



Anyagtudományi sejtautomaták skálázási stratégiái

PhD értekezés tézisei

Készítette: Gyöngyösi Szilvia

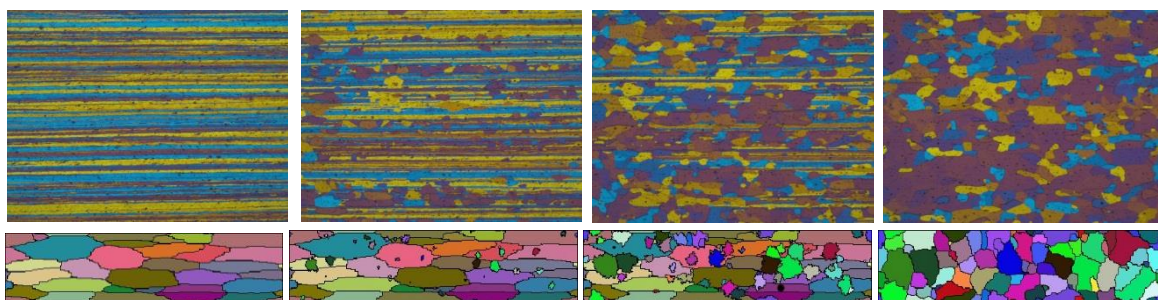
Debreceni Egyetem - Szilárdtest Fizika Tanszék - Tudományos segédmunkatárs

Tudományos vezető: Dr. Barkóczy Péter

Miskolci Egyetem - Műszaki Anyagtudományi Kar

Fémtni, Képlékenyalakítási és Nanotechnológiai Intézet - Egyetemi docens

FUX Zrt – Kutatásfejlesztési Igazgató



Miskolci Egyetem

Műszaki Anyagtudományi Kar

Fémtni, Képlékenyalakítási és Nanotechnológiai Intézet

Kerpely Antal Anyagtudományok és Technológiák Doktori Iskola

Vezető: Prof. Dr. Gácsi Zoltán

Egyetemi tanár

Hivatalos bírálók: **Dr. Geiger János**

Dr. Búza Gábor

Miskolc

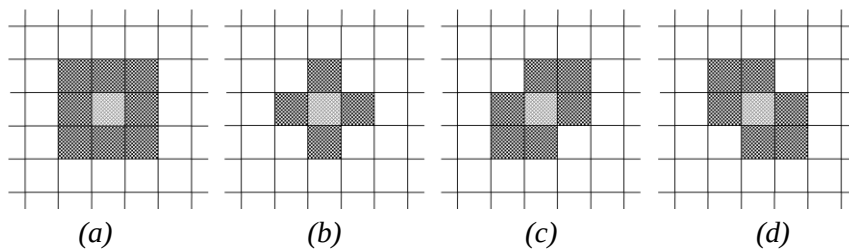
2016

Egy folyamat szimulációja akkor válik szükségessé, ha az adott folyamat a valóságban valamilyen okból nem vizsgálható, nem tudunk kísérleteket végezni a jelenségre vonatkozóan, vagy esetleg túl költséges lenne annak mérése. Ez a műszaki gyakorlatban, a technológia tervezés folyamatában gyakran teljesül. Napjainkban igen elterjedt szimulációs módszer – az anyagtudományban is gyakran alkalmazott mikroszerkezeti modellezés jól bevált eszköze - a sejtautomata. A folyamatok ez a fajta modellezése nem a megszokott konvencionális módszerek körébe tartozik. A sejtautomata szimuláció megoldásában különbözik a szokásos szimulációs eljárásoktól. Azonban itt fontos megjegyezni azt is, hogy az adott modell nem tükrözheti teljes valójában az adott folyamatot. A modell szükségszerűen egy matematikai absztrakció.

A sejtautomata módszer elvi alapjainak kidolgozása Stanislaw Ulam és ismert magyar tudósunk Neumann János nevéhez fűződik. A sejtautomata egy térben és időben diszkrét modell, dinamikus rendszer. Alkalmazása az élet számos területén népszerűvé vált többek között az anyagtudományban ismert rövidtávú diffúziós folyamatok során kialakult mikroszerkezetek modellezésére. A sejtek szabályos rácshálózatot építenek fel, ahol minden sejt egyforma. Ez az úgynevezett sejtter (egy dimenzióban sejtlánc). A sejtteret alkotó minden egyes sejt egy-egy rácselemnek felel meg. Egy dimenzióban nem igazán beszélhetünk geometriáról, de a szemléltetés eszközeként a négyzetrácsot szokás alkalmazni. Két dimenzióban a háromszög, négyszög és hatszög rács, míg három dimenzióban az egyszerűbb kezelhetőség, érthetőség és megjelenítés miatt a kockarács használata terjedt el. Az automata működése közben minden egyes sejtnak minden egyes lépésben rendelkeznie kell egy állapottal. A sejtautomata egymást követő lépések folyamata, működése során az automata minden időlépésben megvizsgálja minden egyes sejtnak az állapotát és a szinkron elvnek megfelelően ezt szisztematikusan minden lépésben minden sejtre elvégzi. A sejtek állapotát egy szabályrendszer határozza meg. A vizsgálat során az állapotváltási szabályokat is figyelembe véve dönti el az automata, hogy mi lesz az adott sejt új állapota. Az új állapotból az előzőekben leírt módon határozza meg a következő új állapotot, és így lépésről lépésre változnak a sejtek állapotai, és halad előre az automata. Az automata működése során a sejtek kölcsönhatásban vannak egymással. Az új állapot nemcsak a sejt saját, hanem a szomszédjai állapotának is függvénye, ezért definiálni kell az úgynevezett szomszédságokat, amelyek megadják, hogy melyik sejtek lépnek kölcsönhatásba egymással. Feladattól, illetve attól függően, hogy milyen sejtgeometriát választottunk sokféle szomszédság alkalmazása terjedt el.

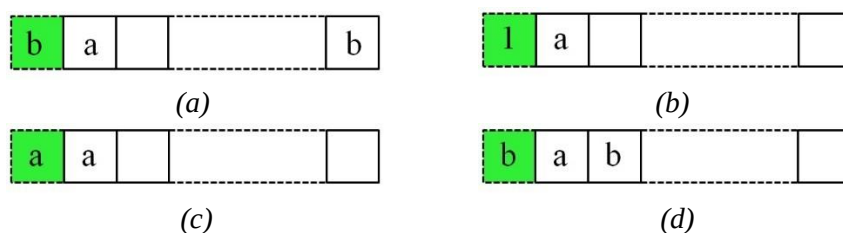


1. ábra. A vizsgált sejt szomszédjai egy dimenzióban négyzet sejtgeometria esetén [Fadaei2009]



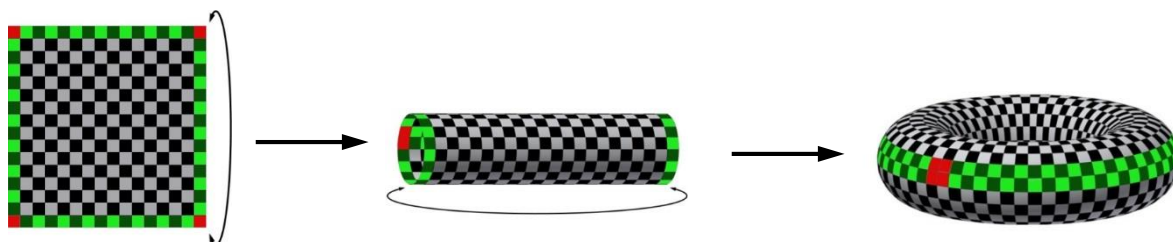
2. ábra. Szomszédsági relációk négyzet sejtgeometria esetén két dimenzióban (a) Moore-féle, (b) Neumann-féle és (c,d) alternáló 7-es szomszédság.

Egy dimenzióban egyszerű a helyzet, mert az új állapot meghatározása során a vizsgált sejt előtt és mögött elhelyezkedő sejteket kell figyelembe venni. A későbbiekben bemutatásra kerülő kétdimenziós automaták a négysszomszédság elvén **(2.(b). ábra)** működnek.



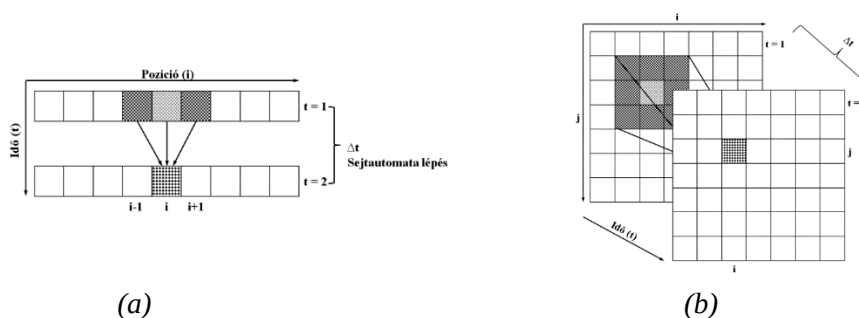
3. ábra. Határfeltételek egy dimenziós sejt-automatában. (a) periódikus, (b) fix, (c) adiabatikus és (d) reflektív

Belátható, hogy a szomszédságok definiálásánál az univerzum szélein elhelyezkedő sejtek esetén sérül az a szabály, hogy minden sejt egyforma az univerzumban, hiszen ezeknek a sejteknek lesznek hiányzó szomszédjai. A probléma kiküszöbölésére alkalmazzák a határfeltételeket, melyek szerint virtuális sejtekkel helyettesítik a hiányzó szomszédokat. Határfeltételek alkalmazására is számos lehetőséget kínál az irodalom, a probléma megoldására, mind egy-, mind két dimenzióban a periodikus határfeltételt **(3.(a).ábra, 4-ábra)** alkalmaztam.



4. ábra. Periodikus határfeltétel két dimenzióban

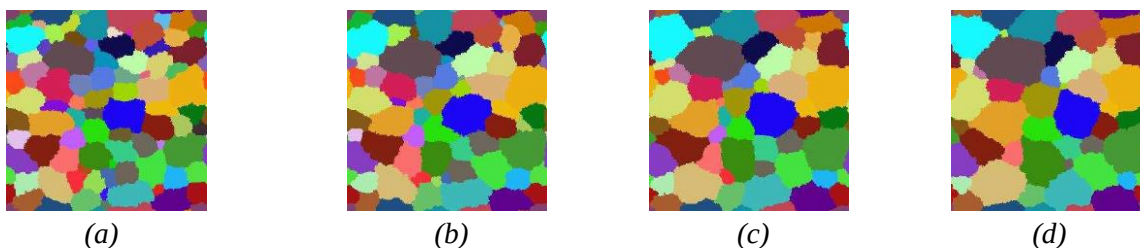
Az automata megalkotása során létrehozunk egy szabályos négyzetes rácsszerkezetet (egy dimenzióban a sejteket, mint láncot fűzzük egymás után **(5.(a). ábra)** és definiáljuk az egymással kapcsolatban lévő sejteket. A határfeltételek megfogalmazásával a rácsszerkezet határain elhelyezkedő elemekre az állapotahatározók és az állapotváltozási szabályokkal együttesen egy olyan automata hozható létre, amely működése során mindig a sejtek közvetlen környezetét veszi csak figyelembe.



