Ким В. А., Аунг Нгве Тэйн, Лысенко В. В., Афанасьева А. А.
V. A. Kim, Aung Ngwe Tain, V. V. Lysenko, A. A. Afanasyeva

**РОЛЬ МАСШТАБНОГО ФАКТОРА НА МУЛЬТИФРАКТАЛЬНУЮ
ПАРАМЕТРИЗАЦИЮ МИКРОСТРУКТУР**

**LARGE-SCALE FACTOR EFFECT ON MICROSTRUCTURE MULTIFRACTAL
PARAMETRIZATION**

Ким Владимир Алексеевич – доктор технических наук, профессор кафедры материаловедения и технологии новых материалов Комсомольского-на-Амуре государственного университета (Россия, Комсомольск-на-Амуре); 681013, Хабаровский край, г. Комсомольск-на-Амуре, пр. Ленина, 27; тел.: + 7 (914) 373-25-34. E-mail: sinerg@mail.ru.

Mr. Vladimir A. Kim – Doctor of Engineering, Professor, Material Technology and New Materials Department, Komsomolsk-on-Amur State University (Russia, Komsomolsk-on-Amur); 681013, Khabarovsk territory, Komsomolsk-on-Amur, 27 Lenin str.; tel.: + 7 (914) 373-25-34. E-mail: sinerg@mail.ru.

Аунг Нгве Тэйн – аспирант кафедры материаловедения и технологии новых материалов Комсомольского-на-Амуре государственного университета (Россия, Комсомольск-на-Амуре); 681013, Хабаровский край, г. Комсомольск-на-Амуре, пр. Ленина, 27; тел.: + 7 (909) 828-68-46. E-mail: aungngwethein7@gmail.com.

Mr. Aung Ngwe Tain – a postgraduate student, Material Technology and New Materials Department, Komsomolsk-on-Amur State University (Russia, Komsomolsk-on-Amur); 681013, Khabarovsk territory, Komsomolsk-on-Amur, 27 Lenin str.; tel.: + 7 (909) 828-68-46. E-mail: aungngwethein7@gmail.com.

Лысенко Валерия Викторовна – аспирант кафедры материаловедения и технологии новых материалов Комсомольского-на-Амуре государственного университета (Россия, Комсомольск-на-Амуре); 681013, Хабаровский край, г. Комсомольск-на-Амуре, пр. Ленина, 27. E-mail: valeri.168@mail.ru.

Ms. Valeria V. Lysenko – a postgraduate student, Material Technology and New Materials Department, Komsomolsk-on-Amur State University (Russia, Komsomolsk-on-Amur); 681013, Khabarovsk territory, Komsomolsk-on-Amur, 27 Lenin str. E-mail: valeri.168@mail.ru.

Афанасьева Анна Алексеевна – аспирант кафедры материаловедения и технологии новых материалов Комсомольского-на-Амуре государственного университета (Россия, Комсомольск-на-Амуре); 681013, Хабаровский край, г. Комсомольск-на-Амуре, пр. Ленина, 27. E-mail: a.afanaseva@infotech-kms.ru.

Ms. Anna A. Afanasyeva – a postgraduate student, Material Technology and New Materials Department, Komsomolsk-on-Amur State University (Russia, Komsomolsk-on-Amur); 681013, Khabarovsk territory, Komsomolsk-on-Amur, 27 Lenin str. E-mail: a.afanaseva@infotech-kms.ru.

Аннотация. В данной статье приведено исследование влияния кратности увеличения изображения микроструктуры на мультифрактальные спектры микроструктуры стали 45, рассчитанные по разным мерам. В качестве мер были приняты площадь, периметр микроструктурных объектов и фрактальная размерность их границ. Показано, что с повышением кратности увеличения изображения микроструктуры диапазон изменения величин мультифрактальных компонентов возрастает. Диапазон изменения и комплексные показатели мультифрактальных спектров принимают наибольшие значения при использовании в качестве меры площади микроструктурных объектов.

