

## СИСТЕМНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

УДК 530.1

А.И. Михалев, В.В. Помулев, В.Г. Горб, Ю.С. Пройдак

### МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ФОРМИРОВАНИЯ 3D МЕТАЛЛОСТРУКТУР НА ОСНОВЕ ПЕРКОЛЯЦИОННЫХ КЛАСТЕРОВ

**Введение.** Для получения информации о структуре металлоструктур используют различные методы и подходы описания видимой в микроскоп (или на микрофотографии) картины. Однако истинный интерес представляет пространственное строение сплава, а не плоскостная структура. При этом существует необходимость получения количественных оценок его строения (структуры) [1]. В тоже время непосредственно наблюдать внутреннее строение металлических материалов невозможно, и приходится ограничиваться изучением двухмерной картины, рассматривая плоскостную структуру не как самостоятельный объект оценки, а лишь как источник информации о реальном пространственном строении сплава [8].

В данной работе предложен один из подходов моделирования 3D структуры металлических материалов, основанный на пространственных перколяционных кластерах. Оправданность предлагаемого подхода вытекает из физической сути самого процесса затвердевания, при котором образуются два вложенных друг в друга перколяционных кластера: один, состоящий из частиц кластера, другой - из материала среды, окружающей кластер [3].

**Целью работы** является моделирование динамики формирования металлоструктур на основе перколяционных кластеров с применением методов фрактальной геометрии для количественного описания формирующихся металлоструктур, а также программная реализация перколяционной модели.

В основе работы лежат следующие положения:

- механические и технологические свойства материала определяются его структурой [3];

- структура в нестационарном состоянии обладает фрактальными свойствами;
- пространственная модель (перколяционные кластеры) является фрактальной.

Опираясь на триаду Н.С. Курнакова состав-структура-свойства [3], связь механических свойств и структуры можно записать в виде следующего выражения:

$$P_{mex} = M\{S\}, \quad (1)$$

где  $S = \{s_i\}$  – структура материала,  $M$  – оператор.  $s_i$  – соответствующая структура  $i$ -го сечения ( $s_i \in S$ ),  $i = 1..n$ .

Наличие фрактальных свойств у объектов, порождаемых в неравновесных процессах, к которым без сомнения относится и процесс затвердевания, доказана в ряде работ последнего десятилетия.

Поэтому в терминах пространственной перколяционной модели структура может быть описана как

$$S = P\{Df, Exp\}, \quad (2)$$

где геометрия, а точнее «изрезанность», неравновесность, характеризуется параметрами модели  $Df$  – фрактальная размерность и  $Exp$  – набор критических экспонент перколяционных кластеров. В свою очередь эти параметры характеризуют способ заполнения пространства кластером.

Теория перколяции имеет дело с эффектами случайного распределения взаимосвязанных ячеек в системе [2]. В данной работе основное внимание уделяется пространственной перколяции, наблюдаемой, например, в металлических “фильмах” и пористых кластерах [1, 2]. Простейший пример пространственной перколяции это  $d$ -мерная коробка (решетка) в которую случайным образом «накиданы» два типа шаров: проводящие и изоляторы. При этом ключевым параметром является величина, называемая критическим отношением объемов (critical volume fraction). Как показывают исследования, данная величина, является геометрическим инвариантом. Другой не менее важной геометрической характеристикой пористого кластера, является корреляционная длина:

$$l \sim r(P_c - p)^{\nu} \quad (3)$$

где  $r$  – размер элементов (полиэдры, шары, эллипсоиды),  $\nu$  – критическая экспонента ( $\nu \in Exp$ ),  $p$  – отношение числа проводящих элементов к не проводящим,  $P_c$  – порог перколяции.

Корреляционная длина  $l$  тесно связана с важным для кластера параметром – массой:

$$m \sim l^f, \quad (4)$$

где  $m$  – масса кластера,  $f$  – критическая экспонента ( $f \in Exp$ ), которая для случая  $p=P_c$  всегда меньше эвклидовой размерности  $D_E$ . Более того разность  $(D_E - f)$  – это дефицит размерности или соразмерность Хаусдорфа, являющаяся связывающим звеном между теорией фракталов и перколяционными кластерами [2].

