

УДК 537.533.35:578.72

ФРАКТОГРАФІЧНА ХАРАКТЕРИСТИКА ГЕОМЕТРИЧНО ПРАВИЛЬНИХ ТА РАНДОМІЗОВАНИХ ПОВЕРХОНЬ

ФРАКТОГРАФИЧЕСКАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ГЕОМЕТРИЧЕСКИ ПРАВИЛЬНЫХ И РАНДОМИЗИРОВАННЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ

THREE-DIMENSIONAL FRACTOGRAPHIC CHARACTERISTIC OF GEOMETRICALLY REGULAR AND RANDOMIZED SURFACES

Мельник Ю.А., аспірант (Луцький національний технічний університет, м. Луцьк)

Мельник Ю.А., аспирант (Луцкий национальный технический университет, г. Луцк)

Melnyk Y.A., postgraduate (Lutsk National Technical University, Lutsk)

Розглянуто питання кількісних оцінок мікрорельєфу 3D фрактографічних поверхонь. Отримано теоретичні залежності відповідних оцінок для строго детермінованих поверхонь.

Рассмотрены вопросы количественных оценок микрорельефа 3D фрактографических поверхностей. Получены теоретические зависимости соответствующих оценок для строго детерминированных поверхностей.

The problems of quantitative estimates of the microrelief fractographic 3D surfaces. The theoretical dependence of the corresponding ratings for strictly deterministic surfaces.

Ключові слова:

Фрактографія, шорсткість, растрова електронна мікроскопія, Фур'є-перетворення, моменти функції, кореляція.

Фрактография, шероховатость, растровая электронная микроскопия, Фур'є-преобразование, моменты функции, корреляция.

Fractography, roughness, scanning electron microscopy, Fourier-transform, the moments of the correlation.

Постановка наукової проблеми та її значення. Розвиток нових технологій в прецизійній механіці, оптиці та мікроелектроніці спонукає дослідження топографії поверхонь на макрорівнях [1]. В зв'язку з цим останнім часом особливої уваги заслуговує тривимірне відображення методами мікротопографії, як найбільш повний спосіб опису мікрорельєфу поверхні [2,3]. Мікрорельєф, як тривимірний об'єкт, має визначену просторову організацію та мікроструктуру. При цьому мікроструктура може розглядатись як результат просторової кореляції в розміщенні окремих нерівностей, будучи детермінованою або випадковою, ізотропною або анізотропною [4,5,6]. Виходячи з цього повний опис цифрової моделі мікрорельєфу (ЦММР), як фізичного поля, передбачає аналітичну інтерпретацію досліджуваної поверхні та отримання законів спільного розподілу функції $Z(x,y)$ і її перших та других похідних для будь-якої скінченної множини точок. Для отримання цих розподілів потрібно мати значний об'єм вимірів, тому в більшості відомих нам робіт [7] при аналізі випадкових масивів використовують одномірні закони розподілу, кореляційні функції і енергетичні спектри, що не завжди правомірно. Такі характеристики достатньо коректні для опису випадкових масивів за умови їх однорідності і ізотропності.

Для розв'язку задачі коректної кількісної характеристики мікрогеометрії фактографічних поверхонь твердих тіл в загальному випадку, нами пропонується виконувати 3D – реконструкції цифрових моделей мікрорельєфу, що вивчаються з допомогою растрових електронних мікроскопів (РЕМ) в режимі фотограмметричної зйомки. В цьому напрямку відомі чисельні дослідження [8,9], проте на теперішній час в немає узагальненої теорії мікростереофрактографії [3], 3D-реконструкції мікрорельєфу цих фактографічних поверхонь різних типів та достатньо коректних кількісних оцінок, тощо.

Аналіз останніх досліджень та публікацій. В сучасній мікрофрактографії широко застосовується растрова електронна мікроскопія і цифрова обробка зображень [1,2,3]. Особливо посилилась ця тенденція в останні роки в зв'язку з зародженням і інтенсивною динамікою нанотехнологічних досліджень, тобто досліджень на субмікронному та нано - рівнях.

