



МОЖЛИВОСТІ ТА ПЕРСПЕКТИВИ МОДИФІКАЦІЇ МЕТОДИКИ ТРИВИМІРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ МІКРОСТРУКТУРИ

Іванов О. О.*

Доктор філософії

Заклад Вищої освіти “Університет Короля Данила”

76018, вул. Є. Коновальця, 35, м. Івано-Франківськ, Україна

<https://orcid.org/0000-0003-4678-7956>

e-mail: oleksandr.o.ivanov@ukd.edu.ua

Шкатуляк В. В.

Голова циклової комісії з Інформаційних технологій

Заклад Вищої освіти “Університет Короля Данила”

76018, вул. Є. Коновальця, 35, м. Івано-Франківськ, Україна

e-mail: vasyl.v.shkatuliak@ukd.edu.ua

Зубко С. Р.

Студент-магістр

Заклад Вищої освіти “Університет Короля Данила”

76018, вул. Є. Коновальця, 35, м. Івано-Франківськ, Україна

<https://orcid.org/0009-0002-3572-8483>

e-mail: vasyl.v.shkatuliak@ukd.edu.ua

Анотація. У статті представлено інноваційний підхід до тривимірного моделювання мікроструктури матеріалів, що ґрунтується на серійному аналізі зображень, отриманих методом пошарового полірування. Такий підхід дозволяє формувати високоточні 3D-моделі, які достовірно відображають просторову будову матеріалу, долаючи обмеження класичних методів металографії. Запропонована методика доповнює та розширює можливості чисельного моделювання, забезпечуючи більш детальний аналіз мікроструктурних особливостей матеріалів. У роботі проведено ґрунтовний аналіз сучасних підходів до прогнозування фазового складу та механічних властивостей матеріалів, зокрема таких методів, як CALPHAD, скінченно-елементний аналіз (FEM) та молекулярна динаміка (Molecular Dynamics). Розглянуто їхні ключові переваги, обмеження та сфери застосування. Запропонований метод тривимірного моделювання дозволяє отримати детальну інформацію про просторовий розподіл частинок, фазових включень і дефектів, що є надзвичайно важливим для контролю якості матеріалів та оптимізації їхніх експлуатаційних характеристик. Особливу увагу приділено перспективам подальшого розвитку методу, зокрема автоматизації процесу реконструкції, інтеграції алгоритмів машинного навчання для покращення точності та швидкості аналізу, а також оцінці похибок вимірювань для підвищення надійності результатів. Результати дослідження підтверджують ефективність запропонованого підходу для дослідження реальних матеріалів, що відкриває нові можливості для наукових і прикладних завдань у галузі матеріалознавства.

Ключові слова: мікроструктура, тривимірне моделювання, методика, комп'ютерна обробка, алгоритм.

Запропоноване посилання: Іванов, О. О., Шкатуляк, В. В., & Зубко, С. Р. (2025). Можливості та перспективи модифікації методики тривимірного моделювання мікроструктури. *Методи та прилади контролю якості*, 1(54), 29-36. doi: 10.31471/1993-9981-2025-1(54)-29-36

* Відповідальний автор



Вступ

Мікроструктура матеріалів є ключовим фактором, що визначає їхні експлуатаційні властивості. Взаємозв'язок між розмірами зерен, фазовими складовими та взаємним розташуванням компонентів (фаз, твердих розчинів тощо) всередині матеріалу безпосередньо впливає на механічні, технологічні та інші властивості матеріалів. Тому розуміння структури матеріалу та можливість її моделювання відіграють вкрай важливу роль як у прогнозуванні поведінки матеріалів в експлуатаційних умовах, так і для контролю якості матеріалів деталей, що знаходяться в умовах роботи.

Метою роботи є оптимізація методики тривимірного моделювання мікроструктури матеріалу та дослідження її ефективності у відтворенні реальних структурних характеристик. Запропонована методика базується на послідовному експериментальному визначенні геометрії мікроструктури за допомогою аналізу серії зображень, отриманих у процесі полірування зразка.

