

Фрактальна структура кулястого графіту у високоміцному чавуні* (огляд)

О.В. Соценко, доктор технічних наук, професор

Національна металургійна академія України, Дніпропетровськ

Розглянуто можливість застосування методів фрактальної геометрії до опису морфології включень кулястого графіту в чавуні. Показано, що глобулярні графітні включення є фрактальними структурами. Приведена методика і результати оцінки фрактальної розмірності включень глобулярного графіту в чавуні. Показано, що фрактальна розмірність може бути використана для оцінки ступеня компактності включень графіту.

Один з перших критичних аналізів відомих за публікаціями гіпотез формування кулястого графіту (КГ) в чавуні на різних етапах їх розвитку наведено в 1961 р. в роботі [1]. Автори відзначають недостатнє аргументування ряду найпоширеніших гіпотез, віддаючи перевагу гіпотезі утворення графіту в мікроскопічних газових пузирях. У роботі, опублікованій в 1982 р. [2], що містить критичний огляд гіпотез після 20 років від дати публікації першого огляду, вказується увага на суперечності теорії і фактів, що дозволяє вважати теорію формування графіту в газових пузирях необґрунтованою в поясненні механізму цього процесу. Проте, в черговому критичному аналізі «загальноприйнятих» гіпотез утворення кулястого графіту [3], опублікованого в 2003 р., пропонується не тільки черговий варіант процесу на основі бульбашкової теорії, але він поширюється [4] і на механізм формування графіту в чавуні з вермикулярним графітом (ВГ).

На фоні практично не продуктивної дискусії і конкуренції різних гіпотез формування кулястого графіту в чавуні протягом понад чотирьох десятиліть [1 – 4] необхідний пошук нових підходів, не тривіальних рішень, а також розробка і застосування комп'ютерних моделей для опису і дослідження впливу різних чинників на процеси формування компактних форм графіту в модифікованому чавуні. Представляється маловірогідним припущення, що формування кулястого і вермикулярного графіту в чавуні повинно здійснюватися на основі якихось «унікальних» механізмів, властивих тільки модифікованим чавунам. Ігнорувати класичні уявлення про агрегативну стійкість дисперсної фази в різних дисперсійних середовищах, включаючи і високотемпературні розплави, було б некоректно.

Фрактальний підхід відповідає сучасному рівню аналізу і розуміння фізичної природи систем і явищ. Ідеї і методи фрактального аналізу успішно реалізуються в матеріалознавстві [5], при оцінці структури і властивостей металів [6], металознавстві, металургії, ливарному виробництві [7, 8] тощо. В останні десятиліття кількість публікацій про фрактали і прикладення фрактальної геометрії в науці і техніці зростає експоненційно. Фрактальний аналіз дозволяє набагато спростити складні процеси і об'єкти, що важливо для розуміння їх сутності, моделювання і опису.

*Стаття друкується в порядку обговорення

У даній роботі розглядається можливість застосування методів фрактальної геометрії до опису морфологічних особливостей і механізму формування включень графіту у чавуні з кулястим графітом.

Кулястий графіт як фрактальна структура Один з фундаторів теорії фракталів Б. Мандельброт визначає фрактал як структуру, що складається з часток, які в якомусь сенсі подібні цілому [9]. Самоподібність є головною особливістю ієрархічної організаційної структури фракталів. Самоподібність або масштабна інваріантність має на увазі, що зовнішня – спостережувана форма об'єкту, що вивчається, або явища, будучи представлена в графічному вигляді, включає велику кількість копій (клонів) різного масштабу, що утворилися за одним механізмом. Як геометричний об'єкт фрактал характеризується дробною нецілочисельною розмірністю.

Об'єктом дослідження були статистично представницькі «аномальні» графітні структури, що формують в широкому діапазоні швидкостей тверднення магнієвих чавунів – в циліндричних зразках діаметром 2 – 400 мм, відлитих в кокіль і в сухі піщані форми; а також в призматичних зразках завтовшки 0,8 мм, одержаних високошвидкісним гартуванням розплаву при вакуум-всмоктуванні його в кварцові трубки і капіляр мідного холодильника. Хімічний склад досліджених чавунів (% мас. частка): 3,10 – 4,20 С, 0,93 – 3,20 Si, 0,10 – 0,50 Mn, 0,01 – 1,05 Р, 0,01 – 0,02 S, 0,03 – 0,05 Mg.

