

КОМП'ЮТЕРНІ МЕТОДИ ГЕНЕРАЦІЇ ТА АНАЛІЗУ МІКРОСТРУКТУР ПОЛІКРИСТАЛІЧНИХ МАТЕРІАЛІВ

Водка О.О.

*Національний технічний університет
«Харківський політехнічний інститут»,
м. Харків*

Металеві матеріали на мікрорівні являють собою полікристалічну структуру. Кожен кристал цієї структури має свою форму та орієнтацію в просторі. Це призводить до того, що сукупність форм і орієнтацій кристала визначає механічні характеристики матеріалу. Таким чином, важливо моделювати мікроструктури матеріалів. Це дозволяє визначати механічні параметри матеріалів на основі їх мікроструктури.

Метод кліткових автоматів широко застосовується при моделюванні мікроструктури різних матеріалів. Цей метод широко використовуються для прогнозування поведінки в різних галузях.

Для реалізації методу кліткових автоматів у цій роботі розроблено програмне забезпечення, що дозволяє синтетично генерувати мікроструктури полікристалічних матеріалів. У програмному забезпеченні реалізовані можливості використовувати різні правила сусідства клітин.

Процес кристалізації з фізичної точки зору повинен відбуватися рівномірно у всіх напрямках. Через локальні коливання та градієнти температури нерівномірний об'єм хімічного складу розплаву кристалізується нерівномірно в різних напрямках. Для моделювання цього ефекту пропонується встановити швидкість кристалізації у вигляді еліпса. Радіуси еліпса відповідають швидкості кристалізації у відповідних напрямках. Для визначення ймовірностей переходу еліпс проектується на комірки поля. Потім визначається площа еліпса, яка потрапила в кожен клітинку. Отримані клітинні ділянки представляють ймовірність кристалізації в різних напрямках. Кількісні характеристики мікроструктур досліджуються на основі створених мікроструктур.

Для визначення геометричних характеристик мікроструктур матеріалів проводиться визначення ряду характеристик. Так розроблене програмне забезпечення визначає фактор форми, нормовану площу зерна, коефіцієнт масштабу та кут орієнтації зерна. Отримані дані статистично обробляються, і за результатами обробки визначаються функції густини ймовірності. За статистичними параметрами отримані результати порівнюють з параметрами мікроструктури матеріалів отриманих на основі аналізу мікрошліфів.

Таким чином, розроблене програмне забезпечення дозволяє генерувати мікроструктури полікристалічних матеріалів та визначати в статистичній формі геометричні параметри згенерованих мікроструктур.