фазы, который плавно изменяет свое состояние от жидкого до твердого, что позволяет не отслеживать и не описывать явно границу раздела фаз. С помощью метода фазового поля можно с высокой точностью описывать микроструктуру металлов и сплавов с использованием переменных поля [17]. Так, например, статья [18] посвящена применению метода ФП для моделирования дендритного роста в двух и трех измерениях в чистых металлах с использованием тонкоинтерфейсного приближения, что способствовало снижению времени расчетов, тем самым доказав эффективность применения ФП в трехмерных моделях. Авторами работы [19] была предложена вариация метода фазового поля, который объединяет подходы молекулярной динамики и метод ФП, благодаря чему эволюция микроструктуры моделируется на атомном масштабе с б**о**льшими временными шагами. В работе [20] классическая постановка метода ФП была дополнена динамическим переопределением ориентаций для экономии вычислительных ресурсов. Сверхмасштабное моделирование (в десятки раз больший масштаб, чем в предыдущих исследованиях) фазового поля было выполнено авторами [21] для описания роста зерна в условиях изотропной энергии и подвижности границ, отсутствии фазовых превращений и внешних воздействий. Статья [22] была посвящена исследованию влияния высокоподвижных границ на аномальный (отдельные зерна растут быстрее окружающих их зерен) рост зерен в поликристалле с использованием метода ФП. Данный подход позволяет описывать переход от обычного роста зерен к аномальному. Ориентационная модель фазового поля была разработана в статье [23] для моделирования роста зерен в поликристалле с учетом анизотропии границ зерен. Модель была валидирована на двумерных задачах, показав влияние малоугловых границ на топологию зеренной структуры. Метод ФП был использован в работе [24] для моделирования конкурентного роста зерен при направленной кристаллизации в трехмерной постановке с учетом физических и термодинамических условий. Модели на основе ФП также используется для моделирования процессов аддитивного производства. Например, для моделирования зеренной структуры в процессе многослойной порошковой наплавки в работах [25, 26]. Общей характеристикой данного класса моделей является неявное расположение границ фаз, прямой учет физических и термодинамических эффектов. Главным недостатком метода является высокая вычислительная нагрузка, что затрудняет его применение для моделирования реальных производственных процессов.

Наряду с методами Монте-Карло и фазового поля, широкое распространение получили клеточные автоматы, отличающиеся высокой вычислительной эффективностью. Одной из важнейших работ по применению клеточных автоматов (КА) для моделирования кристаллизации является статья [27]. Предложенная математическая модель учитывала процессы зарождения и роста зерен в зависимости от температуры переохлаждения в двумерной постановке в однородном поле температуры. В дальнейшем был предложен алгоритм децентрированного квадрата [6], который позволил сохранять форму зерна вне зависимости от формы ячеек в неоднородном температурном поле. Позже авторы [28] модифицировали модель для перехода в трехмерный случай, где зерна имели октаэдрическую оболочку. Для учета изменения температуры в статье [29] была предложена сопряженная модель клеточного автомата и метода конечных элементов (МКЭ). Эта модификация позволила описывать переход от столбчатых зерен к равноосным. Для предсказания морфологии зеренной структуры латунных сплавов в процессе горизонтального непрерывного литья была разработана модель на основе метода конечных разностей (МКР) и клеточных автоматов [30].

Результаты расчетов показали хорошее соответствие экспериментальным данным. В работе [31] совмещенная модель МКЭ и клеточных автоматов позволила проанализировать влияние параметров литья на формирование структуры изделия.

С помощью клеточных автоматов можно описывать такие сложные процессы, как рекристаллизация. В работе [32] с использованием метода клеточных автоматов была разработана модель, позволяющая учитывать пространственную неоднородность металлов. Результаты моделирования согласуются как с известной моделью JMAK, так и с экспериментальными данными. Статья [33] содержит подробную теоретическую основу процесса рекристаллизации и формализации клеточных автоматов. Разработанная в статье модель включала МКЭ для вычисления плотности дислокаций, затем эти значения передавались в качестве входных данных для метода клеточных автоматов.

Для моделирования зеренной структуры в процессах аддитивного производства и сварки методом клеточных автоматов, как правило, используют различные численные методы, с помощью которых происходит вычисление температурного поля внутри ванны расплава. Многоуровневая модель [34], сочетающая методы клеточных автоматов и фазового поля позволила описывать эволюцию зеренной структуры в процессе лазерной сварки как на масштабе зерен, так и на масштабе дендритов. В статье [35] для более точного описания зеренной структуры в процессах аддитивного производства и литья была разработана многосеточная модель на основе клеточных автоматов. Расчетная область разбивалась на две сетки: грубую и тонкую. Вложенная тонкая сетка вводилась для описания формы раздела фаз. Работа [36] посвящена моделированию перехода от столбчатой к равноосной структуре при затвердевании литого слитка алюминиевого сплава с помощью совмещенной модели МКР и клеточных автоматов. Были сделаны выводы о влиянии параметров скорости охлаждения и плотности зародышей на структуру материала. Модель, сочетающая метод решеточных уравнений Больцмана и клеточные автоматы, была разработана в статье [37]. Особое внимание уделено росту дендритов, образованию газовых пор и их взаимодействию. Для описания процессов внутри ванны расплава, которые возникают в процессе лазерного плавления порошка, был применен подход вычислительной гидродинамики в работе [38], модель формирования зеренной структуры включала алгоритм смещенного октаэдра. Двумерное моделирование процесса селективного электронно-лучевого плавления порошка было проведено в статье [39]. Эволюция температуры внутри ванны расплава описывалась методом решеточных уравнений Больцмана, а процесс роста зерен методом клеточных автоматов. Процесс случайного зарождения зерен внутри расплава в работе не рассматривался. Для учета случайной нуклеации в ходе аддитивного производства авторами [40] было предложено разделение зарождения на объемное и поверхностное. Результаты численных экспериментов показали влияние максимальной плотности зародышей на зеренную структуру. Для повышения вычислительной эффективности трехмерных клеточных автоматов для моделирования зеренной структуры в статье [41] была предложена схема параллельных вычислений. Для описания затвердевания сплава стали в процессе селективного плавления порошка в работе [42] была предложена. сопряженная модель метода гидродинамики сглаженных частиц и клеточных автоматов.

Высокая вычислительная эффективность клеточных автоматов, возможность их естественной параллелизации и простота интеграции с другими численными методами делают этот подход обоснованным для построения двумерной модели кристаллизации и её дальнейшего расширения до трехмерной постановки.

Постановка задачи и методика расчетов

Поскольку конечная цель исследования заключается в создании программного комплекса, объединяющего модель кристаллизации с уже реализованной моделью тепломассопереноса для описания процессов проволочной наплавки металлов, а проведённый анализ доступных методов показал, что метод клеточных автоматов является наиболее подходящим для моделирования процесса кристаллизации, работа была структурирована на последовательные этапы.

Таким образом, целью данной работы является разработка и верификация двумерной математической модели процесса кристаллизации на основе метода клеточных автоматов, служащей основой для последующего перехода к трехмерной постановке и дальнейшей интеграции с моделью тепломассопереноса, реализованной методом гидродинамики сглаженных частиц.

В рамках настоящей работы решаются следующие задачи:

1. Разработка и верификация двумерной модели кристаллизации на основе клеточных автоматов;
2. Апробация и калибровка модели на сплаве Al7Si для проверки корректности алгоритмов;
3. Количественный анализ влияния ключевых технологических параметров (скорости охлаждения и параметров нуклеации) на формирование зеренной структуры.