У роботі [10] показано, що основним субструктурним елементом включень графіту в чавунах з кулястим графітом незалежно від їх морфологічних типів (рис. 1) є переважно автономний пірамідальний полікристалічний блок (АППБ).

Характер взаємодії і відносна орієнтація при агрегації і кооперованому зростанні таких автономних пірамідальних полікристалічних блоків із загальною центру (рис. 1 г, рис. 2 а, б, г) або від деякої просторової лінії (рис. 1 б; рис. 2 в) визначають утворення різних форм включень графіту, спостережуваних в чавунах з кулястим (ЧКГ) і вермикулярним графітом (ЧВГ) [11]. Характерною особливістю таких АППБ є те, що оптично виявляється “макрошорсткість” їх поверхні. Таку шорсткість створюють пірамідальні блоки (ПБ) дисперсного графіту (рис. 1, рис. 2 а, б). Дисперсні ПБ часто фіксуються в затверділій матричній рідині на стадії їх руху в зону формування АППБ в структурі квазікулястого агрегату [10].

Аналогічні закономірності будови притаманні і для морфологічної групи двошарових включень графіту. Формування зовнішнього шару цих включень так само, як і внутрішнього ядра (рис. 2 г) відбувається за допомогою кооперованого

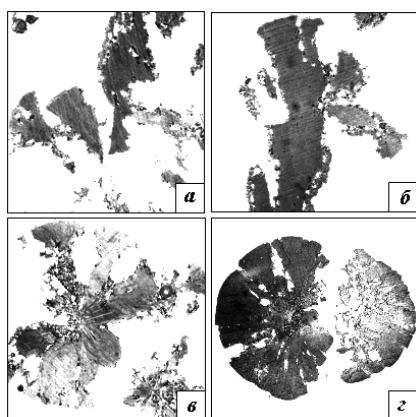


Рис. 1. Поліцентрична лінійна (а, б), моноцентрична радіальна (в, г) орієнтація АППБ графіту.

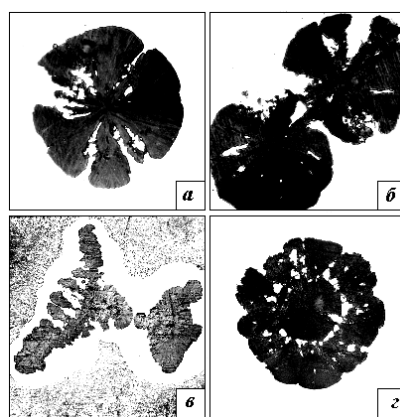


Рис. 2. Коопероване зростання АППБ і розподіл матричної рідини на міжблокових межах включень графіту.

зростання АППБ. При цьому як в структурі ядра, так і зовнішнього шару спостерігаються однакові ознаки попереднього ущільнення шорстких границь між АППБ – радіальні рядки ділянок матричної рідини і мікропористості із відповідними їм епіциклоїдальними западинами зовнішнього контуру перетину [10].

Важливим експериментальним доказом формування в розплаві АППБ графіту різного ступеня дисперсності є структури графіту із “аномальним” зовнішнім шаром (рис. 3). На поверхні щільних глобулярних включень утворюється рихлий шар

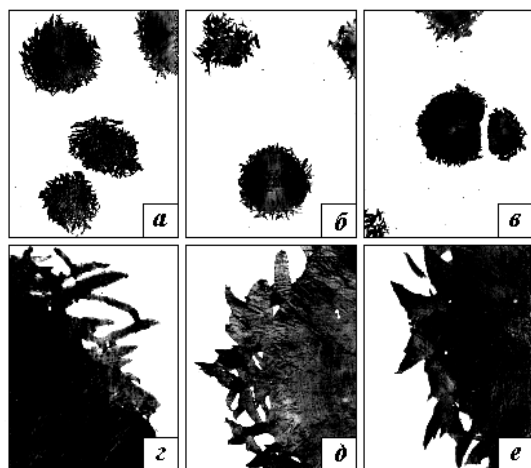


Рис. 3. Різновиди аномальної будови зовнішнього шару компактних включень графіту. а – в – $\times 100$, г – е – $\times 500$.

різно орієнтованих дисперсних АППБ нижчого рівня ієрархічної структури графітного агрегату (рис. 3 а – в).