5. ábra. Sejtautomata lépés (a) egy dimenzióban és (b) két dimenzióban [Fadaei2009]

Adott stratégia szerint sorra megvizsgálja a sejteket, és meghatározza a sejtek új állapotát. Majd az így keletkezett új térrész vizsgálatát újra kezdi, és ismételteti, amíg az automata meg nem állítjuk. Láthatjuk, hogy az automata működése során a sejtter az időben fejlődik. A szimuláció működése során az idő diszkrét léptékben telik. Az automata működésében egy meghatározó pillanat, amikor előáll az új sejtter, azaz a sejtek vizsgálatát megadott stratégia szerint befejezte. Két sejtter közötti időtartamot nevezzük egy automata lépésnek. A vizsgált folyamathoz az egy lépés rendelhető, mint az idő alapegysége, amit az automata skálázásával válthatunk át valós időre (5. ábra).

Rövidtávú diffúziós folyamatok szimulációja a bemutatott módszerrel megoldható. Adott térfogatrésznek annál nagyobb az energiája, minél több szemcsehatárt foglal magában. A rendszer mindig a legkisebb energiaszint elérésére törekszik, amit az átlagos szemcsemeret növekedésével próbál elérni. A szemcsedurvulás két dimenzióban működő szimulációja szinkron, sztochasztikus [Geiger2001] automata, ahol a négyszög geometriájú sejtek Neumann-féle relációban vannak egymással. Az univerzumot 200x200 sejt építi fel, a sejtek a sejtteret hézagmentesen töltik ki. Periodikus határfeltétel gondoskodik az univerzum szélein lévő sejtek hiányzó szomszédjainak „helyettesítéséről”. A sejtek állapota a báziskoordináta rendszer bázis síkjaitól mért orientáció eltérés dőlt és csavar komponense.



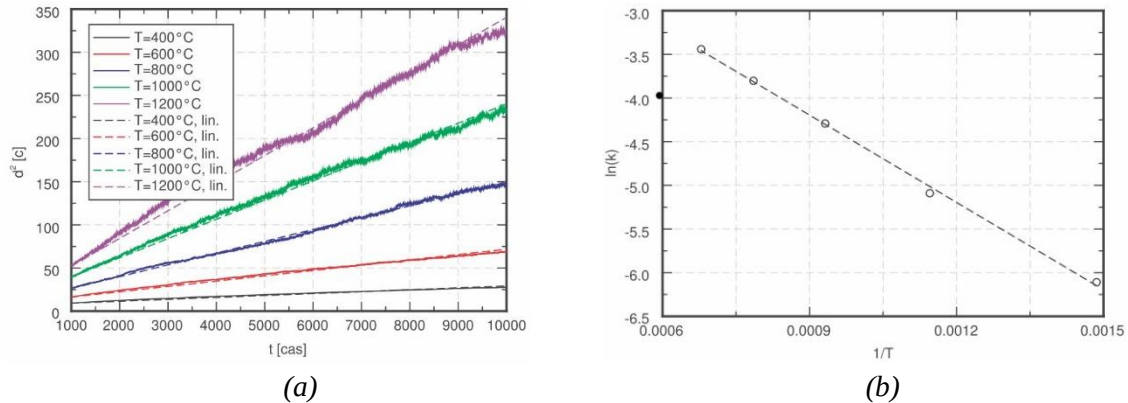
6.ábra. Szemcsedurvulás szimulációs eredményei. A beállított hőmérséklet 1000°C, az ábrákon az (a) 2000. (b) 4000. (c) 6000. és (d) 8000. automatalépésben számolt eredmények láthatók.[Geiger2001]

A szemcsehatár mozgásával, azaz a szemcsék növekedésével a rendszer egy kisebb energia állapot elérésére törekszik. A szimulációban két eltérő orientációjú sejt között van szemcsehatár. Két szomszédos sejt esetén a határenergiák azonosak. Annak a sejtnek nagyobb az energiája, amelyik több eltérő orientációjú szomszédal rendelkezik. A határmozgás valószínűsége a következő egyenlet alapján határozható meg:

$$p_s = S_0 \exp\left(-\frac{Q_s - E_{h,s}}{RT}\right) \quad (1.1)$$

ahol Q_s – a szemcsedurvulás aktiválási energiája, $E_{h,s}$ – a határ energiája, S_0 – anyagtól függő állandó. Minél nagyobb a sejt energiája, az állapotváltozás annál könnyebben megy végbe. A sejt ekkor felveszi a legkisebb határenergiával rendelkező szomszédos sejt állapotát. Ha több ilyen sejt van, a választás véletlenszerűen történik. A vizsgált sejt akkor kap új állapotot, ha a szemcsehatáron helyezkedik el, és a legnagyobb határenergiával rendelkezik a szomszédságban

lévő sejtekhez képest. Ekkor hőmérséklettől függő p_s valószínűséggel megváltoztatja az állapotát. Ezzel a feltétellel az is elkerülhető, hogy egy lépésben két sejt próbáljon állapotot váltani.



7.ábra. Szemcsedurulás szimulációjának eredményei: (a) Átlagos szemcseméret az idő függvényében, (b) kinetikai görbe az $1/T$ függvényében [Geiger2001]

A szemcsedurulás sejtautomata szimulációs eredményeit mutatja a **7. ábra**. A kapott eredményekből a kialakuló szemcseszerkezetek átlagos szemcseterületét megmérve, az ábrázolható az idő függvényében (**7. ábra(a)**). A kapott görbék közelítőleg egyenesek. Az egyenesek meredeksége növekszik a hőmérséklettel. A számítást különböző hőmérsékleteken elvégezve, látható, hogy nagyobb hőmérséklet esetén kapunk durvább szerkezetet. Az apróbb eltérések az automata sztochasztikus voltaival magyarázható. Amennyiben a kapott meredekségek logarimuszát az $1/T$ függvényében ábrázoljuk, úgy a kapott pontok szintén egy egyenesre esnek (**7.(b). ábra**). A kapott eredmények követik a fizikát.

Újrakristályosodás két dimenzióban működő sejtautomata szimulációjának felépítése megegyezik a szemcsedurulás szimulációjáéval. Különbséget a két automata között a folyamatbeli különbözőségek adják (állapotok, a folyamat hajtóereje). Ez esetben, a két állapotot az alakított és újrakristályosodott állapot jelenti. Folyamat hajtóereje a tárolt energia (amely az alakításból eredő energiatöbbletet jelenti). Két szabályrendszer a csíráképződés és a csíranövekedés. A sztochasztikus szabályrendszernek megfelelően az új állapot létrejötte ez esetben is valószínűségi változó függvénye. Ezen valószínűségi értékén keresztül van lehetőség a hőmérséklet és az alakítás mértékének hatását vizsgálni a szimuláció működésére, hiszen mindkét paraméter az újrakristályosodás sebességét erősen befolyásolja. A valószínűségi változó meghatározásának módja csíráképződés (1.2) esetén:

$$p_N = N_0 \exp\left(-\frac{Q_N - E_{st}}{RT}\right) \quad (1.2)$$

ahol N_0 – konstans, Q_N – csíráképződés aktiválási energia, R – gázállandó, T – hőmérséklet és E_{st} – tárolt energia.

A tárolt energia az alakítás mértékének függvénye, számítása a következő képlet szerint történik:

$$E_{st} = E_{st,max} (1 - \exp(-kq)) \quad (1.3)$$

ahol $E_{st,max}$, k – anyagtól függő állandó és q – az alakítás mértéke

A valószínűségi érték számítása csíranövekedés (1.4) esetén:

$$p_G = G_0 \exp\left(-\frac{Q_G - E_{st}}{RT}\right) \quad (1.4)$$

ahol G_0 – konstans, Q_G – csíranövekedés aktiválási energia, E_{st} – tárolt energia, R – gázállandó, T – hőmérséklet.

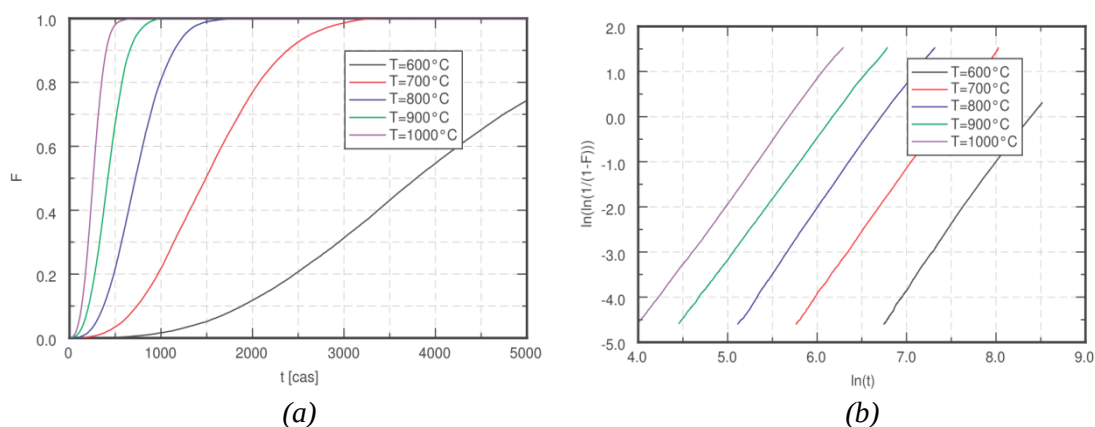
A csíra megjelenési helye véletlenszerű. Egy sejtől abban az esetben lesz csíra, ha a vizsgált sejt és annak minden szomszédja alakított állapotban van és energiája nagyobb, mint a csíráképződés aktiválási energiája. A csíranövekedési folyamat akkor indul meg, ha az adott sejtnél van legalább egy olyan szomszédja, amely újrakristályosodott állapotban van. Ebben az esetben a vizsgált sejt felveszi ezt az állapotot, amellyel a kisebb energia állapot biztosított számára. Az automata sztochasztikus jellegéből adódóan természetesen a növekedés az előbb felsorolt feltételek mellett egy valószínűségi változóhoz is kötött $[0...1]$ intervallumból. A valószínűségi változó értéke a növekedés sebességére, továbbá a növekvő csíra alakjára van befolyással. Szimulációs kísérletek igazolják, hogy kisebb valószínűségi értékkel kapunk mikroszkópi felvételekhez hasonló szemcseszerkezetet [Barkóczy2012, Schönfish1995].



8. ábra. Újrakristályosodás folyamata [Barkóczy2000, Barkóczy2003, Caneda2008, Cotterill 1982, Roósz2001]

A **8. ábra** mutatja be az újrakristályosodási folyamat fejlődését az univerzumban. A kezdetben alakított, elnyújtott (**8. ábra(a)**) szemcsék határain megjelennek a csírák (**8. ábra(b)**), majd azok növekedésnek indulnak (**8. ábra(c)**), mindaddig, míg a szerkezetet már teljesen az új alakítás hatásaitól mentes szemcsék töltik ki (**8. ábra(d)**). Ismert, hogy az alakítást követő lágyító hőkezelés során bekövetkező tulajdonságváltozások az újrakristályosodott hányad változásával vannak szoros összefüggésben. Az újrakristályosodott térfogathányad idő és hőmérsékletfüggését az JMAK egyenlet írja le. Amennyiben azt az összefüggést vesszük, mely szerint a síkcsiszolaton mért átlagos területarány a teljes minta térfogatarányával egyenlő, úgy ez alkalmazható a szimuláció által számított eredményeken is. Ha megmérjük az újrakristályosodott szemcsék által elfoglalt területet a sejtuniverzum területéhez képest, akkor az újrakristályosodott térfogathányadot kapjuk. Ha különböző hőmérsékleteken teszteljük az automatát, és közben mérjük az átalakult hányad időbeli változását a **9. (a) ábrán** látható

görbékét kapjuk. Az ábrán látható, hogy nagyobb hőmérséklet esetén a görbék a rövidebb idők felé tolódnak, ami megfelel a valóságnak. Az átalakult hányad alapján, elvégezhető a JMAK analízis.



