

Запорізький державний університет

На правах:

Пархоменко Лариса Олександрівна

УДК [669]

Комп'ютерний аналіз дисперсних систем

дисперсних систем

Спеціальність 01.04.13-фізико-математичні науки

Автореферат

Дисертація на здобуття наукового
кандидата фізико-математичних наук

669.014

ЛННБ України ім.В.Стефани



00743859 (-)

а в Запорізькому д

ки: доктор фізико-математичних
наук, професор Псарьов В.І.,
кандидат фізико-математичних
наук, доцент Кулік О.Ф.

нти:

ко-математичних наук, професор
наїда Альфредівна
ичних наук, професор
ий Вадим Юхимович

танова: Чернівецький державний університет

дисертації відбудеться "12" 12 1996 р.

ні на засіданні Спеціалізованої вченої Ради К 08.04.01
порізькому державному університеті за адресою: 330600,
а, вул. Жуковського, 66.

исертацією можна ознайомитися у науковій бібліотеці
кого державного університету.

реферат розіслано "12" 11 1996 р.

кретар Спеціалізованої Ради К 08.04.01.

математичних наук

Шець В.О.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Тверді, рідкі або газоподібні дисперсні системи володіють особливими властивостями : надлишком вільної енергії, підвищеною хімічною, а в деяких випадках і біологічною активністю і є нестійкими внаслідок сильно розвинутої поверхні розділу фаз. Їх основною характеристикою є дисперсність, яка характеризується розподіленням мікрочастинок по якості-небудь суттєвому признаку. Стосовно до твердих дисперсних систем, в яких мікрочастинки дисперсної фази розподілені в кристалічній середовищі-пересиченому твердому розчині, такою характеристикою є густина розподілення мікрочастинок по розмірам-ефективним радіусам. В роботі основну увагу приділено саме цим дисперсно-зміцненим металічним сплавам. Звичайно у них огрублення мікрочастинок дисперсної фази визначається їх коагуляцією, ускладненим перерозподілом легіруючого елементу між фазами, структурними перетвореннями і іншими супровідними процесами. Особливість їх протікання-огрублення дисперсної фази виявляється на зміні густини розподілу мікрочастинок по розмірам. Задача полягає в тому, щоб враховуючи це, одержати достовірну інформацію про характер (кінетика, механізм, деталі) протікання внутрішньосистемних процесів.

Задача розв'язувалася з урахуванням останніх теоретичних досягнень про стійкість і еволюцію дисперсних систем. Основний внесок в це направлення внесли: О. М. Тодес, Н. Н. Сирота, І. М. Ліфшиц і В. В. Сльозов, К. Вагнер, В. І. Псарьов та інші вчені. Проте до теперішнього часу не була встановлена методика добування інформації про природу внутрішньосистемних процесів, враховуючи характер трансформації експериментальних розмірних розподілень-гістограм. Щоб скористуватися досягненнями теоретичних розрахунків, необхідно було розв'язати задачу про розпізнавання образів - подібність та відмінність експериментальних і теоретичних розподілень мікрочастинок по розмірах. Виявить елементи їх подібності і відмінності для того, щоб на експериментальні дані розповсюдити положення фізичної теорії і зробити певні висновки про протікання внутрішньосистемних процесів.

Згідно з таким системним методом аналізу експериментальних розподілів мікрочастинок по розмірам необхідно враховувати як їх моменти, так і співвідношення між ними. Знання моментів (коли

вони всі існують) еквівалентно знання функції розподілу. Це еквівалентність означає, що властивості розподілу можна виразити в термінах моментів, а їх знання - зв'язати з об'ємними процесами в дисперсній системі. Іншими словами, поставлена задача статистичної фізики відповідно до дисперсних систем, яка до теперішнього часу не розглядалась.

Мета і завдання роботи. Розробка методу аналізу старіючих і дисперсно-зміцнених сплавів в процесі їх синтезу або термічної обробки. У зв'язку з цим сукупність існуючих методів вимірювання дисперсності фаз, розподілених в об'ємі металічних сплавів, необхідно доповнити комп'ютерним способом добування інформації про динаміку їхньої еволюції. Це фактично - дисперсійно - комп'ютерний метод аналізу мікроструктури сплавів, який дозволяє по установлених подібності і відмінності між експериментальною гістограмою (розподілом дисперсних частинок по розмірам) і відповідним теоретичним розподілом судити про природу внутрішньосистемних процесів.

У відповідності з поставленою метою завданнями дисертаційної роботи були:

- розробка методики аналізу безлічі теоретичних функцій густини розподілу мікрочастинок по розмірам, відповідним реакційному і дифузійному механізмам їх укрупнення, які створюються системою інтегрально-диференціальних рівнянь, які описують стан сплавів;
- створення алгоритму для визначення аналітичного виду функцій розмірних розподілів в явному виді;
- розробка методики розв'язання оберненої задачі, зв'язаної з визначенням параметрів розподілів по даним насичу чисельних значень, які відповідні одержаній теоретичній функції;
- створення алгоритму для аналізу експериментальних розподілів мікрочастинок по розмірам, який враховує можливість їх ідентифікації з теоретичними розподіленнями;
- встановлення корелюючого зв'язку між ознаками трансформації експериментальних гістограм з часом укрупнення мікрочастинок у сплаві і визиваючими її внутрішньооб'ємними процесами;
- розробка методики встановлення достовірності визначення чисельних значень параметрів розподілу і залежних від них величин, шляхом використання співвідношень між моментами розподілів;
- розробка методики виявлення фізичної картини протікання

внутрішньосистемних процесів по дані аналізу експериментальних розподілів.

