

DOI: 10.15593/2499-9873/2019.3.06

УДК 519.24

С.Е. Батин

Пермский национальный исследовательский
политехнический университет, Пермь, Россия

ОПРЕДЕЛЕНИЕ РАЗМЕРОВ ПРЕДСТАВИТЕЛЬНОГО ИЗОБРАЖЕНИЯ ДЛЯ ОЦЕНКИ СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МАТЕРИАЛА

Рассмотрена задача определения размеров представительного изображения. Показана актуальность задачи для обоснования достоверности получаемых результатов при оценке макроскопических свойств на основе структуры материала. Представлена постановка задачи. Предложен оригинальный подход к решению поставленной задачи на основе симуляции структуры методом Монте-Карло. Получены результаты для искусственной эллипсоидальной структуры. Показана применимость метода для решения поставленной задачи.

Ключевые слова: анализ микрошлифов, генерация структуры материала, представительность изображения, метод Монте-Карло, эллипсоидальная структура.

S.E. Batin

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

DETERMINATION OF REPRESENTATIVE IMAGE SIZE FOR ESTIMATION OF STRUCTURAL CHARACTERISTICS OF MATER

Estimation of image representativity is under consideration. The determination is needed to substantiate reliability of macro properties estimation based on structure parameters. Statement of the problem is presented. Original approach based on the Monte Carlo simulation is suggested. Results for synthetic ellipsoidal structure are received. The method allows to solve the problem.

Keywords: analysis of microsections, material structure generation, image representativity, Monte Carlo method, ellipsoidal structure.

Введение

При решении задачи определения макроскопических свойств материалов по данным о микроструктуре важным является вопрос представительности исходных данных. Для более точной оценки интересующих нас физико-механических свойств металлов, например предела текучести, требуется получение данных о микроструктуре как

можно более глубоких масштабных уровней, поскольку известно [1, 2], что деформация материалов определяется эволюцией микроструктуры на уровне зерен, границ зерен или на уровне ансамблей дефектов кристаллической решетки. Причем желательно получение данных именно о реальной трехмерной структуре.

Получение данных о трехмерной структуре на глубоких масштабных уровнях сопряжено со значительными затратами, а зачастую вовсе невозможно. Применяются различные методы, например рентгеновского анализа структуры [3], томографический анализ [4] или последовательного получения микрошлифов [5]. Наиболее распространенным методом анализа структуры является получение наборов фотографий микрошлифов. Несмотря на то что существуют работы, направленные на получение данных о трехмерной структуре на основе плоских изображений [6], чаще всего исходными измерениями являются только плоские изображения микрошлифов. Так что в дальнейшем, говоря о микроструктуре, будем рассматривать именно фотографии микрошлифов.

При попытке судить по данным микроструктуры о макроскопических свойствах возникает проблема представительности полученных фотографий, которую можно сформулировать в виде следующего вопроса: «Достаточно ли структурных элементов отображено на исследуемом снимке микроструктуры, чтобы судить о свойствах макроскопического образца?». Понятие представительности данных о микроструктуре можно считать расширением понятия представительного объема, являющегося классическим для механики сплошной среды. Представительным называют объем, который содержит достаточное для статистического осреднения количество структурных элементов материала. Необходимость расширения этого понятия обусловлена тем, что в рамках эксперимента не всегда удается получить с необходимым разрешением данные об объемной структуре материала, из-за чего оказывается некорректным говорить о представительном объеме.

При проведении любого исследования, посвященного изучению макроскопических свойств материалов, ключевым вопросом оказывается определение необходимого и достаточного количества элементов структуры, которое позволило бы делать достоверные и обоснованные выводы о величинах физических свойств. Исследованию представительного объема различных материалов посвящено множество работ.

При этом довольно часто для исследования представительного объема прибегают к вычислительному эксперименту [7–10] или исследования проводятся на основе натуральных экспериментов [11].

В рассмотренных работах можно выделить общие принципы и подходы к решению задачи определения представительного объема: свойства и характеристики материала вычисляются или экспериментально определяются для некоторого набора характерных размеров. Далее из рассмотренных выбирается наименьший размер, после увеличения которого точность определения характеристики существенно не изменяется.