9.ábra Statikus újrakristályosodás szimulációja. (a) Újrakristályosodott hányad az idő függvényében különböző izotermákon, (b) számított Avrami görbék

A **9. (b) ábrán** látható, hogy a kapott pontok egy egyenesre esnek és az egyenesek meredeksége számottevően nem tér el egymástól. A meredekségek átlaga: 2.72, ami az Avrami kitevő értéke. Az Avrami kitevő értéke kétdimenziós csíráképződést és növekedést feltételezve elméletileg 3. Az, hogy ennél kisebb értéket kaptunk azzal magyarázható, hogy az univerzum véges, a csíranövekedési folyamat gyorsan megy végbe, így hamar elfogynak a csíráképző helyek. Ez a helytelítettség jelensége. A kapott eredményekből belátható, hogy a sejtautomata alkalmazásával, az újrakristályosodási folyamat is jól szimulálható, az eredmények itt is a vártaknak megfelelnek.

Allotróp átalakulás sejtautomata szimulációjának felépítése ugyancsak megegyezik a szemcsedurvulás és újrakristályosodás szimulációjával. Szemcsedurvulás esetén az eltérő orientációjú sejtek között tettünk különbséget, míg újrakristályosodásnál az alakított és újrakristályosodott állapotok valamelyikét veheti fel a sejt. Allotróp átalakulási folyamat esetén a fázis szerepe a meghatározó. Ha a vas példáját tekintjük a vas-karbon diagram $C=0\%$ koncentrációnál hevítés során 911°C -on az allotróp átalakulási folyamatnak köszönhetően egy fázisátalakulási folyamat megy végbe. A térben középpontos kockarácsú α – fázis felületen középpontos kockarácsú γ - fázissá alakul át. Allotróp átalakulás szimulációjánál ezen két állapot között kell különbséget tenni. A folyamat lezajlása során a fázishatárok mozgása játszik döntő szerepet. A határ energiáját, az egymástól eltérő rácsszerkezetek adják, melyet a fázishatár választ el egymástól. A kristálytani orientáció ez esetben elhanyagolható, mert a határeneergiához képest elhanyagolható az a hatás, hogy a két kristály milyen módon, mértékben vannak elfordulva, elcsavarodva és elmozdulva egymástól. A fázishatár energiája állandónak tekinthető, értéke csak az eltérő fázisú szomszédok számától függ.

$$E_h = (N - n) \cdot E_{h,0} \quad (1.5)$$

ahol $E_{h,0}$ – a fázishatár energiája, N – szomszédok szám, n – az azonos fázishoz tartozó szomszédok száma. Az állapotváltási szabályok meghatározásához ismernünk kell a hajtóerőt.

Ez irodalmi forrásból a vas esetében a következők szerint számítható [Lee2012]:

$$\Delta G_{\text{Fe}} = -1151.053 + 5.607 (T - 825) - 2.55 \cdot 10^{-3} (T-825)^2 + 9.579 \cdot 10^{-6} (T - 825)^3 - 1.87 \cdot 10^{-8} (T - 825)^4 [\text{J/mol}] \quad (1.6)$$

Allotróp átalakulás is csíráképződés és csíranövekedéses folyamat. Az automata sztochasztikus jellegéből adódóan a folyamat egy valószínűségi változó értékétől függ.

Csíráképződés esetén a valószínűségi változó meghatározása:

$$p_N = \exp\left(-\frac{Q_N - |\Delta G| - E_h}{RT}\right) \quad (1.7)$$

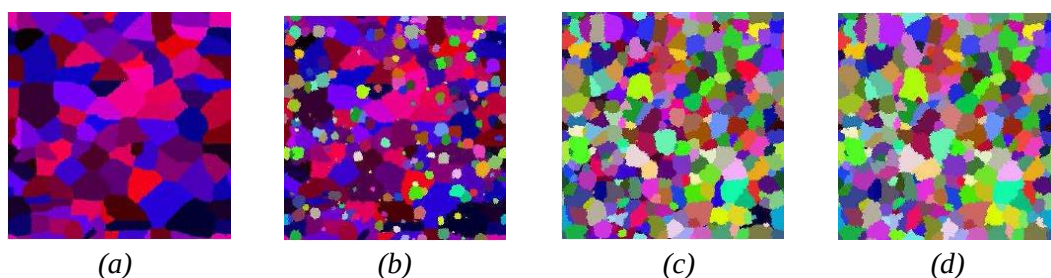
ahol Q_N - csíráképződés aktiválási energia, ΔG – hajtóerő, E_h – fázishatár energia, R - gázállandó, T - hőmérséklet.

Csíranövekedés esetén a valószínűségi változó a következőképpen számítható:

$$p_G = \exp\left(-\frac{Q_G - |\Delta G| - E_h}{RT}\right) \quad (1.8)$$

ahol Q_G - csíranövekedés aktiválási energia.

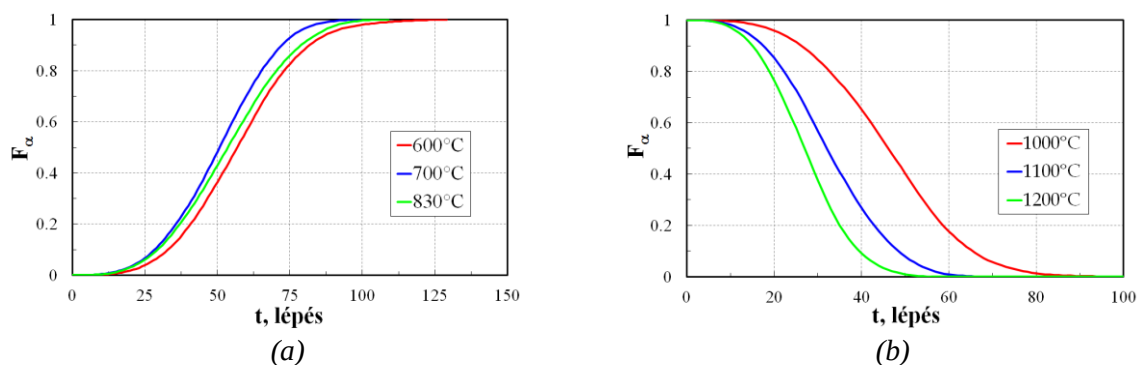
Egy sejtől abban az esetben lesz csíra, ha a vizsgált sejt és annak minden szomszédja instabil fázis. A csíranövekedés folyamata akkor indul meg, ha a vizsgált sejt az instabil fázishoz tartozik és van legalább egy olyan szomszédja amely stabil fázisú. Ha a valószínűségi folyamat lehetővé teszi, akkor a sejt új állapota a stabil fázist jelölő lesz. A **10. ábra** az allotróp átalakulás folyamatát mutatja az univerzumban.



10. ábra. Az univerzumban kialakuló szemcseszerkezetek 1200°C hőmérséklet beállításával végzett számítások esetén. (a) 0. lépés, (b) 20. lépés, (c) 30. lépés és (d) 40. Lépés

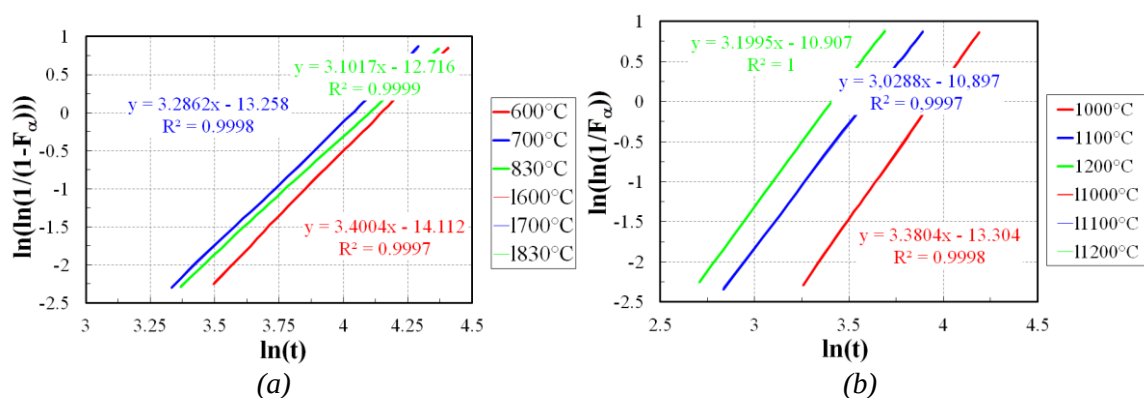
Az automata tesztelésével vizsgáltam a szimuláció helyes működését. A vizsgálatot elvégeztem az átalakulási hőmérséklet (vas esetén $T = 911^\circ\text{C}$) alatt (**11. ábra (a)**). A számolt eredményekből ábrázoltam az átalakult hányad időbeli változását. Ebben az esetben a γ - fázis alakul át α - fázissá. Csak a hajtóerő értékét tekintve minél kisebb hőmérsékleten megy végbe az átalakulás, annál gyorsabban kellene végbemennie. Az eredményeken látszik, hogy ez a 700°C , illetve 830°C -on történő átalakulásnál így is van. $T = 700^\circ\text{C}$ ábrázolt átalakult hányad görbe időben a rövidebb idők felé tolódik a 830°C -on történő átalakulás görbéjéhez képest. Ezzel szemben a 600°C -on végzett számítások hosszabb időt mutatnak. Ennek magyarázata

az, hogy bár a hőmérséklet csökkenésével a hajtóerő nagyobb azonban az állapotváltozások valószínűsége is csökken.

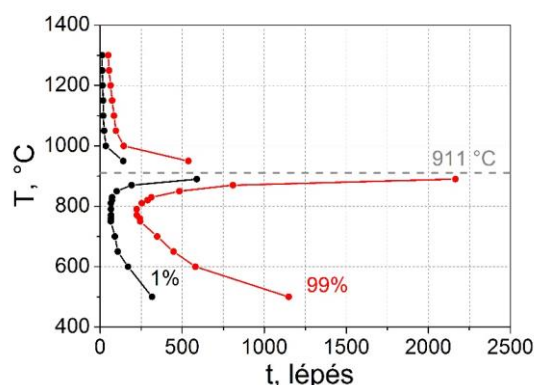


11. ábra. Átalakult hányad változása az idő függvényében (a) $\gamma \rightarrow \alpha$ és (b) $\alpha \rightarrow \gamma$ átalakulás során.
Szimuláció paraméterek: $Q_N=120000$, $Q_G=60000$, $E_{h,0}=10000$

A vizsgálatot elvégeztem az átalakulási hőmérséklet felett. A kapott eredményeken látható, hogy magasabb hőmérsékleten rövidebb idő is elegendő az átalakuláshoz. A számított eredményekből elvégezhető a JMAK analízis. A 12. ábrán látható, hogy a kapott eredmények egy egyenesre esnek. Az egyenesek meredeksége az Avrami kitevő.



