

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2017.04.042>

УДК 669.017:519.21

В.И. Большаков, В.Н. Волчук, Ю.И. Дубров

ГВУЗ “Приднепровская государственная академия строительства и архитектуры”, Днепр
E-mail: volchuky@yandex.ua

Топологические и фрактальные инварианты структуры для оценки качества металла

Представлено академиком НАН Украины А.Ф. Булатом

Предложен эффективный метод оценки механических свойств металла с применением композиции топологического и фрактального подходов для сотового, пластинчатого, зернистого и игольчатого классов структуры. В его основу положены четыре новых критерия для оценки структуры, полученных с использованием композиции данных подходов, что позволяет уменьшить погрешность при прогнозе характеристик прочности металла в 1,24–2,16 раз в зависимости от его класса.

Ключевые слова: топология, теория фракталов, металл, класс структуры, прогноз свойств.

Поиск взаимоотношений показателей качества металла с его структурой является одной из первостепенных задач современного материаловедения. Ретроспективный анализ публикаций за последние 50 лет, начиная с фундаментальных работ таких ученых как R.T. DeHoff [1] и E.E. Underwood [2] (см. также [3, 4]) показал, что прогноз характеристик качества металлов на основании анализа их структур неосуществим ввиду невозможности получения допустимо точного изображения их реального вида. Последнее обусловлено тем, что процессы формального представления структуры металла, согласно известной гипотезе С. Уолфрема, описываются только численно неприводимыми алгоритмами, результаты которых невозможно предсказать, не выполнив их полностью. В материаловедении такая сингулярность проявляется при идентификации структуры металла и объясняется ее чувствительностью даже к относительно малым изменениям термодинамических характеристик. С нашей точки зрения, при идентификации структуры металла перспективным является топологический подход [5], когда параметры структуры-эталона исследуемой стали принимаются за истинные¹. Оценивая воздействия структур сталей на их свойства, идентифицируемые топологическими эквивалентами, авторы [5] использовали искусственный прием,

¹ За эталон принимается топологическая структура сталей, которая рассматривается как стационарная система, находящаяся в равновесии, при условии, если все границы зерен имеют одинаковую поверхностную энергию (одинаковую форму и размеры).

при котором структура исследуемых сталей представлялась четырьмя классами, согласно их топологическим эквивалентам (сотовая, полосчатая, зернистая, игольчатая).

Учитывая различия реальных показателей качества стали и качества этой же структуры металла, идентифицируемой с учётом ее топологических эквивалентов, основными ее инвариантами можем назвать следующие: 1) средний диаметр зерен d ; 2) форма зерен, оцениваемая по дисперсии δ между средним диаметром зерна d и диаметром одного, отдельно взятого зерна d_g (1); 3) метрическое расхождение E , между площадью зерна исследуемой структуры S_g и площадью ячейки топологического эквивалента S_e этого зерна (2)

$$\delta = \sqrt{(d - d_g)^2} / d, \quad (1)$$

$$E = \sqrt{(S_g - S_e)^2} / S_e. \quad (2)$$

В приведенном подходе не учитывался ряд особенностей реальных структур, обусловленных флуктуациями размеров микрочастиц, формой и неоднородностью их расположения в объеме сплава. Этот подход позволяет производить оперативный анализ качества исследуемых марок сталей, однако коэффициент корреляции r при прогнозе их прочностных характеристик остается относительно невысоким — 0,65–0,78.

Поиск более точного прогноза показателей качества стали привел авторов к учету кроме названных топологических характеристик структур, размерностных (фрактальных) характеристик [6–12]. При топологическом подходе учитываются такие характеристики структур сталей, как, например, линейные размеры микрочастиц, объем фаз и другие. Свойства металла также зависят от формы и границы зерен, обусловленных, например, пластической деформацией, транскристаллизацией, анизотропией роста или растворения. При этом предполагается, что чем больше будут деформированными границы зерен, тем большим будет различие геометрических характеристик с топологическим эквивалентом. Таким образом, чем больше отличается форма зерен от формы зерен эквивалента, тем больше будет разница между топологической и фрактальной размерностями. Вероятно, неучет этого факта объясняет относительно невысокую сходимость результатов прогноза предела текучести для стали ($r = 0,65$) с применением топологических характеристик [5].

В предлагаемом методе за фрактальный эквивалент структуры сталей принимается фрактальная размерность D ее элементов (зерен, пластин, игл) в зависимости от исследуемого класса металла. С этой целью введены инварианты для оценки элементов структуры с учетом композиции их топологических и фрактальных характеристик.