В рамках метода клеточных автоматов область моделирования дискретизируется посредством равномерной сетки, состоящей из клеток, каждая из которых характеризуется конечным набором состояний и взаимодействуют с соседними клетками. В данной работе используется топология Фон Неймана с четырьмя соседями. Эволюция системы происходит синхронно на основе текущего состояния клетки и состояния соседей.

Индекс состояния принимает значение 0 для клетки в жидком состоянии и 1 для клетки в твердом состоянии. Переход из одного состояния в другое определяется алгоритмами зарождения и роста. Помимо этого, каждая клетка характеризуется ориентацией кристаллографической решетки зерна, к которому она принадлежит. Само зерно представляется в виде квадратной оболочки, образованную направлениями роста дендритов. Ориентация кристаллографической решетки зерна в двумерной постановке определяется углом θ (рад) между направлением <100> и осью $\boldsymbol{x}$ в лабораторной системе координат. Лабораторная система координат задается явно: ось x направлена слева направо вдоль ширины расчётной области, ось y – снизу вверх.

Модель зарождения

Процесс зарождения зерен будет иметь стохастический характер и подразделяться на 2 этапа: на поверхности и внутри расплава. Случайный характер зарождения задается с помощью нормального распределения плотности центров нуклеации в зависимости от переохлаждения ΔT [27]:

$$\frac{dn}{d(\Delta T)} = \frac{n_{\max}}{\sqrt{2\pi}\Delta T_\sigma} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta T - \Delta T_N}{\Delta T_\sigma}\right)^2\right], \quad (1)$$

где dn – приращение плотности источников зарождения, $n_{\max}$ – максимальная плотность источников зарождения, ΔT_σ – стандартное отклонение переохлаждения, ΔT_N – критическая температура зарождения (средняя температура переохлаждения, при которой начинается зарождение новых зерен). Так как на границах новые зерна будут образовываться раньше, чем внутри расплава, в данной работе будет использовано 2 распределения для моделирования зарождения в этих зонах: $dn_v/d(\Delta T)$ и $dn_s/d(\Delta T)$. Индекс v обозначает распределение для клеток внутри расплава, индекс s – для клеток на поверхности. Эти распределения будут отличаться параметрами ΔT_N и $n_{\max}$. С помощью распределения (1) вычисляется прирост центров зарождения за шаг по времени:

$$\delta n = \int_{\Delta T}^{\Delta T + \delta(\Delta T)} \frac{dn}{d(\Delta T)} d(\Delta T). \quad (2)$$

Для каждой жидкой клетки выбирается случайное число ξ в диапазоне от 0 до 1, затем это число сравнивается с вероятностью зарождения, найденной по формуле:

$$P_n = \min\{1, \delta n S_{cell}\}, \quad (3)$$

где S_{cell} – площадь клетки. Если $P_n > \xi$, то данная клетка меняет индекс состояния на 1, ей присваивается случайный угол разориентации зерна $\theta \in \left(-\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4}\right)$.

Модель роста

Процесс роста зерна моделируется путем увеличения длины квадратной оболочки зерна с учетом кинетики роста дендритного кончика [6]:

$$L_i(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{t_i}^{t} v\big(\Delta T_i(\tau)\big) d\tau, \quad (4)$$

где L_i и $v(\Delta T_i)$ – половина стороны оболочки и скорость роста дендритного кончика i-го зерна соответственно. Скорость дендритного кончика для разных металлов и сплавов может быть аппроксимирована полиномом на основе модели LGK (Lipton, Glicksman, Kurz)[43]. В данной работе будет использована аппроксимация зависимости скорости дендритного кончика от переохлаждения вида [40]:

$$v(\Delta T) = a(\Delta T)^2 + b(\Delta T)^3, \quad (5)$$

где a и b являются коэффициентами.

Для сохранения первоначальной ориентации зерна используется метод децентрированного квадрата [6]. Оболочка зерна растет до тех пор, пока не захватит всех своих ближайших незахваченных соседей. После этого захваченные ячейки наследуют ориентацию «клетки-захватчика» и в них создаются новые оболочки по алгоритму децентрированного квадрата:

1. Для захваченной ячейки (обозначена точкой j на рис. 1) выбирается ближайший угол оболочки родительского зерна.

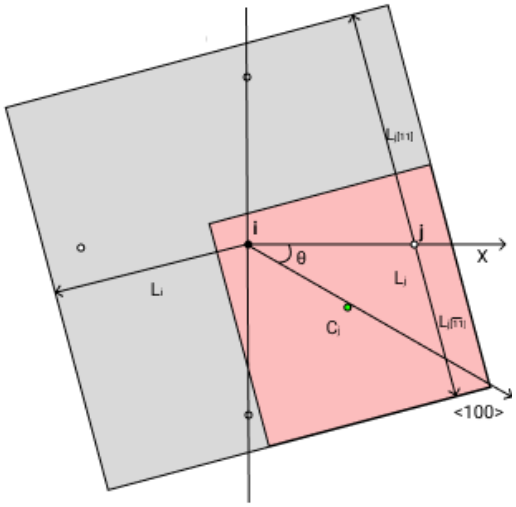


Рис. 1. Схема захвата соседнего зерна
Fig. 1. Neighboring grain capture scheme

2. Вычисляются расстояния L_{11} и $L_{\overline{11}}$ от центра ячейки до противоположных сторон.

3. Чтобы предотвратить чрезмерный рост новая оболочка ограничивается размером дискретизации: $L_j = \frac{1}{2}\left[\min\left(L_{[11]}, \sqrt{2}l_{cell}\right) + \min\left(L_{\overline{[11]}}, \sqrt{2}l_{cell}\right)\right]$. Созданная оболочка выделена красным цветом на рис. 1.

4. Относительно выбранного угла вычисляются координаты центра новой оболочки C_j (на рис. 1 обозначен зеленой точкой).

Алгоритм модели

Алгоритм моделирования эволюции зеренной структуры можно разбить на следующие этапы:

1. Инициализация расчетной области. Область моделирования имеет квадратную форму с размерами 5 мм. Изначально все клетки будут иметь индекс состояния, равный 0, и температуру, равную температуре ликвидуса рассматриваемого сплава.

2. Обновление температурного поля. Так как размеры моделируемой области малы, можно принять гипотезу об однородном температурном поле. Процесс остывания будет описываться с помощью постоянной скорости охлаждения $\dot{T}$. На каждом временном шаге Δt значения температуры в каждой ячейке T_i будет обновляться по правилу:

$$T_i^{t+1} = T_i^t - \dot{T}\Delta t. \quad (6)$$

Затем вычисляется температура локального переохлаждения в клетке:

$$\Delta T_i^{t+1} = T_{liquidus} - T_i^{t+1}. \quad (7)$$

3. Процесс зарождения. Для каждой клетки, находящейся в жидком состоянии, вычисляется вероятность зарождения по формулам (1)–(3) и генерируется случайное число $\xi \in [0, 1]$. Если вероятность зарождения превышает число ξ, то клетка становится центром зарождения нового зерна с произвольной ориентацией $\theta \in \left(-\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4}\right)$.

4. Процесс роста. Для всех клеток в твердом состоянии, у которых имеются свободные соседи (находящиеся в жидком состоянии), вычисляется длина оболочки зерна по формулам (4)–(5). После этого осущест-

вляется проверка попадания свободных соседей внутрь оболочки растущего зерна. В случае, если свободные клетки попали внутрь оболочки, происходит процесс захвата по алгоритму децентрированного квадрата. Захваченные клетки наследуют ориентацию захватившего их зерна, меняют индекс состояния на 1 и в них создается новая оболочка с длиной L_j и центром C_j.

