

УДК 004.942

КОМПЬЮТЕРНЫЕ МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ СИНТЕТИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ВЫСОКОПРОЧНОГО ЧУГУНА ДЛЯ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ОЦЕНКИ ЕГО МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И ПРОЧНОСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК

Шаповалова М. И., Водка А. А.

*Национальный технический университет «Харьковский политехнический институт»,
г. Харьков, Украина*

Введение. Одним из материалов, широко применимых в машиностроении, является высокопрочный чугун. Его используют в ответственных узлах, таких как: зубчатые колеса, коробки передач, рычаги подвески и др. Основной особенностью такого чугуна является относительно простая микроструктура, состоящая из ферритной основы с включением зернистого графита сферической формы. Из литературы известны несколько основных подходов анализа макроструктуры подобных материалов. К первой группе [1-4], относятся экспериментальные исследования. Для них необходимо создать образец путем предварительной обработки, и провести эксперимент с приложением механической нагрузки [4], температуры [1-2], или других внешних факторов. В результате эксперимента анализируются показатели прочности, упругости, пластичности и делается вывод, какое влияние играет соответствующая микроструктура на: развитие трещин [1], фазовый состав [2], твердость исследуемого образца [3].

Вторую группу исследований [5-10], объединяет применения технологий компьютерного зрения. Распознавание образов изображения используют для классификации структуры по соответствующим признакам [5, 8]; оценки количества дефектов (вырожденных графитовых узелков [6]) сегментации сложных микроструктур [7], нахождение размеров частиц и распределение их на плоскости, для прогнозирования свойств материала в соответствии с изображением его микроструктуры [9-10].

Еще одно направление [11-14], предполагает моделирование исследуемой микроструктуры средствами метода конечных элементов. Однако геометрия структуры часто переносится в конечно-элементную модель полностью из изображения, или слишком упрощается, что ограничивает применение метода только соответствующей концентрацией и характером размещения включений.

В работе предлагается создать методику для исследований микроструктуры без дополнительного проведения натурального эксперимента, использовать преимущества компьютерного видения для распознавания микроструктуры. Предложенная методика опирается на генерацию статистически эквивалентной геометрии микроструктуры, не привязываясь к конкретному изображению. Анализ напряженно-деформированного состояния и эквивалентных упругих констант выполняется методом конечных элементов.

Постановка задачи. В качестве исходных данных для работы берутся изображения микроструктуры высокопрочного чугуна из ГОСТ 3443-87 [15]. Рассмотрены пять случаев концентрации шаровидного графита в материале: ШГ2 (2%), ШГ4 (4%), ШГ6 (6%), ШГ10 (10%), ШГ12 (12%), для определения зависимости параметров прочности исследуемого материала от концентрации и размеров включений графита.

Работа предполагает моделирование структуры высокопрочного чугуна синтетическим путем, опираясь на действительные изображения его микроструктуры. Необходимо учитывать возможность случайного расположения включений на плоскости, и рассмотреть возможность вариации их концентрации в зависимости от размеров графита. Определить упругие свойства исследуемого материала путем моделирования конечно элементной модели. Получить характеристики модуля упругости, сдвига и коэффициента Пуассона, как функции концентрации включений.

Обработка изображений. Обработка изображений микроструктуры реализуется на высокоуровневой языке программирования Python с использованием библиотеки компьютерного зрения OpenCV. Алгоритм обработки изображений позволяет избавиться от шумов и выполнить фильтрацию изображения микроструктуры чугуна, для удаления небольших темных пятен графита в феррите, и наоборот, закрытие светлых отверстий в графите. Для выявления границ перехода от одного типа материала к другому, применяется алгоритм Canny Edge Detection, многоступенчатый алгоритм библиотеки OpenCV. Во время исследования микроструктуры – делается предположение, что графитовые включения имеют круглую форму, поэтому поиск охватываемого контура осуществлялся с помощью функции minEnclosingCircle. Для каждой такой области рассчитывается площадь и находится центр масс, который в свою очередь является центром найденного круга.

Генерация статистически эквивалентной микроструктуры шаровидного чугуна возможна благодаря установлению зависимости размеров включений от их концентрации. Для каждого случая концентрации получены данные по количеству и размерам включений графита на плоскости. Рассчитано среднее значение и разброс случайной величины относительно ее математического ожидания.