Наукова та практична цінність. Результати проведеної роботи в значній мірі доповнюють традиційні методи статистичної фізики стосовно реальних металічних сплавів, які містять дисперсну фазу. Пропонований метод дозволяє по дані аналізу змінення основної характеристики дисперсної системи - функції густини розмірного розподілу з часом огрублення дисперсної фази зробити висновок про природу внутрішньосистемних процесів, істотно впливаючих на характер формування мікроструктури і властивостей сплавів.

Така методика вперше розроблена і застосована до аналізу алюмінієво - магнієвих сплавів, що дозволило визначити фізичні характеристики їх мікроструктурного стану по мірі наближення до стану рівноваги.

Пропонований метод може бути розповсюджений на різноманітні дисперсні системи: дисперсно-зміцнені і старіючі сплави, островкові плівки, які застосовуються в мікроелектроніці, системи газових бульбашок, які виникають при радіаційному опроміненні матеріалів та інші.

Наукова новизна. Розв'язана окрема задача, яка зв'язана з розпізнаванням образів: безлічі теоретичних розподілів мікрочастинок по розмірах з експериментальною гістограмою - характеристикою еволюціонуючої дисперсної системи. На основі інформації, отриманої при обробці дані стані дисперсної системи, за допомогою пропонованого методу, можна зробити найбільш повний і вірогідний висновок про до фазового складу і очікуваних властивостей сплаву, який містить дисперсну фазу.

Стосовно до алюмінієво-магнієвих сплавів вивчено вплив температури і легування на кінетику укрупнення дисперсних частинок $AlMg_2$. Визначені чисельні значення важливих характеристик дисперсної системи: критичного радіусу мікрочастинок, частини розчинних і зростаючих дисперсних частинок, їх кінетичних параметрів укрупнення та ін. Показано, що дисперсії системи не можна описувати за допомогою єдиної універсальної функції розподілу мікрочастинок по їх відносним розмірам. Запроваджені нові критерії оцінювання стійкості до збереження ступеня дисперсності мікрочастинок в дисперсно - зміцнених сплавах.

Положення, що вносяться на захист.

1. Корельючий зв'язок між параметрами змін експериментальної кривої розподілу мікрочастинок по розмірах і фізичними процесами, які викликають ці зміни, може бути установлений шляхом порівняння експериментальної залежності з теоретичною кривою, яка відображує фізичну природу даної дисперсної системи.

2. Ідентифікація характеристик теоретичних розподілів і експериментальних кривих в повній мірі може бути здійснена за допомогою розробленого методу, який використовує ЕОМ. Метод включає:

- рішення динамічного рівняння дисперсної системи, в результаті якого одержується безліч множин теоретичних кривих густини розподілів по суттєвій ознаці (для дисперсно - знічених сплавів - розмірів мікрочастинок);

- можливість вибору серед безлічі множин одного теоретичного розподілення, яке має максимальну схожість з експериментальною гістограмою;

- процедуру тестування при складенні обчислювальних програм для ЕОМ;

- оцінку достовірності визначення чисельних значень характеристик експериментального розподілення шляхом використання співвідношення між власними моментами.

3. При інтерпретації одержаних даних необхідно враховувати поряд з особливостями використання традиційних способів дисперсного аналізу і засобів ЕОМ, фізичну природу дисперсної системи і її структурний стан; для дисперсно - знічених сплавів - мікроструктурний стан, фазовий склад і їх зміни з часом.

4. Пропонований метод комп'ютерного аналізу дисперсних систем доповнює можливості кількісної металографії і може бути використаний для оснастки ЕОМ, котрі застосовуються разом з автоматизованими приладами для аналізу мікроструктурного стану сплавів. На цій основі може бути створен комплекс (" АНИКО ") для комбінованого аналізу властивостей структурного і фазового складу сплавів.

Апробація роботи. Основні результати доповідались на I

Міжнародній конференції "Комп'ютерні програми учбового призначення" (Донецьк, 1993 р.), на VI Міжнародній науково-технічній конференції "Нові конструкційні сталі і сплави та методи їх обробки для підвищення надійності та довговічності виробів" (Запоріжжя, 1995 р.).

Публікації

За темою дисертації опубліковано 6 наукових праць.

Структура та обсяг дисертації. Дисертаційна робота складається із вступу, п'ятих розділів, висновків, переліку цитованої літератури з 82 назв. Загальний обсяг роботи склав 149 сторінки, у тому числі 23 малюнки та 12 таблиць.

ЗМІСТ РОБОТИ

У вступній частині обґрунтовано актуальність теми, сформульовані мета, завдання роботи, її новизна та практична цінність, положення, які вносяться на захист.

1. Аналіз дисперсних систем (огляд літератури)

У першому розділі дано визначення дисперсних систем та їх характеристики. Відзначено, що незалежно від фізико-хімічної природи дисперсної системи, її загальної характеристики виявляється розподіл мікроелементів (частинок, плібочок, пор, бульбочок газу та ін.) п'янайбільше суттєвій ознаці. Нею може служити величина, яка визначає народження, розвиток та вищирання складових системи мікроелементів. Стосовно до твердих дисперсних частинок, які розподілені у твердому середовищі - перенасиченому розчині, такою ознакою виявляється їх розчинність у тому середовищі, у якому вони розподілені, а власне - розмір мікрочастинок. Детально висвітлена суттєвість дисперсійного аналізу, який об'єднує різні експериментальні методи визначення розмірів частинок дисперсної фази, їх форми та обмеження, питомі поверхні розділів фаз, величини часткового об'єму та інших ознак дисперсних систем.