1. Для учета влияния формы зерна на характеристики стали вводилось отношение диаметра зерна к его фрактальной размерности — относительный диаметр зерна:

$$k_D = d / D, \quad (3)$$

где $d = L / N$ — средний диаметр зерна, определяемый как отношение суммарной длины отрезков L к общему числу зерен N , пересеченных этими отрезками; D — средняя величина фрактальной размерности зерна, оцениваемая по формуле Хаусдорфа (4) [13]:

$$D = -\lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\ln N(\delta)}{\ln \delta}, \quad (4)$$

где $N(\delta)$ — количество клеток размером δ , покрывших исследуемый объект.

2. Поскольку длина межфазных и внутрифазных границ поликристаллов, включая и межзеренные границы, являющиеся двумерными дефектами, существенно влияет на ряд их механических свойств, вводился коэффициент, отображающий относительную длину межфазных и внутрифазных границ:

$$l_D = (l / S) / D, \quad (5)$$

где l — длина межфазных и внутрифазных границ, приходящаяся на единицу площади S , рассчитываемая с помощью курвиметра; D — фрактальная размерность межфазных и внутрифазных границ. В формуле (5) оценивается “извилистость” границ, которая не учитывается традиционными методами, а по величине их фрактальной размерности.

3. Разница между реальной структурой и ее топологическим эквивалентом определялась по величине дисперсии зерен. Форма зерен отображается в дисперсии δ_D , вычисляемой как разница между относительным диаметром зерна k_D (3) и относительным диаметром ячейки топологического эквивалента k_e :

$$\delta_D = \sqrt{(k_D - k_e)^2} / k_D, \quad (6)$$

где $k_e = d_e / X$, d_e — относительный диаметр ячейки эквивалента, который определяется как наибольшее расстояние между двумя точками на границе зерна; X — размерность ячейки эквивалента на плоскости, принимаем ее равной евклидовой размерности. Учет несоответствия реальной структуры стали по сравнению с эталоном проводился по формуле (6).

4. Так как внутренняя метрика шлифа является функцией его фрактальной размерности, то в ней отображаются характеристики качества стали [9, 12], что характеризуется метрическим расхождением структуры с ее топологическим эквивалентом:

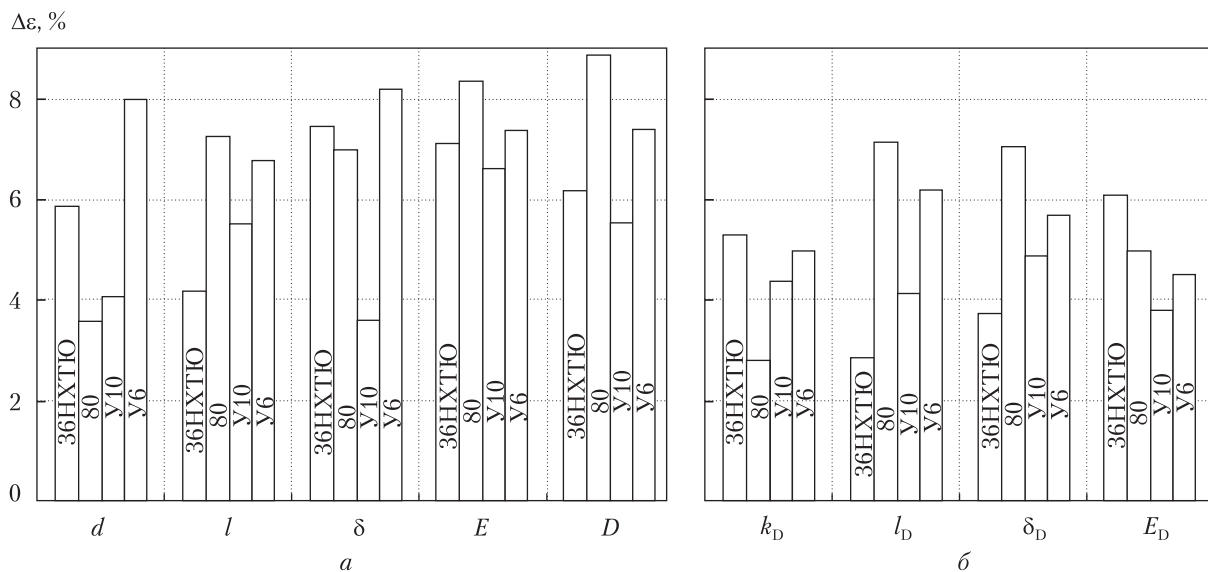
$$E_D = \sqrt{\left(\frac{S}{D} - \frac{S_e}{X}\right)^2} / (S / D), \quad (7)$$

где S и D — площадь и фрактальная размерность зерна исследуемой структуры соответственно; S_e — площадь ячейки топологического эквивалента.