Отметим, что в большинстве работ ставится задача определения размеров представительного объема. Особенностью данной работы является определение размеров, относящихся именно к плоским изображениям.

Постановка задачи. Пусть имеется цифровая фотография микрошлифа исследуемого материала. Рассмотрим задачу определения представительности фотографии микрошлифа. Содержательно задачу можно сформулировать следующим образом: требуется определить площадь отображаемого на фотографии среза объемной структуры материала, необходимую и достаточную для оценки физико-механических свойств макроскопического образца с требуемой точностью. Исходными данными являются параметры распределений объемной структуры материала.

Оценка точности определения свойств материала представляет собой отдельную задачу, которая не будет рассматриваться в данной работе.

Будем полагать, что макроскопические свойства материала однозначно определяются его микроструктурой, т.е. для заданного набора параметров среза микроструктуры существует единственный набор физико-механических свойств, однако одинаковые значения макроскопических свойств могут достигаться при различной микроструктуре. Таким образом появляется возможность определения размеров представительного изображения без рассмотрения задачи оценки физико-механических параметров по данным микроструктуры.

Метод решения. Предлагаемый метод построен на основе симуляции структуры методом Монте-Карло и состоит из следующих этапов: генерация объемной структуры, вычисление сечения сгенериро-

ванной структуры плоскостью, вычисление размеров представительного изображения на основе статистического критерия. Рассмотрим этапы более подробно.

1. *Генерация объемной структуры.* Исходными параметрами являются параметры исходной трехмерной структуры. В качестве модели объемной структуры материала примем набор эллипсоидов. Такая модель позволяет учесть разнородность размеров зерен, их анизотропию и ориентацию. Соответственно, представительность изображения будем определять в терминах этих параметров. Также к сгенерированной модели структуры необходимо предъявить следующие требования: модель должна содержать существенные свойства исследуемого объекта, в модельной структуре должно содержаться представительное количество структурных элементов, но при этом связанные с генерацией структуры вычисления должны производиться достаточно быстро.

Рассмотрим существующие методы генерации структуры поликристаллических материалов. Обычно генерация структуры сводится к генерации набора структурных элементов и их плотной упаковке с применением оптимизационных [5, 12–14] или механистических [15] подходов.

В рассмотренных работах одной из ключевых проблем при моделировании структуры материалов является задача упаковки сгенерированных частиц. Применяются различные подходы к ее решению, однако можно утверждать, что в современных условиях данная задача может достаточно быстро решаться для количества зерен порядка 10 000. Такая ситуация связана с тем, что численная упаковка большого числа эллипсоидов связана или с вычислительной сложностью задачи оптимизации для столь большого числа степеней свободы, или с большим количеством вычислений при механическом моделировании.

Проведем оценку, какое количество структурных элементов материала необходимо сгенерировать, чтобы полученное сечение было гарантированно представительным. Оценим представительное количество зерен в объеме материала как $N = 10^3$. Соответственно будем считать, что на плоском сечении должно присутствовать количество эллипсов, достаточное, чтобы судить о геометрических характеристиках N эллипсоидов. Оценим это количество как на порядок большее, чем представительное количество зерен, т.е. $N_1 = 10N = 10^4$. Теперь задача

сводится к определению количества эллипсоидов в контейнере, при сечении которого плоскостью количество пересечений будет равно принятой оценке. Полагая, что зерна распределены в объеме достаточно равномерно, форма эллипсоидов близка к сферической и размер зерен варьируется незначительно, получим приблизительную оценку для количества зерен в искомой генерируемой структуре $N_2 = N_1^{\frac{3}{2}} = 10^6$. Полученная оценка является достаточно грубой, для более точной оценки числа зерен в генерируемой структуре нужно опираться на контекст решаемой задачи.

На основе полученной оценки количества зерен можно сделать вывод, что решение задачи упаковки для столь большого числа эллипсоидов невозможно за разумное время с использованием существующих методов. С другой стороны, в контексте задачи можно сформулировать критерий близости построенной трехмерной структуры в таком виде, который позволит частично или полностью отказаться от задачи упаковки сгенерированных эллипсоидов. Вопрос соответствия полученной синтетической структуры реальной – это отдельная задача, решение которой будет зависеть от вида генерируемой структуры и имеющихся экспериментальных данных об этой структуре.

