

Т.С. Чикова, И.П. Ющенко

О КОРРЕКТНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ СТАТИСТИЧЕСКОГО МЕТОДА ИЗУЧЕНИЯ МЕХАНИЧЕСКОГО ДВОЙНИКОВАНИЯ МЕТАЛЛОВ

Реальная прочность кристаллов определяется рядом микропроцессов, таких, как генерирование и перемещение точечных дефектов, движение, размножение и взаимодействие дислокаций, зарождение и рост микротрещин и других. Экспериментально установлено, что элементарные акты пластической деформации и разрушения – размножение и движение дислокаций – в реальных кристаллах, содержащих различного рода дефекты, носят случайный характер, поэтому наиболее естественным и адекватным языком, на котором могут описываться процессы прочности и пластичности твердых тел, является статистика.

Статистические методы успешно развиваются во всех отраслях материаловедения [1]. Они стали неотъемлемой частью аппарата теоретического описания и одновременно важным инструментом экспериментального исследования реальных кристаллов. Разработан аппарат статистической теории кристаллического состояния [2, 3], статистический анализ свойств дислокационных ансамблей [4] привел к построению кинетической теории дислокаций [5]. Проведено достаточно полное и всестороннее статистическое исследование структуры линий скольжения, получена аналитическая функция, аппроксимирующая экспериментальные графики распределения расстояний между соседними выходами дислокаций в линиях скольжения [6]. В

экспериментальных исследованиях структуры деформированных поликристаллов применяется метод статистической регуляризации для рентгенографических исследований [7]. При изучении распределений макронеоднородностей пластической деформации используется статистический метод сеток [8]. Развита статистическая теория деформационного упрочнения [9], статистическая теория прочности [10]. При разработке материалов с заданными прочностными свойствами и определении качества технических изделий используются статистические методы планирования механических испытаний с целью оценки характеристик механических свойств с требуемой точностью и надежностью [11].

В многообразном применении статистических методов можно выделить три основных задачи, которые они решают: 1 – создание математического аппарата таких наук, например, как статистическая механика; 2 – описание физических процессов, основу которых составляют случайные события; 3 – обработка результатов экспериментальных наблюдений.

Изучение пластической деформации двойникованием в металлах долгие годы осложнялась отсутствием единых общепринятых методик исследования и невозможностью сопоставления экспериментальных результатов различных авторов, из-за их несовпадения, а иногда и противоречия.

Статистический метод исследования механического двойникования, впервые предложенный в [12] и развитый в ряде других работ [13-15], позволяет получать воспроизводимую количественную информацию о закономерностях кинетики двойникования металлов. Метод весьма чувствителен. Путем сравнительного анализа статистических экспериментальных данных, характеризующих изменения параметров двойниковых прослоек на макро- и мезоскопическом уровнях, можно установить элементарные дислокационные процессы, обеспечивающие развитие механических двойников при различных режимах деформирования [14] и выявить их зависимость от интенсивности воздействия и других внешних и внутренних параметров [15].

В последнее время появились работы по изучению механического двойникования металлов статистическими методами [16, 17], в которых неправильное использование математической статистики приводит к некорректным физическим выводам. В частности, в [16] утверждается, что статистический анализ не позволяет выявить влияние магнитного поля на процесс двойникования в монокристаллах технического висмута. При этом приведенные в работе данные противоречат результатам этих же авторов, опубликованным в других работах [18-20]: из [16] следует, что максимальные длины клиновидных двойников L_m в висмуте не зависят от плотности тока в импульсе, в то время как в работах [18-20] установлена сильная зависимость $L_m(j)$. Кроме того, количественные значения L_m в диапазоне плотностей тока $j = 1-40 \text{ A/mm}^2$ в [16] и в [18-20] в идентичных экспериментах отличаются на порядок. В работе [17] аналитическая функция, аппроксимирующая статистические распределения двойников по длинам, выбирается априори только на основании внешнего вида статистических кривых. Учитывая, что построение статистических графиков $\frac{\Delta N}{N}(L)$ выполнены в [17] с грубыми нарушениями правил статистической обработки данных (шаг гистограммирования для одной и той же физической величины на однотипных кривых различен и, кроме того, меняется в пределах одного графика (рис. 3, рис. 4 [17])), очевидно, что истинные статистические кривые будут иметь другой вид

и обобщающий вывод, сделанный подобным образом, несостоятелен. Авторы [16, 17] в своих работах допускают общую ошибку, которая хорошо видна из приведенных в статьях рисунков (рис. 2 в [16] и рис. 3, рис. 4 в [17]): в графическом представлении дифференциального закона распределения во всех случаях не выполняется условие нормировки, в результате чего приведенные данные нельзя считать математически достоверными.