Полученные данные математического ожидания, дисперсии радиусов включений, и их количество на единицу площади, описываются функцией зависимости размера включений от концентрации. Используя модуль optimize.curve_fit библиотеки SciPy, проводится аппроксимация. Через коэффициенты аппроксимации, вышеуказанные показатели функции концентрации принимают вид (1). График зависимости математического ожидания радиусов $M[R]$ и их дисперсия $D[R]$ изображена на рисунке 1.

$$M[R] = 18,308 \cdot (\psi - 0,048) ^{0,123}; \quad \sqrt{D[R]} = 9,683 \cdot (\psi - 0,045) ^{0,314} \quad (1)$$

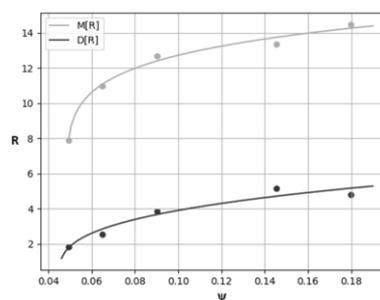


Рисунок 1.- Зависимость размера включений от их концентрации

Для подтверждения качества предлагаемой аппроксимации рассчитывается коэффициент детерминации. Для математического ожидания радиусов включений: $R^2_M = 0,988$, для дисперсии – $R^2_D = 0,943$, это свидетельствует о достаточно высоком качестве предлагаемой модели.

Для генерации статистически эквивалентной искусственной микроструктуры шаровидного чугуна делается предположение, что характер включений подчиняется нормальному закону распределения случайной величины (2). Средствами библиотеки

NumPy реализуется алгоритм случайной генерации радиусов включений методом `numpy.random.normal`. В качестве параметров функции выступают: математическое ожидание и дисперсия радиусов по формуле (1).

$$f(R) = \frac{1}{D[R]\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(R-M[R])^2}{2D[R]^2}}, \quad (2)$$

где R – радиус включений; $M[R]$ – математическое ожидание размеров включений; $D[R]$ – дисперсия радиусов включений графита.

Предложенная схема формирует радиусы включений графита случайным образом до тех пор, пока их суммарная площадь, деленная на заданную площадь изображения, меньше желаемой концентрации (3). Количество таких радиусов N , определяется согласно (4), где N – количество радиусов R ; ψ – концентрация графита в чугуна; S – общая площадь исследуемой микроструктуры; $M[R]$ – математическое ожидание размеров включений.

$$\sum_N \frac{\pi \cdot R^2}{S} < \psi, \quad (3)$$

$$N = \frac{\psi \cdot S}{\pi \cdot M[R]^2}, \quad (4)$$

Размещение радиусов на плоскости моделируемой микроструктуры чугуна происходят также случайно, и реализуется функцией равномерного распределения величины `-random.uniform`. В качестве параметров – выступают заранее заданные размеры изображения.

Конечно-элементная модель. Построение конечно-элементной модели – основано на геометрии искусственно сгенерированной микроструктуре чугуна. Для построения сетки используется двухмерный 8-узловой конечный элемент с двумя степенями свободы в каждом узле. Для проведения вычислений считается, что феррит – это изотропный материал (табл. 1), графит – имеет гексагональную структуру кристаллической решетки. Соответствующие упругие константы приведены в таблице 2.

Таблица 1 - Свойства материала феррита.

E, GPa	ν
210	0.3

Таблица 2 – Свойство материала графита.

$E_x, E_z,$ GPa	$E_y,$ GPa	ν_{xy}	ν_{yz}	ν_{xz}	$G_{xy}, G_{xz},$ GPa	$G_{yz},$ GPa
1025	36	0.34	0.012	0.16	0.18	4.35

На макроуровне, структурные элементы считаются однородными анизотропными материалами с усредненными упругими характеристиками. Физические зависимости анизотропного материала в общем случае анизотропии имеют вид (5).

$$\langle \varepsilon_{ij} \rangle = A_{ijkl} \langle \sigma_{kl} \rangle, \quad (i, j, k, l = 1, 2, 3), \quad (5)$$

где A_{ijkl} – упругие константы эквивалентного однородного материала;

$\langle \sigma_{ij} \rangle, \langle \varepsilon_{ij} \rangle$ – среднее значение напряжений и деформаций, – определенное как интеграл по объему (6).