Summary. The effect of the multiplicity increase of the image of the microstructure on the multifractal spectra of the microstructure of steel 45 calculated by different measures was studied. The area, perimeter of microstructural objects and the fractal dimension of their borders were taken as measures. It is shown that with increasing magnification of the image of the microstructure, the range of changes in the values of multifractal components increases. The range of variation and complex indicators of the multifractal spectra take the greatest values when using microstructural objects as a measure of area.

Ключевые слова: микроструктура, фрактал, мультифрактал, статистическая сумма, числовое множество, неоднородность, упорядоченность.

Key words: microstructure, fractal, multifractal, statistical sum, numerical set, heterogeneity, orderliness.

УДК 621-03

Введение

Изображения микроструктур, выявленные травлением металлографических шлифов и зафиксированные оптической или электронной микроскопией, представляют собой набор геометрических фигур с разной степенью цветовых оттенков. Материал имеет объёмную структурную организацию, но на фотографиях отображается только её срез в прямолинейной плоскости шлифа, поэтому все структурные геометрические объекты на изображениях теряют единицу мерности, то есть реальные трёхмерные объекты представляются в виде двумерных фигур, двумерные – одномерными, а одномерные – точечными [1; 2].

С формальной точки зрения изображение микроструктур – это комбинация геометрических множеств с определённой степенью упорядоченности и разномасштабным подобием, которые можно отнести к категории фрактальных систем. Из всего множества геометрических структурных объектов выделяются те, которые несут наибольшую информационную нагрузку, и их можно объединить единым понятием «интерфейс структурного состояния». Количественное описание структурных превращений заключается в выборе интерфейса структурного состояния, определении его числовых показателей и анализе их изменений при различных энергетических воздействиях на материал [3].

Традиционно к интерфейсу структурного состояния поликристаллического материала относят межзёрненные и межфазовые границы раздела. По их форме, локальной кривизне и упорядоченности можно анализировать технологию производства материала и обработки изделия, условия эксплуатации, причины потери работоспособности и механизмы разрушения [4; 5].

Неоднородность, упорядоченность и периодичность микроструктуры материалов, находящихся в неравновесном состоянии, долгое время анализировались только на качественном уровне. Применение фрактального и мультифрактального формализма при описании микроструктур открывает широкие возможности для количественной оценки структурной организации материала, уточняет и раскрывает новые стороны известных механизмов структурных превращений. Мультифрактальные спектры структурной организации материала являются основой для определения количественных комплексных показателей микроструктур, таких как неоднородность и степень беспорядка. Однако сами мультифрактальные спектры зависят от кратности увеличения изображения микроструктур. С повышением кратности увеличения изображений микроструктур уменьшается площадь поверхности шлифа, фиксируемая на фотографии, выявляются более мелкие объекты, чётче проявляются локальная кривизна границ и неоднородность структурной организации материала. Это приводит к увеличению диапазона числового множества, по которому рассчитывается статистическая сумма.

В статье изложены результаты исследований по влиянию масштабного фактора и количественной характеристики микроструктуры, выбираемой в качестве меры для вычисления мультифрактальных спектров, на комплексные показатели структурной неоднородности и упорядоченности.

Мультифрактальный формализм

Мультифрактальный формализм базируется на понятии статистической суммы, для составления которой в качестве меры можно использовать любой количественный показатель структурной организации материала. Методика генерации мультифрактальных спектров и математический аппарат, описывающий эту процедуру, достаточно подробно изложены в научной литературе и активно используются в материаловедческих исследованиях [6; 7].

Изображение микроструктуры рассматривается как двумерный объект, помещённый в евклидово пространство. Изображение покрывается сеткой из ячеек прямоугольной формы одинакового размера. В качестве меры выбирается какой-либо количественный структурный показатель и определяется его значение в каждой ячейке. Совокупность полученных значений представляет множество $L(k) = \{M_1, M_2, M_3, \dots, M_k\}$, которое является одним из вариантов числового представления микроструктуры материала.

Относительная величина меры вычисляется по формуле

$$p_i(\varepsilon) = \frac{M_i}{\sum_{i=1}^k M_i}, \quad (1)$$

где $p_i(\varepsilon)$ – относительная величина меры (плотность) каждой ячейки; M_i – абсолютная величина меры каждой ячейки; k – число ячеек.