Для изучения применимости предлагаемого метода оценки размеров представительного изображения будем генерировать синтетическую эллипсоидальную структуру, в которой полуоси эллипсоидов распределены равномерно и ориентации их главных осей равномерно распределены в пространстве поворотов. Центры полученных эллипсоидов равномерно распределены в кубическом контейнере, объем которого равен суммарному среднему объему эллипсоидов.

2. Получение сечения сгенерированной структуры. Очевидно, что в случае изотропной структуры секущая плоскость может быть расположена произвольным образом. Необходимым условием является лишь то, что в пересечении должно находиться достаточное число структурных элементов (эллипсоидов), оценка которого приведена в предыдущем пункте.

Рассмотрим решение задачи получения сечения структуры плоскостью. Сечением структуры плоскостью будем называть набор уравнений эллипсов, получающихся при сечении плоскостью эллипсоидов, моделирующих структуру. Решение этой задачи будем проводить аналитически.

После генерации модельной структуры имеем набор эллипсоидов, заданных в виде соответствующего набора уравнений в лабораторной системе координат, связанных с контейнером, в котором проводилось размещение элементов структуры:

$$F_i(x_1, x_2, x_3) = 0, \quad i = \overline{1, N_2}. \quad (1)$$

Секущая плоскость задана направлением нормали и точкой начала локальных координат плоскости. Необходимо получить набор уравнений эллипсов, полученных в результате пересечения плоскости и эллипсоидов. Для этого перепишем уравнения эллипсоидов в новой системе координат, полученной поворотом направления вертикальной оси лабораторной системы координат так, чтобы в полученной системе координат вертикальная ось совпадала с направлением нормали к плоскости и переносом начала лабораторной системы координат в точку, задающую плоскость. Таким образом уравнения эллипсоидов примут вид

$$F_i^*(x_1^*, x_2^*, x_3^*) = 0, \quad i = \overline{1, N_2}. \quad (2)$$

Далее, принимая $x_3^* = 0$ и исключая сечения с нулевой площадью, получим искомые уравнения эллипсов:

$$f_j(x_1^*, x_2^*) = F_j^*(x_1^*, x_2^*, 0) = 0, \quad j = \overline{1, N_1}. \quad (3)$$

Зная уравнения эллипсов, можно рассчитать их характеристики: размер (радиус круга равной площади), ориентация большей полуоси (угол между большей полуосью и положительным направлением оси абсцисс в интервале $[0; \pi)$), анизотропия (отношение длины меньшей полуоси к длине большей), координаты центра.

3. Вычисление размера представительного изображения на основе статистического критерия. После получения сечения и геометрических характеристик составляющих его эллипсов необходимо провести вычисления характерного линейного размера для представительного изображения. Под изображением микроструктуры будем понимать набор эллипсов, центры которых будут находиться в некотором окне, лежащем внутри полученного сечения. Размер соответствующего окна и будет искомым размером представительного изображения.

Для определения размеров такого окна вычислим для множества окон заданных размеров значения статистических характеристик на них. В качестве таких характеристик будем рассматривать среднее

значения размера зерна, коэффициент вариации размера зерна, средние анизотропию и ориентацию. Можно предположить, что оценки выбранных характеристик распределены нормально.

Для оценки погрешности оценок для каждого выбранного размера окна будем использовать выборочное среднеквадратичное отклонение, отнесенное к истинному значению характеристики (среднему значению по всему сгенерированному сечению), т.е. для характеристики α формула статистического критерия примет вид

$$V_{\alpha} = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (\alpha_i - \bar{\alpha})^2} / \alpha^* , \quad (4)$$

где n – количество окон, по которым проводилась оценка параметра; α_i – значение оценки в i -м окне; $\bar{\alpha}$ – среднее значение оценки по всем окнам; α^* – значение оценки для всего сечения.

Целевое значения критерия $V_{\alpha}^{\text{крит}}$ выберем таким, чтобы при нормальном распределении оценки характеристики α вероятность верной оценки составляла $P^{\text{крит}}$. Так, значению $P^{\text{крит}} = 0,95$ будет приближенно соответствовать $V_{\alpha}^{\text{крит}} = 0,025$.