Присутність у структурі графітних включень різнорівневих за масштабом фрагментів графіту із стійкою пірамідальною формою їх випадкових перетинів дає підстави віднести графітну фазу в ЧКГ до так званих нерегулярних фракталів, що виявляють самоподібність у великому діапазоні збільшень. Для графітних включень ієрархія самоподібності обмежується рівнем формування АППБ (кругових секторів) на етапі ущільнення їх в квазіглобулярні агрегати різного ступеня щільності.

Фрактальна розмірність графіту Спроба застосування теорії фракталів до опису процесів формування і морфології включень компактного графіту в ЧКГ вимагає хоча б стислого попереднього розгляду деяких основних положень цієї теорії. Однією з основних характеристик фрактала або фрактальної системи є фрактальна розмірність (D). Фрактальна розмірність – основна характеристика того, як кластер заповнює займаний ним простір. На підставі фрактальної розмірності можна зробити припущення про механізм формування кластерного агрегату [12].

Фрактальна розмірність системи на відміну від топологічної (точка має розмірність 0, лінія – 1, площа – 2, куб – 3) нецілочисельна. Вона вимірюється як оцінка параметра самоподібності і характеризує геометричну складність об’єкту. Вона також до певної міри характеризує швидкість збільшення елементів фрактала із збільшенням інтервалу масштабів, в якому він розглядається.

Наочним класичним прикладом, що характеризує фрактал і його фрактальну розмірність, є лист паперу, зім’ятий в кулю [13]. Ця куля не може розглядатися як двовимірна, оскільки вона має довжину, ширину і висоту. Але вона не може бути і тривимірною, оскільки вона не повністю однорідна, бо зроблена із одного нескінченно тонкого аркуша. Фрактальна розмірність цієї кулі приблизно дорівнює 2,5. При цьому її нормальна (Евклідова) розмірність дорівнює 3.

Для визначення фрактальної розмірності на площині фрактальна структура покривається мережею квадратів все меншого розміру (рис. 4). Якщо $N(L)$ – число квадратів із стороною L , необхідних для покриття

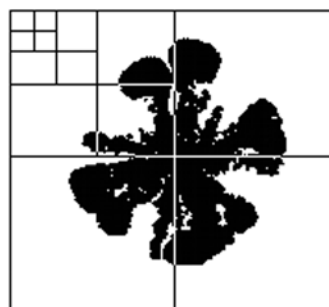


Рис. 4. Схема до визначення фрактальної розмірності включення графіту.

фрактальної структури, графік подвійного логарифму від $N(L)$ як функції від L має кутівий коефіцієнт, рівний D :

$$D = \lim_{L \rightarrow 0} \frac{\ln N(L)}{\ln L}.$$

Такі вимірювання з використанням фото-зображень, наприклад, мікроструктур різного масштабу або збільшення дають у підсумку результати близькі до інваріантних значень D . Такий метод називають «методом ящиків».

Для кількісної характеристики включень компактного графіту на різних стадіях його формування [14 – 16] використовували значення фрактальної розмірності (D), які визначали за допомогою комп'ютерних програм *ImageJ* і *Fractal Analysis*. Для тестування цих програм були використані прості геометричні фігури, а також класичні фрактали Коха після декількох ітерацій. Розбіжність результатів, отриманих за допомогою обох програм для однакових об'єктів, не перевищувала 5 %, що забезпечує достатньо високий рівень відтворюваності. Узгодженість значень для розмірності вказує на придатність розглянутих вище аксіом фрактального числення.

Мікрофотографії включень графіту або їх фрагментів, що мають відтінки сірого кольору, піддавали бінаризації, тобто перетворенню в чорно-білий варіант. Це дозволило отримати висококонтрастні зображення із чітко помітними елементами досліджуваної структури. Фрагменти знімків екрану монітора із результатами визначення D в програмі *ImageJ* приведені на рис. 5.