В данной работе проведен сравнительный анализ методов прогноза характеристик качества стали с применением топологического, фрактального подходов и их композиции согласно принятым классам структуры. Характеристики исследуемых классов структуры металла приведены в таблице.

На графиках рисунка показана относительная погрешность прогноза прочностных характеристик сталей при заданных выше условиях.

Из графиков следует, что наилучшая точность прогноза прочности по топологическим характеристикам наблюдается для зернистого класса стали. Это можно объяснить тем, что фрактальная размерность элементов структуры данного класса незначительно отличается от евклидовой. Так, для стали У10 точность прогноза показателей прочности составляет 0,94 по сравнению с топологическим подходом, что обусловлено узким диапазоном изменения размерности зернистого перлита — 1,98–2, благодаря округлой форме зерен, и, соответственно, низкой чувствительностью фрактального подхода при оценке свойств. Из представленных графиков следует, что погрешность при прогнозе прочностных характеристик для сотового, полосчатого и игольчатого классов металла с применением композиции топо-



Относительная погрешность прогноза $\Delta \varepsilon$ предела текучести для сталей 36НХТЮ, 80 и предела прочности для сталей У10, У6 с использованием топологического, фрактального подходов (а) и их композиции (б)

| Величина | 36НХТЮ | Сталь 80 | | У10 | У6 |
|---|--------------|------------------------------------|---------------------|--------------------------|-----------------------------|
| Класс структуры | Сотовая | Полосчатая | | Зернистая | Игольчатая |
| Составляющие структуры | Аустенит | Пластинчатый перлит | | Зернистый цементит | Троостит закалки, мартенсит |
| Термообработка | Нормализация | горячая деформация (ковка и отжиг) | | Отжиг | Закалка с 800 °С в воду |
| <i>Топологический подход</i> | | | | | |
| Диаметр зерен, d (мкм) | 10–16 | Феррит 0,6–1 | Цементит 0,8–1,3 | 2,4–3,1 | 1,1–1,5 |
| Дисперсия зерен, δ | 0,29–0,35 | 0,10–0,16 | 0,10–0,15 | 0,21–0,27 | 0,34–0,42 |
| Метрическое расхождение, E | 0,21–0,27 | 0,08–0,13 | 0,09–0,12 | 0,26–0,34 | 0,17–0,24 |
| Длина межфазных и внутрифазных границ, l , мм/мм ² | 780–2410 | (310÷365)·10 ³ | | (98÷174)·10 ³ | (92÷150)·10 ³ |
| Объемная доля, ω_f | — | 0,32 | 0,68 | 0,41 | — |
| <i>Фрактальный подход</i> | | | | | |
| Фрактальная размерность, D | 1,62–1,94 | 1,73–1,84 | 1,71–1,89 | 1,83–1,98 | 1,57–1,81 |
| <i>Композиция топологического и фрактального подходов</i> | | | | | |
| Относительный диаметр зерен, k_D , мкм | 5,4–11 | 0,37–0,64 | 0,45–0,77 | 1,31–1,69 | 0,72–0,93 |
| Дисперсия зерен, δ_D | 0,23–0,30 | 0,12–0,17 | 0,07–1,1 | 0,23–0,29 | 0,20–0,25 |
| Метрическое расхождение, E_D | 0,16–0,23 | 0,07–0,10 | 0,09–0,14 | 0,14–0,35 | 0,06–0,11 |
| Относительная длина межфазных и внутрифазных границ, l_D мм/мм ² | 415–1440 | (168÷207)·10 ³ | | (51÷94)·10 ³ | (54÷89)·10 ³ |

логического и фрактального подходов ниже в 1,24–2,16 раза. Последнее можно объяснить тем, что при топологическом подходе учитываются такие геометрические характеристики элементов структуры как их длина, площадь, объем, однако при этом не учитываются другие характеристики структуры, определяемые с применением фрактального подхода. При фрактальном подходе учитываются разница между формой зерна и его топологическим эквивалентом; “извилистость” границ зерен, которая не фиксируется традиционными методами при оценке показателей качества; дисперсия формы зерен между относительным диаметром зерна и относительным диаметром его топологического эквивалента, а также метрическое расхождение структуры с ее топологическим эквивалентом. Эти подходы взаимно дополняют друг друга, поскольку представляют дополнительную информацию о влиянии режимов обработки металла на структуру и, соответственно, на свойства.