2. Теорія еволюції дисперсно - зміцнених сплавів. Стан проблеми

У другому розділі розглянуто загальні теоретичні положення еволюції дисперсно-зміцнених сплавів. Виходячи із особливостей власної дисперсійної системи визначені кінетичні закономірності росту та розчинення частинок, які використовувались для

отримання функцій розподілу та їх змін, нарівні зі змінюю характерних параметрів системи з часом коалесценції. Динамічний стан системи описується за допомогою рівнянь:

1) рівняння безперервності

$$\frac{\partial f(r, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} \left[f(r, t) \cdot \frac{dr}{dt} \right] = 0,$$

де $\frac{dr}{dt}$ - швидкість зміни розміру мікрочастинок, $f(r, t)$ - функція розподілу мікрочастинок за розмірами;

2) рівняння руху у ансамблі розмірів

$$v(k) \cdot \frac{dr_k}{dt} = v_k(t) \cdot \frac{dr}{dt},$$

де r_k - критичний радіус, який відокремлює розчинені частинки від зростаючих; $v_k(t)$ - його приведена швидкість;

3) закон збереження маси речовини дисперсної фази

$$m = \Delta + \frac{4}{3} \cdot \pi \rho \int_0^{r_g} f(r, t) \cdot r^3 dr,$$

де ρ - густина речовини дисперсної фази, $\Delta = C_r - C_\infty$ - пересичення середовища, r_g - верхня межа розмірів в ансамблі.

З цієї системи рівнянь була одержана залежність функції розподілу мікрочастинок по відносним розмірам $u = \frac{r}{r_k}$ у вигляді

$$f(r, t) = C(r_k) r_k^{-4} \cdot \varphi(u),$$

$$\text{де } \varphi(u) = \frac{3 v_k}{v_k u - v(u)} \exp \left[-3 v_k \int \frac{du}{v_k u - v(u)} \right], \quad (1)$$

яка при різних формах рівняння руху розмірів мікрочастинок описує їх розподіл по розмірам в різних дисперсних системах. Постійна інтегрування C визначається нормуванням $f(r, t)$ на одиницю об'єму при використанні виразу для закону збереження маси речовини дисперсної фази.

Для дисперсно-знічених сплавів, враховуючи певний механізм укрупнення мікрочастинок, вираз (1) приймає вид:

1) для реакційного механізму укрупнення дисперсних частинок

$$\varphi(u) = \frac{3 v_k (\varepsilon u^2 + u^{1-\alpha})}{\varepsilon v_k u^3 + v_k u^{2-\alpha} - u + 1} \exp \left[-3 v_k \int \frac{(\varepsilon u^2 + u^{1-\alpha}) du}{\varepsilon v_k u^3 + v_k u^{2-\alpha} - u + 1} \right], \quad (2)$$

2) для дифузійно-контролюючої коалесценції

$$\rho(u) = \frac{3v_k (u^2 + \varepsilon_1 u^{1-\alpha})}{v_k u^3 + \varepsilon_1 v_k u^{2-\alpha-u+1}} \exp \left[-3v_k \int \frac{(u^2 + \varepsilon_1 u^{1-\alpha}) du}{v_k u^3 + v_k u^{2-\alpha-u+1}} \right], \quad (3)$$

де α - параметр нерівноважності міжфазової межі, $\varepsilon(\varepsilon_1)$ - кінетичний параметр.

3. Дисперсійно - комп'ютерний аналіз мікроструктури сплавів

У розділі 3 розглядані методи аналізу дисперсних систем, одержаних за допомогою експериментального обладнання та шляхом теоретичних розрахунків із застосуванням комп'ютерної техніки. Приведений опис укладеної програми, за допомогою якої виконується кількісний аналіз мікроструктури твердих дисперсних систем, який передбачає виконання ряду операцій: перерахування статистичного набору елементів двохирної структури на трьоххірну з подальшим визначенням характеристик експериментального розмірного розподілу гістограми. Для прикладу приведені дані розрахунків для алюмінієво-магнієвого сплаву, який містить дисперсні частинки Al_3Mg_2 .

Із проведеного аналізу виходить, що знайдені характеристики експериментального розподілу мікрочастинок по розмірам виявляються для неї статичними: не відображають динаміку протікаючого у сплаві процесу. Але, з часом ізотермічного нагрівання буде відбуватись зміна цих характеристик, що, у свою чергу, повинно викликати трансформацію кривих розподілу - експериментальних гістограм. Це потребує додаткових досліджень, щоб за характером вказаної трансформації розподілень визначити можливі особливості протікання процесів у сплаві, які викликають цю трансформацію.

Описано як з допомогою складених комп'ютерних програм вдалося отримати аналітичні вирази для теоретичних функцій розподілів (2) і (3) відповідно

$$\rho(x) = \frac{C x^{q-p} (1 + \varepsilon x^{q+p}) (x - x_0)^{-\gamma_0} (\varepsilon x + a_1)^{-\gamma_1} (x + a_2)^{-\gamma_2}}{\prod_{i=1}^k (x^2 + b_i x + c_i)^{d_i}} x$$

$$x \exp \left[-\frac{a_0}{xg-x} + \sum_{i=1}^k t_i \arctg \frac{2x+b_i}{\Delta_i} \right] \quad (4)$$

$$p(x) = \frac{C x^{q-P} (x^{q+P} + \varepsilon_1) (x_g - x)^{-\gamma_0} (x+a_1)^{-\gamma_1} (x+a_2)^{-\gamma_2}}{\prod_{i=1}^k (x^2 + b_i x + c_i)^{d_i}} x$$

$$x \exp \left[-\frac{a_0}{xg-x} + \sum_{i=1}^k t_i \arctg \frac{2x+b_i}{\Delta_i} \right], \quad (5)$$

$$\alpha = \frac{p}{q} \quad (p \leq q), \quad x_g = u_g^{1/q}, \quad x = u_g^{1/q}, \quad k = \begin{cases} \frac{3q-3}{2}, & \text{для } q\text{-неларного} \\ \frac{3q-4}{2}, & \text{для } q\text{-парного} \end{cases}$$

При $\alpha = 0$ і $\varepsilon = 0$ із (4) одержуємо розподіл Вагнера, а при $\alpha = 0$ і $\varepsilon_1 = 0$ із (5) - розподіл Ліфшица - Сльозова.