Для декількох типів включень компактного графіту були знайдені фрактальні розмірності поверхонь і контурів їх випадкових перетинів. Проведено зіставлення значень фрактальної розмірності класичних фракталів із фрактальною розмірністю реальних графітних структур. Так, для перетину графіту, показаного на рис. 5 а,

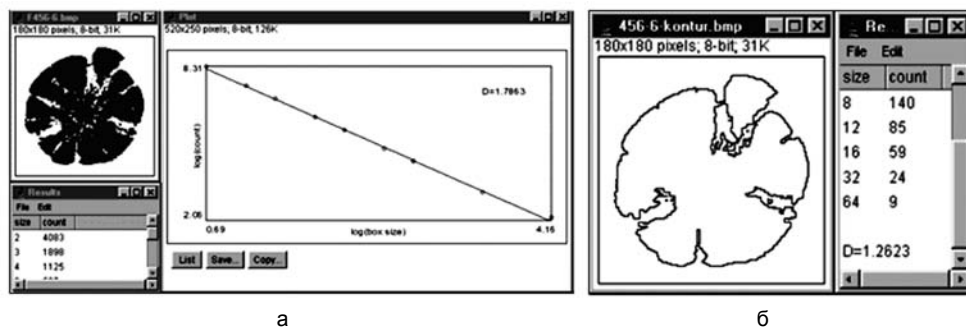


Рис. 5. Оцінка фрактальної розмірності діаметрального перетину (а) і контура (б) графітного включення.

$D = 1,79$. Близьку до цього значення розмірність має «сніжинка» Коха – $D = 1,71$ [17]. Для контура графітного включення, показаного на рис. 5 б, $D = 1,26$. Це значення повністю співпадає із фрактальною розмірністю контура «сніжинки» Коха ($D = 1,26$). Близькість значень фрактальної розмірності досліджених графітних структур із аналогічними за структурою класичними фракталами є одним з доказів правомірності застосування основних положень теорії фракталів до процесів графітоутворення у виробництві високоміцного чавуну з кулястим графітом.

Фрактальна розмірність може бути успішно використана як ще одна кількісна оцінка форми і морфології графітних включень поряд із відомими оцінками фактору форми і компактності [18]. Перевага фрактальної розмірності порівняно з вказаними оцінками полягає в можливості комп'ютеризації отримання таких оцінок без застосування шкал порівняння реальних структур із еталонними.

Комп'ютерна модель процесу Одним з найвірогідніших і експериментально підтверджених механізмів формування включень квазіглобулярного графіту в ЧКГ є агрегативно-коагуляційний [19, 20]. Дослідження ранніх стадій формування графітних включень показало, що цей процес відбувається в результаті агрегації дисперсних субмікроскопічних блоків-кристалітів за дифузійним механізмом [10, 15]. Для подібних агрегатів часто використовують поняття фрактального кластера, під яким розуміють структуру, що утворюється внаслідок агрегації частинок за умови дифузійного характеру їх руху. У зв'язку з цим перспективним є моделювання процесу агрегації частинок в умовах імітації різних температур і концентрацій дисперсної фази. В ході проведення чисельних експериментів були виявлені нові закономірності в структурній організації агрегатів колоїдних частинок, показано, що агрегати мають самоподібну або фрактальну структуру [9]. Для дослідження таких об'єктів часто застосовують модельні фрактали. Змодельованому фрактальному кластеру з власною фрактальною розмірністю можна співставити реальний кластер або агрегат, який також має фрактальну структуру і таку ж фрактальну розмірність. Таким чином, досліджуючи властивості модельного фрактального кластера, можна проаналізувати властивості реальних кластерів із фрактальною структурою.

У 1981 році Т. Віттен і Л. Сандер [21] запропонували просту модель дифузійної агрегації частинок (DLA – diffusion limited aggregation). Цікавість до цієї моделі була викликана, по-перше, тим, що багато фізичних об'єктів формується приблизно за таким механізмом. По-друге, при відносно простій моделі можна врахувати вплив багатьох чинників. В рамках цієї моделі фрактальна структура формується із наночасток таким чином: частинки надходять (виділяються) із віддаленого джерела і рухаються, здійснюючи випадкові броунівські рухи. Досягнувши кластера (спочатку – центру кристалізації), частинки приєднуються до нього, утворюючи квазіглобулярні структури різної щільності. В результаті утворюється пористий кластер, послідовні стадії формування якого (а – е) зображені на рис. 6. Усередині кластера між його гілками росту утворюються пори – ділянки матричної рідини. По мірі зростання структури число пор і їх розміри збільшуються, що обумовлене ефектом екранування. Екранованими виявляються елементи кластера, розташовані в западинах його звивистої фрактальної поверхні, куди вірогідність попадання частинок із навколишньої матричної рідини – макрофази дуже мала. Тому частинки дисперсної фази приєднуються до таких центрів зростання кластера, які більш доступні для контакту. Ці центри розташовані на виступах поверхні кластера. Тому екрановані центри зростання фрактального кластера залишаються нереалізованими. Вони зберігаються в процесі зростання кластерів у внутрішніх замкнених порах. Цим і пояснюється зниження середньої щільності частинок фрактального кластера по мірі віддалення від створюючого центру. У двовимірному випадку фрактальна розмірність такого кластера виявляється близькою до значення 1,7.

