

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Пермский национальный исследовательский политехнический университет»

На правах рукописи

БАТИН СЕРГЕЙ ЕВГЕНЬЕВИЧ

**МОДЕЛЬ КОМПЛЕКСНОГО ОЦЕНИВАНИЯ
ПРОЧНОСТНЫХ СВОЙСТВ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ
МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ СИСТЕМНОГО АНАЛИЗА
ЗЕРЕННО-ФАЗОВОЙ СТРУКТУРЫ**

05.13.01 Системный анализ, управление и обработка информации
(технические и информационные системы)

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание учёной степени
кандидата технических наук

Научные руководители:

д.т.н., профессор Столбов В.Ю.

д.ф.-м.н., профессор Гитман М.Б.

Пермь – 2020 г.

Оглавление

Оглавление	2
Введение.....	4
Глава 1. Проблема оценивания физико-механических свойств при создании функциональных материалов.....	11
1.1 Функциональные металлические материалы как сложная техническая система	11
1.2 Зависимость прочностных свойств ФММ от параметров микроструктуры	16
1.3 Существующие модели оценивания прочностных свойств материалов	23
1.4 Выводы по главе.....	40
Глава 2. Постановка задачи комплексного оценивания свойств ФММ	42
2.1 Общая постановка задачи комплексного оценивания	42
2.2 Математическая постановка задачи комплексного оценивания.....	52
2.3. Методика определения минимально допустимого количества экспериментов и значимых характеристик зеренно-фазовой структуры материала	61
2.4. Алгоритм исследования устойчивости модели оценивания в стохастическом смысле	63
2.3 Обоснование метода решения	65
2.4 Выводы по главе.....	67
Глава 3. Выбор размеров представительного изображения микроструктуры для определения свойств ФММ.....	69
3.1 Обзор проблемы определения представительного объема материалов.	69
3.2 Понятие представительного изображения микроструктуры при оценке прочностных свойств ФММ	71
3.3 Алгоритм оценки размеров представительного изображения зеренной структуры материала	73
3.4 Выбор размеров представительного изображения для исследуемых ФММ	82
3.5 Выводы по главе.....	84

Глава 4. Оценивание прочностных свойств ФММ на основе анализа зеренно-фазовой структуры	86
4.1 Обработка исходной информации на основе компьютерного анализа зеренно-фазовой структуры исследуемого материала.....	86
4.2 Пример оценивания прочностных свойств стали, подверженной термообработке	96
4.3 Определение значимых характеристик микроструктуры.....	102
4.4 Определение минимально допустимого количества экспериментов для определения прочностных свойств металлических функциональных материалов	103
4.5 Исследование стохастической устойчивости модели оценивания	105
4.6 Внедрение результатов диссертации	113
4.7 Выводы по главе.....	115
Заключение	118
Библиографический список	120
Приложение 1	131
Приложение 2	132
Приложение 3	133
Приложение 4	135

Введение

Актуальность темы исследования. В современных условиях хозяйственной и производственной деятельности весьма актуальным представляется вопрос использования материалов, имеющих улучшенные эксплуатационные свойства. Такие материалы, имея относительно более высокие показатели механических характеристик таких, как предел текучести, предел прочности, удельный упругий модуль, позволяют добиться значительных преимуществ при снижении веса конструкции или ее стоимости, в то же время сохраняя необходимую прочность. Этого можно добиться, применяя наукоемкие подходы к проектированию микроструктуры таких материалов.

В то же время весьма актуальным является вопрос количественного описания взаимосвязи микро- и макросвойств материалов, поскольку ввиду высокой ее сложности при проведении исследований наиболее часто встречается лишь качественное описание того, почему материал с наблюдаемой микроструктурой имеет измеренные механические свойства. Сложность количественного описания данной взаимосвязи состоит в том, что они определяются видом дефектной микроструктуры в широком диапазоне масштабов: от размеров совокупности из нескольких тысяч зерен, имеющих размеры порядка десятков микрометров или микрометров для мелкозернистых материалов, до характерных масштабов дислокационной структуры, имеющей порядок десятков нанометров. Существующая инструментальная база, применяемая для идентификации микроструктуры, как правило, не позволяет получить достаточно полные данные для структуры в столь широком диапазоне масштабов. Чаще всего проводится лишь исследование микроструктуры на уровне зёрненной структуры. Таким образом, можно говорить о значительной неопределенности исходных данных в задаче системного анализа связи микроструктуры и макроскопических свойств различных материалов, когда исследуемый металлический материал рассматривается как сложная

техническая система с иерархической структурой описания на различных масштабных уровнях и нелинейными связями между ними.

Ввиду упомянутой выше неопределенности данных при идентификации параметров микроструктуры, ключевой становится необходимость учета всей доступной информации о характеристиках материала на различных масштабных уровнях и проведение системного анализа данных. Хорошим источником данных могут служить фотографии микрошлифов, широко используемые при металловедческом анализе. Как правило, для качественного объяснения наблюдаемых макроскопических прочностных свойств такие фотографии подвергаются экспертному анализу, при котором делаются выводы о некоторых характерных размерах, например среднем размере зерен, долях фаз, а также морфологии зерен и включений, наличии текстуры материала. Таким образом возникает возможность провести системный анализ связи таких характеристик микроструктуры металлического материала с измеряемыми в макроскопическом эксперименте его прочностными свойствами.

Степень разработанности темы исследования.

Исследованию поведения металлических материалов на макроуровне в зависимости от различных параметров термомеханической обработки посвящены работы российских и зарубежных ученых, в частности: Барышникова М.П., Гуна Г.С., Сегала В.М., Cai X., Yu W. и многих других.

Влияние технологий получения и/или обработки материалов на микроструктуру рассмотрены в работах Валиева Р.З., Зельдовича В.И., Ефимовой Ю.Ю., Колобова Ю.Р., Копцевой Н.В., Хейфеца А.Э., Чукина М.В., Гусева А.Л., Kim C.S., Arlazarov A., Zhu R. и других ученых.

Исследованию взаимосвязей между характеристиками структуры материала и его макроскопическими свойствами посвящено также значительное количество работ, среди которых можно выделить исследования Bouaziz O., Галимова Э.Р., Мамина А.С., Наймарка О.Б., Трусова П.В., Varon S., Kim C.S. и других. В последние годы появились работы, в которых делается попытка установления связей между различными объектами, в том числе

микро-и макросвойствами металлов и сплавов с помощью нейросетевого моделирования (Клюев А.В., Столбов В.Ю., Толстых А.А., Вологдин С.В., M. Azimi, D. Britz, Brian I. Decost и другие) Однако применение этого метода для исследуемой задачи требует разрешения ряда фундаментальных вопросов, связанных со следующими проблемами: обоснование размеров представительного объема материала, позволяющего с заданной точностью осуществлять переход с микро- на макро- уровень; исследование устойчивости числовых значений свойств материала на макроуровне при малых изменениях характеристик зёренно-фазовой структуры; исследование устойчивости нейросетевой модели в зависимости от мощности обучающего множества экспериментальных данных. Решение этих вопросов требует получения новых знаний в области распознавания сложных микроструктур материала и идентификации их параметров.

Так или иначе связь микроструктуры и механических свойств материалов рассматривается практически во всех работах, посвященных материаловедению, однако в этих работах связь микроструктуры и макросвойств практически всегда определяется только с качественных позиций. Если же проводится количественное описание связи микроструктуры и макросвойств (Большаков В.И., Касьян О.С., Šimek D. И другие), то, как правило, не проводится оценка комплексов характеристик. Таким образом, разработка алгоритмов комплексной оценки прочностных свойств металлических материалов на основе данных об их микроструктуре является актуальной.

Объектом исследования являются металлические функциональные материалы как сложные технические системы.

Предметом исследования являются модели и алгоритмы, позволяющие устанавливать системные закономерности и связи между прочностными свойствами металлических материалов и их микроструктурой.

Цель диссертационного исследования заключается в повышении эффективности процессов создания функциональных металлических

материалов за счет применения моделей и алгоритмов, позволяющих проводить комплексное оценивание прочностных свойств металлического материала на основе системного анализа характеристик его микроструктуры.

Для достижения данной цели были поставлены **следующие задачи:**

1. разработать модель комплексного оценивания прочностных свойств металлических материалов и определить ее входные параметров;
2. разработать алгоритм оценивания размера представительного изображения микроструктуры;
3. обосновать минимально допустимое количество экспериментов и значимых характеристик микроструктуры, позволяющих получать оценку требуемых прочностных свойств с заданной точностью;
4. исследовать эффективность предложенных моделей и алгоритмов при создании функциональных металлических материалов.

Научная новизна диссертационной работы заключается в следующем:

- предложена оригинальная модель оценивания прочностных свойств материала, отличающаяся использованием нечетких отношений для установления причинно-следственных связей между параметрами микроструктуры и макросвойствами, что дает возможность более эффективно проектировать функциональные материалы;
- разработан алгоритм определения представительности цифровых данных о микроструктуре для оценки макроскопических свойств материала, отличающийся способом генерации модельной объемной структуры, заданием сечения сгенерированной зеренной структуры плоскостью и вычислением размеров представительного изображения на основе статистического критерия;
- разработана методика определения минимально допустимого числа экспериментов и значимых параметров при проведении оценки прочностных свойств металлических материалов в рамках новой модели комплексного оценивания, позволяющая получать оценки с допустимым значением погрешности на основе меньшего числа экспериментов;

Теоретическая значимость работы заключается в разработке новых моделей и алгоритмов, позволяющих проводить оценку физико-механических свойств материалов на основе минимальных данных о его зеренно-фазовой структуре и проводить анализ достоверности полученной оценки.

Практическая значимость заключается в применении разработанных моделей и алгоритмов при проектировании новых материалов, что упрощает процесс, позволяет уменьшить число натуральных экспериментов и снижает стоимость такого проектирования.

Модель оценивания комплексных свойств материалов реализована в виде программы для ЭВМ «Нечеткий определитель комплексных свойств материалов (НОКСМ)» (Свидетельство о государственной регистрации № 2018661275 от 04.09.2018, Бюл. № 9.).

Предложенные модели и алгоритмы внедрены в производственную и исследовательскую практику предприятия ООО «Research and Development MGTU», что подтверждается актом внедрения от 20.11.2019. Применение разработанных моделей и методик позволяет сократить затраты на 7% за счет обоснованного уменьшения числа необходимых экспериментов.

Разработанные в диссертации модели и алгоритмы также используются в учебном процессе при реализации образовательных программ бакалавриата и магистратуры по направлению «Информационные системы и технологии» ПНИПУ, что подтверждается соответствующим актом внедрения.

Теоретическую и методологическую основу исследований составляют положения системного анализа, теории нечетких множеств, теории вероятностей и математической статистики, методы оптимизации и комплексного оценивания.

На защиту выносятся следующие основные результаты:

1. Модель комплексного оценивания прочностных свойств металлических материалов на основе системного анализа зеренно-фазовой структуры (соответствует пп. 5 и 11 паспорта специальности);

2. Алгоритм определения размеров представительного изображения микроструктуры при оценке прочностных свойств (соответствует пп. 5 и 12 паспорта специальности);

3. Методика определения минимально допустимого числа экспериментов и значимых параметров при проведении оценки прочностных свойств металлических материалов (соответствует пп. 5 и 11 паспорта специальности);

Достоверность результатов исследования определяется корректным использованием современных математических методов, широкой успешной практикой применения методов теории нечетких множеств в других предметных областях, верификацией полученных теоретических результатов в экспериментах на реальных данных.

Апробация результатов диссертации. Работа по теме диссертации выполнялась в рамках международного проекта (уникальный идентификатор проекта RFMEFI58617X0055) по программе «Горизонт 2020» на 2016-2020 гг.

Результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на научно-методических семинарах кафедры «Вычислительная математика, механика и биомеханика» ПНИПУ; XXIV и XXV Всероссийских школах-конференциях молодых ученых и студентов «Математическое моделирование в естественных науках» (г. Пермь, 2015, 2016); XIV Всероссийской школе-конференции молодых ученых «Управление большими системами» УБС-2017 (г. Пермь, 2017); Международной научно-технической молодежной конференции «Перспективные материалы конструкционного и медицинского назначения» (г. Томск, 2018); VIII и IX Всероссийских научных конференциях с международным участием «Механика композиционных материалов и конструкций, сложных и гетерогенных сред» (г. Москва, 2018, 2019); Международной научно-технической конференции «Функциональные материалы: прогнозирование свойств и технологии изготовления» (г. Пермь, 2019).

Публикации. Основное содержание работы опубликовано в 17 печатных работах, из них четыре статьи в ведущих рецензируемых научных изданиях, в том числе три статьи индексируются в международных базах цитирования Scopus и WoS; получено одно свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ и один патент на изобретение.

Глава 1. Проблема оценивания физико-механических свойств при создании функциональных материалов

1.1 Функциональные металлические материалы как сложная техническая система

Как известно [1,2] «... свойства любого металлического материала определяются его внутренней структурой. Структура, в свою очередь, зависит от химического состава, технологии получения и последующей обработки материала посредством механических, химических, термических и других воздействий». В работах [1–3] исследователи приходят к выводу, что «управляя структурой металла, можно получать материалы с требуемыми сочетаниями эксплуатационных свойств».

В работах [4,5] отмечается, что сегодня «... огромное количество металлических материалов, предназначенных для различных сфер деятельности человека, используется в качестве конструкционных материалов (КМ) в машиностроении, строительстве, быту и пр. Отличительным свойством КМ является крупнотоннажность их производства, ограниченная номенклатурность в масштабах одного предприятия и широкие возможности взаимозаменяемости. Вследствие этого к качеству самих КМ, а также к уровню контроля этого качества, не предъявлялось повышенных требований, а сам контроль эксплуатационных свойств вполне мог осуществляться специалистами с типовой для отечественной металлургии квалификацией».

В последнее время всё чаще ставится [6] задача производства так называемых **функциональных материалов (ФМ)** - материалов, которые обладают заранее заданным эксплуатационными свойствами. ФМ должны обладать строго определенными и желательно настраиваемыми физико-механическими свойствами, дающими возможность реализовывать служебные характеристики конструкций и устройств, недостижимые при использовании других материалов, например КМ. Создание ФМ с оптимальными свойствами осуществляется путем усиления или подавления каких-либо свойств уже

имеющихся материалов и невозможно без привлечения современных экспериментальных и теоретических методов исследования. Ярким представителем ФМ являются, например, металлические сплавы с мартенситными превращениями и эффектами памяти формы [7].

Следует отметить, что в последнее время понятие «функциональный материал» часто стали трактовать [4] в более расширенном виде, понимая иногда под функциональным материалом не просто материал, а некоторую «конструкцию, позволяющую обеспечивать заданный набор эксплуатационных характеристик». Большое распространение в технике получили так называемые функционально-градиентные материалы. В таких материалах механические свойства изменяются по заданному закону в некотором направлении. В качестве примера можно привести упрочненную насосную штангу, в которой в условиях агрессивной среды основная нагрузка ложится на небольшой наружный слой материала, в то время как остальной материал штанги находится в более благоприятных условиях [8]. Поэтому возникает необходимость создания функционально-градиентного материала с различными свойствами по радиусу штанги. В работе [8] предлагается добиваться эффектов повышения износостойкости и усталостной прочности в коррозионной среде за счет создания в поверхностном слое материала штанги сжимающих остаточных продольных напряжений.

В настоящее время появились так называемые аддитивные технологии, позволяющие послойно формировать функционально-градиентный материал путем создания необходимой микроструктуры в каждом слое. Примером такой технологии является метод селективного лазерного сплавления металлического материала [9], который позволяет получать металлические функциональные материалы с заданными свойствами, управляя процессом охлаждения расплавленного слоя. При этом возникает необходимость моделирования процесса затвердевания с целью получения заданной микроструктуры и, как следствие, требуемых эксплуатационных характеристик.

Другим классом функциональных материалов может служить сложная конструкция, включающая несколько материалов (подконструкций), взаимодействующих между собой. Примером такого материала является система кость-эндопротез, состоящая из металлического импланта, кости человека и условий их взаимодействия при заданной эксплуатационной долговечности [10]. В упомянутой статье вводятся частные биомеханические критерии оптимальности исследуемого функционального материала и предлагается комплексный критерий эксплуатационной долговечности конструкции кость-эндопротез с учетом индивидуальных физиологических показателей для различных возрастных групп протезируемых.

В данном исследовании в основном будут рассматриваться металлические ФМ, уникальные прочностные свойства которых задаются на этапе формирования их микроструктуры [4].

В работах авторов, относящихся к научной школе кафедры ВММБ ПНИПУ, отмечается [4,5,11], что «...сложность и уникальность свойств ФМ приводит к тому, что обеспечить необходимый уровень требований к ним возможно лишь путем управления технологическим процессом их изготовления. Свойства ФМ и их качество определяется многоуровневой системой факторов, характеризующих технологический процесс на всех стадиях производства».

К основным уровням исследователи [4,5] относят:

- химический состав ФМ, включающий, например, для сталей, содержание в них углерода, легирующих элементов, «вредных» металлов, неметаллических включений пр.;
- микроструктуру ФМ, определяемую, например, для стали, наличием аустенитной, ферритной, мартенситной, бейнитной или перлитной фазы или их сочетаний;
- форму получения ФМ, которая в специальных случаях может иметь вид нанопорошка или нанотрубок, пленок (в том числе пористых), волокна и т.д.

Там же [4] отмечается, что проверку показателей качества (и определяющих его факторов), как правило, проводят путем измерения физико-механических свойств ФМ (прочности, твердости, вязкости, упругости и др.). Ключевым преимуществом использования методов, хорошо освоенных при производстве КМ, является тот факт, что не предъявляются повышенные требования ни к аппаратуре, ни к квалификации работников [4]. Ограничение возможности их использования связано с невозможностью раскрытия с их помощью требуемых уникальных свойств ФМ. Стоит согласиться с утверждением, что подобные «...методы позволяют лишь быстро и с минимальными затратами отсеять заведомый брак».

Основные виды контроля эксплуатационных свойств производимых ФМ связаны с изучением их микроструктуры. Для изучения структур металлов и сплавов применяются прямые и косвенные методы [12]. К числу косвенных методов относятся: магнитный, дилатометрический, измерение электросопротивления и другие физические методы исследования, которые, хотя и не дают прямого изображения структуры, но всё же позволяют вскрыть кинетику происходящих в них превращений. В данной работе косвенные методы рассматриваться не будут.

К числу прямых методов относятся [12]:

- исследование макроструктуры невооружённым глазом по виду изломов или шлифованных и протравленных макрошлифов;
- исследование микроструктуры при помощи оптического микроскопа с увеличением до 1500 раз, а также с применением электронного микроскопа с увеличением до 200 тыс. раз;
- исследование атомно-кристаллической структуры с помощью рентгенографического анализа, позволяющего различать расстояния порядка 10^{-8} см.

Макроструктурным анализом, или, кратко, макроанализом, называется [8] метод исследования строения металлов и сплавов невооруженным глазом

или при небольших увеличениях - до 30 раз. Строение металлов и сплавов, изучаемое при помощи макроанализа, называется макроструктурой [12].

Метод макроскопического анализа позволяет согласно [8]:

- исследовать излом для установления характера разрушения;
- выявить дефекты, нарушающие сплошность металла - рыхлость, газовые пузыри, трещины, усадочные раковины, флокены, расслоения, свищи и другие дефекты в литых заготовках или полученных обработкой давлением, а также в сварных швах;
- определить характер первичной кристаллизации и дендритной структуры в слитках или литых деталях;
- определить химическую неоднородность сплава (ликвацию, в частности, ликвацию углерода и вредных примесей серы и фосфора), шлаковые включения, неметаллические включения;
- определить неоднородность строения сплава, вызванную последующей обработкой давлением;
- определить неоднородность состава и структуры, возникающую после термической или химико-термической обработки, например, зон цементации в стали.

Проблемы макроскопического анализа в данной работе также не рассматриваются.

Из вышесказанного можно утверждать, что функциональные материалы представляют собой сложные технические системы, создаваемые специализированным образом для работы в заданных условиях. При этом таким системам свойственна сложная структура на микроуровне, задаваемая в процессе их технологической обработки и определяющая область применимости созданного материала.

Таким образом, можно утверждать, что заданный функциональный материал представляют собой сложную техническую систему, для которой характерна высокая неопределенность ее внутренней структуры,

определяющей в свою очередь ее макроповедение при эксплуатации. При этом связи между микроструктурой и макросвойствами функционального материала обычно неизвестны, существенно не линейны и требуют дополнительных исследований.

1.2 Зависимость прочностных свойств ФММ от параметров микроструктуры

Остановимся более подробно на микроскопическом методе исследования металлов и сплавов, или, кратко, микроанализе, который предусматривает [11,12] изучение структуры металла при помощи металлографического микроскопа. Между микроструктурой и многими свойствами металла существует достаточно определенная связь, которая, к сожалению, не всегда известна. Поэтому микроанализ имеет большое значение.

Микроскопический анализ включает [4]: приготовление микрошлифа, выявление микроструктуры (травление), исследование структуры под микроскопом. Наблюдаемая в микроскопе картина строения металла называется микроструктурой [12]. Микроструктура металлов и сплавов характеризуется количеством, формой и расположением фаз и размером зерна, которые влияют на механические свойства сплавов [13]. Согласно [4,11] микроанализ применяется:

- для определения формы и размеров фаз и зёрен;
- для выявления микропороков металла - микротрещин, раковин, пористости, микровключений, ликвации.

Очевидно, что значения численных характеристик этих и других факторов, определяющих эксплуатационные свойства ФМ, должны контролироваться на всех стадиях производства. Вместе с тем, сложность процедуры контроля, а также требования к аппаратуре и квалификации персонала неодинаковы для разных факторов.

Как отмечено в работе [5], «...необходимый экспертный уровень реально

достигается на производстве КМ». В своей диссертации Шарыбин С.И. объясняет это тем, что «...крупнотоннажное малономенклатурное производство подразумевает повторение в течение многих лет одних и тех же производственных циклов. При этом численные характеристики отклонений от заданных производственных параметров подчиняются законам больших чисел, и, как следствие, поддаются высококачественной статистической обработке. Результатом такой обработки являются наборы «базовых», «эталонных» образцов микрошлифов, соответствующих качественному протеканию всех стадий производственного процесса, а также тем или иным отклонениям от заданных параметров процесса». Там же [5] отмечено, что «... в результате накопления и обобщения огромного набора эмпирических данных были разработаны, официально одобрены и внедрены в производственную практику многочисленные стандарты, составившие методическую базу данного направления контроля качества на предприятии».

Например, ГОСТ 5640-68 «Сталь. Металлографический метод оценки микроструктуры листов и ленты» [14] предполагает для оценки качества конкретной партии стали сравнить соответствующий ей микрошлиф с четырьмя наборами образцов, позволяющими оценить содержание в ней структурно-свободного цементита, перлита, уровень полосчатости ферритно-перлитной структуры, а также уровень видманштеттовой структуры (см. рис. 1.1 – рис. 1.4 соответственно).

Расшифровка наблюдаемой микроструктуры требует большого опыта. Например, как отмечено в [5], «расшифровка наблюдаемой микроструктуры требует большого опыта». Там же [5] приводится такой пример – «внешние различия между образцами Балл 0, Балл 1 и Балл 2 ряда А шкалы структурно-свободного цементита (рис. 1.1) могут быть вызваны как разным уровнем его содержания в образце, так и разным увеличением используемого для анализа микроскопа».

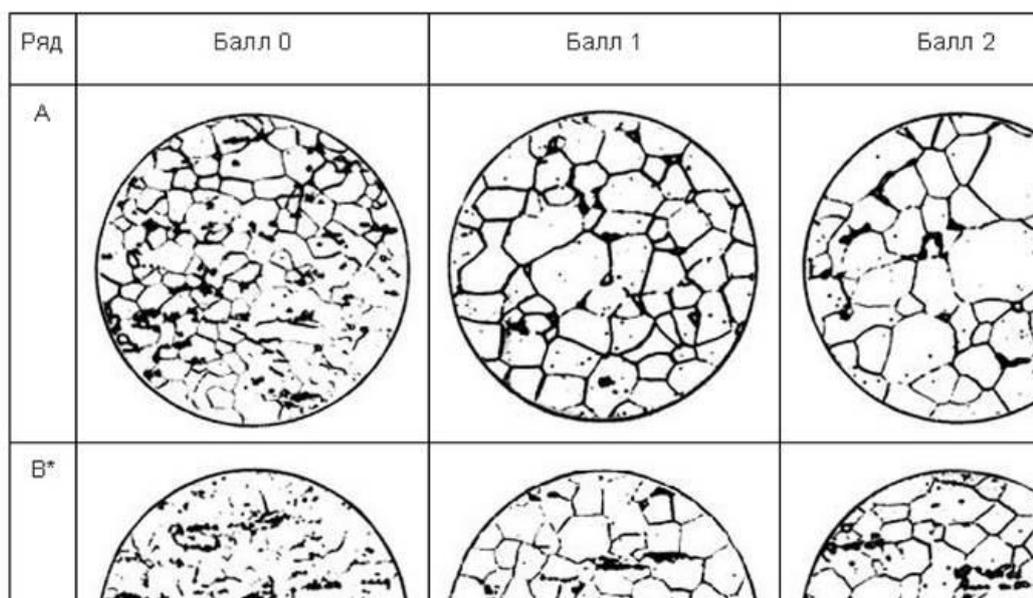


Рисунок 1.1 – Фрагмент шкалы структурно-свободного цементита по
ГОСТ 5640-68

Исследователи [5] приходят к выводу, что «... если даже квалифицированный эксперт получит лишь единственную фотографию микрошлифа, он не сможет сделать качественного заключения. Успешность его работы и его авторитет основаны на том, что (применительно к данному примеру) после исследования в одних и тех же условиях большого числа образцов, соответствующих требуемому содержанию структурно-свободного цементита, эксперт в тех же самых условиях (но при получении образца стали, сваренной с отклонением от требований технологического процесса) сумеет обратить внимание на «вдруг» увеличившиеся размеры кристаллической структуры».

Очень сильные визуальные различия шкалы перлита (рис.1.2), соответствующие Балл 0 рядов А и Б описываются стандартом практически лишь с единственным количественным различием – размером зерна. Подобное описание нивелируется маркой используемого микроскопа.

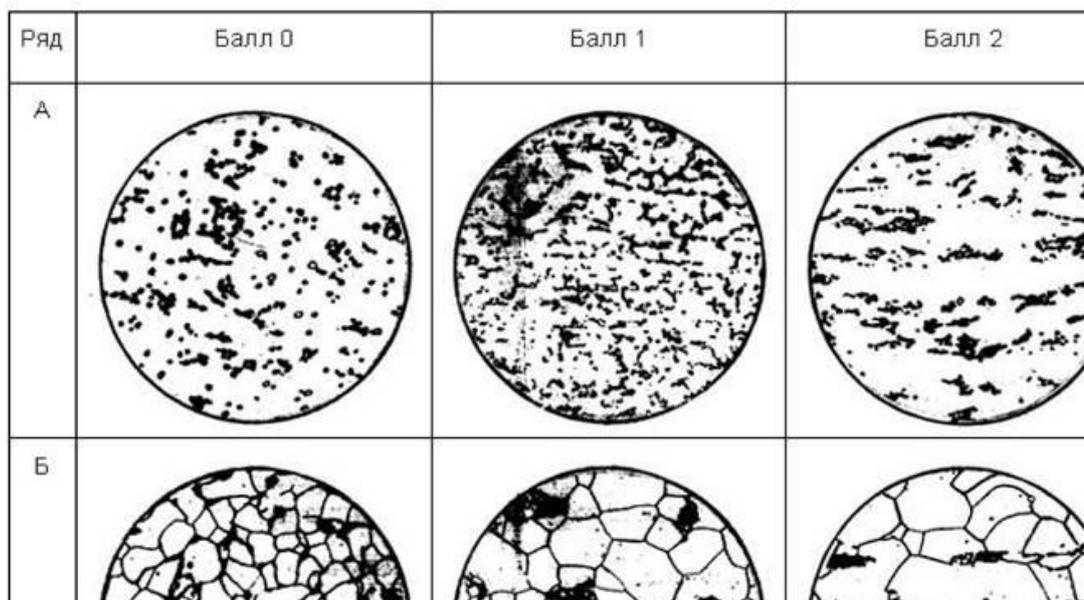


Рисунок 1.2 – Фрагмент шкалы перлита по ГОСТ 5640-68

Наоборот, изображения шкалы полосчатости ферритно-перлитной структуры (рисунок 1.3) визуалью очень схожи, хотя их описания существенно различаются.