Такі дослідження базуються на поглибленому застосуванні теорії випадкових процесів та математико-статистичних методів [10]. Для отримання 3D-кількісних оцінок мікростереофрактографії застосовують різні методи: 3D-реконструкція за різнофокусними зображеннями [2,11], комп'ютерна аналітична РЕМ-мікроскопія, мікростереофотограмметрія та ін. Досить універсальним є метод мікростереофотограмметрії [3], однак, низка теоретичних та практичних питань цього методу ще недостатньо вивчені і експериментально перевірені.

Мета та завдання досліджень. В моделях кількісної фрактографії зазвичай аналізується площа руйнування та показники шорсткості (площинні \bar{K}_A і профільні \bar{K}_P коефіцієнти розгалуження мікротріщин) та інші статистичні особливості характеру руйнування. Дана стаття відноситься до цієї проблематики. Нами розглянуто два випадки поверхонь з геометрично правильною формою мікрорельєфу, а також отримання кількісних оцінок фрактографічних поверхонь загального типу.

Виклад основного матеріалу. Отримаємо теорію для основних у фрактографії випадків 3D-моделей геометрично правильних та рандомізованих поверхонь.

3D-цифрова модель мікрорельєфу типу сходинок (східчато-пластинчатого типу)

В фрактографії такі поверхні є типовими для випадків крихкого руйнування, у мікромеханізмі якого домінують утворення сходинок спайності або річково-терасовий візерунок. Останній утворюється множиною взаємодій магістральних та вторинних мікротріщин, віддалі між сходинок визначається співвідношенням їх швидкостей.

Нехай, 3D-поверхні крихкого руйнування мають майже регулярну мікротекстуру. Тоді математичні моделі таких поверхонь можна отримати наступним чином [3]. Припустимо також, що мікрорельєф утворюється методом РЕМ-стереопар.

Нехай $h = Q(x)$ – апіорі невідома функція, яка відображає залежність відносної висоти досліджуваної поверхні від елемента x лівого зображення РЕМ-стереопари. За множиною пар значень $\{(x_s, h_s) : 0 \leq s \leq s-1\}$ оцінюється функція Q . Ця задача за своєю постановкою є задачею екстраполяції функції двох змінних, які відомі для

скінченної множини точок. У випадку ЦММР східчастого типу доцільно скористатись циліндричною системою координат, коли кожний елемент мікрорельєфу розглядається, як сума циліндричних складових.

$$\text{Тоді} \quad Q(x) = \sum_{j=0}^{\tau-1} Q_j(x), \quad (1)$$

де $Q_j(x)$ – циліндрична функція виду:

$$Q_j(x) = f_i(t) \left(x_1 \cos \alpha_j + x_2 \sin \alpha_j \right), \quad (2)$$

де x_1, x_2 – координати x ; $f_i(t)$ – апріорі невідомі функції однієї змінної

$$\alpha_j = \pi \cdot j \cdot \tau^{-1} \quad (0 \leq \tau \leq \tau - 1). \quad (3)$$

$$\text{Нехай} \quad t_{js} = x_1^{(s)} \cos \alpha_j + x_2^{(s)} \sin \alpha_j, \quad (4)$$

де $x_1^{(s)}, x_2^{(s)}$ – координати x_s ($0 \leq s \leq S - 1$).

Для кожного j ($0 \leq j \leq \tau - 1$) значення t_{js} впорядкуємо в послідовність $T(j, k)$ ($0 \leq k \leq S - 1$). Якщо $ord_j(\cdot)$ – відповідна функція впорядкування, то $T(j, \dots ord(S)) = t_{js}$. За таких умов $h_s = Q(x_s)$ і

$$\sum_{j=0}^{\tau-1} f_j \left(T(j, ord_j(s)) = h_s \quad (0 \leq s \leq S - 1) \right).$$

Будемо вважати функції $f_j(t)$ кусково-лінійними на ділянках від $T(j, k)$ до $T(j, k + 1)$, ($0 \leq k \leq S - 2$), а кути нахилу на цих відрізках позначимо через $f_{j, k+1}$.