Аналіз сучасних закордонних і вітчизняних досліджень та публікацій

У сучасному матеріалознавстві моделювання фазового складу матеріалів відіграє визначальну роль у прогнозуванні їхніх експлуатаційних характеристик. Один із найпоширеніших підходів у цьому напрямку є метод CALPHAD (Calculation of Phase Diagrams), основою якого є термодинамічний розрахунок [1] і база експериментальних даних для визначення фазових рівноваг та поведінки матеріалів у різних умовах [2].

CALPHAD дозволяє проводити прогнозування фазових складових, враховуючи температурні та механічні фактори. Цей метод широко застосовується при розробці нових матеріалів, оптимізації хімічного складу та виборі технологічних параметрів виробництва. Перевага методу над іншими видами моделювання – можливість отримувати точні дані про стан фаз без проведення великої кількості експериментів.

Не дивлячись на точність, універсальність і те, що частково метод базується на реальних експериментальних даних, CALPHAD варто також розглядати з позиції певних обмежень. Наприклад, результат моделювання залежить від коректності бази даних, яку використовують у моделюванні. Що стосується поширених матеріалів, сплавів, то результати експериментальних даних, як правило, вже є неодноразово перевіреними та апробованими. CALPHAD оперує рівноважними термодинамічними станами, що не завжди враховує кінетику фазоутворення або мікроструктурні особливості матеріалів. У роботі [3] зазначаються відсутність кінетичних аспектів (CALPHAD не враховує кінетику фазоутворення) і те, що метод орієнтований більше на термодинаміку, ніж на визначення механічних характеристик. Метод передбачає поведінку фаз у макромасштабі, але не моделює точну геометрію макроструктури. Робота [4] розглядає точність прогнозів CALPHAD і те, що застосування для складних сплавів може призводити до значних похибок.

Варто пам'ятати, що при виготовленні реальних матеріалів на мікроструктуру та фазовий склад, а, відповідно, і на якість та робочий ресурс вплине багато факторів [5], які буває складно контролювати в умовах реального виготовлення матеріалів, такі як: хімічний склад вхідних компонентів (наявність домішок), вид вхідних компонентів (розмірність, фазовий склад тощо) [6, 7], параметри отримання матеріалу (температури, швидкість нагрівання, час витримки, швидкість охолодження і розподіл температур під час нагрівання та охолодження), а також умови роботи, в яких працює матеріал чи деталь, та наявність дефектів різного роду в структурі матеріалу. Наприклад, у роботі [8] зазначено вплив умов роботи на мікроструктуру матеріалу, що призводить до нерівномірних властивостей матеріалу протягом життєвого циклу експлуатації. Робота [9] демонструє, як зміна мікроструктури призводить до значного зниження механічних характеристик.

Таблиця 1 – Порівняння методів цифрового моделювання FEM та MD

Характеристика	FEM (Finite Element Method)	MD (Molecular Dynamics)
Рівень моделювання	Макроскопічний, розрахунки на рівні матеріалу чи конструкції	Атомарний або нанорівень, розрахунки на рівні окремих частинок
Основний принцип	Дискретизація області на скінченні елементи, рішення рівнянь механіки суцільних середовищ	Чисельне розв'язання рівнянь руху Ньютона для кожного атома або молекули
Моделювання деформацій	Визначення напружень, деформацій та структурних змін макрооб'єктів	Вивчення руху частинок, міжатомних взаємодій, фазових переходів
Обчислювальна складність	Висока (залежить від розміру сітки), але добре оптимізована для макромасштабного моделювання	Дуже висока, обмежена кількістю частинок та часовими масштабами
Типове застосування	Інженерні конструкції, механіка матеріалів [12], термоелектричні процеси, зварні з'єднання	Наноматеріали, молекулярна біологія [13], фазові перетворення, хімічні реакції
Головні недоліки	Чутливість до параметрів сітки, складність для мікроструктурних аналізів	Висока обчислювальна складність, обмеження в масштабі часу

Враховуючи наведене, для реального застосування матеріалів метод CALPHAD потребує доповнення експериментальними даними конкретного випадку. Можна також розглядати випадки, коли огляд мікроструктури є частиною контролю якості – огляд на наявність дефектів, визначення точної форми і розміру твердих частинок та інше.