Шаги алгоритма повторяются до тех пор, пока все клетки области моделирования не перейдут в твердое состояние. На рис. 2 изображена блок-схема описанного выше алгоритма.

Для реализации алгоритма был выбран язык программирования Python. Использование библиотеки NVIDIA Warp, позволяющей использовать графические ускорители для вычислений, позволило увеличить производительность: время одного численного эксперимента уменьшилось в десятки раз по сравнению с ЦПУ-реализацией. Инициализация начальных данных для численного эксперимента выполняется на ЦПУ в виде массива структур, который затем передается на ГПУ. Помимо информации о клетках, при инициализации генерируется дискретный набор возможных ориентаций зародышей.

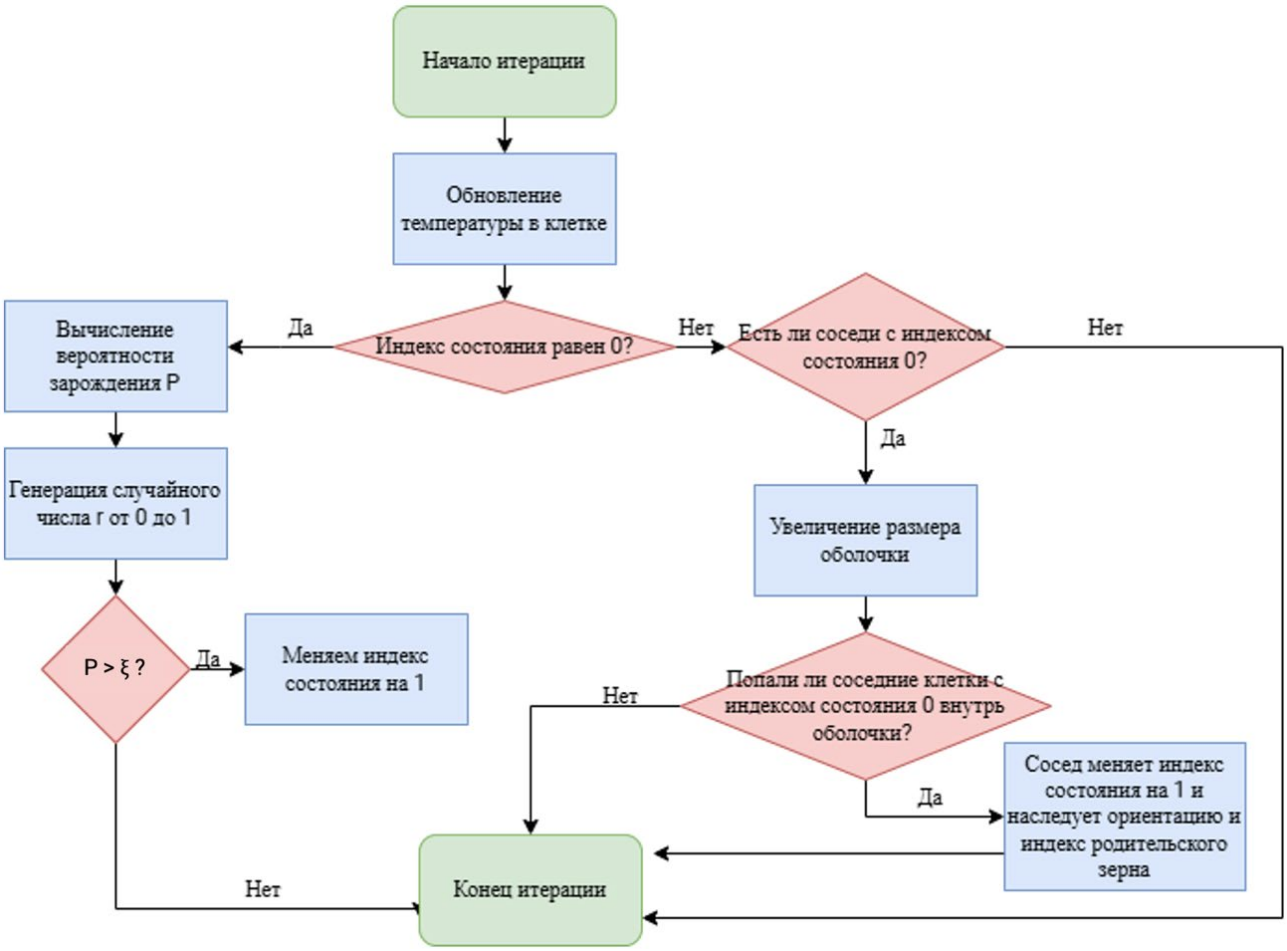


Рис. 2. Алгоритм модели кристаллизации
Fig. 2. Crystallization model algorithm

Результаты моделирования

С помощью представленной математической модели была проведена серия численных экспериментов, описывающих процесс затвердевания сплава Al7Si. Параметры материала представлены в табл. 1. Во всех расчетах использовалась двумерная решетка 300×300 клеток, размер ячейки клеточного автомата $l_{cell} = 40$ мкм.

Таблица 1 / Table 1

Параметры сплава Al7Si [41]
Al7Si[41] alloy parameters

Температура ликвидус T_{liq}, К	a, $\frac{м}{с \cdot К^2}$	b, $\frac{м}{с \cdot К^3}$
893	$2{,}9 \cdot 10^{-6}$	$1{,}49 \cdot 10^{-6}$

Для иллюстрации работы реализованной модели проведена серия численных экспериментов. На рис. 3 показаны стадии процесса эволюции зеренной структуры в различные моменты времени. На ранней стадии наблюдается рост столбчатых зерен, идущих от стенок области (рис. 3, *a*). Зародыши внутри расплава в данный момент отсутствуют, так как температура переохлаждения для их образования еще не достигнута. В следующий рассматриваемый момент времени внутри расплава сформировались равноосные зёрна. Сформировавшаяся зёренная структура изображена на рис. 3, *c*. Центральная часть области заполнена крупными равноосными зернами, которые оттеснили рост вытянутых столбчатых зерен.

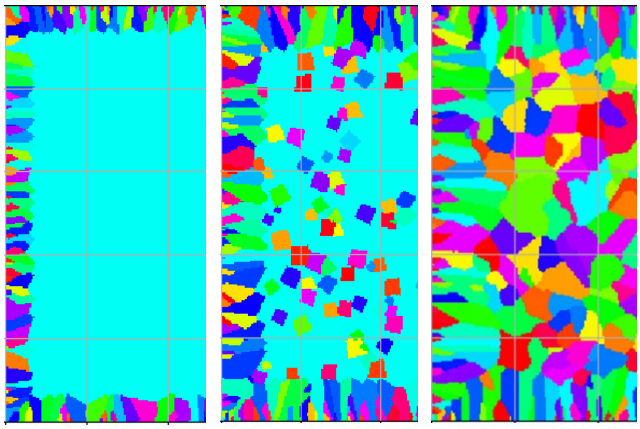


Рис. 3. Эволюция зеренной структуры сплава Al7Si в различные моменты времени t при скорости охлаждения $\dot{T} = 3$ К/с
Fig. 3. Evolution of the grain structure of the Al7Si alloy at various time points t at a cooling rate of $T = 3$ K/s