Очевидно, что

$$\sum_{i=1}^k p_i(\varepsilon) = 1. \quad (2)$$

Статистическая сумма определяется таким образом:

$$Z(q, \varepsilon) = \sum_{i=1}^k p_i^q(\varepsilon), \quad (3)$$

где q – произвольные вещественные целые числа от $-\infty$ до $+\infty$.

Компоненты мультифрактального спектра рассчитываются по формуле

$$D_q = \left(\frac{1}{q-1} \right) \cdot \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln[Z(q, \varepsilon)]}{\ln \varepsilon}, \quad (4)$$

где $\varepsilon = \left(\frac{1}{k} \right)^{0,5}$ – характеристический линейный размер ячейки.

Значение мультифрактала при $q = 1$ определяется по отдельной формуле

$$D_1 = \frac{\sum_{i=1}^k p_i \cdot \ln(p_i)}{\ln \varepsilon}. \quad (5)$$

При $q \rightarrow +\infty$ (положительная вервь мультифрактального спектра) основной вклад в обобщённую статистическую сумму вносят ячейки, имеющие наибольшую плотность, а при $q \rightarrow -\infty$ (отрицательная ветвь мультифрактального спектра) – наименьшую плотность. Следовательно, значения компонент мультифрактального спектра и диапазон их варьирования показывает степень неоднородности числового множества $L(k)$.

Отдельные компоненты мультифрактального спектра имеют различный физический смысл. D_0 , соответствующая $q = 0$, представляет собой обычную хаусдорфову размерность множества $L(k)$. Она является наиболее грубой характеристикой мультифрактала и не несёт никакой информационной нагрузки о статистических свойствах микроструктуры, а указывает на мерность евклидова пространства и характер разбивки изображения на ячейки.

Величина D_1 тесно связана с энтропией фрактального множества и является характеристикой меры беспорядка в числовом множестве $L(k)$.

При $q = 2$ статистическая сумма представляет собой корреляционный интеграл, поэтому D_2 называют корреляционной размерностью. Если бы числовое множество $L(k)$ представляло собой набор точек, то величина D_2 – меру того, что выбранные наугад 2 точки будут располагать-

ся в одной ячейке. Применительно к структурной организации материала D_2 можно трактовать как меру того, что вблизи какого-либо микроструктурного элемента располагается хотя бы один аналогичный объект, то есть это мера образования упорядоченных групп однотипных микроструктур. Все остальные компоненты множества D_q представляют собой мультифрактальный спектр. Большие значения D_q при $q \gg 1$ соответствуют высоким показателям энтропии, в связи с чем величина D_q может быть применена для распознавания визуально не различимых или слабо различимых друг от друга микроструктур.

Компоненты мультифрактального спектра используются для расчёта ряда показателей структурной организации материала, например [7]:

$$\Delta_q = D_1 - D_q. \quad (6)$$

$$K_\infty = D_{-\infty} - D_{+\infty}. \quad (7)$$

С их помощью оцениваются степень беспорядка, упорядоченности и периодичности микроструктуры соответственно. Чем больше Δq при $q \gg 1$, тем более упорядочена структура и в ней сильнее проявляется периодическая составляющая. Величина K_∞ конечна и является мерой беспорядка или хаоса в структурной организации материала, то есть чем больше величина K_∞ , тем больше беспорядка. На практике для вычисления комплексных мультифрактальных показателей достаточно $q = 40$. При более точных исследованиях $q = 100$ или даже $q = 200$ [6; 7].

Методика исследования

Объектом исследования стали микроструктуры стали 45, полученные при увеличении в 100, 200, 400 и 1000 крат. Травление шлифов осуществлялось 4%-м раствором азотной кислоты в этиловом спирте. Цифровые изображения микроструктур получали с помощью металлографического микроскопа Nikon 200A.