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \sigma_{ij} dV; \quad \langle \varepsilon_{ij} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \varepsilon_{ij} dV. \quad (6)$$

В большинстве случаев структура исследуемого материала имеет соответствующую симметрию, поэтому усреднения упругих свойств позволяет рассматривать такой материал, как ортотропный. В случае, когда в координатных плоскостях принята система координат, параллельна плоскостям симметрии упругих

свойств ортотропной материала, закон Гука можно представить в матричной форме. В качестве исследуемого образца берутся плоские искусственно смоделированные изображения микроструктуры чугуна, поэтому напряженное состояние рассчитывается на основе плоских моделей. Тогда закон Гука примет вид (7):

$$\begin{bmatrix} \langle \varepsilon_{xx} \rangle \\ \langle \varepsilon_{yy} \rangle \\ \langle 2\varepsilon_{xy} \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_x} & -\frac{\nu_{yx}}{E_y} & 0 \\ -\frac{\nu_{xy}}{E_x} & \frac{1}{E_y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{G_{xy}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \langle \sigma_{xx} \rangle \\ \langle \sigma_{yy} \rangle \\ \langle \sigma_{xy} \rangle \end{bmatrix}. \quad (7)$$

где E_x, E_y – модуль Юнга; ν_{xy}, ν_{yx} – коэффициент Пуассона; G_{xy} – модуль сдвига.

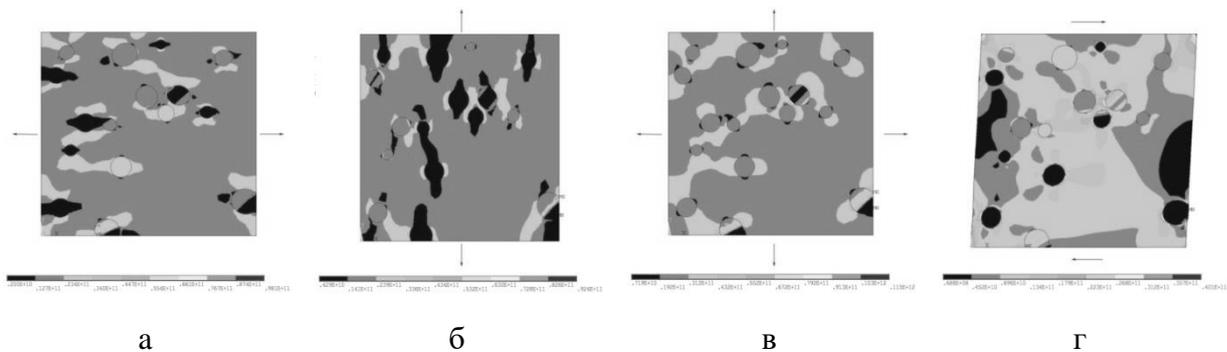


Рисунок 2.- Эквивалентные напряжения по Мизесу в микроструктуре при различных видах нагружения: а - растяжение вдоль X; б - растяжения вдоль Y; в - растяжение вдоль X и Y; г - смещение в плоскости XY.

Получено симметричную матрицу, для нахождения всех констант необходимо выполнить четыре числовые эксперименты. На рис. 2 изображена схема нагружения модели, результаты которой позволяют создать систему линейных алгебраических уравнений относительно коэффициента Пуассона, модуля упругости и сдвига.

Результаты исследования микроструктуры чугуна. На рис. 2 изображены результаты расчета напряженно-деформированного состояния микроструктуры высокопрочного чугуна с включением сферического графита по четырем видам нагружения. Считая ориентацию включений произвольной, необходимо проводить серию численных экспериментов, для получения упругих констант. Не имея точных данных, относительно направленности включений, принято решение применять метод Монте-Карло для определения возможных вариантов напряженного состояния. В рамках этого метода ориентация кристаллов считается случайной. Было проведено 200 численных экспериментов для 17-ти значений различных концентраций включений. Полученные результаты для упругих констант статистически усредняются, и устанавливаются зависимости коэффициента Пуассона, модуля упругости и сдвига от концентрации включений (рис. 3). В качестве доверительного интервала для расчетных данных принимается зависимость (8), для нормального распределения случайной величины соответствует 99,7% вероятности попадания результатов в указанной области.

$$\alpha_{int} = M \pm 3 \cdot \sqrt{D}; \quad (8)$$

где M та D – математическое ожидание и дисперсия упругих констант.