Модель, рассматриваемую в работе, можно представить следующим образом:

$$P_{mex} = G\{Exp, Df_{класт}\}, \quad (5)$$

где  $G$  – соответствующий оператор задающий связь между  $Exp$  – набором критических экспонент перколяционной системы, которые вычисляются аналитически и  $Df_{класт}$  – фрактальной размерностью перколяционного кластера, которая в свою очередь является технической характеристикой и служит для проверки адекватности модели, определяющий  $P_{mex}$  – механические свойства объекта.

Процедура проверки адекватности требует дополнительного объяснения. Несмотря на возможность генерировать 3D объекты с помощью модели перколяционного процесса, по-прежнему остается крайне трудной задачей сравнения их (и по какому критерию) с соответствующим реальным 3D структурообразованием, так как «извлечь» его в чистом виде невозможно.

Предлагается исследовать данный объект по его сечениям, как схематично показано на рисунке 1. Для этого вычисляются фрактальные размерности выходных сечений модели, и реальных объектов вычисляется фрактальная размерность  $Df_{mod}$ ,  $Df_{real}$ . Тогда их разность и определяет степень адекватности модели следующим образом:

$$|Df_{mod} - Df_{real}| < \varepsilon \quad (6)$$

где  $\varepsilon$  – наперед заданная точность настройки модели, которая показывает адекватность модели.

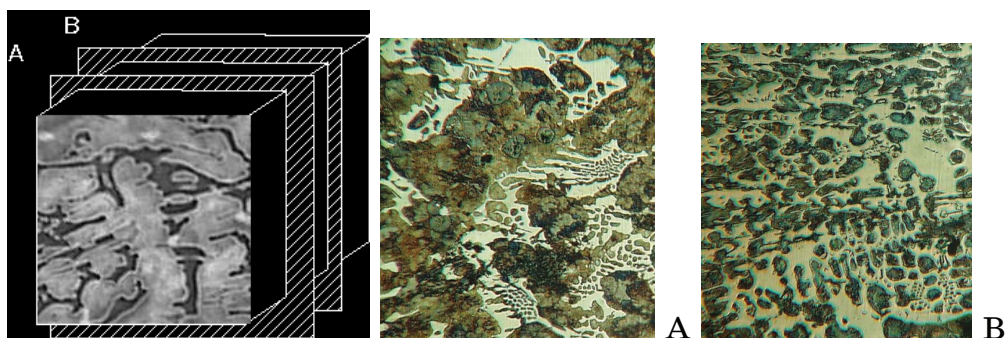


Рисунок 1 – Структура перколяционных кластеров: А и В – соответствующие сечения

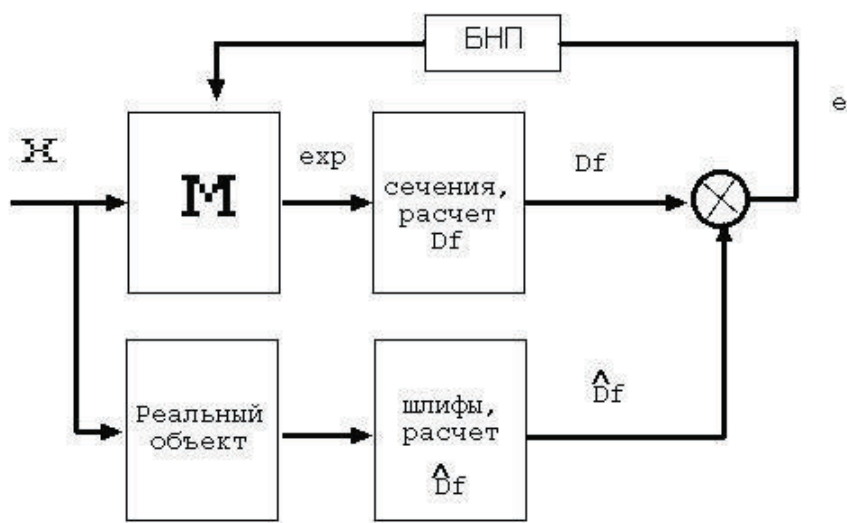


Рисунок 2 – Структура системы фрактальной идентификации объектов, БНП – блок настройки коэффициентов модели

### Геометрическая интерпретация перколяционного кластера в 3D

Компьютерное моделирование динамики роста перколяционного кластера проводилось с использованием среды Borland Builder 6.0 с использованием библиотеки OpenGL.