Тоді

$$f_j(T(j, k)) = f_{j,0} + \sum_{m=0}^{k-1} [T(j, m+1) - T(j, m)] \cdot f_{j, m+1}, \quad (5)$$

де $f_{j,0}$ – початкове значення функції $f_j(t)$, а

$$q_s = h_s \quad (0 \leq s \leq S - 1) \quad (6)$$

Тоді за визначенням :

$$q_s = h_s = \sum_{j=0}^{\tau-1} \left\{ f_{j,0} + \sum_{m=0}^{ord(s)-1} [T(j, m+1) - T(j, m)] \cdot f_{j, m+1} \right\},$$

$$(0 \leq s \leq S-1) \quad (7)$$

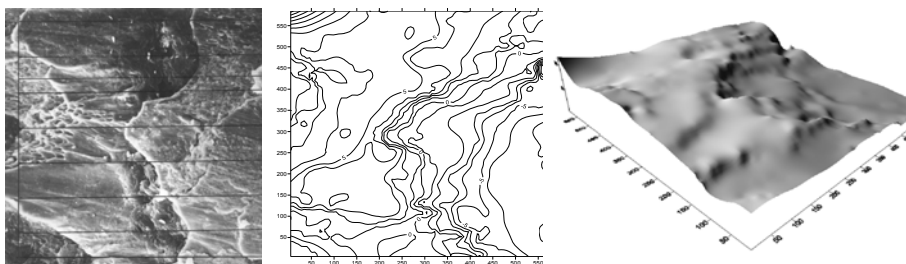
В такій постановці задача екстраполяції зводиться до обчислення змінних $f_{j,k}$ ($0 \leq j \leq \tau-1$, $0 \leq k \leq S-1$), що задовольняють лінійним рівнянням (7). Для однозначного вибору змінних $f_{j,k}$ доцільно скористатися методом найменших квадратів (МНК), мінімізуючи квадратичний функціонал «дії».

$$F = \sum_{j=0}^{\tau-1} \sum_{k=0}^{s-2} \left\{ f_{j, k+1} [T(j, k+1) - T(j, k)] \right\}^2 \Rightarrow \min. \quad (8)$$

На рис. 1 представлена мікрофотографія крихкого руйнування при збільшенні $1000\times$.

Щоб оцінити, наскільки результати характеру ЦММР в такій постановці відповідають дослідженню взагалі довільних поверхонь руйнування, скористаємося відомою в класичній профілометрії теоремою: «поверхні руйнування з однаковим показником шорсткості мають приблизно однакові профільні показники шорсткості» [6]. Для «ідеальної» (рис.2б) східчастої поверхні руйнування в роботі [3,6] відомо загальне співвідношення між середніми показниками профілю шорсткості (\bar{K}_P) і відповідними показниками шорсткості окремих ділянок (\bar{K}_A):

$$\frac{1}{\bar{K}_P} = \frac{4}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (2 - K_A)^n}{(2n+1) K_A^{n+1}}. \quad (9)$$



а)

б)

в)

Рис. 1. Крихке руйнування: а) мікрофотографія крихкого руйнування. Збільшення $1000\times$; б) ізолінійна карта ЦММР крихкого руйнування; в) тривимірна реконструкція рельєфу поверхні крихкого руйнування

Якщо записати рівняння у вигляді скінченного ряду, то після певних перетворень отримуємо:

$$\frac{1}{\bar{K}_P} = \frac{4}{\pi} \left[\frac{1}{K_A} - \frac{(2-K_A)}{3K_A^2} - \frac{(2-K_A)^3}{7K_A^4} + \dots \right]. \quad (10)$$