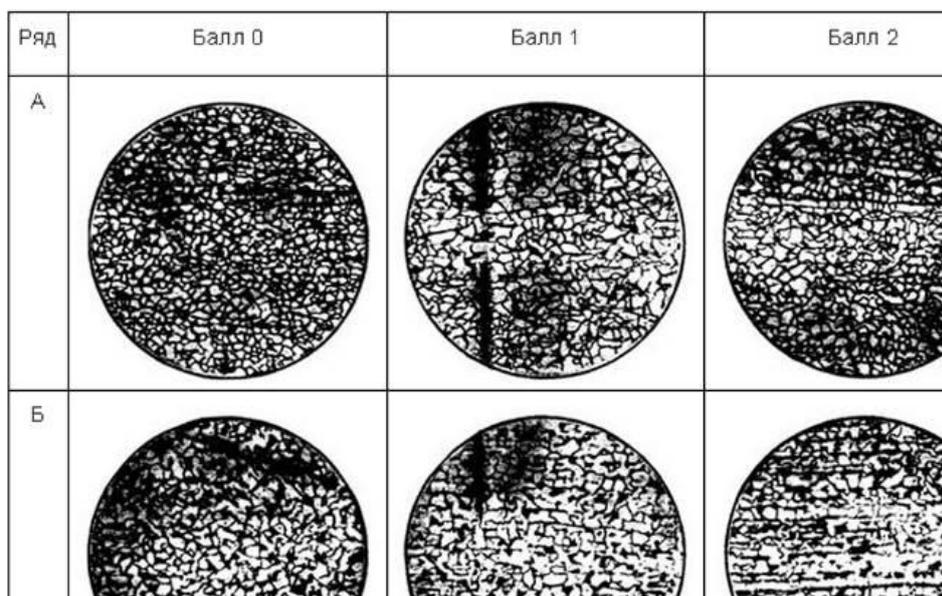


Рисунок 1.3 – Фрагмент шкалы полосчатости ферритно-перлитной структуры по ГОСТ 5640-68

В [5] замечено, что это еще более заметно на шкале видманштеттовой структуры (рис. 1.4), где визуалью непохожие образцы Балл 0 рядов А и Б имеют дословно совпадающее описание: «Равномерная феррито-перлитная структура с полным отсутствием признаков видманштетта».

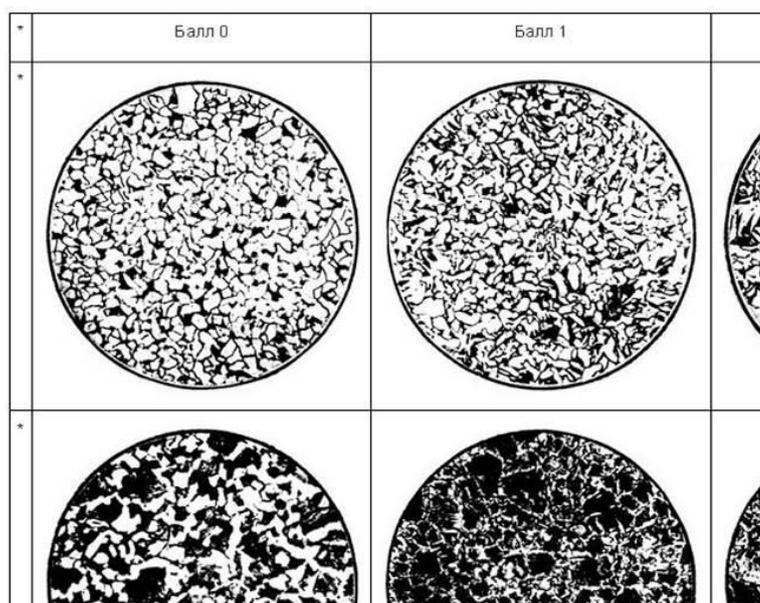


Рисунок 1.4 – Фрагмент шкалы видманштеттовой структуры по ГОСТ 5640-68

Многие указания по анализу образцов микрошлифов вызывают значительные затруднения. Например, в ГОСТ 1435-99 «Прутки, полосы и мотки из инструментальной нелегированной стали» [15] имеется шкала для оценки микроструктуры инструментальной нелегированной стали, фрагмент которой приведен на рис. 1.5.

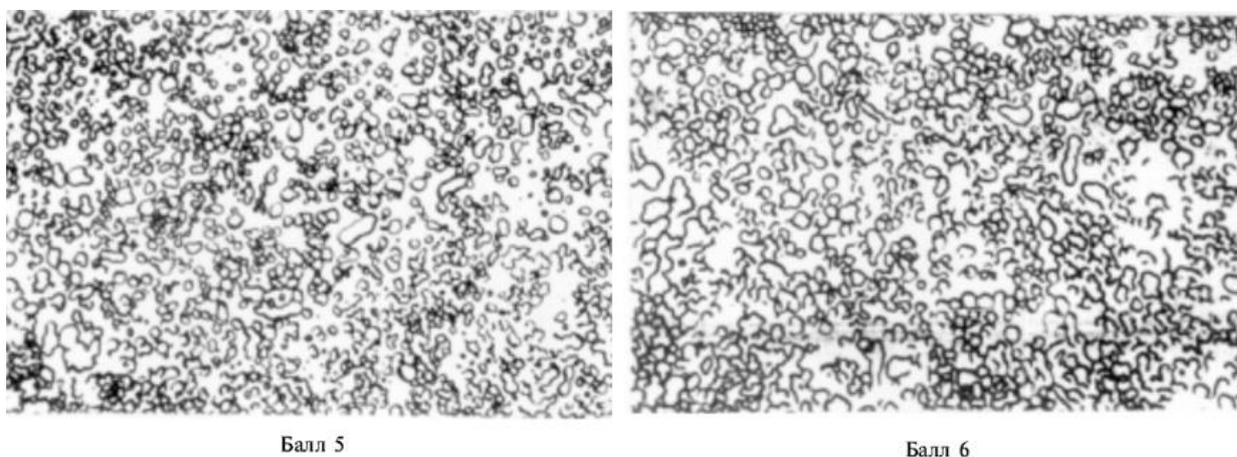


Рисунок 1.5 – Фрагмент шкалы для оценки микроструктуры инструментальной нелегированной стали по ГОСТ 1435-99

Также в [5] отмечается, что «...образцы, соответствующие Балл 5 и Балл 6 визуально практически неразличимы (с точностью до увеличения микроскопа). Более того, им соответствует одно и то же описание – «зернистый перлит с увеличивающимся размером цементитных частиц». Понятно, что

указанное различие может быть замечено только лишь опытным специалистом при работе на одном и том же, более того – одинаково настроенном, оборудовании».

Указанные в примере затруднения визуального анализа, возникающие при работе с достаточно простыми углеродными сталями, многократно усиливаются при работе с легированными сталями. В частности, в большинстве случаев легированную сталь невозможно металлографически отличить от углеродистой стали (особенно легированную сталь перлитного класса). Она выглядит под микроскопом как углеродистая сталь с таким же содержанием углерода. «Легированную сталь можно металлографически отличить от углеродистой только лишь в тех случаях, когда она либо содержит много спецкарбидов, либо они имеют специфическую форму, либо в ее структуре виден аустенит при комнатной температуре» отмечается в [5].

Но, при производстве КМ, по крайней мере, удалось (за счет крупнотоннажности, значительного времени выпуска и накоплении достаточного числа случаев брака) собрать необходимое опорное пространство металлографических образцов в форме комплекса государственных и отраслевых стандартов, подобных рассмотренным выше. Значительно сложнее обстоят дела с контролем качества технологических процессов производства ФМ.

Основная сложность связана с тем, что, как отмечается в [5], такие фазы жизненного цикла ФМ, как:

- разработка научно-технических основ, состава, структуры и формы ФМ;
- разработка технологии их производства и применения;
- собственно промышленный выпуск ФМ

обычно осуществляются разными организационными структурами. Как следствие, практика производства таких материалов имеет крайне ограниченный опыт, сами они зачастую представляют собой новые для предприятий - изготовителей классы материалов, и их производство не может базироваться на прецедентном подходе, обычно используемом

производственниками для решения материаловедческих и технологических задач. С другой стороны, организации-разработчики вряд ли заинтересованы в проведении полного факторного эксперимента по моделированию всех возможных отклонений параметров технологического цикла ФМ от заданных, и формирования банков образцов микрошлифов, подобных приведенным в вышеупомянутых стандартах.

Вместе с тем, прогресс в области аппаратных и программных средств вычислительной техники сделал возможным существенный прорыв в таких областях техники, как интеллектуальные системы, машинное зрение, анализ изображений с помощью нейросетевых технологий и пр. Разработанные к настоящему времени научно-технические решения позволяют в достаточной мере обеспечить возможность реализации автоматических методов обработки и распознавания изображений в новых предметных областях, в частности – в области контроля качества выпускаемой продукции. Несмотря на отсутствие общетеоретических основ анализа и распознавания изображений [16], прогресс в конкретных областях анализа образов - признаковом, текстурном, контурном и структурном (различающихся типами используемых представлений изображений), сделал возможной разработку «ситуационных» алгоритмов, предназначенных для решения той или иной конкретной проблемы или задачи распознавания образов, и не предназначенных для какого-либо обобщения или адаптации для других целей. Кроме того, существенное (на два-три порядка) снижение стоимости устройств, формирующих цифровые изображения, при обеспечении их компактности, обусловило оснащение ЦЗЛ (центральных заводских лабораторий) или иных центров проектирования функциональных материалов широким спектром оптико-электронных приборов и комплексов, ориентированных на формирование и обработку цифровых изображений. Возросла также и производительность электронных компонентов оптико-электронных приборов, что создало возможности использования вычислительно более ресурсоемких алгоритмов анализа изображений, например [17].

Указанные обстоятельства позволяют организациям-разработчикам ФМ, помимо технологии их производства, разрабатывать и передавать предприятиям-изготовителям программные комплексы для автоматизированного микроструктурного анализа и контроля эксплуатационных свойств ФМ на всех этапах их изготовления. **Однако при этом остается нерешенной еще одна важнейшая проблема – прогнозирование эксплуатационных свойств ФМ по результатам анализа сформированной микроструктуры. Сложность решения этой задачи связана с отсутствием универсальных отношений между параметрами микроструктуры и макрохарактеристиками ФМ. Причем эта проблема усугубляется многофакторностью и многокритериальностью задачи прогнозирования характеристик ФМ, что, в свою очередь, требует ее постановки и решения в условиях неопределенности и исследования устойчивости получаемых решений на различных масштабных уровнях.**

Таким образом, актуальной задачей является построение многоуровневой модели комплексного оценивания прочностных свойств металлических функциональных материалов на основе системного анализа их микроструктуры.

1.3 Существующие модели оценивания прочностных свойств материалов

Проблеме определения связи прочностных свойств и микроструктуры различных металлических материалов посвящено множество работ. Далее представлен обзор актуальных работ, посвященных исследованию связи микроструктуры металлов и их макроскопических механических свойств, а также предсказанию таких свойств, основанному на анализе фотографий микрошлифов образцов или параметров процесса термомеханической обработки. Рассматриваемые работы с точки зрения подхода к описанию связи микроструктуры и механических свойств можно разбить на несколько групп:

- работы, в которых связь описывается с качественных позиций;
- работы, в которых вводятся или используются некоторые

макрофеноменологические соотношения для связи микроструктуры и макроскопических характеристик;

- прочие работы, которые нельзя явным образом отнести к одной из первых двух групп работ.

Рассмотрим эти группы работ более подробно.

Работы, качественно описывающие связь микроструктуры и макросвойств металлов и сплавов

Работа [18] посвящена изучению взаимосвязи микроструктуры и макроскопических физико-механических характеристик в высоколегированных марганцевых сталях (TWIP-стали). Подробно описаны физические механизмы пластического деформирования в таких материалах, обуславливающие их высокую прочность и пластичность, а также широко освещено поведение микроструктуры рассматриваемых сталей при различных технологических процессах, в частности, позволяющих увеличить предел текучести или усталостную прочность. При этом, несмотря на глубокий физический анализ процессов, происходящих в таких сталях при термомеханической обработке, в работе не предлагается подходов, позволяющих определить некоторую количественную связь между параметрами микроструктуры и интересующими физико-механическими характеристиками.

В работе [19] рассматривается влияние процесса двухстадийного отжига на микроструктуру и механические свойства среднелегированных марганцевых сталей, предварительно обработанных методами холодного проката. Проведены экспериментальные исследования, в ходе которых исследовалась микроструктура и измерялись механические свойства. Большое внимание уделено исследованию распределения легирующей добавки в рассматриваемых образцах и влиянию возникающего неравномерного распределения марганца на формирование фазовой структуры в процессе термической обработки. Качественно описывается зависимость получаемых макроскопических свойств и микроструктуры.

Работа [20] посвящена разработке программы термической обработки низколегированной стали, позволяющей значительно улучшить ее прочность и пластичность. Проводится глубокий термодинамический анализ процессов высокотемпературного отжига стали заданного состава, позволяющий выбрать оптимальные параметры для получения желаемой микроструктуры. Целевая микроструктура определяется в рамках принятия гипотезы о том, что высокое содержание феррита и остаточного аустенита при мелкозернистой структуре стали позволяет получить наилучшие механические свойства в плане соотношения прочности и пластичности материала. Корректность выбранной гипотезы подтверждается экспериментально. Таким образом, связь микроструктуры и макроскопических характеристик в работе рассматривается экспертно с качественных позиций.

Работа [21] посвящена исследованию влияния различного состава примесей в легированных бором сплавах, как перспективных материалах с высоким отношением упругого модуля к плотности. Разработка таких материалов актуальна для применения при создании легких конструкций, обладающих высокими механическими свойствами, где традиционно применяются дорогие алюминиевые и титановые сплавы. Описана экспериментальная процедура отливки и термомеханической обработки образцов с различным составом легирующих примесей, проведены металлографические и механические испытания. Показано, что механические свойства данных материалов определяются размером и морфологией включенных боридов. Приведены качественные описания связи микроструктуры и макроскопических эксплуатационных свойств.

В работе [22] рассматривается микроструктура и макроскопические свойства сварных швов, полученных в результате сварки горячекатанных стальных листов. Сравниваются швы, полученные с использованием односточечной и двухточечной фокусировки лазерного луча. Рассматривается микроструктура и механические свойства на различном удалении от центра шва. Отмечается преимущество двухточечной сварки ввиду меньшего

охрупчивания зоны термического воздействия. Связь микроструктуры и макросвойств описывается с качественных позиций.

В работе [23] проводится исследование эволюции микроструктуры и, как следствие, механических свойств нержавеющей стали в процессе термического старения. Исследуемый материал применяется при строительстве АЭС, поэтому его надежная эксплуатация в условиях повышенных температур является актуальной задачей. В рамках работы проведена серия экспериментов, в ходе которых образцы подвергались выдержке в условиях повышенной температуры. Варьировалось время старения. Далее для каждого из образцов проводилось металлографическое исследование микроструктуры и экспериментальное измерение механических свойств. Авторами делается вывод об изначальном уменьшении предела текучести и предела прочности исследуемого материала при выдержке до 1000 часов и дальнейшем увеличении предела текучести, сопровождаемом уменьшением ударной вязкости, что говорит о большей хрупкости материала. Микроструктурные исследования позволяют качественно объяснить наблюдаемую эволюцию механических свойств постепенным уменьшением доли двойников в материале и стремлением структуры стать более равноосной. Падение же ударной вязкости объясняется увеличением доли примесей в границах зерен, что делает их источниками разрушения.

В работе [24] исследуется эволюция микроструктуры и ее влияние на механические свойства в процессе термообработки одной из марок стали. Проводится глубокий экспериментальный анализ микроструктуры на различных этапах термической обработки материала, заключающийся в определении доли фаз мартенсита и остаточного аустенита, размеров зерна для фаз; количества, морфологии и химического состава включений. Выполняется измерение механических характеристик: твердости по Виккерсу и ударной вязкости. Качественно отмечается, какое влияние оказывает наблюдаемая микроструктура на измеренные механические свойства. Также проводится анализ фотографий поверхности трещин материала, на основе которых

выдвигаются предположения о механизмах разрушения, характерных после исследованной термообработки.

Для указанных работ характерно экспертное описание физических механизмов, происходящих в процессе термомеханической обработки образцов. Физика таких процессов обуславливает как наблюдаемую на микрошлифах структуру металлов, так и измеряемые макроскопические свойства. Подход, основанный на таком глубоком физическом анализе происходящих процессов, представляется наиболее корректным с научной точки зрения, однако его существенным недостатком является то, что на практике почти невозможно построить количественное описание происходящих в реальном материале процессов как ввиду высокой их сложности, так и в связи с проблемами идентификации параметров моделей процессов, происходящих на низких масштабных уровнях.

Работы, описывающие связь микроструктуры и макрохарактеристик на основе феноменологического или эмпирического количественного подхода

Работа [25] посвящена конечноэлементному моделированию процесса штамповки деталей из листовых заготовок, учитывающему на основе макрофеноменологических моделей диффузионные и бездиффузионные фазовые переходы в сталях. Проводится идентификация и верификация параметров модели на основе оригинальных экспериментальных данных. Получаемое в процессе моделирования поле макроскопической механической величины (твердости по Роквеллу) рассчитывается на основе правила смеси в зависимости от объемных долей фаз и твердости каждой из фаз, определяемой исходя из известных данных о химическом составе и скорости охлаждения. Адекватность полученных результатов проверяется сравнением данных модели с результатами измерения в наборе контрольных точек. Авторами делается вывод о качественном соответствии результатов, а небольшое количественное несоответствие объясняется исключением из рассмотрения процессов образования оксидов.

В работе [26] предложен метод определения макроскопических параметров стали на основе данных мультифрактального анализа изображений микрошлифов. Для предсказания макросвойств предлагается построение регрессионных соотношений между измеряемыми мультифрактальными параметрами микроструктуры и макроскопическими эксплуатационными характеристиками. Показано, что предлагаемый подход позволяет получать значения требуемых макрохарактеристик с приемлемой для практических приложений точностью, однако стоит отметить, что при таком подходе требуется значительное число экспериментов. Кроме того, авторами уделяется мало внимания физической интерпретации разработанной методики.

В работе [27] предлагается подход к оценке твердости материала на определенном расстоянии от центра сварного шва, базирующийся на определении мультифрактальных характеристик микроструктуры. Проводится аппроксимация на основе набора экспериментальных точек для функции значений твердости и мультифрактальных характеристик. В дальнейшем предлагается на основе полученных полиномов проведение оценки макроскопических свойств. К одному из недостатков такого подхода следует отнести то, что не учитывается возможная неопределенность экспериментальных данных.

В работе [28] проводится моделирование технологического процесса термической обработки стали с мартенситно-ферритной структурой. Размеры зерна и объемная доля фаз в каждой расчетной точке моделируемого макрообразца рассчитывается на основе макрофеноменологических соотношений. Механические свойства рассчитываются на основе правила смеси, где каждая из фаз оказывает линейный вклад соответственно ее доле. Показано хорошее качественное соответствие результатов моделирования и экспериментальных данных.

Работа [29] посвящена определению механических характеристик стали, полученной методами порошковой металлургии. Рассматривается влияние параметров процесса спекания и содержания в смеси графита на механические

свойства материала. Проведены металлографические исследования структуры получаемых в различных условиях образцов и рассчитаны механические свойства, такие как предел текучести и предел прочности, на основе эмпирических соотношений, описывающих данные свойства в зависимости от доли пор материала.

В работе [30] представлено экспериментальное исследование соотношения макроскопических свойств полученного в процессе отлива материала с характеристиками его микроструктуры, а именно расстоянием между осями вторичных дендритов (*secondary dendrite arm spacing*). Применяемая в работе экспериментальная процедура заключается в подготовке набора образцов, полученных с различной скоростью охлаждения, дальнейшем измерении параметров микроструктуры и макросвойств. Итоговая зависимость определяется на основе построения регрессионных соотношений между механическими характеристиками и выбранным параметром микроструктуры.

В работе [31] описывается метод быстрого анализа микроструктуры (*Fast Microstructure Analysis – FMA*), основанный на анализе дифракционной картины при просвечивании образцов рентгеновскими лучами. FMA дает возможность автоматической обработки данных рентгеновского дифрактометра, что позволяет проводить оперативный объективный анализ микроструктуры. Такой способ анализа микроструктуры является выгодным технологическим решением, позволяющим проводить неразрушающий контроль качества практически на всех стадиях производства, где это оказывается необходимым. В основе метода лежит определение параметров деформированной решетки и остаточных напряжений и деформаций в материале, что позволяет оценивать такие параметры материала как предел текучести и предел прочности. Приведено применение предлагаемого метода в серии экспериментов на холоднотянутой проволоке из стали марок С45 и С80D. Авторы делают вывод о хорошей точности предлагаемого метода. Однако, при всех преимуществах метода следует отметить, что его применение не дает полных сведений о микроструктуре – данные о размерах и форме зерен

остаются недоступными.

В работе [32] рассматривается задача определения набора характеристик материала, которые возможно получить неразрушающими магнитными и акустическими методами и которые находятся в функциональной зависимости с механическими свойствами материала. Описываются на качественном уровне механизмы, обеспечивающие связь неразрушающим образом измеримых магнитных и акустических свойств материала с макроскопическими прочностными свойствами. Показано, что на основе измерения индукции насыщения стали могут быть предсказаны ее предел текучести и предел прочности. Также демонстрируется возможность определения типа деформационного воздействия, которому подвергался образец: была ли эта деформация пластическим течением или ползучестью. К достоинствам такого подхода следует отнести возможность неразрушающего контроля свойств материала. Однако, получаемые сведения не содержат напрямую сведения о микроструктуре материала. Кроме того, предлагаемые подходы исследования магнитных свойств применимы лишь, когда мы имеем дело с ферромагнетиками.

Один из подходов к прогнозированию макроскопических параметров материала, основанному на данных о микроструктуре, представлен в работе [33]. Оценка таких параметров, как предел текучести или предел прочности, основывается на вычислении геометрических характеристик структуры, с заранее определенной топологией. Под такой топологией в указанных работах понимается характерный рисунок расположения зерен в материале с регулярной структурой. При этом отнесение материала к определенному классу, имеющему одинаковую топологию, производится экспертом. В дальнейшем предполагается линейная связь между определяемыми макроскопическими параметрами и геометрическими показателями микроструктуры. Коэффициенты предложенной зависимости предполагают эмпирическое определение, или, в случае недоступности экспериментальных данных, могут определяться экспертом. Авторы [33] заявляют, что «

...приведенный алгоритм позволяет производить недорогой и быстрый анализ качества стали на предпроектной стадии ее исследования». Однако, следует отметить, что предлагаемый метод позволяет проводить оценку макросвойств только для сталей с однородной микроструктурой. И, несмотря на принципиальную возможность применения данного подхода к неоднородным структурам путем выделения в них однородных подобластей, такое разбиение представляет собой отдельную сложную задачу, включающую выделение областей на изображении и согласование влияния на макросвойства геометрических характеристик различных областей.

В первую очередь стоит отметить, что для работ, входящих в эту группу, характерна прежде всего практическая направленность, вынуждающая переходить к количественным описаниям. Другими словами, несмотря на широко распространенный подход к качественному описанию связи микроструктуры и макрохарактеристик, практические задачи требуют перехода к количественным оценкам пусть и ценой упрощения описаний. Также отметим, что ввиду широкого разнообразия применяемых в хозяйственной деятельности функциональных и конструкционных материалов возникает множество подходов к описанию взаимосвязи их микро- и макросвойств.

Прочие работы

Кроме приведенных выше двух групп работ отдельно стоит отметить еще несколько работ, в которых описаны подходы, которые нельзя явным образом отнести ни к одной из вышеуказанных групп.

В работе [34] описывается подход к получению макроскопических свойств, а именно кривой напряжения-деформация, для представительного объёма двухфазной стали DP980. Предлагаемый подход заключается в прямом конечноэлементном моделировании поликристаллического агрегата с применением аппарата физических теорий пластичности (crystal plasticity), в которые вносятся модификации для учета упругих взаимодействий дислокаций — модель супердислокаций (superdislocation model). Полученные с

использованием модели результаты сравниваются с экспериментальными данными и результатами более простых моделей: макрофеноменологической модели с использованием закона упрочнения Свифта и моделью физической теории пластичности, в которую не вносится модель супердислокаций. Показано, что модель супердислокаций намного лучше позволяет описывать наблюдаемые экспериментальные кривые, чем прочие модели. Однако, в работе рассматривается лишь один вид структуры двухфазной стали: зерна полагаются равными и имеющими простейшую морфологию, также параметры дислокационной структуры для зерен полагаются одинаковыми. При сравнении с экспериментом не показывается, что образцы имели структуру близкую к предполагаемой в расчетах.

В работе [35] представлена многоуровневая математическая модель процессов сверхпластичности кристаллических материалов. В модели задаются определяющие соотношения, описывающие поведение структуры материала в режиме сверхпластичности на глубоких масштабных уровнях зеренной и дислокационной структуры материала. Показано удовлетворительное соответствие результатов моделирования и экспериментальных данных в испытаниях на одноосное нагружение. Отмечается, что модель подходит к описанию поведения материала на макроуровне с позиций физических теорий пластичности.

В целом подход к описанию поведения материала на макроуровне с позиций физических теорий пластичности представляется перспективным, однако в настоящий момент существенным недостатком таких моделей является высокая сложность идентификации параметров, относящихся к уровню дислокационной и зеренной структур, и их вычислительную ресурсозатратность, не позволяющую широко применять такие модели на практике.

Работа [36] посвящена созданию нечеткой искусственной нейронной сети, позволяющей предсказывать механические свойства образцов, а именно: предел прочности, предел текучести, удлинение и остаточное сужение. При

этом входными данными являются параметры термомеханической обработки образцов: температура обработки, скорость деформации и деформация. Показано хорошее соответствие значений, получаемых с помощью обученной нейронной сети и экспериментальных данных. Авторами делается вывод о применимости разработанной методики для предсказания механических свойств в технических приложениях.

Работа [37] посвящена предсказанию механических свойств диффузионных соединений алюминиевых сплавов, с использованием искусственных нейронных сетей. В качестве входных параметров черного ящика рассматриваются параметры процесса диффузионного соединения: температура, давление и время выдержки. Для каждого из механических параметров соединения строится отдельная ИНС. Выбор для аппроксимации экспериментальных данных методов, основанных на обучении ИНС, авторами обосновывается тем, что данные методы позволяют добиться большей точности по сравнению со статистическими, например, регрессией. Описание эволюции микроструктуры в работе приведено качественным образом в рамках предположений о влиянии на нее различных параметров процесса диффузионного соединения. Показана высокая точность полученной модели при режимах обработки близких к тем, на которых проводилось обучение сети.

В работах [38,39] описывается способ получения графеновых материалов с использованием различных технологий: первый получается при взрывной эксфолиации оксида графита, а второй при взрывной эксфолиации графита, интеркалированного трифторидом хлора. С использованием методов элементного анализа, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, масс-спектрометрии, ИК- и КР-спектроскопии и сканирующей электронной микроскопии были изучены следующие характеристики получаемых материалов: удельные поверхности, размеры пор и электропроводность. Показаны различия в свойствах материалов в зависимости от технологии их получения. Указывается, что дальнейшее применение полученных материалов требует обсуждения возможных областей применимости.

Работа [40] посвящена разработке модели на основе искусственных нейронных сетей способной предсказывать механические свойства стали в зависимости от условий ее эксплуатации. Входными параметрами черного ящика являются данные о температуре и скорости деформации, а получаемыми механическими свойствами предел текучести, предел прочности, параметры степенного закона упрочнения и относительное удлинение образцов. Применение аппарата ИНС авторами обосновывается его эффективностью с точки зрения получаемой точности, а также тем, что в рамках задачи нет необходимости в построении детального физического описания процессов, происходящих в твердом теле. Показана хорошая точность предсказаний разработанной модели на обучающей и тестовой выборках.

Однако, применимость подхода, основанного на использовании нейронных сетей, для задач предсказания механических характеристик материалов вызывает обоснованные сомнения. В первую очередь стоит отметить, например, что предлагаемый авторами подход не рассматривает физический смысл величин, между которыми устанавливается связь. Также обучение сети требует значительного объема исходных данных, получение которого связано с высокими материальными и временными затратами, причем обученная сеть может лишь использоваться для предсказания механических свойств ограниченной группы материалов ввиду значительных различий в физических механизмах, обуславливающих механические свойства различных материалов. Кроме того, не показана устойчивость применяемых алгоритмов к возмущениям параметров процесса обработки материала и применимость обученной нейронной сети для предсказания макросвойств материала в случае его обработки в условиях, значительно отличающихся от тех, на которых проводилось обучение сети.

В работе [41] предлагается подход к восстановлению атомарной структуры материала по результатам атомного зондирования. Такие восстановленные данные могут быть в дальнейшем использованы при проведении симуляций методами молекулярной динамики или анализа

структуры методами функций плотности. Предлагаемый подход состоит в выявлении структур ближнего порядка в данных атомного зондирования, в процессе которого пропущена регистрация определенной доли атомов. В дальнейшем проводится восстановление пропущенных атомов с использованием метода Монте-Карло, которое сохраняет структуры ближнего порядка. Авторами приводится пример использования данных восстановленной структуры для определения макроскопических свойств материала, а именно: локальной энергии связи, локальной энергии Ферми и локальных модулей упругости. Для упругих модулей исследуемого материала показано соответствие с известными экспериментальными данными.

На основе последней работы можно утверждать, что даже самый глубокий анализ, проводимый на уровне межатомных расстояний, реальных структур не позволяет получать полные и исчерпывающие сведения о механических свойствах материалов.

Далее проведем сводный анализ рассмотренных в разборе работ и выделим, влияние каких характеристик микроструктуры обычно учитывается при оценке макроскопических эксплуатационных свойств. В модели оценивания прочностных свойств входными параметрами будут характеристики микроструктуры функционального металлического материала, выходными же – макроскопические прочностные свойства. Во многом выбор этих параметров будет определяться доступными для анализа экспериментальными данными. Однако выделим, какие параметры микроструктуры и прочностных свойств обычно включаются в рассмотрение при решении задачи определения связи между ними.