Учитывая, что для создания теории механического двойникования реальных кристаллов необходимо накопление достоверной количественной информации о влиянии различных факторов на эволюцию двойниковой структуры, представляется целесообразным сформулировать основные концептуальные положения статистического метода исследования эволюции двойниковых ансамблей в металле. В процессе длительного применения этого метода при изучении развития двойников у концентраторов напряжений в металлах с гексагональной и ромбоэдрической структурами установлено следующее.

Под действием концентрированной нагрузки в металлическом кристалле зарождается ансамбль двойников клиновидной формы, количество которых, размеры (длина L и толщина у устья h) и плотность двойнивающих дислокаций на границах ρ являются случайными величинами.

Совокупность клиновидных двойников, возникающих в металле под сосредоточенным усилием в одной серии измерений, не совсем случайна: большинство двойников возникает у одних и тех же концентраторов напряжений (стабильные концентраторы), задаваемых деформирующим устройством, остальные прослойки зарождаются на неоднородностях структуры кристалла (нестабильные концентраторы).

При деформировании образца алмазным индентором в виде пирамидки двойники, возникающие у стабильных концентраторов напряжений, задаваемых деформирующим устройством, и у нестабильных концентраторов – дефектов внутренней структуры кристалла описываются одинаковыми законами распределений по размерам и по плотностям двойнивающих дислокаций на границах.

Статистические графики распределений клиновидных двойников по длинам $\frac{\Delta N}{N}(L)$, по толщинам $\frac{\Delta N}{N}(h)$ и по плотностям двойнивающих дислокаций на границах $\frac{\Delta N}{N}(\rho)$ являются воспроизводимыми обобщенными количественными характеристиками процесса двойникования реальных кристаллов сосредоточенной нагрузкой.

Волны плотности полных дислокаций, которые возникают при расколе монокристалла в процессе приготовления рабочих образцов, не влияют на макроскопическую периодичность в распределении двойников по длинам.

Статистические графики $\frac{\Delta N}{N}(L)$ для двойников системы $\{110\}\langle 001\rangle$ в монокристалле висмута для разных плоскостей двойникования оказались сходными между собой (рис.1), некоторые количественные различия их связаны с тем, что вероятность возникновения двойников у разных концентраторов отличается.

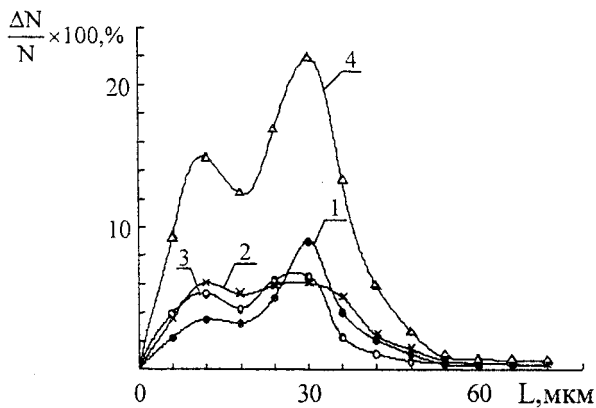


Рис. 1. Статистические распределения двойников по длинам для разных плоскостей двойникования монокристалла висмута. 1 – I-я плоскость, 2 – II-я плоскость, 3 – III-я плоскость, 4 – общая кривая.

Результаты, приведенные на рис.1, получены на одном монокристаллическом образце V_i при неизменной ориентировке кристалла и пирамидки.

Замена индентора, имеющего форму пирамидки, на сферический индентор приводит к заметному сокращению числа двойников у отпечатка, однако статистические закономерности развития двойникования при этом не изменяются.

Соблюдение требований теории вероятностей и математической статистики к обработке и графическому представлению экспериментальных данных [21] обеспечивает объективность и достоверность получаемой информации. При анализе экспериментальных данных исследования эволюции двойниковой структуры в реальном металлическом кристалле наиболее наглядным способом представления статистического дифференциального закона распределения является гистограмма, в построении которой нужно исходить из следующих фундаментальных положений математической статистики и опыта изучения клиновидных механических двойников в монокристаллах висмута, сурьмы и цинка при различных способах воздействия.