Окрім CALPHAD моделювання мікроструктури дозволяє розглядати розподіл фаз, форму частинок та їх взаємодію у матеріалі. Основні підходи включають чисельне моделювання та класичну металографію.

До чисельного моделювання можна віднести використання обчислювальних методів для прогнозування взаємодії фаз та механічних характеристик, а саме – FEM та DM.

Чисельні методи FEM [10] (Finite Element Method, метод скінченних елементів) та Molecular Dynamics [11] (молекулярна динаміка) дозволяють аналізувати механічні, теплові та електромагнітні властивості матеріалів. Порівняння FEM та MD наведено в таблиці 1. Опис характеристик методів та їх порівняння наведено в таблиці 1.

Виходячи з таблиці 1, методи FEM та MD принципово різні та працюють на різних масштабах, обидва методи базуються на складній математиці та використовуються для аналізу властивостей матеріалу. Можна зазначити, що обидва методи не точно відтворюють мікроструктурні особливості матеріалів. Практичне використання методів в реальних умовах виготовлення та відновлення матеріалів ускладнюється високими обчислювальними складностями і достатньо складною реалізацією та інтерпретацією результатів.

Металографія залишається одним із ключових наукових експериментальних методів дослідження мікроструктури металів і сплавів шляхом аналізу їхніх поверхневих зрізів. Серед інших, основним і найбільш важливим недоліком такого методу є неможливість 3D-відтворення мікроструктури, через що автори [14] вказують на втрату просторової інформації, оскільки вся структура виглядає як площина у 2D-зображенні, неможливість точного визначення об'єму фаз та проблеми з реконструкцією 3D-структури. Таким чином, традиційна металографія не може повноцінно відтворити 3D-мікроструктуру матеріалу,

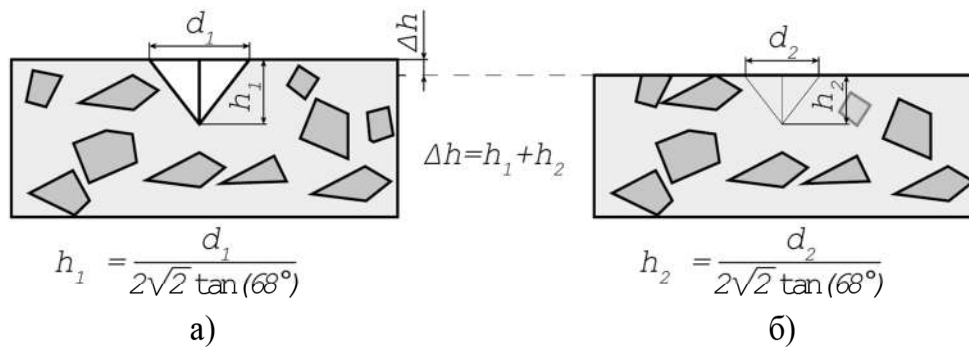


Рисунок 1 – Зразок до полірування (а) та після (б) і визначення необхідних параметрів

що залишає велику частину інформації про матеріал та інтерпретацію результатів попереднього моделювання (якщо таке було для матеріалу) невизначеною, що може призвести до зниження якості оцінки матеріалу.

Сучасні дослідження вказують на важливість створення 3D-моделей мікроструктури, що точно відображають реальні параметри матеріалів. Однак традиційні методи, такі як 2D-аналіз мікроструктури, не завжди достатньо ефективні, оскільки не відтворюють повний просторовий вигляд частинок і фазових складових. Серед сучасних публікацій стосовно такого моделювання часто використовується машинне навчання [15-17], що також є частиною прогнозування і, відповідно, не може надати точних даних про структуру матеріалу. Саме тому проблема відтворення реальної геометрії фаз залишається актуальною на сьогодні для широкого застосування.