Анализ результатов. Предложенный метод был реализован для синтетической структуры, представляющей собой набор случайных эллипсоидов. Для каждого эллипсоида генерировались значения длин полуосей по равномерному закону и ориентация. Все значения длин рассматриваются в безразмерном виде. В качестве единицы длины принимается средний радиус объемных зерен. Были проведены два численных эксперимента с различными параметрами распределения длин полуосей эллипсоидов. Предполагалось, что при большей дисперсии длин полуосей в исходной структуре увеличится размер представительного изображения. В обоих случаях генерировалось 10 000 000 эллипсоидов, среднее значение длин полуосей было одинаковым.

На рисунках представлены зависимости статистического критерия от размера окна. Для расчета критерия составлялась выборка из 100 окон для каждого размера.

В таблице представлены исходные параметры и результаты расчетов. Размер представительного изображения определялся с точностью до целых.

Размеры представительного изображения
для исследуемых характеристик структуры

| Интервал значений длин полуосей | Средний размер зерна | Коэффициент вариации размера зерна | Средняя анизотропия зерен | Средняя ориентация зерен |
|---------------------------------|----------------------|------------------------------------|---------------------------|--------------------------|
| (0,5; 1,5) | 20 | 46 | 12 | 33 |
| (0,2; 1,8) | 24 | 34 | 21 | 31 |

Отметим, что при повторных реализациях наблюдается повторяемость получаемых результатов, однако требуются дополнительные исследования точности и устойчивости получаемых оценок размеров представительного изображения структуры.

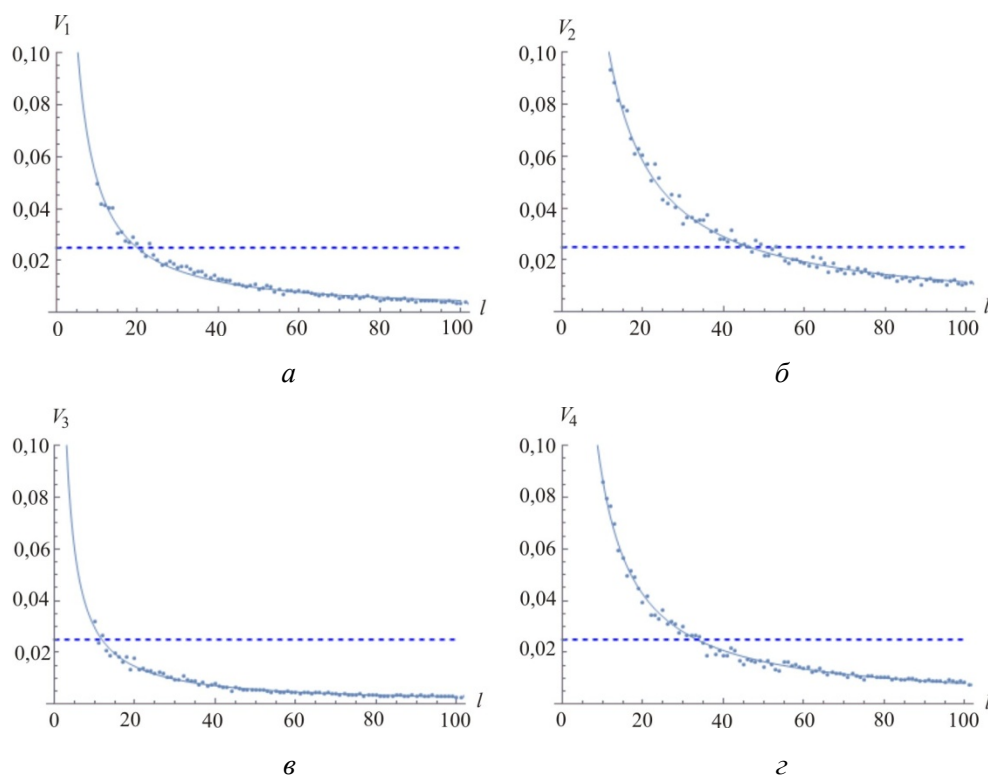


Рис. 1. Зависимость статистического критерия от размера окна для характеристик: a – средний размер зерна; $б$ – коэффициент вариации размера зерна; $в$ – средняя анизотропия зерен; $г$ – средняя ориентация зерен. Интервал длин полуосей объемной структуры (0,5; 1,5) (авторские результаты)