Цільове призначення пропонованих програм - аналіз виду теоретичних функцій щільностей розподілів і відповідних їм характеристик: u_g, v_k, S_k - коефіцієнта асиметрії, ек-ексцеса та ін. Це необхідно при візуальному порівнянні теоретичних розподілів з експериментальними. Таким чином вся множина теоретичних розподілів, відповідних певному механізму, може адекватно відповідати існуючій різноманітності експериментальних гістограм. Задача полягає в тому, щоб для кожної з них необхідно підібрати теоретичний розподіл з певними числовими значеннями параметрів α і $\varepsilon(\varepsilon_1)$, тобто здійснити їх ідентифікацію, щоб потім одержати необхідну інформацію про внутрішній стан дисперсних систем.

Наведено засіб порівняння теоретичних розподілів (4) або (5) - з образом - суттєвої експериментальної гістограмою. Запропонований засіб - це не загальноприйнята підгонка (доведення до потрібної форми, розміру, типу асиметрії та інших ознак) математичної кривої розподілу того чи іншого типу до експериментальної гістограми, а встановлення подібності між гістограмою - образом і подобом - теоретичним розподілом, відібраним із безлічі однотипних по механізму укрупнення мікрочастинок кривих розподілу. Передбачено відшукування серед безлічі наявних теоретичних розподілів найбільш подібної по належних ознаках на експериментальну гістограму. Тільки в результаті такого розв'язання можна з найбільшою точністю визначити чисельні значення параметрів α і $\varepsilon(\varepsilon_1)$, а, також, і інших характеристик

розподілів, це дає можливість одержати достовірну інформацію про внутрішні причини, які визначають трансформацію експериментальних розподілів в процесі укрупнення мікрочастинок в дисперсній системі. Рішення цієї задачі одержано мінімізуванням функціоналів - не лінійних рівнянь, моментів експериментальних розподілів мікрочастинок по розмірах відповідно для реакційно- і дифузійно- контролюючого механізму огрублення дисперсних фаз:

$$F = |S_0| + |S_1| + |S_{s-a}|, \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \text{де } S_0 &= v_k e^2 (1+\alpha) r_k^{-\alpha+2\alpha} M_{4+\alpha} - e (4+\alpha) r_k^{-\alpha+2\alpha} M_{2+\alpha} + e (4+\alpha) r_k^{-\alpha} M_{1+\alpha} - \\ &- v_k (1+\alpha) r_k^{-\alpha+2\alpha} M_{2-\alpha} - (2-\alpha) M_1 + (2-\alpha) r_k M_0 \\ S_1 &= v_k e^2 (2+\alpha) r_k^{-\alpha+2\alpha} M_{5+\alpha} + 2e v_k r_k^{-\alpha} M_4 - e (5+\alpha) r_k^{-\alpha+2\alpha} M_{3+\alpha} + \\ &+ e (5+\alpha) r_k^{-\alpha+2\alpha} M_{2+\alpha} - v_k r_k^{-\alpha} M_{3-\alpha} - (3-\alpha) r_k^{-\alpha} M_2 - (3-\alpha) M_1 \\ S_{s+\alpha} &= 2v_k e^2 (1+\alpha) r_k^{-\alpha+2\alpha} M_{5+2\alpha} + 2e v_k (1+\alpha) r_k^{-\alpha+2\alpha} M_{4+\alpha} - \\ &- e (5+2\alpha) r_k^{-\alpha+2\alpha} M_{3+2\alpha} + e (5+2\alpha) r_k^{-\alpha+2\alpha} M_{2+2\alpha} - 3r_k^{-\alpha+2\alpha} M_{2+\alpha} - 3r_k^{-\alpha} M_{1+\alpha} \end{aligned}$$

$$F = |f_0| + |f_1| + |f_{s-a}|, \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \text{де } f_0 &= v_k (1+\alpha) r_k^{-\alpha+2\alpha} M_{4+\alpha} - (4+\alpha) r_k^{-\alpha+2\alpha} M_{2+\alpha} + (4+\alpha) r_k^{-\alpha} M_{1+\alpha} - \\ &- v_k e^2 (1+\alpha) r_k^{-\alpha+2\alpha} M_{2-\alpha} - e (2-\alpha) M_1 + e (2-\alpha) r_k M_0 \\ f_1 &= v_k (2+\alpha) r_k^{-\alpha+2\alpha} M_{5+\alpha} + 2e v_k r_k^{-\alpha} M_4 - (5+\alpha) r_k^{-\alpha+2\alpha} M_{3+\alpha} + \\ &+ (5+\alpha) r_k^{-\alpha+2\alpha} M_{2+\alpha} - v_k e^2 r_k^{-\alpha} M_{3-\alpha} - e (3-\alpha) r_k^{-\alpha} M_2 + e (3-\alpha) M_1 \\ f_{s+\alpha} &= 2v_k (1+\alpha) r_k^{-\alpha+2\alpha} M_{5+2\alpha} + 2e v_k (1+\alpha) r_k^{-\alpha} M_{4+\alpha} - \\ &- (5+2\alpha) r_k^{-\alpha+2\alpha} M_{3+2\alpha} + (5+2\alpha) r_k^{-\alpha+2\alpha} M_{2+2\alpha} - 3e r_k^{-\alpha} M_{2+\alpha} + 3e r_k^{-\alpha} M_{1+\alpha} \end{aligned}$$

$$M_{i+\alpha} = \int_0^r r^{i+\alpha} f(r, t) dr, \quad i=1, 2, 3, 4.$$

Вірогідність одержаних таким чином чисельних значень параметрів α і $e(e_1)$ уточнюється виведенням співвідношенням між моментами експериментальної гістограми:

$$(n-3)M_n = \frac{n}{\sqrt{k}} \left[M_{n-\gamma(u)} - M_{n-\gamma(u)} \right], \quad (8)$$