Приведем уравнения регрессии для функции определяющего параметра названных выше классов структур с учетом композиции топологического и фрактального подходов (8)–(11), при которых наблюдается наименьшая погрешность.

Для сотовой структуры:

$$P = x_1 k_D + x_2 l_D + x_3 \delta_D + x_4 E_D = 40,87k_D + 0,27l_D + 553,81\delta_D - 273,37E_D \quad (r = 94), \quad (8)$$

где P – параметр (выбранное к рассмотрению механическое свойство); x_1, x_2, x_3, x_4 – вклад диаметра, длины зерен, дисперсии и метрического расхождения в значение параметра соответственно.

Для полосчатой структуры:

$$P = \omega_f(x_1 k_D + x_2 l_D + x_3 \delta_D + x_4 E_D) + (1 - \omega_f) \times (x_1 k_D + x_2 l_D + x_3 \delta_D + x_4 E_D) = \omega_f(-151,34k_D + 0,005l_D - 1012,41\delta_D - 964,46E_D) + (1 - \omega_f) \times (46,71k_D + 0,005l_D + 104,36\delta_D - 969,24E_D) \quad (r = 87). \quad (9)$$

Эта формула состоит из двух частей, каждая из которых построена так, как и в предыдущем примере. Величина ω_f указывает на процентное содержание феррита в структуре, поэтому является уравнивающим коэффициентом для обеих частей уравнения, показывающих влияние феррита и цементита соответственно.

Для зернистой структуры:

$$P = \omega_f(x_1 k_D + x_2 l_D + x_3 \delta_D + x_4 E_D) = \omega_f(-706,33k_D + 0,02l_D + 1005,48\delta_D + 4612,82E_D) \quad (r = 85). \quad (10)$$

В данном уравнении использовался тот же принцип что и в (11) для определения влияния свойств зерен на определяющий параметр, величина ω_f указывает на количество зерен.

Для игольчатой структуры уравнение имеет следующий вид:

$$P = x_1 k_D + x_2 l_D + x_3 \delta_D + x_4 E_D = 369,72k_D + 0,005l_D - 240,64\delta_D + 113,09E_D \quad (r = 89). \quad (11)$$

Таким образом, показано, что композиция топологического и фрактального методов дает более точный прогноз, чем каждый из названных подходов в отдельности друг от друга.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Russ J.C., Dehoff R.T. Practical Stereology. New York: McGraw-Hill, 2000. 381 p.
2. Underwood E.E. Quantitative Stereology. Boston: Addison-Wesley, 1970. 274 p.
3. Салтыков С.А. Стереометрическая металлография. Москва: Металлургия, 1976. 270 с.
4. Соколов В.Н. Количественный анализ микроструктуры горных пород по их изображениям в растровом электронном микроскопе. *Соросов. образоват. журн.* 1997. № 8. С. 72–78.
5. Большаков В.И., Дубров Ю.И., Касьян О.С. Микроструктура стали как определяющий параметр при прогнозе ее механических характеристик. *Допов. Нац. акад. наук Укр.* 2010. № 6. С. 89–96.
6. Гринченко В.Т., Мацыпура В.Т., Снарский А.А. Введение в нелинейную динамику. Хаос и фракталы. Киев: Наук. думка, 2005. 263 с.
7. Булат А.Ф., Дырда В.И. Фракталы в геомеханике. Киев: Наук. думка, 2005. 356 с.
8. Mandelbrot B.B. Fractal Analysis and Synthesis of Fracture Surface Roughness and Related Forms of Complexity and Disorder. *Int. J. Fract.* 2006. **138**, № 1. P. 13–17.
9. Lung C.W., March N.H. Mechanical Properties of Metals. Atomistic and Fractal Continuum Approaches. Singapore: World Scientific, 1999. 416 p.
10. Sabirov I., Yang C., Mullins J., Hodgson P.D. A theoretical study of the structure–property relations in ultrafine metallic materials with fractal microstructures. *Materials Science & Engineering A*. 2013. **559**. P. 543–548.
11. Balankin A.S. Stresses and strains in a deformable fractal medium and in its fractal continuum model. *Phys. Lett. A*. 2013. **377**, № 38. P. 2535–2541.
12. Большаков В.И., Дубров Ю.И. Об оценке применимости языка фрактальной геометрии для описания качественных трансформаций материалов. *Допов. Нац. акад. наук Укр.* 2002. № 4. С. 116–121.
13. Hausdorff F. Dimension und äußeres Maß. *Mathematische Annalen*. 1919. **79**. P. 157–179.