Приклад модельної 3D-східчастої поверхні, отриманої методом екстраполяції, дано на рис. 2

Аналізуючи одержаний вираз, можна встановити, що коли $K_A = 2$, що відповідає поверхні з довільною кривизною, розподіл орієнтації елементів поверхні і локальна кривизна окремих ділянок поверхні руйнування не впливає на однозначність кореляції між \bar{K}_A і \bar{K}_P . Цей результат може тлумачитися таким чином: якщо вважати перший член у рівнянні (8) таким, що враховує хаотичність рельєфу поверхні, то члени більш високого порядку можна розглядати як поправки на відхилення аналізованої поверхні від повністю довільної поверхні руйнування. Зауважимо: коли $K_A = 1$, що відповідає випадку «ідеальної гладкої поверхні руйнування», то і $\bar{K}_P = 1$. Комп'ютерні розрахунки підтвердили, що для коректного визначення значень K_A , які важливі для фрактографії, відмінності повинні складати 2-3%, що практично не суттєво.

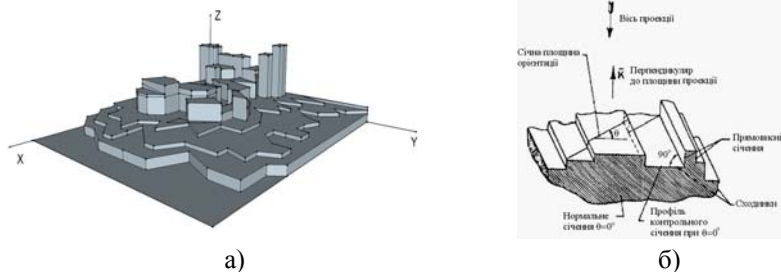


Рис. 2 а) мікрорельєф східчато пластинчатого типу; б) «ідеальна» 3D східчата поверхня крихкого руйнування

Розглянемо іншу геометрично правильну цифрову модель мікрорельєфу, отриману із сукупності кубиків різних розмірів (рис. 3)

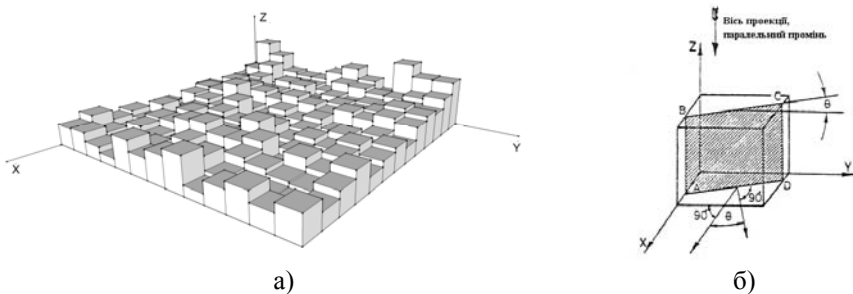


Рис. 3. Профілометричний аналіз куба

Згідно рис.3 (б) будемо розглядати тільки його бічну і верхню поверхні куба, які проєктуються на його основу (так, що $K_A=5$ і K_P може бути визначено із залежності (11)). Для довільного січення перпендикулярного основі $K_P(\theta) = ABCD / AD$, а для усереднення при різних орієнтаціях можна легко визначити, що

$$K_P(\theta) = \begin{cases} 1 + 2 \cos \theta & \text{для } 0 < \theta < \pi/4 \\ 1 + 2 \sin \theta & \text{для } \frac{\pi}{4} < \theta < \pi/2 \end{cases} \quad (11)$$

Вважаючи, що $p(\theta)d\theta = d\theta/(\pi/2)$, одержуємо

$$\bar{K}_P = \frac{2}{\pi} \left\{ \int_0^{\pi/4} (1 + 2 \cos \theta) d\theta + \int_{\pi/4}^{\pi/2} (1 + 2 \sin \theta) d\theta \right\} \quad (12)$$

або $\bar{K}_P = 2,80063$.