1. Статистическая функция распределения любой случайной величины является прерывной ступенчатой функцией, скачки которой соответствуют наблюдаемым значениям случайной величины; они равны частотам появления этих значений $\frac{\Delta N_i}{N}$, где ΔN_i – число появлений i -го значения случайной величины в N опытах. Область изменения кинематических параметров, по которым исследуется распределение, разбивается на несколько интервалов с заданным шагом – шагом гистограммирования. В дальнейшем, на основании соображений, связанных с существом изучаемого явления, или, исходя из внешнего вида экспериментального распределения, подбирается теоретический закон распределения изучаемой величины. Опыт показывает, что наиболее подходящей кинематической величиной при изучении кинетики двойникования в металлах является длина двойника. Она изменяется в широких пределах и может быть измерена с большой относительной точностью. Компьютерная статистическая обработка экспериментальных данных показывает, что распределение двойников по длинам не соответствует ни одному из известных теоретических распределений [14]. Отсутствие априорных

соображений об истинном распределении двойников по длинам потребовало большой предварительной работы по выяснению влияния величины шага гистограммирования, области изменения кинематической величины и точности измерений на вид гистограмм с целью определения условий, при которых гистограммы отражают объективные и наиболее общие закономерности развития двойников.

2. Истинное распределение экспериментальных данных на гистограммах представляется в виде усредненных в пределах шага гистограммирования значений. В идеале, чем меньше шаг, тем лучше график будет соответствовать истинному распределению. Но уменьшение шага гистограммирования приводит к выявлению статистически необоснованной структуры в распределениях, например, за счет индивидуальности распределения двойников у разных концентраторов. Эту трудность легко избежать, если известен с точностью до параметров аналитический вид функции распределения.

3. На гистограммах могут не выявляться структурные особенности распределения, если шаг гистограммирования сопоставим с шириной области, занимаемой структурным элементом распределения.

4. При построении гистограмм не учитывается точность измерения кинематической переменной в каждом отдельном случае. По этой причине шаг гистограммирования должен быть много больше возможных ошибок измерения – это является очевидным условием статистической равнозначности всех величин, объединенных шагом гистограммы.

5. Если относительная точность измерений кинематической величины сильно отличается в различных интервалах исследуемой области, гистограммы могут не отражать истинной плотности распределения. В такой ситуации каждое экспериментальное значение измеряемой величины следует представлять в виде гауссианы с дисперсией, равной квадрату ошибки измерения σ_i^2 и максимумом, совпадающим с экспериментально определенным значением кинематической переменной [22]. Плавная кривая, полученная суммированием по всем измерениям, каждое из которых представлено гауссианой

$$\Phi(x) = \sum_{i=1}^n g(x, x_i, \sigma_i),$$

где

$$g(x, x_i, \sigma_i) = \frac{1}{\sigma_i} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x - x_i)^2}{2\sigma_i^2}\right),$$

является хорошим приближением истинного распределения.

Параметры σ_i и x_i – среднеквадратичное отклонение и среднее значение кинематической величины, например, длины двойника, по которой ведется исследование распределения. В таком варианте представления экспериментальных данных исключается влияние шага гистограммирования.

6. Экспериментальные статистические данные могут быть представлены не в виде гистограмм, а в виде плавных кривых проведенных через середины прямоугольников гистограмм, что не влияет на достоверность приведенных результатов [22]. Замена гистограмм кривыми распределения делается для большей наглядности графического изображения, удобства проведения сравнительного анализа данных различных серий измерений и теоретической аппроксимации экспериментальных результатов.

В соответствии с требованиями, сформулированными в пунктах 1-4, для кривых распределения двойников по длинам в металлах шаг гистограммирования составляет $\Delta L=6-7$ мкм, для плотностей двойникоующих дислокаций – $\Delta \rho=10 \times 10^5 \text{ см}^{-1}$.

Объем статистической выборки при изучении кинетики развития клиновидных механических двойников в реальных кристаллах, содержащих дефекты структуры различной природы и мощности, определяется диапазоном разброса данных и для распределений двойников по длинам в зависимости от режима деформирования и интенсивности воздействия на кристалл составляет $N \sim 300-900$.

Применение статистического метода при изучении закономерностей развития деформационных двойников в металлах дает возможность проводить физический анализ полученных данных в двух аспектах.

I. Выявлять элементарные дислокационные процессы, контролирующие и определяющие двойникование при заданных условиях. Такие заключения делаются на основании сравнительного анализа эволюции последовательных статистических кривых, полученных при изменении интенсивности и других характеристик воздействия на образец. При этом для каждого исследуемого образца необходимо прежде всего установить статистические распределения первичных (т. е. зародившихся под действием только статической нагрузки, без дополнительного воздействия) двойников по заданному параметру. Сравнение статистических графиков, полученных при целенаправленном изменении условий деформирования, с исходной кривой дает возможность устанавливать общие закономерности эволюции полученных распределений, отвлекаясь от деталей, обусловленных локальными особенностями структуры данного образца.

II. На основании соображений, связанных с существом изучаемого явления, или, исходя из внешнего вида экспериментального статистического распределения, подбирается теоретический закон распределения изучаемой величины.