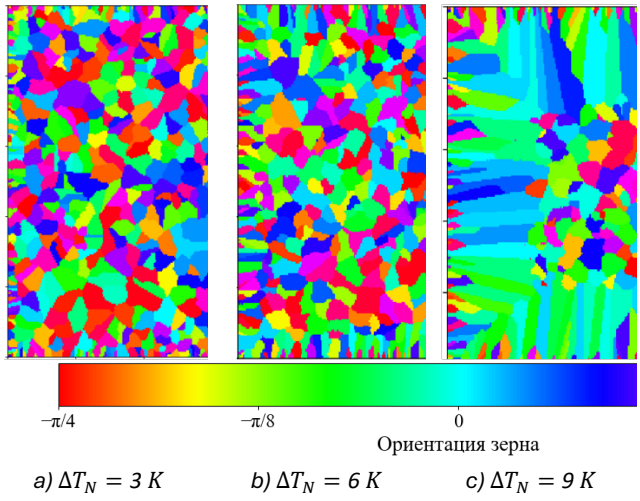


Рис. 4. Влияние критической температуры зарождения ΔT_N внутри расплава на конкуренцию столбчатых и равноосных зерен
Fig. 4. Influence of the critical nucleation temperature ΔT_N inside the melt on the competition of columnar and equiaxed grains

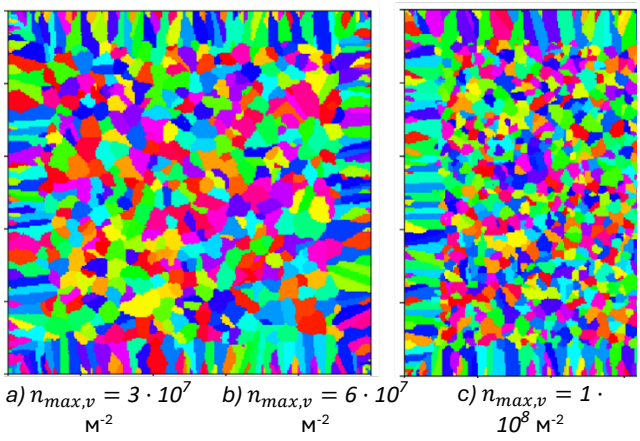


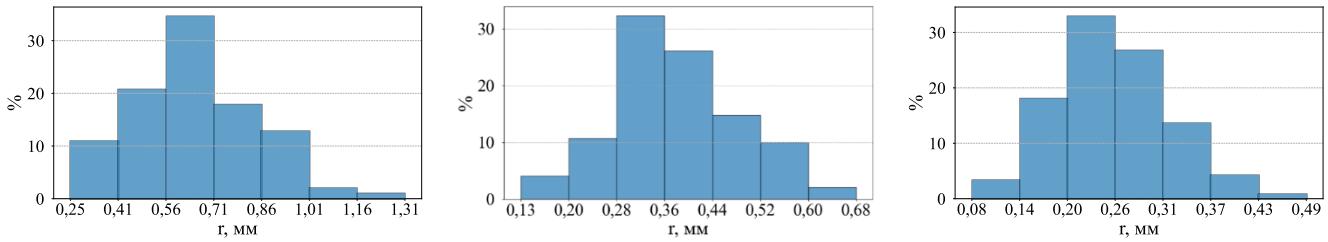
Рис. 5. Зеренная структура при различных значениях параметра максимальной плотности источников зарождения при $\dot{T} = 3$ К/с и $\Delta T_{N,v} = 7$ К
Fig. 5. Grain structure at different values of the parameter of the maximum density of nucleation sources at $\dot{T} = 3$ K/s и $\Delta T_{N,v} = 7$ K

Для проверки способности модели воспроизводить различные сценарии конкурентного роста столбчатых и равноосных зёрен были проведены тестовые расчеты с вариацией параметра средней температуры образования зародышей внутри расплава (ΔT_N). Данный параметр напрямую влияет на конкуренцию между столбчатыми и равноосными зернами. На рис. 4 изображена сформировавшаяся зеренная структура при различных значениях параметра ΔT_N. При увеличении критической температуры объёмного зарождения зона столбчатых зёрен расширяется, что согласуется с классической теорией [2]: для активации объёмного зарождения требуется большее переохлаждение, поэтому фронт столбчатых зерен продвигается вглубь образца. В процессе конкуренции столбчатых зерен выигрывают те, которые имеют более близкую к оси ***x*** в лабораторной системе координат ориентацию (цвета, соответствующие промежутку угла ориентаций от -0,2 радиан до 0,2 радиан). Данное наблюдение доказывает способность модели учитывать анизотропию, характерную для рассматриваемого сплава.

Другим важным этапом проверки модели стала вариация параметра максимальной плотности источников зарождения зерен внутри расплава $n_{max,v}$ при постоянных значениях скорости охлаждения $\dot{T}$, критической температуры зарождения зерен $\Delta T_{N,v}$ и максимальной плотности источников зарождения на границах $n_{max,s}$. На рис. 5 показана сформировавшаяся зёренная структура при различных значениях $n_{max,v}$. Полученные результаты показывают, что увеличение параметра максимальной плотности источников напрямую влияет на увеличение общего числа зёрен, а следовательно, приводит к уменьшению среднего размера зерна.

Для верификации разработанной математической модели были проведены численные эксперименты по моделированию процесса кристаллизации расплава при различной скорости охлаждения. На рис. 6 изображены гистограммы по среднему размеру равноосных зерен r. В данной работе под средним размером зерна понимается эквивалентный радиус окружности, полученный на основе данных о площади равноосного зерна.

Результаты моделирования сравнивались с результатами натурных экспериментов из работы [44] по среднему размеру равноосного зерна. Скорость охлаждения $\dot{T}$ изменялась в диапазоне от 0,7 до 9 К/с. При этом наблюдалось значительное уменьшение размера зерна от 0,67 мм при $\dot{T} = 0{,}7$ К/с до 0.242 мм при $\dot{T} = 9$ К/с. Параметры модели, используемые в численных экспериментах, представлены в табл. 2.



a) $\dot{T} = 0{,}2$ К/с *b)* $\dot{T} = 1{,}5$ К/с *c)* $\dot{T} = 9$ К/с

Рис. 6. Гистограмма распределения размеров зерен при различных скоростях охлаждения
6. Histogram of grain size distribution at different cooling rates

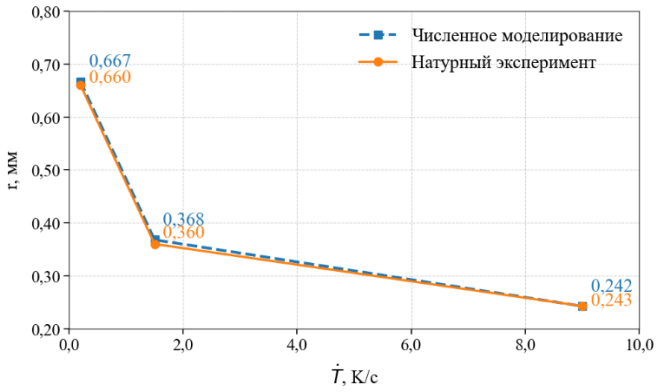


Рис. 7. Сравнение результатов моделирования и натурного эксперимента
Fig. 7. Simulation and field experiment results comparison