Основний матеріал дослідження

Авторами [18] запропоновано методику, яка враховує переваги інших методів та дозволяє отримувати повноцінне 3D-зображення структури матеріалу, що базується на реальних експериментальних даних. Наведений алгоритм складається з наступних етапів: підготовка зразка та нанесення відбитка алмазним індентором; пошарове полірування зразка з фіксованою кількістю рухів; математичне визначення товщини знятого шару шляхом вимірювання діагоналей відбитка до та після полірування; серійна зйомка структури

після кожного етапу полірування; побудова 3D-моделі в програмі Blender на основі отриманих зображень.

Математичний апарат методу використовується для обчислення товщини шару матеріалу (Δh), знятого під час одного етапу полірування. Апарат базується на стандартній геометрії алмазної піраміди Віккерса з кутом при вершині $\alpha = 136^\circ$. Серед вхідних даних для проведення розрахунків d_1 – довжина діагоналі відбитка індентора до полірування (в пікселях), d_2 – довжина діагоналі відбитка індентора після полірування (в пікселях), $\alpha = 136^\circ$ – кут при вершині стандартного алмазного індентора. Наведений математичний апарат складається з чотирьох кроків: а саме - розрахунок глибини відбитка пірамідки до полірування (1), розрахунок глибини відбитка пірамідки після полірування (2), розрахунок товщини шару, видаленого під час полірування (3) та переведення значень в мікрометри на основі встановленого калібрувального коефіцієнта. Детальну візуалізацію проведення математичних розрахунків і визначення даних зображено на рисунку 1.

Схематично логічно-послідовний перелік операцій вказано на рисунку 2.

Успішну апробацію даної методики проведено авторами роботи [19], що не тільки дозволило отримати повноцінну тривимірну модель частинки зміцнюючої фази, яка відображає її геометрію, але й розглянути її внутрішню будову та підтвердити дані про формування таких частинок навколо менших частинок, що утворюються в матеріалі раніше.