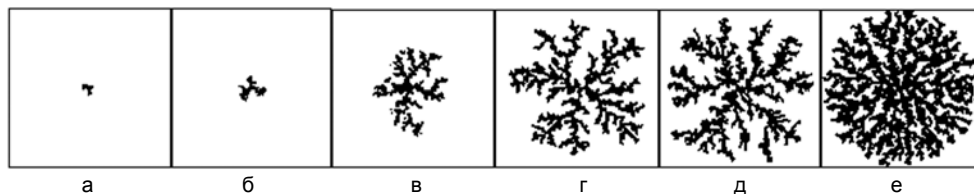


Рис. 6. Динаміка формування фрактального кластера в процесі DLA.

Експериментально встановлений факт формування в розплаві графітних включень із пірамідальних частинок різного рівня дисперсності [10, 11] дозволяє розглядати зростання квазіглобулярних і двошарових (рис. 7 а) включень графіту як

результат кооперованого зростання їх окремих субструктурних елементів в умовах обмеження дифузії. Це обмеження може бути зумовлене як і для модельних кластерів (див. рис. 6), або нестачею «будівельного матеріалу», або недоступністю його проникнення у вузькі радіальні міжблочні канали (див. рис. 7 а). Зіставлення морфологічних особливостей різних графітних включень на різних стадіях їх формування з модельними DLA-кластерами (див. рис. 6, 7 б) дає підстави стверджувати, що механізм їх формування аналогічний і реалізується на основі DLA-моделі.

Висновки Дослідження морфології включень графіту в ЧКГ показали, що вони мають самоподібну або фрактальну структуру. Це дає підстави стверджувати, що графітні включення і їх агрегати можуть бути одним з центральних об'єктів прикладення теорії фракталів в дослідженні процесів структуроутворення в ЧКГ і ЧВГ.

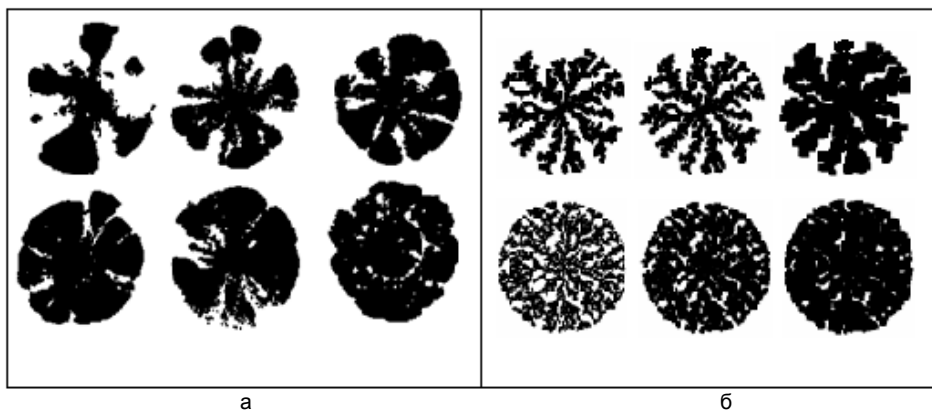


Рис. 7. Варіанти морфології графітних включень (а) і DLA-моделей (б).

Фрактальна розмірність може бути успішно використана як ще одна кількісна оцінка форми і морфології графітних включень поряд із відомими оцінками фактору форми і компактності. Перевага фрактальної розмірності в порівнянні з вказаними оцінками полягає в можливості комп'ютеризації отримання таких оцінок без застосування шкал порівняння реальних структур із еталонними.

Зіставлення морфологічних особливостей різних графітних включень на різних стадіях їх формування із модельними DLA-кластерами дає підстави стверджувати, що механізм їх формування аналогічний і реалізується на основі DLA-моделі.