Выбор рассматриваемых макроскопических физико-механических характеристик и особенно характеристик микроструктуры в первую очередь, определяется типом исследуемого материала. Рассмотрим, какие материалы выбираются для исследования:

1. различные виды сталей:

- а) конструкционные углеродистые стали — работы [26,28,31–34];

- b) легированные марганцевые стали — работы [18–20];
- c) нержавеющие стали, эксплуатируемые в условиях повышенных температур, исследуются в работах [23,24,40];
- d) борсодержащие стали — работы [21,25];
- e) сварные швы стальных листов — работы [22,27];
- f) стали, полученные методами порошковой металлургии исследуются в работе [29];

2. алюминиевые сплавы:

- a) термомеханически обработанные сплавы — работы [36,41];
- b) литейные сплавы исследуются в работе [30];
- c) диффузионные соединения сплавов различного состава [37].

Для каждого из указанных классов материалов не только характерны различная структура, определяющая механические свойства, но также наборы характерных механизмов деформирования, связанные с вышеупомянутой структурой, и различные наборы свойств наиболее актуальные для условий их эксплуатации.

Далее рассмотрим, какие прочностные механические характеристики рассматриваются в работах, включенных в данный обзор. Как правило, в качестве макроскопических характеристик прочности материалов выбираются экспериментально измеримые величины или же параметры конститутивной модели материала, которые можно оценить на основе набора некоторых экспериментов. В обозреваемых работах представлены следующие основные прочностные характеристики:

1. *предел текучести (Yield Strength, Yield Stress)* — напряжение, по достижению которого материал начинает деформироваться пластически, то есть после разгрузки сохраняется некоторая остаточная деформация;
2. *предел прочности (Ultimate Tensile Strength)* — напряжение, при достижении которого наблюдается разрушение материала на макроскопическом уровне;
3. *твердость (Hardness)* — характеристика, измеряемая методом внедрения

в материал индентора заданной формы; по методу измерения различаются твердость по Виккерсу, по Роквеллу и другие;

4. *ударная вязкость* — характеристика, ассоциирующаяся с количеством энергии, поглощаемой материалом до разрушения;
5. *относительное удлинение (% elongation)* — отношение разности конечной, то есть достигнутой в момент разрушения, и начальной длины образца к его начальной длине в экспериментах на растяжение;
6. *предел усталости (fatigue limit)* — амплитуда напряжения, в пределах которой материал может выдержать заданное количество циклов нагружения.

В представленных в данном обзоре работах механические свойства определяются на основе различных наборов измеримых параметров, относящихся к материалу, в том числе, например, магнитных или акустических. Однако наиболее интересным для исследования представляются параметры материала, описывающие зеренно-фазовую структуру, поскольку такие параметры имеют ясную физическую природу, что позволяет добиться прозрачной интерпретации задачи описания связи макросвойств и микропараметров материала. К таким параметрам микроструктуры можно отнести следующие:

1. *средний размер зерна*, влияние которого на макросвойства отражено, например, в законе Холла-Петча;
2. *объемные доли фаз*, имеющих различные механические свойства, которые могут содержаться в соотношениях вроде правила смеси или учитываться более сложным образом;
3. *морфология отдельных зерен и фаз*, которая является достаточно сложным для количественного учета параметром и может, в свою очередь, характеризоваться различными наборами числовых значений;
4. *распределение и морфология неметаллических включений и пор*, которая также сложно поддается количественному учету;
5. *распределение ориентаций зерен*, отвечающее за наличие текстуры и

- анизотропию свойств материала;
6. *химический состав отдельных фаз*, который влияет на механические свойства отдельных фаз и, как следствие, макроскопические свойства всего представительного объема материала;
 7. *мультифрактальные характеристики структуры*, которые можно считать некоторыми интегральными характеристиками многомасштабных, геометрических и морфологических микроструктурных особенностей;
 8. *распределение остаточных напряжений в материале*.

Кроме того, отдельно стоит отметить структурные параметры, относящиеся к более глубокому уровню дислокационной субструктуры материала [35]. Идентификация таких параметров является, как правило чрезвычайно сложной задачей, однако они также в существенной степени влияют на макроскопические механические свойства [18,34].

Представим в виде таблицы данные о том, в каких работах отмечено влияние параметров микроструктуры на те или иные макроскопические свойства материала.

Таблица 1.1 – Упоминания о влиянии характеристик микроструктуры на макроскопические свойства, представленные в литературе

Название макросвойств материала	Список работ
<i>Средний размер зерна</i>	
Предел текучести	[18,20,23,33]
Предел прочности	[18,20,23]
Относительное удлинение	[18,20]
Предел усталости	[18]
<i>Объемные доли фаз</i>	
Предел текучести	[20,28]
Предел прочности	[20,28]

Твердость	[20,24,25]
Ударная вязкость	[18,20,22,24]
Относительное удлинение	[20]
<i>Морфология отдельных зерен и фаз</i>	
Предел текучести	[30,33]
Предел прочности	[30,33]
Относительное удлинение	[21,30]
<i>Распределение и морфология неметаллических включений и пор</i>	
Предел текучести	[21,29]
Предел прочности	[21,29]
Относительное удлинение	[21]
Твердость	[24]
Ударная вязкость	[23,24]
<i>Химический состав отдельных фаз</i>	
Предел текучести	[19]
Предел прочности	[19]
Относительное удлинение	[19]
Твердость	[24]
Ударная вязкость	[24]
<i>Мультифрактальные характеристики структуры</i>	
Предел текучести	[26]
Предел прочности	[26]
Относительное удлинение	[26]
Твердость	[26,27]
<i>Распределение остаточных напряжений в материале</i>	
Предел прочности	[31]

На основании проведенного анализа можно утверждать, что макроскопические свойства для сталей главным образом определяется фазовым составом, характерными размерами и морфологией зёрен. В первую очередь, отметим влияние на макроскопические свойства металлических материалов среднего размера зерна. В работах [18] и [23] отмечается, что данный параметр существенно влияет на твердость и пластичность сталей, так что материалы с существенно различными характерными размерами зёрен будут иметь различные макроскопические свойства. Также то, что твердость сталей с различными долями феррита, бейнита и мартенсита существенно отличаются, обусловлено различием свойств отдельных фаз. На уровне представительного объема итоговая твердость может быть оценена на основании правила смеси, как в работах [29] и [25], но при такой оценке не рассматриваются сложные микромасштабные взаимодействия, происходящие в процессе деформирования и также обуславливающие наблюдаемые макроскопические свойства. Для получения более точной оценки необходимо рассмотрение ещё и морфологии зёрен. В работе [33] выявлено, что на твердость сталей существенно влияют параметры топологически однородной структуры. Кроме того, в работе [21] указывается, что для сталей, содержащих в составе бор, характерно также влияние морфологии включений боридов.

1.4 Выводы по главе

По результатам 1-ой главы, посвященной литературному обзору проблемы оценивания свойств функциональных металлических материалов, можно сделать следующие выводы.

1. Приведен обзор литературных источников, на основе которых можно заключить, что понимается под термином «функциональные материалы», какой набор задач обычно стоит при их проектировании и производстве. Перечислены основные методы анализа микроструктуры материалов.

2. На основе литературного обзора выявлены основные отличия конструкционных металлических материалов от функциональных в подходах к оценке их макроскопических эксплуатационных свойств на основе анализа микроструктуры. Показана актуальность в разработке методов комплексного оценивания прочностных свойств материалов на основе анализа данных об их микроструктуре.

3. Приведен аналитический обзор работ, посвященных описанию связи микроструктуры и макроскопических свойств различных металлических материалов. Выявлено, какие методы обычно используются для описания такой связи. Проведена классификация работ по исследуемым материалам, учитываемым в работах характеристикам микроструктуры и оцениваемым макроскопическим свойствам. Отмечено, на значимость каких характеристик микроструктуры обычно указывают авторы.

На основе проведенного обзора можно заключить, что задача разработки моделей и алгоритмов, позволяющих проводить оценку макроскопических эксплуатационных свойств функциональных материалов на основе системного анализа характеристик зеренно-фазовой структуры является актуальной. Отметим, что довольно мало работ посвящено комплексной оценке требуемого набора эксплуатационных свойств исследуемого материала. Кроме того, в изученных работах практически не применяются подходы, основанные на теории нечетких множеств. Таким образом, можно сделать вывод о необходимости исследований в области комплексного оценивания макроскопических свойств материала в условиях неопределенности, в том числе с использованием аппарата теории нечетких множеств.

Глава 2. Постановка задачи комплексного оценивания свойств ФММ

2.1 Общая постановка задачи комплексного оценивания

Под комплексным оцениванием будем понимать процедуру получения общей оценки исследуемого объекта, характеризующей его состояние, т.е. некоторую совокупность (комплекс) основных характеристик данного объекта, определяющих его функциональную применимость в конкретных условиях эксплуатации.

Эти характеристики объекта обычно можно представить в виде набора частных критериев (показателей) и основная задача заключается в их агрегировании в некоторый обобщенный критерий, учитывающий разнородность и неодинаковую значимость частных показателей. Для этого необходима некоторая модель агрегирования, основанная на математических методах, в частности, на элементах теории искусственного интеллекта.

В начале рассмотрим математические методы комплексного оценивания, не относящиеся к методам искусственного интеллекта.

Обобщенный критерий оценивания формулируется, как правило, в виде некоторой свёртки. В настоящее время существуют подходы к построению как линейных, так и нелинейных сверток, в частности, с позиции теории нечетких множеств.

В качестве хорошо известных и разработанных моделей, с помощью которых возможна свёртка однородных или разнородных частных показателей, отметим квалиметрические модели [42], в которых результат комплексного оценивания представляет собой некоторую взвешенную оценку частных критериев. Обычно применяют один из следующих подходов:

1. Если объединяются однородные параметры Q_i , разброс между которыми невелик, рекомендуется использовать арифметическую (линейную) свёртку:

$$Q = \sum_{i=1}^n q_i \cdot Q_i, \quad (1)$$

где q_i – весовые коэффициенты, а $\sum_{i=1}^n q_i = 1$.

2. Неоднородные показатели, имеющие большой разброс, рекомендуется агрегировать с помощью геометрической свёртки:

$$Q = \prod_{i=1}^n Q_i^{q_i}. \quad (2)$$

3. Наконец, однородные показатели с большим разбросом, лучше агрегировать с помощью гармонической свёртки:

$$Q = \frac{1}{\sum \frac{q_i}{Q_i}}. \quad (3)$$

Если часть показателей оценивается количественно, а часть – качественно, то для комплексного оценивания применяются так называемые матричные свертки [43–45].

Отдельные показатели составляют исходный базис синтеза свёрток. Соответственно, именно они отвечают за адекватность обобщенного критерия. Если использовать топологическую интерпретацию процесса свёртки в виде композиции стандартных функций свёртки, заполняющих подобласти определения отдельно взятой матрицы свёртки, то достоверность конструируемых матриц свёртки существенно возрастает [43–46].

В частном случае задачи прогнозирования эксплуатационных свойств исследуемого материала можно утверждать, что она относится к группе задач классификации. Иными словами, необходимо определить близость исследуемого материала к определенному классу по набору эксплуатационных свойств, а именно относящихся к прочностным параметрам материала, которые, в свою очередь, однозначно определяются характеристиками его микроструктуры. При этом макроскопические эксплуатационные свойства исследуемого материала считаются неизвестными, а задан лишь набор

характеристик микроструктуры. Данная задача относится к задачам дискриминантного анализа, общую постановку которой можно найти, например, в работе [47]. В соответствии с ней необходимо найти такую решающую функцию $f: X \rightarrow R$, для которой выполняются следующие условия:

$$\begin{cases} f(x) > 0, \text{ для } \forall x \in C_1 \\ f(x) < 0, \text{ для } \forall x \in C_2 \end{cases} \quad (4)$$

где C_1, C_2 являются двумя заранее заданными классами. Заметим, что постановка (4) может быть обобщена на произвольное количество классов. Компоненты вектора x являются различными частными показателями, а уравнение $f(x) = 0$ образует гиперповерхность, разделяющее объекты в соответствующем пространстве показателей.

Известно, что вид решающей функции определяет различные виды задач, в которых происходит разделение объектов в пространстве их признаков, в которых простейшим случаем являются линейно-разделяемые пространства [48]. Когда объекты не могут быть линейно разделены, обычно применяются методы линеаризации. Исходная задача сводится к линейной или кусочно-линейной задаче классификации. Множества признаков называются линейно-разделяемыми, если решающая функция $f(x)$ является линейной:

$$f(x) = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_Nx_N. \quad (5)$$

Подробный обзор методов решения подобных задач можно найти в [49].

Однако, не все объекты в N -мерном пространстве могут быть разделены на классы на основании одного признака [11]. Например, на рис. 2.1 показано двумерное пространство признаков, которое является линейно-разделимым. Из рисунка видно, что все показатели разбиваются на два класса и можно без труда отнести исследуемый объект к тому или иному классу. При этом по каждому признаку в отдельности объекты не разделяются. Видно, что если разделить заданное на рисунке множество объектов только по признаку x_2 , то множества признаков объектов будут пересекаться.

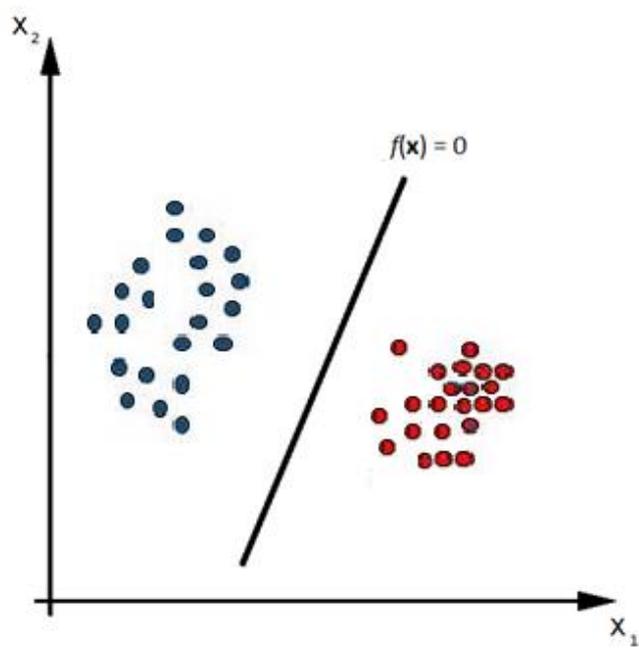


Рисунок 2.1 – Линейная разделимость в двумерном пространстве признаков

Поэтому можно сделать обобщенный вывод, что, увеличив размерность задачи, можно достичь линейной разделимости. Такие методы, называемые методами ядер [50], за счет увеличения размерности задачи позволяют разделить объекты в пространстве пересекающихся множеств признаков. На рис. 2.2а изображено множество признаков, которое линейно-неразделимо в двумерном пространстве. При этом переход к трехмерной задаче (рис. 2.2б) позволяет прийти к линейной разделимости объектов. Если в данном примере провести плоскость, разрезающую параболоид таким образом, что точки, относящиеся к разным классам, окажутся по ее разные стороны, то она и будет являть искомой разделяющей гиперповерхностью. Наиболее известными ядрами являются полиномиальные и сверточные ядра Мерсера [51], а также гауссовы ядра. Однако, в этом случае приходят к тому, что подбор ядра для конкретной задачи является весьма неочевидной и сложной задачей. То есть можно сказать, что сложность задачи переносится с подбора нелинейной разделяющей гиперповерхности к подбору нелинейного ядра. При этом данная задача не всегда является разрешимой.

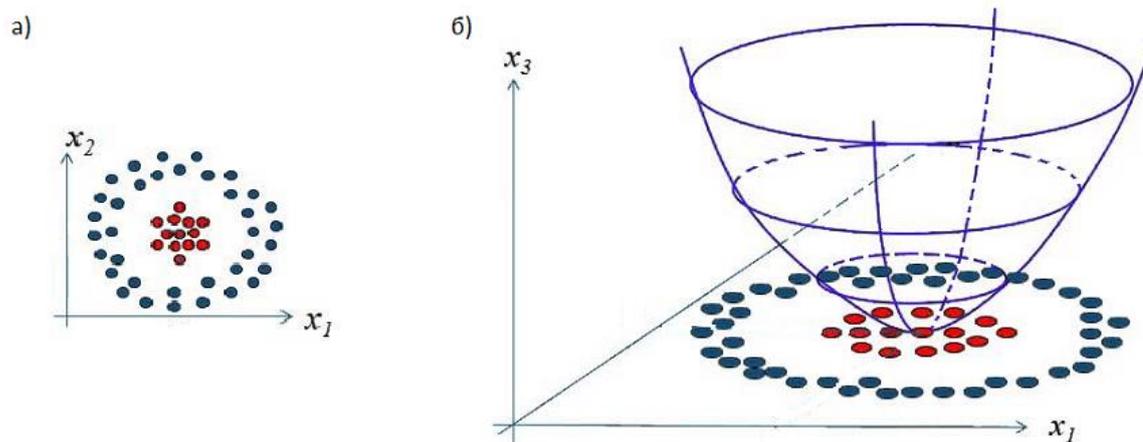


Рисунок 2.2 – Линейная разделимость: (а) отсутствует в двумерном пространстве признаков, (б) присутствует в трехмерном пространстве, образованном параболическим ядром

Необходимо отметить, что даже в случае с линейно-разделяемыми признаками возникает неоднозначность при определении коэффициентов в функции (5). Представим задачу (4) с решающей функцией (5) в виде:

$$z_i(a_0 + \mathbf{a}\mathbf{x}_i) > 0, \text{ для } \forall i = \overline{1..M}, \quad (6)$$

где z – индикаторная функция, которая равна

$$z = \begin{cases} 1, & \text{для } \forall \mathbf{x} \in C_1 \\ -1, & \text{для } \forall \mathbf{x} \in C_2 \end{cases}, \quad (7)$$

а индекс i означает, что пара (\mathbf{x}_i, z_i) берется из обучающей выборки размера M , при этом $\mathbf{a} = (a_1, a_2, \dots, a_N)$ и $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_N)^T$.

Задача (4) в таком случае является математически некорректной и требует применения подходов применяемых при решении таких задач. Для выбора наиболее подходящего решения из удовлетворяющих задаче (4), надо сформулировать дополнительный критерий оптимальности.

Одним из подходов в таком случае является применение метода опорных векторов (SVM, Support Vector Machine), предложенного в [52]. В качестве разделяющей гиперплоскости в предлагаемом методе выбирается такая гиперплоскость, расстояние от которой до ближайших представителей классов (\mathbf{x}_i, z_i) (так называемых опорных векторов) максимально.

В работах [53,54] метод опорных векторов используется в задаче классификации материалов по цифровым снимкам их поверхности. В работе [55] показано, что SVM показывает значительно лучший результат по сравнению с методом ближайших соседей. В работе [56] показано, что применение классификатора SVM улучшает точность решения задачи классификации материалов по снимкам поверхности по сравнению с байесовским подходом (RBF). Работа [57] посвящена численным экспериментам с различными детекторами поверхности, включая многомасштабные детекторы. В качестве классификатора использовался SVM.

В работе [58] классификатор SVM используется для решения задачи детектирования трещины при прокатке стали в оптическом диапазоне. Используется нелинейный вариант SVM с RBF ядром. Детектирование и классификация дефекта выполняется в режиме реального времени. В результате обучения на 1226 изображениях достоверность (ассигасу) составила 90,5%.

Отметим, что рассмотренные методы кластеризации хорошо применимы в случае наличия большой выборки данных, кроме того, признаки должны быть примерно равнозначными и разбиение на классы проводится в том же пространстве параметров, в котором проводятся измерения. В случае же задачи анализа микроструктур практически значимой является чаще всего классификация в пространстве эксплуатационных свойств исследуемых материалов, в то время как доступной является информация о характеристиках микроструктуры образцов. Также, как правило, получение большой выборки данных оказывается недоступным ввиду дороговизны. Поэтому в ряде работ предлагаются новые эффективные подходы к решению этой задачи, одним из которых выступает подход, основанный на элементах теории нечетких множеств.

Рассмотрим подробнее работу [11], где исследуется процесс получения функционального материала путем специальной термообработки. Считается, что количество имеющихся экспериментов равно l , при этом в каждом

эксперименте измеряется k параметров микроструктуры и r эксплуатационных свойств.

Далее в работе [11] вводятся *специальные* нечеткие множества для характеристик зёрненно-фазовой структуры и физико-механических свойств материала: A^i – *специальное* нечеткое множество, содержащее параметры зёрненно-фазовой структуры для i -го эксперимента; B^i – *специальное* нечеткое множество, содержащее эксплуатационные свойства для i -го эксперимента. В отличие от *обычных* нечетких множеств *специальные* нечеткие множества могут состоять из элементов различной физической природы с разными размерностями. При этом *важность* каждого i -го элемента *специального* нечеткого множества (в дальнейшем будем обозначать как μ_i для характеристик микроструктуры и ν_i – для макросвойств исследуемого материала) ставится в соответствие *функции принадлежности* элемента в обычном нечетком множестве. Переменными d и w предлагается обозначать количество элементов в специальных нечетких множествах для характеристик микроструктуры и макросвойств соответственно.

$$d = \sum_{i=1}^k p_i; \quad w = \sum_{i=1}^r t_i. \quad (8)$$

Для каждого i -го эксперимента ($i=1, \dots, l$) общий вид специальных нечетких множеств A^i и B^i может представляется в следующем виде [11]:

$$A^i = (\underbrace{a_1}_{p_1\text{-пар элементов}}, \underbrace{a_2}_{p_2\text{-пар элементов}}, \dots, \underbrace{a_k}_{p_k\text{-пар элементов}}), \quad (9)$$

$$B^i = (\underbrace{b_1}_{t_1\text{-пар элементов}}, \underbrace{b_2}_{t_2\text{-пар элементов}}, \dots, \underbrace{b_r}_{t_r\text{-пар элементов}}). \quad (10)$$

Далее в [11] оценку близости исследуемого материала к определенному классу, характеризующемуся заданным комплексом физико-механических характеристик C^* , предлагается определять *мерой близости* параметров зёрненно-фазовой структуры исследуемого материала к параметрам зёрненно-фазовой структуры всех *тестовых* образцов (число которых равно l), для

каждого из которых известно принадлежит ли этот образец к классу с комплексом физико-механических характеристик C^* или нет.

В [11] вводится мера близости между специальными нечеткими множествами A и B , которая обозначается δ_i и определяется следующим образом:

$$\delta_i = \sum_{i=1}^d \mu_i \cdot \left| \frac{(a_i - b_i)}{\max(a_i, b_i)} \right|, \quad (11)$$

где d , как указано выше, определяется количеством пар элементов μ_i/a_i и μ_i/b_i в нечетких множествах A и B , соответственно.

Также в [11] вводятся понятия усредненных мер близости принадлежности и не принадлежности классу: «если образцы с номерами от l до s , ($s \leq l$) принадлежат классу материалов с комплексом физико-механических характеристик C^* , а m образцов к этому классу не принадлежат, тогда *усредненная* мера близости исследуемого материала к классу, характеризующемуся заданным комплексом физико-механических характеристик, может быть определена:

$$\delta^+ = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s \delta_i. \quad (12)$$

При этом вводится *усредненная* мера близости исследуемого материала к классу, характеризующемуся комплексом физико-механических характеристик, не соответствующих C^* :

$$\delta^- = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \delta_i. \quad (13)$$

Считается, что если $\delta^+ < \delta^-$, то исследуемый материал принадлежит к классу с комплексом физико-механических характеристик C^* , в противном случае – не принадлежит.»

В работе [11] указано ограничение, что описанная выше методика определения меры близости исследуемого материала к заданному классу может применяться, когда отклонения параметров микроструктуры исследуемого материала от имеющихся экспериментальных образцов не превышают

величины максимальных отклонений в имеющихся экспериментальных данных.

В этой же работе [11] предложена еще одна процедура определения принадлежности исследуемого материала к классу с заданным комплексом физико-механических характеристик C^* . Предлагается определять меры близости δ_j всех *специальных* нечетких множеств A^j к *специальному* нечеткому множеству B , $j=1,\dots,l$, а затем – минимальное значение из них: $\delta^* = \min(\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_l)$. В дальнейшем, если $\delta^* = \delta_j$, а *специальное* нечеткое множество A^j принадлежит к классу с заданным комплексом физико-механических характеристик C^* , то исследуемый материал считается принадлежащим к этому классу.

В [11] отдельно рассматривается вопрос задания классов материалов в пространстве признаков макроскопических свойств материалов. Предлагается определять в качестве C^* некоторое детерминированное значение какой-либо прочностной характеристики или определить C^* в виде линейной свертки набора физико-механических характеристик с учетом их важности, *специального* нечеткого множества и т.п. В качестве примера приводится следующий метод задания C^* :

$$C^* = (c_i \in [c_i^*(v_i), c_i^{**}(v_i)], i = 1, \dots, r), \quad (14)$$

где $c_i^*(v_i)$ и $c_i^{**}(v_i)$ – значения границ допустимого интервала для i -й физико-механической характеристики исследуемого материала, которые заданы с учетом ее значимости в комплексной оценке эксплуатационных свойств.

В дальнейшем подход, описанный в работе [11], получил развитие в [59,60]. В указанных работах формализуется понятие меры близости специальных нечетких множеств, показывается, что указанные меры являются метриками в пространствах специальных нечетких множеств характеристик микроструктуры и макроскопических эксплуатационных свойств. Предлагаются подходы и алгоритмы, позволяющие существенно повысить точность классификации в пространстве макросвойств материала за счет более

гибкого подхода к определению вида функций принадлежности специальных нечетких множеств и расчету коэффициентов функций принадлежности с использованием методов оптимизации. Предлагаемые модификации исходного подхода позволяют более точно проводить классификацию на основе эталонного образца или набора эталонных образцов.

Однако, подход, описанный в [11,59,60] не в полной мере отвечает требованиям, предъявляемым к оценке макроскопических свойств функциональных материалов по микроструктуре при их проектировании. Как правило, целевая микроструктура функционального материала является неизвестной и требует определения именно в процессе проектирования. В таком случае невозможно определить специальные нечеткие множества для микроструктуры эталонного образца или набора эталонных образцов, на основе которых будет проводиться классификация. Таким образом, необходима модель, позволяющая проводить комплексную оценку макроскопических эксплуатационных свойств материала по данным о его микроструктуре.

Исследуемый функциональный материал по определению должен обладать заданным комплексом макроскопических эксплуатационных свойств, которые в свою очередь зависят от микроструктуры этого материала. Как макроскопические свойства, так и микроструктура материала характеризуются некоторыми числовыми значениями, которые можно получить экспериментально. Задача оценивания заключается в том, чтобы по заданному набору характеристик микроструктуры однозначно определить требуемые макроскопические свойства.

В заключение данного параграфа сформулируем следующую содержательную постановку задачи комплексного оценивания прочностных свойств функциональных металлических материалов.

Пусть задан некоторый набор образцов материала. Для каждого из образцов получены значения микро- и макросвойств материала. В качестве характеристик микроструктуры могут рассматриваться полученные на основе анализа фотографий микрошлифов материала данные о среднем размере зерна,

коэффициенте вариации размера зерна, объемных долях фаз, анизотропии и ориентации зерен или же некоторые фрактальные характеристики. Рассматриваемыми макросвойствами могут быть, например, такие прочностные характеристики материала, как предел текучести, твердость или усталостная прочность.

Требуется, исходя из анализа параметров микроструктуры материала, оценить его макроскопические характеристики. При этом набор макроскопических характеристик, оценка которых производится, состоит из тех же характеристик, которые измерялись экспериментально. Например, если в экспериментах для каждого образца измерялись значения ударной вязкости и твердости, то оценка будет проводиться или для обоих этих параметров, или для одного из них.

Перейдем к математическому описанию сформулированной задачи.

2.2 Математическая постановка задачи комплексного оценивания

Рассмотрим задачу получения металлического функционального материала с заданным набором физико-механических (прочностных) свойств. В наиболее общем виде задача сформулирована, например, в [6]. Требуется найти такие технологии изготовления материала и/или специальные технологии его дальнейшей физико-механической обработки, в результате применения которых формируется заданный комплекс его эксплуатационных характеристик (прочность, пластичность, термостойкость и т.п.), который обозначим множеством Z . Будем считать, что возможные технологические процессы характеризуются множеством параметров X , в число которых входят начальные характеристики исходной заготовки, и технологические режимы ее обработки. Отметим, что элементами этих множеств могут быть объекты различной математической природы: скаляры, векторы или тензоры. Например, температура нагрева и время выдержки при термообработке – скалярные величины, скорость перемещения инструмента – 3-х мерный вектор, остаточные напряжения и деформации – тензоры и т.п. Размерность этих

множеств зависит от числа технологических параметров и количества заданных эксплуатационных характеристик функционального металла или сплава.

Считается, что существует некоторый оператор F , который устанавливает однозначное отношение между элементами множеств:

$$z = F(x), \quad x \in X, z \in Z, \quad (15)$$

где x и z – конкретные значения параметров процесса получения функционального материала и соответствующий им набор значений эксплуатационных свойств.

Оператор F в зависимости от вида множеств X и Z может представлять собой некоторый функционал, вектор-функцию или дифференциальный оператор.

При создании функционального материала необходимо найти такие значения x^* , которые бы обеспечили получение наперед заданных значений характеристик z^* . Другими словами, необходимо решить следующую оптимизационную задачу:

$$\begin{aligned} &\text{найти такие параметры } x^* \in X, \\ &\text{при которых} \quad \|z - z^*\| \Rightarrow \min \end{aligned} \quad (16)$$

и выполняются ограничения в виде равенства (15).