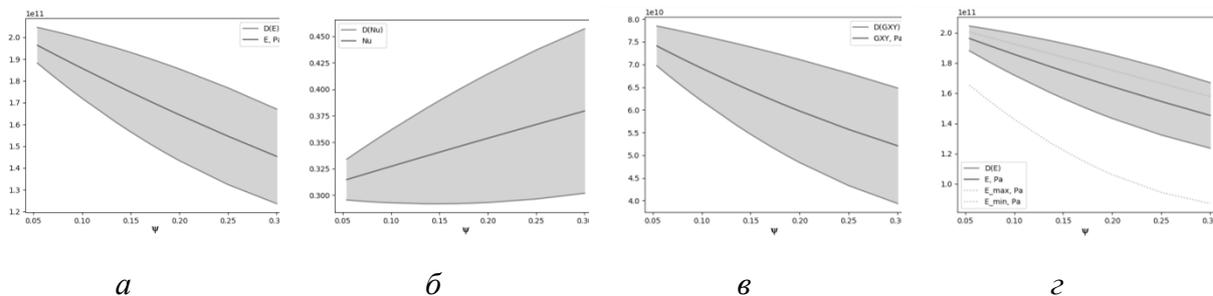


Рисунок 3 - Зависимость упругих характеристик материала от концентрации включений: а – модуль упругости $E(\psi)$; б – коэффициент Пуассона $\nu(\psi)$; в – модуль сдвига $G(\psi)$; г – правило смеси для модуля упругости $E(\psi)$.

Для оценки достоверности, полученные результаты усредненных упругих характеристик сравнивались с результатами полученными с помощью правила смеси (9). Такой подход дает возможность определить оценку верхней и нижней границы модуля упругости. Эти оценки соответствуют параллельным и перпендикулярным структурным элементам (рис. 3, г). Из анализа полученных результатов видно, что математическое ожидание эквивалентного модуля упругости находится между верхней и нижней границей оценки по правилу смеси, что подтверждает корректность построенных моделей. Однако из рис. 3, г хорошо видно, что верхняя граница доверительного интервала превышает верхнюю оценку модуля упругости. Это объясняется тем, что правило смеси не учитывает случайную ориентацию главных осей кристаллов графита, а сравнение возможно только по средним значениям. Также, что реальные свойства графита являются более сложными чем изотропные, как это предполагает правило смеси.

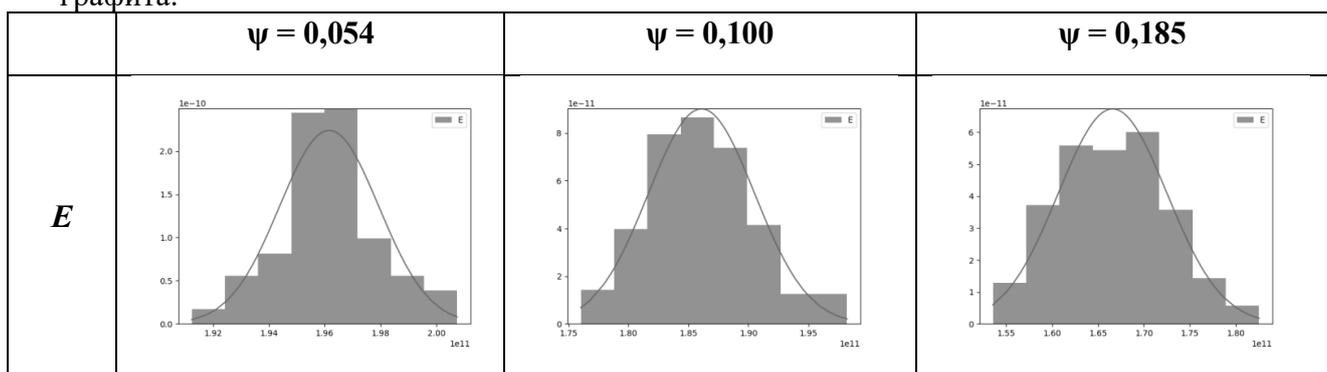
$$E_{max} = \psi \cdot E_g + (1 - \psi) \cdot E_f;$$

$$E_{min} = \left(\frac{\psi}{E_g} + \frac{1-\psi}{E_f} \right)^{-1}; \quad (9)$$