Література

1. Справочник по изготовлению отливок из высокопрочного чугуна / Под общ. ред. А.А. Горшкова. – Москва-Киев: Машгиз, 1961. – 300 с.
2. Неижко И.Г. О теориях образования шаровидного графита // Кристаллизация, структурообразование и свойства модифицированного чугуна. – Киев: ИПЛ АН УССР. – 1982. – С. 3 – 14.
3. Баранов А.А., Баранов Д.А. К теории образования в чугуне шаровидного графита // Металл и литье Украины. – 2003. – № 9 – 10. – С. 42 – 45.
4. Баранов Д.А. О механизме формирования вермикулярного графита при затвердевании чугуна. // Литейн. пр-во. – 2004. – № 10. – С. 2 – 3.
5. Иванова В.С., Баланкин А.С., Бунин И.Ж. Синергетика и фракталы в материаловедении. – М.: Наука, 1994. – 384 с.

6. Барахтин Б.К., Мещеряков Ю.И., Савенков Г.Г. Динамические и фрактальные свойства стали СП-28 в условиях высокоскоростного нагружения // ЖТФ. – 1998. – 68, № 10. – С. 43 – 49.
7. Михалев А.И., Деревянко А.И., Помулев В.В. Применение методов фрактальной геометрии для анализа металлоструктур // Вестник ХГТУ. – 2001. – 3(12). – С. 178 – 180.
8. Таран Ю.Н., Михалев А.И., Хрычиков В.Е. Фрактальная модель роста зерен при затвердевании сплавов // Современные проблемы металлургии. – Днепропетровск: НМАУ. – 2001. – 3. – С. 414 – 421.
9. Федер Е. Фракталы. – М.: Мир, 1991. – 260 с.
10. Соценко О.В. Особенности формирования структуры графита в модифицированных чугунах // Литейн. пр-во. – 1983. – № 12. – С. 5 – 8.
11. Соценко О.В. Кинетические закономерности процесса формирования графита в высокопрочном чугуне // Литейн. пр-во. – 1984. – № 11. – С. 4 – 6.
12. Смирнов Б.М. Физика фрактальных кластеров. – М.: Наука, 1991. – 134 с.
13. Тугой И. Фрактальная размерность: скрытые измерения. – Режим доступа: <http://www.ghcube.com/fractals/general.html>.
14. Соценко О.В. Исследование ранних стадий формирования графита в ЧШГ // Эвтектика-VI. – Запорожье, 2003. – С. 180 – 182.
15. Соценко О.В. Аномальные формы графита в модифицированном чугуне // Теория и практика металлургии. – 1998. – № 4. – С. 17 – 20.
16. Соценко О.В. Особливості формування кулястого графіту в половинчастому чавуні // Металознавство та обробка металів. – 1999. – № 4. – С. 3 – 8.
17. Третьяков Ю.Д. Дендриты, фракталы и материалы // Соросовский образовательный журнал. – 1998. – № 11. – С. 96 – 102.
18. Соценко О.В. Оценка компактности включений графита в высокопрочном чугуне // Литейн. пр-во. – 1982. – № 6. – С. 5 – 7.
19. Соценко О.В. Агрегативный механизм формирования графита в ЧШГ // Изв. вузов. Черн. металлургия. – 1990. – № 8. – С. 71 – 74.
20. Соценко О.В. Физическая модель агрегативного формирования графита в ЧШГ // Изв. вузов. Черн. металлургия. – 1990. – № 10. – С. 51 – 54.
21. Смирнов Б.М. Фрактальные кластеры // УФН. – 1986. – 149, № 2. – С. 177 – 217.

Одержано 07.05.09

О.В. Соценко

Фрактальная структура шаровидного графита в высокопрочном чугуне
Резюме

Рассмотрена возможность применения методов фрактальной геометрии к описанию морфологии включений шаровидного графита в чугуне. Показано, что шаровидные графитные включения являются фрактальными структурами. Приведена методика и результаты оценки фрактальной размерности включений шаровидного графита в чугуне. Показано, что фрактальная размерность может быть использована для оценки степени компактности включений графита.

O.V. Sotsenko

Fractal structure of nodular graphite in high-strength cast iron
Summary

Possibility of application of methods of fractal geometry to the description of morphology of nodular graphite inclusions in cast-iron is considered. It is shown that the inclusions have fractal structures. A method and results of estimation of fractal dimension of these inclusions cast-iron is presented. It is shown that a fractal dimension can be used for estimation of the degree of compactness of graphite inclusions.