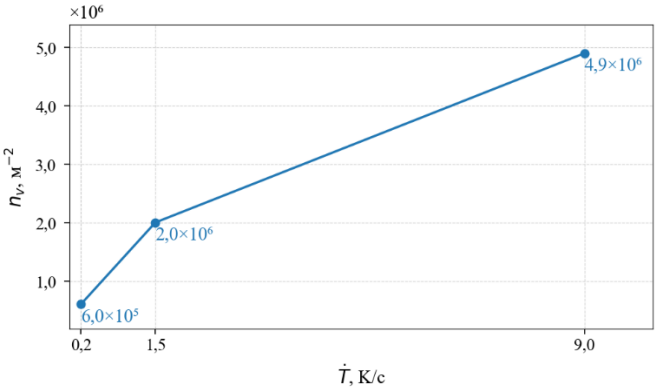


Рис. 8. Зависимость параметра максимальной плотности источников зарождения от скорости охлаждения
Fig. 8. Dependence of the parameter of the maximum density of nucleation sources on the cooling rate

Таблица 2 / Table 2

Параметры модели и численной схемы
Model parameters and numerical scheme

$n_{max,s}$, м$^{-1}$	$\Delta T_{N,s}$, К	$\Delta T_{N,v}$, К	ΔT_{σ}, К	Δx, мкм	Δt, с
$2 \cdot 10^4$	0,5	2	0,1	40	0,005

Сравнение результатов численного и натурного экспериментов представлено на рис. 7. Отмечается хорошее соответствие между расчетными и экспериментальными значениями среднего размера зерна (расхождение не более 2,3 %), что подтверждает корректность используемых в модели механизмов зарождения и роста зерен.

Уменьшение размера зерна вызвано повышением интенсивности зарождения новых зерен при более высоких скоростях охлаждения. Для обеспечения соответствия расчётных данных экспериментальным результатам была проведена параметрическая настройка модели, в ходе которой варьировался коэффициент максимальной плотности центров зарождения внутри расплава $n_{\max,v}$. На рис. 8 представлена зависимость $n_{\max,v}$ от скорости охлаждения $\dot{T}$, полученная в результате калибровки модели по экспериментальным данным из работы [44]. Видно, что увеличение скорости охлаждения сопровождается ростом максимальной плотности источников нуклеации, что соответствует физической природе процесса переохлаждения расплава. Данную зависимость можно аппроксимировать функцией $n_{\max,v} = A\dot{T}^m$, где $A = 1{,}5 \cdot 10^6$, $m = 0{,}55$.

При низкой скорости охлаждения ($\dot{T} = 0{,}2$ К/с) плотность центров зарождения составляет $0{,}6 \cdot 10^6$ м$^{-2}$, что означает малое число зародышей и формирование крупной зеренной структуры. С увеличением скорости охлаждения до 9 К/с параметр $n_{\max,v}$ возрастает до $4{,}9 \cdot 10^6$ м$^{-2}$. Таким образом, варьирование параметра $n_{\max,v}$ позволило достичь высокой степени соответствия между численными и экспериментальными зависимостями среднего размера зёрен от скорости охлаждения. Полученные значения демонстрируют, что модель адекватно описывает влияние переохлаждения не только на кинетику роста, но и на интенсивность зарождения, что обеспечивает её физическую обоснованность и предсказательную способность при различных условиях кристаллизации.

Для проверки сходимости реализованной математической модели по шагу времени была проведена серия численных экспериментов с постоянными значениями параметров, которые приведены в табл. 2. Для каждого значения шага по времени Δt проводилось несколько независимых расчетов, по результатам которых определялись средний эквивалентный размер зерна и разброс значений. Сходимость решения оценивалась по изменению среднего размера зерна между соседними значениями шага Δt и по величине статистического разброса внутри каждой серии расчетов.

Показано, что в диапазоне малых шагов по времени (Δt = 0,025; 0,0125; 0,00625; 0,003125 с) средний размер зерна изменяется в пределах (порядка 0,35–0,37 мм), а невязка между соседними значениями шага не превышает 0,015 мм и далее уменьшается до ≈ 0,001 мм при стандартном отклонении не более 0,02 мм. При увеличении шага до Δt = 0,05–0,2 с средний размер зерна изменяется существенно, а невязка между соседними значениями достигает 0,2–0,25 мм, что указывает на потерю сходимости и задаёт верхнюю границу допустимого шага по времени на уровне $\Delta t \lesssim 0{,}025$ с.

Заключение

В представленной работе разработана математическая модель процесса кристаллизации сплава с использованием метода клеточных автоматов. Исследование представляет собой начальный этап разработки программного комплекса для сопряженного моделирования процессов тепломассопереноса и эволюции микроструктуры при проволочной наплавке металлов.

Разработанная математическая модель включает стохастическое зарождение, учитывающее поверхностное и объемное зарождение. Для корректного описания роста зерен использовался метод децентрированного квадрата, что позволило корректно воспроизводить ориентацию зерен в процессе их роста. Также было выполнено исследование сходимости по шагу времени, показавшее, что устойчивое воспроизведение распределения размеров зерен достигается только при значениях временного шага $\Delta t \lesssim 0{,}025$ с. В ходе численных экспериментов установлено, что критическая температура объемного зарождения $\Delta T_{N,v}$ является ключевым параметром, определяющим переход от столбчатой к равноосной структуре: увеличение $\Delta T_{N,v}$ с 3 К до 9 К приводит к значительному расширению зоны столбчатых зерен. Показано, что в условиях конкурентного роста преимущество получают зерна с благоприятной ориентацией. Это свойство позволяет корректно учитывать кристаллографическую анизотропию рассматриваемого материала.

Важным практическим результатом стало установление количественных связей между технологическими параметрами и характеристиками зеренной структуры. Установлено, что увеличение скорости охлаждения приводит к уменьшению среднего радиуса зерна с 667 мкм до 243 мкм и росту максимальной плотности зародышей $n_{\max,v}$ с $0{,}6 \cdot 10^6$ до $4{,}9 \cdot 10^6$ м$^{-2}$. Получена аппроксимация зависимости максимальной плотности зародышей внутри расплава от скорости охлаждения, что позволяет адаптировать данный параметр под заданные условия охлаждения.

Таким образом, разработанная и верифицированная модель позволяет не только качественно, но и количественно прогнозировать зеренную структуру сплава Al7Si при различных условиях кристаллизации. Установленные зависимости между скоростью охлаждения, плотностью зародышей и итоговыми характеристиками структуры могут быть использованы для оптимизации технологических процессов, таких как литье и аддитивное производство, где требуется контроль над механическими свойствами через управление микроструктурой.

На основе полученных результатов планируется переход к разработке трехмерной модели кристаллизации на основе клеточных автоматов и ее верификация на ряде сплавов. В дальнейшем предполагается интеграция этой модели с существующей моделью проволочной наплавки для сопряженного моделирования тепломассопереноса и формирования зеренной структуры.