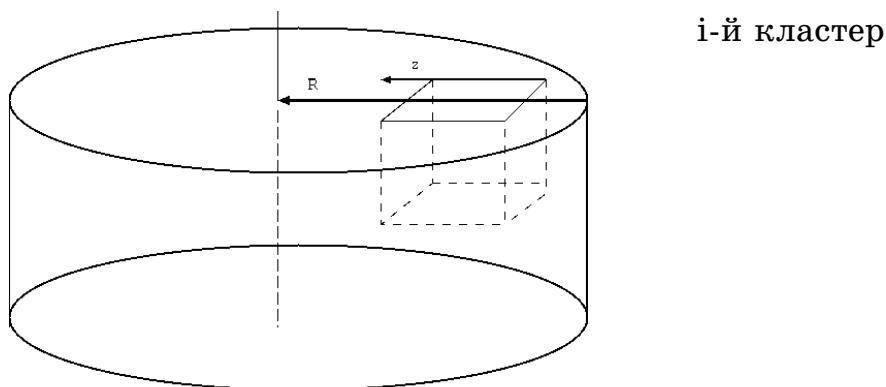


Рисунок 3 – Геометрическое представление перколяционной структуры отливки ( $R$  – радиус отливки,  $z$  – направление затвердевания)

**Модель динамики роста перколяционного кластера**

Входные данные модели:

$$X = Y [h, L, Pc], \quad (7)$$

где  $h$  - вероятности заполнения ячеек,  $L$  - расстояние между шлифами (сечениями),  $Pc$  - порог перколяции.

Выходные данные модели:

$$F[S] = \langle s, l, Df \rangle \quad (8)$$

Результаты выполнения программы.

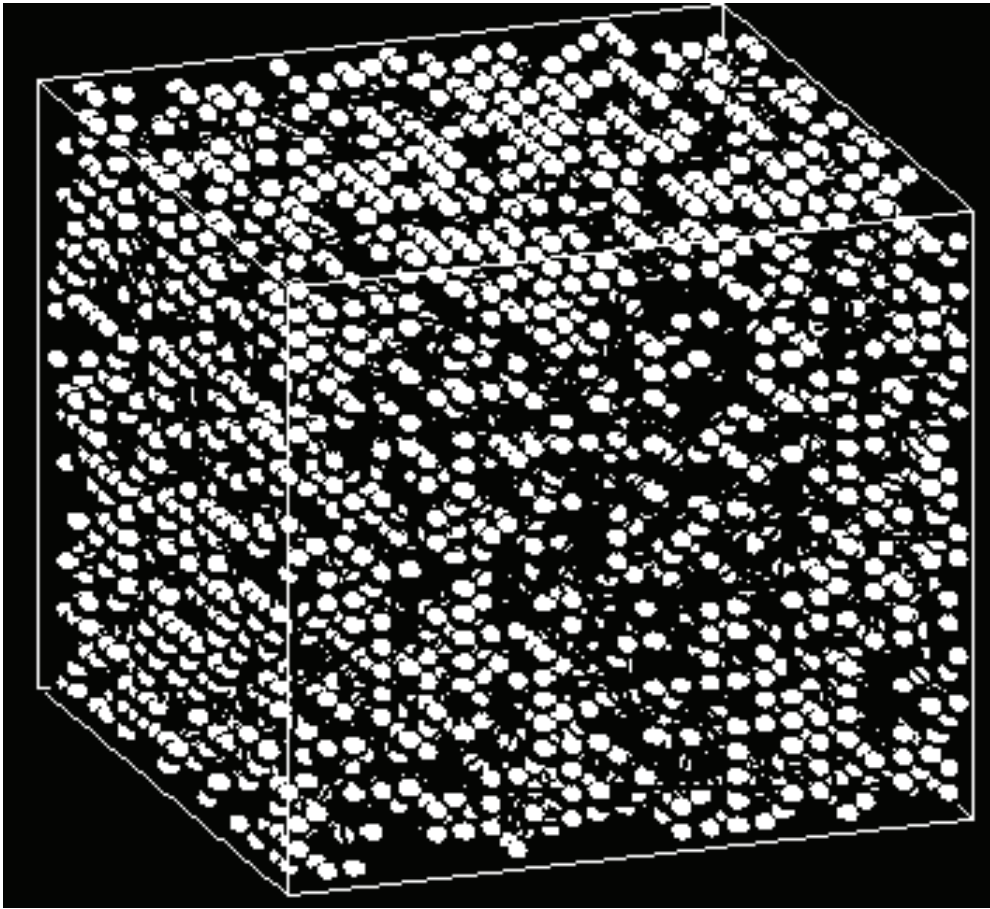


Рисунок 4 – Пример 3D суперкластера с параметрами:  $Pc=0.48$ ,  $L=0.02$ ,  $h$  – вероятность заполнения ячеек определяющаяся по экспоненциальному закону