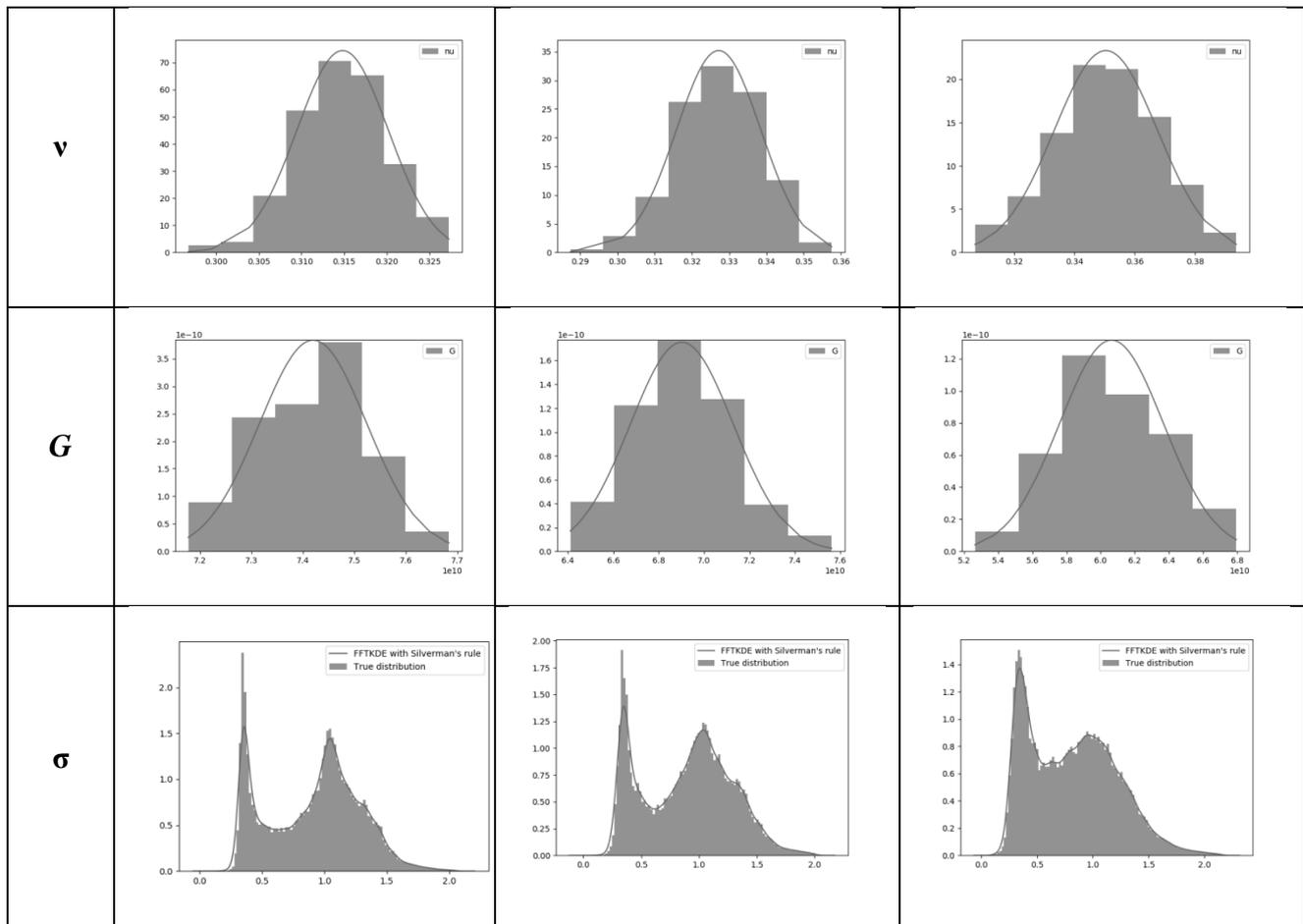
E_f – модуль упругости феррита.