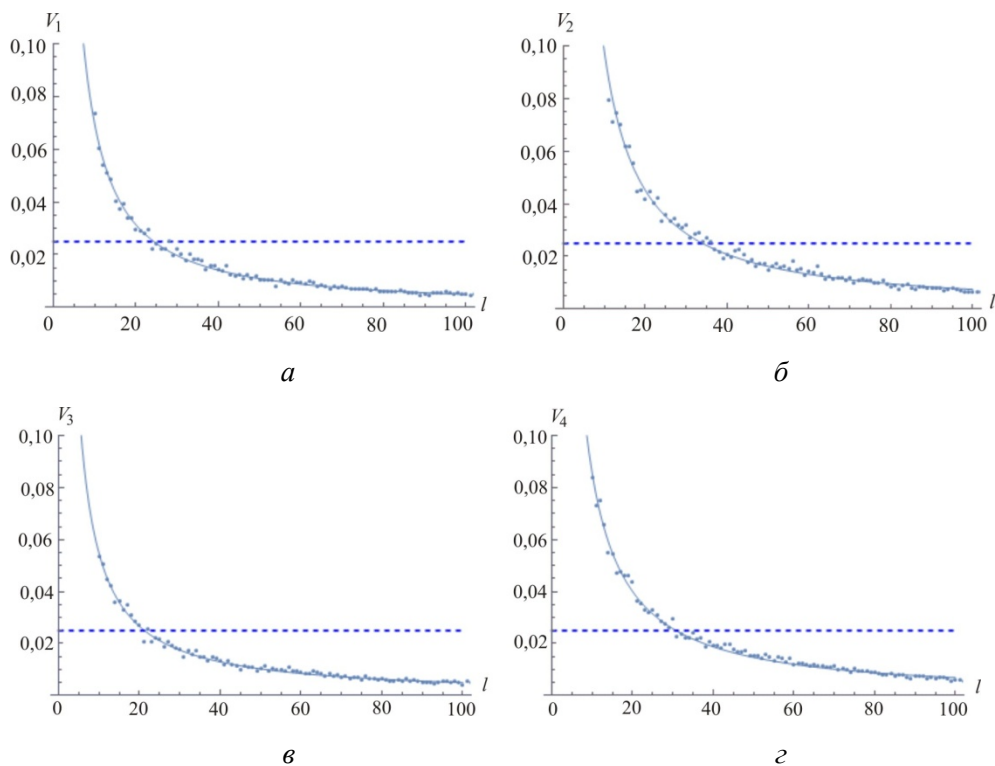


Рис. 2. Зависимость статистического критерия от размера окна для характеристик: *a* – средний размер зерна; *б* – коэффициент вариации размера зерна; *в* – средняя анизотропия зерен; *г* – средняя ориентация зерен. Интервал длин полуосей объемной структуры (0,2; 1,8) (авторские результаты)

Как и предполагалось, при увеличении дисперсии распределения полуосей исходных эллипсоидов увеличивается и требуемый размер представительного окна для определения среднего размера зерна и средней анизотропии зерен. Уменьшение размера окна в случае определения средней ориентации зерен можно считать незначительным. Значительное же уменьшение требуемого размера окна для оценки коэффициента вариации размеров зерна требует дополнительных исследований. Можно предположить, что выбранный статистический критерий не подходит для этой характеристики материала.

Заключение. Поставлена задача определения размеров представительного изображения для оценки структурных характеристик материалов. Предложен метод решения поставленной задачи с использованием моделирования структуры материала методом Монте-Карло.

Приведены результаты расчетов для синтетической трехмерной эллипсоидальной структуры. Полученные результаты позволяют сделать вывод, что предложенный метод позволяет получить приблизительные оценки размеров представительного изображения.