Поступило в редакцию 15.04.2016

REFERENCES

1. Russ, J.C., & Dehoff, R.T. (2000) Practical Stereology. New-York: McGraw-Hill.
2. Underwood, E.E. (1970) Quantitative Stereology. Boston: Addison-Wesley.
3. Saltykov, S.A. (1976) Stereometric Metallography. Moscow: Metallurgy (in Russian).
4. Sokolov, V. N. (1997). Quantitative microstructure analysis of rocks by the processing of their scanning-electron microscope (SEM) images. *Sorosov. obrazovatel'n. zhurn.*, No. 8, pp. 72-78 (in Russian).
5. Bol'shakov, V. I., Dubrov, Yu. I. & Kasian, O. S. (2010). Steel microstructure as a defining parameter in the prediction of its mechanical properties. *Dopov. Nac. akad. nauk Ukr.*, No. 6, pp. 89-96 (in Russian).
6. Grinchenko, V.T., Matsypura, V.T., & Snarskiy, A.A. (2005) Introduction to nonlinear dynamics. Chaos and Fractals. Kyiv: Nauk. Dumka (in Russian).
7. Bulat, A.F., Dyrda, V.I. (2005) Fractals in geomechanics. Kyiv: Nauk. Dumka (in Russian).
8. Mandelbrot, B. B. (2006). Fractal Analysis and Synthesis of Fracture Surface Roughness and Related Forms of Complexity and Disorder. *Int. J. Fract.*, 138, No. 1, pp. 13-17.
9. Lung, C.W., March, N.H. (1999) Mechanical Properties of Metals. Atomistic and Fractal Continuum Approaches. Singapore: World Scientific.
10. Sabirov, I., Yang, C., Mullins, J. & Hodgson, P. D. (2013). A theoretical study of the structure-property relations in ultrafine metallic materials with fractal microstructures. *Materials Science & Engineering A*, 559, pp. 543-548.
11. Balankin, A. S. (2013). Stresses and strains in a deformable fractal medium and in its fractal continuum model. *Phys. Lett. A*, 377, No. 38, pp. 2535-2541.
12. Bolshakov, V. I. & Dubrov, Yu. I. (2002). An estimate of the applicability of fractal geometry to describe the language of qualitative transformation of materials. *Dopov. Nac. akad. nauk Ukr.*, No. 4, pp. 116-121 (in Russian).
13. Hausdorff, F. (1919). Dimension und äußeres Maß. *Mathematische Annalen*, 79, pp. 157-179.

Received 15.04.2016

В.И. Большаков, В.М. Волчук, Ю.И. Дубров

ДВНЗ “Придніпровська державна академія будівництва та архітектури”, Дніпро
E-mail: volchuky@yandex.ua

ТОПОЛОГІЧНІ ТА ФРАКТАЛЬНІ ІНВАРІАНТИ СТРУКТУРИ ДЛЯ ОЦІНКИ ЯКОСТІ МЕТАЛУ

Запропоновано ефективний метод оцінки механічних властивостей металу із застосуванням композиції топологічного та фрактального підходів для сотового, пластинчатого, зернистого та голчатого класів структури. В його основу покладено чотири нових критерії для оцінки структури, отриманих з використанням композиції даних підходів, що дозволяє зменшити похибку при прогнозі характеристик міцності металу в 1,24–2,16 разів в залежності від його класу.

Ключові слова: *топология, теория фракталів, метал, клас структури, прогноз властивостей.*

V.I. Bol'shakov, V.M. Volchuk, Yu.I. Dubrov

Prydneprov's'ka State Academy of Civil Engineering and Architecture, Dnipro
E-mail: volchuky@yandex.ua

TOPOLOGICAL AND FRACTAL INVARIANTS OF A STRUCTURE TO ASSESS THE QUALITY OF A METAL

An efficacious method of evaluating the mechanical properties of a metal with the application of a composition of the topological and fractal approaches for the cellular, lamellar, granular, and needle-grade classes of a structure is proposed. It is based on four new criteria for the evaluation of new structures and allows one to reduce the error in the prediction of strength characteristics of a metal by 1.24–2.16 times depending on its class.

Keywords: *topology, fractal theory, metal, class of a structure, forecast of properties.*