Тесты статистической нормальности. Полученные результаты упругих характеристик исследуемого материала проверяются с помощью параметрического статистического метода. В ходе исследование считалось, что данные распределены нормально. В качестве графического метода качественной оценки результатов строятся гистограммы (табл. 3), для визуальной проверки принадлежности полученных результатов к нормальному распределению.

Таблица 3 - Гистограммы распределения модуля упругости, коэффициента Пуассона, модуля сдвига и эквивалентных напряжений при различных концентрациях включений графита.



Продолжение таблицы 3.



Приведенные гистограммы для упругих характеристик имеют приближенную колоколовидную форму, характерную нормальному распределению данных. Для статистической проверки нормальности, с помощью библиотеки SciPy, выполнен тест Шапиро-Уилки. В табл. 4 приведены результаты p -значений для упругих характеристик исследуемого материала при соответствующей концентрации включений. Уровень статистической значимости принимался $\alpha = 0,05$. Все полученные p -значения больше порогового уровня, нулевая гипотеза о нормальности распределений – принимается. Для напряжений гистограмма имеет вид бимодального распределения с двумя пиками. Это соответствует структуре исследуемого чугуна с включениями графита. Для такого типа распределения применяется не параметрический метод оценки распределения плотности вероятности. С целью выбора лучшего результата в работе выполнено сравнение алгоритмов автоматического выбора полосы пропускания (рис. 4), средствами библиотеки KDEpy. Определено, что улучшенный метод Шезера-Джонса, дает чрезмерное зашумление гистограммы. С другой стороны, ядровая оценка плотности распределения случайной величины предложенные Скоттом и Сильверманом – дают более сглаженные и почти совпадающие между собой зависимости, лучше передающие общую тенденцию распределения. Для результатов по напряжениям в табл. 4 берутся ядровые оценки по правилу Сильвермана.

Таблица 4 – p -значения теста Шапиро-Уилки.

	$\psi = 0,054$	$\psi = 0,100$	$\psi = 0,185$
$E(\psi)$	0,089	0,444	0,173
$\nu(\psi)$	0,154	0,738	0,128
$G(\psi)$	0,189	0,544	0,381

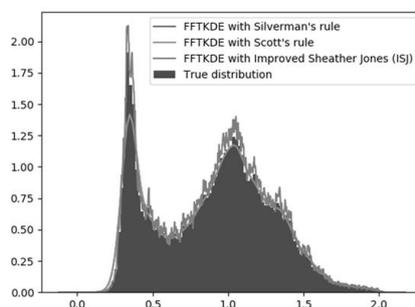


Рисунок 4.- Ядровая оценка плотности распределения

Выводы. В работе создан алгоритм исследования упругих механических свойств высокопрочного чугуна. Проведено распознавания сфероидальных включений графита на микроструктурных изображениях. Полученные зависимости размеров включений от их концентрации, и предложена методика искусственной генерации микроструктуры чугуна. Проведен конечно-элементный анализ созданной структурной модели, получены формулы определения модуля упругости, коэффициента Пуассона и модуля сдвига. Построены зависимости упругих характеристик от содержания включений графита. Для оценки результатов применено правило смеси к усредненным показателям модуля упругости. Построены гистограммы распределения упругих характеристик и эквивалентных напряжений при различных концентрациях включений. Нормальность распределения данных проверена тестом Шапиро-Уилки. Для бимодального распределения эквивалентных напряжений применены алгоритм автоматического выбора полосы пропускания по правилу Сильвермана. Результаты численного моделирования показали хорошее соотношение расчетных значений коэффициента Пуассона, модуля упругости и сдвига со справочными данными.

Поддержка. Данная работа выполнена при поддержке МОН Украины в рамках реализации научно-исследовательской работы «Разработка методов математического моделирования поведения новых и композиционных материалов для оценки ресурса и прогнозирования надежности элементов конструкций» (№ ДР 0117U004969).