Следует отметить, что задача (16) в зависимости от вида минимизируемого функционала и вида оператора F , может быть сведена либо к задаче оптимального управления [61], либо к задаче параметрической оптимизации [62].

Основной проблемой решения задачи (16) является построение оператора F . При этом следует отметить, что обычно такие операторы строятся для некоторых частных случаев. В частности, известен вид оператора, связывающего предел текучести материала с параметрами его термомеханической обработки [63]. Однако в общем случае для нескольких характеристик, особенно если они рассматриваются совместно, эта задача является достаточно сложной и, в настоящее время, не существует не только ее

аналитического решения, но и общих подходов к нему. Обычно каждое физико-механическое свойство материала на макроуровне описывается отдельной моделью процесса термомеханической обработки, что усложняет решение общей задачи (16).

Предлагается новый подход к решению этой задачи, заключающийся в декомпозиции исходной задачи на несколько задач, связанных между собой.

Первоначально вводится гипотеза о том, что комплекс требуемых физико-механических характеристик материала однозначно определяется его микроструктурой. В случае рассмотрения металлов и сплавов под микроструктурой будем понимать зёрненно-фазовую структуру материала. Обозначим Y множество параметров, описывающих микроструктуру материала. Тогда соотношение (15) примет вид:

$$z = F(y(x)), \quad x \in X, y \in Y, z \in Z, \quad (17)$$

где y – конкретные значения параметров зёрненно-фазовой структуры материала.

Теперь задачу формирования заданных свойств функционального материала можно разбить на два этапа, показанных на рисунке 2.3.

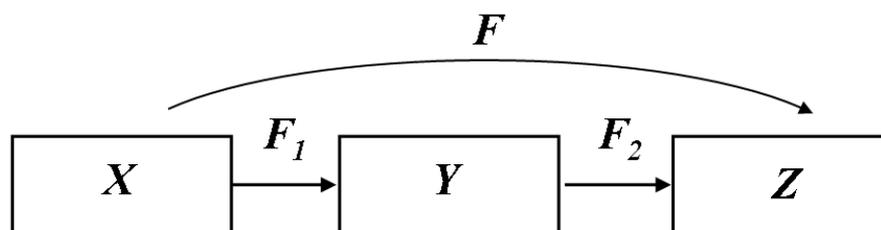


Рисунок 2.3 – Декомпозиция задачи формирования заданных свойств функционального материала

На рисунке 2.3 под F_1 понимается оператор, устанавливающий соотношения между значениями параметров, характеризующих процессы получения функционального материала, и значениями параметров формируемой зёрненно-фазовой структуры и микроповрежденности, а под F_2 – оператор, связывающий параметры микроструктуры со значениями получаемого набора эксплуатационных свойств.

Теперь соотношение (17) можно преобразовать к виду:

$$z = F(y(x)) = F_2(F_1(x)) = F_2(y), \quad (18)$$

где оператор F представляет собой суперпозицию операторов F_1 и F_2 , т.е. $F = F_2 \circ F_1$.

Таким образом, задача формирования свойств функционального материала сводится к совокупности двух задач: получения зёрненно-фазовой структуры материала и комплексная оценка его эксплуатационных свойств в зависимости от параметров микроструктуры материала.

В нашем исследовании мы не будем рассматривать первую задачу, т.е. оставим в стороне вид оператора F_1 . Нас интересует только идентификация параметров полученной зёрненно-фазовой структуры. Считается, что известны технологии получения требуемого функционального материала и, как следствие их применения, его зёрненно-фазовая структура, которая представлена цифровыми изображениями микрошлифов этого материала при различных технологических режимах его изготовления. При этом накоплено значительное количество экспериментальных данных, позволяющее установить отношения между параметрами микроструктуры материала и технологическими режимами его получения.

Особый интерес представляет собой вторая задача, в которой необходимо по известному набору параметров зёрненно-фазовой (микро)структуры материала провести комплексную оценку его физико-механических (макро)свойств. При рассматриваемом подходе речь идет, по существу, о решении задачи: $z = F_2(y)$.

Отметим, что под оператором F_2 можно понимать оператор F_{21} или F_{22} , рассматривая отдельно задачу оценки прочностных свойств ФМ по зёрненно-фазовой структуре или по микроповрежденности.

Эта задача решается в два этапа. Первый этап соответствует идентификации всех возможных параметров y полученной зёрненно-фазовой структуры, а второй этап – определению количества *значимых* компонентов

вектора y , характеризующего эту микроструктуру с точки зрения заданного комплекса макрохарактеристик материала. Опишем логическую связь этих этапов.

Начнем со второго этапа. Следуя выдвинутой гипотезе об однозначном соответствии макросвойств материала его микроструктуре, необходимо определить, какое минимальное количество и каких параметров микроструктуры однозначно определяет требуемый набор макрохарактеристик функционального материала. Другими словами, требуется найти такой $\tilde{y} \in Y$ при котором:

$$\exists F_2, \text{ что } \|\bar{z} - F_2(\tilde{y})\| < \varepsilon, \quad (19)$$

где \bar{z} – имеющиеся экспериментальные данные по требуемому набору макрохарактеристик, ε – наперед заданная точность.

Для обеспечения полноты \tilde{y} необходимо определить максимально возможное количество параметров микроструктуры. По существу, речь идет об идентификации этих параметров по имеющемуся набору микрошлифов исследуемого материала.

При решении задач количественного анализа микроструктуры (для металлов и сплавов - количественной металлографии) активно используются разнообразные параметры зёрненной структуры, такие как: площадь зерен, периметр границ, длины малой и большой оси зерна (среднее значение и разброс), приближенность к кругу, удлинённость, компактность и т.д. Автоматизация сегментации изображений, например, в [64] позволяет получать эти параметры прямым способом, т.е. без применения известных методов ручной обработки [14,15,65–70] или, например, метода секущих. Кроме того, термомеханические свойства материала существенно зависят не только от параметров зёрненной структуры, но и от фазового состава, а также от наличия дислокационных субструктур внутри зерна. При интенсивной пластической деформации может образовываться устойчивая фрагментированная субструктура, стабилизируемая частицами вторичных карбидов [13].

Необходимо также учитывать влияние границ и тройных стыков [71]. Отметим, что автоматизация выявления этих особенностей на снимках позволит существенно уточнить прогноз свойств материалов.

Как следует из вышесказанного, в последнее время в количественной металлографии большое распространение получили интеллектуальные технологии, основанные на применении методов компьютерного распознавания образов и осуществляющие поддержку принятия решений при анализе экспертом сложных микроструктур [72]. В данной работе для решения задач классификации фаз и сегментации зёрен использовалась автоматизированная система [73], позволяющая по цифровой фотографии микрошлифа вычислять параметры зёренно-фазовой структуры с заданной точностью. При этом применение автоматизированных методов решения задачи идентификации параметров микроструктуры материала позволяет значительно увеличить количество этих параметров, возможно оказывающих существенное влияние на комплекс исследуемых макрохарактеристик материала.

Определив параметры микроструктуры y , можно перейти к задаче комплексного оценивания макросвойств функционального материала, т.е. к определению оператора F_2 общей задачи (18).

Исходя из содержательной постановки задачи, будем полагать, что имеется исходный набор экспериментов, в котором для каждого образца некоторым образом измерены характеристики микроструктуры и макроскопические свойства. Опишем на языке теории нечетких множеств искомый вид оператора F_2 .

Пусть количество выбранных параметров микроструктуры равно k , количество параметров, характеризующих требуемый комплекс эксплуатационных свойств функционального материала, равно r .

Будем считать, что количество имеющихся экспериментов (микрошлифов и соответствующих каждому из них замеров эксплуатационных характеристик) равно l . Тогда искомая связь может быть описана в виде

нечетких отношений S^i между параметрами микроструктуры и эксплуатационными характеристиками материала [74]:

$$S^i = A^i \times B^i, \quad i = \overline{1, l} \quad (20)$$

где A^i – нечеткое множество, содержащее характеристики структуры в i -м эксперименте; B^i – нечеткое множество, содержащее эксплуатационные характеристики материала; \times – знак декартова произведения нечетких множеств. Таким образом, для каждого эксперимента будет определено отношение связи (20) между нечеткими множествами.

Связь между некоторым произвольным (*тестируемым*) множеством $A^{мест}$, описывающим микроструктуру в рассматриваемом эксперименте, и индуцируемым им множеством $B^{мест}$, описывающим эксплуатационные характеристики, можно определить как [75]:

$$S = \bigcup_{i=1}^l S^i. \quad (21)$$

При этом индуцируемое множество можно определить следующим образом:

$$B^{мест} = A^{мест} \circ S, \quad (22)$$

где « \circ » – знак максиминного произведения [75].

Следует отметить, что $B^{мест}$ будет получено в виде нечеткого множества. Если нас интересует $B^{мест}$ в виде обычного множества (т.е. любая эксплуатационная характеристика должна быть представлена как однозначно определенная скалярная величина), необходимо для каждой характеристики решить задачу *определения четкого представителя нечеткого числа*. Можно предложить несколько способов решения этой задачи, рассмотренных, например, в [75,76].

Если график функции принадлежности описывается непрерывной не унимодальной функцией, то, на наш взгляд, наиболее объективный выбор этого

представителя – это *аналог медианы* для случайных величин, который можно определить следующим образом:

$$\int_{a_i^{\min}}^{a_i^*} \mu_{A_i}(u) du = \int_{a_i^*}^{a_i^{\max}} \mu_{A_i}(u) du, \quad (23)$$

где A_i – нечеткое множество, соответствующее i -той эксплуатационной характеристике; a_i^* – четкий представитель нечеткого множества A_i ; a_i^{\min} – нижняя граница носителя нечеткого множества A_i ; a_i^{\max} – верхняя граница носителя нечеткого множества A_i ; $\mu_{A_i}(u)$ – функция принадлежности нечеткого множества A_i . Другими словами, в качестве четкого представителя нечеткого множества выбирается то значение его носителя, которое делит площадь под графиком функции принадлежности на две приблизительно равные части.

Если носитель нечеткого множества представляет собой дискретную величину, то определение четкого представителя нечеткого числа может быть осуществлено аналогично определению *математического ожидания* для дискретных случайных величин:

$$a_i^* = \sum_{i=1}^r \left(\frac{\mu_{A_i}(a_i)}{\sum_{j=1}^r \mu_{A_i}(a_j)} \right) \cdot a_i, \quad (24)$$

где a_i – i -й элемент носителя нечеткого множества A_i ; $\mu_{A_i}(a_i)$ – функция принадлежности i -ого элемента этого нечеткого множества A_i ; r – количество пар в нечетком множестве A_i .

Если график функции принадлежности нечеткого множества имеет ярко выраженный унимодальный характер, то в качестве четкого представителя нечеткого множества можно выбрать то значение носителя, которое соответствует максимальному значению функции принадлежности:

$$a_i^* = (a_i^* \in S(A_i) \mid \mu_{A_i}(a_i^*) \geq \mu_{A_i}(a_i), a_i \in S(A_i)), \quad (25)$$

где $S(A_i)$ – носитель нечеткого множества A_i .

Полученные значения можно принять за искомую оценку.

Рассмотрим подробнее вопрос построения нечетких множеств A^i – содержащего характеристики структуры в i -м эксперименте; B^i – описывающего макросвойства материала в нем. Алгоритм построения этих нечетких множеств будем строить по одинаковому принципу.

Для каждой из характеристик структуры или макросвойства определим значения элементов носителей и функции принадлежности для каждого носителя. Далее сгруппируем получившиеся нечеткие множества в множество, описывающее микроструктуру в i -м эксперименте, и множество, описывающее макросвойства.

Значения элементов носителей для каждой характеристики микроструктуры или макроскопического эксплуатационного свойства материала будем выбирать следующим образом:

1. Определим минимальное и максимальное значение характеристики на всем наборе экспериментов;
2. Выберем отрезок, полностью содержащий в себе экспериментальные значения характеристики;
3. Выберем на отрезке по определенному правилу множество точек: в простейшем случае отрезок может быть разбит на равные интервалы.

По приведенному алгоритму множества элементов носителей могут быть выбраны для каждой характеристики. Далее необходимо вычислить для них значения функции принадлежности.

Определение вида функции принадлежности представляет собой отдельную задачу. В общем случае вид функции принадлежности может быть выбран отдельно для каждой из характеристик, исходя из экспертных оценок, при этом наиболее адекватным будет полагать, что функция принадлежности принимает максимальное значение, если значение элемента носителя совпадает с экспериментальным значением характеристики.

Таким образом, в результате обработки экспериментальных данных будут получены нечеткие множества для характеристик микроструктуры и макросвойств для каждого эксперимента, на основе которого будет строиться аппроксимация оператора F_2 , а также нечеткие множества характеристик микроструктуры, на основе которых будут проводиться оценки макроскопических свойств.

2.3. Методика определения минимально допустимого количества экспериментов и значимых характеристик зеренно-фазовой структуры материала

Отметим, что практическое применение описанной модели комплексного оценивания макроскопических свойств материала требует оценки минимально допустимого количества исходных экспериментов, а также установления значимых характеристик микроструктуры, при которых можно оценивать макросвойства с заданной точностью. Необходимость решения такой задачи обусловлена необходимостью минимизации затрат на проведение экспериментов при производстве функциональных материалов. Также определение значимых характеристик позволяет сделать вывод о том, изменение каких характеристик микроструктуры в первую очередь позволит добиться получения требуемых эксплуатационных свойств материалов.

Для решения задачи оценки минимально допустимого количества экспериментов и определения значимых характеристик микроструктуры рассмотрим получаемые оценки некоторого макросвойства H . Опишем используемый алгоритм [77].

Пусть общее число доступных экспериментов равно n . Для расчета погрешности будем сравнивать теоретическое значение оценки конкретного макросвойства исследуемого материала с его экспериментально измеренным значением.

Таким образом, погрешность можно выразить формулой

$$\delta_H = \left| \frac{H^{теор} - H^{эксп}}{H^{эксп}} \right|. \quad (26)$$

Для определения минимального допустимого количества требуемых экспериментов, позволяющих получить требуемую погрешность, теоретическое значение рассчитывается с использованием модели комплексной оценки, когда исходными являются все возможные комбинации экспериментальных образцов. Возможность использования полного перебора для решения такой задачи минимизации обусловлена обычно малым количеством доступных экспериментальных данных.

Количество возможных сочетаний при использовании в качестве исходных образцов i экспериментов можно выразить обычным соотношением, известным из комбинаторики [78]:

$$C_n^i = \frac{n!}{i!(n-i)!}. \quad (27)$$

Обозначив максимальную допустимую погрешность как δ_H^* , минимальное количество экспериментов i^* , обеспечивающих заданную точность, будет определяться соотношением

$$\delta_n^{i^*} \leq \delta_H^*, \quad (28)$$

где δ_n^i представляет собой среднюю теоретическую погрешность по всем возможным комбинациям исходных экспериментов.

Для определения значимых характеристик можно воспользоваться следующим подходом, аналогичным подходу к определению минимального числа характеристик: определим погрешность оценки макросвойства H на основании каждой из характеристик микроструктуры, а затем выберем те характеристики, при использовании которых погрешность оценки не превышает заданную. Однако предложенный подход не учитывает комплексное влияние характеристик микроструктуры на макроскопическое свойства материала.

Для выбора значимых характеристик будем использовать погрешность оценки, полученную, когда выбранная характеристика не используется при оценке макроскопических свойств. Обозначим эту погрешность как

$$\delta_H^j = \left| \frac{H^{\text{теор},j} - H^{\text{эксп}}}{H^{\text{эксп}}} \right|, \quad (29)$$

где j – номер исключенной из рассмотрения характеристики микроструктуры.

Таким образом, значимыми характеристиками с номерами j^{**} будем считать те, которые удовлетворяют соотношению

$$\delta_{HV}^{j^{**}} \geq \delta_{HV}^{**}, \quad (30)$$

где δ_{HV}^{**} – заданная погрешность. Другими словами, если при исключении характеристики из рассмотрения погрешность остается меньше заданной величины, то влиянием такой характеристики можно пренебречь.

Пример применения данной методики в практике проектирования арматурной стали приведен в 4-ой главе диссертации.

2.4. Алгоритм исследования устойчивости модели оценивания в стохастическом смысле

Рассмотрим устойчивость получаемого решения. Устойчивость будем рассматривать в стохастическом смысле, т.е. стохастической устойчивости оценок макрохарактеристик ФММ по отношению к случайному возмущению его параметров микроструктуры. Критерий устойчивости будем строить на основании определения стохастической или P -устойчивости, которое можно сформулировать следующим образом:

Для любой вероятности P^ существует такая вероятность $P^{**}(P^*)$, что для любого $\varepsilon > 0$ может быть найдено $\delta(\varepsilon) > 0$, такое что при выполнении условия*

$$P\left(\|x_0 - x_0^*\|_{N_1} < \delta\right) \geq P^{**} \quad (31)$$

выполняется условие

$$P\left(\|x - x^*\|_{N_2} < \varepsilon\right) \geq P^* . \quad (32)$$

Тогда полученное значение оценки макроскопической эксплуатационной характеристики может считаться P -устойчивым, иначе оно полагается P -неустойчивым.

Нормы N_1 и N_2 являются детерминированными, то есть вычисляются для отдельных реализаций случайных величин в пространстве событий.

Понятие стохастической устойчивости является обобщением классического понятия устойчивости для детерминированных систем [79], но в отличие от них может быть применено в случае, когда анализируется устойчивость недетерминированных систем. В нашем случае использование именно стохастической устойчивости обусловлено тем, что для входных параметров модели комплексного оценивания, а именно характеристик микроструктуры, свойственна высокая неопределенность.

На основе приведенного определения примем следующий алгоритм оценки стохастической устойчивости полученных макроскопических характеристик материала.

1. *Задаются значения вероятности P^* .* Если принять значение вероятности P^* равным 0,95, это будет означать, что при возмущении исходных параметров микроструктуры доля возмущенных макрохарактеристик будет составлять не более 0,05. Значение параметра δ будем принимать таким образом, что оно является максимально возможным с принятой вероятностью отклонения P^* .
2. *Задается значение относительного отклонения ε .* Значение параметра ε определяет, какое относительное отклонение в значении макрохарактеристики мы можем считать *малым*. Значение параметра ε может быть принято равным 0,05. В таком случае будем считать возмущенными оценки макроскопических свойств, относительно превосходящие принятое значение.

3. *Задается величина возможных отклонений параметров микроструктуры δ и рассматриваются все возможные случайные возмущения параметров микроструктуры на величину принятой δ .*
4. *Оценивается стохастическая устойчивость оценки каждой макрохарактеристики исследуемого материала. Пусть общее количество таких возмущенных наборов параметров микроструктуры равно N , при этом в M случаях значения макрохарактеристик отклоняются от невозмущенных на относительную величину меньшую ε . Тогда оценку характеристики будем считать P -устойчивой, если вероятность ее малого отклонения не меньше заданной P^* :*

$$P = \frac{M}{N} \geq P^* . \quad (33)$$

5. *Исследуется стохастическая устойчивость комплексной оценки. В случае оценки устойчивости нескольких макроскопических свойств в предположении о том, что их устойчивости стохастически независимы, можно сформулировать критерий устойчивости для комплекса из n характеристик:*

$$P = P_1 \cdot P_2 \cdot \dots \cdot P_n \geq P^* . \quad (34)$$

Примеры использования данного алгоритма при исследовании стохастической устойчивости разработанной модели комплексного оценивания будут приведены в 4-ой главе диссертации.

2.3 Обоснование метода решения

Решение задачи комплексного оценивания прочностных свойств с использованием методов теории нечетких множеств дает возможность использовать для проведения оценки значительно меньшее количество исходных экспериментов, чем методы на основе искусственных нейронных сетей [80,81]. Также предлагаемый алгоритм позволяет достаточно универсально его использовать для широких наборов характеристик микро- и

макросвойств материала, полученных в результате эксперимента. Кроме того, применение выбранного метода решения связано с использованием значительно меньших вычислительных ресурсов по сравнению с физическими моделями моделирования технологических процессов получения требуемой микроструктуры и прочностных свойств материала, а также нейросетевыми подходами, например в [81]. Таким образом, выбранный метод построения модели комплексной оценки прочностных свойств позволяет получить на основе относительно небольшого числа экспериментов инструмент прогнозирования эксплуатационных характеристик материала на основе данных о его микроструктуре.

Однако важной особенностью предлагаемого метода является высокая зависимость адекватности получаемых результатов от качества априорных предположений о виде используемых функций принадлежности, реализации операций над нечеткими множествами, выбранного способа определения четкого представителя нечеткого числа. Выбор обозначенных параметров метода, основанного на теории нечетких множеств, следует проводить для каждого конкретного случая на основании дополнительных исследований.

Ввиду обозначенных ограничений описанного подхода, рассмотрим границы его применимости.

Существенной особенностью проектирования и производства функциональных материалов является, как утверждалось выше, малое количество доступных экспериментальных данных, а также дороговизна планирования и проведения экспериментов. В таких условиях, как правило, применение статистических или нейросетевых подходов приводит к существенному повышению стоимости проектирования материала, которое ввиду особенностей применения функциональных материалов (проектируемых по определению для конкретной конструкции) значительно влияет на итоговую стоимость конструкций, где такие материалы применяются.

Предлагаемый подход с использованием элементов теории нечетких множеств, в свою очередь, предлагает возможность привлечения экспертных

знаний при разработке систем количественной оценки макроскопических свойств, что снижает необходимое число экспериментов. Таким образом, разработанный подход к оценке связи макроскопических эксплуатационных характеристик с параметрами микроструктуры материала может использоваться в качестве инструмента на стадии проектирования материала, позволяя получать приблизительные оценки свойств по данным микроструктуры и упрощая подбор необходимых параметров микроструктуры, позволяющих получить требуемые свойства.

Также предлагаются методики и алгоритмы к определению минимально допустимого числа экспериментов и оценки стохастической устойчивости получаемых результатов. Использование описанных подходов позволит дополнительно уменьшить в будущем число экспериментов, контролируя при этом адекватность получаемых результатов комплексных оценок эксплуатационных свойств материалов.

2.4 Выводы по главе

По результатам 2-ой главы, посвященной содержательной, концептуальной и математической постановкам задачи комплексного оценивания макроскопических свойств материалов на основе анализа характеристик их микроструктуры, методике определения минимального допустимого числа необходимых для оценки экспериментов и значимых характеристик, а также алгоритму исследования устойчивости полученных оценок, можно сделать следующие выводы.

1. Проведена содержательная постановка задачи комплексного оценивания. На основе сравнения с методами дискриминантного анализа микроструктур материалов показано, что в случае с оценкой эксплуатационных свойств функциональных материалов методы классификации с использованием эталонных образцов неприменимы.

2. Приведена концептуальная постановка задачи оценивания макроскопических свойств материала по микроструктуре в контексте более

общей задачи получения функционального материала, записанной в операторном виде. Предложена модель комплексного оценивания на основе применения методов теории нечетких множеств. Сформулированы основные принципы построения нечетких множеств для предложенной модели оценивания.

3. Приведена методика оценки минимально допустимого числа экспериментов и определения значимых характеристик микроструктуры, существенно влияющих на эксплуатационные свойства проектируемого материала. Использование этой методики в модели оценивания позволяет обосновать необходимое число экспериментов и измеряемые в них характеристики микроструктуры таким образом, чтобы полученная оценка не превышала допустимую погрешность.

4. Описан алгоритм исследования стохастической устойчивости полученной комплексной оценки макроскопических свойств материала. На основе применения алгоритма можно сделать вывод, при каком уровне искажений в исходных данных применение модели оценивания допустимо и с какой вероятностью.

Описанные модели и алгоритмы позволяют получить комплексные оценки макроскопических свойств исследуемого материала. При этом важным вопросом является корректность исходных данных, полученных в экспериментах, для применения в модели комплексного оценивания. Характеристики микроструктуры, используемые в модели, имеют обычно вполне определенный физический смысл. Их численные значения сами по себе являются результатом измерений и полученной информации о микроструктуре, так что во многом корректность результатов применения модели комплексного оценивания определяется корректностью и адекватностью исходных данных.

Глава 3. Выбор размеров представительного изображения микроструктуры для определения свойств ФММ

3.1 Обзор проблемы определения представительного объема материалов

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.

В работе [82] рассматривается моделирование представительного объема двухфазной феррит-мартенситной стали с высоким содержанием мартенсита. Принимаются определяющие соотношения для каждой из фаз. Моделирование макроскопической зависимости напряжений от деформаций проводится с использованием метода конечных элементов. Выбор размеров представительного объема осуществляется, исходя из предположения, что средние поля напряжений и деформаций не должны значительно отличаться при выборе различных окон заданного размера.

В работе [83] рассматривается моделирование процесса упрочнения двухфазных сталей с использованием физических теорий пластичности. При этом применяется два подхода: составляются отдельные определяющие соотношения для фаз феррита и мартенсита или используется модель с усредненными определяющими соотношениями для материала. Преимуществом второй модели является возможность использовать более крупную сетку при конечноэлементном моделировании. Сравнение результатов моделирования производится для представительного объема материала.

Работа [84] посвящена определению размеров представительного объема поликристаллического агрегата, содержащего микротрещины, размеры которых имеют порядок нескольких диаметров зерен. При определении

представительного объема число зерен увеличивалось до тех пор, пока не оказывалось, что последующее увеличение их количества изменяло усредненный отклик материала менее чем на 1%. Соответственно в работе можно рассмотреть типичный подход для определения представительного объема, заключающийся в увеличении или уменьшении количества рассматриваемых структурных элементов и поиска наименьшего их числа, которое может считаться представительным.

В работе [85] представлен экспериментальный подход к определению представительного объема поликристаллическом материале. Методика опирается на измерение коэффициента поперечной деформации на заданном наборе интервалов. В дальнейшем величина представительного объема определялась как суммарный размер интервалов, на котором среднее значение коэффициента поперечной деформации соответствует значению для макрообразца. Авторами получена оценка характерного размера представительного объема, согласующаяся с результатами, ранее полученными с использованием других методов.

В работе [86] представлен подход к определению стохастически устойчивого представительного объема для гетерогенных материалов со случайно распределенными включениями. Представительный объем вычисляется с использованием критерия хи-квадрат. Проводится конечноэлементное моделирование последовательности объемов гетерогенного материала, далее для каждого из объемов вычисляется среднее значение деформаций или напряжений. Представительный объем определяется как нижняя граница объема, больше которого макроповедение материала уже не изменяется существенно. Особенностью работы является исследование чувствительности полученного значения объема к виду нагружения, применяемому в процедуре его определения.

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 не изменяется существенно.

3.2 Понятие представительного изображения микроструктуры при оценке прочностных свойств ФММ

Если решать задачу определения макроскопических свойств материалов по данным о микроструктуре, важным оказывается вопрос о представительности исходных данных. Для более точной оценки интересующих физико-механических свойств металлов, например, предела текучести, требуется получение данных о микроструктуре как можно более глубоких масштабных уровней, поскольку широко известно [18,87], что деформация материалов определяется эволюцией микроструктуры на уровне зерен, границ зерен или 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 методы, например, рентгеновского анализа структуры [31], томографического анализа [88] или последовательного получения микрошлифов [89]. Наиболее распространённым методом анализа структуры, однако, является получение наборов фотографий микрошлифов. И хотя существуют работы, направленные на получение данных о трехмерной структуре на основе плоских изображений [90], чаще всего исходными измерениями являются только плоские изображения микрошлифов [91]. 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*.

Определим понятие размера представительного изображения микроструктуры для цифровой фотографии микрошлифа материала. Примем изначально определение в контексте рассматриваемой задачи оценивания комплексных свойств материала по данным о его микроструктуре:

Представительным будем называть такой размер изображения микроструктуры, который является необходимым и достаточным для получения оценки макроскопических свойств материала с требуемой точностью.

Таким образом, появляется возможность делать выводы о корректности полученной оценки макроскопических свойств материала в зависимости от использованных для проведения такой оценки исходных фотографий микрошлифов.

Однако можно предполагать, что макроскопические свойства материала могут быть однозначно определены, когда известны параметры его микроструктуры, и в случае устойчивости получаемой комплексной оценки представительность изображения микроструктуры может быть определена независимо от метода проведения комплексной оценки.

Принимая вышеописанные требования по отношению к методу оценки комплексных свойств материала, определение представительности

изображения микроструктуры материала может быть переформулировано следующим образом:

Представительным будем называть такой наименьший размер изображения микроструктуры, на котором погрешность оценки параметров микроструктуры материала не превышает заданной величины.

Введенное определение позволяет реализовать алгоритм оценки размеров представительного изображения микроструктуры материала.

3.3 Алгоритм оценки размеров представительного изображения зеренной структуры материала

Будем проводить оценку размеров представительного изображения микроструктуры для фотографий микрошлифов, на которых изображена зеренная структура металлов, поскольку именно на основе таких изображений чаще всего анализируется микроструктура материала при его исследовании.

Содержательно постановку задачи определения размеров представительного изображения зеренной структуры можно сформулировать следующим образом:

Требуется определить наименьший размер окна для отображаемого на фотографии среза объемной структуры материала, на котором погрешность оценки параметров зеренной структуры материала не превышает заданной величины. Исходными данными являются параметры распределений объемной структуры материала.

Отметим, что параметры распределений объемной структуры материала предполагаются априори. Такое предположение может быть сделано, исходя из известных распределений для похожих материалов. Решение задачи может быть получено для смоделированного микрошлифа материала, который в свою очередь может быть смоделирован сечением плоскостью случайной модельной структуры с заданными распределениями размеров и ориентаций структурных элементов, соответствующими реальному материалу [92].