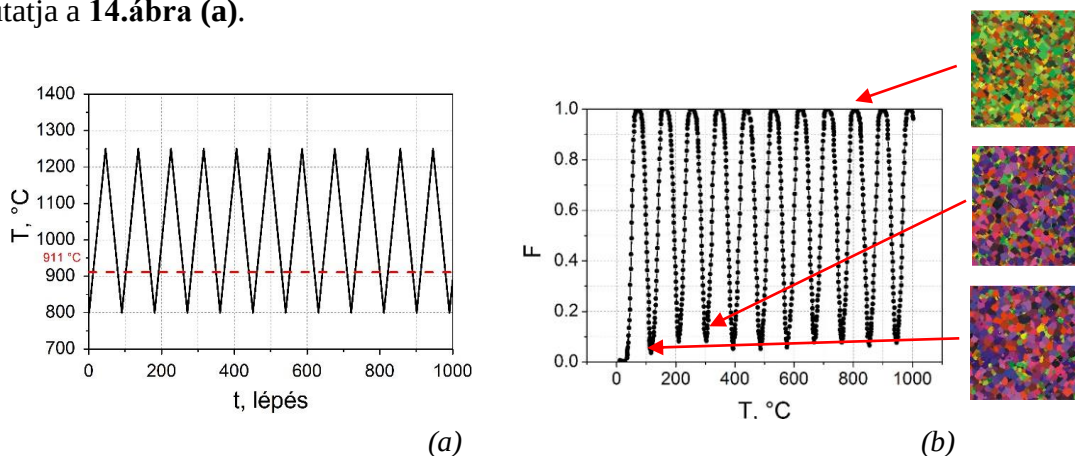
12. ábra. Avrami analízis. (a) $\gamma \rightarrow \alpha$ és (b) $\alpha \rightarrow \gamma$ átalakulás során.



13. ábra. Izoterm átalakulási diagram

Az allotróp átalakulás kinetikájának szemléletes megjelenítése az átalakulási diagram. A 13. ábrán a számolt allotróp átalakulási folyamat izoterm átalakulási diagramját mutatja, az 1% és 99% átalakuláshoz tartozó görbepárokat.

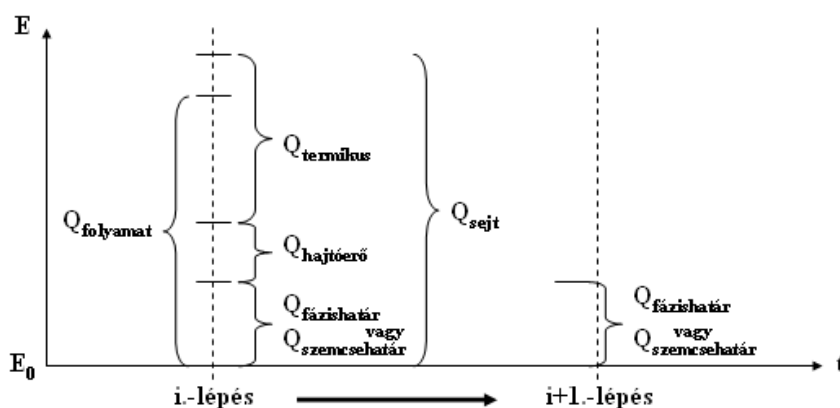
Az allotróp átalakulási folyamat egymást követő hevítés és hűtés hatására is végbemegy. A szimulációban bizonyítható a folyamat reverzibilis volta. Ezen állítás vizsgálatához változó hőmérséklet megadásával működtettem az automatát. Az automata hőmérsékletváltozását mutatja a **14.ábra (a)**.



14.ábra (a) Az automata hőmérsékletváltozása az allotróp átalakulás reverzibilis voltának tesztelésekor (b) a hőmérsékletváltozás (lineáris hevítés és hűtés) során rögzített $\alpha \rightarrow \gamma$, $\gamma \rightarrow \alpha$ átalakulás $T_{Fe_trans}=911\text{ }^{\circ}\text{C}$ és a szimuláció által számított szerkezet

Az eredmények ez esetben is azt mutatják, hogy a sejtautomata módszer alkalmazásával az allotróp átalakulás folyamata is szimulálható, a számolt eredmények megfelelnek a valóságos mérések során tapasztaltaknak.

Az látható, hogy az automaták felépítése minden folyamat esetén megegyezik, különbség csupán az állapotokban és a hajtóerőben van, azaz az állapotváltozás feltételrendszerét kell olyan módon megfogalmazni, hogy az ugyanazon energia feltétel alkalmazásával mindhárom folyamatra teljesüljön, amivel az automaták összekapcsolása megoldható (**15. ábra**).

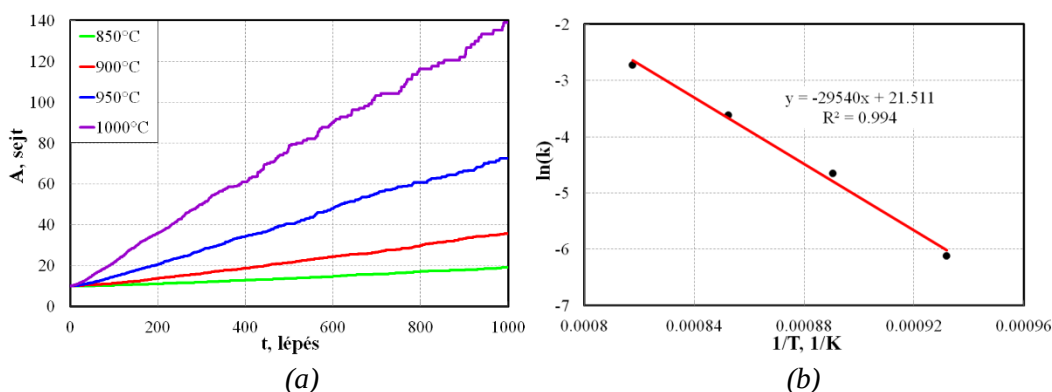


15. ábra Energia feltétel

Rövidtávú diffúziós folyamatok szimulációja tehát megoldható a sejtautomata módszerrel. Ez a megoldás annyiban különbözik a megszokott konvencionális megoldásokhoz képest – például JMAK analízis – hogy azonos információ halmazhoz kisebb komplexitású számítási apparátus tartozik, könnyebben kezelhető és jóval részletgazdagabb eredményt szolgáltat. A számítási időt még tovább csökkenthetjük azáltal, hogy a sejtautomatát a lehető legegyszerűbb formára

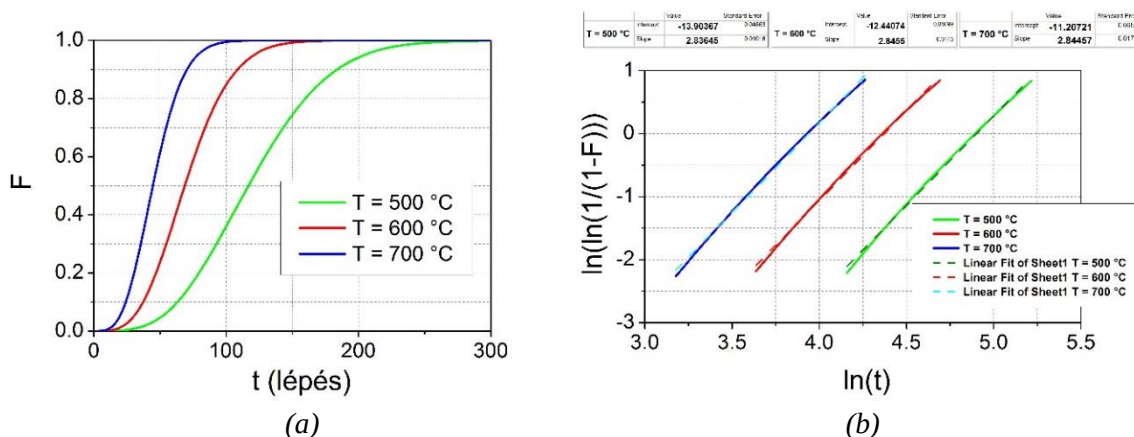
hozzuk, azaz egydimenzióban működővé tesszük. Ez a megoldás nem csak a számítás gyorsaságát, hanem a skálázhatóságát is növeli, amellyel egyetemben az automata gyakorlatban való alkalmazhatóságát is kedvezőbbé tesszük. Az egydimenziós automaták megalkotásánál azt a megállapítást vettem alapul, hogy a kétdimenziós automatáknak (pl.: Hesselbarth-Göbel determinisztikus automata) létezik egydimenziós megfelelőjük (Wolfram 254-es automata). Így belátható, hogy a korábban bemutatott folyamatok kétdimenziós szimulációinak elkészíthető az egy dimenzióban működő változata.

Az egydimenziós automaták működése teljesen megegyezik a kétdimenziós automatákéval. Különbség valóban csak az automata dimenziójában jelentkezik, azaz „sejtláncsal” dolgozunk, illetve a szemcsedurulásnál a dimenzió okozta korlátok miatt, nem tudjuk figyelembe venni a szemcsék görbületét. Ez a probléma is könnyen orvosolható azáltal, hogy a sejtek állapota a szemcsék méretét is tartalmazza. Ebben az esetben, amikor a sejt vizsgálata történik, az automata megvizsgálja azt is, hogy az adott sejt és szomszédjai mekkora méretű szemcséhez tartoznak, amennyiben a vizsgált sejt kisebb, úgy felveszi a szomszédos sejt állapotát. **A 16. ábra** a szemcsedurulás egy dimenzióban működő szimulációs eredményeit mutatja.



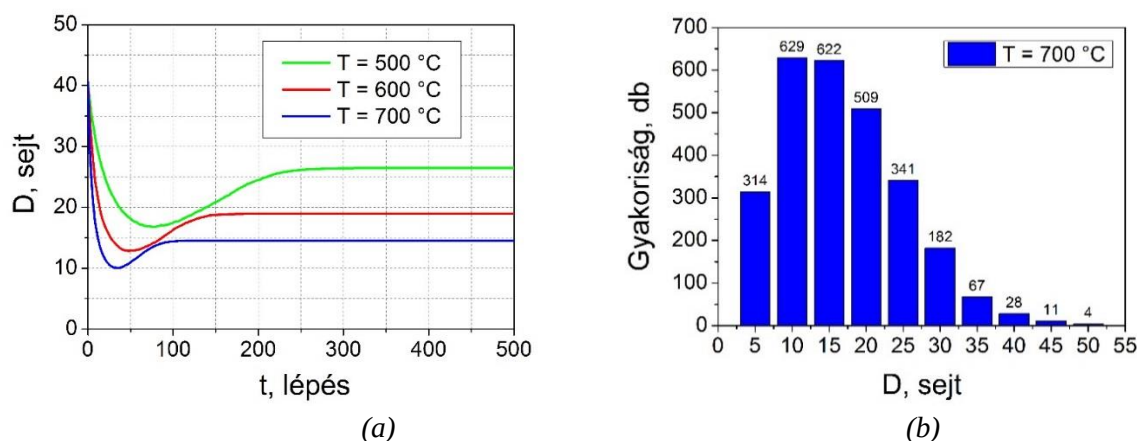
16. ábra. Szemcsedurulás egy dimenzióban működő sejtautomata szimulációs eredményei

Az újrakristályosodási folyamat szimulációja is megoldható egy dimenzióban (17. ábra).