В обоих случаях принципиально важным условием, обеспечивающим объективность физических выводов, является проверка достоверности формы статистических графиков, в частности, достоверности максимумов на полимодальных кривых. С этой целью используются общепринятые способы:

— Проводятся однотипные измерения размеров двойников на нескольких образцах, выколотых из одного кристалла, затем строится суммарный статистический график по результатам всех измерений, при этом флуктуационные максимумы взаимно поглощаются и уточняется положение истинных максимумов, обусловленных объективными закономерностями развития механического двойника.

— Дополнительный контроль графиков осуществляется путем сдвига шага гистограммирования на половину интервала (для длин, например, на 3 мкм), вид достоверной кривой при этом не должен изменяться.

— Наиболее детальная проверка осуществляется с помощью критерия согласия Пирсона [21, 22].

Тщательная проверка достоверности формы экспериментальных статистических кривых распределения двойников по размерам необходима для правильного определения аналитических функций, аппроксимирующих эти распределения, и, в конечном счете, для математического описания закономерностей развития клиновидных двойников в металлических кристаллах.

На основании изложенных принципов нами разработан пакет компьютерных программ для статистической обработки экспериментальных данных исследования механического двойникового металлов и теоретического анализа полученных результатов, которые позволяют существенно ускорить и оптимизировать эти трудоемкие процессы.

Литература

1. Лихачев В. А., Волков А. Е., Шедугов В. Е. Континуальная теория дефектов (Структурно-аналитическая механика материалов) Л.: Изд-во Ленингр.ун-та, 1986. – 232 с.
2. Махутов Н. А. и др. Статистические закономерности малоциклового разрушения. М., Наука, 1989. – С. 5–18.
3. Степнов М. Н., Гиацинтов Е. В. Усталость легких конструкционных сплавов. – М.: Машиностроение, 1973. – 317 с.
4. Гиацинтов Е. В., Степнов М. Н., Когаев В. П. //Исследования усталости и длительной статической прочности алюминиевых сплавов: Труды МАТИ. 1961. Вып. 51. С. 39–66.
5. Степнов М. Н. //Конструкционная прочность легких сплавов и сталей: Труды МАТИ. 1961. Вып. 51. С.39–66.
6. Вейбулл В. А. Усталостные испытания и анализ их результатов. – М.: Машиностроение, 1964. – 276 с.
7. Хазанов И. И., Политов В. А. //Проблемы прочности. – 1977. № 2. С. 10–15.
8. Виклер, Хилбери, Гозл. //Теоретические основы инженерных расчетов. – М.: Мир, 1979. – С. 46–52.
9. Степнов М. Н., Махутов Н. А., Серегин А. С., Лисин А. Н. //Физ.-хим. механика материалов. – 1982. – № 3. – С.70–74.
10. Тот Л., Ромвари П., Надь Д. //Проблемы прочности. – 1983. – № 11. – С. 54–59.
11. Айвазян С. А. Енюков И. С., Мешалкин Л. Д. Прикладная статистика. Основы моделирования и первичная обработка данных: Справ, изд. – М: Финансы и статистика, 1983. – 472 с.
12. Чикова Т.С. //Структура и свойства сегнетоэлектриков. Минск, 1982. – С. 61–73.
13. Башмаков В. И., Чикова Т. С. Пластификация и упрочнение металлических кристаллов при механическом двойниковании. Минск: Технопринт, 2001. – 217 с.
14. Башмаков В. И., Чикова Т. С. //Физ. металлов и металловедение. – 1981. – Т. 51. Вып. 5. – С. 1066–1072.
15. Leffers T., Van Houtte P. //Acta metall. – 1989. V. 37. № 4. – P. 1191–1198.
16. Савенко В. С., Остриков О. М. //Вести НАНБ. – 1998. № 2. – С. 96–98.
17. Остриков О. М. //Физ. металлов и металловедение. – 1999. – Т. 87. № 5. – С. 78–82.
18. Савенко В. С., Спицын В. И., Троицкий О. А. //ДАН СССР. – 1985. – Т. 283. № 5. – С. 1181–1183.
19. Савенко В. С., Пинчук А. И. //Весці АН Беларусь Сер. фіз.-тэхн. навук. 1993. № 2. С. 27–31.
20. Савенко В. С., Углов В. В., Остриков О. М., Ходоскин А. П. // Физ. металлов и металловедение. 1998. – Т. 85. № 5. – С. 97–105.
21. Степнов М. Н. Статистические методы обработки результатов механических испытаний: Справочник. – М.: Машиностроение, 1985. – 232 с.
22. Худсон Д. Статистика для физиков. – М.: Мир, 1970. – 296 с.

Summary

The original positions of a statistical method of experimental exploration mechanical of the mechanical wedge - shaped twins of metals are formulated.

Поступила в редакцию 20.08.01