Объемная зеренная структура металлов с хорошей точностью может быть смоделирована набором эллипсоидов [89,93]. Такая модель позволяет оценить размеры представительного изображения для следующих параметров микроструктуры: средний размер зерна, коэффициент вариации размера зерна, средняя анизотропия зерен, средняя ориентация зерен.

Таким образом, алгоритм определения размера представительного изображения зеренной структуры металлов можно описать следующим образом:

1. Генерация эллипсоидальной объемной структуры материала
2. Вычисление сечения сгенерированной структуры плоскостью
3. Генерация на полученном сечении наборов окон для множества размеров и вычисление параметров микроструктуры для каждого из сгенерированных окон
4. Вычисление размеров представительного изображения для каждой из характеристик на основании статистического критерия

Рассмотрим более подробно этап **генерации эллипсоидальной зеренной структуры**. На этом шаге алгоритма необходимо получить трехмерную модель зеренной структуры материала. Важной особенностью сгенерированной структуры является то, что количество элементов в ней намного большее, чем содержащееся в представительном объеме исследуемого материала. Такое требование необходимо для того, чтобы полученное в последствии сечение структуры плоскостью имело гарантированно большую площадь, чем искомый размер представительного изображения микроструктуры. Рассмотрим существующие методы генерации структуры поликристаллических материалов.

В работе [94] рассматривается задача плотной упаковки сферических частиц, имеющих случайный размер. Изначально частицы размещались с невысокой плотностью и в дальнейшем производился расчет движения частиц как абсолютно твердых тел, движущихся по законам ньютоновской механики.

Исследована получаемая плотность упаковки при разном законе распределения размеров частиц. Вычисления проводились для 15000 частиц.

В работе [93] представлен метод генерации трехмерной структуры металла, статистически эквивалентной данным, полученным в результате последовательного микрошлифования, описанной в [89]. Метод заключается в последовательном выполнении следующих операций: генерации набора эллипсоидов с заданными параметрами распределения их объемов, отношений полуосей и ориентаций главных осей; размещении сгенерированных эллипсоидов в контейнере; генерации набора многогранников Вороного с использованием центров эллипсоидов в качестве опорных точек. В дальнейшем сгенерированная структура используется в задачах моделирования методами физических теорий пластичности.

Работа [95] посвящена задаче плотной упаковки заданного класса трехмерных геометрических объектов. Представлены концептуальная и математическая постановка задачи оптимизации. Описаны подходы к поиску локального экстремума. Получены результаты применения разработанного алгоритма в задачах упаковки. Вычисления проводились для количества объектов, не превышающего трехсот.

В работе [96] представлен подход к моделированию зеренной структуры алюминия на основе упаковки эллипсоидов. В контейнере генерируется значительное количество эллипсоидов, суммарный объем которых намного превышает объем контейнера. Далее искомая структура представляет собой решение задачи оптимизации: из исходного множества эллипсоидов выбирается такое подмножество, что плотность упаковки должна оказаться максимальной при минимальном объеме пересечений эллипсоидов.

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 10000. 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 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, то есть $N_1 = 10N = 10^4$. 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 лишь первым приближением и необходимы дальнейшие исследования для оценки числа зерен в генерируемой структуре в контексте 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 решаемой задачи можно отказаться от упаковки сгенерированных эллипсоидов, поскольку достаточно приблизительная оценка размеров представительного изображения микроструктуры.

Рассмотрим вопрос о распределении параметров формы и ориентации формы генерируемых эллипсоидов. В работе [93] предлагается система генерации набора эллипсоидов, моделирующих реальную зеренную структуру металла с помощью эллипсоидов. При такой генерации для каждого эллипсоида

изначально генерируется значение его объема $V = \pi abc$, который распределен по логнормальному закону; затем генерируются отношения длин меньших полуосей b/a и c/a , распределенные по закону бета-распределения; наконец полученным эллипсоидам задается ориентация формы. Как логнормальное распределение, так и бета-распределение являются двухпараметрическими, поэтому для оценки их параметров можно воспользоваться значениями средних значений и среднеквадратических отклонений для соответствующих величин.

На рисунке 3.1 изображен пример генерируемого эллипсоида.

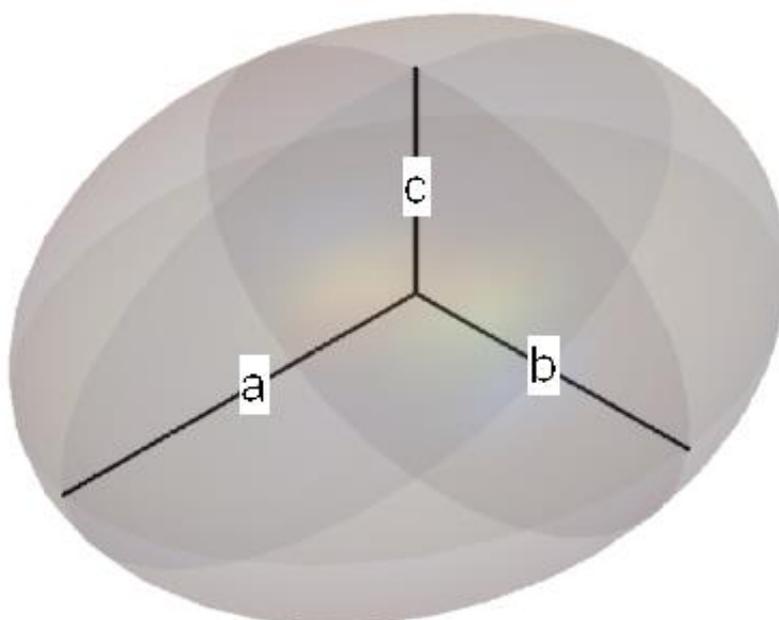


Рисунок 3.1 – Изображение генерируемого эллипсоида с обозначением его полуосей

Ориентация формы сгенерированных эллипсоидов задается тремя углами Эйлера. Первый и третий углы Эйлера распределены равномерно в интервале $[0; 2\pi)$, косинус второго угла Эйлера равномерно распределен в интервале $[-1; 1)$. Такое распределение ориентаций позволяет добиться того, что единичные вектора ориентации наибольшей оси эллипсоидов будут равномерно распределены на поверхности единичной сферы.

Набор сгенерированных эллипсоидов размещается в кубическом контейнере, объем которого равен суммарному среднему объему генерируемых

эллипсоидов. Координаты центров распределяются равномерно внутри контейнера (рисунок 3.2).

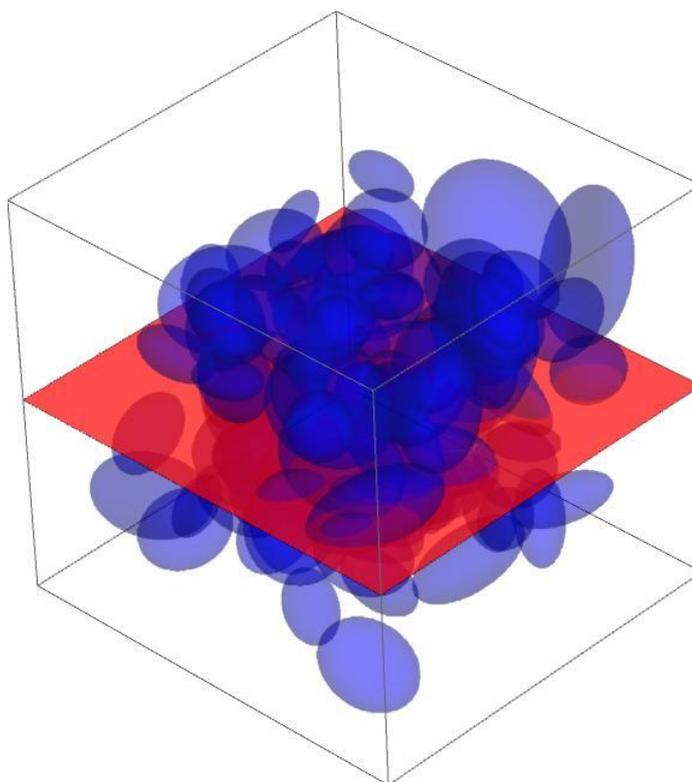


Рисунок 3.2 – Пример генерируемой трехмерной структуры для 100 эллипсоидов и секущей плоскости

Рассмотрим **получение сечения сгенерированной структуры плоскостью**. Очевидно, что в случае изотропной структуры секущая плоскость может быть расположена произвольным образом. Необходимым условием является лишь то, в пересечении должно находиться достаточное число структурных элементов (эллипсоидов), оценка для которого приведена в разделе выше.

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:

$$F_i(x_1, x_2, x_3) = 0, i = \overline{1, N_2}. \quad (35)$$

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 переписем уравнения эллипсоидов в новой системе координат, полученной поворотом направления вертикальной оси лабораторной системы координат так, чтобы в полученной системе координат вертикальная ось совпала с направлением нормали к плоскости, и переносом начала лабораторной системы координат в точку, задающую плоскость [97]. Таким образом уравнения эллипсоидов примут вид:

$$F_i^*(x_1^*, x_2^*, x_3^*) = 0, i = \overline{1, N_2}. \quad (36)$$

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

$$f_j(x_1^*, x_2^*) = F_j^*(x_1^*, x_2^*, 0) = 0, j = \overline{1, N_1}. \quad (37)$$

На рисунке 3.3 представлено изображение сечения трехмерной структуры плоскостью, исходной трехмерной структурой является изображенная в примере на рисунке 3.2. Уравнения эллипсов записаны в локальных координатах секущей плоскости.

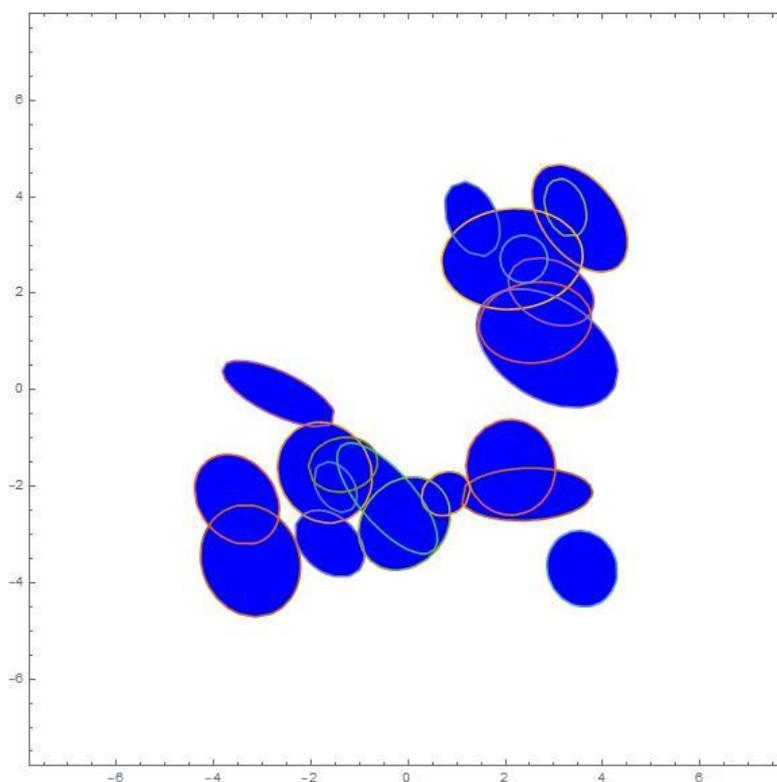


Рисунок 3.3 – Пример сечения трехмерной структуры плоскостью

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

Наконец, для **вычисления размеров представительного изображения микроструктуры** на основе сгенерированного сечения будем для набора размеров генерировать случайные выборки окон, центры которых равномерно распределены на всем сечении. Под окнами будем понимать квадраты, полностью располагающиеся внутри сечения и имеющие заданную длину стороны. Будем считать, что эллипс находится в окне, если координаты его центра располагаются внутри сгенерированного окна.

Для каждого из сгенерированных окон рассчитаем вышеупомянутые характеристики микроструктуры. Далее необходимо выполнить для каждого из размеров окон вычисление статистического критерия, позволяющего оценить погрешность оценки параметра микроструктуры.

Поскольку оценка параметров микроструктуры выполняется при достаточно большом количестве эллипсов, находящихся в окне, то можно предполагать, что распределение оценок близко к нормальному. Поэтому статистический критерий будем строить на основе выборочного среднеквадратического отклонения оценок микроструктуры для набора окон одинакового размера. Чтобы привести значения критерия к безразмерному виду, отнесем значения выборочного среднеквадратического отклонения оценки характеристики к истинному значению характеристики, которое можно оценить как значение характеристики на всем сечении. Для характеристики микроструктуры α формула статистического критерия примет вид:

$$V_{\alpha} = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (\alpha_i - \bar{\alpha})^2} / \alpha^* , \quad (38)$$

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.

Полагая, что оценка распределена нормально, можно выбрать размер окна, при котором изображение микроструктуры можно считать представительным. Для этого нужно определить целевое значение критерия. Условием для определения значения критерия будет то, что вероятность $P^{\text{крит}}(V_{\alpha}^{\text{крит}})$ равна вероятности получить оценку с погрешностью, не превышающей $\delta^{\text{крит}}(V_{\alpha}^{\text{крит}})$:

$$P\left(\left|\frac{\alpha - \alpha^*}{\alpha^*}\right| \leq \delta^{\text{крит}}(V_{\alpha}^{\text{крит}})\right) = P^{\text{крит}}(V_{\alpha}^{\text{крит}}). \quad (39)$$

Для нормально распределенных оценок целевое значение критерия определяется с использованием функции ошибок и, например, для $\delta^{\text{крит}} = 0,05$ и $P^{\text{крит}} = 0,95$ будет приближенно равно $V_{\alpha}^{\text{крит}} \approx 0,025$. Такое значение примем в последующих расчетах.

3.4 Выбор размеров представительного изображения для исследуемых ФММ

Определим размер представительного изображения зеренной структуры для металлических функциональных материалов, в частности сталей. Для выбранного класса материалов необходимо оценить априорные параметры объемной структуры, а именно параметры распределений объемов зерен и отношений сторон зерен.

В работах [89,93] представлены результаты исследования объемной структуры сталей. На основе представленных в указанных работах результатов можно принять следующие параметры зеренной структуры, представленные в таблице 3.1:

Таблица 3.1 – Параметры распределений для объемной структуры материала

	Объем эллипсоидов (логнормальное распределение)	Отношение полуосей b/a (бета-распределение)	Отношение полуосей c/a (бета-распределение)
Среднее значение	$4\pi/3$	0,74	0,55
Среднеквадратическое отклонение	$4\pi/3$	0,1	0,12

Отметим, что параметры для отношений длин полуосей являются безразмерными величинами. Параметры распределений объемов эллипсоидов имеют же размерность куба длины. В качестве единичной длины при вычислениях примем радиус шара, имеющего объем, равный среднему объему эллипсоида. Соответственно итоговое значение размера представительного объема будет также получено в единицах выбранной длины.

По описанному в предыдущей главе алгоритму для объемной структуры сталей был проведен расчет статистического критерия (38). Количество генерируемых эллипсоидов составляло 1 000 000. Критерий рассчитывался для

набора размеров с шагом в единицу. Далее набор рассчитанных точек аппроксимировался методом наименьших квадратов к степенной зависимости значения критерия от размера в виде (40) для каждого из параметров зеренной структуры.

$$V_{\alpha}(l) = \frac{a}{l^b}. \quad (40)$$

Расчет по описанному алгоритму проводился в системе Wolfram Mathematica 11.1. Генерация случайных величин была реализована с использованием стандартных функций математического пакета. На рисунке 3.4 представлены результаты расчета.

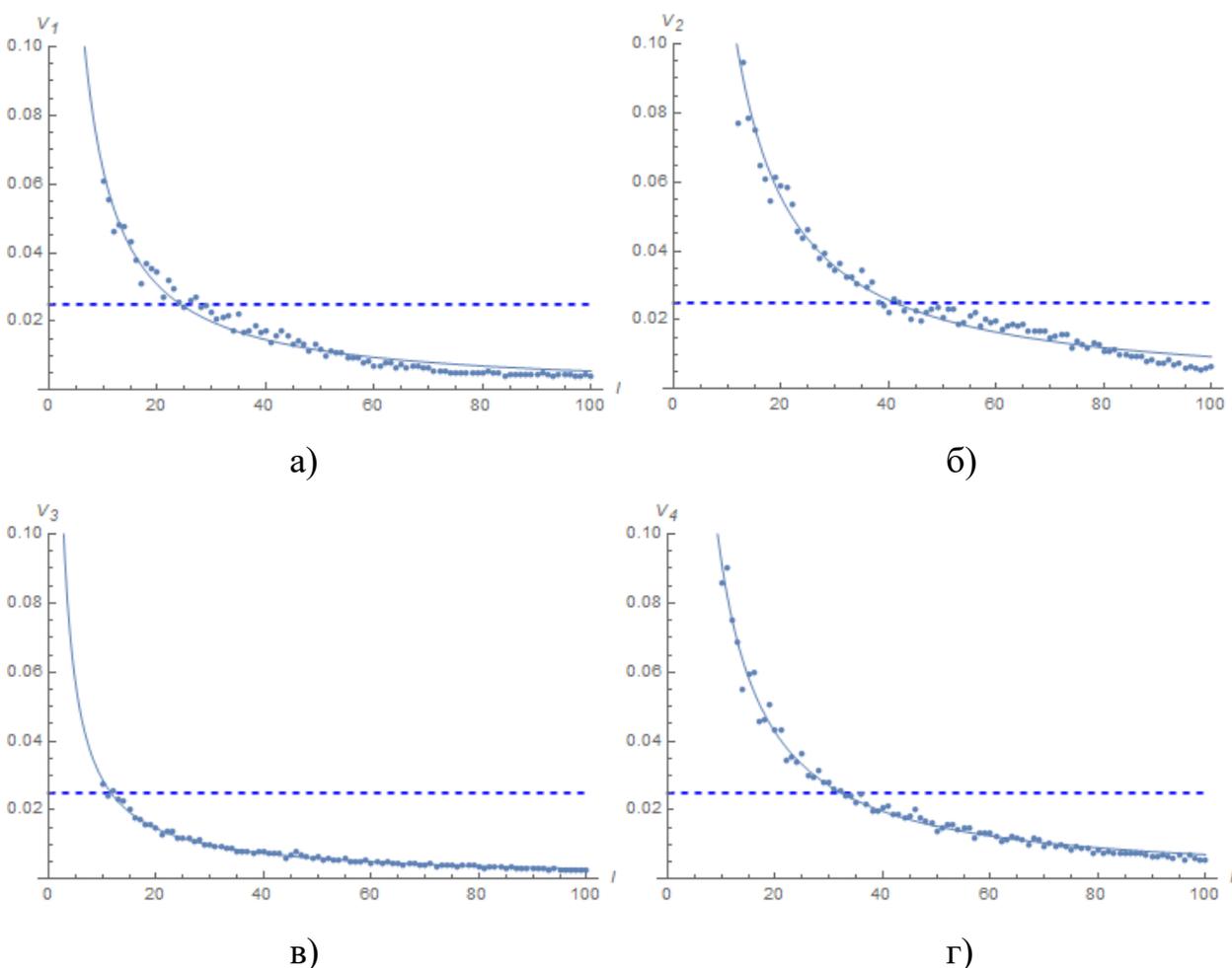


Рисунок 3.4 – Зависимость статистического критерия от размера окна для характеристик: а) средний размер зерна; б) коэффициент вариации размера зерна; в) средняя анизотропия зерен г) средняя ориентация зерен.

Таблица 3.2 – Размеры представительного изображения микроструктуры с точностью до целых

Средний размер зерна	Коэффициент вариации размера зерна	Средняя анизотропия зерен	Средняя ориентация зерен
24	42	12	32

Полученные значения размеров представительного изображения микроструктуры представлены в таблице 3.2. Можно сказать, что для каждого параметра микроструктуры размер представительного изображения будет различным. В качестве размера представительного изображения для комплекса параметров микроструктуры примем максимальное значение. Таким образом, представительным будем считать размер фотографии микрошлифа, превосходящий средний радиус зерен в объемной структуре в 42 раза или диаметр в 21 раз. Под средним радиусом зерна понимается радиус шара, объем которого равен среднему объему зерен в трехмерной структуре.

3.5 Выводы по главе

По результатам 3-ей главы, посвященной выбору размеров представительного изображения микроструктуры для оценки макроскопических свойств функциональных металлических материалов, можно сделать следующие выводы.

1. Проведен обзор существующих подходов к определению представительного объема материалов. Выявлены общие алгоритмы определения размеров представительного объема поликристаллических материалов.
2. Сформулировано понятие представительного изображения микроструктуры материала при оценке его макроскопических свойств.

Приведены содержательная и концептуальная постановки задачи оценки размеров представительного изображения.

3. Описан алгоритм, позволяющий оценить представительность изображения микроструктуры материала при использовании набора характеристик микроструктуры для комплексного оценивания макросвойств. Отмечено, что применение алгоритма требует введения априорных предположений о виде трехмерной структуры.

4. Проведена оценка размеров представительного изображения для классов материалов, обладающих заданными априорными характеристиками трехмерной структуры. Получены численные значения оценки в безразмерном виде.

Применение описанного в главе алгоритма позволяет оценить корректность и адекватность исходных фотографий микрошлифов, когда на их основе получены численные значения характеристик зеренной структуры, примененные в модели комплексного оценивания макроскопических свойств функционального металлического материала. Отметим также, что предлагаемый алгоритм может также использоваться при других методах оценки свойств материала на основе микроструктуры, например, в (Приложение 4).

Глава 4. Оценивание прочностных свойств ФММ на основе анализа зеренно-фазовой структуры

4.1 Обработка исходной информации на основе компьютерного анализа зеренно-фазовой структуры исследуемого материала

Демонстрация работы программного обеспечения была проведена с использованием материалов экспериментальных исследований, предоставленных лабораторией металлографии Института наносталей Магнитогорского государственного технического университета им. Г.И. Носова. В качестве исходных данных выступали размеченные цифровые фотографии шлифов функциональных сталей, полученные при создании специально обработанной арматурной стали с повышенными прочностными характеристиками. При получении стали использовался процесс закалки исходной стали, состоящий из этапов нагрева, выдержки и охлаждения. В качестве исходного материала брались образцы диаметром 10 мм и длиной 80 мм из стали марки 80P эвтектоидного состава, содержащей 0,79 % С, 0,26 % Si, 0,54 % Mn, 0,03 % Cr, 0,03 % Ni, 0,0003 % Al, и микролегированной бором в количестве 0,002 %. Нагрев образца производился до температуры 930 °С со скоростью 20 °С/с, время выдержки составляло 3 мин. Скорость охлаждения варьировалась в диапазоне от 7 до 100 °С/с. В таблице 4.1 приведены прочностные свойства стали, получаемые при различной скорости охлаждения. На рисунке 4.1 приведены примеры микроструктур, образуемых в материале в зависимости от скорости охлаждения. Приведенные данные получены на основе экспериментальных исследований, проведенных специалистами лаборатории. Для выявления качественных и количественных характеристик формирующейся структуры использовался исследовательский комплекс GLEEBLE 3500 с оптическим микроскопом Meiji Techno с применением системы компьютерного анализа изображений Thixomet PRO, а также сканирующего электронного микроскопа JSM 6490 LV.

Обработка исходных микрошлифов и получение числовых значений

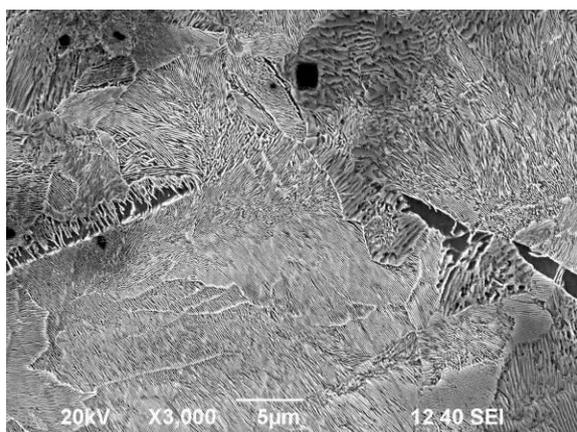
характеристик микроструктуры проводилось с использованием системы распознавания образов, разработанной Шарыбиным С.И. в своей кандидатской диссертации [5]. В дальнейшем будем использовать числовые значения параметров структуры в качестве исходных данных. Опишем основные подходы к получению числовых данных о характеристиках микроструктуры исследуемого материала, реализованные в [5].

Таблица 4.1 – Фазовые составляющие и прочностные свойства материала после закалки в зависимости от скорости охлаждения

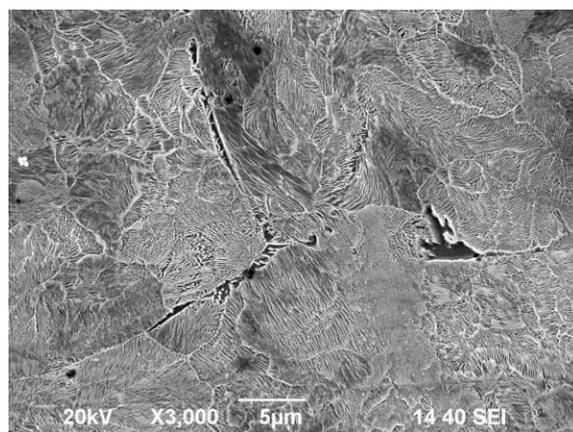
№	Скорость охлаждения, °C/с	Структуры	Твёрдость, HV ₃₀	Ударная вязкость, (Дж/см ²)
1	7	Ф+ФКС	345	39.1
2	15	Ф+ФКС+Б _{верх}	407	47.4
3	20	Ф+ФКС+ Б _{верх} + Б _{нижн}	412	55.7
4	25	Ф+ФКС+ Б _{верх} + Б _{нижн}	436	58.5
5	30	ФКС+Б _{верх} +М	469	64.0
6	40	ФКС (Т) +Б _{верх} +М	554	55.7
7	50	ФКС (Т)+М	517	50.1
8	60	ФКС (Т)+ М	800	44.6

Как видно из представленных результатов экспериментов, в стали после термообработки возникают следующие фазовые составляющие: ферриты (Ф), бейниты (Б), мартенситы (М) и ферритно-карбидные смеси (ФКС) или троститы (Т).

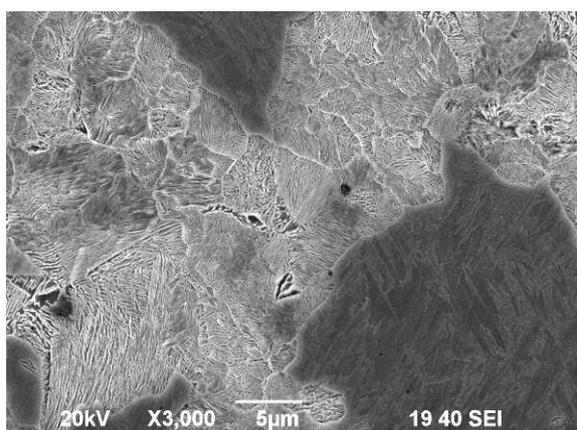
Примеры цифровых фотографий микрошлифов при различных режимах термообработки исходной стали приведены на рисунке 4.1.



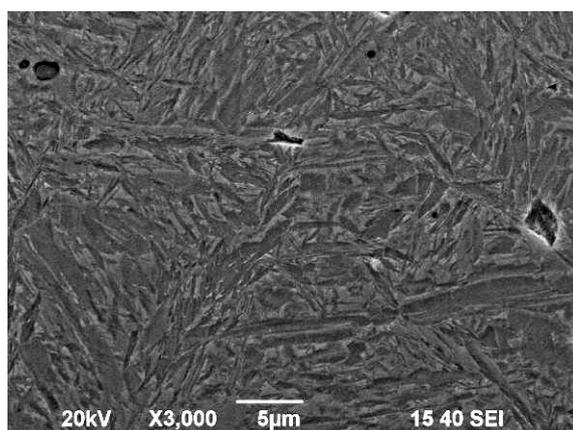
а



б



в



г

Рисунок 4.1 – Примеры цифровых фотографий микроструктуры стали после нагрева до 930 °С, выдержки в течение 3 мин. и охлаждения со скоростью 1.5 °С/с (а), 20 °С/с (б), 50 °С/с (в) и 100 °С/с (г)

Для применения предложенной модели комплексного оценивания прочностных свойств функционального материала необходимо знание значений основных параметров микроструктуры исследуемой стали, к которым можно отнести (химический состав материала считается заданным, а микрповреждения при термообработке не накапливаются):

- Фазовый состав и доля каждой фазовой составляющей
- Параметры зеренной структуры.

Отметим, однако, что предлагаемая модель комплексного оценивания также может быть использована в случае, когда исходными данными являются не характеристики микроструктуры материала, а параметры микрповрежденности. Подробнее исследование связи скейлнговых

параметров поврежденности и усталостной прочности металлического материала освещено в работах [98,99].

Для определения фазового состава и вычисления доли фаз по фотографии микрошлифа в [5] использовался метод распознавания по образцу с учителем, который заключается в обучении машинного алгоритма классам, которые он в последствие может распознавать. Фотография микрошлифа в электронном виде является входными данными информационной системы, в результате можно определить, к какому классу та или иная область фотографии была отнесена. При этом вся фотография разбивается на малые части, каждая из которых по некоторой заданной метрике сравнивается с шаблоном каждой фазы. После компьютерного исследования всей фотографии микрошлифа результаты агрегируются и определяется фазовый состав металлического материала. Примеры используемых шаблонов приведены на рисунке 4.2.