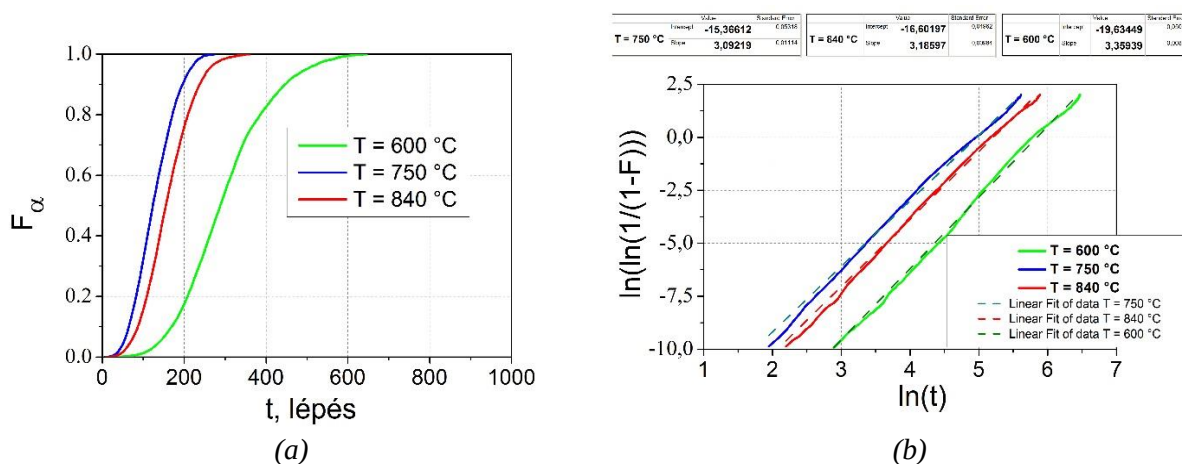
17. ábra. Újrakristályosodás egy dimenzióban működő sejtautomata szimulációs eredményei. (a) Átalakult hányad diagram, (b) Avrami kinetika

Természetesen, ezekben az esetekben a dimenziószám csökkenése miatt vizuálisan nem kaphatunk olyan részlet gazdag eredményeket (mikroszerkezeti képet), mint két dimenzióban, de ez esetben is elegendő információhoz jutunk a folyamat végbemenetelével kapcsolatban. Az újrakristályosodott hányad változásán túl, a szemcseméret változásáról (18.(a).ábra) és annak eloszlásáról (18.(b). ábra) is információt kaphatunk.



18. ábra. Újrakristályosodás egy dimenzióban működő sejtautomata szimulációs eredményei. (a) Szemcseméret időbeli változása, (b) Szemcseméret eloszlás

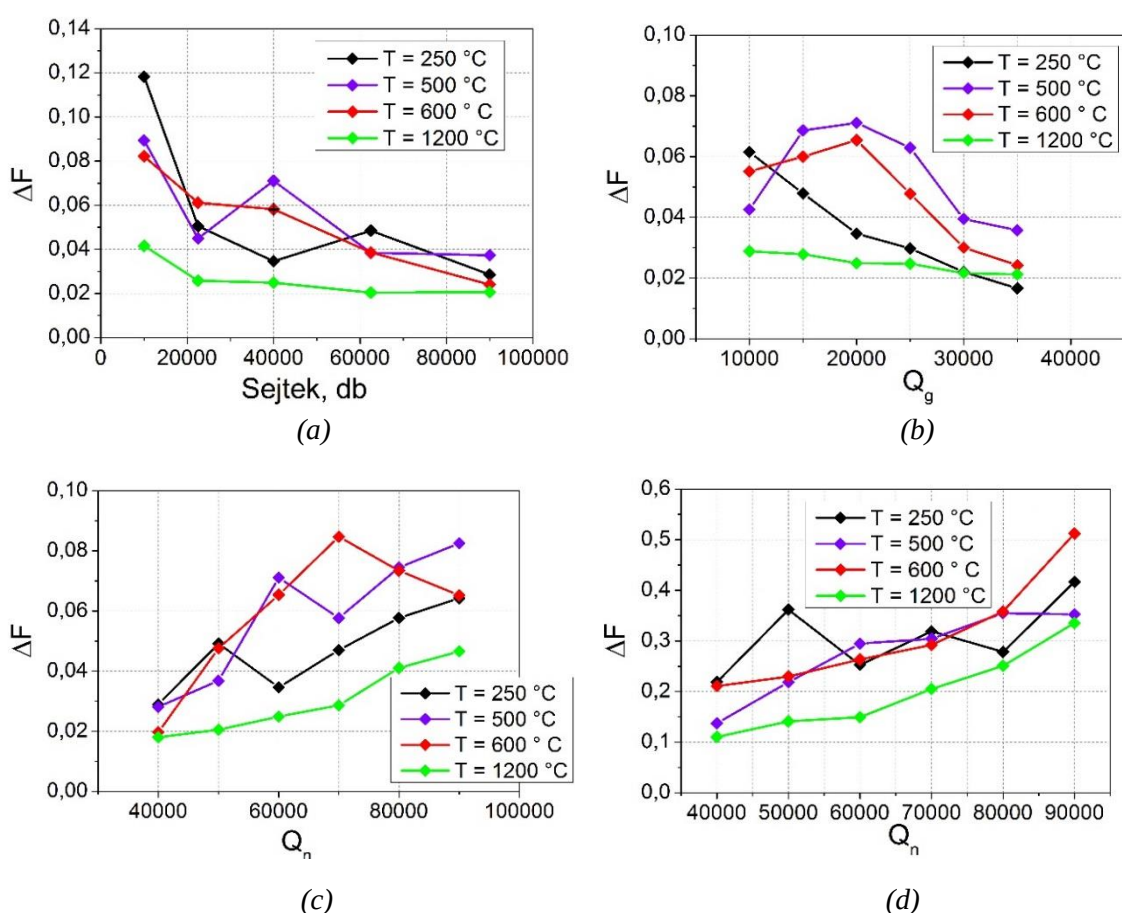
Hasonló eredményeket kapunk allotróp átalakulás esetén is (19.ábra). A kapott eredményekből elmondható, hogy rövidtávú diffúziós folyamatok sejtautomata szimulációja egy dimenzióban is megfelelően működik, a szimulációból számolt eredmények követik a fizikai törvényszerűségeket. Ez esetben is a folyamatok kinetikája vizsgálható mind az átalakult hányadon, mind a szemcseméret változásán keresztül. Megfelelő sztereológiai összefüggések alkalmazásával, a szemcsék méret szerinti eloszlása is ábrázolható.



19. ábra. Allotróp átalakulás egy dimenzióban működő sejtautomata szimulációs eredményei. (a) Átalakult hányad diagram, (b) Avrami kinetika

A kapott információk mellett, az automata számolási ideje is jelentősen csökkenthető, az által hogy egy dimenzióban működik. Viszont ebben az esetben a szimuláció paraméterei (sejtek száma, csíráképződési-, csíranövekedési és szemcsedurvulási aktiválási energiák) jelentősen

befolyásolják a számolás pontosságát. Meg kell adnunk azt a tartományt, amelyben az automata reprodukálhatóan működtethető, illetve a későbbiekben skálázható lesz. Az említett aktiválási energia értékek, az automata pontosságát még hőmérsékletfüggővé is teszik. Az említett paraméter együttes tartomány meghatározásához az automata stabilitás vizsgálatát végeztem el, azaz megvizsgáltam, hogy az automata mekkora hibával számol. Ehhez adott paraméter beállításokkal párhuzamosan futattam a szimulációt és néztem az egyes számítások között kapott különbséget, mindamellett pedig vizsgáltam az egyes szimulációs paraméterek változtatásának a hatását. A vizsgálatot két hőmérséklet tartomány szélsőértékén végeztem el. Egyrészt a réz, illetve alumínium lágyításának megfelelő hőmérsékletek hatását néztem ez 250°C és 500 °C értékeket jelent, illetve a vizsgálatot 600°C és 1200 °C-on is elvégeztem, azért hogy az allotrópia folyamatára, illetve a vas lágyítási hőmérsékletén végzett számításokról is legyen információ. A kapott eredményeket mutatja a **20. ábra**.



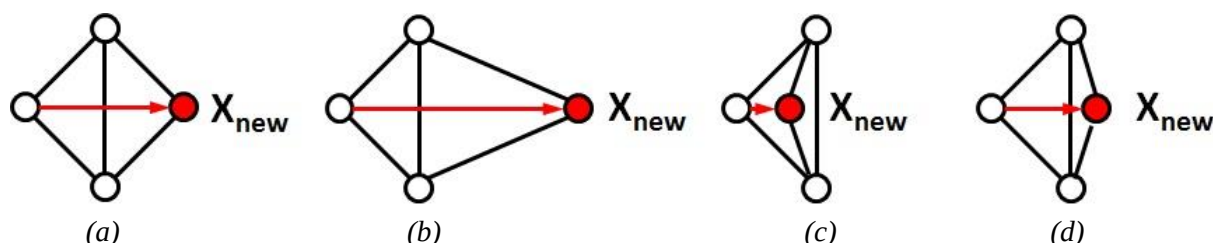
20. ábra. Stabilitás vizsgálat

A kapott eredményekről összességében elmondható, hogy minél nagyobb univerzum esetén kapunk pontosabb eredményt (**20.(a) ábra**). Az aktiválási energiák kisebb értékek mellett biztosítják az automata stabilabb, pontosabb működését, ami még az automata gyorsaságát is biztosítja (**20.(b,c) ábra**). Ez pedig számunkra kedvezőbb eredményhez vezet, hiszen itt a skálázás elvégzése mellett, a számítási idő csökkentése is a célunk.

A sejt automata szimulációkban a fent leírtakban láthattuk, hogy az idő számítási lépésekben telik. Ha a távolságot tekintjük, akkor a mérés szempontjából a sejtet vesszük alapegységnek.

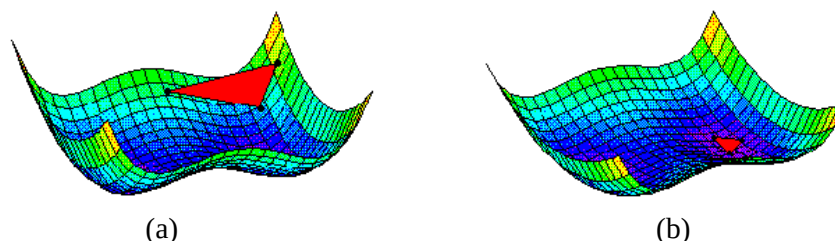
Mivel ezek nem valós értékek, ezek a mennyiségek korlátozzák az automata gyakorlati felhasználhatóságát. A szimulációk alkalmazásával azonban olyan paraméterek változásának a hatását is tudjuk vizsgálni, amelyet a valóságban nem tudunk. Munkám során a globális optimalizációs módszerek közül a Nelder-Mead szimplex algoritmust választottam az automata skálázásához.

A módszer a direkt kereső eljárások családjába sorolható [Wright1996, Powell1998]. Kezdetben kevés számú pont szükséges, ami lecsökkenti a szükséges iterációkenti függvényértékelések számát. N számú változó esetén $N+1$ számú változó szükséges. Azaz ha két paraméterünk van, a kereső eljárás három pontból indul ki adott felületen. Ezen kétváltozós függvény esetében úgy kell a három pontot megválasztani, hogy azok ne essenek egy vonalra [Gao2010, Paláncz2011, Babarczy2013]. Először a szimplex legrosszabb pontját keressük meg, majd különböző szabályok alkalmazásával a régi szimplexből új szimplexet határozunk meg. Ezek a szabályok a tükrözés (reflection), összehúzás (contraction) és a tágítás/nyújtás (expansion) [Gao2010, Paláncz2011, Babarczy2013]. Ezen szabályok alkalmazásával érhető el, hogy a szimplexben minél távolabb kerüljünk a legrosszabb esetet jelentő ponttól.