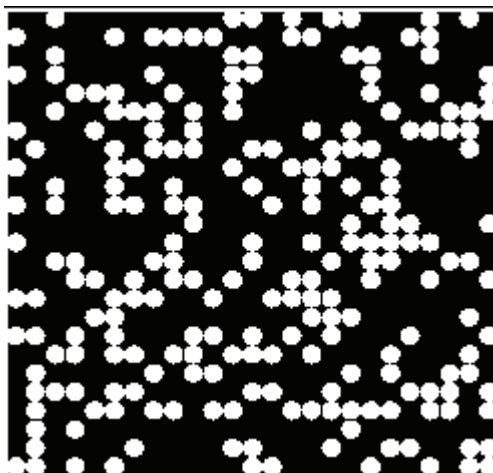


Рисунок 5 – Шлиф 1

Результаты моделирования приведены в таблице 1.

Таблица 1

Смоделированные перколяционные параметры системы

Номер шлифа	Pc	Lmax	Dmod	Dmod`	$\varepsilon$ , %	Smod
Шлиф 1	0.48	0.6	1.67501	1.769957	5,4	227
Шлиф 2		0.6	1.67181	1.745348	4,2	230
Шлиф 3		0.62482	1.68066	1.716689	2.1	234
Шлиф 4		0.678823	1.70457	1.785469	4.5	236
Шлиф 5		0.62482	1.67353	1.786575	6.3	241
Шлиф 6		0.6	1.6604	1.764879	5.9	241
Шлиф 7		0.678823	1.6996	1.791701	5.1	241
Шлиф 8		0.678823	1.69862	1.782650	4.7	242
Шлиф 9		0.555698	1.62669	1.723006	5.6	249
Шлиф 10		0.678823	1.68996	1.779335	5	251
Шлиф 11		0.651153	1.66939	1.801766	7.3	259
Шлиф 12		0.651153	1.66301	1.824019	8.8	266

Разработанная программа имеет следующие особенности:

- используются различные законы распределения, заполнения ячеек для шлифов, расположенных на различных расстояниях от оси модельного объекта;
- имеется возможность выделения отдельного сечения (шлифа), которые можно сохранить в файл, для расчета фрактальной размерности;
- программа рассчитывает корреляционные длины и массы полученных пространственных кластеров.

Вывод. Построена 3D модель перколяционных кластеров отображающих динамику роста металлоструктур, применены методы фрактальной геометрии для проверки адекватности моделирования.

Исследован процесс затвердевания металлических материалов и связь фрактальных характеристик со структурой. Установлена связь фрактальных и перколяционных характеристик (параметров) материала (структуры). Предложен подход к моделированию динамики роста металлоструктур на основе перколяционного кластера в 3D объекте.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Смирнов Б.М. Физика фрактальных кластеров. М.:Наука, 1991.- 136 с.
2. Wu J. Introduction to Percolation Theory // <http://socrates.berkeley.edu/~jqwu/>
3. Куликов Д.В., Мекалова Н.В., Закирничная М.М. Физическая природа разрушения// <http://www.mahp.oil.ru>, 1999.
4. Федер Е. Фракталы. // Пер. с англ.- М.- Мир, 1991.- 260 с.
5. Козлов Э.В., Тришкина Л.И. //Эволюция дислокационной структуры, упрочнения и разрушения сплавов. Томск: Изд-во Томского Университета, 1992.
6. Михалев А.И., Деревянко А.И., Помулев В.В. Фрактальное оценивание зернистости металлоструктур // Системные технологии. Региональный межвузовский сборник научных работ. – Выпуск 2 (10) – Днепрпетровск. 2000. с. 104-112.
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. Михалев А.И., Помулев В.В. Вопросы геометрического моделирования структур металлических материалов на основе перколяционных кластеров. //Системные технологии. Региональный межвузовский сборник научных работ. – Выпуск 3 (44). – Днепрпетровск, 2006. – С. 31 – 34.

Получено 23.04.2007 г.