Для гармонійного середнього отримуємо $\bar{K}_P = 2,79907$, що практично одне і те ж. Для паралельних січень можна легко відзначити, що $\bar{K}_P = 3$, в той час для січних площин типу октаедра $\bar{K}_P = 2,78$. Відзначаючи, що в такому випадку $K_A = 5$, одержуємо відповідне значення \bar{K}_P , що передбачене рівнянням (12) (для східчастої поверхні руйнування).

3D оцінка рандомізованих (випадкових) ЦММР.

В загальному випадку випадкову 3D фрактографічну поверхню можна представити такою, як на рис.4

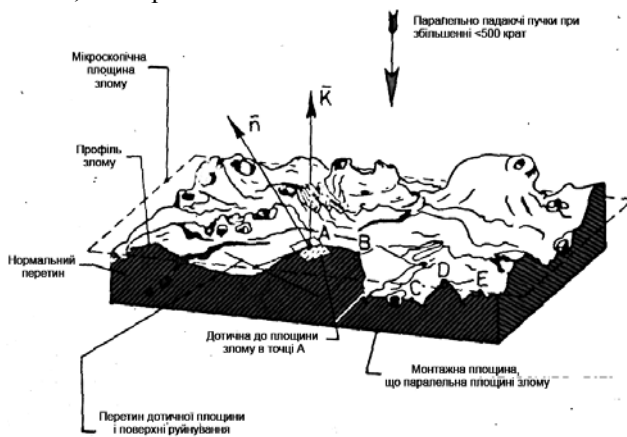


Рис. 4. Приклад випадкової 3D фрактографічної поверхні.

Для спрощення математичних викладок проаналізуємо випадкові ізотропні гауссівські поверхні, хоча більшість поверхонь є негауссівськими. 3D аналіз таких поверхонь надзвичайно складний.

Для ізотропних ЦММР основними характеристиками є автокореляційна функція (АКФ) та спектральна щільність [10].

Будемо вважати, що поверхня однорідна, тобто що її статистичний опис інваріантний по відношенню до трансляції початку координат. В такому випадку автокореляційна функція за визначенням [10] дорівнює:

$$R_{x,y} = \frac{1}{4L_1L_2} \int_{-L_1}^L \int_{-L_2}^{L_2} h(x,y)h(x+\Delta x,y+\Delta y) dx dy. \quad (13)$$

Якщо поверхня ізотропна, то функція R залежить лише від змінної

$$r = (x^2 + y^2)^{1/2} \text{ і не залежить від полярного кута } \theta = \arctg\left(\frac{y}{x}\right).$$

Як АКФ, так і спектральна щільність отримуються на основі взаємних Фур'є-перетворень. В загальному випадку перетворення Фур'є має вигляд:

$$F(k_x, k_y) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} R(x, y) \exp[-i(xk_x + yk_y)] dx dy, \quad (14)$$

де k_x і k_y – компоненти хвильового вектора \vec{k} .

З виразу (13) видно, що величина $R(0,0)$ дорівнює σ^2 , де σ – середньоквадратичне значення (стандартне відхилення) висот нерівностей. Для визначення інших значень функції $R(x, y)$ зручніше скористатись її моментами m_{pq} .

Тому:

$$\sigma^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F(k_x, k_y) dk_x dk_y. \quad (15)$$

Відомо, що довільну функцію можна представити моментами m_{pq} , які визначаються з виразу [10,12]:

$$m_{pq} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x^p y^q F(x, y) dx dy, \quad p, q = 0, 1, 2, \dots \quad (16)$$

Встановлено, що $m_{00} = \sigma^2$.