де

$$M_n = \int_0^g u^n \varphi(u) du; \quad M_{n-\gamma(u)} = \int_0^g \frac{u^n \varphi(u)}{\gamma(u)} du;$$

$$M_{n-\gamma(u)} = \int_0^g \frac{u^{n-1} \varphi(u)}{\gamma(u)} du; \quad \gamma(u) = \varepsilon u^2 + u^{1-\alpha}.$$

Критерієм ймовірності знайдених значень параметрів α і $\varepsilon(\varepsilon_1)$ є рівність лівої і правої частини в відношенні між моментами (8).

Описаний алгоритм комп'ютерної програми тестування розробленого методу для даних виборки теоретичного розподілу.

Одержані результати вказують на принципову можливість аналітичного визначення параметрів, які характеризують експериментальне розподілення - гістограму. Крім цього запропонований метод може бути використаний для аналізу фонування виборки на нодельних (теоретичних) функціях щільності розподілення.

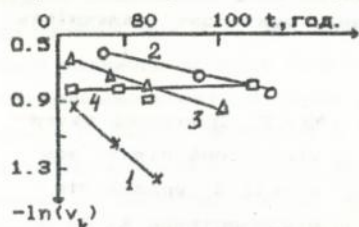
Докладно висвітлює алгоритм комп'ютерного аналізу експериментальних розподілів. Ілюструючи прикладом є приведені дані розрахунків змін дисперсності мікрочастинок Al_3Mg_2 в $Al-Mg$ сплаві (79% Al ; 20% Mg ; 1% Mn) у процесі ізотермічного нагрівання при $430^\circ C$ на протязі 70 годин. Одержані дані дозволяють судити про особливості дисперсної системи: положення критичного радіусу r_k , який відділяє розчинні мікрочастилки від зростаючих; кількості останніх, дійсного значення нодельного розміру та ін. Зі змінюю зовнішніх умов (температури, часу, тиску та ін.) повинна проходити трансформація розподілення: змінюється форма кривих щільностей, положення максимуму, розмах, значення верхньої межі розмірів та інших характеристик. Все це в підсумку дає можливість одержати інформацію про протікання процесів у дисперсній системі.

4. Результати комп'ютерного аналізу дисперсно-зміцнених сплавів

В розділі 4 наведено результати комп'ютерного аналізу дисперсно-зміцнених сплавів, передбачаючи дві можливості: розрахунок традиційних характеристик дисперсної системи і розрахунок величин, характеризуючих динаміку внутрішньосистемних процесів. Це показано на прикладі алюмінієво-магнієвих сплавів, які були

ізотермічно нагріті при різних температурах.

Для різних алюмінієво-магнієвих сплавів і при різних температурах їх нагрівання відбувається зменшення загальної кількості частинок; збільшується середній радіус мікрочастинок (\bar{r}); відбувається зніження модального радіуса (r_m) в бік великих розмірів; росте значення верхньої межі розмірів (r_g), а також змінюється й інші характеристики розподілів і тим значніше, чим вища температура. З цієї причини змінюється їх коефіцієнт асиметрії (S_k) і ексцес (S_{ex}). На мал.1 приведені криві експериментальної залежності $\ln(v_k) = f(t)$ від часу для сплавів двох сполучень, які ізотермічно нагріваються при температурах 400 і 430°C (Маковічук В. І.). Як бачимо, вони мають лінійний вигляд (криві 1, 2, 3) або ж при незначному нахилі приблизно зберігають постійне значення (крива 4).



Мал.1. Експериментальні залежності $\ln(v_k)$ від часу ізотермічної витримки сплавів: 1 - 80% Al + 20% Mg, 430°C; 2 - 79% Al + 20% Mg + 1% Mn, 430°C; 3 - 79% Al + 20% Mg + 1% Mn, 400°C; 4 - 79.7% Al + 20% Mg + 0.3% Cr, 400°C.

Відповідні їм залежності критичного радіусу r_k і середнього розміру мікрочастинок \bar{r} з часом ізотермічного нагрівання сплавів також мають лінійний вигляд. По характеру змінювання приведеної швидкості $v_k(t)$ треба судити про часові залежності характерних розмірів мікрочастинок дисперсної системи. В інших випадках залежність $\ln(v_k) = f(t)$ може бути нелінійною. Тому найбільш достовірний висновок про діючий механізм укрупнення мікрочастинок в дисперсійній системі можливо одержати тільки в результаті аналізу їх розподілу по розмірам.

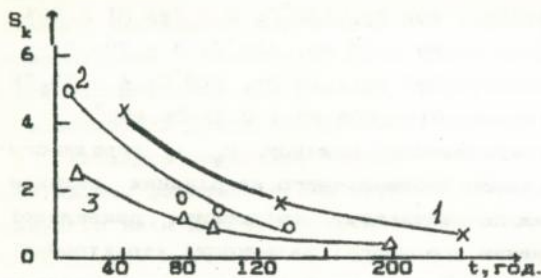
В процесі ізотермічного нагрівання сплавів відбувається безперервне зніження в сторону більш крупних розмірів мікрочастинок Al₃Mg₂ модального розміру r_m і верхньої межі розмірів r_g . Зніження зазначених характеристик експериментальних гістограм закономірно, тому що в дисперсійній системі відбувається неперервна розчинення найбільш дрібних і зростання більш великих мікрочастинок. В свою чергу, останні можуть переогрануватись, що повинно приводити до збільшення їх стійкості до розчинення.