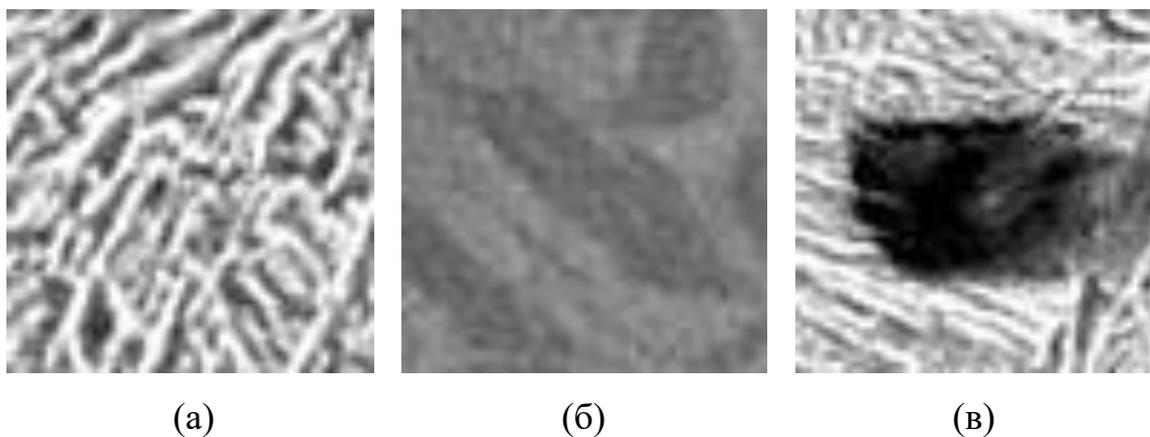


Рисунок 4.2 – Примеры шаблонов классов, использованных для обучения алгоритма классификации: бейнитных структур (а), мартенситных структур (б) и ферритных структур (в)

Рассмотрим применение алгоритма распознавания фазового состава при анализе фотографии микрошлифа материала, полученного в результате описанного технологического процесса термообработки исходной стали со скоростью охлаждения $30^{\circ}\text{C}/\text{с}$. Фотография полученной микроструктуры приведена на рисунке 4.3.

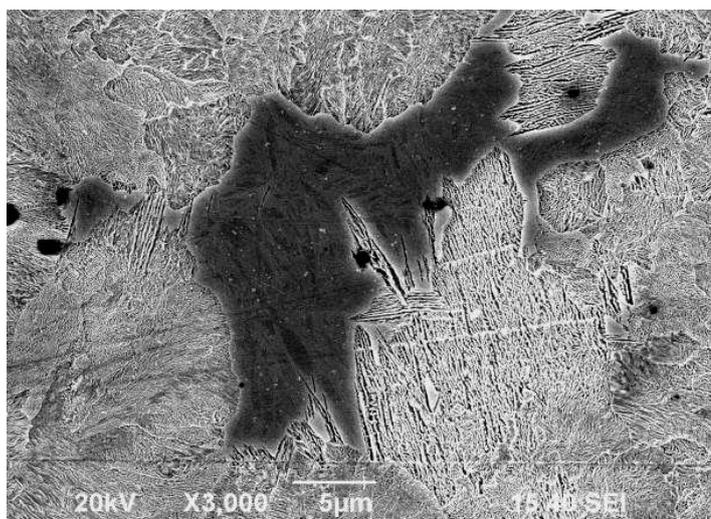


Рисунок 4.3 – Часть фотографии микрошлифа, по которому проводилось определение фазового состава исследуемой стали

На рисунке 4.4. представлен результат компьютерного определения фазовых составляющих образца после проведения структурной фильтрации результата классификации. В [5] отмечается, что результат качественно совпадает с данными экспертов-металловедов, согласно которым наблюдается образование 3-х фаз (см. табл.4.1): ФКС, бейнита и мартенсита. При этом были определены доли фаз: ФКС – 69,7%; Б – 20,2% и М – 10,1%.

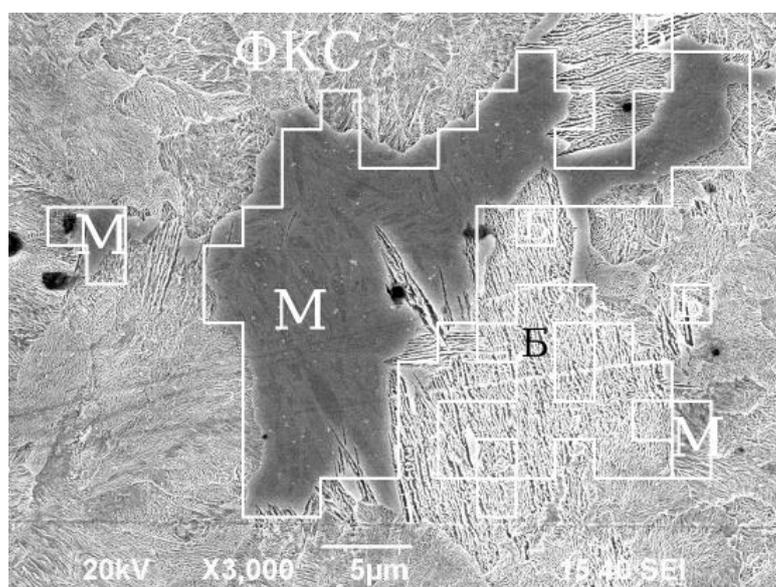


Рисунок 4.4 – Результат проведения этапа классификации фазовых составляющих термообработанной стали

На следующем этапе обработки исходных данных происходит подсчёт численных характеристик зёрновой структуры, используя их представление в виде многоугольников при решении задачи сегментации зерен [5]. При этом подсчитываются:

- Средний максимальный и минимальный размер зерна;
- Плотность распределения зёрен;
- Ориентация зёрен;
- Степень анизотропии зерна;
- Для некоторых структур также возможен подсчёт таких характеристик, как межпластинчатое расстояние.

Согласно [5] «Ориентация зерна отождествляется с направлением прямой, проходящей через наиболее удалённую от геометрического центра точку на границе зерна, и его геометрический центр. *Размер зерна* считается по двум направлениям – одно из них это размер зерна по направлению ориентации зерна, второй размер считается в ортогональном направлении. Для нахождения численных значений размера используется ограничивающий прямоугольник, направленный вдоль зерна. Разница между максимальным и минимальным значениями по горизонтали составляет размер зерна вдоль его направления вдоль большей оси эллипса».

Чтобы определить *анизотропию* зерна, сравнивается его размер вдоль и поперёк направления зерна. *Степенью анизотропии* считается как среднее значение отношения величины зерна вдоль его вертикали и горизонтали (b/a , где a и b – длина соответствующих осей эллипса на рисунке 4.5).

Результат работы алгоритма нагляднее всего виден при анализе балла зерна исследуемой стали. Результат этапа определения зёрен отображён на рисунке 4.6.

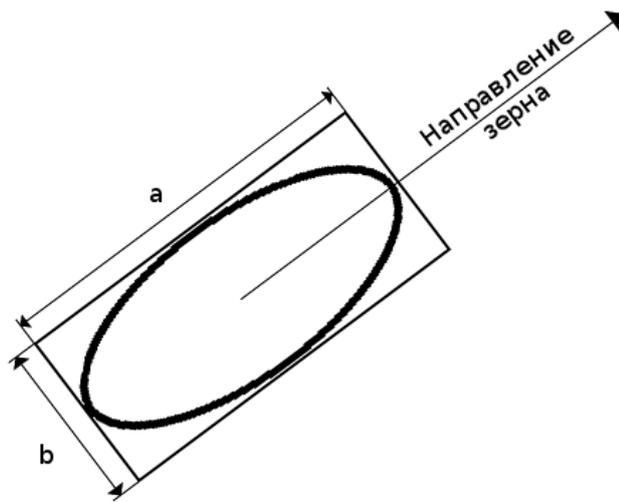


Рисунок 4.5 – Ограничивающий прямоугольник, используемый для определения размера и ориентации зерна

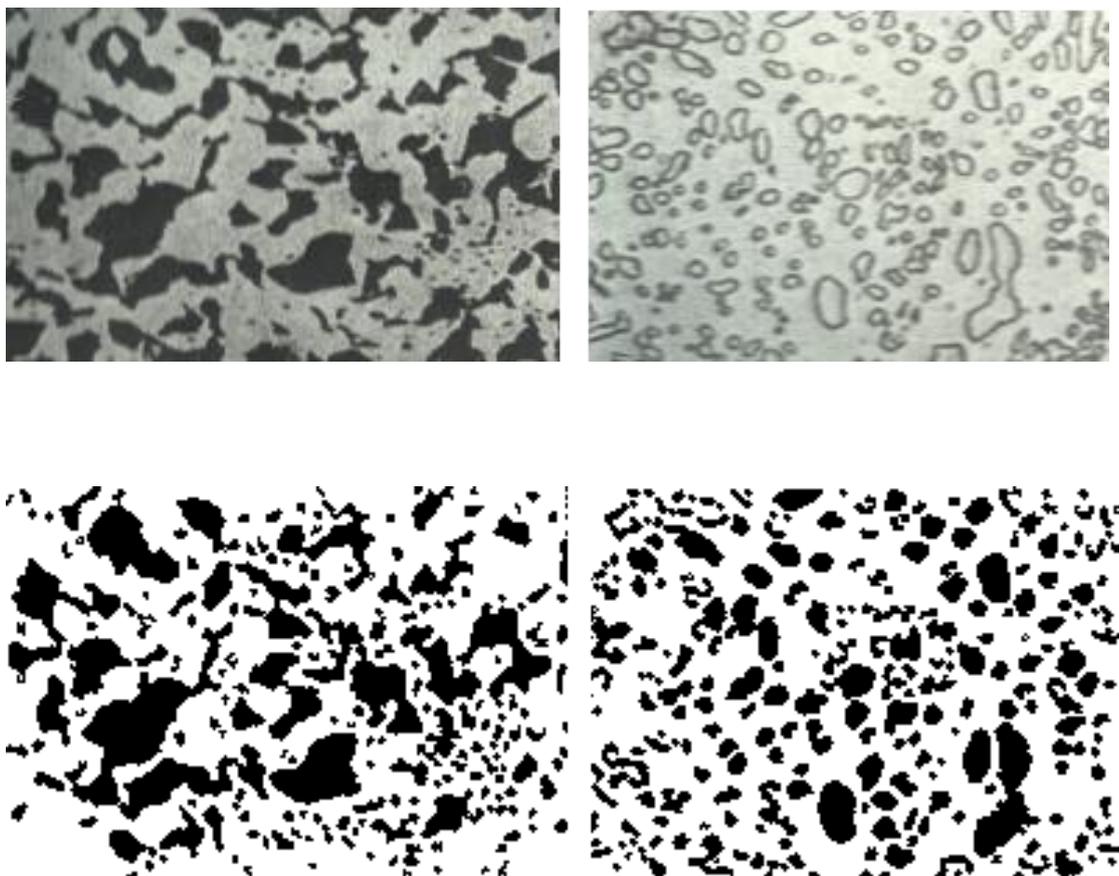


Рисунок 4.6 – Исходные фотографии микрошлифов исследуемой стали (сверху) и зерна, идентифицированные алгоритмом сегментации (снизу)

Как отмечено в [100], предварительная фильтрация или повышение качества входных данных алгоритмов оценки позволяет повысить точность прогнозирования, так что проведем оценку представительности исходных изображений.

Будем принимать в качестве оценки представительности изображения характерные размеры, полученные в главе 3. Поскольку исследуемые материалы относятся к классу функциональных сталей, то такую оценку можно считать приемлемой. В качестве оценки будем использовать максимальный линейный размер, полученный для оценок различных характеристик. Таким образом будем считать представительными изображения, линейный размер которых в 42 раза превосходит априорное значение среднего радиуса объемных зерен или, что аналогично, в 21 раз превосходит диаметр зерен.

Для рассматриваемого материала величину среднего диаметра зерен можно оценить значением порядка 30 мкм, что означает, что на фотографии микрошлифа линейный размер должен составлять порядка 660 мкм.

В случае фотографий микрошлифов при увеличении $\times 250$, которые являются исходными данными для алгоритма компьютерного анализа, линейный размер (сторона квадрата аналогичной площади) составляет, на основе данных из [101], приблизительно 690 мкм. Таким образом, можно считать исходные изображения микрошлифов представительными.

В качестве примера результата обработки численных параметров зёрненной структуры, выполненной в работе [5], на рисунке 4.7 приведена гистограмма распределения средних размеров зёрен на рассматриваемом шлифе исследуемой стали после термообработки.

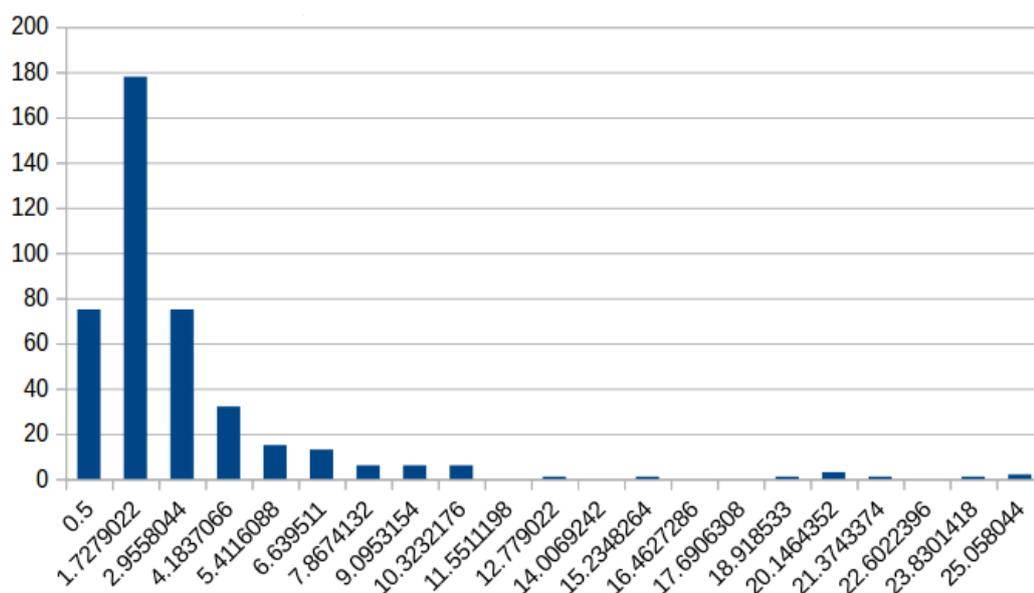


Рисунок 4.7 – Гистограмма распределения размера зерна на изучаемом микрошлифе исследуемого материала

После обработки всех цифровых фотографий микрошлифов исследуемого материала при различных режимах термообработки результаты сведем в табл. 4.2.

Таблица 4.2 – Параметры зеренно-фазовой структуры материала и его механические характеристики, полученные в результате натурных экспериментов и компьютерного анализа фотографий микрошлифов

№ п/п	Скорость охлаждения, °C/c	Параметры зёренной структуры (размеры зерна в мкм)	Параметры фазового состава, %	Твердость материала HV_{30}	Ударная вязкость KC , дж/см ²
1	10	Средний размер зерна: 0.10 Коэффициент вариации размера зерна: 0.11 Степень анизотропии: 0.98 Объемное содержание зерен: 0.87	ФКС: 100	400	54.3
2	20	Средний размер зерна: 0.10 Коэффициент вариации	ФКС: 60 Бейнит: 10	412	55.7

		размера зерна: 0.07 Степень анизотропии: 1.14 Объемное содержание зерен: 0.86	Мартенсит: 30		
3	25	Средний размер зерна: 0.16 Коэффициент вариации размера зерна: 0.06 Степень анизотропии: 1.09 Объемное содержание зерен: 0.94	ФКС: 70 Бейнит: 20 Мартенсит: 10	436	58.5
4	30	Средний размер зерна: 0.26 Коэффициент вариации размера зерна: 0.17 Степень анизотропии: 1.18 Объемное содержание зерен: 0.98	ФКС: 70 Бейнит: 20 Мартенсит: 10	469	64.0
5	40	Средний размер зерна: 0.25 Коэффициент вариации размера зерна: 0.03 Степень анизотропии: 1.25 Объемное содержание зерен: 0.87	ФКС: 50 Бейнит: 30 Мартенсит: 20	554	55.7
6	50	Средний размер зерна: 0.21 Коэффициент вариации размера зерна: 0.06 Степень анизотропии: 1.1 Объемное содержание зерен: 0.79	ФКС: 40 Бейнит: 30 Мартенсит: 30	617	50.1
7	60	Средний размер зерна: 0.13	ФКС: 10	800	44.6

		Коэффициент вариации размера зерна: 0.07 Степень анизотропии: 1.08 Объемное содержание зерен: 0.91	Мартенсит: 90		
--	--	--	------------------	--	--

Полученные после компьютерной обработки результаты анализа зеренно-фазовой структуры исследуемого материала в дальнейшем будут использованы при проверке предложенной модели комплексной оценки прочностных свойств создаваемого функционального материала в виде арматурной стали.

4.2 Пример оценивания прочностных свойств стали, подверженной термообработке

Для проведения оценок макроскопических характеристик функционального материала на основе анализа параметров микроструктуры была реализована программа «Нечеткий определитель комплексных свойств материала» (НОКСМ) [102] (Приложение 1). Реализованное программное обеспечение позволяет оценивать макроскопические свойства материала на основе данных о его микроструктуре, реализуя подход, описанный в главе 2 настоящей диссертации.

В качестве демонстрационного примера будем рассматривать получение арматурной стали с заданными прочностными свойствами путем термообработки, режимы которой исследовались в НИИ Наносталей и взяты в качестве исходных для проверки работоспособности разработанной модели комплексного оценивания. Численные результаты исследования зеренно-фазовой структуры термообработанной стали приведены в разделе 4.1. Видно, что при исследуемых режимах образуются 3 фазы: ферритно-карбитная смесь (ФКС), мартенсит (М) и бейнит (Б), от объемных долей которых в зависимости прочностные свойства материала. Кроме фазового состава на

эксплуатационные характеристики исследуемой стали сильное влияние оказывают параметры зёрненной структуры, приведенные в табл. 4.2. Видно, что форма и размеры зёрен изменяются в широком диапазоне, что несомненно влияет на прочностные свойства стали. В качестве основных параметров зёрненно-фазовой структуры выбраны: объём фаз – ФКС, Б, М, а также – средний размер зерна, коэффициент вариации размера зерна, степень анизотропии зерен и объемная доля зерен.

В качестве эксплуатационных характеристикам исследуемого функционального материала выбраны твердость по Виккерсу (HV_{30}) и ударная вязкость (KC), значения которых приведены в табл. 4.2. При этом измерение твёрдости по Виккерсу при нагрузке 30 кг на универсальном твердомере третьего поколения Emco Test M4C075G3 с камерой высокого разрешения и автоматическими измерениями по методам Бринелля, Роквелла, Виккерса.

Объединяя нечеткие отношения S^i , $i=1, \dots, 6$ по формуле (21), получим нечеткое отношение (матрицу) связи между произвольным множеством, описывающим зёрненно-фазовую структуру функционального материала (в рассматриваемом примере – это структура образца №5) и индуцируемым им множеством, описывающим эксплуатационные характеристики материала, т.е. оператор F_2 .

Алгоритм составления нечетких множеств

Для составления нечеткого отношения необходимо определить для характеристик микроструктуры и эксплуатационных свойств материала алгоритм выбора элементов носителей соответствующих нечетких множеств и вид функции принадлежности для них.

Будем выбирать элементы носителей и вид функций принадлежности следующим образом:

- Для каждой характеристики микроструктуры или значения макроскопических свойств определим максимальное и минимальное значение для набора экспериментов;

- Выберем количество элементов носителей нечетких множеств для каждого из параметров микроструктуры или макросвойств равным количеству доступных экспериментов. Исходя из общих предположений, можно ожидать повышения точности оценок при увеличении количества значений элементов носителей, однако выбор количества точек, значительно превышающего количество доступных экспериментов, может напротив ухудшить получаемые оценки.
- Для каждой характеристики или макросвойства выберем значения носителей таким образом, чтобы интервал между минимальным и максимальным экспериментальным значением полностью содержался в интервале между минимальным и максимальным значением элементов носителей, который бы в свою очередь разбивался на равные значения.
- Поскольку отсутствует дополнительная априорная информация о влиянии вида функции принадлежности на итоговую точность оценок, то будем использовать простейший вид функции принадлежности: принадлежность имеет максимальное значение, равное единице, при равенстве экспериментальному значению и линейно убывает при отклонении от него, принимая нулевое значение при отклонении большем или равном разности между значениями соседних элементов носителей.

Формула (41) отражает вид функции принадлежности:

$$\mu_i(u) = 1 - \left| \frac{x_i - u}{l} \right|, \quad (41)$$

где i – номер эксперимента, x_i – значение параметра микроструктуры или макроскопического свойства, полученное в эксперименте, l – значение, обозначающее скорость убывания функции принадлежности при отклонении от экспериментального значения в нашем случае равное длине отрезка между

соседними значениями элементов носителей, на которых строится нечеткое множество.

На рисунке 4.8 проиллюстрирован вид получаемого нечеткого множества для одного значения характеристики микроструктуры или макросвойства.

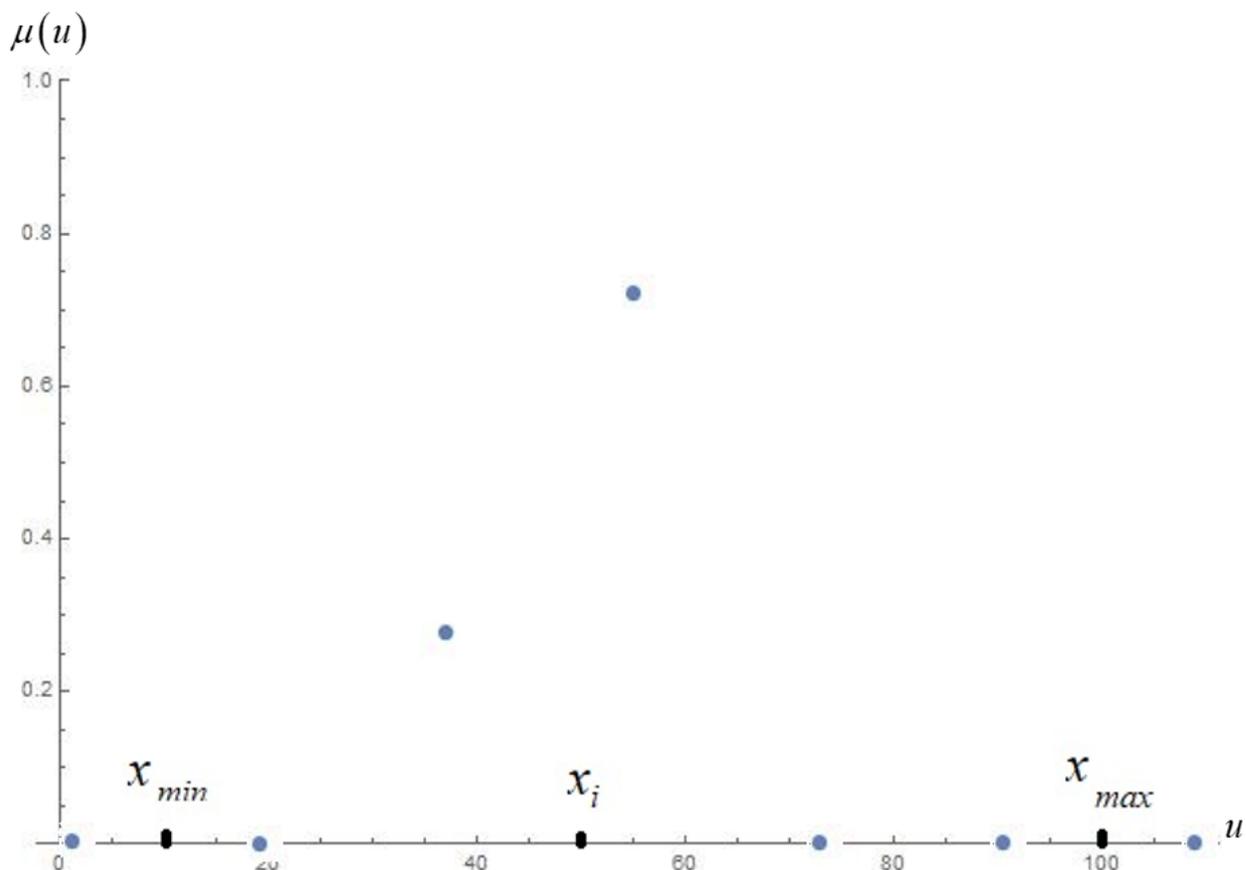


Рисунок 4.8 – Иллюстрация значений функции принадлежности для элементов носителей, относящихся к отдельной характеристике микроструктуры для одного из экспериментов

Ниже представлен пример нечеткого множества для характеристик микроструктуры в 6-м эксперименте:

$$A^6 = \{0 \setminus 0,08; 0 \setminus 0,12; 0 \setminus 0,15; 0,06 \setminus 0,18; 0,94 \setminus 0,21; 0 \setminus 0,24; 0 \setminus 0,28; 0 \setminus 0,02; 0,43 \setminus 0,04; 0,57 \setminus 0,07; 0 \setminus 0,1; 0 \setminus 0,13; 0 \setminus 0,16; 0 \setminus 0,18; 0 \setminus 0,95; 0 \setminus 1,01; 0,28 \setminus 1,06; 0,72 \setminus 1,12; 0 \setminus 1,17; 0 \setminus 1,22; 0 \setminus 1,28; 0,5 \setminus 0,77; 0,5 \setminus 0,81; 0 \setminus 0,85; 0 \setminus 0,88; 0 \setminus 0,92; 0 \setminus 0,96; 0 \setminus 1; 0 \setminus 1; 0 \setminus 19; 0,83 \setminus 37; 0,17 \setminus 55; 0 \setminus 73; 0 \setminus 91; 0 \setminus 109; 0 \setminus -3; 0 \setminus 3; 0 \setminus 9; 0 \setminus 15; 0 \setminus 21; 0,5 \setminus 27; 0,5 \setminus 33; 0 \setminus -9; 0 \setminus 9; 0,83 \setminus 27; 0,17 \setminus 45; 0 \setminus 63; 0 \setminus 81; 0 \setminus 99\}.$$

В таблице 4.3 структура нечеткого множества A^6 представлена более подробно: в строках таблицы отражено, какие элементы множества относятся к

тем или иным характеристикам микроструктуры. В таблице 4.4 приводится аналогичный вид множества для макроскопических свойств B^6 .

Таблица 4.3 – Пример нечеткого множества характеристик микроструктуры для эксперимента № 6

Средний размер зерна	0 \ 0,08	0 \ 0,12	0 \ 0,15	0,06 \ 0,18	0,94 \ 0,21	0 \ 0,24	0 \ 0,28
Коэффициент вариации размера зерна	0 \ 0,02	0,43 \ 0,04	0,57 \ 0,07	0 \ 0,1	0 \ 0,13	0 \ 0,16	0 \ 0,18
Степень анизотропии	0 \ 0,95	0 \ 1,01	0,28 \ 1,06	0,72 \ 1,12	0 \ 1,17	0 \ 1,22	0 \ 1,28
Объемное содержание зерен	0,5 \ 0,77	0,5 \ 0,81	0 \ 0,85	0 \ 0,88	0 \ 0,92	0 \ 0,96	0 \ 1
Доля ФКС	0 \ 1	0 \ 19	0,83 \ 37	0,17 \ 55	0 \ 73	0 \ 91	0 \ 109
Доля бейнита	0 \ -3	0 \ 3	0 \ 9	0 \ 15	0 \ 21	0,5 \ 27	0,5 \ 33
Доля мартенсита	0 \ -9	0 \ 9	0,83 \ 27	0,17 \ 45	0 \ 63	0 \ 81	0 \ 99

Таблица 4.4 – Пример нечеткого множества макросвойств для эксперимента № 6

Твердость по Виккерсу	0 \ 360	0 \ 440	0 \ 520	0,79 \ 600	0,21 \ 680	0 \ 760	0 \ 840
Ударная вязкость	0 \ 42,66	0,08 \ 46,54	0,92 \ 50,42	0 \ 54,3	0 \ 58,18	0 \ 62,06	0 \ 65,94

На основе полученных нечетких множеств вычислим для каждого эксперимента нечеткие отношения между параметрами микроструктуры и

макроскопическими эксплуатационными характеристиками. Для этого воспользуемся формулами (20) и (21), представленными в главе 2.

Для выполнения оценки макроскопических свойств будем рассматривать образец № 5. Таким образом, будем использовать данные по остальным образцам для построения искомого нечеткого отношения. В таблице 4.5 приведено результирующее нечеткое множество.

Таблица 4.5 – Нечеткое множество, полученное при проведении комплексной оценки для образца № 5

Твердость по Виккерсу	0,5 \	0,65 \	0,57 \	0,61 \	0,21 \	0,34 \	0,34 \
	360	440	520	600	680	760	840
Ударная вязкость	0,34 \	0,34 \	0,61 \	0,64 \	0,43 \	0,5 \	0,5 \
	42,66	46,54	50,42	54,3	58,18	62,06	65,94

Для представления значений прочностных свойств в виде скалярных величин, необходимо для каждой характеристики отдельно (в нашем случае это твердость по Виккерсу (HV_{30}) и ударная вязкость (KC)) решить задачу определения четкого представителя нечеткого числа. Это можно сделать различными способами (из соотношений (23), (24) или (25)).