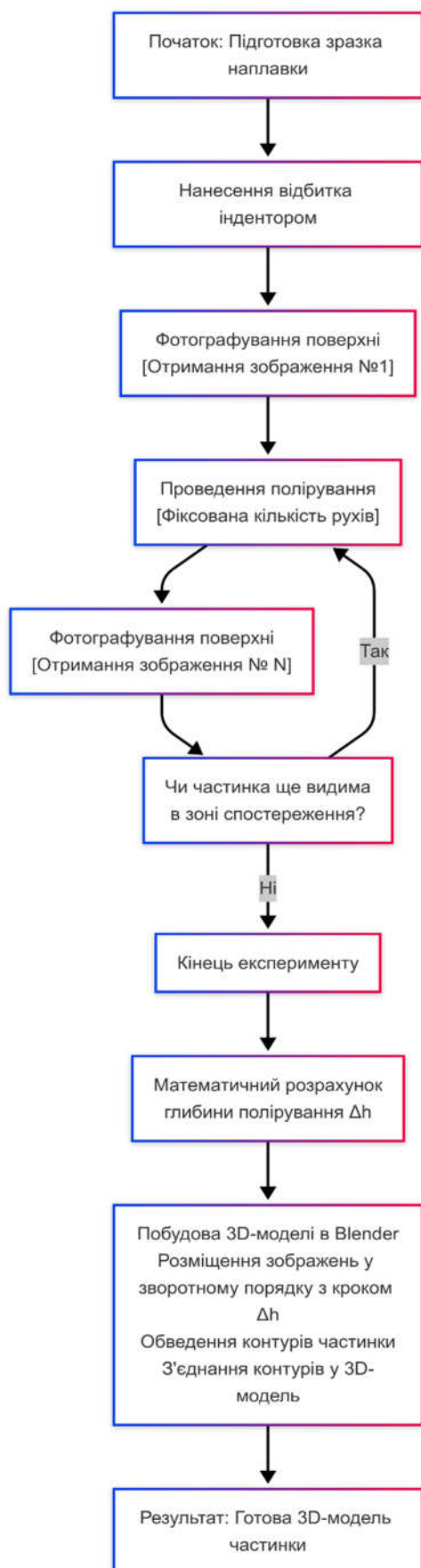


Рисунок 2 - Схема алгоритму моделювання тривимірної моделі структури матеріалу

Метод є універсальним, оскільки його можна застосовувати практично до будь-якого твердого матеріалу, який можна полірувати. Важливим також є і те, що трудомісткість виконання методу можна легко змінювати, залежно від необхідної точності, що залежить від кроку полірування та нелінійно впливає на витрати часу (рисунок 3).

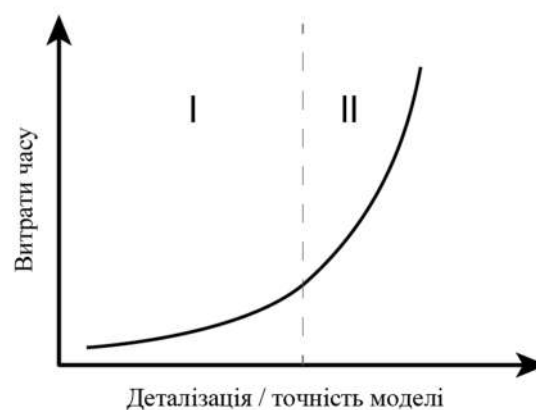


Рисунок 3 – Концептуальний графік залежності витрат часу для здійснення алгоритму від деталізації моделі

Точність отриманої моделі мікроструктури залежить від кроку полірування, який впливає на кількість виконаних операцій з отримання зображень. Відповідно до рисунка 3 деталізація нелінійно впливає на витрати часу, спочатку (зона I) різко підвищуючи точність з незначним збільшенням тривалості до того моменту (зона II), поки зменшення кроку полірування (збільшення тривалості) не дасть значного приросту точності. Чітку границю між такими зонами виділити складно, але залежно від задач можна вибрати “оптимальну зону”, яка дозволяє досягати необхідного балансу між точністю та витраченим часом.

Оптимізація та напрямки для вдосконалення

Запропонований алгоритм є надійним і практично цінним. Але варто зазначити перспективні та можливі напрямки оптимізації і вдосконалення, серед яких можна виділити підвищення точності та деталізації моделей, аналіз похибок вимірювань, автоматизацію процесу, а також застосування методів машинного навчання.

Як зазначалося раніше, зменшення товщини шару, що знімається за один раз, підвищує точність геометрії та рельєфу. Можливим варіантом є аналіз типових задач матеріалознавства і відповідно введення рекомендованих “кроків полірування” для окремих задач та випадків.

Поточний математичний апарат не враховує похибки вимірювань. Пропонується розгляд розрахунку похибки для Δh , що базується на похибці вимірювання діагоналей d_1 та d_2 , що в загальному підвищить якість проведення методики. Зменшити похибку може і застосування удосконалення методики шляхом альтернативного вимірювання глибини, наприклад, використання оптичного профілометра, що може вимірювати топографію поверхні безконтактно і з високою точністю, що дозволяє визначати Δh безпосередньо, міняючи геометричні розрахунки.

Найбільш перспективно виглядають автоматизація процесу та застосування машинного навчання. Автоматична обробка зображень кардинально зменшує ручну працю та час моделювання. Замість ручного обведення контурів частинки в Blender, можна використати алгоритми комп'ютерного зору (наприклад, бібліотеку OpenCV для Python) та комп'ютерного навчання. Однак постає проблема в тому, що матеріали кардинально відрізняються мікроструктурою та її складовими, але перевагою є те, що в даному випадку машинне навчання використовуватиметься не для апроксимації моделі мікроструктури, а тільки як інструмент для зменшення тривалості і ручної технічної роботи. Використовуючи скрипти (Python API в Blender), можна автоматично імпортувати отримані на попередньому етапі контури та “зшивати” їх у 3D-модель, що дозволить зменшити найбільш трудомістку частину ручної роботи.