Згідно запропонованому методу комп'ютерного аналізу

дисперсно-зміцнених сплавів, віддається перевага особливостям трансформації кривих щільностей розподілу мікрочастинок по розмірам, опосередковано утримуючих важливу інформацію про суть внутрішньосистемних процесів. Асиметрія розподілів характеризується

коефіцієнтом $S_k = \frac{m_2}{m_2^{2/3}}$, де $m_2 = \int_0^g (r-\bar{r})^2 f(r,t) dr$,
 $m_2 = \int_0^g (r-\bar{r})^3 f(r,t) dr$.

Зниження величини S_k з часом вказує на зменшення максимуму розподілів в сторону більш великого розміру мікрочастинок. Це і відбувається в сплавах, для яких зображена тижасова залежність величини S_k на мал.2.

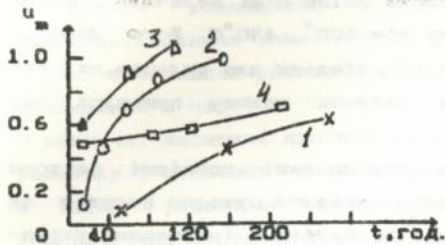


Мал.2. Тижасова залежність коефіцієнту асиметрії S_k розподілів мікрочастинок Al_2Mg_2 по розмірам Al-Mg сплавів: 1-80% Al+20% Mg, 350°C; 2-79% Al+20% Mg+1% Mn, 400°C; 3-79.7% Al+20% Mg+0.3% Cr, 400°C.

Зниження максимуму розподілів по мірі збільшення мікрочастинок Al_2Mg_2 можна охарактеризувати тижасовою зміною величини

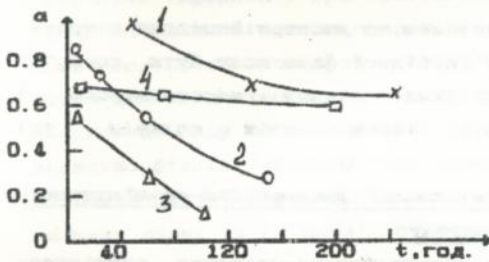
$$u_m = \frac{r_m}{r_k}$$

показаних на мал.3. З часом відбувається безперервне збільшення відносного модального розміру і тим більш значине, чим вища температура ізотермічного нагрівання сплаву. Міркуючи про хід кривих і характер збільшення u_m з часом, важко установити яку-небудь якісну закономірність зміни величини u_m з часом. Це зв'язано з тією обставиною, що величина u_m суттєво визначається кінетичними особливостями процесу, тобто залежить від багатьох факторів. Це помітно, якщо зрівняти хід кривих 1-3 із кривих для сплаву легированого хромом.



Мал. 3. Тинчасова залежність відносного подальшого розміру розподілів нікročастинок Al_3Mg_2 по розмірах для сплаву, який містить 80% Al+20% Mg: 1 - 350°C; 2 - 400°C; 3 - 430°C; сплаву 79.7% Al+20% Mg+0.3% Cr: 4 - 400°C.

Суттєвий вплив на трансформацію експериментальних розподілів справляє зміна величини параметру α з часом. Якщо $\alpha = 0$, тоді умова виживання нікročастинок для будь-якого заданого розміру $r' = \text{const}$ будуть однаковими. Вони зникають по мірі наближення величини α до одиниці. При $\alpha = 1$ всі нікročастинок дисперсної системи для кожного заданого розміру будуть мати різні можливості для виживання (розчинення, росту). З часом укрупнення нікročастинок Al_3Mg_2 відбувається зменшення величини α (Мал. 4): система рухається до стану рівноваги. Можливо, що при дуже великому часі ізотермічного нагрівання ця величина прийме нульове значення, відповідно подальшій дисперсній системі Вагнера.



Мал. 4. Тинчасова залежність параметру нерівноваги α розподілів нікročастинок Al_3Mg_2 для сплаву 80% Al+20% Mg: 1 - 350°C; 2 - 400°C; 3 - 430°C і сплаву, який містить 79.7% Al+20% Mg+0.3% Cr: 4 - 400°C.

Також найбільш суттєвими факторами є кінетична характеристика дисперсної системи. Наприклад, такою може бути доля зростаючих (σ) і розчиняючихся ($1-\sigma$) нікročастинок в кожний даний момент часу при постійній температурі. Величина σ з часом ізотермічного нагріву сплаву повільно збільшується. Це зв'язано з цією обставиною, що дисперсна система з часом наближається до стану рівноваги.

При постійній температурі процес оствальдовської коагуляції найбільш сильно розвивається на початкових стадіях, а потім він поступово затухає. Параметр $\alpha(\alpha_1)$, який характеризує цю особливість дисперсної системи, спочатку збільшується, досягає максимуму, а

потім зменшується. Особливо характерна зміна цієї величини з часом спостерігається для Al - Mg сплаву при 400°, 430°C. Його дещо сповільнене зменшення на більш пізніх стадіях для сплавів, які містять Mn і Cr, можна віднести за рахунок впливу присадок цих елементів.