В таблице 4.6 приведены результаты вычислений твердости по Виккерсу и ударной вязкости для образца № 5 после вычисления четкого представителя нечеткого числа по формуле (24), экспериментальные значения рассматриваемых характеристик, и вычисленные относительные погрешности.

Таблица 4.6 – Результаты оценки с использованием НОКСМ и их сравнение с экспериментальными данными

Твердость материала HV_{30} (эксперимент)	Твердость материала HV_{30} (оценка)	Относительная погрешность HV_{30}	Ударная вязкость KC , дж/см ² (эксперимент)	Ударная вязкость KC , дж/см ² (оценка)	Относительная погрешность KC
554	525.9865	5.0566	55.7	54.7343	1.7337

Таким образом, можно утверждать, что применение описанного подхода может давать результаты с невысокой относительной погрешностью.

4.3 Определение значимых характеристик микроструктуры

Рассмотрим результаты вычислительных экспериментов по обоснованию выбора основных параметров микроструктуры, существенно влияющих на прочностные свойства исследуемого материала [77].

На основе данных из таблицы 4.2. Исходными характеристиками будем считать следующие:

1. доля ФКС;
2. доля бейнита;
3. доля мартенсита;
4. средний размер зерна;
5. коэффициент вариации размера зерна;
6. степень анизотропии;
7. объемное содержание зерен.

В качестве базового эксперимента выберем 5-й эксперимент.

По результатам 6 экспериментов (исключая эксперимент №5) по модели оценивания, описанной выше, были просчитаны значения теоретической твердости по Виккерсу для 5-го эксперимента для каждой характеристики зёрненно-фазовой структуры. Результаты расчетов сведены в табл. 4.7.

Таблица 4.7 – Оценка значимости характеристик микроструктуры

№ исходной характеристики	Твердость по Виккерсу	Относительная погрешность
1	519.87	6.16
2	523.94	5.43
3	518.05	6.49
4	517.11	6.66
5	526.86	4.89
6	525.12	5.21
7	507.06	8.47

Из табл. 4.7 следует, что для расчета прочностной характеристики (твердости по Виккерсу) при заданной необходимой точности $\delta_{HV}^{**} = 5\%$ пятой характеристикой зёрненно-фазовой структуры (коэффициент вариации размера зерна) можно пренебречь.

Таким образом, для прогнозирования эксплуатационных характеристик функциональных материалов разработан подход, позволяющий исключать те из исходных параметров зёрненно-фазовой структуры те из них, которые оказывают незначительное влияние на исследуемые макросвойства.

Перейдем к определению минимально допустимого количества экспериментов для определения прочностных свойств металлических функциональных материалов с заданной точностью для рассмотренных выше примеров.

4.4 Определение минимально допустимого количества экспериментов для определения прочностных свойств металлических функциональных материалов

Если в качестве базового эксперимента, как и прежде, можно использовать 5-й эксперимент, то по методике, описанной выше (см. раздел 2.3), используем оставшиеся 6 экспериментов (все кроме 5-го) для определения минимального количества экспериментов, необходимых для прогнозирования значения твердости по Виккерсу [77].

В таблице 4.8 приведены значения твердости по Виккерсу и относительной погрешности вычислений для 5-го эксперимента при различном количестве исходных экспериментов (с учетом их возможных комбинаций) для этого случая. Чтобы определить необходимое число экспериментов для обеспечения приемлемой точности, проведем все возможные численные эксперименты для нахождения искомым эксплуатационных свойств базового образца. Начнем с одного эксперимента, потом выберем два эксперимента и т.д. При этом количество возможных расчетов для i экспериментов равно C_{n-1}^i , где $i = 1, 2, 3,$

... $n-1$. C_{n-1}^i – число сочетаний из $n-1$ по i , которое определяется обычной формулой сочетаний:

$$C_{n-1}^i = \frac{(n-1)!}{i!*(n-1-i)!}$$

Пусть, например, $n=7, i=2$. Тогда $C_6^2 = \frac{6!}{2!*4!} = 15$; $n=7, i=3$. Тогда $C_6^3 = \frac{6!}{3!*3!} = 20$ и

т.д. При каждом i получаем свою погрешность расчетов. Если определить необходимую точность как δ_{HV}^* то минимальное количество необходимых экспериментов i^* определится из условия (28).

Результаты вычислительных экспериментов сведем в таблицу 4.8.

Таблица 4.8 – Влияние количества экспериментов на погрешность оценки

Число экспериментов	Количество сочетаний	Твердость по Виккерсу HV_{30}	Относительная погрешность δ_{HV}^* , %
1	6	499.3	9.87
2	15	507.9	8.32
3	20	515.5	6.95
4	15	520.8	5.99
5	6	524.1	5.40
6	1	527.1	4.86

Как видно из табл. 4.8 относительная погрешность монотонно снижается при увеличении числа экспериментов, что качественно свидетельствует о применимости предложенного подхода. Принимая, как и в случае определения значимых характеристик, задаваемую погрешность δ_{HV}^* равной 5%, получаем, что для определения твердости по Виккерсу минимальным является количество экспериментов, равное 6.

Как следует из приведенных выше расчетов, предложенный подход позволяет оценить минимальное число экспериментов, необходимых для

прогнозирования эксплуатационных свойств металлических функциональных материалов с заданной точностью.

Хотелось бы отметить следующее. Как для задачи выбора основных параметров зёрненно-фазовой структуры, так и для задачи оценивания минимально допустимого количества экспериментов, необходимых для прогнозирования эксплуатационных свойств функциональных материалов, *все* характеристики микроструктуры оцениваемого (базового) образца должны лежать в пределах соответствующих характеристик из имеющейся базы экспериментов, используемой для нахождения прогнозируемой эксплуатационной макрохарактеристики. В этом случае мы находимся в рамках решения задачи *интерполяции*. Если же какая-либо исходная характеристики микроструктуры исследуемого образца находится вне заданных пределов, то задача становится задачей *экстраполяции* и точность прогнозирования эксплуатационных свойств функционального материала в этом случае значительно ухудшается.

4.5 Исследование стохастической устойчивости модели оценивания

Исследуем описанную модель получения комплексных оценок на устойчивость в стохастическом смысле.

В исследовании на стохастическую устойчивость примем значения допустимой при оценке погрешности ε равным 0,05. Рассматриваемую вероятность большого отклонения P^* равной 0,95.

В таблице 4.9 приведены результаты исследования на P -устойчивость оценок значений временного сопротивления и микротвердости образцов стали 80 на основании значений следующих параметров микроструктуры: доля феррита, доля ФКС, среднее межпластинчатое расстояние.

Таблица 4.9 – Анализ стохастической устойчивости оценки эксплуатационных характеристик стали 80. $\varepsilon = 0.05$, $P^* = 0.95$

Значение δ	P для временного сопротивления	P -устойчивость	P для микротвердости	P -устойчивость
0.025	0.98	Да	0.91	Нет
0.05	0.97	Да	0.90	Нет
0.20	0.948	Нет	0.81	Нет

На основе проведенного анализа можно сделать вывод, что оценка временного сопротивления стали 80 является стохастически устойчивой при малых значениях δ , в то время как оценка микротвердости не является стохастически устойчивой ни при одном из рассмотренных относительных отклонений параметров с заданной величиной вероятности P^* , однако может быть охарактеризована как стохастически устойчивая, если принять значение вероятности P^* равным 0,90.

В качестве другого примера рассмотрим применение предложенного алгоритма исследования стохастической устойчивости модели оценивания прочностных характеристик (микротвердости и временного сопротивления) для процесса получения термообработанной стали 50 при некотором случайном разбросе параметров ее зеренно-фазовой структуры, в качестве которых выступали: доля ФКС (перлита), доля Φ (феррита), доля Б (бейнита), доля М (мартенсита), межпластинчатое расстояние (МП), балл зерна (кроме М и Б), балл М, длина игл М.

Напомним, что применение алгоритма исследования стохастической устойчивости модели оценивания, рассмотренного в разделе 2.4 диссертации, приводит к необходимости решения двух взаимосвязанных задач: построения модели оценивания некоторых эксплуатационных свойств стали 50 по заданному набору числовых параметров, характеризующих ее зеренно-фазовую

структуру, а также исследования устойчивости полученных механических характеристик при некотором разбросе параметров их микроструктуры.

Первоначально рассмотрим задачу комплексного оценивания требуемых прочностных свойств металлических функциональных материалов (*микротвердости* и *временного сопротивления* материала) по заданному набору числовых параметров, характеризующих их зеренно-фазовую структуру. Для построения модели использовались экспериментальные данные, полученные в Институте наносталей МГТУ им. Г.И. Носова с помощью исследовательского комплекса GLEEBLE 3500.

Следует отметить, что не все приведенные выше параметры микроструктуры оказывают существенное влияние на исследуемые прочностные характеристики (*микротвердость* и *временное сопротивление* материала). Применяя описанную выше методику для определения значимых параметров микроструктуры, а также минимально возможного количества экспериментов, *существенно* влияющих на комплексное оценивание прочностных характеристик (микротвердости и временного сопротивления) по экспериментам Магнитогорского государственного технического университета им. Г.И. Носова для *стали 50*, было выявлено, что таких параметров – три (*доля ФКС, доля Φ и среднее межпластинчатое расстояние*), а количество экспериментов – восемь. Соответствующие данные приведены в табл. 4.10.

Таблица 4.10 – Данные экспериментов

№ эксп-та	доля ФКС, %	доля Φ , %	Среднее межпластинчатое расстояние, мкм	Временное сопротивление, МПа	Микротвердость, МПа
1	97	3	0,22	993	2227
2	93	7	0,18	980	2462
3	97	3	0,11	970	2500
4	93	7	0,125	975	2650
5	95	5	0,11	1010	2700
6	92	8	0,181	887	2613
7	100	0	0,179	895	2762
8	55	45	0,278	741	2154

Для каждого эксперимента, приведенного в табл. 4.10, построим отношение S^i между параметрами зёрненно-фазовой структуры и прочностными характеристиками функционального материала, которое определяется соотношением (20).

Носители нечеткого множества A^i (для любого эксперимента) состоят из элементов, соответствующих долям ФКС, Φ и межпластинчатому расстоянию (МП). Для стали 50 это:

$$\text{supp}(\Phi\text{КС}) = (0; 20; 40; 60; 80; 100), \%; \quad \text{supp}(\Phi) = (0; 20; 40; 60; 80; 100), \%; \\ \text{supp}(\text{МП}) = (0,085; 0,14; 0,18; 0,22; 0,34), \text{ мкм}.$$

Носители нечеткого множества B^i (для любого эксперимента):

- для микротвердости (МТ): $\text{supp}(\text{МТ}) = (2150; 2280; 2410; 2540; 2670; 2800)$, МПа;
- для временного сопротивления (ВС): $\text{supp}(\text{ВС}) = (740; 794; 848; 902; 956; 1010)$, МПа;

Напомним, что степень принадлежности любого элемента рассматриваемого нечеткого множества вычисляется следующим образом.

Находим интервал носителя рассматриваемого нечеткого множества, которому принадлежит этот элемент. Например, пусть значение ФКС (C_j) равно 65%. Тогда интервал значений составляет $[C_j^{\min}, C_j^{\max}]$ % (в нашем случае $[60, 80]$ %). Теперь значение функции принадлежности для C_j^{\min} определяется формулой: $\mu(C_j^{\min}) = 1 - |(C_j^{\min} - C_j) / (C_j^{\max} - C_j^{\min})|$, а функция принадлежности C_j^{\max} : $\mu(C_j^{\max}) = 1 - \mu(C_j^{\min})$. Для всех остальных элементов носителя этого нечеткого множества значения функций принадлежности будет равно 0.

Для рассматриваемого примера $\text{supp}(\Phi\text{КС}) = (0; 20; 40; 60; 80; 100)$, %; значение ФКС – 65%, получим: $(0/0; 0/20; 0/40; 0,75/60; 0,25/80; 0/100)$, %.

Теперь обобщенное отношение S для любого тестируемого образца между параметрами его зёрненно-фазовой структуры и параметрами,

характеризующими его эксплуатационные характеристиками определяться формулой (21).

В рассматриваемом примере эти соотношения для временного сопротивления и микротвердости стали примут вид, представленный на рис. 4.9:

$$\begin{array}{c}
 S_{BC} = \\
 \left(\begin{array}{cccccc}
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0,25 & 0,19 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0,75 & 0,19 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0,278 & 0,4 & 0,35 & 0,35 \\
 0 & 0 & 0,278 & 0,87 & 0,741 & 0,75 \\
 0 & 0 & 0,278 & 0,87 & 0,741 & 0,75 \\
 0 & 0 & 0,278 & 0,4 & 0,35 & 0,35 \\
 0,75 & 0,019 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0,25 & 0,019 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0,545 & 0,545 \\
 0 & 0 & 0,025 & 0,025 & 0,648 & 0,455 \\
 0 & 0 & 0,278 & 0,87 & 0,556 & 0,444 \\
 0,517 & 0,019 & 0,025 & 0,025 & 0,315 & 0,685 \\
 0,483 & 0,019 & 0 & 0 & 0 & 0
 \end{array} \right)
 \end{array}
 \quad
 \begin{array}{c}
 S_{MT} = \\
 \left(\begin{array}{cccccc}
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0,25 & 0,031 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0,75 & 0,031 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0,15 & 0,15 & 0,35 & 0,4 & 0,4 & 0,231 \\
 0,408 & 0,592 & 0,6 & 0,692 & 0,75 & 0,708 \\
 0,408 & 0,592 & 0,6 & 0,692 & 0,75 & 0,708 \\
 0,15 & 0,15 & 0,35 & 0,4 & 0,4 & 0,231 \\
 0,75 & 0,031 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0,25 & 0,031 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0,308 & 0,545 & 0,545 & 0,231 \\
 0 & 0 & 0,308 & 0,455 & 0,727 & 0,231 \\
 0 & 0 & 0,6 & 0,438 & 0,562 & 0,708 \\
 0,517 & 0,592 & 0 & 0,025 & 0,025 & 0 \\
 0,483 & 0,031 & 0 & 0 & 0 & 0
 \end{array} \right)
 \end{array}$$

Рисунок 4.9 – Матрицы отношений для временного сопротивления и микротвердости для термообработанной стали 50

Таким образом, получено соотношение для комплексного оценивания прочностных свойств (микротвердости и временного сопротивления) *стали 50* на основе её зёрненно-фазовых характеристик.

Теперь перейдем к исследованию стохастической устойчивости построенной комплексной модели оценивания.

Как уже отмечалось для *стали 50* основные микрохарактеристики, существенно влияющие на ее исследуемые прочностные свойства, это *доля ФКС, доля Ф и среднее межпластинчатое расстояние (MP)*.

Если ввести предположение о независимости этих характеристик, то для каждого эксперимента необходимо провести, по крайней мере, три исследования – на среднем уровне значения этой характеристики, на нижнем и

на верхнем уровнях. Другими словами, таких исследований должно быть: $3 \cdot 3 \cdot 3 = 27$. Однако, доля ФКС и доля Φ не являются независимыми переменными. Возможные отклонения микропараметров приведены в табл. 4.11. При этом нас устраивают только те варианты, в которых изменяется только одна из зависимых величин (ФКС или Φ). Подобный подход встречается в работе [http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=275738].

Таблица 4.11 – Анализ возможных отклонений

№ п/п	Отклонения параметров			Подходит
	ФКС	Φ	MP	
1	-	-	-	Нет
2	-	-	0	Нет
3	-	-	+	Нет
4	-	0	-	Да
5	-	0	0	Да
6	-	0	+	Да
7	-	+	-	Нет
8	-	+	0	Нет
9	-	+	+	Нет
10	0	-	-	Да
11	0	-	0	Да
12	0	-	+	Да
13	0	0	-	Да
14	0	0	0	Да
15	0	0	+	Да
16	0	+	-	Да
17	0	+	0	Да
18	0	+	+	Да
19	+	-	-	Нет
20	+	-	0	Нет
21	+	-	+	Нет
22	+	0	-	Да
23	+	0	0	Да
24	+	0	+	Да
25	+	+	-	Нет
26	+	+	0	Нет
27	+	+	+	Нет

Анализируя данные табл. 4.11, можно сделать вывод о том, что возможных исследований должно быть 15.

Если учесть, что количество необходимых экспериментов, как указано выше, 8, то общее количество экспериментов для определения исследуемой прочностной характеристики при всех возможных отклонениях параметров микроструктуры (N) равно $15 \cdot 8 = 120$.

Для оценки P -устойчивости исследуемых прочностных характеристик стали 50 будем считать, что $P^* = 95\%$.

Проведем вычисления прочностных характеристик функционального материала (*микротвердости* и *временного сопротивления*) при некотором возможном заданном разбросе параметров микроструктуры $\Delta.x\%$. В качестве $\Delta.x\%$ выберем 20%, 5% и 2.5%.

В качестве ε -окрестности исходных прочностных характеристик выберем 0,5% исходной прочностной характеристики для каждого эксперимента.

Примеры результатов вычислений при изменяемых значениях исходных данных для *микротвердости* приведены в табл. 4.12, а для *временного сопротивления* – в табл. 4.13.

Таблица 4.12 – Результаты оценок микротвердости при различных отклонениях

№	Не отклоненное значение микротвердости, МПа	Отклонения параметров			Полученное значение микротвердости, МПа, 5%	Полученное значение микротвердости, МПа, 2,5%	Полученное значение микротвердости, МПа, 20%	Δ , 20%	Δ , 5%	Δ , 2,5%	$\varepsilon = 0,5\%$	$\Delta \leq \varepsilon$			
		ФКС	Ф	МР											
...															
1	2500.611	+5%	0%	-5%	2500.611	2500.611	2510,8	-10,189	0	0	12,50306	+	+	+	
2	2506.045	2,5%	0%	-2,5%	2510.800	2510.800	2510,8	-4,755	-4,755	-4,755	12,53023	+	+	+	
3	2510.800	20%	0%	-20%	2510.800	2510.800	2510,8	0	0	0	12,554	+	+	+	
4	2504.862				2510.800	2510.800	2510,8	-5,938	-5,938	-5,938	12,52431	+	+	+	
5	2510.800				2510.800	2510.800	2510,8	0	0	0	12,554	+	+	+	
6	2503.224				2510.800	2509.300	2510,8	-7,576	-7,576	-6,076	12,51612	+	+	+	
7	2510.800				2510.800	2510.800	2510,8	0	0	0	12,554	+	+	+	
8	2218.291				2221.644	2220.891	2388,54	-	-	-		-	+	+	
								170,249	-3,353	-2,6	11,09146				
...															

Таблица 4.13 – Результат оценок временного сопротивления при различных отклонениях

№	Экспериментальное значение временного сопротивления, МПа	Отклонения параметров			Полученное значение временного сопротивления, МПа, 5%	Полученное значение временного сопротивления, МПа, 2,5%	Полученное значение временного сопротивления, МПа, 20%	Δ , 20%	Δ , 5%	Δ , 2,5%	$\varepsilon = 0,5\%$	$\Delta \leq \varepsilon$			
		ФКС	Ф	МР											
...															
1	908.437	0%	+5%	-5%	908.452	908.445	942.168	-33,731	-0,015	-0,008	4,542185	-	+	+	
2	938.885	0%	2,5%	-2,5%	939.737	938.567	941.618	-2,733	-0,852	0,318	4,694425	+	+	+	
3	942.481	0%	0%	-20%	942.597	942.539	942.950	-0,469	-0,116	-0,058	4,712405	+	+	+	
4	942.534				942.209	942.416	941.132	1,402	0,325	0,118	4,71267	+	+	+	
5	944.088				943.953	944.029	943.383	0,705	0,135	0,059	4,72044	+	+	+	
6	933.840				937.305	936.611	940.740	-6,9	-3,465	-2,771	4,6692	-	+	+	
7	942.168				942.168	942.168	942.168	0	0	0	4,71084	+	+	+	
8	870.455				889.108	879.791	904.492		-			-	-	-	
...								-34,037	18,653	-9,336	4,352275				

Для оценки P -устойчивости прочностных свойств необходимо вычислить количество экспериментов (M), при которых эта характеристика будет устойчива.

Результаты вычислений приведены в табл. 4.14.

Таблица 4.14 – Оценка стохастической устойчивости макросвойств

Δ , x%	M	$P=M/N$, %	P -устойчивость
<i>Микротвердость, ($P^* = 95\%$)</i>			
2,5	120	100	+
5	106	88	-
20	82	68,3	-
<i>Временное сопротивление, ($P^* = 95\%$)</i>			
2,5	95	79,17	-
5	89	74,17	-
20	65	54,17	-

Таким образом, в исследуемых случаях ($P^* = 95\%$) P -устойчивой будет наблюдаться только для микротвердости при $\Delta = 2,5\%$.

Если нас интересует P -устойчивость микротвердости и временного сопротивления одновременно, то необходимо использовать соотношение (34).

Так, например, при $P^* = 95\%$ и $\Delta = 5\%$ получим:

$P = 0,88 \cdot 0,7417 = 0,6527$ (65,27%). Другими словами, комплекс прочностных свойств исследуемой стали, включающий *микротвердость* и *временное сопротивление* для заданного разброса исходных параметров зерно-фазовой структуры ($\Delta = 5\%$) при $P^* = 95\%$ является P -неустойчивым.

Можно трактовать полученные результаты еще одним образом. Если принять вычисленное значение P за P^* (т.е. $P^* = P$), то в этом случае относительно нового значения P^* соответствующее значение исследуемой прочностной характеристике при заданном разбросе исходных микрохарактеристик является P -устойчивым. Например, *микротвердость* при $\Delta = 20\%$ и $P^* = 68,3\%$ будет P -устойчивой.

4.6 Внедрение результатов диссертации

Предложенные модели и алгоритмы внедрены в производственную и исследовательскую практику предприятия ООО «Research and Development MGTU», занимающегося распространением инновационных решений в промышленности, что подтверждено актом внедрения, представленным в приложении 2.

Были внедрены следующие результаты:

1. Модель комплексного оценивания прочностных свойств упрочненных сталей на основе теории нечетких множеств и системного анализа зеренно-фазовой структуры в составе программы для ЭВМ «Нечеткий определитель комплексных свойств материалов (НОКСМ)»
2. Методика определения минимально допустимого числа экспериментов и значимых параметров зеренно-фазовой структуры при проведении оценки прочностных свойств металлических материалов
3. Алгоритм определения размеров представительного изображения микроструктуры при оценке прочностных свойств металлов и сплавов.

В результате внедрения модели и алгоритма были оптимизированы затраты предприятия за счет автоматизации трудоемких работ при создании новых функциональных материалов с заданными механическими характеристиками.

Разработанная методика оценивания минимально допустимого числа экспериментов и значимых параметров зеренно-фазовой структуры, существенно влияющих на прочностные свойства проектируемых функциональных материалов, позволяет снижать затраты за счет обоснованного снижения числа экспериментов. Например, при создании арматурной стали с заданным набором прочностных свойств в диссертации показано, что количество необходимых экспериментов при различных режимах термообработки можно снизить примерно на 13% без значительного снижения точности оценивания требуемых прочностных характеристик материала.

Таким образом, за счет обоснованного снижения количества необходимых экспериментов и уменьшения времени на обработку их результатов при проведении комплексной оценки прочностных свойств на этапе проектирования функциональных металлических материалов снижение общих затрат при их создании составляет примерно 7 % в год.

Также результаты диссертационной работы внедрены в научно-образовательный процесс Пермского национального исследовательского политехнического университета при реализации программ бакалавриата и магистратуры по направлению подготовки «Информационные системы и технологии», что подтверждается актом внедрения, приведенного в приложении 3. Внедрены следующие результаты:

- интеллектуальная технология компьютерной идентификации параметров микроструктуры кристаллических материалов, основанная на машинном распознавании объектов на цифровых фотографиях микрошлифов;
- комплекс математических моделей и алгоритмов комплексного оценивания эксплуатационных характеристик металлических материалов на основе компьютерного анализа их микроструктуры;

- программный модуль для ЭВМ «Нечеткий определитель комплексных свойств материалов (НОКСМ)»: Свидетельство о государственной регистрации № 2018661275 от 04.09.2018, Бюл. № 9 / С.Е.Батин и др. (РФ)

В акте внедрения указывается, что результаты используются при чтении дисциплин «Специальные главы математики» и «Методы исследования и моделирования информационных процессов и технологий» магистратуры, «Интеллектуальные информационные системы и технологии» бакалавриата, а также при выполнении курсовых работ и дипломного проектирования.

Отмечается, что использование результатов диссертации Батина С.Е. существенно дополнило теоретическую и учебно-методическую базу образовательных программ, реализуемых на кафедре «Вычислительная математика, механика и биомеханика» Пермского национального исследовательского политехнического университета, что оказало положительное влияние на качество образовательного процесса.

4.7 Выводы по главе

По результатам 4-ой главы, посвященной демонстрации возможностей разработанных моделей и алгоритмов при проектировании функциональных металлических материалов с заданным комплексом прочностных свойств на примере создания арматурной стали, можно сделать следующие выводы.

1. Приведен пример обработки исходной информации на основе компьютерного анализа зеренно-фазовой структуры исследуемого материала. Показано, что с помощью методов машинного распознавания объектов на цифровых фотографиях микрошлифов можно получить численные значения параметров зеренно-фазовой структуры исследуемого металлического материала, которые в дальнейшем можно использовать для оценивания его прочностных свойств. При этом на основе предложенного алгоритма была проведена оценки представительности цифровых изображений и показано, что исходные изображения микроструктуры удовлетворяют необходимым

требованиям и могут быть использованы при прогнозировании макросвойств исследуемой стали.

2. Приведен демонстрационный пример применения разработанной модели комплексного оценивания прочностных свойств арматурной стали на основе анализа параметров ее зеренно-фазовой структуры. Показано представление микроструктурных характеристик и макросвойств исследуемого материала в виде нечетких множеств и представлены результаты оценивания прочностных свойств путем установления множественных отношений между заданным комплексом прочностных свойств и параметрами фазового состояния и зёрненной структуры, вычисляемыми по фотографии микрошлифа исследуемого материала. Исследована точность оценивания прочностных свойств путем сопоставления расчетных и экспериментальных данных и показано достаточно хорошее их совпадение.

3. Продемонстрировано применение методики выявления значимых параметров микроструктуры, существенно влияющих на прогнозируемые прочностные свойства исследуемого материала. Показано, что параметром зеренно-фазовой структуры, характеризующим степень вариации размеров зерна, при оценивании прочностных свойств арматурной стали можно пренебречь из-за его малого влияния на прогнозируемый результат.

4. Приведен пример оценки минимально допустимого количества экспериментов при проведении исследований режимов термообработки, обеспечивающего заданную точность оценивания прочностных свойств арматурной стали. Показано, что для этого достаточно проведение 6 экспериментов, что примерно на 13% меньше количества проведенных испытаний на практике.

5. Проведено исследование устойчивости разработанной модели оценивания в стохастическом смысле. Показано, что при заданных значениях вероятности разброса значений параметров зеренно-фазовой структуры исследуемого материала модель будет стохастически устойчива с вероятностью

не менее 0.9, т.е. все прогнозируемые значения прочностных свойств будут находиться в необходимых пределах по точности.

б. Приведено описание внедрения результатов диссертации в практику проектирования новых функциональных металлических материалов и реализацию образовательных программ подготовки студентов по направлению подготовки «Информационные системы и технологии» ПНИПУ, что подтверждается соответствующими актами внедрения.

Показано, что за счет обоснованного снижения количества необходимых экспериментов и уменьшения времени на обработку их результатов при проведении комплексной оценки прочностных свойств на этапе проектирования функциональных металлических материалов снижение общих затрат при их создании составляет примерно 7 % в год. Кроме этого, отмечается, что использование результатов диссертации существенно дополнило теоретическую и учебно-методическую базу образовательных программ, реализуемых на кафедре «Вычислительная математика, механика и биомеханика» Пермского национального исследовательского политехнического университета, что оказало положительное влияние на качество образовательного процесса.

Заключение

1. Выполнен анализ современных подходов к определению свойств функциональных металлических материалов (ФММ) на основе данных о его микроструктуре. Выявлены основные зависимости между характеристиками микроструктуры и значениями физико-механических макроскопических свойств материалов, отмеченные в литературе. На основе проведенного системного анализа выбран набор характеристик микроструктуры, необходимый для комплексной оценки требуемых прочностных свойств. Разработана модель комплексного оценивания свойств ФММ на основе системного анализа его микроструктуры, позволяющая на основе аппарата теории нечетких множеств выявлять системные связи между характеристиками микроструктуры и макросвойствами исследуемого материала.

2. Разработан алгоритм определения размеров представительного изображения микроструктуры материала, выполнена оценка размеров представительного изображения для исследуемого класса ФММ. Разработанный алгоритм позволил оценить представительность фотографий микрошлифов различных увеличений, принадлежащего к заданному классу материалов; сделан вывод о представительности микрошлифов сталей, полученных с увеличением $\times 250$. Показано, что для исследуемой группы сталей представительным можно считать размер фотографии микрошлифа, превосходящий средний радиус зерна в объемной структуре в 42 раза, где под средним радиусом зерна понимается радиус шара с объемом, равным среднему объему зерен в трехмерной структуре.