Для визначення інших моментів ізотропних поверхонь справедливі наступні співвідношення [7]:

$$\begin{aligned} m_{20} = m_{02} = m_2; \quad m_{11} = m_{13} = m_{31} = 0; \\ m_{00} = m_0; \quad m_{22} = m_{40} = m_{04} = m_4. \end{aligned} \quad (17)$$

В більшості випадків неізотропних поверхонь достатньо визначити три моменти m_0, m_2, m_4 , і рельєф поверхні $h(x, y)$. Для прикладу припустимо, що мікрорельєф (рис.5) можна представити у вигляді суми синусоїдально профільованих поверхонь.

$$\text{Тоді } h(x, y) = \sum_n C_n \cos(xk_{xn} + yk_{yn} + \varepsilon_n). \quad (18)$$

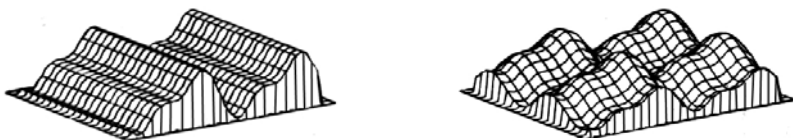


Рис. 5. Мікрорельєф у вигляді суми синусоїдально профільованих поверхонь

А для моментів m_{00}, m_{20}, m_{40} отримані вирази

$$m_{pq} = \frac{1}{2} \sum_n k_{xn}^p k_{yn}^q C_n^2. \quad (19)$$

Остаточно отримаємо:

$$m_{00} = m_0 = \sigma^2 = \frac{1}{2} \sum_{\Delta k} C_n^2, \quad m_{20} = m_2 = \frac{1}{2} \sum_n C_n^2 k_{xn}^2, \quad ,$$
$$m_{40} = m_4 = \frac{1}{2} \sum_n C_n^2 k_{xn}^4 \quad (20)$$

Аналогічні оцінки можна отримувати і для випадків 3D фактографічних поверхонь.

Висновок. Отримані в статті результати можна вважати, як певне узагальнення 3D-реконструкції фактографічних поверхонь методи їх оцінок.

1. Балабанов В. Нанотехнологии. Наука будущего. – М.: Эксмо, 2009. 246с.
2. Чмыхов Д.В. Виртуальная лаборатория микроскопии с использованием новых методов анализа изображений / Будущее высоких технологий и инноваций за молодой Россией. – Рыбинск, 2009. – С.37-41.
3. Мельник В.М., Шостак А.В. Кількісна стереомікрофактографія: [Монографія] - ПВД «Твердиня», Луцьк, - 2010. - с. 460. - ISBN 978-617-517-031-1
4. Хусу А.П., Виттенберг Ю.Р., Пальмов В.А. //Шероховатость поверхностей. -М.: Наука, 1975. -343 с.
5. Рудзит Я.А. Шероховатость поверхностей/ Кризберг Ю.А.// Микрогеометрия и эксплуатационные свойства машин. – Зинате, 1983. – С.55.
6. El-Soudani. Profilometric Analysis of Fractures// Metallography. – 1988. – V.11.P.277-335.
7. Lonquet-Higgins M.S. The Statistical Analysis of a Random Moving Surface. // Philosophical Transactions of Royal Society, 1957. – V.249. – pp.321-387.
8. Malkin S. Grinding Technology Theory and Applications of Machining with Abrasives // The Gleason Works, Roachester, New York, 2007 -32p.
9. Fritz Klocke Manufacturing Processes 2. Grinding, honing, lapping. Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2009.
10. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. -М.: Наука, 1973- -681 с.
11. Sokolov V.N. 3-D reconstruction of surface and Subsurface structures of Solids by SEM Stereo Images //Yurkovets D., Melnik V., Boude A., Howell P./Inst. Phys. Conf. Dundee,2001. – P.168. – Section 4. – P.109-122.
12. . Дуда Р., Харг П. Распознавание образов и анализ сцен. -М.: Мир, 1976. -511 с.