Библиографический список

1. Трусов П.В., Останина Т.В., Швейкин А.И. Эволюция зеренной структуры металлов и сплавов при интенсивном пластическом деформировании: многоуровневые модели // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2022. – № 2. – С. 114–146. doi: 10.15593/perm.mech/ 2022.2.11
2. Thermal behavior and grain growth orientation during selective laser melting of Ti-6Al-4V alloy / Yin J. [et al.] // Journal of Materials Processing Technology. – 2018. – Vol.260. – pp. 57-65.
3. Альмяшева О. В. Новые подходы к проблеме зародышеобразования: учебное пособие / О.В. Альмяшева, О.В. Проскурина, А.А. Красилин, В.В. Гусаров. – СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2015. – 79 с.
4. Толочко Н.К., Андрушевич А.А. Методы получения мелкозернистой структуры отливок при кристаллизации // Литье и металлургия. – 2012. – №2. – С. 27-31.
5. Быкова П.О. Формирование структуры при кристаллизации материала: методическое пособие к практическим занятиям по дисциплине «Материаловедение» / П.О. Быкова; Перм. нац. исслед. политехн. ун-т. – Пермь, 2015. – 18 с.
6. Gandin Ch.-A., Rappaz M. A coupled finite element-cellular automaton model for the prediction of dendritic grain structures in solidification process // Acta metall. mater. – 1994. – Vol. 42, No. 7. – pp. 2233-2246.
7. Ильиных, А.В. Многоцикловая усталость при растяжении и кручении алюминиевого сплава AlSi10Mg, полученного методом селективного лазерного сплавления / А.В. Ильиных, А.М. Паньков, А.В. Лыкова // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2024. – № 4. – С. 14–25. doi: 10.15593/perm.mech/2024.4.02
8. Zhi Y., Jiang Y., Ke D., Hu X., Liu X. Review on cellular automata for microstructure simulation of metallic materials // Materials. – 2024. – Vol. 17. – Art. 1370. doi: 10.3390/ma17061370
9. Blikstein P., Tschiptschin A.P. Monte Carlo simulation of grain growth // Materials Research. – 1999. – Vol. 2, No. 3. – pp. 133-137.
10. Huang C.M., Joanne C.L., Patnaik B.S.V., Jayaganthan R. Monte Carlo simulation of grain growth in polycrystalline materials // Applied Surface Science. – 2006. – Vol. 252. – pp. 3997-4002.
11. Saito Y., Enomoto M. Monte Carlo simulation of grain growth // ISIJ International. – 1992. – Vol. 32, No. 3. – pp. 267-274.
12. Ivashihin O.M., Shevchenko S.V., Vasiliev N.L., Semiatin S.L. 3D Monte Carlo simulation of texture-controlled grain growth // Acta Materialia. – 2003. – Vol. 51. – pp. 1019-1034.
13. Rodgers T.M., Madison J.D., Tikare V., Maguire M.C. Predicting mesoscale microstructural evolution in electron beam welding // JOM. – 2016. – Vol. 60. – pp. 1419-1426. doi: 10.1007/s11837-016-1863-8
14. Nosonovsky M., Zhang X., Esche S.K. Scaling of Monte Carlo simulations of grain growth in metals // Modeling Simul. Mater. Sci. Eng. – 2009. – Vol. 17. – Art. 025004. doi:10.1088/0965-0393/17/2/025004
15. Wei H.L., Elmer J.W., DebRoy T. Crystal growth during keyhole mode laser welding // Acta Materialia. – 2017. – Vol. 133. – pp. 10-20. doi: 10.1016/j.actamat.2017.04.074

16. Zhi Y., Jiang Y., Ke D., Hu X., Liu X. Review on cellular automata for microstructure simulation of metallic materials // Materials. – 2024. – Vol. 17, No. 6. – pp.1370. doi: 10.3390/ma17061370

17. Chen L.-Q. Phase-field models for microstructure evolution // Annual review of materials research. – 2002. – Vol. 32. – pp. 113-140. doi: 10.1146/annurev.matsci.32.112001.132041

18. Karma A., Rappel W.-J. Quantitative phase-field modeling of dendritic growth in two and three dimensions // Physical Review E. – 1998. – Vol. 57, No. 4. – pp. 4323-4329.

19. Provatas N., Dantzig J.A., Athreya B., Chan P., Stefanovic P., Goldenfeld N., Elder K.R. Using the phase-field crystal method in the multi-scale modeling of microstructure evolution // JOM. – 2007. – Vol. 59. – pp. 83-90. doi: 10.1007/s11837-007-0095-3

20. Krill C.E., Chen L.-Q. Computer simulation of 3-D grain growth using a phase-field model // Acta Materialia. – 2002. – Vol. 50. – pp. 3057-3073.

21. Miyoshi E., Takaki T., Ohno M., Shibuta Y., Sakane S., Shimokawabe T., Aoki T. Ultra-large-scale phase-field simulation study of ideal grain growth // npj Computational materials. – 2017. – Vol. 3. – pp. 1-6. doi:10.1038/s41524-017-0029-8

22. Liu Y., Militzer M., Perez M. Phase-field modeling of abnormal grain growth // Materials. – 2019. – Vol. 12, No. 24. – Art. 4048. doi: 10.3390/ma12244048

23. Staublin P., Mukherjee A., Warren J.A., Voorhees P.W. Phase-field model for anisotropic grain growth // Acta Materialia. – 2022. – Vol. 237. – Art. 118169. doi: 10.1016/j.actamat.2022.118169

24. Takaki T., Sakane S., Ohno M., Shibuta Y., Aoki T., Gandin C.-A. Competitive grain growth during directional solidification of a polycrystalline binary alloy: Three-dimensional large-scale phase-field study // Materialia. – 2018. – Vol. 1. – pp. 104-113. doi: 10.1016/j.mtla.2018.05.002

25. Yang M., Wang L., Yan W. Phase-field modeling of grain evolutions in additive manufacturing from nucleation, growth, to coarsening // npj computational materials. – 2021. – Vol. 7. – Art. 56. doi:10.1038/s41524-021-00524-6

26. Lu L.-X., Sridhar N., Zhang Y.-W. Phase field simulation of powder bed-based additive manufacturing // Acta Materialia. – 2018. – Vol. 144. – pp. 801-809. doi: 10.1016/j.actamat.2017.11.033

27. Rappaz M., Gandin Ch.-A. Probabilistic modelling of microstructure formation in solidification processes // Acta metall. mater. – Vol. 41, No. 2. – pp. 345-360.

28. Gandin Ch.-A., Rappaz M. A 3d cellular automaton algorithm for the prediction of dendritic grain growth // Acta metall. mater. – Vol. 45, No. 5. – pp. 2187-2195.

29. Gandin Ch.-A., Rappaz M., Desbiolles J.-L., Thevoz P. A three-dimensional cellular automaton - finite element model for the prediction of solidification grain structures // Metallurgical and Materials Transactions A. – 1999. – Vol. 30, No. 12. – pp. 3153-3165. doi:10.1007/ s11661-999-0226-2

30. Tsai D.-C., Hwang W.-S. A three dimensional cellular automaton model for the prediction of solidification morphologies of brass alloy by horizontal continuous casting and its experimental verification // Materials Transactions. – 2011. – Vol. 52, No. 4. – pp. 787-794. doi:10.2320/matertrans.M2010402

31. Bai C.-F., Wang B., Ma J., Zhang J.-Y., Pan W.-P. Modeling effect of cooling conditions on solidification process during thermal cycle of rollers in twin-roll strip casting // Journal of Iron and Steel Research International. – 2023. – Vol. 30. – pp. 64-73. doi:10.1007/s42243-022-00822-3

32. Hesselbarth H.W., Gobel I.R. Simulation of recrystallization by cellular automata // Acta metall. mater. – 1991. – Vol. 39, No. 9. – pp. 2135-2143.

33. Raabe D. Recrystallization Simulation by Use of Cellular Automata // Handbook of Materials Modeling. – 2005. – pp. 2173-2203.