ЛИТЕРАТУРА

1. Sikoraab, P. *Mechanical and microstructural properties of cement pastes containing carbon nanotubes and carbon nanotube-silica core-shell structures, exposed to elevated temperature* / P. Sikoraab, M. Elrahmanac, S.-Y. Chunga, K. Cendrowskid, E. Mijowskad, D. Stephana // *Cement and Concrete Composites*. — 2019. — № 95. — P. 193–204.
2. Xu, H. *Mechanical modeling of battery separator based on microstructure image analysis and stochastic characterization* / H. Xu, M. Zhu, J. Marcicki, X. G. Yang // *J. Power Sources*. — 2017. — № 345. — P. 137–145.

3. Seungwoo, S. Investigation of the microstructure of laser-arc hybrid welded boron steel / S. Seungwoo, Y. H. Lee, D.-W. Choi, K.-R. Cho, S. M. Shin, Y. Lee, S.-H Kang., Z. Lee // *JOM*. — 2018. — № 70 (8). — P. 1548–1553.
4. Zhang Y., Fan Y., Zhao X., Du A., Ma R., Wu J., Cao X. Influence of graphite morphology on phase, microstructure, and properties of hot dipping and diffusion aluminizing coating on flake/spheroidal graphite cast iron». *Metals*, April 2019. № 9(4). P. 450.
5. DeCost, B. L. A computer vision approach for automated analysis and classification of microstructural image data / B. L. DeCost, E. A. Holm // *Comput. Mater. Sci.* — 2015. — № 110. P. — 126–133.
6. Renato, F. Automatic quantification of spheroidal graphite nodules using computer vision techniques / F. Renato, Pereira Valberto E. R. da Silva Filho, B. Moura Lorena, N. K. Arun, R. de Alexandria Auzuir // *J Supercomput.* — 2018. — P. 1–14.
7. Campbell, A. New methods for automatic quantification of microstructural features using digital image processing / A. Campbell, P. Murray, E. Yakushina, S. Marshall, W. Ion // *Materials & Design*. — 2018. — № 141. — P. 395–406.
8. Kwon, O. A deep neural network for classification of melt-pool images in metal additive manufacturing / O. Kwon, H. Kim, M. Ham, W. Kim, G. Kim, J. Cho, N. Kim, K. Kim // *Journal of Intelligent Manufacturing*. — 2018. — P. 1–12.
9. DeCost, B. L. High throughput quantitative metallography for complex microstructures using deep learning: A case study in ultrahigh carbon steel / B. L. DeCost., B. Lei, T. Francis, E. A. Holm // *Microscopy and Microanalysis*. — 2019. — № 25 (1). — P. 21–29.
10. Shapovalova, M. I. Image microstructure estimation algorithm of heterogeneous materials for identification their chemical composition / M. I. Shapovalova, O. O. Vodka // *IEEE 2nd Ukraine Conference on Electrical and Computer Engineering (UKRCON)*. — 2019. Lviv, Ukraine
11. Hua, F. Elasto-plastic FEM analysis of residual stress in spun tube / F. Hua, Y. Yang, D. Guo, W. Tong, Z. Hu // *J. Mater. Sci. Technol.* — 2004. — № 20. — P. 379–382.
12. Seriacopi, V. Finite element analysis of the effects of thermo-mechanical loadings on a tool steel microstructure / V. Seriacopi, N. K. Fukumasu, R. M. Souza, I. F. Machado // *Engineering Failure Analysis*. — 2019. — № 97. — P. 383–398.
13. Park, H. K. Three-dimensional microstructure modeling of particulate composites using statistical synthetic structure and its thermo-mechanical finite element analysis / H. K. Park, J. Jung, H. S. Kim // *Comput. Mater. Sci.* — 2017. — № 126. — P. 265–271.
14. Vodka, O. O. Processing microsection images to determine elastic characteristics of cast iron / O. O. Vodka // *IEEE Ukraine SYW-2018 Congress. Student, Young Professional and Women in Engineering*. — 2018. Kyiv, Ukraine.
15. ГОСТ 3443-87 Отливки из чугуна различной формы графита. Методы определения структуры (ISO 945-75*). [Взамен ГОСТ 3443-77]. — М.: Стандартинформ, — 2005.