3. Разработана методика определения значимых характеристик микроструктуры и минимально допустимого количества экспериментов при определении эксплуатационных свойств исследуемого материала. Разработанная методика позволяет сократить количество натуральных экспериментов при проектировании новых ФММ. Показано, что, например, при создании технологии получения арматурной стали путем термообработки для

оценки набора прочностных свойств с заданной точностью достаточно измерять 6 существенных параметров микроструктуры и провести не менее 6 экспериментов для различных скоростей охлаждения стали при закалке.

4. Разработанная модель комплексного оценивания свойств ФММ и предложенные алгоритмы легли в основу математического обеспечения программы для ЭВМ «НОКСМ», внедрение которой в производственную и исследовательскую практику ООО «Research and Development MGTU» позволило сократить затраты на разработку новых материалов на 7% за счет обоснованного уменьшения числа экспериментов, примерно на 13%, что подтверждается соответствующим актом внедрения.

Также результаты диссертации внедрены в практику реализации образовательных программ подготовки студентов по направлению «Информационные системы и технологии» ПНИПУ, что подтверждается соответствующим актом внедрения. Отмечается, что использование результатов диссертации существенно дополнило теоретическую и учебно-методическую базу образовательных программ, реализуемых на кафедре «Вычислительная математика, механика и биомеханика» Пермского национального исследовательского политехнического университета, что оказало положительное влияние на качество образовательного процесса.

Библиографический список

1. Металловедение и термообработка стали: Справ. изд. В 3-х томах./ Под редакцией Бернштейна М.Л., Рахштада А.Г. – М.: Металлургия. – 1991.
2. Яковлев А.В. Методы, модели и алгоритмы формирования и анализа изображений в системе контроля качества материалов и продукции машиностроительного предприятия: Дис. ... канд. технич. наук, Владимир, 2003.
3. Гуляев А.П. Металловедение: Учебник для вузов. 6-е изд., перераб. И доп. — М.: Металлургия, 1986. - 544 с.
4. Столбов В.Ю., Федосеев С.А. Выборочный контроль качества металлических функциональных материалов на основе когнитивного анализа фотографий микрошлифов // Вестник Южно-уральского государственного университета. Серия: компьютерные технологии, управление, радиоэлектроника. 2018. Vol. 18, № 4. P. 127–137.
5. Шарыбин С.И. Автоматизация контроля качества функциональных материалов на основе средств интеллектуальной поддержки принятия решений: Дис. ... канд. технич. наук, Пермь, 2015.
6. Батин С.Е., Гитман М.Б., Столбов В.Ю. Двухуровневая модель оценивания эксплуатационных характеристик функционального материала // Материалы конференции «Новые технологии в научных исследованиях, проектировании, управлении, производстве». – Изд-во ВГТУ. – 2017. – С. 25–30.
7. Ооцука К. Сплавы с эффектом памяти формы : пер. с япон. / К. Ооцука, К. Симидзу, Ю. Судзуки [и др.]. М. : Металлургия, 1990. 224 с.
8. Stolbov V. Yu., Gitman M. B., Bartolomey M. L., Nadymov A. N. Recovery of strength properties of pump rods by means of functional gradient materials generating // IOP Conf. Series: Earth and Environmental Science 87 (2017) 092012 doi :10.1088/1755-1315/87.
9. Кузнецов П.А., Зисман А.А., Петров С.Н., Гончаров И.С. Структура и

механические свойства аустенитной стали 316L, полученной методом селективного лазерного сплавления // Деформация и разрушение материалов. – 2016. – № 4. – С. 9-13.

10. Гитман М.Б., Скрябин В.Л., Сотин А.В., Столбов В.Ю., Батин С.Е. Методика комплексного оценивания эксплуатационной долговечности функционального материала при эндопротезировании тазобедренного сустава. Сообщение 1. // Российский журнал биомеханики. – 2017.
11. Ключев А.В., Гитман М.Б., Столбов В.Ю. Об одном подходе к решению задачи дискриминантного анализа микроструктур функциональных материалов по комплексу физико-механических характеристик // Прикладная математика и вопросы управления. 2016. №4. стр. 63-88.
12. Богодухов С.И., Бондаренко Е.В., Проскурин А.Д. и др. Материаловедение и технологические процессы машиностроительного производства: лабораторный практикум. Оренбургский государственный университет, Оренбург, ГОУ ОГУ, 2004 – 409с.
13. Козлов Э.В., Конева Н.А., Попова Н.А. Зеренная структура, геометрически необходимые дислокации и частицы вторых фаз в поликристаллах микро- и мезоуровня // Физическая мезомеханика. 2009. 12(4). С. 93-106.
14. ГОСТ 5640-68 Сталь. Металлографический метод оценки микроструктуры листов и ленты.
15. ГОСТ 1435-99 Прутки, полосы и мотки из инструментальной нелегированной стали.
16. Потапов А.С. Автоматический анализ изображений и распознавание образов на основе принципа репрезентационной минимальной длины описания: Дис. ... канд. технич. наук, Санкт-Петербург, 2008.
17. Аристов Г.В., Ключев А.В. Распознавание и классификация микроструктуры металлов и сплавов с использованием глубоких нейронных сетей // Труды 27-ой Международной конференции по компьютерной графике и машинному зрению (GraphiCon-2017). Пермь,

2017. C. 180-183.
18. Bouaziz O. et al. High manganese austenitic twinning induced plasticity steels: A review of the microstructure properties relationships // *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.* Elsevier Ltd, 2011. Vol. 15, № 4. P. 141–168.
 19. Arlazarov A. et al. Evolution of microstructure and mechanical properties of medium Mn steels during double annealing // *Mater. Sci. Eng. A.* Elsevier B.V., 2012. Vol. 542. P. 31–39.
 20. Zhu R. et al. Multi-phase microstructure design of a low-alloy TRIP-assisted steel through a combined computational and experimental methodology // *Acta Mater.* 2012. Vol. 60, № 6–7. P. 3022–3033.
 21. Baron C., Springer H., Raabe D. Combinatorial screening of the microstructure–property relationships for Fe–B–X stiff, light, strong and ductile steels // *Mater. Des.* Elsevier Ltd, 2016. Vol. 112. P. 131–139.
 22. Morawiec M. et al. Effect of dual beam laser welding on microstructure–property relationships of hot-rolled complex phase steel sheets // *Arch. Civ. Mech. Eng.* 2017. Vol. 17, № 1. P. 145–153.
 23. Kim C.S. Variation of mechanical characteristics and microstructural evolution in aisi 316 austenitic stainless steel subjected to long-term thermal aging at elevated temperature // *Strength Mater.* 2017. Vol. 49, № 2. P. 263–271.
 24. Tao X. et al. Microstructure evolution and mechanical properties of X12CrMoWVNbN10-1-1 steel during quenching and tempering process // *J. Mater. Res. Technol.* Korea Institute of Oriental Medicine, 2016. Vol. 5, № 1. P. 45–57.
 25. Cui J. et al. Microstructure distribution and mechanical properties prediction of boron alloy during hot forming using FE simulation // *Mater. Sci. Eng. A.* Elsevier B.V., 2012. Vol. 535. P. 241–251.
 26. Волчук В.Н. Применение результатов вейвлетно-мультифрактального анализа структуры металла для прогноза его качества. // *Вісник Придніпровської державної академії будівництва та архітектури.* – № 10(211). – 2015. – С. 16-20.

27. Галимов Э.Р., Маминов А.С., Беляев А.В. Определение механических свойств сварных соединений методом мультифрактального анализа. // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Наука и образование. – №3. – 2010. – С. 131-134.
28. Cai X., Liu C., Liu Z. Process design and prediction of mechanical properties of dual phase steels with prepositional ultra fast cooling // Mater. Des. Elsevier Ltd, 2014. Vol. 53. P. 998–1004.
29. Čiripová L. et al. Prediction of mechanical properties of Fe-Cr-Mo sintered steel in relationship with microstructure // Mater. Des. 2012. Vol. 35. P. 619–625.
30. Shabani M.O., Mazahery A. Prediction of mechanical properties of cast A356 alloy as a function of microstructure and cooling rate // Arch. Metall. Mater. 2011. Vol. 56, № 3. P. 671–675.
31. Šimek D. et al. Prediction of mechanical properties of carbon steels after hot and cold forming by means of fast microstructure analysis // Steel Res. Int. 2014. Vol. 85, № 9. P. 1369–1378.
32. Makowska K., Piotrowski L., Kowalewski Z.L. Prediction of the Mechanical Properties of P91 Steel by Means of Magneto-acoustic Emission and Acoustic Birefringence // J. Nondestruct. Eval. Springer US, 2017. Vol. 36, № 2. P. 1–10.
33. Большаков В.И., Дубров Ю.И., Касьян О.С. Микроструктура стали как определяющий параметр при прогнозе ее механических характеристик. // Доп. НАН України. – № 6. – 2010. – С. 89–96.
34. Bong H.J. et al. An RVE procedure for micromechanical prediction of mechanical behavior of dual-phase steel // Mater. Sci. Eng. A. Elsevier B.V., 2017. Vol. 695, № April. P. 101–111.
35. Trusov P. V., Sharifullina E.R., Shveykin A.I. Multilevel Model for the Description of Plastic and Superplastic Deformation of Polycrystalline Materials // Phys. Mesomech. 2019. Vol. 22, № 5. P. 402–419.
36. Yu W. et al. Prediction of the mechanical properties of the post-forged Ti-6Al-4V alloy using fuzzy neural network // Mater. Des. Elsevier Ltd, 2010. Vol. 31,

- № 7. P. 3282–3288.
37. Sagai Francis Britto A., Raj R.E., Mabel M.C. Prediction of shear and tensile strength of the diffusion bonded AA5083 and AA7075 aluminium alloy using ANN // Mater. Sci. Eng. A. Elsevier B.V., 2017. Vol. 692, № March. P. 1–8.
 38. Bondarchuk O.V., Lobach A.S., Baskakov S.A., Kazakov V.A., Gusev A.L. Synthesis and characterization of grafen-based materials produced via thermal exfoliation of graphene oxide and CLF Intercalated graphite // International Journal of Hydrogen Energy. 2014 № 19 (159). С. 14-27.
 39. Шульга Ю.М. et al. Сравнительное исследование графеновых материалов, образующихся при термической эксфолиации оксида графита и графита, интеркалированного трифторидом хлора // Химия высоких энергий. 2013. Vol. 47, № 6. P. 481.
 40. Desu R.K. et al. Mechanical properties of Austenitic Stainless Steel 304L and 316L at elevated temperatures // J. Mater. Res. Technol. Korea Institute of Oriental Medicine, 2016. Vol. 5, № 1. P. 13–20.
 41. Moody M.P. et al. Atomically resolved tomography to directly inform simulations for structure-property relationships // Nat. Commun. 2014. Vol. 5. P. 1–10.
 42. Современные проблемы принятия решений группами субъектов с пересекающимися интересами // А.Ю. Букалова, А.Н. Данилов, В.А. Харитонов, Д.И. Иванов // Статистика. Моделирование. Оптимизация: сб. тр. всерос. конф. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2011.- С. 262–267.
 43. Белых А.А. Методология прогнозирования и оценки эффективности информационных систем: дис ... д-ра техн. наук: 05.13.01. Пермь, 2012. – 390с.
 44. Интеллектуальные технологии обоснования инновационных решений: Монография / В.А. Харитонов [и др.]; под науч. ред. В.А. Харитонova. Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та. 2010. – 363 с.
 45. Системы конструирования матриц свертки в экспертных задачах комплексного оценивания / А.А. Белых, М.Р. Камалетдинов, М.В. Лыков,

- Е.В. Мишкина // Вестник «УГТУ-УПИ»: Строительство и образование: сб. науч. трудов. – Екатеринбург: ГО ВПО УГТУ-УПИ. 2006.
46. Сибикина И.В. Процедура оценки компетентности студентов вуза, обучающихся по направлению «информационная безопасность» // Вестник АГТУ. Сер.: Управление, вычислительная техника и информатика. – 2011. – № 1. – С. 200–205.
 47. Потапов А.С. Распознавание образов и машинное восприятие: общий подход на основе принципа минимальной длины описания. СПб.: Политехника. 2007. 548 с.
 48. Vladimir N. Vapnik. An Overview of Statistical Learning Theory. //IEEE Transactions on Neural Networks, 10(5). 1999. P. 988–999.
 49. Дж.-О. Ким, Ч. У. Мьюллер, У. Р. Клекка, М. С. Олдендерфер, Р. К. Блэшфилд Факторный, дискриминантный и кластерный анализ. М.: Финансы и статистика. 1989. 216 с.
 50. Мерков А.Б. Распознавание образов. Введение в методы статистического обучения. М.: Едиториал УРСС. 2011. 256 с.
 51. J. Mercer. Functions of positive and negative type and their connection with the theory of integral equations. //Philos. Trans. Roy. Soc. London, A, 209, 1909. P. 415–446.
 52. Вапник В.Н., Червоненкис А.Я. Теория распознавания образов. М.: Наука, 1974. 416 с.
 53. Michael Weinmann, Juergen Gall, Reinhard Klein Material Classification based on Training Data Synthesized Using a BTF Database // Proceedings of Computer Vision - ECCV 2014 - 13th European Conference, 2014, Part III, pp. 156-171.
 54. Victor Hugo C De Albuquerque, João Manuel RS Tavares, Luís MP Durão, Evaluation of delamination damage on composite plates using an artificial neural network for the radiographic image analysis // Journal of Composite Materials, 2010, 44(9), pp. 1139-1159.
 55. M. Varma, A. Zisserman. A statistical approach to material classification using

- image patch exemplars //IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, Vol.31, N 11, 2009, pp. 2032–2047.
56. Ishrat Badami, Michael Weinmann, Reinhard Klein Material Recognition: Bayesian Inference or SVMs? // Proc. Semin. Comput. Graph. (CESCG) 2012, pp. 133–140.
 57. Wenbin Li, Mario Fritz Learning Multi-Scale Representations for Material Classification // German Conference on Pattern Recognition, 2014, pp. 757-764.
 58. Hongbin Jia, Yi Lu Murphey, Jianjun Shi, Tzyy-Shuh Chang An Intelligent Real-time Vision System for Surface Defect Detection // Proceedings of the Pattern Recognition, 17th International Conference on (ICPR'04), 2004, Volume 3, pp. 239-242.
 59. Батин С.Е., Бояршинов Д.А., Гитман М.Б. Мера близости для специальных нечетких множеств // Материалы конференции «Прикладная математика, механика и процессы управления». – Пермь: Изд-во ПНИПУ. 2016. – С. 67–69.
 60. Батин С.Е., Гитман М.Б. Комплексное оценивание прочностных свойств функциональных материалов на основе анализа параметров зёрненно-фазовой структуры // Материалы конференции «Управление большими системами. УБС-2017». – Пермь: Изд-во ПНИПУ. 2017. – С. 496–5.
 61. Алексеев В.М., Тихомиров В.М., Фомин С.В. Оптимальное управление. – М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы. 1979.– 342 с.
 62. David M. Himmelblau. Applied nonlinear programming. – McGraw-Hill in New York. 1972. – 498p.
 63. Микроструктура и свойства низкоуглеродистой свариваемой стали после термомеханического упрочнения / В.М. Счастливец, Т.И. Табатчикова, И.Л. Яковлева, С.Ю. Ключева, А.А. Круглова, Е.И. Хлусова, В.В. Орлов // Физика металлов и металловедение. 2012. Т. 113.
 64. Потапов А.А., Гуляев Ю.В., Никитов С.А., Пахомов А.А., Герман В.А. Новейшие методы обработки изображений. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008.–

496 с.

65. ГОСТ 5639-82 Стали и сплавы. Методы выявления и определения величины зерна.
66. ГОСТ 8233-56 Сталь. Эталоны микроструктуры.
67. ГОСТ 3443-87 Отливки из чугуна с различной формой графита. Методы определения структуры.
68. ГОСТ 9391-80 Сплавы твердые спеченные. Методы определения пористости и микроструктуры.
69. ГОСТР ИСО 4967-2009 Сталь. Определение содержания неметаллических включений. Металлографический метод с использованием эталонных шкал.
70. ГОСТ 1778-70 Сталь. Металлографические методы определения неметаллических включений.
71. Рыбин В.В. Большая пластическая деформация и разрушение металлов. – М.: Металлургия, 1986. – 224 с.
72. Мартюшев Н.В. Программные средства для автоматического металлографического анализа // Современные проблемы науки и образования. – 2012. – № 5. – С. 1-6.
73. Шарыбин С. И., Столбов В. Ю., Гитман М. Б., Барышников М. П. Разработка интеллектуальной системы распознавания сложных микроструктур на шлифах металлов и сплавов // Нейрокомпьютеры: разработка, применение. 2014. №12. С. 50-56.
74. Кофман А. Введение в теорию нечетких множеств: Пер. с франц. – М.: Радио и связь, 1982. – 432 с.
75. Zadeh L. From computing with numbers to computing with words — from manipulation of measurements to manipulation of perceptions // Int. J. Appl. Math Comput. Sci. 2002. Vol. 12, № 3. P. 307–324.
76. Zadeh L. Fuzzy Sets // Information and Control. 1965. Vol.8. M. pp. 338-353.
77. Gitman I.M. et al. Methodology to estimate the minimum number of experiments and key microstructural parameters in macroscopic strength

- properties evaluation // ZAMM Zeitschrift fur Angew. Math. und Mech. 2019. Vol. 99, № 3. P. 1–9.
78. Белоусов А. И., Ткачев С. Б. Дискретная математика. – М.: МГТУ, 2006.– 744 с.
 79. Ляпунов А. М. Общая задача устойчивости движения.– М. : ГИТТЛ, 1950.– 472 с.
 80. Патент на изобретение. Способ определения параметров термомеханической обработки и химического состава функциональных материалов с помощью глубокой нейронной сети / Ключев А.В., Столбов В.Ю., Гитман М.Б., Клестов Р.А., Батин С.Е. патентообладатель Пермский национальный исследовательский политехнический университет. – № 2 704 751 Дата подачи заявки: 30.10.2018. Опубликовано: 30.10.2019. Бюл. №.31.
 81. Ключев А.В., Столбов В.Ю., Копцева Н.В., Ефимова Ю.Ю. Оценка механических характеристик упрочненных сталей на основе нейросетевого анализа цифровых изображений микроструктур // Черные металлы, 2020. №. 6. С.50-56.
 82. Zhou J. et al. Realistic microstructural RVE-based simulations of stress-strain behavior of a dual-phase steel having high martensite volume fraction // Mater. Sci. Eng. A. Elsevier, 2015. Vol. 630. P. 107–115.
 83. Rieger F., Böhlke T. Microstructure based prediction and homogenization of the strain hardening behavior of dual-phase steel // Arch. Appl. Mech. Springer Berlin Heidelberg, 2015. Vol. 85, № 9–10. P. 1439–1458.
 84. Simonovski I., Cizelj L. Representative Volume Element Size of a Polycrystalline Aggregate with Embedded Short Crack // Internal Conference: Nuclear Energy for New Europe 2007. 2007. P. 1–8.
 85. В. П. Багмутов, А. С. Столярчук, А. В. Коробов Методика определения представительного объема в поликристаллических конструкционных материалах// Известия ВолгГТУ. – 2013. – С. 71–74.
 86. Gitman I.M., Gitman M.B., Askes H. Quantification of stochastically stable

- representative volumes for random heterogeneous materials // Arch. Appl. Mech. 2006. Vol. 75, № 2–3. P. 79–92.
87. Adaskin A.M. et al. Determination of the hollomon parameter for a chromium-base refractory alloy with the aim of predicting its properties // Met. Sci. Heat Treat. 2016. Vol. 57, № 9–10. P. 610–613.
88. Прусов Е.С. Компьютерная томография для задач трехмерного материаловедения. // Фундаментальные исследования. № 5-2. – 2015. – С. 318-323.
89. Groeber M. et al. A framework for automated analysis and simulation of 3D polycrystalline microstructures. Part 1: Statistical characterization // Acta Mater. 2008. Vol. 56, № 6. P. 1257–1273.
90. А.Д. Дрозин, Н.М. Япарова Метод обработки информации, получаемой при обследовании микрошлифа готовой стали в случае нерепрезентативных данных // Вестник ЮУрГУ. Серия «Вычислительная математика и информатика». – 2017. – С. 20–27.
91. Металлография железа. Т.1,2 (с атласом микрофотографий). – М.: Металлургия, 1972. – 440 с.
92. Батин С.Е. Определение размеров представительного изображения для оценки структурных характеристик материала // Прикладная математика и вопросы управления/Applied Mathematics and Control Sciences. – 2019. – №3. – С.103–115.
93. Groeber M. et al. A framework for automated analysis and simulation of 3D polycrystalline microstructures. Part 2: Synthetic structure generation // Acta Mater. 2008. Vol. 56, № 6. P. 1274–1287.
94. Stroeve P., Stroeve M. Assessment of packing characteristics by computer simulation // Cem. Concr. Res. 1999. Vol. 29, № 8. P. 1201–1206.
95. Стоян Ю.Г., Сёмкин В.В., Чугай А.М. Моделирование плотной упаковки 3D объектов// Кибернетика и системный анализ, том 52 № 2. – 2016. – с. 137–146.
96. A. Brahme et al. 3D reconstruction of microstructure in a commercial purity

- aluminum// Scripta Materialia 55. – 2006. – pp 75–80.
97. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике (для научных работников и инженеров). – 4-е изд. – М.: «Наука» глав. ред. физ.-мат. лит, 1977.
 98. Bartolomey M. et al. Influence of microdamage structure on fatigue resistance of metal functional material. 2018. Vol. 157, № Aime. P. 76–80.
 99. Батин С.Е., Бартоломей М.Л., Бояршинов Д.А., Гитман М.Б. Анализ влияния структуры микроповрежденности на усталостную прочность металлического функционального материала // Материалы конференции «Перспективные материалы конструкционного и медицинского назначения». – Томск: Изд-во ТПУ. 2018. – С. 34–35.
 100. Shuravin A.P., Vologdin S. V. Filtering Input Data of Neural Network Using Digital Signal Processing Technology // Bull. Kalashnikov ISTU. 2017. Vol. 20, № 4. P. 104.
 101. Копцева Н.В., Ефимова Ю.Ю., Никитенко О.А. Атлас микроструктур: учебное пособие. – Магнитогорск: Магнитогорский Дом печати. – 2015. – 108 с.
 102. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2018661275. Российская Федерация. Нечеткий определитель комплексных свойств материалов (НОКСМ) / М.Л. Бартоломей, С.Е. Батин, Д.А. Бояршинов, М.Б. Гитман; правообладатель Пермский национальный исследовательский политехнический университет. — № 2018618635; поступл. 13.08.2018; опубл. 04.09.2018, Бюл. № 9.

Приложение 1

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2018661275

**Нечеткий определитель комплексных свойств материалов
(НОКСМ)**

Правообладатель: *Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Пермский национальный исследовательский политехнический университет» (RU)*

Авторы: *Бартоломей Мария Леонидовна (RU), Батин Сергей Евгеньевич (RU), Бояришов Дмитрий Альбертович (RU), Гитман Михаил Борисович (RU)*

Заявка № 2018618635

Дата поступления 13 августа 2018 г.

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ 04 сентября 2018 г.



Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности

Г.П. Ивлиев Г.П. Ивлиев

Приложение 2



Россия, Магнитогорск, ул. Ленинградская 79, корп. 6, 1 эт., оф. 1
т. +7 (3519) 33 01 51 mail@rmd-mgn.ru р/с 40502810838070000001 в Филиал
"ЕКАТЕРИНБУРГСКИЙ" АО "АЛЬФА-БАНК"БИК 046577964ИНН
7456039409 КПП 745601001 к/с 30101810100000000964

АКТ

внедрения результатов научно-исследовательских работ по комплексному оцениванию прочностных свойств металлических материалов на основе системного анализа зеренно-фазовой структуры

г. Магнитогорск

20 ноября 2019 г.

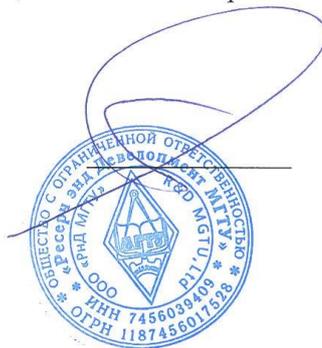
В период с 01.03.2019 по 20.11.2019 в ООО «Ресерч энд девелопмент МГТУ» были апробированы и внедрены модели и алгоритмы комплексного оценивания прочностных свойств металлических материалов на основе системного анализа зеренно-фазовой структуры, разработанные аспирантом кафедры «Вычислительная математика, механика и биомеханика» ФГАОУ ВО «Пермский национальный исследовательский политехнический университет (ПНИПУ)» Батыным С.Е. при выполнении диссертационной работы, в том числе:

1. Модель комплексного оценивания прочностных свойств упрочненных сталей на основе теории нечетких множеств и системного анализа зеренно-фазовой структуры
2. Методика определения минимального числа экспериментов и значимых параметров при проведении оценки прочностных свойств металлических материалов
3. Алгоритм определения размеров представительного изображения микроструктуры при оценке прочностных свойств металлов и сплавов.

Разработанные модели и методики позволяют снижать затраты за счет обоснованного снижения числа экспериментов и уменьшения времени на обработку их результатов при проведении комплексной оценки прочностных свойств металлических материалов примерно на 7 % в год.

В результате внедрения методик были оптимизированы затраты лабораторий ООО «РнД МГТУ» за счет автоматизации трудоемких работ при создании новых функциональных материалов с заданными механическими характеристиками.

Директор
ООО «РнД МГТУ»



/ Д.Л. Якобчук /

Приложение 3

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

**«Пермский национальный исследовательский
политехнический университет»
(ПНИПУ)**

614990, Пермский край, г. Пермь, Комсомольский проспект, д. 29.

Тел.: 8(342) 219-80-67. Факс: 8(342) 219-89-27

E-mail: rector@pstu.ru; <http://www.pstu.ru>

ОКПО 02069065 ОГРН 1025900513924 ИНН/КПП 5902291029/590201001

№ _____
На № _____ от _____



УТВЕРЖДАЮ:

Ректор по учебной работе
д-р техн. наук, профессор
Лобов Н.В.

Лобов Н.В.
02.09.2020 г.

Акт

внедрения результатов диссертации

Батина Сергея Евгеньевича

в учебный процесс при реализации образовательных программ
по направлению «Информационные системы и технологии»

г. Пермь

02.09.2020 г.

Комиссия в составе:

Председатель комиссии:

Руководитель магистерской программы «Информационные технологии и
системная инженерия», доктор технических наук, профессор

члены комиссии:

И.о. начальника управления образовательных технологий, Герасимчук Ирина
Леонидовна,

доцент кафедры «Вычислительная математика, механика и биомеханика»

Онискив Владимир Дмитриевич, кандидат технических наук

на основании анализа бакалаврской и магистерской программ по направлению
подготовки «Информационные системы и технологии», реализуемых
Пермским национальным исследовательским политехническим
университетом, составила настоящий акт о том, что в университете
используются следующие результаты диссертационной работы Батина С.Е.:



Сертифицировано
«РУССКИМ РЕГИСТРОМ»

- интеллектуальная технология компьютерной идентификации параметров микроструктуры кристаллических материалов, основанная на распознавании объектов на цифровых фотографиях микрошлифов;

- комплекс математических моделей и алгоритмов комплексного оценивания эксплуатационных характеристик металлических материалов на основе компьютерного анализа их микроструктуры;

- программный модуль для ЭВМ «Печатный определитель комплексных свойств материалов (НОКСМ)»: Свидетельство о государственной регистрации № 2018661275 от 04.09.2018, Бюл. № 9 / С.Е.Батин и др. (РФ)

Результаты используются при чтении дисциплин «Специальные главы математики» и «Методы исследования и моделирования информационных процессов и технологий» магистратуры, «Интеллектуальные информационные системы и технологии» бакалавриата, а также при выполнении курсовых работ и дипломного проектирования.

Использование результатов диссертации Батина С.Е. существенно дополнило теоретическую и учебно-методическую базу образовательных программ, реализуемых на кафедре «Вычислительная математика, механика и биомеханика» Пермского национального исследовательского политехнического университета, что оказало положительное влияние на качество образовательного процесса.

Председатель комиссии:

Руководитель магистерской программы
доктор. техн. наук, профессор

С.А. Федосеев

Члены комиссии:

И.о. начальника управления
образовательных технологий

И.Л. Герасимчук

Доцент кафедры «Вычислительная математика,
механика и биомеханика»
канд. техн. наук

В.Д. Опискив



Сертифицировано
«РУССКИМ РЕГИСТРОМ»

Приложение 4

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



ПАТЕНТ

НА ИЗОБРЕТЕНИЕ

№ 2704751

**СПОСОБ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ
ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ И
ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ
МАТЕРИАЛОВ С ПОМОЩЬЮ ГЛУБОКОЙ НЕЙРОННОЙ
СЕТИ**

Патентообладатель: *Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Пермский национальный исследовательский политехнический университет" (RU)*

Авторы: *Клюев Андрей Владимирович (RU), Столбов Валерий Юрьевич (RU), Гитман Михаил Борисович (RU), Клестов Роман Андреевич (RU), Батин Сергей Евгеньевич (RU)*

Заявка № 2018135661

Приоритет изобретения 08 октября 2018 г.

Дата государственной регистрации в

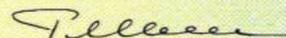
Государственном реестре изобретений

Российской Федерации 30 октября 2019 г.

Срок действия исключительного права

на изобретение истекает 08 октября 2038 г.

*Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности*

 Г.П. Ивалиев