34. Tan W., Shin Y.C. Multi-scale modeling of solidification and microstructure development in laser keyhole welding process for austenitic stainless steel // Computational Materials Science. – 2015. – Vol. 98. – pp. 446-458. doi:10.1016/j.commatsci.2014.10.063

35. Yu Y., Li Y., Lin F., Yan W. A multi-grid Cellular Automaton model for simulating dendrite growth and its application in additive manufacturing // Additive Manufacturing. – 2021. – Vol. 47. – Art. 102284. doi:10.1016/ j.addma.2021.102284

36. Zhang H., Nakajima K., Wu R., Wang Q., He J. Prediction of solidification microstructure and columnar-to equiaxed transition of Al-Si alloy by two-dimensional cellular automaton with “decentred square” growth algorithm // ISIJ International. – 2009. – Vol. 49. – pp. 1000-1009.

37. Lee W., Bae J., Lee H., Kang S.-H., Yoon J. Numerical simulation of dendritic growth and porosity evolution in solidification of Al-Cu alloy with lattice Boltzmann – Cellular automata method // Journal of Alloys and Compounds. – 2022. – Vol. 929. Art. 167233. doi:10.1016/j.jallcom.2022.167233

38. Zhang Y., Zhang J. Modeling of solidification microstructure evolution in laser powder bed fusion fabricated 316L stainless steel using combined computational fluid dynamics and cellular automata // Additive Manufacturing. – 2019. – Vol. 28. – pp. 750-765. doi:10.1016/j.addma.2019.06.024

39. Rai A., Helmer H., Korner C. Simulation of grain structure evolution during powder bed based additive manufacturing // Additive Manufacturing. – 2017. – Vol. 13. – pp. 124-134. doi:10.1016/j.addma.2016.10.007

40. Li X., Tan W. Numerical investigation of effects of nucleation mechanisms on grain structure in metal additive manufacturing // Computational Materials Science. – 2018. – Vol. 153. – pp. 159-169. doi:10.1016/j.commatsci.2018.06.019

41. Lian Y., Lin S., Yan W., Liu W.K., Wagner G.J. A parallelized three-dimensional cellular automaton model for grain growth during additive manufacturing // Computational Mechanics. – 2018. – Vol. 61. – pp. 543-558. doi:10.1007/s00466-017-1535-8

42. Ma J., Niu X., Zhou Y., Li W., Liu Y., Shen M., Wang H., Cheng W., You Z. Simulation of solidification microstructure evolution of 316L stainless steel fabricated by selective laser melting using a coupled model of smooth particle hydrodynamics and cellular automata // Journal of Materials Research and Technology. – 2023. – Vol. 27. – pp. 600-616. doi:10.1016/j.jmrt.2023.09.296

43. Lipton J., Glicksman M.E., Kurz W. Dendritic growth into undercooled alloy melts // Materials Science and Engineering. – 1984. – Vol. 65. – pp. 57-63.

44. Li L., Li D., Feng J., Zhang Y., Kang Y. Effect of cooling rates on the microstructure and mechanical property of La modified Al7SiMg alloys processed by gravity die casting and semi-solid die casting // Metals. – 2020. – Vol. 10. – Art. 549. https://doi.org/10.3390/met10040549

References

1. Trusov P.V., Ostanina T.V., Shveykin A.I. Evolyutsiya zernennoi struktury metallov i splavov pri intensivnom plasticheskom deformirovanii: mnogourovnevye modeli [Evolution of the grain structure of metals and alloys under intense plastic deformation: multilevel models]. PNRPU Mechanics Bulletin, 2022, Vol. 2, pp. 114-146. doi: 10.15593/perm.mech/2022.2.11

2. Thermal behavior and grain growth orientation during selective laser melting of Ti-6Al-4V alloy / Yin J. [et al.] // Journal of Materials Processing Technology. – 2018. – Vol.260. – pp. 57-65.

3. Almyasheva O.V., Proskurina O.V., Krasilin A.A., Gusarov V.V. Novye podkhody k probleme zarodysheobrazovaniya: uchebnoe posobie [New approaches to the problem of nucleation: a textbook]. St. Petersburg, SPbGTI(TU), 2015, 79 p.

4. Tolochko N.K., Andrushevich A.A. Metody polucheniya melkozernistoi struktury otlivok pri kristallizatsii [Methods for obtaining fine-grained structure of castings during crystallization]. *Litye i metallurgiya — Casting and Metallurgy*, 2012, No. 2, pp. 27-31.

5. Bykova P.O. Formirovanie struktury pri kristallizatsii materiala: metodicheskoe posobie k prakticheskim zanyatiyam po distsipline "Materialovedenie" [Structure formation during material crystallization: a practical guide for the discipline "Materials Science"]. Perm, Perm National Research Polytechnic University, 2015, 18 p.

6. Gandin Ch.-A., Rappaz M. A coupled finite element-cellular automaton model for the prediction of dendritic grain structures in solidification process // Acta metall. Mater, 1994 Vol. 42, No. 7, pp. 2233-2246.

7. Ilinykh A.V., Pankov A.M., Lykova A.V. High-Cycle Tensile and Torsional Fatigue of AlSi10Mg Aluminum Alloy Produced by Selective Laser Alloying. PNRPU Mechanics Bulletin, 2024, No. 4, pp. 14-25. doi: 10.15593/perm.mech/2024.4.02

8. Zhi Y., Jiang Y., Ke D., Hu X., Liu X. Review on cellular automata for microstructure simulation of metallic materials // Materials. – 2024. – Vol. 17. – Art. 1370. doi: 10.3390/ma17061370

9. Blikstein P., Tschiptschin A.P. Monte Carlo simulation of grain growth // Materials Research, 1999, 2 (3), pp. 133-137.

10. Huang C.M., Joanne C.L., Patnaik B.S.V., Jayaganthan R. Monte Carlo simulation of grain growth in polycrystalline materials // Applied Surface Science, 2006, Vol. 252, pp. 3997-4002.

11. Saito Y., Enomoto M. Monte Carlo simulation of grain growth // ISIJ International, 1992, Vol. 32, No. 3, pp. 267-274.

12. Ivashihin O.M., Shevchenko S.V., Vasiliev N.L., Semiatin S.L. 3D Monte Carlo simulation of texture-controlled grain growth // Acta Materialia, 2003, Vol. 51, pp. 1019-1034.

13. Rodgers T.M., Madison J.D., Tikare V., Maguire M.C. Predicting mesoscale microstructural evolution in electron beam welding // JOM, 2016, Vol. 60, pp. 1419-1426. doi: 10.1007/s11837-016-1863-8

14. Nosonovsky M., Zhang X., Esche S.K. Scaling of Monte Carlo simulations of grain growth in metals // Modeling Simul. Mater. Sci. Eng., 2009, Vol. 17, Art. 025004. doi:10.1088/0965-0393/17/2/025004

15. Wei H.L., Elmer J.W., DebRoy T. Crystal growth during keyhole mode laser welding // Acta Materialia, 2017, Vol. 133, pp. 10-20. doi: 10.1016/j.actamat.2017.04.074

16. Zhi Y., Jiang Y., Ke D., Hu X., Liu X. Review on cellular automata for microstructure simulation of metallic materials // Materials, 2024, Vol. 17, No. 6, pp.1370. doi: 10.3390/ma17061370

17. Chen L.-Q. Phase-field models for microstructure evolution // Annual review of materials research, 2002, Vol. 32, pp. 113-140. doi: 10.1146/annurev.matsci.32.112001.132041

18. Karma A., Rappel W.-J. Quantitative phase-field modeling of dendritic growth in two and three dimensions // Physical Review E, 1998, Vol. 57, No. 4, pp. 4323-4329.