Применение предложенного метода для оценок по реальным материалам требует дальнейших исследований соответствия смоделированной трехмерной структуры реальной структуре материала. Также общая концепция метода может быть расширена для неэллипсоидальных структур.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (соглашение № 14.586.21.0055 от 17.07.2017 г., проект RFMEF1586117 X0055 в составе реализации международного проекта «Fracture across Scales and Materials, Processes and Disciplines (FRAMED)» в рамках программы «Горизонт-2020»).

Список литературы

1. High manganese austenitic twinning induced plasticity steels: A review of the microstructure properties relationships / O. Boaziz [et al.] // *Current Opinion in Solid State and Materials Science*. – 2011. – Vol. 15. – P. 141–168.
2. Determination of the hollomon parameter for a chromium-base refractory alloy with the aim of predicting its properties / A.M. Adaskin [et al.] // *Metal Science and Heat Treatment*. – 2016. – Vol. 57, no. 9. – URL: <https://doi.org/10.1007/s11041-016-9930-x> (accessed 01 Aug. 2019).
3. Prediction of mechanical properties of carbon steels after hot and cold forming by means of fast microstructure analysis / D. Šimek [et al.] // *Steel Research International*. – 2014. – No. 9. – P. 1369–1378.
4. Прусов Е.С. Компьютерная томография для задач трехмерного материаловедения // *Фундаментальные исследования*. – 2015. – № 5–2. – С. 318–323.
5. A framework for automated analysis and simulation of 3D polycrystalline microstructures. Part 1: Statistical characterization / M. Groeber [et al.] // *Acta Materialia*. – 2008. – Vol. 56. – P. 1257–1273.
6. Дрозин А.Д., Япарова Н.М. Метод обработки информации, получаемой при обследовании микрошлифа готовой стали в случае нерепрезентативных данных // *Вестник ЮУрГУ. Сер. Вычислительная математика и информатика*. – 2017. – Т. 6, № 4. – С. 20–27.
7. Realistic microstructural RVE-based simulations of stress–strain behavior of a dual-phase steel having high martensite volume fraction / J. Zhou [et al.] // *Materials Science & Engineering A630*. – 2015. – P. 107–115.

8. Rieger F., Böhlke T. Microstructure based prediction and homogenization of the strain hardening behavior of dual-phase steel // *Archive of Applied Mechanics*. – 2015. – Vol. 85. – Iss. 9–10. – P. 1439–1458. – URL: <https://doi.org/10.1007/s00419-014-0974-3> (accessed 01 Aug. 2019).

9. Simonovski I., Cizelj L. Representative volume element size of a polycrystalline aggregate with embedded short crack // *Proceedings of the International Conference Nuclear Energy for New Europe*. – 2007. – URL: <https://www.osti.gov/etdeweb/servlets/purl/21083859>.

10. Gitman I., Gitman M., Askes H. Arch Quantification of stochastically stable representative volumes for random heterogeneous materials // *Appl. Mech.* – 2006. – Vol. 75. – P. 79–92. – URL: <https://doi.org/10.1007/s00419-005-0411-8> (accessed 01 Aug. 2019).

11. Багмутов В.П., Столярчук А.С., Коробов А.В. Методика определения представительного объема в поликристаллических конструкционных материалах // *Изв. ВолгГТУ*. – 2013. – Т. 8, № 15 (118). – С. 71–74.

12. A framework for automated analysis and simulation of 3D polycrystalline microstructures. Part 2: Synthetic structure generation / M. Groeber [et al.] // *Acta Materialia*. – 2008. – Vol. 56. – P. 1274–1287.

13. Стоян Ю.Г., Семкин В.В., Чугай А.М. Моделирование плотной упаковки 3D-объектов // *Кибернетика и системный анализ*. – 2016. – Т. 52, № 2. – С. 137–146.

14. 3D-reconstruction of microstructure in a commercial purity aluminum / A. Brahme [et al.] // *ScriptaMaterialia*. – 2006. – Vol. 55. – P. 75–80.

15. Stroeven P., Stroeven M. Assessment of packing characteristics by computer simulation // *Cement and Concrete Research*. – 1999. – Vol. 29. – P. 1201–1206.

References

1. Boaziz O. et al. High manganese austenitic twinning induced plasticity steels: A review of the microstructure properties relationships. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 2011, vol. 15, pp. 141-168.