Зазначені шляхи дозволять масштабувати методику для статистичного аналізу не тільки окремо вибраної зони чи частинки, але й комплексно досліджувати матеріал, що дозволить зібрати статистику про розподіл частинок за об'ємом та формою, просторову орієнтацію частинок,

кількість та розподіл внутрішніх включень. Запропоновані шляхи у вигляді логічної схеми зображено на рисунку 4.

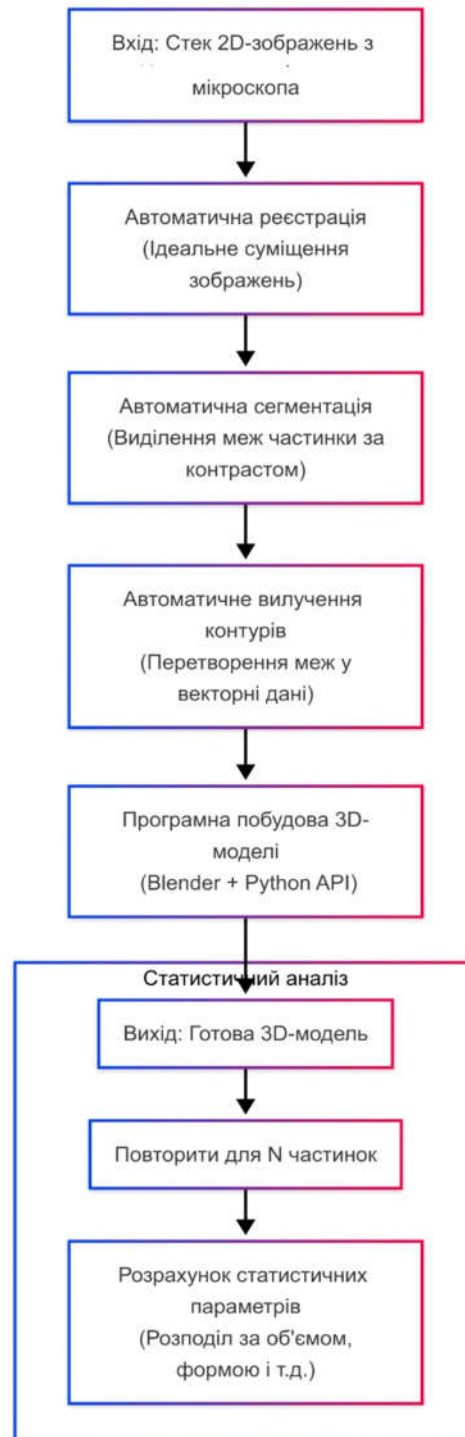


Рисунок 4 – Схема запропонованого автоматизованого процесу

Висновки

1. Запропонована методика дозволяє повноцінно відтворити 3D-мікроструктуру матеріалу на основі реальних експериментальних даних.

2. Використання пошарового полірування та аналізу отриманих зображень усуває обмеження традиційної 2D-металографії.

3. Розглянуто обмеження існуючих методів моделювання, зокрема CALPHAD, FEM та Molecular Dynamics, що підтверджує потребу у вдосконалених підходах.

4. Визначено перспективні напрями вдосконалення: автоматизація процесу, впровадження машинного навчання для зменшення ручної праці та розрахунків помилок вимірювання.

5. Запропонована методика універсальна та може застосовуватися до різних матеріалів, що розширює її практичне використання у матеріалознавстві та інженерії.

6. Врахування геометричних особливостей мікроструктури дозволяє точніше прогнозувати механічні властивості та поведінку матеріалу в експлуатації.

Подяки
Відсутні.

Конфлікт інтересів
Відсутній.