21.ábra Szimplex módszernél alkalmazott szabályok. (a) tükrözés, (b) tágítás és (c),(d) kontrakciók [Gao2010, Paláncz2011, Babarczy2013]

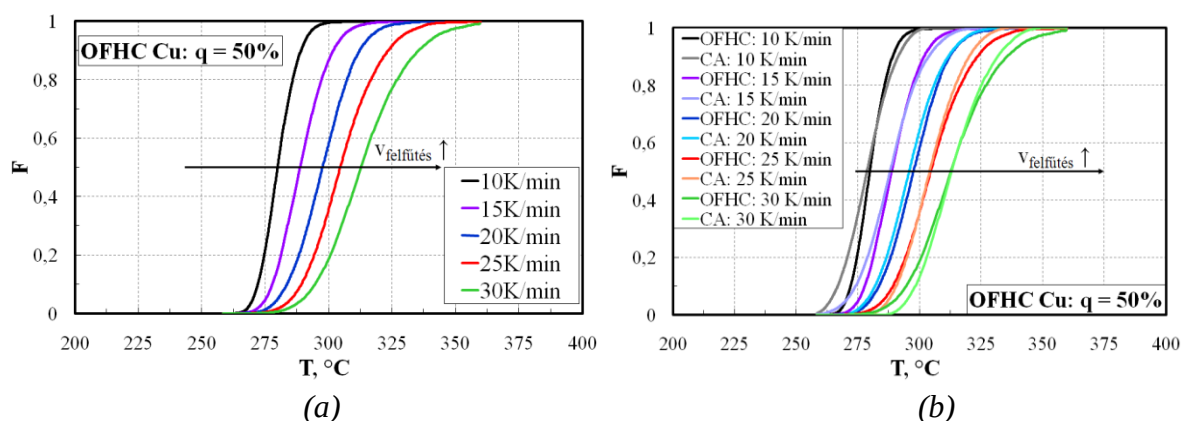
A legrosszabb pontot figyelmen kívül hagyva meghatározzuk a pontok súlyvonalát. A legrosszabb esetet jelentő pontot tükrözzük a súlyvonalra (**21. ábra (a)**). Ezzel meghatároztuk az új pontot (X_{new}) és az új szimplexet. Ha ez az új pont a célfüggvény értelmében jobb, mint a régi szimplex legjobb pontja, abban az esetben jó irányban mozdultunk el, és az új pontot ebben az irányban tovább mozdítjuk. Ez az expansió művelete (**21. ábra (b)**). Abban az esetben, ha a kapott új pontunk rosszabb esetet jelent, mint a régi szimplex legjobb pontja, úgy tekintjük, hogy rossz irányba mozdultunk és a tükrözés irányával ellentétes irányba mozdítjuk el (expansió) a pontot. Abban az esetben, ha a függvényérték jobb, mint a legrosszabb pont és rosszabb, mint a második legrosszabb pont, úgy a kontrakció műveletét alkalmazzuk (**21. ábra (d)**). Az új pont a legrosszabb pont helyére kerül és az algoritmus új szimplexrel indul tovább [Gao2010, Paláncz2011, Babarczy2013].



22.ábra Nelder-Mead szimplex módszer (a) induló szimplex, (b) végső szimplex [Paláncz2011]

PhD értekezésemben ezen globális optimalizációs eljárást alkalmaztam. A Nelder-Mead algoritmus alapján az illesztéshez alkalmaztam egy a csíráképződési aktiválási energiától és a csíranövekedési aktiválási energiától függő függvényt, amely a mért és a szimuláció által számított átalakult hányad görbék eltéréseinek négyzetösszegét mutatja. A két görbe legjobb illeszkedése az előbbi függvény által leírt felületnek a minimumában valósul meg. Ezt a minimumot kerestem a szimplex eljárással. Az eljárás két paraméter esetén három pontból indul ki. A legnagyobb eltérésnégyzet-összeget jelentő pontot figyelmen kívül hagyva meghatároztam a fennmaradó pontok tömegközéppontját, majd a legrosszabb esetet jelentő pontot tükröztem a tömegközéppontra. Amennyiben az így kapott pontban az eltérés négyzetösszeg kisebb, abban az esetben ezen három ponttal számolunk tovább. A szimplex módszer alkalmazásával az automata által számolt eredmények skálázása is megoldható.

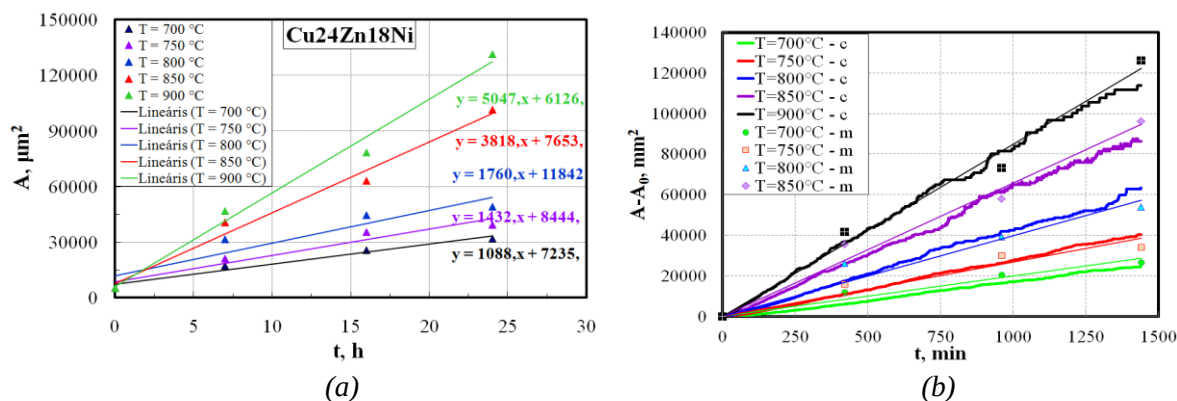
Újrakristályosodás vizsgálatára vonatkozó mérési eredmények láthatóak a **23.(a) ábrán**. A mérést OFHC réz anyagminőségű, különböző mértékben melegen hengerelt lemezekből kimunkált próbákkal végezték. A kiinduló lemez vastagsága 11mm volt, amelyet 400°C-on 1 órás lágyító hőkezelésnek vetették alá. Az ilyen módon kilágyított réztömböt 50%-os alakítási mértékkel hidegen hengerelték. A kapott lemezekből 3,5 mm átmérőjű korongokat kimunkálva DSC vizsgálatokat végeztek a Műszaki Anyagtudományi Kar Anyagtudományi Intézetének Netzsch DSC204 típusú hőfluxusos DSC berendezésével (A DSC csúcsokat az alapvonalról leválasztva, annak egyre normált integráljából megkapjuk az ábrán látható átalakult hányad diagramokat). A rézmintákat 10, 15, 20, 25, 30 K/min felfűtési sebességgel hevítették [Ömböli2007].



23. ábra (a) OFHC minőségű különböző mértékben hengerelt réz lemezek DSC görbéiből meghatározott újrakristályosodott hányad változását mutató görbék különböző hevítési sebességek mellett [Ömböli2007], (b) Szimulációs görbék illesztése 1D-s sztochasztikus automatával. Nelder-Mead szimplex algoritmussal. Az alakítás mértéke 50%,

A mért és a szimuláció által számított újrakristályosodott hányad görbék illesztési eredményeit foglalja össze a **23.(b) ábra**. A diagramon látható, hogy 50%-os alakítási mérték esetén különböző felfűtési sebességek (10K/min, 15K/min, 20K/min, 25K/min, 30K/min) mellett a számított újrakristályosodott hányad görbére, a szimuláció által számított átalakult hányad görbe jól illeszkedik. Kis eltérés csak az átalakulás kezdetén figyelhető meg a görbék illeszkedését illetően, ami a DSC eredmények kiértékelésének szubjektív voltából adódhat (lineáris alapvonalat feltételezve a csúcsok leválasztása az alapvonalról) [Ömböli2007].

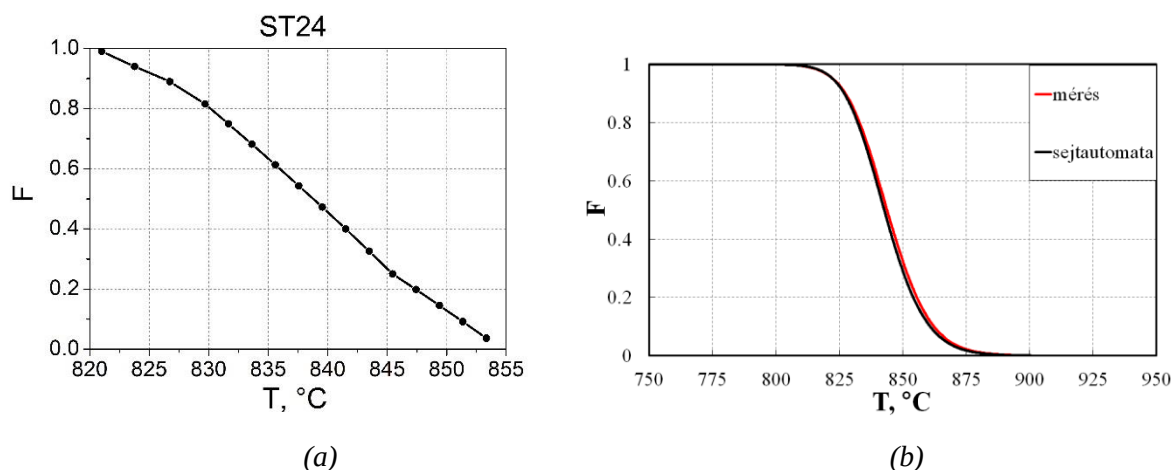
Az illesztés egy szemcsedurvulási folyamat mérési eredményére is jól elvégezhető. $\text{Cu}_{24}\text{Zn}_{18}\text{Ni}$ ötvözet szemcsedurvító hőkezelését végeztem 700°C és 900°C hőmérséklettartományban 50°C lépésközzönként. Hőkezelési időnek 7, 16 és 24 órát választottam a kapott eredményeket az átlagos szemcseméret idő függvényében mutatja a **24. ábra**. A **24.(b)** ábra mutatja a számolt és mért eredmények megfelelő illeszkedését.



24. ábra. (a) Átlagos szemcseterület az idő függvényében, (b) Szimulációs görbék illesztése 1D-s sztochasztikus automatával. Nelder-Mead szimplex algoritmussal.

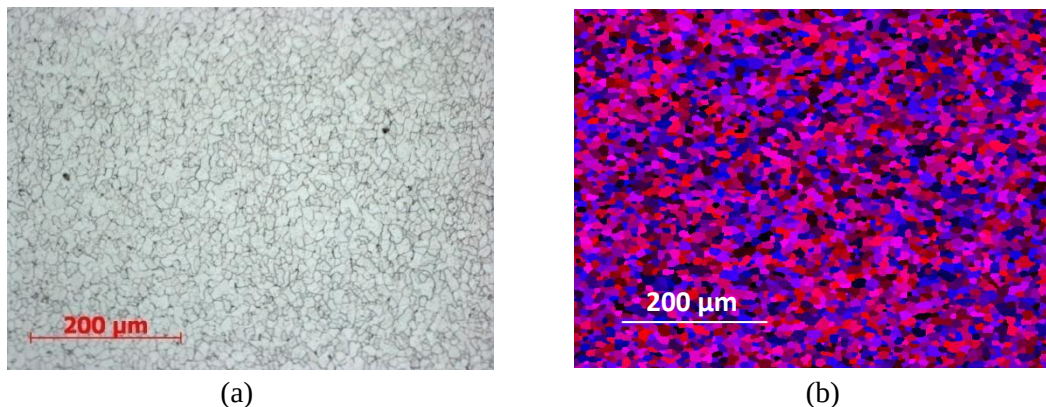
Habár a folyamatok egydimenziós sejtautomata szimulációja pont a skálázásnak köszönheti „megszületését”, hiszen e miatt volt szükséges az automatát a lehető legegyszerűbben működő formában hozni, a mért és számolt görbék illesztése ugyanúgy kétdimenzióban is elvégezhető, amennyiben egy vizuálisan többet mondó képet akarunk kapni a mikroszerkezetről.