Із комп'ютерного аналізу випливає, що такі зовнішні фактори як температура і легування сплавів справляє суттєво впливає на кінетику внутрішньосистемних процесів. Найбільш інтенсивне укрупнення мікрочастинок спостерігається у сплаві 80%Al+20%Mg. У сплавах, які містять Mn і Cr, процес огрублення мікрочастинок Al_3Mg_2 проходить з меншою швидкістю, особливо в сплаві, який містить хром. Це значить, що легірування сплаву хроном приводить до слабкої зміни ступені дисперсності мікрочастинок Al_3Mg_2 , тобто до підвищення стійкості, до зберігання їх дисперсності.

Також приведені результати досліджень зміни мікроструктурного стану хромо-нікелевої сталі з допомогою дисперсійно-комп'ютерного методу, який передбачає можливість використання поряд з совокупністю методів виміру дисперсності фаз, розподілених в об'ємі сплавів, комп'ютерного способу добування інформації про динаміку їх еволюції.

Із проведеного аналізу випливає, що дисперсійно-комп'ютерний аналіз мікроструктурного стану карбідної фази може бути корисним при дослідженні корозійно-стійких сталей напартенситного і напартенситно-феритного класів, а також інших сплавів які містять дисперсні фази.

5. Можливості і перспективи реалізації дисперсійно-комп'ютерного методу

У розділі 5 відмічено, що запропонована методика комп'ютерного аналізу дисперсних систем (дисперсно-зміцнені металевих сплавів, островкових плівок, матеріалів, які містять газонаповнені пори та ін.) враховуючи можливості розв'язання ряду проблемних задач:

- зображення ознак системи мікрочастинок (їх геометричної форми, розмірів, взаємного розміщення в об'ємі та ін.), розподілених в трьохвірному просторі на двовірне або зворотне відновлення трьохвірної картини по їх двовірним перетинам площин;
- формування системи мікрочастинок у графічні розподіли по їх найбільш суттєвому признаку;

- аналіз розподілів і їх порівняння з математичними моделями, заданими аналітичними функціями;
- аналіз еволюції розподілів і груп мікрочастинок із однаковими признаками в часі;
- заключні висновки про протікання внутрішньосистемних процесів, розвитку і стійкості дисперсної системи, час життя мікрочастинок, а також умовах змінення і збереження їх ознак (складу, кристалічної структури, форми, ограніння та ін.), схильності до розчинення або росту та інших характеристик.

Всі перелічені задачі відображені в комплексі запропонованих програм для ПЕОМ типу IBM PC/AT. В своїй сукупності вони можуть бути об'єднані в пакет програм. Враховуючи різні можливості кількісної металографії, запропонований пакет може бути використаний при проведенні аналізу мікроструктурного стану і фазового складу сплавів шляхом залучення засобів ЕОМ.

В сукупності автоматизованих приборів і улаштувань для кількісного аналізу мікроструктури сплавів із різного роду ЕОМ можливо створити комплекс не тільки для повного аналізу картини мікроструктури в площині перетинів і в об'ємі сплавів, але і для одержання інформації про протікання внутрішньосистемних процесів. Такий об'єднаний комплекс може бути названий автоматизованим науково-дослідним комплексом ("АНИКО"). Комплекс "АНИКО" рекомендується для предметного навчання студентів професійних навчальних закладів, наприклад, ряду спеціалізацій: фізичне матеріалознавство, металознавство, фізика твердого тіла. Опанувавши зміст їх окремих блоків, описання структурних особливостей, процедуру відбору експериментальних даних та їх аналіз студенти набувають професійні звички комп'ютерної практики.

ВИСНОВКИ

1. Кореляція між еволюцією дослідної кривої розподілу по розмірах і фізичною природою процесів, які приводять до цієї еволюції, може бути знайдена шляхом порівняння експериментальної залежності з сім'єю теоретичних кривих, які описують фізичну природу дисперсної системи.

2. Розроблен новий метод ідентифікації теоретичних розподілів з експериментальною гістограмою. Метод складається з:

- послідовного рішення динамічного рівняння дисперсної системи;
- відбір теоретичного розподілу, який володіє максимальною схожістю з експериментальною гістограмою;
- оцінки достовірності результатів з використанням відношень між власними моментами експериментального розподілу.

3. На прикладі алюмінієво-магнієвих сплавів проілюстрована процедура встановлення корелюючого зв'язку між ознаками трансформації експериментальних гістограм з часом укрупнення мікрочастинок Al_3Mg_2 у сплаві і викликаючих її процесами в системі. Наближення при ізотермічному нагріванні алюмінієво-магнієвих сплавів, які містять дисперсну Al_3Mg_2 фазу, до стану рівноваги супроводжується зменшення кількісного значення параметру нерівноваженості α , що визиває зніження максимума кривих щільності розподілу в сторону великих розмірів і зменшення ступені їх позитивної асиметрії (коефіцієнта S_k).

4. Визначено кількісне значення критичного радіусу системи мікрочастинок Al_3Mg_2 . При збільшенні критичного радіусу з часом ізотермічного нагрівання сплавів супроводжується появою значної доли мікрочастинок, з характерною високою швидкістю розчинення в натричній фазі (речовини середовища). Розрахована доля зростаючих часток (g) збільшується з часом ізотермічного нагрівання сплавів.

5. Залежність кінетичного параметру від інших величин така, що ця характеристика розподілу при $T = \text{const}$ збільшується з часом укрупнення мікрочастинок, досягає максимума і потім зменшується. Експериментальні дані підтверджують такі його якісні зміни, пророчені теорією. Для сплаву з хромом величина ϵ слабо залежить від часу, що зв'язано з впливом цього легіруючого елементу.