Список використаних джерел / References

1. Wang W., Li Z. CALPHAD as a Toolbox to Facilitate the Development of HEAs. IntechOpen. 2023. doi: [10.5772/intechopen.105191](https://doi.org/10.5772/intechopen.105191)
2. Palumbo M., Dematteis E. M., Fenocchio L. et al. Advances in CALPHAD Methodology for Modeling Hydrides: A Comprehensive Review. J. Phase Equilib. Diffus. 2024. Vol. 45. P. 273–289. doi: [10.1007/s11669-024-01113-y](https://doi.org/10.1007/s11669-024-01113-y)
3. CALPHAD Methodology - Thermo-Calc Software. Thermo-Calc Software. 2025. URL: <https://thermocalc.com/about-us/methodology/the-calphad-methodology>
4. Gorsse S., Senkov O. N. About the Reliability of CALPHAD Predictions in Multicomponent Systems. Entropy. 2018. Vol. 20. P. 899. doi: [10.3390/e20120899](https://doi.org/10.3390/e20120899)
5. Factors Affecting Phase Changes. Solubility of Things. URL: <https://www.solubilityofthings.com/factors-affecting-phase-changes>
6. Khan M. U., Soomro S. A., Jahanger M. I. et al. Factors influencing synthesis and properties of MAX phases. Sci. China Mater. 2024. Vol. 67. P. 3427–3455. doi: [10.1007/s40843-024-3073-7](https://doi.org/10.1007/s40843-024-3073-7)
7. Armstrong R. W. Size effects on material yield strength, deformation, and fracturing properties. Journal of Materials Research. 2019. Vol. 34. No. 13. P. 2161–2176. doi: [10.1557/jmr.2018.406](https://doi.org/10.1557/jmr.2018.406)
8. Song Y., Wu W., Yu Y. et al. Effects of Electric and Magnetic Treatments on Microstructures of Solid Metals: A Review. Chin. J. Mech. Eng. 2023. Vol. 36. P. 139. doi: [10.1186/s10033-023-00961-y](https://doi.org/10.1186/s10033-023-00961-y)
9. Tian G., Mao B., Xu Y. et al. Investigation on gradual degradation of mechanical property and microstructure in 9% Cr heat-resistant steels via interrupted creep test. J. Mater. Sci. 2023. Vol. 58. P. 4637–4656. doi: [10.1007/s10853-023-08296-8](https://doi.org/10.1007/s10853-023-08296-8)
10. Soni S., Khan A. H., Khare G. A Comprehensive Review on Current Trends, Applications and Future Directions of Finite Element Methods. Journal of Emerging Technologies and Innovative Research. 2023. Vol. 10. No. 8. URL: <https://www.jetir.org/papers/JETIR2308450.pdf>
11. Berendsen H. J. C. Molecular dynamics simulations: The limits and beyond. Computational Molecular Dynamics: Challenges, Methods, Ideas. SpringerLink. 1998. P. 3–36. URL: https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-642-58360-5_1
12. Kyratsis P., Tzotzis A., Davim J. P. A Comparative Study Between 2D and 3D Finite Element Methods in Machining. In: 3D FEA Simulations in Machining. Springer, Cham. 2023. P. 1–12. doi: [10.1007/978-3-031-24038-6_1](https://doi.org/10.1007/978-3-031-24038-6_1)
13. Casalini T., Limongelli V., Schmutz M. et al. Molecular modeling for nanomaterial–biology interactions: Opportunities, challenges, and perspectives. Frontiers in Bioengineering and Biotechnology. 2019. Vol. 7. P. 1–14. doi: [10.3389/fbioe.2019.00268](https://doi.org/10.3389/fbioe.2019.00268)
14. Gokhale A. M., Singh H., Mao Y. et al. Three-Dimensional Metallography for Visualization, Characterization, Modeling, and Simulation of Three-Dimensional Microstructures. Microscopy and Microanalysis. 2010. Vol. 16. P. 714–715. doi: [10.1017/S1431927610063105](https://doi.org/10.1017/S1431927610063105)
15. Harmon J. E. Mashynne navchannia dlia kharakterystyky 3D mikrostruktury v realnomu chasi // Argonne National Laboratory. 2020. URL: <https://www.anl.gov/article/capturing-3d-microstructures-in-real-time> [in Ukrainian]