Allotrop átalakulás esetére dilatométeres vizsgálattal a próba tágulás változását mértem. 960°C hőmérséklettől 600°C hőmérsékletig $4^\circ\text{C}/\text{perc}$ sebességgel, majd ez alatt $10^\circ\text{C}/\text{perc}$ sebességgel végeztem a hűtést, miközben a relatív elmozdulást mértem. A kapott eredményekből az átalakult hányad görbét ábrázolva mutatja a **25.(a) ábra** és az illesztési eredményeket a **25.(b) ábra**.



25. ábra. (a) 0,04 % karbon tartalmú acél dilatométer görbéje $4^\circ\text{C}/\text{perc}$ sebességgel hűtve, (b) ST24anyagminőségű acél illesztése a szimuláció által számolt eredményre Nelder-Mead szimplex algoritmussal

A ST24 anyagminőségű acél mikroszkópi felvételét és a sejtautomata által számított eredményt mutatja a **26. ábra**. Mind a mért szemcseszerkezeten, mind a számított szerkezeten az átlagos szemcseátmérőt mértem így meghatározható, hogy egy sejt a valóságban mekkora méretű. A skálázáshoz egy automatalépést egy másodpercre vettem.



26. ábra (a) ST24 acél mikroszerkezete, (b) szimulációval számított szerkezet

A szimuláció skálázási stratégiája a folyamatok kinetikai mérési módszerétől függ. Ezek alapján kétféleképpen tehetünk különbséget a folyamatok között. Először is az újrakristályosodást és az allotróp átalakulást kell együtt kezelni, amikor is az említett folyamatok két részfolyamatból állnak a csíráképződésből és növekedésből. Ezen folyamatok közös jellemzője, hogy a kinetikájuk az átalakult hányad görbével leírható (amikor is az idő és hőmérséklet függését ábrázoljuk a folyamatnak). Ha ezt a megközelítést tekintjük, akkor belátható, hogy itt az időfüggés külön kezelhető a méretskálától. A mért és számított átalakult hányad görbék illesztésével az időbeliség skálázható, majd a valós és számolt szemcseméretök összevetésével kiszámítható az a skálatényező, amivel a szemcséket alkotó sejtek száma valós távolságokká számíthatók. A másik folyamat a szemcsedurvulás, amikor is az átlagos szemcseméret időbeli változásával jellemezhető a folyamat. Ez esetben tehát az idő- és térbeliség nem választható külön, azok mindenképp együtt kezelendők. Azonban a szimulációs paraméterek száma kevesebb, hiszen csak egy folyamat változtatja a szemcseméretet. A térbeli és időbeli skálázás függősége miatt az idő vagy térbeli skálatényezőt meg kell előre határozni, majd ennek felhasználásával a másik tényező a skálázás során egyértelműen megkapható.

Az egydimenziós sejtautomata alkalmazásával tulajdonképpen ugyanannyi információt kapunk, mint a két dimenzióban működő változatával, viszont nagy előnye a síkban működő változatához képest, hogy jelentősen gyorsabb a működése, ami egy az iparban való alkalmazását tekintve jelentős előnyt jelent. A sejtautomata modell alkalmazásával az Avrami számítás teljes mértékben kiváltható. Ezáltal - illetve a fentiekben bemutatott eredmények is bizonyítják – az egydimenziós sejtautomata hatékonyan beépíthető hőkezelési folyamatok technológiai tervezésében. A számításokhoz természetesen szükségeltetik különböző mérések elvégzése, illetve azok automatával történő illesztése.

Új tudományos eredmények

1. Tézis: Elkészítettem a rövidtávú diffúziós folyamatok (újrakristályosodás, szemcsedurvulás, allotróp átalakulás) szimulációjára alkalmas egydimenziós sejtautomatát. Az automata számítási eredményeinek kinetikai elemzésével bizonyítottam, hogy az egydimenziós sejtautomata alkalmazásával a rövidtávú diffúziós folyamatok szimulálhatók. Összevettem az egydimenziós és a kétdimenziós sejtautomata szimulációkat. Megállapítottam, hogy annak ellenére, hogy az automata működése vizuálisan nem adja vissza a szimulált folyamatokat, mint a magasabb dimenzióban működő automaták, ugyanannyi információt kapunk, mint kétdimenziós és háromdimenziós sejtautomata alkalmazásával. Ebben az esetben is vizsgálhatjuk a folyamatok kinetikáját az átalakult hányadon és a szemcseméret változásán keresztül. Emellett a szemcsék méret szerinti eloszlását is megkapjuk a megfelelő sztereológiai összefüggések alkalmazásával.

2. Tézis: Bemutattam, hogy az egydimenziós sejtautomata szimulációval felépített rövidtávú diffúziós folyamatok szimulátorai mérések kiértékeléséből származó adatokkal skálázhatók. Mind az újrakristályosodás, mind az allotróp átalakulás szimulációja eredményül adja az átalakult hányad és a szemcseméret időtől és hőmérséklettől való függését. Szemcsedurvulás szimulációjából az átlagos szemcseméret idő és hőmérséklet függését kapjuk meg, amely függvények alkalmasak a szimulátor kinetikai elemzésére ugyanazon a módon, ahogyan a megfelelően elvégzett mérések eredményei. Ebből következően a szimulációk eredményei, és a mérési eredmények egymással összevethetők, közöttük egyértelmű matematikai kapcsolat létesíthető, a szimuláció eredményei skálázhatók.

3. Tézis: Kimutattam, hogy az egydimenziós sejtautomata szimulációk szimulációs paraméterei a számolás pontosságát, így a skálázhatóságot jelentősen befolyásolják, azaz létezik a szimulációnak olyan paraméter együttes tartománya, amelyben a skálázás adott pontossággal elvégezhető. Ugyancsak kimutattam, hogy a számolás pontosságát elsősorban a sejtek száma és a csíráképződési, növekedési és szemcsedurvulási folyamatok aktiválási energiája határozza meg. A szimulált folyamatok aktiválási energiáinak numerikus értelmezése miatt, az értékük nagy tartományában az automaták pontosságát hőmérsékletfüggővé is teszik. A hatékony, gyors számítás miatt meg kell határozni az említett paraméterek azon tartományát, ahol a számolás költsége és a skálázás pontossága optimumot biztosít. Erre az automaták általam javasolt stabilitás vizsgálata megoldást ad.

4. Tézis: Sejtautomata szimulációk skálázásának a feladata, hogy a szimulációs eredmények időbeliségét és térbeliségét meghatározzuk mérési eredményekkel történő összevetés alapján. Megállapítottam, hogy ez történhet olyan módon, hogy előre rögzített skálázási tényezőket véve a szimuláció kinetikai paramétereit változtatjuk mindaddig, amíg a mérési eredményeket a skálázási tényezők figyelembevételével adott pontossággal meg nem kapjuk a szimuláció eredményeiben. Az általam kifejlesztett egydimenziós sejtautomata szimulációk esetén ezek a kinetikai paraméterek a csíráképződés és csíranövekedés aktiválási energiája az újrakristályosodás és allotróp átalakulás esetén, és a szemcsedurvulás aktiválási energiája a

szemcsedurvulás szimulációja esetén. Bemutattam, hogy a mért és a skálatényezőkkel átszámított, szimulációval kapott eredmények eltérésnégyzet összege egy globális minimummal rendelkező függvény a szimulációs paraméterek függvényében. Bemutattam, hogy a mért és számított eredmények illeszkedéséhez ennek a függvénynek a szélsőértékét kell megkeresni. A kereséshez a Nelder-Mead simplex eljárást hatékonyan alkalmaztam a szokásosan végzett mérési módszerek esetén.

5. Tézis: Megállapítottam, hogy a szimuláció skálázási stratégiája a folyamatok kinetikai mérési módszerétől függ. A skálázás feladata, hogy a szimulációs eredmények időbeliségét és térbeliségét meghatározzuk mérési eredményekkel történő összevetés alapján. Megállítottam, hogy minden olyan mérési sorozat alkalmas illesztésre, ami klasszikus kinetikai kiértékelésre is alkalmas. Rámutattam, hogy a skálázás során ugyanazon hőmérséklet- és időváltozások mellett kell elvégezni a számolást, mint ami mérések körülményei voltak. Emiatt a különböző mérési metódusok alapján végzett skálázások külön kezelendők, de bármelyik esetet tekintve maga a szimuláció azonos, a skálázás sikere érdekében abban változtatást tenni nem szükséges. Skálázási stratégiában különbség mutatkozik a csíráképződéses – növekedéses folyamatok és a szemcsedurvulás között. Amíg a csíráképződéses – növekedéses folyamatok esetén az átalakult hányad értelmezése miatt (dimenzió nélküli érték) az idő- és méretskálázás külön kezelhető. Ezzel szemben a szemcsedurvulás esetén az idő- és méretskálázást egy lépésben kell elvégezni. Mind a két esetben az automata működése miatt célszerű az időlépést állandó értékre választani, hogy az automata lépéseinek száma ne változzon és azonos legyen. Ezzel a megkötéssel határozható meg az aktiválási energiák a csíráképződéses – növekedéses folyamatok esetén, és az aktiválási energia és a méretskála a szemcsedurvulás esetén. Csíráképződéses – növekedéses folyamatoknál mikroszkópi felvételen az átlagos szemnagyságok összevetésével határozható meg a méretskála értéke.