2. Adaskin A. M. et al. Determination of the Hollomon Parameter for a Chromium-Base Refractory Alloy with the Aim of Predicting its Properties. *Metal Science and Heat Treatment*, 2016, vol. 57, no. 9, doi.org/10.1007/s11041-016-9930-x.

3. Šimek D. et al. Prediction of Mechanical Properties of Carbon Steels After Hot and Cold Forming by Means of Fast Microstructure Analysis. *Steel Research International*. 2014, no. 9, pp. 1369-1378.

4. Prusov E.S. Computernaya tomografiya dlya zadach trehmernogo materialovedeniya [Computer tomography for problems of 3D Material Science]. *Fundamentalnye issledovaniya*, 2015, vol. 5-2, pp. 318-323.

5. Groeber M. et al. A framework for automated analysis and simulation of 3D polycrystalline microstructures. Part 1: Statistical characterization. *Acta Materialia*, 2008, vol. 56, pp. 1257-1273.
6. Drozin A.D., Yaparova N.M. Method obrabotki informathii, poluchaemoi pri obsledovanii microshlifa gotovoi stali v sluchae nerepresentativnyh dannyh [Method to processing of the information taken during scanning of finished steel in the case of unrepresentative data]. *Vestnik SUSU. Series «Computational mathematics and software engineering»*, 2017, vol. 6, no. 4, pp. 20-27.
7. Zhou J. et al. Realistic microstructural RVE-based simulations of stress-strain behavior of a dual-phase steel having high martensite volume fraction. *Materials Science & Engineering*, 2015, A630, pp. 107-115.
8. Rieger F., Böhlke T. Microstructure based prediction and homogenization of the strain hardening behavior of dual-phase steel. *Archive of Applied Mechanics*, 2015, vol. 85, iss. 9–10, pp. 1439-1458. doi.org/10.1007/s00419-014-0974-3.
9. Simonovski I., Cizelj L. Representative Volume Element Size of a Polycrystalline Aggregate with Embedded Short Crack. *Proceedings of the International Conference Nuclear Energy for New Europe*, 2007, available at: <https://www.osti.gov/etdeweb/servlets/purl/21083859> (accessed 01 Aug. 2019).
10. Gitman I., Gitman M. & Askes H. Arch Quantification of stochastically stable representative volumes for random heterogeneous materials. *Appl. Mech.* 2006, vol. 75, pp. 79-92, doi.org/10.1007/s00419-005-0411-8.
11. Bagmutov V.P., Stolyarchuk A.S., Korobov A.V. Methodika opredeleniya predstavitel'nogo objema v policristallicheskih konstrukcionnyh materialah [Method of representative volume element determination in polycrystalline construction materials]. *Izvestiya VolgGTU*, 2013, vol. 8, no. 15 (118), pp. 71-74.
12. Groeber M. et al. A framework for automated analysis and simulation of 3D polycrystalline microstructures. Part 2: Synthetic structure generation. *Acta Materialia*, 2008, vol. 56, pp. 1274-1287.
13. Stoyan Yu.G., Syomkin V.V., Chugai A.M. Modelirovanie plotnoi upakovki 3D objectov [Modelling of 3D objects dense packing]. *Cibernetica i sistemnyi analiz*, 2016, vol. 52, no. 2, pp. 137-146.
14. Brahme A. et al. 3D-reconstruction of microstructure in a commercial purity aluminum. *ScriptaMaterialia*, 2006, vol. 55, pp. 75-80.
15. Stroeven P., Stroeven M. Assessment of packing characteristics by computer simulation. *Cement and Concrete Research*, 1999, vol. 29. pp. 1201-1206.

Получено 14.08.2019

Сведения об авторе

Батин Сергей Евгеньевич (Пермь, Россия) – аспирант кафедры «Вычислительная математика, механика и биомеханика», Пермский национальный исследовательский политехнический университет (614990, Пермь, Комсомольский пр., 29, e-mail: sebatin@yandex.ru).

About the author

Sergey E. Batin (Perm, Russian Federation) – Ph.D. Student, Department of Computational Mathematics Mechanics and Biomechanics, Perm National Research Polytechnic University (614990, Perm, Komsomolsky av., 29, e-mail: sebatin@yandex.ru).