16. Alrfou K., Zhao T., Kordijazi A. Deep Learning Methods for Microstructural Image Analysis: The State-of-the-Art and Future Perspectives. Integrating Materials and Manufacturing Innovation. 2024. Vol. 13. P. 703–731. doi: [10.1007/s40192-024-00369-z](https://doi.org/10.1007/s40192-024-00369-z)

17. Shang X., Liu Z., Zhang J. et al. Tailoring the mechanical properties of 3D microstructures: a deep learning and genetic algorithm inverse optimization framework. arXiv. 2023. URL: <https://arxiv.org/pdf/2305.05634v3>

18. Ivanov O. O., Prysiazhniuk P. M., Bodrova L. G. et al. 3D Modeling of the Structure of Deposited Materials Based on Fe–Ti–Mo–B–C System. Mater. Sci. 2023. Vol. 59. P. 163–169. doi: [10.1007/s11003-024-00758-x](https://doi.org/10.1007/s11003-024-00758-x)

19. Ivanov O., Karpash M., Petryna D. et al. Experimental approbation of the algorithm for obtaining 3D model of hardfacing material phase particle. Procedia Structural Integrity. 2024. Vol. 59. P. 330–336. doi: [10.1016/j.prostr.2024.04.047](https://doi.org/10.1016/j.prostr.2024.04.047)

IMPROVEMENT OF THE ALGORITHM OF GEOMETRIC PARAMETER DEFINITION IN PLANE USING SCANLINE METHOD

Ivanov O. O.

PhD

King Danylo University of Higher Education
76018, vul. Ye. Konovaltsia, 35, Ivano-Frankivsk, Ukraine
<https://orcid.org/0000-0003-4678-7956>
e-mail: oleksandr.o.ivanov@ukd.edu.ua

Shkatulyak V. V.

Head of the Department of Information Technologies
King Danylo University of Higher Education
76018, vul. Ye. Konovaltsia, 35, Ivano-Frankivsk, Ukraine
e-mail: vasyl.v.shkatuliak@ukd.edu.ua

Zubko S. R.

Master's Student
King Danylo University of Higher Education
76018, vul. Ye. Konovaltsia, 35, Ivano-Frankivsk, Ukraine
<https://orcid.org/0009-0002-3572-8483>
e-mail: vasyl.v.shkatuliak@ukd.edu.ua

Abstract. The article presents an innovative approach to three-dimensional modeling of the microstructure of materials, based on serial analysis of images obtained by the layer-by-layer polishing method. This approach allows you to form high-precision 3D models that reliably reflect the spatial structure of the material, overcoming the limitations of classical metallography methods. The proposed technique complements and expands the capabilities of numerical modeling, providing a more detailed analysis of the microstructural features of materials. The paper provides a thorough analysis of modern approaches to predicting the phase composition and mechanical properties of materials, in particular, such methods as CALPHAD, finite element analysis (FEM) and molecular dynamics (Molecular Dynamics). Their key advantages, limitations and areas of application are considered. The proposed three-dimensional modeling method allows you to obtain detailed information about the spatial distribution of particles, phase inclusions and defects, which is extremely important for controlling the quality of materials and optimizing their operational characteristics. Particular attention is paid to the prospects for further development of the method, in particular, automation of the reconstruction process, integration of machine learning algorithms to improve the accuracy and speed of analysis, as well as the assessment of measurement errors to increase the reliability of the results. The results of the study confirm the effectiveness of the proposed approach for the study of real materials, which opens up new opportunities for scientific and applied tasks in the field of materials science.

Keywords: microstructure, three-dimensional modeling, methodology, computer processing, algorithm.