19. Provatas N., Dantzig J.A., Athreya B., Chan P., Stefanovic P., Goldenfeld N., Elder K.R. Using the phase-field crystal method in the multi-scale modeling of microstructure evolution // JOM, 2007, Vol. 59, pp. 83-90. doi: 10.1007/s11837-007-0095-3

20. Krill C.E., Chen L.-Q. Computer simulation of 3-D grain growth using a phase-field model // Acta Materialia, 2002, Vol. 50, pp. 3057-3073.

21. Miyoshi E., Takaki T., Ohno M., Shibuta Y., Sakane S., Shimokawabe T., Aoki T. Ultra-large-scale phase-field simulation study of ideal grain growth // npj Computational materials, 2017, Vol. 3, pp. 1-6. doi:10.1038/s41524-017-0029-8

22. Liu Y., Militzer M., Perez M. Phase-field modeling of abnormal grain growth // Materials, 2019, Vol. 12, No. 24, Art. 4048. doi: 10.3390/ma12244048

23. Staublin P., Mukherjee A., Warren J.A., Voorhees P.W. Phase-field model for anisotropic grain growth // Acta Materialia, 2022, Vol. 237, Art. 118169. doi: 10.1016/j.actamat.2022.118169

24. Takaki T., Sakane S., Ohno M., Shibuta Y., Aoki T., Gandin C.-A. Competitive grain growth during directional solidification of a polycrystalline binary alloy: Three-dimensional large-scale phase-field study // Materialia, 2018, Vol. 1, pp. 104-113. doi: 10.1016/j.mtla.2018.05.002

25. Yang M., Wang L., Yan W. Phase-field modeling of grain evolutions in additive manufacturing from nucleation, growth, to coarsening // npj computational materials, 2021, Vol. 7, Art. 56. doi:10.1038/s41524-021-00524-6

26. Lu L.-X., Sridhar N., Zhang Y.-W. Phase field simulation of powder bed-based additive manufacturing // Acta Materialia, 2018, Vol. 144, pp. 801-809. doi: 10.1016/j.actamat.2017.11.033

27. Rappaz M., Gandin Ch.-A. Probabilistic modelling of microstructure formation in solidification processes // Acta metall. mater, Vol. 41, No. 2, pp. 345-360.

28. Gandin Ch.-A., Rappaz M. A 3d cellular automaton algorithm for the prediction of dendritic grain growth // Acta metall. mater, Vol. 45, No. 5, pp. 2187-2195.

29. Gandin Ch.-A., Rappaz M., Desbiolles J.-L., Thevoz P. A three-dimensional cellular automaton - finite element model for the prediction of solidification grain

structures // Metallurgical and Materials Transactions A, 1999, Vol. 30, No. 12, pp. 3153-3165. doi:10.1007/s11661-999-0226-2

30. Tsai D.-C., Hwang W.-S. A three dimensional cellular automaton model for the prediction of solidification morphologies of brass alloy by horizontal continuous casting and its experimental verification // Materials Transactions, 2011, Vol. 52, No. 4, pp. 787-794. doi:10.2320/matertrans.M2010402

31. Bai C.-F., Wang B., Ma J., Zhang J.-Y., Pan W.-P. Modeling effect of cooling conditions on solidification process during thermal cycle of rollers in twin-roll strip casting // Journal of Iron and Steel Research International, 2023, Vol. 30, pp. 64-73. doi:10.1007/s42243-022-00822-3

32. Hesselbarth H.W., Gobel I.R. Simulation of recrystallization by cellular automata // Acta metall. mater, 1991, Vol. 39, No. 9, pp. 2135-2143.

33. Raabe D. Recrystallization Simulation by Use of Cellular Automata // Handbook of Materials Modeling, 2005, pp. 2173-2203.

34. Tan W., Shin Y.C. Multi-scale modeling of solidification and microstructure development in laser keyhole welding process for austenitic stainless steel // Computational Materials Science, 2015, Vol. 98, pp. 446-458. doi:10.1016/j.commatsci.2014.10.063

35. Yu Y., Li Y., Lin F., Yan W. A multi-grid Cellular Automaton model for simulating dendrite growth and its application in additive manufacturing // Additive Manufacturing, 2021, Vol. 47, Art. 102284. doi:10.1016/j.addma.2021.102284

36. Zhang H., Nakajima K., Wu R., Wang Q., He J. Prediction of solidification microstructure and columnar-to equiaxed transition of Al-Si alloy by two-dimensional cellular automaton with “decentred square” growth algorithm // ISIJ International, 2009, Vol. 49, pp. 1000-1009.

37. Lee W., Bae J., Lee H., Kang S.-H., Yoon J. Numerical simulation of dendritic growth and porosity evolution in solidification of Al-Cu alloy with lattice Boltzmann – Cellular automata method // Journal of Alloys and Compounds, 2022, Vol. 929, Art. 167233. doi:10.1016/j.jallcom.2022.167233

38. Zhang Y., Zhang J. Modeling of solidification microstructure evolution in laser powder bed fusion fabricated 316L stainless steel using combined computational fluid dynamics and cellular automata // Additive Manufacturing, 2019, Vol. 28, pp. 750-765. doi:10.1016/j.addma.2019.06.024

39. Rai A., Helmer H., Korner C. Simulation of grain structure evolution during powder bed based additive manufacturing // Additive Manufacturing, 2017, Vol. 13, pp. 124-134. doi:10.1016/j.addma.2016.10.007

40. Li X., Tan W. Numerical investigation of effects of nucleation mechanisms on grain structure in metal additive manufacturing // Computational Materials Science, 2018, Vol. 153, pp. 159-169. doi:10.1016/j.commatsci.2018.06.019

41. Lian Y., Lin S., Yan W., Liu W.K., Wagner G.J. A parallelized three-dimensional cellular automaton model for grain growth during additive manufacturing // Computational Mechanics, 2018, Vol. 61, pp. 543-558. doi:10.1007/s00466-017-1535-8

42. Ma J., Niu X., Zhou Y., Li W., Liu Y., Shen M., Wang H., Cheng W., You Z. Simulation of solidification microstructure evolution of 316L stainless steel fabricated by selective laser melting using a coupled model of smooth particle hydrodynamics and cellular automata // Journal of Materials Research and Technology, 2023, Vol. 27, pp. 600-616. doi:10.1016/j.jmrt.2023.09.296

43. Lipton J., Glicksman M.E., Kurz W. Dendritic growth into undercooled alloy melts // Materials Science and Engineering, 1984, Vol. 65, pp. 57-63.

44. Li L., Li D., Feng J., Zhang Y., Kang Y. Effect of cooling rates on the microstructure and mechanical property of La modified Al7SiMg alloys processed by gravity die casting and semi-solid die casting // Metals, 2020, Vol. 10, Art. 549. https://doi.org/10.3390/met10040549

Финансирование. Исследования выполнены при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации и выполнения государственного задания «Разработка научно-технологических основ формирования системы материал-конструкция со специальными свойствами на основе гибридных аддитивных технологий»-FSNM-2024-0003.
Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
Вклад авторов равноценен.

Funding. The research was carried out with the financial support of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation and the fulfillment of the state assignment "Development of scientific and technological foundations for the formation of a material-structure system with special properties based on hybrid additive technologies"-FSNM-2024-0003.
Conflict of interest. The authors declare no conflict of interest.
The authors' contributions are equal.