Обработка изображений выполнялась программой Image.Pro.Plus.5.1 (США) и включала корректировку резкости, снятие контрастной маски, выделение границ с помощью фильтра Лапласа и калибровку изображений для её привязки к соответствующей масштабной линейке. Обработка изображений проводилась только по «тёмным» микроструктурным объектам. При снятии контрастной маски к «тёмным» объектам относили микроструктуры, у которых соотношение чёрных и белых цветов составляло по 128 пикселей [2; 3], затем вычислялись количественные показатели микроструктур, в частности, площадь F_j , периметр P_j каждого микроструктурного объекта и фрактальная размерность границ D_j . Алгоритм определения фрактальной размерности границ в программе Image.Pro.Plus.5.1 базируется на методе хорд. В качестве мер для расчёта мультифрактальных спектров использовались эти же показатели. При расчёте статистических сумм и мультифрактальных спектров показатель q варьировался в диапазоне целочисленных величин от -50 до +50.

Результаты и их анализ

На рис. 1 представлены микроструктуры исследуемой стали 45 при различной кратности увеличения. Материал состоит из ферритных и перлитных зёрен с различными границами раздела. Наибольшую информацию о структурной организации материала несут границы зёрен, поэтому в материаловедении их называют интерфейсом структурного состояния. Микроструктура при 100- и 200-кратном увеличении не выявляет развитость и локальную кривизну границ, но позволяет с достаточной точностью определять процентное соотношение ферритных и перлитных зёрен и по ним рассчитывать содержание углерода в сталях.

При 400-кратном увеличении хорошо выявляется структурная организация границ и начинает проявляться строение перлитной фазы. При кратности увеличения, равной 1000, можно различить участки границ с высокой и низкой когерентностью, а в структуре перлита чётко проявля-

ются ферритные и цементитные пластинки. Границы с низкой когерентностью, обладая большей поверхностной энергией, сильнее подвергаются травлению и приобретают большую толщину и более тёмный оттенок [8; 9; 10]. Начиная с 400-кратного увеличения, можно различить ферритные и перлитные зёрна с более высокой свободной энергией или химическим потенциалом, которые сильнее подвергаются химическому травлению и приобретают более тёмный оттенок.

Чем выше кратности увеличения, тем меньше площадь поверхности шлифа, фиксируемая на изображении микроструктуры, поэтому микроструктуры, полученные при 100- и 200-кратном увеличении, представляются более однородными по сравнению с 400- и 1000-кратным увеличением. Неоднородность микроструктуры при кратности увеличения, равной 1000, очевидна, поэтому для обеспечения статистической точности необходимо увеличивать количество изображений, подвергаемых анализу.

Рис. 1. Микроструктура стали 45 при увеличении: а – в 100 крат; б – 200 крат; в – 400 крат; г – 1000 крат

На рис. 2, 3 и 4 представлены мультифрактальные спектры, рассчитанные по различным мерам, а в табл. 1 – комплексные показатели, рассчитанные по мультифрактальным спектрам.

Мультифрактальные спектры, рассчитанные по периметру и площади микроструктурных объектов, имеют много общего. При сравнительном анализе областей положительных и отрицательных значений q они носят несимметричный характер.

Рис. 2. Мультифрактальные спектры, рассчитанные по периметрам микроструктурных объектов: 1 – увеличение в 100 крат; 2 – 200 крат; 3 – 400 крат; 4 – 1000 крат

Рис. 3. Мультифрактальные спектры, рассчитанные по площади микроструктурных объектов: 1 – увеличение в 100 крат; 2 – 200 крат; 3 – 400 крат; 4 – 1000 крат

Рис. 4. Мультифрактальные спектры, рассчитанные по фрактальной размерности границ микроструктурных объектов: 1 – увеличение в 100 крат; 2 – 200 крат; 3 – 400 крат; 4 – 1000 крат

Меньшие значения диапазона изменений мультифрактальных спектров в положительной области ($0 < q < +50$) по сравнению с отрицательной областью ($-50 < q < 0$) указывают, что в микроструктуре материала преобладают мелкие микроструктурные объекты. С повышением кратности увеличения изображения микроструктуры величина компонентов мультифрактального спек-

тра возрастает, но эта закономерность строго соблюдается в случае использования в качестве меры площади микрообъектов. В мультифрактальных спектрах, рассчитанных по периметру микроструктурных объектов, имеются нарушения этой закономерности в положительной области q ($0 < q < 50$). Например, при кратности увеличения, равной 100, значения мультифрактальных спектров принимают большие значения, чем при кратности, равной 400.