6. Тимчасова залежність критичного (r_k) або середньозарифметичного (\bar{r}) розмірів мікрочастинок визначається зміною з часом швидкості v_k . Не існує простої часової залежності $r_k(t)$ або $\bar{r}(t)$, які використовують в практиці обробки експериментальних даних. Тільки при $v_k = \text{const}$ ($\alpha = \epsilon = 0$) можна одержати формулу Вагнера

$$(r_k \sim \bar{r} \sim t^{1/2}).$$

7. Шлях еволюції системи мікрочастинок відмічений закономірною зміною з часом характеристик її трансформуючих розподілів по розмірам ($\alpha, \epsilon, v_k, u_g$ та ін.). Існує варіаційний принцип вибору шляху при русі багатоеlementної системи із нестійкого стану до

рівноваги з тенденцією установалення стійкого динамічного існування.

8. Запропонований метод комп'ютерного аналізу дисперсних систем важливо доповнює можливості кількісної металографії сплавів і безпосередньо може бути використаний для оснастки ЕОМ, котрі застосовуються до автоматизованих приладів для аналізу мікроструктурного стану сплавів.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ ДИСЕРТАЦІЇ ОПУБЛІКОВАНО У РОБОТАХ

1. В.И. Псарев, А.Ф. Куликов, Л.А. Пархоменко. Элементы предметной компьютеризации по курсу "Физическое материаловедение". - Тезисы докладов I Международной конференции. - Донецк, 1993, с. 223 - 224.

2. В.И. Псарев, Л.А. Пархоменко, А.Ф. Куликов. Дисперсионно-компьютерный анализ микроструктуры сплавов. - Изв. АН России. Металлы, - 1994, N 5, с. 154-162.

3. В.И. Псарев, А.Ф. Куликов, Л.А. Пархоменко. Компьютерное материаловедение дисперсно-упрочненных сплавов. - Материалы VI Международной научно-технической конференции. - Запорожье, 1995, часть 1, с. 49.

4 В.И. Псарев, Л.А. Пархоменко, А.Ф. Куликов. Дисперсионно-компьютерный анализ изменения микроструктурного состояния при высокотемпературной отпуске хромоникелевой стали. - Материалы VI Международной научно-технической конференции. - Запорожье, 1995, часть 2, с. 96-97.

5. В.И. Псарев, Л.А. Пархоменко, А.Ф. Куликов. Системный анализ дисперсно-упрочненных сплавов. - Изв. АН России. Металлы, - 1996, N 3, с. 142-150.

6. В.И. Псарев, Л.А. Пархоменко. Кинетика огрубления и стабилизация островковых тонких пленок. - Изв. вузов. Физика, - 1996. - Деп.

АННОТАЦИЯ

Пархоменко Л.А. Компьютерный анализ дисперсных систем. Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.13 - физика металлов, Запо-

роцкий государственный технический университет, Запорожье, 1996.

Защищается диссертация на правах рукописи, которая содержит описание метода дисперсионно-компьютерного анализа микроструктуры сплавов, связанного с установлением возможной коррелирующей связи между признаками изменения со временем экспериментальных гистограмм и внутрисистемными процессами, вызывающими трансформацию распределений микрочастиц по размерам. По своему содержанию он является развитием методов статистической физики, предназначенных для анализа размерных распределений дисперсных фаз дисперсно-упрочненных сплавов. На основе информации, получаемой при обработке данных состояния дисперсной фазы с помощью предлагаемого метода, можно сделать наиболее полное и достоверное заключение о качестве микроструктурного состояния, фазового состава и ожидаемых свойств дисперсно-упрочненного сплава. Показано влияние температуры и легирования на кинетику укрупнения дисперсных частиц, которая оказывает существенное влияние на разупрочнение металлических сплавов, упрочненных дисперсными фазами. Приведены исследования изменения микроструктурного состояния хромоникелевой стали с помощью предлагаемого метода. Отмечено, что дисперсионно-компьютерный анализ микроструктурного состояния карбидной фазы может быть полезным при исследовании коррозионно-стойких сталей мартенситного и мартенситно-ферритного классов, а также других сплавов, содержащих дисперсные фазы.

S U M M A R Y

Parkhomenko L. A. The computer analysis disperse systems.

The thesis on the competition of a degree of the candidate of physical-mathematical sciences on a speciality 01.04.13 - physics of metals, Zaporozhye State University, Zaporozhye, 1996.

The dissertation on rights of manuscript is defended. It contains the description of dispersion-computer analysis method analysis of alloys microstructure. The method enables establish possible correlative connection between change attributes experimental histograms in time and intrasystem processes, which cause transformations of microparticles distributions according to their sizes. This method is a development of statistical physics methods and it is used for analysis of size distribution

of microparticles in dispersion-strengthened alloys. On the basis of information obtained from data processing of condition disperse phase with help of above method, it will be possible to make the most full-fledged and reliable conclusion about quality of microstructural condition of phase composition and expected properties of dispersion-strengthened alloys. The influence of temperature and alloyage on kinetics of integration disperse particleson is shown. It essentially influences the weakening of metal alloys containing disperse phases. The researches of change of microstructural conditions chromonickel steel with the help of the offered method are adduced. It is marked that the dispersion- computer analysis of microstructural condition carbide phase can be useful for research corrosion - proof steels of martensite and martensite-ferrite classes, as well as for other alloys, containing disperse phases.

Ключові слова:

дисперсійно-комп'ютерний аналіз, дисперсна система, коагуляція, коалесценція, реакційно- і дифузійно-контрольовний механізм, трансформація розподілів, ідентифікація, функціональні моменти.

48. 26. 10. 19. 21

THE UNIVERSITY OF CHICAGO
LIBRARY

432152

АВ 36.104

Подписано к печати 17.10.96г. Заказ №1038, Тираж 100 экз.
Запорожье, ЗГТУ, Типография, ул.Гоголя, 64.