Folyóiratcikkek, Konferencia kiadványok

- [1] **Gyöngyösi Szilvia**, Barkóczy Péter: Allotróp átalakulás szimulációja sejtautomata módszerrel. XXIX. Országos Tudományos Diákköri Konferencia: Műszaki Szekció Tanulmányai. Miskolc, Magyarország, 2009.04.14-2009.04.16. Miskolc: pp. 21-27.
- [2] A Tóth, **Sz Gyöngyösi**, P Barkóczy: Computation of the grain structure by cellular automaton in single phase aluminum alloys. 14th International Symposium on Metallography, Acta Metallurgica Slovaca Conference: Metallography 2010. Stará Lesná, Szlovákia, 2010.04.28-2010.04.30. Kosice: pp. 87-92.
- [3] **Gyöngyösi Szilvia**, Dr. Barkóczy Péter, Tóth Anita: Allotróp átalakulás sejtautomata szimulációjának skálázása. Műszaki Tudomány az Észak-Alföldi régióban 2010. Nyíregyháza, Magyarország, 2010.05.19. Nyíregyháza: MTA Debreceni Akadémiai Bizottság, pp. 295-300.
- [4] **Gyöngyösi Szilvia**, Barkóczy Péter: Fázisátalakulási folyamatok sejt-automata szimulációinak skálázása. XXIV. Hőkezelő és Anyagtudomány a Gépgyártásban Országos Konferencia. Balatonfüred, Magyarország, 2010.10.06-2010.10.08. MTESZ Fejér és Veszprém megyei Szervezete, pp. 52-58.
- [5] **Gyöngyösi Szilvia**, Barkóczy Péter, Tóth Anita: Rövidtávú diffúziós folyamatok szimulációja sejtautomata módszerrel. MISKOLCI EGYETEM KÖZLEMÉNYEI - 2. SZOROZAT ANYAG- ÉS KOHÓMÉRNÖKI TUDOMÁNYOK 1:(35) pp.17-26. (2010)
- [6] Péter Barkóczy, **Szilvia Gyöngyösi**, Anita Tóth: The Simulation of Phase Transformations Driven by Short Range Diffusion by Cellular Automata. MicroCAD 2010 E szekció: International Scientific Conference. Miskolc, Magyarország, (2010) Miskolci Egyetem, pp. 9-14. Anyagtudomány és -technológia (ISBN:978-963-661-910-7)
- [7] **S Gyöngyösi**, A Tóth, P Barkóczy: Simulation of Phase Transformations Driven by Short Range Diffusion by Cellular Automaton. MATERIALS SCIENCE FORUM 659: pp. 405-410. (2010)
- [8] **S Vigh-Gyöngyösi**, P Barkóczy, A Tóth: The simulation of phase transformations driven by short range diffusion by cellular automata. 4th International Conference Processing and Structure of Materials (PSM4). Palic, Szerbia, 2010.05.27-2010.05.29. pp. 125-132.
- [9] **Szilvia Gyöngyösi**, Péter Barkóczy: The Scaling of a Cellular Automaton Simulation of Allotropic Transformation. 7th International Conference of PhD Students: Agriculture. Miskolc, Magyarország, 2010.08.08-2010.08.12. University of Miskolc, pp. 55-59. (ISBN:978 963 661 936 7)
- [10] Tóth Anita, **Gyöngyösi Szilvia**, Dr. Barkóczy Péter: Alumínium ötvözetek újrakristályosodásának szimulációja sejtautomata módszerrel Műszaki Tudomány az

Észak-Alföldi régióban 2010. Nyíregyháza, Magyarország, 2010.05.19 Nyíregyháza: MTA Debreceni Akadémiai Bizottság, pp. 315-320.

- [11] Tóth Anita, **Gyöngyösi Szilvia**, Barkóczy Péter: Minimális bonyolultságú skálázható sejtautomata kiválasztása újrakristályosodás szimulációjához. MISKOLCI EGYETEM KÖZLEMÉNYEI -2.SOROZAT ANYAG - ÉS KOHÓMÉRNÖKI TUDOMÁNYOK: (35) pp. 39-49. (2010)
- [12] **Gyöngyösi Szilvia**, Barkóczy Péter: Átalakulási diagramok számítása allotróp átalakulás esetén sejtautomata szimulációjával MISKOLCI EGYETEM KÖZLEMÉNYEI. 2. SOROZAT, ANYAGMÉRNÖKI TUDOMÁNYOK 36:(1) pp. 25-34. (2011)
- [13] Baleda Tamás, Mertinger Valéria, **Gyöngyösi Szilvia**, Barkóczy Péter: Dc05 lemez újrakristályosodásának vizsgálata. microCAD 2012, D Section: XXVI. International Scientific Conference. Miskolc, Magyarország, 2012.03.29-2012.03.30. Miskolci Egyetem Innovációs és Technológia Transzfer Centrum, pp. D71-D77. Applied Materials Science and Nanotechnology Symposium (ISBN:978-963-661-773-8)
- [14] **Gyöngyösi Szilvia**, Barkóczy Péter, Hlavács Adrienn: Egydimenziós sejtautomata skálázása, microCAD 2012, D Section: XXVI. International Scientific Conference. Miskolc, Magyarország, 2012.03.29-2012.03.30. Miskolci Egyetem Innovációs és Technológia Transzfer Centrum, pp. D201-D206. Applied Materials Science and Nanotechnology Symposium (ISBN:978-963-661-773-8)
- [15] Nemcsik György, Barkóczy Péter, **Gyöngyösi Szilvia**: Trapéz keresztmetszetű huzalok húzástechnológiájának fejlesztése. XIV. Képlékenyalakító konferencia: Miskolc 2012. Miskolc, Magyarország, 2012.02.16-2012.02.18. Miskolc: Miskolci Egyetem, pp. 228-233.(ISBN:978-963-661-985-5)
- [16] G. Rimaszéki, **Szilvia Gyöngyösi**, Peter Barkóczy: Simulation von Rekristallisation mit Zellularautomat, 14th International Students' Day of Metallurgy, Glausthal, 2007.március 22-24
- [17] Barkóczy Péter, **Gyöngyösi Szilvia**: Rövidtávú diffúziós folyamatok szimulációja sejtautomata módszerrel, *BÁNYÁSZATI KOHÁSZATI LAPOK-KOHÁSZAT* 145:(2) pp. 30-34. (2012)
- [18] **Szilvia Gyöngyösi**, Péter Barkóczy: Scaling cellular automaton simulations of short-range diffusion processes *MATERIALS SCIENCE FORUM* 729: pp. 150-155.(2013)
- [19] Demkó Gábor, Barkóczy Péter, **Gyöngyösi Szilvia**: A Miskolci Egyetem közleménye, Anyagmérnöki Tudományok, 1 füzet (37.kötet), 2012, pp. 55-64

Könyv

- [1] Dr. Barkóczy Péter, Gyöngyösi Szilvia: Sejtautomata Anyagtudományi alkalmazásai. 2013

Előadások

- [1] Rövidtávú diffúzióval végbemenő folyamatok szimulációja sejtautomatával, Balatonkenese, szakmai előadás magyar nyelven, 2009.10.12
- [2] Allotróp átalakulás sejtautomata szimulációjának skálázása, Nyíregyháza, Műszaki Tudomány az Észak Alföldi Régióban 2010, szakmai előadás magyar nyelven, 2010.05.19
- [3] Alumínium ötvözetek újrakristályosodásának szimulációja sejtautomata módszerrel, Nyíregyháza, Műszaki Tudomány az Észak Alföldi Régióban 2010, szakmai előadás magyar nyelven, 2010.05.19
- [4] The simulation of phase transformations driven by short range diffusion by cellular automata, Szerbia, Palic, szakmai előadás idegen nyelven, 2010.05.28
- [5] The simulation of phase transformations driven by short range diffusion by cellular automata, XXIV. MicroCad, Miskolci Egyetem, szakmai előadás magyar nyelven, 2010.03.18
- [6] The Scaling of a Cellular Automaton Simulation of Allotropic Transformation, 7th International Conference of PhD Students, szakmai előadás idegen nyelven, 2010.08.10
- [7] Fázisátalakulási folyamatok sejtautomata szimulációinak skálázása, XXIV. Hőkezelő és Anyagtudomány a gépgyártásban, Országos konferencia és szakkiállítás, Balatonfüred, szakmai előadás magyar nyelven, 2010.10.06
- [8] Rövidtávú diffúzió által végbemenő folyamatok sejt automata szimulációinak skálázása, Balatonkenese, szakmai előadás magyar nyelven, 2011.10.11
- [9] Egydimenziós sejtautomata skálázása, XXIV. microCAD International Scientific Conference, Miskolci Egyetem, Szakmai előadás magyar nyelven, 2012.03.30

Irodalomjegyzék

Babarczy Mónika (2013). Nelder-Mead algoritmus és variánsainak alkalmazása, tesztelése. Eötvös Lóránd Tudományegyetem. Operációkutatási Tanszék.

Barkóczy Péter, Roósz András, Geiger János (2000): Újrakristályosodás szimulációja cella automata módszerrel microCAD 2000 International Computer Science Conference. ME ITTC, 2000. pp. 135-139.

Barkóczy P., Somogyi I., Roósz A., Tranta F. (2000). Újrakristályosodás vizsgálata DSC méréssel, XIX. Hőkezelés és Anyagtudomány a Gépgyártásban Országos Konferencia, Székesfehérvár, pp. 53-56.

Barkóczy P, Roósz A, Geiger J (2003). Simulation of Recrystallization by Cellular Automaton Method. MATERIALS SCIENCE FORUM 414-415: pp. 359-363.

Barkóczy P, Roósz A, Geiger J (2004). Újrakristályosító lágyítás tervezése cella automata módszerrel 21st. Heat Treatment and Materials Science for Mechanical Engineering National Conference. pp. 143-148.

Barkóczy P, Roósz A, Geiger J (2004). Simulation of Dynamic Recrystallization by Cellular Automata ACTA METALLURGICA SLOVACA 10 pp. 129-134.

Barkóczy P, Roósz A, Geiger J (2005). Simulation of Dynamic and Meta-dynamic Recrystallization by Cellular Automaton. European Congress on Advanced Materials and Processes. pp. 49

Caneda S. T., Assis W. L., Rios P. R. (2008). Simulation of Recrystallization in Iron Single Crystals. Materials Research, Vol. 11, No. 1, 109-115

Cotteril P, Mould P. r. (1982). Recrystallization and Grain Growth in Metals, Surrey University Press, London.

Fadaei A. H., Setayeshi S., Kia S. (2009). An optimization method based on combination of cellular automata and simulated annealing for VVER-1000 NPP loading pattern. Nuclear Engineering and Design 239. pp. 2800-2808

Gao F., Han L. (2010): Implementing the Nelder-Mead Simplex algorithm with adaptive parameter, Comput. Optim. Appl.

Geiger J, Roósz A (1998). A szemcsedurulás kétdimenziós szimulációja cella automata módszerrel. I rész. A modell felépítése Bányászati Kohászati Lapok-Kohászat 131: pp. 113-121

Geiger J, Roósz A (1998). A szemcsedurulás kétdimenziós szimulációja cella automata módszerrel. II rész. A modell tesztelése és a valós szemcseszerkezetek durvulása Bányászati Kohászati Lapok-Kohászat 131: pp. 456-461

Geiger J, Roósz A (1999). Sok objektumból álló rendszerek modellezése cella automata módszerrel GÉP 51:(11) pp. 25-28.

Geiger J, Roósz A, Barkóczy P (2001). Simulation of grain coarsening in two dimensions by cellular-automaton. ACTA MATERIALIA 49: pp. 623-629.

Gyöngyösi Szilvia, Barkóczy Péter, Tóth Anita (2010). Rövidtávú diffúziós folyamatok szimulációja sejtautomata módszerrel. *MISKOLCI EGYETEM KÖZLEMÉNYEI - 2. SOROZAT ANYAG- ÉS KOHÓMÉRNÖKI TUDOMÁNYOK*1:(35) pp.17-26.

Lee T., Baskes M., Valone S. M., Doll J. D. (2012): Atomistic modeling of thermodynamic equilibrium and polymorphism of iron. *Journal of physics*. Vol. 24. pp.22

Ömböli Norbert (2007). Újrakristályosodás kinetikai kiértékelő módszereinek összehasonlítása. *Tudományos Diákköri Dolgozat*.

Paláncz Béla (2011): Numerikus módszerek. *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem. Fotogrammetria és Térinformatika Tanszék*.

Roosz A, Barkóczy P, Geiger J (2001). Cellular automaton simulation of recrystallisation and grain coarsening 7th European Conference on Advanced Materials and Processes. *Associazione Italiana di Metallurgia*. pp.160.

Roósz A, Barkóczy P, Geiger J (2001). Simulation of Plastic Deformation, Recrystallization and Grain Growth by Cellular Automaton. pp. 356-361.