Компоненты мультифрактального спектра, рассчитанные по площади микроструктурных объектов, характеризуются более широким диапазоном изменения и большими величинами комплексных показателей K_∞ и Δ_{50} , поэтому предпочтительной мерой для расчёта мультифракталов является площадь микроструктурных объектов.

Характер изменения мультифрактального спектра, рассчитанного по фрактальной размерности границ (см. рис. 4), принципиально отличается от предыдущих. Диапазон изменения компонентов спектра и значения комплексных показателей на порядок ниже по сравнению с характеристиками мультифракталов, рассчитанных по площади и периметру микроструктурных объектов. При этом общая закономерность повышения диапазона мультифрактальных спектров с повышением кратности увеличения сохраняется.

Таблица 1

Комплексные показатели, рассчитанные по мультифрактальным спектрам

Кратность увеличения изображения	Мера для расчёта мультифрактального спектра					
	Периметр микрообъектов		Площадь микрообъектов		Фрактальная размерность границ	
	K_∞	Δ_{50}	K_∞	Δ_{50}	K_∞	Δ_{50}
100	0,1489	0,0966	0,2555	0,1451	0,0051	0,0023
200	0,2091	0,1292	0,3391	0,0903	0,0214	0,0112
400	0,4942	0,2694	0,1968	0,0766	0,0197	0,0102
1000	1,2568	0,3305	1,2360	0,3909	0,0197	0,0102

Выводы

С повышением кратности увеличения изображений микроструктур уменьшается площадь поверхности шлифа, зафиксированная на фотографии; выявляются более мелкие объекты, чётче проявляется локальная кривизна границ и неоднородность структурно организации материала. Это приводит к увеличению диапазона числового множества, по которому рассчитывается статистическая сумма и мультифрактальный спектр.

Наилучшая информативность мультифрактального спектра достигается, если в качестве меры для его расчёта используется площадь микроструктурных объектов.

ЛИТЕРАТУРА

- Брандон, Д. Микроструктура материалов. Методы исследования и контроля / Д. Брандон, У. Каплан. – М.: Техносфера, 2004. – 384 с.
- Претт, У. Цифровая обработка изображений / У. Претт; пер. с англ. – М.: Мир, 1982. – 480 с.
- Ким, В. А. Методика цифровой обработки изображений микроструктуры алюминиевых сплавов в среде MATLAB / В. А. Ким, О. В. Башков // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2013. – Т. 79. – № 10. – С. 34-40.
- Синергетика и фракталы в материаловедении / В. С. Иванова, А. С. Баланкин, И. Ж. Бунин [и др.]. – М.: Наука, 1994. – 383 с.
- Поверхностные слои и внутренние границы раздела в гетерогенных материалах / Р. Р. Балахонов, А. В. Болеста, М. П. Бондарь [и др.]. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2006. – 520 с.
- Встовский, Г. В. Введение в мультифрактальную параметризацию структур материалов: моногр. / Г. В. Встовский, А. Г. Колмаков, И. Ж. Бунин. – М. – Ижевск, 2001. – 116 с.
- Божокин, С. В. Фракталы и мультифракталы / С. В. Божокин, Д. А. Паршин. – М. – Ижевск, 2001. – 128 с.
- Кристиан, Дж. Теория превращений в металлах и сплавах. В 2 ч. Ч. 1. Термодинамика и общая кинетическая теория / Дж. Кристиан; пер. с англ. А. Я. Беленького и Д. Е. Темкина. – М.: Мир, 1978. – 807 с.
- Поверхностные слои и внутренние границы раздела в гетерогенных материалах / Р. Р. Балахонов, А. В. Болеста, М. Н. Бондарь [и др.]. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2006. – 520 с.
- Вест, А. Химия твёрдого тела. Теория и приложения. В 2 ч. Ч. 1. / А. Вест; пер. с англ. – М.: Мир, 1988. – 558 с.